

Université Mohamed Khider – Biskra  
Faculté des Sciences et de la technologie  
Département : Génie Electrique.  
Ref :.....



جامعة محمد خيضر بسكرة  
كلية العلوم و التكنولوجيا  
قسم: الهندسة الكهربائية  
المرجع:.....

Thèse présentée en vue de l'obtention  
Du diplôme de  
**Doctorat en sciences**  
**Option : Electronique**

**Simulation numérique des effets de radiation dans les détecteurs de  
particules à base de silicium de type p**

Présentée par :  
**TERGHINI Ouarda**

Soutenu publiquement le:16/06/2015

**Devant le jury composé de :**

Dr. A. Ben Akcha	Maitre de Conférences 'A'	Président	Université de Biskra
Pr. L. DEHIMI	Professeur	Rapporteur	Université de Batna
Dr. M. Ledra	Maitre de Conférences 'A'	Examineur	C. Universitaire de Mila
Dr. A. Saadoune	Maitre de Conférences 'A'	Examineur	Université de Biskra
Dr. N. Athamna	Maitre de Conférences 'A'	Examineur	Université de Batna

## Résumé

Dans ce travail, nous avons fabriqué une diode schottky AuGeNi/Si de type p, ainsi des mesures des caractéristiques courant-tension et capacité-tension en variant la température sont faites, la simulation de cette diode par Tcad-Silvaco dans une gamme de température de 295 à 400K est réalisée. L'extraction des paramètres tel que le facteur d'idéalité et la hauteur de la barrière montre que le facteur d'idéalité  $\eta$  diminue, la hauteur de la barrière  $\Phi_{B0}$  augmente avec la température. Le tracé de Richardson modifié a donné la hauteur de barrière  $\bar{\Phi}_{B0}$  et la constante Richardson  $A^*$ , 1.15eV et  $30.53Am^{-2}K^{-2}$ , respectivement. La dépendance en température des caractéristiques I-V de la diode AuGeNi/p-Si Schottky était expliquée avec succès par le mécanisme d'émission thermo-ionique avec une distribution gaussienne de la hauteur de barrière schottky(SBHs).

Les résultats de simulation et les résultats expérimentaux sont en bon accord. L'étude de la capacité négative pour des polarisations directes et à des températures supérieures à  $T=260K$  a montré que la capacité négative est causée par l'injection des Porteurs minoritaires.

Dans la deuxième partie de cette thèse le travail est consacré à l'étude des défauts sur le détecteur de particules a base d' une diode Schottky de type p. Une diode de Schottky est simulée et une étude est faite pour le dopage de cette diode par des métaux lourds tels que l'or, le Platine et le niobium.

La diffusion de métaux dans le silicium crée des niveaux de défauts dans la bande interdite, ces niveaux sont représentés par des accepteurs et des donneurs dans la bande interdite. La diminution de courant de saturation, le facteur d'idéalité et la hauteur de barrière augmente dans tous les cas de la diode dopée, par l'Or, le Platine et le Niobium.

La diminution du courant de saturation due à des défauts qui sont créés par les métaux dans la bande d'énergie interdite. Les niveaux donneurs dans le semi-conducteur de type p dans la bande interdite sont responsables de la grande valeur de la hauteur de barrière Schottky. Une comparaison montre que les métaux Or, le platine et le niobium créent des centres de recombinaison entraînant la diminution de la conductivité. Cependant, dans tous les cas, le courant est devenu presque ohmique.

En outre, cela signifie que le dopage du silicium avec l'un des trois métaux a un effet similaire à une irradiation de 1 MeV de neutrons. Si les détecteurs fabriqués par des diodes en silicium dopées par le Platine, l'Or ou du Niobium est résistant à tout type de rayonnement.

## Abstract

In this work, we fabricated a Schottky diode AuGeNi/p-type Si, the measurements of current-voltage and capacity-voltage characteristics by varying the temperature are made, the simulation of this diode by the software Tcad Silvaco in a temperature range from 295 to 400K° is performed. The extraction of parameters such as ideality factor and barrier height shows that the ideality factor  $\eta$  decreases, BHs  $\phi_{B0}$  increases with increasing temperature. The modified Richardson plot has given mean barrier height  $\bar{\phi}_{B0}$  and Richardson constant  $A^*$  as 1.15eV and  $30.53\text{Am}^{-2}\text{K}^{-2}$ , respectively. The temperature dependence of the I–V characteristics of the AuGeNi/p-Si Schottky diode have been successfully explained on the basis of thermionic emission mechanism with Gaussian distribution of the Schottky barrier heights (SBHs).

Simulation and experimental results are good agreement.

The capacity-voltage characteristics show the negative capacitance for direct polarizations and for temperatures greater than  $T=260\text{K}$ . The study showed that the negative capacitance is caused by the injection of minority carriers.

In the second part of this thesis, the work is consecrated to the study of defects on the particle detector based on a p-type Schottky diode. A Schottky diode is simulated and a study for the doping of the diode by heavy metals such as gold, platinum and niobium. The diffusion of metals in the silicon creates defect levels, these levels are represented by acceptors and donors in band gap. The saturation current decrease, the ideality factor and barrier height increases in all cases of the doped diode, for gold, Platinum and Niobium.

The decrease in the saturation current due to defects that are created by the metals in the band gap. Donor levels in the p-type semiconductor in the band gap are responsible for the high value of the Schottky barrier height.

A comparison shows that the metals gold, platinum and niobium create recombination centers causing the decrease in conductivity. However, in all cases the current has become almost ohmic.

Furthermore, this means that doping silicon with any of the three metals has a similar effect as irradiation by 1 MeV neutrons. It is expected that detectors fabricated from platinum, or niobium and gold doped silicon would be resistant to any kind of radiation environment.

*Keywords: Schottky contacts, Barrier inhomogeneity, negative capacitance, current-voltage-temperature characteristics, particle detector, Gaussian distribution.*

## ملخص

في هذا العمل، تمت صناعة الصمام الثنائي شوتكي AuGeNi/p-Si كما قمنا بقياسات الخصائص (تيار- جهد) و (سعة-جهد) في درجات حرارة متغيرة تتراوح بين 295-400 درجة مئوية لهذا الصمام الثنائي وكذلك قمنا بمحاكاته باستعمال المبرمج Tcad-Silvaco. دراسة الخصائص (تيار-جهد) تبين ان معامل المثالية  $\eta$  يتناقص، و ارتفاع الحاجز  $\Phi_B$  يزيد مع زيادة درجة الحرارة. وقد أعطى نموذج ريتشاردسون المعدل متوسط ارتفاع الحاجز  $\bar{\Phi}_{B0}$  و ثابتة ريتشاردسون  $A^*$  ،  $1.15 \text{ eV}$  و  $30.53 \text{ Am}^{-2} \text{ K}^{-2}$  على التوالي. وقد أوضحت النتائج أن الخصائص (I-V) للصمام الثنائي شوتكي AuGeNi/p-Si تعتمد على آلية الانبعاث الثرميوني مع توزيع جاوس لمرتفعات حاجز شوتكي (SBHs). المحاكاة والنتائج التجريبية هي على اتفاق جيد.

وأظهرت دراسة الخصائص (سعة-جهد) ان السعة سلبية فيما يخص الاستقطابات المباشرة ومن اجل درجات حرارة أعلى من  $T=260\text{K}$  و هذه السعة السلبية ناجمة عن حقن من الحاملات الأقلية. في الجزء الثاني من هذه الأطروحة، كرس العمل لدراسة العيوب على كاشف الجسيمات ذو أساس الصمام الثنائي شوتكي نوع p. محاكاة الصمام الثنائي شوتكي ، باستعمال المبرمج Tcad-Silvaco ودراسة إضافة الشوائب للصمام الثنائي المتمثلة في إضافة المعادن الثقيلة مثل الذهب، البلاتين والنيوبيوم. انتشار المعادن في السيلكون يخلق مستويات عيب، وتتمثل هذه المستويات في مستويات أخذة و أخرى مانحة في فجوة النطاق. انخفاض تيار التشبع، و زيادة معامل المثالية وحاجز الارتفاع في جميع حالات إضافة المعادن، الذهب، البلاتين والنيوبيوم.

الانخفاض في تيار التشبع بسبب العيوب التي يتم إنشاؤها بواسطة المعادن في فجوة النطاق. المستويات المانحة في الفجوة هي المسؤولة عن ارتفاع قيمة ارتفاع حاجز شوتكي من نوع p. وتظهر المقارنة أن المعادن الذهب والبلاتين والنيوبيوم تخلق مراكز إعادة التركيب مما تسبب في انخفاض الموصلية. ذلك، و في جميع الحالات أصبح التيار أوميا تقريبا.

وعلاوة على ذلك، أن إضافة الشوائب للصمام الثنائي المتمثلة في إضافة أي معدن من المعادن الثلاثة للسيليسيوم له تأثير مماثل لتشبع بنسبة إميغا إلكترون فولت نيوترونات. ومن المتوقع أن الكاشف المصنوع من السيليسيوم المضاف إليه المعادن التالية الذهب، البلاتينيوم و النيوبيوم ستكون مقاومة لأي نوع من الإشعاع.

## الكلمات المفاتيح

اتصالات شوتكي ,خصائص تيار- الجهد-درجة الحرارة، توزيع جاوس، الحاجز اللامتجانس، السعة السلبية، كاشف الجسيمات.

