

République Algérienne Démocratique et Populaire
Ministère de L'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique
Université Mouloud Mammeri De Tizi-Ouzou



Faculté du génie électrique et d'informatique

Département d'automatique

Mémoire de Fin D'Etudes

MASTER ACADIMIQUE

Spécialité : **Génie Microélectronique**

Présenté par

BENABBOU Merzouk

Mémoire dirigé et proposé par professeur : **Arezki BENFDILA**

Thème :

Etude et simulation d'un microcapteur chimique

Mémoire soutenu publiquement le 11/10/2015 devant le jury composé de :

LAKHELEF	Ahcene	MCB	UMMTO	président
BENFDILA	Arezki	prof	UMMTO	encadreur
CHELLI	Takfarinas	MAA	UMMTO	examinateur
GOUDJIL	Mouhamed	MAA	UMMTO	examinateur

Promotion : 2015-2016

Introduction générale

La détection d'une espèce chimique ainsi l'évaluation de sa quantité ou de sa concentration dans tous les domaines touchant à la chimie et à la biochimie (environnement, alimentation, pharmacie, médecine,...) peuvent être réalisées l'aide des capteurs chimiques mis au point depuis quarantaine d'années appelés plus couramment les microcapteurs qui ont l'avantage d'être compatibles avec les technologies de la microélectronique. Les capteurs chimiques sont des dispositifs simples, constitués d'une partie chimiquement sensible (couche sensible) permettant la reconnaissance chimique et d'un système transducteur transformant les grandeurs chimiques en un signal électrique facilement exploitable. Grâce à les techniques de microélectronique, la plupart des capteurs chimiques sont fabriqués par des procédés en masse et de façon collective. Ce dernier point présente divers avantages allant de la réduction en taille et un gain en fiabilité à un coût très bas. Le but de ce travail a été consacré principalement et d'étudier par simulation, les paramètres technologiques d'un capteur chimique potentiométrique de type ISFET (Ion Selective Field Effect Transistor), constitué d'une structure de base similaire à celle d'un transistor MOSFET, qui représente le transducteur électrique, et une couche sensible déposée sur l'oxyde de grille remplaçant l'électrode de grille métallique du transistor MOSFET conventionnel (transducteur chimique). Ce type de capteurs est caractérisé par sa taille très petite, son temps de réponse rapide, et la possibilité de production en nombre élevé, et enfin la possibilité d'intégration de l'électronique avec le capteur sur la même puce. Notre travail a été basé sur l'étude des paramètres technologiques du transducteur électrique (représenté par le transistor MOSFET) du capteur chimique ISFET.

L'outil de simulation utilisé dans ce travail est le logiciel TCAD-SILVACO. Ce logiciel permet de concevoir et prévoir les performances des dispositifs à base de semiconducteur. Les différents composants électroniques (distribution des porteurs dans la structure, profondeurs des jonctions, concentration des porteurs) ont été simulés à partir du logiciel ATHENA qui emploie des modèles physiques spécifiques.

Ce mémoire s'articulera autour de trois chapitres. Dans le premier chapitre, nous dressons un état de l'art sur les capteurs et les microcapteurs. Le deuxième chapitre

traite des capteurs chimiques en générale et de l'ISFET en particuliers. Nous avons d'écrit leur principe de fonctionnement, la détection du potentiel chimique et la détection du pH, nous traitons aussi des membranes ionosensibles.

Dans le troisième chapitre, nous allons présenter le simulateur TCAD-SILVACO, ainsi son outil de simulation (ATHENA) avec la plateforme de programmation (DECKBUILD) et l'outil de visualisation (TONYPLOT). Ensuite, nous ferons une description des différentes étapes génériques de la fabrication technologique (oxydation, diffusion, gravure,.....) du dispositif simulé sous ATHENA. Enfin, nous donnerons une synthèse sur les différents paramètres géométriques technologiques utilisés dans cette simulation.

I.1 Généralité sur les capteurs

I.1 Définition :

Un capteur est un dispositif qui sous l'effet d'une grandeur physique que l'on souhaite connaître et caractériser délivre une grandeur physique exploitable (signal électrique par exemple). On parle aussi de transducteur (Figure I.1), puisque la grandeur physique d'entrée est généralement transformée en une autre grandeur physique de sortie comme un signal électrique tel qu'un courant, une tension, une charge, une impédance, etc.

Le capteur permet de prélever une grandeur abstraite, appelée information, qui sélectionne un événement particulier parmi un ensemble d'événements possibles. Pour pouvoir être traitée, cette information sera portée par un support physique, appelé alors de signal. L'information délivrée par un capteur pourra être logique (2 états), numérique (valeur discrète) ou analogique. D'une façon générale, les capteurs peuvent être classés selon deux critères:

Grandeur mesurée : capteur chimique, de position, de température, de vitesse, de force, de pression, etc.

Caractère de l'information délivrée : capteurs logiques appelés aussi capteurs tout ou rien (TOR), capteurs analogiques ou numériques.

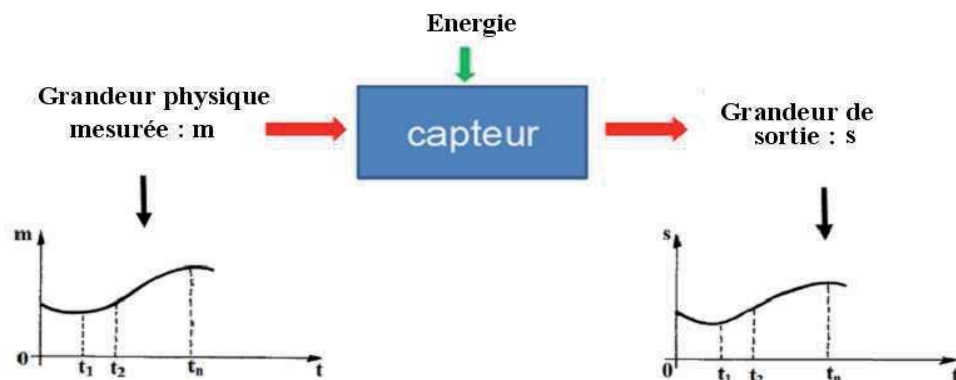


Figure I.1 : Principe d'un capteur.

2- Principales caractéristiques des capteurs :

Suivant les applications souhaitées, le choix d'un capteur adéquat nécessite l'établissement préalable d'un cahier des charges dans lequel sont énumérés :

- le type de l'événement à détecter,
- la nature de cet événement,
- la grandeur de l'événement,
- l'environnement de l'événement,
- etc.

A partir de ces paramètres, le choix du capteur est effectué. Par ailleurs, l'utilisation d'un capteur dans les meilleures conditions, nécessite un étalonnage qui permet de connaître les incertitudes de mesure relatives aux paramètres caractéristiques du capteur. Un certificat d'étalonnage d'un capteur contient généralement les caractéristiques suivantes : étendue de mesure, résolution, fonction de transfert, linéarité, caractéristiques statistiques, temps de réponse, sensibilité, limite de détection, etc.

2.1-Etendue de la mesure ou dynamique : Elle définit la zone dans laquelle les caractéristiques du capteur sont assurées par rapport à des spécifications données.

2.2-Résolution : Elle correspond à la plus petite variation de la grandeur que le capteur est susceptible de déceler. La résolution R_m dépend non seulement de la caractéristique des instruments de mesure associés au capteur mais aussi du rapport signal sur bruit du capteur.

2.3-Fonction de transfert : Elle donne la relation d'évolution de la grandeur de sortie en fonction de la grandeur d'entrée. Elle est donnée par une courbe en régime permanent (Figure I.2) et ne donne pas d'informations sur les caractéristiques transitoires du capteur.

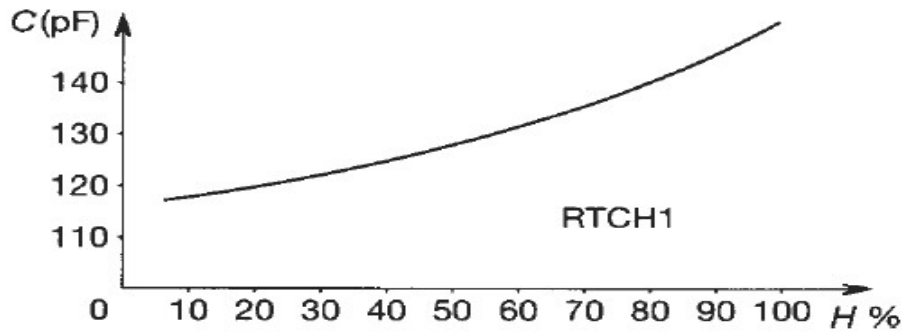


Figure I.2: Exemple de caractéristique d'un capteur d'humidité du type capacitif.

2.4-Linéarité

C'est la zone de la réponse du capteur dans laquelle sa sensibilité est indépendante de la valeur de la grandeur mesurée. Cette zone peut être définie à partir de la définition d'une droite obtenue comme approchant au mieux la caractéristique réelle du capteur, en prenant en compte des incertitudes σ_i de chaque point de mesure, consiste à minimiser l'écart de linéarité entre la caractéristique linéarisée et la réponse expérimentale (Figure I.3).

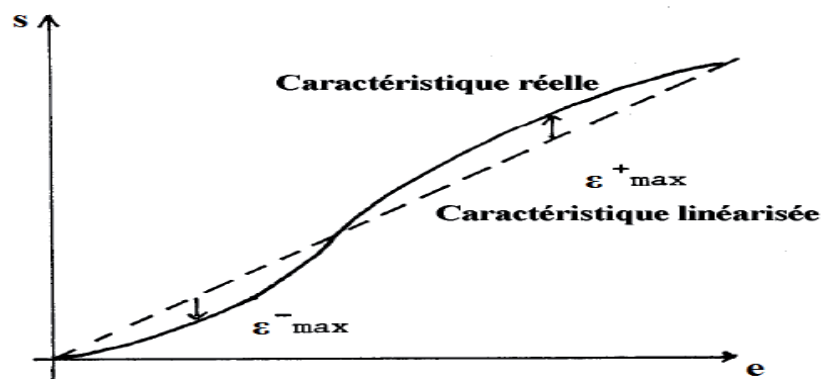


Figure I.3 : Exemple de linéarisation de caractéristiques.

2.5-Caractéristiques statistiques

Les caractéristiques statistiques permettent de prendre en compte la notion d'erreurs accidentelles qui peuvent survenir sur un capteur.

a-Fidélité : Elle définit la qualité d'un capteur à délivrer des résultats les plus proches possibles lors d'analyses répétées sur une même grandeur physique m . L'erreur de fidélité correspond à la dispersion (écart type) σ des résultats autour de la valeur moyenne $\langle m \rangle$ de n mesures effectuées sur m :

$$\langle m \rangle = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n m_i \quad \text{I. 1}$$

$$\sigma = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (m_i - \langle m \rangle)^2}{n - 1}} \quad \text{I. 2}$$

où m_i est la valeur de m à la $i^{\text{ème}}$ mesure.

Parmi les écarts de fidélité on distingue : la répétabilité et la reproductibilité ;

- **Répétabilité**

La répétabilité correspond à la variation aléatoire des résultats d'une série de n conditions de mesure pendant un court intervalle de temps. Ces conditions sont appelées conditions de répétabilité et elles comprennent : même mode opératoire de mesure, même observateur, même équipement de mesure, même lieu de mesure [1].

- **Reproductibilité**

Elle représente la variation aléatoire des résultats de plusieurs séries de mesures, réalisées sur une même grandeur m , espacée dans le temps, dans des conditions expérimentales différentes. Ces conditions peuvent comprendre : principe de mesure, méthode de mesure, observateur, instrument de mesure, conditions d'utilisation, temps de mesure.

b-Justesse : C'est l'aptitude d'un capteur à délivrer une réponse proche de la valeur vraie et ceci indépendamment de la notion de fidélité. Elle est liée à la valeur moyenne obtenue sur un grand nombre de mesures par rapport à la valeur réelle.

c-Précision : La définition du terme « précision » varie d'un auteur à un autre et inclut soit uniquement la reproductibilité ou la fidélité, soit également la notion de « justesse ». Elle définit l'écart en % que l'on peut obtenir entre la valeur réelle et la valeur obtenue en sortie du capteur.

2-6 : Rapidité

C'est la qualité d'un capteur à suivre les variations de la grandeur mesurée. On peut la chiffrer par :

- la bande passante du capteur (à -3 dB) mesurée en fréquence.

- le temps de réponse (en X%) à un échelon.

