HAL
open science

Modélisation du transport électronique et de l'accumulation de la charge dans les isolants en couches minces

Anne-Charlotte Amiaud

To cite this version:

Anne-Charlotte Amiaud. Modélisation du transport électronique et de l'accumulation de la charge dans les isolants en couches minces. Mécanique des matériaux [physics.class-ph]. Sorbonne Université, 2018. Français. NNT : 2018SORUS004 . tel-02078801

HAL Id: tel-02078801

https://theses.hal.science/tel-02078801v1

Submitted on 25 Mar 2019

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.

Sorbonne Université

Ecole doctorale Sciences Mécaniques, Acoustique, Electronique et Robotique de Paris (SMAER)

Laboratoire de Physique et d'Etude des Matériaux

Modélisation du transport électronique et de l'accumulation de la charge dans les isolants en couches minces

Par Anne-Charlotte Amiaud

Thèse de doctorat de Physique

Dirigée par Stéphane Holé

Présentée et soutenue publiquement le 13 février 2018

Devant un jury composé de :

Jérôme Tignon	Professeur, LPA, Paris	*Président du jury*
Serge Agnel	Professeur, IES, Montpellier	*Rapporteur*
Alain Sylvestre	Professeur, G2ELab, Grenoble	*Rapporteur*
Sylvain Delage	Docteur, III-V Lab, Palaiseau	*Examinateur*
Jean-Jacques Ganem	Maître de Conférences, INSP, Paris	*Examinateur*
Séverine Le Roy	Chargée de Recherche, LAPLACE, Toulouse	*Examinateur*
Stéphane Holé	Professeur, LPEM, Paris	*Directeur de thèse*
Aude Leuliet	Docteur, Thales Research & Technology, Palaiseau	*Encadrant industriel*

Except where otherwise noted, this work is licensed under
http://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/3.0/

Remerciements

Ces travaux de thèse ont été réalisés au sein du Laboratoire de Caractérisation et Démonstrateurs Technologiques (LCDT) chez Thales Research & Technology (TRT) à Palaiseau et du Laboratoire de Physique et d'Etude des Matériaux (LPEM) à l'ESPCI, dans le cadre d'une convention CIFRE. Je tiens tout d'abord à remercier Madame Aude Leuliet et Monsieur Stéphane Holé qui m'ont encadrée durant ces trois années de thèse. Pour le temps que vous m'avez consacré malgré des emplois du temps chargés, pour votre soutien et vos conseils, merci !

Je tiens à remercier Monsieur Serge Agnel et Monsieur Alain Sylvestre pour l'intérêt qu'ils ont porté à mes travaux et pour les avoir évalués en tant que rapporteurs. Mes remerciements s'adressent également à Monsieur Sylvain Delage, Monsieur Jean-Jacques Ganem, Madame Séverine Le Roy et Monsieur Jérôme Tignon qui m'ont fait l'honneur d'accepter de prendre part à mon jury de thèse.

Je remercie vivement Madame Brigitte Loiseaux, responsable du LCDT, pour m'avoir accueillie dans son laboratoire lors de mon stage de fin d'études, puis pour réaliser ma thèse. J'adresse également mes remerciements à Monsieur Gilbert Quilghini, responsable du Groupe de Recherche en Technologie et Mesure (GRTM) lors de mon stage et de mon arrivée en thèse, ainsi qu'à Monsieur Shailendra Bansropun qui a ensuite pris la responsabilité de GRTM.

Un merci particulier à Monsieur Julien Nagle et Monsieur Jean-Pierre Ganne qui ont participé à ces travaux dès leurs débuts, ont encouragé leur poursuite et ont apporté leur précieuse expertise.

De nombreuses personnes ont contribué de près ou de loin aux résultats obtenus, de la fabrication à la caractérisation, en passant par le développement du modèle. Je remercie donc Monsieur Paolo Martins ainsi que Monsieur Raphaël Aubry, responsable du LTCA, pour les différents dépôts de matériaux et les composants réalisés pour cette étude. Je remercie également Monsieur Jean-Jacques Ganem, Monsieur Ian Vickridge et Monsieur Emerick Briand de l'INSP à l'UPMC pour m'avoir offert l'opportunité de découvrir SAFIR et d'effectuer des analyses sur les couches minces de nitrure de silicium. Merci aussi à Monsieur Dominique Carisetti, Madame Françoise Gonnet et Monsieur Nicolas Sarazin du LATPI pour la FTIR et la réalisation des images MEB. J'adresse mes remerciements à Monsieur Borge Vinter, pour ses conseils et la relecture attentive des calculs. Je remercie Monsieur Renato Bisaro pour nos discussions scientifiques du soir et du matin dans le bus et son aide précieuse pour la rédaction des articles. Merci à Rémi de l'ESPCI pour le partage du Solartron et le temps consacré aux essais de mesures de courant thermo-stimulé. Je ne saurai évidemment oublier mes collègues du LCDT : Michel pour la formation à l'utilisation d'un analyseur de réseaux, Claude pour les conseils lors de la mise en place du banc de mesure de faible courant et son fameux électromètre « easy to

use », Quentin pour l'initiation à l'automatisation des bancs, Matthieu pour la réalisation des masques et Anne pour l'aide pratique pour les manips.

Une thèse étant rarement un long fleuve tranquille, j'exprime toute ma reconnaissance à Aude pour sa disponibilité et sa gentillesse sans faille. Merci de m'avoir supportée tous les jours ou presque, pour nos longues discussions techniques (mais pas que !) et nos déjeuners scientifiques. Je remercie également tous les membres du LCDT pour leur bonne humeur et leur sympathie, ce fut un plaisir de travailler à vos côtés à TRT.

J'adresse mes remerciements aux permanents et doctorants du LPEM pour cette mémorable conférence au Japon. Merci beaucoup à Stéphane de m'avoir proposé d'y participer avec vous. Mes rares passages au laboratoire ne m'avaient pas permis de tous vous rencontrer avant. Je vous remercie pour votre accueil et pour la très bonne ambiance durant cette semaine de conférence ; j'en garderai d'excellents souvenirs.

Ces années ont été l'occasion de faire la connaissance de nombreuses personnes qui participent à l'atmosphère régnant à TRT. Merci aux doctorants, en pleine expédition scientifique, en rédaction ou déjà devenus docteurs : Alpha avec qui j'ai partagé le bureau et de nombreuses discussions philosophiques pour tenter de refaire le monde, Marie-Anne, Guillaume, Lilia, Romain, Rémy, Joffrey, Oriane, Alexia, Romain, Jérémy, Sophie, Aude, Matthieu, … Cette thèse ne fut pas seulement scientifique mais aussi sportive ; je remercie Laure, Isabelle, Muriel, Oriane, Alexia, Aude, Dalila et Stéphanie pour les midis sportifs parfois sources de multiples courbatures mais toujours générateurs de bonne humeur !

Un très grand merci à ma famille, ma belle-famille et mes amis pour vos encouragements constants. Pendant ces trois années j'ai parcouru avec vous de nombreux kilomètres, en avion, en voiture (de course ?), à pieds même sous 40°C et 80% d'humidité, à vélo parfois face au vent ou sur une monture défaillante, en bus de jour comme de nuit, en train, à ski, en raquettes et même en canoë (avec et sans passager rampant non identifié). J'ai aussi profité de quelques parts de bûches à tout moment de l'année, de raclettes parfois évidemment improvisées, d'expériences culinaires asiatiques et de dégustations ch'ti. Mais j'ai surtout passé d'excellents moments à vos côtés ! J'adresse une mention spéciale à Marie et Mathias pour nos années à la fac, les vacances bretonnes et nos retrouvailles régulières. Merci aussi aux doctorants du LMV à l'UVSQ pour les soirées quizz, les cupcakes et les découvertes culturelles étonnantes ; merci de m'avoir intégrée au cercle des matheux.

Enfin merci à toi, Antoine, pour ton soutien indéfectible et ta patience dans les moments difficiles. A mon tour maintenant de soutenir, tu vas rire mais je me dis qu'ensuite il va vraiment falloir penser à trier et ranger…

Table des matières

TABLE DES MATIERES I

INTRODUCTION GENERALE 1

CHAPITRE I ETAT DE L'ART 5

1) GENERALITES SUR LES DIELECTRIQUES 5

Structure de bandes 5

Permittivité et relaxation diélectrique 7

Claquage des diélectriques 9

2) IMPACT DU DIELECTRIQUE SUR LE FONCTIONNEMENT ET LA FIABILITE DES COMPOSANTS ELECTRONIQUES 11

Capacité MIM 11

Capacité MOS 12

MEMS RF 13

Couches minces diélectriques en microélectronique 15

Synthèse 16

3) TRANSPORT DE CHARGES DANS LES DIELECTRIQUES 16

Interface électrode-diélectrique 17

Courants d'interface 19

Courants volumiques 21

Synthèse 25

4) MODELISATION DES MATERIAUX ISOLANTS SOUS CHAMP ELECTRIQUE 27

Modèles développés pour la défaillance des composants électroniques 27

Modèles de transport de charges dans les isolants 30

Synthèse 32

CHAPITRE II CARACTERISATION DU MATERIAU 33

1) DISPOSITIFS UTILISES 33

Présentation des échantillons 33

Dépôt des couches minces diélectriques 36
Matériau diélectrique étudié : le nitrure de silicium 36
2) ANALYSES PAR FAISCEAUX D'IONS 39
Méthodes de caractérisation 39
Composition et structure des échantillons 45
3) SPECTROSCOPIE INFRAROUGE A TRANSFORMEE DE FOURIER (FTIR) 51
Méthode de caractérisation 51
Analyse du spectre IR 51
4) CARACTERISATION EN FREQUENCE 54
Méthode de caractérisation 54
Permittivité et pertes en fréquence 57
5) MESURES DE COURANT SOUS TENSION CONTINUE 61
Méthode de caractérisation 61
Identifications de courants dans les dispositifs capacitifs 62
6) SYNTHESE 67

CHAPITRE III MODELE DE TRANSPORT DE CHARGES 69

1) MODELISATION DES COURANTS 69
Trap Assisted Tunneling 69
Piégeage et dépiégeage de charges 80
Gestion de la charge délocalisée 82
2) PRESENTATION DU MODELE 82
Hypothèses 83
Description de l'algorithme 84
Equations de transport et bilan des porteurs 86
Résultats de simulation 89
3) INFLUENCE DES PARAMETRES SUR LE MODELE 92
Conditions d'utilisation 93
Propriétés des matériaux 95

Synthèse 97
4) REGIME IMPULSIONNEL 100
5) SYNTHESE 105

CHAPITRE IV APPLICATION AUX DISPOSITIFS EN MICROELECTRONIQUE ... 107

1) ETUDE DES CAPACITES MIM 108
Courant dans les capacités 108
Vieillissement des capacités sous contrainte électrique 115
Minimisation de la charge stockée : optimisation des matériaux 118
2) ETUDE DES MEMS RF 125
Tension d'actionnement et performances du composant 125
Simulation de l'évolution temporelle de la tension d'actionnement 130
Optimisation de la durée de vie 134
3) SYNTHESE 138

CONCLUSION ET PERSPECTIVES 139

BIBLIOGRAPHIE 143

TABLE DES NOTATIONS ET ABREVIATIONS 159

LISTE DES PUBLICATIONS 161

Introduction générale

Depuis la réalisation du premier transistor en 1947, la micro-électronique s'est développée à un rythme effréné et les composants électroniques ont maintenant envahi notre quotidien. Ils sont présents dans des domaines très divers tels que les transports, les télécommunications, l'énergie, la santé, ou encore la sécurité. De multiples progrès ont été réalisés ; de nouveaux composants et de nouvelles fonctionnalités sont régulièrement mis au point.

Les prévisions énoncées par Gordon Moore dès 1975 sur l'augmentation de la densité de transistors sur puces en micro-électronique se sont révélées exactes [1]. Ce rythme de développement s'est aussi appliqué à d'autres composants et grandeurs physiques en électronique. En effet, la concentration de composants ainsi que leurs performances et leur complexité tendent à croitre rapidement. Ce contexte conduit aujourd'hui à devoir concevoir des dispositifs toujours plus petits, plus fiables et performants, à moindre coût et consommant peu d'énergie. De plus, la réduction des dimensions nécessite de développer des micro et nano dispositifs et donc d'utiliser des matériaux en couches de plus en plus minces. Pour atteindre ces objectifs, la maîtrise des propriétés des matériaux et la compréhension des phénomènes physiques à l'échelle nanométrique sont indispensables.

Les systèmes sont parfois soumis à des conditions de fonctionnement difficiles comme de forts champs électriques, des températures élevées, de l'humidité, une exposition aux rayonnements. Ces conditions d'utilisation induisent d'importantes contraintes pouvant être à l'origine de la défaillance des composants et donc éventuellement de celle du dispositif dans lequel ils sont inclus. C'est pourquoi l'analyse des mécanismes de défaillance est primordiale pour améliorer la fiabilité des dispositifs. Pour résoudre cette problématique majeure de fiabilité, des investigations sont menées depuis de nombreuses années sur les propriétés des matériaux utilisés pour la micro-électronique.

Dans ces travaux, le cas des matériaux diélectriques est plus spécifiquement étudié. Ceux-ci sont présents dans de nombreux composants en micro-électronique (capacités, systèmes micro-électro-mécaniques, transistors, mémoires…) sous forme de couches minces. Les procédés utilisés pour la réalisation de ces dépôts sont particulièrement complexes à maîtriser. Le contrôle de l'homogénéité des films minces pour des surfaces de dépôts toujours plus grandes est actuellement un challenge pour les plateformes technologiques. Les matériaux ainsi obtenus sont souvent peu stœchiométriques, contiennent des contaminants, des lacunes ou des excès de certaines espèces et leur composition n'est pas homogène [2] [3] [4]. Ceci impacte d'une part les caractéristiques diélectriques de ces isolants et peut d'autre part contribuer à accélérer leur vieillissement. De plus, du fait de la miniaturisation des dispositifs, ils peuvent être soumis à des

contraintes électriques considérables affectant leur durée de vie. Le stress électrique est susceptible de provoquer le claquage du diélectrique ou l'apparition d'un champ électrique rémanent suite à l'injection de charges par exemple. Les porteurs ainsi injectés peuvent être stockés dans les pièges créés par les défauts du matériau. Pour certaines applications comme les mémoires, le transport de charges dans le diélectrique est nécessaire pour le fonctionnement du dispositif mais doit être contrôlé pour une utilisation optimale de ses fonctionnalités [5] [6]. Dans d'autres cas, ceci mène à une dégradation des performances du composant et peut entraîner sa défaillance [7] [8]. Il faut donc être capable de sélectionner les matériaux adaptés au mode d'utilisation du composant afin d'optimiser ses performances et sa durée de vie.

Pour la prédiction de ces comportements et le choix des matériaux ou des technologies de dépôt, se pose aujourd'hui un problème de modélisation compte-tenu des défauts, des variations de stœchiométrie, des interfaces... De nombreuses équipes de recherche ont étudié le transport de charges dans les isolants sous champ électrique [9] [10] [11] [12]. Des modèles permettant d'estimer la durée de vie du dispositif suivant les caractéristiques du composant, le matériau ou les conditions d'utilisation sont proposés dans la littérature [13] [14] [15]. Cependant, ils ne sont pas conçus pour prendre en compte les phénomènes physiques en jeu dans le transport de charges.

Une meilleure compréhension de ces effets grâce à la simulation est d'un intérêt significatif pour l'amélioration de la fiabilité des composants capacitifs. Ceci a motivé les travaux présentés dans ce mémoire. Le modèle développé prend en compte des phénomènes de transport aux interfaces et dans le volume du matériau. L'évolution de différentes grandeurs physiques (courants, charges, champ électrique) est calculée en fonction du temps et de la profondeur dans la couche mince. L'objectif est de maîtriser et de valider la modélisation des mécanismes de transport de charges dans des matériaux diélectriques intégrés à des structures capacitives et soumis à un stress électrique. Il permet d'estimer l'intérêt d'un matériau diélectrique relativement à la fiabilité de composants capacitifs sans passer par une étape de fabrication complète ou de vieillissement. Cet outil peut également être utilisé en amont afin de définir un matériau aux propriétés idéales suivant l'application visée.

Ce mémoire s'articule autour de quatre chapitres présentant les différents aspects de ce travail de thèse.

Le premier chapitre introduit les propriétés des matériaux diélectriques puis leur implication dans la fiabilité de certains composants électroniques en se concentrant sur la problématique d'accumulation de charges. Les mécanismes régissant le transport de ces charges dans les isolants et aux interfaces sont ensuite décrits. Enfin, une revue bibliographique des modèles développés pour simuler le transport de charges dans des isolants ou évaluer l'impact des charges sur la durée de vie de composants électroniques est présentée.

Le second chapitre est consacré à la caractérisation des matériaux. En effet, cette étape est nécessaire à l'élaboration d'un modèle physique représentatif des phénomènes de transport de charges. Les informations ainsi obtenues sur les échantillons, des couches minces de nitrure de silicium de 100 nm à 255 nm d'épaisseur, permettent par la suite de paramétrer efficacement le modèle. Différentes méthodes de caractérisation et d'analyse physique ont été utilisées en vue d'identifier et de comprendre les phénomènes en jeu dans le processus de transport et d'accumulation de charges dans les isolants en couches minces. Ces résultats conduisent à une meilleure connaissance des échantillons utilisés.

Le troisième chapitre se concentre sur le développement du modèle de transport de charges dans les diélectriques sous champ électrique. La première partie détaille les phénomènes de transport pris en compte dans le modèle proposé. Puis le processus de calcul est décrit à travers la présentation des équations et de l'algorithme régissant la simulation. Des résultats sont ensuite présentés pour mettre en évidence l'impact des propriétés des matériaux et des conditions d'utilisation sur l'accumulation de charges pendant la durée de vie de dispositifs capacitifs.

Le quatrième et dernier chapitre de ce mémoire s'intéresse plus particulièrement à l'utilisation du modèle pour l'évaluation et l'amélioration de la fiabilité des composants électroniques. Dans un premier temps, les résultats de simulation sont confrontés à des mesures de courant sur des capacités MIM (Métal-Isolant-Métal) afin de valider le modèle développé. Grâce aux résultats de simulation, des pistes sont proposées pour réaliser de l'ingénierie de matériau et ainsi développer un diélectrique permettant de limiter les courants de fuite et l'accumulation des charges. Puis les résultats de simulations sont comparés à des mesures de tension d'actionnement dans le cas des systèmes micro-électro-mécaniques radiofréquences (MEMS RF). Le modèle est alors utilisé en tant qu'outil d'évaluation et d'optimisation de la durée de vie de ces composants.

La conclusion générale de ce mémoire rappelle et synthétise les étapes de caractérisation des matériaux diélectriques en couches minces et de mise en place de l'outil de simulation. Des perspectives d'évolution sont également proposées pour le modèle et son champ d'application.

Chapitre I Etat de l'art

Les matériaux diélectriques sont utilisés dans de nombreux dispositifs en micro-électronique. Certaines de leurs propriétés varient suivant le matériau choisi et peuvent affecter la fiabilité et la durée de vie des composants. La première partie de ce chapitre rappelle les propriétés fondamentales des matériaux diélectriques. L'impact des propriétés de ces matériaux sur le fonctionnement et la fiabilité des composants en micro-électronique est ensuite présenté. Finalement, les mécanismes de transport de charges dans les isolants sont détaillés ainsi que les différents modèles existant pour évaluer la fiabilité des composants et modéliser le transport de charges dans des couches minces diélectriques.

1) Généralités sur les diélectriques

Du fait de leur structure de bandes, les matériaux diélectriques sont des isolants, ils ne contiennent théoriquement qu'une infime quantité de charges susceptibles de se déplacer sur de grandes distances. Des charges peuvent cependant se déplacer localement sous l'action d'un champ électrique. Si le champ électrique appliqué est trop élevé, le matériau peut claquer et ne plus remplir son rôle d'isolant.

Structure de bandes

Les matériaux sont classés en trois groupes suivant leurs propriétés de conduction : métal, semi-conducteur et isolant. Ces propriétés de conduction sont expliquées grâce à la théorie des bandes [16]. Dans un matériau cristallin parfait on distingue des bandes parfaitement délimitées : une bande de conduction dans laquelle les électrons peuvent se déplacer, et une bande de valence dans laquelle les trous peuvent se déplacer, cette bande de valence étant séparée de la bande de conduction par une bande interdite (Figure 1).

Dans le cas des métaux, très bons conducteurs, la bande de conduction contient toujours des électrons pouvant participer à la conduction électrique. Les semi-conducteurs ont une structure de bandes différente ; il existe un gap entre la bande de conduction et la bande de valence. Ce gap peut être franchi par des porteurs lorsque la température du matériau est assez élevée, la bande de conduction contient alors des électrons, la bande de valence contient des absences d'électrons (trous) et le matériau devient légèrement conducteur. A basse température le semi-conducteur est isolant, sa bande de conduction est vide et sa bande de valence est pleine. Les semi-conducteurs peuvent aussi être dopés pour augmenter leur capacité à conduire le courant. Les isolants présentent quant à eux un gap élevé. Leur bande de conduction est vide et

leur bande de valence pleine, l'énergie thermique ne permet pas aux porteurs de franchir ce gap important. En théorie, les isolants ne peuvent donc pas conduire l'électricité.

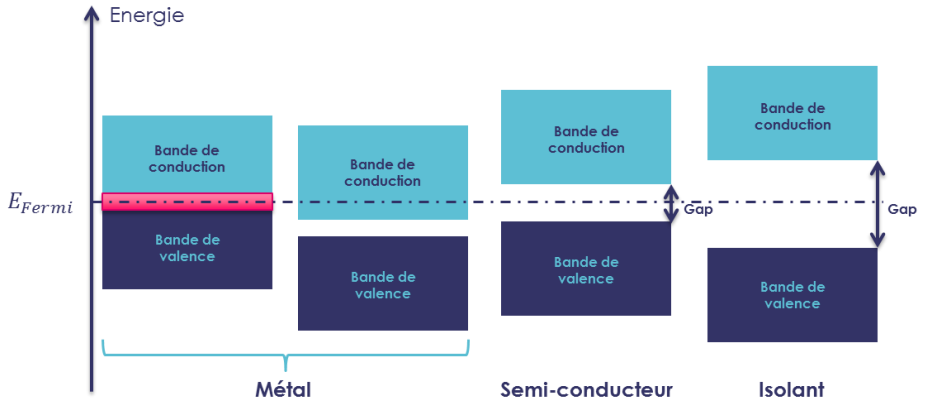


Figure 1 : Structures de bandes des matériaux

Cependant, les isolants réels contiennent des défauts de structure pouvant générer des états localisés dans la bande interdite. Les limites des bandes de valence et de conduction ne sont pas aussi nettement définies, le bord des bandes peut s'étendre dans la bande interdite et former des queues de bande ; des états peuvent aussi se situer plus en profondeur dans le gap [17] (Figure 2). Cette structure imparfaite peut alors être à l'origine de phénomènes de conduction dans les matériaux isolants réels.

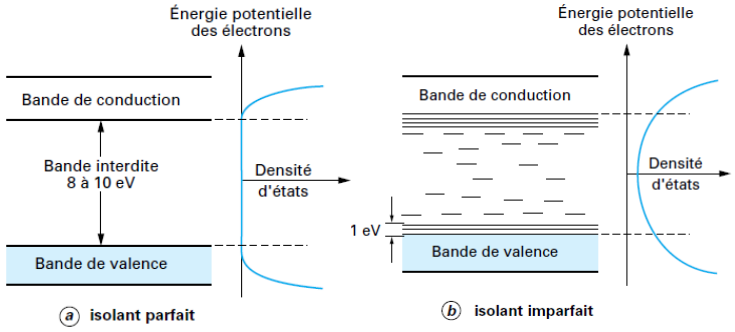


Figure 2 : Diagramme de bande d'un isolant parfait a) et d'un isolant réel b) [18]

Permittivité et relaxation diélectrique

Les diélectriques sont des matériaux polarisables [19]. Les charges liées présentes dans le matériau peuvent se déplacer sous l'effet d'un champ électrique et ainsi générer des dipôles ; les barycentres des charges positives et négatives ne coïncident plus. Des charges libres peuvent aussi se déplacer, donnant lieu au phénomène de polarisation pas charge d'espace.

La polarisation d'un matériau est corrélée à sa densité volumique de dipôles. Pour les milieux diélectriques isotropes, la polarisation totale notée $\vec{P}$ comprend la polarisation permanente du matériau $\overrightarrow{P_0}$ ainsi que la polarisation induite proportionnelle au champ électrique $\vec{E}$. Elle s'exprime de la façon suivante :

$$\vec{P} = \overrightarrow{P_0} + \varepsilon_0 \chi \vec{E} \qquad (1)$$

avec ε_0 la permittivité diélectrique du vide et χ la susceptibilité diélectrique du matériau, $\varepsilon_r = \chi + 1$ est la permittivité relative du diélectrique.

On distingue différentes contributions à la polarisation totale d'un diélectrique soumis à un champ électrique (Figure 3) [20] [21] :

- La polarisation électronique : le nuage électronique se déplace par rapport au noyau de l'atome, faisant apparaître une polarisation (dipôle induit). Ce phénomène s'établit sur des temps très courts $\sim 10^{-15}$s .
- La polarisation ionique ou atomique : les ions positifs et négatifs constituant une molécule se déplacent, créant un dipôle. Ce mécanisme de polarisation est observable sur des temps courts $\sim 10^{-12}$s.
- La polarisation dipolaire ou d'orientation (polarisation de Debye) : des molécules possédant un moment dipolaire permanent présentes dans le diélectrique s'orientent avec le champ électrique pour des temps inférieurs à $\sim 10^{-9}$s.

Sous l'effet d'un champ électrique, des charges libres peuvent aussi se déplacer dans le diélectrique. Ce déplacement de charge entraîne la formation d'un dipôle macroscopique équivalent et fait donc augmenter la polarisation équivalente du matériau. Ce phénomène peut intervenir sur des temps très longs, supérieurs à la centaine de secondes.

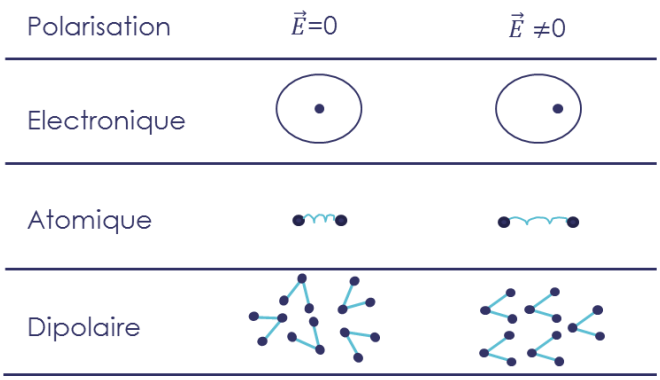


Figure 3 : Mécanismes de polarisation dans un diélectrique

Les dipôles peuvent avoir des difficultés à suivre les variations du champ électrique appliqué. Il existe alors un déphasage entre le champ électrique et le mouvement des dipôles ; ce phénomène est caractérisé par la relaxation ou la résonance diélectrique. Ce retard entraîne l'apparition de pertes diélectriques. Un condensateur plan, composant formé d'un diélectrique entre deux électrodes métalliques, présente une capacité C qui s'exprime sous la forme d'un nombre complexe pour tenir compte de ces pertes diélectriques :

$$C = C' - jC'' = \varepsilon_0(\varepsilon'_r - j\varepsilon''_r)\frac{S}{d} \qquad (2)$$

avec ε'_r la partie réelle de la permittivité relative du diélectrique, ε''_r la partie imaginaire de la permittivité relative du diélectrique, S la surface des électrodes du condensateur et d l'épaisseur du film diélectrique. Les pertes diélectriques du matériau sont données par l'angle de pertes $tg\delta$ ou facteur de dissipation diélectrique :

$$tg\delta = \frac{\varepsilon''_r}{\varepsilon'_r} \qquad (3)$$

Lorsque la fréquence du champ électrique appliqué augmente, les mécanismes de polarisation peuvent de moins en moins suivre l'évolution du champ électrique. Il s'en suit une augmentation des pertes et une chute de la permittivité (Figure 4) [21]. Une partie des espèces polarisables ne peut plus contribuer à la polarisation totale de l'échantillon.

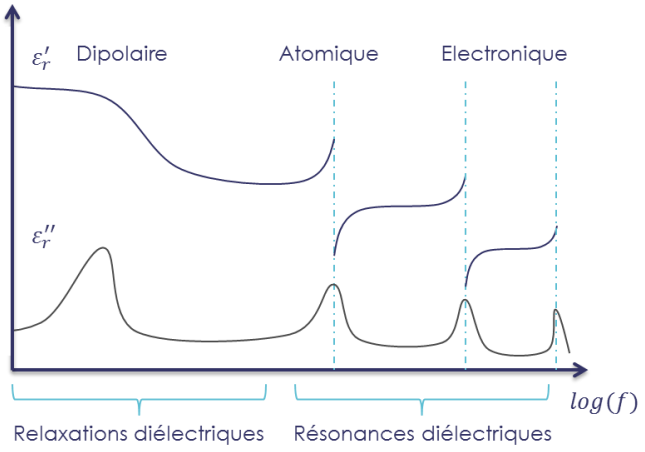


Figure 4 : Evolution de la partie réelle ε'_r et de la partie imaginaire ε_r'' de la permittivité suivant la fréquence du champ électrique

La valeur de permittivité d'un matériau diélectrique peut donc varier avec la fréquence du signal appliqué. Cette propriété du matériau peut aussi dépendre de sa structure cristalline et de l'arrangement des atomes, c'est par exemple le cas pour le dioxyde de titane [22] ($\varepsilon'_r = 45$ pour la structure tétragonale en phase anatase et $\varepsilon'_r = 127$ pour la structure tétragonale en phase rutile à 1 MHz), le dioxyde d'hafnium ou le dioxyde de zirconium [23] ($\varepsilon'_r = 20$ à 25 pour la structure monoclinique et jusqu'à 70 pour la structure cubique ou tétragonale).

Claquage des diélectriques

Les isolants utilisés en micro-électronique et plus généralement dans l'industrie peuvent être soumis à des tensions très élevées pendant de longues périodes. De plus, pour des raisons d'encombrement et de poids il faut réduire les surfaces des capacités ; les isolants utilisés doivent donc être de plus en plus fins (épaisseurs de l'ordre du nanomètre à la centaine de nanomètres). Ces modes d'utilisation peuvent entraîner le claquage du matériau qui n'assure alors plus sa fonction d'isolant.

Différents mécanismes de dégradation peuvent contribuer au claquage du diélectrique [18] [24]. Le claquage thermique est lié aux pertes diélectriques et aux courants de conduction provoquant un échauffement du matériau. Le claquage peut aussi être associé à la porosité et l'inhomogénéité du matériau. Des arborescences diélectriques peuvent se former à partir d'un défaut ou d'une cavité et se propager dans l'isolant. Lorsqu'une tension est appliquée, le champ électrique se concentre au niveau des défauts et cavités, des charges s'accumulent dans ces zones et finalement un claquage survient le long de la cavité. Ces phénomènes sont liés à la

densité, aux défauts et à la stœchiométrie de la couche diélectrique, le mode de dépôt impacte donc fortement le claquage diélectrique.

Park *et al.* [25] montrent par exemple que le claquage du dioxyde de titane est principalement dû aux lacunes en oxygène du matériau. Ces lacunes forment des filaments conducteurs ce qui entraîne le claquage de l'isolant lorsqu'il est soumis à un fort champ électrique. Le phénomène de claquage influencé par la présence de lacunes en oxygène a aussi été mis en évidence pour le dioxyde de zirconium [26]. Certaines équipes réalisent des recuits à l'oxygène pour les films minces d'oxyde, afin de combler les lacunes pour diminuer les courants de fuite et augmenter la tenue en tension [27] [28] .

Grâce à une étude théorique et expérimentale, McPherson *et al.* [29] ont proposé une relation entre la permittivité diélectrique d'un isolant et son champ de claquage. Ils ont calculé les champs de claquage théoriques de certains diélectriques à l'aide d'un modèle thermomécanique basé sur l'étude des liaisons dans les matériaux diélectriques [30] [31]. Leur étude montre que plus un matériau a une permittivité élevée, plus son champ de claquage est bas (Figure 5). Finalement, ils ont établi une relation liant le champ de claquage E_{Bd} et la permittivité relative d'un matériau ε'_r : $E_{Bd} \propto {\varepsilon'_r}^{-\beta}$ où le paramètre β est de l'ordre de $1/2$. Cette tendance montre que pour le choix d'un diélectrique il est nécessaire de trouver un compromis entre la valeur de permittivité et la résistance au champ électrique appliqué. Cependant, il faut noter que l'étude des liaisons dans les isolants est théorique ; du fait de la présence de défauts, des échantillons réels présentent probablement des champs de claquage plus faibles que ceux calculés par McPherson *et al.*

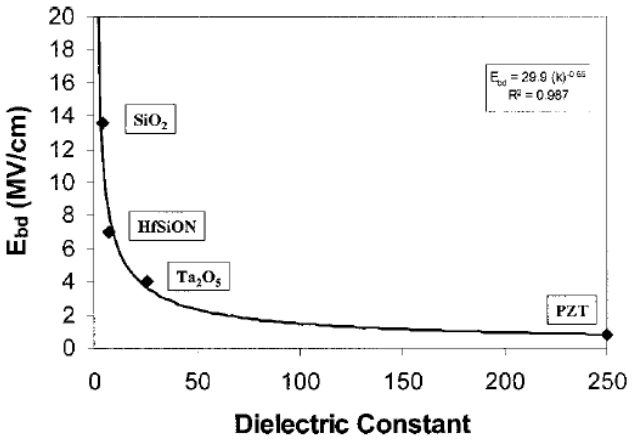


Figure 5 : Champ électrique de claquage en fonction de la constante diélectrique [30]

2) Impact du diélectrique sur le fonctionnement et la fiabilité des composants électroniques

La réduction de la taille des composants électroniques permet d'intégrer de plus en plus de dispositifs sur des petites surfaces. Cependant, cette miniaturisation entraine l'apparition de nouvelles contraintes technologiques et doit s'effectuer sans affecter leur fiabilité. Trois exemples de dispositifs sont ici présentés, ils montrent comment les propriétés des films minces diélectriques entrent en jeu dans l'évaluation des performances des composants électroniques.

Capacité MIM

Une capacité MIM (Métal-Isolant-Métal) est un condensateur plan composé de trois couches de matériau : un conducteur (première électrode), un isolant et un conducteur (deuxième électrode). Ce composant est utilisé pour de nombreuses applications telles que les mémoires, le découplage, le stockage d'énergie ou encore le filtrage. Lors de l'application d'une tension V entre ses deux électrodes, le condensateur se charge. Il apparaît alors une charge $Q = CV$ avec C la valeur de capacité du condensateur. La capacité dépend de la géométrie du condensateur et des propriétés de l'isolant, pour une géométrie plane on a :

$$C = \frac{S}{d}\varepsilon_0\varepsilon_r \qquad (4)$$

avec S la surface de contact électrode-isolant, d l'épaisseur de l'isolant, ε_r sa permittivité et ε_0 la permittivité diélectrique du vide.

Les performances attendues pour un condensateur varient suivant l'utilisation du composant. De manière générale les travaux menés visent à augmenter la valeur de la capacité et de la tension de claquage et diminuer les pertes diélectriques et les courants de fuite. La capacité du condensateur peut être augmentée par l'augmentation de la surface de contact électrode-isolant, la diminution de l'épaisseur de diélectrique ou l'utilisation d'un diélectrique à forte permittivité (dit diélectrique *high-k*). L'augmentation des surfaces de contact est une solution peu adaptée dans le cas de la micro-électronique. La réduction de l'épaisseur de l'isolant entraine une diminution de sa tenue en tension. De plus, sous fort champ électrique, des porteurs de charge peuvent être injectés dans le matériau isolant générant ainsi des courants de fuite importants. Pour limiter ces courants de fuite, il est nécessaire de maîtriser les propriétés du matériau isolant [28] [32] ainsi que la nature et la qualité des interfaces avec les électrodes métalliques [27]. L'utilisation de diélectriques *high-k* permettrait l'accroissement de la capacité, cependant l'augmentation de la permittivité d'un matériau semble être associée à une réduction de sa tension de claquage [29]. La permittivité des matériaux diélectriques peut aussi être très sensible à sa structure [22] [23].

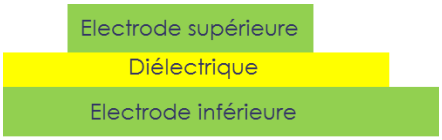


Figure 6 : Structure d'une capacité MIM

Finalement, que l'on choisisse de travailler sur la diminution de l'épaisseur du film mince diélectrique ou sur l'augmentation de la permittivité, la compréhension de la structure du matériau et la maîtrise du dépôt sont indispensables pour l'amélioration des performances du dispositif.

Capacité MOS

Une capacité MOS (Metal-Oxide-Semi-conductor) est composée de trois couches de matériaux : un semi-conducteur (par exemple un substrat de silicium dopé), un isolant (par exemple un oxyde SiO_2) et un conducteur (appelé électrode de grille). Dans les transistors à effet de champ, la structure MOS peut être soumise à un fort champ électrique qui peut dégrader l'oxyde et altérer le fonctionnement du composant. Un transistor MOSFET (Metal-Oxide-Semi-conductor Field Effect Transistor) est constitué d'une capacité MOS à laquelle s'ajoutent deux zones de silicium fortement dopées. Ces deux zones sont appelées drain et source et servent de réservoirs de porteurs pour le fonctionnement du transistor. C'est un dispositif à quatre électrodes : la source, le drain, la grille et le substrat. Une tension est appliquée entre la grille et le substrat permettant de commander l'intensité du courant dans le canal entre la source et le drain. Généralement, la source (pour un canal N) ou le drain (pour un canal P) et le substrat sont électriquement connectés, ce qui conduit finalement à un composant à trois électrodes (Figure 7).

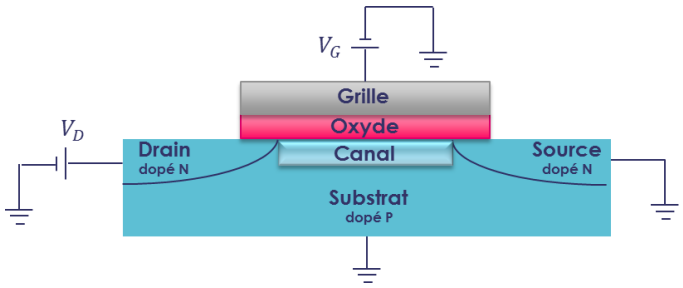


Figure 7 : Structure d'un transistor MOS (canal N)

Le fonctionnement de ces composants repose sur l'effet de champ. Dans le cas du NMOS par exemple, l'application d'une tension de grille V_G positive permet de générer un champ électrique qui attire les électrons du substrat à l'interface semi-conducteur-isolant. Le substrat semi-conducteur devient alors conducteur si la tension V_G dépasse une tension de seuil V_T pour laquelle la densité d'électrons à l'interface est suffisante pour créer un canal de type n. La tension de drain V_D permet aux porteurs mobiles ainsi générés de se déplacer dans le canal puisqu'il y a continuité du type de porteurs entre la source et le drain, ce qui entraine l'apparition d'un courant I_{DS}.

Lors de leur utilisation, les composants de type MOS peuvent présenter différents modes de défaillance : le claquage de l'oxyde, l'injection de porteurs chauds, le stress de grille [33] [34] [35]. Les phénomènes de transport de charges dans les capacités MOS ont été étudiés afin de comprendre les mécanismes de défaillance de ces dispositifs [36] [37]. En effet, lors de l'application de la tension de grille, les porteurs s'accumulent à l'interface entre le substrat et l'oxyde. De nombreux défauts sont présents dans l'oxyde et à l'interface, l'oxyde est aussi soumis à un fort champ électrique. Des porteurs sont alors susceptibles d'être émis ou piégés et des défauts supplémentaires peuvent être créés. Le stockage de charges dans l'oxyde ou à l'interface oxyde-silicium peut faire varier la tension de seuil V_T lors de l'utilisation du composant [37]. La dérive de la tension de seuil entraîne une dégradation du contrôle de l'état bloquant ou passant du canal à l'aide de la tension de grille V_G.

Dans le cas de l'utilisation des transistors MOS pour la réalisation de mémoires, le piégeage de charges est le phénomène physique recherché pour pouvoir conserver l'information. Pour cette application, l'écriture des données est faite par injection et extraction de porteurs dans une grille flottante située dans l'isolant. Il faut alors contrôler le transport et l'accumulation de la charge pour stocker, lire et effacer les données [38].

MEMS RF

Les MEMS (Micro-Electro-Mechanical-Systems) sont des composants électro-mécaniques micrométriques, consommant peu d'énergie, et par exemple utilisés comme micro-capteurs ou micro-actionneurs. Ils peuvent notamment être employés comme interrupteurs intégrés à des systèmes de télécommunication hyperfréquences (RF). Ces composants présentent des avantages sur les interrupteurs traditionnels sur de nombreux points (consommation d'énergie, faibles pertes d'insertion, petite taille [39]) mais il est nécessaire de maitriser leur fiabilité pour envisager leur intégration.

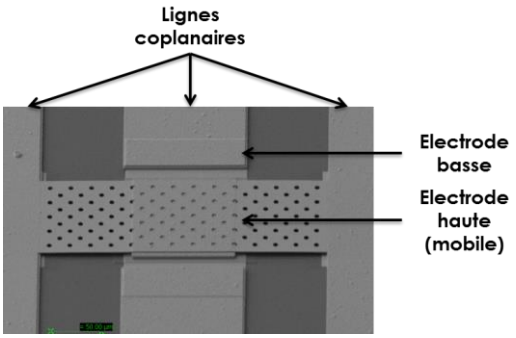


Figure 8 : MEMS RF capacitif parallèle fabriqué à TRT (structure en pont)

Un MEMS RF capacitif parallèle en structure pont (Figure 8) est composé d'une membrane supérieure (électrode haute) que l'on peut abaisser, d'un gap d'air, d'une couche de diélectrique (permettant l'isolation et faisant apparaître la capacité) et d'une électrode basse. Il fonctionne de la façon suivante (Figure 9) : lorsqu'aucune tension n'est appliquée, la membrane est en position haute et le signal RF passe dans la ligne ; lorsque l'on applique une tension entre l'électrode haute et l'électrode basse, la membrane s'abaisse (actionnement par force électrostatique), le gap d'air diminue et la capacité augmente, le signal RF est envoyé à la masse. D'autres structures de MEMS RF sont également utilisables : MEMS RF capacitif série ou structure de type poutre cantilever.

Les performances des dispositifs sont en partie déterminées par des mesures d'isolation et de pertes. Lorsque la membrane est à l'état haut, le signal passe et les pertes d'insertion doivent être faibles (de l'ordre de 0,1 dB) ; lorsque la membrane est abaissée, le signal est bloqué et l'isolation doit alors être élevée, le signal est atténué d'au moins 10 dB.

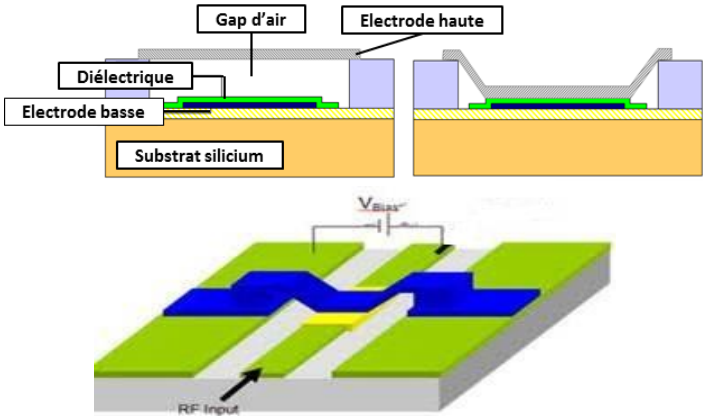


Figure 9 : Vue en coupe et vue du dessus d'un MEMS RF capacitif parallèle

Dans certains cas, la défaillance de ces composants est attribuée à l'accumulation de charges dans la couche de diélectrique ; il existe aussi d'autres causes de défaillance comme l'humidité, la puissance reçue ou la fatigue mécanique [40].

Le mécanisme de défaillance provenant de la charge est le suivant : lorsque le MEMS est actionné, des charges peuvent être injectées dans le diélectrique par les électrodes (Figure 10). Une fois la membrane relâchée, les charges injectées au niveau de l'électrode basse peuvent s'évacuer facilement et rapidement, alors que les charges injectées par l'électrode haute doivent traverser tout le diélectrique (Figure 11). Des charges s'accumulent alors dans la partie supérieure du diélectrique lors de l'utilisation du MEMS (Figure 11). Cette accumulation de charges modifie les forces électrostatiques agissant sur la membrane ce qui peut finalement provoquer son adhérence sur le diélectrique ou le blocage en position haute [41] ; le MEMS n'est alors plus utilisable.

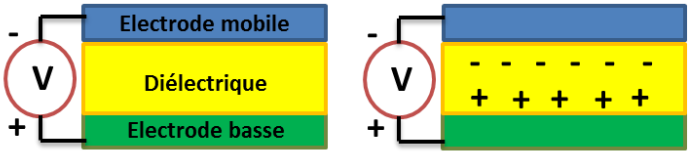


Figure 10 : Membrane en position basse - Injection de charges

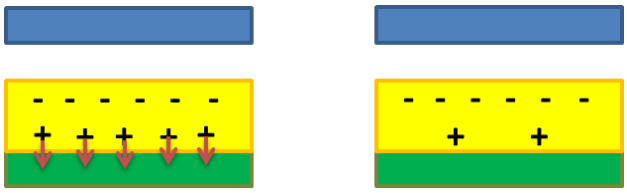


Figure 11 : Membrane relâchée - Accumulation de charges

Le temps de vie de ces interrupteurs dépend de différents facteurs comme la tension appliquée, la fréquence d'actionnement, le rapport cyclique ou encore le matériau diélectrique utilisé [39].

Couches minces diélectriques en microélectronique

Différents types de matériaux diélectriques sont intégrés dans les composants en microélectronique sous forme de couches minces. On trouve par exemple : HfO_2, ZrO_2, TiO_2, SiO_2, Al_2O_3, Ta_2O_5 ou encore Si_3N_4 [2] [3] [5] [10] [23] [42]. Ils sont utilisés en fonction de

leurs performances et caractéristiques (permittivité, champ de claquage, courant de fuite, linéarité en tension et en température…) suivant l'application visée [43] [44] [45].

Les épaisseurs de ces films minces peuvent être très faibles (inférieures au nanomètre [46] [42]), rendant leurs propriétés extrêmement sensibles aux défauts et variations de composition dans l'épaisseur. Il est alors nécessaire de maîtriser les différents procédés utilisés pour le dépôt de ces couches minces : Plasma Enhanced Chemical Vapor Deposition (PECVD), Chemical Vapor Deposition (CVD), Physical Vapor Deposition (PVD), Atomic Layer Deposition (ALD), Ion Assited Deposition (IAD)... De nombreuses études sont réalisées sur les conditions de dépôts pour optimiser leurs performances [22] [47]. Il est par exemple possible de limiter l'incorporation de contaminants en faisant varier les conditions de dépôts [48]. Des recuits à l'issue de ces phases de dépôts peuvent permettre dans certains cas de limiter les courants de fuite [10] [32]. Le procédé de croissance de l'un des matériaux peut aussi impacter la qualité des autres matériaux constituant le composant [49]. En effet, le budget thermique de certains procédés est parfois incompatible avec les technologies d'intérêt [50] [51] [52]. Il peut alors être préférable d'utiliser et de développer des méthodes de croissance à plus basses températures [44] [53].

De plus, la fabrication des composants comporte des étapes technologiques pouvant affecter leurs performances [54] : dépôts de résine, gravures plasma, gravures par faisceaux d'ions, photolithographie, séchage… Des travaux sont menés afin d'étudier différents procédés permettant de réaliser ces étapes sans dégrader le dispositif [55].

Synthèse

Ces exemples montrent que le transport et l'accumulation de porteurs dans les matériaux soumis à de forts champs électriques dans les composants électroniques est susceptible d'être l'une des causes de dégradation de leurs performances. L'étude et la modélisation des phénomènes de transport de charges dans les diélectriques semble alors essentielle à la compréhension de ces mécanismes de défaillance en micro-électronique.

3) Transport de charges dans les diélectriques

Aucune charge ne peut traverser un diélectrique parfait soumis à un champ électrique. Dans les faits, lorsqu'un diélectrique placé entre des électrodes métalliques est soumis à un champ électrique on observe l'apparition d'un faible courant. Ce courant provient de la polarisation du diélectrique due aux charges intrinsèques ainsi qu'à l'injection et l'extraction de charges par les électrodes. Des porteurs peuvent être injectés (ou extraits) dans les bandes de

conduction et de valence ou dans des pièges provenant de la structure imparfaite de l'isolant. L'injection et l'extraction de charges dans le diélectrique et les mécanismes régissant le transport de ces charges dites extrinsèques sont présentés dans cette section.

Interface électrode-diélectrique

Le comportement d'une capacité MIM soumise à un champ électrique est déterminé par les propriétés du diélectrique mais aussi par les interactions entre les électrodes et le diélectrique. En effet, c'est la zone de contact entre le métal et l'isolant qui déterminera la quantité de charges injectées dans l'isolant et donc le courant traversant la capacité. Il est alors nécessaire de bien connaître la nature de cette interface pour comprendre les mécanismes de génération de charges extrinsèques dans le diélectrique.

Lors du contact entre un métal et un isolant, la structure de bande des deux matériaux est modifiée et une barrière de potentiel ϕ_0 se forme. Elle représente l'énergie nécessaire à un électron du métal pour passer dans la bande de conduction de l'isolant. Pour un matériau parfaitement cristallin et ne possédant pas d'états d'interfaces, son expression théorique dépend de l'affinité électronique de l'isolant A_e et du travail de sortie du métal ϕ_m [17] (Figure 12) :

$$\phi_0 = \phi_m - A_e \tag{5}$$

Les charges doivent franchir cette barrière par effet thermique ou par effet tunnel suivant le mécanisme d'injection. Pour un même diélectrique, plus le travail de sortie du métal d'électrode ϕ_m est élevé, plus la barrière ϕ_0 à franchir pour les électrons est élevée et donc plus le courant de fuite et la quantité de charges injectées sont faibles.

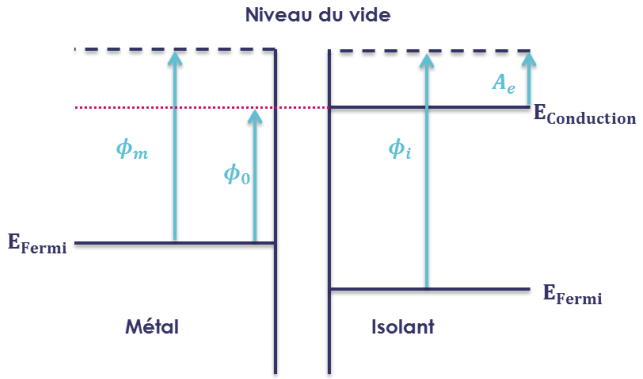


Figure 12 : Diagramme d'énergie d'un métal et d'un isolant sans contact

Métal	Pt	Au	W	Al	Ag	Ti
Travail de sortie ϕ_m	5,65 eV	4,9 eV	4,55 eV	4,28 eV	4,26 eV	4,33 eV

Tableau 1 : Travaux de sortie de quelques métaux d'électrodes [56]

Il existe différents types de contact suivant les travaux de sortie des deux matériaux en contact (Figure 13) [17] :

- Contact neutre : lorsqu'il n'y a pas ou peu de différence entre les travaux de sortie des deux matériaux le contact est dit neutre. Il n y a pas de déformation des bandes lors du contact, ce phénomène est aussi appelé condition de bande plate.

