الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية

République Algérienne démocratique et populaire

وزارة التعليم العالى و البحث العلمى

Ministère de l'enseignement supérieur et de la recherche scientifique

جامعة سعد دحلب البليدة

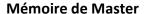
Université SAAD DAHLAB de BLIDA

كلية التكنولوجيا

Faculté de Technologie

قسم الإلكترونيك

Département d'Électronique



Mention Électronique Spécialité micro-électronique

présenté par

**BRAHIMI** Chakib

&

**BENLEMDJALDI Moussa** 

# Simulations de l'influence des défauts sur une diode Schottky à base AlGaAs

Proposé par : Mr : FILALI Walid

Mr: AISSAT Abdelkader

Année Universitaire 2017-2018



#### Résumé

L'objectif principal de ce travail est d'étudier les caractéristiques d'une diode Schottky à base AlGaAs que sont obtenus après la simulation assisté par logiciel "SILVACO". Pour bien comprendre le comportement de cette diode et son principe de fonctionnement et les phénomènes participant dans la conductivité du courant dans ce dernier, on a fait un partie théorique contient des généralités et des notions du base sur les semi-conducteurs en générale et ce type de composants spécialement. La simulation nous a permis d'étudier l'influence des défauts et d'autres paramètres sur les caractéristiques électriques tels que I-V and C-V.

Mots clés: Diode; Schottky; Semi-conducteurs.

#### **Abstract**

The main objective of this work is to study the characteristics of a Schottky diode based on AlGaAs that are obtained after a simulation assisted by "SILVACO". To fully understand the behavior of this diode and its operating system and the phenomena Participant in the conductivity of this diode, we did a theoretical part contains generalities and basic notions about semiconductors in general and this type of components especially. The simulation allowed us to study the influence of defects and other parameters on the electrical characteristics such as the I-V and C-V.

**Keywords**: Diode; Schottky; Semiconductors.

ملخص

الهدف الرئيسي من هذا العمل هو دراسة خصائص الصمام الثنائي نوع شوتكي القائم على AlGaAs التي تم الحصول عليها بعد محاكاة بمساعدة "SILVACO" ، قمنا بعمل جزء نظري يحتوي على العموميات والمفاهيم الأساسية حول أشباه الموصلات بشكل عام وهذ النوع من المركبات خاصة. سمحت لنا المحاكاة بدراسة تأثير العيوب وعوامل أخرى على الخصائص الكهربائية مثل C-V J-V

كلمات المفاتيح: الصمام الثنائي; أنصاف النواقل; شوتكي

Je dédie ce modeste travail à

Mon père

Ma trop chère mère

Mes frères

Toute ma famille

Tous les amis

La promotion micro-électronique 2018

Moussa

Je dédie ce modeste travail à

Ma très chère mère

Mon père

Mon frère

Toute ma famille

Tous les amis

La promotion micro-électronique 2018

Chakib

Nous remercions ALLAH, le tout puissant pour m'avoir donné la force, la volonté et la patience pour mener à terme mon travail.

Nous tenons à remercier en premier lieu, notre promoteur, monsieur **FILALI Walid** Docteur au centre de développement des technologies avancées (C.D.T.A). Nous le remercions de nous avoir accueillies et de nous avoir très vite encouragées à participer à des échanges scientifiques. Sa grande disponibilité, ses rigueurs scientifiques, son enthousiasme, sa patience et ses précieux conseils qui nous a permis de travailler dans les meilleures conditions.

Les enseignants de l'université de SAAD DAHLAB de Blida qui on veillées pendant des années à nous former.

Tous ceux qui ont contribué de prés ou de loin a l'élaboration de ce modeste travail

**BC:** Bande de conduction

**BV**: Bande de valence

**BI:** Bande interdite

**Eg:** Gap ou langueur de la bande interdite

**ni** : Densité de porteurs intrinsèques

**n**: Nombre d'électron

**p**: Nombre des tous

 $N_c$ : Nombre de place disponible dans la bande de conduction

 $N_v$ : Nombre de place disponible dans la bande de valence

**N**<sub>A</sub>: Densité d'accepteur

N<sub>D</sub>: Densité de donneur

**E**<sub>c</sub>: Énergie de la bande de conduction

**E**<sub>F</sub>: Énergie de niveau de fermi

 $\mathbf{E}_{\mathbf{F}\mathbf{n}}$ : Niveau de Fermi pour un semi-conducteur type n

**E**<sub>FP</sub>: Niveau de Fermi pour un semi-conducteur type P

**K**: Constante de Boltzmann

T: Température

Ψ: Potentiel électrostatique

ε: Permittivité locale

**ρ:** Densité locale de la charge d'espace

**E**: Champ électrique

 $\overrightarrow{J_n}$ : Densité de courant d'électrons

 $\overrightarrow{J_p}$ : Densité de courant des trous

**G**<sub>n:</sub> Taux de génération pour les électrons

**G**<sub>p:</sub> Taux de génération pour les trous

**R**<sub>n:</sub> Taux de recombinaison pour les électrons

**R**<sub>p:</sub>**R**<sub>n:</sub> Taux de recombinaison pour les trous

**φn:** Niveaux de Fermi type n

**φp:** Niveaux de Fermi type p

 $f(\varepsilon)$ : Probabilité qu'un niveau énergétique «  $\varepsilon$  » soit occupé par un électron

Φm: Travail sorti d'un semi-conducteur

**eΦs**: Travail de sortie d'un métal

 $e \phi_B$ : Travail de sortie de semi-conducteur

**E**<sub>Fm</sub>: Niveaux de Fermi du métal

W: Largeur de la zone de déplétion du semi-conducteur

**V**<sub>d</sub>: Hauteur de barrière

V: Tension

 $Q_{sc}$ : Charge d'espace

**C:** Capacité différentielle

**]**: Densité du courant

**A\*:** Constante de Richardson

*m*\*: Masse effective des électrons dans le semi-conducteur

**h**: Constante de Planck

*vr*: Maximum potentiel

 $n_m$ : Densité des électrons maximum

 $x_m$ : Position du potentiel maximum

**n**<sub>0</sub>: Densité des électrons

 $v_r$ : Vitesse de recombinaison

 $\mathbf{F}_s$  et  $\mathbf{F}_m$ : Fonctions de distributions de Fermi Dirac

 $τ_n$  et τ**p**: Durée de vie des électrons et des trous respectivement dans le semi-conducteur

**Rs:** Résistance série

 $J_{T}$ : Densité du courant total

 $J_{e-m}$ : Densité du courant l'émission-diffusion

 $J_R$ : Densité de la courante recombinaison

 $J_{tu}$ : Densité du courant tunnel

**Silvaco:** Silicon Valley corporation

# Résumé

## Dédicaces

Remerciements

Liste des acronymes et abréviations

Listes des figures

Liste des tableaux

Introduction générale

# **Chapitre 1**

Intro	duction			01
1.1	Les s	emi-	conducteurs III-V	01
	1.1.1	Le	s Semi-conducteurs intrinsèque et extrinsèque	02
		a) :	semi-conducteur intrinsèque	02
		b) s	semi-conducteur extrinsèque	03
		:	1) Semi-conducteur type p	03
		2	2) Semi-conducteur type N	04
1.2	Les éq	uatio	ons de base des semi-conducteurs	. 05
	1.2.1	Equ	ation de Poisson	05
	1.2.2	Équ	ations de continuité	. 06
	1.2.3	Les	équations de transport	06
	1.2.4	Tra	nsport des charges par le modèle « Drift-Diffusion »	06
	1.2.5	Thé	orie de base des statistiques de porteurs	. 07
	-	1) S	tatistiques de Fermi-Dirac et de Boltzmann	07
1.3	Pourqu	» iou	AlGaAs »	08
1.4	Proprie	étés	fondamentaux du matériau	08
	1.4.1	Pro	priétés électroniques	10
		a)	Propriétés chimiques	10
		b)	Propriétés électriques	11
	1.4	4.1.1	Structure de bande d'énergie électronique	12
	1.4.	1.2	Gap direct et gap indirect	13
1.5	Les Dé	fauts	dans AlGaAs	14
	151	Mi	cronines	14

	1.5.2	Défauts	por	ctuels « intrinsèque »	15
		1.5.2.1	Le	s différents types de defauts ponctuel	15
			a)	Lacune ponctuelle	15
			b)	L'atome interstitiel	15
			c)	L'atome de substitution	15
			d)	Association des defauts	15
				Chapitre 2	
Introd	luction				18
2.1	Barrièr	e de poten	tiel	(barrière Schottky)	18
	2.1.1	Mise en co	onta	ct d'un un métal avec semi-conducteur	19
		a) eΦm	ı = e	Φs (Régime des bandes plates)	20
		b) eΦm	ı>e0	Os (contact ohmique)	20
		c) Cas	qФn	n <qφs (contacte="" schottky)<="" td=""><td>22</td></qφs>	22
2.2	Mécar	ismes de c	ond	uction dans une diode Schottky	24
2.3	Le trar	nsport des	char	ges	25
	2.3.1	Théorie	d'ér	nission thermoïnique	25
	2.3.2	La diffus	ion.		26
	2.3.3	L'émissio	n-di	fusion	27
	2.3.4	Conducti	on p	par effet tunnel	28
	2.3.5	Recomb	inai	son dans la zone de charge d'espace	29
	2.3.6	Recomb	inai	son dans la région neutre (ohmiques)	29
	2.3.7	Densité	de	courant total	30
2.4	Modè	le à barrièr	e ho	omogène	30
Concl	usion				31
				Chapitre 3	
Intro	oduction	١			32
3.1	L'obj	ectif de la	simu	ılation	33
3.2	Proc	essus de sir	mula	ation	33
	3.2.1	Présent	atio	n de SILVACO	33
		3 2 1	DE	CKBI III D	34

		3.2.2	Spé	cification de la structure et des propriétés électrique	
		Du dispo	sitif.		. 35
		3.2.3	L'or	dre des commandes dans ATLAS	36
		3.2.3.1	spe	écification de la structure	37
			a)	Le maillage	37
			b)	Régions et matériaux	38
			c)	Electrode	40
			d)	Dopage	41
		3.2.3.2	2 sp	écification du modèle et des matériaux	42
			a)	Matériaux	42
			b)	Les Modèles	42
				1) Modèles pour la mobilité	43
				2) Modèles pour la recombinaison	
				Et la génération des porteurs	44
				3) Statistiques de porteurs	44
				4) Modèles pour l'ionisation par impact	45
			c)	Les Contacts	46
			d)	Interface	46
		3.2.3.3	3 L	es méthodes numériques	46
		3.2.3.4	l S	pécification de la solution	48
		3.2.3.	5 <i>A</i>	Analyse	48
Concl	usion				49
				Chapitre 4	
Introd	duction	1	•••••		50
4.1	Proces	ssus d'élak	orat	ion	. 50
4.2	Caract	éristiques	capa	cité-tension et courant-tension sans traps	. 52
4	1.2.1	Caractéris	tique	es courant-tension en fonction de la surface	
		Schottky.			52
		a) Polar	isati	on direct	. 53
		b) Polar	isati	on inverse	. 54

4-2	2-2 Caractéristiques capacité-tension en fonction la fréquence	55
4.3 Ca	ractéristiques capacité-tension courant-tension avec traps	56
4.3.2	1 Les Défauts	56
4-3-2	2 Caractéristique courant-tension en fonction de la surface avec traps	57
	a) polarisation direct	57
4-3-3	3 Caractéristique capacité-tension en fonction de la fréquence	58
4-3-4	4 Caractéristiques capacité-tension en fonction la température	
	à la fréquence 1Mhz	59
4-4 Cc	omparaison des résultats des simulations sans / avec traps	60
4-4-1	La caractéristique courant-tension	60
	a) Polarisation directe	60
	b) Polarisation inverse	62
4-4-2	La caractéristique capacité-tension	63
Conclusi	ion	65

Figure 1.1 :	Diagramme de bandes d'énergie d'un semi-conducteur	04
Figure 1.2:	Mailles cristallographiques des structures Diamant et Zinc Blende	09
Figure 1.3:	a) première zone de Brillouin d'un cristal Zinc-Blende,	
	b) plans et directions cristallographiques d'un substrat de GaAs	
	(Norme américaine)	10
Figure 1.4:	Structure de bandes du phosphure d'indium au centre de la zone	
	De Brillouin	12
Figure 1.5:	Gap d'énergie direct et indirect	13
Figure 1.6:	Image AFM d'une région contenant une micropipe	14
Figure 1.7:	a) Images de cathodluminescence de micropipes dans un substrat 6H-SiC	
	à l'échelle 500µm b) à l'échelle 100µm	14
Figure 1.8:	Exemple de défauts ponctuels dans un cristal ordonné	15
Figure 1.9:	Défaut de Schottky dans la structure cristalline	16
Figure 1.10 :	Défaut de Frenkel	. 16
Figure 2.1:	Diagramme des bandes d'énergie à l'équilibre thermodynamique pour	
	la Jonction M-S type p et n	19
Figure 2.2:	Diagramme des bandes d'énergie en régime des bandes plates	20
Figure 2.3:	Diagramme des bandes d'énergie en régime d'accumulation	. 21
Figure 2.4:	Contact M-S type p ohmique sous polarisation	21
Figure 2.5:	Diagramme des bandes d'énergie en régime de déplétion	22
Figure 2.6:	Contact M-S type p redresseur (diode Schottky) sous polarisation	23
Figure 2.7:	Courbe C <sup>-2</sup> (V)	24
Figure 3.1:	Interdisciplinarité de la simulation	32
Figure 3.2:	L'interface DECKBUILD	34
Figure 3.3:	Entrées / sorties d'ATLAS	36
Figure 3.4:	Ordre des commandes sous ATLAS	36
Figure 3.5:	Maillage de la structure à deux dimensions	38
Figure 3.6:	La structure avec les régions et les matériaux	39
Figure 3.7:	Définition des électrodes	40
Figure 3.8:	la structure après dopage	41
Figure 4.1:	Image finale de la diode Schottky NU1362	50