2.7-Sensibilité

La sensibilité S_v détermine l'évolution de la grandeur de sortie Δs en fonction de la grandeur d'entrée Δm en un point donné, c'est-à-dire la dérivée de la grandeur de sortie par rapport à celle d'entrée en ce point :

$$S_v = \Delta s / \Delta m = \partial s / \partial m \quad \text{I.3}$$

Elle correspond à la pente de la tangente à la courbe issue de la caractéristique du capteur en un point donné. Dans le cas d'un capteur linéaire, la sensibilité est constante et égale à la pente de la droite. Il est important de signaler que cette grandeur est intrinsèque au capteur et ne dépend pas ou peu des autres équipements de mesure associé au capteur dans une chaîne de mesure . Par conséquent, plus cette grandeur intrinsèque du capteur est forte, plus il est sensible.

La limite de détection est la valeur minimale de la grandeur physique m que l'on est capable de déceler. La limite de détection ne doit pas être confondue avec la sensibilité du capteur car elle dépend à la fois de la sensibilité et de la résolution instrumentale R_m liée aux équipements utilisés pour la mesure du signal. Par conséquent, la limite de détection est utilisée pour évaluer la performance de l'association d'un capteur et du dispositif de mesure. Plus elle est faible, plus l'association est sensible. L'expression de la limite de détection LD, déduite à partir de la définition de la sensibilité du capteur, est de la forme :

$$LD = \frac{R_m}{S_v} \quad \text{I.4}$$

3- Chaîne de mesure

Généralement, un capteur est utilisé dans une chaîne de mesure faisant intervenir plusieurs phénomènes différents (Figure I.4).

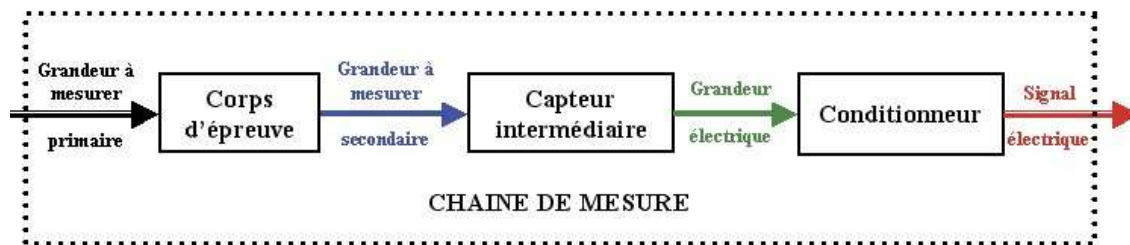


Figure I.4 : Schéma de principe d'une chaîne de mesure.

De manière générale, la sortie d'une chaîne de mesure est du type électrique. Si la chaîne de mesure fait intervenir plusieurs transducteurs, on appelle corps d'épreuve celui en contact direct avec le phénomène à quantifier. Le dernier transducteur est associé à un conditionneur qui fournit la grandeur électrique de sortie de manière exploitable. Le choix de ce conditionneur est une étape très importante dans le cadre de la chaîne de mesure car, associé au capteur, il détermine la nature finale du signal électrique et va influencer les performances de la mesure. Ce capteur doit être insensible ou isolé de toutes perturbations extérieures.

3.1 Les éléments principaux d'un capteur chimique

Les capteurs chimiques contiennent habituellement deux composantes de base connectées en série : une partie sélective (récepteur ou couche sensible), constitué d'un matériau de détection sensible à l'espèce recherchée (molécule, ion,..), et un transducteur physico-chimique qui transforme la réponse chimique en signal électrique [2].

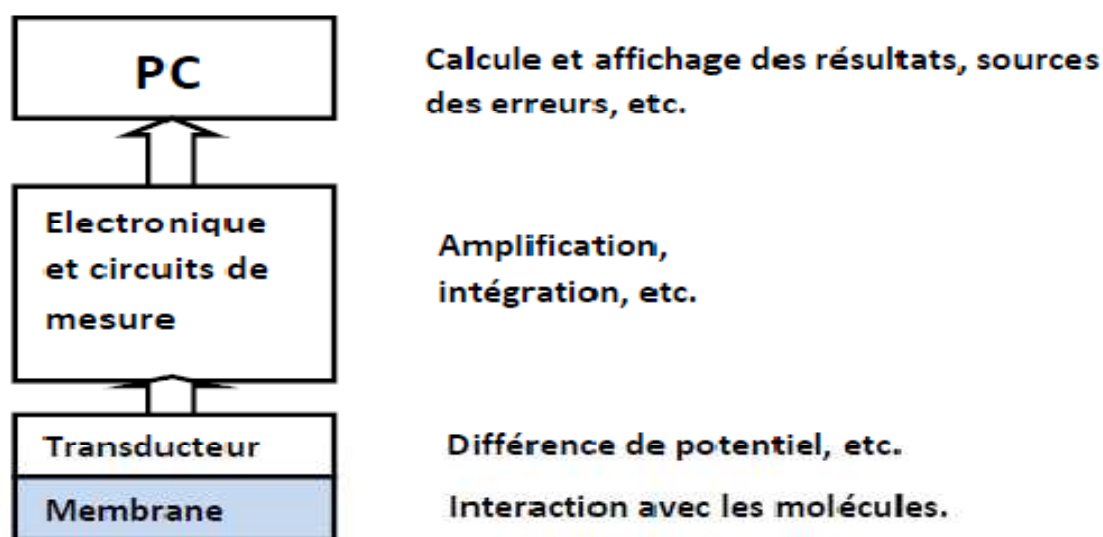


Figure I.5 : Schéma synoptique d'un capteur chimique

Selon les interactions avec les espèces chimiques (absorption, réaction chimique, transfert de charge,...), les propriétés physico-chimiques de la couche sensible, telles que la masse, le volume, les propriétés optiques,..., vont changer. Ces changements des propriétés de la couche sensible peuvent être détectés par différents transducteurs et transférés en un signal électrique. Le signal mesuré est traduit par un changement de la valeur initiale du courant, du potentiel, de la conductivité ou de la fréquence.

Les capteurs chimiques sont classés selon leurs types de détection [3] :

✓ **La détection thermique :**

Les capteurs thermométriques ou calorimétriques tels que les thermistances sont basés sur la détermination d'une espèce chimique par la mesure la variation de température produite lors d'une détection d'un élément chimique. Ce type de capteurs sont peu utilisés parce qu'ils sont limités aux analyses en milieu produisant que des variations thermiques [4].

✓ **La détection optique :**

La lumière peut être considérée comme des particules (photons) ou des ondes électromagnétiques selon le principe de la dualité corpusculaire. Les propriétés des ondes électromagnétiques telles que l'amplitude, la fréquence, la phase, et l'état de polarisation peuvent être employées pour concevoir des capteurs optiques. Le principe de fonctionnement de ces capteurs est basé sur l'hypothèse que, si un échantillon est irradié avec une lumière visible ou avec des ondes électromagnétiques, le rayonnement peut être absorbé, ce qui a comme conséquence une diminution de l'intensité du rayonnement détectée par rapport au faisceau primaire.

On peut citer comme exemple de capteurs optiques, les capteurs chimiques à base de fibres optiques. Grâce à leur faible poids et leur petite taille, on peut effectuer des mesures dans des endroits difficiles d'accès. Ces capteurs sont constitués de trois parties : émetteur, optrode et détecteur. L'optrode est la partie principale du capteur, elle sert comme indicateur de changement de ses propriétés. Cependant, ces capteurs à fibre optique restent toujours coûteux, avec les problèmes de connexions, en plus de l'influence néfaste de la lumière naturelle sur ce type de capteurs [5].

✓ **La détection électrochimique :**

Les capteurs électrochimiques présentent la gamme de produits les plus anciennement utilisés, leurs principes se basent sur le phénomène de transfert de charges. On peut classer les capteurs chimiques selon leur mode de transduction :

✓ **La détection ampérométrique :**

Les capteurs ampérométriques sont basés sur la mesure du rapport courant-tension dans une cellule électrochimique comportant des électrodes. Un potentiel est appliqué aux électrodes, et un courant qui est proportionnel à la concentration des corps électroactifs est mesuré. Ce type de capteurs est généralement caractérisé par une bonne sensibilité et rapidité. Ainsi les capteurs ampérométriques peuvent être miniaturisés plus facilement que les capteurs potentiométriques. Par conséquent, il y a une tendance en faveur de la détection ampérométrique, en particulier pour des biocapteurs enzymatiques[2] . Cependant, les mesures sont sensibles à la température [5].

• **La détection conductimétrique**

Les capteurs conductimétriques sont basés sur la mesure de la conductance entre deux électrodes. Pour les milieux aqueux, la conductance peut être mesurée, car celle-ci est liée à la concentration des ions. Il est aussi possible de déposer une couche sensible entre les électrodes. En présence d'espèces piégées sur la couche sensible, la réaction provoquée par ces espèces conduit à un changement de la conductance de la couche sensible. L'avantage principal de la détection conductimétrique, est qu'un grand nombre des réactions enzymatiques implique une diminution ou une augmentation de l'espèce chargée. Un tel mode de transduction est également très rapide, peu coûteux, n'exige pas une électrode de référence, et convient à la miniaturisation. Par contre, ce mode de transduction est caractérisé par de faibles sélectivité et sensibilité [6].

• **La détection potentiométrique**

La mesure potentiométrique a été pour longtemps une partie significative d'analyse chimique instrumentale. Dans de tels capteurs, l'information analytique est obtenue en convertissant la réponse chimique en un signal électrique, qui est

proportionnel à la concentration (activité) générée ou consommée dans le processus chimique. Un tel mécanisme de transduction est très attirant pour des opérations des biocapteurs en raison de sa sélectivité, sa simplicité, son coût de revient assez bas. Cependant, il est moins sensible et souvent plus lent par rapport aux capteurs ampérométriques [5].

I.4. TECHNOLOGIE DE FABRICATION DES CAPTEURS ET MICROCAPTEUR

On peut classer les étapes de fabrications issues de la microélectronique sur silicium en trois catégories : les techniques additives (dépôt de couches mince, épitaxie,...), les techniques sélectives ou de transfert de motifs telles que la photolithographie et les techniques soustractives de gravure.

I.4.1-Dépôt de couches minces

De nombreux procédés de micro usinage sont basés sur la technologie du dépôt de couches minces. Le choix de la nature d'une couche mince de métal à utiliser dans un micro- capteur dépend essentiellement de l'application visée .elles consistent à déposer des couches de différents matériaux les unes sur les autres depuis un gaz, un plasma, une solution aqueuse ou un état solide. On peut déposer des métaux, du polysilicium, des oxydes et nitrures de silicium, des polymères, etc. les épaisseurs de couches obtenues et leurs caractéristiques (électriques, piézoélectrique, mécanique...) sont très dépendantes des procédés utilisés : PVD, CVD, oxydation, etc. ces procédés dépendent des paramètres tels que la température, l'inclinaison de wafer et sa topologie et la composition de l'atmosphère dans la machine. On adjoint souvent une étape de traitement thermique après la déposition pour obtenir les caractéristiques désirées.

I .4.2-La photolithographie

Le principe de la photolithographie consiste à irradier un film de matériau photosensible, appelé résine, au travers d'un masque ou est définie l'image du circuit. Une partie de l'intensité lumineuse est absorbée par la couche, engendrant des

modifications physico-chimiques de la résine, les zones exposées deviendront solubles, dans le cas des résines positives, ou insolubles, quand il s'agit de résines négatives. Après une étape de développement, les motifs de la résine apparaissent, créant à leur tour un masque sur le substrat. Ce masque permet ensuite de délimiter les régions du substrat de silicium qui subiront un traitement (gravure, implantation).

I.4.2.1 Principe de photolithographie

Cette opération consiste à déposer une photosensible en film mince et uniforme. Ces résines sont des composés organiques dont la solubilité est affectée par le rayonnement UV. Selon la source d'irradiation, plusieurs techniques par rayon X, par faisceaux d'électrons ou d'ions et la photolithographie.

Même si le développement technologique propose de nouvelles techniques capables de réduire significativement la dimension des motifs imprimés, la photolithographie reste la plus employée en industrie car elle permet des cadences de production élevées.

La figure I.6 présente les étapes de photolithographie.