- Contact bloquant : le contact est dit bloquant si le travail de sortie du métal ϕ_m est plus élevé que le travail de sortie de l'isolant ϕ_i. Dans ce cas, les électrons de l'isolant ayant plus d'énergie que les électrons du métal vont diffuser dans le métal pour permettre l'alignement des niveaux de Fermi des deux matériaux. Une zone de déplétion se forme alors dans l'isolant.

- Contact ohmique : le contact est dit ohmique si le travail de sortie de l'isolant ϕ_i est plus élevé que le travail de sortie du métal ϕ_m. A l'inverse du contact bloquant, les électrons du métal ont plus d'énergie que ceux de l'isolant et vont alors diffuser dans l'isolant jusqu'à l'alignement des niveaux de Fermi des deux matériaux. Une région d'accumulation d'électrons se forme dans l'isolant. Les courbures de bandes sont négligeables dans les isolants, la zone d'accumulation est grande.

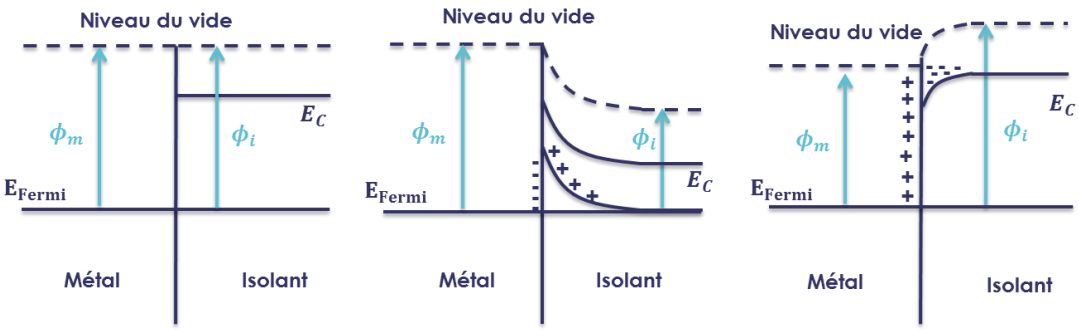


Figure 13 : Contact neutre - Contact bloquant - Contact ohmique

La barrière réelle à l'interface électrode-diélectrique peut être différente de la barrière théorique ϕ_0 présentée précédemment [57] [58]. En effet, de nombreux défauts peuvent être présents aux interfaces du fait de la présence de défauts physiques et chimiques à la surface du diélectrique, de la rugosité à l'interface électrode-diélectrique, de la rupture de périodicité du cristal… Le matériau constituant l'électrode peut aussi diffuser dans le diélectrique. Les différents défauts à l'interface permettent la création d'états dans la bande interdite de l'isolant ; les électrons du métal peuvent alors pénétrer dans l'isolant grâce à ces pièges générés dans la bande interdite. Bardeen [59] a pour la première fois introduit le concept d'états de surfaces pour expliquer la différence entre barrière réelle et barrière théorique. Les états créés dans la bande interdite du diélectrique peuvent provoquer l'ancrage du niveau de Fermi du métal, la hauteur de la barrière devient alors indépendante du travail de sortie du métal. Ces états de surface semblent difficiles à caractériser en termes de densité et d'énergie [60].

L'interface entre le métal et le diélectrique est une zone très complexe à étudier et à modéliser. Les conditions de dépôts influent sur les propriétés chimiques (défauts, lacunes…) et physiques (rugosité) de surface des deux matériaux en contact. De plus, lors de l'application d'un potentiel sur une capacité MIM, les irrégularités au contact électrode-diélectrique entraînent la non-homogénéité du champ électrique à l'interface. Ces différents phénomènes impactent l'injection et le transport de charges aux interfaces.

Courants d'interface

Lorsqu'un champ électrique est appliqué sur la structure MIM, des charges contenues dans le métal peuvent être injectées dans l'isolant. Le champ électrique fait diminuer la barrière à franchir pour les porteurs.

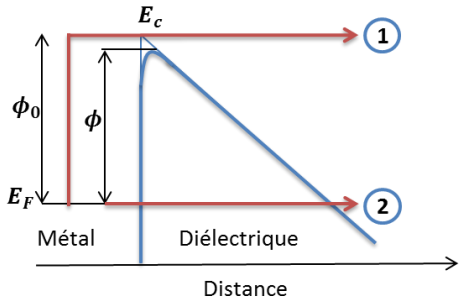


Figure 14 : 1-Schottky, 2-Fowler-Nordheim

Courant Schottky : (mécanisme 1 sur la Figure 14)

Le courant de type Schottky ou courant thermo-électrique, correspond à la transmission des porteurs du métal vers la bande de conduction du diélectrique par effet thermique [61]. La barrière de hauteur ϕ_0 à franchir est abaissée par le champ électrique E. La densité de courant s'exprime de la façon suivante [62] [63] :

$$J_S = q_0 \frac{4\pi m^* k_B^2}{h^3} T^2 e^{-\frac{q_0\phi_0 - \beta_S\sqrt{E}}{k_B T}} \text{ en A.m}^{-2} \tag{6}$$

avec $4\pi m^* k_B^2/h^3$ la constante de Richardson-Schottky (en $\mathrm{A.m^{-2}.K^{-2}}$), $\beta_s = \sqrt{{q_0}^3/4\pi\varepsilon_0\varepsilon_r}$ la constante de Schottky (en $\mathrm{J.m^{1/2}.V^{-1/2}}$), m^* la masse effective d'un porteur, q_0 sa charge élémentaire, h la constante de Planck, k_B la constante de Boltzmann, ϕ_0 la hauteur de la barrière.

Pour déterminer la présence d'un courant Schottky à l'aide de données expérimentales, il faut étudier l'évolution de $\ln(J_S)$ en fonction de $\sqrt{E}$. En effet, comme :

$$\ln(J_S) = \ln\left(q_0 \frac{4\pi m^* k_B^2}{h^3} T^2\right) - \frac{q_0\phi_0}{k_B T} + \frac{\beta_s\sqrt{E}}{k_B T} \tag{7}$$

cette courbe doit être une droite si le courant d'interface est de type Schottky. Cette méthode permet d'extraire la valeur de la hauteur de barrière à partir de résultats expérimentaux.

Courant Fowler-Nordheim : (mécanisme 2 sur la Figure 14)

Le courant Fowler-Nordheim correspond à la transmission d'électrons de la cathode à travers la barrière par effet tunnel [62] [64], c'est un effet indépendant de la température. Ce courant est représenté par :

$$J_{FN} = \frac{{q_0}^3}{8\pi h\phi_0} E^2 e^{-\frac{4}{3}\sqrt{\frac{2m^*\phi_0}{\hbar^2}}\frac{\phi_0}{qE}} \text{ en A.m}^{-2} \tag{8}$$

avec m^* la masse effective de l'électron dans le diélectrique.

L'identification expérimentale de ce courant s'effectue à l'aide de :

$$\ln\left(\frac{J_{FN}}{E^2}\right) = \ln\left(\frac{{q_0}^3}{8\pi h\phi_0}\right) - \frac{4}{3}\sqrt{\frac{2m^*\phi_0}{\hbar^2}}\frac{\phi_0}{qE} \tag{9}$$

$\ln(J_{FN}/E^2)$ en fonction de $1/E$ doit être représenté par une droite.

Trap Assisted Tunneling :

Il correspond à un courant généré par passage de l'électron, du métal vers un piège du diélectrique (TAT) ou d'un piège du diélectrique vers le métal (TAT inverse) par effet tunnel [15]. C'est un effet dominant en régime transitoire [61].

Le calcul du Trap Assisted Tunneling a été réalisé d'après le modèle de Simmons [65] et [66] pour l'étude du courant tunnel traversant une jonction métal-isolant-métal ; il est détaillé dans le chapitre III de ce mémoire. Ce calcul est basé sur la détermination du nombre d'électrons $N_{M\rightarrow D}$ par unité de surface et de temps pouvant passer par effet tunnel du métal vers un piège du diélectrique suivant les caractéristiques de la barrière. Son expression est la suivante :

$$J_{TAT} = q_0 N_{M\rightarrow D} N_p S_p \text{ en A.m}^{-2} \tag{10}$$

avec N_p le nombre de pièges disponibles par unité de surface dans le diélectrique et S_p la section efficace d'interaction entre un électron et un piège.

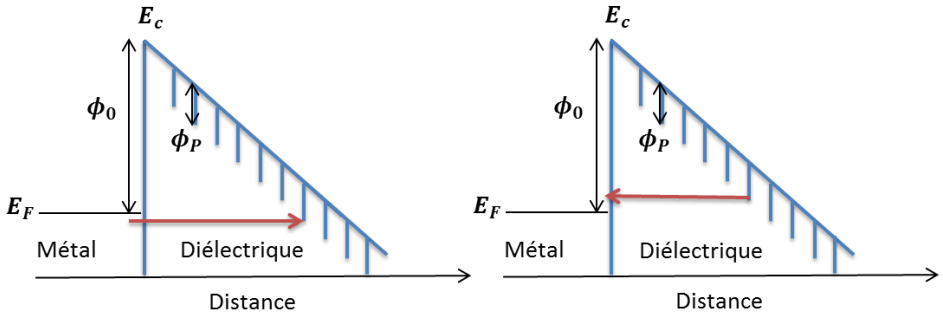


Figure 15 : TAT (gauche) et TAT inverse (droite)

Courants volumiques

Les porteurs injectés dans les pièges ou la bande de conduction du diélectrique peuvent se déplacer dans le matériau suivant différents mécanismes.

Courant limité par charges d'espace (Space Charge Limited Current) :

Il existe différentes relations courant-tension dans le cas d'un courant limité par charges d'espace [17] [62]. Le comportement peut être de type ohmique lorsque la tension appliquée est inférieure à une tension dite de transition V_{tr}. Dans ce cas, la densité de porteurs injectés est négligeable devant la densité de porteurs intrinsèques n_0 ; la tension appliquée n'est pas assez élevée pour pouvoir injecter des porteurs dans l'isolant. Ce courant s'exprime de la façon suivante :

$$J_{Ohm} = q_0 n_0 \mu E \quad \text{en A.m}^{-2} \tag{11}$$

avec μ la mobilité électronique. La pente de $\ln(J_{Ohm})$ en fonction de $\ln(V)$ est alors $\alpha = 1$ (Figure 16).

Pour V supérieure à V_{tr}, l'espèce dominante est constituée des porteurs injectés, le courant est donné par :

$$J_{SCLC} = \frac{9}{8}\varepsilon_r \varepsilon_0 \theta \mu \frac{V^2}{d^3} \quad \text{en A.m}^{-2} \tag{12}$$

avec d l'épaisseur de diélectrique et θ la fraction de porteurs injectés libres par rapport aux porteurs injectés piégés. La pente de $\ln(J_{SCLC})$ en fonction de $\ln(V)$ est alors $\alpha = 2$ (Figure 16).

Lorsque la tension appliquée V est supérieure à un seuil noté V_{TFL}, les pièges sont tous pleins, le courant est alors :

$$J_{SCLC} = \frac{9}{8}\varepsilon_r \varepsilon_0 \mu \frac{V^2}{d^3} \quad \text{en A.m}^{-2}. \tag{13}$$

La pente de $\ln(J_{SCLC})$ en fonction de $\ln(V)$ vaut $\alpha = 2$ (Figure 16).

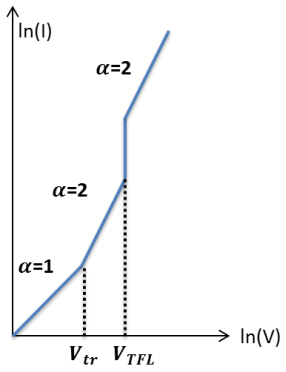


Figure 16 : Courant limité par charge d'espace [62]

<u>Courant Frenkel-Poole :</u>

Le courant Frenkel-Poole est généré par les électrons piégés dans le diélectrique, ils peuvent acquérir de l'énergie par effet thermique et sortir des pièges du diélectrique vers la bande de conduction. En effet, la barrière à franchir est abaissée en présence d'un champ électrique [67]. Ce phénomène est l'équivalent dans le volume de l'injection de charges à l'interface par l'effet Schottky. Ce courant est dominant en temps longs et à haute tension [61], il est donné par [17] [62] :

$$J_{FP} = \sigma_{FP} E e^{\frac{-q_0(\phi_\mathrm{p} - \sqrt{q_0 E / \pi \varepsilon_0 \varepsilon_r})}{k_B T}} \text{ en A.m}^{-2} \qquad (14)$$

avec σ_{FP} la conductivité Frenkel-Poole (en S.m^{-1}) et ϕ_p la profondeur des pièges.

On peut identifier un courant de type Frenkel-Poole par le tracé de $\ln(J_{FP}/E)$ en fonction de $\sqrt{E}$, ce graphique doit être une droite car :

$$\ln\left(\frac{J_{FP}}{E}\right) = \ln(\sigma_{FP}) - \frac{q_0 \phi_\mathrm{p}}{T k_B} + \frac{q_0}{k_B T}\sqrt{\frac{q_0 E}{\pi \varepsilon_0 \varepsilon_r}} \qquad (15)$$

On peut ensuite déterminer la profondeur des pièges ϕ_p et la conductivité Frenkel-Poole σ_{FP} en traçant $\ln(J_{FP})$ en fonction de $1/T$ **:**

$$\ln(J_{FP}) = \ln(\sigma_{FP}\mathrm{E}) + \frac{1}{T}\left[\frac{q_0}{k_B}\left(-\phi_\mathrm{p} + \sqrt{\frac{q_0 E}{\pi\varepsilon_0\varepsilon_r}}\right)\right] \tag{16}$$

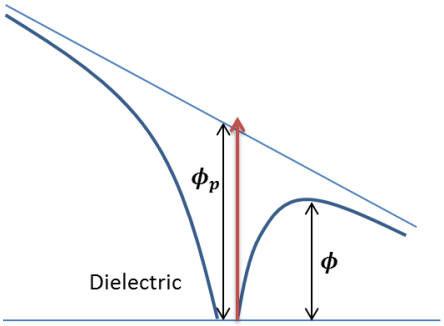


Figure 17 : Courant Frenkel-Poole [62]

<u>Hopping :</u>

Un porteur piégé peut passer d'un piège à un autre piège non occupé par un effet dit de hopping [62]. Ce mécanisme de transport des porteurs piégés est thermo-stimulé et dépend de la distance spatiale entre deux sites. Il a initialement été proposé par Mott et Gurney [68] pour la conduction ionique.

Les porteurs peuvent passer de piège en piège dans le sens direct et dans le sens inverse c'est-à-dire de part et d'autre du piège de départ :

- dans le sens direct : $\phi_d = \phi_\mathrm{p} - q_0 E \lambda_d$
- dans le sens inverse : $\phi_i = \phi_\mathrm{p} + q_0 E \lambda_i$

Le courant total est la somme du courant direct et du courant inverse. En supposant que $\lambda_d = \lambda_i = \lambda$, l'expression du courant est alors la suivante :

$$J_H = J_0 e^{-\frac{\phi_p}{k_B T}} 2\sinh\left(\frac{q_0 E\lambda}{2k_B T}\right) \text{ en A.m}^{-2} \tag{17}$$

avec ϕ_p la profondeur du piège et λ la distance moyenne du saut entre les pièges.

A faible champ électrique, le courant de conduction par saut est proportionnel au champ électrique :

$$J_H \sim J_0\, e^{-\frac{\phi_p}{k_B T}} \frac{q_0 \lambda}{k_B T} E \tag{18}$$

A fort champ électrique, lorsque la conduction est assurée par le hopping, on peut négliger le courant inverse et ainsi déterminer la distance moyenne de saut entre les pièges.

On obtient :

$$J_H = J_0 e^{-\frac{\phi_p - q_0 E \lambda_d}{k_B T}} \tag{19}$$

puis λ_d est évaluée grâce au tracé de $\ln(J_H)$ en fonction de E.

Synthèse

Les mécanismes présentés ci-dessus participent donc au transport des charges de différentes façons. Certains assurent l'injection des porteurs dans le diélectrique (courants Schottky, Fowler-Nordheim ou Trap Assisted Tunneling), d'autres assurent le transport de ces porteurs dans le volume du diélectrique (courant limité par charge d'espace, effet Frenkel-Poole ou hopping). De plus, ces mécanismes de transport peuvent être associés à la présence de charges libres ou bien de charges piégées dans le diélectrique ; il est alors nécessaire de considérer ces différentes catégories de porteurs pour comprendre les phénomènes de transport dans les isolants.

Mécanisme de transport	**Expression**	**Caractéristiques**
Schottky	$J_S = q_0 \frac{4\pi m^* k_B^2}{h^3} T^2 e^{-\frac{q_0\phi_0 - \beta_s\sqrt{E}}{k_B T}}$	• Injection assistée thermiquement • Identification expérimentale : $\ln(J_S) = \ln\left(q_0 \frac{4\pi m^* k_B^2}{h^3} T^2\right) - \frac{q_0\phi_0}{k_B T} + \frac{\beta_s\sqrt{E}}{k_B T}$ est une droite
Fowler-Nordheim	$J_{FN} = \frac{{q_0}^3}{8\pi h \phi_0} E^2 e^{-\frac{4}{3}\sqrt{\frac{2m^*\phi_0}{\hbar^2}}\frac{\phi_0}{qE}}$	• Indépendant de la température • Identification expérimentale : $\ln\left(\frac{J_{FN}}{E^2}\right) = \ln\left(\frac{{q_0}^3}{8\pi h\phi_0}\right) - \frac{4}{3}\sqrt{\frac{2m^*\phi_0}{\hbar^2}}\frac{\phi_0}{qE}$ est une droite
Trap Assisted Tunneling direct	$J_{TAT} = q_0 N_{M\to D} N_p S_p$	• Injection dans des pièges du diélectrique par effet tunnel
Trap Assisted Tunneling inverse	$J_{TATre} = q_0 N_{D\to M} N_p S_p$	• Extraction des pièges du diélectrique vers l'électrode par effet tunnel
Courant limité par charge d'espace	$J_{SCLC} = \frac{9}{8}\varepsilon_r\varepsilon_0\theta\mu\frac{V^2}{d^3}$ Ohmique : $J_{Ohm} = q_0 n_0 \mu E$	• Plusieurs régimes possibles • Cas ohmique : $J \propto E$ • θ représente la fraction de charges libres par rapport aux charges piégées • $\theta = 1$ si tous les pièges sont pleins
Frenkel-Poole	$J_{FP} = \sigma_{FP} E e^{\frac{-q_0\left(\phi_p - \sqrt{q_0 E/\pi\varepsilon_0\varepsilon_r}\right)}{k_B T}}$	• Libération d'un porteur piégé • Identification expérimentale : $\ln\left(\frac{J_{FP}}{E}\right) = \ln(\sigma_{FP}) - \frac{q_0\phi_p}{Tk_B} + \frac{q_0}{k_B T}\sqrt{\frac{q_0 E}{\pi\varepsilon_0\varepsilon_r}}$ est une droite
Hopping	$J_H = J_0 e^{-\frac{\phi_p}{k_B T}} 2\sinh(\frac{q_0 E\lambda}{2k_B T})$	• Activé thermiquement • $J_H \propto E$ à faible champ

Tableau 2 : Récapitulatif des mécanismes de transport de charges

4) Modélisation des matériaux isolants sous champ électrique

L'étude des mécanismes de défaillance liés aux propriétés des diélectriques intéresse des domaines variés. Pour l'étude de certains modes de défaillance, la compréhension des mécanismes de conduction et d'accumulation de porteurs dans les matériaux isolants est indispensable. Des modèles simulant ces phénomènes ont ainsi été développés pour différentes applications.

Modèles développés pour la défaillance des composants électroniques

De nombreux modèles développés pour anticiper la défaillance de composants électroniques sont proposés dans la littérature. Certains permettent d'estimer la durée de vie des dispositifs et ont été mis au point à partir d'ajustements de grandeurs caractéristiques (tension d'actionnement, capacité…) mesurées en fonction du temps [69] [70] [71]. D'autres s'appuient sur l'identification et le calcul de différents modes de transports ainsi que la résolution d'un système composé des équations de Poisson et de conservation de la charge pour déterminer l'accumulation de la charge dans les isolants. Ces modèles apportent une plus grande compréhension des phénomènes de transport et d'accumulation de charges dans les films minces diélectriques.

Certains modèles ont été spécifiquement développés pour estimer le temps de claquage diélectrique et ainsi étudier la fiabilité des circuits intégrés [72] [73]. Ogden *et al.* [57] proposent un modèle permettant de décrire le processus de claquage dans un diélectrique en s'appuyant sur les phénomènes de transport. Des électrons sont tout d'abord injectés dans l'isolant par effet Schottky, ils sont ensuite accélérés par le champ électrique appliqué. Ils peuvent alors se déplacer dans la bande de conduction ou de piège en piège par effet tunnel. Dans ces travaux, les pièges sont considérés comme positivement chargés ; leur présence entraîne une augmentation du champ électrique à la cathode. Des collisions entre les électrons et les défauts font perdre de l'énergie aux électrons et de nouveaux défauts sont ainsi créés. Ceci entraîne une augmentation du courant dans la structure jusqu'à atteindre une valeur critique de densité de pièges menant au claquage de l'isolant. Le modèle permet de reproduire des résultats expérimentaux pour le nitrure de silicium et le dioxyde de silicium [57] [74].

De nombreux modèles ont été spécifiquement mis au point pour l'étude de l'accumulation de la charge dans les composants capacitifs.

Yuan *et al.* [75] ont caractérisé le temps de charge et de décharge de diélectriques couramment utilisés pour les MEMS RF capacitifs. Leur étude montre que la charge stockée dans le diélectrique en fonction du temps peut être représentée par une expression dépendant des temps caractéristiques de charge et de décharge, des durées d'application et de suppression du

champ électrique ainsi que de la charge à l'état stationnaire. La localisation moyenne de la charge stockée dans l'isolant est quant à elle estimée grâce à des ajustements du décalage de la tension d'actionnement du MEMS en fonction du temps. Yuan *et al.* [13] et Peng *et al.* [76] [77] ont ensuite étudié l'impact de la température d'utilisation du dispositif ainsi que celle des cycles d'actionnement (valeur de tension, rapport cyclique, durée d'actionnement…) sur la charge accumulée en fonction du temps. Ce modèle permet d'estimer la charge d'un diélectrique connu suivant différentes conditions d'utilisation, après avoir extrait les temps caractéristiques de charge et décharge du matériau ainsi que la charge totale accumulée à l'état stationnaire. Cependant, toute modification du diélectrique ou des électrodes conduit à refaire l'intégralité des tests expérimentaux sur les MEMS.

Mellé *et al.* [14] [78] ont tout d'abord caractérisé l'isolant utilisé dans leur MEMS RF afin de déterminer le mode de conduction dominant dans leurs échantillons. A partir de l'expression du mécanisme de transport identifié (Frenkel-Poole) et en considérant que la charge dans le diélectrique était stockée de façon uniforme, ils ont établi une expression du décalage de la tension d'actionnement en fonction du temps. Cette expression dépend des propriétés du diélectrique et des caractéristiques dimensionnelles du composant étudié. Elle prend aussi en compte la rugosité au contact entre l'isolant et l'électrode supérieure grâce à l'utilisation d'un champ électrique effectif dans l'isolant. Le modèle proposé permet de décrire la vitesse d'accumulation de la charge dans le diélectrique suivant les propriétés du dispositif ; il fournit un indicateur sur la durée d'utilisation possible du MEMS RF étudié. Le mécanisme de transport identifié est la conduction par effet Frenkel-Poole, c'est-à-dire le transport de charges piégées et donc préalablement injectées dans l'isolant. Le modèle ne s'intéresse pas à l'injection des charges et ne permet pas de déterminer où celles-ci sont stockées.

De même, Koszewski *et al.* [79] [80] ont commencé par l'identification des mécanismes de conduction dans des MEMS RF capacitifs contenant du Si_3N_4 et du SiO_2 comme diélectrique. La conduction dans le SiO_2 semble contrôlée par l'effet Schottky, la conduction dans le Si_3N_4 est quant à elle assurée par l'effet Frenkel-Poole. Grâce à la connaissance de ces mécanismes et de certaines propriétés du matériau, ils proposent un modèle permettant d'évaluer la quantité totale de charges accumulée dans l'isolant en fonction du temps. Pour chaque pas de temps, le courant d'injection puis la charge totale associée, l'impact sur la tension d'actionnement et l'écrantage du champ électrique sont calculés. La dérive de la tension d'actionnement est ainsi déterminée suivant la durée d'utilisation du dispositif ; les résultats de simulation sont en bon accord avec les résultats expérimentaux. Cependant, comme dans le cas du modèle précédent, ces travaux ne donnent pas accès à la distribution spatiale des charges dans l'isolant ni à l'ensemble des phénomènes de transport dans les diélectriques étudiés. Ces modèles ne permettent donc pas d'améliorer la fiabilité des dispositifs.

Papaioannou *et al.* [15] modélisent le transport électronique dans une structure Métal-Isolant-Métal en considérant l'injection de charges du métal dans des pièges du diélectrique par effet tunnel (Trap Assisted Tunneling). Ces charges piégées peuvent ensuite être extraites vers la bande de conduction par un mécanisme Frenkel-Poole ou être extraites vers le métal à nouveau par effet tunnel. La charge totale accumulée dans les pièges du diélectrique est calculée en supposant qu'une fraction de la charge injectée par le Trap Assisted Tunneling est réémise par l'effet Frenkel-Poole. La dépendance temporelle de l'accumulation de la charge dans l'isolant est assurée par la présence d'un facteur exponentiel dépendant du temps pour les mécanismes de transport par effet tunnel, comme proposé précédemment par Ramprasad [61]. Les résultats de simulations montrent que la charge totale accumulée dans l'isolant augmente avec la durée d'application de la tension et dépend de la densité d'états dans le gap du diélectrique. Ce modèle inclut l'injection de porteurs dans le diélectrique ainsi qu'un mode de conduction dans le volume. Cependant, ce modèle ne permet pas de connaître la localisation des porteurs piégés et ne prend pas en compte la modification du champ électrique interne avec l'accumulation de la charge dans le temps.

Le modèle de transport de charges actuellement le plus complet adapté au cas des MEMS RF a été réalisé par Palit *et al.* [81]. Le modèle à une dimension initialement proposé permet de calculer l'accumulation de la charge dans la couche d'isolant (d'épaisseur de l'ordre de la centaine de nm) d'une structure Métal-Isolant-Métal. Il est basé sur la résolution des équations de Poisson et de conservation de la charge. Les porteurs sont injectés dans des pièges de l'isolant (Trap Assisted Tunneling) et la conduction volumique est assurée par un effet Frenkel-Poole. Les porteurs ainsi extraits dans la bande de conduction par le mécanisme Frenkel-Poole sont immédiatement collectés par les électrodes. Les pièges sont distribués uniformément dans le diélectrique, la diffusion est négligée et seul le transport d'électrons est considéré. Ce modèle a ensuite été enrichi par le traitement des équations régissant la mécanique d'abaissement de la membrane [41] afin de modéliser le fonctionnement d'un MEMS RF capacitif. Cette étude leur permet d'estimer l'impact du mode d'utilisation sur le nombre de cycles de fonctionnement sans défaillance du composant électronique. De plus, l'influence de la rugosité à l'interface entre le diélectrique et la membrane mobile a été étudiée [82]. Les résultats montrent que les simulations de l'accumulation de la charge dans une capacité MIM avec des contacts parfaits (sans rugosité d'interface) permettent une bonne estimation des effets de charge dans les MEMS RF. Contrairement aux modèles présentés précédemment, celui-ci donne accès à la localisation des charges piégées dans le diélectrique, les éléments régissant le transport de charges sont calculés sur toute l'épaisseur du diélectrique et pendant toute la durée d'application de la tension. Ce modèle (Figure 18) inclut un mécanisme d'injection (J_{IN}) et d'extraction (J_{OUT}) des porteurs dans les pièges du diélectrique par effet tunnel et un mécanisme de réémission des porteurs piégés (J_E). Les porteurs ainsi réémis ne peuvent pas être à nouveau piégés et participer à la conduction dans la bande conduction, seuls les porteurs piégés sont considérés.

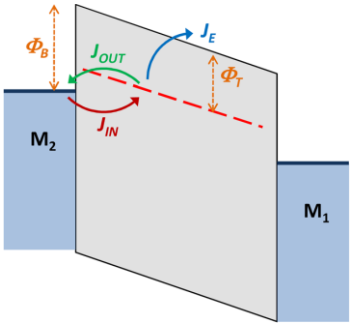


Figure 18 : Schéma du modèle de transport de charges de Palit et al. [81]

Dans sa thèse, Cirba [83] étudie les mécanismes de piégeage et dépiégage dans le SiO_2 soumis à un rayonnement ionisant pour les composants de type MOS (Métal-Oxyde-Semi-conducteur). Dans ce modèle, des paires électron-trou sont créées à l'initialisation par rayonnement puis les porteurs se déplacent dans la bande de conduction ou de valence avec une mobilité effective. Ils peuvent être piégés et dépiégés, et peuvent aussi se recombiner. Le modèle n'inclut pas l'injection de porteurs aux électrodes ni la création de défauts supplémentaires lors de la simulation.

Modèles de transport de charges dans les isolants

La modélisation du transport de charges dans les isolants intéresse des domaines variés. Des modèles de transport dans les isolants soumis à de forts champs électriques ont notamment été développés pour les polymères, utilisés par exemple dans les câbles à haute tension, ou les systèmes de stockage d'énergie. Ces modèles permettent de déterminer la localisation des charges dans le polymère en fonction du temps par la résolution des équations de l'électromagnétisme dans toute l'épaisseur de l'isolant.

Dans les années 1990, plusieurs équipes ont travaillé sur la modélisation du transport de charges dans les polymères. En 1994, Alison *et al.* [84] publient un modèle de transport de charges pour l'étude du polyéthylène. Une source aux électrodes assure l'injection de porteurs dans l'isolant ; ceux-ci peuvent ensuite être piégés, se déplacer grâce au champ électrique et à une mobilité effective qui leur est associée ou se recombiner. Fukuma *et al.* [85] se sont intéressés à la distribution de la charge dans le XLPE (cross link polyethylene). Ils proposent un modèle bipolaire à une dimension basé sur l'injection d'électrons et de trous par un mécanisme Schottky et un transport des porteurs dans le volume par hopping ; de plus les charges libres peuvent se recombiner. Le passage du courant et le champ électrique local provoquent un

échauffement par effet Joule pris en compte dans ce modèle [86]. Kaneko *et al.* [87] [88] se sont aussi intéressés à la modélisation de la distribution de la charge d'espace dans le XLPE. Les porteurs (électrons et trous) sont injectés par Schottky aux électrodes et migrent vers l'électrode opposée par hopping. Dans ce modèle, les charges peuvent se recombiner dans le volume de l'isolant. Dans [88], les porteurs peuvent aussi être générés par des sites accepteurs ou donneurs dans le polymère.

Le Roy *et al.* [89] [90] ont développé un modèle de transport de charges appliqué au cas des polymères. Ils ont tout d'abord proposé un modèle bipolaire à une dimension. Ce modèle comprend l'injection d'électrons et de trous par effet Schottky, le transport dans le volume grâce à une mobilité effective, le piégeage des charges injectées, l'extraction et la recombinaison possible de ces charges. Afin d'optimiser le calcul numérique, le maillage spatial utilisé n'est pas uniforme dans tout le diélectrique, le maillage est plus resserré dans les zones d'accumulation de charges (proche des électrodes). La diffusion est ici négligée, il n'y a pas de génération interne de charges et il existe un unique type de piège. Boufayed *et al*. [91] [92] ont ensuite enrichi ce modèle avec une distribution exponentielle de pièges. Ces pièges se remplissent en commençant par les pièges les plus profonds. Taleb *et al.* [60] se sont plus particulièrement intéressés aux phénomènes de transport de charges aux interfaces métal-isolant. Les interfaces sont physiquement et chimiquement très complexes, elles comprennent de nombreuses impuretés. La zone d'interface est alors modélisée différemment du reste du diélectrique. Le modèle comprend une répartition non uniforme de la densité de pièges au niveau des interfaces. La densité de pièges y est plus élevée et ceux-ci sont plus profonds que dans le volume de l'isolant. De plus, la surface de l'isolant peut présenter une rugosité importante impactant le champ électrique et l'injection de charges à l'interface métal-isolant [93].

Une approche différente du transport de charges dans les isolants est proposée par Huang *et al.* [94]. Ils se sont intéressés au transport dans les matériaux nanocomposites à base de polymères en s'appuyant sur une approche de type Monte Carlo. Ces matériaux sont constitués d'une matrice polymère et de nano-inclusions, la présence des nano-inclusions modifie la morphologie et le comportement du matériau. La distribution de champ électrique dans l'isolant est aussi impactée par la présence de ces inclusions ; cet effet est pris en compte dans le modèle par la résolution des équations de Maxwell grâce à la méthode des éléments finis. Le hopping est le mode de transport considéré dans ce modèle, la probabilité de passer d'un piège à un autre est estimée pour chaque porteur suivant les énergies des sites de départ et d'arrivée. Le transport d'un porteur s'arrête lorsque le temps de résidence cumulé dans les pièges dépasse une valeur prédéterminée. Le comportement moyen des électrons est ainsi obtenu par répétition du calcul de probabilité de saut pour chaque électron jusqu'à la condition d'arrêt. Les simulations donnent accès à la distribution de charges dans l'isolant en fonction du temps dans le cas d'un transport par hopping.

Lean *et al.* [95] ont développé un modèle de transport de charges pour des matériaux polymères en multi-couches. Ces matériaux alternant des polymères aux propriétés complémentaires sont utilisés dans les systèmes de stockage d'énergie. Le champ de claquage de ces structures est impacté par les contrastes de permittivité entre les différentes couches ainsi que l'accumulation de charges aux interfaces. Le modèle bipolaire proposé inclut l'injection de porteurs par effet Schottky ou Fowler-Nordheim suivant le champ électrique appliqué, les mécanismes de dérive-diffusion et piégeage-dépiégeage dans le polymère ainsi que des recombinaisons assistées par piège (Shockley-Read-Hall). Ce modèle permet d'étudier l'accumulation de la charge aux interfaces entres les couches ainsi que la distribution de champ électrique dans l'ensemble de la structure. Les avantages de l'utilisation de certains polymères pour ces structures multi-couches ont ainsi pu être confirmés par la simulation.

Synthèse

Les modèles présentés dans cette section permettent d'étudier l'accumulation de la charge dans des isolants soumis à des champs électriques grâce à différentes approches. Les méthodes d'évaluation de la quantité globale de charge accumulée dans l'isolant mènent à des conclusions intéressantes pour améliorer la fiabilité des composants, en étudiant par exemple les caractéristiques ou les conditions d'utilisation des systèmes. L'un des objectifs de ces travaux de thèse est de développer un modèle donnant accès à l'ensemble des grandeurs physiques impactant le transport de charges dans les diélectriques. En effet, il est nécessaire pour cette étude de pouvoir évaluer le champ électrique et la quantité de charges accumulée en tout point du diélectrique. Ceci permet de proposer un matériau aux propriétés idéales permettant d'optimiser la durée de vie des composants. De plus, le modèle de transport de charges doit être physiquement complet et cohérent ; il doit représenter le plus fidèlement possible la réalité physique des phénomènes de conduction dans les isolants grâce au choix des mécanismes de transport.

Chapitre II Caractérisation du matériau

La conception d'un modèle de transport de charges dans un diélectrique nécessite la connaissance des caractéristiques du matériau isolant. Différentes méthodes de caractérisation ont permis d'accéder à certaines propriétés des couches minces de nitrure de silicium étudiées. Dans ce chapitre, les dispositifs utilisés pour réaliser les mesures ainsi que le matériau diélectrique sont tout d'abord présentés. Chaque méthode de caractérisation et les résultats obtenus grâce à ces techniques d'analyses sont ensuite décrits. Des analyses par faisceaux d'ions rapides ont tout d'abord permis de connaître la stœchiométrie du matériau. Des analyses FTIR (spectroscopie InfraRouge à Transformée de Fourier) menées sur les échantillons informent sur la nature des liaisons. Des caractérisations en fréquence ont aussi été réalisées dans le but de déterminer la présence de mécanismes de polarisation dans les échantillons étudiés. De plus, un banc de mesure de faible courant a été développé afin de pouvoir identifier des mécanismes de transport de charges dans les structures MIM étudiées et ensuite comparer les résultats de mesures avec les simulations.

1) Dispositifs utilisés

Différents dispositifs ont été utilisés pour caractériser les couches minces diélectriques étudiées. Ces composants ont été réalisés par la plateforme technologique à TRT. Les capacités MIM ou condensateurs plans sont parmi les structures les plus simples comportant un diélectrique. Ces dispositifs présentent de nombreux avantages autant pour la caractérisation du diélectrique que pour la modélisation du transport électronique dans les isolants. Elles sont simples à réaliser et le contact électrode-diélectrique est parfait, au sens où il n'y a pas d'air entre l'électrode et le diélectrique. Des capacités MIM adaptées aux hyperfréquences ont aussi été utilisées. Lors des dépôts de nitrure de silicium, des wafers témoins ont été placés dans les bâtis de dépôts mais n'ont pas été métallisés ; ainsi ces échantillons ont pu être caractérisés par faisceaux d'ions.

Présentation des échantillons

Les capacités et les structures MIM coplanaires utilisées pour les mesures sont réalisées sur des plaques à haute résistivité. Ces substrats sont composés de 300 µm de Si et 2 µm de SiO_2. La haute résistivité des substrats est une propriété importante pour les mesures en fréquence car l'onde électromagnétique se propage dans le dispositif de test, dans l'air mais aussi dans le substrat. Cette propriété permet de limiter les pertes provenant du substrat.

Trois plaques de diamètre 3 pouces ont été fabriquées pour cette thèse (Figure 19). Pour ces plaques, un masque comportant des capacités circulaires de différentes surfaces a été élaboré (Figure 20*)*. Ces capacités sont composées d'un film mince de diélectrique (nitrure de silicium) entre deux électrodes métalliques (ici en or). Les épaisseurs de matériaux sont de 100 nm pour le diélectrique, 500 nm pour l'électrode inférieure et 3 µm pour l'électrode supérieure. Une couche d'accroche métallique (titane-tungstène) d'épaisseur 10 nm est présente entre l'isolant et l'électrode (Figure 21). Cette couche est indispensable à une bonne adhésion du diélectrique avec les électrodes. Le procédé de dépôt utilisé pour réaliser la couche mince diélectrique est différent suivant la plaque. Pour deux des plaques, le nitrure de silicium a été déposé par PECVD (Plasma-Enhanced Chemical Vapor Deposition ou dépôt chimique en phase vapeur assisté par plasma) à deux températures différentes (250°C et 360°C). Le dernier dépôt a été réalisé par ICP-CVD (Inductively Coupled Plasma Chemical Vapor Deposition) à 250°C.

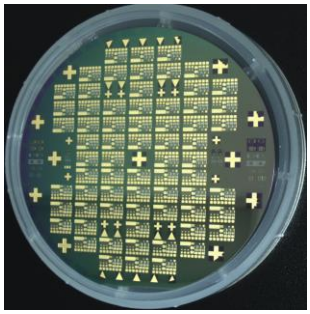


Figure 19 : Plaque 3''- 68 cellules de 30 capacités

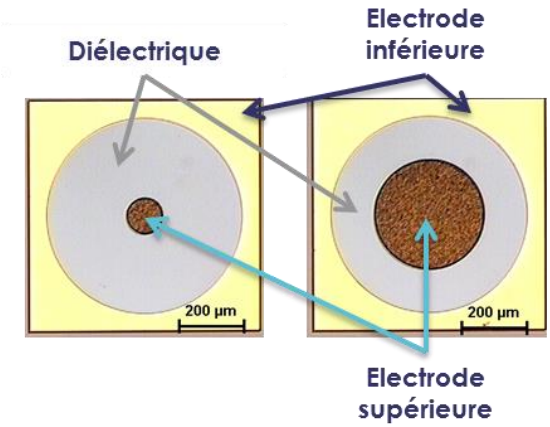


Figure 20 : Capacités rondes de diamètres 112 µm et 340 µm

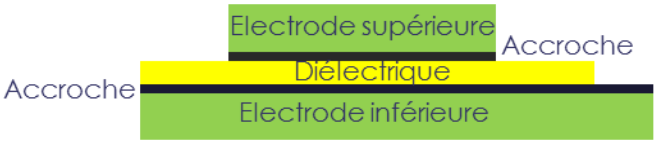


Figure 21 : Vue schématique en coupe de l'empilement des matériaux

Une plaque supplémentaire réalisée en dehors du cadre de la thèse a été utilisée pour les mesures de permittivité en fonction de la fréquence, les mesures de courant en DC et la caractérisation de MEMS RF. En effet, cette plaque contient des capacités MIM, des capacités MIM adaptées aux mesures en hyperfréquence et des MEMS RF. Les structures MIM coplanaires adaptées aux mesures en hyperfréquence ont été utilisées afin d'étudier la présence des phénomènes de polarisation du diélectrique à hautes fréquences. Elles sont constituées d'une couche de diélectrique de 255 nm déposée sur un guide d'onde coplanaire (500 nm d'or et une couche d'accroche de 10 nm de titane). L'électrode supérieure est composée de 10 nm de titane-tungstène (couche d'accroche) et 3 µm d'or (Figure 22). Le dépôt de nitrure de silicium a été réalisé par PECVD à 340°C. N'ayant pas de wafer témoin pour cette plaque, aucun dosage par faisceau d'ions n'a pu être effectué.

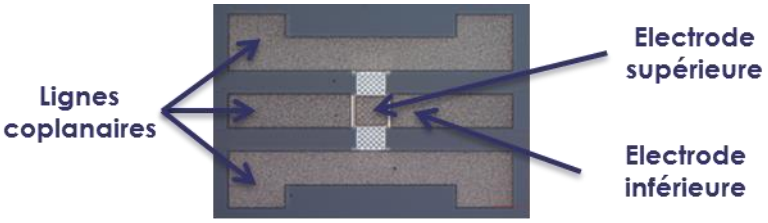


Figure 22 : Capacité adaptée aux mesures en hyperfréquence

Type de dépôt	ICP-CVD 250°C	PECVD 360°C	PECVD 340°C	PECVD 250°C
Substrat	Si/SiO_2	Si/SiO_2	Si/SiO_2	Si/SiO_2
Epaisseur	100 nm	100 nm	255 nm	100 nm
Dispositifs	Capacités MIM	Capacités MIM	Capacités MIM, MEMS RF capacitifs	Capacités MIM

Tableau 3 : Récapitulatif des échantillons étudiés

Dépôt des couches minces diélectriques

Différentes étapes de dépôts et de gravures sont nécessaires à la fabrication des dispositifs de test. L'électrode métallique inférieure est tout d'abord déposée par évaporation sur le substrat en silicium haute résistivité. Puis la couche de diélectrique est réalisée et enfin l'électrode métallique supérieure est déposée par pulvérisation cathodique. Pour ces travaux les couches minces de nitrure de silicium ont été déposées par PECVD et ICP-CVD, des modes de dépôt couramment utilisés en micro-électronique.

La PECVD est une méthode de dépôt qui consiste à synthétiser une couche mince de matériau (de plusieurs nanomètres à quelques micromètres d'épaisseur) à partir d'éléments précurseurs en phase gazeuse. Un plasma est généré par application d'un champ électrique dans une enceinte contenant un substrat. Sous l'effet du champ électrique certaines molécules des gaz précurseurs sont ionisées et un plasma se forme. Les espèces constituants le plasma sont très réactives, elles peuvent réagir en phase gazeuse ou à la surface du substrat et ainsi contribuer à la croissance du film mince sur le substrat. Suivant la pression, le champ électrique, le type de gaz, la fréquence plasma ou encore la température dans l'enceinte, différentes réactions impactant la stœchiométrie ont lieux. Pour ce procédé de croissance, il n'est pas nécessaire de chauffer le substrat à haute température pour assurer la croissance de la couche mince. En effet, une partie de l'énergie nécessaire aux réactions provient de l'énergie électrique. Dans le cas du dépôt par ICP-CVD, le plasma est entretenu par couplage inductif avec un signal radiofréquence. Le plasma ainsi obtenu est plus dense en espèces réactives [96].

Matériau diélectrique étudié : le nitrure de silicium

Le nitrure de silicium amorphe est couramment utilisé comme isolant en micro-électronique (capacités MIM, transistors HEMT, dispositifs MEMS…). Le matériau obtenu lors du dépôt est rarement stœchiométrique et présente différents types de défauts (Figure 23) : liaisons pendantes sur les atomes de silicium ou d'azote, liaisons $\equiv \mathrm{Si} - \mathrm{Si} \equiv$, liaisons $= \mathrm{N} - \mathrm{N} =$, liaisons $\equiv \mathrm{Si} - \mathrm{H}$ ou $= \mathrm{N} - \mathrm{H}$… La nature et les propriétés de ces défauts dépendent du mode de dépôt des couches d'isolant [15] [97]. Ces différents défauts peuvent générer des états dans le gap capables de piéger des porteurs [98] ; ils contribuent alors à la conduction du matériau lorsqu'ils piègent et libèrent des porteurs. L'étude des défauts est donc indispensable à la compréhension des mécanismes de transport dans les diélectriques. Robertson *et al.* [99] se sont basés sur la méthode des liaisons fortes pour étudier les différents défauts et effectuer le calcul des niveaux d'énergie dans le nitrure de silicium amorphe. Une approche expérimentale basée sur la résonance de spin électronique (ESR) a été largement utilisée par Warren *et al.* [100] pour l'étude de ces défauts.

Les liaisons pendantes Si sont présentes dans les films minces de Si_3N_4 quelle que soit leur stœchiométrie [101] et sont généralement identifiées comme étant les principaux défauts [98] [102]. Ces liaisons pendantes (aussi appelées centres K) sont formées d'un atome de silicium lié à trois atomes d'azote : $N_3 \equiv Si \cdot$. Elles semblent provenir de la rupture de liaisons $Si - Si$ ou de liaisons $Si - H$ [3]. Ce type de défaut peut être présent dans le nitrure de silicium dans trois états différents de charge [102] : chargé positivement Si_3^+, chargé négativement Si_3^- et neutre Si_3^0. La liaison pendante pour le silicium génère ainsi un piège amphotère, c'est-à-dire capable de piéger un électron e^- ou un trou h^+ [103]. Selon Robertson, le défaut neutre Si_3^0 est à l'origine d'un piège dans le gap à environ 3,1 eV au-dessus de la bande de valence [98]. Cet état est généralement considéré comme piège mémoire dans le nitrure de silicium. En effet, le porteur est piégé dans un état éloigné des limites de bandes, son extraction est alors plus difficile que pour des états peu profonds. Le défaut chargé positivement et le défaut chargé négativement forment un piège à environ 1 eV sous la bande de conduction [98]. Les liaisons $Si - Si$ sont à l'origine de deux types de défauts associés aux états liants σ et anti-liants σ^*, ces défauts se situent en limite de bande de conduction et de valence [101] créant ainsi une queue de bande [98]. Les liaisons pendantes azote sont aussi des centres piégeurs, elles sont principalement présentes dans les dépôts riches en azote ou stœchiométriques [104]. Comme pour les liaisons pendantes silicium, ces défauts peuvent être neutres (N_2^0) ou chargés (N_2^-, N_2^+). Le piège créé par le centre neutre N_2^0 se situe en limite de bande de valence [3] [98] [101]. Les centres N_2^- forment aussi des états proches de la bande de valence créant une queue de bande [98]. Ils sont identifiés comme pièges pour les trous [98]. Ces défauts chargés peuvent provenir d'un transfert de charges entre deux liaisons pendantes [101] : $2N_2^0 \rightarrow N_2^- + N_2^+$ ou $Si_3^0 + N_2^0 \rightarrow Si_3^+ + N_2^-$. Des liaisons N-N peuvent également être présentes, donnant naissance à des défauts dans le gap proches du minimum de la bande de conduction (environ 1 eV sous la bande de conduction) et du maximum de la bande de valence (0,5 eV au-dessus) [3]. D'autres défauts, appelés centres N_4^+, se forment selon la réaction suivante :

$$Si_3^+ + N_3^0 \rightarrow N_4^+ + Si_4^0 \qquad (20)$$

Le centre Si_3^+ forme une nouvelle liaison $Si - N$ avec un site N_3^0. Ceci donne lieu à un défaut proche du minimum de bande de conduction [3].

De l'hydrogène étant présent dans les gaz précurseurs utilisés pour la fabrication de la couche mince, le Si_3N_4 déposé par PECVD contient une quantité non négligeable d'hydrogène (quelques pourcents à quelques dizaines de pourcents [3] [96] [105]). Le matériau obtenu est finalement du SiN_x:H. La quantité d'hydrogène incorporée dépend des conditions de fabrication de la couche mince [106]. L'hydrogène incorporé dans le film mince se lie aux atomes d'azote et de silicium. Les liaisons $Si - H$ créent deux types de défauts associés aux états liants et anti-liants. Le défaut provenant de l'état anti-liant se situe au-dessus du minimum de bande de conduction [101], celui provenant de l'état liant est en dehors du gap mais proche de la

limite de bande de valence [98]. Cependant, certains travaux placent ce défaut dans le gap du nitrure de silicium [99] [107]. Enfin, la littérature a montré que les liaisons $N-H$ ne génèrent pas de défauts dans le gap [99] [108]. Un fort taux d'hydrogène permet la réduction de la quantité de liaisons pendantes [97]. L'hydrogène a donc un rôle de passivation mais le matériau peut évoluer dans le temps. En effet, les liaisons pendantes azote et silicium semblent en partie provenir de rupture de liaisons $N-H$ et $Si-H$ [100] [104].

Les films minces de nitrure de silicium peuvent aussi contenir de l'oxygène (quelques pourcents ou dixièmes de pourcents) [109] ; celui-ci se substitue alors à l'azote formant un défaut O_N dans l'isolant [110]. Cette contamination peut avoir lieu lors du dépôt, en cas de fuite ou de présence d'oxygène dans le bâti. Après le dépôt de la couche, celle-ci peut aussi s'oxyder à l'air ambiant [96]. Selon Grillo *et al.* [110], ce défaut génère un piège à électrons situé à 3,5 eV au-dessus du maximum de bande de valence.

