

République algérienne démocratique et populaire
Ministère de l'enseignement supérieur et de la recherche scientifique
Université Saad Dahleb Blida 1



Faculté des sciences
Département de physique

Mémoire de fin d'étude
Pour l'obtention du diplôme de Master en Physique

Option : Physique des matériaux

Thème :

**Etude par photoluminescence des propriétés d'interface
de la structure MIS SiN/*n*-GaN en régime de déplétion**

Présenté par : Amiar Wissam
Alik Leyla

Soutenu le /01/2021 devant le jury composé de :

M ^{me} S. Ouir, MCB (USDB1) :	Présidente
M ^{me} N. Benzekkour, MCB (USDB1) :	Examinatrice
M ^r M. Ould Mohamed, MCB (USDB1) :	Examineur
M ^{me} M. Mattalah, MCA (USDB1) :	Promotrice

Blida 1-2019/2020-

تحتوي أشباه الموصلات ذات فجوة النطاق العريض في قطاع نيتريد III-N حاليًا على العديد من التطبيقات الدقيقة والإلكترونية الضوئية (ترانزستورات طاقة الميكروويف ، وأجهزة الكشف الضوئي XUV ، وما إلى ذلك) مما يفسر حماسهم الحالي للبحث. في الواقع ، يتم حاليًا معاينة تقنية مركبات III-N هذه بسبب وجود العديد من العيوب والتي لها تأثير على الأداء الصحيح للأجهزة يتعلق موضوع هذا العمل بالقياس الكمي والتوقيع (الكثافة ومستوى الطاقة) للعيوب الموجودة في واجهة عازل-أشباه الموصلات لهيكل MIS SiN / n-GaN. تقنية التوصيف المستخدمة هي التحليل الطيفي للضوء الضوئي في نظام نضوب في إطار نموذج الطبقة الميتة. تعتمد معلمات السطح / الواجهة مثل معدل إعادة التركيب السطحي الذي يميز تأثير المصائد السطحية وشدة التلألؤ الضوئي على عمليات إعادة تكوين أزواج

الفتحات الإلكترونية في أشباه الموصلات المعرضة للإثارة البصرية أشباه النواقل

لدى أشباه النواقل ذات النطاق الممنوع العريض المصنفة ضمن سلسلة النيتريد الثالث III-N العديد من التطبيقات المجهرية والإلكترونية الضوئية (ترانزستورات المستعملة في الموجات المجهرية ذات استطاعة فائقة، الكواشف الضوئية للشعاع x و الأشعة فوق البنفسجية XUV....) وهذا ما يفسر حماس الباحثون الحالي في تطوير المعارف. في الواقع ، فإن تكنولوجيا هذه المركبات III-N معاقب بوجود العديد من العيوب التي لها تأثير على حسن سير الأجهزة .

الكلمات- المفتاحية : نيتريد الغاليوم (GaN), كثافة الحالات في الواجهة عازل GaN -SiN هيكل MIS , الطيف الضوئي.

Résumé

Les semiconducteurs à large bande interdite de la filière nitrure III-N ont à l'heure actuelle de nombreuses applications micro et optoélectroniques (transistors de puissance microonde, photodétecteurs XUV,...) ce qui explique leur engouement actuel pour la recherche. En effet, la technologie de ces composés III-N est aujourd'hui pénalisée par la présence de nombreux défauts, qui ont un impact sur le bon fonctionnement des dispositifs.

La thématique de ce travail porte sur la quantification et la signature (densité et niveau énergétique) des défauts présents à l'interface isolant-semiconducteur de la structure MIS SiN/*n*-GaN. La technique de caractérisation utilisée est la spectroscopie par photoluminescence en régime de déplétion dans le cadre du modèle de la couche morte. Les paramètres de surface/interface tels que la vitesse de recombinaison en surface caractérisant l'influence des pièges en surface et l'intensité de photoluminescence sont basés sur les processus de génération-recombinaison de paires électron-trou dans un semiconducteur soumis à une excitation optique.

Mots-clés : Nitrure de gallium (GaN), densité d'états d'interface (D_{it}), interface isolant (SiN)-GaN, structure MIS, photoluminescence.

Abstract

III-N nitride wide band gap semiconductors currently have many micro and optoelectronic applications (microwave power transistors, XUV photodetectors, etc.) which explain their present interest for research. Indeed, the technology of these III-N compounds is currently penalized by the presence of many defects, which have an impact on the good operation of devices.

The topic of this work relates to the quantification and the mark (density and energy level) of defects present at the insulator-semiconductor interface of the MIS SiN/*n*-GaN structure. The characterization technique used is photoluminescence spectroscopy in a depletion regime within the framework of the dead layer model. The surface/interface parameters such as the surface recombination velocity characterizing the influence of surface traps, and the photoluminescence intensity are based on generation-recombination processes of electron-hole pairs in an illuminated semiconductor.

Key-words : Gallium nitride (GaN), interface state density (D_{it}), insulator (SiN)-GaN interface, MIS structure, photoluminescence spectroscopy.

Remerciements

Ce présent travail a été élaboré à l'Université Saâd Dahlab de Blida-1 (USDB-1), Faculté des Sciences, Département de Physique.

Pour sa réalisation, nous tenons à remercier et à exprimer notre reconnaissance, tout d'abord, à Monsieur M. Derbal, Professeur à l'USDB-1, pour nous avoir accueillies dans son laboratoire LASICOM puis à toute l'équipe : Mesdames F. Bouamra et S. Ouir, Messieurs A. Boumédiène, B. Rekié et B. Boutahraoui.

L'encadrement a été assuré par Madame M. Mattalah, Maître de Conférences à l'USDB-1. A cet effet, nous lui exprimons notre reconnaissance pour son aide, ses conseils et ses encouragements. Par la même, nous remercions Madame S. Ouir, Maître de Conférences à l'USDB-1 et Vice-doyenne chargée de la Post-Graduation, de la Recherche Scientifique et des Relations Extérieures, d'avoir fait l'honneur de présider notre jury de soutenance.

Par ailleurs, nous exprimons notre reconnaissance à Madame N. Benzekour et à Monsieur M. Ould Mohamed, Maîtres de Conférences à l'USDB-1, pour avoir accepté d'examiner ce travail.

Nos égards s'adressent aussi au Chef de Département Monsieur A. Mouzali et à l'ensemble des enseignants qui ont contribué à notre formation depuis nos premiers pas à l'université.

On ne saurait oublier l'aide précieuse apportée par Monsieur A. Soltani, Maître de Conférences à l'université de Lille-1 (France), pour les calculs ab-initio et Monte Carlo, auquel nous adressons nos vifs remerciements.

Par ailleurs, et il va s'en dire que nous ne pouvons oublier les efforts consentis par nos parents qui depuis notre plus jeune âge ont toujours fait leur maximum, en consacrant temps et argent, pour nous éveiller et nous encourager dans nos passions. Sans eux, le rêve qui nous tenait tant à cœur n'aurait pu se réaliser.

In finé, les efforts à déployer pour la réalisation de ce travail étaient tels que sans le concours des personnes susdites, il n'aurait pu être arrivé à son terme.

*A la fin de ce chemin orné d'un master
en Physique des matériaux,
nous exprimons nos vives reconnaissances
au grand DIEU
qui nous offre cette réussite.*

A mes très chers parents qui sont derrière toutes mes réussites;

A mes très chers frères et sœurs;

A mes belles-sœurs;

A mes nièces et neveux ;

A K. Araríá.

ALIK LEYLA

*A mes très chers parents qui sont derrière toutes mes réussites ;
A ma sœur Wafa,
A ma copine Hayet.*

AMIAR WISSAM

Table des matières

Introduction Générale	1
Chapitre I :	
Généralités sur la structure métal-isolant-semiconducteur	
I.1 Introduction	3
I.2 Analyse physique de la structure métal-isolant-semiconducteur MIS.....	3
I.2.1 Diagramme de bandes d'énergie	
I.2.1.a Bande interdite (gap) d'un semiconducteur	6
I.2.1.b Niveau de Fermi	7
I.2.1.c Semiconducteur intrinsèque	8
I.2.1.d Semiconducteur extrinsèque	9
I.3 Diagramme de bandes d'énergie d'une structure MIS.....	11
I.3.1 Structure MIS idéale	12
I.3.2 Fonctionnement d'une structure MIS.....	12
I.3.3. Structure MIS réelle	14
I.4 Références bibliographiques ..	16
Chapitre II :	
Techniques de caractérisation des états de surface	
II.1 Introduction	17
II.2 Etats de surface /interface	17
II.2.1 Historique	17
II.2.2 Définition d'un état de surface	17
II.3 Méthodes de caractérisation des états de surface /interface	18
II.3.1 La photoluminescence	18
II.3.1.1 Description des processus en photoluminescence	19
II.3.1.1.1 Processus de génération-recombinaison dans un SC	19
II.3.1.2 Intensité de photoluminescence	23
II.3.1.3 Modèle de la couche morte DLM (Dead Layer Model).....	23
II.4 Procédé et banc de mesure de l'intensité de photoluminescence	30
II.5 Références bibliographiques	32

Table des matières

Chapitre III : Principales propriétés du GaN

III.1 Introduction	33
III.2 Intérêt du GaN	33
III.3 Propriétés physiques	34
III.3.1 Largeur de bande interdite	34
III.3.2 Structure cristalline.....	35
III.3.3 Structure de bandes	36
III.3.4 Densité de porteurs intrinsèques	37
III.3.5 Mobilités des électrons	37
III.3.6 Champ de claquage	39
III.3.7 Conductivité thermique du GaN..	39
III.4 Dopage du GaN	40
III.4.1 Dopage résiduel.....	40
III.4.2 Dopage intentionnel	40
III.5 Polarisation dans le GaN	41
III.5.1 Polarisation spontanée	41
III.5.2 Polarisation piézoélectrique	43
III.6 Polarité dans le GaN	44
III.7 Défauts dans le volume du GaN	45
III.8 Etats de surface /interface du GaN	46
III.9 Choix du diélectrique pour la passivation du GaN	47
III.10 Applications du GaN	48
III.10.1 Applications optiques	48
III.10.2 Applications électroniques	48
III.10.3 Applications militaires.....	49
III.11 Conclusion	49
III.12 Références bibliographiques	50

Chapitre IV : Caractérisation de la MIS-GaN par photoluminescence

IV.1 Introduction	51
IV.2 Procédure de la programmation	51
IV.3 Application du modèle de la couche morte a la structure morte MIS SIN/n-GaN.....	53
IV.3.1 Variation de la vitesse de recombinaison en surface en fonction du potentiel de surface et de la densité d'états d'interface	53

Table des matières

IV.3.2 Variation de l'intensité de photoluminescence en fonction du potentiel de surface et de la densité d'états d'interface.....	54
IV.3.3 Variation de la charge de GaN en fonction du potentiel de surface	55
IV.3.4 Caractéristique $V_s(V_g)$	57
IV.3.5 Distribution de la densité d'états d'interface D_{it}	58
IV.4 Conclusion	59
IV.5 Références bibliographiques	61
Conclusion générale	62

Liste des symboles et abréviations

a_{GaN}	Paramètre de maille de GaN
AlN	Composé nitrure d'aluminium
BC	Bande de conduction
BI	Bande interdite
B_{rad}	Coefficient de recombinaison radiative
BV	Bande de valence
C_i	Capacité de l'isolant
C_n	Coefficient de capture des électrons
C_N	Impureté carbone en site azote
C_p	Coefficient de capture des trous
C_{SC}	Capacité du semiconducteur
c-GaN	Nitrure de gallium cubique
C_{13}, C_{33}	Constantes élastiques
d	Diamètre du spot laser
D_{it}	Densité d'états d'interface
DLM	Dead Layer Model
DLTS	Deep Level Transient Spectroscopy
D_p	Coefficient de diffusion des trous
E_C	Energie du niveau le plus bas de BC loin de l'interface
E_F	Energie du niveau de Fermi dans le semiconducteur
E_{Fn}	Energie du quasi-niveau de Fermi pour les électrons
E_{Fp}	Energie du quasi-niveau de Fermi pour les trous
E_G	Energie de la bande interdite
E_V	Energie du niveau le plus haut de la bande de valence loin de l'interface
e_{31}, e_{33}	Coefficients piézoélectriques
G	Taux de génération des paires électrons-trous
GaAs	Arséniure de gallium
GaP	Phosphure de gallium
GaN	Nitrure de gallium
I_n	Densité de courant des électrons
InN	Composé nitrure d'azote
InP	Composé phosphure d'indium
I_p	Densité de courant des trous
I_{PL}	Intensité de photoluminescence
k_B	Constante de Boltzmann
L_p	Longueur de diffusion des trous
MIS	Métal-Isolant-Semiconducteur
MOS	Métal-Oxyde-Semiconducteur
m_n^*	Masse effective de l'électron
m_p^*	Masse effective du trou
MS	Interface Métal-Semiconducteur
m_0	Masse de l'électron dans le vide
n	Concentration d'électrons libres dans le semiconducteur
N^*	Dopage résiduel
N_A	Densité des accepteurs
N_{A^-}	Densité des accepteurs ionisés
N_C	Densité d'états effective dans la bande de conduction
N_D	Densité des donneurs
N_{D^+}	Densité des donneurs ionisés
n_i	Concentration intrinsèque d'électrons dans le semiconducteur
N_{it}	Concentration des états d'interface

Liste des symboles et abréviations

N_T	Concentration des centres de recombinaison loin de l'interface
N_{Ts}	Concentration des centres de recombinaison à l'interface
N_V	Densité d'états effective dans la bande de valence
n_0	Concentration d'électrons libres dans le substrat loin de l'interface
n_1	Concentration d'électrons dans le cas où $E_F=E_T$
O_N	Impureté oxygène en site azote
p	Concentration des trous libres dans le semi-conducteur
p_i	Concentration intrinsèque de trous dans le semi-conducteur
PL	Photoluminescence
P_{pz}	Polarisation piézoélectrique
P_{sp}	Polarisation spontanée
p_0	Concentration des trous libres dans le substrat loin de l'interface
p_1	Concentration de trous dans le cas où $E_F=E_T$
Q_m	Charge du métal
Q_{it}	Charge piégée par les états d'interface
U	Taux de recombinaison des porteurs
U_{Aug}	Taux de recombinaison Auger
U_n	Taux de recombinaison des électrons
U_p	Taux de recombinaison des trous
U_s	Taux de recombinaison des porteurs en surface
U_{SRH}	Taux de recombinaison Shockley-Read-Hall
UV	UltraViolet
V	Potentiel électrique
V_{BP}	Tension de bandes plates
V_g	Tension de grille
V_s	Potentiel de surface du semiconducteur
V_{sat}	Vitesse de saturation
v_{th}	Vitesse thermique moyenne
W	Largeur de la zone de déplétion
w-GaN	Nitride de gallium wurtzite
α	Coefficient d'absorption
β	Coefficient d'auto-absorption
Δn	Concentration des électrons en excès
Δp	Concentration des trous en excès
ϵ_i	Constante diélectrique de l'isolant
ϵ_{SC}	Constante diélectrique du semiconducteur
ϕ	Densité de flux de photons
ϕ_0	Densité de flux de photons incidents
ϕ_{Fn}	Différence entre E_{FSC} et E_{Fi}
ϕ_m	Travail de sortie du métal
ϕ_{mS}	Différence entre le travail de sortie du métal et du SC
λ	Longueur d'onde du laser
ν	Fréquence de l'onde
σ	Section efficace de capture moyenne
σ_n	Section efficace de capture des électrons
σ_p	Section efficace de capture des trous
τ_n	Durée de vie des électrons
τ_p	Durée de vie des trous
χ_{SC}	Affinité électronique du semiconducteur

Liste des figures

Figure I-1 : Forme simple d'une structure MIS.....	3
Figure I-2 : Représentation des bandes d'énergie.....	5
Figure I-3 : Structure de bande d'un SC à gap direct (a) et à gap indirect (b).....	6
Figure I-4 : Diagramme des bandes d'énergie du travail de sortie d'un métal et de l'affinité électronique d'un SC.....	7
Figure I-5 : Silicium dopé avec de l'Arsenic. Dopage type n.....	10
Figure I-6 : Silicium dopé avec de Bore. Dopage type p	10
Figure I-7 : Effet du dopage sur les bandes du conduction et de valence.....	11
Figure I-8 : Diagramme d'énergie d'une structure MOS ou MIS idéale.....	12
Figure I-9 : Diagramme de bandes pour une structure MIS sur un SC type n en régime d'accumulation, de bandes plates , de déplétion et d'inversion.....	13
Figure I-10 : Pièges électronique présents dans la couche diélectrique et à l'interface isolant-semi-conducteur. (1) charges mobiles dans diélectrique , (2) charges fixes dans le diélectrique et (3) états d'interface.....	14
Figure II-1 : Transitions principales au sein d'un SC.....	19
Figure II-2 : Processus de génération-recombinaison dans un SC sous illumination.....	22
Figure II-3 : Schéma pour le modèle de la couche morte de PL dans un SC.....	24
Figure II-4 : Schéma équivalent de la capacité d'une structure MIS idéale.....	29
Figure II-5.a : Structure MIS .Vue en coupe (a) ,vue de dessus (b).....	30
Figure II-5.b : Synoptique du banc de mesure de photoluminescence.....	30
Figure II-6 : Procédé de mesure de l'intensité de PL.....	31
Figure III-1 : Largeur de bande interdite en fonction du paramètre cristallin des composés III-V à base de nitrures X-N.....	34
Figure III-2 : Structure hexagonale du GaN.....	35
Figure III-3 : Structure cubique du GaN.....	35
Figure III-4 : Structure de bandes , densité d'états de 1 ^{ère} zone de Brillouin de w-GaN.....	37
Figure III-5: Evolution de la masse effective dans AlN et GaN en fonction de l'énergie des électrons	38
Figure III-6: Variation de la mobilité des électrons en volume dans GaN et AlN en fonction du champ électrique pour deux température (300 K et 700 K).....	38

Liste des figures

Figure III-7 : Vitesse de dérive des électrons en fonction du champ électrique de n-GaN et n-AlN wurtzite dopées à 10^{15} cm^{-3} pour deux températures de réseau 300K et 700K calculées par la méthode Monte-Carlo.....	39
Figure III-8 : Position des dopants dans le réseau cristallin du GaN (a) Mg accepteur, (b) Si donneur.....	41
Figure III-9 : a) Distribution des électrons de la bande de valence d'un atome w-GaN. b) Contribution des moments dipolaires pour la génération de la polarisation spontanée. c) Polarisation spontanée dans une structure GaN wurtzite.....	42
Figure III-10 : Charges en surface $\sigma +$ et $\sigma -$ d'une couche de GaN hexagonale.....	42
Figure III-11 : Sens de polarisation piézoélectrique dans le GaN pour deux contraintes données : (a) en tension ; (b) en compression.....	44
Figure III-12 : Polarité de GaN hexagonal. (a): polarité gallium, (b): polarité azote.....	45
Figure IV -1 : Organigrammes de la simulation.....	52
Figure IV -2 : Evolution de la vitesse de recombinaison en surface avec le potentiel de surface pour différentes densités d'interface dans la structure MIS SiN/n-GaN.....	54
Figure IV -3 : Evolution de l'intensité de photoluminescence avec le potentiel de surface pour différentes densités d'états d'interface dans le cas de la structure MIS SiN/n-GaN.....	55
Figure IV -4 : Variation de la charge du GaN type n en fonction du potentiel de surface à l'interface isolant-SC .En régime d'accumulation ou de forte inversion ,la variation est très rapide.....	55
Figure IV -5 : Caractéristique $V_s(V_g)$ calculée à partir de l'équation II.32 de la capacité MIS SiN /n-GaN	58
Figure IV.6.a : Variation de la densité d'états d'interface en fonction du potentiel de surface	58
Figure IV.6.b : Distribution de la densité d'états d'interface dans le gap du GaN.....	59

Liste des tableaux

Tableau I.1: Extrait de classification périodique des éléments	6
Tableau I.2 : Nature et valeur du gap de quelques SC.....	7
Tableau I.3: Travail de sortie de quelques métaux.....	8
Tableau I.4 : Affinités électronique de quelques SC et isolants.....	8
Tableau III.1 : Récapitulatif de quelques propriétés physiques du GaN à 300K	36
Tableau III.2 : Valeur de polarisation spontanée dans GaN et AlN.....	43
Tableau III.3 : Coefficients piézoélectriques et élastiques de AlN et GaN.....	44
Tableau IV .1: Paramètres physiques du GaN	53

Introduction
Générale

Les matériaux III-V s'avèrent être les plus prometteurs pour leurs propriétés électroniques, physiques et optiques très intéressantes ouvrant un vaste champ d'applications en électronique et en optoélectronique et suscitant un intérêt croissant de la part des communautés scientifiques et industrielles. Le nitrure de gallium (GaN) en fait partie. Sa large bande interdite, sa forte conductivité thermique et sa vitesse de saturation élevée font de lui un matériau de choix pour des applications d'électronique de puissance et de hautes fréquences pouvant fonctionner dans des milieux hostiles et à hautes températures. De plus, grâce à sa bande interdite directe, sa forte émission et son bon couplage avec la lumière, il est aussi très convoité pour des applications d'optoélectroniques en émission et en détection (ex : DELs, lasers, cellules solaires, photonique).