Figure 4.2:	Coupe de la2Dstructure 'NU1362' de la simulation	51
Figure 4.3:	Structure 'NU1362' de la simulation d'après Tonyplot	51
Figure 4.4:	La Caractéristique Courant-voltage en polarisation directe de la diode	
	NU1362 en fonction de la surface Anode sans traps	53
Figure 4.5:	la caractéristique courant-voltage en polarisation inverse de la diode	
	NU1362 en fonction de la surface Anode sans traps	54
Figure 4.6 :	La caractéristique Capacité-voltage en fonction de	
	la fréquence de la diode NU1362 sans traps	55
Figure 4.7:	La Caractéristique Courant -voltage en polarisation directe de la diode	
	NU1362 en fonction de la surface Anode avec traps	57
Figure 4.8:	La caractéristique la caractéristique Capacité-voltage en fonction	
	de la fréquence de la diode NU1362 avec traps	58
Figure 4.9:	La caractéristique Capacité-voltage en fonction de la fréquence de la diode	!
	NU1362en fonction de la température avec traps	59
Figure 4.10 :	La Caractéristique Courant-voltage en polarisation directe de la diode	
NU13	62 sans et avec traps pour une surface d'anode de 1000 μm de [0v a 6v] (	50
Figure 4.11 :	La Caractéristique Courant-voltage en polarisation directe de la diode	
NU1362	sans et avec traps pour une surface d'anode de 1000 μm de [0v a 1.4v]	51
Figure <b>4.12</b> :	La Caractéristique Courant-voltage en polarisation inverse de la diode	
NU13	362 sans et avec traps pour une surface d'anode de 600 μm de [-2v a 0v] (	52
Figure 4.13 :	La caractéristique la caractéristique Capacité-voltage pou une fréquence	
	De 600 KHz de la diode NU1362 avec traps/sans traps	63
Figure 4.14	: La caractéristique la caractéristique Capacité-voltage pour une fréquenc	e
	De 100 KHz de la diode NU1362 avec traps/sans traps	64

Tableau 1.1:	Extrait de la classification périodique des éléments	01
Tableau 1.2 :	Propriétés chimiques de l'AlGaAs	11
Tableau 1.3:	Propriétés physiques de l'AlGaAs	. 11
Tableau 3.1:	Modèles dépendant de la mobilité	43
Tableau 3.2 :	Modèles dépendant de la recombinaison et génération des porteurs	44
Tableau 3.3:	Modèle pour les statistiques des porteurs	45
Tableau 3.4:	Modèles pour l'ionisation par impact	45
Tableau 3.5:	Les méthodes numériques	47
Tableau 4.1:	Les traps "défaut" appliqué sur notre structure	56

# Introduction générale

Dans l'ensemble des matériaux, les semi-conducteurs constituent une classe bien définie, avec des propriétés physiques particulières qui sont sources d'intérêt au plan de la connaissance fondamentale et à celui des applications. Ces deux facteurs indissociables font l'importance de ces matériaux, malgré le nombre limité d'éléments et de composés semi-conducteurs.

Principalement remarquables par leurs propriétés électroniques, les semiconducteurs interviennent dans presque tous les équipements électriques et optiques.

La plus grande partie des composants (transistors, diodes, et ce qu'on appelle puce en générale) sont réalisés en silicium qui joue un rôle prépondérant, sa technologie et sa connaissance théorique ont atteint des niveaux inégalés.

En électronique rapide et en optoélectronique, les propriétés du silicium sont insuffisantes (mobilités des porteurs relativement petites et transitions électroniques indirectes au seuil d'absorption optique). Dans de telles applications, les composés semi-conducteurs III-V sont préférables. On citera par exemple quelques composés binaires et ternaires, GaAs, InP, GaAlAs, InGaAs,... Les propriétés de ces matériaux sont très intéressantes pour les performances de ces dispositifs.

L'objectif principal de ce travail Simulations de l'influence des défauts sur une diode Schottky à base structure de la famille III-V des semi-conducteurs, à travers le logiciel Silvaco Atlas.

Les semi-conducteur employées dans notre travail est le «  $Al_{(x)}Ga_{(1-x)}As$  », ici « x » représente le nombre relatif d'atomes pour lesquels le « Ga » est remplacé par l'aluminium « Al », pour x < 0.38 le « $Al_{(x)}Ga_{(1-x)}$  As » est un matériau a bande interdite directe. Par contre, lorsque la fraction molaire « x » est plus grande, le matériau devient indirect.

Dans le premier chapitre nous allons aborder les matériaux semiconducteurs III-V, les équations de base des semi-conducteurs et les modèles utilisés dans le simulateur ATLAS. Dans le deuxième chapitre, nous allons découvrir Notions générales les diodes Schottky et contacts Métal/semi-conducteurs.

Dans le troisième chapitre, nous allons découvrir le logiciel de simulation Silvaco Atlas ainsi qu'une présentation de la structure étudiée.

Enfin nous présentons au dernier chapitre les résultats de simulation obtenus dans notre étude avec discussions.

## Introduction

Après les résultats spectaculaires enregistrés avec le Silicium dans le domaine de microélectronique, la recherche des composants électroniques qui possèdent des propriétés de transport et de mobilité supérieures à celles du Silicium, conduit la plupart des grands laboratoires de recherches à s'intéresser à des nouveaux matériaux et en particulier les composés semi-conducteurs III-V.

C'est alors qu'une nouvelle classe de matériaux fait son apparition, basés sur la création d'un potentiel dans un cristal par:

- La modulation de dopage.
- La variation de composition d'un alliage.
- La combinaison des deux méthodes précédentes.

## 1.1 Les semi-conducteurs III-V

Les matériaux semi-conducteurs III-V sont des corps composés formés à partir d'un élément de la troisième (III) colonne et d'un élément de la cinquième (V) colonne de la classification périodique de Mendeleïev. Le tableau (1-1) regroupe un extrait de cette classification (les chiffres en haut et bas représentent respectivement le nombre atomique et la masse atomique). Ainsi de nombreux composés binaires peuvent être réalisés. [1]

III	IV	VI
<sub>10,81</sub> <sup>5</sup> B	<sub>12,01</sub> 6C	<sub>14,01</sub> <sup>7</sup> N
<sub>26,98</sub> <sup>13</sup> AL	<sup>14</sup> <sub>28,09</sub> SI	$^{15}_{30,97}P$
$_{69,74}^{31}Ga$	<sup>32</sup> <sub>72,59</sub> Ge	<sup>33</sup> <sub>74,92</sub> As
<sub>114,82</sub> In	<sub>118,69</sub> Sn	<sub>121,75</sub> <sup>51</sup> Sb

**Tableau 1.1.** Extrait de la classification périodique des éléments. [2]

## 1.1.1 Les Semi-conducteurs intrinsèque et extrinsèque :

Un semi-conducteur est un corps cristallin dont les propriétés de conductivité électrique sont intermédiaires entre celle des métaux et celle des isolants.

#### 1.1.1.a Semi-conducteur intrinsèque

Est un semi-conducteur non dopé, c'est à dire qu'il contient peu d'impuretés (atomes étrangers) en comparaison avec la quantité de trous et d'électrons générés thermiquement.

Dans ce type de semi-conducteur, chaque électron de la bande de conduction correspond un trou dans la bande de valence. De cette constatation, nous déduisons que les densités des électrons n et des trous p sont identiques pour les semi-conducteurs intrinsèques.

$$ni = n = p \tag{1.1}$$

Où ni la densité de porteurs intrinsèques

Avec un niveau de Fermi  $E_F$  distant des extrêmes (Ev et Ec) de plus de 3kT on peut obtenir les densités des porteurs avec la simplification de la fonction de Fermi (1.2) sous une forme exponentielle.

$$n = N_c \exp\left(-\frac{E_c - E_F}{kT}\right) \tag{1.2}$$

$$p = N_v \exp\left(\frac{E_c - E_F}{kT}\right) \tag{1.3}$$

Où Nc et Nv sont les densités équivalentes (ou effectives) d'états. Elles représentent en quelque sorte le nombre d'états utiles, à la température T, dans leur bande d'énergie respective.

A partir des équations ci-dessus on obtient la densité intrinsèque sous la forme:

$$n_i = \sqrt{N_c N_v} \exp\left(-\frac{E_c - E_F}{2kT}\right) \tag{1.4}$$

#### 1.1.1.b semi-conducteur extrinsèque

Un semi-conducteur extrinsèque est obtenu grâce à l'introduction d'impuretés, par dopage N ou P, dans le but d'augmenter la conductivité des semi-conducteurs intrinsèques.

Les porteurs libres introduisent une bande d'énergie supplémentaire dans la bande interdite du semi-conducteur (à un niveau accepteur ou donneur selon le type de dopage P ou N).

### 1.1.1.b.1 Semi-conducteur type p:

Un semi-conducteur type P est un semi-conducteur intrinsèque dans lequel on a introduit des impuretés de type accepteur. Ces impuretés sont ainsi appelées parce qu'elles acceptent un électron de la bande de conduction pour réaliser une liaison avec le cristal semi-conducteur.

Un semi-conducteur dopé P à une densité d'électrons n plus faible que celle des trous p. On dit alors que les électrons sont les porteurs minoritaires et les trous, les porteurs majoritaires. [7]

La densité de trous est proche de celle du dopant accepteur  $N_A$ . Les densités de porteurs sont données par :

$$n = \frac{ni^2}{N_A} p = N_A \tag{1.5}$$

$$n = \frac{ni^2}{N_A} p = N_A \tag{1.6}$$

Le niveau de Fermi pour un semi-conducteur type P est :

$$E_{FP} = E_v + kT ln \frac{N_v}{N_A} \tag{1.7}$$

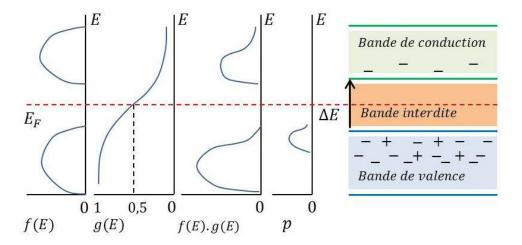


Figure 1.1 : Diagramme de bandes d'énergie d'un semi-conducteur.

## 1.1.1. b.2 Semi-conducteur type N

Le principe d'un semi-conducteur dopé type N est le même que celui du semi-conducteur dopé P, la différence réside au niveau du type de dopants. Autrement dit, les impuretés introduites sont de type donneur. Ces impuretés sont ainsi appelées parce qu'elles donnent un électron à la bande de conduction pour réaliser une liaison avec le cristal semi-conducteur. [7]

Un semi-conducteur dopé Na une densité d'électrons n plus élevée et une densité de trous p plus faible que le même semi-conducteur pris dans sa configuration intrinsèque. On dit alors que les électrons sont les porteurs majoritaires et les trous, les porteurs minoritaires.

Les densités de porteurs pour un semi-conducteur de type N sont :

$$p = \frac{ni^2}{N_D} n \tag{1.8}$$

Le niveau de Fermi pour un semi-conducteur type P est alors :

$$E_{Fn} = E_c - kT ln \frac{N_c}{N_D} \tag{1.9}$$

Ainsi plus la densité de donneurs est élevée plus le niveau de Fermi se rapproche de la bande de conduction. A la limite si  $N_D=N_c$  le niveau de Fermi entre dans la bande de conduction, on dit alors que le semi-conducteur est dégénéré. [7]

## 1.2 Les équations de base des semi-conducteurs

Des années de recherche dans la physique des dispositifs à semi-conducteur ont eu comme résultat l'établissement d'un modèle mathématique qui s'applique à toute la diapositive. Ce modèle consiste en un ensemble d'équations fondamentales qui lient le potentiel électrostatique et les densités de porteurs ensemble. Ces équations, qui sont résolues à l'intérieur de tous les simulateurs de dispositifs, ont été dérivées à partir des lois de Maxwell et consistées en l'équation de Poisson, les équations de continuité et les équations de transport. L'équation de Poisson décrit la variation du potentiel électrostatique avec les densités de charges locales.

#### 1.2.1 Equation de Poisson

$$\operatorname{div}\left(\boldsymbol{\varepsilon}\boldsymbol{\nabla}\boldsymbol{\Psi}\right) = -\boldsymbol{\varrho} \tag{1.10}$$

L'équation de Poisson relie le potentiel électrostatique à la densité de charge de l'espace. Où  $\psi$  est le potentiel électrostatique,  $\epsilon$  est la permittivité locale, et  $\rho$  est la densité locale de la charge d'espace. Le potentiel de référence peut être défini de différentes manières. La densité locale de la charge d'espace est la somme des contributions de toutes les charges mobiles et fixes (électrons, trous, et impuretés ionisées). Le champ électrique est obtenu à partir du gradient de potentiel.

$$\overrightarrow{\mathbf{E}} = -\overrightarrow{\mathbf{gard}}(\mathbf{\psi}) \tag{1.11}$$

# 1.2.2 Équations de continuité

Les équations de continuité pour les électrons et les trous sont définies par les équations suivantes:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{1}{g} \operatorname{div} \overrightarrow{J_n} + G_n - R_n \tag{1.12}$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = \frac{1}{g} \operatorname{div} \overrightarrow{\mathbf{J}_{p}} + G_{p} - R_{p}$$
 (1.13)

où n et p sont respectivement les concentrations d'électrons et de trous, Jn et Jp sont les densités de courants d'électrons et de trous respectivement, Gn et Gp sont les taux de génération pour les électrons et les trous, Rn et Rp sont les taux de recombinaison pour les électrons et les trous, et q est la charge de l'électron.

## 1.2.3 Les équations de transport

Les équations des densités de courants, ou des modèles de transport des charges, sont habituellement obtenues en appliquant des approximations et des simplifications aux équations de transport de Boltzmann. Le modèle le plus simple et utile du transport de charges est le modèle « Drift-Diffusion ». Ce modèle est attrayant dans le sens où il ne présente aucune variable indépendante en plus du potentiel ø, et des concentrations n et p. Ce modèle est accordé pour presque tous les dispositifs faisables technologiquement [3]

## 1.2.4 Transport des charges par le modèle « Drift-Diffusion »

Les dérivations basées sur la théorie de transport de Boltzmann ont prouvé que les densités de courants dans les équations de continuité peuvent être rapprochées par un modèle de diffusion. Dans ce cas-ci, les densités de courant sont exprimées en termes des quasi niveaux de Fermi on et op comme:

$$\overrightarrow{\mathbf{J_n}} = -\mathbf{q}\mu_n \mathbf{n} \nabla \mathbf{\phi}_n \tag{1.14}$$

$$\overrightarrow{\mathbf{J_p}} = - \mathbf{q} \mu_p \mathbf{p} \nabla \boldsymbol{\phi} \tag{1.15}$$

Où μn et μp sont les mobilités d'électrons et de trous respectivement. Les quasi-niveaux de Fermi sont alors liés aux concentrations de porteurs et au potentiel par les deux approximations de Boltzmann:

$$n = n_{ie} exp\left[\frac{q (\psi - \varphi_n)}{KT}\right]$$
 (1.16)

$$p = n_{ie} exp\left[\frac{q (\psi - \varphi_p)}{KT}\right]$$
 (1.17)

Où n<sub>ie</sub> est la concentration intrinsèque efficace et T L est la température de treillis.