# Remerciements

*Je remercie d'abord mon **DIEU** le tout puissant.*

*Les travaux effectués dans cette thèse ont été effectués au sein du Laboratoire des Matériaux Semi-conducteurs et Métalliques (**LMSM**) de l'Université de Biskra.*

*Je remercie mon encadreur Monsieur **L. DEHIMI**, Professeur à l'université de Hadj Lakhder Batna, pour ses conseils précieux pour sa patience et son aide tout long de ce travail.*

*Egalement je tiens à remercier le Prof. Dr. Süleyman Özçelik pour son invitation, au laboratoire de « **photonics application and research** » université de Gazi à Ankara (Turque), j'adresse également ma profonde reconnaissance à Dr. Tarik Asar, pour sa disponibilité et son aide précieuse durant la fabrication de l'échantillon et les mesures des caractéristiques électriques.*

*Je tiens à remercier Monsieur **A. Ben Akcha**, Maitre de Conférences à l'université de Biskra d'avoir accepté de présider le jury de ma thèse. Je remercie vivement aussi les membres du jury : Monsieur **M. Ledra**, Maitre de Conférence au centre universitaire de Mila, Monsieur **A. Saadoune**, Maitre de Conférences à l'université de Biskra et Monsieur **N. Athamna**, Maitre de Conférences à l'université de Batna d'avoir tous accepté d'examiner le travail de cette thèse.*

*Je remercie tous ceux qui ont contribué, de près ou de loin, pour la réalisation de ce travail.*

# DÉDICACE

*A mes parents.*

*A mon mari.*

*A mes frères et Sœurs.*

*A toute ma famille.*

*A tous mes amies et mes collègues.*

*Je dédie ce travail.*

## Liste des figures

<b>Figure I.1:</b> Niveaux énergétiques dans un métal et un semi-conducteur(type p) .....	3
<b>Figure I.2:</b> Schéma de diagrammes de bande d'énergie de type p de M/S contacts.....	4
<b>Figure I.3:</b> Variation du carré de l'inverse de la capacité en fonction de la tension.....	7
<b>Figure I.4:</b> Diagramme énergétique à l'équilibre thermodynamique d'un métal et d'un semiconducteur de type n (a) avant contact et avec états de surface, (b) après contact et avec états de surface.....	8
<b>Figure I.5:</b> contact métal / semi-conducteur avec états de surface et couche interfaciale...	10
<b>Figure I.6:</b> charge image.....	11
<b>Figure I.7:</b> L'abaissement de la barrière Schottky par l'effet Schottky.....	11
<b>Figure I.8:</b> mécanismes de passage d'un électron à travers une barrière d'énergie à l'interface métal/semi-conducteur.....	12
<b>Figure I.9:</b> Des contacts de type n avec des concentrations croissantes de dopage.....	15
<b>Figure I.10:</b> $E_{00}$ et $kT$ en fonction de la densité de dopage de Si type n a $T = 300K$ .....	15
<b>Figure I.11:</b> (a) Diagramme énergétique à deux dimensions d'un contact métal- semiconducteur inhomogène (b) distribution gaussienne de la fluctuation de la barrière de potentiel suivant le modèle de Werner.....	17
<b>Figure II.1:</b> Principe de fonctionnement d'un détecteur à jonction semi-conductrice.....	22
<b>Figure II.2:</b> Courant de fuite en fonction de la fluence pour différents types de détecteurs Si.....	24
<b>Figure II.3:</b> Recombinaison directe (gauche) ou indirecte par un niveau profond (droite).....	25
<b>Figure II.4:</b> Schéma illustrant l'émission et la capture d'électrons et de trous: (a) capture d'un électron; (b) émission d'un électron; (c) Piège à électrons; (d) Piège à trous.....	26
<b>Figure II.5:</b> Le champ électrique et Les mouvements des porteurs dans le détecteur de silicium.....	29
<b>Figure III.1:</b> Le rôle de simulation.....	31
<b>Figure III.2:</b> Environnement virtuel de fabrication des plaquettes de Silvaco.....	32
<b>Figure III.3:</b> Les entrées et sorties du ATLAS.....	33
<b>Figure III.4:</b> Ordre des groupes des commandes d'Atlas (Les commandes fondamentales afférentes).....	35
<b>Figure III.5:</b> (b1) Maillage bidimensionnel avec pas constant dans la couche (cas particulier d'un élément fini trianguler). (b2) Maillage bidimensionnel avec pas adaptable d'une couche a l'autre.....	35
<b>Figure IV.1:</b> Le schéma de principe de systèmes de mesure.....	43
<b>Figure IV.2:</b> Caractéristiques I-V-T expérimentale de AuGeNi /p-Si /SBD.....	44
<b>Figure IV.3:</b> structure de la diode Schottky AuGeNi/p-Si.....	45
<b>Figure IV.4:</b> Caractéristiques I-V-T simulées de AuGeNi /p-Si.....	47
<b>Figure IV.5:</b> Caractéristiques I-V-T simulées(ligne continu) et expérimentales de AuGeNi /p- Si.....	47
<b>Figure IV.6:</b> Détermination de $I_0$ et du facteur d'idéalité $\eta$ pour $T=400K$ .....	48
<b>Figure IV.7:</b> Variation de la barrière $\Phi_{B0}$ et du facteur d'idéalité $\eta$ en fonction de la température de la diode AuGeNi /p-Si ;a) expérimentale, b)simulé.....	49

<b>Figure IV.8:</b> Plot de Richardson de $\ln(I_0/T^2)$ en fonction $1000/T$ , a) résultats expérimentales, b) résultats de simulation.....	50
<b>Figure IV.9:</b> Caractéristiques expérimentales $C^{-2}(V)$ de la diode AuGeNi /p Si, a) simulé, b) expérimentale.....	52
<b>Figure IV.10:</b> la dépendance en température de la hauteur de la barrière à partir de C-V pour AuGeNi /p-Si SBD. ....	53
<b>Figure IV.11 :</b> Hauteur de barrière en fonction de $1/2k_B T$ . a) expérimentale) simulée.....	54
<b>Figure IV.12 :</b> Tracé de $(1/n - 1)$ en fonction de $q/2KT$ de la diode Schottky selon la distribution gaussienne. a) expérimentale, b) simulée.....	55
<b>Figure IV.13:</b> Plot de Richardson modifié de $\ln(I_0/T^2)-(q^2\sigma_0^2/2k^2T^2)$ en fonction de $(q/kT)$ . a) expérimentale, b) simulé.....	56
<b>Figure IV.14:</b> Caractéristiques C-V-T expérimentale de AuGeNi /p-Si /SBD.....	57
<b>Figure IV.15 :</b> Caractéristiques C-V-T expérimentale de AuGeNi /p-Si /SBD pour deux températures ( $T=295K$ et $T=230K$ ).....	58
<b>Figure IV.16 :</b> Caractéristiques C-V-T simulées de AuGeNi /p-Si /SBD pour deux températures ( $T=295K$ et $T=230K$ ).....	59
<b>Figure IV.17:</b> Les électrons pour la capacité positive ( $T=230K$ ) à $V=1V$ .....	58
<b>Figure IV.18:</b> Les électrons pour la capacité négative ( $T=295K$ ) à $V=1V$ .....	60
<b>Figure IV.19:</b> structure de la diode Schottky Au/p-Si.....	62
<b>Figure IV.20 :</b> Caractéristiques I-V de Au /p-Si /SBD non dopée simulée .....	62
<b>Figure IV.21 :</b> Caractéristiques I-V de Au /p-Si /SBD non dopée fabriquée.....	63
<b>Figure IV.22 :</b> Caractéristiques logarithmiques I-V de Au /p-Si /SBD dopé par l'Or simulée .....	64
<b>Figure IV.23 :</b> Caractéristiques logarithmiques I-V de Au/p-Si/SBD dopé par l'Or fabriquée .....	64
<b>Figure IV.24:</b> Caractéristiques logarithmiques I-V de Au/p-Si/SBD dopé par Platine simulée .....	66
<b>Figure IV.25:</b> Caractéristiques logarithmiques I-V de Au/p-Si/SBD dopé par Platine fabriquée .....	66
<b>Figure IV.26:</b> Caractéristiques logarithmiques I-V de Au/p-Si/SBD dopé par Niobium simulée .....	68
<b>Figure IV.27:</b> Caractéristiques logarithmiques I-V de Au/p-Si/SBD dopé par Niobium fabriquée .....	68
<b>Figure IV.28:</b> Concentration des porteurs pour la structure d'une diode non dopée a $v=2V$ .....	70
<b>Figure IV.29:</b> Concentration des porteurs pour la structure d'une diode dopée par l'Or a $v=2V$ .....	70
<b>Figure IV.30:</b> Concentration des porteurs pour la structure d'une diode dopée par le platine a $v=2V$ .....	71
<b>Figure IV.31:</b> Concentration des porteurs pour la structure d'une diode dopée par le niobium a $v=2V$ .....	72

## Liste des tableaux

<b>Tableau III.1:</b> Les paramètres de SRH.....	39
<b>Tableau IV.1 :</b> Les valeurs obtenues du courant de saturation, le facteur d'idéalité et la hauteur de barrière de potentiel .....	49
<b>Tableau IV.2:</b> Constante de Richardson et barrière de potentiel.....	50
<b>Tableau IV.3:</b> Les valeurs obtenues de la hauteur de barrière de potentiel et le taux de dopage.....	52
<b>Tableau IV.4:</b> Barrières moyennes et déviations standard extraites de la structure AuGeNi /p-Si SBD .....	54
<b>Tableau IV.5:</b> Barrières moyennes et valeurs de la constante de Richardson extraites de la courbe $\ln(I_0/T^2)-(q^2\sigma_0^2/2k^2T^2)$ en fonction de $(q/kT)$ .....	56
<b>Tableau IV.6:</b> Les paramètres évalués à partir des caractéristiques I-V pour la diode non dopée.....	63
<b>Tableau IV.7:</b> Les paramètres évalués à partir des caractéristiques I-V pour la diode dopée par l'Or.....	65
<b>Tableau IV.8:</b> Les paramètres évalués à partir des caractéristiques I-V pour la diode dopée par le platine.....	67
<b>Tableau IV.9:</b> Les paramètres évalués à partir des caractéristiques I-V pour la diode dopée par le Niobium.....	69