Cependant, certains aspects de ce matériau restent encore mal maîtrisés, tels que le contrôle des interfaces métal-GaN et isolant-GaN caractérisées par une forte densité d'états de surface ou d'interface (D_{it}). Ce phénomène, aussi rapporté sur GaAs et sur la plupart des matériaux III-V, constitue l'un des freins majeurs au développement d'une technologie MIS ou MOS fiable sur GaN. Pour quantifier les défauts présents en surface et/ou en interface de ces structures, il existe plusieurs méthodes électriques et/ou optiques. La spectroscopie de photoluminescence est la technique optique développée et amplement utilisée dans le cadre de cette étude. Elle est non destructrice et précise basée sur la luminescence des matériaux et permettant de définir la signature de pièges.

Ce travail est structuré en quatre parties. Le premier chapitre est consacré à un rappel sur les propriétés physiques des matériaux constituant les structures MIS en se basant sur celles du semiconducteur suivi des différents régimes de fonctionnement d'une MIS sous polarisation électrique.

Dans le deuxième chapitre, nous décrivons la technique de photoluminescence (PL) en régime de déplétion dans le cadre du modèle de la couche morte.

Le troisième chapitre est dédié aux principales propriétés du matériau nitrure de gallium (GaN), aux types de défauts présents dans ce substrat et aux différents domaines d'applications.

Introduction générale

Le dernier chapitre comporte les résultats de simulations numériques portant sur la vitesse de recombinaison des porteurs en surface, l'intensité de photoluminescence, la charge dans le semiconducteur en identifiant les trois régimes caractéristiques d'une structure MIS et la caractéristique potentiel de surface-tension de polarisation pour remonter à la distribution de la densité d'états d'interface dans la bande interdite.

Chapitre 1

GENERALITES SUR LA STRUCTURE MIS

I.1. Introduction

Dans la première partie de ce chapitre, nous rappelons quelques propriétés physiques des matériaux constituant les structures métal-isolant-semiconducteur (MIS) en se basant sur celles du semiconducteur telles que la largeur de sa bande interdite et la position du niveau de Fermi dans un semiconducteur intrinsèque et extrinsèque.

Dans une deuxième partie, nous introduisons le principe de fonctionnement et les différents régimes d'une structure MIS sous polarisation électrique en décrivant les différences existant entre une MIS idéale et une MIS réelle. Les différents régimes nous permettent par la suite de voir le comportement de la charge électrique dans la structure MIS en fonction de la tension appliquée dans les structures suscités.

I.2. Analyse physique de la structure Métal-Isolant-Semiconducteur

La structure Métal-Isolant-Semiconducteur est un sandwich de couches constituées de matériaux de nature différente : conducteur, isolant et semiconducteur. La structure MIS est très répandue en microélectronique et en électronique de puissance car elle constitue une partie fondamentale des composants (transistors, diodes, etc.). Elle est très simple à réaliser. Elle est obtenue par l'oxydation thermique d'un semiconducteur pour fournir la couche d'isolant (le plus souvent un oxyde) et les contacts électriques (conducteurs) sont obtenus par dépôts d'électrodes (grilles) métalliques (Figure I.1).

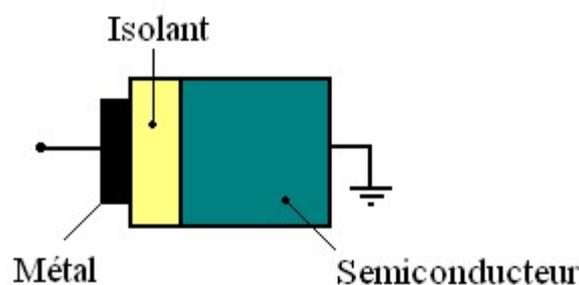


Figure I.1 : Forme simple d'une structure MIS.

I.2.1. Diagramme de bandes d'énergie

Dans une structure cristalline de forte densité atomique, la population électronique occupe des niveaux énergétiques qui constituent les bandes d'énergie permises ; bandes de conduction (BC) et de valence (BV) séparées par une bande d'énergie interdite (BI).

Les électrons occupant BC sont libres. Ceux qui se situent dans BV contribuent à la cohésion locale du cristal (entre atomes voisins).

Les niveaux énergétiques minimum et maximum de BC et BV sont notés E_C et E_V , respectivement. La largeur de BI ou gap est donnée par :

$$E_G = E_C - E_V \quad (eV) \quad (I.1)$$

Au zéro absolu, le niveau de plus haute énergie, occupé par les électrons, est le niveau de Fermi E_F .

Ainsi, en fonction du degré d'occupation des bandes et de leurs différentes bandes d'énergie, on distingue les conducteurs, les isolants et les semiconducteurs.

- Conducteur

Un conducteur ou métal est un matériau qui conduit l'électricité et la chaleur. Dans un conducteur, l'interpénétration de BV et BC implique qu'il n'existe pas d'énergie de bande interdite (Figure I.2.a). La bande de conduction est partiellement pleine avec une forte densité d'électrons de conduction ($n \approx 10^{22}$ à 10^{23} électrons/cm³) même à basse température. On a donc besoin de peu d'énergie pour exciter un conducteur.

- Isolant

Un isolant ou diélectrique est un matériau qui s'oppose au passage du courant électrique (isolant électrique), de la chaleur (isolant thermique) ou des vibrations sonores (isolant phonique). Dans un isolant, les bandes d'énergie sont vides ou pleines. Les bandes vides d'électrons ne participent pas à la formation d'un courant électrique. Dans des bandes pleines, un électron ne peut se déplacer que s'il existe une place libre (un trou) dans sa bande

d'énergie. Une telle configuration est obtenue pour des énergies de E_G supérieures à quelques 5 eV (Figure I.2.b) car l'agitation thermique à 300 K ne peut pas faire passer les électrons de BV à BC.

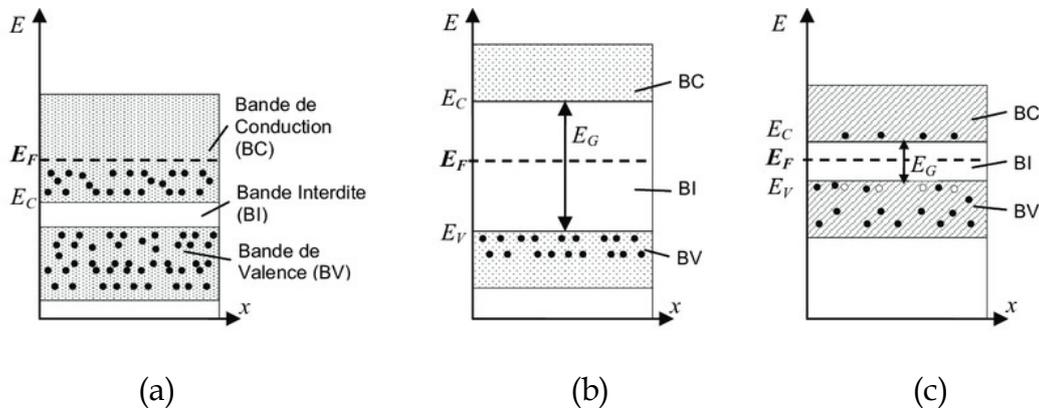


Figure I.2 : Représentation des bandes d'énergie : (a) métal, (b) semiconducteur, (c) isolant.

- Semiconducteur

Un semiconducteur (SC) est un isolant à $T = 0$ K. Il a un gap plus faible que celui de l'isolant (Figure I.2.c). L'agitation thermique ($T = 300$ K) fait passer un électron d'un état dans BV à un état dans BC laissant derrière lui un trou. Ce qui rend la conduction électrique possible. Celle-ci est d'autant plus faible que le gap est grand.

Les SC peuvent-être des éléments comme le silicium (Si) ou le germanium (Ge), mais ils peuvent aussi être réalisés à partir de composés binaires, ternaires et quaternaires.

Dans ce travail, nous nous intéressons à une classe importante, du point de vue technologique, de SC formés à partir d'éléments de la 3^{ème} et de la 5^{ème} colonne de la classification périodique de Mendeleïev. Le tableau I.1 regroupe un extrait de cette classification.

III	IV	V
5	6	7
B	C	N
10,81	12,01	14,01
13	14	15
Al	Si	P
26,98	28,09	30,97
31	32	33
Ga	Ge	As
69,94	72,59	74,92
49	50	51
In	Sn	Sb
114,82	118,69	121,75

Tableau I.1 : Extrait de la classification périodique des éléments.

I.2.1.a. Bande interdite (gap) d'un semiconducteur

Dans les SC à gap direct, le minimum de BC et le maximum de BV sont situés au centre de la zone de Brillouin $\vec{k} = \vec{0}$ (Figure I.3.b). Le minimum de BC correspond à des électrons possédant une faible masse effective, donc très mobiles. Dans ce type de SC, les transitions sont verticales. Ce qui est très intéressant pour l'électronique rapide ou pour l'optoélectronique.

Dans les SC à gap indirect, les extrema sont situés à des points différents de l'espace des \vec{k} (Figure I.3.a). Le minimum de BC correspond à des électrons possédant une grande masse effective, donc une faible mobilité. Les transitions optiques sont possibles que si l'énergie des phonons de vecteur d'onde \vec{q} est suffisante pour conserver l'énergie du cristal et du vecteur d'onde \vec{k} .

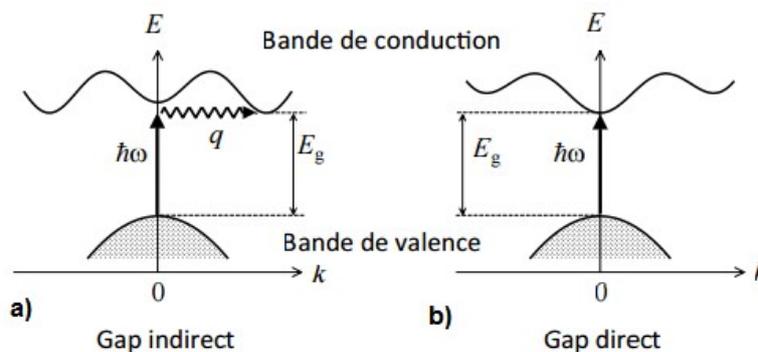


Figure I.3 : Structure de bande d'un SC à gap indirect (a) et à gap direct (b).

Le tableau I.2 regroupe le gap (E_G) de quelques SC [1].

Semiconducteur	Nature du gap	E_G (eV) @ 300 K
Si	indirect	1.11
Ge	indirect	0.66
InP	Direct	1.35
GaAs	Direct	1.42
GaP	Indirect	2.26
GaN	Direct	3.4
AlN	Indirect	6.2
InN	Direct	1.9

Tableau I.2 : Nature et valeur du gap de quelques SC.

I.2.1.b. Niveau de Fermi

Le niveau de Fermi E_F est une caractéristique propre d'un système qui traduit la répartition des électrons dans celui-ci en fonction de la température.

Dans un isolant ou un SC, E_F se situe dans la bande interdite (Figure I.2.b,c), tandis que dans un métal, le niveau de Fermi (E_{Fm}) se trouve au milieu d'une bande permise (BC) (Figure I.2.a).

Le diagramme énergétique des électrons est tracé par rapport au niveau du vide (NV), figure I.4, qui représente l'énergie d'un électron dans le vide sans vitesse initiale.

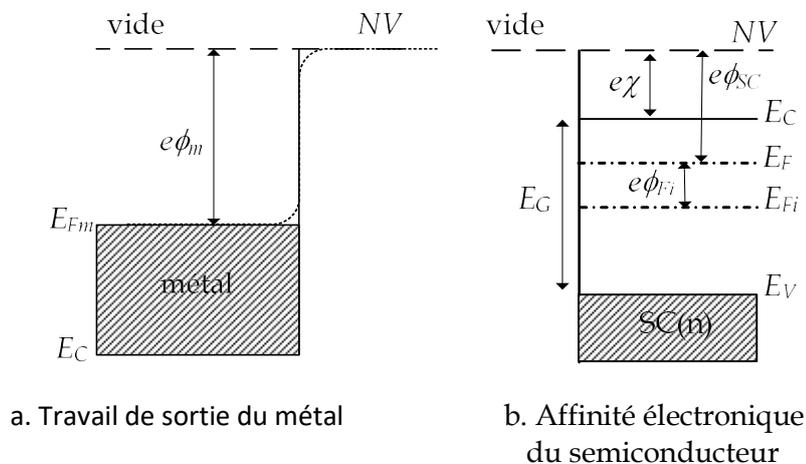


Figure I.4 : Diagramme des bandes d'énergie du travail de sortie d'un métal et de l'affinité électronique d'un SC.

Le travail de sortie d'un métal est l'énergie minimale que doit fournir un électron pour sortir du métal, donné par :

$$e\phi_m = NV - E_{Fm} \quad (I.2)$$

e est la valeur de la charge élémentaire ($e = 1.6 \times 10^{-19} C$).

Le tableau I.3 regroupe des travaux de sortie de quelques métaux [2].

Métal	Pt	Ir	Ni	Pd	Au	Mo	Cr	Fe	Al
Travail de sortie $e\phi_m$ (eV)	5.65	5.62	5.15	5.12	5.10	4.5	4.5	4.5	4.28

Tableau I.3 : Travail de sortie de quelques métaux.

Le travail de sortie d'un SC s'écrit :

$$e\phi_{SC} = NV - E_F \quad (I.3)$$

Dans un SC, les électrons se trouvent dans le niveau énergétique E_C le plus élevé de BC. Donc l'énergie qu'il faut fournir à un électron pour s'extraire et se retrouver dans le vide est définie par l'affinité électronique donnée par :

$$e\chi = NV - E_C \quad (I.4)$$

Le tableau I.4 regroupe des affinités électroniques de quelques SC et isolants.

Affinité électronique $e\chi$ (eV)							
Semiconducteurs						Isolants	
Si	Ge	GaP	GaAs	GaN	AlN	SiO ₂	Si ₃ N ₄
4.01	4.13	4.3	4.07	4.1	-1 ~ 3.2	1.1	4.07

Tableau I.4 : Affinités électroniques de quelques SC et isolants.

Un SC peut-être soit pur (intrinsèque) soit dopé (extrinsèque) par des impuretés qui permettent de contrôler sa résistivité.

I.2.1.c. Semiconducteur intrinsèque

Un SC intrinsèque est un SC dépourvu de toute impureté. Les électrons de BC ne proviennent que de l'excitation thermique d'électrons liés de BV. Dans ce cas, la densité de porteurs intrinsèque n_i vérifie l'égalité : $n = p = n_i$ où n et p sont les densités de porteurs libres données par [3] :

$$n = N_C e^{\left(\frac{E_C - E_F}{k_B T}\right)} \text{ avec } N_C = 2 \left(\frac{2\pi m_C k_B T}{h^2}\right)^{3/2} \quad (I.5)$$

$$p = N_V e^{\left(\frac{E_V - E_F}{k_B T}\right)} \text{ avec } N_V = 2 \left(\frac{2\pi m_V k_B T}{h^2}\right)^{3/2} \quad (\text{I.6})$$

Où N_C et N_V représentent les densités équivalentes d'états dans BC et BV [4], respectivement. h et k_B sont les constantes de Planck et Boltzmann, respectivement.

D'après la loi d'action de masse : $np = n_i^2$, on aboutit à :

$$n_i = (N_C N_V)^{1/2} e^{-\frac{E_G}{2k_B T}} \quad (\text{I.7})$$

A partir de l'égalité $n = p$, le niveau de Fermi intrinsèque E_{Fi} est :

$$E_{Fi} = \frac{E_C + E_V}{2} + \frac{1}{2} k_B T \ln \frac{N_V}{N_C} \text{ ou } E_{Fi} = \frac{E_C + E_V}{2} + \frac{3}{4} k_B T \ln \frac{m_V}{m_C} \quad (\text{I.8})$$

Le rapport des masses effectives des trous m_V et celle des électrons m_C est de l'ordre de 1 dans les SC à gap indirect et de l'ordre de 10 dans les SC à gap direct. Dans ce cas, le niveau de Fermi E_{Fi} se situe au milieu du gap tel que :

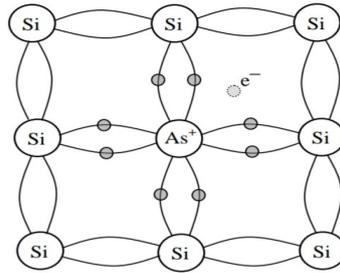
$$E_{Fi} \approx \frac{E_C + E_V}{2} \quad (\text{I.9})$$

I.2.1.d. Semiconducteur extrinsèque

Les SC extrinsèques sont fabriqués en ajoutant des impuretés à un SC intrinsèque. Les impuretés ajoutent des trous ou des électrons libres au matériau de base, initialement neutre électriquement. Ce processus d'ajout d'impuretés est le dopage. Lors du dopage, les impuretés vont se lier chimiquement aux atomes du SC lui conférant des propriétés électriques adaptées aux applications électroniques et optoélectroniques. Cependant, il restera un électron ou un trou en trop suite à ce processus servant de porteurs de charges. Il existe deux types de SC extrinsèques : type n et type p .

- Semiconducteur de type n

Un SC type n est un SC dans lequel on a introduit des impuretés plus riches en électrons (type donneur) que les atomes du SC. Par exemple la substitution d'un atome de la colonne V de la classification périodique (ex : As, P) dans un SC de la colonne IV (ex : Si, Ge). Ces impuretés donnent un électron qui devient libre dans BC (Figure I.5).

Figure I.5 : Silicium dopé avec de l'Arsenic. Dopage de type n .

Dans un SC de type n , les électrons sont les porteurs majoritaires et les trous sont les porteurs minoritaires. La densité des électrons est donnée par :

$$n = N_C e^{\frac{E_C - E_{Fn}}{k_B T}} \quad (\text{I.10})$$

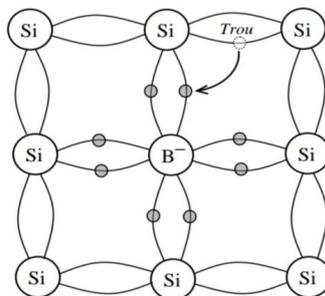
Le niveau de Fermi E_{Fn} s'écrit :

$$E_{Fn} = E_C - k_B T \ln \frac{N_C}{N_D} \quad (\text{I.11})$$

Plus la densité des donneurs (N_D) est élevée, plus le niveau de Fermi se rapproche de BC. A la limite si $N_D = N_C$, le niveau de Fermi entre dans BC et le SC devient dégénéré.

- Semiconducteur de type p

Pour créer une impureté de type accepteur, il faut introduire dans le réseau du SC des impuretés plus pauvres en électrons que les atomes du SC. Ces impuretés acceptent un électron de BV afin de pouvoir compléter la liaison avec le SC, ce qui donne un trou (Figure I.6). Par exemple un atome de la colonne III (B, Al, Ga, In) dans un SC de la colonne IV (C, Si, Ge, Sn).