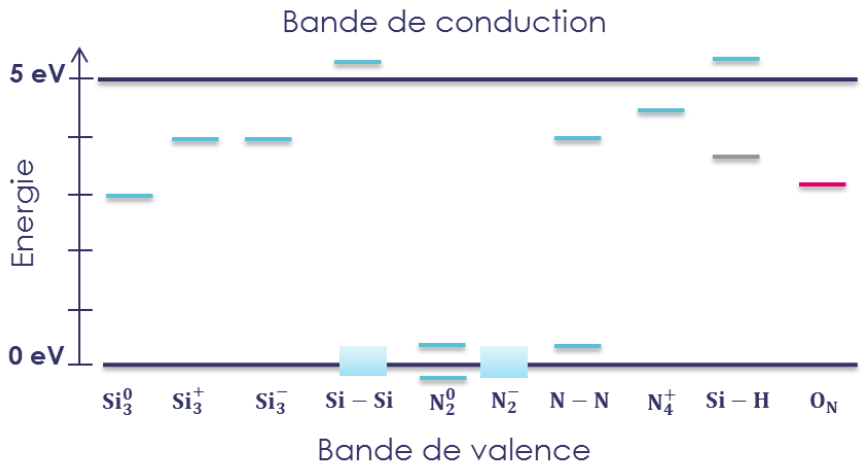
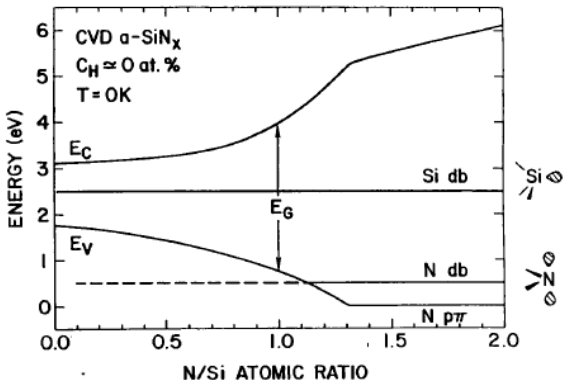


Figure 23 : Niveaux d'énergie des défauts dans le nitrure de silicium identifiés dans la littérature – Robertson et al. (bleu) [98] [99] [101] / Vianello et al. (gris) [107] / Grillo et al. (rouge) [110]

L'ordre de grandeur de la densité de pièges dans le nitrure de silicium a été déterminé de manière expérimentale dans la littérature. La densité de pièges est estimée à environ 10^{24} m^{-3} à 10^{27} m^{-3} [100] [107] [108] [111] [112] suivant les conditions de dépôt de la couche mince [98] [113] [114]. La répartition spatiale des pièges dans le nitrure de silicium a aussi été étudiée dans la littérature ; la distribution mesurée n'est pas uniforme dans toute l'épaisseur du matériau [112]. En effet, la densité de pièges déterminée par Park *et al.* [111] dans les 10 à 15 premiers nanomètres proches de l'interface est 6 à 15 fois plus élevée que la densité de pièges dans le volume du diélectrique.

L'évolution du gap du nitrure de silicium en fonction de sa stœchiométrie a été calculée par Robertson [3] (Figure 24). Lorsque la quantité d'azote augmente, les liaisons Si – Si générant des états en limites de bande de valence et de bande de conduction sont remplacées par des liaisons Si – N créant quant à elles des états situés plus en profondeur dans la bande de valence [3] [105] [114] ; ceci agrandit donc le gap du matériau. L'augmentation du gap avec l'augmentation de la quantité d'azote dans le matériau a aussi été mise en évidence expérimentalement par Heo *et al.* [105].



Calculated variation in band-edge energies with N concentration x for a-SiN_x alloys.

Figure 24 : Gap du nitrure de silicium en fonction de sa stœchiométrie [3]

2) Analyses par faisceaux d'ions

Méthodes de caractérisation

Des analyses par faisceaux d'ions rapides ont été réalisées sur les différents dépôts de nitrure de silicium à l'Institut des Nanosciences de Paris. Un accélérateur d'ions, de type Van de Graaff, permet de générer un faisceau parallèle d'ions monocinétiques dans une large gamme d'énergie de 100 keV à 2,5 MeV. L'interaction entre le faisceau d'ions et les atomes des couches minces étudiées donne accès à des informations sur la composition et la structure de ces couches. Suivant la nature des ions et leur énergie, il est possible de réaliser différentes analyses.

Analyse des réactions nucléaires (NRA)

Cette technique de mesure est basée sur l'étude des particules émises lors d'interactions nucléaires entre un faisceau d'ions incidents de haute énergie et certains noyaux d'atomes de la

cible à étudier. Cette méthode est utilisée pour la détection et le dosage d'éléments légers avec une précision de l'ordre de quelques pourcents.

Un faisceau d'ions légers de haute énergie est généré grâce à l'accélérateur et projeté sur la couche mince à analyser (Figure 25). Si l'énergie des particules incidentes est assez élevée pour vaincre la répulsion coulombienne, celles-ci peuvent interagir avec les noyaux atomiques des éléments légers de la cible ; des réactions nucléaires ont alors lieu. Certains ions incidents peuvent être rétrodiffusés, ils sont éliminés grâce à un film de mylar placé sur le détecteur pour ne pas perturber le résultat de l'analyse. Les particules émises lors des réactions nucléaires sont collectées par un détecteur dans la chambre d'analyse. Le nombre de particules A émises dans la direction θ et collectées par le détecteur dans l'angle solide Ω est donné par :

$$A(\theta) = \sigma_{eff}(E) P_i N_a \Omega \tag{21}$$

avec $\sigma_{eff}(E)$ la section efficace d'interaction entre la particule incidente et le noyau d'atome étudié pour une énergie de faisceau donnée, P_i le nombre de particules incidentes et N_a la densité d'atomes étudiés.

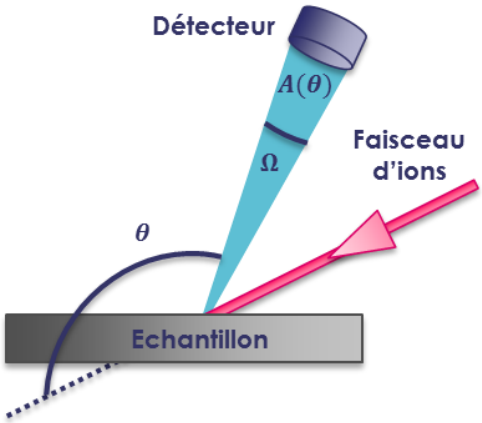


Figure 25 : Schéma NRA

L'énergie du faisceau incident est choisie de façon à obtenir une section efficace d'interaction avec les noyaux étudiés $\sigma_{eff}(E)$ élevée. La probabilité d'interaction entre la particule incidente et le noyau diminue avec l'augmentation de la masse atomique du noyau sondé ; c'est pourquoi l'analyse par réaction nucléaire est plus adaptée au dosage d'éléments légers. De plus, la particule incidente perd de l'énergie en traversant les couches d'atomes de la cible. Il faut donc se situer sur un plateau de section efficace en fonction de l'énergie de la particule incidente afin de pouvoir interagir avec les atomes situés en profondeur malgré les

pertes d'énergie. La densité d'atomes étudiés est finalement déterminée par comparaison avec les résultats obtenus sur un échantillon de référence.

Il est également possible de réaliser des profils de concentration de certaines espèces dans le volume de la cible grâce à l'analyse par profilage de réaction nucléaire à résonance fine. Cette méthode s'appuie sur l'existence d'une résonance fine caractéristique pour certaines réactions nucléaires. Un balayage en énergie des particules incidentes permet alors de sonder la cible en profondeur. Cette méthode n'a pas été utilisée pour ces travaux.

Spectroscopy de rétrodiffusion Rutherford (RBS)

La méthode RBS est basée sur l'étude des collisions élastiques entre un faisceau d'ions de haute énergie et les atomes d'une cible. L'analyse des pertes d'énergie des particules rétrodiffusées informe sur la nature et la répartition sur quelques centaines de nanomètres en profondeur des éléments de la cible étudiée. Cette méthode est adaptée à la détection et au dosage d'éléments plutôt lourds (masse atomique supérieure à 5) avec une précision de l'ordre de quelques pourcents.

Un faisceau d'ions de haute énergie est projeté sur l'échantillon analysé en incidence rasante (α de l'ordre de 75°) (Figure 26). Les ions incidents entrent alors en collision avec les atomes de la cible (Figure 27). Les atomes plus légers que les ions incidents peuvent être diffusés, les ions incidents peuvent être diffusés ou rétrodiffusés par les atomes de la cible plus lourds. La RBS s'intéresse aux particules rétrodiffusées ; les particules éjectées de la cible sont quant à elles étudiées pour l'analyse par détection des atomes de recul (ERDA) présentée dans la suite.

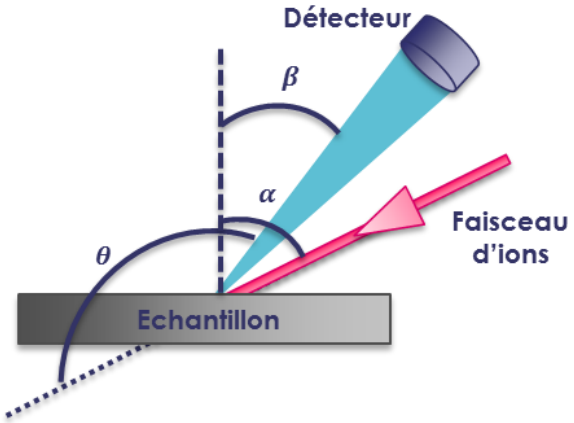


Figure 26 : Schéma RBS

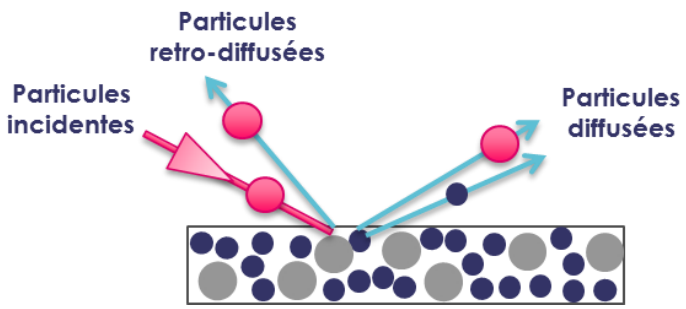


Figure 27 : Collisions entre les ions incidents et les atomes d'une cible

La particule incidente de masse m_1 et d'énergie E_1 entre en collision élastique avec un atome de la couche mince de masse m_2 (Figure 28). La probabilité d'occurrence d'une collision est proportionnelle au carré de la charge Z du noyau cible ; c'est pourquoi cette méthode de mesure est plus adaptée à l'étude d'éléments lourds. L'application des lois de conservation de quantité de mouvement et d'énergie permet de calculer le facteur cinématique de rétrodiffusion K_s, c'est-à-dire le rapport entre l'énergie E_1 de la particule incidente et l'énergie E'_1 de cette particule après la collision [115] :

$$K_s = \frac{E_1{}'}{E_1} = \frac{m_1 cos\theta + \sqrt{m_2^2 - m_1^2 sin^2\theta}}{m_1 + m_2} \qquad (22)$$

avec θ l'angle de rétrodiffusion des ions incidents.

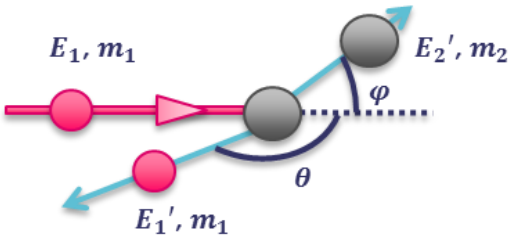


Figure 28 : Collision élastique entre une particule de masse m_1 et d'énergie E_1 et une particule de masse m_2

Les ions rétrodiffusés après les collisions sont recueillis par le détecteur. Leur énergie est dépendante de la masse de l'atome avec lequel il y a eu collision ; ils portent donc une information sur la nature de la cible, mais aussi sur la distance totale parcourue dans l'échantillon. En effet, la perte d'énergie des particules rétrodiffusées dépend de la distance

parcourue lors du trajet aller-retour dans la cible. Prenons un échantillon composé de deux éléments a et b de masse $m_a > m_b$ et de même concentration $C_b = C_a$ (Figure 29 a) et b)). Pour un angle de rétrodiffusion θ donné, les particules collectées par le détecteur ont une énergie croissante avec la masse des atomes de la cible selon l'expression du facteur cinématique K_s. Les particules ayant subi des collisions élastiques avec des atomes de type a ont donc une énergie cinétique $K_a E_1$ supérieure à celles ayant subi des collisions avec des atomes de type b. Le pic caractéristique de cette collision apparaîtra donc sur le spectre à une énergie plus élevée. La hauteur du pic dépend de la concentration de l'élément mais aussi de la probabilité de collision entre un élément de l'échantillon et un élément du faisceau incident. Cette probabilité interaction dépend de la section efficace différentielle de :

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \left(\frac{Z_1 Z_2 q_0}{4E_1}\right)^2 \frac{1}{\sin^4(\theta/2)} \qquad (23)$$

Avec Z_1 et Z_2 les numéros atomiques des espèces entrant en collision. Plus les éléments sont lourds, plus la section efficace différentielle de collision est élevée et plus l'intensité du pic est importante. La largeur du pic caractéristique dépend quant à elle de la distance dx parcourue par les particules rétrodiffusées, les pertes d'énergie ΔE augmentent avec la profondeur à laquelle une collision a eu lieu suivant le pouvoir d'arrêt du milieu sondé. Une information sur la distribution des éléments peut ainsi être extraite du spectre RBS.

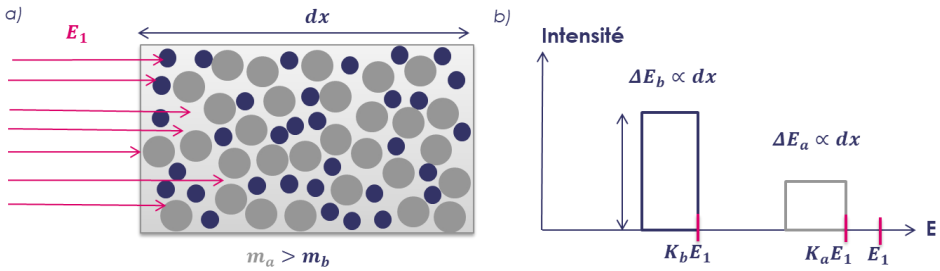


Figure 29 : a) Interaction entre un faisceau incident et une cible b) Représentation schématique du spectre RBS correspondant

Un spectre RBS est constitué de paliers dont les énergies de différents fronts sont caractéristiques des éléments présents dans la cible. La hauteur de ces paliers informe sur la concentration de ces éléments et la largeur sur leur distribution spatiale dans l'échantillon.

Analyse par détection des atomes de recul (ERDA)

Cette méthode de mesure s'appuie elle aussi sur le phénomène de diffusion Rutherford ; elle se base sur la détection des particules éjectées de la cible sous l'impact du faisceau d'ions sur l'échantillon en incidence rasante (α de l'ordre de 75°) (Figure 27). Elle est utilisée pour la détection et le dosage d'éléments légers (typiquement l'hydrogène) avec une précision de l'ordre de quelques pourcents.

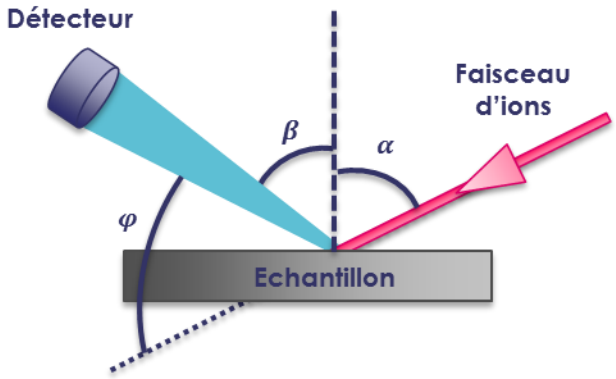


Figure 30 : Schéma ERDA

De la même façon que pour la RBS, il est possible de calculer le facteur cinématique de recul K_r, c'est-à-dire le rapport entre l'énergie E_1 de la particule incidente et l'énergie E'_2 de la particule éjectée de l'échantillon après collision [115]:

$$K_r = \frac{E_2{}'}{E_1} = \frac{4m_1m_2cos^2\varphi}{(m_1+m_2)^2} \qquad (24)$$

avec φ l'angle de diffusion des particules éjectées (Figure 28).

Cette technique permet d'obtenir le dosage d'éléments légers en surface d'un matériau. La composition de l'échantillon est finalement déduite en comparant les spectres expérimentaux à des spectres de référence.

Composition et structure des échantillons

Analyse des réactions nucléaires (NRA)

Comme présenté précédemment, la NRA permet le dosage d'éléments légers. Les quantités d'oxygène et d'azote ont ainsi pu être déterminées dans les films minces de nitrure de silicium. Les dosages ont été effectués dans les conditions suivantes :

- Dosage de l'azote :

- Faisceau incident : ions ${}^{2}_{1}H$ à 1100 keV
- Réaction nucléaire : ${}^{14}_{7}N+{}^{2}_{1}H \rightarrow {}^{4}_{2}He+{}^{12}_{6}C$, la particule ${}^{4}_{2}He$ est obtenue à l'état fondamental α_0 et à l'état excité α_1
- Angle de détection des particules : θ = 150° (Figure 25)
- Echantillon de référence : ${}^{14}N$ à10^{18} atomes/cm²

- Dosage de l'oxygène :

- Faisceau incident : ions ${}^{2}_{1}H$ à 875 keV
- Réaction nucléaire : ${}^{16}_{8}O+{}^{2}_{1}H \rightarrow {}^{1}_{1}H+{}^{17}_{8}O$, la particule ${}^{1}_{1}H$ est obtenue à l'état fondamental p_0 et à l'état excité p_1
- Angle de détection des particules : θ = 150° (Figure 25)
- Echantillon de référence : ${}^{16}O$ à $349{,}9 \times 10^{15}$ atomes/cm²

Les spectres obtenus par NRA représentent le nombre de coups vus par le détecteur en fonction de l'énergie des particules lors de l'impact. Pour le dosage de l'azote, on distingue deux pics associés à la génération de particules α à l'état fondamental et à l'état excité (Figure 31). Le troisième pic peut provenir d'une réaction entre les particules incidentes et l'oxygène présent. Le spectre obtenu pour effectuer le dosage de l'oxygène présente quant à lui deux pics caractéristiques des particules p_0 et p_1 (Figure 32). Les autres pics proviennent des réactions nucléaires avec l'azote et le carbone contenus dans le film mince étudié. Les dosages des quantités d'azote et d'oxygène dans les échantillons sont finalement réalisés en comparant les spectres avec ceux des échantillons de référence (Tableau 4).

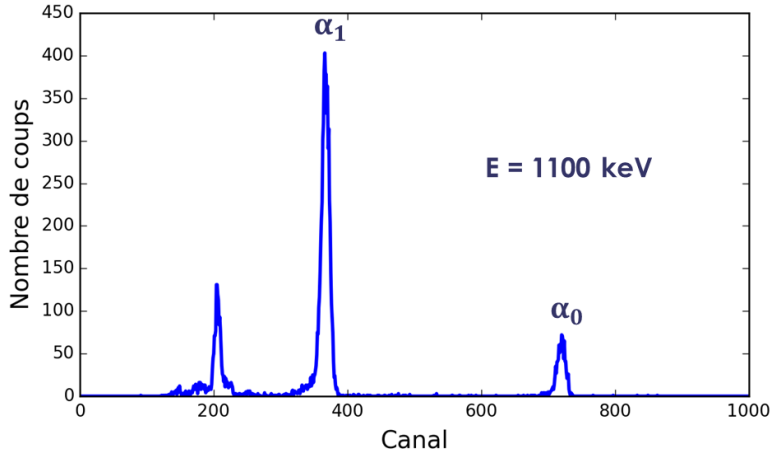


Figure 31 : Spectre NRA 1100 keV – Echantillon : Si_3N_4 déposé par ICP-CVD à 250°C

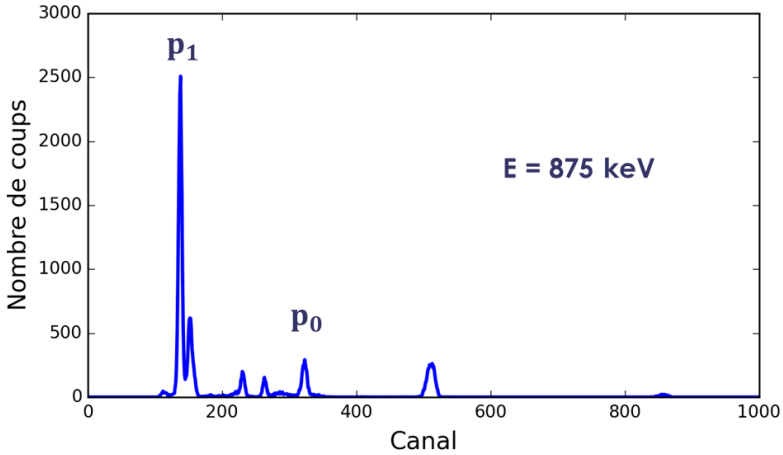


Figure 32 : Spectre NRA 875 keV – Echantillon : Si_3N_4 déposé par ICP-CVD à 250°C

Echantillon	ICP-CVD 250°C	PECVD 360°C	PECVD 250°C
Azote (±2%)	$4{,}87 \times 10^{17}$/cm²	$4{,}95 \times 10^{17}$/cm²	5×10^{17}/cm²
Oxygène (±10%)	$1{,}47 \times 10^{16}$/cm²	$5{,}98 \times 10^{15}$/cm²	$1{,}3 \times 10^{16}$/cm²

Tableau 4 : Dosages de l'azote et de l'oxygène obtenus par NRA pour les 3 dépôts

Cette méthode de mesure a permis de doser l'azote et l'oxygène dans les films minces diélectriques étudiés. On peut remarquer que la quantité d'oxygène est relativement importante, cette contamination a probablement eu lieu pendant la phase de dépôt.

Spectroscopie de rétrodiffusion Rutherford (RBS)

Comme présenté précédemment, la RBS permet le dosage d'éléments lourds. Les quantités de silicium et d'azote ont ainsi pu être déterminées dans les films minces de nitrure de silicium. Les dosages ont été réalisés dans les conditions suivantes :

- Dosage du silicium et de l'azote :

- Faisceau incident : ions $^{4}_{2}$He à 1850 keV
- Angle de détection des particules : θ = 165° (Figure 26)
- Echantillon de référence : ^{83}Bi à $5{,}61 \times 10^{15}$atomes/cm²

Le spectre obtenu par RBS (Figure 33) représente le nombre de coups vus par le détecteur en fonction de l'énergie des particules lors de l'impact. La lecture étant faite de droite à gauche (en partant des énergies les plus élevées), on observe un premier palier dû au silicium contenu dans la couche, le second palier provient du silicium du substrat et le dernier représente l'azote. La réponse de l'azote est superposée à celle du substrat, ainsi le dosage de cet élément n'est pas aisé dans ce cas. Le dosage du silicium est estimé par comparaison du spectre avec celui de l'échantillon de référence (Tableau 5).

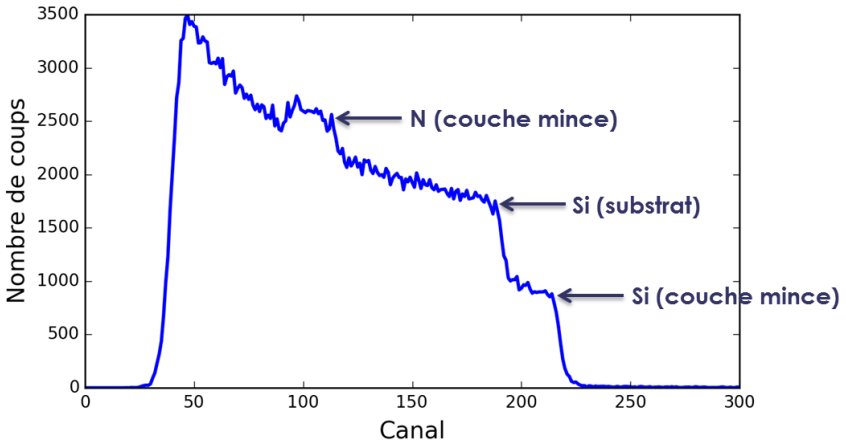


Figure 33 : Spectre RBS – Echantillon : Si_3N_4 déposé par ICP-CVD à 250°C

Echantillon	ICP-CVD 250°C	PECVD 360°C	PECVD 250°C
Azote ($\pm$2%)	$4{,}82 \times 10^{17}$/cm²	$4{,}91 \times 10^{17}$/cm²	$4{,}96 \times 10^{17}$/cm²
Silicium ($\pm$2%)	$3{,}30 \times 10^{17}$/cm²	$3{,}15 \times 10^{17}$/cm²	$2{,}82 \times 10^{17}$/cm²

Tableau 5 : Dosages de l'azote et du silicium obtenus par RBS pour les 3 dépôts

Les dosages des quantités d'azote et de silicium ont pu être réalisés grâce à la RBS pour les échantillons étudiés afin d'évaluer la stœchiométrie des dépôts.

Analyse par détection des atomes de recul (ERDA)

L'ERDA permet quant à elle le dosage d'éléments légers ; elle est donc particulièrement adaptée au dosage de l'hydrogène. Les dosages ont été menés dans les conditions suivantes :

- Dosage de l'hydrogène :
- Faisceau incident : ions $^{4}_{2}$He à 1850 keV
- Angle d'incidence du faisceau : α = 74° (Figure 30)
- Echantillon de référence : hPS (polystyrène hydrogéné) - H à $2{,}56 \times 10^{17}$ atomes/cm²

Le spectre réalisé par ERDA est présenté Figure 34 ; la quantité d'oxygène dans les échantillons analysées et estimée en comparant l'intégrale du pic avec celle du pic obtenu dans le spectre de référence (Tableau 6).

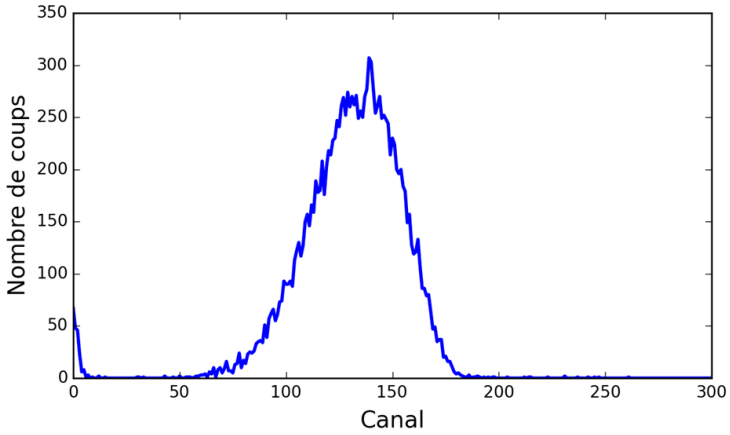


Figure 34 : Spectre ERDA – Echantillon : Si_3N_4 déposé par ICP-CVD à 250°C

Echantillon	ICP-CVD 250°C	PECVD 360°C	PECVD 250°C
Hydrogène ($\pm$1%)	$1{,}21 \times 10^{17}$/cm²	$1{,}09 \times 10^{17}$/cm²	$2{,}24 \times 10^{17}$/cm²

Tableau 6 : Dosage de l'hydrogène obtenu par ERDA pour les 3 dépôts

L'ERDA a permis de réaliser le dosage de l'hydrogène dans les couches minces de nitrure de silicium. L'hydrogène incorporé dans le diélectrique provient des gaz précurseurs utilisés pour les différentes méthodes de dépôt.

Conclusion

La stœchiométrie des échantillons est obtenue à partir du dosage de silicium obtenu par RBS et du dosage d'azote obtenu par NRA (Tableau 7).

Echantillon	ICP-CVD 250°C	PECVD 360°C	PECVD 250°C
Rapport Si/N ($\pm 0,02$)	0,68	0,64	0,57

Tableau 7 : Stœchiométrie des échantillons

Selon les dosages, les différents films minces étudiés sont tous sur-stœchiométriques en azote. La couche déposée par ICP-CVD à 250°C est celle dont le rapport $\mathrm{Si/N}$ est le plus proche de la stœchiométrie idéale du nitrure de silicium : $\mathrm{Si/N} = 0{,}75$. Le dépôt obtenu par PECVD à 250°C est quant à lui très éloigné de la stœchiométrie.

Les pourcentages d'hydrogène et d'oxygène dans les films minces de nitrure de silicium étudiés sont présentés dans le tableau suivant :

Echantillon	ICP-CVD 250°C	PECVD 360°C	PECVD 250°C
Taux d'hydrogène	13%	12%	22%
Taux d'oxygène	1,8%	0,7%	1,7%

Tableau 8 : Taux d'hydrogène et d'oxygène dans les échantillons

Le taux d'oxygène contenu dans la couche déposée par PECVD à 250°C est plus élevé que pour les deux autres dépôts. Les deux dépôts par PECVD ont été réalisés dans le même bâti, une température de dépôts plus basse est probablement plus favorable à l'incorporation d'oxygène dans la couche de nitrure de silicium.

Ces trois modes de dépôts pour le nitrure de silicium conduisent donc à trois matériaux non-stœchiométriques, de compositions différentes et contenant de l'hydrogène et de l'oxygène. Ils sont sur-stœchiométriques en azote. Selon l'étude des défauts du nitrure de silicium exposée dans la première partie de ce chapitre, ces différents dépôts contiennent donc des liaisons pendantes azote mais aussi des liaisons pendantes silicium. De plus, en supposant que toutes les liaisons silicium sont saturées par l'azote et que l'hydrogène présent vient se lier à l'azote restant, la quantité d'hydrogène contenue dans chacune des couches ne permettrait pas la passivation de l'ensemble des liaisons pendantes azote. Des centres N_4^+ ou des liaisons $\mathrm{N-N}$ peuvent aussi être présents dans le matériau. D'après Robertson, la stœchiométrie nous renseigne sur la dimension du gap pour ces trois dépôts [3]. Selon la Figure 24 extraite de ses publications, le gap des couches minces déposées par PECVD à 360°C et ICP-CVD à 250°C serait d'environ 5,5 eV. Celui de la couche mince déposée par PECVD à 250°C serait d'environ 6 eV.

3) Spectroscopie InfraRouge à Transformée de Fourier (FTIR)

Méthode de caractérisation

La Spectroscopie InfraRouge à Transformée de Fourier (FTIR) est une méthode de caractérisation non destructive basée sur l'étude des interactions entre un faisceau infrarouge et la matière. Elle permet d'identifier la nature des liaisons chimiques dans les échantillons étudiés.

Un faisceau infrarouge est envoyé sur l'échantillon analysé, une partie du signal peut être absorbée, une autre est réfléchie et la dernière partie est transmise. Le signal est absorbé lorsque la fréquence du champ électromagnétique incident correspond à la fréquence d'un mode de vibration d'une liaison. Cette fréquence de vibration dépend de la masse des atomes en jeu dans la liaison et de la nature de la vibration. En effet, il existe plusieurs modes de vibration des liaisons chimiques : l'élongation symétrique, l'élongation anti-symétrique, la déformation dans le plan (cisaillement ou rotation plane), la déformation hors du plan (balancement ou torsion). Seuls certains modes sont actifs en infrarouge du fait des règles de sélection ; l'absorption est possible uniquement si le moment dipolaire de la molécule varie lors de la vibration. Le spectre réfléchi (ou transmis) présente alors des pics d'absorption aux fréquences pour lesquelles l'onde électromagnétique a interagi avec la matière. L'analyse des fréquences d'apparition de ces pics dans le spectre renseigne ainsi sur le type de liaisons présentes dans l'échantillon.

Analyse du spectre IR

Les mesures par spectroscopie infrarouge ont été réalisées en réflexion sur une gamme spectrale allant de 675 cm^{-1} à 4000 cm^{-1}. Le spectre obtenu en fonction du nombre d'onde est présenté Figure 35 ; la contribution du substrat ainsi que celle de l'environnement ont été soustraites pour ne conserver que la contribution des films minces étudiés.

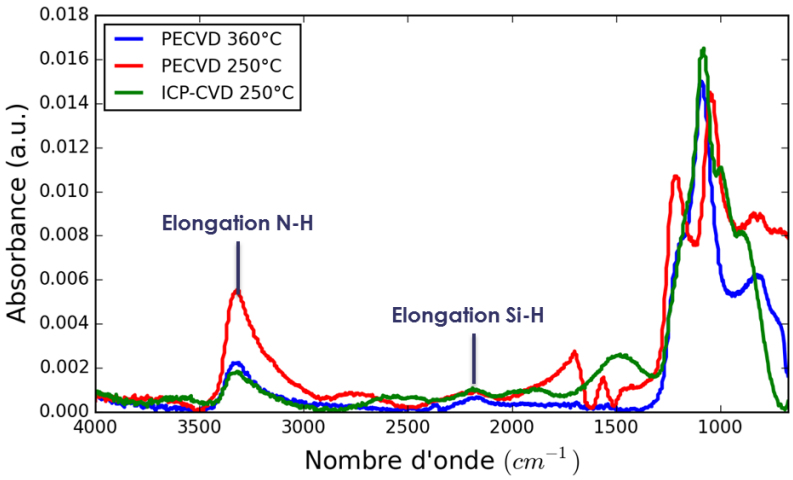


Figure 35 : Spectre InfraRouge (675 cm^{-1} à 4000 cm^{-1}) des échantillons de nitrure de silicium

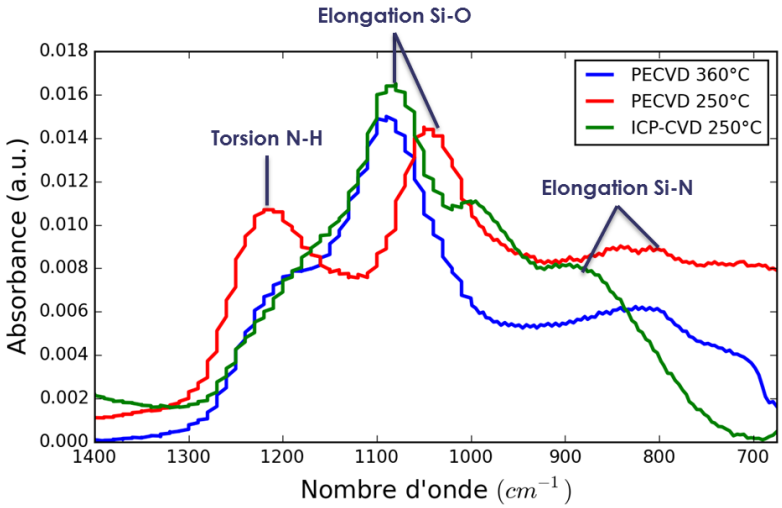


Figure 36 : Spectre InfraRouge (675 cm^{-1} à 1400 cm^{-1}) des échantillons de nitrure de silicium

Différents types de liaisons peuvent être identifiés grâce à la localisation des pics d'absorption dans le spectre (Tableau 9). Il faut noter que les fréquences de vibration caractéristiques de certains modes peuvent être légèrement décalées suivant l'environnement chimique des liaisons [116]. La bande d'absorption autour de 3300 cm^{-1} est attribuée au mode d'élongation de la liaison $N-H$. Le pic de faible amplitude à 2200 cm^{-1} correspond au mode d'élongation des liaisons $Si-H$. Le spectre entre 675 cm^{-1} et 1700 cm^{-1} est représenté Figure 36. Dans cette bande, le pic d'absorption à 1200 cm^{-1} correspond au mode de torsion des liaisons $N-H$, les pics de 1000 cm^{-1} à 1100 cm^{-1} sont attribués au mode d'élongation des liaisons $Si-O$ et les pics de 830 cm^{-1} à 890 cm^{-1} correspondent au mode d'élongation asymétrique des liaisons $Si-N$.

Les spectres obtenus par infrarouge peuvent permettre de déterminer les densités relatives de certaines liaisons chimiques par comparaison des aires sous les pics ; l'aire sous les pics est proportionnelle à la densité de chaque liaison. L'absorption étant dépendante du type de liaison, il n'est pas possible de comparer les pics des différentes vibrations entre eux pour obtenir des informations sur les échantillons. On observe une plus grande quantité de liaisons $\mathrm{N-H}$ dans la couche mince déposée par PECVD à 250°C. En effet, la surface du pic représentatif du mode d'élongation de ces liaisons est 2,6 à 2,9 fois plus élevée que pour les autres dépôts. De même, l'intensité du pic correspondant au mode de torsion des liaisons $\mathrm{N-H}$ à 1200 $\mathrm{cm^{-1}}$ est plus élevée pour cet échantillon. Ces résultats sont en accord avec les dosages présentés dans la section précédente, le dépôt par PECVD à 250°C étant celui contenant la plus grande quantité d'hydrogène et d'azote. En comparant les surfaces des pics représentatifs des modes d'élongation des liaisons $\mathrm{N-H}$ et $\mathrm{Si-H}$, on remarque que les densités de liaisons $\mathrm{Si-H}$ dans les matériaux déposés par PECVD à 250°C et par ICP-CVD à 250°C sont proches ; la densité de liaisons $\mathrm{Si-H}$ pour le dépôt par PECVD à 360°C est environ deux fois plus petite. Selon l'analyse des dosages réalisés par faisceaux d'ions rapides, les trois dépôts sont sur-stœchiométriques en azote. Ces résultats indiquent que l'hydrogène présent dans ces échantillons semble se lier de manière préférentielle avec le silicium plutôt qu'avec l'azote notamment dans le cas du dépôt par ICP-CVD.

Fréquence	**Mode de vibration associé**
3300-3335 $\mathrm{cm^{-1}}$	Mode d'élongation $\mathrm{N-H}$
2100-2200 $\mathrm{cm^{-1}}$	Mode d'élongation $\mathrm{Si-H}$
1175-1200 $\mathrm{cm^{-1}}$	Mode de torsion $\mathrm{N-H}$
1050 -1080 $\mathrm{cm^{-1}}$	Mode d'élongation $\mathrm{Si-O}$
830-890 $\mathrm{cm^{-1}}$	Mode d'élongation asymétrique $\mathrm{Si-N}$

Tableau 9 : Mode de vibration suivant la fréquence de l'onde électromagnétique [116] [117]

Les mesures par spectroscopie infrarouge permettent de compléter l'étude de la composition des échantillons de nitrure de silicium réalisée grâce aux analyses par faisceaux d'ions. Elles donnent accès à la nature des liaisons entre les espèces en présence ce qui impacte la structure et la nature des défauts dans les matériaux.

4) Caractérisation en fréquence

Méthode de caractérisation

Les diélectriques ont tout d'abord été caractérisés à basse fréquence. Des mesures réalisées sur des capacités MIM ont permis de déterminer l'évolution de la permittivité et des pertes diélectriques en fonction de la fréquence du champ électrique appliqué dans la bande $1\ \mathrm{Hz} - 1\ \mathrm{MHz}$.

Pour cette bande de fréquences, la spectroscopie diélectrique a été utilisée pour caractériser le matériau. Un signal AC de fréquence déterminée par l'utilisateur et un signal DC (de très faible amplitude) sont envoyés sur l'échantillon afin d'exciter les espèces polarisables. Le déphasage mesuré entre le courant et la tension et leur amplitude respective permettent de déterminer la partie réelle et la partie imaginaire de l'impédance de la couche de matériau étudié. Dans notre cas, l'impédance mesurée est la capacité d'une structure MIM. A partir des valeurs de capacités C mesurées à l'aide du spectroscope diélectrique (Solartron 1260 Gain/Phase Analyzer et module Solartron Dielectric Interface 1296), la valeur de la permittivité du matériau peut être extraite simplement grâce à la relation suivante :

$$C = C' - jC'' = \varepsilon_0(\varepsilon'_r - j\varepsilon''_r)\frac{S}{d} \qquad (25)$$

avec ε_0 la permittivité du vide, ε'_r la partie réelle de la permittivité relative du matériau, ε''_r la partie imaginaire de la permittivité relative du matériau, S la surface des électrodes de la capacité et d l'épaisseur de diélectrique.

La partie réelle de la permittivité relative ainsi que la tangente de pertes ont ensuite été déterminées dans le domaine radiofréquence. Les dispositifs sont adaptés pour les mesures à ces fréquences ; ils sont réalisés sur un guide d'onde coplanaire où le diélectrique est déposé sur la ligne centrale du guide et l'électrode haute reliée aux lignes de masse (Figure 20).

La permittivité du matériau a alors été déterminée dans la bande de fréquences $100\ \mathrm{MHz} - 10\ \mathrm{GHz}$. Le protocole de mesure et l'analyse des résultats sont différents et plus complexes pour les fréquences élevées que pour les fréquences présentées au paragraphe précédent. On utilise un analyseur de réseau vectoriel (Analyseur Agilent), appareil de mesure adapté aux hyperfréquences, équipé de pointes RF afin de mesurer les paramètres S sur les dispositifs MIM adaptés. L'analyseur de réseau vectoriel permet de mesurer la partie réelle et la partie imaginaire (ou le module et la phase) des paramètres S.

Les paramètres S permettent d'étudier les quadripôles en hyperfréquence en termes d'ondes incidentes et réfléchies (Figure 37). Les coefficients S_{11} et S_{22} sont les coefficients de réflexion de l'onde vue à l'entrée et à la sortie, et sont définis selon :

$$S_{11} = \frac{b_1}{a_1}\bigg|_{a_2=0} \qquad S_{22} = \frac{b_2}{a_2}\bigg|_{a_1=0} \tag{26}$$

Les coefficients S_{12} et S_{21} sont les coefficients de transmission de l'onde de la sortie vers l'entrée et de l'entrée vers la sortie, et sont définis selon :

$$S_{12} = \frac{b_1}{a_2}\bigg|_{a_1=0} \qquad S_{21} = \frac{b_2}{a_1}\bigg|_{a_2=0} \tag{27}$$

Figure 37 : Schématisation d'un quadripôle [118]

La configuration du dispositif de test correspond au cas d'une admittance parallèle, la matrice des paramètres S associée est alors la suivante [118] :

$$\begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{-Y}{Y+2} & \frac{2}{Y+2} \\ \frac{2}{Y+2} & \frac{-Y}{Y+2} \end{pmatrix} \tag{28}$$

avec Y$= Z_0/Z$, $Z_0 = 50\ \Omega$ l'impédance de la ligne de transmission et Z l'impédance de la structure MIM adaptée pour les mesures en hyperfréquence.

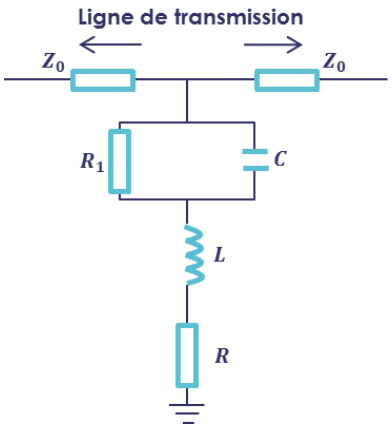


Figure 38 : Schéma équivalent d'une structure MIM adaptée pour les mesures en hyperfréquence

Les coefficients de transmission et réflexion S_{21} et S_{11} sont mesurés à l'aide de l'analyseur de réseau puis la permittivité du matériau diélectrique peut être extraite de ces mesures. En effet, ces coefficients dépendent de la permittivité réelle et des pertes du diélectrique. Il faut noter que l'influence de l'inductance de l'électrode haute est négligeable jusqu'à environ 10 GHz dans le cas particulier des dispositifs étudiés. Cette électrode est modélisée uniquement par sa résistance R. En effet, pour des fréquences supérieures s'approchant de la fréquence de résonance $f_r = 1/2\pi\sqrt{LC}$ du dispositif, il est nécessaire de prendre en compte l'inductance L de l'électrode supérieure. Comme pour les mesures à basse fréquence, le diélectrique peut être modélisé par une capacité C en parallèle avec une résistance R_1 représentant respectivement la partie réelle et imaginaire de la permittivité. Finalement on peut écrire pour l'impédance Z du dispositif :

$$Z = R + \frac{\frac{1}{R_1} - jC\omega}{\frac{1}{R_1^2} + C^2\omega^2} \qquad (29)$$

où ω est la pulsation du signal avec $\omega = 2\pi f$ et f la fréquence de ce signal. Les modules au carré des paramètres S_{11} et S_{21} mesurés à l'analyseur s'écrivent en fonction de l'impédance Z :

$$|S_{11}|^2 = \frac{Z_0^2}{[Z_0 + 2Re(Z)]^2 + 4Im^2(Z)} \qquad (30)$$

$$|S_{21}|^2 = \frac{4}{4 + \frac{Z_0(Z_0 + 2Re(Z))}{Re^2(Z) + Im^2(Z)}} \qquad (31)$$

où $Re(Z)$ et $Im(Z)$ sont les parties réelle et imaginaire de l'impédance. Afin de déterminer les parties réelle et imaginaire de la permittivité, on cherche C et R_1 à l'aide des deux équations ci-dessus et de l'impédance Z donnée précédemment. La résistance R de l'électrode est mesurée indépendamment à l'aide d'un ohmmètre. Une fois déterminées R_1 et C, on obtient la permittivité réelle du matériau ε'_r ainsi que sa tangente de pertes $tg\ \delta$:

$$\varepsilon'_r = \frac{Cd}{S\varepsilon_0} \qquad tg\delta = \frac{1}{R_1 C\omega} \qquad (32)$$

Ces mesures de permittivité en fréquence renseignent sur la présence ou non de centres contribuant à la polarisation du matériau, présentée en I.3.

Permittivité et pertes en fréquence

Les mesures des parties réelle et imaginaire de permittivité dans la bande 1 Hz - 1 MHz ont été réalisées pour les différents dépôts de nitrure de silicium.

Les résultats montrent que la permittivité du nitrure de silicium varie peu dans cette bande de fréquences (1 Hz à 1 MHz), la partie réelle de la permittivité vaut environ 6,7 pour le dépôt par PECVD à 340°C (Figure 39 à gauche). La partie imaginaire est peu élevée ($< 5.10^{-2}$) et reste stable pour les fréquences inférieures à 100 kHz (Figure 39 à droite). Les pertes ($tg\delta$) sont alors inférieures à 0,007 pour ces fréquences (Figure 40). La permittivité des différents dépôts en fonction de la fréquence présente le même comportement dans la bande 1 Hz - 1 MHz (Tableau 8). La partie réelle de la permittivité est légèrement plus élevée pour le dépôt par ICP-CVD à 250°C.

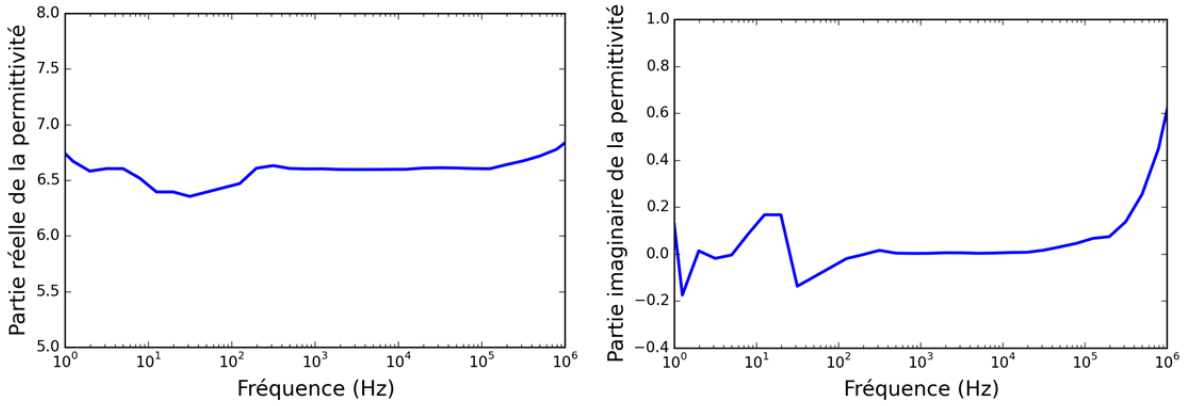


Figure 39 : Partie réelle et partie imaginaire de la permittivité du nitrure de silicium en fonction de la fréquence entre 1 Hz et 1 MHz - Echantillon : Si_3N_4 déposé par PECVD à 340°C

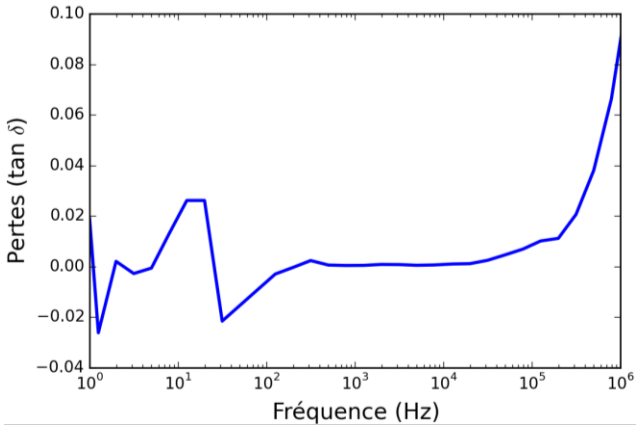


Figure 40 : Pertes diélectriques du nitrure de silicium en fonction de la fréquence entre 1 Hz et 1 MHz - Echantillon : Si_3N_4 déposé par PECVD à 340°C

Echantillon	ICP-CVD 250°C	PECVD 360°C	PECVD 250°C	PECVD 340°C
ε'_r @ 1 kHz	7,9	7,6	7,3	6,7
ε'_r @ 1 MHz	7,8	7,5	7	6,9

Tableau 10 : Partie réelle de la permittivité à 1 kHz et 1 MHz pour les 4 dépôts

Afin de déterminer l'évolution de la permittivité du matériau entre 100 MHz et 10 GHz, des dispositifs adaptés aux mesures hyperfréquences ont été utilisés. Ceux-ci sont présents sur la

plaque pour laquelle l'isolant a été déposé par PECVD à 340°C. Ces dispositifs coplanaires ont une surface de contact électrode-diélectrique de 100 µm x 100 µm et la valeur de résistance mesurée pour l'électrode supérieure est : $R = 0{,}1\ \Omega$. Les paramètres S obtenus grâce à ces mesures sont présentés Figure 41.

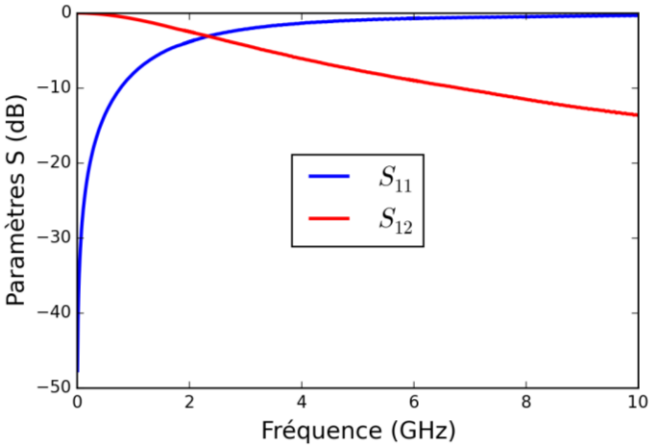


Figure 41 : Paramètres S mesurés sur des capacités MIM au nitrure de silicium adaptés aux mesures hyperfréquences – Echantillon : Si_3N_4 déposé par PECVD à 340°C

On observe dans cette gamme de fréquences (100 MHz à 10 GHz), que la partie réelle de la permittivité du diélectrique reste presque constante et proche de 6,5 (Figure 42 à gauche). La partie imaginaire de la permittivité reste inférieure à 0,1 sur presque toute la bande de fréquences (Figure 42 à droite). Les pertes ($tg\delta$) sont alors de l'ordre de 0,01 ce qui est assez élevé (Figure 43). La partie réelle et la partie imaginaire de la permittivité semblent augmenter lorsque la fréquence se rapproche de 10 GHz : ceci n'est peut-être pas dû au diélectrique mais à la précision de mesure et au modèle utilisé pour représenter la structure MIM adaptée. Le paramètre S_{11} devient très petit lorsque la fréquence augmente ($\ll$ 1 dB, Figure 41) ce qui le rend difficile à mesurer. De plus, l'inductance de l'électrode supérieure a été négligée dans le modèle.