# Sommaire

---

<b>Liste des figures</b>	III
<b>Liste des tableaux</b>	V
<b>Introduction générale</b> .....	1
<b>Chapitre I Généralités sur la structure M/S</b>	
I.1 Introduction.....	3
I.2 Structure schottky.....	3
I.2.1 Formation de la barrière Schottky.....	4
I.2.2 Zone de charge d'espace.....	5
I.3 Modèle de Bardeen.....	7
I.4 Modèle de Cowley et Sze.....	8
I.5 Abaissement de la barrière ; effet Schottky.....	10
I.6 Mécanismes de transport du courant dans un contact M/S en polarisation directe.....	12
I.6.1 courant d'émission thermoionique .....	13
I.6.2 Courant dû au passage des porteurs à travers la barrière.....	14
I.7 Modèle homogène de la barrière de potentiel $\Phi_B$ du contact Schottky.....	16
I.8 Modèle de la diode Schottky inhomogène (Modèle de Werner) .....	16
<b>Chapitres II Détecteurs de particules</b>	
II.1 Introduction.....	20
II.2 Détecteurs de particules à base de semi-conducteurs.....	21
II.3 Les détecteurs de particules au silicium (Si) .....	23
II.4 Les détecteurs de particules à l'Arséniure de Gallium (GaAs) .....	23
II.5 Le courant de fuite.....	23
II.6 Les défauts profonds.....	24
II.6.1 Caractéristiques des défauts profonds.....	24
II.7 Efficacité de collection de charge (CCE) .....	29
II.8 Temps de relaxation.....	30
<b>Chapitres III Outils de simulation physique Tcad-Silvaco</b>	
III.1 Introduction.....	31
III.2 Le rôle de la simulation.....	31
III.3 TCAD Silvaco.....	31
III.4 Logiciel de simulation « Silvaco-Atlas ».....	32
III.4.1 Présentation d'Atlas.....	33
III.4.2 Ordres de commandes d'Atlas.....	34
III.4.2.1 Spécification de la structure.....	34

# Sommaire

---

III.4.2.1.a Le maillage.....	34
III.4.2.1.b La spécification des regions.....	36
III.4.2.1.c Les électrodes.....	36
III.4.2.1.d La spécification du dopage.....	37
III.4.2.2 Spécification des matériaux et de modèles.....	37
III.4.2.2.a Matériau.....	37
III.4.2.2.b Modèles physiques.....	37
III.4.2.3 Contact.....	39
III.4.2.4 Interface.....	39
III.4.3 Spécification Méthodes numériques de calcul.....	39
III.4.4 Spécification de Solution.....	40
III.4.4.1 Log.....	40
III.4.4.2 Solve.....	40
III.4.4.3 Load et Save.....	40
III.4.4.4Analyse des résultats.....	40
III.5 Equations de bases de la physique des semi-conducteurs.....	41

## Chapitre IV Résultats et discussions

IV.1 Introduction.....	42
IV.2 Diode schottky AuGeNi /p-Si.....	42
IV.2.1 Procédé de fabrication.....	42
IV.2.2 technique de mesure des caractéristiques électriques .....	42
IV.3 Simulation.....	44
IV.3.1 Introduction.....	44
IV.3.2 Description de la structure .....	45
IV.3.3 Modèles physiques utilisés.....	45
IV.3.4 Caractéristique I-V-T de la structure AuGeNi /p-Si /SBD.....	46
IV.3.5 Modèle de la barrière homogène.....	48
IV.3.5.1 Etude de la hauteur de barrière et facteur d'idéalité .....	48
IV.3.5.1.a Méthode d'extraction des paramètres.....	48
IV.3.5.1.b Effet de la température.....	48
IV.3.5.2 Plot de Richardson.....	50
IV.3.5.3 Détermination de la hauteur de barrière à partir des caractéristiques C-V-T.....	51
IV.3.6 Modèle de la barrière Schottky inhomogène.....	53
IV.3.6.1 Barrière moyenne et déviation standard.....	53
IV.3.6.2 Plot de Richardson modifié.....	55
IV.4 Analyse de la capacité (C-V-T) .....	57
IV.5 L'effet des pièges sur le détecteur de particule a base d'une diode schottky Au /p-Si.....	60
IV.5.1 Introduction.....	60
IV.5.2 Dopage par des métaux.....	60

# Sommaire

---

IV.5.3 Simulation de la diode.....	61
IV.5.4 Caractéristique(I-V) de la simulation.....	62
IV.5.4.1 Diode non dopée.....	62
IV.5.4.2 Diode dopée par l'Or.....	63
IV.5.4.3 Diode dopée par le Platine.....	65
IV.5.4.4 Diode dopée par le Niobium.....	67
IV.5.5 Discussion des résultats.....	69
<b>Conclusion générale.....</b>	<b>74</b>
<b>Bibliographie.....</b>	<b>77</b>
<b>Annexe</b>	

# **Introduction générale**

## Introduction générale

La détection de rayonnements a fait toujours l'objet de nombreuses recherches. Les besoins de la physique nucléaire ont conduit à chercher des détecteurs permettant de couvrir un très grand angle solide avec une résolution en énergie la meilleure possible. Les détecteurs à semi-conducteur permettent de couvrir ces besoins. La recherche est particulièrement focalisée sur le silicium, pour ce qui concerne les particules chargées et les ions lourds [1].

Les détecteurs réalisés à base des semi-conducteurs sont de plus en plus utilisés grâce à leur résolution énergétique, ainsi pour des avantages économiques.

Le silicium est de nos jours, un matériau très utilisé en microélectronique. Doté d'une très bonne résolution spatiale et en énergie, depuis près de 50 ans il a été un très bon détecteur de l'énergie des particules chargées et plus récemment, de la position de leur point de passage. Actuellement, le silicium est largement utilisé (en micro-pistes ou en pixels) dans les grands collisionneurs de particules chargées à très hautes énergies, destinés à explorer les mystères de la matière[2].

Expérimentalement, les chercheurs ont trouvé que les caractéristiques électriques d'un détecteur changent complètement d'allure à la soumission au rayonnement. Il s'est trouvé que ce changement est dû essentiellement aux défauts introduits suite à ces rayonnements.

Les détecteurs au silicium sont utilisés dans les expériences réalisées auprès des accélérateurs de particules. Étant exposés à de grandes fluences de particules d'irradiation, l'étude de la détérioration possible des caractéristiques électriques de ces détecteurs est primordiale. En particulier, la dépendance des dommages créés en fonction de l'énergie des particules irradiées doit être caractérisée. Les expérimentateurs ont effectué des irradiations de détecteurs au silicium pour pouvoir vérifier l'importance des dommages créés par ces irradiations. Suite aux irradiations, une mesure et une analyse des caractéristiques électriques en fonction de la fluence d'irradiation ont été effectuées [3].

La création des défauts dans les détecteurs par irradiations, fait l'objet des études depuis déjà plus de 30 ans.

Le principal effet des radiations est la création des défauts. Parmi les effets des défauts : Ils subissent une dégradation sévère dans leurs caractéristiques électriques. En particulier, leur efficacité de collection de charges (CCE) est dégradée en raison de changements dans la tension

# Introduction générale

---

de déplétion totale. Leur température de fonctionnement est également réduite en raison de l'augmentation dans le courant de fuite [4].

Notre thèse se présente principalement en quatre chapitres. Le premier aborde un rappel théorique sur les contacts métal/semi-conducteur ou communément appelé diodes Schottky, ainsi que les modèles qui expliquent les phénomènes de transport de courant dans ces différents types de structures, à savoir le modèle à barrière homogène et le modèle à barrière inhomogène.

Dans le deuxième chapitre les principaux notions et définitions concernant les détecteurs de particules sont présentées.

Le troisième chapitre présente le principe du simulateur TCAD développé par le groupe SILVACO, et son mode de fonctionnement et ses commandes.

Le quatrième chapitre est consacré au développement de programmes sur les diodes Schottky, les caractéristiques courant-tension et capacité-tension à différentes températures ont été simulés et comparés à ceux des structures réelles métal/Si, ainsi l'extraction des paramètres tel que courant de saturation, facteur d'idéalité et la hauteur de barrière schottky ont été présentés

En suite les effets des radiations sont étudiés dans la deuxième partie du quatrième chapitre. Des diodes à barrière Schottky ont été fabriquées sur le silicium de type P non dopé et silicium dopé par des métaux. Les métaux utilisés sont l'or, le platine et le niobium. La diffusion des métaux dans le silicium créent des différents niveaux d'énergies de défauts [5].

Les résultats de cette étude ainsi que leurs analyses seront discutés dans le quatrième chapitre.

Enfin, une conclusion générale résumera les résultats de cette thèse.

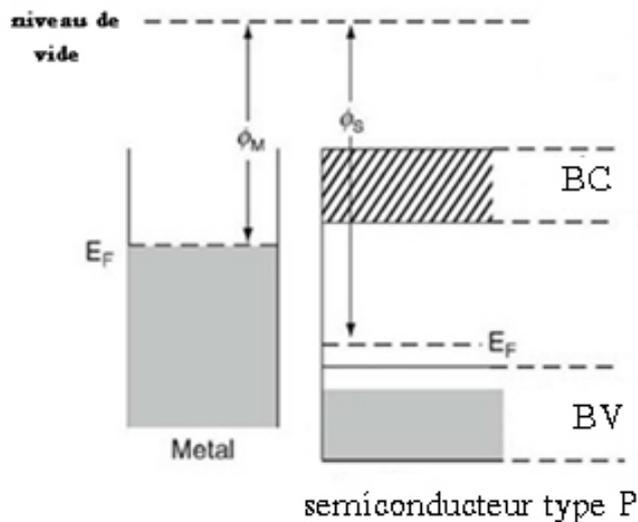
**Chapitre I**  
**Généralités sur la structure M/S**

## I.1 Introduction

Dans le cadre de l'étude d'une hétéro-structure, il est nécessaire de déterminer la valeur de la hauteur de barrière existant à l'interface entre les différents matériaux. C'est cette barrière qui va conditionner le passage des porteurs de charge d'un matériau vers l'autre. Pour obtenir un bon contact Schottky (ohmique), cette barrière doit être la plus grande (faible) possible. Pour déterminer la valeur de cette barrière, il faut comprendre la théorie du contact métal/semiconducteur et le processus de mise en équilibre thermodynamique dû à l'association des deux matériaux [6].