Figure I.6 : Silicium dopé avec du Bore. Dopage de type p .

De façon analogue, dans un SC de type p , les trous sont majoritaires et les électrons sont minoritaires.

La densité des trous est donnée par :

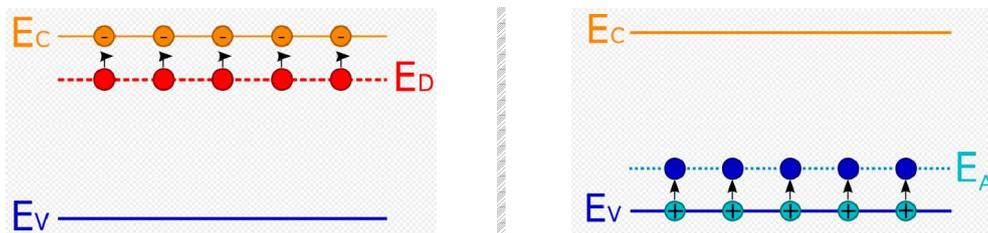
$$p = N_V e^{-\frac{E_C - E_{Fp}}{k_B T}} \quad (\text{I.12})$$

Le niveau de Fermi E_{Fp} s'écrit :

$$E_{Fp} = E_V + k_B T \ln \frac{N_C}{N_A} \quad (\text{I.13})$$

Plus la densité des accepteurs (N_A) est élevée, plus le niveau de Fermi se rapproche de BV. Si $N_A = N_V$, le niveau de Fermi entre dans BV et le SC devient dégénéré.

Le dopage a un effet sur les BV et BC, en augmentant ou diminuant leurs extrémités. Le dopage de type n abaisse BC (Figure I.7.a), alors que celui de type p remonte BV (Figure I.7.b). Dans les deux cas, la bande interdite se réduit, ce qui facilite le dé-confinement des électrons.



a- Dopage n : introduire des niveaux d'énergie E_D dans BI près de BC. b- Dopage p : introduire des niveaux d'énergie E_A dans BI près de BV.

Figure I.7 : Effet du dopage sur les bandes de conduction et de valence.

I.3. Diagramme de bandes d'énergie d'une structure MIS

Nous allons, pour simplifier l'étude, considérer que les matériaux constituant une structure MIS sont homogènes et ont des travaux de sortie identiques.

En d'autres termes, l'écart énergétique entre le niveau du vide et le niveau de Fermi du métal est égal à celui du SC dopé constituant le substrat.

A l'équilibre thermodynamique, le métal et le SC sont au même potentiel et le champ électrique local entre les deux est nul ceci donne des niveaux de Fermi

Où V_{BP} est la tension de bandes plates qui est la tension à appliquer sur le métal pour redresser les bandes à l'horizontale.

- Régime de bandes plates

Pour une tension $V_g = V_{BP}$, toutes les bandes sont alignées et l'équilibre thermodynamique s'établit.

- Régime de déplétion ou d'appauvrissement

Lorsque la tension V_g est comprise entre la tension de bandes plates et la tension de seuil ($V_{th} < V_g < V_{BP}$), les charges majoritaires sont repoussées loin de la surface et une zone de charge d'espace (ZCE) se crée. Les bandes d'énergie sont courbées vers le haut du diagramme.

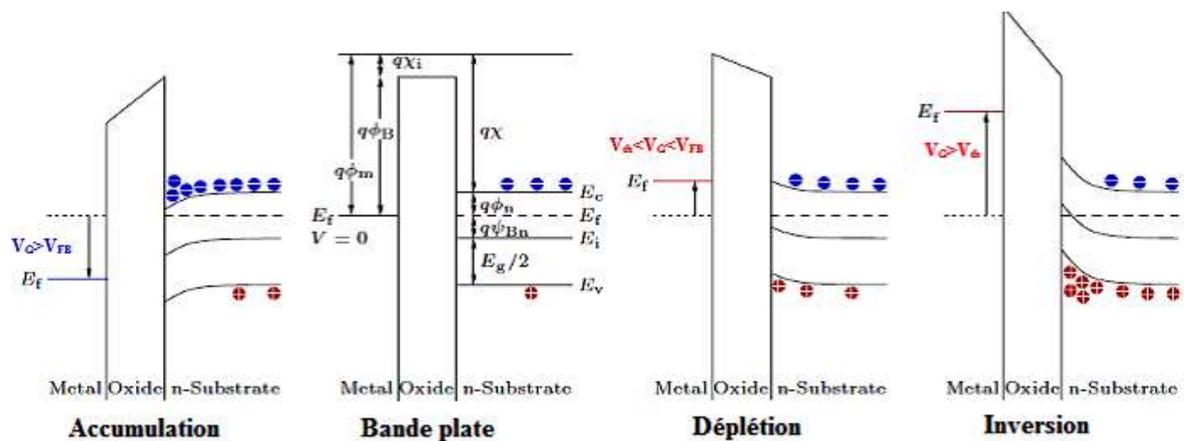


Figure I.9 : Diagrammes de bandes pour une structure MIS sur un SC type n en régime d'accumulation, de bandes plates, de déplétion et d'inversion [5].

- Régime d'inversion

Pour une tension de polarisation de grille inférieure à la tension de seuil ($V_g < V_{th}$), une couche d'inversion se forme à la surface du SC.

La tension seuil V_{th} de la structure est définie comme étant la tension de polarisation de l'électrode métallique nécessaire à l'établissement du régime de forte inversion.

Il est possible d'observer ces trois régimes de fonctionnement en faisant une mesure de capacité en fonction de la tension de grille (C-V) [6].

I.3.3. Structure MIS réelle

La structure MIS idéale n'existe pas dans la réalité, mais constitue une bonne approximation pour décrire une interface avec de très bonnes propriétés électroniques. Néanmoins, il existe plusieurs défauts présents dans la couche isolante et à l'interface isolant-SC (Figure I.10), qui peuvent modifier le comportement de la structure MIS. Ils se classent essentiellement en trois catégories : les états d'interface (Q_{it}), les charges fixes (Q_f) et les charges mobiles (Q_m). Ces charges réduisent les performances des composants MIS (transistors, diodes, etc.) et peuvent ultimement affecter leur fiabilité et leur stabilité.

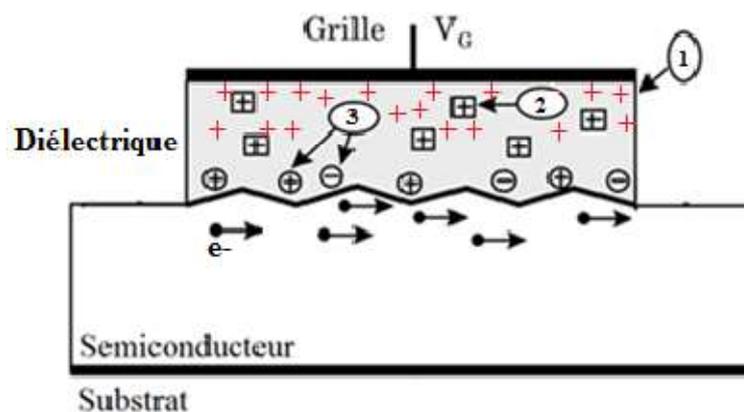


Figure I.10 : Pièges électroniques présents dans la couche diélectrique et à l'interface isolant-semiconducteur. (1) charges mobiles dans le diélectrique, (2) charges fixes dans le diélectrique et (3) états d'interface.

- Les charges mobiles :

Les charges mobiles sont des ions présents dans la couche diélectrique et qui réagissent à la tension électrique appliquée sur la grille. Ces charges sont principalement causées par la présence d'impuretés au cours du procédé de microfabrication ou du dépôt du diélectrique.

- Les charges fixes :

Les charges fixes sont des charges présentes dans la couche diélectrique et sont situées proche de l'interface isolant-SC. Ces charges peuvent s'incorporer dans le diélectrique au cours du procédé de dépôt. Leur densité dépend essentiellement de la nature et des conditions de dépôt du diélectrique. Pour

une structure MIS, la principale influence de ces charges est le décalage de la tension de bande plate (V_{BP}) [7].

- Les états de surface/interface :

La surface d'un SC est caractérisée par la présence de pièges (états de surface) résultant des phénomènes intrinsèques et extrinsèques (liaisons pendantes, contaminations, etc.). Ces défauts induisent une courbure des bandes en surface, piègent les porteurs libres et augmentent leur vitesse de recombinaison [8].

Les propriétés des états de surface feront l'objet du deuxième chapitre.

I.4. Références bibliographiques

- [1]- Annaig Denis, " Elaboration, cristallogenèse et caractérisations physico-chimiques des nitrures des éléments de la colonne III et en particulier de GaN " Thèse de Doctorat, Université de Bordeaux (2003).
- [2]- H. Stöcker, " Toute la physique", Dunod (1999).
- [3]- H. Mathieu, " Physique des semiconducteurs et des composants électroniques ", Dunod 5^e édition (2001).
- [4]- S. M. Sze, Physics of Semiconductors Devices, Wiley-Interscience, New York (1969).
- [5]- P. Hehenberger, "Advanced Characterization of the Bias Temperature Instability", Thèse soutenue en Décembre 2011 à l'Université Technique de Vienne, (2011).
- [6]- L.M. Terman, Solid State Electron, Vol.5, No. 5, p. 285 - 299 (1962).
- [7]- B. Van Zeghbroeck, 'Principles of semiconductor devices', livre électronique, <http://ece-www.colorado.edu/~bart/book/>.
- [8]- E. H. Nicollian et J. R. Brews, "MOS (Metal Oxide Semiconductor) Physics and Technology", Wiley, New York (1982).

Chapitre 2

TECHNIQUES DE CARACTERISATION
DES ETATS DE SURFACE

II.1. Introduction

Ce chapitre est consacré à la présentation et la mise en œuvre d'une technique de caractérisation théorique de surfaces ou d'interfaces Métal-Isolant-SC (MIS) et Métal-SC (MS) ; une technique purement optique donc non destructrice. Elle est basée sur la luminescence des matériaux permettant d'obtenir des grandeurs physiques précises et de définir la signature de pièges (densité et position énergétique).

II.2. Etats de surface/interface

II.2.1 Historique

Le terme " Etats de surface" a été utilisé pour la première fois par Tamm [1] en 1932. Il a remarqué que de nouveaux niveaux d'énergie sont introduits lorsque les dimensions de la structure ne sont pas assez importantes pour qu'elles soient considérées comme infinies. Ces nouveaux états sont confinés à la surface du cristal. Bardeen [2] a, par la suite, expliqué des résultats expérimentaux obtenus sur des contacts métal-SC par la présence d'états de surface.

Actuellement, il est admis que les états d'interface jouent un rôle capital, souvent néfaste, dans le comportement des dispositifs à SC.

II.2.2. Définition d'un état de surface

Un état de surface ou d'interface est un état électronique, localisé à la surface ou à l'interface. Il possède les propriétés suivantes :

- Il peut émettre ou piéger des porteurs.
- Son niveau d'énergie est localisé dans la bande interdite ou même dans une des bandes (de valence ou de conduction) mais seuls les niveaux existant dans la bande interdite ou juste au-dessus ou en dessous des extrema de bandes sont capables d'être chargés ou déchargés avec l'application d'une tension. Cette variation de charge induit une contribution capacitive qui modifie le comportement de la structure étudiée.
- Il peut se comporter comme un état donneur ou accepteur.

Un état de surface est caractérisé par :

- Son niveau d'énergie E_{it} dans la bande interdite du SC.
- La section efficace de capture des électrons σ_n ou des trous σ_p .

Dans le cas d'une distribution continue, deux paramètres définissent les états d'interface :

- La densité d'états d'interface D_{it} ($cm^{-2}eV^{-1}$).
- Le nombre d'états de surface par unité de surface N_{it} (cm^{-2}), $N_{it} = \int D_{it}(E)dE$.

II.3. Méthodes de caractérisation des états de surface/interface

Les états d'interface sont omniprésents dans les dispositifs à SC malgré le développement technologique qu'a connu le domaine de conception de ces dispositifs du fait de leur origine physique, une fois toute imperfection disparue.

La détermination de la densité des états d'interface D_{it} a été largement étudiée et différentes méthodes de caractérisation électrique et/ou optique ont été développées dans ce but. Parmi lesquelles :

- Les méthodes capacitives qui utilisent des mesures de la capacité en fonction de la tension à basse ou à haute fréquence [3].
- Les méthodes de la conductance basées principalement sur des mesures de la conductance en fonction de la fréquence et de la tension [4].
- La méthode des transitoires de capacité des niveaux profonds (DLTS : Deep Level Transient Spectroscopy) basée sur l'analyse des signaux transitoires (de capacité, de tension ou de courant) engendrés par l'émission des porteurs piégés par les états d'interface, de surface ou en volume [5].
- La spectroscopie de photocourant basée sur la détection d'un courant généré après irradiation de l'échantillon à l'aide d'une source de lumière monochromatique à longueurs d'ondes variables [6] et bien d'autres mesures.
- La technique de photoluminescence qui a fait l'objet de ce travail [7].

II.3.1 La photoluminescence

La photoluminescence peut-être définie comme la radiation photonique produite par un SC à la suite d'une excitation lumineuse.

La spectroscopie de photoluminescence est très intéressante car non destructive. Elle ne requière pas de préparation spécifique du matériau ou l'élaboration d'un composant spécifique.

II.3.1.1. Description des processus en photoluminescence

Au sein d'un SC, on identifie 3 types de transitions (Figure II.1) :

- Transitions interbandes radiatives dans lesquelles la recombinaison de la paire e-h s'effectue de façon directe avec émission de photons. Elles sont à leur tour classifiées selon la configuration des bandes du SC en transitions directes et indirectes ;
- Transitions intrabandes ;
- Transitions via des défauts/impuretés.

Dans le premier type (transition directe), la recombinaison radiative de la paire e-h s'effectue de façon directe alors que dans le cas d'une transition indirecte, la recombinaison se fait via l'intervention d'une troisième particule à savoir le phonon (vibration du réseau cristallin), afin de conserver le vecteur d'onde \mathbf{k} total de la transition.

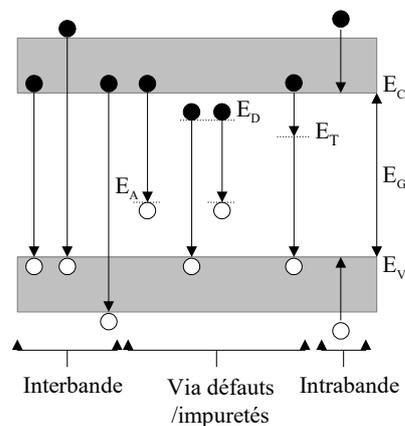


Figure II.1 : Transitions principales au sein d'un SC.

II.3.1.1.1. Processus de génération- recombinaison dans un SC

Une radiation lumineuse appliquée à la surface d'un SC est en partie réfractée et/ou absorbée par ce dernier. Dans le cas d'une source ponctuelle (cas d'un faisceau localisé), la densité de flux de photons $\phi(x)$ est donnée par la loi de Beer-Lambert :

$$\phi(x) = \phi_0(1 - R)e^{-\alpha x} \quad (\text{II.1})$$

R et α sont les coefficients de réflexion et d'absorption de la lumière, respectivement et Φ_0 est la densité de flux des photons incidents donné par : $\Phi_0 = \frac{P_{opt}}{\frac{hc}{\lambda}A}$ (II.2)

Où P_{opt} est la puissance optique et $A = \frac{\pi d^2}{4}$ est la surface excitée, d est le diamètre du spot laser, h est la constante de Planck, c est la vitesse de la lumière et λ est la longueur d'onde du laser.

Si l'énergie des photons incidents est supérieure ou égale à l'énergie de la bande interdite du SC ($h\nu \geq E_G$, ν est la fréquence de l'onde), il y a génération de paires électron-trou (e-h) (Figure II.2). Le SC est alors dans un état hors équilibre.

Si chaque photon absorbé crée une paire e-h, le taux de génération G qui est le nombre de paires e-h générées par unité de volume et par unité de temps est donné par : $G(x) = \alpha\Phi(x)$ (II.3)

Après un certain temps, les paires e-h disparaissent en se recombinant (retour à l'équilibre thermodynamique) suivant différents processus classés en recombinaisons radiatives et non radiatives en volume et à la surface du SC.

a. Processus de recombinaison radiative

- Recombinaison bande à bande

Le mécanisme de recombinaison dominant en photoluminescence à température ambiante est la recombinaison radiative bande à bande. Il correspond à la transition d'un électron de BC vers BV tout en émettant un photon d'énergie $h\nu \geq E_G$. Le taux de recombinaison (U_{rad}) correspondant, définit comme étant le nombre de paires e-h qui se recombinent et aussi le nombre de photons émis par unité de volume et par unité de temps, est donné par :

$$U_{rad} = B_{rad}(pn - n_i^2) \quad (II.4)$$

B_{rad} est le coefficient de recombinaison radiative, n et p sont respectivement les concentrations totales en électrons et en trous et n_i est la densité intrinsèque des porteurs (Cf. chapitre I).

b. Processus de recombinaisons non radiatives

- Recombinaison Shockley-Read-Hall (SRH)

La recombinaison radiative est souvent accompagnée et dominée par la recombinaison non radiative de SRH (Shockley-Read-Hall) [8,9]. Dans ce cas, les centres de recombinaison sont des niveaux énergétiques discrets dans le gap (Figure II.2) qui peuvent-être vides ou occupés par un électron.

Le taux de recombinaison SRH qui exprime le nombre de transitions par unité de volume et par unité de temps ainsi que la durée de vie des porteurs en excès est donné par :

$$U_{SRH} = C_n C_p N_T \frac{pn - n_i^2}{C_n(n+n_1) + C_p(p+p_1)} \quad (II.5)$$

C_n et C_p sont les coefficients de capture des électrons et de trous tels que :

$C_n = \sigma_n v_n$ et $C_p = \sigma_p v_p$ où v_n et v_p sont les vitesses thermiques et σ_n et σ_p sont les sections de capture des électrons et des trous. N_T est la concentration des centres de recombinaison dans le gap du SC de niveau d'énergie E_T .

n et p sont les concentrations des porteurs hors équilibre dans le volume données par : $n = n_0 + \Delta n$ et $p = p_0 + \Delta p$ (II.6)

Δn et Δp sont les concentrations des porteurs en excès et n_0 et p_0 sont les concentrations des porteurs majoritaires et minoritaires à l'équilibre thermique dans le volume du SC (Cf. chapitre I).

n_1 et p_1 sont les concentrations des porteurs dans le SC non dégénéré lorsque le niveau de Fermi E_F coïncide avec le niveau E_T ($E_F = E_T$). Elles sont données par :

$$n_1 = N_c e^{\left(\frac{E_c - E_T}{k_B T}\right)} \text{ et } p_1 = N_v e^{\left(\frac{E_T - E_v}{k_B T}\right)} \quad (II.7)$$

- Recombinaison Auger

La recombinaison Auger est un processus de recombinaison non radiative. Dans ce processus, l'énergie de l'électron qui passe de BC vers BV n'est pas prise par un photon mais par un électron dans la BC (processus e-h-e) ou par un trou de BV (processus h-e-h) (Figure II.2).

Le taux de recombinaison Auger est donné par :

$$U_{Aug} = (pn - n_i^2)(nC_n + pC_p) \quad (II.8)$$

Les constantes C_n et C_p décrivent la probabilité des processus e-h-e et h-e-h respectivement.

Le processus de recombinaison Auger est souvent négligeable sauf si la densité de flux de photons en surface du SC sous illumination génère une grande densité de porteurs.