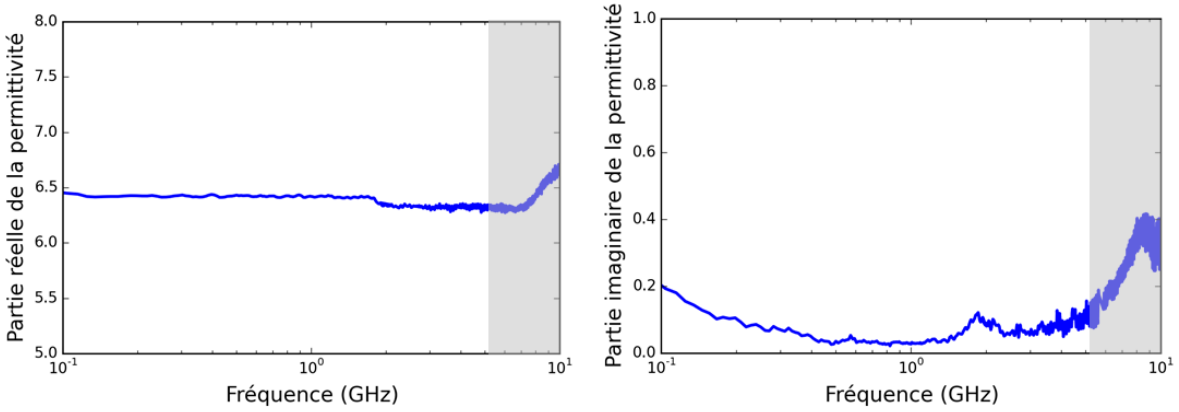


Figure 42 : Partie réelle et partie imaginaire de la permittivité du nitrure de silicium en fonction de la fréquence entre 100 MHz et 10 GHz – Echantillon : Si_3N_4 déposé par PECVD à 340°C

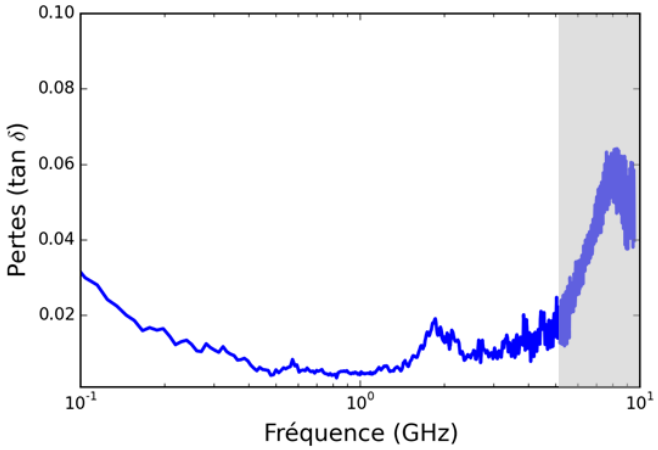


Figure 43 : Pertes diélectriques du nitrure de silicium en fonction de la fréquence entre 100 MHz et 10 GHz – Echantillon : Si_3N_4 déposé par PECVD à 340°C

En comparant ces résultats avec les courbes théoriques de permittivité en fonction de la fréquence (Figure 4), il est raisonnable de considérer que ces différentes couches minces de nitrure de silicium n'ont pas de transitions dipolaires. En effet, la partie réelle de la permittivité reste stable ($\varepsilon'_r \sim 7$) pour les échantillons testés sur une large bande de fréquences (1 Hz - 1 MHz et 100 MHz – 10 GHz). Le courant généré par les mouvements des charges intrinsèques peut alors être négligé dans le modèle de transport de charges pour le cas du nitrure de silicium.

5) Mesures de courant sous tension continue

Méthode de caractérisation

Les capacités MIM sont conçues pour que le courant soit limité au maximum (bon isolant et barrière électrode-diélectrique élevée) et les surfaces des électrodes en contact avec le diélectrique sont petites. Malgré les forts champs électriques appliqués, les courants circulant dans les capacités MIM sont très faibles ; ils peuvent être de l'ordre du femto ampère. Il est donc nécessaire de disposer d'un appareil performant présentant une résolution suffisante pour effectuer des mesures de courant sur ces dispositifs.

Un banc de mesure de courant composé d'un électromètre Keysight B2987A, de câbles triaxiaux reliés à des pointes DC et d'un microscope binoculaire a été mis en place (Figure 44). L'électromètre a une résolution de 0,01 fA et est utilisable sur batterie, ceci permet de limiter l'impact du secteur 50 Hz sur le bruit de mesure. Le port de mesure est équipé d'un câble triaxial raccourci au maximum, l'effet d'écran de son blindage permet d'éliminer une grande partie du bruit dans l'environnement de la mesure. L'appareil comprend une source de tension pouvant délivrer jusqu'à 1000 V. De plus, la température de l'échantillon peut être contrôlée et maintenue entre 270 K et 360 K grâce à un module Peltier et une sonde placés sous le wafer testé. Le banc n'étant pas sous atmosphère contrôlée, il n'est pas possible de descendre très bas en température pour effectuer les mesures de courant car de la condensation se forme sur l'échantillon.

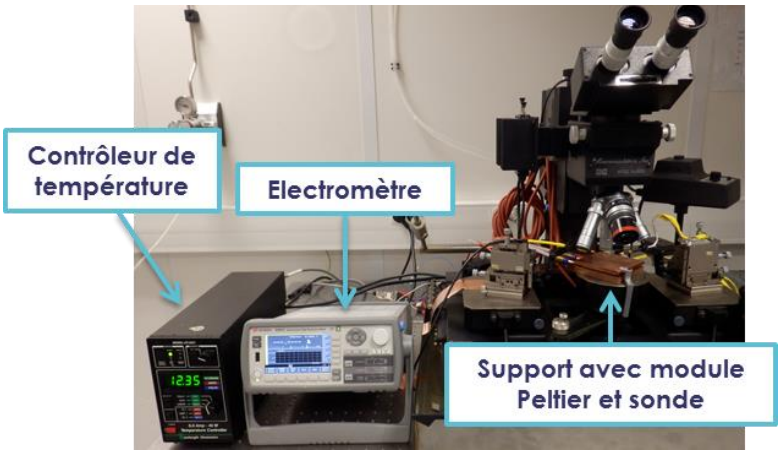


Figure 44 : Banc de mesure faible courant avec contrôle de la température de l'échantillon

Différents types de mesures de courant peuvent être réalisés pour caractériser le matériau et obtenir des informations pour la réalisation du modèle et les comparaisons mesure-simulation :

- Mesures I-V (réalisées à différentes températures) (Figure 45 à gauche) :
  - Protocole : application d'une série de pas de tension avec mesure du courant pour chaque valeur de tension
  - Objectifs de la mesure : déterminer la valeur du champ électrique de claquage ; identifier la présence de certains courants ; évaluer des paramètres physiques du diélectrique

- Mesures I(t) (Figure 45 à droite) :
  - Protocole : application d'une tension sur l'échantillon et mesure du courant en fonction du temps
  - Objectifs de la mesure : étudier les différentes étapes de l'établissement du régime permanent ainsi que l'état stationnaire du système ; comparer le courant mesuré au courant calculé par la simulation du transport de charges

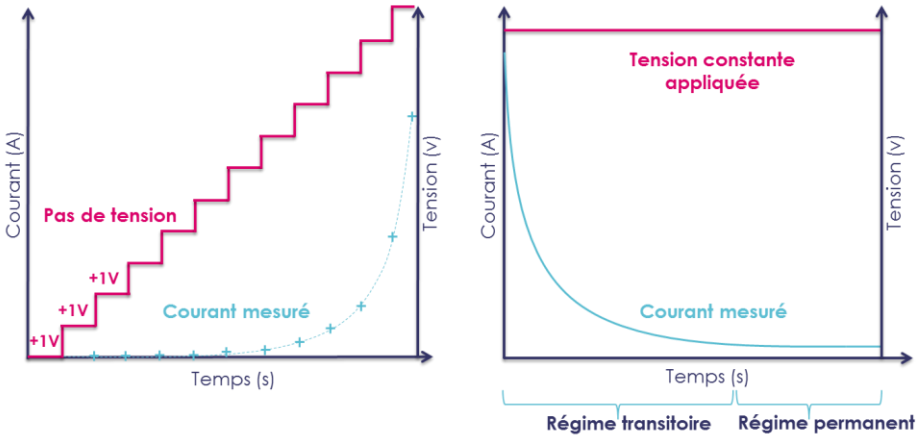


Figure 45 : Exemple de mesure I(t) et de mesure I-V

Identifications de courants dans les dispositifs capacitifs

Grâce aux mesures de courant en fonction de la tension appliquée, il est possible d'identifier certains mécanismes de transport de charges dans les dispositifs électroniques étudiés. Ces mesures permettent aussi de déterminer la valeur des paramètres physiques associés à ces courants, la profondeur moyenne des pièges dans le diélectrique par exemple. Elles ont été réalisées pour les quatre types de dépôt. Les courbes et l'exploitation des résultats de mesures sont présentées en détails pour le cas du nitrure de silicium déposé par ICP-CVD à 250°C.

Des mesures I-V en température ont été faites sur les structures MIM au nitrure de silicium présentées précédemment. Le but étant de mettre en évidence la présence de mécanismes de transports dans ces capacités. Les mesures ont été faites pour différentes valeurs de température (Figure 46).

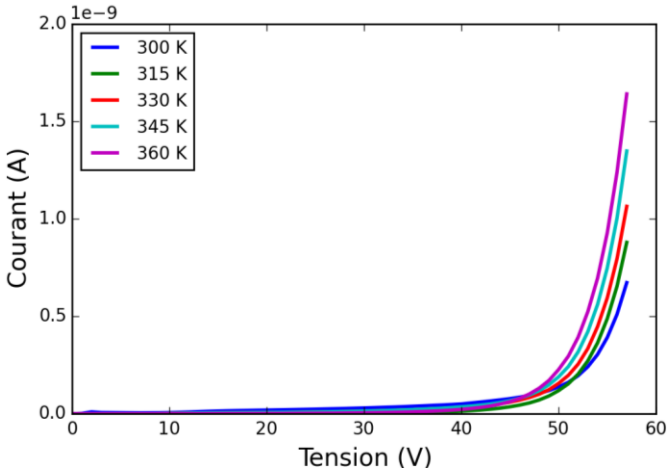


Figure 46 : Courant mesuré en fonction de la tension appliquée à différentes températures – Echantillon : Si_3N_4 déposé par ICP-CVD à 250°C

A bas champ électrique, le courant identifié est de type Schottky. Le tracé de ln(J) en fonction de $\sqrt{E}$ permet de déterminer la présence de ce courant. En effet, celui-ci doit être une droite, l'expression du mécanisme d'injection Schottky conduisant à :

$$\ln(J) = \ln\left(\frac{q_0 4\pi m^* {k_B}^2 T^2}{\mathrm{h}^3}\right) - \frac{\phi_0}{k_B T} + \frac{\beta_s\sqrt{E}}{k_B T} \qquad (33)$$

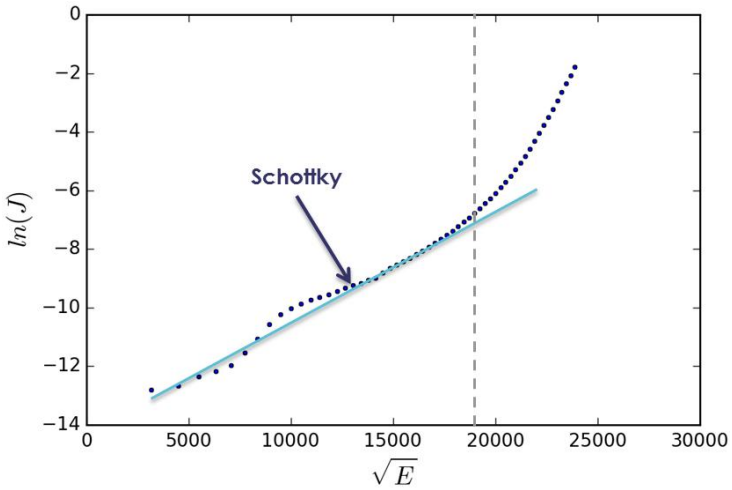


Figure 47 : Identification du courant Schottky pour une mesure à 360 K- Echantillon : Si_3N_4 déposé par ICP-CVD à 250°C

Ce tracé (Figure 47) est approximativement une droite pour les champs électriques inférieurs à 3 MV/cm. Une partie du transport de charges est donc assurée par un mécanisme de type Schottky à faible champ électrique ; les charges sont injectées dans l'isolant par effet thermique. Ce résultat est aussi obtenu pour les autres échantillons étudiés. Le courant Schottky a précédemment été identifié dans la littérature pour des capacités au nitrure de silicium [97].

La valeur de hauteur de la barrière à l'interface électrode-diélectrique peut être calculée à partir de l'ordonnée à l'origine de la droite. Cette valeur a été déterminée pour les différentes mesures I-V en température. La hauteur de la barrière à l'interface ϕ_0 ainsi calculée est comprise entre 1,18 eV et 1,39 eV. Les valeurs extraites varient, ceci est probablement dû au fait que les mesures sont assez bruitées à faible champ électrique. La hauteur de la barrière estimée pour le courant Schottky peut être différente de la hauteur de la barrière théorique. En effet, comme exposé dans le Chapitre I, les défauts et états d'interfaces peuvent faire varier cette valeur [119] [120].

Selon la littérature, le courant volumique dominant à fort champ électrique dans le Si_3N_4 est de type Frenkel-Poole [12] [78] [121] [122]. Le courant Frenkel-Poole peut être identifié de la façon suivante : le tracé de $\ln(J/E)$ en fonction de $\sqrt{E}$ doit être une droite car :

$$\ln\left(\frac{J}{E}\right) = \ln(\sigma_{FP}) - \frac{q_0\phi_\mathrm{p}}{Tk_B} + \frac{q_0}{k_BT}\sqrt{\frac{q_0E}{\pi\varepsilon_0\varepsilon_r}} \qquad (34)$$

La Figure 48 montre que pour un champ appliqué supérieur à environ 3 MV/cm, le courant mesuré est un courant de type Frenkel-Poole, ce qui n'est pas le cas pour des valeurs de champs inférieures. Les autres échantillons étudiés présentent la même caractéristique.

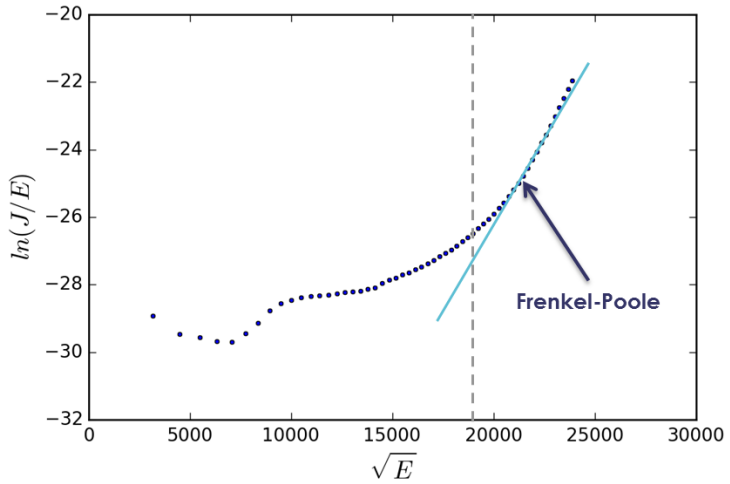


Figure 48 : Identification du courant Frenkel-Poole pour une mesure à 360 K- Echantillon : Si_3N_4 déposé par ICP-CVD à 250°C

Grâce à ces mesures, ln(J) a été tracé en fonction de $1/T$ (Figure 49). La valeur de la pente permet de déterminer ϕ_p, la profondeur des pièges, en considérant qu'il n'y a qu'un seul type de pièges dans le diélectrique.

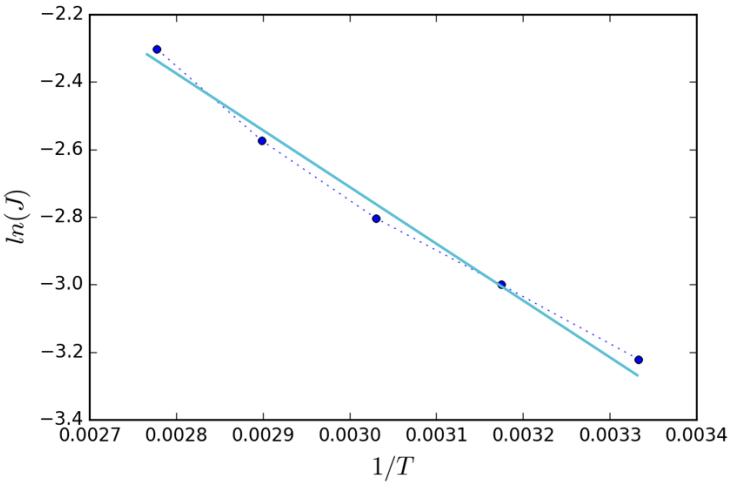


Figure 49 : ln(J) en fonction de 1/T à 55 V – Echantillon : Si_3N_4 déposé par ICP-CVD à 250°C

La valeur de la profondeur moyenne des pièges ainsi obtenue pour cet échantillon est :

$$\phi_{\mathrm{p}} = 0{,}77 \text{ eV} \tag{35}$$

Echantillon	ICP-CVD 250°C	PECVD 360°C	PECVD 250°C	PECVD 340°C
$\boldsymbol{\phi_{\mathrm{p}}}$	0,77 eV	0,68 eV	0,70 eV	0,70 eV

Tableau 11 : Energie moyenne des pièges pour les quatre dépôts de nitrure de silicium

Les énergies de pièges ainsi évaluées correspondent aux intervalles donnés dans la littérature pour le nitrure de silicium (Figure 23 et [121] [123] [124] [125]). Les valeurs de ce paramètre peuvent être affinées grâce aux ajustements des mesures de courant en fonction du temps dans la simulation du transport de charges (Chapitre IV). Cependant, ces premières évaluations fournissent un intervalle pour déterminer ces valeurs. Les énergies moyennes de pièges extraites pour les échantillons sont inférieures à $1\,\mathrm{eV}$. Les pièges présents dans le gap doivent donc correspondre majoritairement à des liaisons pendantes silicium, des liaisons $\mathrm{N-N}$, des défauts de type $\mathrm{N_4^+}$ et des liaisons $\mathrm{Si-H}$ (mises en évidence par la FTIR) ou des substitutions d'azote par l'oxygène.

Cette méthode d'identification des mécanismes de transport basée sur l'étude de mesures de courant en fonction de la tension est couramment utilisée dans la littérature [11] [78] [121] [122] [45] mais présente certaines limites. En effet, si des charges sont injectées dans l'isolant lorsque la tension est appliquée sur l'échantillon, le champ électrique dans l'isolant devient différent du champ électrique appliqué ; plus la tension appliquée est élevée, plus cet effet est important. L'écrantage du champ aux interfaces métal-isolant n'est pas pris en compte dans cette méthode d'analyse des résultats de mesures. Pour les mesures, le champ électrique considéré est le champ macroscopique, alors que dans les calculs et dans l'expression des courants, le champ électrique considéré est le champ électrique local. De plus, si plusieurs mécanismes contribuent au transport de charges, il peut être difficile de les discriminer.

L'identification des courants dans les échantillons est une étape importante dans l'élaboration du modèle de transport de charges. La présence des courants Frenkel-Poole et Schottky a été mise en évidence dans les structures de test et les valeurs des paramètres associés à ces mécanismes de transport ont été évaluées. Différents phénomènes peuvent participer au transport de charges suivant les structures MIM étudiées ; l'ensemble des mécanismes de transport de charges existants dans ces dispositifs a été présenté dans le premier chapitre de ce

mémoire. La présence de ces mécanismes de transport dépend de nombreux paramètres comme : la hauteur de la barrière électrode-diélectrique, la densité de pièges dans le diélectrique, la profondeur des pièges, le champ électrique appliqué sur le dispositif, … L'injection par effet tunnel vers les pièges (TAT) est un mécanisme complexe, il n'y a pas de méthode simple basée sur des mesures I-V permettant de mettre en évidence sa présence dans les structures MIM testées. De plus, ce mécanisme d'injection basé sur l'effet tunnel est aussi assisté thermiquement ; il faudrait donc une méthode permettant de l'isoler de l'injection par effet Schottky (effet thermique) pour pouvoir mettre en évidence sa présence. Le courant de type hopping est peu rapporté dans la littérature pour le transport de charges dans le cas du nitrure de silicium. A faible champ électrique, le courant mesuré ne dépend pas linéairement de la tension appliquée ; l'effet de hopping ne semble donc pas contribuer au processus de transport de charges dans les couches minces étudiées. La présence du courant limité par charge d'espace, identifiable par l'obtention de droites lors du tracé de $\ln(J)$ en fonction de $\ln(V)$, n'a pas pu être mise en évidence dans les échantillons. Ce mécanisme est cependant indiqué dans la littérature pour le transport de charges dans le nitrure de silicium [97] [113] ; les phénomènes de transport identifiés lors des mesures peuvent masquer sa présence. Le courant d'injection Fowler-Nordheim étant indépendant de la température, il ne semble pas intervenir dans le transport de porteurs pour ces échantillons. En effet, les mesures du courant en fonction de la tension réalisées sur les dispositifs capacitifs montrent que le courant dépend de la température de l'échantillon.

6) Synthèse

L'étude des matériaux diélectriques est une étape indispensable à la compréhension des phénomènes de transport de charges et à la réalisation du modèle. En effet, le comportement des dispositifs capacitifs sous fort champ électrique dépend des caractéristiques du diélectrique utilisé.

Les analyses par faisceaux d'ions rapides ont tout d'abord permis de déterminer la stœchiométrie des couches minces de nitrure de silicium et de mettre en évidence la présence d'oxygène et d'hydrogène dans les échantillons étudiés. Les couches minces caractérisées sont sur-stœchiométriques en azote et contiennent des liaisons pendantes azote et silicium. L'analyse de ces résultats ainsi qu'une étude bibliographique indiquent que le gap de ces échantillons vaut 5,5 eV à 6 eV suivant le mode de dépôt. Les analyses FTIR menées sur ces couches minces renseignent sur la nature des liaisons. L'hydrogène présent semble se lier de manière préférentielle avec le silicium, générant ainsi des défauts en limite de bandes selon la littérature.

Les caractérisations en fréquence montrent que les dépôts de nitrure de silicium ne contiennent pas ou peu de charges intrinsèques. En effet, la permittivité effective reste stable sur

une large plage de fréquences ($1\ \mathrm{Hz} - 1\ \mathrm{MHz}$ et $100\ \mathrm{MHz} - 10\ \mathrm{GHz}$). Ainsi, seules les charges extrinsèques seront prises en compte dans le modèle de transport.

Les mesures de courant en fonction de la tension appliquée sur l'échantillon ont ensuite permis d'identifier deux mécanismes de transports dans les capacités étudiées : l'injection de porteurs par effet Schottky pour des champs électriques inférieurs à $3\ \mathrm{MV/cm}$ et le transport de porteurs dans le volume par mécanisme Frenkel-Poole pour des champs électriques supérieurs à $3\ \mathrm{MV/cm}$. L'exploitation de ces mesures de courant en fonction de la température de l'échantillon donne une estimation de la valeur moyenne de l'énergie des pièges. Les valeurs obtenues sont comprises entre 0,68 eV et 0,77 eV suivant la méthode de dépôt. Ces énergies de pièges sont en accord avec l'étude des différents types de défauts existants dans le nitrure de silicium réalisée dans la première section de ce chapitre. Il n'est cependant pas possible de déterminer exactement les différents niveaux de pièges avec cette méthode de mesure. Le dépôt par PECVD à 360°C présente un défaut moyen moins profond. En effet, il contient deux fois moins de liaisons Si-H que les autres dépôts et peu d'oxygène, donc probablement moins de défauts dont l'énergie est supérieure à $1\ \mathrm{eV}$. Le dépôt par PECVD à 250°C contient le plus d'hydrogène et le plus d'azote ; les liaisons N-H identifiées par la FTIR sont alors plus nombreuses. Cependant, ces liaisons ne génèrent pas de défauts dans le gap du nitrure de silicium. L'énergie moyenne des pièges pour le dépôt par ICP-CVD est la plus élevée, elle est évaluée à 0,77 eV. Ceci peut être expliqué par la densité de silicium et la quantité d'oxygène plus importantes dans ce dépôt. En effet, les liaisons pendantes du silicium et de l'oxygène sont associées à des défauts plus profonds dans le gap du nitrure de silicium.

Chapitre III Modèle de transport de charges

L'objectif des travaux de modélisation est de mieux comprendre l'impact des différents mécanismes de transport de charges dans les isolants. Ceci apporte des éléments dans l'étude du vieillissement des isolants soumis à des champs électriques et permet de mieux appréhender certaines défaillances de composants électroniques. Le modèle développé permet de réaliser des simulations d'accumulation de charges dans des structures MIM suivant les propriétés du matériau et les conditions d'utilisation. La quantité de charges dans le diélectrique ainsi que les valeurs du champ électrique et du courant sont calculées en fonction de la distance aux électrodes. Tous les résultats aident à prévoir l'impact de l'accumulation de porteurs dans les isolants et à évaluer la durée d'utilisation optimale des dispositifs électroniques. La première partie de ce chapitre présente les différents courants pris en compte dans la simulation, puis le modèle est décrit. Des résultats de simulation mettant en évidence l'impact des propriétés du matériau sont ensuite présentés et le cas de la décharge est finalement exposé.

1) Modélisation des courants

Une étude bibliographique associée à l'exploitation des résultats de mesures de courant présentée dans le Chapitre II a permis de déterminer les mécanismes de transport de charges à prendre en compte pour le modèle développé. Le modèle comprend des mécanismes d'injection aux interfaces électrode-diélectrique et des mécanismes de transport dans le volume du diélectrique.

Trap Assisted Tunneling

Un des mécanismes d'injection du modèle est le Trap Assisted Tunneling (TAT) ; c'est-à-dire l'injection ou l'extraction par effet tunnel des électrons contenus dans les électrodes métalliques directement vers des pièges du diélectrique sans passer par sa bande de conduction. Ce mécanisme de transport est proposé dans la littérature comme courant d'interface dans les capacités MIM [15] [39] [61]. Les simulations du TAT avec différentes valeurs de température, profondeur de piège ou tension appliquée permettent de comprendre le fonctionnement de ce mécanisme de transport. Ces différents tests ont permis de valider le calcul de ces courants avant de les intégrer au code complet.

Calcul du Trap Assisted Tunneling

Le calcul du Trap Assisted Tunneling a été réalisé d'après [65] [66].

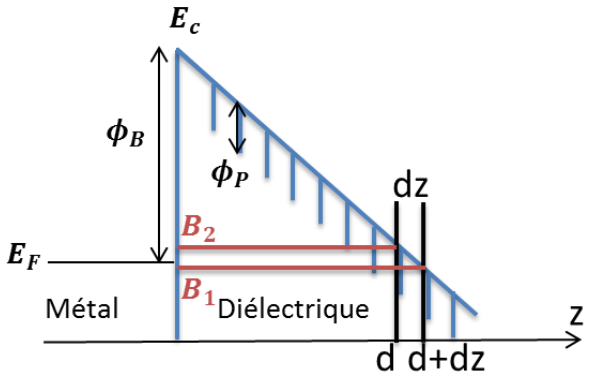


Figure 50 : Schéma du calcul du TAT

Un électron peut passer de l'électrode métallique au diélectrique par un effet quantique : l'effet tunnel. Cet électron de masse m^* et d'énergie $E = E_\perp + E_z$ se propage selon l'axe z et sa fonction d'onde électronique ψ est solution de l'équation de Schrödinger à une dimension :

$$\frac{\partial \psi^2(z)}{\partial z^2} = -k^2(z)\psi(z) \qquad (36)$$

avec $k^2(z) = 2m^*(E_z - U(z))/\hbar^2$, $U(z) = E_{Fermi} + \phi_B - \phi_P - q_0 \sum_i (E_{field\ i} dz)$ la barrière tunnel, m^* la masse effective de l'électron dans l'isolant, E_{Fermi} l'énergie de Fermi du métal de l'électrode, ϕ_B la hauteur de la barrière, ϕ_P la profondeur des pièges, $E_{field\ i}$ le champ électrique total à la distance d de l'électrode d'injection (champ appliqué et champ généré par les charges).

Dans l'approximation BKW[1], la probabilité de transmission d'un électron de l'électrode métallique dans le diélectrique s'écrit comme :

$$|\Gamma^2| = e^{[-2\int_0^d |k(z)| dz]} \qquad (37)$$

avec d la distance entre le métal et le piège.

[1] Approximation Brillouin-Kramers-Wentzel : approximation pouvant être utilisée pour résoudre l'équation de Schrödinger, valable si la variation du potentiel sur une longueur d'onde est petite par rapport à l'énergie cinétique de la particule [160].

On note $dn_1(v_z)$ le nombre d'électrons de vitesse v_z à une surface dS de l'électrode pendant un temps dt. $dn_1(v_z) = n(v_z)v_z dt dS$ avec $n(v_z)$ la densité volumique d'électrons de vitesse v_z (en $m^{-3}\frac{1}{m/s}$). Le nombre d'électrons passant de l'électrode vers le diélectrique par unité de temps et de surface s'écrit alors :

$$N_{M\to D} = \int_0^{v_{max}} n(v_z)v_z \Gamma dv_z \tag{38}$$

avec v_{max} la vitesse maximale des électrons suivant z.

On a $E_z = m^* {v^2}_z/2$ et $dE_z = m^* v_z dv_z$, donc :

$$N_{M\to D} = \frac{1}{m^*}\int_0^{E_{max}} n(v_z)\Gamma dE_z \tag{39}$$

avec E_{max} l'énergie maximale des électrons associée à la direction $\vec{z}$.

Considérons un petit volume $d\vec{k}^3$ autour du vecteur d'onde $\vec{k}$. Le nombre de niveaux à un électron dans ce volume est : $dN(\vec{k}) = \Omega/4\pi^3 d\vec{k}^3$ où Ω est le volume réel du système. La probabilité que chaque état soit occupé est $f(E_k)$ la distribution de Fermi-Dirac pour les électrons dans le métal. Le nombre d'électrons par unité de volume dans le volume $d\vec{v}$ autour de $\vec{v}$ est :

$$dn(\vec{v}) = \frac{2{m^*}^3}{h^3} f(E_k)\, dv_x dv_y dv_z \tag{40}$$

avec $E = m^* v^2/2$ et $(E_k) = 1/(1 + e^{E_k - E_{Fermi}/k_B T})$.

On détermine $n(v_z)$ en intégrant $dn(\vec{v})$ sur les composantes perpendiculaires à la direction de propagation des électrons.

$$n(v_z) = \frac{2{m^*}^3}{h^3}\iint_{-\infty}^{+\infty} dv_x dv_y f(E) \tag{41}$$

En utilisant les coordonnées polaires et $E = E_\perp + E_z$ on obtient :

$$n(v_z) = \frac{2{m^*}^3}{h^3}\int_0^{2\pi} d\theta \int_{B1}^{B2} v_\perp dv_\perp f(E) \tag{42}$$

$$n(v_z) = \frac{4\pi m^{*2}}{h^3} \int_{B1}^{B2} dE_\perp \, f(E_\perp + E_z) \tag{43}$$

$B1 = E_{Fermi} + \phi_B - \phi_P - q_0 \sum_{i=0}^{n+1} E_{field\ i} dz$ et $B2 = E_{Fermi} + \phi_B - \phi_P - q_0 \sum_{i=0}^{n} E_{field\ i} dz$, les bornes de la bande d'énergie possible pour l'électron pour tunneler dans une couche de diélectrique d'épaisseur dz à une distance d.

Le nombre d'électrons pouvant passer du métal à un piège du diélectrique, par unité de temps et de surface, est une somme sur le nombre d'électrons ayant l'énergie pour passer la barrière, pondérée par la probabilité de transmission Γ :

$$N_{M\to D} = \frac{4\pi m^*}{h^3} \int_0^{E_{max}} dE_z \; \Gamma \int_{B1}^{B2} dE_\perp \, f(E_\perp + E_z) \tag{44}$$

$$N_{M\to D} = \frac{4\pi m^*}{h^3} \int_0^{E_{max}} dE_z \, \Gamma \times k_B T \ln \left\{ \frac{1 + e^{(-\phi_B + \phi_P + q_0 \sum_{i=0}^{n+1} E_{field\ i} dz)/k_B T}}{1 + e^{(-\phi_B + \phi_P + q_0 \sum_{i=0}^{n} E_{field\ i} dz)/k_B T}} \right\} \tag{45}$$

On calcule finalement la densité surfacique de courant :

$$J_{TAT} = q_0 N_{M\to D} N_p S_p \text{ en } A.m^{-2} \tag{46}$$

avec N_p le nombre de pièges disponibles par unité de surface dans le diélectrique et S_p la section efficace d'interaction entre un électron et un piège.

Le TAT retour se calcule de façon similaire, on obtient :

$$N_{D\to M} = \frac{4\pi m^*}{h^3} \int_0^{E_{max}} dE_z \, \Gamma \int_{B1}^{B2} dE_\perp \, (1 - f(E_\perp + E_z)) \tag{47}$$

$$N_{D\to M} = \frac{4\pi m^*}{h^3}\int_0^{E_{max}} dE_z\,\Gamma \times \left(q_0 E_{field}(z).dz - k_B T\, ln\left\{ \frac{1+e^{(-\phi_B+\phi_P+q_0\sum_{i=0}^{n+1} E_{field\,i}dz)/k_B T}}{1+e^{(-\phi_B+\phi_P+q_0\sum_{i=0}^{n} E_{field\,i}dz)/k_B T}} \right\} \right) \quad (48)$$

$$J_{TATre} = q_0 N_{D\to M} N_O S_p \text{ en } A.m^{-2} \quad (49)$$

avec N_O le nombre de pièges occupés par unité de surface dans le diélectrique.

Résultats de simulation pour le Trap Assisted Tunneling

Pour réaliser les tests de validation du TAT direct, on considère que les pièges sont répartis de manière uniforme dans le diélectrique et qu'ils sont vides avant de commencer la simulation.

La forme globale du courant TAT direct est donnée Figure 51. L'injection est faible pour les plus petites distances puis augmente sur quelques nanomètres et chute ensuite rapidement. Ceci s'explique par l'action de deux effets : la probabilité pour un électron de passer du métal vers le diélectrique diminue avec la distance mais les pièges proches de l'électrode sont moins accessibles en terme d'énergie que les pièges les plus éloignés (Figure 15). Pour des courtes distances, la probabilité de tunneler est élevée mais l'énergie du piège peut être trop faible pour pouvoir injecter des électrons. Puis pour des distances plus importantes, la probabilité de tunneler est toujours élevée et les pièges deviennent accessibles. A plus grande distance la probabilité de tunneler est trop faible pour que les électrons puissent passer.

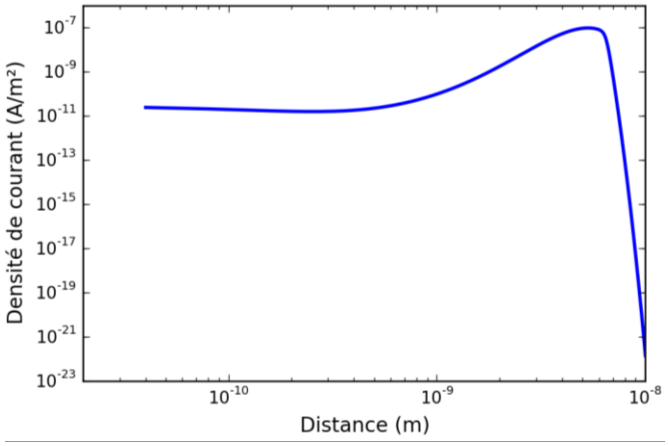


Figure 51 : Injection par Trap Assisted Tunneling

Impact de la profondeur des pièges

L'évolution de la densité de courant avec la distance à l'électrode pour différentes valeurs de profondeur de pièges est donnée Figure 52. On constate que la densité de courant augmente avec la profondeur des pièges. Les pièges proches de l'électrode deviennent plus accessibles pour les électrons. De plus, le maximum de la densité de courant se rapproche de l'électrode avec l'augmentation de la profondeur de piège. Les résultats sont bien en accord avec le modèle. En effet, plus les pièges sont profonds, plus la probabilité de tunneler vers un piège proche de l'électrode est grande et donc plus le maximum de densité de courant est proche de l'électrode (Figure 53).

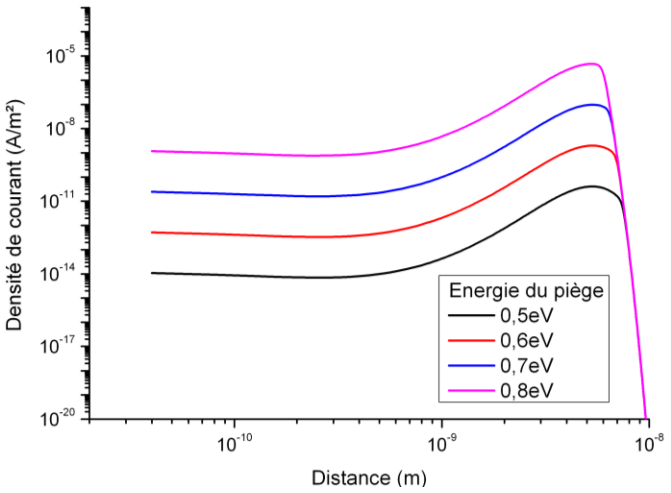


Figure 52 : Densité de courant TAT (en log) en fonction de la distance pour différentes profondeurs de pièges

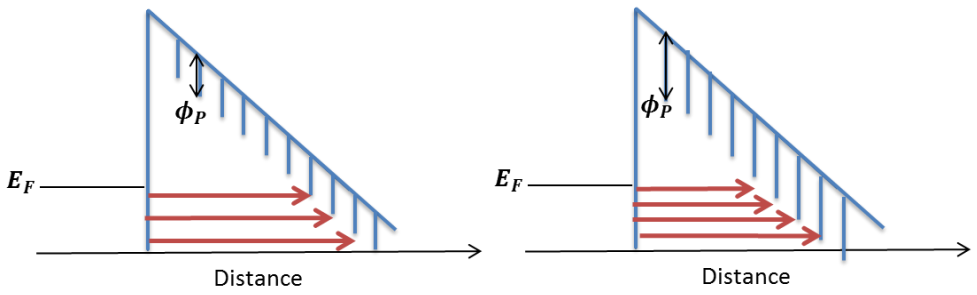


Figure 53 : Augmentation de la profondeur des pièges dans le diélectrique

Impact du champ électrique appliqué

De la même façon, on trouve que plus on augmente le champ électrique plus la probabilité de tunneler vers un piège proche du diélectrique est importante et plus la densité de courant augmente (Figure 54). Plus le champ électrique appliqué augmente et plus les pièges près de l'électrode deviennent accessibles aux électrons du métal (Figure 55).

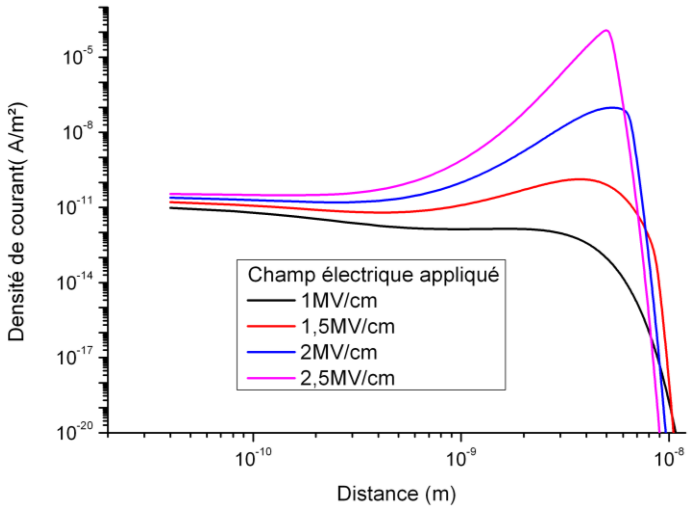


Figure 54 : Densité de courant TAT (en log) en fonction de la distance pour différents champs électriques

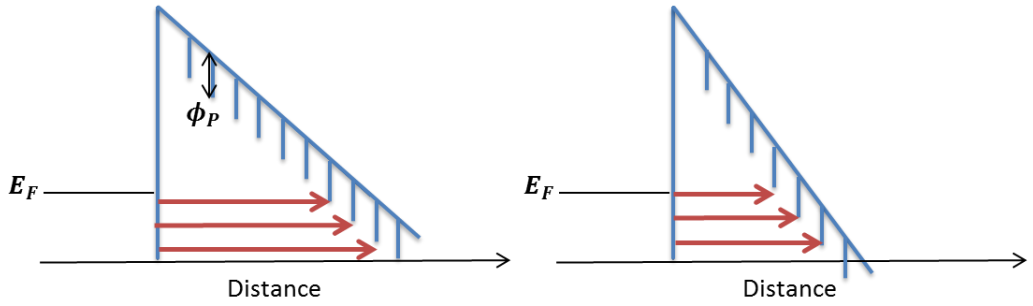


Figure 55 : Augmentation du champ électrique appliqué sur les électrodes

Impact de la température

L'effet de la température sur les résultats de simulation du TAT a aussi été étudié. On remarque que le courant augmente avec la température dans les couches de diélectrique les plus proches de l'électrode (Figure 56). L'augmentation du courant est due à la modification de la distribution de Fermi-Dirac pour les électrons dans le métal. En effet, des états d'énergie du métal de plus en plus élevée peuvent être peuplés en augmentant la température, des électrons ont alors l'énergie suffisante pour atteindre des pièges proches de l'électrode (Figure 57). A plus grande distance (environ 5 nm ici), la température impacte peu la valeur de densité de courant.

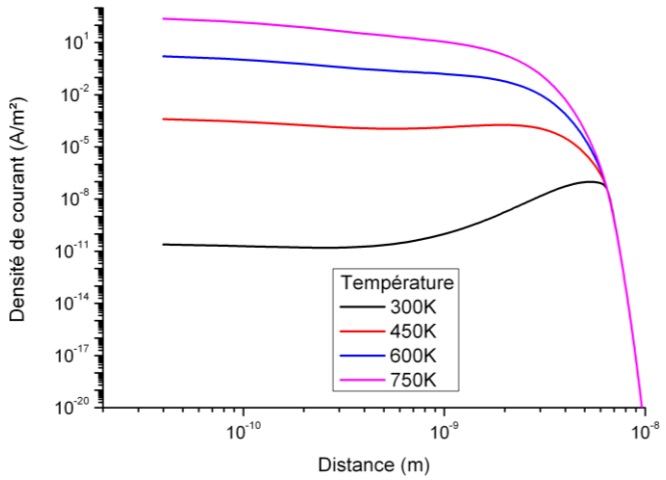


Figure 56 : Densité de courant TAT (en log) en fonction de la distance pour différentes températures

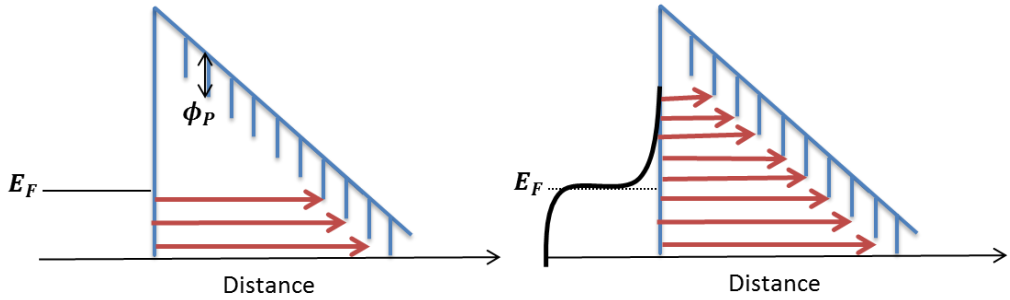


Figure 57 : Augmentation de la température

Résultats de simulation pour le Trap Assisted Tunneling retour

Pour valider le code du TAT retour, des simulations ont été réalisées en supposant que les pièges du diélectrique étaient uniformément remplis. Cependant, il faut noter que lors de la simulation du transport électronique dans le modèle complet de charge, la répartition des porteurs piégés n'est pas uniforme. Elle est donnée par le calcul et dépend du temps et de l'ensemble des mécanismes de transport.

La densité de courant générée par le TAT retour est présentée Figure 58. La densité de courant est grande à courte distance puis chute très rapidement. En effet, les électrons dans les pièges proches de l'électrode ont une énergie correspondant à des états peu occupés dans le métal ; d'après la distribution de Fermi-Dirac, ils peuvent donc passer de l'isolant au métal. Lorsque l'on s'éloigne de l'électrode, l'énergie des électrons diminue, ce qui correspond à des états plus peuplés dans le métal, et la probabilité de tunneler chute également ; les électrons restent dans le diélectrique et le courant diminue.

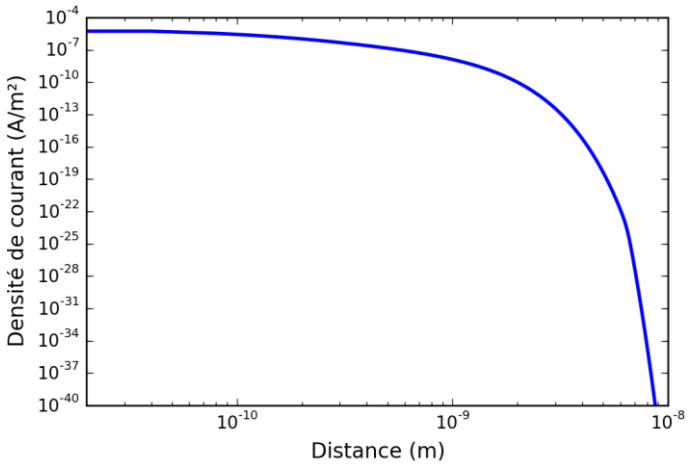


Figure 58 : Extraction par Trap Assisted Tunneling

Impact de la profondeur de pièges

L'augmentation de la profondeur des pièges entraîne une diminution plus rapide du courant avec la distance (Figure 59). Selon le modèle, plus les pièges sont profonds, plus l'énergie des électrons dans les pièges correspondent à des états occupés dans le métal, la probabilité de transition du diélectrique vers le métal diminue donc plus rapidement. La distance maximale d'extraction des électrons piégés dans le diélectrique diminue avec l'augmentation de la profondeur des pièges.

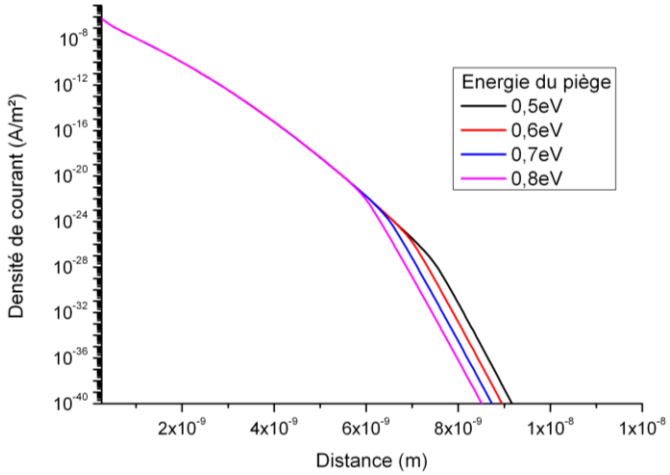


Figure 59 : Densité de courant TAT retour (en log) en fonction de la distance pour différentes profondeurs de pièges

Impact du champ électrique appliqué

L'impact de la valeur de tension appliquée aux électrodes a aussi été testé. Les valeurs de densité de courant varient peu suivant la valeur de tension pour les couches de diélectrique proches de l'électrode (Figure 60). La valeur de la tension a peu d'effet sur la probabilité de tunneler pour un électron piégé proche de l'électrode. Ensuite la valeur de densité de courant diminue avec l'augmentation de la tension ; pour une même distance à l'électrode, l'énergie d'un électron dans ce piège correspondra à des états d'énergie déjà occupés dans le métal.

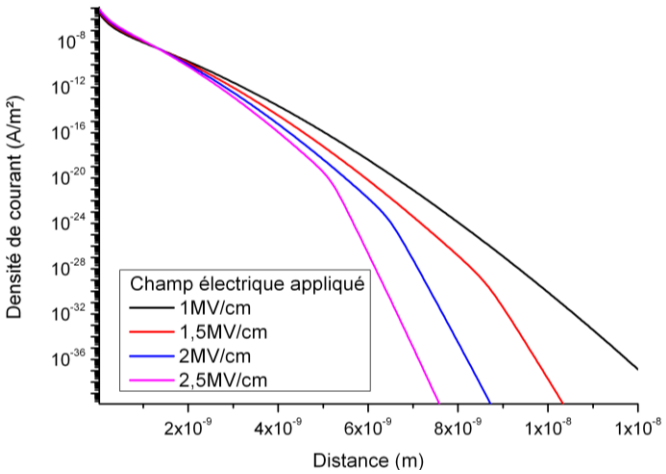


Figure 60 : Densité de courant TAT retour (en log) en fonction de la distance pour différents champs électriques

Impact de la température

Comme pour le TAT direct, la variation de température modifie la distribution de Fermi-Dirac et donc la valeur du courant. Les électrons dans le métal occupent des niveaux d'énergie plus élevés si on augmente la température et des états niveaux d'énergie plus faibles sont alors disponibles, les électrons piégés dans le diélectrique peuvent venir peupler ces états. On a donc une diminution plus lente de la densité de courant si la température augmente, on augmente la profondeur maximale d'extraction des électrons du diélectrique (Figure 61).