## I.2 Structure schottky

Le premier contact métal-semiconducteur a été élaboré en 1874 par F. Braun et a été expliqué par Schottky et Mott en 1938 [7]. La figure (I.1) illustre les niveaux énergétiques d'un métal et d'un semiconducteur avant le contact.



**Figure I.1:** Niveaux énergétiques dans un métal et un semi-conducteur (type p)

A zéro degré absolu, tous les électrons libres sont situés au-dessous du niveau de Fermi, l'énergie minimum qu'il faut fournir pour extraire un électron du métal est appelée Travail de sortie du

métal, on la notera  $\phi_M$ . On définit alors le travail de sortie  $\phi_M$  par l'énergie nécessaire pour faire éjecter du métal un électron depuis le niveau de Fermi d'énergie  $E_{Fm}$  au niveau du vide ( $N_V$ ). On caractérise, le semiconducteur par un autre paramètre qui est l'énergie qu'il faut fournir à un électron situé au bas de la bande de conduction, pour l'extraire du semi conducteur et l'amener dans le vide sans vitesse initiale, c'est l'affinité électronique, notée par  $\chi$ . L'affinité électronique  $\chi$  est défini par la différence énergétique entre le niveau du vide et celui de la bande de conduction du semiconducteur [8].

## I.2.1 Formation de la barrière Schottky

Lorsque les deux matériaux sont mis en contact, et quand le travail de sortie du métal est inférieur à celui du semiconducteur (type-p) ( $\phi_m < \phi_s$ ), les électrons passent du métal dans le semiconducteur. Il apparaît un déficit d'électrons à la surface du métal. Dans le semiconducteur, les électrons qui viennent du métal se recombinent avec les trous créant une zone de déplétion due à la présence des ions  $N_a^-$  qui ne sont plus compensés par les trous. Il apparaît ainsi une zone de charge d'espace étalée dans le semiconducteur. Le système évolue jusqu'au moment où le champs et la tension de diffusion résultants, arrêtent la diffusion des électrons (Figure I.2). Les bandes de conduction et de valence se déforment alors pour suivre le niveau du vide. Ces courbures correspondent aux zones de charge d'espace au voisinage des interfaces. La hauteur de la barrière d'interface, que voient les trous pour passer du semi conducteur au métal, est alors donnée par:

$$\Phi_b = E_g + \chi - \phi_m \quad (I.1)$$

$$qV_{bi} = \phi_s - \phi_m = \phi_B - (E_{FS} - E_V) \quad (I.2)$$

$$\Phi_b = qV_{bi} + KT \ln \frac{N_V}{N_A} \quad (I.3)$$

$\Phi_b$  : barrière de potentiel dans le métal

$\phi_m$  : travail de sortie du métal

$\chi$  : affinité électronique

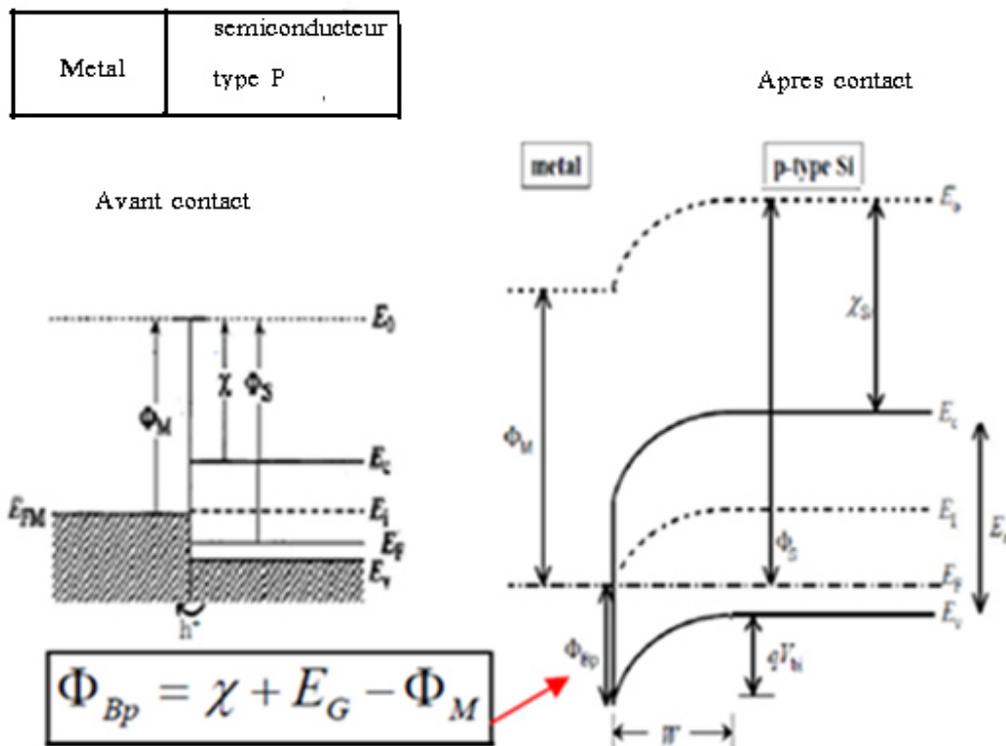
$E_g$  : bande d'énergie interdite du semi conducteur

$N_V$ : densité effective d'états dans la bande de valence

# Chapitre I: Généralités sur la structure M/S

Il est clair que la création d'une barrière d'énergie va limiter la conduction à travers la structure métal/semiconducteur. Un effet diode peut être attendu.

La hauteur de barrière Schottky est le paramètre le plus important dans le contact métal/semiconducteur, il détermine le comportement électrique de deux contacts (ohmique et Schottky). La barrière de potentiel est l'énergie nécessaire pour qu'un électron dans le métal puisse pénétrer dans le semiconducteur.



**Figure I. 2:** Schéma de diagrammes de bande d'énergie de type p de contact M/S.  $\Phi_M < \Phi_S$ , contact Schottky

## I.2.2 Zone de charge d'espace

Pour trouver les distributions spatiales de champs et du potentiel électriques, largeur de la zone de charge d'espace, et la capacité de jonction d'une diode Schottky, on doit résoudre l'équation de Poisson dans la région de charge d'espace en utilisant des conditions aux limites appropriées.

## Chapitre I: Généralités sur la structure M/S

---

L'équation de Poisson unidimensionnelle (1-D) dans la région de déplétion d'une diode Schottky est donnée par:

$$\frac{d^2V(x)}{dx^2} = -q \frac{N_a}{\epsilon_s} \quad (\text{I.4})$$

Où  $\epsilon_s$  est la permittivité absolue du semiconducteur.

Le champ électrique calculé à une direction x est donné par:

$$E(x) = \frac{qN_a}{\epsilon_{sc}} (x - W) \quad (\text{I.5})$$

la largeur de la zone de charge d'espace W, sous polarisation est donnée par:

$$W = \sqrt{\frac{2\epsilon_s}{qN_a} (V_{bi} + V_R)} \quad (\text{I.6})$$

$V_{bi}$ : tension de diffusion

$V_R$ : polarisation inverse

La densité de charge par unité de surface à l'équilibre thermodynamique s'exprime comme suit:

$$Q_{sc} = qN_a W = qN_a \sqrt{\frac{2\epsilon_s}{qN_a} (V_{bi} + V_R)} \quad (\text{I.7})$$

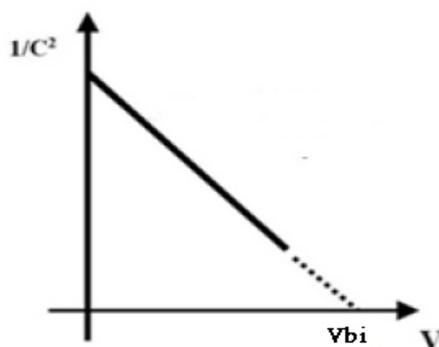
$$C = \frac{\delta Q_{sc}}{\delta V} = \sqrt{\frac{qN_a \epsilon_s}{2(V_{bi} + V_R)}} \quad (\text{I.8})$$

A partir de cette expression, nous pouvons extraire la variation de l'inverse du carré de la capacité en fonction de la tension appliquée,  $V_R$  :

$$\frac{1}{C^2} = 2 \left( \frac{V_{bi} + V_R}{qN_a \epsilon_s} \right) \quad (\text{I.9})$$

Cette formule est importante car elle montre qu'en traçant l'inverse du carré de la capacité en fonction de la tension, la pente de la courbe est directement proportionnelle au dopage ( $N_a$ ) (Figure I.3). En déterminant  $V_{bi}$  par l'extrapolation de la droite à  $C^{-2} = 0$ , donc, on peut déterminer la hauteur de barrière donnée par l'équation:

$$\Phi_b = qV_{bi} + KT \ln \frac{N_V}{N_A} \quad (\text{I.10})$$



**Figure I.3:** Variation du carré de l'inverse de la capacité en fonction de la tension.

### I.3 Modèle de Bardeen

D'après la théorie de Schottky, la barrière de potentiel dépend du travail de sortie du métal (l'équation (I.1)).