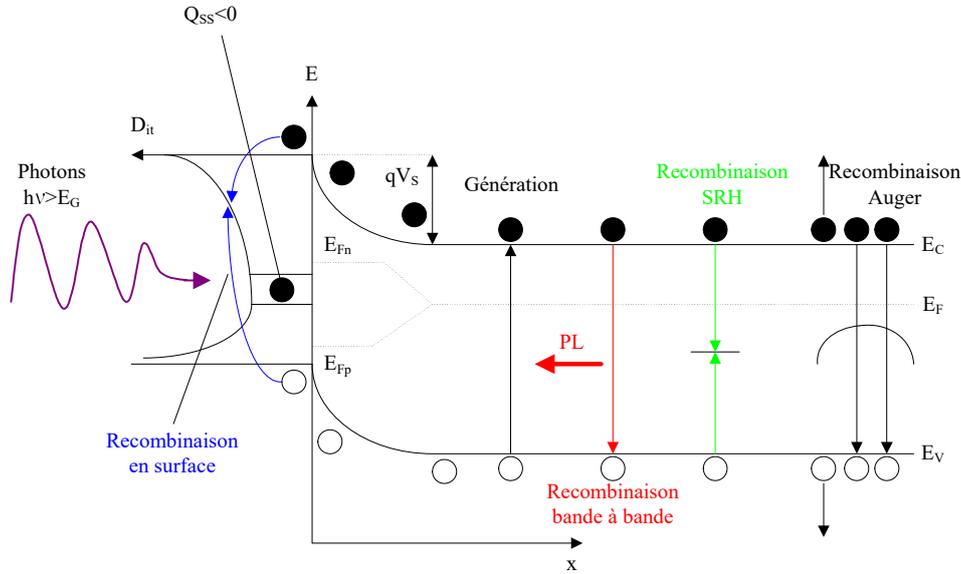


Figure II.2 : Processus de génération-recombinaison dans un SC sous illumination [10].

- Recombinaison en surface

Le processus de recombinaison en surface via un continuum d'états de surface (Figure II.2) est le mécanisme le plus important car souvent dominant. La statistique de recombinaison en surface est similaire à celle de la recombinaison SRH.

$$U_s = C_n C_p N_{Ts} \frac{p_s n_s - n_i^2}{C_n (n_s + n_1) + C_p (p_s + p_1)} \tag{II.9-a}$$

Le taux de recombinaison des porteurs en surface (nombre de paires e-h se recombinant par unité de surface et par unité de temps) est obtenu en remplaçant N_{Ts} par $D_{it}(E)dE$ et E_T est remplacée par E variant de E_V à E_C . Nous obtenons donc:

$$U_s = \int_{E_V}^{E_C} \frac{\sigma_{ns} \sigma_{ps} v_n v_p (p_s n_s - n_i^2) D_{it}(E)}{\sigma_{ns} v_n [n_s + n_1(E)] + \sigma_{ps} v_p [p_s + p_1(E)]} dE \tag{II.9-b}$$

σ_{ns} , σ_{ps} sont les sections efficaces de capture des états de surface pour les électrons et les trous, respectivement.

n_s et p_s sont respectivement les concentrations des électrons et des trous en surface exprimées en fonction du potentiel de surface V_s par :

$$n_s = n e^{\left(\frac{qV_s}{k_B T}\right)} = (n_0 + \Delta n) e^{\left(\frac{qV_s}{k_B T}\right)} \quad (\text{II.10-a})$$

$$p_s = p e^{\left(\frac{-qV_s}{k_B T}\right)} = (p_0 + \Delta p) e^{\left(\frac{-qV_s}{k_B T}\right)} \quad (\text{II.10-b})$$

II.3.1.2. Intensité de photoluminescence

La photoluminescence (PL) est très sensible aux états électroniques d'un SC du fait que la recombinaison en surface/interface diminue le taux de recombinaison radiative. Les processus de génération-recombinaison sont très compliqués car l'excès de porteurs divise le niveau de Fermi (E_F) en quasi-niveaux de Fermi relatifs aux électrons et aux trous (E_{Fn} et E_{Fp}) et modifie l'occupation des états de surface. Ces derniers changent la courbure de bandes par leur charge, provoquant la recombinaison des porteurs.

Pour calculer l'intensité de photoluminescence (I_{PL}), il faut au préalable déterminer les profils de concentration des électrons $n(x)$ et des trous $p(x)$ en volume du SC en partant de la surface et tenir compte de tous les processus de génération-recombinaison en surface et en volume.

A température ambiante, I_{PL} peut-être mise sous la forme :

$$I_{PL} = C B_{rad} \int_0^{\infty} [p(x)n(x) - n_i^2] e^{-\beta x} dx \quad (\text{II.11})$$

β est le coefficient d'auto-absorption (coefficient d'absorption à la radiation émise par l'échantillon) et C est un facteur lié à la géométrie du système de mesure utilisé.

Pour quantifier les grandeurs physiques en surface d'un SC, une approche a été développée correspondant au modèle de la couche morte DLM (Dead Layer Model). Elle donne une description analytique de l'évolution des paramètres électroniques du SC sous illumination à partir d'hypothèses simplificatrices.

II.3.1.3. Modèle de la couche morte DLM (Dead Layer Model)

Cette méthode est applicable à une jonction Métal-SC ou Métal-Isolant-SC. Il est possible de travailler aussi bien en régime de déplétion qu'en régime d'accumulation. Dans le 1^{er} cas, développé dans cette étude, le modèle DLM est basé sur l'hypothèse que la recombinaison radiative est négligeable dans une zone

appelée "couche morte" en surface du SC où la concentration des porteurs mobiles est faible (Figure II.3). Cette zone correspond à la région de déplétion d'épaisseur W qui dépend de la polarisation externe. De plus, les porteurs minoritaires générés dans cette zone sont repoussés, sous l'action d'un champ électrique ou polarisation, vers la surface où la recombinaison non radiative est dominante.

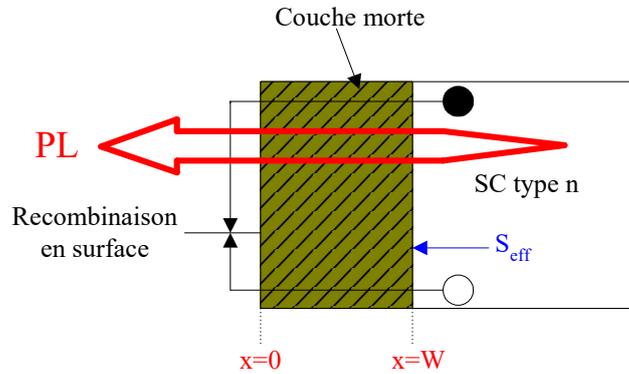


Figure II.3 : Schéma pour le modèle de la couche morte de PL dans un SC.

a- Détermination de la vitesse de recombinaison en surface d'un SC

Dans un SC de type n et d'épaisseur d , supposé en condition de bandes plates et éclairé uniformément sur l'une de ses faces par un rayonnement permanent d'énergie $h\nu \geq E_G$, le courant de diffusion des trous en excès est donné par :

$$I_p = -qD_p \frac{d(\Delta p)}{dx} \quad (\text{II.12})$$

En régime permanent, $\frac{dp}{dt} = 0$. La loi de conservation de charges pour les trous est :

$$\frac{1}{q} \frac{dI_p}{dx} = G - U \quad (\text{II.13})$$

La dérivée première de l'équation (II.12) par rapport à x sera égale à l'équation (II.13), d'où :

$$D_p \frac{d^2(\Delta p)}{dx^2} = G - U \quad (\text{II.14})$$

Le taux de génération G est donné par l'équation (II.3) et le taux de recombinaison $U = U_{rad} + U_{SRH} + U_{Aug}$, dans le cas d'une faible injection ($n_0 \gg \Delta n$), est proportionnel à la densité de trous en excès : $U = \frac{(p-p_0)}{\tau_p} = \frac{\Delta p}{\tau_p}$ où τ_p est la durée de vie des trous.

En substituant G et U dans l'équation (II.14), l'équation de diffusion des trous en excès est la suivante :

$$\frac{d^2(\Delta p)}{dx^2} - \frac{\Delta p}{L_p^2} = \frac{\alpha \tau_p}{L_p^2} G_E(0) e^{-\alpha x} \quad (\text{II.15})$$

Où $L_p = \sqrt{D_p \tau_p}$ est la longueur de diffusion et $G_E(0) = (1 - R)\phi_0$ est le flux de photons transmis dans le SC.

La solution de l'équation (II.15) est de la forme :

$$\Delta p(x) = A e^{-\frac{x}{L_p}} + \frac{G_E(0) \alpha L_p^2}{D_p (1 - \alpha^2 L_p^2)} e^{-\alpha x} \quad (\text{II.16})$$

A est une constante déterminée à partir de la condition à la limite $x = 0$ (surface du SC) suivante :

$$D_p \left. \frac{d(\Delta p)}{dx} \right|_{x=0} = S \Delta p(x=0) \quad (\text{II.17})$$

Le paramètre S représente la vitesse de recombinaison en surface ($x = 0$). Elle caractérise l'influence des états de surface sur PL et est défini comme étant la vitesse des porteurs minoritaires qui circulent à travers la surface pour maintenir la condition d'équilibre.

La densité de courant des trous près de la surface (Eq. II.12) devient :

$$I_p = q \Delta p S \Rightarrow S = \frac{I_p}{q \Delta p} \quad (\text{II.18-a})$$

Puisque le courant ne peut pas circuler en dehors du SC au delà de sa surface, S correspond à la mesure du nombre de paires e-h se recombinant par unité de surface et par unité de temps. Plus précisément, $I_p(x=0) = q U_s$, d'où :

$$S = \frac{U_s}{\Delta p} = \frac{U_s}{\Delta n} \quad (\text{II.18-b})$$

En reprenant l'expression de U_s (Eq. II.9-a), S devient :

$$S = \frac{c_n c_p D_{it}}{\Delta p} \frac{p_s n_s - n_i^2}{c_n (n_s + n_1) + c_p (p_s + p_1)} \quad (\text{II.19})$$

Le calcul de Δp en $x = 0$ conduit à des valeurs non physiques de S qui dépassent la vitesse thermique des porteurs car selon le modèle DLM, l'intensité de PL est générée uniquement en volume du SC (c-à-d pour $x > W$) et pour $x < W$, la recombinaison radiative est négligeable à cause des concentrations des électrons et des trous en excès (Δn et Δp) qui sont faibles. Pour cette raison, une vitesse de recombinaison effective en surface S_{eff} est défini par la même équation (II.19) avec Δp déterminée par la même équation (II.16) mais le calcul de la constante A se fait à partir de la condition à la limite $x = W$ donnée par :

$$D_p \left. \frac{d(\Delta p)}{dx} \right|_{x=W} = S_{eff} \Delta p(x=W) \quad (\text{II.20})$$

En substituant les expressions de Δp (Eq. II.16) avec la condition (II.20), n_1 et p_1 (Eq. II.7) et de n_s et p_s (Eq. II.10-a et II.10-b), le développement de S_{eff} donne :

$$S_{eff} = \frac{n_0 + p_0}{2n_i} \frac{v_{th} \sigma D_{it}}{ch\left(\frac{E_T - E_i + U_0}{k_B T}\right) + e^{\left(\frac{E_{Fn} - E_{Fp}}{2k_B T}\right)} ch\left(\frac{qV_s + F - E_i}{k_B T} + U_0\right)} \quad (\text{II.21})$$

On a posé : $C_n = \sigma_n v_n$, $C_p = \sigma_p v_p$, $U_0 = \text{Log} \sqrt{\frac{C_n}{C_p}}$, $\sigma = \sqrt{\sigma_n \sigma_p}$, $v_{th} = \sqrt{v_n v_p}$ et

$$F = \left(\frac{E_{Fn} + E_{Fp}}{2}\right).$$

σ est la section efficace moyenne de capture, v_{th} est la vitesse thermique moyenne, E_{Fn} et E_{Fp} sont respectivement les quasi-niveaux de Fermi des électrons et des trous et F est le quasi-niveau moyen de Fermi.

Dans le cas d'une génération bipolaire ($\Delta n = \Delta p$) en régime de faible injection, les quasi-niveaux de Fermi sont donnés par :

$$E_{Fn} - E_F = k_B T \text{Ln} \left(1 + \frac{\Delta n}{n_0}\right) \text{ et } E_{Fp} - E_F = -k_B T \text{Ln} \left(1 + \frac{\Delta p}{p_0}\right) \quad (\text{II.22})$$

Dans l'équation (II.21), $S_{eff}(V_s)$ est proportionnelle à la densité d'état d'interface D_{it} . Cette expression est valable si le niveau de densité D_{it} est discret et s'il présente une énergie E_T dans BI du SC.

b- Intensité de photoluminescence dans le modèle DLM

Dans le cas d'une forte absorption de la lumière ($\beta\alpha \gg L_p^{-1}$) et pour des vitesses de recombinaison en surface S élevées, $\Delta p(x)$ peut être calculée analytiquement. L'intensité de photoluminescence I_{PL} due à l'excès de trous est calculée par l'intégrale suivante :

$$I_{PL} = C B_{rad} \int_W^\infty \frac{\Delta p}{\tau_{rp}} e^{-\beta x} dx \quad (\text{II.23})$$

Avec τ_{rp} est la durée de vie radiative des trous.

Après intégration, on obtient :

$$I_{PL} = \frac{C B_{rad} G_E(0) \alpha L_p^2}{\tau_{rp} D_p (1 - \alpha L_p^2)} \left[\frac{1}{\alpha + \beta} - \frac{\alpha L_p + S_{eff} \frac{L_p}{D_p}}{\left(\beta + \frac{1}{L_p}\right) \left(1 + S_{eff} \frac{L_p}{D_p}\right)} \right] e^{-W(\alpha + \beta)} \text{ avec } W(V_s) = \sqrt{\frac{2\epsilon\epsilon_0 |V_s|}{qN_D}} \quad (\text{II.24})$$

Les mesures de I_{PL} sont effectuées en régime de déplétion ($V_g \leq 0$) sous excitation monochromatique et polarisation électrique de l'échantillon.

c- Evaluation de la caractéristique $V_g(V_s)$ d'une structure MS ou MIS sous illumination

- Résolution de l'équation de Poisson

Le calcul théorique de V_g en fonction de V_s d'une structure MS ou MIS sous illumination s'effectue par la résolution de l'équation de Poisson. L'étude est unidimensionnelle et par unité de surface.

$$\frac{d^2V}{dx^2} = -\frac{\rho(x)}{\varepsilon_{SC}\varepsilon_0} \quad (\text{II.25})$$

$\rho(x)$ est la concentration de charge d'espace donnée par :

$$\rho(x) = q[N_D^+(x) - N_A^-(x) + p(x) - n(x)] \quad (\text{II.26})$$

Loin de l'interface, la condition de neutralité donne :

$$\rho(x) = 0 \text{ d'où : } N_D^+(x) - N_A^-(x) = n(x) - p(x) \quad (\text{II.27})$$

Dans un SC de type n avec un niveau d'injection modéré ($n_0 \gg \Delta n$) :

$n \approx n_0 \Rightarrow E_F \approx E_{Fn}$, l'équation de Poisson devient :

$$\frac{d^2V}{dx^2} = \frac{q}{\varepsilon_{SC}\varepsilon_0} n_0 \left[e^{\frac{qV(x)}{k_B T}} - 1 - \frac{p_0 + \Delta p}{n_0} \left(e^{-\frac{qV(x)}{k_B T}} - 1 \right) \right] \quad (\text{II.28})$$

En multipliant les deux membres de cette équation par $\frac{dV}{dx}$ et en intégrant en x entre le volume du SC ($V = 0$) et l'interface où $V = V(x)$, l'équation II.28 devient :

$$\left(\frac{dV}{dx} \right)^2 = \pm \frac{2k_B T n_0}{\varepsilon_{SC}\varepsilon_0} \left[e^{\frac{qV(x)}{k_B T}} - \frac{qV(x)}{k_B T} - 1 + \frac{p_0}{n_0} e^{\frac{E_{Fn} - E_{Fp}}{k_B T}} \left(e^{-\frac{qV(x)}{k_B T}} + \frac{qV(x)}{k_B T} - 1 \right) \right] \quad (\text{II.29})$$

L'équation II.29 permet de calculer le champ électrique en surface :

$$E_s = -\left. \frac{dV}{dx} \right|_{x=0} = \pm \sqrt{\frac{2k_B T n_0}{\varepsilon_{SC}\varepsilon_0}} F \left(V_s, \frac{p_0}{n_0} \right) \quad (\text{II.30})$$

$$\text{Avec } F \left(V_s, \frac{p_0}{n_0} \right) = \left[e^{\frac{qV_s}{k_B T}} - \frac{qV_s}{k_B T} - 1 + \frac{p_0}{n_0} e^{\frac{E_{Fn} - E_{Fp}}{k_B T}} \left(e^{-\frac{qV_s}{k_B T}} + \frac{qV_s}{k_B T} - 1 \right) \right]^{1/2} \quad (\text{II.31})$$

Le champ électrique est dirigé dans le sens des potentiels décroissants. Expérimentalement, l'origine des x est prise à la surface du SC. E_s est positif si V_s est positif.

Cette expression du champ électrique en surface (Eq. II.30) est très importante car elle va permettre d'évaluer la valeur de la charge en surface en appliquant le théorème de Gauss et de déduire par la suite la capacité équivalente vue depuis la grille de la structure MIS.

La tension de polarisation V_g appliquée à la grille est donnée pour une structure MIS par :

$$V_g = V_{BP} - \left(-\frac{\varepsilon_0 \varepsilon_{SC} E_s d_i}{\varepsilon_i} + V_s \right) \quad (\text{II.32})$$

ε_i et d_i sont respectivement la constante diélectrique et l'épaisseur de l'isolant.

La tension de bande plate V_{BP} correspond à la tension de polarisation pour laquelle les extrema de bandes deviennent parfaitement plates ($V_s = 0$).

- Dans une structure MIS idéale, $V_{BP} = \phi_m - \phi_s$.

$$\text{Ceci donne : } V_{BP} = \phi_m - \left(\chi_{SC} + \frac{E_G}{2} - \phi_{Fn} \right) \quad (\text{II.33})$$

ϕ_m , ϕ_s , χ_{SC} et ϕ_{Fn} sont respectivement le travail de sortie du métal, le travail de sortie du SC, l'affinité électronique du SC et la différence entre le niveau de Fermi du SC et le niveau de Fermi intrinsèque qui est donnée par :

$$\phi_{Fn} = E_F - E_i = \frac{k_B T}{q} \ln \frac{N_D}{n_i} \quad (\text{II.34})$$

- Dans une structure MIS réelle, il existe des charges à l'interface isolant-SC, V_{BP} s'écartera donc de ϕ_{ms} . Elle est donnée par :

$$V_{BP} = \phi_m - \phi_s - \frac{Q_{it}}{C_i} \quad (\text{II.35})$$

Q_{it} représente les charges piégées par les états d'interface et $C_i = \frac{\varepsilon_i}{d_i}$ représente la capacité de l'isolant.

L'équation (II.32) devient :

$$V_g = \phi_m - \phi_s - \frac{Q_{it}}{C_i} - \frac{Q_{SC}}{C_i} - V_s \quad (\text{II.36})$$

A partir du théorème de Gauss, nous pouvons exprimer la charge du SC par unité de surface : $Q_{SC} = -\varepsilon_0 \varepsilon_{SC} E_s$ et par la suite déduire la capacité du SC, C_{SC} , qui dépend de la tension de grille V_g . La charge s'écrit :

$$Q_{SC} = \pm \frac{2\varepsilon_0 \varepsilon_{SC} k_B T}{q L_D} F \left(V_g, \frac{p_0}{n_0} \right) \quad (\text{II.37})$$

Avec $L_D = \sqrt{\frac{2\varepsilon_0 \varepsilon_{SC} k_B T}{q^2 N_D}}$ est la longueur de Debye pour un SC extrinsèque.

Elle a exactement la même forme que celle de la largeur de la zone de charge d'espace pour laquelle le potentiel serait le potentiel thermodynamique.

d- Détermination de la densité d'états d'interface

La modélisation électrique d'une structure MIS correspond alors principalement à la mise en série de la capacité du SC, C_{SC} et celle de l'isolant C_i (Figure II.4).