## 1.2.5 Théorie de base des statistiques de porteurs

#### 1.2.5.1 Statistiques de Fermi-Dirac et de Boltzmann

À l'équilibre thermique et à une température TL les électrons obéissent aux statistiques de Fermi-Dirac :

$$f(\varepsilon) = \frac{1}{1 + \exp(\frac{\varepsilon - \mathrm{EF}}{|\nu T|})} \tag{1.18}$$

f(ε) est la probabilité qu'un niveau énergétique « ε » soit occupé par un électron ; EF est l'énergie correspondante au niveau de Fermi ; k est la constante de Boltzmann. Si (E - EF) >>kTL, l'équation s'écrit comme suit :

$$f(\varepsilon) = \exp\left(\frac{EF - \varepsilon}{kTI}\right) \tag{1.19}$$

Cette dernière équation représente la statistique de Boltzmann. L'utilisation de la statistique de Boltzmann rend le calcul beaucoup plus simple, mais la statistique de Fermi-Dirac est nécessaire pour expliquer certaines propriétés des matériaux très fortement dopés (semi-conducteurs dégénérés)

# 1.3 Pourquoi « AlGaAs »

L'arséniure de gallium ou L'arséniure de gallium-aluminium ont quelques propriétés électriques supérieures à celles du silicium :

- Ils possèdent une plus grande vitesse de saturation des électrons, et ceux-ci ont une mobilité plus grande, ce qui lui permet de fonctionner à des fréquences supérieures à 250 GHz;
- Les dispositifs à technologie GaAs/AlGaAs génèrent moins de bruit en hautes fréquences que ceux à base de silicium;
- Ils peuvent de même fonctionner à puissance plus élevée, du fait d'une tension de claquage plus élevée.
- Ils possèdent un gap direct, ce qui lui confère des propriétés d'optoélectroniques supérieures

Les propriétés de l'arséniure de gallium / L'arséniure de gallium-aluminium, en particulier sa vitesse de commutation, l'ont fait paraître comme un matériau idéal, notamment pour des applications en informatique. Dans les années 1980, beaucoup pensaient que le marché de la microélectronique serait dominé à terme par l'arséniure de gallium, remplaçant ainsi le silicium. La première tentative d'évolution est due aux vendeurs de superordinateurs Cray Research, Convex, et Alliant. Cray développa une machine à base d'arséniure de gallium, le cray-3, mais les efforts financiers de recherche furent insuffisants, et la compagnie fit faillite en 1995. [5]

# 1.4 Propriétés fondamentaux du matériau

La plupart des matériaux III-V se cristallisent dans la structure "Zinc Blende" présentée sur la figure 1.2 Cette structure, qui s'apparente à celle du diamant, est constituée de deux sous-réseaux cubiques à faces centrées, l'un étant constitué des atomes de l'élément III, l'autre des atomes de l'élément V.

Ces deux sous-réseaux sont décalés l'un par rapport à l'autre le long de la diagonale du cube, d'une quantité  $(a_0/4, a_0/4)$ ,  $a_0$  étant le paramètre cristallin, c'est-à-dire la langueur de l'arête du cube élémentaire.

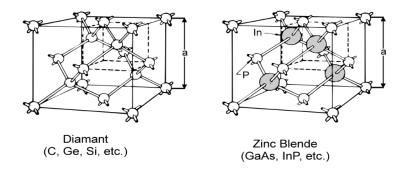
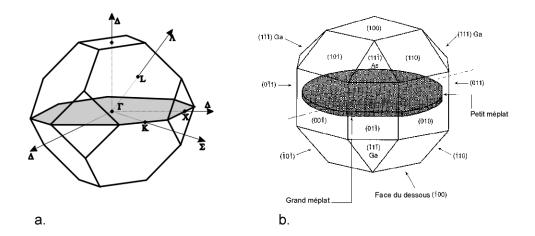


Figure 1.2: Mailles cristallographiques des structures Diamant et Zinc Blende.

De ce fait, dans les matériaux III-V, les liaisons atomiques ne sont pas simplement covalentes comme dans le silicium. Elles reposent sur le transfert d'électrons des atomes du groupe V sur ceux du groupe III. Dans le cas du phosphure d'indium, le phosphore possède cinq électrons périphériques et l'indium trois. Dans le cristal, chaque atome de phosphore est entouré de quatre atomes d'indium, et chaque atome d'indium est entouré de quatre atomes de phosphore. Il se produit alors un échange d'électrons, et le cristal se construit avec les ions P+ et In-, qui ont tous quatre électrons périphériques. Cette répartition est à l'origine du caractère partiellement ionique et partiellement covalent des liaisons (semi-conducteurs polaires), qui sont orientées dans l'espace suivant les axes de symétrie d'un tétraèdre régulier.

Rappelons que la zone de Brillouin des réseaux cfc a la forme d'un octaèdre tronqué par les six faces d'un cube, comme cela est illustré sur la figure 1.3. Elle présente un centre de symétrie à l'origine (noté G) et des axes de symétrie :

- Les axes < 100 > à symétrie d'ordre 4 (Δ),
- Les axes < 111 > à symétrie d'ordre 6 (Λ),
- Les axes < 011 > à symétrie d'ordre 2 (Σ).



*Figure 1.3* : a) première zone de Brillouin d'un cristal Zinc-Blende, b) plans et directions cristallographiques d'un substrat de GaAs (norme américaine).

Les points de rencontre de chacun de ces axes avec les frontières de la zone de Brillouin jouent un rôle essentiel dans la théorie des bandes. On les note généralement de la manière suivante :

- Points X de coordonnées (2Π/a, 0, 0) sur les axes < 100 >,
- Points L de coordonnées (Π /a, Π /a, Π /a) sur les axes < 111 >,

Points K de coordonnées (0, 3  $\Pi$  /2a, 3  $\Pi$  /2a) sur les axes < 011 > .La forme et le volume de la zone de Brillouin ne dépendent que de la géométrie du réseau de Bravais, sans égard à la composition chimique ou au nombre d'atomes dans la cellule unitaires. La zone de Brillouin est une cellule unitaire primitive de réseau réciproque d'importance fondamentale pour l'étude des propriétés électroniques des cristaux, en particulier dans les semi-conducteurs

### 1.4.1 Propriétés électroniques

L'aluminium arséniure de gallium (Al  $_x$ Ga<sub>1-x</sub> As) est un matériau semi-conducteur ayant presque la même constante de réseau que l'arséniure de gallium mais un plus grand gap. Le x dans la formule est un nombre entre 0 et 1 indiquant un alliage entre l'arséniure de gallium et l'arséniure d'aluminium.

# 1.4.1.a Propriétés chimiques

Les propriétés chimiques de l'AlGaAs sont présentées dans le tableau ci-dessous:

Formule chimique	AlGaAs
Groupe	III-V
Bande de gap	1.42 – 2.16 eV
Type de bande de gap	Directe gapx<0.4
Structure cristalline	Zinc Blend

Tableau 1.2 : Propriétés chimiques de l'AlGaAs

# 1.4.1.b Propriétés électriques

Les propriétés électriques de l'AlGaAs sont présentées dans le tableau ci-dessous:

Concentration de transporteur intrinsèque	x=0.1 2.1•10 <sup>5</sup> cm <sup>-3</sup>
	x=0.3 2.1•10 <sup>3</sup> cm <sup>-3</sup>
	x=0.5 2.5•10 <sup>2</sup> cm <sup>-3</sup>
	x=0.8 4.3•10 <sup>1</sup> cm <sup>-3</sup>
Mobilité des électrons	02 V-1 s-1
	0.452 V-1 s-1
Mobilité des trous	370 - 970x+740x2 cm <sup>2</sup> V <sup>-1</sup> s <sup>-1</sup>
Coefficient de diffusion des électrons	02/s
	0.452/s
Coefficient de diffusion des trous	9.2-24x+18.5x2 cm <sup>2</sup> /s
Résistivité	x = 02/s
	0.452/s

Tableau 1.3: Propriétés physiques de l'AlGaAs.

### 1.4.1.1 Structure de bande d'énergie électronique

Le problème de l'électron dans un solide cristallin revient à considérer l'interaction des électrons avec un potentiel périodique. On montre en développant les calculs dans le cristal parfait que les électrons ne peuvent pas occuper un état d'énergie arbitraire, mais qu'ils sont confinés à des bandes d'énergies qui présentent entre elles des zones interdites. Une bande pleine (dont tous les états sont occupés) est inerte pour la conduction électrique et thermique: la conduction est possible seulement lorsqu'une bande est incomplète. L'occupation des bandes est décrite par une statistique Fermi-Dirac. A température nulle, les états dont l'énergie est inférieure à une énergie EF appelée énergie de Fermi sont occupés, et les états dont l'énergie est supérieure à EF sont libres. Dans les semi-conducteurs, l'énergie de Fermi est située dans la bande interdite, dont la largeur varie selon le matériau de 0 eV à quelques eV. Pour avoir conduction, il faut qu'un électron de la bande inférieure passe dans la bande supérieure, ce qui peut être réalisé soit par activation thermique (en augmentant la température), optique (avec des photons d'énergie supérieure à l'énergie de bande interdite) ou électronique. On se restreint ainsi pour l'étude des propriétés électriques et optiques du matériau aux deux bandes de part et d'autre du niveau de Fermi, nommées bande de valence et bande de conduction. La figure 1.4 schématise l'allure de la densité d'états autour de la bande interdite pour un semi-conducteur à bande interdite directe: les deux bandes présentent un extremum au même point de l'espace des vecteurs d'onde k. La plupart des semi-conducteurs III-V et II-VI sont à bande interdite directe. Le Si et le Ge, quant à eux, ont une bande interdite indirecte avec des extrema déplacés dans l'espace k. [7]

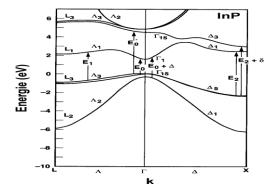


Figure 1.4 : Structure de bandes du phosphure d'indium au centre de la zone de Brillouin.

#### 1.4.1.2 Gap direct et gap indirect :

En physique des semi-conducteurs, on appelle gap la largeur de la bande interdite, laquelle est l'intervalle d'énergies situé entre l'état de plus basse énergie de la bande de conduction et l'état de plus haute énergie de la bande de valence. On parle de gap direct lorsque ces deux extremums correspondent au même quasi-moment (quantité de mouvement associée au vecteur d'onde dans la première zone de Brillouin), et de gap indirect lorsque la différence entre les vecteurs d'onde de ces deux extremums est non nulle. Les matériaux à gap direct et ceux à gap indirect se comportent très différemment du point de vue optoélectronique car les porteurs de charge des matériaux à gap direct peuvent passer d'une bande à l'autre en échangeant simplement un photon, dont la quantité de mouvement est négligeable à ces niveaux d'énergie, tandis que les porteurs des matériaux à gap indirect doivent interagir à la fois avec un photon et avec un phonon afin de modifier leur vecteur d'onde, ce qui rend la transition bien moins probable. Un certain nombre de semi-conducteurs III-V sont à gap direct, comme L'aluminium arséniure de gallium AlGaAs et l'arséniure d'indium InAs, tandis que d'autres sont à gap indirect, comme l'antimoniure d'aluminium AISb; le silicium et le germanium sont également des semi-conducteurs à gap indirect. [4]

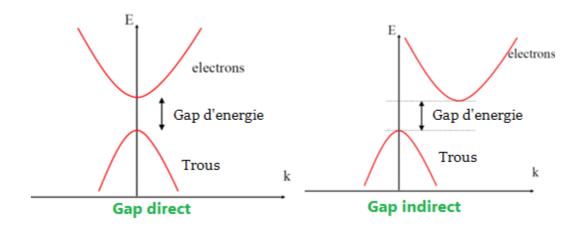


Figure 1.5 : Gap d'énergie direct et indirect

## 1.5 Les Défauts dans AlGaAs

Il est communément défini par soit manque, soit insuffisance de quelque chose, soit absence, ou bien imperfection, ou difformité.

### 1.5.1 Micropipes:

Les macro-défauts appelés «micropipes» sont des défauts hexagonaux qui correspondent à des microtubes vides traversant le lingot de SiC , Divers techniques de caractérisation ont été utilisées pour étudier les micropipes : les localiser, comprendre l'origine de leur formation afin de réduire leur densité et enfin, de mettre en évidence leurs effets sur les dispositifs.

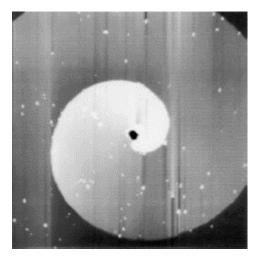


Figure 1.6: Image AFM d'une région contenant une micropipe[10]

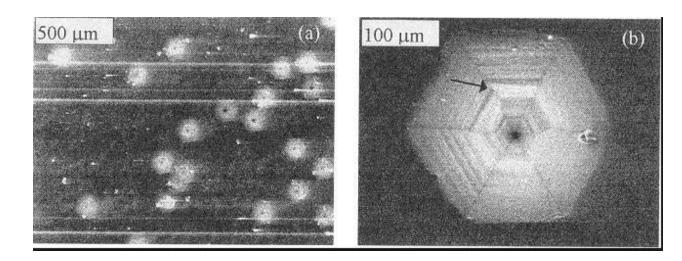


Figure 1.7: a) Images de cathodluminescence de micropipes dans un substrat 6H-SiC à l'échelle 500μm b) à l'échelle 100μm. [11]

## 1.5.2 Défauts ponctuels « intrinsèque »

Le défaut ponctuel est un défaut limité à un nœud du réseau. Il est de dimension0 :le rayon atomique est très petit de vantes dimensions du cristal.

#### 1.5.2.1 Les différents types de défauts ponctuels

- **a.** Lacune ponctuelle: est un site du réseau ne contenant aucun motif, aucun atome (vide).
- **b.** L'atome interstitiel: l'atome étrangers insère dans les espaces vides duré seau La taille de l'atome étrangères en général inférieure à celle de l'atome de réseau.
- c. L'atome de substitution: la position régulière d'un atome occupée par un atome étrange reste en général de même taille que celle de l'atome du réseau.

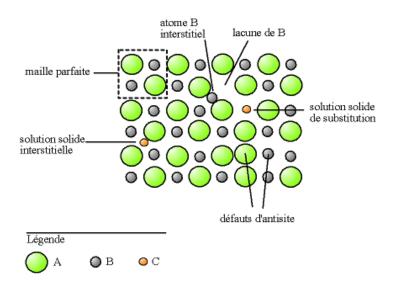


Figure 1.8 : Exemple de défauts ponctuels dans un cristal ordonné.