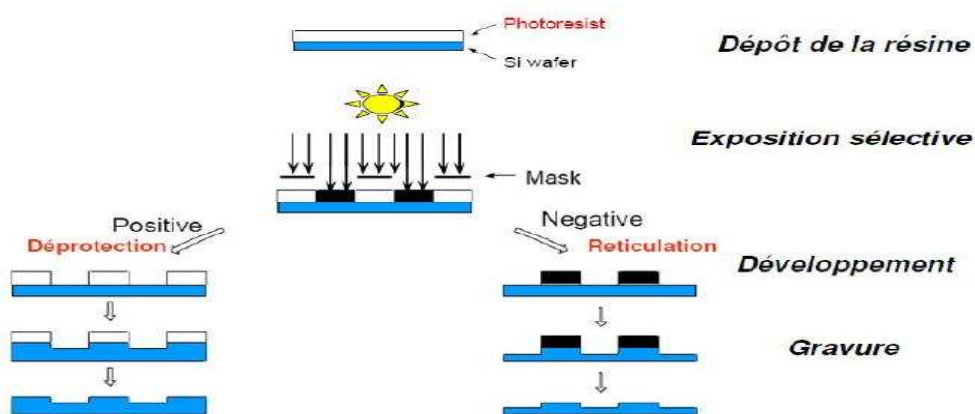


Figure I.6 : principales étapes du procédé lithographique [7]

I.4.2.2-Réalisation d'un motif sur plaquette

En général l'opération de la photolithographie se déroule de la façon suivante [7] :

1. Etallement de la résine photosensible par centrifugation : le substrat de silicium est fixé par aspiration sur support tournant, une quantité de résine de façon quasi uniforme en un film mince de quelques microns.
2. Séchage de la résine pour évacuer le solvant,
3. Exposition de la résine à un rayonnement ultraviolet à travers un masque,
4. Développement de la résine. Le bain de développement va dissoudre soit la partie de résine insolée dans le cas d'une résine dite positive, soit la résine non insolée dans le cas d'une résine négative,
5. La résine restante est ensuite retirée de la surface par des solvants chimiques puissants. Dans le cas d'une résine positive, on retrouve après l'opération, exactement le même motif sur la couche gravée de la plaquette, que sur le masque de départ. Par exemple, à un motif de métal sur le masque (correspondant à un motif opaque), correspond le même motif d'oxyde restant sur la plaquette après gravure. Dans le cas d'une résine négative, on obtient sur la plaquette le motif complémentaire.

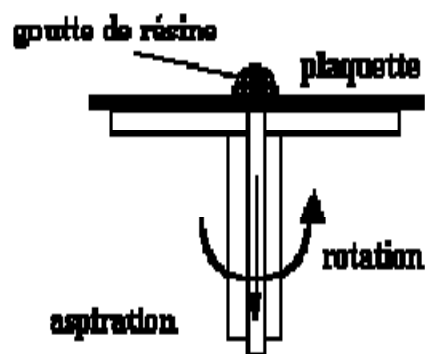


Figure I.5 : tournette pour l'étalement de résine photosensible .

I.4.3.Gravure

La gravure est une méthode de transfert soustractive, c'est à dire que la structure est formée par un enlèvement de matière du substrat ou d'une couche sous-jacente via les ouvertures d'un masque de résine. Cette attaque chimique et/ou

physique des parties de la surface non protégées par les masques peut être réalisée en milieu liquide (gravure humide) ou en milieu gazeux (gravure sèche par plasma).

I.4.3.1.Gravure chimique

La gravure par attaque chimique est la technique la plus répandue. Elle est obtenue en plongeant un substrat de silicium dans des bains chimiques après la phase de photolithographie. La vitesse d'attaque est fonction de la concentration des différents composants. Les produits d'attaque du silicium sont nombreux :

-EDP : éthylène diamine pyrocathecol ;

-KOH : mélange de potasse et d'eau ;

-HNA : acide fluorhydrique (HF) et acide nitrique(HNO₃) dilués dans de l'acide acétique(CH₃COOH)...

Les deux types de gravure peuvent avoir un caractère [8] :

- ✓ Isotope : le profil de la gravure est symétrique dans toutes les directions de la région attaquée
- ✓ Anisotrope : une direction donnée est privilégiée, permettant d'obtenir des profils de gravure directionnels.

I.4.3.2.Gravure par voie sèche

Si la gravure humide permet l'usinage de volume du silicium (sur plusieurs dizaines, voire centaines de microns de profondeur), cette technique est fortement dépendante de la structure du silicium, rendant impossible la réalisation de certaines géométries. Les techniques utilisées en gravure sèche (laser, plasma) attaquent verticalement le silicium, permettant la création de motifs courbes. Cependant la profondeur de gravure n'excède pas quelques microns (on parle d'usinage de surface) pour les procédés classiques, ce qui limite fortement leur champ d'application. La technique la plus répandue est la gravure par plasma schématisée en

figure I.6. Le plasma utilisé est un gaz ionisé possédant sensiblement le même nombre de particules chargées positivement et négativement. La gravure est effectuée dans une chambre à vide à l'aide d'un bombardement d'ions qui arrachent des atomes de silicium sur les parties non protégées du wafer, la protection ayant été réalisée au préalable par micro photolithographie. Cette dernière méthode est plus intéressante car elle permet d'augmenter considérablement la densité des ions réactifs et ainsi la vitesse de gravure.

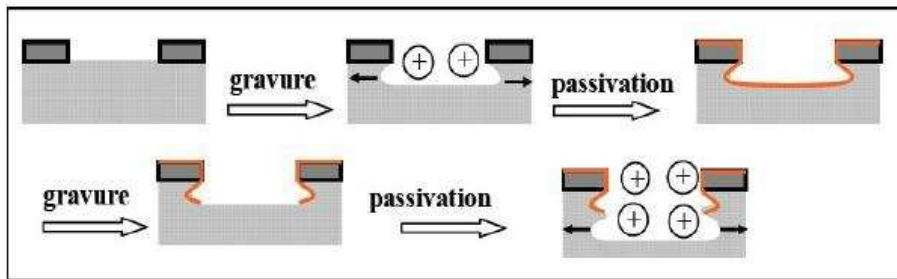


Figure I.7 : principe de la gravure [7].

I.5. Conclusion

Nous avons présenté dans ce chapitre un état de l'art sur les capteurs et leurs caractéristiques ainsi différentes types des capteurs. Nous avons ensuite établi un bilan sur les microcapteurs et leurs méthodes standard de fabrication. Nous allons maintenant entrer dans l'étude de ChemFET

Chapitre II

Etude de Micro-Capteur Chimique.

à Base de

FET.

II-1. Introduction

Les problèmes soulevés par des domaines très diversifiés, tels que la pollution, le contrôle de qualité de notre environnement (surveillance des rejets industriels ou domestiques) et même la médecine (détection d'ion ou de molécules en solutions biologiques), se posent actuellement avec acuité. Des techniques d'analyses classiques sont utilisées pour la mesure des phénomènes physico-chimiques ou la détection des espèces chimiques. Mais la plupart de ces méthodes sont coûteuses, complexes, volumineuses. La mise au point de méthodes d'analyse de plus en plus précises et sélectives est alors nécessaire. La technique la plus séduisante est apparue depuis une quarantaine d'années sous le terme de capteur chimique. Le développement des microcapteurs a vu le jour grâce à deux technologies adaptées qui ont été combinées : la technologie des circuits intégrés telle que le transistor à effet de champ, et les électrodes iono-sensibles conventionnelles. Il s'est donc avéré possible de fabriquer des matériaux chimiquement sensibles par le moyen de la technologie de la microélectronique [9].

Les capteurs chimiques sont des dispositifs miniaturisés qui convertissent un état chimique en un signal électrique. Un état chimique est déterminé par les différentes concentrations, pressions partielles, ou activités des particules telles que les atomes, molécules, ions, ou composés biologiques qui peuvent être détectés dans un gaz, liquide, ou en phase solide [10].

II.2- Les Electrode ionosensible (EIS) :

Ce sont les plus anciens des capteurs potentiométriques. Ce type de capteurs est constitué d'une électrode de travail ou de mesure sur laquelle est fixée une membrane ionosensible (Ion Selective Electrode), et une électrode de référence. L'électrode ionosensible mesure la différence de potentiel entre les deux électrodes, le potentiel de l'électrode de mesure varie lorsque l'électrolyte provoque une interaction avec la membrane ionosensible. la différence de potentiel à cette interface est alors proportionnelle au logarithme de la concentration de l'ion à détecter [11].

Le capteur type de cette famille est certainement celui destiné à la mesure du pH.

Le potentiel hydrogène (pH) indique la concentration en ions H_3O^+ présents dans une solution ; ou plus précisément le cologarithme décimal de cette concentration exprimée en mole/litres :

$$pH = -\log ([H_3O^+]) \quad \text{II.1}$$

L'équation de NERNST décrit le comportement de l'électrode :

$$E = E_0 - 2,3 \text{ kT/e (pH)} \quad \text{II.2}$$

Où :

E : est la ddp mesurée aux bornes des deux électrodes

E0 : est lié au potentiel de l'électrode de référence

k : est la constante de Boltzmann e : est la charge élémentaire

T : est la température en Kelvin

Le potentiel varie linéairement en fonction du logarithme décimal des concentrations des espèces oxydantes et réductrices.

A température ambiante (25°C), la pente est limitée à $2,3 \text{ kT/e} \approx 60 \text{ mV/unité}$. Cette pente représente la sensibilité de détection et détermine par conséquent la qualité du capteur chimique. Lorsque la sensibilité est inférieure à cette valeur maximale, on parlera de réponse non-Nernstienne [12].

Tableau II.1 : mesure de sensibilité pour différents isolants [13].

Isolants	Si3N4	Al2O3	Ta2O5
Mesure de pH	-12	-12	-12
Mesure de sensibilité (mV/pH)	3-55	4-56	6-58

II.3- Les capteurs chimiques ISFET (Ion Selective Field Effect Transistor) :

Les capteurs chimiques ISFET mis au point au début des années 1970 par P.Bergveld, ont permis de mesurer le changement du pH par un décalage correspond dans la tension de seuil du dispositif [14]. La structure de base d'un ISFET est similaire à celle d'un MOSFET (Metal Oxide Semiconductor Field Effect Transistor), avec une électrode de grille remplacée par une membrane sélective appelée la couche "ionosensible" (Si_3N_4 , Al_2O_3 , Ta_2O_5 ,...). La compatibilité avec la microélectronique donne l'opportunité d'intégrer plusieurs capteurs (multi-capteurs) sur la même puce pour la détection de plusieurs ions simultanément. Le contrôle de qualité des eaux est l'une des tâches les plus importantes associées aux capteurs ISFET. Ce type de capteurs est employé généralement pour mesurer la concentration des polluants dans l'eau (Na^+ , Ca^{++} , NH_4^+ ,...). Il est aussi utilisé dans le domaine biomédical pour la détection d'enzymes, bactéries, et aussi en milieu sanguin pour détecter les ions sodium Na^+ et potassium K^+ .

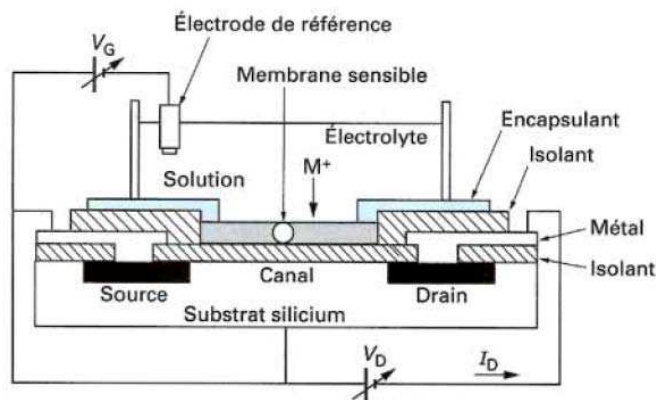


Figure II.1 : vue schématique d'un capteur ISFET.

Le principe de fonctionnement d'un capteur ISFET va être expliqué en se basant sur le capteur traditionnel pH-ISFET. Ce type de capteur a permis de mesurer l'activité d'ions hydrogène en solution. La structure d'un pH-ISFET est identique à celle d'un MOSFET (Metal Oxide Semiconductor Field Effect Transistor), c'est pourquoi nous allons présenter dans ce qui suit, la structure et le principe de fonctionnement d'un tel dispositif.

II-3 Structure et principe de fonctionnement d'un transistor MOSFET

Le transistor MOSFET (Metal Oxide Semiconductor Field Effect Transistor) constituée d'un substrat de silicium de type n ou p dans lequel sont implantées, par diffusion ou implantation ionique, deux zones, fortement dopées et de type opposé à celui du substrat, appelées drain et source. Sur la zone limitée par le drain et la source (appelée zone active), est déposée une couche de diélectrique par oxydation du silicium (substrat). Le diélectrique ainsi obtenu, le SiO_2 natif, est recouvert d'une couche, pouvant être du polysilicium de haute conductivité et/ou de l'aluminium, appelée grille. Une capacité MOS est ainsi réalisée, voir figure II.2.

La couche active liant la source et le drain, activée par polarisation, est appelée canal. Selon sa présence ou son absence et en l'absence de toute polarisation, le transistor peut être à appauvrissement (Normally On) ou à enrichissement (Normally Off).

Indépendamment du type du transistor, un MOSFET est caractérisé par ses dimensions géométriques et physiques qui sont décrites ci-dessous et montrés par la figure II.2.