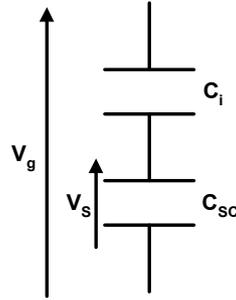


Figure II.4 : Schéma équivalent de la capacité d'une structure MIS idéale.

La différentiation de l'équation (II.36) par rapport à V_s conduit à :

$$\frac{dV_g}{dV_s} = - \left[1 - \frac{1}{C_i} \left(\frac{dQ_{SC}}{dV_s} + \frac{dQ_{it}}{dV_s} \right) \right] \Rightarrow \frac{dQ_{it}}{dV_s} = C_i \left(-\frac{dV_g}{dV_s} - 1 \right) - \frac{dQ_{SC}}{dV_s} \quad (\text{II.38})$$

La densité d'états d'interface par unité d'énergie et par unité de surface est alors donnée par :

$$D_{it}(V_s) = -\frac{1}{q} \frac{dQ_{it}}{dV_s} \quad (eV^{-1}cm^{-2}) \quad (\text{II.39})$$

Le calcul de $D_{it}(V_s)$ nécessite la connaissance de $\frac{dV_g}{dV_s}$ déduite de la caractéristique $V_s(V_g)$ expérimentale et fait intervenir la dérivée $\frac{dQ_{SC}}{dV_s}$ calculée à partir de l'équation de Poisson et donnée par :

$$\frac{dQ_{SC}}{dV_s} = \pm \frac{\epsilon_0 \epsilon_{SC}}{\sqrt{2}L_D} \frac{\left[e^{\frac{qV_s}{k_B T} - 1 + \frac{p_0}{n_0}} e^{\frac{E_{Fn} - E_{Fp}}{k_B T}} \left(1 - e^{-\frac{qV_s}{k_B T}} \right) \right]}{\left[e^{\frac{qV_s}{k_B T}} - \frac{qV_s}{k_B T} - 1 + \frac{p_0}{n_0} e^{\frac{E_{Fn} - E_{Fp}}{k_B T}} \left(e^{-\frac{qV_s}{k_B T}} + \frac{qV_s}{k_B T} - 1 \right) \right]}^{1/2} \quad (\text{II.40})$$

La distribution de $D_{it}(E)$ est obtenue en transformant le potentiel de surface en énergie par la relation :

$$(E_C - E)_s = \frac{E_g}{2} - qV_s - q\phi_{Fn} \quad (\text{II.41})$$

II.4. Procédé et banc de mesure de l'intensité de photoluminescence

Le synoptique du banc de mesure de l'intensité de photoluminescence dans le cas d'une structure MS ou MIS (Figure II.5.a) est représenté sur la figure II.5.b.

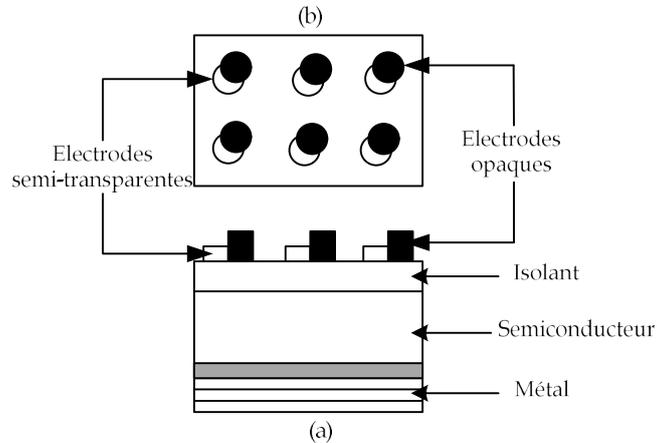
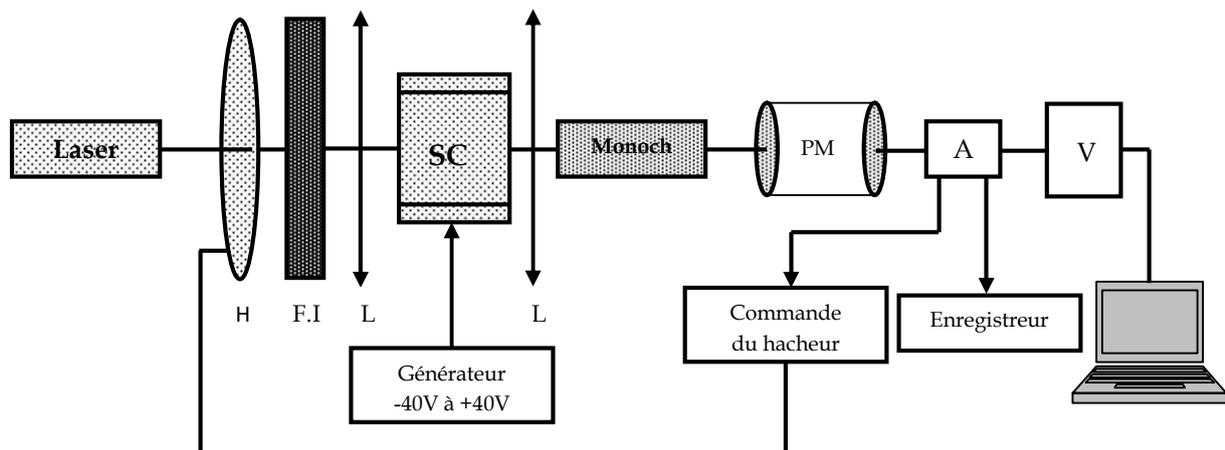


Figure II.5.a : Structure MIS. Vue en coupe (a), vue de dessus (b).



H : Hacheur, F.I : Filtre Interférentiel, L : Lentille, PM : Photomultiplicateur, Monoch : Monochromateur, A : Analyseur Synchrone, V : Voltmètre.

Figure II.5.b : Synoptique du banc de mesure de photoluminescence

Les électrodes opaques (épaisseur 200 - 300 nm) de l'échantillon sont soumises à une tension de polarisation continue de -40 V à 40 V générée par un générateur de tension. En même temps, les électrodes semi-transparentes (épaisseur 10 - 15 nm) sont excitées par une source laser UV d'énergie maximale égale à 4.6 eV (longueur d'onde $\lambda = 266$ nm). L'intensité expérimentale du laser peut atteindre des flux de 10^{24} photons.cm⁻².s⁻¹, figure II.6.

Le signal lumineux émis par le substrat de GaN est récolté par une lentille de focalisation et à l'aide d'un dispositif expérimental, on peut mesurer l'intensité de PL en différents points de l'échantillon.

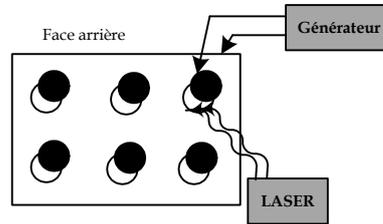


Figure II.6 : Procédé de mesure de l'intensité de PL.

II.5. Références bibliographiques

- [1]- Tamm, Phys. Z. Sowjetunion 1, 733 (1932).
- [2]- J. Bardeen, Phys. Rev. 71, 717 (1947).
- [3]- L.M. Terman, Solid State Electron, Vol.5, No. 5, p. 285 - 299 (1962).
- [4]- E. H. Nicollian et A. Goetzberger, Bell System Technical Journal, 46: 1055-1133 (1967).
- [5]- I. V. Antonova and *al.*, Semiconductors, Vol. 42, No. 1, pp.52 (2008).
- [6]- H. A. Barkad, "Conception et réalisation de photodétecteurs X-UV à base de matériaux à large bande interdite destinés à des applications spatiales", thèse soutenue à l'université de Lille (2010).
- [7]- M. Matys and *al.*, Acta Physica Polonica A, Vol. 120, No. 6-A, pp. A-73 (2011).
- [8]- W. Shockley, W.T. Read, Phys. Rev. 87, 835 (1952)]
- [9]- R.N. Hall, Phys. Rev. 87, 387 (1952).
- [10]- T. Sawada, K. Numata, S. Tohdoh, T. Saitoh, H. Hasegawa, Jpn. J. Appl. Phys. 32, 511 (1993).

Chapitre 3

PRINCIPALES PROPRIETES DU GAN

III.1. Introduction

Le matériau nitrure de gallium (GaN) possède des propriétés remarquables qui en font un bon candidat, pour les applications en puissance à haute température et en environnement caustique.

L'objet de ce chapitre est de rappeler quelques éléments pertinents connus de la physique concernant les matériaux semiconducteurs de la filière III-N utiles pour notre étude. Dans un premier temps, nous rappelons les principales propriétés du semiconducteur GaN qui sont : les propriétés structurales (structure cristalline et structure de bandes), les propriétés électroniques (masses effectives, mobilité des électrons), les propriétés électriques (champ de claquage, polarisations spontanée et piézoélectrique) et les propriétés thermiques (conductivité thermique). Nous décrivons aussi les différents défauts présents dans le GaN, leurs origines et le rôle de la passivation avec un diélectrique sur la réalisation d'une bonne qualité de l'interface isolant-SC.

III.2. Intérêt du GaN

Le nitrure de gallium (GaN) est un matériau semiconducteur binaire de la famille III-V, les éléments qui le composent appartiennent à la 3^{ème} (Ga) et à la 5^{ème} (N) colonne de la classification périodique de Mendeleïev. Il concurrence le couple (GaAs, InP) pour la puissance en "haute fréquence" et le SiC pour la puissance en "basse fréquence" car il rallie les propriétés physiques avantageuses de ces 2 matériaux.

Ses caractéristiques principales [1] sont :

- un grand gap : 3,39 eV à 300 K
- une bonne conductivité thermique ($1,3 \text{ W.cm}^{-1}.\text{K}^{-1}$)
- une vitesse de saturation des porteurs supérieure à celle du GaAs ($V_{sat}=2.5 \times 10^7 \text{ cm.s}^{-1}$)
- un champ de claquage élevé de l'ordre de 3 à 4 MV/cm.
- c'est un matériau pyroélectrique (polarisations piézoélectrique et spontanée)
- c'est un matériau à gap direct (avantageux pour l'optoélectronique)
- une bonne isolation au niveau du buffer en GaN même à haute température
- Possibilité de dopage type *n* (Si, Ge, O) et type *p* (Fe, C)

- Possibilité de réaliser des alliages ternaires avec de l'aluminium ($\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$) permettant d'obtenir un gap plus important ou avec de l'indium ($\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$) permettant d'obtenir un gap plus petit que GaN [1].

III.3. Propriétés physiques

III.3.1. Largeur de bande interdite

La figure III.1 représente les variations de la largeur de bande interdite de composés à base de nitrures X-N en fonction du paramètre cristallin. Ce diagramme montre qu'il est possible d'obtenir des matériaux dont la largeur de bande interdite et dont les propriétés optiques varient dans une large gamme du visible à l'ultraviolet .

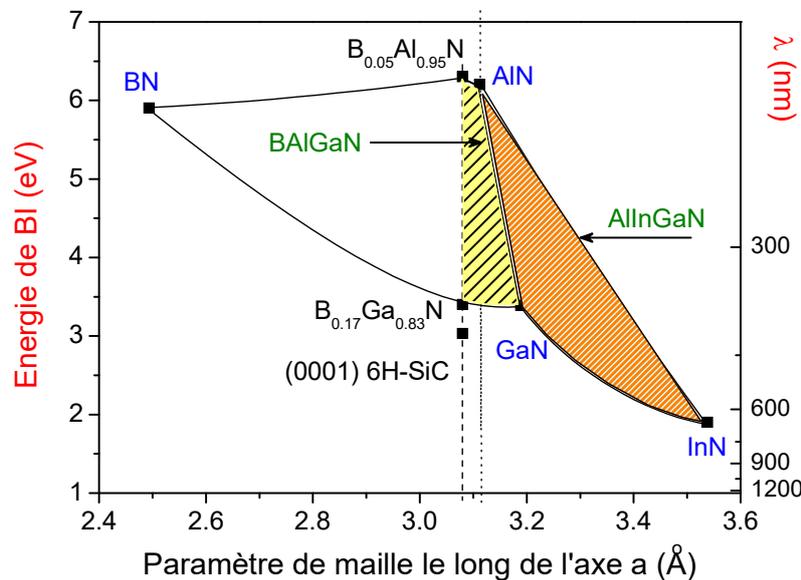


Figure III.1: Largeur de bande interdite en fonction du paramètre cristallin des composés III-V à base de nitrures X-N.

La large bande interdite du GaN permet d'envisager son utilisation dans des photodétecteurs UV insensibles au rayonnement visible du soleil, aux rayonnements ionisants et à l'ultraviolet (dit *solar-blind* : aveugle au rayonnement solaire, qui ne détecte pas les longueurs d'onde au-dessus de 365 nm) [2], ce qui fait de lui un matériau approprié pour des applications de détection d'objet sur fond de rayonnement (ex. radar militaire, satellite, etc.). De plus, le caractère direct de la bande interdite du GaN permet l'utilisation de ce matériau pour la réalisation de dispositifs optoélectroniques de haute efficacité tels que les DELs et les lasers. Ses propriétés physiques intéressantes le rendent non seulement attractif pour les

émetteurs bleus, mais également pour l'électronique haute température, haute puissance et haute fréquence.

III.3.2. Structure cristalline

Le GaN peut être obtenu notamment suivant deux structures cristallines, l'une wurtzite de type hexagonal (w-GaN), l'autre cubique de type zinc blende (c-GaN). Cette différence entre ces deux structures implique des propriétés physiques différentes. La forme cristalline hexagonale (w-GaN) (Figure III.2) est considérée comme étant la plus stable. A température ambiante, les paramètres de maille pour cette structure sont $a = 0.31878$ nm et $c = 0.5185$ nm. La structure est formée de deux réseaux hexagonaux, l'un constitué d'atomes de gallium (Ga) et l'autre d'atomes d'azote (N).

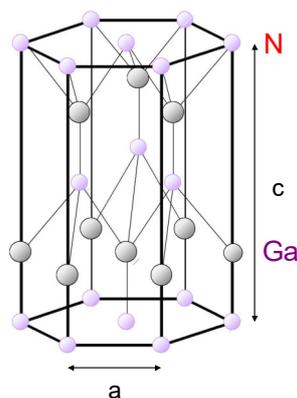


Figure III.2 : Structure hexagonale du GaN

La structure cubique (c-GaN), (Figure III.3), ayant un paramètre de maille de 0.455 nm, est constituée de deux sous réseaux cubiques faces centrées, chacun comprenant un type d'atome, interpénétrés et décalés d'un quart par rapport à la diagonale de la maille.

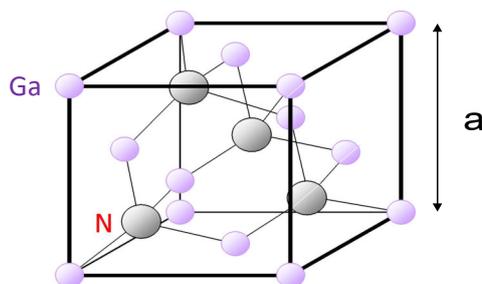


Figure III.3 : Structure cubique du GaN

La structure cubique, thermodynamiquement métastable, peut-être obtenue en choisissant des conditions de croissance adaptées. Elle est très utilisée en optoélectronique.

Généralement, la structure hexagonale (w-GaN) est la plus souvent utilisée, car elle est plus facile à épitaxier. Enfin, il est à noter que les propriétés physiques rassemblées dans le tableau III.1 restent quasiment identiques pour ces deux formes cristallines.

Propriétés du GaN	300K	1.6K
Structure	Hexagonale	
Gap	3.39 eV	3.50 eV
Paramètre de maille	a = 3.188 Å, c = 5.1855 Å	---
Expansion thermique	$5.59 \times 10^{-6} \text{ K}^{-1}$	$3.17 \times 10^{-6} \text{ K}^{-1}$
Conductivité thermique	1.3 W/cm.K	---
Indice de réfraction	n(1 eV) = 2.33	n(3.38 eV) = 2.67
Constante diélectrique	$\epsilon = 10.4$	$\epsilon = 5.5$
Structure	Cubique	
Gap	3.3 eV	---
Paramètre de maille	a = 4.55 Å	---
Indice de réfraction	n(3 eV) = 2.9	---

Tableau III.1 : Récapitulatif de quelques propriétés physiques du GaN @ 300K.

III.3.3. Structure de bandes

La structure de bande des deux formes cristallines du GaN est directe, c'est-à-dire que le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction sont situés au point Γ , centre de la 1^{ère} zone de Brillouin $\vec{k} = \vec{0}$ (Figure III.4). Le minimum central de la bande de conduction correspond à des électrons de faible masse effective, donc très mobiles.

Il existe par ailleurs des minima secondaires en bordure de la zone de Brillouin (L et X). Ces minima sont beaucoup plus plats, les électrons y ont une masse effective beaucoup plus grande et donc une plus faible mobilité. Quant à largeur de bande interdite, elle augmente lorsque la température diminue selon la relation [3] :

$$E_G = E_G(0) - 7.7 \times 10^{-4} \times \frac{T^2}{T+6} \quad (\text{eV}) \quad (\text{III.1})$$

A $T = 0 \text{ K}$, $E_G = 3.47 \text{ eV}$ (Wurtzite) et 3.28 eV (Cubique).

La densité d'états est aussi représentée au voisinage de la 1^{ère} zone de Brillouin (Figure III.4).

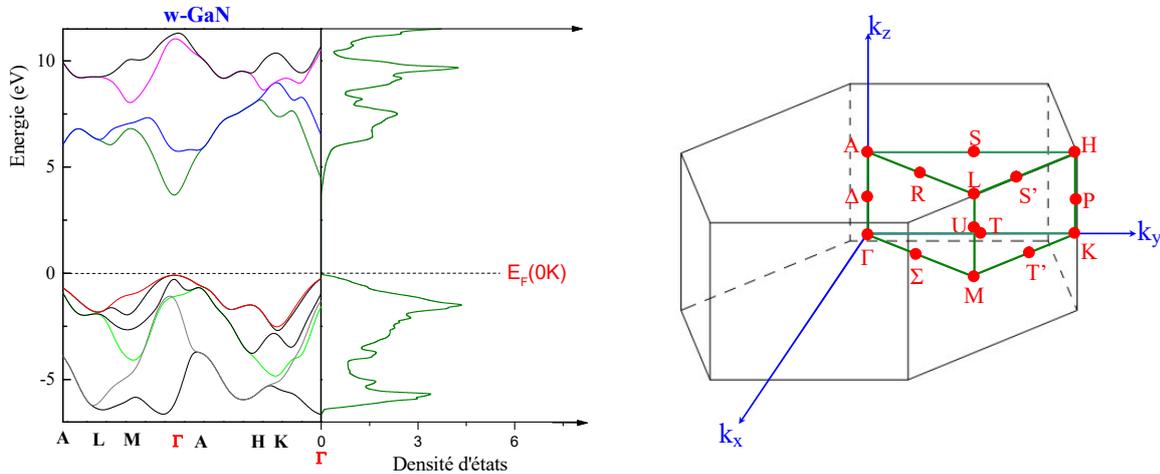


Figure III.4 : Structure de bandes, densité d'états et 1^{ère} zone de Brillouin de w-GaN [4].

III.3.4. Densité de porteurs intrinsèques

Du fait de sa large bande interdite, les densités intrinsèques des porteurs dans le GaN sont très faibles, de l'ordre de $2 \times 10^{-10} \text{ cm}^{-3}$ à 300 K [5]. Cependant, en pratique, on mesure des densités de charges bien supérieures dues aux défauts présents dans le matériau. Les couches de GaN non intentionnellement dopés (crués sans dopage extrinsèque) ont toujours une conductivité de type n , avec des densités électroniques de l'ordre de 10^{16} cm^{-3} à 10^{19} cm^{-3} . La densité de porteurs intrinsèques dans le w-GaN varie en fonction de la température comme suit :

$$n_i = (N_C N_V)^{1/2} e^{-\frac{E_G}{2kT}} \quad (\text{III.2})$$

$E_G(T)$ est donné par l'équation (III.1).

