

Résolution de la charge en présence d'effet quantique dans une capacité MOS par la méthode des différences finies

Projet de méthode numérique – PNS 2A / 2015
Quentin Rafhay – Jean-Christophe Toussaint

1. Introduction et motivations du projet

La capacité MOS est à la fois un concept de base de la physique des composants à semi-conducteur et un élément essentiel de nombreuses applications électroniques et optoélectroniques. Une bonne compréhension des mécanismes physiques intervenants dans les différents régimes de fonctionnement de ce composant est donc indispensable pour un ingénieur PNS.

L'objectif de ce projet de méthode numérique est ainsi de simuler la charge dans la capacité MOS en fonction de la tension appliquée, sans employer les hypothèses vues en cours, et ce, en présence d'un effet quantique dû au confinement des électrons. Pour atteindre cet objectif, il sera donc nécessaire de coupler les compétences acquises dans le module de méthode numérique avec celles acquises dans les modules de physique des semi-conducteurs et physique des composants à semi-conducteurs.

Cet énoncé sert de base pour vous guider dans l'implémentation du code et sa validation.

2. Rappels de physique des semiconducteurs

a. Régime de fonctionnement

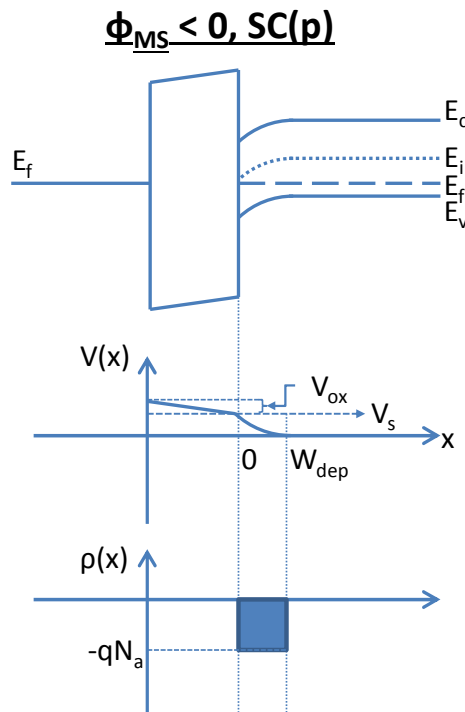


Figure 1 : Diagramme de bande d'une capacité MOS dans le cas d'un substrat (p) et d'une

Comme illustré sur la figure 1, la mise en contact d'un métal, d'un oxyde et d'un semiconducteur dont la différence de travaux de sortie Φ_{ms} négative, entraîne la formation d'une

zone de charge espace, induite par une disparition des porteurs libres, laissant ainsi place à une densité de charges fixes égales aux dopages dans chaque section. Une tension interne, ainsi qu'un champ électrique interne apparaissent dans le composant, en même temps que le profil de charge fixe. Une polarisation positive de la capacité augmentera la taille de la zone de charge espace (régime de désertion). Puis, à partir d'une courbure de bande suffisante, une couche très dense d'électron apparaîtra : c'est le régime d'inversion. Une polarisation inverse créera une couche d'accumulation de porteur libre sur l'interface. Pour des épaisseurs d'oxyde assez mince, le champ à l'interface est suffisamment fort pour créer un puit de potentiel dont les dimensions sont de l'ordre de grandeur de la longueur d'onde des électrons. De fait, une quantification des états possibles pour les électrons de la couche d'inversion apparaît, ce qui modifie le comportement de la capacité MOS par rapport au cas classique.

b. Equation des densités de porteur à l'équilibre dans un SC dans le cas classique

Les concentrations de porteurs libres $n(x)$ et $p(x)$ ($p(x)$ sur la fig 1) sont reliées au potentiel électrique ($V(x)$ sur la fig 1), à l'aide des expressions suivantes :

$$\begin{aligned} n(x) &= n_0 \exp\left(+\frac{qV(x)}{k_b T}\right) \\ p(x) &= p_0 \exp\left(-\frac{qV(x)}{k_b T}\right) \\ \rho(x) &= q(p(x) - n(x) - N_a) \end{aligned} \quad (1)$$

c. Potentiel dans la capacité MOS

Le potentiel l'électrique est relié aux profils de charge à l'aide de l'équation de Poisson :

$$\text{div}(\epsilon_s \cdot \text{grad}(V(x))) = -\rho(x) \quad (2)$$

d. Equation de Schrödinger dans un puit de potentiel et concentration de porteur dans le cas d'un gaz 2D

L'équation de Schrödinger à résoudre pour la capacité MOS est la suivante :

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \Delta \psi(x) + E_p(x) \cdot \psi(x) = E \cdot \psi(x) \quad (3)$$

Le profil de porteur libre (ici électron quantifiés) est donné par :

$$n(x) = \sum_{i=1}^n \frac{m_d g_v k_b T}{\pi \hbar^2} \ln \left(1 + \exp \left(\frac{E_f - E_i}{k_b T} \right) \right) \cdot |\psi_i(x)|^2 \quad \text{en m}^{-3} \quad (4)$$

On remarque ainsi que l'équation de Schrödinger permet de déterminer le profil de charge à partir du potentiel électrique, alors que l'équation de Poisson permet de déterminer le potentiel électrique à partir du profil de charge. C'est la résolution « auto-consistante » de ces deux équations (leur « couplage ») qui permet le calcul de la charge en présence d'effet quantique.