#### d. Association des défauts

Dans les cristaux ordonnés, on peut avoir :

 l'association de lacunes de deux ou plusieurs éléments différents, c'est un défaut de SCHOTTKY.

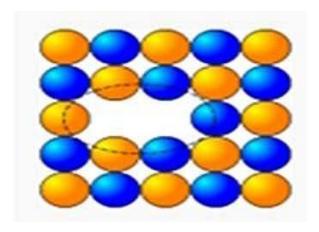


Figure 1.9 : Défaut de Schottky dans la structure cristalline.

l'association d'un atome auto-interstitiel et d'une lacune du même élément,
 c'est un défaut de FRENKEL.

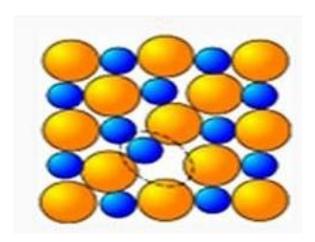


Figure 1.10 : Défaut de Frenkel.

# **Conclusion**

Dans ce chapitre, nous avons a bordé des Généralité sur les semi-conducteur tels que les type de ces derniers et leurs propriétés structural et électronique ainsi que propriétés d'AlGaAs en plus , quelques équations de base qui modélisent les phénomènes de conduction et de transport de charge. Enfin des notions de base sur les défauts existants dans ces matériaux.

## Introduction

La structure métal semi-conducteur M-S est un semi-conducteur mis en contact avec un métal, cette association peut donner lieu à un contact redresseur (Schottky) ou bien à un contact ohmique, cela dépend du type de matériau utilisé, car la structure M-S est, ce qu'on appelle un dispositif unipolaire, cela signifie qu'un seul type de porteurs (électrons ou trous) participe de façon importante à la conduction du courant et détermine les conditions de fonctionnement du dispositif.

Afin de mieux comprendre les phénomènes résultant de cette jonction il faut s'intéresser aux digrammes des bandes d'énergie de la structure à différents travaux de sortie. [12]

# 2.1 Barrière de potentiel (barrière Schottky)

Au contact métal semi-conducteur, un équilibre thermodynamique se crée, c'est-à-dire que les niveaux de fermi du métal et du semi-conducteur s'alignent, contrairement au niveaux du vide, ceux de la bande de valence et de la bande de conduction conservent leurs positions respectives par rapport au niveau de Fermi du fait des travaux de sortie différents de chacun des matériaux, cela fait apparaître une courbure de bande du coté semi-conducteur près de la zone de contact : c'est la barrière de potentiel.

Autrement dit, la barrière de potentiel est un niveau élevé d'énergie que doit posséder provisoirement un électron pour accéder à la partie au-delà de la barrière, sachant qu'elle lui est lui étant impossible s'il n'atteint pas ce niveau.

La figure 2.1 présente un diagramme de bandes d'énergie expliquant la notion de barrière qui se forme à l'interface d'un contact M-S.[13]

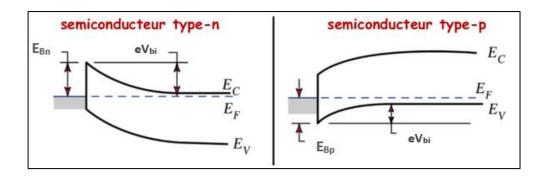


Figure 2.1 : Diagramme des bandes d'énergie à l'équilibre thermodynamique pour la jonction M-S type p et n.

Dans un contact M-S type n, La barrière présentée aux électrons qui veulent transiter du métal vers le semi-conducteur, est donnée par:

Vu du coté métal :

$$E_{Rn} = e\Phi m - e\Phi s \tag{2.1}$$

Vu de côté semi-conducteur :

$$V_{bi} = \Phi m - \Phi s \tag{2.2}$$

Dans le cas d'un contact M-S de type p, est donnée par :

Vu du coté semi-conducteur :

$$E_{Bp} = e\Phi s + E_G - e\Phi m \tag{2.3}$$

Vu du coté métal :

$$V_{hi} = \Phi m - \Phi s \tag{2.4}$$

# 2.1.1 Mise en contact d'un un métal avec semi-conducteur

Quand un métal et un semi-conducteur sont en contact, la structure des bandes d'énergie à l'interface est conditionnée par la différence éventuelle entre le travail de sortie du métal :  $e\Phi_m$  et le travail de sortie du semi-conducteur :  $e\Phi_s$ .

# 2.1.1.a $e\Phi m = e\Phi s$ (Régime des bandes plates)

Lorsque le travail de sortie du métal  $e\Phi_m$  est égal au travail de sortie du semi-conducteur  $e\Phi_s$ , les niveaux de Fermi du métal  $E_{Fm}$  et du semi-conducteur  $E_{FP}$  sont alignés en l'absence de contact car leur distance au niveau du vide est la même. Lorsque le contact est réalisé, les niveaux de Fermi étant déjà alignés, l'équilibre thermodynamique peut se réaliser sans échange de porteurs. C'est ce que l'on appelle le régime de bandes plates (flat-band).

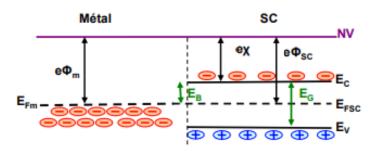


Figure 2.2 : Diagramme des bandes d'énergie en régime des bandes plates

#### 2.1.1.b $e\Phi m > e\Phi s$ (contact ohmique)

Dans le cas d'un travail de sortie du métal  $e\Phi_m$  supérieur au travail de sortie du semi-conducteur  $e\Phi_s$ , Lors de la mise en contact du métal et du semi-conducteur, les électrons du semi-conducteur situés près de l'interface possèdent une plus grand énergie que ceux du métal. Ils vont donc transférer vers celui-ci en laissant derrière eux des trous dans le semi-conducteur, ce qui fait apparaître une zone d'accumulation dans le semi-conducteur. Il y a donc une accumulation de porteurs majoritaires dans le semi-conducteur et le niveau de Fermi s'aligne. Il n'existe donc aucune zone dépourvue de porteurs majoritaires dans la structure. Cette dernière conduira l'électricité dès qu'une tension sera appliquée. Le contact est ohmique. [13][14]

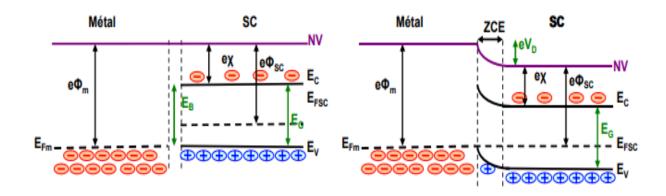


Figure 2.3 : Diagramme des bandes d'énergie en régime d'accumulation

#### • Sous polarisation

Les électrons passent du semi-conducteur vers le métal. Il apparaît une accumulation des trous à la surface du semi-conducteur. Il n'y a donc pas de zone isolante (vide de porteurs) à l'interface, la tension est alors distribuée dans tout le semi-conducteur, a l'interface l'arrivée ou le départ d'un trou dans le Semi-conducteur est de suite compensé par celui d'un électron dans le métal. Le courant circule librement dans les deux sens au contact.

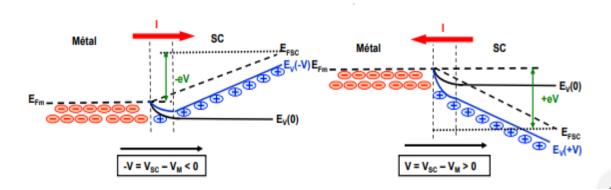


Figure 2.4: Contact M-S type p ohmique sous polarisation

## 2.1.1.c Cas $Q\Phi m < Q\Phi s$ (contacte Schottky)

Dans le cas d'un travail de sortie du métal  $e\Phi_m$  est inférieur au travail de sortie du semi-conducteur  $e\Phi_s$ , Lors de la mise en contact du métal et du semi-conducteur, les électrons du métal possèdent une plus grande énergie que ceux du semi-conducteur. Ils vont donc transférer vers le semi-conducteur, Ce phénomène s'arrête lorsque l'alignement des niveaux de Fermi est réalisé. Les électrons se recombinent avec les trous du semi-conducteur présent près de l'interface ce qui crée une zone désertée (ZCE). En faisant l'hypothèse de SHOCKLEY, on supposera que cette zone est entièrement dépourvue de porteurs majoritaires sur une épaisseur W, Au-delà, la densité des porteurs majoritaire est égale au dopage P du semi-conducteur. [13][14]

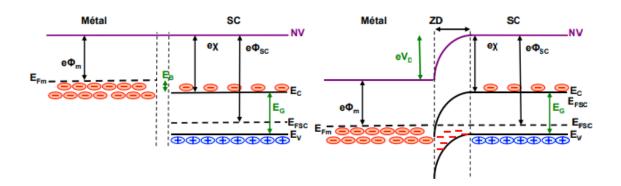


Figure 2.5 : Diagramme des bandes d'énergie en régime de déplétion

#### • Sous polarisation:

Les électrons passent du métal dans le semi-conducteur. Il apparaît un déficit d'électrons à la surface du métal. Dans le semi-conducteur, les électrons qui viennent du métal se recombinent avec les trous créant une zone de déplétion due à la présence des ions  $N\bar{a}$  qui ne sont plus compensés par les trous. Ilapparaît ainsi une zone de charge d'espace étalée dans le semi-conducteur. Le système évolue jusqu'au moment où le champ et la tension de diffusion résultants, arrêtent la diffusion des électrons (Figure 2.6).

La hauteur de la barrière d'interface, que doivent franchir les trous pour passer du semi-conducteur au métal, est alors donnée par :

$$E_B = Eg + e\chi - e\Phi m \tag{2.5}$$

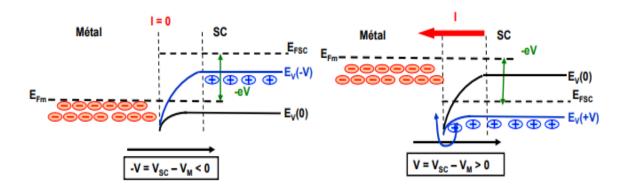


Figure 2.6: Contact M-S type p redresseur (diode Schottky) sous polarisation

#### • Capacité

Si la structure est polarisée par une tension V, supposée positive dans le sens direct c'est-à-dire quand le métal est polarisé positivement par rapport au semi-conducteur, la barrière de potentiel devient  $V_d$ -V et la largeur de la zone de charge d'espace devient

$$W^2 = \frac{2 \varepsilon_S}{eN_D} (V_d - V) \tag{2.6}$$

Toute variation de V entraîne une modulation de W(V) et par suite une modulation de la charge totale développée dans le semi-conducteur. Il en résulte que la structure présente une capacité différentielle. La charge d'espace est donnée par :

$$Q_{sc} = -Q_m = eN_D W = (2\varepsilon_s eN_D (V_d - V))^{\frac{1}{2}}$$
 (2.7)

La capacité différentielle est donnée par :

$$C(V) = \left| \frac{dQ}{dV} \right| = \left( \frac{\varepsilon_S e N_D}{2} \right)^{\frac{1}{2}} (V_d - V)^{-\frac{1}{2}} = \frac{\varepsilon_S}{W}$$
 (2.8)

Cette capacité est équivalente à celle d'un condensateur plan d'épaisseur W. On peut écrire l'expression de C(V) sous la forme

$$C^{-2}(V) = \frac{2}{\varepsilon_S e N_D} (V_d - V)$$
 (2.9)

La courbe représentant  $C^{-2}(V)$  est une droite dont la pente permet de déterminer la densité de donneurs  $N_D$ , et dont l'abscisse à l'origine permet de déterminer la hauteur de barrière  $V_d$  (figure 2.7). Si le dopage du semi-conducteur n'est pas homogène, la courbe représentant  $C^{-2}(V)$  n'est plus une droite.

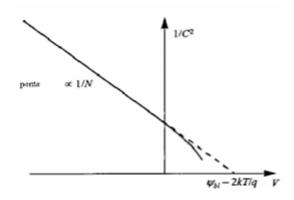


Figure 2.7: Courbe C-2 (V)

# 2.2 Mécanismes de conduction dans une diode Schottky

Les caractéristiques courant-tension d'une diode Schottky sont généralement décrites par l'émission thermoïonique :

$$J = J_0(e^{\frac{qV}{nKT}} - 1) (2.10)$$

Avec V: la tension appliquée, n: le facteur d'idéalité,  $J_0$ : la densité de courant de saturation K: la constante de Boltzmann, T: la température, l'équation de la densité de courant de saturation  $J_0$  est donnée sous la forme suivante :

$$J_0 = A^* T^2 \, e^{\frac{-q\phi_B}{KT}} \tag{2.11}$$

A\*: constante de Richardson, D'où on peut extraire la hauteur de la barrière de Schottky.

Pour une diode Schottky idéale, le facteur d'idéalité, n est égalent à l'unité, et la hauteur de la barrière (en eV) est indépendante de la température et de la tension de polarisation. La densité de courant de saturation  $J_0$ , et le facteur d'idéalité n peuvent être obtenus à partir de l'interception et de la pente des courbes In(J) = f(V), respectivement, sous la forme :

$$LnJ = lnJ_0 + qV/nkT (2.12)$$

Si A \* est connu, la hauteur de la barrière Schottky peut être calculée après que  $J_0$  soit déterminé à partir de l'équation (II.12).

$$\phi_B = \frac{kT}{q} \ln \left( \frac{A^* T^2}{J_0} \right)$$
 (2.13)

Dans la pratique, A \* est inconnue et les mesures I – V dépendants de la température sont utilisés pour déterminer la hauteur de la barrière et la constante de Richardson. Celles-ci peuvent être extraites par la méthode de Richardson :

$$ln\left(\frac{J_0}{T^2}\right) = lnA^* \frac{q}{kT} \phi_B \tag{2.14}$$

# 2.3 Le transport des charges

Dans une diode Schottky, différents mécanismes de transport de charges peuvent exister simultanément ou séparément et être responsables du passage du courant.

- Emission d'électrons du semi-conducteur vers le métal au-dessus de la barrière.
- Courant dû au passage des électrons à travers la barrière par effet tunnel.
- Recombinaison dans la zone de charge d'espace.
- Recombinaison dans la région neutre.

# 2.3.1 Théorie d'émission thermoïnique

En 1928 Owen Richardson reçut le prix Nobel sur pour son travail sur le phénomène thermoïonique et plus spécialement pour la découverte de la loi portant maintenant son nom. Dans la théorie de l'émission thermoïonique, le gradient du quasi-niveau de Fermi est négligé.