III.3.5. Mobilité des électrons

Les masses effectives des électrons et des trous dans un SC sont directement reliées à la structure de bande de celui-ci. Elles sont proportionnelles à l'inverse de la courbure de la structure de bande respectivement au voisinage du minimum et du

maximum de BC et de BV. La masse effective des électrons dans le GaN non dopé est plus petite que celle de AlN (Figure III.5).

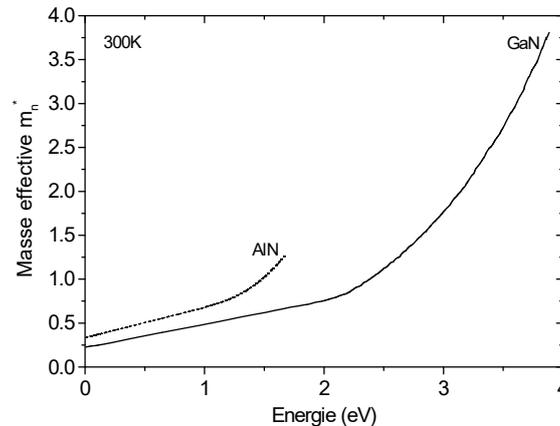


Figure III.5 : Evolution de la masse effective dans AlN et GaN en fonction de l'énergie des électrons.

Etant donné que la masse effective des électrons dans le GaN est plus petite que celle dans AlN, leur mobilité est plus importante puisque celle-ci est inversement proportionnelle à la masse (Figure III.6).

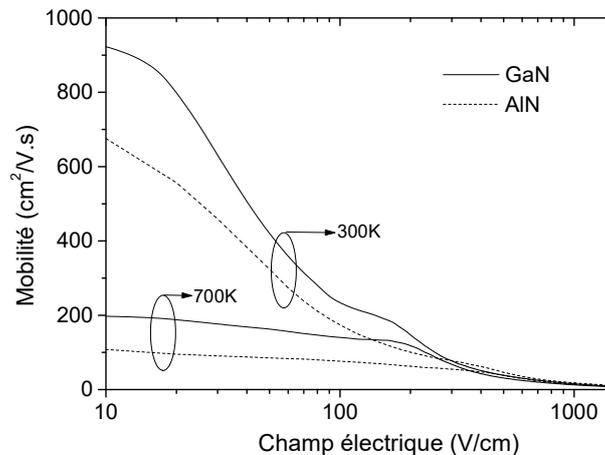


Figure III.6 : Variation de la mobilité des électrons en volume dans GaN et AlN en fonction du champ électrique et pour deux températures (300K et 700K) [6].

La figure III.7 montre la variation de la vitesse des électrons dans le GaN en fonction du champ électrique appliqué, en comparaison avec l'AlN. On peut observer les trois régimes de mobilité : le régime linéaire ($\vec{v} = \mu \vec{E}$), le régime de survitesse et le régime de saturation pour lesquels la mobilité n'est pas constante et varie fortement avec l'énergie des électrons (ou le champ électrique).

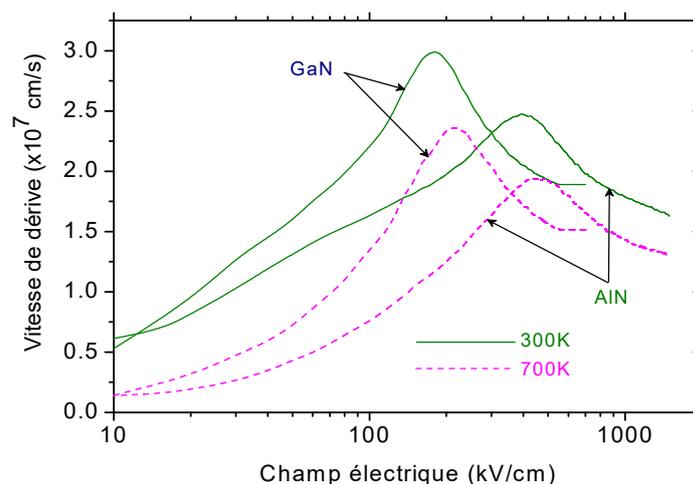


Figure III.7 : Vitesse de dérive des électrons en fonction du champ électrique de n-GaN et n-AlN wurtzite dopées à 10^{15}cm^{-3} pour deux températures de réseau 300K et 700K calculées par la méthode Monte-Carlo [6].

Pour des dispositifs électroniques sur GaN, fonctionnant sous un fort champ électrique, les électrons ne sont plus en régime de mobilité. En effet, au-delà d'un champ critique, la vitesse des porteurs dans le GaN n'augmente plus avec le champ appliqué, mais elle sature, c'est la vitesse de saturation.

De plus, sous un fort champ électrique, la vitesse de dérive des électrons passe par un maximum avant de décroître et d'atteindre le régime de saturation, c'est le pic de survitesse. Cette survitesse est commune à la plupart des éléments de la famille III-V, elle approche $3 \times 10^7 \text{ cm.s}^{-1}$ dans le GaN à 300K [2].

III.3.6. Champ de claquage

Comme pour tous les matériaux à large bande interdite, le champ de claquage du GaN est très élevé. En théorie, on l'estime à environ 3 MV.cm^{-1} . Cette valeur est à peu près 10 fois supérieure à celle du GaAs ou du Si [2,7].

III.3.7. Conductivité thermique du GaN

La conductivité thermique du GaN est de $1,3 \text{ W.K}^{-1}\text{.cm}^{-1}$ [8]. Cette valeur est très proche de celle du Si et elle est trois fois supérieure à celle du GaAs ou du saphir. Cette propriété est capitale pour des applications où une forte dissipation thermique est nécessaire. C'est le cas en particulier des dispositifs de puissances hyperfréquence

où la température dans le canal peut atteindre 400°C [9]. Une bonne évacuation de la chaleur est donc nécessaire.

III.4. Dopage du GaN

III.4.1. Dopage résiduel

Compte tenu de la valeur du gap du GaN, les densités intrinsèques de porteurs sont extrêmement faibles. Aussi, les nitrures III-N à large bande interdite présentent toujours un fort dopage résiduel non intentionnel de type donneur (type n). La densité d'électrons résiduelle est de 10^{16}cm^{-3} sur substrat Silicium et de 10^{13}cm^{-3} sur substrat SiC. Attribué au départ aux lacunes d'azote, il pourrait être dû aux impuretés de type Si_{Ga} , O_{N} et C_{N} dans lesquelles le silicium se place préférentiellement en site gallium (Si_{Ga}) agissant comme donneur, l'oxygène se place en priorité en site azote (O_{N}) agissant comme simple donneur et le carbone agit comme accepteur en site azote (C_{N}), respectivement.

III.4.2. Dopage intentionnel

a- Dopage p

Le GaN peut-être dopé intentionnellement et de manière contrôlée. Pour le dopage des SC III-V, on utilise généralement des éléments du groupe II en substitution des atomes III, qui agissent alors comme des accepteurs (type p).

Le dopage de type p est particulièrement complexe. Divers accepteurs ont été étudiés tels que le Mg, Zn, Be et C. L'élément le plus efficace connu pour un dopage p sur GaN est le magnésium (Mg) du fait de sa plus grande solubilité dans GaN (Figure III.8-a) mais la qualité cristalline du GaN dopé p est dégradée, car le Mg facilite l'apparition de défauts structuraux (inclusions, domaines d'inversion).

b- Dopage n

Le silicium (Si) est le dopeur par excellence pour le type n . Des dopages jusqu'à quelques 10^{19}cm^{-3} ont été obtenus de manière relativement simple et reproductible. Le Si, élément de la colonne IV, peut occuper un site N ou Ga dans le GaN (Figure

III.8-b). Cependant, il se loge principalement sur un site Ga, car il a un rayon de covalence plus proche de celui de Ga que de celui de N.

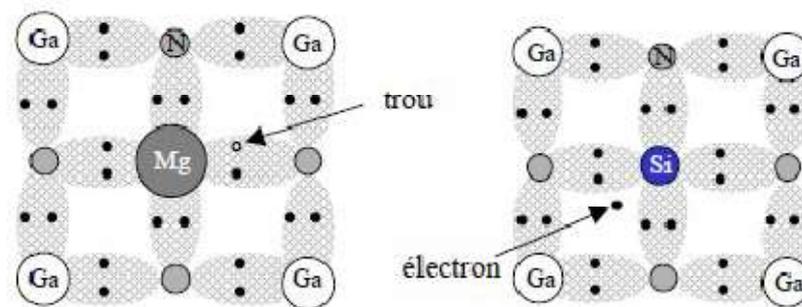


Figure III.8 : Position des dopants dans le réseau cristallin du GaN (a) Mg accepteur, (b) Si donneur.

III.5. Polarisation dans le GaN

L'une des spécificités des nitrures d'éléments III-N, comparés aux autres composés III-V tels que les arséniures (GaAs par exemple), est l'existence d'une polarisation spontanée et une polarisation piézoélectrique [10]. Le GaN est un matériau pyroélectrique.

III.5.1. Polarisation spontanée

Le GaN possède deux éléments d'électronégativités très différentes. C'est pourquoi, les électrons de la bande de valence sont davantage attirés par l'anion (azote : N) que par le cation (aluminium : Al ou gallium : Ga) (Figure III.9-a). Les barycentres des charges positives et négatives ne concordent pas, ce qui donne une polarisation permanente appelée polarisation spontanée existant à l'équilibre. La liaison NGa se caractérise donc par un moment dipolaire non nul lié à la position dissymétrique des électrons de valence. C'est pourquoi, le SC w-GaN présente une polarisation macroscopique non nulle.

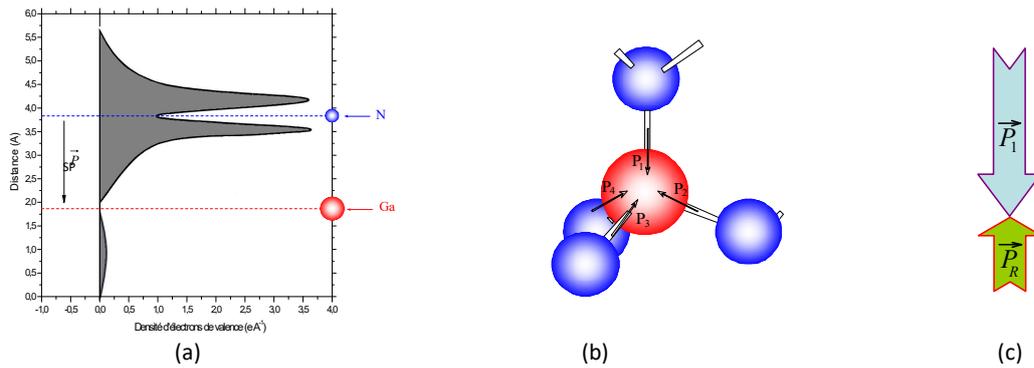


Figure III.9 : a) Distribution des électrons de la bande de valence d'un atome w-GaN. b) Contribution des moments dipolaires pour la génération de la polarisation spontanée. c) Polarisation spontanée dans une structure GaN wurtzite.

Plus précisément, l'atome de gallium possède quatre atomes d'azote voisins formant un dipôle tel que : $\sum_{i=1}^4 \vec{P}_i = \vec{P}_{SP}$ (III.3)

Parmi ces quatre atomes, trois se trouvent être dans le même plan cristallographique perpendiculaire à l'axe c et le quatrième se situe quant à lui, sur l'axe c .

La figure III.9-b montre la contribution des moments dipolaires autour d'un atome de gallium.

La somme vectorielle des moments dipolaires \vec{P}_2, \vec{P}_3 et \vec{P}_4 forme un moment dipolaire \vec{P}_R parallèle à l'axe c , c'est-à-dire parallèle au moment dipolaire \vec{P}_1 mais de sens opposé (Figure III.9-c). Pour une structure w-GaN relaxée, le moment dipolaire $|\vec{P}_1| > |\vec{P}_R|$ entraîne un vecteur de polarisation spontanée $|\vec{P}_{SP}| = |\vec{P}_1| - |\vec{P}_R|$ qui est non nul et dirigée suivant l'axe de croissance du matériau (0001).

L'effet de cette polarisation spontanée dans w-GaN en volume se traduit par la création d'une succession de dipôles électriques qui sont à l'origine du champ électrique interne \vec{E} (Figure III.10) orienté dans la direction opposée à l'axe de croissance (0001) et ceci sans excitation extérieure.

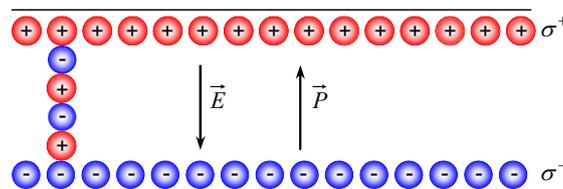


Figure III.10 : Charges en surface σ^+ et σ^- d'une couche de GaN hexagonale.

Les valeurs de la polarisation spontanée (P_{sp}) pour le GaN et AlN sont regroupées dans le tableau III.2 [11].

Matériaux	w-GaN	w-AlN
c_0/a_0	1.6259	1.6010
P_{sp} (C/m ²)	-0.029	-0.081

Tableau III.2 : Valeur de polarisation spontanée dans GaN et AlN.

En conclusion, un échantillon de w-GaN épitaxié suivant l'axe c , présente sur chacune de ses deux faces, des densités de charges fixes identiques mais de signes opposés.

III.5.2. Polarisation piézoélectrique

Tous les composés III-V non centro-symétriques sont piézoélectriques. En ce qui concerne les nitrures à base de GaN, cette piézoélectricité est très importante car la liaison III-N est fortement polaire, les électrons sont essentiellement localisés sur l'atome d'azote [11].

La piézoélectricité est l'aptitude à produire une charge électrique proportionnelle à une contrainte élastique (en tension ou en compression). Ce phénomène est réversible. Son origine résulte de la brisure de la symétrie du cristal. En effet, l'existence de dipôles électriques internes provient de la séparation à l'échelle de la maille, du centre de gravité des charges positives et négatives sous l'action d'une contrainte extérieure σ_{xx} .

La polarisation piézoélectrique P_{PZ} dépend linéairement de la déformation du paramètre de maille a et s'exprime par la relation suivante [12] :

$$P_{PZGaN} = 2 \frac{a-a_0}{a_0} \left(e_{31} - e_{33} \frac{C_{13}}{C_{33}} \right) \quad (\text{III.4})$$

Où a_0 et a sont les paramètres de maille du substrat (saphir, SiC ou Si) et de la couche de GaN, respectivement; e_{31} et e_{33} sont les constantes piézoélectriques; C_{13} et C_{33} sont les constantes élastiques. Les valeurs de ces constantes rapportées dans la littérature sont regroupées dans le tableau III.3 [12] :

Matériaux	AlN	GaN
$e_{31}(\text{C}/\text{m}^2)$	-0.60	-0.49
$e_{33}(\text{C}/\text{m}^2)$	1.46	0.73
$C_{11}(\text{GPa})$	396	367
$C_{12}(\text{GPa})$	137	135
$C_{13}(\text{GPa})$	108	103
$C_{33}(\text{GPa})$	373	405

Tableau III.3 : Coefficients piézoélectriques et élastiques de AlN et GaN.

Dans le cas où la couche de GaN est soumise à une contrainte biaxiale en tension ($a > a_0$) : le rapport c/a décroît créant une polarisation piézoélectrique P_{PZ} dans le même sens que la polarisation spontanée P_{SP} (Figure III.11-a). A contrario, si elle est soumise à une contrainte compressive ($a < a_0$) : le rapport c/a augmente créant une polarisation piézoélectrique P_{PZ} opposée à la polarisation spontanée P_{SP} (Figure III.11-b).

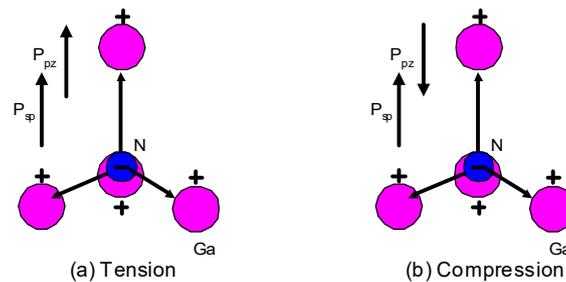


Figure III.11 : Sens de polarisation piézoélectrique dans le GaN pour deux contraintes données : (a) en tension ; (b) en compression.

En conclusion, la polarisation totale dans le w-GaN est la somme de deux composantes parallèles à l'axe c : la polarisation spontanée et la polarisation piézoélectrique. La polarisation spontanée peut générer des champs électriques de l'ordre de 3MV/cm dans les matériaux de type III-N. La polarisation piézoélectrique dépend linéairement de la déformation du paramètre de maille a et peut-être comparable avec la polarisation spontanée. Elle peut renforcer ou affaiblir la polarisation spontanée selon la contrainte.

III.6. Polarité dans GaN

La croissance du GaN se fait par l'alternance d'une couche atomique de gallium (Ga) et d'une couche d'azote (N). En fonction de la méthode et des conditions de

croissance, on peut obtenir une surface de GaN avec des propriétés structurales et électroniques différentes (face Ga ou face N). Le niveau de Fermi en surface étant dépendant des propriétés électroniques de la surface, il est donc affecté par les conditions de croissance et la terminaison. La figure III.12 illustre la structure du GaN avec une terminaison face Ga (Figure III.12-a) représentée par l'indice de Miller [0001] et avec une terminaison N (Figure III.12-b) représentée par l'indice [000-1].

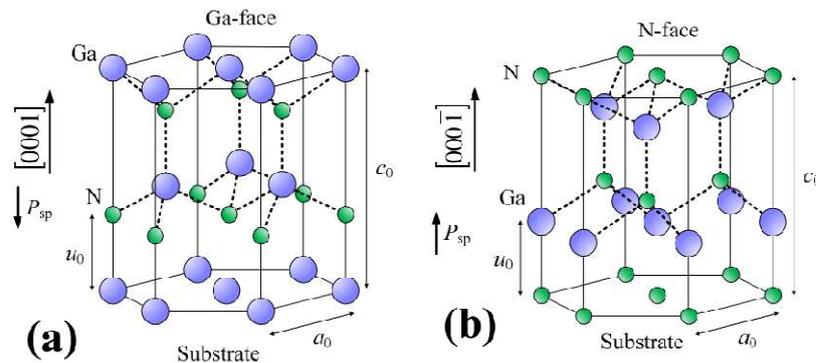


Figure III.12 : Polarité de GaN hexagonal. (a): polarité gallium, (b): polarité azote.

Il a été démontré théoriquement [11] et vérifié expérimentalement [13], que pour réaliser des transistors à haute mobilité d'électrons (HEMT) et faciliter la formation du gaz bidimensionnel d'électrons (2DEG) à l'interface AlGa_xN/GaN, il est plus favorable de choisir des couches épitaxiées ayant une polarité à face Ga.

III.7. Défauts dans le volume du GaN

Lacunes d'azote et de gallium : La lacune d'azote est soupçonnée être à l'origine du dopage résiduel (donneur léger). Les lacunes d'azote se forment préférentiellement sur *n*-GaN et les lacunes de gallium sur *p*-GaN [14].

Atomes en interstices : La formation de défauts interstitiels d'azote (N_i) ou de gallium (Ga_i) dans le GaN est souvent considérée comme peu probable à cause de la faible constante de maille du GaN et la large différence de taille entre les atomes de gallium (Ga) et d'azote (N). Même s'ils sont présents dans le volume ou en surface du GaN, leur densité est très faible et affecte peu le comportement électronique des composants sur GaN [15].