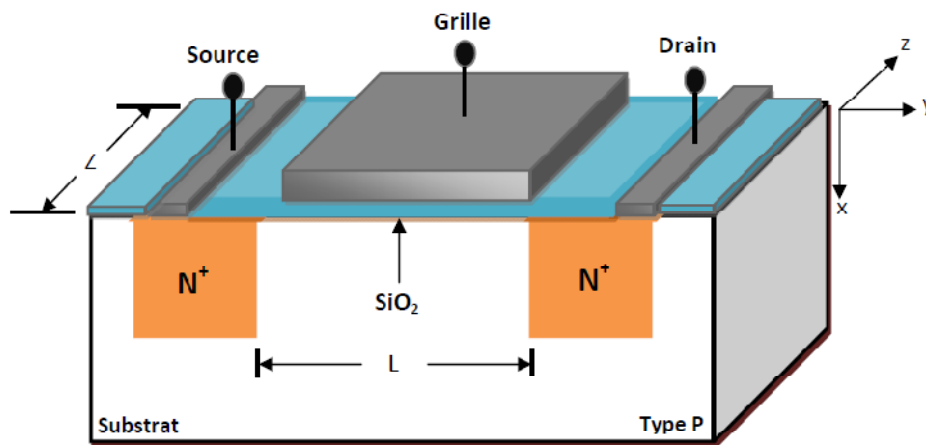


Figure II.2 : Transistor MOSFET.

On appelle L et W la longueur et la largeur du canal du MOSFET respectivement. X_j représente la profondeur de diffusion de la source et du drain et t_{ox} l'épaisseur de l'oxyde de grille. La surface de la grille est $A= W.L$ et x la profondeur du canal.

La grille et le drain sont polarisés par les tensions V_{GS} et V_{DS} référencées par

rapport à la source ou au substrat, tous deux généralement maintenus à la masse afin de contrôler la conductivité du canal et le courant du drain traversant longitudinalement le canal.

Le dopage du substrat varie entre 10^{15} et 10^{17} atomes/cm³. Celui du drain et source par contre, est de l'ordre de 10^{19} atomes/cm³. Le canal est physiquement séparé de l'oxyde par l'interface qui influe sur le comportement et les performances du MOSFET. [15]

Le principe de fonctionnement du MOSFET consiste à moduler, par la tension de polarisation grille source, V_{GS} , la conductance du canal. Cette modulation est effective à partir d'une tension V_{GS} appelée tension de seuil V_T . La tension effective de modulation de la conductivité du canal est $(V_{GS} - V_T)$.

Selon la valeur de la tension de grille V_{GS} on peut définir plusieurs zones de fonctionnement :

- 1) $V_{GS} = 0$: le canal est saturé en porteurs majoritaires, les trous. Aucun courant ne peut circuler entre la source et le drain.
- 2) $0 < V_{GS} < V_T$ (V_T = tension de seuil) – les trous sont repoussés vers le substrat.

C'est le régime de déplétion. Aucun courant ne peut circuler dans le canal entre la source et le drain.

- 3) $V_{GS} > V_T$: les trous du substrat dans le canal seront repoussés pour laisser la place aux porteurs minoritaires, les électrons. Si maintenant le drain est porté à un potentiel V_d supérieur à celui de la source, alors les électrons s'écoulent de la source vers le drain en créant un courant de drain I_d .

La tension de seuil, V_T , est donnée par l'équation :

$$V_T = \frac{\phi_M + \phi_{SI}}{q} + \frac{Q_b + Q_{ss} + Q_{ox}}{C_{ox}} + 2\phi_f \quad \text{II.3}$$

Selon V_d , on distingue deux régimes de fonctionnement :

- 1) $V_{ds} < V_{gs} - V_T$: le régime est dit linéaire, le courant de drain est donné par l'équation :

$$I_d = \frac{\mu C_{ox} \omega}{L} \left[(V_{gs} - V_T) V_{ds} - \frac{V_{ds}^2}{2} \right] \quad \text{II.4}$$

Où μ : représentent la mobilité des électrons dans le canal, C_{ox} : est la capacité de l'isolant, ω et L : sont la largeur et la longueur du canal respectivement.

Puis, au fur à mesure que la tension de drain augmente, la densité des électrons dans la couche d'inversion diminue, l'épaisseur de la couche d'inversion se réduit à zéro, et la conductivité du canal va jusqu'à s'annuler au voisinage du drain. On parle de pincement (Pinch-off) du canal au niveau du drain [16]. Dans ce cas, la tension de drain $V_{ds} = V_{gs} - V_T$.

La tension de drain et le courant de drain sont donc appelés tension de saturation et courant de saturation, respectivement (figure II.3).

2) $V_{ds} > V_{gs} - V_T$: lorsque la tension de drain augmente au-delà de la tension de saturation, le point de pincement se déplace vers la source et le courant de drain reste quasiment constant. Dans cette région, on est en régime dit de saturation, et l'expression du courant de drain est donnée par l'équation (II.4) :

$$I_{ds} = \mu C_{ox} \frac{w}{2L} (V_{gs} - V_T)^2 \quad \text{II.5}$$

Où μ est la mobilité moyenne des électrons dans le canal.

La figure II.3 présente d'une façon différente la relation courant de drain-tension de grille. Lorsque la tension de grille est très petite par rapport à V_{ds} ($V_{ds} > V_{gs} - V_T$), le courant de drain se situe dans la zone saturée. Puis, une augmentation de la tension de grille fait que le courant de drain devient linéaire ($V_{ds} < V_{gs} - V_T$).

Nous observons une dérive de la linéarité pour une forte tension de grille V_{gs} . Celle-ci proviendrait d'une part de la modification de la mobilité des électrons dans le canal sous l'action d'un champ électrique important à la surface du semi-conducteur et d'autre part, une partie de la tension de drain appliquée ne se retrouve pas totalement

aux bornes du canal, mais serait perdue aux bornes des résistances séries de la source et du drain.

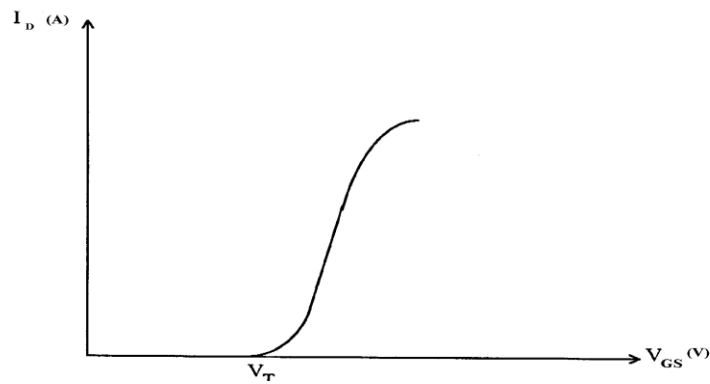


Figure II. 2 : Caractéristique $I_{DS}=f(V_{GS})$ pour $V_{DS}=Cst$ [17]

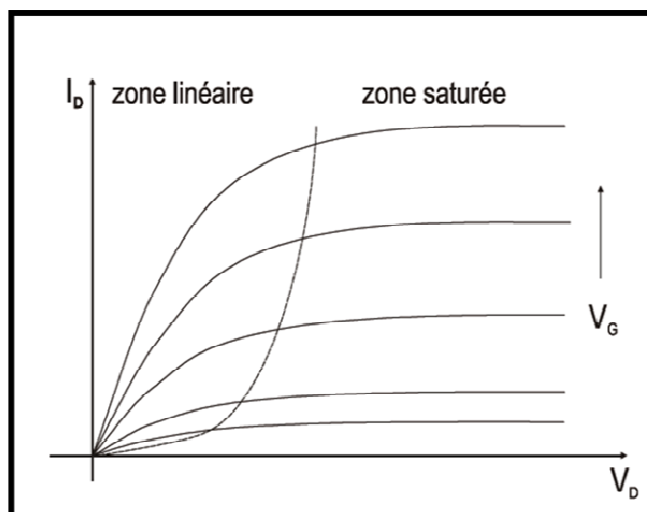


Figure II.3 : Caractéristique $I_{DS}=f(V_{DS})$ pour $V_{GS} = cst$ [18]

Il existe plusieurs paramètres importants du MOSFET, on dénombre :

- La transductance ou le gain (g_m) est définie par :

$$g_m = \frac{dI_{DS}}{dV_{GS}} \quad \text{II.6}$$

Elle doit être la plus élevée possible lorsque la longueur de canal est inférieure à 100nm.

- La conductance du canal (g_D) est donnée par :

$$g_D = \frac{dI_{DS}}{dV_{DS}} \quad \text{II.7}$$

- La pente sous-seuil représente la tension de grille qu'il faut appliquer (en régime sous le sous-seuil dit subthreshold) afin d'augmenter le courant de drain d'une décade elle est donnée par :

$$S = \frac{dV_{GS}}{d(\log I_D)} \quad \text{II. 8}$$

- Le courant à l'état<<off>> doit être le plus faible possible pour ne pas consommer de puissance.

II.4- Principe de fonctionnement d'un capteur chimique ISFET

Comme nous l'avons mentionné précédemment, le capteur ISFET a la structure d'un MOSFET seulement dans le cas d'un capteur chimique ISFET, la grille métallique est remplacée par l'ensemble constitué d'une électrode de référence, de l'électrolyte à analyser et d'une couche sensible à l'ion recherché. Le principe de fonctionnement du capteur chimique ISFET est basé sur le piégeage des ions dans la couche ionosensible. Les charges piégées introduisent une variation du potentiel chimique Ψ_0 (Eq (II .9)).

$$V_T = E_{ref} - \Psi_0 + \chi^{sol} - \frac{\phi_{si}}{q} - \frac{Q_{ss} + Q_{ox} + Q_b}{C_{ox}} + 2\phi_f \quad \text{II. 9}$$

Où:

E_{ref} : Potentiel appliqué sur l'électrode de grille ;

Ψ_0 : Potentiel électrostatique qui dépend de pH ;

χ^{sol} Potentiel de surface de l'électrolyte ;

Q_{SS} : Charge localisée à l'interface oxyde/silicium ; Q_{OX} : Charge localisée dans l'oxyde.

Le courant de drain d'un pH-ISFET I_D dans la région linéaire est donné par

l'expression suivante :

$$I_D = \mu_n C_i \frac{Z}{L} \left(\left(V_G - \left(E_{ref} - \Psi_0 + \chi^{sol} - \frac{\phi_{si}}{q} - \frac{Q_{ss} + Q_{ox} + Q_b}{C_{ox}} + 2\phi_f \right) \right) V_D - \frac{V_D^2}{2} \right) \quad \text{II. 10}$$

Seule la variation du potentiel électrostatique ψ_0 qui représente la différence de potentiel entre la membrane et la solution, influe sur le courant de drain. Le principe de fonctionnement d'un pH-ISFET est basé sur le piégeage des ions au niveau de la couche ionosensible.

II-4.1 Principe physico-chimique de la détection des ions hydrogène :

La plupart des électrolytes sont à base de solutions aqueuses. Le potentiel électrostatique ψ_0 développé, est le seul terme qui dépend réellement du pH de la solution électrolyte résultant de l'interaction de la surface de la membrane ionosensible avec les ions d'hydrogène présents dans l'électrolyte [19].

II-4.1.1 L'électrolyte

L'eau est un solvant polaire, ce qui signifie que ces molécules ne sont pas symétriquement chargées, c'est cette polarité des molécules qui lui permet de se décomposer. D'une façon générale, la conduction dans un électrolyte est induite lorsqu'on applique une polarisation à partir d'un circuit électronique [20].



L'équation (II.13) est gouvernée par la constante d'équilibre, donnée par l'expression

Suivante :

$$K_{Eq} = \frac{[H^+][OH^-]}{[H_2O]} \quad \text{II.12}$$

L'ajout d'un acide ou base va provoquer une modification d'équilibre entre la concentration des ions H^+ et OH^- .

II-4.1.2 Interface électrolyte/solide

Dans un processus électrochimique, à l'interface électrolyte/solide, la transformation chimique obéit au phénomène de transfert de charge électrique par une réaction d'oxydation et de réduction :



Un équilibre local est établi à la surface du capteur, se qui conduit à la génération d'un potentiel d'équilibre proportionnel à la concentration des espèces en solution selon la loi de Nernst [12] :

$$E_{eq} = E_{0+} \frac{K_B}{nq} \ln \frac{c_{ox}}{c_{red}} \quad \text{II.14}$$

Avec E_0 le potentiel standard, n nombre d'électrons, k_B la constante de Boltzmann, T température absolue, c_{ox} et c_{red} les concentrations des espèces Ox et Red en solution, respectivement.

Comme nous l'avons déjà mentionné, le seul paramètre qui influe sur le comportement du courant de drain, est le potentiel ψ_0 . Par l'intermédiaire de ce paramètre, l'information chimique est transformée en un signal électrique [21].