Ceci implique que le quasi-niveau de Fermi dans le semi-conducteur est plat. La concentration des électrons du côté semi-conducteur de l'interface M/S est augmentée par un facteur exp(qV/kT) quand une tension de polarisation est appliquée.

$$n = N_c \exp\left[-\frac{q(\phi_B - V)}{kT}\right] \tag{2.20}$$

Où  $N_c$  est la densité d'états effectifs des électrons dans la bande de conduction du semi-conducteur,  $\phi_B$  la hauteur de la barrière Schottky (en eV) et V la tension appliquée. La densité du courant dû à l'émission thermoïonique des électrons au dessus de la barrière est donnée par l'expression :

$$J = J_0(e^{qV/kT} - 1) (2.21)$$

Où Jo, selon la loi de Richardson, est :

$$J_0 = A^* T^2 e^{-q\Phi B/kT} (2.22)$$

Avec:

$$A^* = 4 \pi m^* q k^2 / h^3 \tag{2.21}$$

 $m^*$  La masse effective des électrons dans le semi-conducteur, h la constante de Planck.

## 2.3.2 La diffusion

Proposée par Schottky et Spenke en 1939[15], cette théorie suppose que les électrons migrent du semi-conducteur au métal par dessus la barrière en traversant la zone appauvrie du semi-conducteur, ce qui restreint le courant direct. En effet ce dernier est limité par la diffusion des porteurs à travers le champ électrique dans la zone de charge d'espace. La concentration des électrons dans le côté semi-conducteur de l'interface de M/S est donnée par :

$$n = N_c \exp\left[-\frac{q(E_c - E_F)}{kT}\right] \tag{2.15}$$

La densité du courant dans la région de déplétion dépend du champ local et du gradient de concentration comme le montre l'équation suivante:

$$J = qn\mu E + qDn\frac{d_n}{dx} \tag{2.16}$$

Où E est le champ électrique de la barrière,  $D_n$  le coefficient de diffusion et  $\mu$  la mobilité d'électron. L'équation finale de la caractéristique densité du courant-tension est la suivante :

$$J = J_0 (e^{qV/kT} - 1) (2.17)$$

Où la densité du courant de saturation Joest:

$$J_0 = q . N_c . \mu . E_{v_{max}} . (e^{-q\Phi B/kT})$$
 (2.18)

Le champ électrique maximum dans la jonction est donné par

$$E_{\max} = q N_D \frac{w}{\varepsilon_s} \tag{2.19}$$

W est largeur de la zone de déplétion du semi-conducteur.

#### 2.3.3 L'émission-diffusion

La théorie combinée de l'émission thermoïonique-diffusion était présentée d'abord par Crowell et Sze en 1966 [16]. Dans cette théorie on définit une vitesse de recombinaison  $v_r$  au maximum potentiel. La densité de courant au sommet de la barrière est :

$$J = q(n_m - n_0)\nu_r (2.23)$$

Où  $n_m$  est la densité des électrons à  $x_m$  (position du potentiel maximum) quand une tension de polarisation est appliquée

$$n_m = N_c \exp[-q(\phi_B - \frac{\phi(x_m)}{kT}]$$
 (2.24)

Où  $\phi(x_m)$  est le quasi-niveau de Fermi (en eV) à $x_m$  sous un tension de polarisation V.

 $n_0$  est la densité des électrons à  $x_m$  sous la condition de quasi-équilibre :

$$n_0 = N_c \exp(-q\phi_B/kT) \tag{2.25}$$

L'expression finale du courant est la même que précédemment (théorie de diffusion et de l'émission thermoïonique), la différence réside au niveau du courant de saturation comme le montre la relation suivante :

$$j = A^{**}{}_{n}T^{2}\exp(-q\phi_{bm}/kt).(q^{ev/kt}-1)$$
 (2.26)

La vitesse de recombinaison est donnée par :

$$v_r = \frac{A^* T^2}{q N_C} \tag{2.27}$$

# 2.3.4 Conduction par effet tunnel

Pour les Sc les plus dopés ou bien pour un fonctionnement à basse température, le courant tunnel devient significatif.

Le courant tunnel est proportionnel au coefficient de transmission (probabilité Tunnel) et à la probabilité d'occupation dans le semi-conducteur et de non occupation dans le métal.

$$J = \frac{A^{**}T^2}{kT} \int_{E_{Fm}}^{qE_b} F_s T(E) (1 - F_m) dE$$
 (2.28)

 $F_s$  et  $F_m$  les fonctions de distributions de Fermi Dirac pour le semi-conducteur et le métal,  $A^{**}$  constante de Richardson.

# 2.3.5 Recombinaison dans la zone de charge d'espace

Le processus de recombinaison dans la région de déplétion dans une diode Schottky est lié l'existence des centres localisés dans la bande interdite. Selon le modèle de Schockley, Read et Hall (SRH) en 1952[16], le taux de recombinaison U dans la région de déplétion est donné par l'expression suivante :

$$U = \frac{n \cdot p - n_i^2}{\tau_n(n + n_i) + \tau_p(p + n_i)}$$
 (2.29)

Où tn et tp sont la durée de vie des électrons et des trous respectivement dans le semi-conducteur. Un seul niveau de piège situé au milieu de la bande interdite et coïncide avec le niveau intrinsèque est supposé. La densité du courant de recombinaison est donnée par :

$$J = q \int_0^W U(x) dx \tag{2.30}$$

Avec les simplifications suivantes n p>>ni, et  $\tau n = \tau p = \tau$ , l'expression de la densité du courant pour des basses tensions positives est donné par :

$$J = J_0 \exp\left(\frac{qV}{2kT}\right) \cdot \left[1 - \exp\left(-\frac{qV}{kT}\right)\right]$$
 (2.31)

Οù

$$J_0 = \frac{qn_iW}{2\tau} \tag{2.32}$$

 $n_i$ : est la concentration intrinsèque des électrons.

W : la largeur de la zone de déplétion

# 2.3.6 Recombinaison dans la région neutre (ohmique)

On a supposé que la tension, V, appliquée à la jonction apparaît en totalité dans la SCR. Mais en réalité, il existe des chutes de tension aux niveaux des régions neutres. Ces chutes de tension affaiblissent considérablement l'injection des charges et par conséquent le courant surtout pour les tensions positives assez grandes. Ils sont modélisés par une résistance série (Rs). La tension appliquée à la jonction sera donc :

$$V = V_a - R_s I (2.33)$$

# 2.3.7 Densité de courant total

L'expression de la densité du courant total  $J_T$  à travers un contact M-S est :

$$J_T = J_{e-m} + J_R + J_{tu} (2.34)$$

 $J_{e-m}$ : Densité du courant l'émission-diffusion

 $J_R$ : Densité de la courante recombinaison

 $J_{tu}$  : Densité du courant tunnel

Les caractéristiques courant-tension d'une diode Schottky sont généralement décrites par :

# 2.4 Modèle à barrière homogène

En tenant compte de toutes ces considérations : de la résistance série et parallèle, des pertes ohmique, du courant de fuite et du courant de recombinaison on peut modeler la caractéristique I-V, d'une diode Schottky à barrière homogène de surface (A) par la relation suivante.

$$I = I_s \left[ \exp\left(\frac{q(V - R_s I)}{\eta kT}\right) \right] - 1 \tag{2.35}$$

# **Conclusion**

Dans ce chapitre nous avons a bordé des notions de base sur les diodes Schottky, différents types de contacts (régime des bandes plates, contact ohmique, contact Schottky).

Les mécanismes de conduction dans une diode Schottky, et les types de transport de charge.

# Introduction

La simulation peut être définie comme une technique pour étudier les systèmes dynamiques du monde réel en imitant leur comportement avec l'utilisation d'un modèle mathématique du système implémenté sur un ordinateur numérique.

La simulation peut également être considérée comme une technique numérique pour résoudre des modèles de probabilités complexes, équation différentielle ordinaire et équation différentielle partielle, analogiquement à la façon dont nous pouvons utiliser un ordinateur pour évaluer numériquement l'intégrale d'une fonction compliquée. C'est pourquoi la science de la simulation est considérée comme un domaine interdisciplinaire ainsi illustré à la figure 3.1.

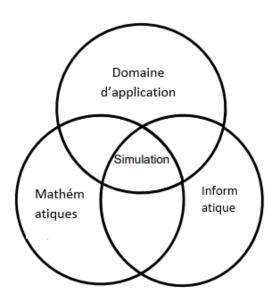


Figure 3.1 : Interdisciplinarité de la simulation

Le domaine de l'électronique, ou de la microélectronique en particulier est parfaitement compatible avec la simulation, celle-ci joue un rôle majeurs dans l'évolution que connais ce domaine en matière de miniaturisation continuelle de la technologie des semi-conducteurs.

Dans ce chapitre nous allons découvrir le logiciel SILVACO avec ses différents outils de simulation interactifs permettant la conception et l'analyse de la plupart des dispositifs semi-conducteurs.

# 3.1 L'objectif de la simulation

Le rôle principal du simulateur est faire baisser le nombre des étapes d'itérations nécessaires pour la fabrication du composant avec certaines propriétés désirées. Un simulateur utilisé pour un composant semi-conducteur donne les données suivantes comme résultats :

- Caractéristiques I-V, C-V, Q-V, G-V...
- Courbe à 2D inclus la courbe d'une grandeur comme par exemple le potentiel en fonction de la distance verticale d'un composant.
- La courbe à 3D inclus un autre paramètre par exemple la distance verticale z.

#### 3.2 Processus de simulation

#### 3.2.1 Présentation de SILVACO

Depuis sa création en 1984 par le Dr. Ivan Pesic , SILVACO est devenu le plus important simulateur de semi-conducteurs. SILVACO TCAD est l'abréviation de Silicon Valley Corporation Technologie Computer Aided Design. Il s'agit d'un progiciel de simulation de processus semi-conducteurs composé de plusieurs simulateurs physiques (ATHENA, ATLAS, MERCURY... etc.) regroupés sous un environnement appelé DECKBUILD. Chacun d'eux simule différents processus. En raison du grand nombre de modules de SILVACO et de leur complexité, seuls les modules utilisés dans ce travail seront présentés: [2]

- DECKBUILD: est un environnement d'exécution graphique interactif pour développer des ponts d'entrée de simulation de processus et de dispositifs. Il est considéré comme la fenêtre principale de SILVACO où tous les simulateurs peuvent être contrôlés.
- ATLAS: est un module de simulateur de dispositif à base physique qui prédit les caractéristiques électriques associées à des structures physiques et des conditions de polarisation spécifiées. Ceci est obtenu en approximant le

fonctionnement d'un dispositif sur une grille (discrétisation). Le transport de porteurs à travers ce dispositif peut être simulé en appliquant un ensemble d'équations différentielles, dérivées des lois de Maxwell sur cette grille. Cela signifie qu'ATLAS fournit une plate-forme pour analyser les réponses AC, DC et temporelles pour toutes les technologies basées sur les semi-conducteurs en deux et trois dimensions.

TONYPLOT: est un outil de visualisation qui trace les résultats obtenus à partir
de la simulation. Il fournit des capacités de visualisation scientifique, y compris
des graphiques XY avec des axes linéaires et logarithmiques, des graphiques
polaires, des graphiques de surface et de contour.

#### 3.2.1.1 DECKBUILD

C'est l'interface graphique entre l'utilisateur et les simulateurs (voir figure 3.2) . Il se compose de deux fenêtres ; la fenêtre de saisie (input window) dans laquelle les simulateurs peuvent être appelés et contrôlés à l'aide des commandes DECKBUILD. La deuxième fenêtre (Run-Time output) affiche les sorties et les résultats des simulateurs, et notamment les erreurs de programmation et les avertissements après la compilation.

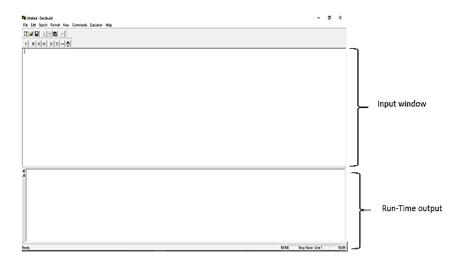


Figure 3.2: L'interface DECKBUILD

DECKBUILD fournit différentes commandes pouvant être effectuées sur la simulation en cours, en voici quelques-unes :

**Appel d'un simulateur :** Ceci peut être fait en utilisant l'instruction "Go" qui indique à DECKBUILD de fermer le simulateur actuel et/ou de démarrer le simulateur spécifié (par exemple Go ATLAS). Ensuite, n'importe quelle instruction du simulateur appelé peut être exécutée

**Déclaration de variable:** L'instruction "Set" est utilisée pour attribuer des noms (caractères) aux valeurs des variables (par exemple Set T = 300). La valeur de la variable peut être utilisée plus tard en faisant précéder son nom d'un signe dollar "\$" (par exemple Set a = \$ T, dans ce cas "a" prendra la valeur de "T", donc a = 300).

**Mettre fin à une ligne commande:** A la fin du paquet, les simulateurs ouverts doivent être fermés à l'aide de l'instruction "Quit".

#### <u>Remarque :</u>

Des commentaires peuvent être introduit à l'intérieur d'un programme, pour ce faire, ceux-ci doivent être précédés du caractère "#" (tout instruction précédée d'un "#" ne sera pas exécutée car considérée comme commentaire).

# 3.2.2 Spécification de la structure et des propriétés électriques

# Du dispositif

ATLAS est un simulateur de dispositif dans lequel on peut spécifier la structure physique, ainsi que caractéristiques électriques qui lui sont associées.

Il est possible de suivre deux méthodologies dans la définition des paramètres physiques et électriques d'un dispositif comme le montre la figure III.4.a. La première méthode consiste à spécifier la structure physique dans l'un des modules prévus à cet effet (ATHENA ou DevEdit) et ensuite indiquer les propriétés électriques dans ATLAS. La deuxième prévoit, quant à elle, la définition tous les paramètres, physiques et électriques, dans ATLAS. C'est cette seconde méthode qui sera utilisé dans ce qui suit.