3. Discrétisation de l'équation de Poisson en différence finies et identification des conditions aux limites

Le schéma numérique qui sera utilisé dans ce projet est celui des différences finies. Une géométrie unidimensionnelle sera largement suffisante pour traiter la charge dans la capacité MOS.

- Ecrire la discrétisation de l'équation de Poisson dans le schéma des différences finies en une dimension, en utilisant un maillage non constant, et en prenant en compte les différences de constantes diélectrique des matériaux. Identifier les conditions aux limites à appliquer.

4. Première implémentation de la résolution de l'équation de Poisson

a. Travail amont

Avant de se lancer dans l'implémentation de l'équation de Poisson, il est nécessaire de définir et calculer un certain nombre de grandeur.

- Définir toutes les constantes dans un script : constantes physique, paramètre géométrique, paramètre des matériaux.
- Identifier et calculer toutes les grandeurs « intermédiaires » en lien avec la capacité MOS
- Utiliser le maillage fourni

b. Définition des conditions initiales

- Quel est le régime le plus « naturel » pour initialiser la simulation ?
- Dédurre le profil de charge initial que vous utiliserez pour démarrer la simulation.

c. Résolution de Poisson

- Implémenter la résolution numérique de l'équation de Poisson dans le cas d'un système simple (comme sur la figure 1). Tracer $V(x)$ et superposer le $V(x)$ théorique vu en cours.

d. Couplage avec le calcul de la densité de charge

- Ecrire une fonction qui déduit les profils de porteurs libres $n(x)$ et $p(x)$ classique et le profil de charge $\rho(x)$ à partir des équations (1)

e. Identifications des limites de la résolution

- Déterminer le potentiel $V(x)$ avec l'équation de Poisson partir de ce nouveau profil de charge. Implémenter une boucle « for » qui résout l'équation de Poisson, puis calcul le profil de charge, et qui répète l'opération. Commentez

5. Deuxième implémentation : l'équation de Poisson amortie

a. Schéma de l'équation amorti

Pour améliorer la stabilité de la résolution de l'équation de Poisson, on utilise une version amortie de l'équation de Poisson, obtenue à partir d'un schéma Newton-Raphson [1].

$$\text{div}(\epsilon_s \cdot \text{grad}(V^{\text{inconnu}}(x))) - \frac{q^2}{k_b T} (p(x) + n(x)) \cdot V^{\text{inconnu}}(x) = -\rho(x) - \frac{q^2 V^{\text{prec}}(x)}{k_b T} (p(x) + n(x)) \quad (5)$$

Si la solution converge, V^{prec} tend vers V^{inconnu} , et l'équation (5) tend vers l'équation (2). V^{inconnu} est donc une version « plus juste » de la solution que V^{prec} . Cette approche fait donc intervenir un profil de potentiel inconnu (V^{inconnu}), obtenu à partir d'un profil de potentiel connu (V^{prec}).

- Démontrer l'équation (5). Pour cela, il faut noter que :

$$V^{inconnu} = V^{prec} + \delta V \quad (6)$$

Et donc qu'au premier ordre :

$$\rho(V^{inconnu}) = \rho(V^{prec} + \delta V) = \rho(V^{prec}) + \frac{\partial \rho}{\partial V} \cdot \delta V \quad (7)$$

La suite de la démonstration se fait en utilisant les équations (1) et en appliquant l'équation de Poisson à $V^{inconnu}$.

- Comment l'équation (5) modifie le schéma de discrétisation précédemment obtenu, pour l'équation de Poisson ?
- Puisque le profil de potentiel inconnu s'obtient à partir d'un profil de potentiel connu V^{prec} , il faut initialiser le potentiel. Quel potentiel V^{init} utiliserez-vous ?

b. Implémentation

- Implémenter la discrétisation de l'équation (5)
- Réutiliser la boucle Poisson \Leftrightarrow Charge pour vérifier la stabilité de ce schéma
- Comparez le potentiel et la charge obtenus par simulation et celui attendu par la modélisation vue en cours
- Tracer $Q_{inv}(V_g)$, sachant que :

$$Q_{inv}(V_g) = q \int_0^{\infty} n(x) dx \quad (8)$$

Quel schéma d'intégration allez-vous utiliser ?

Comparer à l'équation théorique de la charge d'inversion dans une capacité MOS

Existe-il un écart entre les deux ? D'où proviendrait cet écart potentiel ? Que faudrait-il faire pour résoudre ce problème ?

6. Troisième implémentation : l'équation de Schrödinger

Le schéma numérique qui sera utilisé ici aussi est celui des différences finies.

- Ecrire la discrétisation de l'équation de Schrödinger dans le schéma des différences finies en une dimension. Identifier les conditions aux limites à appliquer.
- Implémenter la discrétisation de l'équation de Schrödinger
- Calculer $n(x)$ à l'aide de l'équation (4)
- Si le profil de charge semble bon, implémenter la boucle de convergence entre l'équation de Poisson amortie et l'équation de Schrödinger. Vérifier la convergence.
- Calculer $Q_{inv}(V_g)$, la comparer au cas classique et à l'équation théorique

7. Références :

[1] Stéphane Altazin, "Caractérisation et modélisation de la diode organique", thèse Grenoble INP, 2012.