Atomes d'impuretés en sites substitutionnel : Les impuretés souvent présentes dans les couches de GaN sont le silicium et l'oxygène en sites gallium (Si_{Ga}) et azote (O_{N}) agissant comme donneurs et le carbone en site azote (C_{N}) agissant comme accepteur

Défauts étendus : Le fort désaccord de maille ainsi que la différence de dilatation thermique entre le substrat et la couche de GaN induisent une forte densité de dislocations perpendiculaires au substrat et des fautes d'empilement dans GaN. Ceci entraîne une contrainte résiduelle importante lors du refroidissement. Ces taux de dislocations restent toujours largement supérieurs aux matériaux III-V comme GaAs ou InP. Cependant, leur présence engendre une diminution de la durée de vie des porteurs et des efforts sont consentis pour améliorer la qualité cristallographique du GaN afin de pouvoir optimiser les performances des dispositifs réalisés.

III.8. Etats de surface/interface dans le GaN

Pour le GaN, la densité d'états de surface (D_{it}) rapportée dans la littérature est généralement élevée (de l'ordre de $10^{11} - 10^{13} \text{ eV}^{-1} \cdot \text{cm}^{-2}$) [16]. Ces pièges de surface peuvent être classés en deux grandes catégories : Etats de surface intrinsèques et états de surface extrinsèques.

- **Etats de surface intrinsèques :** Les pièges de surface intrinsèques sont associés à la reconstruction qui se produit à la terminaison de la structure cristalline en surface. Des travaux [17] montrent que les configurations cristallines sont stables en surface alors qu'on observe le plus souvent une formation de lacunes (V_{Ga} ou V_{N}) en volume et que les pièges présents à la surface du GaN dépendent fortement des conditions de croissance.

- **Etats de surface extrinsèques :** Toute déformation par rapport à la reconstruction parfaite de la surface du GaN est associée à des états de surface extrinsèques. Ces défauts peuvent être sous forme d'une variation ou d'une reconstruction du cristal en surface, de joint de grain, de défauts structuraux ou de dislocations, ou encore la formation d'oxyde natif ou l'adsorption de contaminations (carbone, hydrogène, ...).

III.9. Choix du diélectrique pour la passivation du GaN

La passivation d'un dispositif à base de SC est un procédé qui permet de stabiliser les propriétés de sa surface, sans perturber ses caractéristiques fonctionnelles. Ceci revient à réduire l'activité électrique et la réactivité chimique de la surface du SC en neutralisant les liaisons pendantes en surface [18]. À ce titre, une simple couche mince neutre du point de vue électrique et chimique peut protéger un dispositif actif contre les contaminations en réduisant sa réactivité aux éléments extérieurs (oxydation, adsorption de contaminants, humidité). Si la passivation par une couche mince de diélectrique est faite avec un bon contrôle de la qualité de l'interface isolant-SC (suffisamment pour garantir une faible D_{it}), le niveau de Fermi peut bouger librement dans la bande interdite, il sera alors possible de moduler le potentiel de surface du SC. Sinon, en présence d'une forte D_{it} , le niveau de Fermi reste bloqué au niveau la surface et aucune modulation du potentiel de surface n'est possible.

Un isolant idéal peut être soit un matériau cristallin ou amorphe, sans porteurs de charge libres, sans charges fixes et sans ions mobiles. La constante diélectrique (ϵ_i) ne doit pas présenter de dispersion par rapport à la fréquence.

Plusieurs diélectriques ont été proposés dans la littérature comme couches de passivation pour le GaN. En plus de la stabilité chimique et thermique, un bon diélectrique de grille doit avoir un large décalage de bandes par rapport au SC pour réduire les courants de fuite. L'oxyde de silicium (SiO_x) et le Si_xN_y sont les diélectriques les plus fréquemment utilisés [19]. Le SiO_x présente le plus fort décalage de bande par rapport au GaN : il est de +2 eV pour BV (E_V) et de +3.6 eV pour BC (E_C). Cependant, il possède une faible permittivité diélectrique (~ 3.9).

Le SiN_x présente l'avantage d'une plus grande constante diélectrique ($\epsilon_{\text{SiN}} \sim 7$), le décalage par rapport à BC du GaN est de +2.4 eV mais il est de -0.6 eV par rapport à E_V , ce n'est donc pas un bon candidat pour la réalisation des dispositifs MIS sur GaN type p [19].

III.10. Applications du GaN

De nombreuses sociétés se mirent à travailler activement pour l'introduction du GaN dans des applications diverses en électronique. Le GaN se révèle désormais comme un matériau de choix pour la réalisation de sources optoélectroniques de hautes efficacités, et aussi pour la réalisation de dispositifs de puissances et de hautes fréquences pouvant fonctionner dans des milieux hostiles. Les recherches sur GaN ne cessent d'évoluer et la place qu'occupe ce matériau dans le domaine de la microélectronique ne cesse de croître.

III.10.1. Applications optiques

Parmi les applications optiques du GaN et de ses alliages, on peut compter :

- **Les LEDs et les Lasers** : des dispositifs qui sont récemment devenus très populaires grâce aux améliorations de la fiabilité et de l'efficacité et grâce à leur prix décroissant. Les diodes laser représentent la moitié de l'industrie et sont utilisés en électronique ou encore en télécommunications. Les technologies laser progressent aussi dans le domaine de la santé, de l'esthétique, mais le segment de l'imprimante laser peine car déjà dépassé par les imprimantes 3D.

- **Les photodétecteurs UV** : En raison de leurs propriétés particulières, les SC à grand gap ($E_G > 3$ eV), constituent le meilleur choix pour la réalisation de photodétecteurs UV. Parmi ces matériaux, les nitrures à base de GaN sont les plus performantes, en raison de toute une série de propriétés : un gap direct, un coefficient d'absorption de l'ordre de 10^5 cm⁻¹ ($\lambda < 360$ nm), possibilité de modulation de la réponse spectrale du détecteur et plus particulièrement son seuil de coupure, leur robustesse, leur résistance mécanique, leur résistance thermique,...etc. Ceci ouvre la possibilité de réaliser des photodétecteurs UV très sélectifs, fiables, avec une longue durée de vie, capables de fonctionner en atmosphère hostile.

III.10.2. Applications électroniques

Le GaN est un excellent candidat pour les applications microondes haute puissance/haute température en raison de son champ de claquage électrique élevé

résultant de la large bande interdite ce qui permet l'utilisation du dispositif à des tensions très élevées. En outre, le large gap énergétique permet au matériau de résister à des températures de fonctionnement élevées (300°C - 500°C).

Ces propriétés matérielles indiquent clairement pourquoi le GaN est un candidat sérieux pour la prochaine génération de dispositifs pour les applications microondes haute puissance/haute température.

III.10.3. Applications militaires

En général, les programmes de recherche dans le domaine de la défense se concentrent sur le développement de la technologie GaN à utiliser dans des composants tels que les radars de surface, les brouilleurs, la communication sur le champ de bataille, liaisons de communication par satellite, modules d'émission/réception, et des amplificateurs à faible bruit. Les fréquences d'intérêt pour ces applications vont de 2 GHz à 40 GHz.

III.11. Conclusion

Au cours de ce chapitre, nous avons rappelé quelques propriétés physiques remarquables des semiconducteurs de la filière III-N à base de nitrure de gallium GaN tout en mettant l'accent sur leurs aspects pyroélectrique et piézoélectrique. Nous avons donné quelques propriétés de transport de GaN et du nitrure d'aluminium AlN obtenues par simulation Monte-Carlo. Ces dernières permettent de mettre en évidence que la vitesse de saturation dans ces SC peut-être atteinte pour des champs électriques beaucoup plus intenses que dans le cas des autres matériaux SC III-V conventionnels. L'énorme désaccord de paramètre de maille entre le GaN et la totalité des substrats disponibles (Saphir, Si, SiC), entraîne la formation de fortes densités de défauts cristallins dans le matériau ce qui limite les performances et, dans une certaine mesure la durée de vie des composants réalisés.

III.12. Références bibliographiques

- [1]- A. Minko, "Technologie des composants de type HEMTs AlGa_N/Ga_N sur substrat silicium pour des applications en amplification de puissance et faible bruit", Thèse de doctorat, Université de Lille 1, IEMN, décembre (2004).
- [2]- J.Y. Duboz, *Technique de l'ingénieur*, Vol. 1, No E1995, pp. E1995.1-E1995.24 (1999).
- [3]- V. Bougrov, and *al.*, John Wiley & Sons, Inc., New York, pp. 1-30 (2001).
- [4]- M. B. Kanoun, Communication interne (IEMN).
- [5]- K.A. Abdullah, M.J. Abdullah, F.K. Yam, Z. Hassan, *Microelectronic Engineering* 81, pp. 201-205 (2005).
- [6]- M. Mattalah, "Analyse de défauts en surfaces et interfaces de semiconducteurs III-N à large bande interdite appliqués à la micro et l'optoélectronique", thèse soutenue à l'université de Sidi Bel Abbès (2008).
- [7]- E. Al Alam, and *al.*, "Etude et réalisation de dispositifs MOS de puissance sur GaN pour applications haute tension et haute température", 12ème Journées Nano, Micro et optoélectronique, Ile d'Oléron, France, 3 au 6 Juin 2008.
- [8]- Propriétés des matériaux semiconducteurs, site internet de l'institut Ioffe, <http://www.ioffe.ru/SVA/NSM/Semicond/GaN/>.
- [9]- M. C. J. C. M. Krämer, 'Gallium nitride-based microwave high-power heterostructure field-effect transistors: design, technology, and characterization', thèse soutenue le 6 Mai 2006, Eindhoven: Université Technique d'Eindhoven (2006).
- [10]- F. Sacconi, A. Di Carlo, P. Lugli, H. Morkoç, *IEEE Transactions on Electron Devices*, Vol. 48, No 3, pp. 450-457 (2001).
- [11]- O. Ambacher, and *al.*, *J. Appl. Phys.*, Vol. 85, No 6, pp. 3222-3233 (1999).
- [12]- R. Chu, Thèse M.Sc., Hong Kong University of Science and Technology (2004).
- [13]- O. Ambacher, and *al.*, *J. Appl. Phys.* Vol. 87, No 1, pp. 334-344 (2000).
- [14]- J. Neugebauer, C.G. Van de Walle, *Phys. Rev. B*, Vol. 50, pp. 8067-8070 (1994).
- [15]- M. A. Reshchikov, and H. Morkoç, *J. Appl. Phys.*, Vol. 97, pp. 061301 (2005).
- [16]- B.S. Eller, J. Yang et R. J. Nemanich, *J. Vac. Sci. Technol. A*, Vol. 31, No. 5 (2013).
- [17]- J. Fritsch, and *al.*, *Phys. Rev. B*, Vol. 57, No. 24 (1998).
- [18]- A. Jaouad, "Passivation de GaAs par déposition PECVD basse fréquence du nitrure de silicium", thèse soutenue à l'université de Sherbrooke (2005).
- [19]- Long, R.D.; McIntyre, P.C., *Materials*, 5, pp. 1297-1335 (2012).

Chapitre 4

CARACTERISATION DE LA MIS-GAN
PAR PHOTOLUMINESCENCE

IV.1. Introduction

Ce dernier chapitre comporte les résultats numériques de l'analyse des défauts à l'interface isolant-SC à partir de la technique de caractérisation citée dans le deuxième chapitre. Nous exposons tout d'abord les étapes et les organigrammes de la programmation faite en FORTRAN suivis des résultats obtenus avec leurs interprétations.

IV.2. Procédure de la programmation

La résolution des équations (II.21), (II.24), (II.32) et (II.37) suit les organigrammes (IV.1-a et IV.1-b) suivants et correspondant à :

Organigramme IV.1-a : Etapes de calculs de la vitesse de recombinaison en surface et de l'intensité de photoluminescence

- 1- Introduire les paramètres physiques en C.G.S à 300K du SC (GaN) regroupés dans le tableau IV.1.
- 2- Faire varier la densité d'états d'interface D_{it} ($10^{11}, 10^{12}, 10^{13}, 10^{14}$)
- 3- Faire varier le potentiel de surface V_s ; $V_s > 0$ en régime d'accumulation et $V_s < 0$ en régime de déplétion.
- 4- La résolution de l'équation de diffusion des trous en excès permet :
 - ☞ d'écrire l'équation de la vitesse de recombinaison en surface S_{eff} en fonction de D_{it} et V_s ;
 - ☞ d'écrire l'équation de l'intensité de photoluminescence I_{PL} en fonction de S_{eff} et V_s .
- 5- Afficher les valeurs de V_s, S_{eff} et I_{PL} .

Organigramme IV.1-b : Etapes de calculs de la caractéristique potentiel de surface-tension de polarisation, de la charge du SC et de la densité d'états d'interface

- 1- Introduire les paramètres physiques en C.G.S à 300K du SC (GaN) regroupés dans le tableau IV.1, l'épaisseur et la constante diélectrique de l'isolant (SiN) et le travail de sortie du métal (Cr).
- 2- Faire varier le potentiel de surface V_s ; $V_s > 0$ en régime d'accumulation et $V_s < 0$ en régime de déplétion.

- 3- Résoudre l'équation de Poisson pour remonter à la caractéristique potentiel de surface-tension de polarisation, $V_s(V_g)$.
- 4- Application de théorème de Gauss pour retrouver la charge du GaN, $Q_{SC}(V_s)$.
- 5- Les dérivées premières de Q_{SC} et de V_g par rapport à V_s aboutissent à l'évolution de la densité d'états d'interface en fonction du potentiel de surface, $D_{it}(V_s)$ et dans le gap $D_{it}(E)$.

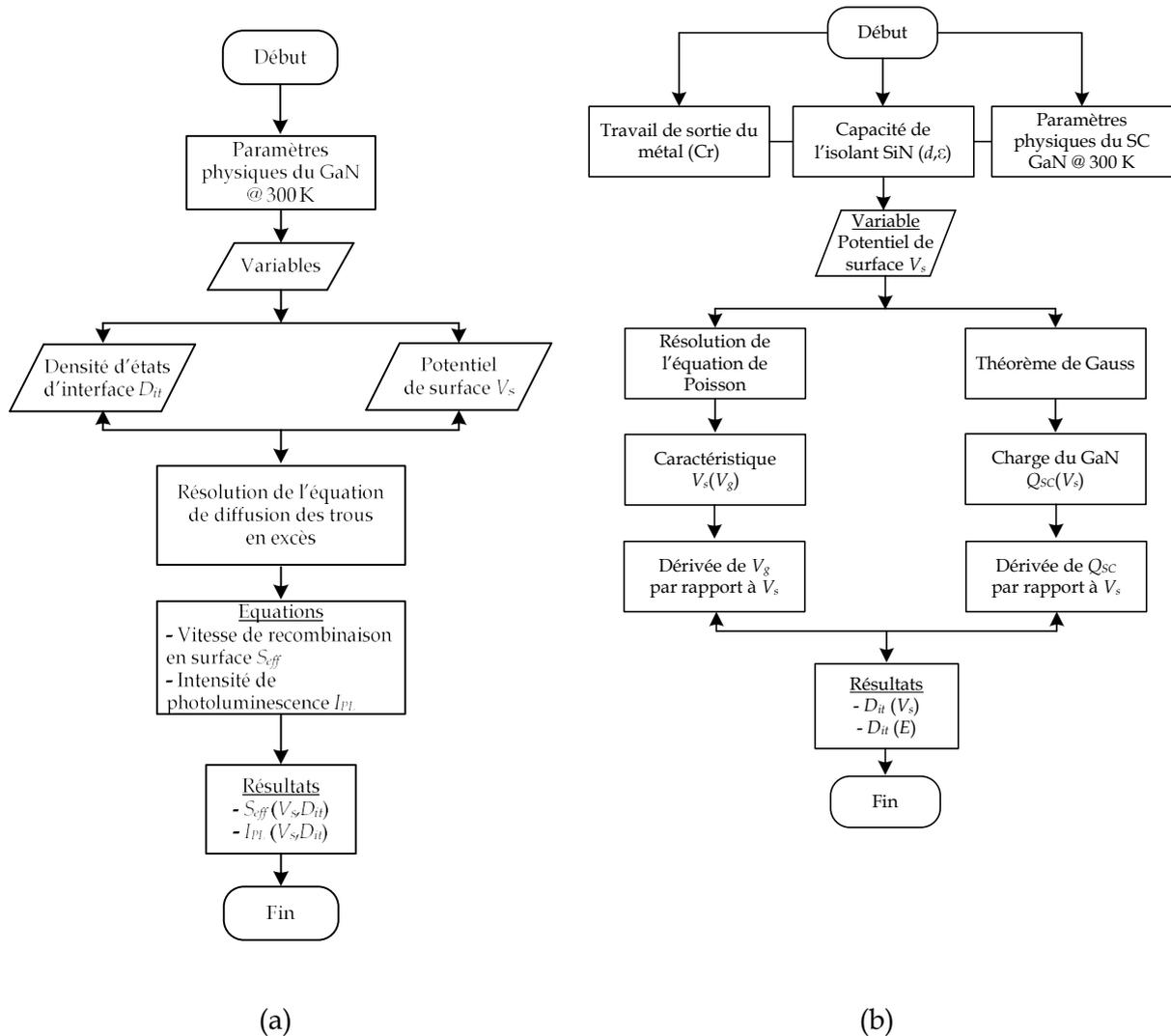


Figure IV.1 : Organigrammes de la programmation.

Paramètre, symbole (@300K)	GaN
Bande interdite E_G (eV)	3.4
Dopage N_D (cm^{-3})	3.4×10^{17}
Concentration intrinsèque des porteurs n_i (cm^{-3})	2×10^{-10}
Section efficace de capture moyenne σ (cm^2)	2.4×10^{-17}
Vitesse thermique moyenne v_{th} (cm/s)	2×10^7
Durée de vie $\tau_n = \tau_p = \tau$ (s)	10^{-9}
Constante diélectrique ε	10.4
Longueur de diffusion des trous L_p (cm)	2.7×10^{-5}
Coefficient de diffusion des trous D_p (cm^2/s)	0.75
Coefficient d'absorption α (cm^{-1})	10^5
Coefficient d'auto-absorption β (cm^{-1})	1.12×10^3
Coefficient de recombinaison radiative B_{rad} (cm^3/s)	10^{-10}
Coefficient de recombinaison Auger des trous C_p (cm^6/s)	10^{-31}
Coefficient de recombinaison Auger des électrons C_n (cm^6/s)	10^{-31}

Tableau IV.1: Paramètres physiques du GaN.

IV.3. Application du modèle de la couche morte à la structure MIS SiN/*n*-GaN

Le modèle de la couche morte a été appliqué à la structure MIS SiN/*n*-GaN en régime de déplétion. Le semiconducteur GaN est dopé *n* ($N_D = 3.4 \times 10^{17} cm^{-3}$). Son affinité électronique est $\chi_{GaN} = 4.1V$. L'isolant déposé sur GaN est le SiN d'épaisseur $d_{SiN} = 26.3 nm$ et de permittivité $\varepsilon_{SiN} = 7.1$. Le métal utilisé est le Chrome et son travail de sortie est de 4.5 eV.

IV.3.1. Variation de la vitesse de recombinaison en surface en fonction du potentiel de surface et de la densité d'états d'interface

La vitesse de recombinaison en surface S_{eff} , caractérisant l'influence des pièges en surface, est déterminée en fonction du potentiel de surface V_s . Elle est représentée sur la figure IV.2 pour des valeurs de densité d'états d'interface D_{it} de $10^{11}, 10^{12}, 10^{13}, 10^{14} eV^{-1} cm^{-2}$. La concentration de trous en excès Δp est de $10^{13} cm^{-3}$ et une section efficace de capture moyenne σ de $10^{-17} cm^2$.

D'après la relation $S_{eff}(V_s)$ (Eq. II.21), il est clair que l'amplitude de S_{eff} est gouvernée par le produit σD_{it} . La vitesse de recombinaison en surface admet un maximum quand $qV_s = E_i - \frac{E_{Fn} + E_{Fp}}{2}$.