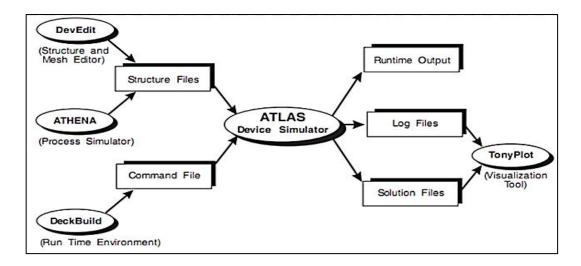


Figure 3.3 : Entrées / sorties d'ATLAS

# 3.2.3 L'ordre des commandes dans ATLAS

L'ordre des commandes dans ATLAS, comprend cinq groupes d'instructions qui doivent apparaître dans un ordre précis comme c'est défini dans la (figure 3.4)

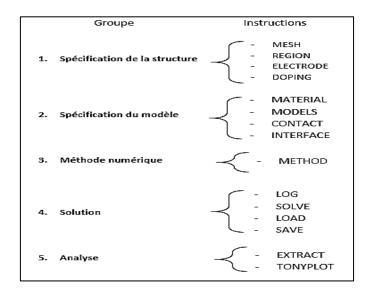


Figure 3.4: Ordre des commandes sous ATLAS

#### 3.2.3.1 spécifications de la structure

#### a Le maillage

Un maillage fait référence à une collection d'éléments dont l'union définit le périphérique. Il est établi en chevauchant deux ensembles de lignes parallèles et perpendiculaires l'une à l'autre pour former un réseau qui a la forme du dispositif. Les intersections de lignes sont appelées nœuds, tandis que les espaces entre elles sont appelés éléments. Une simulation précise nécessite un maillage fin capable de résoudre toutes les équations menant à la solution. L'efficacité numérique nécessite un maillage grossier qui minimise le nombre total de points de la grille, donc une simulation rapide [17].

Pour générer un maillage dans ATLAS, trois informations importantes doivent être définies :

- La direction des lignes (x.mesh et y.mesh)
- Les emplacements des lignes principales (loc)
- Le pas entre chaque ligne (spac) qui explique la distance entre les lignes secondaires en micromètre.

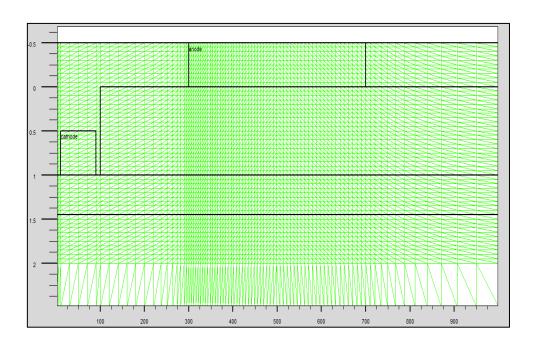
L'instruction mesh space.multi introduit un facteur de multiplication entre deux lignes de maillage défini par dans une direction donnée pour augmenter où pour diminuer le nombre de lignes de maillage.

La Figure 3.5 montre le maillage de notre dispositif (diode Schottky AlGaAs/GaAs) généré en utilisant le code suivant:

```
Go atlas
      filename = diode 1362
set
mesh space.mult=1.0 width=400
mesh auto
x.mesh loc=0
                      spac=20
x.mesh loc=5
                      spac=20
x.mesh loc=10
                      spac=20
x.mesh loc=90
                      spac=20
x.mesh loc=100
                      spac=20
x.mesh loc=200
                      spac=20
x.mesh loc=300
                      spac=5
```

loc=700	spac=10			
loc=1000	spac=50			
***************************************				
loc=-0.5	spac=1			
loc=0	spac=0.05			
loc=0.5	spac=0.05			
loc=1	spac=0.05			
loc=1.45	spac=0.05			
loc=1.5	spac=0.05			
loc=2	spac=0.5			
loc=10.45	spac=50			
	loc=-0.5 loc=0 loc=0.5 loc=1 loc=1.45 loc=1.5 loc=2			

y.mesh loc=201.45



spac=50

Figure 3.5 : Maillage de la structure à deux dimensions.

# **b** Régions et matériaux

Après la définition du maillage on définit le type des matériaux et les régions selon les coordonnées x et y, en utilisant la syntaxe ayant la forme :

```
Region num=<integer>material=<material type><position parameters>
```

Pour notre structure, on a besoin de définir quatre régions dont les matériaux sont : l'Air, l'arséniure de galium (GaAs), et l'Aluminium arséniure de gallium (AlGaAs).

Ce dernier est un composé ternaire dont la composition x = 0.29 doit être déclarer sous la forme : x.composition = <value>.

# La figure 3.6 montre le résultat généré par le code suivant :

```
x.min=0
Region
            num=1
                                      x.max=1000
                                                        y.min=-0.5
y.max=201.45\material=Air
Region
           num=2
                      x.min=100
                                     x.max=1000
                                                           y.min=0
y.max=1\material=AlGaAsx.composition=0.29
                                                =1000
region
            num=3
                       x.min=0
                                    x.max
                                                           y.min=1
y.max=1.45\material=GaAs
region
           num=4
                      x.min=0
                                             =1000
                                                        y.min=1.45
                                  x.max
y.max=201.45\material=GaAs
```

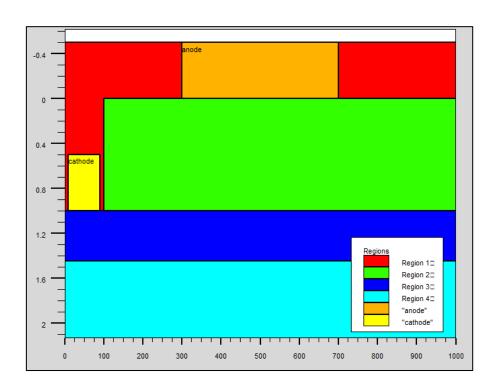


Figure 3.6 : La structure avec les régions et les matériaux.

#### c Electrodes

Après avoir créé les couches de substrat et de semi-conducteur, l'étape suivante consiste à créer des contacts sur l'appareil. Au moins un contact doit être spécifié dans le script. En raison de la nature métallique des électrodes, un métal doit être ajouté à la structure dans des endroits spécifiques.

Les électrodes sont définies par l'instruction suivante :

Electrode name =<electrode name><position parameters>

Suivant cette syntaxe on a utilisé le code suivant pour notre exemple (figure 3.7)

Electrode name=anode x.min=1320 x.max=1720 y.min=0 y.max=0.5 material=titanium/gold

Electrode name=cathode x.min=10 x.max=310 y.min=\$'DebutGaAs'-0.5
y.max=\$'debut GaAs'

On a défini deux électrodes, l'Anode avec le matériau Titanium/Or (Ti/Au) et la Cathode dont la nature du métal l'Or/Nickel/Or (Au/Ni/Au).

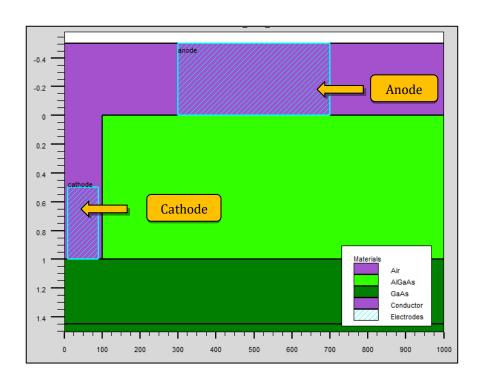


Figure 3.7 : Définition des électrodes.

#### d Dopage

#### Le dopage est défini par l'instruction suivante :

Doping<distribution\_type><dopant\_type><position\_parameters><conc
entration>

Où le type de distribution devra être spécifié. On a réalisé un dopage avec une distribution uniforme de type p et d'une concentration de 1.0e16 cm<sup>-3</sup> pour la région 2 (AlGaAs). Concernant la région 3 on a réalisé un très faible dopage dont la concentration de 1.79e6 cm<sup>-3</sup> sert à spécifier que le matériau, ici le GaAs, est presque intrinsèque, ce dopage est introduit par la commande :

```
Doping uniform p.type region=2 conc=1.0e16
Doping uniform p.type region=3 conc=1.79e6
Le résultat est dans la figure 3.8.
```

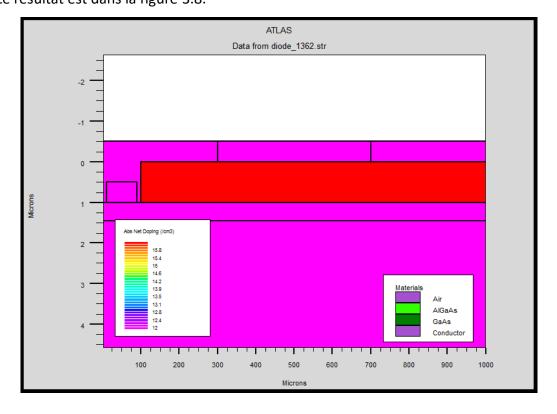


Figure 3.8 : La structure après dopage

**Remarque :** les schémas des différentes étapes de la réalisation de la structure ont été visualisés avec Tonyplot

Une fois la structure final définie, elle doit être sauvegardé dans un fichier structure (.str) via l'instruction :

```
Save outf = <name.str>
```

Notre structure est enregistrée sous le nom « DiodeA\_1362» comme montre la figure 2.4: Save outf=DiodeA 1362.str

#### 3.2.3.2 spécifications du modèle et des matériaux

#### a Matériaux

Tous les matériaux sont classés selon leurs propriétés physiques comme par exemple

- la conductivité (conducteurs, semi-conducteurs, isolants)
- l'affinité électronique
- l'énergie du gap
- la mobilité
- la densité des porteurs
- La vitesse de saturation, etc...

Par exemple : L'énergie de gap du silicium (Si) à 300 K est : 1.12 eV, la mobilité des porteurs à un faible champ électrique, le temps de vie pour la recombinaison SRH des électrons et des trous peuvent s'écrire sous ATLAS par l'instruction suivante:

```
MATERIAL MATERIAL=Silicon EG300=1.12 MUN=1100 TAUN0=2e-7 TAUP0=1e-5.[19]
```

#### b Les Modèles

Les modèles physiques implémentés dans Atlas peuvent être regroupés en cinq groupes :

- 1. Mobilité
- 2. Recombinaison et génération
- 3. Statistiques des porteurs
- 4. Impact ionisation
- 5. Effet tunnel

La syntaxe de la déclaration du modèle dans le simulateur « ATLAS » est la suivante:

```
MODEL<paramètres générales>< paramètres du modèle >
```

L'instruction qui a été utilisée dans notre programme contient certains de ces modèles, elle est sous la forme :

Models bipolar auger srh fldmob Boltzman bgn temp=300

Impact crowel

Le choix du modèle dépend des matériaux et composants choisis pour la simulation. On prend par exemple des modèles utilisés dans notre travail :

# b.1 modèles pour la mobilité

Le tableau 3.1 contient les principaux modèles dépendants de la mobilité, leurs syntaxes.

Avec n : la concentration des électrons, p : concentration des trou, T est la température du réseau, N est la concentration des dopants, E // champ électrique parallèle,  $E_{\perp}$  le champ électrique perpendiculaire.

Modèle	Syntaxe/instruction	Remarque
Dépendant de la mobilité en fonction de la concentration	Conmob	C'est une table de dopage versus mobilité valide pour 300K seulement
Dépendant de la mobilité en fonction de la concentration incluant les effets de diffusion dans le réseau (modèle de KLASSEN)	Kla	A utiliser à haute concentration des impuretés
Dépendant de la mobilité en fonction de la concentration et de la température	Analytic	Caughey - formule de Thomas. Utilisé pour une température de 77-450K
Diffusion porteurs-porteurs	Ccsmob	Important lorsque la concentration des porteurs est élevée
Dépendant de la mobilité en fonction du champ électrique parallèle	Fldmob	Nécessaire pour modéliser tout type d'effet de saturation de vitesse
Lombardi	Cvt	Modèle complet incluant les effets N, T, E  // et E⊥ recommandé pour les dispositifs non planaires
Yamaguchi	Yamaguchi	Inclut les effets N, E // et E ±Seulement pour 300K

Tableau3.1: Modèles dépendant de la mobilité. [18]

# b.2 Modèles pour la recombinaison et la génération des porteurs

La génération-recombinaison des porteurs est le processus par lequel le matériau semi-conducteur tente de revenir à l'équilibre après perturbation.

Modèle	Syntaxe/instruction	Remarque
Shockley-Read-Hall	SRh	Utilise les durées de vie des opérateurs minoritaires fixes. Il devrait être utilisé dans la plupart des simulations
Shockley-Read-Hall dépendant de la concentration	Consrh	Indique la recombinaison Shockley- Read-Hall en utilisant la durée de vie des porteurs dépendant de la concentration
Auger	Auger	Indique la recombinaison Auger.  Recommandé pour les fortes densités  decourant

Tableau 3.2 : Modèles dépendant de la recombinaison et génération des porteurs

# **b.3** Statistiques de porteurs

Les statistiques de porteurs tentent à modéliser au mieux le phénomène de transport des charges à l'intérieur d'un dispositif, et c'en tenant compte des nombreux phénomènes physiques le régissant.

Modèle	Syntaxe/instruction	Remarque
Boltzmann	Boltzmann	Modèle par défaut
Fermi-Dirac	Fermi	Réduit la concentration de porteurs dans les régions fortement dopées (approche statistique)
Ionisation incomplète	Incomplète	Compte dans le cas de gel des dopants. Typiquement utilisé pour les basses températures
Ecart de gap (Band gap Norrowing)	Bgn	Important dans les régions fortement dopées. Critique pour le gain bipolaire

Tableau 3.3 : Modèle pour les statistiques des porteurs

# b.4 Modèles pour l'ionisation par impact

L'ionisation par impact est le processus par lequel un porteur perd de l'énergie en créant d'autres porteurs de charge. Un porteur avec une énergie suffisante, acquise grâce à l'application d'un champ électrique suffisamment grand peut libérer un électron de la BV et le promouvoir à la BC, créant un pair électron trou. Cela peut entraîner un effet d'avalanche. Le porteur de charge d'origine est créé par l'absorption d'un photon.

Modèle	Syntaxe/instruction	Remarque
Selberherr	Impact selb	Recommandé pour la plupart des cas. Inclut les paramètres dépendants de la température
Crowell-Sze	Impact crowell	Utilise la dépendance à la longueur de diffusion du porteur

Tableau 3.4: Modèles pour l'ionisation par impact.

ATLAS propose des syntaxes regroupant un ensemble de modèles spécifique à certaines technologies par exemple : MOS et BIPOLAR qui configurent un ensemble de base de modèles de mobilité, de recombinaison, et d'effet tunnel pour les dispositifs MOSFET et bipolaire.