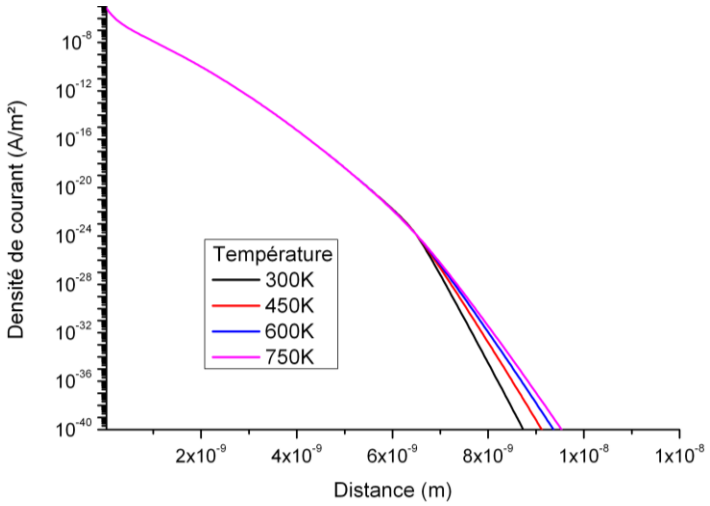


Figure 61 : Densité de courant TAT retour (en log) en fonction de la distance pour différentes températures

Discussion

Les résultats de simulation présentés montrent que peu de charges sont injectées par le TAT dans des pièges très proches de l'électrode (Figure 51), de plus le TAT inverse est plus efficace pour les charges piégées proches de l'électrode (Figure 58). La combinaison de ces deux mécanismes de transport empêche donc les porteurs de s'accumuler dans les pièges au niveau des interfaces électrode-diélectrique.

Grâce à ces simulations d'injection et d'extraction de charges par effet tunnel, l'impact de paramètres du matériau et des conditions d'utilisation sur la densité de courant TAT ont été mis en évidence. En effet, la modification de la profondeur des pièges ou de la valeur du champ électrique appliqué entraîne une variation de la barrière à franchir pour les porteurs. Ceci impacte la probabilité de tunneler et donc la densité de courant à l'interface ainsi que la distance d'injection ou d'extraction des porteurs. Quant à elle, la variation de température modifie la distribution en énergie des porteurs dans le métal. Cette distribution donne la quantité de porteurs disponibles pour l'injection dans les pièges du diélectrique et la quantité d'états non occupés disponibles pour l'extraction des porteurs piégés.

Piégeage et dépiégeage de charges

Les charges piégées dans le diélectrique peuvent être libérées dans la bande de conduction ou la bande de valence par le mécanisme Frenkel-Poole et les charges délocalisées

(dans la bande de conduction ou la bande de valence de l'isolant) peuvent être capturées dans des pièges.

L'expression du courant Frenkel-Poole est [67] [78] :

$$J_{FP} = \sigma_{FP} E e^{\frac{-q_0(\phi_\mathrm{p} - \sqrt{q_0 E / \pi \varepsilon_0 \varepsilon_r})}{k_B T}} \tag{50}$$

avec σ_{FP} la conductivité Frenkel-Poole (en $\mathrm{S.m^{-1}}$) et ϕ_p la profondeur des pièges.

Cette expression comprend un terme proportionnel au champ électrique : $\sigma_{FP} E$. Elle inclut donc la libération des porteurs puis leur transport. Cependant, il est nécessaire de séparer ces deux effets pour la cohérence globale du modèle.

La quantité de porteurs libérés dépend de la probabilité pour un porteur d'être extrait d'un piège :

$$e^{\frac{-q_0(\phi_\mathrm{p} - \sqrt{q_0 E / \pi \varepsilon_0 \varepsilon_r})}{k_B T}} \tag{51}$$

mais aussi de la quantité de porteurs piégés n_p, et de la densité d'états dans la bande de conduction N_c (ou dans la bande de valence N_v). Les porteurs présents dans la bande de conduction ou la bande de valence peuvent être à leur tour piégés. Le nombre de pièges disponibles est égal à $N_p - n_p$, c'est-à-dire le nombre de pièges N_p moins le nombres de pièges déjà occupés n_p. Le nombre de porteurs capturés par des pièges non occupés est alors proportionnel à : $(N_p - n_p) n_l$ avec n_l la densité de porteurs libres.

Le phénomène de capture d'un porteur dans la bande de valence ou la bande de conduction par un piège est l'effet inverse du mécanisme de libération Frenkel-Poole. Les expressions de ces deux phénomènes peuvent être liées grâce au principe du bilan détaillé ; un équilibre doit s'établir entre ces deux mécanismes. Les équations de bilan pour les électrons piégés $\mathrm{n_p}$ et les électrons libres $\mathrm{n_l}$ sont alors [126] :

$$\left(\frac{\partial n_p}{\partial t}\right)_{Capt} = \beta n_l N_p \left(1 - \frac{n_p}{N_p}\right) - \beta n_p \frac{N_c}{2} e^{\frac{-q_0(\phi_p - \sqrt{\frac{q_0 E}{\pi \varepsilon_0 \varepsilon_r}})}{k_B T}} \tag{52}$$

$$\left(\frac{\partial n_l}{\partial t}\right)_{Capt} = -\beta n_l N_p \left(1 - \frac{n_p}{N_p}\right) + \beta n_p \frac{N_c}{2} e^{\frac{-q_0(\phi_p - \sqrt{\frac{q_0 E}{\pi \varepsilon_0 \varepsilon_r}})}{k_B T}} \tag{53}$$

avec β le coefficient de capture électron-piège. Ce coefficient est de la forme $\beta = \sigma_{capt} v_{th}$ avec σ_{capt} la section efficace de capture du piège et v_{th} la vitesse thermique des porteurs. Le produit $\sigma_{capt} v_{th} n_l$ représentant le flux de porteurs libres.

Gestion de la charge délocalisée

Lorsque des porteurs provenant des électrodes (par injection Schottky) ou des pièges (par effet Frenkel-Poole) sont injectés dans la bande de conduction ou la bande de valence, ils ne sont pas précisément localisés contrairement aux porteurs présents dans les pièges. Pour pouvoir intégrer ces mécanismes de transport dans le modèle numérique, il est nécessaire de distribuer spatialement ces charges dans la bande de conduction ou la bande de valence. Il existe une incertitude sur leur position, ces charges sont injectées et diffusent sur une certaine longueur ; cette grandeur sera appelée longueur de cohérence dans la suite de ce document.

Il a donc été choisi de répartir les charges délocalisées injectées suivant une lorentzienne centrée sur le point d'injection z_0, avec une longueur de cohérence L_c (largeur à mi-hauteur de la lorentzienne) :

$$L(z) = \frac{L_c}{2\pi} \frac{1}{\left(\frac{L_c}{2}\right)^2 + (z - z_0)^2} \qquad (54)$$

Le déplacement des porteurs présents dans la bande de conduction et la bande de valence est ensuite assuré par le courant limité par charge d'espace [97] [113]. Les résultats de mesures de permittivité en fonction de la fréquence ont montré qu'il n'y avait pas ou peu de charges intrinsèques dans le nitrure de silicium, l'espèce dominante est donc constituée des porteurs injectés. L'expression de ce mécanisme de transport est alors la suivante :

$$J_{SCLC} = \frac{9}{8} \varepsilon_r \varepsilon_0 \theta \mu \frac{V^2}{d^3} \qquad (55)$$

2) Présentation du modèle

Le modèle d'accumulation de charges a été réalisé dans le cas d'une capacité MIM, structure simple à modéliser. C'est un modèle bipolaire unidimensionnel, les calculs de transport de charges sont réalisés uniquement dans l'épaisseur du diélectrique. La conduction par les électrons et par les trous est prise en compte de manière distincte. De plus, la charge totale présente dans le diélectrique est séparée en deux catégories suivant qu'elle soit piégée ou

délocalisée (dans la bande de conduction ou la bande de valence). Il y a donc 4 types de porteurs : les électrons piégés, les électrons libres, les trous piégés et les trous libres. Il peut être utilisé pour réaliser des simulations comprenant des phases de charge et de décharge.

Ce modèle général est ici réalisé pour une structure MIM au nitrure de silicium, les mécanismes de transport considérés sont donc adaptés à ce cas d'étude. Cependant, le modèle est adaptable et peut aisément être utilisé pour l'étude d'autres matériaux isolants.

Hypothèses

Le programme de simulation comprend les mécanismes de transport de charges suivants (Figure 62) :

- Transport à l'interface électrode-diélectrique
  - Courant Trap Assisted Tunneling
  - Courant Trap Assisted Tunneling inverse (à l'électrode d'injection et à l'électrode opposée à l'injection)
  - Courant Schottky
- Transport dans le volume du diélectrique :
  - Libération des porteurs piégés par effet Frenkel-Poole
  - Piégeage des porteurs libres
  - Courant limité par charge d'espace (SCLC)

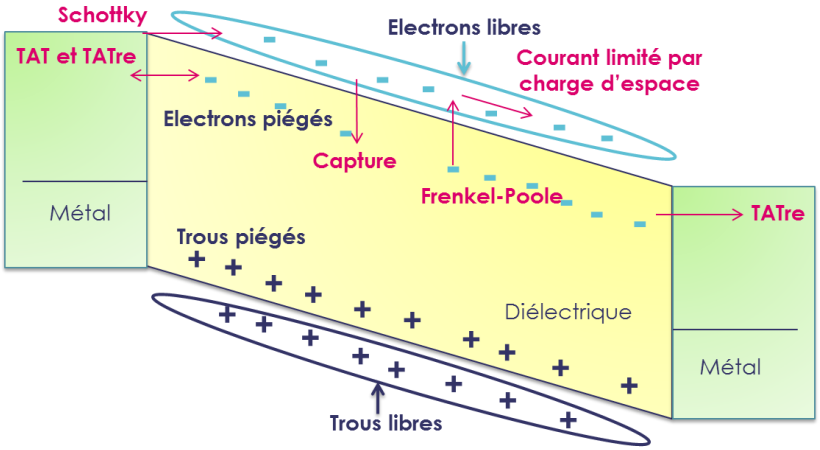


Figure 62 : Schéma récapitulatif des phénomènes de transport considérés dans le modèle

Le modèle est unidimensionnel, il représente donc une section moyenne du dispositif. Des images MEB de sections de capacités MIM étudiées montrent que l'épaisseur du film mince

diélectrique est uniforme malgré la présence de rugosité (Figure 63). On peut considérer que la distribution de champ électrique est identique dans toutes les sections de l'isolant et qu'il n y a pas d'effet de pointe.

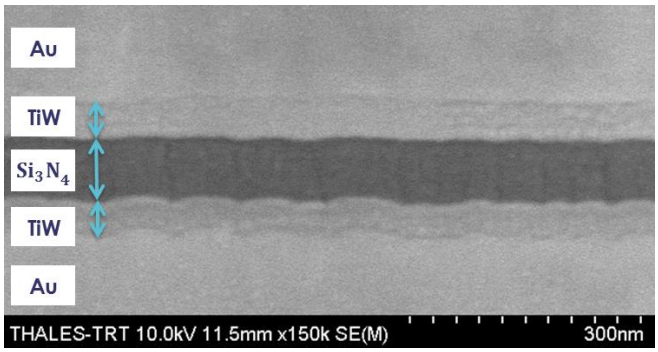


Figure 63 : Image MEB d'une coupe de capacité MIM

Les hypothèses suivantes ont été faites pour la réalisation du modèle :

- Contact électrode-diélectrique parfait : la rugosité n'est pas prise en compte. En effet, dans les capacités MIM l'électrode est en contact parfait avec le diélectrique ; il n y a pas d'air entre le métal et l'isolant. De plus, selon les travaux de Palit *et al.* [82] la rugosité peut être négligée en première approximation pour l'application au cas des MEMS RF capacitifs.
- Matériau homogène : les propriétés du matériau (énergie des pièges, distribution spatiale des pièges…) sont uniformes dans tout le diélectrique. En réalité, la zone d'interface électrode-diélectrique est différente du volume du diélectrique sur quelques nanomètres ; elle présente notamment plus de pièges selon la littérature [111] [112]. Cependant, le TAT retour présent dans le modèle est un mécanisme très efficace, peu de charges peuvent rester piégées dans cette zone.
- Diélectrique ne contenant aucune charge au début de la simulation.

Description de l'algorithme

L'algorithme est principalement basé sur la résolution des deux équations suivantes pour chaque pas de temps et dans toute l'épaisseur du diélectrique :

- $\frac{\partial E(z,t)}{\partial z} = \frac{\rho(z,t)}{\varepsilon_0 \varepsilon_r}$ équation de Poisson *(56)*
- $\frac{\partial \rho(z,t)}{\partial t} = -\frac{\partial j(E,z,t)}{\partial z}$ équation de conservation de la charge *(57)*

Le diélectrique est divisé en tranches d'épaisseur dz (Figure 64) et une tension V_{app} est appliquée entre la première et la dernière tranche. L'équation suivante doit être respectée comme condition aux limites : $\sum_i E_i dz_i = -V_{app}$ avec i l'indice des tranches de diélectrique.

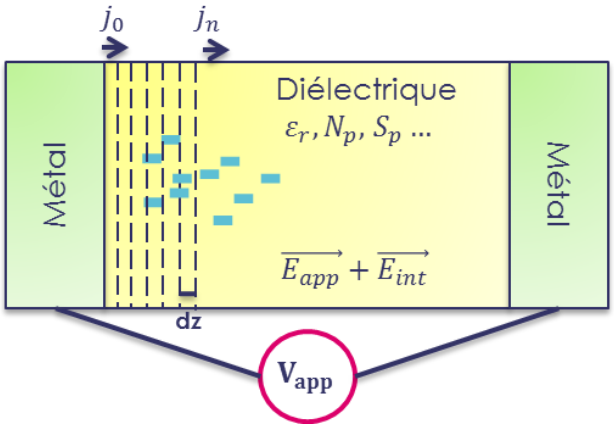


Figure 64 : Structure utilisée dans la simulation

Le calcul se déroule en différentes étapes (Figure 65) :

- Initialisation :
  - Définition des propriétés des électrodes et du diélectrique ainsi que des conditions de test
  - Champ électrique homogène dans tout le diélectrique : $E(z,0) = E_{app}$
  - Aucune charge dans le diélectrique : $\rho_{n_l}(z,0) = \rho_{n_p}(z,0) = \rho_{p_l}(z,0) = \rho_{p_p}(z,0) = 0$

- Boucle sur le temps :
  - Calcul des différents courants dans chaque tranche suivant la valeur du champ électrique local et de la quantité de charges présentes
  - Bilan des porteurs et résolution de l'équation de conservation de la charge $\partial\rho(z,t_j)/\partial t = -\partial j(E,z,t_j)/\partial z$ pour chaque tranche et chaque type de porteurs afin de déterminer la variation de quantité de charges $\Delta\rho(z)$ avec contrôle de la positivité de la densité de porteurs de chaque espèce
  - Calcul de la charge totale par tranche : $\rho_{tot}(z,t_j) = \rho_{tot}(z,t_{j-1}) + \Delta\rho_{tot}(z)$
  - Calcul du champ électrique dans chaque tranche grâce à l'équation de Poisson $\partial E(z,t_j)/\partial z = \rho_{tot}(z,t_j)/\varepsilon_0\varepsilon_r$ et à la condition aux limites imposée par $\sum_i E_i dz_i = -V_{app}$.

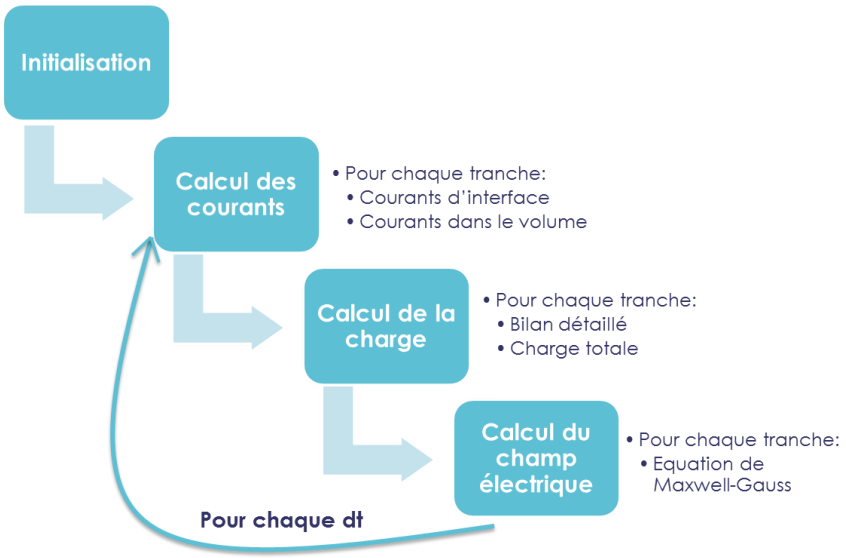


Figure 65 : Représentation schématique de l'algorithme

Equations de transport et bilan des porteurs

Les différents mécanismes de transport de charges ont été mis en équations afin d'être intégrés dans le modèle numérique. Le bilan des porteurs est ensuite effectué grâce aux expressions de ces mécanismes. Ces bilans permettent finalement de déterminer la quantité de charges présentes dans une tranche i du diélectrique à un instant t_j pour calculer le champ électrique en tous points du matériau isolant.

<u>Trap Assisted Tunneling</u>

Une partie de l'injection des porteurs dans le diélectrique est assurée par le TAT. Le courant d'injection par TAT pour les électrons dans une tranche i est donné par :

$$J_{TATi} = q_0 N_{iM\to D} N_{p_i} S_p \tag{58}$$

avec $N_{iM\to D}$ la densité d'électrons pouvant passer de l'électrode vers la tranche i du diélectrique par unité de temps et N_{p_i} la densité de pièges disponibles dans la tranche i du diélectrique. On note $\left(\partial n_{p_i}/\partial t\right)_{TAT}$ la densité d'électrons injectés associée.

Le TAT inverse permet de vider certains pièges du diélectrique, la quantité de charges extraites d'une tranche i par ce mécanisme est donnée par :

$$J_{TATre1i} = q_0 N_{iD\to M} N_{oi} S_p \text{ du côté de l'électrode d'injection} \tag{59}$$

$$J_{TATre2i} = q_0 N_{iD\to M} N_{oi} S_p \text{ du côté de l'électrode opposée à l'injection} \tag{60}$$

avec $N_{iD\to M}$ la densité d'électrons pouvant passer de la tranche i du diélectrique vers l'électrode par unité de temps et N_{oi} la densité de pièges occupés dans la tranche i du diélectrique. On note $\left(\partial n_{p_i}/\partial t\right)_{TATre1}$ et $\left(\partial n_{p_i}/\partial t\right)_{TATre2}$ les densités d'électrons associés.

Injection par effet Schottky

Le courant total généré par le mécanisme Schottky s'exprime de la façon suivante :

$$J_S = q_0 \frac{4\pi m^* k_B^2}{h^3} T^2 e^{-\frac{\phi_0 - \beta_S\sqrt{E_0}}{k_B T}} \tag{61}$$

avec E_0 le champ électrique à l'interface électrode-diélectrique.

Comme présenté précédemment, les électrons injectés sont répartis dans la bande conduction (et les trous dans la bande de valence) suivant une lorentzienne centrée sur la zone d'injection des porteurs. On note $\left(\partial n_{l_i}/\partial t\right)_S$ la densité d'électrons injectés par effet Schottky dans la tranche i du diélectrique.

Capture des porteurs libres et émission des porteurs piégés

Les porteurs libres dans la bande de conduction peuvent être piégés, le taux de capture des électrons dans la tranche i du diélectrique s'écrit :

$$C_{pi} = q_0 \beta n_{li} N_{pi} \left(1 - \frac{n_{pi}}{N_{pi}}\right) \text{ en A/m}^3 \tag{62}$$

avec n_{li} la densité de porteurs libres et $1 - n_{pi}/N_{pi}$ le taux de pièges disponibles dans la tranche i du diélectrique.

Les porteurs piégés peuvent être réémis dans la bande de valence ou la bande de conduction par le mécanisme Frenkel-Poole. Le taux d'émission des électrons piégés dans la tranche i du diélectrique s'écrit alors :

$$R_{pi} = q_0 \beta n_{pi} \frac{N_c}{2} e^{\frac{-q_0(\phi_p - \sqrt{\frac{q_0 E_i}{\pi \varepsilon_0 \varepsilon_r}})}{k_B T}} \text{ en A/m}^3 \qquad (63)$$

avec E_i la valeur du champ électrique dans la tranche i du diélectrique.

Ces porteurs sont ensuite répartis dans la bande de conduction ou la bande de valence suivant une lorentzienne centrée sur la zone d'injection. On notera $\left(\partial n_{l_i}/\partial t\right)_{L_{iFPk}}$ la densité d'électrons injectés dans la tranche i du diélectrique par Frenkel-Poole et provenant des pièges dans la tranche k.

Transport par courant limité par charge d'espace

Les charges peuvent se déplacer dans la bande conduction et la bande de valence grâce au courant limité par charge d'espace. L'expression du courant limité par charge d'espace pour les électrons dans la tranche i du diélectrique est la suivante :

$$J_{SCLCi} = \frac{9}{8} \varepsilon_r \varepsilon_0 \mu \frac{{E_i}^2}{d} \frac{n_{l_i}}{N_{p_i}} \qquad (64)$$

avec N_{p_i} la densité de piéges dans une tranche de diélectrique. On note $\left(\partial n_{l_i}/\partial t\right)_{SCLC}$ la densité d'électrons associée à ce mécanisme de transport dans la tranche i du diélectrique.

Bilan pour les électrons libres dans la bande de conduction

$$\frac{\partial n_{l_i}}{\partial t} = -\frac{C_{pi}}{q_0} + \frac{R_{pi}}{q_0} + \left(\frac{\partial n_{l_i}}{\partial t}\right)_S + \sum_{k=i-L_c}^{i} \left(\frac{\partial n_{l_i}}{\partial t}\right)_{L_{iFPk}} - \sum_{k=i+1}^{i+L_c} \left(\frac{\partial n_{l_i}}{\partial t}\right)_{L_{jFPi}} + \left(\frac{\partial n_{l_i}}{\partial t}\right)_{SCLC} \qquad (65)$$

Bilan pour les électrons piégés

$$\frac{\partial n_{p_i}}{\partial t} = \frac{\mathrm{C}_{pi}}{q_0} - \frac{\mathrm{R}_{pi}}{q_0} + \left(\frac{\partial n_{p_i}}{\partial t}\right)_{TAT} - \left(\frac{\partial n_{p_i}}{\partial t}\right)_{TATre1} - \left(\frac{\partial n_{p_i}}{\partial t}\right)_{TATre2} \qquad (66)$$

<u>Bilan de la charge électronique totale ρ_{n_i} présente dans la tranche i</u>

$$\frac{\partial \rho_{n_i}}{\partial t} = q_0 \left(\frac{\partial n_{p_i}}{\partial t} + \frac{\partial n_{l_i}}{\partial t} \right) \tag{67}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho_{n_i}}{\partial t} = q_0 \Bigg(& \left(\frac{\partial n_{p_i}}{\partial t} \right)_{TAT} - \left(\frac{\partial n_{p_i}}{\partial t} \right)_{TATre1} - \left(\frac{\partial n_{p_i}}{\partial t} \right)_{TATre2} + \left(\frac{\partial n_{l_i}}{\partial t} \right)_{S} \\ & + \sum_{k=i-L_c}^{i} \left(\frac{\partial n_{l_i}}{\partial t} \right)_{L_{iFPk}} - \sum_{k=i+1}^{i+L_c} \left(\frac{\partial n_{l_i}}{\partial t} \right)_{L_{kFPi}} + \left(\frac{\partial n_{l_i}}{\partial t} \right)_{SCLC} \Bigg) \end{aligned} \tag{68}$$

Ces bilans sont réalisés de la même façon pour les trous afin de déterminer la densité de trous piégés et libres dans le diélectrique, et la densité totale de porteurs par tranche de diélectrique.

Résultats de simulation

Le code de calcul simulant le transport de charges dans un diélectrique permet d'accéder aux valeurs de différentes grandeurs physiques en fonction du temps et de la distance aux électrodes :

- champ électrique
- localisation des charges
- charge totale
- courants en fonction du temps

Ces résultats sont ici présentés à travers un exemple de simulation pour un champ électrique appliqué de 2 MV/cm.

Lorsqu'un champ électrique est appliqué aux bornes d'une capacité, des charges sont injectées dans l'isolant. Ces charges modifient le champ interne au diélectrique et provoquent un écrantage du champ électrique suivant leur localisation dans l'isolant par rapport aux électrodes (Figure 66). Plus les charges s'accumulent, plus le champ électrique est écranté à l'interface isolant-métal ; la barrière se déforme (Figure 67). Cet écrantage progressif entraine une diminution du courant d'injection et donc de la vitesse d'accumulation de la charge dans le diélectrique (Figure 68).

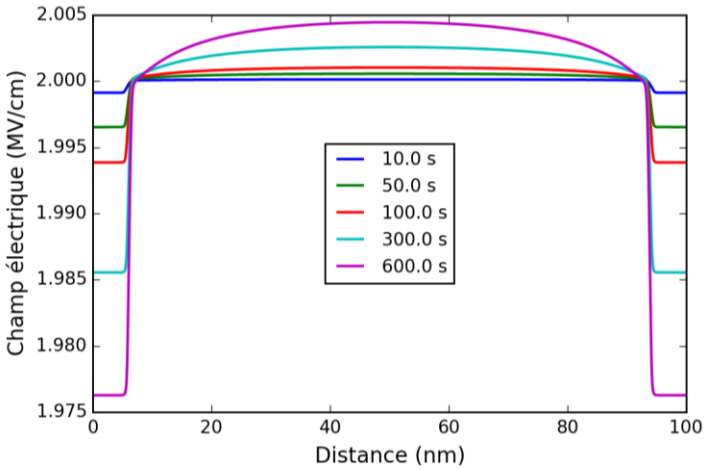


Figure 66 : Valeur absolue du champ électrique dans l'isolant pour différents temps de simulation

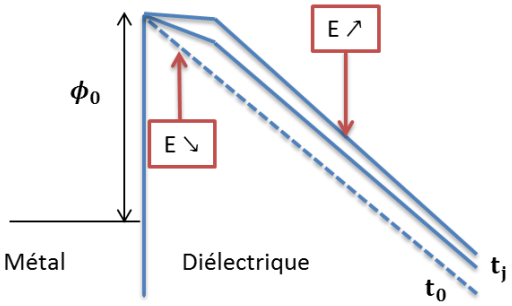


Figure 67 : Modification de la barrière par variation du champ électrique lors de la charge

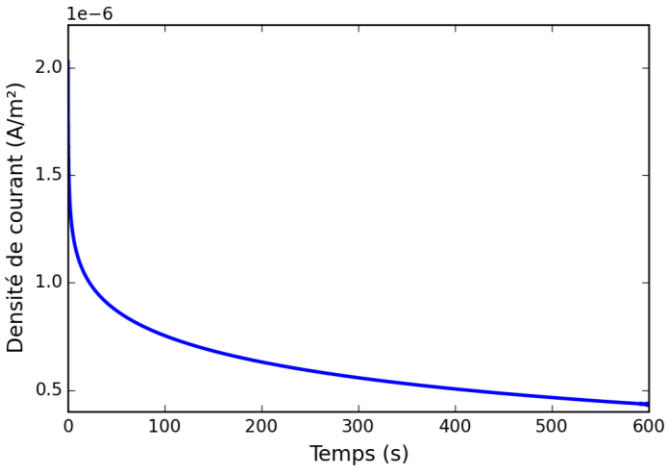


Figure 68 : Courant en fonction du temps

Dans cet exemple, la charge piégée s'accumule à une profondeur d'environ 5 à 7 nm dans l'isolant (Figure 69 et Figure 70). Peu de charges sont stockées dans des pièges proches des électrodes ; elles sont aisément réinjectées dans le métal par TAT inverse. On retrouve avec ce modèle une forme de distribution de charges dans le diélectrique déjà simulée par Papaioannou *et al.* [15] et Jain *et al.* [41].

De plus, on peut constater que la charge semble avancer vers l'intérieur de l'isolant (Figure 70), ceci est aussi visible dans les simulations de Papaioannou *et al.* [15] et Jain *et al.* [41]. Plusieurs phénomènes contribuent à cette accumulation de charges plus en profondeur dans le diélectrique. Le champ électrique étant écranté progressivement par remplissage des pièges pour les couches proches de l'électrode, la forme de la barrière est modifiée et l'injection de charges devient plus difficile dans les pièges proches de l'électrode. De plus, le courant volumique participe au transport des porteurs vers l'intérieur de l'isolant.

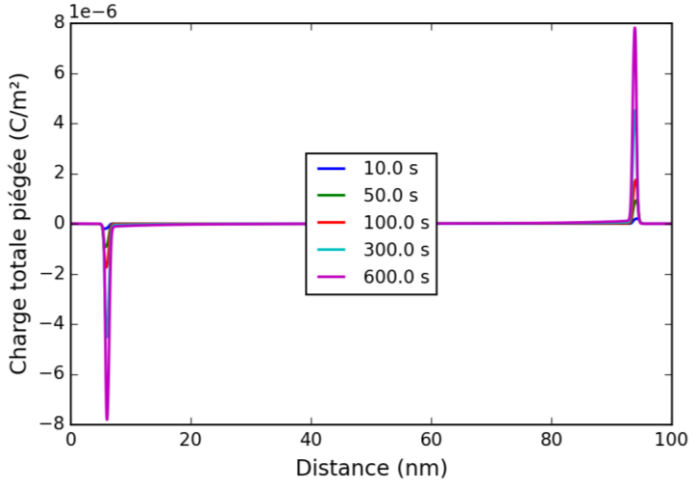


Figure 69 : Distribution de la charge piégée dans l'isolant pour différents temps

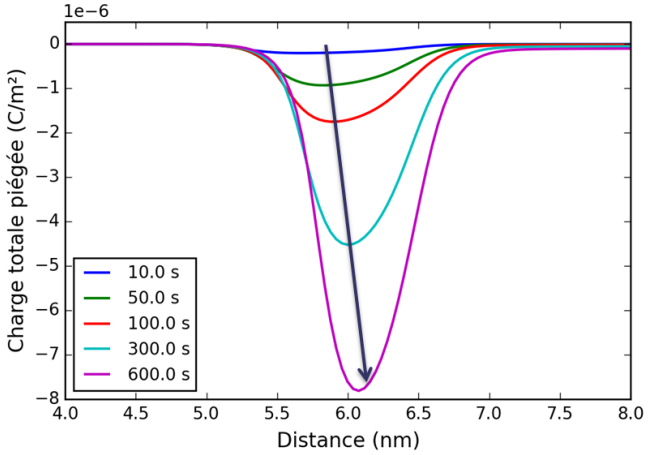


Figure 70 : Distribution de la charge piégée dans l'isolant pour différents temps (zoom sur la zone d'accumulation)

Ces résultats sont donnés à titre d'exemple, ils peuvent varier de manière significative suivant la nature et les propriétés des matériaux.

3) Influence des paramètres sur le modèle

Les propriétés des matériaux et les conditions d'utilisation des dispositifs affectent les modes de transport de charges et donc le courant, la distribution spatiale et la quantité de charges dans l'isolant en fonction du temps. L'influence des différents paramètres du modèle sur les résultats de simulation a été étudiée et est présentée dans cette section. Ceci permet ensuite de

comprendre comment les propriétés du matériau ainsi que son environnement d'utilisation peuvent affecter les performances des dispositifs électroniques. L'étude de ces résultats est nécessaire pour l'utilisation du code de simulation comme outil d'évaluation et d'amélioration des performances des composants capacitifs. Les valeurs des paramètres matériaux utilisées pour ces simulations sont données dans le Tableau 12, des variations autour de ces valeurs ont permis de réaliser l'étude.

Paramètre	Hauteur de la barrière TAT ϕ_{B}	Hauteur de la barrière Schottky ϕ_0	Densité de pièges N_p (pour $dz = 0{,}5$ Å)	Energie de pièges ϕ_{p}
Valeur	2 eV	1,25 eV	$1 \times 10^{16}/\mathrm{m}^2$	0,7 eV

Section efficace de capture S_p	Permittivité dans le volume	Permittivité aux interfaces	Masse effective m^*	Mobilité μ
$1 \times 10^{-20}\mathrm{m}^2$	7	7	$0{,}5\ \mathrm{m}_0$	$1.10^{-16}\mathrm{m}^2.\mathrm{V}^{-1}.\mathrm{s}^{-1}$

Tableau 12 : Paramètres utilisés pour les simulations sur des capacités MIM comprenant du nitrure de silicium d'épaisseur 100 nm

Conditions d'utilisation

Si le champ électrique appliqué augmente, le courant dans la capacité augmente ; il y a alors plus de charges injectées. Ceci entraîne un écrantage plus rapide du champ électrique aux interfaces et donc une diminution du courant d'injection. Le TAT devient le courant d'injection principal lorsque le champ électrique augmente et le courant Schottky domine l'injection lorsque le champ électrique diminue. On retrouve cet effet si l'on observe la distribution spatiale de charges piégées pour différents champs électriques (Figure 71). Lorsque le champ électrique appliqué diminue, la charge piégée provient de plus en plus de porteurs initialement libres qui sont ensuite capturés dans des pièges, plutôt que de porteurs injectés directement dans les pièges par le TAT. Ainsi, si le courant d'injection dominant est le courant Schottky (à faible champ électrique), les charges sont principalement injectées dans la bande de conduction ; la distribution spatiale de la charge piégée est alors impactée par les niveaux de pièges (pour l'effet du TAT inverse) mais dépend aussi de la longueur de cohérence pour les charges libres. Comme

présenté dans la première partie de ce chapitre (Figure 54), si le champ électrique appliqué sur la capacité augmente la distribution spatiale des charges injectées dans les pièges est de plus en plus piquée ; ceci provient de la forme de la barrière.

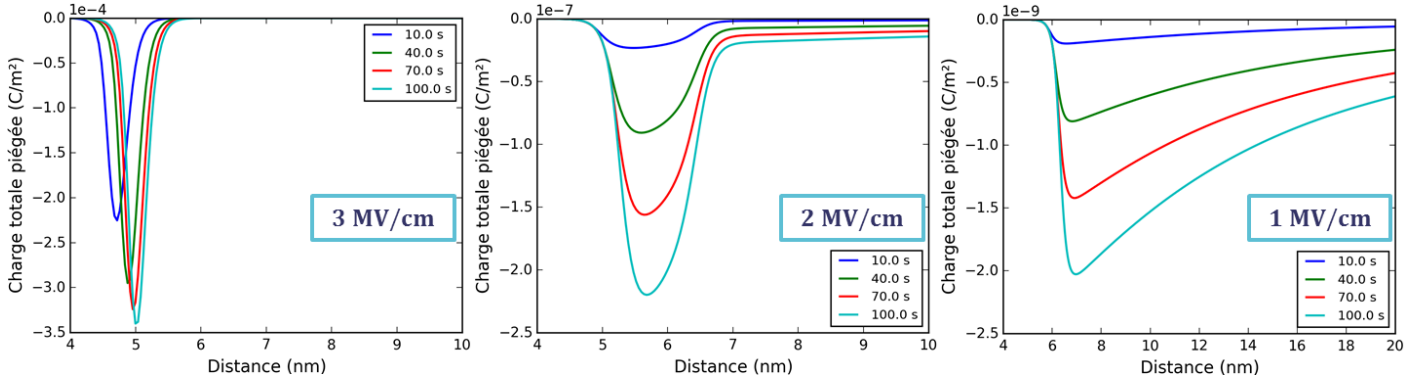


Figure 71 : Distribution de la charge piégée dans l'isolant (zoom sur la zone d'accumulation) pour différentes valeurs de champ électrique appliqué

De la même façon, si la température augmente le courant d'injection augmente, plus de charges sont injectées et l'écrantage augmente. On remarque aussi que la distribution spatiale de charges piégées est plus étalée (Figure 72). Ceci résulte de plusieurs effets ; tout d'abord, si la température augmente de plus en plus de charges sont injectées proche de l'électrode (Figure 56) ainsi que dans la bande de conduction ou de valence (le courant Schottky étant proportionnel à la température au carré). De plus, la probabilité de libération des porteurs augmente, les porteurs ainsi extraits vers la bande de conduction ou la bande de valence se déplacent vers l'électrode opposée à celle de l'injection. La forme de la barrière est aussi différente suivant la distribution des porteurs, ceci impacte alors la suite de la simulation.

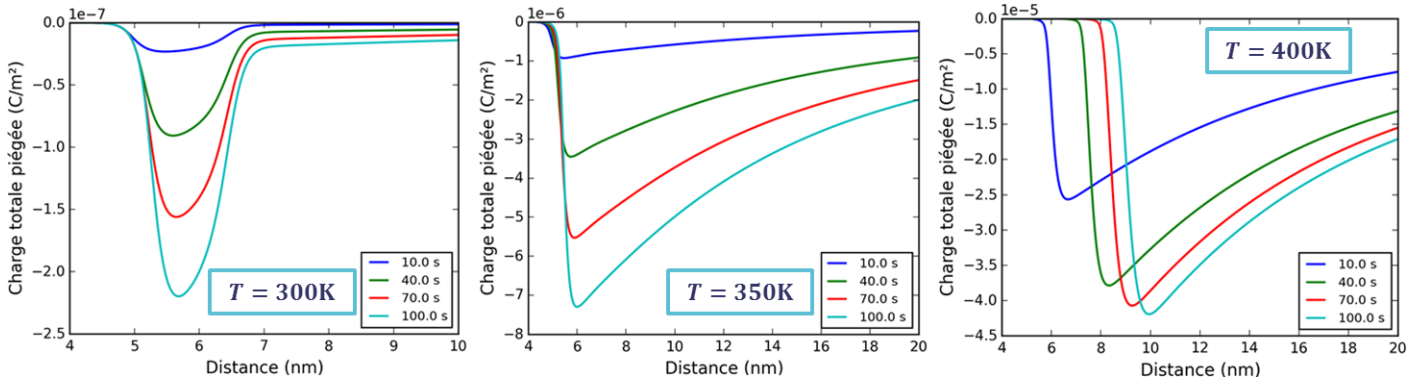


Figure 72 : Distribution de la charge piégée dans l'isolant (zoom sur la zone d'accumulation) pour différentes valeurs de température – Champ électrique appliqué : 2 MV/cm

Propriétés des matériaux

Le niveau de piège dans le matériau diélectrique est une propriété pouvant impacter fortement le comportement des charges (Figure 73). Une petite variation de la profondeur de piège fait varier de manière considérable la quantité de charges stockées ainsi que sa distribution spatiale. En effet, lorsque les pièges présentent une énergie plus élevée, une plus grande quantité de charges est injectée par TAT et celles-ci sont stockées plus proche de l'électrode au début de la simulation. Ceci entraîne un écrantage plus important du champ électrique aux interfaces, la forme de la barrière est modifiée. Les charges sont alors plus difficilement stockées dans des pièges proches des électrodes car l'injection par TAT devient de moins en moins probable. De plus, la forme de la barrière peut finalement entraîner une augmentation de l'extraction des porteurs par effet tunnel. Cependant, la probabilité de libération d'un porteur diminue avec l'augmentation de l'énergie des pièges ; les mécanismes Frenkel-Poole et TAT retour sont moins efficaces. Les valeurs de profondeur de pièges utilisées pour ces simulations correspondent aux énergies données dans la littérature (Figure 23 et [121] [123] [124] [125]) ainsi qu'aux valeurs mesurées dans le deuxième chapitre de cette thèse.

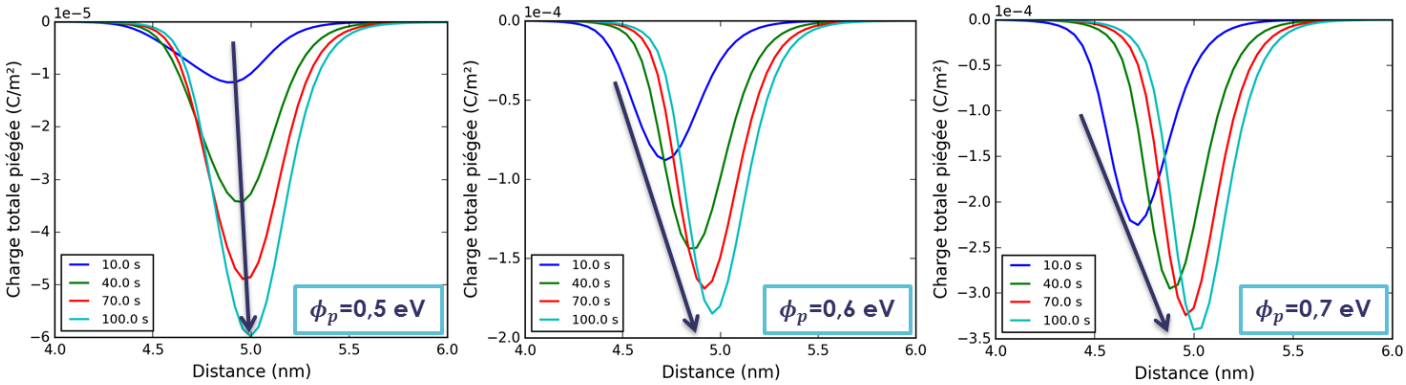


Figure 73 : Distribution de la charge piégée dans l'isolant (zoom sur la zone d'accumulation) pour différentes valeurs d'énergie de piège – Champ électrique appliqué : 3 MV/cm

La valeur de la hauteur de barrière a le même impact sur le TAT et le TAT retour que la profondeur des pièges. En effet, pour les courants tunnels assistés par les pièges, le paramètre important est la différence entre la hauteur de barrière et la profondeur des pièges. Le courant Schottky dépend de la hauteur de la barrière de manière exponentielle ; une légère augmentation de la hauteur de barrière entraîne alors une diminution du courant. Si la hauteur de la barrière augmente, la charge totale dans le diélectrique diminue. Dans cette section les simulations présentées ont été réalisées avec des hauteurs de barrière de l'ordre de 1,2 eV pour le courant Schottky et 2 eV pour le courant TAT. Des simulations réalisées avec les valeurs théoriques de

hauteur de barrière ne permettent pas d'obtenir des valeurs de courant de l'ordre des valeurs mesurées dans les capacités. L'affinité électronique du nitrure de silicium est d'environ 2 eV [127] et le travail de sortie des principaux métaux constituant les électrodes et couches d'accroche en microélectronique est de l'ordre de 4,5 à 5 eV (Tableau 1). La hauteur de barrière théorique entre le nitrure de silicium et ces métaux est donc d'environ 2,5 eV. Les courants calculés sont alors extrêmement faibles ou n'ont pas de sens physique (par exemple : courant Schottky calculé de l'ordre de $10^{-28}\ \mathrm{A/m^2}$ et courant TAT calculé de l'ordre de $10^{-16}\ \mathrm{A/m^2}$ pour un champ électrique de $2\ \mathrm{MV/cm}$). Comme présenté dans le premier chapitre de cette thèse, la barrière réelle peut être fortement abaissée par rapport à la barrière théorique en raison des conditions de dépôts, de contaminants ou de défauts d'interfaces [93].

Si la densité de pièges augmente, le courant TAT, proportionnel à la densité de pièges, augmente ainsi que la capture de porteurs libres. La quantité de charges piégées augmente et le courant décroit alors plus vite en fonction du temps car l'écrantage est plus élevé. L'injection diminue et la forme de la barrière devient favorable à l'extraction des charges par effet tunnel ; l'accumulation de charges proche des électrodes est moins importante. Les valeurs de densité de pièges utilisées pour ces simulations sont comprises entre $10^{25}\ \mathrm{m^{-3}}$ et $10^{26}\ \mathrm{m^{-3}}$ en accord avec la littérature [107] [111] [114]. De même, si la section efficace de capture augmente, les courants TAT et TAT retour, proportionnels à la section efficace de capture, augmentent. La charge totale piégée augmente donc et est piégée plus en profondeur dans l'isolant à cause de l'écrantage du champ électrique. Les valeurs de sections efficaces de capture généralement données dans la littérature sont de l'ordre de $10^{-17}\ \mathrm{m^2}$ à $10^{-21}\ \mathrm{m^2}$ [80] [128].

Si la masse effective du porteur augmente, le courant Schottky augmente et les courants tunnels assistés par les pièges diminuent. En effet, l'injection par effet Schottky est proportionnelle à la masse effective du porteur et la probabilité de traverser la barrière par effet tunnel diminue. La charge libre totale injectée augmente donc alors que la charge injectée dans les pièges diminue. Cependant, la charge piégée peut augmenter par capture de charges libres, ces charges ainsi piégées ont une faible probabilité de traverser la barrière pour atteindre les électrodes de par leur masse effective élevée. Il faut aussi noter que la charge est piégée de plus en plus proche des électrodes si la masse effective augmente. La masse effective des porteurs dans le nitrure de silicium est évaluée à environ 0,5 m_0 [129] [130]. La mobilité des porteurs est un paramètre peu étudié dans les matériaux isolants et les valeurs présentées dans la littérature pour le nitrure de silicium varient de plusieurs ordres de grandeur [12] [113]. Si la mobilité des porteurs augmente, le courant dans le volume du diélectrique augmente. Les porteurs entrent plus en profondeur dans le diélectrique et l'écrantage aux interfaces diminue. Ils sont alors piégés plus en profondeur dans le diélectrique ce qui fait diminuer la probabilité de retour de ces porteurs piégés dans le métal par TAT inverse ; la charge piégée augmente.

Synthèse

Les conclusions de cette étude sur le courant et la charge suivant les propriétés des matériaux sont résumées dans les tableaux suivants.

Paramètre α	**Impact sur les courants si α ↗**	**Remarques**
Champ électrique E	Courant ↗	• Plus E ↗, plus J_{TAT} domine l'injection totale • J_S est moins sensible aux variations de E que J_{TAT}
Température T	Courant ↗	• Ecrantage ↗
Hauteurs de barrière ϕ_B et ϕ_0	J_{TAT} ↘ J_{TATre} ↗ J_S ↘	• Pour J_{TAT} et J_{TATre}, le paramètre important est $\phi_B - \phi_p$. • J_S est très sensible à la valeur de ϕ_0
Densité de pièges N_p	J_{TAT} ↗ Capture ↗	• $J_{TAT} \propto N_p$ • Courant ↘ plus vite avec le temps
Energie de pièges ϕ_p	J_{TAT} ↗ Probabilité de libérer un porteur piégé dans le volume ↘	• J_{TAT} très sensible aux variations de ϕ_p • Normalement J_{TATre} ↘ mais la quantité de charges stockées ↗ avec ϕ_p
Section efficace de capture S_p	J_{TAT} ↗	• $J_{TAT} \propto S_p$ • $J_{TATre} \propto S_p$
Masse effective m^*	J_S ↗ J_{TAT} et J_{TATre} ↘	• $J_S \propto m^*$ • Probabilité tunnel ↘
Mobilité μ	J_{SCLC} ↗	• Les porteurs entrent plus en profondeur dans le diélectrique

Tableau 13 : Impact des paramètres sur le courant dans la capacité

Paramètre α	**Impact sur la quantité de charges si α ↗**	**Remarques**
Champ électrique E	ρ ↗	• Plus ↗, plus la quantité de charges injectées directement dans les pièges ↗ • Distribution des charges injectées par J_{TAT} plus piquée si E ↗
Température T	ρ ↗	• Ecrantage ↗
Hauteurs de barrière ϕ_{B} et ϕ_0	ρ ↘	• Si ϕ_{B} ↗, la distribution de la charge piégée évolue
Densité de pièges N_p	ρ_p ↗	• J_{TAT} ↗ et la capture ↗ • ρ_p plus en profondeur
Energie de pièges ϕ_{p}	ρ_p ↗	• Si ϕ_{p} ↗, la distribution de la charge piégée évolue
Section efficace de capture S_p	ρ_p ↗	• ρ_p plus en profondeur
Masse effective m^*	ρ_l ↗ ρ_p ↘	• ρ_p piégée plus proche de l'électrode si m^* ↗
Mobilité μ	ρ_p ↗	• Charges piégées plus en profondeur

Tableau 14 : Impact des paramètres sur la charge dans la capacité

On remarque l'interdépendance de ces paramètres sur les mécanismes de transport. L'augmentation du courant d'injection TAT entraîne par exemple l'augmentation de la charge piégée proche des électrodes et provoque donc un écrantage du champ électrique au bord du diélectrique. Le courant d'injection total diminue ainsi plus rapidement, moins de pièges sont disponibles pour capturer d'autres porteurs mais plus de porteurs peuvent être extraits par le TAT inverse ou le mécanisme Frenkel-Poole. La réalisation de ces simulations suivant les propriétés

des matériaux a permis de comprendre comment les mécanismes de transport agissent sur l'accumulation de charges dans l'isolant en fonction de ses caractéristiques.

4) Régime impulsionnel

Lors de leur utilisation, les dispositifs capacitifs sont soumis à des phases de charge lorsqu'un champ électrique est appliqué, et des phases de décharge lorsque le champ électrique appliqué revient à zéro. Durant la phase de décharge, presque aucun porteur ne peut être injecté dans le diélectrique et les porteurs déjà présents sont très peu mobiles. En effet, le champ électrique dans le matériau est faible ; il est uniquement généré par la charge stockée. Les simulations présentées dans cette partie sont constituées de cycles comprenant 100 s de charge puis 100 s de décharge. Elles utilisent les valeurs de paramètres du Tableau 12 (Figure 72, Figure 74, Figure 75, Figure 76) avec un abaissement de la barrière Schottky à 1,05 eV pour la Figure 77et la Figure 78.

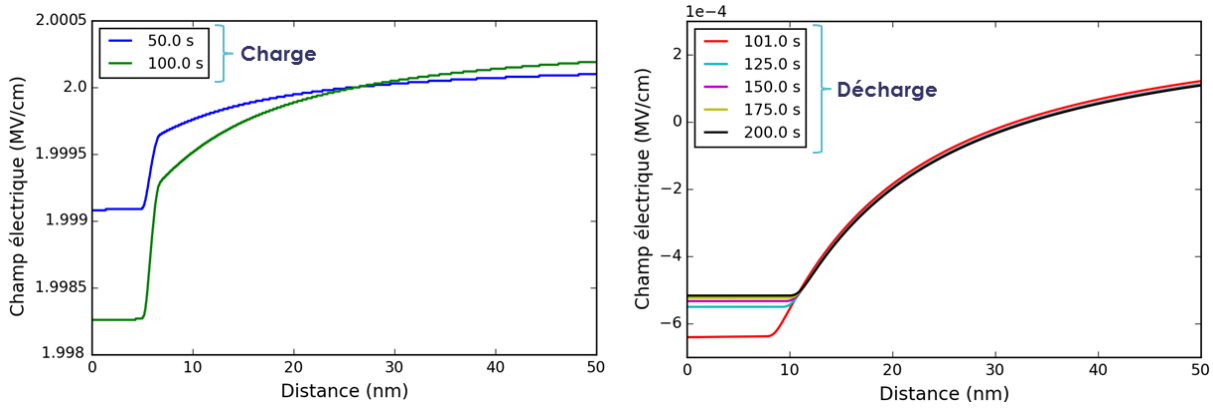


Figure 74 : Champ électrique dans l'isolant lors de la charge (à gauche) et de la décharge (à droite) pour 100 s de charge puis 100 s de décharge

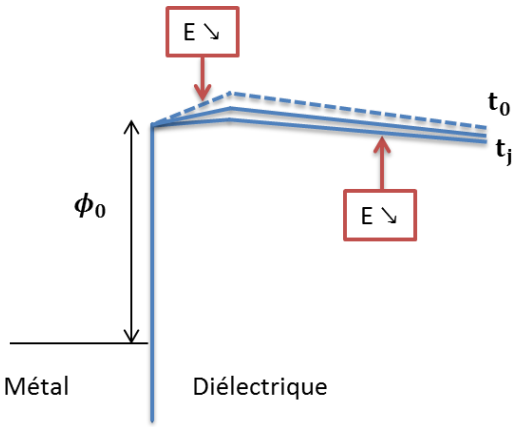


Figure 75 : Modification de la barrière par variation du champ électrique lors de la décharge

Lors de la décharge, le champ électrique dans le diélectrique diminue de façon significative et change de signe dans la zone proche de l'interface (Figure 74). La forme de la barrière est modifiée (Figure 75) et devient favorable à l'extraction des porteurs par le TAT inverse. Les charges situées dans des pièges proches de l'interface électrode-diélectrique sont alors plus facilement extraites des pièges vers le métal (Figure 76). Les porteurs libres générés lors de la phase de charge sont capturés dans les pièges ; ils peuvent ensuite être injectés dans l'électrode métallique ou rester stockés s'ils sont piégés trop en profondeur dans l'isolant. Lors de la décharge, une partie de la charge est donc rapidement évacuée vers les électrodes par effet tunnel ou courant limité par charge d'espace mais une certaine quantité de charges s'accumule dans l'isolant (Figure 76 et Figure 77). Les charges situées après la rupture de pente du potentiel (vers 10 nm sur la Figure 75) peuvent lentement être évacuées en dehors du diélectrique (Figure 76). Celles situées après la position du plan de champ nul ne peuvent pas être extraites lors de la décharge.