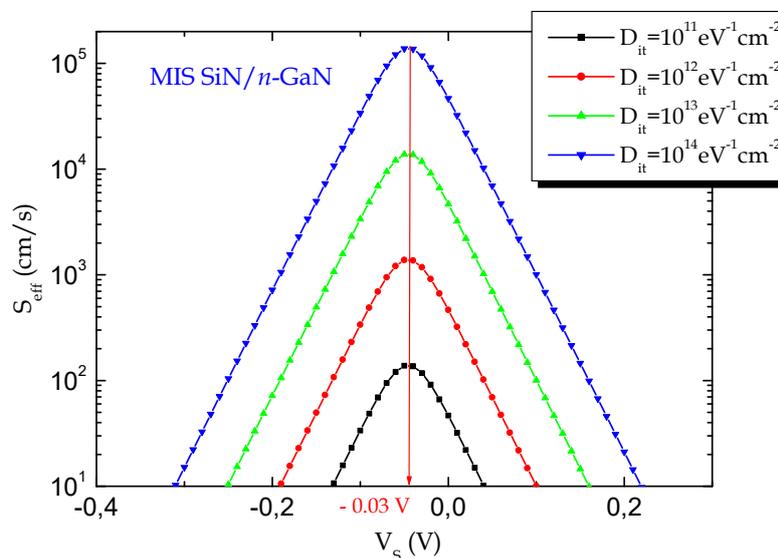


Figure IV.2 : Evolution de la vitesse de recombinaison en surface avec le potentiel de surface pour différentes densités d'états d'interface dans la structure MIS SiN/n-GaN.

Des vitesses de recombinaison n'excédant pas 10^6 cm s^{-1} sont couramment observées pour des surfaces de GaN non dégradées. La figure montre que la vitesse de recombinaison en surface dépend fortement de D_{it} et une grande valeur de S_{eff} correspond à la présence d'une densité de pièges importante. Cette corrélation entre recombinaison en surface et D_{it} a été mise en évidence par Krawczyk et *al.* [1], en observant sur des structures MIS, une intensité de photoluminescence décroissante en fonction de la densité d'états d'interface. La présence de ces phénomènes de recombinaison en surface mène à une diminution du rendement des dispositifs luminescents et photovoltaïques puisque leur temps de réponse y est d'autant plus long que ces défauts en surface sont conséquents.

IV.3.2. Variations de l'intensité de photoluminescence en fonction du potentiel de surface et de la densité d'états d'interface

La figure IV.3 montre l'évolution de l'intensité de photoluminescence I_{PL} de la structure MIS SiN/n-GaN en fonction du potentiel de surface V_s (Eq. II.24) pour différentes densités d'états d'interface D_{it} de $0, 10^{11}, 10^{12}, 10^{13}, 10^{14} \text{ eV}^{-1} \text{ cm}^{-2}$.

Les résultats montrent que pour une interface idéale ($D_{it} \neq 0$), l'intensité de photoluminescence augmente d'une façon monotone du régime de déplétion à celui des bandes plates ($V_s = 0V$). Pour de densités D_{it} élevées, les courbes de I_{PL} fléchissent et admettent une diminution. Cette dernière devient plus accentuée pour des D_{it} encore plus conséquentes. Il y a donc corrélation entre les fortes densités d'états d'interface et les faibles intensités de PL.

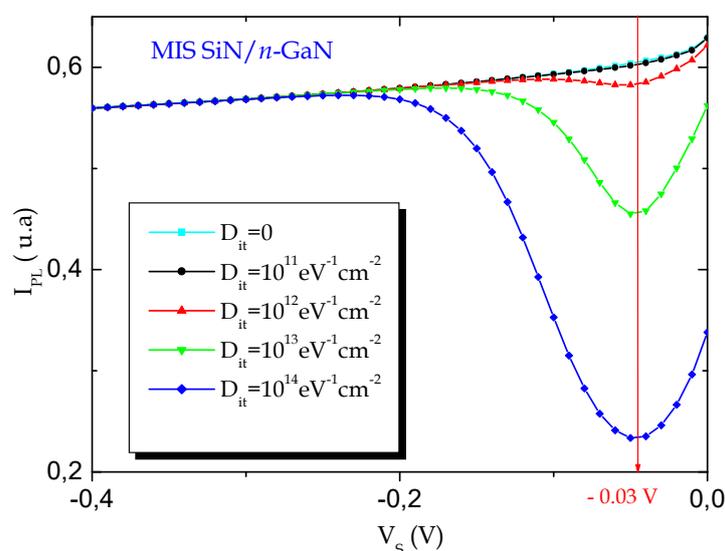


Figure IV.3 : Evolution de l'intensité de photoluminescence avec le potentiel de surface pour différentes densités d'états d'interface dans le cas de la structure MIS SiN/n-GaN.

IV.3.3. Variations de la charge du GaN en fonction du potentiel de surface

La figure IV.4 montre la variation de la charge du SC Q_{sc} en fonction du potentiel de surface V_s qui dépend directement de la polarisation appliquée sur la grille V_g .

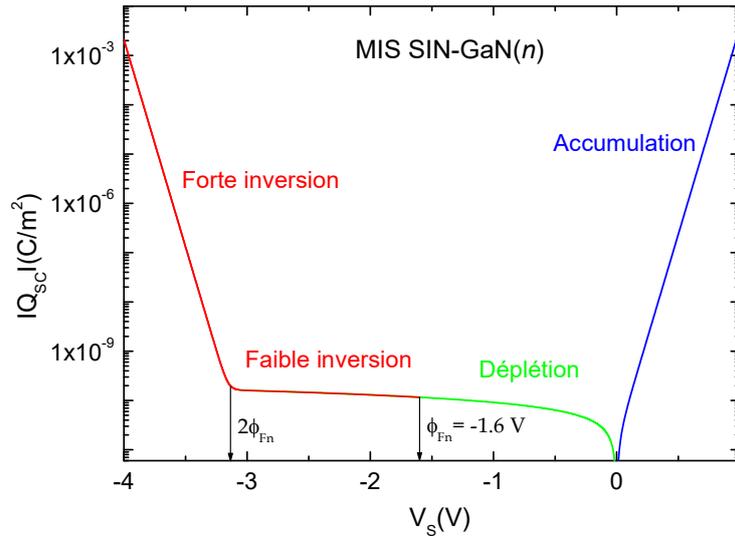


Figure IV.4 : Variation de la charge du GaN type n en fonction du potentiel de surface à l'interface isolant-SC. En régime d'accumulation ou de forte inversion, la variation est très rapide.

Nous allons analyser l'expression de la charge en fonction des 3 régimes imposés par la tension de grille V_g .

Dans la fonction $F\left(V_s, \frac{p_0}{n_0}\right)$ de l'expression de Q_{sc} , le rapport $\frac{p_0}{n_0}$ est une valeur très faible qui correspond au rapport des concentrations de porteurs minoritaires à celui des majoritaires. Pour $N_D = 3.4 \times 10^{17} cm^{-3}$, $n_0 = 3.4 \times 10^{17} cm^{-3}$ et $p_0 = \frac{n_i^2}{N_D} \sim 6 \times 10^{-38} cm^{-3}$, $\frac{p_0}{n_0} \sim 10^{-55}$.

a- Régime d'accumulation

Dans l'expression de Q_{sc} , $V_s > 0$ et $|Q_{sc}| > 0$, seul le terme $e^{\frac{qV_s}{kT}}$ subsiste dans $F\left(V_s, \frac{p_0}{n_0}\right)$.

Ainsi :

$$Q_{sc} = -\frac{2\varepsilon_0\varepsilon_{sc}k_B T}{qL_D} e^{\frac{qV_s}{2k_B T}} \quad (IV.1)$$

En appelant n_s la concentration en surface/interface isolant-SC donnée par :

$n_s = n_0 e^{\frac{qV_s}{k_B T}}$, l'expression de la charge devient :

$$Q_{sc} = -\sqrt{2q\varepsilon_0\varepsilon_{sc} \frac{k_B T}{q}} \sqrt{n_s} \quad (IV.2)$$

Cette forme est intéressante car elle met en évidence l'importance de la concentration en surface n_s dans l'expression de la charge qui traduit aussi une loi exponentielle en fonction du potentiel de surface V_s .

b- Régime de déplétion

Dans l'expression de Q_{sc} , $V_s < 0$ et $|Q_{sc}| > 0$, avec $0 < |V_s| < |\phi_{Fn}|$, seul le terme $\frac{qV_s}{k_B T} + 1$ subsiste dans $F\left(V_s, \frac{p_0}{n_0}\right)$. Ainsi :

$$Q_{sc} = -\frac{2\varepsilon_0\varepsilon_{SC}k_B T}{qL_D} \sqrt{\frac{q|V_s|}{k_B T}} \quad (IV.3)$$

Elle peut s'écrire sous la forme:

$$Q_{sc} = +\sqrt{2\varepsilon_0\varepsilon_{SC}qn_0\left(\frac{qV_s}{k_B T} - 1\right)} \quad (IV.4)$$

Remarque : $Q_{sc} = +qN_D W(V_s)$ ce qui donne : $W(V_s) = \sqrt{\frac{2\varepsilon_0\varepsilon_{SC}|V_s|}{qN_D}}$ (IV.5)

Nous retrouvons la largeur de la zone de déplétion créée par les états de surface.

c- Régime de faible inversion

Dans l'expression de Q_{sc} , $V_s < 0$ et $|Q_{sc}| > 0$, avec $|\phi_{Fn}| < |V_s| < 2|\phi_{Fn}|$, le terme incluant le facteur $\frac{p_0}{n_0}$ est toujours négligeable et donc l'expression de cette charge reste identique au cas de déplétion :

$$Q_{sc} = -\frac{2\varepsilon_0\varepsilon_{SC}k_B T}{qL_D} \sqrt{\frac{q|V_s|}{k_B T}} \quad (IV.6)$$

d- Régime de forte inversion

Dans l'expression de Q_{sc} , $V_s < 0$ et $|Q_{sc}| > 0$, avec $|V_s| > 2|\phi_{Fn}|$, le facteur $\frac{p_0}{n_0}$ devient supérieur à $e^{\frac{qV_s}{k_B T}} = e^{\frac{2q\phi_{Fn}}{k_B T}}$ et cette partie de $F\left(V_s, \frac{p_0}{n_0}\right)$ devient prépondérante. Ainsi :

$$Q_{sc} = \frac{\varepsilon_0\varepsilon_{SC}k_B T}{qL_D} \sqrt{e^{\frac{E_{Fn}-E_{Fp}}{k_B T}} e^{-\frac{qV_s}{2k_B T}} \sqrt{\frac{p_0}{n_0}}} \quad (IV.7)$$

Sachant que : $p_s = p_0 e^{-\frac{qV_s}{k_B T}}$

La charge s'écrit :

$$Q_{sc} = \sqrt{2q\varepsilon_0\varepsilon_{SC} \frac{k_B T}{q}} \sqrt{p_s} \quad (IV.8)$$

L'aspect intéressant de cette dernière expression est que nous retrouvons exactement le même type d'expression que dans le cas de l'accumulation (Eq.IV.1) mais en changeant le type de porteurs de charge ; dans notre structure sur substrat n , nous

changeons n_s en p_s . Il est clair que la structure a été inversée par rapport à la situation de départ.

Nous remarquons aussi que la charge du SC augmente très fortement en valeur absolue dans les régimes d'accumulation et de forte inversion et varie très peu entre (Figure IV.4). Puisque cette charge compense l'effet de la tension appliquée sur la grille, cela aura pour conséquence que dans les régimes extrêmes, la tension appliquée sur la grille pourra être relativement importante.

IV.3.4. Caractéristique $V_s(V_g)$

La figure IV.5 représente la variation du potentiel de surface V_s en fonction de la tension de polarisation V_g appliquée à la grille de la structure MIS SiN/ n -GaN.

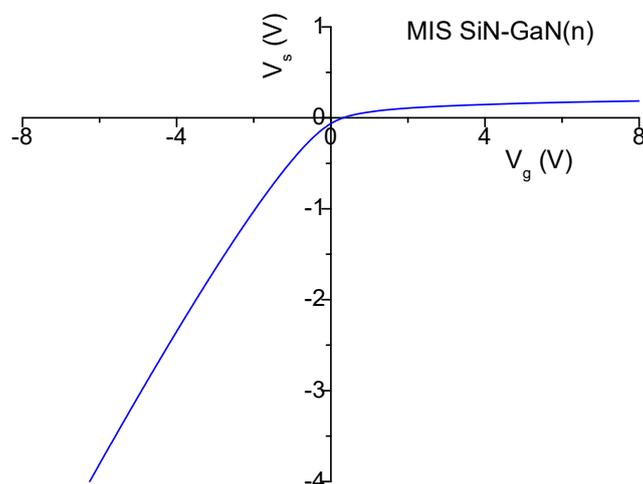


Figure IV.5 : Caractéristique $V_s(V_g)$ calculée à partir de l'équation II.32 de la capacité MIS SiN/ n -GaN.

Le potentiel de surface dépend directement de la tension de polarisation appliquée à la grille. Il change de signe pour une tension de polarisation positive à cause de l'accumulation de porteurs en surface.

IV.3.5. Distribution de la densité d'états d'interface D_{it}

L'évolution de la densité d'états d'interface D_{it} dans la structure MIS SiN-GaN(n) en fonction du potentiel de surface V_s (Eq. II.34) est représentée sur la figure IV.6-a. La capacité du SiN est de $27 \times 10^{-8} F$. La distribution de D_{it} admet un minimum D_{it} de $3.52 \times 10^{13} eV^{-1} cm^{-2}$ pour un potentiel de surface $V_s = -0.03 V$.

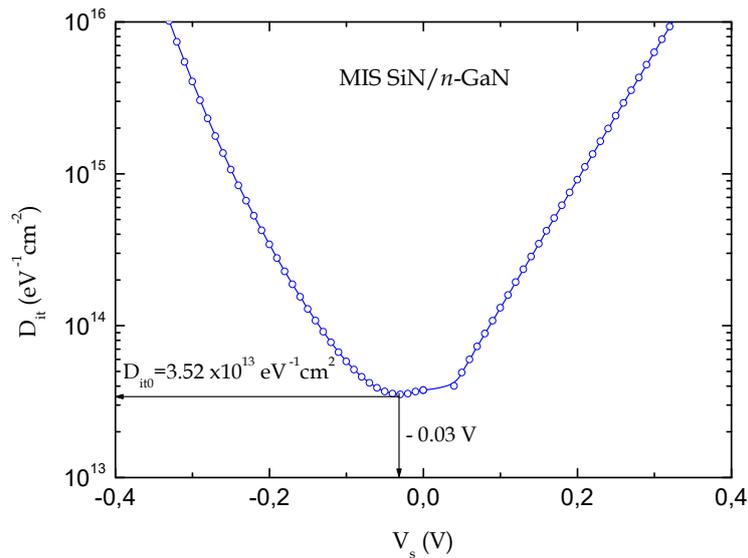


Figure IV.6-a : Variation de la densité d'états d'interface en fonction du potentiel de surface.

La figure IV.6-b montre la distribution de la densité des états d'interface dans la bande interdite du GaN, obtenue par le modèle de la couche morte pour l'interface MIS SiN/n-GaN en transformant les variations du potentiel de surface en énergie par

la relation [2] : $(E_C - E)_s = \frac{E_g}{2} - qV_s - q\phi_{Fn}$.

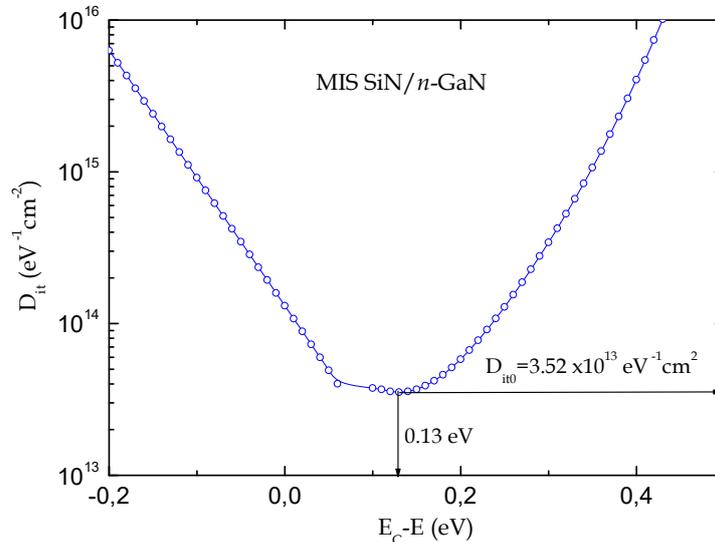


Figure IV.6-b : Distribution de la densité d'états d'interface dans le gap du GaN. La distribution $D_{it}(E)$ est un continuum d'états d'interface qui admet un minimum D_{it0} de $3,52 \times 10^{13} \text{ eV}^{-1} \text{ cm}^{-2}$ à $0,13 \text{ eV}$ localisé dans la partie supérieure du gap (au dessous du minimum de la bande de conduction E_C). La valeur de D_{it0} est du même ordre de grandeur que celle reportée par différentes études optique et électrique effectuées sur des structures à base de GaN et qui ont donné en moyenne des densités d'états de surface/interface allant de 10^{12} à $10^{14} \text{ eV}^{-1} \text{ cm}^{-2}$ [3].

IV.4. Conclusion

Les propriétés d'interface de la structure MIS SiN/*n*-GaN, ont été déterminées par la technique de photoluminescence qui consiste à mesurer l'intensité de photoluminescence en régime de déplétion dans le cadre du modèle de la zone morte. Les calculs numériques donnent les résultats suivants:

- une corrélation entre les fortes densités de pièges, les faibles intensités de photoluminescence et les grandes vitesses de recombinaison en surface ;
- Le potentiel de surface à l'interface isolant-SC dépend directement de la tension de polarisation appliquée à la grille. Il change de signe pour une tension de polarisation positive à cause de l'accumulation de porteurs en surface ;
- la charge du GaN évolue en fonction du potentiel de surface. Elle augmente très fortement dans les régimes d'accumulation et de forte inversion et varie très peu entre (régimes de déplétion et de faible inversion) ;
- l'interface isolant-SC exhibe un continuum d'états d'interface qui admet un minimum de $3.52 \times 10^{13} eV^{-1} cm^{-2}$ localisé à 0.13 eV dans la partie supérieure du gap.

IV.5. Références bibliographiques

- [1]- S. Krawczyk, B. Baily, B. Sautreuil, R. Blanchet, P. Victorovitch, Electron. Lett. 20, pp. 657 (1984).
- [2]- E.H. Nicollian, J.R. Brews, MOS Physics and Technology, Wiley Interscience, New York (1982).
- [3]- B.S. Eller, J. Yang et R. J. Nemanich, J. Vac. Sci. Technol. A, Vol. 31, No. 5 (2013).

Conclusion
Générale

Conclusion générale

Ce travail concerne la caractérisation des défauts présents à l'interface isolant-semiconducteur de la structure MIS Cr-SiN-GaN type n . La signature des pièges (densité et localisation dans la bande interdite) constitue l'un des paramètres à définir pour améliorer la fiabilité de ces composants en minimisant l'impact des défauts introduits au cours du procédé technologique mais aussi au cours de l'élaboration du matériau. Nous avons proposé dans ce contexte de mettre à jour et d'améliorer certaines techniques optiques non destructrices permettant de répondre à cette demande et dans certains cas de les combiner avec des techniques de caractérisation électrique. La technique de caractérisation permettant la quantification des pièges (densité et position énergétique) présents à l'interface SiN/ n -GaN est la spectroscopie de photoluminescence en régime de déplétion dans le cadre du modèle de la couche morte.

Nos résultats numériques montrent que la structure MIS Cr/SiN/GaN exhibe un continuum d'états d'interface admettant un minimum de $3.52 \times 10^{13} eV^{-1} cm^{-2}$ localisé dans la partie supérieure du gap à $0.13 eV$ en deçà du bas de la bande de conduction. Cette valeur de densité minimale s'avère être du même ordre de grandeur que celle reportée dans la littérature et obtenue par différentes méthodes optique et électrique. Nous concluons que la technique de photoluminescence est très simple, un moyen très prometteur pour évaluer la densité des états d'interface et qu'elle est très adaptée pour les SC à gap direct.