Le modèle BIPOLAR regroupe les modèles suivants: conmob, fldmob, consrh, auger et bgn

#### c Les Contacts

La commande "contact" permet de dire à ATLAS comment traiter l'électrode. Une électrode en contact est ohmique par défaut. Si l'on veut traiter l'électrode comme un contact Schottky, la fonction de travail appropriée doit être définie selon la syntaxe suivante :

Contact name = <electrode>work function =<value>

C'est la fonction de travail qui définit si le contact est un redresseur (Schottky) ou ohmique. En effet, la barrière de Schottky est connue comme la hauteur de barrière à la jonction pour l'injection d'électrons du métal à la bande de conduction semi-conductrice, elle est égale à la différence entre la fonction de travail du métal et l'affinité électronique du semi-conducteur donc c'est le travail de sortie qui définit la nature du contact.

#### d interface

La spécification d'une densité d'état à l'interface entre deux régions, peut se faire par l'instruction suivante :

Interface qf=<value><position paramètres>

#### 3.2.3.3 Les méthodes numériques

Différentes méthodes numériques peuvent être utilisées pour résoudre les équations qui calculent les densités des porteurs, les différents potentiels et courants ...etc.

Il existe trois méthodes numériques pour solutionner les équations : Gummel, Newton et Block qui peuvent être spécifié dans le programme par l'instruction :

Method<method 1><method 2><method 3>

Le principe de fonctionnement des trois des méthodes est résumé dans le tableau 3.5

Méthode	Principe	Remarque
Gummel	La méthode Gummel résout pour tour à tour chaque inconnue, en gardant les autres variables constantes et en répétant le processus jusqu'à ce qu'une solution stable soit atteinte.	<ul> <li>Cette méthode tolère des suppositions initiales relativement médiocre</li> <li>Généralement utile lorsque le système d'équations est faiblement couplé mais n'a qu'une convergence linéaire.</li> </ul>
Block	La méthode de Block résout certaines équations entièrement couplées alors que d'autres sont découplées.	<ul> <li>Utile lorsque le chauffage du réseau ou les équations d'équilibre énergétique sont inclus.</li> </ul>
Newton	La méthode de Newton résout le système total d'inconnues ensemble	<ul> <li>utile lorsque le système d'équations est fortement couplé et a une convergence quadratique.</li> <li>Recommandée pour la majorité des cas</li> <li>Les cas suivants doivent impérativement faire appel à la méthode de Newton pour les simulations isothermes de diffusion de dérive: les conditions du courant aux limites.</li> </ul>

Tableau 3.5 : Les méthodes numériques.

#### 3.2.3.4 Spécification de la solution

Dans cette partie on demande à ATLAS de faire de calculer et résoudre les différentes équations en fonction des conditions physiques et électriques spécifiées.

Cela se fait avec quatre instructions: log, Solve, Output et Save.

L'instruction log crée un fichier de sauvegarde où tous les résultats de la simulation seront enregistrés. L'instruction utilisée dans notre programme est :

```
Log outf=DiodeAlGaAs GaAs 1 1.log
```

L'instruction Solve: calcule les données d'un ou plusieurs points de polarisation pour DC (courant direct) ou AC (courant alternatif). Mais avant, une solution initiale simplifiée doit être calculé (qui ne résout que l'équation de Poisson) pour obtenir une estimation initiale de la solution finale.

L'instruction peut être sous la forme :

```
solve init
solve vanode=-10 vstep=0.1 vfinal=10 name=anode
```

Les instructions Save et output sont utilisé pour sauvegarder les résultats dans un fichier structure (.str), par exemple :

```
Save outfile =Diode_1362.str
```

### 3.2.3.5 Analyse

La partie analyse regroupe deux instruction extract et tonyplot

L'instruction extract permet d'extraire et afficher la fenêtre « run-time output » la valeur d'un résultat attribué à un point spécifique, par exemple :

Extract name="I max" y.valfrom curve (v."anode", i."anode") wherex.val=3

Elle permet aussi d'extraire les données sous forme de courbe qui sera affiché avec tonyplot

Extract name="courbe\_IV" curve (v."anode", i."anode")"

L'instruction tonyplot offre de visualiser les données sous forme graphique. Exemple :

Tonyplot Diode 1362.dat

La fin du programme est marquée par l'instruction Quit.

#### Conclusion

Au terme de ces étapes on obtient un programme de base auxquels certaines modifications peuvent être apportées au niveau de certains paramètres afin de constater leurs influences respectives au sein du dispositif et ça à l'aide de simulateur « SILVACO ».

Dans le cadre de notre travail on a généré une diode Schottky à base de matériaux semi-conducteurs III-V AlGaAs et GaAs, référencié par NU1362 elle sera soumise à divers variations des paramètres tels que la fréquence, la température dont les résultats seront exposées dans le prochain chapitre.

#### Introduction

Dans ce chapitre, nous exposons les principaux résultats obtenus pour la diode Schottky NU1362 à base AlGaAs. Les résultats sont des simulations de la caractéristique courant tension et capacité tension en fonction de température et fréquence avec défauts et sans défauts.

# 4.1 Processus d'élaboration

Notre échantillon AlGaAs référenciée par NU1362 de type p avec concentration (10<sup>16</sup> cm<sup>-3</sup>) a été élaboré à l'université de Nottingham **(School of Astronomy and AppliedPhysics)** après différentes étapes :

- 1-Croissance du substrat GaAs semi-isolants avec une orientation cristalline conventionnelle (100) en utilisant la technique MBE (Molecal Beam epitaxie) ou injection par jet Moléculaire avec l'équipements VarianGen-II.
- 2- Déposition d'une couche de GaAs non dopé (intrinsèque), comme une couche intermédiaire .Après le dépôt de la couche de  $Al_{0.29}Ga_{0.71}As$  avec une composition X=0.29 de Aluminium et 0.71 de Galium.
- 3- La dernière étape c'est la métallisation ou la déposition des contacts, on a deux types de contacte le premiers c'est Schottky en Titanium / Or et le deuxième c'est Ohmique en OR /Nickel /OR par la technique d'évaporation sous une température de 680 C°.

En globale ils ont obtenu une diode Schottky à base AlGaAs avec différent surfaces Schottky à partir de  $250\mu m - 1000\mu m$ . Comme montre la Figure 4.1 :

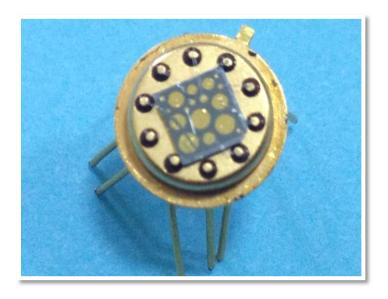


Figure 4.1: Image finale de la diode Schottky NU1362. [20]

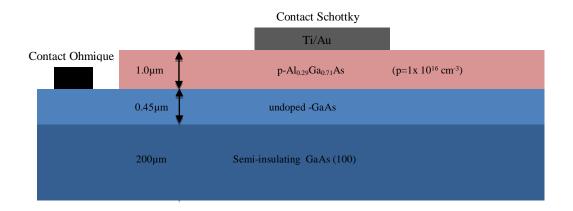


Figure 4.2: Coupe 2D de la structure NU1362.

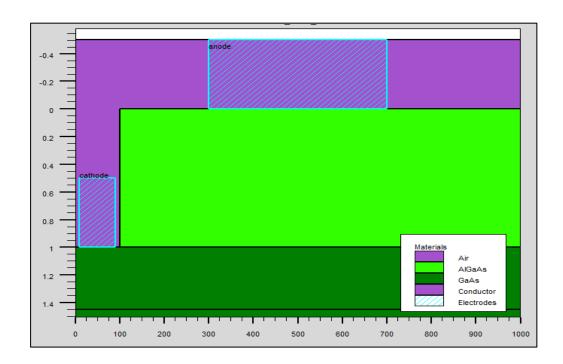


Figure 4.2: Structure NU1362 obtenu avec TONYPLOT.

# 4.2 Caractéristiques capacité-tension et courant-tension sans traps

# 4.2.1 Caractéristiques courant-tension en fonction de la surface Schottky

La caractérisation I-V d'une diode consiste à appliquer une tension sur l'anode et mesurer le courant qui la parcourt. On peut balayer des valeurs de tension (espacées linéairement ou exponentiellement) dans les deux sens de polarisation. Sur des diodes de puissances cette mesure présente un grand intérêt pour mieux comprendre le comportement de notre dispositif ainsi que elle permet d'extraire les paramètres tels que :

- en régime direct
- la hauteur de barrière
- le coefficient d'idéalité
- la tension de seuil
- la résistance série en régime de saturation.
- en régime inverse
- le courant de fuite (inverse)
- la tension de claquage.

#### 4.2.1.a Polarisation direct

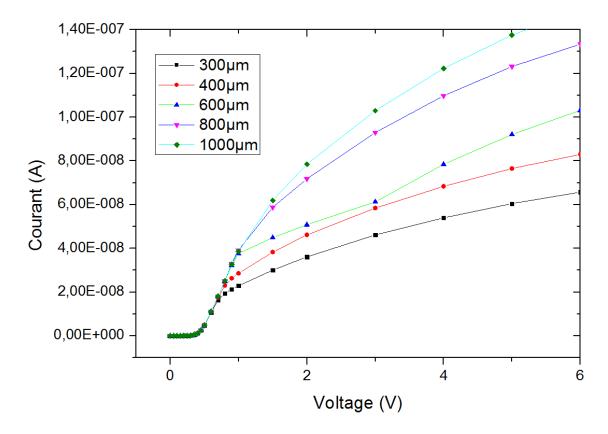


Figure 4.4 : La Caractéristique Courant-voltage en polarisation directe de la diode NU1362 en fonction de la surface d'Anode sans traps.

On a simulé la caractéristique courant-voltage en polarisation directe et inverse comme illustrer dans les figures 4.4 et 4.5, pour le premier cas en polarisation directe il y a une relation proportionnelle entre le courant de saturation et la surface Schottky, par il n y a pas d'un changement apparent de la tension de seuil en fonction du surface.

#### 4.2.1.b Polarisation inverse

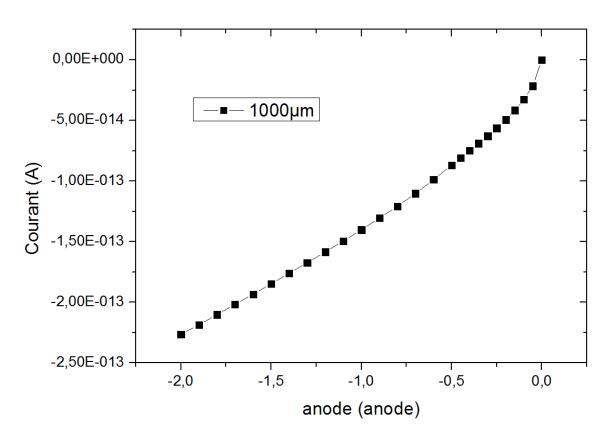
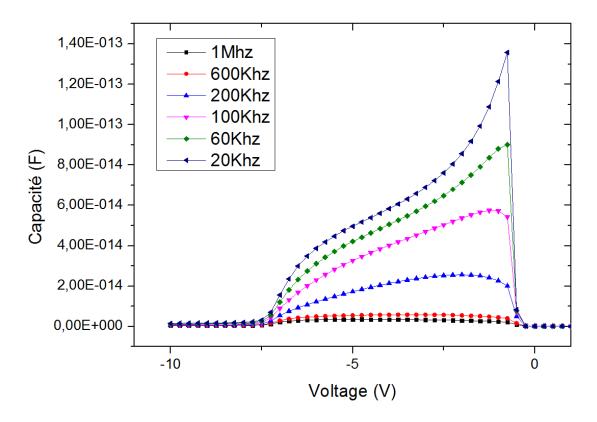


Figure 4.5 : La caractéristique courant-voltage en polarisation inverse de la diode NU1362 pour la surface 1000μm sans traps.

La figure 4.5 montre la caractéristique courant-voltage en polarisation inverse de la diode NU1362 pour la surface 1000µm sans traps. On remarque que le courant en inverse augmente quasi linéarités avec l'augmentation de la tension en inverse, on n'a pas pu arriver à la tension de claquage car le programme de simulation nécessite de l'autre modèle pour modéliser les phénomènes dans cette région.

## 4-2-2 Caractéristiques capacité-tension en fonction la fréquence

La mesure de la capacité permet de déterminer les propriétés dynamiques du composant. La diode fonctionne comme un réservoir de charge que l'on remplit et que l'on vide pendant un cycle de commutation. Une diode peut passer rapidement de l'état bloqué à l'état de conduction, et vice versa, si la charge stockée en régime inverse est faible. C'est pour cette raison que la valeur de la capacité est donnée pour plusieurs valeurs de tensions inverses dans des documentations techniques.



**Figure 4.6 :** la caractéristique Capacité-voltage en fonction de la fréquence de la diode NU1362 sans traps.

La figure 4.6 montre deux régimes, le premier de -7.5 V jusqu'a -1 V c'est la régime de charge et d'accumulation dont la valeur de capacité augmente en fonction de l'augmentation de la tension, en même temps il augmente avec la diminution de la fréquence 20Khz jusqu'à elle arrive à 1.3E-13 (pF) et ça due au taux de réponse des porteurs de chargé (électrons –trous)

En deuxième lieux on remarque une diminution presque brusque des valeurs de capacité autour de 0V c'est régime de décharge

# 4.3 Caractéristiques capacité-tension courant-tension avec traps

### 4.3.1 Les Défauts

Après la métallisation celle qui la dernière étape de la réalisation de la diode Schottky, ils ont passés à une autre étape c'est la caractérisation des défauts (DLTS),

La technique DLTS a une sensibilité plus élevée que toute autre technique de caractérisation de semi-conducteurs. Par exemple, en silicium, il peut détecter des défauts et des impuretés à une concentration de  $10^{12}\,\mathrm{cm}^{-3}$  à une partie des atomes de matériau. Cette technique, il est indispensable dans les laboratoires de recherche et des matériaux semi-conducteurs.

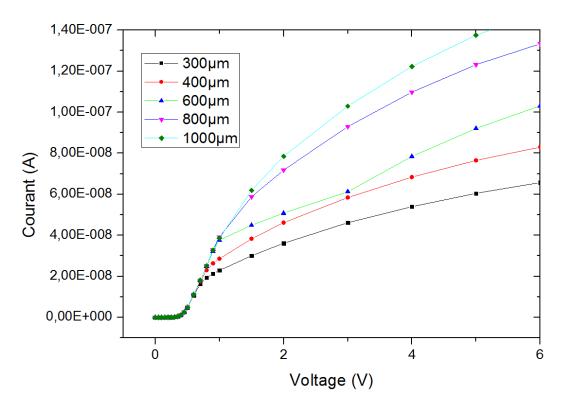
Echantillon	Concentration (cm <sup>-3</sup> )	Traps	Enrgie d'activation (eV)	Cross-section de Capture (cm²)	Concentration (cm <sup>-3</sup> )
NU1362 (100)	$1 \times 10^{16}$	HA1	0.041±0.002	8.32 x 10 <sup>-15</sup>	$2.09 \times 10^{13}$
		HA2	0.145±0.006	5.35x10 <sup>-13</sup>	$2.74 \times 10^{13}$
		HA3	1.89±0.006	$1.89 \times 10^{-13}$	1.67x10 <sup>14</sup>

**Tableau 4.1 :** Les paramètres de défauts détectés avec la technique DLTS sur la diode NU1362. [20]

Le tableau si dessus montre les différents paramètres tels que la concentration des défauts, l'énergie d'activation ou le niveau d'énergie de défaut, cross section de capture des défauts intégrés dans le simulateur ATLAS.