Une répartition des charges et des potentiels est introduite, lorsque les deux phases électrolyte-solide sont mises en contact. Les charges sur la surface du solide sont générées par l'ionisation des groupes de la surface dûs à leurs réaction d'équilibre acide-base avec les ions de H^+ de l'électrolyte. Ces charges dépendent de

la concentration des ions H^+ dans la solution électrolyte et le potentiel électrique sur la surface [22]. La redistribution des charges est décrite par le modèle de Stern, pour définir la double couche électrique. Ce modèle est un modèle amélioré du modèle de Gouy-Chapman [23].

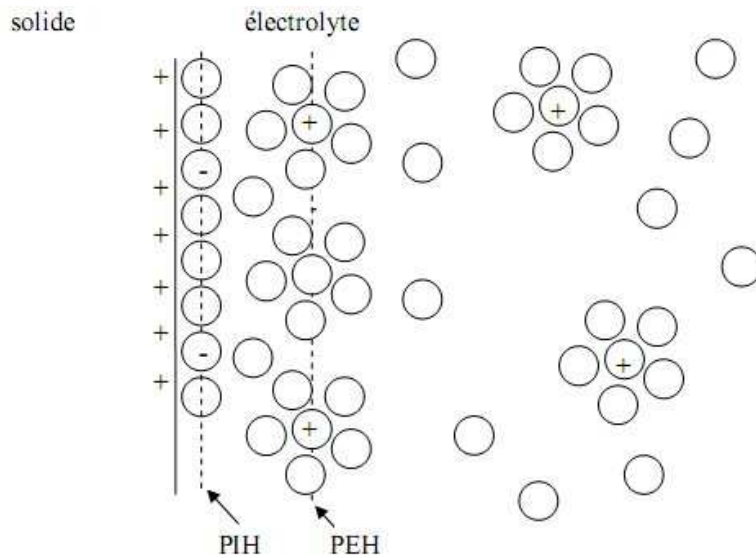


Figure II.1 : Redistribution des charges à l'interface solide/électrolyte [6].

La région la plus proche du solide, est appelée la couche interne, elle contient les ions spécifiquement adsorbés. Cette région s'étend jusqu'au plan interne d'Helmholtz (PIH), qui passe à travers le centre électrique des ions adsorbés. Elle s'appelle la première région. La deuxième région s'étale entre le PIH et le PEH, qui est le plan externe d'Helmholtz, il passe à travers le centre des ions solvatés. La troisième région s'appelle la couche diffuse. Elle s'étend du plan externe d'Helmholtz PEH jusqu'au volume de l'électrolyte.

II-2.1.3 Interface Electrolyte-Isolant-Solide (EIS)

Pour des structures EIS (Electrolyte-Isolant-Silicium), la double couche électrique a été décrite par un modèle appelé "Site-binding model" introduit en 1973 par Yates et al [21]. Ce modèle est basé sur l'existence de groupements à la surface de l'isolant. Leur nature est amphotère c'est-à-dire, que les groupes hydroxyles de la surface d'isolant peuvent être neutres, chargés positivement ou chargés

négativement. Dans le cas du dioxyde de silicium SiO_2 , ce sont les groupes silanols (SiOH), qui causent la variation des charges de la surface d'oxyde lorsque le pH varie.

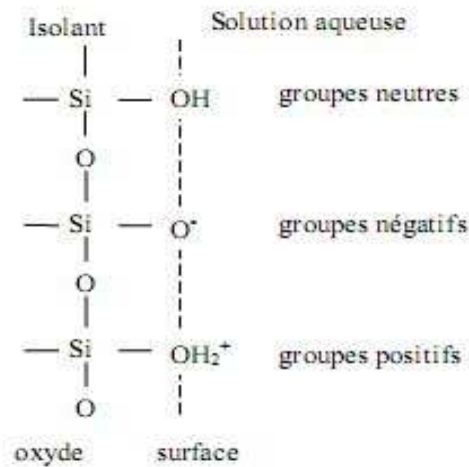


Figure II. : Présentation schématique de la théorie du modèle “Site-binding “ [5].

L'arrangement des ions de la surface au volume de l'électrolyte détermine le potentiel de surface avec une dépendance des propriétés des groupes de surface et des charges de surface en fonction de la concentration d'électrolyte [21].

II-3 Membranes sensible au pH

La sélectivité et la sensibilité chimique d'un capteur pH-ISFET sont limitées par les propriétés de l'interface électrolyte/isolant. Le premier isolant qui a été étudié pour la détection des ions H^+ est l'oxyde de silicium. Cependant, ce matériau a rapidement montré ses limites pour la mesure du pH. Sa sensibilité est subnernstienne ($<30\text{mV/pH}$, la valeur de sensibilité quasi-nernstienne est 55mV/pH), avec des temps de réponse très long, et une faible durée de vie [23]. Pour cela, les recherches se sont tournées vers les structures isolantes bicouches. En conservant l'oxyde de silicium SiO_2 vu ses qualités d'interface, et sa bonne tenue au claquage, on dépose sur cette couche d'autres matériaux ayant de meilleures propriétés d'interface pour la détection de l'ion H^+ . Les principales couches sensibles aux ions d'hydrogène sont :

- Le nitrure de silicium Si_3N_4 . C'est un matériau qui est bien connu et maîtrisé dans la technologie des circuits intégrés. La structure $\text{SiO}_2/\text{Si}_3\text{N}_4$ est

caractérisée par une réponse stable, rapide, une bonne linéarité, et une sensibilité quasi-nernstienne (entre 50-56 mV/pH). Généralement, la couche de Si₃N₄ est obtenue par un dépôt chimique en phase vapeur (LPCVD) [21-22].

- L'oxyde d'aluminium (Al₂O₃). Ce type de diélectrique permet d'obtenir une sensibilité satisfaisante variant entre 53-57 mV/pH [2], et des réponses faibles. Cependant son dépôt n'est pas compatible avec les technologies des circuits intégrés à la base de silicium.
- L'oxyde de tantale (Ta₂O₅). Cette couche diélectrique est caractérisée par un temps de réponse rapide de l'ordre de milliseconde [24], une bonne sensibilité qui varie entre 54 et 60 mV/pH. Les films de Ta₂O₅ sont plus performants que les films de SiO₂ et Si₃N₄ pour la fabrication de membranes sensibles aux ions H⁺ [19].

L'inconvénient pour ces films est de ne pas être compatible avec les technologies des circuits intégrés. De plus ce matériau n'est pas sélectif aux ions potassium K⁺, calcium Ca⁺ et sodium Na⁺ [25].

Le Tableau II-2 donne un sommaire des couches ionosensibles utilisées dans le capteur ISFET [26].

caractéristiques	SiO ₂	Si ₃ N ₄	Al ₂ O ₃	ZrO ₂	Ta ₂ O ₅
Intervalle de ph	4-10	1-13	1-13	0-8	2.5-13
Sensibilité [mv/ph]	25-46	46-56	53-56	50-56	55-57
Temps de réponse [95%]	<1min	<1s	<1s	>1min	<1s
Stabilité [mv/h.ph]	Instable	1.0	0.8	0.2	0.5

D'autres membranes sensibles aux ions H^+ ont été proposées pour remplacer le Si_3N_4 comme le WO_3 , ZrO_2 , et Gd_2O_3 , du fait de leurs grandes sensibilités. Par contre, la faible qualité d'interface limite leurs utilisations [27].

Les membranes organiques sont rarement utilisées pour la détection des ions H^+ . par contre elles sont utilisées d'une part pour la détection d'autres types d'ions tels que les ions K^+ , Ca^+ , Na^+ , NH_4^+ , et Cl^- , d'autre part pour la détection de molécules biologiques comme les enzymes par l'intermédiaire des technologies liées aux polymères. On peut citer comme exemple :

- Le polychlorure de vinyle (PVC). Ce polymère est chimiquement stable. Cependant, il peut être conducteur, donc il est nécessaire de réaliser des structures isolantes telles que $SiO_2/Si_3N_4/PVC$. Le PVC peut être utilisé pour la détection des enzymes.
- Polysiloxane (PSX). Une structure $SiO_2/Si_3N_4/PXS$ a été développée par I. Humenyk et al pour la détection de l'ion d'ammonium. Cette membrane est caractérisée par une bonne sensibilité. Néanmoins, le dépôt de cette membrane s'effectue par la méthode de microgoutte. Cette technique pose des problèmes de positionnement sur la grille de SiO_2/Si_3N_4 , elle est caractérisée par une non-reproductibilité, elle empêche donc l'obtention d'un processus industriel de fabrication pNH4-ISFET [27].

II.4.7. Les inconvénients et les avantages d'un ISFET

Le tableau II.3 regroupe les avantages et les inconvénients des capteurs chimiques ISFETs [25].

Tableau II.3 : Avantages/Inconvénients des capteurs chimiques ISFETs.

Avantage	Inconvénients
Compatibilités avec la technologie silicium	Dérive temporelle

Faible cout	Vieillessement
Possibilité de conception des capteurs Jetables	Sensible à la force ionique de la solution
Miniaturisation	Calibration fréquente
Intégration dans les systèmes monolithiques	Optimisation de packaging
Robustesse	Difficulté d'intégration des couches sensibles
Facilité et commodité d'utilisation	Intégration d'une électrode de référence
Faible résistance de sortie	
Caractère générique : adaptation a tous type d'ions dans le cadre de système multi capteurs	
Court temps de réponse	
Faible énergie de consommation	
Interface avec la micro fluidique	
Non nécessite du maintien spéciale	

Conclusion

Un capteur chimique de type ISFET à une structure de base similaire à un transistor MOSFET, le rôle d'un capteur ISFET est défini à partir de sa couche chimiquement sensible. Donc, seules les propriétés chimiques des couches ionosensibles déterminent les caractéristiques du capteur chimique ISFET telle que la sensibilité et la sélectivité.

En plus de leur bonne sensibilité, leur temps de réponse court, l'avantage majeur de ce type de capteur est la compatibilité avec la technologie de fabrication de silicium, on peut intégrer sur une même puce plusieurs capteurs pour différentes détections d'ions, grâce aux techniques de production collective de la microélectronique.

Chapitre III .Simulation des étapes technologiques

de réalisation du capteur

chimique ISFET.

Introduction

Les transistors chimiques à effet de champ sont des capteurs qui transforment les grandeurs chimiques en un signal électrique. L'utilisation des technologies de la microélectronique pour la réalisation de ces capteurs donne une possibilité d'intégration et une production à faible coût. Les simulateurs TCAD (Technology Computer-Aided Design) permettent la modélisation du comportement physique et électrique d'un composant électronique, dans le but d'économiser le temps et le coût de développement, et ainsi de pouvoir envisager et optimiser des solutions pour améliorer les performances des dispositifs. Les simulateurs existants sur le marché (ISE, SYNOPSIS, SILVACO,...) ont le même principe de fonctionnement. Dans ce travail, nous avons utilisé le simulateur TCAD-SILVACO (ATHENA).

Dans ce chapitre, nous présenterons le logiciel de simulation TCAD-SILVACO, et son module de simulation : ATHENA pour la simulation des processus technologiques. Puis, nous ferons une description des différentes étapes de simulation du procédé technologique telles que l'oxydation, la diffusion, la gravure, etc.

III - Conception par simulation (TCAD-SILVACO) du capteur ISFET

III -1. Présentation du logiciel TCAD-SILVACO

SILVACO (Silicon Valley Corporation) est un environnement de logiciels qui permet de concevoir et prévoir les performances des dispositifs à semi-conducteur. Cet outil sert à la modélisation des dispositifs à semi-conducteur avant leur fabrication. Il est très utile dans le développement de beaucoup de projets de recherches. Le TCADSILVACO inclut de nouveaux modèles physiques qui emploient des méthodes et des algorithmes numériques efficaces, de nouvelles techniques de maillage, l'optimisation des solutions

linéaires, etc, tout en permettant d'obtenir des résultats de simulation très proches de celles de la pratique. L'avantage majeur de ce type de simulateurs est qu'il donne la possibilité de visualiser des phénomènes physiques difficilement accessibles et donc observables. Les modules de TCAD-SILVACO peuvent être utilisés pour :

- La simulation des étapes de fabrication technologique tels que, ATHENA, SSupreme3, SSupreme4, etc.
- La simulation électrique des dispositifs tels que, les Diodes, les MOSFET, les transistors bipolaires..., réalisée par le module ATLAS.
- Virtual Wafer Fab pour automatiser la simulation de fabrication des Wafers.

Dans cette étude, les simulations sont effectuées par le module ATHENA.