On remarque que la dynamique de décharge est très différente suivant le champ électrique appliqué lors de la phase de charge et suivant le mécanisme d'injection dominant. En effet, plus le champ électrique appliqué est élevé, plus la charge s'accumule rapidement et plus la décharge semble efficace pour l'évacuation des charges (Figure 78). Tout d'abord, la charge est piégée plus proche de l'électrode lorsque le champ électrique est élevé ; la contribution du TAT augmente par rapport à celle de l'injection Schottky lorsque le champ électrique augmente. La probabilité pour un porteur d'être extrait du piège vers l'électrode est donc plus grande. De plus, si le champ électrique augmente, la quantité de charges dans le diélectrique est plus importante. Le champ électrique lors de la décharge est alors plus élevé dans la zone proche des électrodes, ceci favorise l'extraction des porteurs vers les électrodes. Cependant, la quantité de charges stockées dans l'isolant après un cycle charge-décharge augmente avec le champ électrique appliqué lors de la charge (Figure 78).

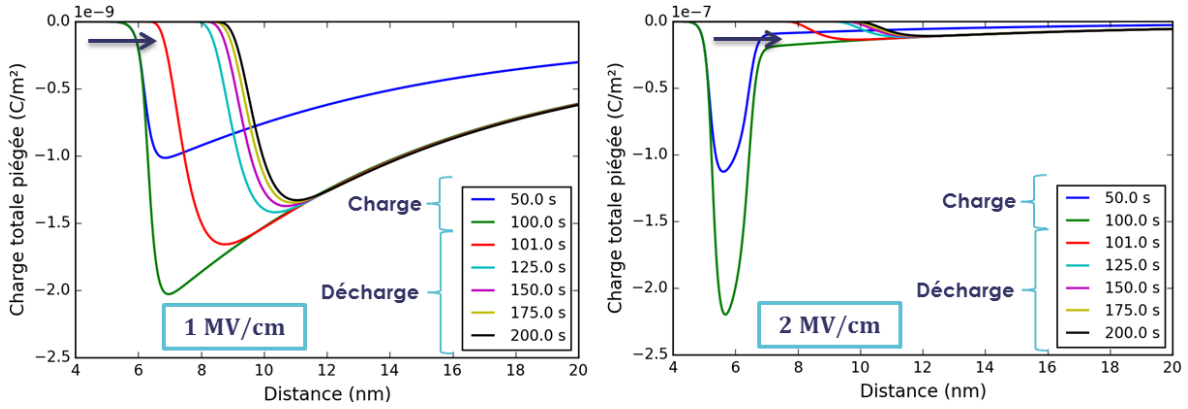


Figure 76 : Distribution de la charge piégée dans l'isolant (zoom sur la zone d'accumulation) après une phase de charge de 100 s et une phase de décharge de 100 s – 1 MV/cm et 2 MV/cm

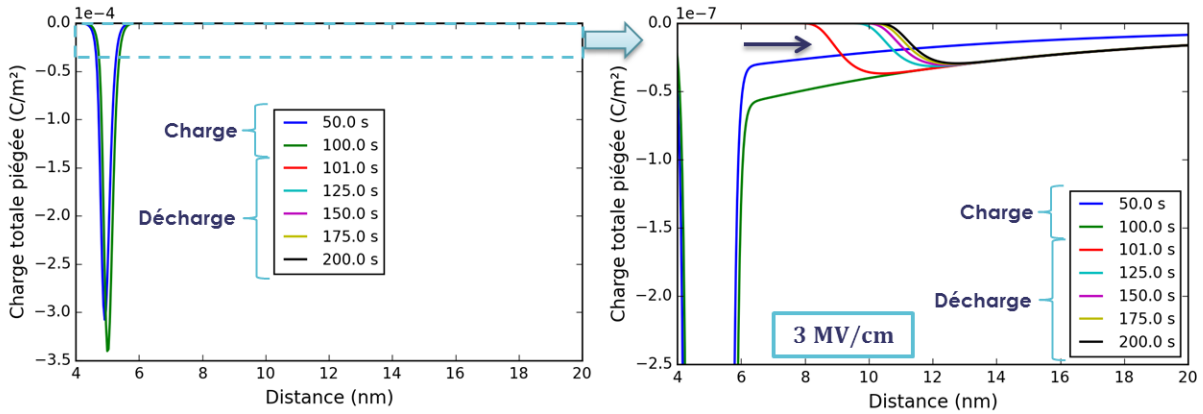


Figure 77 : Distribution de la charge piégée dans l'isolant (zoom sur la zone d'accumulation) après une phase de charge de 100 s et une phase de décharge de 100 s – 3 MV/cm

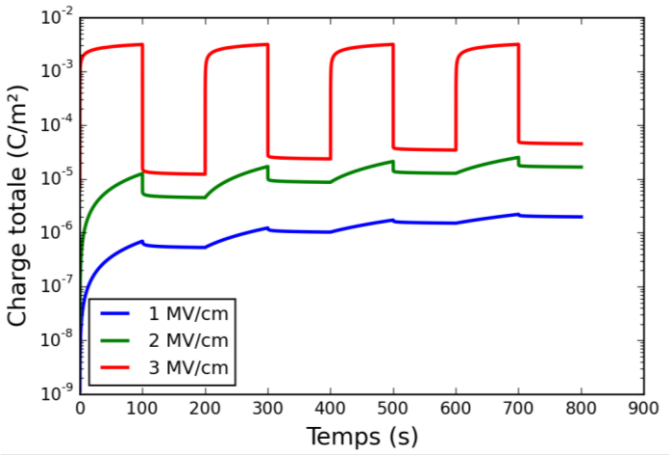


Figure 78 : Charge totale dans le diélectrique en fonction du temps pour 4 cycles charge-décharge (100 s de charge et 100 s de décharge)

Si l'injection est essentiellement assurée par le mécanisme Schottky pour les valeurs de champs électriques testées, les charges sont stockées plus en profondeur dans le diélectrique (Figure 79). Plus le champ appliqué lors de la phase de charge augmente, plus la densité de charges libres augmente. Ainsi, une plus grande quantité de charges s'accumule loin des électrodes lorsque le champ électrique augmente. Cette distribution des charges dans le diélectrique, déterminée par la longueur de cohérence, diminue la probabilité de ressortir par effet tunnel au moment de la décharge. Dans ce cas, plus le champ électrique appliqué lors de la charge augmente, moins la phase de décharge est efficace pour l'évacuation des charges hors de l'isolant (Figure 80).

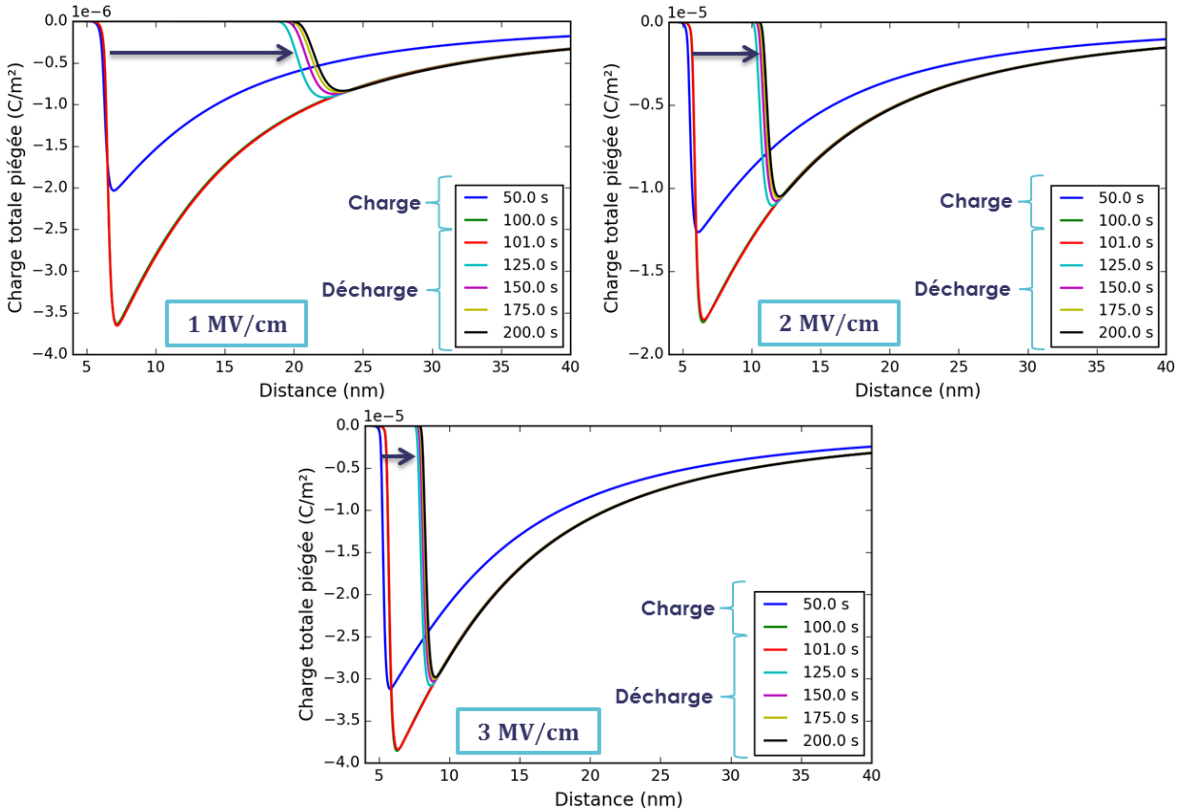


Figure 79 : Distribution de la charge piégée dans l'isolant (zoom sur la zone d'accumulation) après une phase de charge de 100 s et une phase de décharge de 100 s pour une injection dominée par le mécanisme Schottky – 1 MV/cm, 2 MV/cm et 3 MV/cm

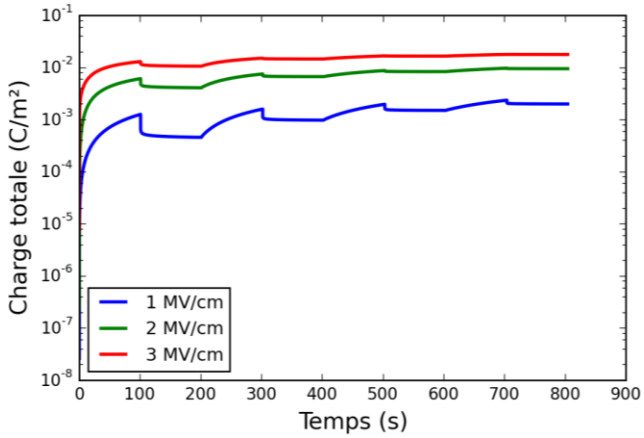


Figure 80 : Charge totale dans le diélectrique en fonction du temps pour 4 cycles charge-décharge (100 s de charge et 100 s de décharge) pour une injection dominée par le mécanisme Schottky

Après la phase de décharge, une quantité non négligeable de charges peut rester stockée dans l'isolant. Ceci dépend de la localisation des charges dans le matériau, et donc de ses propriétés et du mode d'utilisation du composant. Dans tous les cas, la charge diminue rapidement lorsque le champ électrique appliqué devient nul, elle diminue ensuite très lentement (Figure 78 et Figure 80). De plus, si la quantité de charges dans le diélectrique diminue peu lors des décharges, de moins en moins de charges sont injectées dans le diélectrique lors des phases de charge suivantes. Un régime stationnaire tend alors à s'établir plus rapidement.

5) Synthèse

Ces travaux de modélisation permettent de comprendre comment la charge s'accumule dans un diélectrique sous champ électrique en régime impulsionnel. En effet, le modèle développé donne accès à l'évolution temporelle des grandeurs physiques liées au transport de charges dans l'isolant. Différents phénomènes de transport par effet thermique et par effet tunnel sont pris en compte, les charges peuvent être libres ou piégés dans le diélectrique. Cette étude s'est principalement concentrée sur les structures capacitives au nitrure de silicium, matériau couramment utilisé en microélectronique. Cependant, le modèle peut être utilisé pour d'autres types de matériaux diélectriques en adaptant leurs propriétés lors de l'étape d'initialisation de l'algorithme.

Grâce à l'algorithme de calcul, il est possible d'obtenir la distribution de charges en fonction du temps dans le matériau isolant suivant ses propriétés et les conditions d'utilisation. Le modèle peut alors être utilisé pour étudier le vieillissement de composants capacitifs. Il permet de déterminer quel serait le matériau idéal suivant l'application visée ou le mode d'utilisation, et ainsi aider à la conception du composant, au choix du matériau et du mode de dépôt.

Chapitre IV Application aux dispositifs en microélectronique

Comme présenté dans le premier chapitre, les propriétés des matériaux utilisés dans les composants électroniques conditionnent leurs performances et leur fiabilité. Certaines défaillances surviennent très rapidement lors de l'utilisation des composants, elles sont généralement associées à des défauts de fabrication. Ces composants comportant des défauts de jeunesse sont rapidement éliminés. Pendant la durée de vie des dispositifs, des défaillances peuvent apparaître de façon aléatoire, indépendamment de l'usure du système. Puis les composants entrent dans une phase de vieillissement, leurs performances se dégradent. Ces différentes phases sont représentées par une courbe dite en baignoire, indiquant la probabilité de défaillance d'un produit en fonction du temps (Figure 81). Un des objectifs de ces travaux est de proposer des solutions permettant d'étendre la phase de fonctionnement normal des composants en microélectronique et ainsi retarder la dégradation des performances associées au vieillissement des matériaux diélectriques utilisés.

Dans ce chapitre, les résultats du modèle développé sont tout d'abord confrontés aux résultats de mesures de courant pour des capacités MIM. Puis, le vieillissement des capacités est étudié en régime impulsionnel et des pistes sont proposées pour élaborer un matériau permettant de minimiser la quantité de charges stockées. Le cas des MEMS RF capacitifs est ensuite étudié ; l'évolution temporelle de la tension d'actionnement est mesurée et calculée grâce au modèle. Finalement, les résultats de simulations sont exploités pour déterminer un mode d'utilisation optimal du composant. Le modèle est utilisé comme un outil d'amélioration et d'optimisation des performances des composants capacitifs.

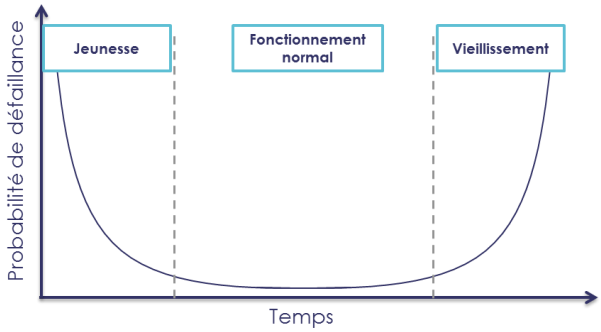


Figure 81 : Probabilité de défaillance en fonction du temps - Courbe en "baignoire" [131]

1) Etude des capacités MIM

Dans cette première partie, le courant mesuré dans les capacités MIM au nitrure de silicium est comparé au courant évalué grâce à la simulation. Puis des solutions sont proposées pour limiter les courants et l'accumulation de la charge dans les capacités et ainsi retarder le vieillissement de ces composants sous champ électrique.

Courant dans les capacités

Comparaisons simulation-mesure

Des mesures de courant en fonction du temps ont été réalisées sur les capacités MIM des différentes plaques présentées dans le second chapitre. Ces mesures de courant sont comparées aux résultats de simulations pour valider le modèle proposé et étudier le vieillissement des capacités. Le courant mesuré J_m est le courant dans le circuit extérieur. Il comprend un terme représentant la valeur moyenne du courant dans le volume du diélectrique ainsi que les valeurs de courant d'injection et d'extraction aux interfaces électrode-diélectrique [88] :

$$J_m \approx J_{inj1} + J_{ext1} + \frac{dz}{d}\sum_{i=2}^{N-1} J_v + J_{injN} + J_{extN} \qquad (69)$$

avec d l'épaisseur du film mince diélectrique et dz l'épaisseur d'une couche de diélectrique pour la discrétisation. En effet, en géométrie plane, un mouvement de charges entre deux électrodes induit un courant dans le circuit extérieur [132] [133] ; le courant dans le volume du diélectrique participe donc au courant mesuré.

Certaines valeurs de paramètres du modèle ont pu être évaluées grâce à la caractérisation du matériau diélectrique ; d'autres sont estimées et ajustées grâce à la littérature et aux comparaisons avec les mesures de courant en fonction du temps. Ainsi, la valeur de l'énergie moyenne des pièges dans le diélectrique utilisée pour les simulations est celle obtenue grâce aux mesures I-V en fonction de la température (Tableau 11). De la même façon, la permittivité des couches minces de nitrure de silicium a été déterminée par des mesures en fonction de la fréquence (Tableau 10). Pour les dispositifs étudiés, la hauteur de barrière théorique pour les électrons entre le nitrure de silicium et la couche d'accroche titane-tungstène est d'environ 2 à 3 eV (l'affinité électronique est de l'ordre de 2 eV pour le nitrure de silicium [127], le travail de sortie du titane-tungstène est compris entre 4,48 eV et 5,19 eV dans [134] et vaut 3,7 eV dans [135]). La hauteur de barrière est d'environ 2,3 eV pour les interfaces nitrure de silicium-titane [56] [135]. Les dosages réalisés sur les échantillons indiquent que le gap est de 5,5 eV à 6 eV. La

hauteur de barrière théorique pour les trous est alors d'environ 3 à 3,5 eV. Les mécanismes d'injection (Schottky et TAT) sont très sensibles à la hauteur de la barrière ; une variation de 0,1 eV peut faire varier le courant d'injection de plusieurs ordres de grandeur. L'injection de trous est donc négligée par rapport à celle des électrons pour les simulations sur ces composants au nitrure de silicium avec une couche d'accroche titane ou titane-tungstène.

A partir de ces valeurs, des simulations ont été réalisées pour les comparer aux mesures de courant en fonction du temps effectuées sur les échantillons. Grâce à l'ajustement des valeurs des différents paramètres, l'ordre de grandeur de ces courants peut être reproduit par la simulation pour plusieurs valeurs du champ électrique. Les comparaisons mesure-simulation du courant en fonction du temps sont données Figure 82, Figure 83 et Figure 84 pour le cas du dépôt de nitrure de silicium par ICP-CVD. La charge totale accumulée dans le diélectrique est aussi calculée en fonction du temps (Figure 85). Les résultats après 1 s, 10 s et 100 s de contrainte électrique sont données Figure 86 pour les plaques étudiées et les valeurs de paramètres utilisées pour les simulations sont présentées dans le Tableau 15.

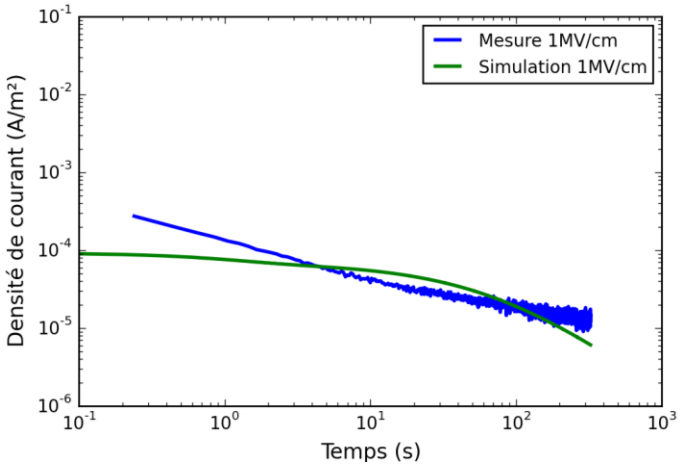


Figure 82 : Comparaison simulation-mesure pour 1 MV/cm - Echantillon : Si_3N_4 déposé par ICP-CVD à 250°C

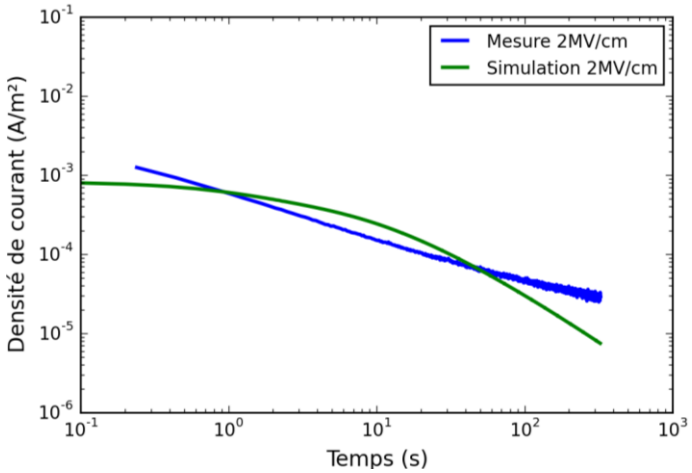


Figure 83 : Comparaison simulation-mesure pour 2 MV/cm - Echantillon : Si_3N_4 déposé par ICP-CVD à 250°C

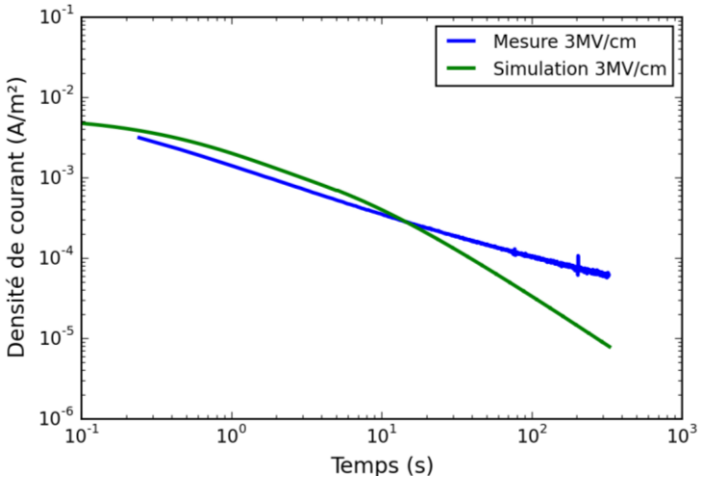


Figure 84 : Comparaison simulation-mesure pour 3 MV/ cm - Echantillon : Si_3N_4 déposé par ICP-CVD à 250°C

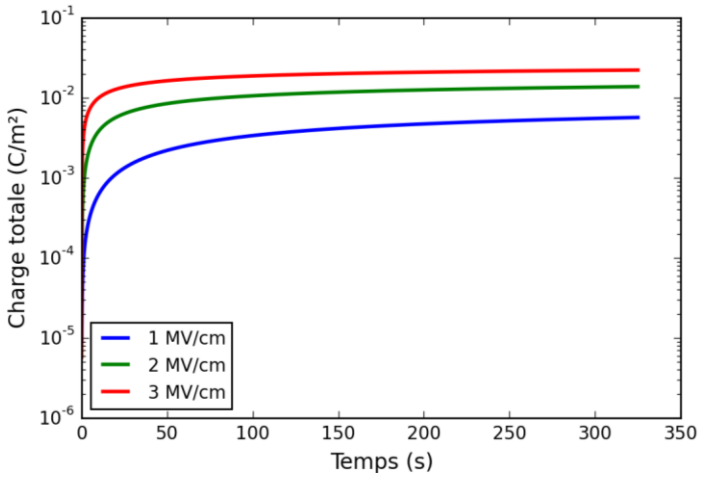


Figure 85 : Simulation – Charge totale dans le diélectrique suivant le champ électrique appliqué sur la capacité - Echantillon : Si_3N_4 déposé par ICP-CVD à 250°C

Discussion

La dynamique d'évolution du courant est complexe et dépend de nombreuses caractéristiques du matériau et des électrodes. Les capacités MIM comportant du nitrure de silicium déposé par PECVD à 360°C présentent les courants les plus élevés ; les valeurs de courant associées aux deux autres modes de dépôts (ICP-CVD à 250°C et PECVD à 250°C) sont assez proches (Figure 86). Les ajustements réalisés pour les simulations montrent que le niveau de courant est ici essentiellement déterminé par la hauteur de la barrière (Tableau 15). Les hauteurs de barrières utilisées pour les simulations sont inférieures aux valeurs théoriques et aux valeurs estimées par les mesures I-V en température. Des différences significatives entre ces valeurs expérimentales et théoriques ont précédemment été observées pour des interfaces métal-diélectrique [58] [60] [129]. Ceci provient des états de surface, les propriétés des matériaux en contact sont modifiées aux interfaces. La hauteur de barrière la plus basse, estimée grâce aux simulations, est celle obtenue pour le dépôt par PECVD à 360°C ; pour ce film diélectrique la valeur de permittivité utilisée dans le terme d'injection Schottky pour les simulations est de 20. En utilisant la même valeur de permittivité à l'interface et dans le volume du diélectrique, c'est-à-dire $\varepsilon'_r = 7{,}5$, il n'était pas possible de reproduire les courbes de courant pour les trois champs électriques appliqués avec un même set de paramètres. Dans ce cas, les propriétés des interfaces semblent différentes des autres dépôts. Le diélectrique est déposé à une température plus élevée, ceci peut modifier la structure du matériau et impacter les propriétés d'interface et d'accroche avec le métal.

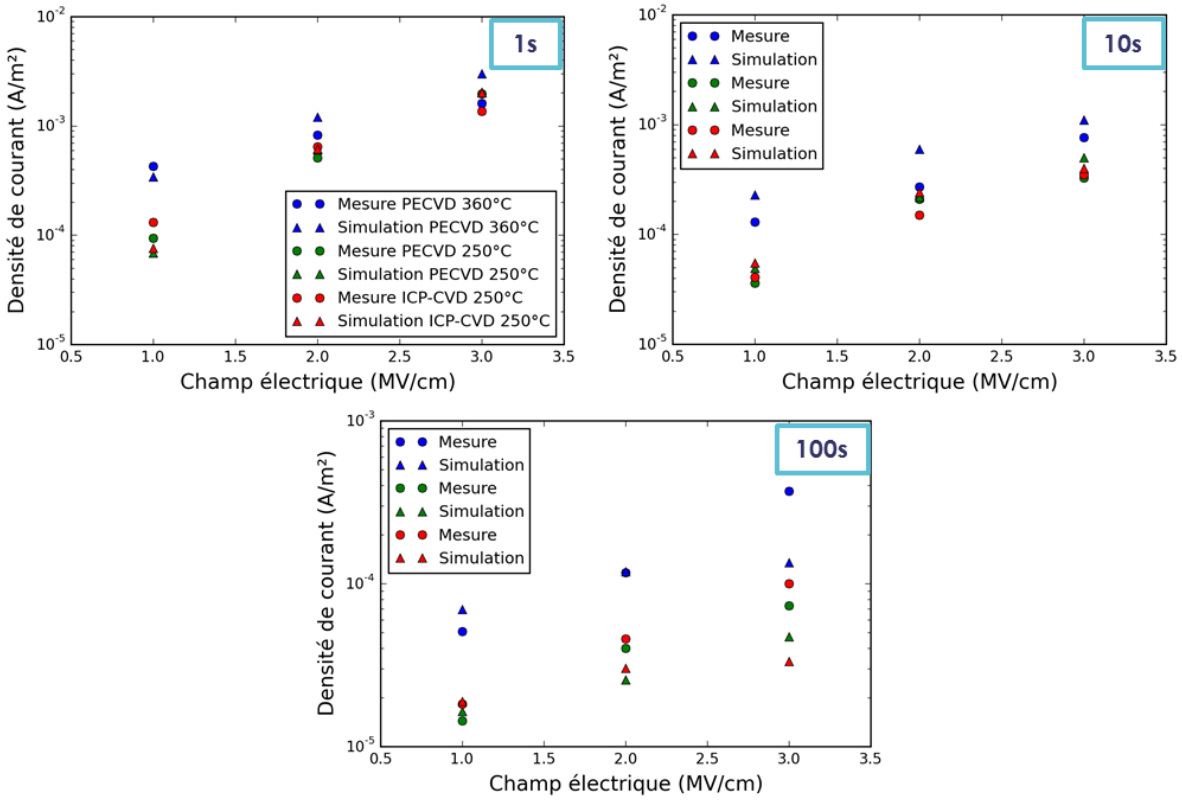


Figure 86 : Comparaisons mesure-simulation à différents champs électriques pour 1 s, 10 s et 100 s

L'ordre de grandeur des résultats de simulation correspond à celui des mesures ; cependant, la dynamique d'évolution du courant est différente. Aux temps courts, le courant simulé diminue plus lentement que le courant mesuré, puis le courant simulé diminue plus rapidement que la mesure aux temps longs (Figure 86). On retrouve ce comportement pour les trois valeurs de champ électrique. Ces écarts entre les simulations et les mesures peuvent probablement être expliqués grâce à certaines hypothèses prises pour le modèle. Le modèle est unidimensionnel, il ne tient donc pas compte des irrégularités aux interfaces entre les électrodes et le diélectrique. De plus, les propriétés du diélectrique sont considérées comme uniformes dans la simulation alors que le matériau diélectrique réel n'est pas homogène. Des mécanismes participant au transport de charges dans le diélectrique n'ont peut-être pas été pris en compte dans le modèle, comme par exemple des courants tunnels entre les pièges. La conduction limitée par charge d'espace est aussi probablement sous-estimée ; elle pourrait permettre un drainage plus efficace des charges libres dans le volume de l'isolant et ainsi maintenir un niveau de courant plus élevé sans augmentation significative de la charge stockée. Cependant, le calcul des courants tunnels nécessite une discrétisation fine du diélectrique, ceci génère des temps de calcul très longs si la mobilité des porteurs est élevée. Il semble que l'approche utilisée permette

d’obtenir l’ordre de grandeur des mesures de courants mais ne suffise pas à reproduire la dynamique d’évolution du courant en fonction du temps.

Echantillon / **Paramètre**	**ICP-CVD 250°C**	**PECVD 360°C**	**PECVD 250°C**
Hauteur de la barrière TAT ϕ_{B}	1,68 eV	1,6 eV	1,68 eV
Hauteur de la barrière Schottky ϕ_0	1,02 eV	0,94 eV	1,03 eV
Densité de pièges N_p (pour $dz =$ 0,5 Å)	$1 \times 10^{16}/\mathrm{m}^2$	$1 \times 10^{16}/\mathrm{m}^2$	$1 \times 10^{16}/\mathrm{m}^2$
Energie de pièges ϕ_{p}	0,77 eV	0,68 eV	0,70 eV
Section efficace de capture S_p	$0{,}3 \times 10^{-23}\mathrm{m}^2$	$0{,}3 \times 10^{-23}\mathrm{m}^2$	$0{,}3 \times 10^{-23}\mathrm{m}^2$
Permittivité dans le volume	7,8	7,5	7
Permittivité aux interfaces	7,8	20	7
Masse effective m^*	0,6 m_0	0,6 m_0	0,6 m_0
Mobilité μ	$1 \times 10^{-16}\mathrm{m}^2.\mathrm{V}^{-1}.\mathrm{s}^{-1}$	$1 \times 10^{-16}\mathrm{m}^2.\mathrm{V}^{-1}.\mathrm{s}^{-1}$	$1 \times 10^{-16}\mathrm{m}^2.\mathrm{V}^{-1}.\mathrm{s}^{-1}$

Tableau 15 : Paramètres utilisés pour les simulations du courant en fonction du temps sur les capacités MIM

Vieillissement des capacités sous contrainte électrique

Tests de cyclage

Des mesures de courant en fonction du temps, avec une phase de charge de 60 s et une phase de décharge de 60 s, ont été réalisées sur les capacités MIM des différentes plaques présentées dans le deuxième chapitre. Des simulations ont été faites avec les valeurs de paramètres données dans le Tableau 15 et sont comparées aux résultats de mesures (Figure 87, Figure 88 et Figure 89). Le courant lors de la décharge est bien reproduit par la simulation. Cependant, le courant mesuré est légèrement supérieur au courant simulé après plusieurs cycles lorsque le champ électrique augmente. Le modèle prend en compte uniquement l'accumulation de charges comme mécanisme de vieillissement du diélectrique. Des défauts peuvent être créés dans l'isolant lorsqu'il est soumis à un champ électrique, le passage du courant peut aussi provoquer un échauffement susceptible de détériorer le matériau lors de son utilisation [57] [136]. Ces effets ne sont pas considérés dans le modèle et peuvent expliquer une partie des écarts entre les mesures et les simulations.

La charge totale accumulée dans l'isolant est représentée Figure 90 pour trois valeurs de champ électrique appliqué sur la capacité MIM. Dans ce cas, l'injection de charges est essentiellement assurée par le courant Schottky, ce qui rend plus difficile leur extraction lors de la décharge. En effet, comme présenté dans le Chapitre II, la charge s'accumule plus en profondeur dans le diélectrique et la phase de décharge n'est pas efficace pour évacuer les charges. La charge diminue peu lors de la décharge, le champ produit par les charges présentes est petit par rapport au champ électrique appliqué lors de la charge. Si une quantité importante de charges reste stockée dans le diélectrique, le champ électrique interne est modifié et n'est pas uniforme à la fin d'un cycle charge-décharge. Dans ce cas, le courant est de plus en plus faible à chaque cycle d'utilisation. Le composant ne revient pas à l'état initial et ceci peut mener à une dérive de son comportement en fonction du temps.

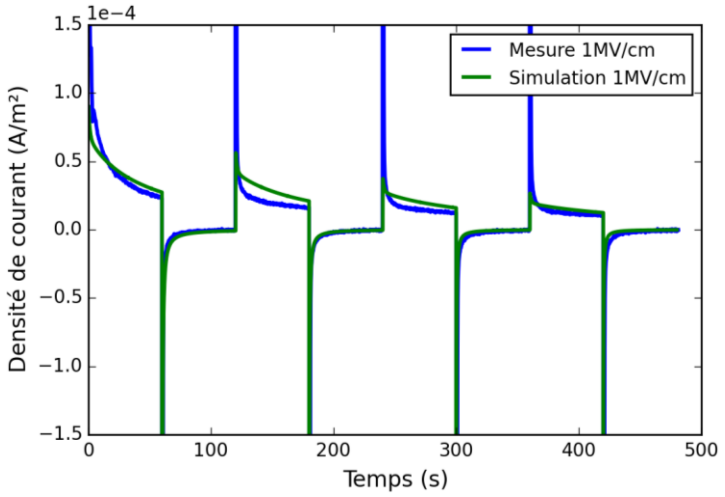


Figure 87 : Comparaison simulation-mesure pour une phase de charge de 60 s à 1 MV/cm et une phase de décharge de 60 s - Echantillon : Si_3N_4 déposé par ICP-CVD à 250°C

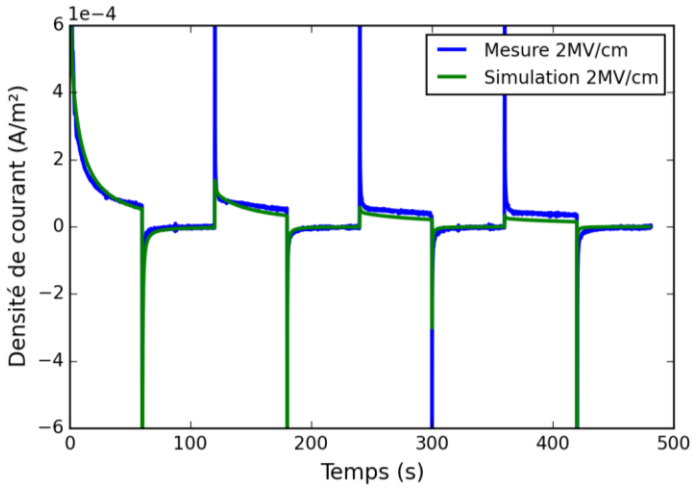


Figure 88 : Comparaison simulation-mesure pour une phase de charge de 60 s à 2 MV/cm et une phase de décharge de 60 s - Echantillon : Si_3N_4 déposé par ICP-CVD à 250°C

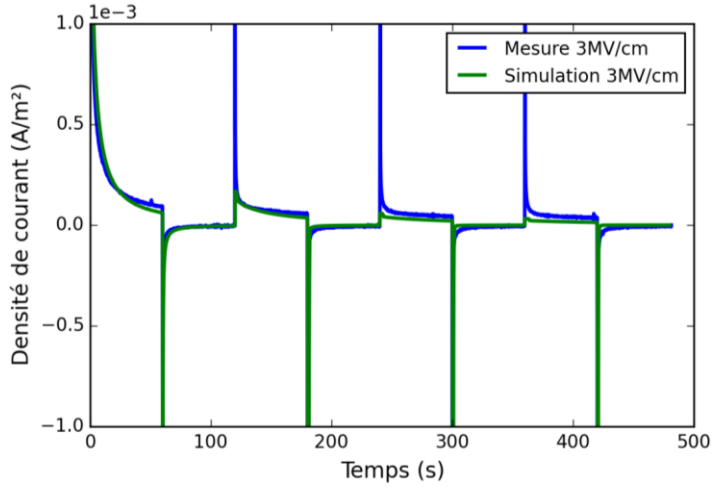


Figure 89 : Comparaison simulation-mesure pour une phase de charge de 60 s à 3 MV/cm et une phase de décharge de 60 s - Echantillon : Si_3N_4 déposé par ICP-CVD à 250°C

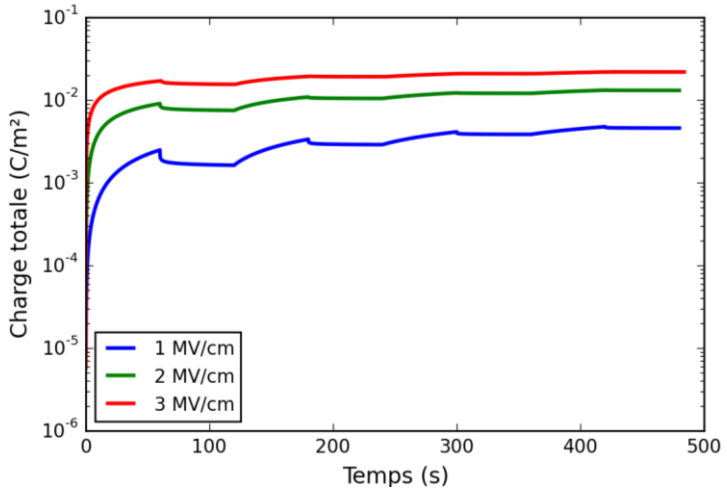


Figure 90 : Simulation – Charge totale dans le diélectrique pour 4 cycles charge-décharge (60 s de charge et 60 s de décharge) - Echantillon : Si_3N_4 déposé par ICP-CVD à 250°C

<u>Fiabilité des capacités MIM</u>

Les capacités MIM sont utilisées pour différentes applications et les performances attendues varient. Cependant, on souhaite de manière générale une capacité ayant une valeur suffisamment importante, un faible courant de fuite, une tension de claquage élevée et une grande linéarité en tension [137] [138]. La linéarité en tension caractérise la stabilité de la valeur de capacité en fonction de la tension appliquée au composant.

Les capacités de découplage sont utilisées dans les circuits RF pour éviter les couplages entre les lignes. Ces capacités, de faible impédance, sont placées entre l'alimentation et la masse pour éliminer les composantes alternatives. Les capacités de liaison sont quant à elles employées pour éliminer les composantes continues. Pour cette application, une bonne linéarité en tension est nécessaire afin d'éviter des modulations intempestives du signal. Des capacités sont aussi intégrées dans les convertisseurs analogique-numérique à double rampe, elles doivent présenter de faibles courants de fuite et ne pas stocker de charges pour ne pas fournir de résultats erronés [139]. Les capacités utilisées pour réaliser des mémoires (DRAM, mémoires flash, ReRAM…) doivent retenir l'information stockée sous forme de charges pour qu'elle soit lue en temps voulu. Ceci impose d'avoir de faibles courants de fuite pour maîtriser la conservation des données [6].

Lors de leur utilisation, ces capacités sont soumises à une succession de phases de charge et de décharge. Des charges peuvent être injectées dans le diélectrique et ainsi générer d'importants courants de fuite. De plus, comme présenté précédemment, si des charges s'accumulent dans l'isolant, le comportement du composant évolue avec le temps. La stabilité des propriétés d'un composant durant son utilisation fait partie des caractéristiques garantissant sa fiabilité. Des études ont montré par des mesures de capacité suivant le stress électrique appliqué, que les caractéristiques de ces composants peuvent évoluer en fonction du temps à cause de l'injection de charges dans l'isolant [138] [139]. La courbe de capacité en fonction de la tension appliquée au composant se décale avec la tension. De plus, l'injection de charges dans l'isolant peut entraîner le claquage du matériau. Certaines études s'intéressent notamment à la valeur seuil de charges dans l'isolant qui entraînerait le claquage du matériau diélectrique [72] [140]. Les courants de fuite et l'accumulation de charges doivent donc être contrôlés pour obtenir des composants fiables et stables pendant leur durée d'utilisation [139]. Le modèle développé peut permettre d'évaluer la fiabilité d'une capacité et la dérive de son comportement en fonction du temps. Il est en effet possible d'estimer le niveau de courant de fuite et la charge accumulée dans la capacité pendant son utilisation en fonction de ses propriétés. Les résultats peuvent alors être utilisés pour choisir ou définir un matériau idéal suivant l'application visée.

Minimisation de la charge stockée : optimisation des matériaux

Une des approches utilisées pour minimiser la charge et les courants de fuite dans les composants capacitifs consiste à travailler sur les propriétés des matériaux employés. Pour toutes les applications, on cherche à maîtriser les propriétés du matériau isolant ainsi que la qualité des interfaces. Makasheva *et al.* [141] ont notamment étudié l'utilisation de multicouches de SiO_xN_y en faisant varier leur composition dans l'épaisseur de l'isolant. Leur étude montre que la variation de stœchiométrie permet de moduler la conductivité de la couche. Ils ont alors cherché à placer le matériau le plus conducteur proche de l'électrode opposée à l'électrode d'injection afin de favoriser l'évacuation des charges, et le matériau le plus isolant proche de l'électrode

d'injection afin de limiter l'injection de charges. Une autre méthode, également basée sur le drainage des charges, est proposée par Bordas *et al.* [142] et Koutsoureli *et al.* [143]. Des nanotubes de carbones sont encapsulés dans des couches minces de nitrure de silicium, créant ainsi des canaux de conduction. La durée de vie des composants a été améliorée de deux ordres de grandeur grâce à l'ajout de ces nanotubes [142]. L'utilisation d'un nitrure de silicium dopé à l'arsenic, proposé par Cheng *et al.* [144], a entraîné une réduction de la quantité d'électrons injectés et une augmentation de la conductivité du matériau diélectrique. Ceci a donc amélioré l'efficacité de la décharge et limité le stockage de charges dans le matériau. Des matériaux isolants constitués de couches de diélectriques de natures différentes ont aussi été étudiés pour minimiser l'accumulation de charges dans l'isolant [145]. Ce matériau isolant multi-couche est constitué d'un diélectrique présentant une affinité électronique élevée, il est placé le long des électrodes afin de limiter l'injection de porteurs ; un second diélectrique de gap plus faible est placé entre ces deux films diélectriques. Les défauts d'interfaces entre ces matériaux semblent participer à l'évacuation des charges lors de la décharge. Cependant, pour les matériaux multi-couche, il faut s'assurer que ces défauts d'interfaces ne contribuent pas au contraire à un stockage de charges plus important. Ces différentes études participent ainsi à l'amélioration de la fiabilité des composants capacitifs.

Le modèle présenté dans le troisième chapitre peut être utilisé pour déterminer les propriétés idéales des matériaux dans les composants capacitifs. En effet, l'étude de la charge accumulée dans l'isolant suivant ses propriétés et celle des électrodes permet d'identifier les paramètres critiques pour l'accumulation de la charge et le courant de fuite (Tableau 13 et Tableau 14). Partant des matériaux existants, il est possible d'évaluer l'impact de variations de leurs propriétés sur le vieillissement de l'isolant sous contrainte électrique. Des simulations ont par exemple été réalisées en modifiant uniquement la nature des électrodes des capacités MIM comportant du nitrure de silicium déposé par ICP-CVD à 250°C. La hauteur de la barrière est alors différente, le courant et la charge stockée varient sensiblement (Figure 91 et Figure 92). Les résultats présentés dans la troisième section du Chapitre III indiquent que la hauteur de la barrière électrode-diélectrique doit être la plus élevée possible pour limiter l'injection de porteurs. Cependant, les états de surface viennent réduire cette valeur théorique. Il est aussi possible d'essayer d'améliorer les propriétés de l'isolant. Tout d'abord, si la densité et l'énergie des pièges sont faibles, peu de charges peuvent être piégées dans le diélectrique. Les résultats de simulation ont montré que la présence de pièges proches de l'électrode d'injection semble peu impacter l'accumulation de la charge. En effet, le TAT inverse empêche le stockage de charges dans ces pièges s'ils ne sont pas trop profonds. Lors de la décharge, des porteurs peuvent être extraits du diélectrique s'ils se situent dans une zone proche des interfaces et si leur énergie n'est pas trop élevée. Certaines propriétés des matériaux peuvent être adaptées en modifiant les conditions de dépôt pour se rapprocher d'un matériau diélectrique idéal en fonction de l'application visée. Des études montrent par exemple que les caractéristiques des pièges présents dans le nitrure de silicium dépendent de sa stœchiométrie et du taux d'hydrogène incorporé lors

du dépôt [80] [121] [124]. La fréquence plasma utilisée pour effectuer le dépôt peut aussi affecter les propriétés du matériau diélectrique et les mécanismes de transport de charges dans les films minces isolants [97] [146].

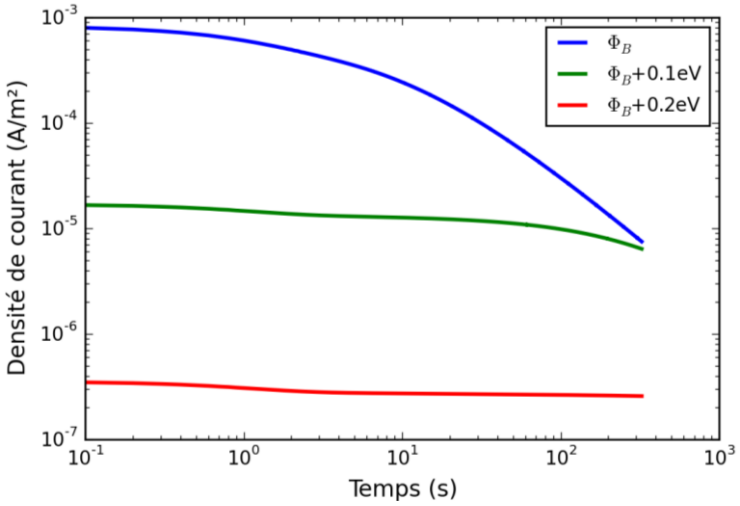


Figure 91 : Simulation - Evolution temporelle du courant suivant la hauteur de la barrière métal-isolant

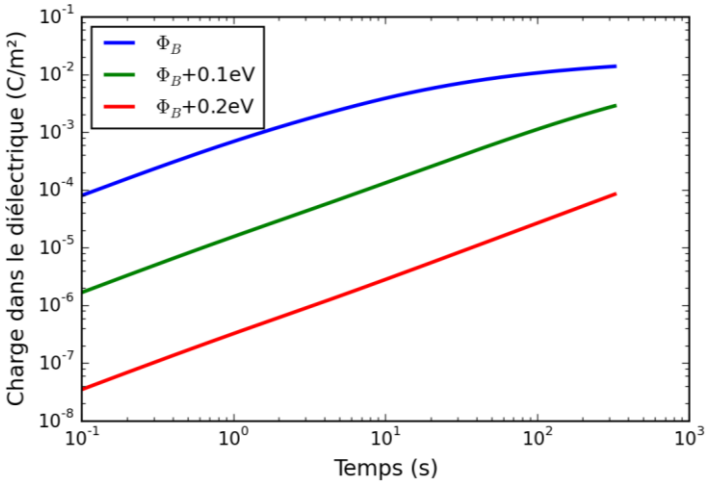


Figure 92 : Simulation - Evolution temporelle de la charge dans le diélectrique suivant la hauteur de la barrière métal-isolant

Lorsqu'une tension est appliquée sur un dispositif capacitif, il y a tout d'abord une décroissance exponentielle du courant avec le temps ; ceci correspond au courant de charge de la capacité associé à la polarisation du diélectrique. Puis on observe une décroissance du courant avec le temps (Figure 93), c'est pendant ce régime transitoire que les charges sont injectées et

s'accumulent dans le diélectrique (Figure 94). Lorsque l'on atteint le régime stationnaire, les courants sont stables et les charges ne s'accumulent plus. Les résultats obtenus grâce au modèle permettent d'évaluer cet état stationnaire du système. En reproduisant l'état stationnaire dans le matériau isolant pendant sa fabrication, aucune charge ne pourra s'accumuler lors de son utilisation sous champ électrique et le courant de fuite sera faible. Un régime permanent artificiel peut par exemple être obtenu par un dopage adapté du diélectrique ou encore de l'ingénierie de bande.