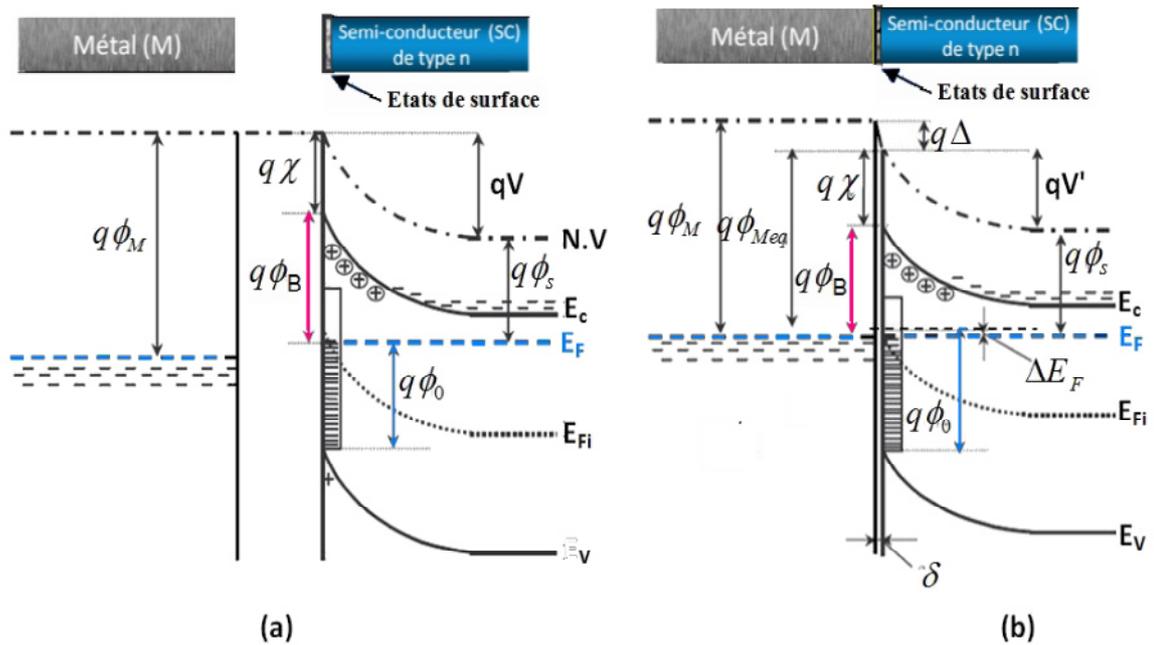
La plupart des expériences réalisés sur différentes structures M/S ont montré que la hauteur de barrière de la jonction n'était pas déterminée systématiquement par les valeurs des travaux de sortie [Mead et Spitzer, 1964], Bardeen [1947] suggère que cet écart est dû à la présence des états de surface à l'interface entre le métal et le semi-conducteur [9]. Ils proviennent de la rupture du réseau cristallin à la surface du cristal. Ils sont en densité très élevée, environ un état par atome de surface. De même, ces états peuvent provenir des impuretés adsorbées à la surface du semi-conducteur.

Si un nombre d'états de surface intrinsèques (associés à des niveaux énergétiques situés dans la bande interdite du semiconducteur), était assez élevé ( $D_{it} > 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ ), la hauteur de la barrière serait alors indépendante du travail de sortie du métal. La hauteur de barrière serait ainsi déterminée entièrement par ces états de surface, alors il se produit un ancrage du niveau de Fermi par ces états de surfaces et par conséquent l'ancrage de la hauteur de barrière.

La figure I.5 représente les diagrammes énergétiques d'un métal et d'un semiconducteur de type N avant et après le contact tel que  $\phi_m > \phi_s$ . On définit le niveau neutre  $\phi_0$ , comme étant la valeur mesurée à partir du niveau supérieur de la bande de valence pour lequel les états de surface doivent être remplis pour avoir une neutralité de charge à la surface du semiconducteur.  $\phi_0$ , est donc un paramètre énergétique qui caractérise les états de surface.

Lors de la formation du contact métal/semiconducteur, la densité d'états de surface est suffisamment grande pour accueillir la charge résultant de l'établissement de l'équilibre, si bien que la barrière reste inchangée (Fig I.4b).

$$\phi_b = E_g - q\phi_0 \tag{I.11}$$



**Figure I.4:** Diagramme énergétique à l'équilibre thermodynamique d'un métal et d'un semiconducteur de type n (a) avant contact et avec états de surface, (b) après contact et avec états de surface[10].

## I.4 Modèle de Cowley et Sze

Pour prendre en considération le rôle joué par la charge localisée sur les états d'interface on peut écrire les hauteurs de barrière des structures Métal-SC(n) et Métal-SC(p) sous les formes

## Chapitre I: Généralités sur la structure M/S

---

respectives (Cowley A.M. - 1965)[11]. La figure (I.5) représente le diagramme de bande d'un contact métal/semi-conducteur en présence d'une couche interfaciale. L'expression de la hauteur de barrière est alors [8].

$$q\phi_{bn} = \gamma(q\phi_m - q\chi) + (1 - \gamma)(E_g - q\phi_0) \quad (I.12)$$

$$q\phi_{bp} = \gamma(E_g + q\chi - q\phi_m) + (1 - \gamma)q\phi_0 \quad (I.13)$$

$$\gamma = \frac{\epsilon_i}{q^2 \delta_i D_i + \epsilon_i} \quad (I.14)$$

$D_i$  : densité des états d'interfaces

$\epsilon_i$  : la permittivité du semi-conducteur et de la couche interfaciale.

$\delta_i$ : L'épaisseur de la couche interfaciale.

Dans les expressions précédentes, l'abaissement de la barrière associé au potentiel image est négligé.

Si la densité  $D_i$  d'états d'interface est négligeable, le paramètre  $\gamma$  est voisin de 1 et on retrouve les expressions intrinsèques de la barrière de potentiel.

$$q\phi_{bn} = q\phi_m - q\chi \quad (I.15)$$

$$q\phi_{bp} = E_g + q\chi - q\phi_m \quad (I.16)$$

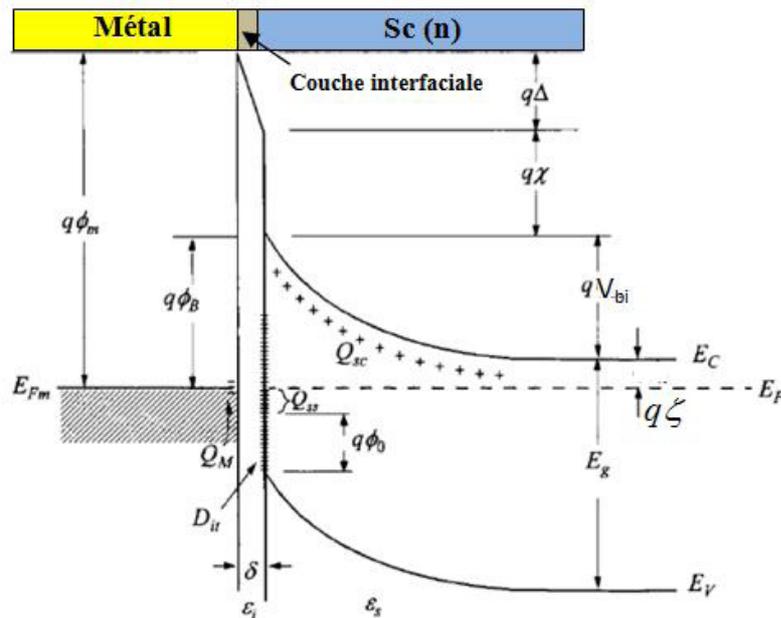
la hauteur de barrière est donnée par la relation de Mott-Schottky.

Si par contre la densité d'états d'interface est très importante, le paramètre  $\gamma$  devient très faible et les hauteurs de barrière s'écrivent

$$q\phi_{bn} = E_g - q\phi_0 \quad (I.17)$$

$$q\phi_{bp} = q\phi_0 \quad (I.18)$$

la hauteur de barrière ne dépend plus du travail de sortie du métal et déterminée complètement par les propriétés de la surface du semiconducteur (modèle de Bardeen).



- $Q_{SS}$ : la densité de charge portée sur l'interface du semiconducteur
- $D_{it}$  : la densité d'états d'interface
- $Q_{sc}$ : la densité de charge d'espace dans le semiconducteur
- $Q_M$ : la densité de charge surfacique dans le métal
- $\Delta$  : la chute de tension dans la couche interfaciale

**Figure I.5:** contact métal / semi-conducteur avec états de surface et couche interfaciale.

### 1.5 Abaissement de la barrière; effet Schottky

La présence d'un électron participant à la conduction dans le semiconducteur se trouve subir une force attractive par la création, par effet électrostatique, d'un porteur image (de signe opposé) la charge (-q) et la charge image (+q) espacées de la distance  $2x$ , Figure I.6, et donc d'un champ électrique. Intégré au voisinage de l'interface, ce champ induit une différence de potentiel et donc une variation du diagramme d'énergie. La force électrostatique induite étant attractive, la différence de potentiel énergétique créée est donc négative et correspond à un abaissement de la

# Chapitre I: Généralités sur la structure M/S

barrière de potentiel existante  $\phi_B$ . Cet abaissement de  $\phi_B$  est appelé l'effet Schottky défini par la formule suivante [12]:

$$\Delta\phi_B = \sqrt{\frac{q\xi_m}{4\pi\epsilon_s}} \tag{I.19}$$

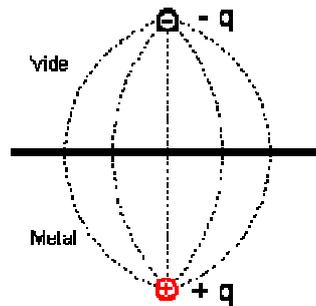
d'où :

$\Delta\phi_B$  est la valeur d'abaissement de la barrière Schottky

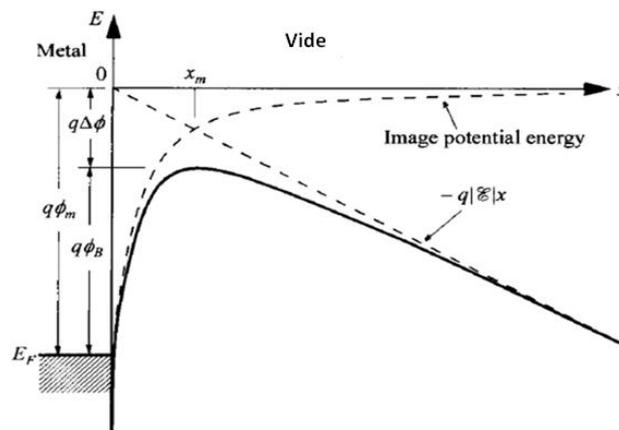
$\xi_m$  : Champ électrique maximum appliqué

$\epsilon_s$  : Permittivité du semiconducteur.