III -1 Le logiciel ATHENA

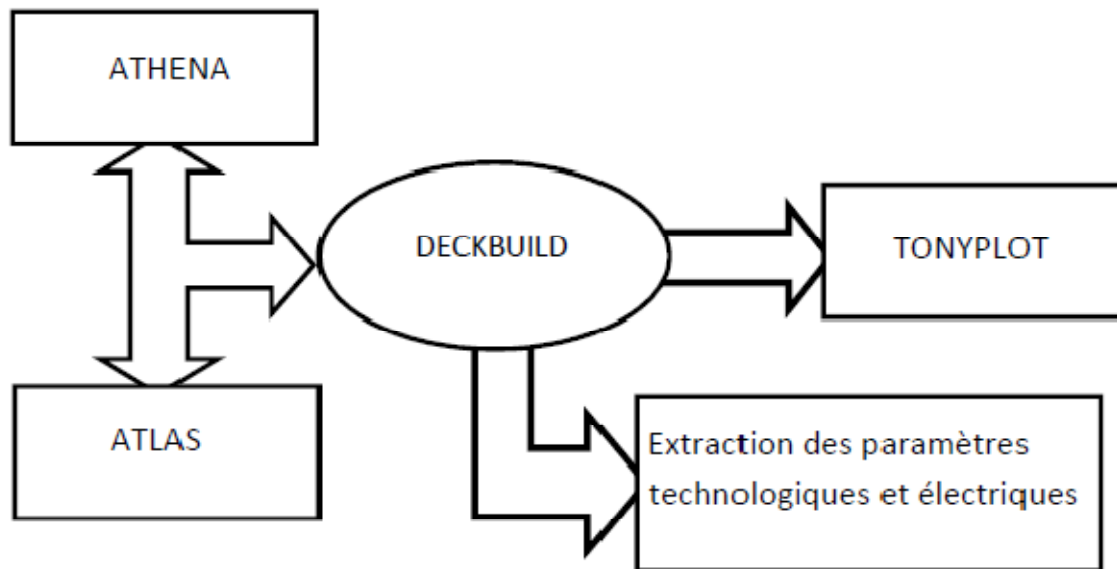
Le logiciel de simulation ATHENA de TCAD-SILVACO fournit des possibilités générales pour la simulation des processus utilisés dans l'industrie des semi-conducteurs : diffusion, oxydation, implantation ionique, gravure, lithographie, procédés de dépôt. Il permet des simulations rapides et précises de toutes les étapes de fabrication utilisées dans la technologie CMOS, bipolaire, SOI, optoélectronique, MEMS, et les composants de puissances [26]. Le programme de simulation (défini comme entrée) des différentes étapes technologiques et les phénomènes physiques, s'établi avec le module DECKBUILD de TCAD-SILVACO, puis la visualisation de la structure de sortie s'effectue avec le module TONYPLOT.

- **DECKBUILD**

Le DECKBUILD est l'environnement où est défini le programme de simulation à travers des commandes spécifiques. De multiples simulateurs considérés comme des entrées peuvent être utilisés avec le DECKBUILD : ATHENA, ATLAS, SSUPREM3, etc. L'affichage des résultats de simulation tels que les paramètres technologiques (profondeur de jonction, concentration des porteurs) et même les paramètres électriques (tension de seuil, courant, etc.) est effectué à l'aide d'une fenêtre d'information (Output window).

- **TONYPLOT**

TONYPLOT est L'environnement où sont visualisés les résultats des simulations. Il donne des possibilités complètes pour la visualisation et l'analyse des caractéristiques de sortie (structure du composant électronique, profil de dopage, et caractéristiques électriques). Selon le programme de simulation, TONYPLOT peut donner des caractéristiques de sortie en une dimension (1D), deux dimensions (2D), ou trois dimensions (3D).



III -1 : Schéma synoptique des modules utilisés dans la simulation par TCAD-SILVACO

III - Cahier des charges

L'objectif de ce travail est de faire une conception par simulation, sous ATHENA , d'un capteur chimique ISFET similaire à un MOSFET à canal N. Pour définir les paramètres technologiques nécessaires à la simulation, tels que les épaisseurs des couches isolantes, la longueur de la grille, la profondeur des jonctions,

ainsi que certains d'autres paramètres, nous nous sommes basés sur des valeurs trouvées dans la littérature, concernant l'étude de différentes structures des capteurs chimiques.

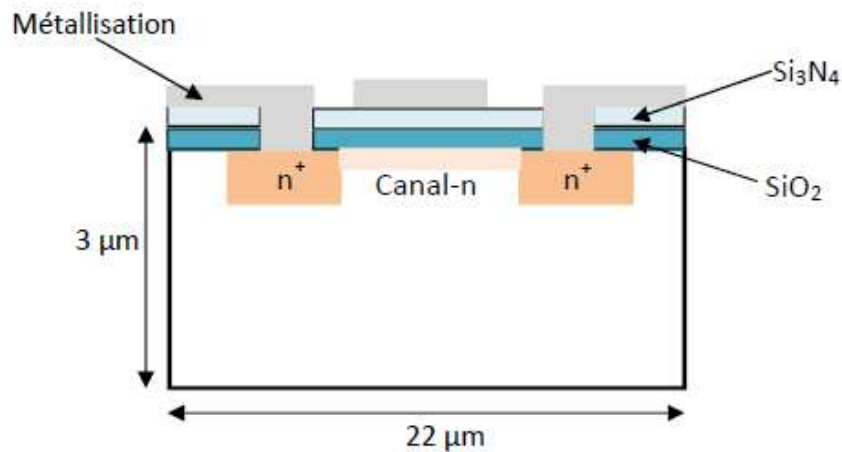


Figure III -1 : Schéma d'un à structure MOSFET canal N.

D'un point de vue pratique, l'un des avantages primordiaux des capteurs chimiques de type ISFET, est la compatibilité avec les techniques de fabrication standard MOS. Comme nous l'avons mentionné dans le chapitre I, la structure d'un dispositif ISFET est similaire à celle d'un MOSFET. La plupart des capteurs chimiques fonctionnent comme des dispositifs en mode d'appauvrissement [27]. Donc la stratégie de conception va être basée sur la simulation d'un MOSFET à canal préformé (transducteur électrique du capteur ISFET). Pour un transistor MOS à canal préformé, la tension de seuil est liée au niveau de dopage dans le canal mais principalement à son profil proche de la surface. La tension de seuil d'un transistor MOS peut être ajustée avec précision en utilisant l'implantation ionique. Cette méthode de dopage consiste à bombarder un échantillon de matériau avec des ions de l'impureté désirée et à des énergies variant de quelque Kilo-électronvolts à quelques Méga-électronvolts. La profondeur de pénétration des ions dans un échantillon est proportionnelle à l'énergie de bombardement. Nous avons calculé théoriquement la dose d'arsenic implanté à partir de la relation suivante [28] :

$$V_T(\mathbf{imp}) = V_T(\mathbf{0}) + \frac{q \cdot D}{C_G} \quad \text{III. 1}$$

Où

D : dose d'implantation pour ajuster la tension de seuil ;

q : charge d'électron ;

C_G : la capacité de grille.

La grille est composée de deux couches de diélectriques : le nitrure de silicium

Si₃N₄ et l'oxyde de silicium SiO₂, la capacité de grille est donnée par l'expression [28] :

$$C_G = \frac{C_{SiO_2} \times C_{Si_3N_4}}{C_{SiO_2} + C_{Si_3N_4}} = \left[\frac{\epsilon_0 \cdot \epsilon_{SiO_2} \cdot \epsilon_{Si_3N_4}}{t_{SiO_2} \cdot \epsilon_{Si_3N_4} + t_{Si_3N_4} \cdot \epsilon_{SiO_2}} \right] \quad \text{III. 2}$$

Où :

ε₀ : Permittivité diélectrique du vide ;

ε_{SiO₂} : Permittivité diélectrique de l'oxyde de silicium =3.9 ;

ε_{Si₃N₄} : Permittivité diélectrique du nitrure de silicium ;

t_{SiO₂} : Épaisseur de l'oxyde de silicium;

t_{Si₃N₄} : Épaisseur du nitrure de silicium.

$$|D| = \frac{(V_T(\mathbf{imp}) - V_T(\mathbf{0})) \times C_G}{q} \quad \text{III.3}$$

Les paramètres technologiques

✓ L'épaisseur des films diélectriques Si₃N₄/SiO₂ : 65 nm pour chacune des deux couches ;

- ✓ La longueur de grille : $16 \mu\text{m}$;
- ✓ La profondeur des jonctions source/drain $X_{jS/D} = 1.5 \mu\text{m}$.

Les paramètres électriques

- ✓ La tension de seuil $V_T = -1\text{V}$;
- ✓ La polarisation électrique : $V_G \leq 2\text{V}$ et $V_D \leq 1\text{V}$;

En tenant compte de ces paramètres technologiques et électriques, et à partir de l'équation (II-16), la valeur théorique de la dose d'implantation est $D = 2.2 \cdot 10^{11}$ at/cm².

III- Simulation en 2D de dispositifs sous ATHENA

Le procédé technologique est simulé à l'aide du module ATHENA, chaque étape de fabrication utilise un modèle physique pour la simulation des phénomènes réels existants dans le processus de fabrication réel. Cependant pour l'ISFET qui n'est pas un composant conventionnel, la difficulté avec l'outil TCAD est de ne pas pouvoir simuler l'interface électrolyte/isolant, ainsi que le comportement du pH de l'électrolyte [29]. Pour cette raison, nous nous sommes intéressés à la simulation de ce dispositif en tant que MOSFET qui peut être considéré comme le transducteur électrique de l'ISFET

III-2 Description du procédé technologique

Une étape très importante et indispensable qui doit être effectuée avant d'entamer la simulation du procédé technologique est le maillage du dispositif.

III-2.1 Maillage du dispositif

Le maillage joue un rôle important pour l'obtention de bonnes simulations. Celui-ci doit être fait avec la plus grande attention pour garantir la fiabilité des résultats. La méthode numérique utilisée pour résoudre les équations physiques est la méthode des éléments finis. Son principe de base est la discrétisation par éléments des équations à traiter. Les éléments qui définissent la maille élémentaire utilisée par le simulateur sont des prismes. Pour obtenir des résultats fiables et précis, la finesse du maillage doit être définie en fonction des variations des grandeurs

physiques. Le choix de maillage doit être fait de façon à avoir un compromis entre la vitesse d'exécution et l'exactitude des résultats [30]. Le maillage doit être très fin pour les régions telles que la région du canal, les jonctions drain/ substrat et source/substrat, alors qu'il peut être moins serré pour d'autres régions du transistor, en dehors de ces zones actives. La maille conçue pour notre dispositif est montrée sur la figure II-7 ci-dessous.

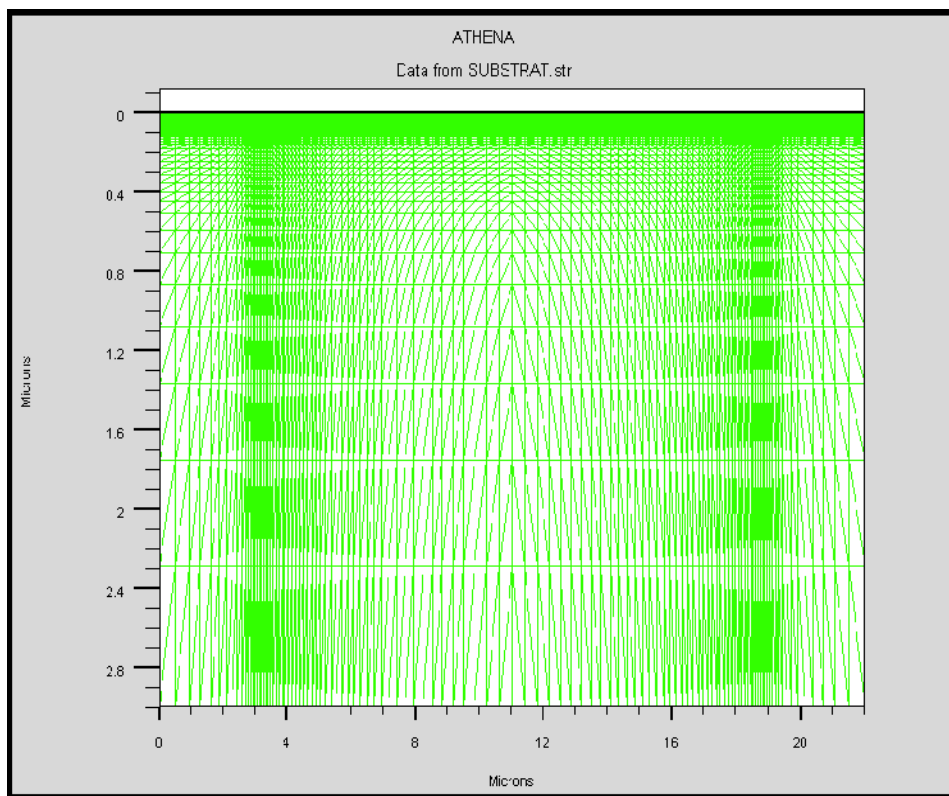


Figure III -2 : Maillage du dispositif.

III-1.2 Choix du substrat

Avant de réaliser tout composant microélectronique, il faut définir le substrat, c'est-à-dire le matériau dans lequel sera réalisé le dispositif.