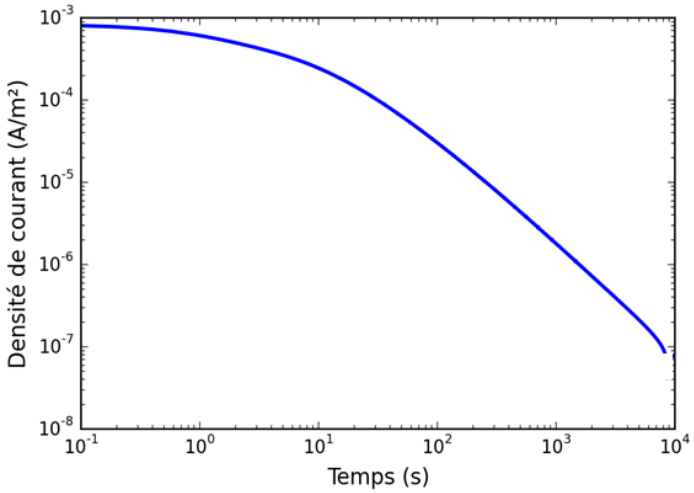


Figure 93 : Simulation - Evolution temporelle du courant pour un champ électrique appliqué de 2 MV/cm - Echantillon : Si_3N_4 déposé par ICP-CVD à 250°C

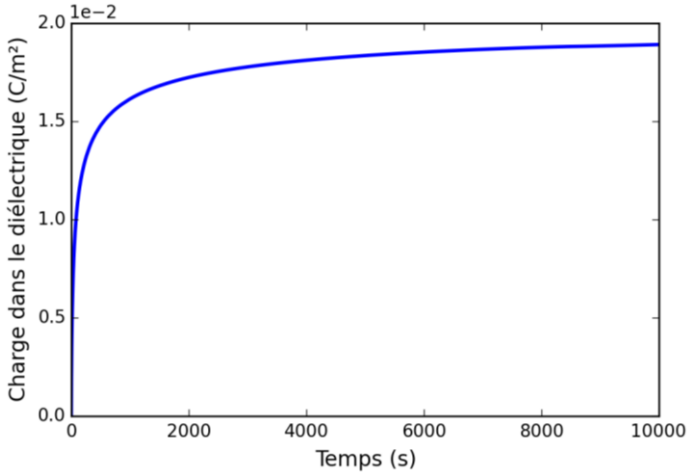


Figure 94 : Simulation – Evolution temporelle de la charge dans le diélectrique pour un champ électrique appliqué de 2 MV/cm - Echantillon : Si_3N_4 déposé par ICP-CVD à 250°C

Les résultats de simulation permettent d'obtenir la distribution spatiale de charges dans le diélectrique en fonction du temps. Une solution pour limiter l'accumulation de charges dans l'isolant peut alors être le dopage. En effet, le matériau diélectrique peut être dopé dans les zones d'accumulation de charges lors de sa fabrication pour reproduire artificiellement l'état de charge à l'état stationnaire. Lorsque le diélectrique sera soumis à un champ électrique, la quantité de charges n'évoluera pas en fonction du temps. Des simulations ont été réalisées en considérant un diélectrique chargé à l'état initial ; les paramètres utilisés sont ceux correspondant au nitrure de silicium déposé par ICP-CVD à 250°C (Tableau 15). Les résultats montrent que le courant est faible et que la charge évolue peu même après 1000 s de contrainte électrique (Figure 95). Dans le cas étudié, le matériau peut être dopé p ou n suivant le type de porteurs pouvant être injectés [147]. La zone à doper est déterminée par le calcul, elle correspond à la distribution de charges dans l'isolant après un stress électrique suffisamment long (Figure 96). Cette distribution de dopant dépend des propriétés du diélectrique, des électrodes et des conditions d'utilisation du dispositif capacitif. La zone doit être dopée p en cas d'accumulation d'électrons, et n en cas d'accumulation de trous. Dans le cas du nitrure de silicium, le dopage p peut être par exemple réalisé avec de l'arsenic ou du bore ; le dopage n peut être réalisé avec du phosphore ou du fluor [147] [148] [149]. Dans certains cas, le dopage est réalisé directement lors du dépôt par utilisation des gaz précurseurs adaptés [148] [149]. Une méthode de dépôt comme l'ALD (Atomic Layer Deposition), adaptée à la microélectronique, devrait permettre de pouvoir synthétiser un matériau présentant une distribution spatiale de dopants adaptée à la problématique. En effet, le contrôle de la composition lors du dépôt peut être réalisé avec une précision à l'échelle de la monocouche atomique [150]. Le dopage peut aussi être fait par implantation d'ions [144].

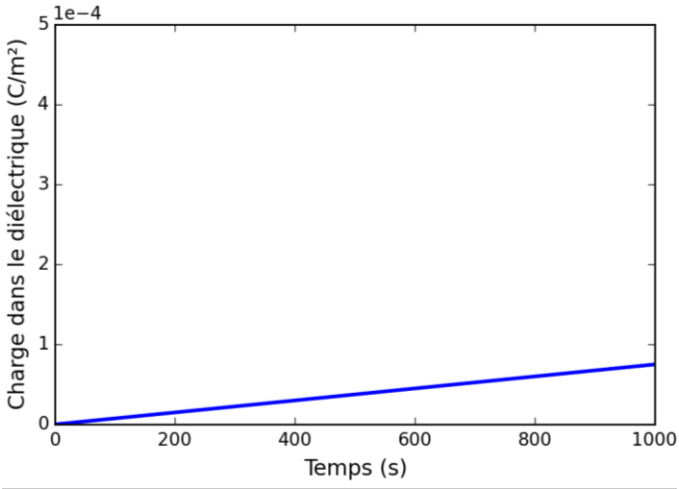


Figure 95 : Simulation - Evolution temporelle de la charge dans le diélectrique dopé - Champ électrique appliqué : 2 MV/cm

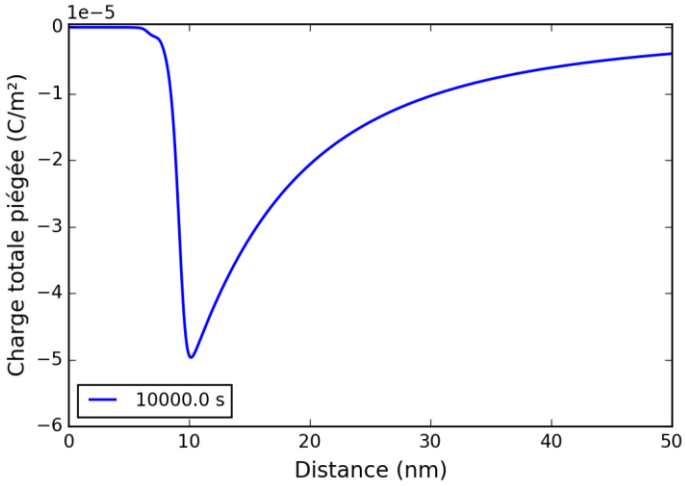


Figure 96 : Distribution de la charge piégée dans l'isolant après 10000 s de simulation - Champ électrique appliqué : 2 MV/cm

Connaissant la distribution spatiale des charges et leur densité, le code de simulation calcule le champ électrique dans la profondeur du diélectrique. Le champ électrique varie rapidement le long des interfaces, zone d'accumulation des charges, puis plus lentement au centre du diélectrique. Un exemple de variation du champ électrique obtenue grâce à la simulation est présentée Figure 97 après 10000 s sous tension. Le potentiel présente une rupture de pente importante à l'endroit où la charge s'accumule. En soustrayant la contribution du champ électrique appliqué au diélectrique, on obtient la déviation de hauteur de bande de conduction générée par la charge présente (Figure 98). La variation est ici d'environ 0,3 eV. La variation est très faible au centre du matériau et se concentre sur une zone de quelques nanomètres proche des électrodes. Le déplacement de la limite de bande de conduction dans l'épaisseur du diélectrique dépend de la distribution de charges et donc des propriétés des matériaux et des mécanismes de transport dominants dans la capacité. Dans l'exemple présenté, le mécanisme d'injection dominant est le courant TAT, cet effet tunnel est fortement dépendant de la forme de la barrière et donc de la position de la bande de conduction. Les paramètres utilisés sont ceux correspondant au nitrure de silicium déposé par PECVD à 340°C (Tableau 16) ; dans ce cas l'injection de porteurs est essentiellement assurée par l'effet tunnel. Pour réaliser les simulations avec un matériau en régime permanent artificiel, la limite de bande de conduction a été assimilée à trois segments (Figure 98). Après 1000 s de contrainte électrique, la charge accumulée dans la couche diélectrique a seulement augmenté de $1{,}1 \times 10^{-4}\ \mathrm{C/m^2}$. Ainsi, si le diélectrique utilisé est conçu pour présenter un régime permanent artificiel avant son utilisation, les courants de fuite et l'accumulation de la charge sont négligeables et n'impactent pas le fonctionnement du dispositif. Il faut noter que le dessin de la bande de conduction doit être effectué dans les conditions d'utilisation du dispositif. En effet, le régime correspondant à une absence d'accumulation de charges diffère suivant la tension appliquée. Afin de réaliser un tel matériau sans utiliser de

multi-couches, il est nécessaire de pouvoir faire varier son gap en ajustant sa composition. Des études sur le comportement du nitrure de silicium en fonction de sa stœchiométrie ont été menées par J. Robertson [3]. La variation du gap a été évaluée en fonction du rapport N/Si (Figure 24). Une déviation de limite de bande de conduction telle que celle évaluée dans le cas étudié, est accessible grâce à un changement de stœchiométrie. Une méthode de dépôt telle que l'ALD (Atomic Layer Deposition) devrait permettre de pouvoir synthétiser un diélectrique présentant une variation de stœchiométrie dans l'épaisseur.

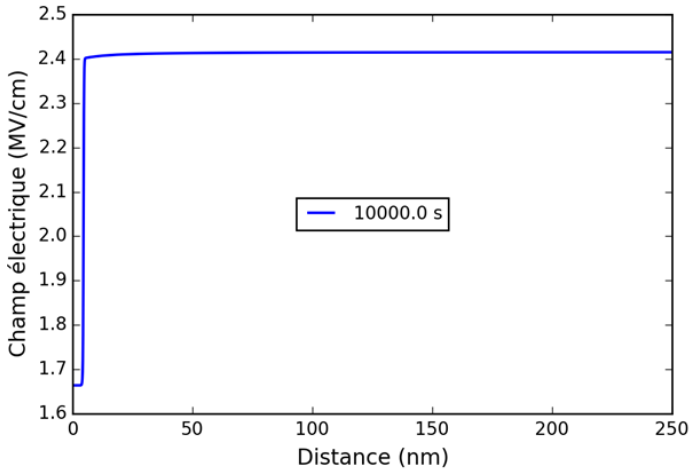


Figure 97 : Champ électrique dans l'isolant après 10000 s de stress électrique (champ électrique appliqué : 2 MV/cm)

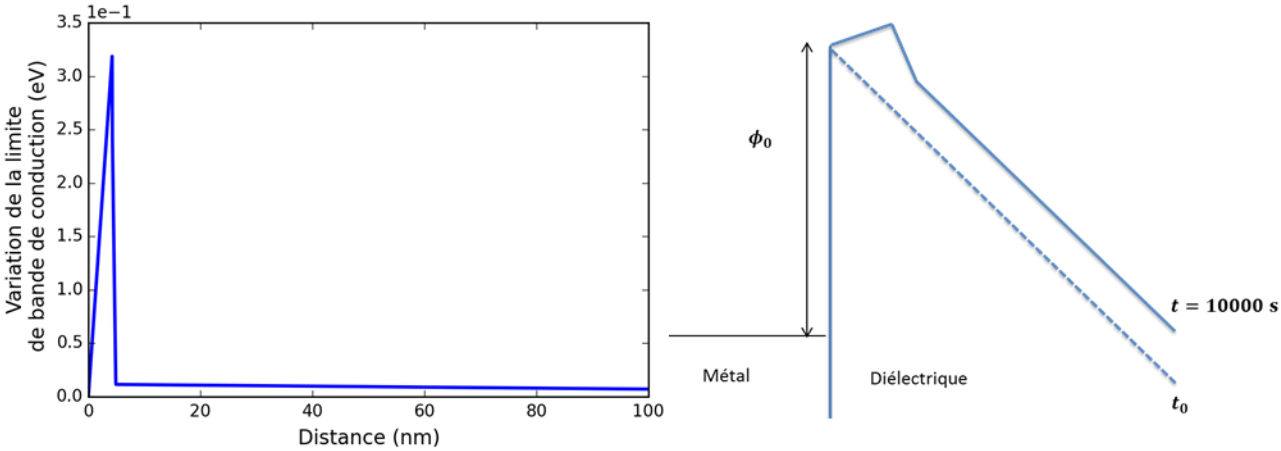


Figure 98 : Variation de la limite de bande de conduction générée par l'accumulation de charges après 10000 s de stress électrique (champ électrique appliqué : 2 MV/cm) et modification de la barrière associée

2) Etude des MEMS RF

Le modèle développé donne accès à la distribution spatiale et à la quantité de charges dans le diélectrique en fonction du temps. Il est donc possible d'évaluer l'impact de cette accumulation de charges sur le fonctionnement de certains composants électroniques. Dans cette section, un autre exemple d'application est étudié : l'effet de la charge sur la tension d'actionnement de l'électrode supérieure dans le cas des MEMS RF capacitifs. La tension d'actionnement V_{ac} a été mesurée au laboratoire pour des MEMS comprenant du nitrure de silicium comme couche mince diélectrique et son évolution en fonction du temps a pu être comparée à des résultats de simulation. Les résultats présentés dans cette section montrent qu'il est possible, grâce au modèle, de déterminer une valeur de tension d'utilisation permettant d'optimiser la durée de vie d'un composant.

Tension d'actionnement et performances du composant

La mesure d'évolution de la tension d'actionnement en fonction du temps réalisée sur les MEMS RF au nitrure de silicium selon le protocole utilisé au laboratoire se décompose en deux parties : le cyclage et la mesure de tension d'actionnement (Figure 99). Lors du cyclage, des créneaux de tension sont appliqués au dispositif ; la membrane s'abaisse lorsque la tension appliquée augmente puis remonte lorsque la tension appliquée s'annule. Les paramètres S sont mesurés pendant toute la durée du test de fiabilité afin d'évaluer les pertes (paramètre S_{11}), l'isolation (paramètre S_{12}) et ainsi déterminer la valeur de la tension d'actionnement du composant. En effet, lorsque la tension appliquée augmente et atteint la valeur de la tension d'actionnement V_{ac}, la membrane s'abaisse. Ce déplacement entraine alors une augmentation de l'isolation (Figure 100). Lorsque la membrane entre en contact avec le diélectrique, l'isolation augmente brutalement et le signal RF est coupé. Lorsque la tension appliquée diminue et atteint la valeur de tension de maintien V_m, la membrane remonte pour finalement revenir à l'état haut (Figure 100). L'isolation diminue et le signal RF passe. La valeur du paramètre S_{12} renseigne donc sur la distance entre l'électrode supérieure mobile et le diélectrique. La tension d'actionnement est ainsi régulièrement mesurée à l'aide d'une rampe de tension triangulaire (Figure 99). Le maximum de cette rampe atteint 120 % de la tension appliquée au composant lors des créneaux afin de prendre en compte les éventuelles variations de valeur de tension d'actionnement pendant la durée du test.

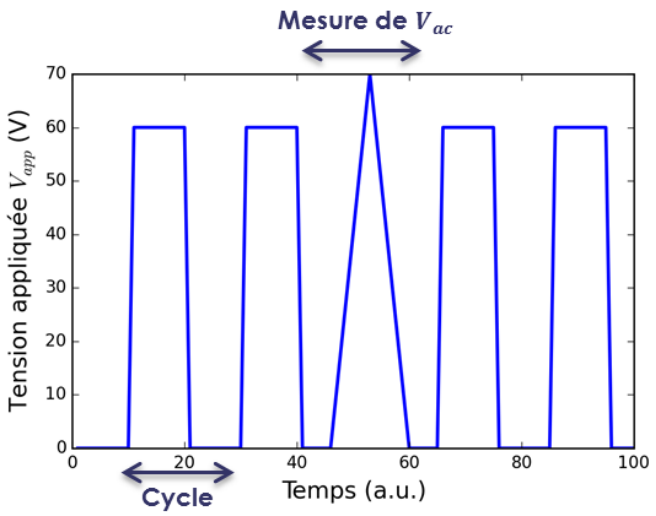


Figure 99 : Forme du signal de test

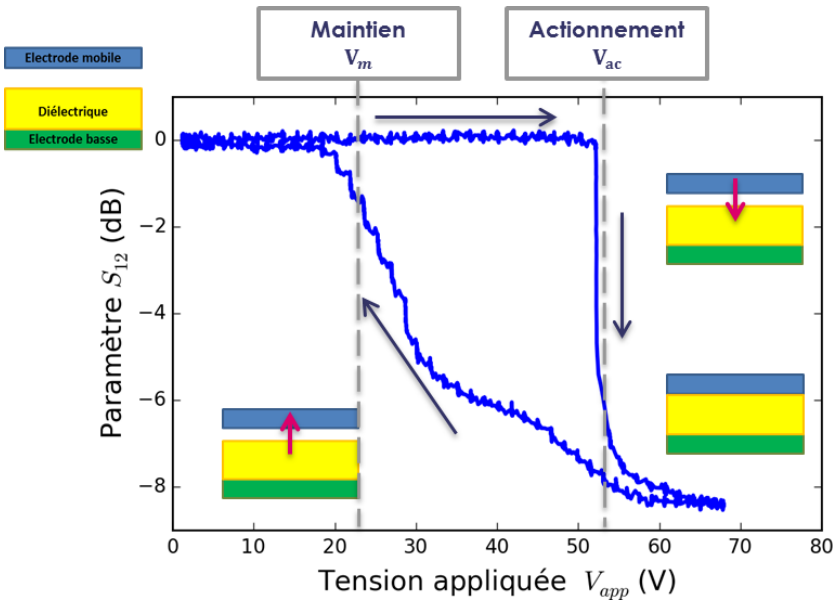


Figure 100 : Isolation et mouvement de l'électrode supérieure pour un MEMS RF capacitif

Ces séquences de mesures ont été réalisées sur une plaque contenant des MEMS ; celle dont le dépôt de nitrure de silicium a été effectué par PECVD à 340°C. L'épaisseur de la couche mince de diélectrique est de 255 nm, l'électrode inférieure est constituée de 500 nm d'or et d'une couche d'accroche de 10 nm de titane, l'électrode supérieure est constituée de 200 nm de titane-tungstène (couche d'accroche) et 500 nm d'or. A l'état haut le gap entre le diélectrique et l'électrode supérieure est de 2,9 µm, la surface de contact électrode-diélectrique est de 100 µm par 280 µm. La tension d'actionnement initiale $V_{ac}(t_0)$ des composants testés est évaluée à 54 V.

Les dispositifs testés ont été soumis à plusieurs millions de créneaux de tension de 60 V à une fréquence de 5 kHz avec un rapport cyclique de 50%.

L'évolution de l'isolation en fonction du temps a été mesurée à 60 V à chaque rampe de tension triangulaire, régulièrement réalisée pendant le test (Figure 101). On observe que l'isolation diminue au début du test, la surface de contact entre la membrane et le diélectrique diminue. Après 2,5 millions de cycles, l'isolation chute brutalement car la membrane ne peut plus s'abaisser à 60 V ; elle n'entre plus en contact avec le diélectrique. La tension appliquée n'est alors pas suffisante pour assurer la commutation du MEMS. La rampe de tension triangulaire, permet aussi d'observer l'évolution de la tension d'actionnement en fonction du temps (Figure 102). Celle-ci augmente avec le nombre de cycles jusqu'à la défaillance du dispositif.

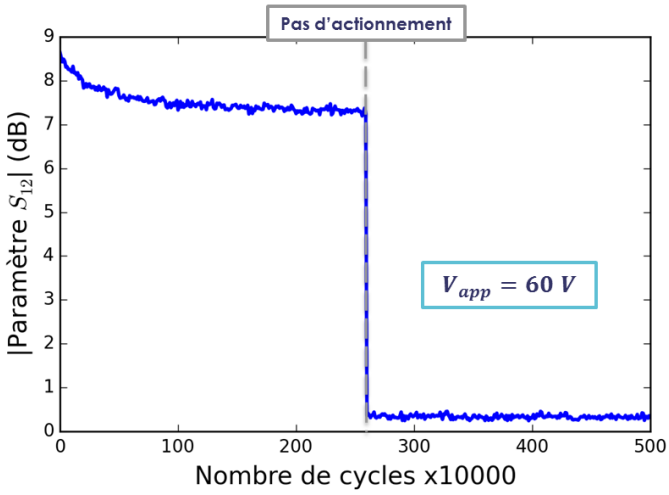


Figure 101 : Isolation mesurée à 60 V en fonction du nombre de cycles - Echantillon : Si_3N_4 déposé par PECVD à 340°C

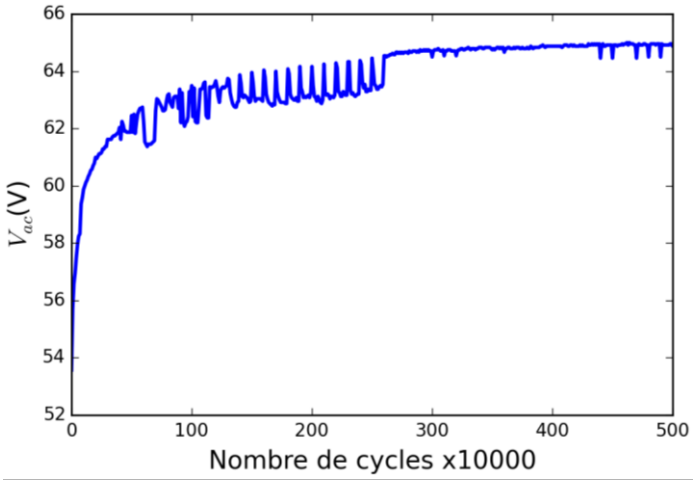


Figure 102 : Evolution de la tension d'actionnement en fonction du nombre de cycles pour une tension appliquée de 60 V - Echantillon : Si_3N_4 déposé par PECVD à 340°C

En traçant l'évolution de l'isolation suivant la tension appliquée pour la première rampe triangulaire, c'est-à-dire avant stress, et pour celle après 5 millions de cycles, on observe que toute la courbe est décalée vers les tensions plus élevées sans subir de déformation (Figure 103). Le MEMS ne peut plus s'actionner car la tension d'actionnement a dépassé la tension appliquée.

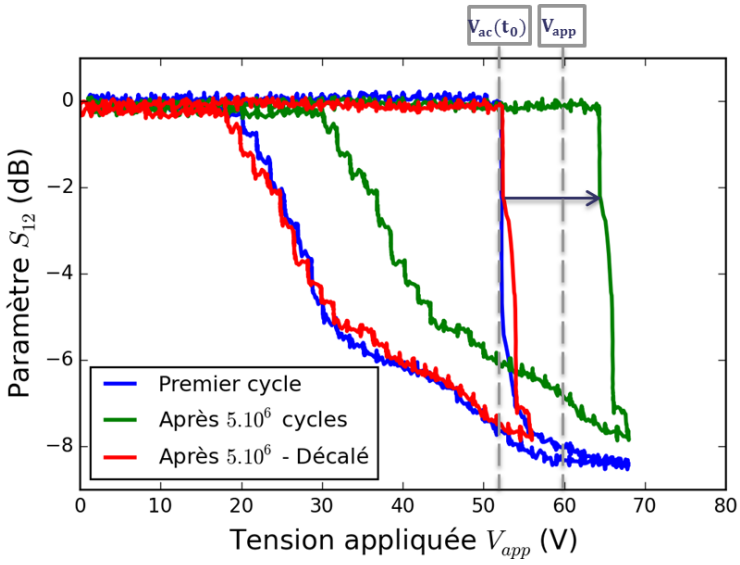


Figure 103 : Isolation en fonction de la tension appliquée pour un MEMS RF capacitif à l'état initial et après plusieurs millions de cycles - Echantillon : Si_3N_4 déposé par PECVD à 340°C

Dans la littérature, plusieurs causes sont proposées pour expliquer la variation de tension d'actionnement des MEMS RF lors de leur utilisation. Il peut s'agir par exemple d'une défaillance mécanique au niveau de la membrane ou d'une défaillance due à une accumulation de charges dans le diélectrique [151] [152] [153]. Afin de d'identifier le type de défaillance en jeu, d'autres séries de tests ont été effectuées. Si le problème est d'ordre mécanique (dégradation de la membrane), la défaillance du MEMS est irréversible. Si le décalage de la tension d'actionnement résulte d'une accumulation de charges dans l'isolant, le dispositif peut à nouveau fonctionner après un temps de pause suffisamment long (permettant à l'isolant de se décharger) ou si l'actionnement est réalisé avec une valeur de tension de signe opposé [77] [154].

Dans le cas des mesures réalisées à TRT, la défaillance du dispositif survient après environ 2,5 millions de cycles lors du premier test de cyclage. Le MEMS est alors laissé au repos pendant une journée pour réaliser une nouvelle série de cycles mais le composant ne s'actionne toujours pas à $60\ \mathrm{V}$ dès le premier cycle. En reproduisant le premier test avec une tension de $-60\ \mathrm{V}$, le MEMS s'actionne à nouveau environ 2,5 millions de fois puis entre en défaillance (Figure 104). Ainsi, un dispositif ne fonctionnant plus à $60\ \mathrm{V}$, peut fonctionner à $-60\ \mathrm{V}$. Ce résultat exclut donc une dégradation mécanique de la membrane, phénomène irréversible. En cas de défaillance mécanique, le signe de la tension appliquée pour actionner la membrane n'impacterait pas le comportement du dispositif. Dans le cas étudié, la défaillance provient donc de la charge du diélectrique.

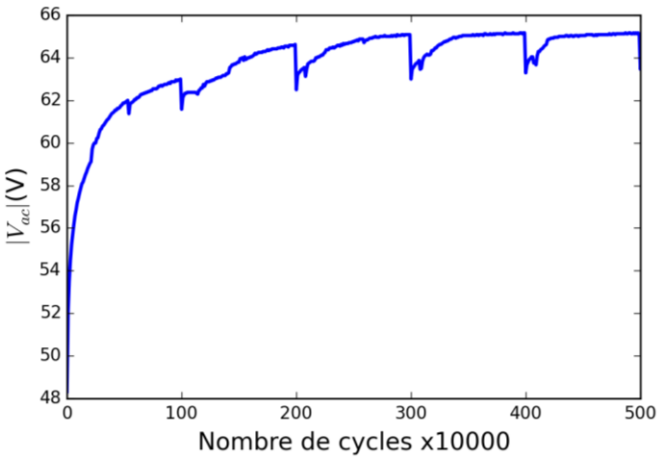


Figure 104 : Evolution de la tension d'actionnement en fonction du nombre de cycles pour une tension appliquée de -60 V - Echantillon : Si_3N_4 déposé par PECVD à 340°C

Le décalage du cycle observé sur les mesures (Figure 103) est associé au chargement du diélectrique [8] [14] [155]. De plus, le cycle est uniquement translaté en tension et non déformé ; ceci indique que la charge est répartie de manière uniforme dans le plan du diélectrique [156]. En

effet, si elle n'était pas uniformément répartie dans le plan du diélectrique, l'électrode supérieure entrerait en contact de manière oblique avec le diélectrique. Ceci impacterait directement la valeur de la capacité et donc l'isolation du dispositif. La courbe se décale vers les tensions plus élevées, la charge contenue dans le diélectrique est négative [40] [77]. La tension est appliquée sur l'électrode inférieure, la charge est injectée par la cathode correspondant donc à l'électrode supérieure.

Simulation de l'évolution temporelle de la tension d'actionnement

Comparaisons simulation-mesure

Le modèle donne accès à la localisation de la charge dans toute l'épaisseur du diélectrique en fonction du temps. L'impact de cette charge sur la tension d'actionnement peut donc être estimé lors des simulations. Le calcul est réalisé en sommant toutes les contributions de la charge sur les N tranches du diélectrique [13] [40]:

$$\Delta V = \frac{1}{\varepsilon_0 \varepsilon_r} \sum_i \rho_i \, dx \, d_i \tag{70}$$

avec d_i la distance entre l'électrode inférieure et la densité surfacique de charges ρ_i (Figure 105). Le modèle étant unidimensionnel, la charge est supposée répartie uniformément dans le plan du diélectrique. Pour les dispositifs étudiés, les mesures montrent que la charge injectée dans le diélectrique est uniformément répartie. Les résultats de simulation peuvent donc être comparés aux résultats de mesures.

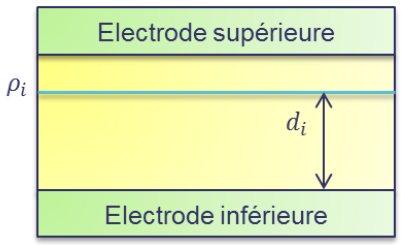


Figure 105 : Calcul du décalage de la tension d'actionnement

Lorsque le MEMS est à l'état bas, des électrons peuvent être injectés dans le diélectrique par l'électrode supérieure. Lorsque la tension est coupée, l'électrode remonte, aucun électron ne peut être injecté mais ils peuvent se déplacer dans le diélectrique. On observe sur la Figure 102 que la tension d'actionnement ne diminue pas après la défaillance du dispositif. Le diélectrique ne semble pas se décharger, les porteurs ne peuvent pas atteindre l'électrode inférieure. Ceci est

confirmé par l'impossibilité d'actionner le composant à 60 V après une journée de repos. La décharge s'effectue très lentement, elle est donc négligée pour les simulations de cyclage d'un MEMS. Seul le temps d'actionnement cumulé est considéré. Mellé *et al.* [78] utilisent également cette approche en considérant uniquement le temps total de stress du diélectrique pour simuler le décalage de la tension d'actionnement.

Des simulations ont été réalisées afin d'étudier l'évolution de la tension d'actionnement en fonction du temps. Le modèle permet de reproduire les résultats de mesures de tension d'actionnement en fonction du temps pour plusieurs valeurs de champ électrique appliqué (Figure 106). Les valeurs de paramètres sont données dans le Tableau 16.

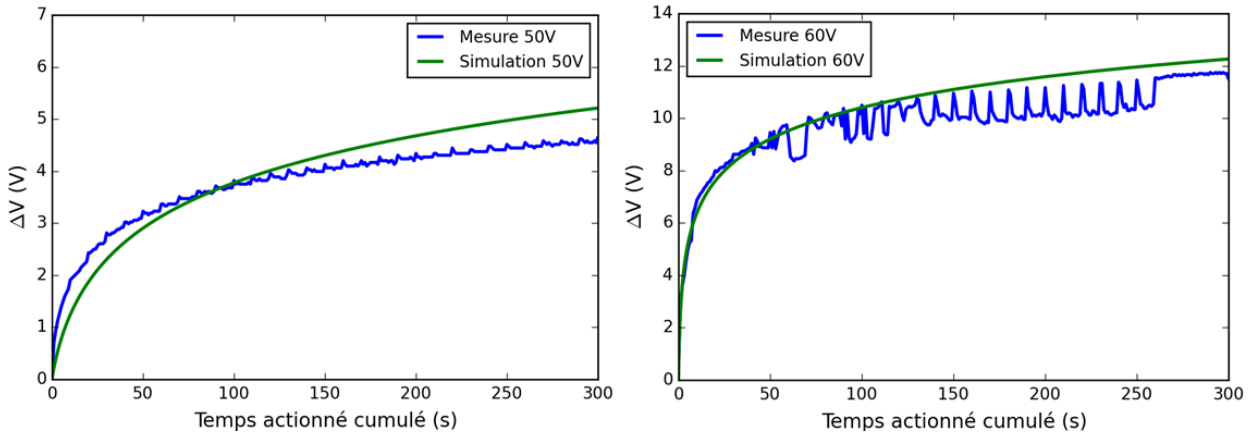


Figure 106 : Comparaison simulation-mesure du décalage de la tension d'actionnement - Echantillon : Si_3N_4 déposé par PECVD à 340°C

Paramètre	Hauteur de la barrière TAT ϕ_B	Hauteur de la barrière Schottky ϕ_0	Densité de pièges N_p (pour $dz = 0{,}5$ Å)	Energie de pièges ϕ_p
Valeur	1,48 eV	1,3 eV	$1 \times 10^{16}/\mathrm{m}^2$	0,7 eV

Section efficace de capture S_p	Permittivité dans le volume	Permittivité aux interfaces	Masse effective m^*	Mobilité μ
$0{,}3 \times 10^{-23}\mathrm{m}^2$	6,9	7,5	$0{,}6\ \mathrm{m}_0$	$1.10^{-16}\mathrm{m}^2.\mathrm{V}^{-1}.\mathrm{s}^{-1}$

Tableau 16 : Paramètres utilisés pour les simulations du décalage de la tension d'actionnement en fonction du temps pour les MEMS RF capacitifs - Echantillon : Si_3N_4 déposé par PECVD à 340°C

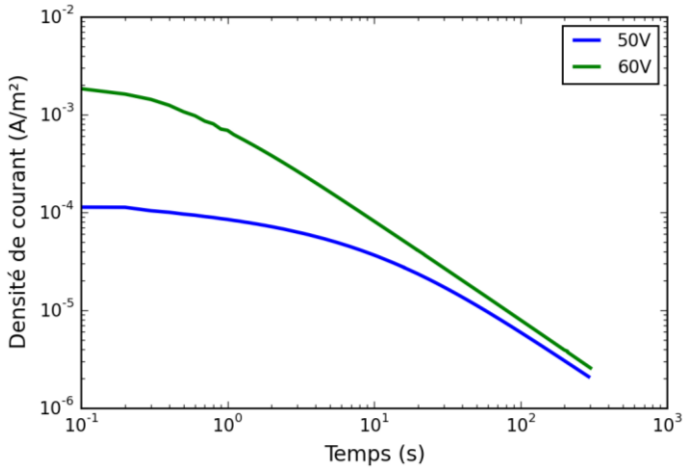


Figure 107 : Courant simulé pour les MEMS RF capacitifs - Echantillon : Si_3N_4 déposé par PECVD à 340°C

Discussion

De la même façon que pour l'étude des capacités MIM, certaines valeurs de paramètres utilisées pour les simulations ont été déterminées grâce aux mesures, comme l'énergie moyenne du piège ou la permittivité du diélectrique (Tableau 10 et Tableau 11), ou grâce aux données de la littérature comme la masse effective des porteurs ou la densité de pièges. D'autres ont été

ajustées avec les mesures de décalage de la tension d'actionnement. Avec ces paramètres, les valeurs de courant obtenues par les simulations sont faibles et diminuent très rapidement (Figure 107). Le courant traversant les MEMS RF capacitifs lors d'une phase de charge semble donc différent de celui dans les capacités MIM. Ceci a précédemment été observé dans la littérature [40].

Plusieurs hypothèses peuvent être envisagées pour comprendre ces différences entre le courant dans une capacité MIM et le courant dans un MEMS RF. Le modèle ne prend pas en compte certains phénomènes physiques liés à l'interface particulière entre le diélectrique et l'électrode supérieure pour un MEMS RF. Celui-ci a été développé pour des capacités MIM ; le contact entre l'électrode supérieure, électrode d'injection des porteurs dans le cas étudié, et le diélectrique est différent pour une capacité et pour un MEMS. En effet, dans le cas du MEMS, l'électrode supérieure entre en contact avec le diélectrique lors de l'actionnement mais il n y a pas de réaction chimique à l'interface métal-isolant lors du contact comme pour la capacité MIM. De plus, du fait de la rugosité, le contact entre les matériaux est ponctuel. L'interface est donc nécessairement différente, les états de surface et mécanismes d'injection ne sont pas les mêmes. Différents effets liés à l'environnement de mesure, à la présence du gap d'air ou aux étapes de fabrication spécifiques aux MEMS RF capacitifs, peuvent impacter la zone d'interface entre la membrane et l'isolant.

La rugosité peut ainsi participer à ces écarts de comportement pour les deux familles de composants. Pour les capacités MIM, le contact entre le diélectrique et les électrodes est parfait au sens où il n y a pas d'air entre le métal et l'isolant. Pour les MEMS, l'aire réelle de contact électrode-diélectrique est plus faible que l'aire du film diélectrique du fait de la rugosité. Aux points de contacts entre le diélectrique et l'électrode supérieure il peut y avoir injection de porteurs dans le diélectrique par des effets tunnel ou thermique, équivalents aux mécanismes Schottky ou TAT, si le contact est suffisamment proche d'une interface de type MIM. Dans les zones où le métal est en contact avec de l'air, les modes de transport de charges sont différents. Selon les travaux de Taleb *et al*. sur le contact métal-polyéthylène dans une capacité [58], plus la rugosité augmente, plus l'injection de porteurs augmente. La rugosité aux interfaces perturbe le champ électrique, elle peut entraîner une augmentation locale du champ électrique dans le diélectrique par effet de pointe, et donc une augmentation de l'injection de porteurs. Pour un contact de type MEMS, c'est-à-dire avec un gap d'air, la rugosité induit une augmentation du champ électrique dans l'air et une diminution du champ électrique dans le diélectrique [93]. Cette augmentation du champ électrique peut déclencher une décharge dans l'air. De fortes décharges électrostatiques causent en général des dégâts irréversibles sur la membrane [157]. Dans ce cas, le composant se dégrade et entre en défaillance pour des raisons mécaniques ; la membrane n'est plus fonctionnelle. Cet effet n'a pas été observé pour les composants testés durant ces travaux. Une décharge partielle peut aussi se produire dans l'air, des particules sont alors ionisées et dérivent entre le métal et le diélectrique sous l'effet du champ électrique [158].

Ces charges peuvent alors se déposer à la surface du diélectrique et être injectées dans le matériau. Les charges injectées dans le diélectrique proviennent en partie du métal de l'électrode mais aussi de l'air.

Différentes étapes de fabrication sont nécessaires à l'obtention de l'électrode mobile. Une couche de résine sacrificielle est notamment utilisée pour le dépôt de cette électrode puis éliminée pour libérer la membrane. Durant ces étapes de fabrication, des contaminants peuvent s'accumuler à la surface du diélectrique [54]. La structure en pont du MEMS RF capacitif le rend sensible à l'humidité, ceci modifie les phénomènes de transport de charges à l'interface supérieure du diélectrique. Une étude réalisée par Peng *et al.* [159] montre que la charge accumulée dans cette zone de l'isolant augmente avec l'humidité ambiante; ces résultats dépendent aussi du type de matériau diélectrique. Les composants peuvent être encapsulés pour limiter cet effet lors de leur utilisation [152].

Finalement, le modèle permet de reproduire l'évolution de la tension d'actionnement des MEMS en fonction du temps sans prendre en compte certains phénomènes physiques spécifiques aux interfaces. Ceux-ci pourraient être considérés dans le modèle de transport de charges par l'introduction d'un milieu effectif comprenant du diélectrique et de l'air à l'interface entre le diélectrique et l'électrode mobile.

Optimisation de la durée de vie

Comme présenté dans la première partie de ce chapitre, l'une des approches pour optimiser les performances d'un dispositif est de travailler sur les propriétés des matériaux utilisés. Elle permet de proposer un matériau idéal suivant les applications visées. Pour le cas des MEMS RF capacitif, le matériau doit permettre de limiter l'accumulation de la charge. Une autre voie consiste à étudier le mode d'utilisation du composant afin d'optimiser ses performances et sa durée de vie.

Les comparaisons entre les mesures de tension d'actionnement et les simulations ont permis d'obtenir les paramètres des matériaux des MEMS étudiés. A partir de ces valeurs, il est possible d'effectuer de nouvelles simulations pour ces dispositifs afin d'évaluer la quantité de charges dans le diélectrique et le décalage induit suivant la tension appliquée (Figure 108). Ainsi, pour les matériaux utilisés dans ce composant, le décalage de la tension d'actionnement peut varier de quelques volts pour un stress de 50 V pendant 300 s à environ 25 V pour un stress de 75 V pendant 300 s. Plus la tension appliquée augmente, plus la quantité de charges injectées est élevée et plus le décalage généré est important.

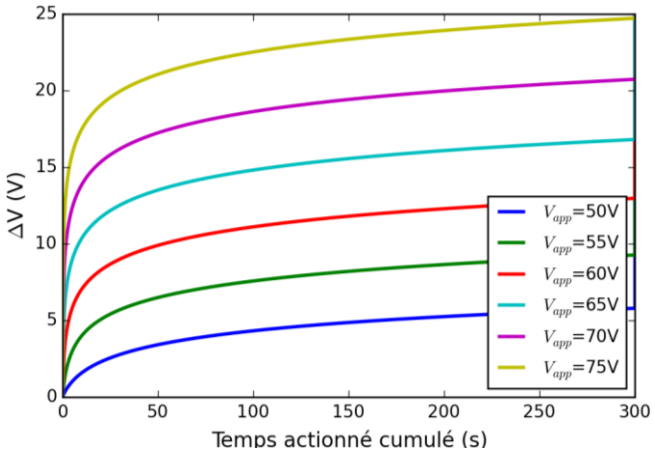


Figure 108 : Décalage de la tension d 'actionnement en fonction du temps actionné cumulé suivant la valeur de tension appliquée

Si les mêmes matériaux sont utilisés pour une structure de MEMS imposant un actionnement de la membrane à une autre valeur de tension à l'état initial, la simulation peut aider à déterminer la valeur optimale de tension à appliquer pour retarder la défaillance du composant. Ainsi, si $V_{ac}(t_0) = 50$ V et si $V_{app} = 55$ V, le composant ne s'actionnera plus après 19 s sous stress électrique (Figure 109). La membrane ne s'actionne plus lorsque le critère suivant n'est pas respecté :

$$V_{ac}(t_0) + \Delta V \leq V_{app} \tag{71}$$

Pour cet exemple, on observe que plus la tension appliquée lors de l'utilisation du composant est élevée par rapport à la tension d'actionnement initiale, plus ce critère sur la tension d'actionnement sera longtemps respecté (Figure 110).

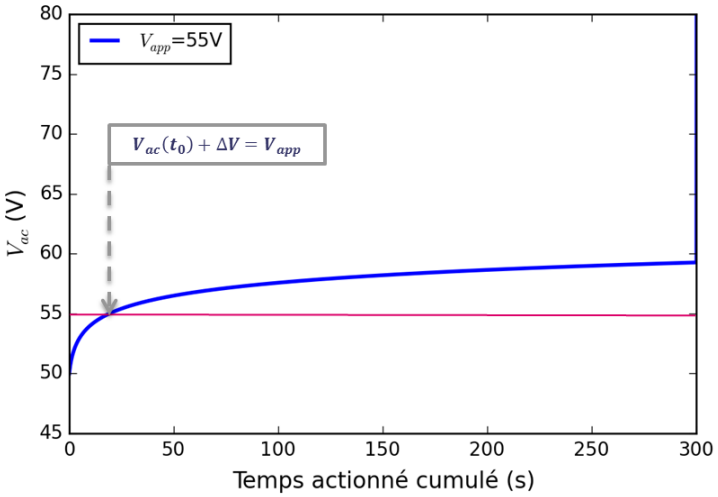


Figure 109 : Décalage de la tension d'actionnement en fonction du temps actionné cumulé pour une tension appliquée de 55 V et une tension d'actionnement initiale de 50 V

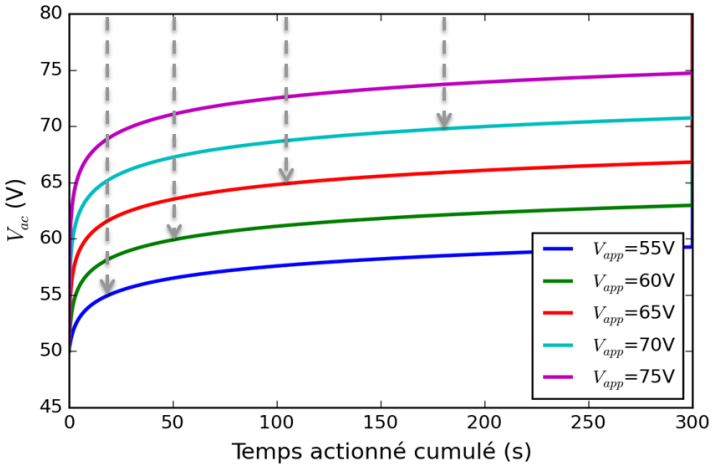


Figure 110 : Décalage de la tension d'actionnement en fonction du temps actionné cumulé suivant la valeur de tension appliquée pour une tension d'actionnement initiale de 50 V

Une valeur de tension appliquée très supérieure à la tension d'actionnement permet donc d'allonger la durée de vie du composant. Cependant, il est nécessaire de tenir compte de deux autres grandeurs pour optimiser les performances d'un MEMS RF capacitif : la tension de claquage du diélectrique et la tension de maintien de la membrane. En effet, si la tension appliquée est trop élevée, le matériau diélectrique peut se dégrader dans le temps et finalement ne plus remplir sa fonction d'isolant en cas de claquage. De plus, si le décalage ΔV devient supérieur à la tension de maintien V_m, la membrane reste à l'état bas lorsque la tension appliquée

est nulle (Figure 111) [14]. On observe alors un collage de la membrane si le critère suivant n'est pas respecté :

$$-V_m + \Delta V \leq 0 \tag{72}$$

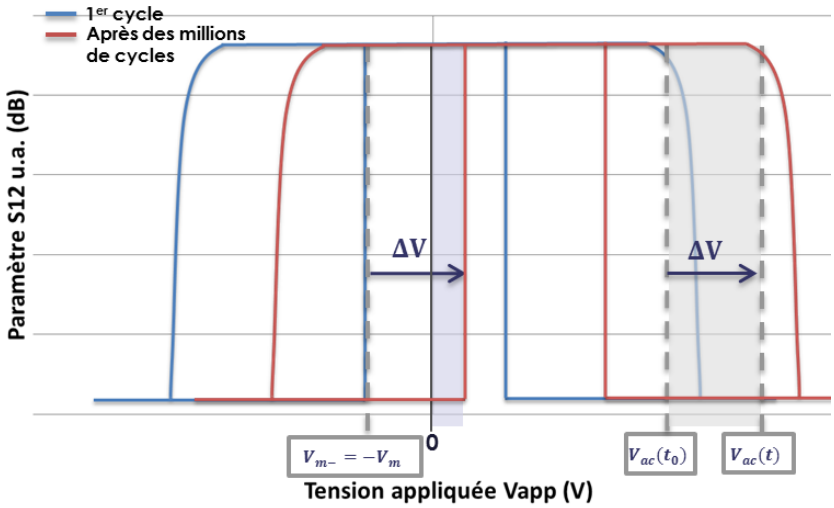


Figure 111 : Schéma du décalage du cycle complet

Connaissant la valeur de la tension d'actionnement à l'état initial ainsi que la valeur de la tension de maintien, toutes deux imposées par la structure du composant, une valeur de tension optimale d'utilisation peut être déterminée. Grâce aux résultats de simulations, il est possible de tracer un diagramme représentant la durée de respect des critères présentés précédemment (Equations (71) et (72)) en fonction de la tension appliquée sur le dispositif (Figure 112). Pour le cas étudié, si $V_{ac}(t_0) = 50$ V et $V_m = 10$ V, la tension d'utilisation optimale du composant est de 60 V. Pour une forme de composant et un ensemble de matériaux donnés, la simulation permet donc d'obtenir la valeur de tension à appliquer pour optimiser la durée de vie d'un MEMS RF capacitif. Ces résultats peuvent aider à la conception des composants suivant les matériaux imposés.

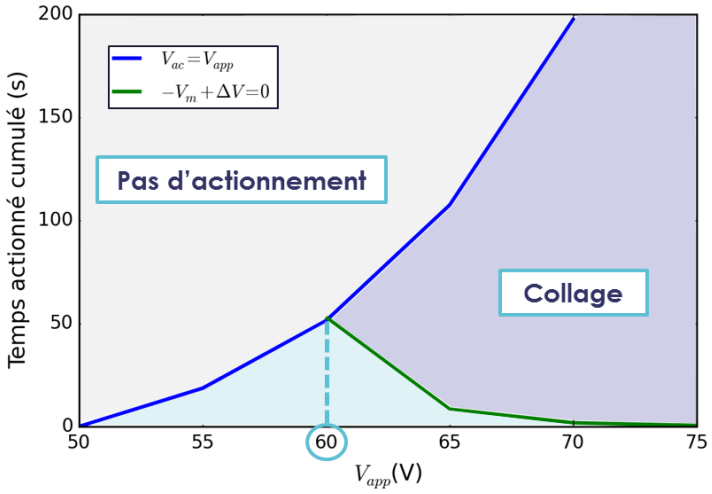


Figure 112 : Détermination du point optimal de fonctionnement d'un dispositif MEMS capacitif

3) Synthèse

Le modèle développé pendant cette thèse peut être utilisé pour choisir les matériaux et contribuer au dimensionnement de composants selon leur mode d'utilisation. En effet, les résultats de simulation peuvent servir d'outil de prévision de la durée de vie des composants suivant leurs propriétés et les applications visées.

Connaissant les propriétés de l'isolant et des métaux des électrodes, les simulations permettent de déterminer les courants de fuite et la quantité de charges dans la couche diélectrique lors de l'utilisation du dispositif. La distribution spatiale de charges dans le diélectrique est donnée par le calcul ; ainsi le décalage de la tension d'actionnement des MEMS RF induit par l'accumulation de charges peut par exemple être évalué. Si les matériaux ou leurs caractéristiques peuvent être modifiés, il est possible de tester ces variations de propriétés sur la fiabilité des composants et ainsi choisir le diélectrique le plus adapté ou encore développer l'utilisation de nouveaux matériaux. Les résultats de simulation aident à définir le matériau diélectrique idéal pour améliorer les performances des composants étudiés. Si les matériaux sont imposés par les contraintes technologiques ou d'utilisation, l'évolution temporelle des performances du composant peut être évaluée en fonction du mode d'utilisation. En effet, en réalisant des simulations, il est par exemple possible de déterminer la valeur de tension à appliquer pour actionner un MEMS RF capacitif et optimiser sa durée de vie pour une structure donnée. Les résultats peuvent finalement être utilisés à la fois pour faire de l'ingénierie de matériaux mais aussi pour aider à la conception de composants afin d'améliorer leurs performances et leur durée de vie.

Conclusion et perspectives

Les matériaux diélectriques sont présents dans de nombreux composants en microélectronique et peuvent être sources de défaillances pour ces dispositifs. Différents critères sont importants à prendre en compte pour le choix des diélectriques intégrés dans ces composants : la valeur de permittivité dans la bande de fréquences d'utilisation, la tension de claquage, les mécanismes de transport de charges dans ce matériau ou encore les méthodes de dépôts utilisées pour synthétiser ces diélectriques. L'objectif principal de ce travail de thèse est la compréhension et la modélisation des phénomènes de transport de charges dans les diélectriques pour l'amélioration de la fiabilité de composants capacitifs.

Le premier chapitre de ce mémoire est tout d'abord dédié à la présentation des caractéristiques des matériaux diélectriques. L'impact de leur vieillissement, relatif à l'accumulation de charges, sur les performances de composants électroniques est ensuite exposé. Ceci permet ainsi d'introduire le contexte et les applications industrielles de ce travail de thèse. Puis les mécanismes de transports de charges dans les composants capacitifs ainsi que les modèles proposés dans la littérature pour simuler ces phénomènes ou étudier l'effet de l'accumulation de charges sur la durée de vie de composants électroniques sont détaillés.