Si l'effet Schottky est pris en compte, la barrière  $q\phi_B$  est remplacée par la barrière effective  $q(\phi_B - \Delta\phi_B)$ .



**Figure I.6:** charge image



**Figure I.7:** L'abaissement de la barrière Schottky par l'effet Schottky[13]

### I.6 Mécanismes de transport du courant dans un contact M/S en polarisation directe

Dans une barrière métal-semiconducteur, plusieurs mécanismes de transport des porteurs peuvent exister simultanément ou séparément et être responsables des composantes de courant intervenant dans les caractéristiques courant-tension observées expérimentalement. L'importance de ces composantes de courant dépend du dopage du semiconducteur, de la température de fonctionnement du dispositif et de la hauteur de la barrière.

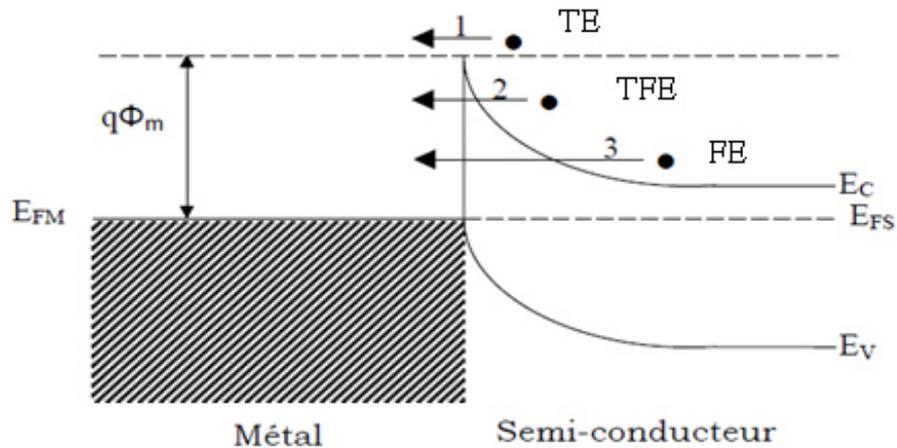
Les principales composantes de courant pouvant transiter à travers la barrière sont représentées dans la figure I.8. Ce sont:

1) Passage d'électrons qui possèdent une grande énergie (dits électrons chauds) du semiconducteur dans le métal, par-dessus la barrière. Deux modèles rendent compte du phénomène: le modèle thermoïonique et le modèle de diffusion, le premier étant prépondérant dans les semiconducteurs à grande mobilité et le second dans les semiconducteurs à faible mobilité [14, 15].

2) Le courant thermoionique assisté par effet de champ.

3) Le courant d'émission par effet de champ (ou effet tunnel pur).

Nous négligeons ici le courant de recombinaison et le courant dû aux porteurs minoritaires.



**Figure I.8:** mécanismes de passage d'un électron à travers une barrière d'énergie à l'interface métal/semi-conducteur[16].

### I.6.1 courant d'émission thermoionique

Le courant d'émission thermoionique (TE) consiste en un passage des porteurs électriques au-dessus de la barrière d'énergie. L'énergie nécessaire au passage est apportée par la température et par la polarisation externe. Ce type de courant est prépondérant dans les composants réalisés sur des matériaux peu dopés ( $N_D$  ou  $N_A < 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ ). C'est le mode principal de passage des porteurs dans les contacts redresseurs.

Le courant traversant un contact métal/semi-conducteur par émission thermo-ionique a pour expression:

$$I = I_0 \left[ \exp\left(\frac{qV}{\eta KT}\right) - 1 \right] \quad (\text{I.19})$$

$$\text{Avec } I_0 = AA^*T^2 \exp\left(\frac{-q\phi_{B0}}{KT}\right) \quad (\text{I.20})$$

$I_0$  : courant de saturation

$V$  : tension appliquée

$K$  : constante de Boltzmann

$A$  : surface de la diode

$A^*$ : valeur théorique de la constante de Richardson

$\phi_{B0}$  : barrière de potentiel de la diode Schottky à  $V=0V$  (SBH)

$\eta$ : facteur d'idéalité

le facteur d'idéalité  $\eta$  qui représente la conformité de la diode à une pure conduction thermoionique. Les valeurs de  $I_0$  et le facteur d'idéalité  $\eta$  sont généralement déterminés à partir de la pente et l'interception de la partie linéaire du courant direct de la courbe  $\ln(I)=f(V)$

$$n = \frac{q}{kT} \frac{dV}{d(\ln I)} \quad (\text{I.21})$$

La hauteur de la barrière Schottky peut être calculée après que  $I_0$  soit déterminé à partir de l'équation (I.20),

$$\phi_{B0} = \frac{kT}{q} \ln\left(\frac{AA^*T^2}{I_0}\right) \quad (\text{I.22})$$

### I.6.2 Courant dû au passage des porteurs à travers la barrière

Lorsque le dopage du matériau semiconducteur augmente, les électrons même s'ils ne possèdent pas l'énergie suffisante pour passer au-dessus de la barrière peuvent transiter à travers elle, par effet tunnel si celle-ci est suffisamment mince.

Le courant tunnel peut être déterminé en calculant la probabilité de transition à travers la barrière à l'aide de la mécanique quantique.

Il y a deux cas à considérer suivant le dopage du semiconducteur et la température de fonctionnement.

#### *Premier cas*

Lorsque la concentration d'impureté augmente et la largeur de barrière diminue, les porteurs initialement excités thermiquement peuvent franchir la barrière au voisinage de son sommet par effet tunnel Figure I.9. C'est le courant thermoïonique assisté par effet de champ (TFE). Ce courant dépend de la température.

#### *deuxieme cas*

Lorsque la concentration d'impureté continue à augmenter, la barrière devient si mince que de nombreux porteurs sont capables de transiter à la base de la barrière. Le courant peut alors être attribué à un effet tunnel pur. C'est le courant d'émission par effet de champ (FE). Il est indépendant de la température. Lorsque l'on se trouve dans ce cas, le contact métal semiconducteur ne présente plus la caractéristique de redressement, il devient ohmique.

La contribution de ces courants dépend de l'énergie thermique  $KT$  et de  $E_{00}$  (tunneling parameter) définie par:

$$E_{00} = \frac{qh}{4\pi} \sqrt{\frac{N}{m^* \epsilon_s}} \quad (\text{I.23})$$

où  $m^*$  est la masse effective des porteurs majoritaires,  $N$  est la concentration d'impureté.

L'équation ( $E_{00}$ ) est tracée sur la figure Figure I.10: Des contacts de type n avec des concentrations croissantes de dopage.

Lorsque  $KT \gg E_{00}$ , le courant de l'émission thermoïonique (TE) domine dans la diode Schottky. Alors que pour  $KT \ll E_{00}$  le courant tunnel (FE) domine, et pour  $KT \cong E_{00}$  le processus principale de conduction est l'émission thermoïonique-tunnel (TFE) qui est la superposition de l'émission thermoïonique TE et de l'effet tunnel FE[14].

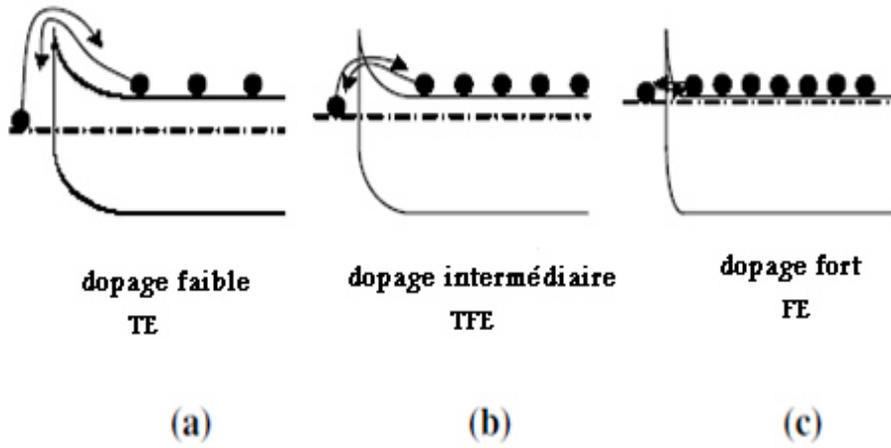


Figure I.9: Des contacts de type n avec des concentrations croissantes de dopage[17].

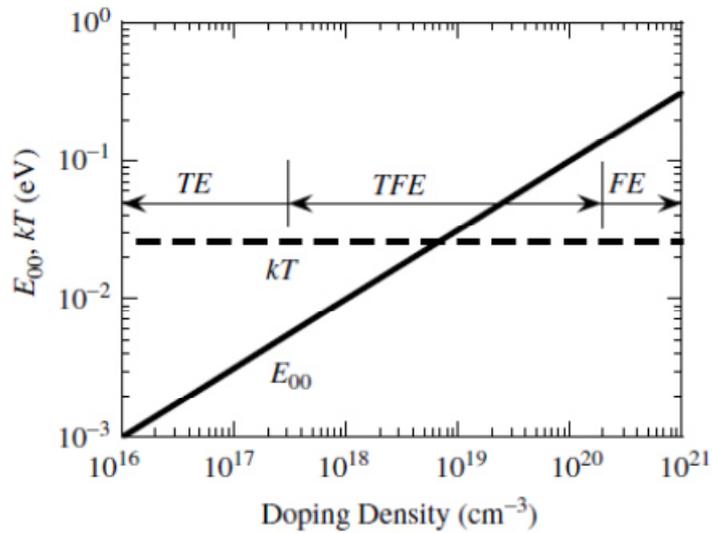


Figure I.10:  $E_{00}$  et  $kT$  en fonction de la densité de dopage de Si type n a  $T=300\text{K}$  [18].