Les capteurs ISFET peuvent être fabriqués à partir de plusieurs types de substrats tels que les wafers de silicium, les verres en pyrex, et les céramiques [31]. Dans notre cas, le choix est porté sur un substrat silicium de type p (dopé Bore) où la mobilité des électrons minoritaires est trois fois plus grande que celle des trous pour

la conduction dans le futur canal du transistor.

Comme dans tout processus de réalisation de transistor MOS, le substrat doit être peu dopé, l'orientation cristallographique des plaquettes est généralement l'axe $\langle 100 \rangle$, qui assure une meilleure qualité d'oxyde de grille [28]. Concernant le dopage du substrat, nous prenons $N_a = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$.

III-1.3 Phase 1 : dépôt d'oxyde de pré-implantation

Cette opération a pour but de faire déposer une couche mince de dioxyde de silicium SiO_2 avec une épaisseur de 50 nm. Afin de limiter la création de défauts dans le silicium à travers cette couche, nous allons implanter une dose d'impuretés de dopants d'Arsenic à travers cette couche pour créer les zones actives source et drain du composant. Le choix des grandeurs technologiques a été fixé après plusieurs simulations en tenant compte du cahier des charges préalablement établi.

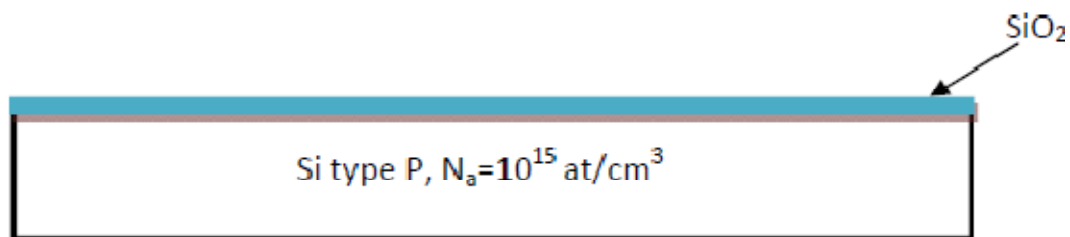


Figure III.3 : Dépôt d'oxyde de pré-implantation

III-1.4 Phase 2 : Formation des zones actives source et le drain

La première étape consiste à faire un dépôt de résine de protection d'une épaisseur de $2 \mu\text{m}$ sur la couche d'oxyde de pré-implantation.

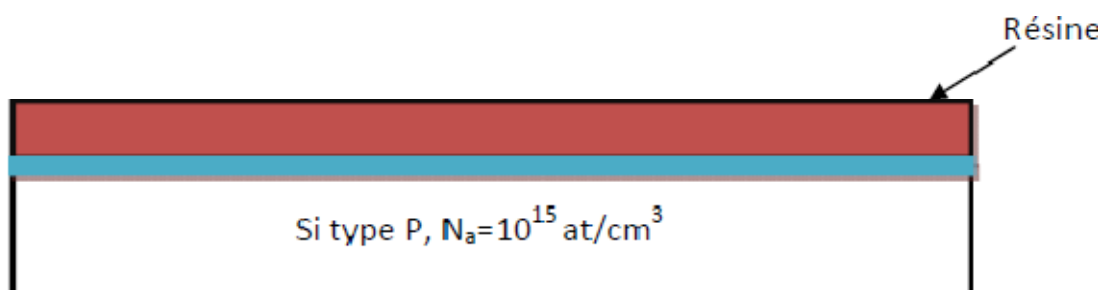


Figure III .4 : Dépôt de la résine protectrice

L'ouverture des fenêtres des caissons source et drain exige une opération de

gravure de la résine, simulée en utilisant le modèle de Monté Carlo [28].

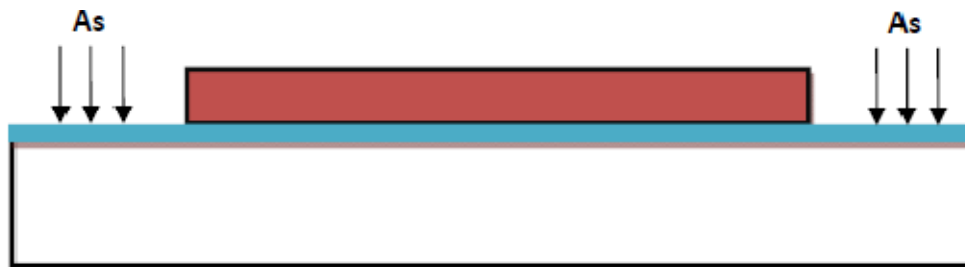


Figure III.5 : Ouverture des fenêtres de la source et drain.

Les zones actives des dispositifs sont réalisées par l'implantation ionique avec une dose d'implantation d'arsenic de 5.410^{14} at/cm² et une énergie de 100 keV à travers un oxyde de pré-implantation et une résine de protection déposée sur la région de la grille du composant. Le choix des grandeurs technologiques a été fixé après plusieurs simulations en tenant compte de la profondeur de jonction et de la concentration d'ions d'arsenic des zones actives (source et drain). L'angle de bombardement utilisé dans cette simulation est égal à 7° .



Figure III.6 : Formation des régions source et de drain N⁺

La figure III.7 montre que la concentration d'impuretés d'arsenic dans les zones actives (source et drain) est plus élevée en surface qu'en volume (de l'ordre de 10^{20} at/cm³ près de la surface).

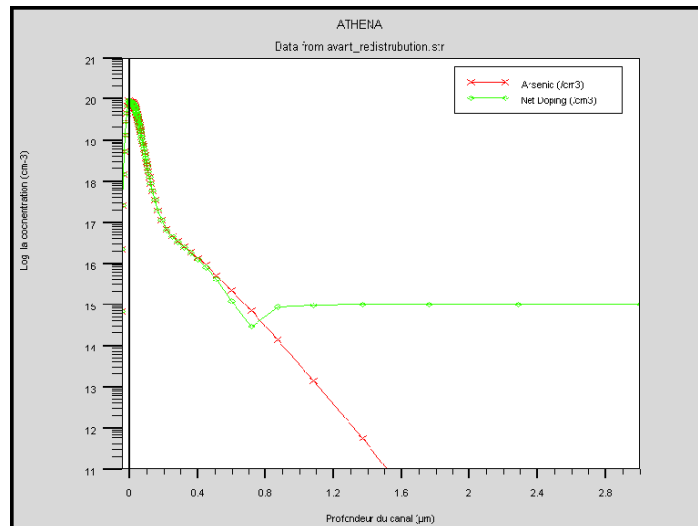


Figure III.7 : Profil de distribution des ions d'arsenic implantés dans le substrat (1D), avant recuit.

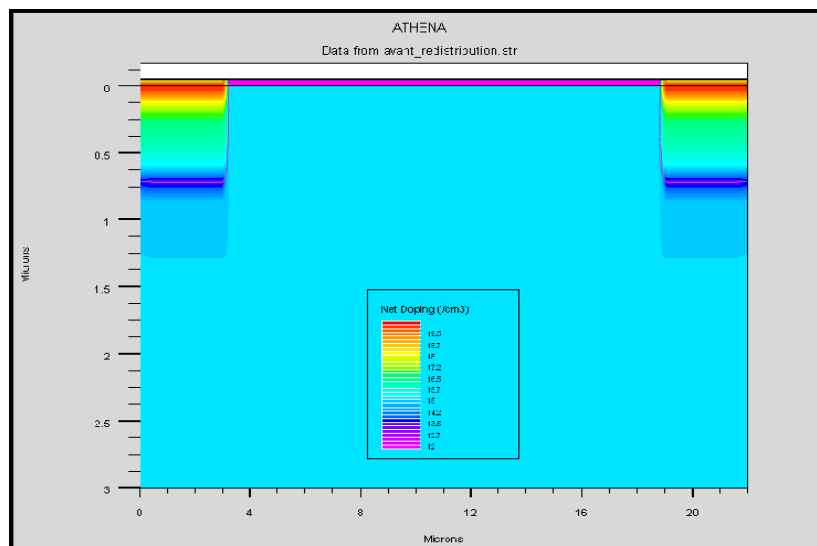


Figure III.8 : Structure bidimensionnelle simulée par ATHENA après redistribution.

III-1.6 Phase 4 : formation du canal

La première opération consiste à graver l'oxyde de silicium précédemment formé sur la face avant de substrat pour créer un oxyde de pré-implantation destiné à la formation du canal.

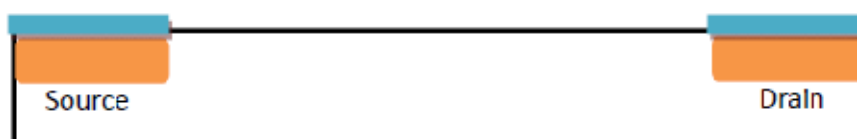


Figure III.8 : Gravure de l'oxyde précédemment formé.

Après l'ouverture d'une fenêtre de grille, nous avons effectué un dépôt d'une couche mince d'oxyde de pré-implantation à travers laquelle les ions d'arsenic vont être implantés dans le canal. La couche de résine déposée (figure III.9) joue le rôle de la couche protectrice des zones actives N^+ .

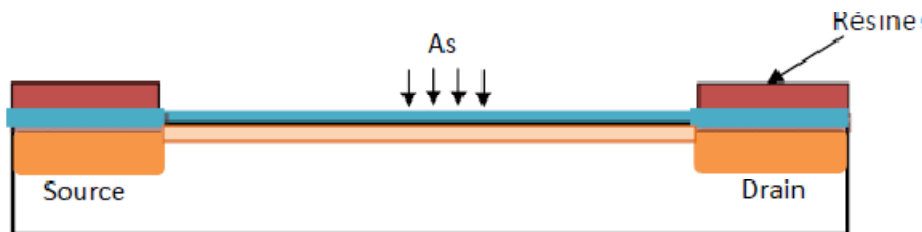


Figure III.9 : Implantation des ions d'arsenic dans le canal.

L'opération suivante consiste à graver la résine et la couche d'oxyde de pré-implantation. Cette dernière contient beaucoup de défauts dus à l'implantation ionique. L'optimisation des paramètres technologiques concernant la formation du canal sera décrite dans le chapitre suivant.

III-1.7 Phase 5 : formation de l'oxyde de grille

L'oxyde de grille a été réalisé en utilisant une oxydation thermique sèche du silicium. Ce dernier assure la croissance d'une couche d'oxyde de bonne qualité, contrairement à une oxydation en atmosphère humide.

La simulation de l'étape d'oxydation thermique a été optimisée pour avoir la couche d'oxyde d'épaisseur voulue (65 nm). La figure II-19 représente le cycle thermique de cette oxydation.

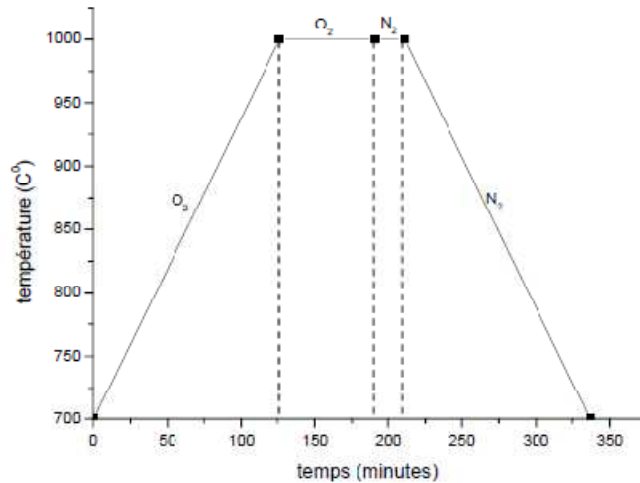


Figure III.10 : Cycle thermique de la formation d'oxyde de grille.

Cette oxydation s'effectue sous une atmosphère en oxygène sec dans le but d'avoir un oxyde de bonne qualité à l'interface SiO₂/Si, en particulier pour minimiser les pièges présents à cet interface.

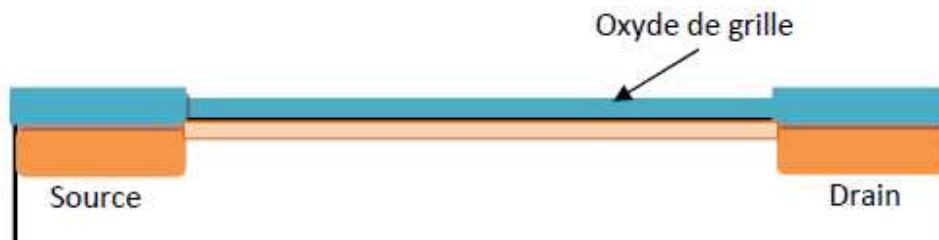


Figure III.11 : Formation d'oxyde de grille.