## 4-3-2 Caractéristique courant-tension en fonction de la surface avec traps

## 4-3-2-a polarisation direct



**Figure 4.7**: la Caractéristique Courant -voltage en polarisation directe de la diode NU1362 en fonction de la surface d'Anode avec traps.

Après l'intégration des paramètres des défauts trouvés avec la technique de détection des niveaux profonds des défauts on a relancé la simulation de la caractéristique Courant -voltage en polarisation directe pour la comparer avec celle sans défauts. Comme montre la figure 4.10.

## 1,40E-013 1Mhz 1,20E-013 600Khz 200Khz 1,00E-013 100Khz 60Khz 8,00E-014 Capacité (F) 20Khz 6,00E-014 4,00E-014 2,00E-014 0,00E+000 -5 -10 0

## 4-3-3 Caractéristique capacité-tension en fonction de la fréquence

Figure 4.8 : la caractéristique Capacité-voltage en fonction de

Voltage (V)

La fréquence de la diode NU1362 avec traps.

La figue si dessus montre la variation du capacité en fonction da la polarisation de - 10 V jusqu'à 1 V, cette courbe est l'allure ordinaire de la caractéristique Capacité-voltage, on distingue deux régime apparent (accumulation – décharge) en plus une zone avec une légère variation de la capacité entre -10 V et -8 V à cause de la présence des niveaux d'énergie profonds (traps).

## 4-3-4 Caractéristiques capacité-tension en fonction la température à la fréquence 1Mhz (avec traps)

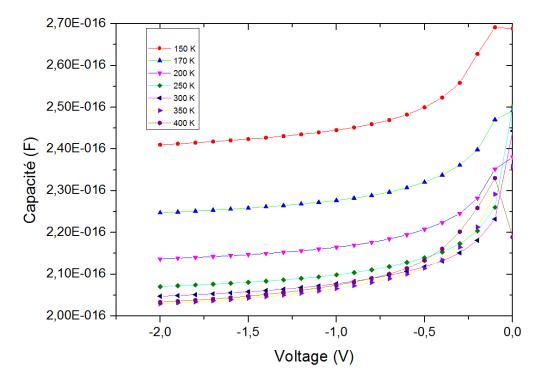


Figure 4.9 : la caractéristique Capacité-voltage de la diode NU1362en fonction de la température à 1 Mhz.

D'après la figure 4.9 : on remarque que la valeur de la capacité se diminue en augmentant la température à cause de la non uniformité de la distribution des défauts superficiels dans la surface contact / semi-conducteur et les défauts profond dans le BULK (gap de semi-conducteur) qui influent sur la hauteur de la barrière.

## 4-4 Comparaison des résultats des simulations sans / avec traps

### 4-4-1 La caractéristique courant-tension

### 4-4-1-a Polarisation directe

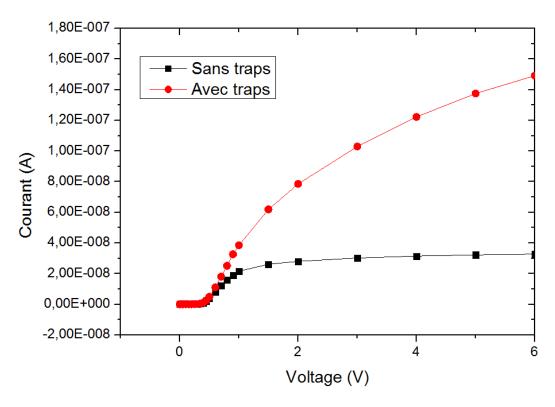


Figure 4.10 : la Caractéristique Courant-voltage en polarisation directe de la diode NU1362 sans et avec traps pour une surface d'anode de  $1000~\mu m$  de [0~V~;~6V] pour la température ambiante

L'intégration des traps dans la caractéristique courant-voltage comme montre la (Figure 4.10) influe sur la tension de seuil et le courant de saturation, pour (V=0.8 v la tension de seuil pour le cas sans traps et supérieur que celle avec traps.

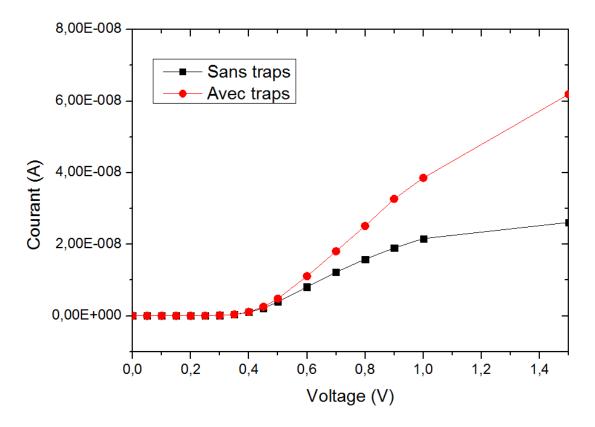


Figure 4.11 : la Caractéristique Courant-voltage en polarisation directe de la diode NU1362 sans et avec traps pour une surface d'anode de  $1000~\mu m$  de [0v a 1.4v] pour la température ambiante

La figure 4.11 montre que en polarisation directe et jusqu'à 1.4 V on n'arrive pas à atteindre le régime de saturation et c'est parmi les propriétés des composant de puissance comme notre cas

### 4-4-2-b Polarisation inverse

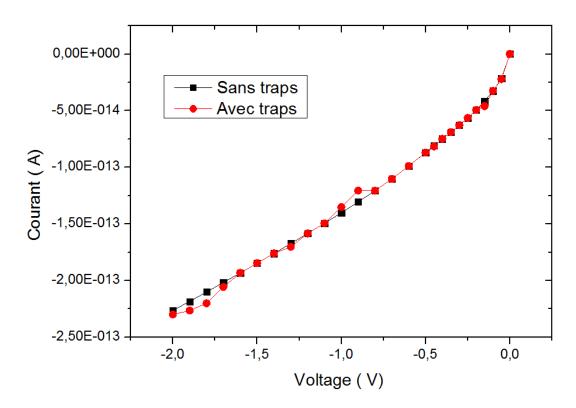


Figure 4.12 : la Caractéristique Courant-voltage en polarisation inverse de la diode NU1362 sans et avec traps pour une surface d'anode de 600 μm de [-2v a 0v] à 300K

D'après la figure 4.12 on remarque qu'il y'a pas de changement apparente entre la simulation avec et sans traps en polarisation inverse à partir de -2 V jusqu'à 0 V

## 4.4.2 La caractéristique capacité-tension à 600 Khz

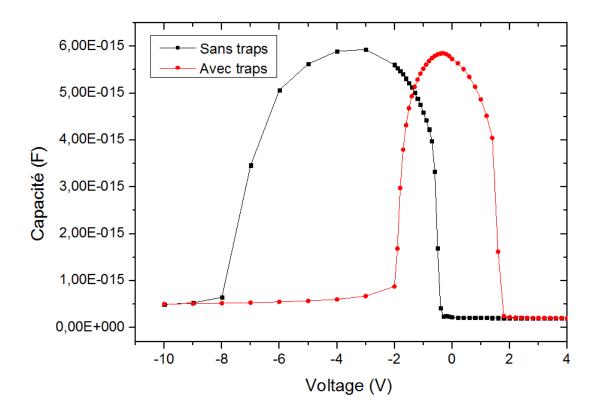


Figure 4.1 : La caractéristique Capacité-voltage la fréquence 600 KHz de la diode NU1362 avec et sans traps.

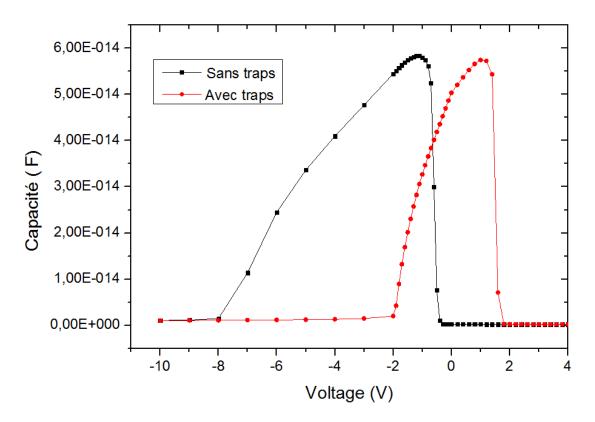


Figure 4.14 : la caractéristique Capacité-voltage pour une fréquence de 100 KHz de la diode NU1362 avec traps/sans traps

Les traps influent d'une manière importante sur la caractéristique capacité-voltage comme montre les Figure 4.13 et Figure 4.14 dont la valeur de la capacité pour sans traps atteint 6<sup>E</sup>-14 F pour une tension -1 V d'autre part elle atteint la même valeur à 1 V pour le cas avec traps c'est un phénomène de Shifting de capacité.

## **Conclusion**

Dans ce chapitre nous avons présentés les résultats de simulation à l'aide du l'outil de simulation des matériaux semi-conducteurs SILVACO. Les caractéristique courant-tension et capacité tension en fonction de surface et de fréquence dans le cas de présence des traps et sans ces derniers, ainsi que l'influence de température. On conclue que les défauts ont d'impact apparent sur le phénomène qui gèrent le comportement de la diode utilisé NU1362.

## **Conclusion générale**

Le travail consiste dans le cadre d'un projet de fin d'étude Master. Il consiste à la conception d'une structure d'une diode Schottky de type p avec une concentration de 1.10<sup>16</sup> à base AlGaAs ainsi que l'étude de ses caractéristiques pour diffèrent paramètres : fréquence, surface et température.

Le premier chapitre est une étude théorique sur les semi-conducteurs à suivi d'une introduction sur les diodes Schottky ensuite on a donné un aperçu sur le simulateur SILVACO.

On a développé et concevoir une structure diode Schottky en tenant compte des contraintes physique et électrique du matériau utilisé .Dans notre étude, la simulation a montré que le comportement de la diode et en relation avec les paramètres externes appliques à travers les caractéristiques courant et capacité tension, en plus une influence des défauts structural résultants de processus d'élaboration de l'échantillon sur ces derniers caractéristiques.

En termes de perspectives, des points importants pour des ultérieurs travails seront basés sur:

- Amélioration du programme de simulation pour assurer la convergence dans la résolution des équations qui modulent les phénomènes électrique et physique de la diode.
- Un modèle électrothermique pourra être ajouté au modèle du de la diode Schottky, ce qui permet de prendre en compte l'effet de l'auto échauffement sur son comportement.
- Le fitting entre les résultats de simulation et les résultats expérimentaux obtenus à l'université de Nottingham- UK.

Enfin, ce modèle constitue un point de départ pour simuler le comportement de la diode NU1362.

- [1] Francis Levy, Traité des matériaux (18), Physique et technologie des semi-conducteurs, Presses polytechniques et universitaires Romandes (1995)
- [2] Henry Mathieu, Physique des semi-conducteurs et des composants électroniques, Masson, 1987.
- Y.MAROUF «Modélisation des cellules solaires en InGaN en utilisant Atlas Silvaco.», mémoire de magister, Université Mohamed Khider-Biskra;2013.
- [4] Iris Visoly-Fisher, Sidney R. Cohen et David Cahen, « Electronically active layers and interfaces in polycrystalline devices: Cross-section mapping of CdS/CdTe solar cells », *Applied Physics Letters*, vol. 83, n° 24, décembre 2003, article n° 4924
- [5] Moss, S. J.; Ledwith, A. (1987). *The Chemistry of the Semiconductor Industry*. Springer.
- [7] Henry Mathieu, *Physique des semi-conducteurs et des composants électroniques*, Masson, 1987.
- [8] C.kitel, « physiqe de l'etat solide», dunod université, 5°ed., 1983
- [9] J.singh, « physique des semi-conducteurs et des composants électronique», dunod, 5° ed., 2004
- [10] OHTANI N., KASTUNO M., FUJIMOTO T., YASHIRO H.— Defect Formation and Reduction During Bulk SiC Growth inSilicon Carbide: recent major advances/ W. J. Choyke, H. Matsunami, G. Pensel (eds), Springer Verlag, Berlin 2004, p.137-162.
- [11] MACMILLAN M. F., HULTMAN L., HALLIN C., IVANOV I. G., HENRY A.,

  JANZEN E., GALLOWAY S. A. Cathodoluminescence of Defect Regions in SiC

  Epi-Films Proccedings of the 7 The International Conference on Silicon Carbide, III
  Nitrides and Related Materials, Stockholm, Sweden, 1997 Mat. Science Forum,

  1998, vols. 264-268, p. 653-656
- [12] A. E. Bazin, "Conception de diodes Schottky sur 3C-SIC épitaxie sur silicium," François Rabelais de Tours, 2009.
- [13] L.SEVELY, "Contribution a l'étude et a la réalisation de contacts sur GaAs par recuit électronique pulse", 1985.

- [14] N. Rouag, "Etude et réalisation des contacts métal-Semi-conducteurs,"

  BATNA, 1998
- [15] B. NEDJEDIA, "Etude des propriétés électriques en régime statique d'une structure Schottky. mémoire de magister," Batna, 2010.
- [16] C. R. Crowell and V. L. Rideout, "Solid-State Electronics", Pergamon Press 1969.
  Vol.12.
- [17] "DevEdit: A Flexible Tool for Structure Editing and Mesh Generation" Simulation Standard, Volume 8, Number 8, August 1997.
- [18] ATLAS User's Manual.
- [19] Jayarama N. Shenoy et al, "High-Voltage Double-Implanted Power MOSFETs in 6H-SiC," IEEE Trans. Electron Devices, Vol. 18, No. 3, pp. 93-95, March 1997.
- [20] RIAZ HUSSAIN MARI "ELECTRICAL CHARACTERISATION OF DEFECTS IN III-V COMPOUND SEMICONDUCTORS BY DLT", thése de Doctorat , School of Physics & Astronomy, Nottingham UK, Aout 2011.