### I.7 Modèle homogène de la barrière de potentiel $\Phi_B$ du contact Schottky

Les mesures de la caractéristique courant tension I-V sont généralement utilisées pour identifier les différents mécanismes de transport de courant dans le contact Schottky. Dans ce travail, la théorie de l'émission thermoionique (TE) est considérée comme le processus de transport dominant qui illustre le modèle homogène de la barrière de potentiel. Ce modèle sera modifié en tenant compte de l'inhomogénéité de la barrière de potentiel  $\Phi_B$  à travers une distribution gaussienne de cette dernière. Le courant décrit par le modèle de TE et qui traverse une barrière de potentiel homogène dans le mode direct est déterminé par l'équation (I.19).

Souvent l'analyse des structures Schottky par le modèle TE en considérant une distribution homogène de la barrière de potentiel présente des anomalies à savoir: Croissance de la barrière de potentielle et diminution du facteur d'idéalité lorsque la température augmente. Une sous-estimation de la valeur de la constante de Richardson qui reste inférieur à la valeur théorique.

Ces anomalies sont souvent expliquées par la présence d'inhomogénéités à l'interface.

Ces inhomogénéités sont liées à:

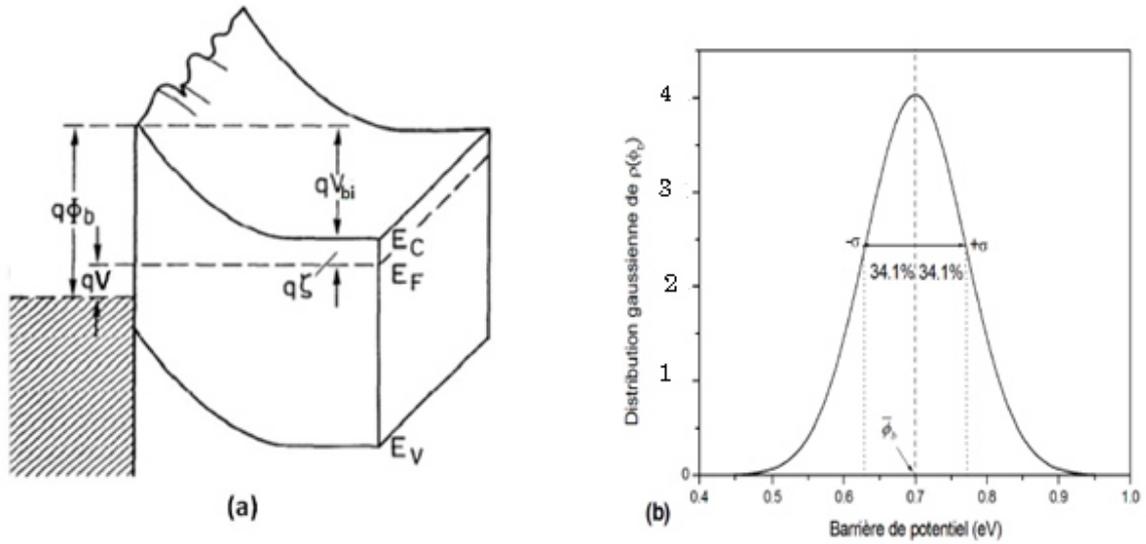
- Présence d'une couche à l'interface M/Semiconducteur non uniforme.
- Une réaction entre le metal et le Semiconducteur.
- Des contaminations de la surface.
- Des défauts de surfaces

Leurs origines est le plus souvent non intentionnelles.

les chercheurs à développer des nouveaux modèles en tenant compte de ces anomalies, on les appelle : les modèles inhomogènes.

### I.8 Modèle de la diode Schottky inhomogène (Modèle de Werner)

Le modèle développé par Werner et Gütter [19, 20] est couramment le plus utilisé vue sa validité dans le cas des faibles inhomogénéités de barrière et la simplicité d'interpréter le sens physique des anomalies du courant mesuré. Ce modèle montre que la hauteur de barrière et le coefficient d'idéalité peuvent varier avec la température et que cette variation est due principalement à une fluctuation spatiale de la hauteur de barrière autour d'une valeur moyenne, comme le montre la figure I.11 b. Les principales causes restent toujours la rugosité de l'interface M/S, les défauts générés à l'interface lors de la croissance du matériau ou pendant la réalisation des contacts.



**Figure I.11:** (a) Diagramme énergétique à deux dimensions d'un contact métal-semiconducteur inhomogène (b) distribution gaussienne de la fluctuation de la barrière de potentiel suivant le modèle de Werner.

D'un point de vue mathématique, le modèle de Werner introduit une distribution gaussienne de la hauteur de barrière autour d'une valeur moyenne  $\bar{\phi}_B$  avec une déviation standard  $\sigma$ . Cette distribution continue s'écrit sous la forme suivante [21]:

$$\rho(\phi_B) = \frac{1}{\sigma_0 \sqrt{2\pi}} \exp \left[ -\frac{(\phi_B - \bar{\phi}_{B0})^2}{2\sigma_0^2} \right] \quad (I.24)$$

$\rho(\phi_B)$  : probabilité de la distribution gaussienne de la barrière de la diode Schottky (SBH)

$\phi_B$ : barrière de potentiel de la diode Schottky (SBH)

$\sigma_0$  : déviation standard.

Le courant total  $I(V)$  à travers la diode Schottky en tenant compte de l'inhomogénéité de la barrière peut s'écrire sous la forme :

$$I = \int i(V, \phi_B) \rho(\phi_B) d\phi_B \quad (I.25)$$

## Chapitre I: Généralités sur la structure M/S

---

Où  $i(V, \phi_B)$  est le courant élémentaire thermoïonique émis dans la diode Schottky de barrière  $\phi_B$  et  $\rho(\phi_B)$  est la distribution gaussienne.

L'intégration de cette expression nous donne une relation entre la hauteur de barrière apparente  $\phi_{B\ app}$  et la hauteur de barrière moyenne:

$$\phi_{B\ app} = \bar{\phi}_{B0} - \frac{q\sigma_0^2}{2kT} \quad (I.26)$$

Cette expression montre que l'effet des fluctuations est plus accentué à basse température. La valeur moyenne  $\bar{\phi}_{B0}$  peut être comparable à celle extraite des mesures  $C(V)$ , qui restent toujours peu sensibles aux fluctuations locales de la barrière[22]. Cet effet provient du fait que les inhomogénéités spatiales sont négligeables par rapport à l'étendue de la ZCE dans le cas des mesures  $C(V)$ , alors que le passage du courant à travers le contact s'effectue préférentiellement au travers des régions de barrière basse de la distribution.

Dans le cas où le courant est décrit par le modèle thermoïonique, et si on suppose que la hauteur de barrière dépend du potentiel appliqué, l'expression du courant sera donnée par la formule suivante:

$$I = AA^*T^2 \exp\left(-\frac{q\phi_{B\ app}}{kT}\right) \left[ \exp\left(\frac{qV}{nkT}\right) - 1 \right] \quad (I.27)$$

De la relation (I.23) et en traçant  $\phi_{B\ app}$  en fonction de  $(q/2kT)$  on peut déterminer la valeur moyenne  $\bar{\phi}_{B0}$  et la déviation standard  $\sigma_0$ . De plus, si on suppose une dépendance linéaire de  $\bar{\phi}_B$  et  $\sigma^2$  avec le potentiel appliqué, on peut écrire alors:

$$\frac{1}{n} - 1 = -\rho_2 + \frac{q\rho_3}{2kT} \quad (I.28)$$

$\rho_2, \rho_3$  : coefficients indépendants de la température et quantifiant la déformation de la distribution de la barrière de potentiel lors de l'application d'une tension  $V$  donnés par:

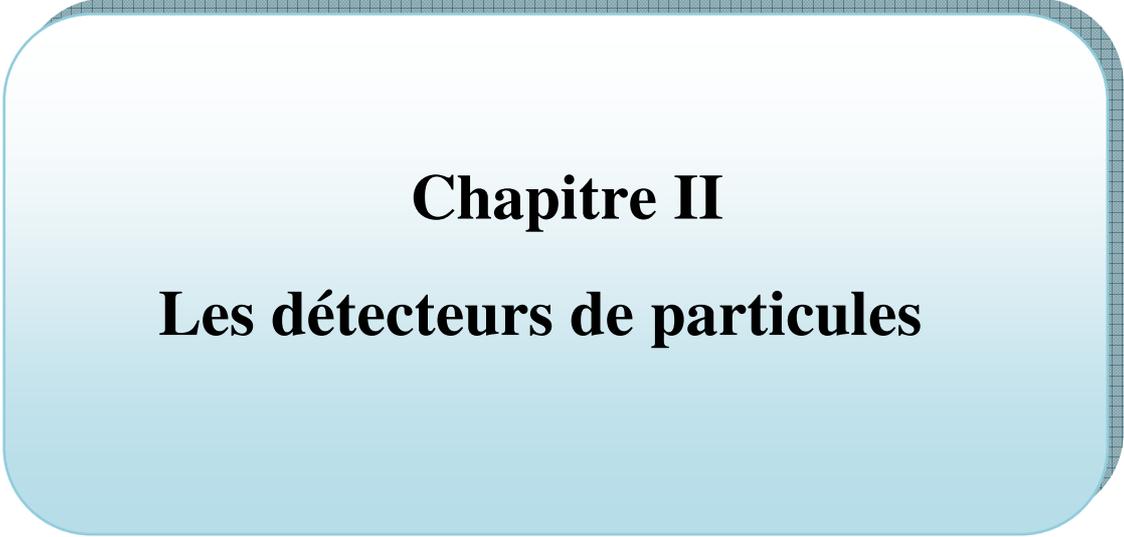
## Chapitre I: Généralités sur la structure M/S

---

$$\bar{\phi}_B - \bar{\phi}_{B0} = \rho_2 V \quad (\text{I.29})$$

$$\sigma^2 - \sigma_0^2 = \rho_3 V \quad (\text{I.30})$$

Où  $\bar{\phi}_B$  et  $\sigma$  la barrière moyenne et la déviation standard à la tension  $V$  respectivement. Alors, le tracé de  $(n^{-1} - 1)$  en fonction de  $(q/2kT)$  nous permet de déterminer les deux coefficients  $\rho_2$  et  $\rho_3$ .