Le second chapitre s'intéresse quant à lui à la caractérisation des matériaux diélectriques. L'accumulation de charges dans l'isolant est une des causes de défaillance de certains dispositifs électroniques. Pour appréhender l'apparition de ce mode de défaillance et ainsi améliorer la durée de vie de ces dispositifs, il est nécessaire de mieux comprendre les mécanismes de transport électronique et d'accumulation de charges dans les diélectriques. Cette étape permet d'étudier les caractéristiques des matériaux pour ensuite élaborer un modèle physique représentatif des phénomènes de transport de charges. Les composants ainsi que le diélectrique étudiés, du nitrure de silicium, sont tout d'abord présentés. Des analyses par faisceaux d'ions, réalisées à l'Institut des Nanosciences de Paris, ainsi que des analyses FTIR ont permis d'obtenir la composition et la structure des isolants. Cette étude montre que les couches minces de nitrure de silicium étudiées ne sont pas stœchiométriques et contiennent de l'hydrogène (10% à 20% suivant le dépôt) et de l'oxygène (de 1% à 2%). Des mesures d'impédance sur des capacités MIM et de paramètres S sur des capacités adaptées aux mesures hyperfréquences ont montré que la permittivité du nitrure de silicium utilisé varie très peu sur une large bande de fréquences ($1\ \mathrm{Hz}$ et $10\ \mathrm{GHz}$). Dans ce cas, seules les charges extrinsèques, c'est-à-dire injectées dans le diélectrique, sont considérées pour la modélisation de la charge du matériau sous champ électrique. La valeur de la partie réelle de la permittivité est évaluée à environ 7 pour les différents dépôts. Des mesures de courant ont été réalisées sur des capacités MIM pour mettre en évidence la présence de certains mécanismes de transport de charges. Ceci a permis d'identifier

le mécanisme d'injection Schottky pour des champs électriques inférieurs à 3 MV/cm et le mécanisme Frenkel-Poole dans le volume du diélectrique pour des champs électrique supérieurs à 3 MV/cm. La valeur de l'énergie moyenne des pièges dans les couches minces diélectriques a ainsi été estimée grâce aux mesures de courant contrôlées en température (de 0,68 eV à 0,77 eV suivant l'échantillon). Des mesures de courant thermo-stimulé ont été menées pour pouvoir déterminer plus finement les différents niveaux de pièges dans les films de nitrure de silicium. Cependant, cette approche expérimentale n'a pas fourni de résultats exploitables. Ces résultats expérimentaux conduisent à une meilleure connaissance des caractéristiques des échantillons utilisés. De plus, ces informations ainsi qu'une étude bibliographique ont ensuite permis de concevoir et paramétrer le modèle de transport de charges.

Le troisième chapitre est consacré à la présentation du modèle de transport de charges développé pour les diélectriques sous contrainte électrique. Basé sur les équations de Maxwell et de conservation de la charge, ce modèle prend en compte des mécanismes de transport par effet thermique et par effet tunnel. Les simulations réalisées donnent accès à différentes grandeurs physiques en fonction du temps et de la distance aux électrodes. Grâce à ces calculs, il est possible de déterminer les valeurs de champ électrique dans l'isolant, les courants ou encore la localisation et la quantité de charges stockées dans le matériau. Le programme est aisément modifiable suivant le diélectrique et l'électrode utilisés dans le dispositif. En effet, il est possible d'ajouter des mécanismes de transport ou de modifier ceux déjà présents, et de faire varier les paramètres physiques associés à l'isolant et au matériau constituant l'électrode. Les conditions d'utilisation et l'impact des phases de décharge du diélectrique peuvent aussi être testés. Cette étude permet d'évaluer l'impact des propriétés des matériaux utilisés dans les composants électroniques capacitifs sur l'accumulation de charges dans le diélectrique pendant leur durée de vie. Des modes de transport comme le courant tunnel entre pièges du diélectrique ou la conduction par les ions ne sont pas considérés dans le modèle. L'ajout de mécanismes de transport pourrait permettre d'adresser d'autres matériaux diélectriques plus complexes couramment utilisés en microélectronique comme par exemple le dioxyde de titane ou des diélectriques ternaires.

Le quatrième chapitre développe des modes d'utilisation du modèle pour l'amélioration de la fiabilité et de la durée de vie des composants capacitifs. Il s'intéresse tout d'abord au cas des capacités MIM. Des mesures de courant sont comparées aux résultats de simulation afin d'évaluer la pertinence du modèle. Le modèle permet de reproduire l'ordre de grandeur des résultats expérimentaux pour différents champs électriques appliqués aux capacités. Les écarts peuvent être expliqués par certaines hypothèses faites pour réaliser le modèle. Le matériau diélectrique est considéré comme homogène et le modèle est unidimensionnel ; il représente les propriétés moyennes du matériau. Les résultats de simulation sont ensuite utilisés pour proposer des matériaux permettant de limiter les courants de fuite et l'accumulation de charges dans les capacités MIM. Le second cas étudié dans ce chapitre est celui des MEMS RF capacitifs

comportant du nitrure de silicium comme film diélectrique. L'évolution de la tension d'actionnement en fonction du temps pour les dispositifs testés est attribuée à l'accumulation de la charge dans la couche d'isolant. Des simulations ont permis de reproduire les résultats de mesures de tension d'actionnement effectuées sur ces composants. Le modèle est alors employé comme outil d'évaluation et d'optimisation de leurs performances. En effet, les résultats de simulation permettent de déterminer la valeur de tension à appliquer à ces composants pour maximiser leur durée de vie. Le modèle peut ainsi être utilisé pour la conception de matériaux diélectriques et le dimensionnement de composants capacitifs.

Les résultats expérimentaux et l'étude bibliographique ont permis de développer un modèle de transport de charges dans les diélectriques sous stress électrique utilisable pour améliorer les performances de composants capacitifs. Ce modèle pourrait être enrichi avec d'autres mécanismes de transport pour être adapté à de nombreux matériaux diélectriques. La modélisation des phénomènes physiques aux interfaces diélectrique-diélectrique serait d'un grand intérêt pour la compréhension du transport de charges dans les isolants multi-couches actuellement développés pour la microélectronique. Le modèle est ici appliqué aux films diélectriques d'épaisseurs de l'ordre de la centaine de nanomètres. Il serait intéressant d'étudier le transport et le stockage de charges dans des films plus minces (de l'ordre de quelques nanomètres) employés pour les mémoires, les capacités MOS ou encore les transistors. Cette étude pourra alors être utilisée pour améliorer la compréhension des phénomènes de claquage dans les diélectriques ainsi que la dérive temporelle des performances de certains composants. Ces travaux ouvrent la voie à l'étude de la fiabilité de nombreux composants en microélectronique comportant des couches minces diélectriques et sensibles à l'accumulation de charges.

Bibliographie

[1] G.E.Moore, «Progress in Digital Integrated Electronics,» *IEEE International Electron Devices Meeting,* pp. 11-13, 1975.

[2] P.Chowdhury, H.C.Barshilia, N.Selvakumar, B.Deepthi, K.S.Rajam, A.R.Chaudhuri et S.B.Krupanidhi, «The structural and electrical properties of TiO2 thin films prepared by thermal oxidation,» *Physica B,* vol. 403, pp. 3718-3723, 2008.

[3] J.Robertson, «Defects and hydrogen in amorphous silicon nitride,» *Philosophical magazine B,* vol. 69, pp. 307-326, 1994.

[4] J.Robertson, K.Xiong et K.-Y.Tse, «Importance of Oxygen Vacancies in High K Gate Dielectrics,» *IEEE International Conference on Integrated Circuit Design and Technology* , pp. 1-4, 2007.

[5] D.-W.Kim, F.E.Prins, T.Kim, S.Hwang, C.H.Lee, D.-L.Kwong et S.K.Banerjee, «Reduction of Charge-Transport Characteristics of SiGe Dot Floating Gate Memory Device With ZrO2 Tunneling Oxide,» *IEEE Transactions on Electron Devices,* vol. 50, pp. 510-513, 2003.

[6] H.Aozasa, I.Fujiwara, A.Nakamura et Y.Komatsu, «Analysis of Carrier Traps in Si3N4 in Oxide/Nitride/Oxide for Metal/Oxide/Nitride/Silicon Nonvolatile Memory,» *Japanese Journal of Applied Physics,* vol. 38, pp. 1441-1447, 1999.

[7] W.Zhou, J.He, X.He, H.Yu et B.Peng, «Dielectric charging induced drift in micro device reliability - A review,» *Microelectronics Reliability,* vol. 66, pp. 1-9, 2016.

[8] S.T.Patton et J.S.Zabinski, «Effects of dielectric charging on fundamental forces and reliability in capacitives microelectromecahnical systems radio frequency switch contacts,» *Journal of Applied Physics,* vol. 99, p. 094910, 2006.

[9] P.S.Das et A.Biswas, «Investigation of charge trapping and breakdown characteristics of sputtered-Y2O3 on n-GaAs substrates,» *Thin Solid Films,* vol. 520, pp. 47-52, 2011.

[10] S.Chakraborty, M.K.Bera, S.Bhattacharya et C.K.Maiti, «Current conduction mechanism in TiO2 gate dielectrics,» *Microelectronic Engineering,* vol. 2005, pp. 188-193, 2005.

[11] L.Sullivan et H.C.Card, «Conduction in amorphous thin films of silicon nitride under non-uniform electric fields,» *Journal of Physics D : Applied Physics,* vol. 7, pp. 1531-1539, 1974.

[12] M.Bose, D.K.Basa et D.N.Bose, «Electrical conduction studies of plasma enhanced chemical vapor deposited silicon nitride films,» *Journal of Vacuum Science & Technology A : Vacuum, Surfaces, and Films,* vol. 19, Jan/Feb 2001.

[13] X.Yuan, Z.Peng, J.C.M.Hwang, D.Forehand et C.L.Goldsmith, «Acceleration of Dielectric Charging in RF MEMS Capacitive Switches,» *IEEE Transactions on Device and Materials Reliability,* vol. 6, pp. 556-563, 2006.

[14] S.Mellé, D.De Conto, L.Mazenq, D.Dubuc, B.Poussard, C.Bordas, K.Grenier, L.Bary, O.Vendier, J.L.Muraro, J.L.Cazaux et R.Plana, «Failure Predictive Model of Capacitive RF-MEMS,» *Microelectronics Reliability,* vol. 45, pp. 1770-1775, 2005.

[15] G.Papaioannou, F.Coccetti et R.Plana, «On the modeling of dielectric charging in RF-MEMS capacitive switches,» *IEEE Topical Meeting on Silicon Monolithic Integrated Circuits in RF Systems (SiRF),* pp. 108-111, 2010.

[16] C.Kittel, Introduction to Solid State Physics, John Wiley & Sons, 2004 (8th edition).

[17] J.G.Simmons, «Conduction in thin dielectric films,» *Journal of Physics D : Applied Physics,* vol. 4, pp. 613-657, 1971.

[18] C.Laurent, «Diélectriques solides et charges d'espace,» *Techniques de l'ingénieur,* 1999.

[19] M.Maglione et R.Decourt, «Matériaux diélectriques,» *Techniques de l'ingénieur,* 2010.

[20] R.Fournié et R.Coelho, «Diélectriques Bases théoriques,» *Techniques de l'ingénieur,* 2000.

[21] C.J.F.Böttcher et P.Bordewijk, Theory of electric polarization (Volume II Dielectrics in time-dependent field), Elsevier Publishing Company, 1978.

[22] J.Y.Kim, H.S.Jung et J.H.No, «Influence of anatase-rutile phase transformation on dielectric properties of sol-gel derived TiO2 thin films,» *Journal of Electroceramics,* vol. 16, pp. 447-451, 2006.

[23] M.Werner, C.Z.Zhao, S.Taylor, P.R.Chalker, K.Black et J.Gaskell, «Permittivity enhancement and dielectric relaxation of doped hafnium and zirconium oxide,» *IEEE Proceedings of the 16th IPFA, China,* pp. 625-627, 2009.

[24] C.Guillermin, «Vieillissement électrique et thermique d'un composite résine époxyde-silice: étude des charges d'espace et de la conduction,» Université Joseph Fourier Grenoble I, 2010.

[25] S.G.Park, B.Magyari-Köpe et Y.Nishi, «Impact of oxygen vacancy ordering on the formation of a conductive filament in TiO2 for resistive switching memory,» *IEEE Electron Device Letters,* vol. 32, pp. 197-199, 2011.

[26] H.M.Kown, S.K.Kown, K.S.Jeong, S.K.Oh, S.H.Oh, W.I.Choi, T.W.Kim, D.H.Kim, C.Y.Kang, .B.H.Lee, P.Kirsch et H.D.Lee, «A correlation between oxygene vacancies and reliability characteristics in a single zirconium oxide Metal-Insulator-Metal capacitor,» *IEEE Transactions on Electron Devices,* vol. 61, pp. 2619-2627, 2014.

[27] B.Hudec, K.Husekova, E.Dobrocka, K.Frohlich, T.Lalinsky, A.Aidla et J.Aarik, «High-permittivity metal-insulator-metal capacitors with TiO2 rutile dielectric and RuO2 bottom electrode,» *Materials Science and Engineering, E-MRS 2009 Spring meeting,* vol. 8, pp. 1-4, 2010.

[28] C.H.Ling, J.Bhaskaran et W.K.Choi, «Characterization of rf-sputtered yttrium oxide films,» *Vacuum,* vol. 43, pp. 753-755, 1992.

[29] J.McPherson, J.Kim, A.Shanware, H.Mogul et J.Rodriguez, «Proposed universal relationship between dielectric breakdwon and dielectric constant,» *International Electron Devices Meeting 2002 (IEDM' 02),* pp. 633-636, 2002.

[30] J.McPherson, J.-Y.Kim, A.Shanware et H.Mogul, «Thermomechanical description of dielectric breakdown in high dielectric constant materials,» *Applied Physics Letters,* vol. 82, pp. 2121-2123, 2003.

[31] J.W.McPherson et H.C.Mogul, «Underlying physics of the thermochemical E model in describing low-field time-dependent dielectric breakdown in SiO2 thin films,» *Journal of Applied Physics,* vol. 84, pp. 1513-1523, 1998.

[32] B.Hudec, K.Husekova, A.Tarre, J.H.Han, S.Han, A.Rosova, W.Lee, A.Kasikov, S.J.Song, J.Aarik, C.S.Hwang et K.Fröhlich, «Electrical properties of TiO2-based MIM capacitors deposited by TiCl4 and TTIP based atomic layer deposition processes,» *Microelectronic Engineering,* vol. 88, pp. 1514-1516, 2011.

[33] S.Lombardo, J.H.Stathis, B.P.Linder, K.L.Pey, F.Palumbo et C.H.Tung, «Dielectric breakdown mechanisms in gate oxides,» *Journal of Applied Physics,* vol. 98, p. 121301,

2005.

[34] M.Carmona, «Fiabilité des transistors MOS des technologies à mémoires non volatiles embarquées,» Université Aix Marseille, 2015.

[35] L.Gerrer, «Impact du claquage progressif de l'oxyde sur le fonctionnement des composants et circuits élémentaires MOS : caractérisation et modélisation,» Université de Grenoble, 2011.

[36] K.M.Farhan Shahil, Md.Nayeem Arafat, Q.D.M.Khosru et M.Rezwan Khan, «Study of charge trapping/detrapping mechanism in SiO2/HfO2 stack gate dielectrics considering two-way detrapping,» *2007 International Workshop on Electron Devices and Semiconductor Technology (EDST),* pp. 117-120, 2007.

[37] S.Zafar, A.Kumar, E.Gusev et E.Cartier, «Threshold Voltage Instabilities in High-k Gate Dielectric Stacks,» *IEEE Transactions on Device and Materials Reliability,* vol. 5, pp. 45-64, 2005.

[38] J.H.You, H.W.Kim, D.H.Kim, T.W.Kim et K.W.Lee, «Effect of the trap density and distribution of the silicon nitride layer on the retention characteristics of charge trap flash memory devices,» *2011 International Conference on Simulation of Semiconductor Processes and Devices,* pp. 199-202, 2011.

[39] N.Tavassolian, «Dielectric charging in capacitive RF MEMS switches with silicon nitride and silicon dioxide,» Georgia Institute of Technology, 2011.

[40] S.Mellé, «Analyse et modélisation des phénomènes de chargement de diélectriques dans les MEMS RF: application à la fiabilité prédictive de micro-commutateurs électromécaniques micro-ondes,» Université Paul Sabatier Toulouse, 2005.

[41] A.Jain, S.Palit et M.Ashraful Alam, «A physics-based predictive modeling framework for dielectric capacitive switches and varactors,» *Journal of Microelectromechanical systems,* vol. 21, pp. 420-430, April 2012.

[42] J.Robertson, «High dielectric cosntant oxides,» *The Eruopean Physical Journal Applied Physics,* vol. 28, pp. 265-291, 2004.

[43] C.H.Ng, K.W.Chew et S.F.Chu, «Characterization and Comparison of PECVD Silicon Nitride and Silicon Oxynitride Dielectric for MIM Capacitors,» *IEEE Electron Device Letters,* vol. 24, pp. 506-508, 2003.

[44] J.Yota, H.Shen et R.Ramanathan, «Chracterization of atomic layer deposition HfO2, Al2O3, and plasma enhanced chemical vapor deposition Si3N4 as metal-insulator-metal capacitor dielectric for GaAs HBT technology,» *Journal of Vacuum Science & technology A: Vacuum, Surfaces, and Films,* vol. 31, pp. 1-9, 2013.

[45] Q.-X.Zhang, B.Zhu, L.-F.Zhang et S.-J.Ding, «Atomic-layer-deposited SiO2/TiO2/SiO2 sandwiched dielectrics for metal-insulator-metal capacitor application,» *Microelectronic Engineering,* vol. 122, pp. 1-4, 2014.

[46] H.-S.Kim, S.A.Campbell et D.C.Gilmer, «Charge Trapping and Degradation in High-Permittivity TiO2 Dielectric Films,» *IEEE Electron Device Letters,* vol. 18, pp. 465-467, 1997.

[47] C.-T.Yeh, S.-M.Chu, T.Louh, L.-W.Yang, T.Yang et K.-C.Chen, «Capacitance Density and Breakdown Voltage Improvement By Optimizing the PECVD Deielctric Film Characteristics in Metal Insulator Metal Capacitors,» *IEEE Joint Symposium 2015 e-Manufacturing and Design Collaboration and International Symposium on Semiconductor Manufacturing,* pp. 1-4, 2015.

[48] G.N.Parsons, J.H.Souk et J.Batey, «Low hydrogen content stoichiometric silicon nitride films deposited by plasma-enhanced chemical vapor deposition,» *Journal of Applied Physics,* vol. 70, pp. 1553-1560, 1991.

[49] Y.Tosaka et S.Nakajima, «Damage Free Etching for Gte Process of GaAs MESFET by ICP Method,» *International Conference on Compound Semiconductor Manufacturing Technology, San Diego,* 2002.

[50] A.Kshirsagar, P.Nyaupane, D.Bodas, S.P.Duttagupta et S.A.Gangal, «Deposition and characterization of low temperature silicon nitride films deposited by inductively coupled plasma CVD,» *Applied Surface Science,* vol. 257, pp. 5052-5058, 2011.

[51] H.Hu, C.Zhu, Y.F.Lu, M.F.Li, B.J.Cho et W.K.Choi, «A High Performance MIM Capacitor Uing HfO2 Dieletrics,» *IEEE ELectron Device Letters* , vol. 23, pp. 514-516, 2002.

[52] H.Takeuchi, A.Wung, X.Sun, R.T.Howe et T.-J.King, «Thermal Budget Limits of Quarter-Micrometer Foundry CMOS for Post-Processing MEMS Devices,» *IEEE Transactions on Electronic Devices,* vol. 52, pp. 2081-2086, 2005.

[53] G.Dutta, N.DasGupta et A.DasGupta, «Low-Temperature ICP-CVD SiNx as Gate Dielectric for GaN-Based MIS-HEMTs,» *IEEE Transactions on Elctron Devices,* vol. 63,

pp. 4693-4701, 2016.

[54] J.J.Yao, «RF MEMS from a device perspective,» *Journal of Micromechanics and Microengineering,* vol. 10, pp. 9-38, 2000.

[55] T.Kagiyama, Y.Tosaka, R.Yamabi et H.Yano, «Study on effect of fabrication process on TDDB lifetime of MIM capacitors,» *International Conference on Compound Semiconductor Manufacturing Technology, Austin,* pp. 51-54, 2007.

[56] H.B.Michaelson, «The work function of the elements and its periodicity,» *Journal of Applied Physics,* vol. 48, pp. 4729-4733, 1977.

[57] S.P.Ogden, J.Borja, J.L.Plawsky, T.-M.Lu, K.B.Yeap et W.N.Gill, «Charge transport model to predict intrinsic reliability for dielectric materials,» *Journal of Applied Physics,* vol. 118, p. 124102, 2015.

[58] M.Taleb, G.Teyssèdre et S.LeRoy, «Role of the Interface on Charge Build-up in a Low-Density Polyethylene: Surface Roughness and Nature of the Electrode,» *IEEE Annual Report Conference on Electrical Insulation and Dielectric Phenomena,* pp. 112-115, 2009.

[59] J.Bardeen, «Surface States and Rectification at a Metal Semi-Conductor Contact,» *Physical Review,* vol. 71, pp. 717-727, 1947.

[60] M.Taleb, G.Teyssèdre, S.Le Roy et C.Laurent, «Modeling of Charge Injection and Extraction in a Metal/Polymer Interface through an Exponential Distribution of Surface States,» *IEEE Transactions on Dielectrics and Electrical Insulation,* vol. 20, pp. 311-319, 2013.

[61] R.Ramprasad, «Phenomenological theory to model leakage currents in metal-insulator-metal capacitor systems,» *Physica Status Solidi (B),* vol. 239, pp. 59-70, 2003.

[62] Y.Segui, «Diélectriques Courants de conduction,» *Techniques de l'ingénieur,* 2000.

[63] J.G.Simmons, «Richardson-Schottky effect in solids,» *Physical Review Letters,* vol. 15, pp. 967-968, 1965.

[64] R.H.Fowler et L.Nordheim, «Electron Emission in Intense Electric Fields,» *Proceedings of the Royal Society of London, Series A, Contanins Papers of Mathematical and Physical Character,* vol. 119, pp. 173-181, 1928.

[65] J.G.Simmons, «Generalized Formula for the Electric Tunnel Effect between Similar

Electrodes Separated by a Thin Insulating Film,» *Journal of Applied Physics,* vol. 34, pp. 1793-1803, 1963.

[66] A.Mangin, «Transport électronique dans des nanocassures pour la réalisation de transistors à molécule unique,» Université Paris Diderot, 2009.

[67] J.Frenkel, «On pre-breakdown phenomena in insulators and electronic semi-conuductors,» *Physical Review,* vol. 54, pp. 647-648, 1938.

[68] N.F.Mott et R.W.Gurney, Electronic processes in ionic crystals, Oxford: Clarendon Press, 1940.

[69] R.W.Herfst, P.G.Steeneken et J.Schmitz, «Time and voltage dependence of dielectric charging in RF MEMS capacitive switches,» *IEEE 45th Annual International Reliability Physics Symposium,* pp. 417-421, 2007.

[70] G.Papaioannou, M.Exarchos, V.Theonas, G.Wang et J.Papapolymerou, «On the dielectric Polarization Effects in Capacitive RF-MEMS Switches,» *IEEE MTT-S International Microwave Symposium Digest,* pp. 761-764, 2005.

[71] M.Koutsoureli, L.Michalas et G.Papaioannou, «Temperature effects on the bulk discharge current of dielectric films of MEMS capacitive switches,» *Microelectronics Reliability,* vol. 52, pp. 2240-2244, 2012.

[72] K.-H.Allers, «Prediction of dielectric reliability from I-V characteristics: Poole-Frenkel conduction mechanism leading to E model for silicon nitride MIM capacitor,» *Microelectronics reliability,* vol. 44, pp. 411-423, 2004.

[73] I.C.Chen, S.Holland et C.Hu, «A quantitative physical model for time-dependent breakdown in SiO2,» *23 rd IEEE International Reliability Physics Symposium,* pp. 24-31, 1985.

[74] S.P.Ogden, T.-M.Lu et J.L.Plawsky, «Electron transport and dielectric breakdown in silicon nitride using a charge transport model,» *Applied Physics Letters,* vol. 109, p. 152904, 2016.

[75] X.Yuan, J.C.M.Hwang, D.Forehand et C.L.Goldsmith, «Modeling and Characterization of Dielectric-Charging Effects in RF MEMS Capacitive Switches,» *2005 IEEE MTT-S International Microwave Symposium Digest,* pp. 753-756, 2005.

[76] Z.Peng, X.Yuan, J.C.M.Hwang, D.Forehand et C.L.Goldsmith, «Top vs. Bottom Charging

of the dielectric in RF MEMS Capacitive Switches,» *Proceedings of Asia-Pacific Microwave Conference 2006,* 2006.

[77] Z.Peng, X.Yuan, J.C.M.Hwang, D.I.Forehand et C.L.Goldsmith, «Superposition Model for Dielectric Charging of RF MEMS Capacitive Switches Under Bipolar Control-Voltage Waveforms,» *IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques,* vol. 55, pp. 2911-2918, 2007.

[78] S.Mellé, D.DeConto, D.Dubuc, K.Grenier, O.Vendier, J.-L.Muraro, J.-L.Cazaux et R.Plana, «Reliability modeling of capacitive RF MEMS,» *IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques,* vol. 53, pp. 3482-3488, November 2005.

[79] A.Koszewski, F.Souchon, Ch.Dieppedale, D.Bloch et T.Ouisse, «Physical model of dielectric charging in MEMS,» *Journal of Micromechanics and Microengineering,* vol. 23, pp. 1-12, 2013.

[80] A.Koszewski, F.Souchon, Ch.Dieppedale et T.Ouisse, «Modeling of dielectric charging in electrostatic MEMS switches,» *Microelectronics Reliability,* vol. 50, pp. 1609-1614, 2010.

[81] S.Palit et M.A.Alam, «Theory of charging and charge transport in "intermediate" thickness dielectrics and its implication for characterization and reliability,» *Journal of Applied Physics,* vol. 111, p. 054112, 2012.

[82] S.Palit, X.Xu, A.Raman et M.A.Alam, «Implications of Rough Dielectric Surfaces on Charging-Adjusted Actuation of RF-MEMS,» *IEEE Electron Device Letters,* vol. 35, pp. 948-950, 2014.

[83] C.Cirba, «Simulation numérique du piégeage et du dépiégeage dans les oxydes de composants MOS,» Université de Montpellier, 1996.

[84] J.M.Alison et R.M.Hill, «A model for bipolar charge transport, trapping and recombination in degassed crosslinked polyethylene,» *Journal of Physics D : Applied Physics,* vol. 27, pp. 1291-1299, 1994.

[85] M.Fukuma, M.Nagao et M.Kosaki, «Numerical analysis on transient space charge distribution in XLPE,» *IEEE 5th International Conference on Conduction and Breakdown in Solid Dielectrics,* pp. 139-143, 1995.

[86] M.Fukuma, M.Nagao et M.Kosaki, «Computer analysis on transient space charge distribution in polymer,» *Proceedings of the 4th International Conference on Porpeties*

and Applications of Dielectric Materials, pp. 24-27, 1994.

[87] K.Kaneko, Y.Suzuoki et T.Mizutani, «Transient current and space charge behaviour due to double injection,» *Proceedings of 2001 International Symposium on Electrical Insulating Materials (ISEIM 2001),* pp. 444-447, 2001.

[88] K.Kaneko, T.Mizutani et Y.Suzuoki, «Computer Simulation on Formation of Space Charge Packets in XLPE Films,» *IEEE Transactions on Dielectrics and Electrical Insulation,* vol. 6, pp. 152-158, 1999.

[89] S.LeRoy, P.Segur, G.Teyssedre et C.Laurent, «Description of bipolar charge transport in polyethylene using a fluid model with a constant mobility: model prediction,» *Journal pf Physics D : Applied Physics,* vol. 37, pp. 298-305, 2004.

[90] S.LeRoy, G. Teyssedre, C.Laurent et P.Segur, «Numerical Model for Studying Dynamic Space Charge Behavior in Polyethylene,» *Proceedings of the 7th International Conference on Properties and Applications of Dielectric Materials,* pp. 859-862, 2003.

[91] F.Boufayed, S.Leroy, G.Teyssèdre, C.Laurent, P.Segur, E.Cooper, L.A.Dissado et G.C.Montanari, «Numerical resolution of charge transport in cross-linked polyethylene by means of a bipolar model with a distribution of traps,» *Proceedings of the 2004 IEEE International Conference on Solid Dielectrics,* vol. 2, pp. 562-566, 2004.

[92] F.Boufayed, S.Leroy, G.Teyssèdre, C.Laurent, P.Ségur, L.A.Dissado et G.C.Montanari, «Simulation of bipolar charge transport in polyethylene featuring trapping and hopping conduction through exponential distribution of traps,» *Proceedings of 2005 International Symposium on Electrical insulating Materials (ISEIM 2005),* vol. 2, pp. 340-343, 2005.

[93] M.Taleb, «Phénomènes aux interfaces des isolants : mesure et simulation,» Université Toulouse III - Paul Sabatier, 2011.

[94] Y.Huang, L.S.Schadler, H.Zhao, Y.wang et C.Brinson, «Modeling of charge transport in nanodielectrics using a coupled finite element and Monte Carlo approach,» *2016 IEEE Conference on Electrical Insulation and Dielectric Phenomena (CEIDP),* pp. 655-658, 2016.

[95] M.H.Lean et W.-P.L.Chu, «Modeling bipolar charge transport in layered polymer films with graded permittivity layers,» *International Journal of Thin Films Science and Technology,* vol. 5, pp. 81-90, 2016.

[96] H.Zhou, K.Elgaid, C.Wilkinson et I.Thayne, «Low-Hydrogen-Content Silicon Nitride Deposited at Room Temperature by Inductively Coupled Plasma Deposition,» *Japanese Journal of Applied Physics,* vol. 45, pp. 8388-8392, 2006.

[97] M.Lamhamdi, J.Guastavino et L.Boudou, «Charging-effects in RF capacitive switches Influence of insulating layers composition,» *Microelectronics Reliability,* vol. 46, pp. 1700-1704, 2006.

[98] J.Robertson et M.J.Powell, «Gap states in silicon nitride,» *Applied Physics Letters,* vol. 44, pp. 415-416, 1984.

[99] J.Robertson, «Defect and impurity states in silicon nitride,» *Journal of Applied Physics,* vol. 54, pp. 4490-4493, 1983.

[100] W.L.Warren, P.M.Lenahan et J.Kanicki, «Electrically neutral nitrogen dangling-bond defects in amorphous hydrogenated silicon nitride thin films,» *Journal of Applied Physics,* vol. 70, pp. 2220-2225, 1991.

[101] J.Robertson, «Electronic structure of silicon nitride,» *Philosophical Magazine B,* vol. 63, pp. 47-77, 1991.

[102] W.L.Warren, J.Robertson et J.Kanicki, «Si and N dangling bond creation in silicon nitride thin films,» *Applied Physics Letters,* vol. 19, pp. 2685-2687, 1993.

[103] W.L.Warren, J.Kanicki, F.C.Rong, E.H.Poindexter et P.J.McWhorter, «Charge trapping centers in N-rich silicon nitride thin films,» *Applied Physics Letters,* vol. 61, pp. 216-218, 1992.

[104] W.L.Warren, J.Kanicki, J.Roertson et P.M.Lenahan, «Energy level of the nitrogen dangling bond in amorphous silicon nitride,» *Applied Physics Letters,* vol. 59, pp. 1699-1701, 1991.

[105] S.Heo, H.Park, J.Chung, H.I.Lee, J.Park, Y.K.Kyoung, Y.S.Kim, K.Kim, S.Byun, W.S.Jeon, G.S.Park, P.Choi, B.-D.Choi, D.Lee, H.Y.Cho et H.J.Kang, «Defect states in amorphous SiNx:H compounds using thermally stimulated exo-electron emission,» *Thin Solid Films,* vol. 616, pp. 850-855, 2016.

[106] E.Papandreou, M.Lamhamdi, C.M.Skoulikidou, P.Pons, G.Papaioannou et R.Plana, «Structure dependant charging process in RF MEMS capacitive switches,» *Microelectronics Reliability,* vol. 47, pp. 1812-1817, 2007.

[107] E.Vianello, F.Driussi, P.Blaise, P.Palestri, D.Esseni, L.Perniola, G.Molas, B.DeSalvo et L.Slemi, «Explanation of the charge trapping properties of silicon nitride storage layers for NVMs - Part II: Atomistic and electrical modeling,» *IEEE Transactions on Electron Devices,* vol. 58, pp. 2490-2499, 2011.

[108] E.Vianello, L.Perniola, P.Blaise, G.Molas, J.P.Colonna, F.Driussi, P.Palestri, D.esseni, L.Selmi, N.Rochat, C.Licitra, D.Lafond, R.Kies, G.Reimbold, B.De Salvo et F.Boulanger, «New insight on the charge trapping mechanisms of SiN-based memory by atomistic simulations and electrical modeling,» *IEEE International Electron Devices Meeting,* pp. 83-86, 2009.

[109] H.J.Stein, S.T.Picraux et P.H.Holloway, «Analyses for Stoichiometry and for Hydrogen and Oxygen in Silicon Nitride Films,» *IEEE Transactions on electron devices,* vol. 25, pp. 1008-1014, 1978.

[110] M.E.Grillo, S.D.Elliott, J.Rodriguez, R.Anez, D.S.Coll, A.Suhane, L.Breuil, A.Arreghini, R.Degraeve, A.Shariq, V.Beyer et M.Czernohorsky, «First-principles study of oxygen and aluminium defects in b-SiN: Compensation and charge trapping,» *Computational Materials Science,* vol. 81, pp. 178-183, 2014.

[111] Y.C.Park, W.B.Jackson, N.M.Johnson et S.B.Hagstrom, «Spatial profiling of electron traps in silicon nitride thin films,» *Journal of Applied Physics,* vol. 68, pp. 5212-5221, 1990.

[112] F.Martin et X.Aymerich, «Characterization of the spatial distribution of traps in Si3N4 by field-assisted discharge of metal-nitride-oxide-semiconductor devices,» *Thin Solid Films,* vol. 221, pp. 147-153, 1992.

[113] S.A.Awan, R.D.Gould et S.Gravano, «Electrical conduction processes in silicon nitride thin films prepared by r.f. magnetron sputtering using nitrogen gas,» *Thin Solid Films,* Vols. %1 sur %2355-356, pp. 456-460, 1999.

[114] K.Maeda et I.Umezu, «Atomic structure and electronic properties of aSiNx:H deposited by radio frequency glow discharge,» *Journal of Applied Physics,* vol. 70, pp. 2745-2754, 1991.

[115] P.Trocellier et P.Trouslard, «Spectrométrie de collisions élastiques et de réactions nucléaires. Théorie,» *Techniques de l'ingénieur,* vol. P2560, pp. 1-31, 2002.

[116] D.V.Tsu, G.Lucovsky et M.J.Mantini, «Local atomic structure in thin films of silicon nitride and silicon diimide produced by remote plasma-enhanced chemical-vapor

deposition,» *Physical Review B,* vol. 33, pp. 7069-7076, 1986.

[117] G.Scardera, T.Puzzer, G.Conibeer et M.A.Green, «Fourier transform infrared spectroscopy of annealed silicon-rich silicon nitride thin films,» *Journal of Applied Physics,* vol. 104, p. 104310, 2008.

[118] L.Chusseau, «Cours d'électronique et de microélectronique de l'Université de Montpellier,» 2006.

[119] A.M.Cowley et S.M.Sze, «Surface States and Barrier Height of Metal-Semiconductor Systems,» *Journal of Applied Physics,* vol. 36, pp. 3212-3220, 1965.

[120] D.V.Geppert, A.M.Cowley et B.V.Dore, «Correlation of Metal-Semiconductir Barrier Height and Metal Work Function; Effects of Surface States,» *Journal of Applied Physics,* vol. 37, pp. 2458-2467, 1966.

[121] S.Habermehl et C.Carmignani, «Correlation of charge transport to local atomic strain in Si-rich silicon nitride thin films,» *Applied Physics Letters,* vol. 80, pp. 261-263, 2002.

[122] S.M.Sze, «Current Transport and Maximum Dielectric Strength of Silicon Nitride Films,» *Journal of Applied Physics,* vol. 38, pp. 2951-2956, 1967.

[123] C.Svensson et I.Lundström, «Trap-assisted charge injection in MNOS structures,» *Journal of Applied Physics,* vol. 44, pp. 4657-4663, 1973.

[124] N.Tavassolian, M.Koutsoureli, G.Papaioannou et J.Papapolymerou, «Optimization of dielectric material stoichiometry for high-reliability capacitive MEMS switches,» *IEEE Microwave and Wireless Components Letters,* vol. 26, pp. 174-176, 2016.

[125] M.Lamhamdi, P.Pons, U.Zaghloul, L.Boudou, F.Coccetti, J.Gustavino, Y.Segui, G.Papaioannou et R.Plana, «Voltage and temperature effect on dielectric charging for RF-MEMS capacitive switches reliability investigation,» *Microelectronics Reliability,* vol. 48, pp. 1248-1252, 2008.

[126] V.Ortiz, J.Nagle, J.-F.Lampin, E.Péronne et A.Alexandrou, «Low-temperature-grown GaAs: Modeling of transient reflectivity experiments,» *Journal of Applied Physics,* vol. 102, p. 043515, 2007.

[127] T.E.Cook, Jr.C.C.Fulton, W.J.Mecouch et R.F.Davis, «Band offset measurments of the Si3N4/GaN (0001) interface,» *Journal of Applied Physics,* vol. 94, pp. 3949-3954, 2003.

[128] V.A.Gritsenko, Yu.N.Novikov, A.V.Shaposhnikov, H.Wong et G.M.Zhidomirov, «Capturing properties of three-fold coordinated silicon atom in silicon nitride : a positive correlation energy model,» *Physic of the Solid State,* vol. 45, pp. 2031-2035, 2003.

[129] V.A.Gritsenko, E.E.Meerson et Y.N.Morokov, «Thermally assisted hole tunneling at the Au-Si3N4 interface and the energy-band diagram of metal-nitride-oxide-semiconductor structures,» *Physical Review B,* vol. 57, 1998.

[130] S.Miyazaki, Y.Ihara et M.Hirose, «Resonant Tunneling Through Amorphous Silicon-Silicon Nitride Double-Barrier Structures,» *Physical Review Letters,* vol. 59, pp. 125-127, 1987.

[131] P.Chapouille, «Fiabilité. Maintenabilité,» *Techniques de l'ingénieur,* vol. T4300, pp. 1-40, 2004.

[132] S.Ramo, «Currents Induced by Electron Motion,» *IEEE Proceedings of the I.R.E.,* vol. 27, pp. 584-585, 1938.

[133] W.Shockley, «Currents to Conductors Induced by a Moving Point Charge,» *Journal of Applied Physics,* vol. 9, pp. 635-636, 1938.

[134] B.R.Rogers, «Underlayer work function effect on nucleation and film morphology of chemical vapor deposited aluminum,» *Thin Solid films,* vol. 408, pp. 87-96, 2002.

[135] N.Gaillard, «Etude des Propriétés Morphologiques, Electriques et Chimiques de l'Interface Métal/Isolant et de leur Impact sur les Performances de la Capacité TiN/Ta2O5/TiN,» Université Joseph Fourier, Grenoble, 2006.

[136] M.Nagao, T.Kimura, Y.Mizuno et M.Kosaki, «Detection of Joule Heating before Dielectric Breakdown in Polyethylene Films,» *IEEE Transactions on Electrical Insulation,* vol. 25, pp. 715-722, 1990.

[137] J.Koch, K.Seidel, W.Weinreich, S.Riedel, J.-C.Chiang et V.Beyer, «Optimized electrode and interface for enhanced reliability of high-k base metal-insulator-metal capacitors,» *Microelectronic Engineering,* vol. 109, pp. 148-151, 2013.

[138] C.Besset, S.Bruyère, S.Blonkowski, S.Crémer et E.Vincent, «MIM capacitance variation under electrical stress,» *Microelectronics Reliability* , vol. 43, pp. 1237-1240, 2003.

[139] C.-C.Hung, A.S.Oates, H.-C.Lin, Y.-E.PercyChang, J.-L.Wang, C.-C.Huang et Y.-W.Yau, «An Innovative Understanding of Metal-Insulator-Metal (MIM)-Capacitor Degradation

Under Constant-Current Stress,» *IEEE Transactions on Device and Materials Reliability,* vol. 7, pp. 462-467, 2007.

[140] J.Scrapulla, E.D.Ahlers, D.C.Eng, D.L.Leung, S.R.Olson et C.-S.Wu, «Dielectric Breakdown, Defects and Reliability in SiN MIMCAPs,» *IEEE GaAs Reliability Workshop,* pp. 92-105, 1998.

[141] K.Makasheva, B.Despax, L.Boudou et G.Teyssedre, «Dielectric layers for RF-MEMS Switches: Design and Study of Appropriate Structures Preventing Electrostatic Charging,» *IEEE Transactions on Dielectrics and Electrical Insulation,* vol. 19, pp. 1195-1202, 2012.

[142] C.Bordas, K.Grenier, D.Dubuc, E.Flahaut, S.Pacchini, M.Paillard et J.-L.Cazaux, «Carbon Nanotube Based Dielectric for Enhanced RF MEMS Reliability,» *IEEE/MTT-S International Microwave Symposium,* pp. 375-378, 2007.

[143] M.Koutsoureli, G.Stavrinidis, D.Birmpiliotis et G.Papaioannou, «Electrical properties of SiNx films with embedded CNTs for MEMS capacitive switches,» *Microelectronics Reliability,* vol. 76, pp. 614-618, 2017.

[144] Z.Cheng, X.Huang, H.Huang, K.Wang et G.Li, «Effect of arsenic doping on charge relaxation process in silicon nitride film for capacitive RF MEMS switch application,» *Microelectronic Engineering,* vol. 162, pp. 89-92, 2016.

[145] G.Li, W.Zhang, P.Li, S.Sang, J.Hu et X.Chen, «Investigation of Charge Injection and Relaxation in Multilayer Dielectric Stacks for Capacitive RF MEMS Switch Application,» *IEEE Transactions on Electron Devices,* vol. 60, pp. 2379-2387, 2013.

[146] U.Zaghloul, G.Papaioannou, F.Coccetti, P.Pons et R.Plana, «Dielectric charging in silicon nitride films for MEMS capacitive switches: Effect of film thickness and deposition condition,» *Microelectronics Reliability,* vol. 49, pp. 1309-1314, 2009.

[147] F.Oba, K.Tatsumi, H.Adachi et I.Tanaka, «n- and p-type dopants for cubic silicon nitride,» *Applied Physics Letter,* vol. 78, pp. 1577-1579, 2001.

[148] S.Hasegawa, M.Segawa et Y.Kurata, «Wide-gap boron-doped microcrystalline silicon nitride,» *Applied Physics Letters,* vol. 49, pp. 1178-1180, 1986.

[149] Y.-B.Park et S.-W.Rhee, «Optoelectronic properties of fluorine-doped silicon nitride thin films,» *Journal of Non-Crystalline Solids,* vol. 343, pp. 33-38, 2004.

[150] N.Schneider et F.Donsanti, «Atomic Layer Deposition (ALD) Principes généraux,

matériaux et applications,» *Techniques de l'Ingénieur,* vol. TIB195DUO, 2016.

[151] W.M.VanSpengen, «Capacitive RF MEMS switch dielectric charging and reliability: a critical review with recommendations,» *Journal of Micromechanics and Microengineering,* vol. 22, pp. 1-23, 2012.

[152] W.M.VanSpengen, «MEMS reliability from a failure mechanisms perspective,» *Microelectronics Reliability,* vol. 43, pp. 1049-1060, 2003.

[153] A.Soma et G.DePasquale, «MEMS Mechanical Fatigue: Experimental Results on Gold Microbeams,» *Journal of Microelectromechanical Systems,* vol. 18, pp. 828-835, 2009.

[154] R.Marcelli, G.Papaioannou, S.Catoni, G.DeAngelis, A.Lucibello, E.Proietti, B.Margesin, F.Giacomozzi et F.Deborgies, «Dielectric charging in microwave microelectromechanical Ohmic series and capacitive shunt switches,» *Journal of Applied Physics,* vol. 105, pp. 1-10, 2009.

[155] R.W.Herfst, H.G.A.Huizing, P.G.Steeneken et J.Schmitz, «Characterization of dielectric charging in RF MEMS capacitive switches,» *IEEE International Conference on Microelectronic Test Structures,* pp. 133-136, 2006.

[156] X.Rottenberg, B.Nauwelaers, W.DeRaedt et H.A.C.Tilmans, «Distributed dielectric charging and its impact on RF MEMS,» *IEEE 34th European Microwave Conference,* pp. 77-80, 2004.

[157] J.Ruan, N.Nolhier, M.Bafleur, L.Bary, F.Coccetti, T.Lisec et R.Plana, «Electrostatic discharge failure analysis of RF MEMS switches,» *Microelectronics Reliability,* vol. 47, pp. 1818-1822, 2007.

[158] D.Molinero et L.Castaner, «Comparison of air gap breakdown and substrate injection as mechanisms to induce dielectric charging in microelectromechanical switches,» *Applied Physics Letters,* vol. 92, pp. 1-3, 2008.

[159] Z.Peng, C.Palego, J.C.M.Hwang, D.I.Forehand, C.L.Goldsmith, C.Moody, A.Malczewski, B.W.Pillans, R.Daigler et J.Papapolymerou, «Impact of Humidity on Dielectric Charging in RF MEMS Capacitive Switches,» *IEEE Microwave and Wireless Components Letters,* vol. 19, pp. 299-301, 2009.

[160] M.LeBellac, Physique quantique : Applications et exercices corrigés, EDP Sciences-CNRS Editions, 2013.

BIBLIOGRAPHIE

Table des notations et abréviations

ε_0 Permittivité du vide ($8{,}85.10^{-12}\ \mathrm{m}^{-3}.\mathrm{kg}^{-1}.\mathrm{s}^4.\mathrm{A}^2$)

ε_r Permittivité relative diélectrique

χ Susceptibilité diélectrique

q_0 Charge élémentaire ($1{,}60.10^{-19}\mathrm{C}$)

m_0 Masse électronique ($9{,}11.10^{-31}$ kg)

k_B Constante de Boltzmann ($1{,}38.10^{-23}\ \mathrm{m}^2.\mathrm{kg}.\mathrm{s}^2.\mathrm{K}^{-1}$)

h Constante de Planck ($6{,}62.10^{-34}\ \mathrm{m}^2.\mathrm{kg}.\mathrm{s}^{-1}$)

C Capacité d'un condensateur (F)

d Epaisseur de l'isolant (m)

S Surface du condensateur (m^2)

E Champ électrique ($\mathrm{V/m}$)

V Tension (V)

T Température (K)

ϕ_m Travail de sortie du métal (eV)

ϕ_i Travail de sortie de l'isolant (eV)

A_e Affinité électronique de l'isolant (eV)

ϕ_0 Hauteur de la barrière métal-isolant (eV)

m^* Masse effective de la particule (kg)

μ Mobilité de la particule ($\mathrm{m}^2.\mathrm{V}^{-1}.\mathrm{s}^{-1}$)

ϕ_p Différence d'énergie entre le niveau du piège et la bande de conduction ou de valence (eV)

λ Distance entre les pièges (m)

N_p Densité de pièges (m^{-2})

S_p Section efficace de capture porteur-piège (m²)

n_l Densité de charges libres (m²)

n_p Densité de charges piégées (m²)

J_S Courant Schottky (A/m²)

J_{FN} Courant Fowler-Nordheim (A/m²)

J_{TAT} Courant Trap Assisted Tunneling (A/m²)

J_{TATre} Courant Trap Assisted Tunneling inverse (A/m²)

J_{FP} Courant Frenkel-Poole (A/m²)

J_{Ohm} Courant ohmique (A/m²)

J_{SCLC} Courant limité par charge d'espace (A/m²)

J_H Courant hopping (A/m²)

PECVD Plasma Enhanced Chemical Vapor Deposition

ICP-CVD Inductively Coupled Plasma Chemical Vapor Deposition

NRA Nuclear Reaction Analysis

RBS Rutherford Backscattering Spectroscopy

ERDA Elastic Recoil Detection Analysis

FTIR Fourier Transform InfraRed Spectroscopy

V_{app} Tension appliquée sur un dispositif (V)

V_{ac} Tension d'actionnement d'un MEMS RF capacitif (V)

ΔV Décalage de la tension d'actionnement (V)

V_m Tension de maintien d'un MEMS RF capacitif (V)

Liste des publications

Publication

A.-C.Amiaud, A.Leuliet, B.Loiseaux, J.-P.Ganne, et J.Nagle, « Modeling of dielectric charging in capacitive structures », *Journal of Applied Physics*, vol.118, 2015

Communication nationale

A.-C.Amiaud, A.Leuliet, M.Paté, S.Holé et P.Martins, « Caractérisation diélectrique du dioxyde de titane entre 1 Hz et 10 GHz », *JCMM 2016, Calais*

Communications internationales

A.-C.Amiaud, A.Leuliet, J.Nagle, B.Loiseaux, P.Martins, R.Aubry, S.Holé « Towards Lifetime Predictive Dielectric Charging Model for Metal-Insulator-Metal Structures », *E-MRS 2017, Strasbourg*

A.-C.Amiaud, A.Leuliet, J.Nagle, B.Loiseaux, P.Martins, R.Aubry, S.Holé « Dielectric Charging Model for Metal-Insulator-Metal Structures », *ISEIM 2017, Toyohashi (Japon)*

Résumé : Les matériaux diélectriques sont présents dans de nombreux dispositifs en microélectronique. Ces derniers peuvent être soumis à de fortes contraintes électriques impactant leur durée de vie. Le stress électrique peut en effet provoquer le claquage du diélectrique ou la modification des performances des composants par accumulation de charges. Dans ces travaux de thèse, différentes méthodes de caractérisation et d'analyse physique ont été utilisées pour étudier la structure des échantillons et identifier les mécanismes en jeu dans le processus d'accumulation de charges dans des couches minces de nitrure de silicium. Puis un code de simulation modélisant les phénomènes de transport de charges dans les isolants a été développé. Le modèle prend en compte des phénomènes de transport par effet tunnel et par effet thermique, dans le volume du diélectrique et aux interfaces isolant-métal. Il permet d'étudier l'évolution de grandeurs physiques (courants, charge, champ électrique) en fonction du temps et de la profondeur dans la couche mince diélectrique. Des résultats de mesures sur des composants capacitifs ont pu être reproduits grâce aux simulations. Cet outil permet d'estimer l'intérêt d'un matériau diélectrique relativement à la fiabilité de composants capacitifs. Il peut également être utilisé en amont afin de définir un matériau aux propriétés idéales pour l'application visée ou aider au dimensionnement de dispositifs en microélectronique.

Mots-clefs : microélectronique, fiabilité, modélisation, matériaux diélectriques, contraintes électriques, accumulation de charges, caractérisations, analyses physiques

Abstract : Dielectric materials can be found in numerous devices in microelectronics. They can be subjected to significant electrical stress, which impacts their lifetime. Indeed, this electrical stress can lead to dielectric breakdown or modify the component performances by charge storage. In this work, several characterization methods and physical analysis have been used in order to study the samples and identify mechanisms involved in charge transport in silicon nitride thin films. Then a simulation code has been developed to model charge transport phenomena in insulators. This model takes into account tunnel and thermal effects in the dielectric and at the dielectric-metal interfaces. The temporal and spatial evolution of physical quantities (currents, charge, electric field) in the dielectric film are calculated. Measurement results on capacitive components can be obtained thanks to simulations. This simulation tool allows testing dielectric materials according to capacitive component reliability. It may be used to define optimal properties for materials depending on applications or to assist in device design in microelectronics.

Key words : microelectronics, reliability, modeling, dielectric materials, electrical stress, charge accumulation, characterization, physical analysis