III-1.8 Phase 6 : dépôt de nitrure de silicium Si₃N₄

Nous avons déposé une couche de nitrure de silicium de 65 nm qui assure une bonne qualité diélectrique. Cette couche est utilisée dans les capteurs chimiques ISFET comme une membrane sensible aux ions d'hydrogène. Le dépôt de Si₃N₄ est obtenu généralement par dépôt chimique en phase vapeur (LPCVD). Cette méthode

est modélisé en utilisant le modèle physique de Monté Carlo.

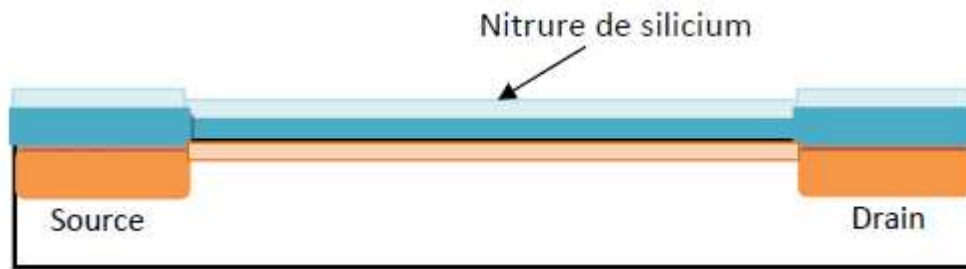


Figure III.12 : Dépôt de nitrure de silicium.

III-1.9 Phase 7 : métallisation

Les contacts métalliques du composant sont réalisés par un dépôt sur la surface avant du composant d'une couche d'aluminium avec une épaisseur de 100 nm. Puis une opération de gravure est nécessaire pour enlever le métal des zones non désirées

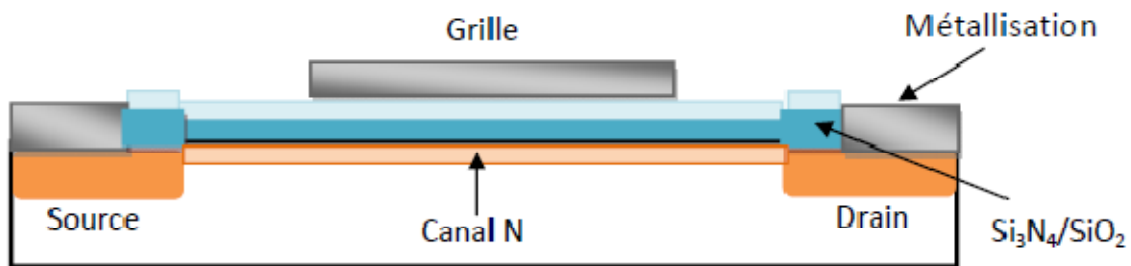


Figure III.13 : formation des contacts métalliques.

IV- Paramètres technologiques et géométriques du composant fini

A la fin de ce chapitre, nous regroupant l'ensemble des paramètres du MOSFET canal N suite à la simulation par ATHENA et nous donnons la figure du dispositif fini (figure III.14). Concernant les dimensions, il s'agit des caissons implantés, de la longueur du canal et de la longueur de la grille métallique, ainsi que les profondeurs des jonctions source et drain. Les dimensions du MOSFET seront définies.

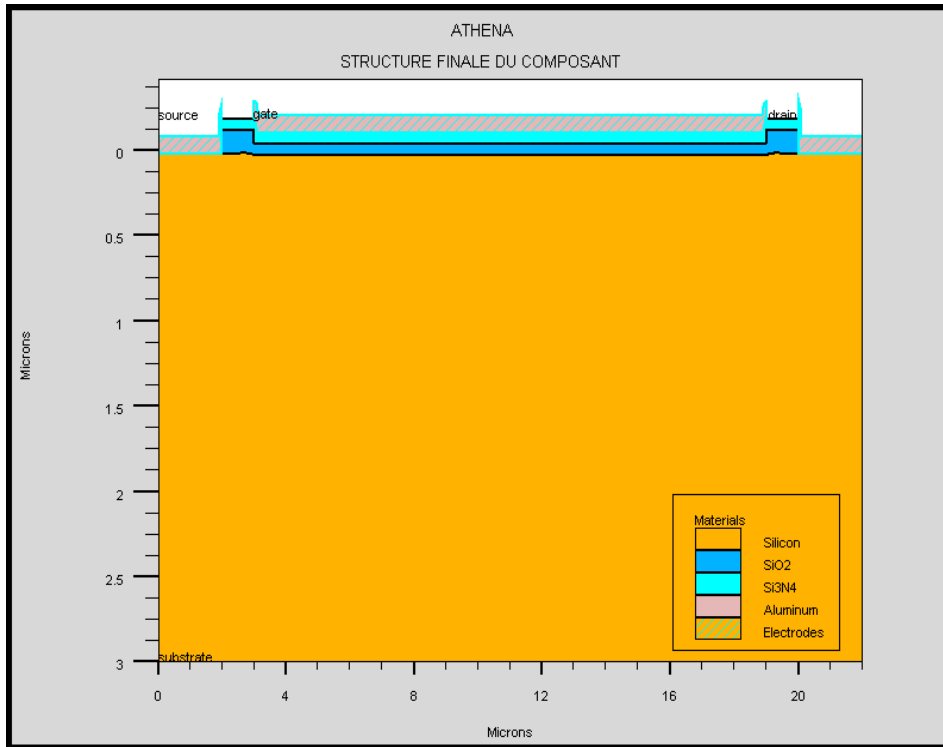


Figure III-14 : Structure finale du composant simulée sous ATHENA.

En ce qui concerne les paramètres technologiques, nous allons présenter une synthèse des caractéristiques du dispositif fini dans le tableau ci-dessous : le type et le dopage du substrat, le dopage des caissons source et drain, l'épaisseur des isolants, à savoir l'oxyde de grille et le nitrure de silicium, la longueur du canal, et enfin l'épaisseur de la couche de métal (Aluminium) servant d'électrode de grille.

Tableau III -1 : Gradeurs optimales de la structure ISFET.

	Substrat	Source	Drain	Canal	SiO ₂	Si ₃ N ₄	Métallisation (Al)
Géométrie (x.y) μm^2	22.3	/	/	/	/	/	/
Epaisseur (nm)	/	/	/	/	65	65	100
Longueur (μm)	16	3	3	16	/	/	/

Profondeur (μm)	3	1.5	1.5	/	/	/	/
Type	P	N ⁺	N ⁺	N			
Dose (As)	/	5.4 10 ¹⁴	5.4 10 ¹⁴	/			
Dopage (cm ⁻³)	10 ¹⁵	9.6 10 ¹⁴	9.6 10 ¹⁴	10 ¹⁵			

Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons présenté le principe de fonctionnement, les performances, les modules de simulation ATHENA , l'environnement où est défini le programme de simulation (DECKBUILD),et l'outil de visualisation (TONYPLOT) du logiciel TCAD-SILVACO. Puis nous avons décrit les étapes de simulation du procédé technologique réalisé par le logiciel ATHENA, en présentant pour chaque étape technologique le modèle physique utilisé pour cette simulation.

L'étude des profils de distribution des porteurs nous a permis de définir la concentration des ions d'arsenic et les profondeurs de jonctions des zones actives. Nous terminons ce chapitre en regroupant dans le tableau III.1 les principaux paramètres technologiques du dispositif MOSFET simulé par ATHENA.

Conclusion générale

L'objectif de notre travail était d'étudier les paramètres technologiques et électriques d'un transistor MOSFET à l'aide du simulateur TCAD-SILVACO, pour la conception d'un capteur chimique de type ISFET .

L'étude théorique sur les différents capteurs électrochimiques (conductimétriques, ampérométriques, et potentiométrique), nous a permis de comprendre le principe de fonctionnement d'un capteur chimique ISFET, à travers l'ensemble des équations qui définissent les différents modes de fonctionnement d'un transistor MOSFET présentant la partie transducteur électrique du capteur chimique. Ainsi, cette étude nous a permis de sélectionner la membrane de nitrure de silicium Si_3N_4 comme la couche ionosensible de ce capteur ISFET. Tout d'abord, nous avons fait une étude sur les phénomènes des réactions à l'interface Electrolyte-Isolant (couche sensible)-Solide, en décrivant le modèle de "sitebinding

La simulation a été effectuée au moyen du simulateur TCAD-SILVACO, qui permet la modélisation du comportement technologique et électrique des composants à base de semi-conducteurs. Nous avons ensuite mis au point, à travers un ensemble de modèles physiques sur lesquels est basé le logiciel, la simulation des différentes étapes de fabrication technologique (oxydation, diffusion, gravure...), à l'aide de l'outil ATHENA de TCAD-SILVACO. L'étude des profils de distribution des porteurs nous a permis d'optimiser la concentration des ions d'arsenic et les profondeurs de jonctions des zones actives (source et drain). L'ensemble des simulations par ATHENA nous a permis d'obtenir un cahier des charges qui regroupe tous les paramètres technologiques et géométriques du dispositif à étudier.

Pour la réalisation du canal préformé de notre capteur ISFET, nous avons optimisé les grandeurs d'implantation ionique dans le but d'ajuster la tension de seuil selon le cahier des charges.

En terme de perspectives, il nous paraît important de développer une manipulation

expérimentale pour étudier le comportement électrochimique du capteur chimique ISFET avec une membrane ionosensible de nitrure de silicium conçu et simulé préalablement avec le simulateur TCAD-SILVACO. L'utilisation d'un nouveau type de diélectrique oxynitrure de silicium SiO_xN_y comme couche sensible est notamment prometteuse, car elle pourrait permettre la détection des ions d'hydrogène, avec une meilleure sensibilité.

Références bibliographiques

- [1] J.W. Schultze, T.Osaka , M. Datta, “Electrochemical microsystem technologies“, Taylor and Francis, pp.384, 2002.
- [2] A. Hierlemann, “Integrated chemical microsensor systems in CMOS Technology“, Springer, pp.29, 2005.
- [3] B. Torbiero, “ développement de microcapteurs électrochimiques pour l’analyse en phase liquide“, thèse de doctorat, Institut National des Sciences Appliquées de Toulouse, 2006.
- [5] I. Humenyuk, “ Développements des microcapteurs chimiques chemfets pour l’analyse de l’eau“, thèse de doctorat, Institut national des sciences appliquées de Toulouse, 2005.
- [6] R.F Taylor, “Handbook of chemical and biological sensors“, IOP Publishing Ltd, 1996.
- [7]Tahanout .C, « Etude, Simulation Electronique d’un micro capteur de gaz à base d’oxyde semi-conducteur». Thèse de magister, Université M’Hamed Bougara-Boumerdes, 2010.
- [8]Zein.J. «Outils CAO pour microsystèmes», thèse de doctorat, institut national polytechnique de Grenoble, 2003.
- [9] W.Olthuis, “Chemical and physical FET-Based sensors or variations on an equation“, Sensors and Actuators B 105 pp.96-103, 2005.
- [10] S. Kal and Bhanu Priya, Design and modeling of ISFET for pH sensing“, IEEE 10 Conference, pp.1-4, 2007.
- [11] M. W. Shinwari, M. Jamal Deen , D.Landheer,“ Study of The Electrolyte-Insulator Semiconductor Field-E \square ect Transistor (EISFET) with applications in biosensor design“, Microelectronics Reliability 47, 2007, pp.2025-2057.
- [12] L. K. Meixner, S. Koch,“ Simulation of ISFET operation based on the site-binding model“, Sensors and Actuators B 6, pp. 315-318, 1992.
- [13] M. P.Gouzy, “Développement d’interfaces adaptées aux analyses biochimiques et biologiques -application aux capteurs chimiques CHEMFETs“, thèse de doctorat, Institut National des Sciences Appliquées de Toulouse, 2004. [14] M. Yuqing, G. Jianguo, and C. Jianrong, «Ion sensitive Field Effect transducer based biosensors, » Biotechnology Advances, 2003.
- [15]Bogdan Mihail CRETU, «Performances et fiabilité des Transistors MOS sub 0.1 μm »

Thèse de Doctorat de L'INPG, Janvier 2003

[16] H. Mathieu, « Physique des semiconducteurs et des composants électroniques », Masson (1987) 363.

[17]B. Torbiero, « Développement de microcapteurs électrochimiques pour l'analyse en Phase liquide », thèse de doctorat, INSA de Toulouse, 2006.

[18] L.Bousse, «Operation of Chemically Sensitive Field-Effect Sensor as a function of the Insulator-Electrolyte Interface», 1983

[19]Ali Amari « Etude de la réponse au pH de structures microelectroniques a membranes de nitrure de silicium fabriqué par LPCVD», Thèse de doctorat de Toulouse, 1984.

[20]J.C.Dutta. «Modeling ion sensitive Field Effect transistors for biosensor applications», article 2010.