**Chapitre II**  
**Les détecteurs de particules**

## Chapitre II: les détecteurs de particules

---

### II.1 Introduction

Les particules chargées interagissent de façon continue avec le milieu, les particules neutres se manifestent lors d'évènements isolés: un photon arrachera l'électron d'un atome ; un neutron entrera en collision avec un noyau ou y provoquera une réaction nucléaire. Ce sera l'ionisation due à l'électron arraché, au noyau qui recule ou aux produits de la réaction nucléaire qui signalera la présence du photon ou du neutron.

Pour ces raisons, il est facile de détecter une particule chargée qui laisse une trace directe de son passage. Par contre un photon ou un neutron pourra sortir d'un détecteur sans avoir laissé de traces, échappant alors à l'observation.

Les semi-conducteurs les plus étudiés et les plus utilisés pour la détection sont le silicium (Si) et l'arséniure de gallium (GaAs). Toutes ces études sont concentrées sur l'effet des radiations sur les caractéristiques de détecteur (courant-tension, capacité-tension, densité effective de dopage, efficacité de collection de la charge, etc.). Par exemple des grandes pertes de puissance sont remarquées dans les cellules solaires, durant leur fonctionnement. Ces pertes sont dues aux radiations (protons, électrons, etc.).

Les perturbations créées par radiation du réseau cristallin du semi-conducteur se manifeste par la présence des niveaux d'énergie dans la bande interdite. Quand ils sont proches du milieu de la bande interdite, ces niveaux sont appelés pièges profonds. Ils ont une incidence directe sur les propriétés électriques du semi-conducteur et des dispositifs associés. En effet, les pièges modifient de façon plus ou moins importante les propriétés électriques des semi-conducteurs:

- Par leurs capacités à émettre ou à capturer les porteurs libres, ils peuvent compenser les niveaux donneurs ou accepteurs introduits intentionnellement et donc réduire la concentration des porteurs libres ainsi que leur mobilité.
- En raison de leur position centrale dans la bande interdite, les niveaux profonds peuvent interagir avec les porteurs des deux bandes. Ils sont considérés comme des centres de génération-recombinaison et affectent donc la durée de vie des porteurs minoritaires.

Les détecteurs à base de semi-conducteurs ont généralement une structure p-n, pin ou des diodes Schottky.

### II.2 Détecteurs de particules à base de semi-conducteurs:

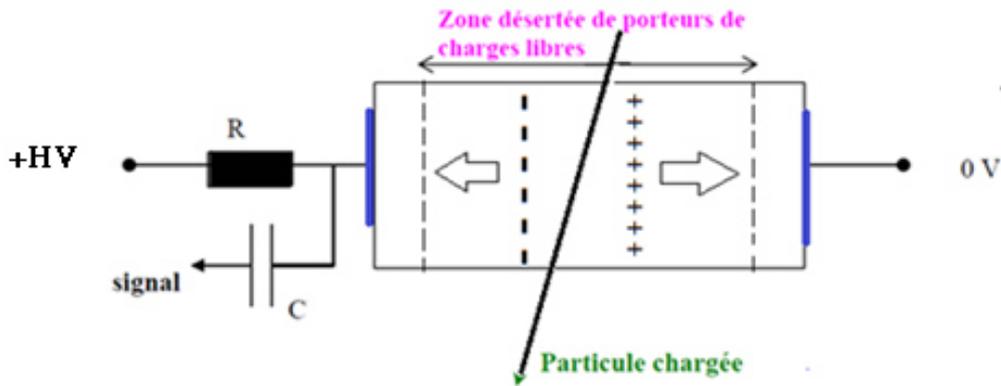
La présence d'une petite bande interdite (comparativement aux isolants) permet d'utiliser les semi-conducteurs comme détecteur de radiation. Lorsqu'une particule pénètre un semi-conducteur, elle peut transmettre de l'énergie à un électron de la bande de valence lui permettant de passer à la bande de conduction. Ce faisant, il laisse un lien incomplet (trou) dans la bande de valence. Sous l'influence d'un champs électrique, les électrons vont créer un courant dans le semi-conducteur. Cet excès de charge est collecté par des électrodes. On aura donc un signal proportionnel au dépôt d'énergie de la particule ionisante

La base d'un tel détecteur est un cristal semi-conducteur dont on a diminué la conductivité électrique intrinsèque afin de réduire le bruit de fond lorsque celui-ci est utilisé comme milieu de détection de particules chargées: s'il y a trop de charges libres en mouvement, la trace d'ionisation d'une particule chargée y sera complètement perdue.

Deux électrodes placées sur chaque face relient le détecteur à une source de tension (polarisation inverse de la jonction) par l'intermédiaire d'une résistance de charge  $R$ , de même qu'à l'électronique de lecture via une capacité de découplage  $C$  (figure II.1).

Lorsqu'une particule chargée traverse la zone désertée de porteurs libres, zone qui constitue le volume utile de détection, elle crée (par ionisation du cristal) des paires électron-trou, Le nombre de paires e-t générées est proportionnel a l'énergie dissipée, donc la détection de la quantité de charge donnera une estimation de l'énergie dissipée. Sous l'effet du champ électrique intense qui règne dans ce détecteur, ces paires de porteurs mobiles se dirigent, selon leur nature, vers l'une ou l'autre électrode. Pendant leur dérive, ils produisent, aux bornes de la résistance de charge, une impulsion de tension d'amplitude  $\Delta U$ , proportionnelle à la charge primaire c-à-d à l'énergie perdue par la particule. De plus, comme les électrons et trous se déplacent rapidement, cela génère une impulsion rapide ( $\approx 100$  ns).

C'est en quelque sorte une chambre à ionisation dont le milieu sensible gazeux serait remplacé par un milieu solide.



**Figure II.1:** Principe de fonctionnement d'un détecteur à jonction semi-conductrice.

Les détecteurs de particules à base de semi-conducteurs sont employés depuis 1964 et ils fournissent la meilleure résolution de l'énergie. Ils donnent également une impulsion d'une amplitude plus élevée.

Le gap d'énergie  $E_g$  du silicium est environ 1.12 eV à la température ambiante. La création d'une paire électron-trou exige une énergie moyenne de 3.62 eV [23].

L'endommagement induit par l'irradiation est l'inconvénient essentiel des détecteurs semi-conducteurs.

Pendant l'irradiation, des défauts comme les interstitiels et les complexes de lacunes se manifestent. Ces défauts forment des niveaux énergétiques peu profonds et profonds dans le gap du semi-conducteur et donc affectent les caractéristiques électriques du détecteur.

Leurs effets principaux sont [24]:

- Augmentation du courant de fuite (les défauts agissent comme centres de Recombinaison/génération).
- Réduction de l'efficacité de collection de la charge (lorsqu'ils jouent le rôle de pièges, la charge peut être réémise trop tard pour être collectée).
- Changement de la tension de déplétion (modification de  $N_{eff}$ ).

## Chapitre II: les détecteurs de particules

---

De toutes ces modifications, la variation de la tension de déplétion est la plus gênante, le courant de fuite pouvant être diminué par un fonctionnement à plus basse température et l'efficacité de collection des charges ne posant pas de problèmes tant que le détecteur est entièrement polarisé.

### II.3 Les détecteurs de particules au silicium (Si)

Le silicium est le matériau de groupe IV. La durée de vie de porteurs minoritaires est longue ( $\approx 10$  ns), puisqu'elle dépend de la densité des centres des pièges et du gap qui est indirect. La durée de vie est un paramètre important dans les détecteurs au silicium puisqu'elle détermine les caractéristiques de commutation. Lorsque le silicium est soumis à hautes radiations, son comportement devient semblable à celui de GaAs. En plus, le dopage de silicium par des métaux lourds (l'or, platine) donne le même effet [24].

Les détecteurs au silicium sont utilisées fréquemment dans les expériences de physique des particules qui exploitent entre autres leur résolution spatiale qui en fait d'excellents candidats pour les détecteurs de vertex. Un élément crucial reste à considérer: qu'en est-il de leur résistance aux radiations? Au niveau du module pixel du détecteur interne d'ATLAS, la fluence de particules atteindra  $10^{15}$  neq/cm<sup>2</sup> en dix ans (temps total prévu d'exploitation du LHC). Cette grande fluence endommagera les détecteurs. Les détecteurs au silicium fonctionnent de manière optimale lorsque la zone désertée des porteurs de charge correspond à l'épaisseur physique totale du détecteur[25].

### II.4 Les détecteurs de particules à l'Arséniure de Gallium (GaAs)

Le GaAs est l'élément du groupe III-V. En plus GaAs a une large bande d'énergie (gap) ( $E_g = 1.43$  eV) et donc une faible concentration intrinsèque ( $n_i = 2 \times 10^6$  cm<sup>-3</sup> à T= 300 K) et des courants de fuite faibles (résultants de génération thermique). La durée de vie de porteurs minoritaires est très courte ( $\approx 1$  ns). La mobilité des électrons est élevée (8600 cm<sup>2</sup> / Vs) et la vitesse spontanée de saturation est haute. Le semi-conducteur est robuste contre les radiations et possède une haute efficacité de détection de rayons x [26].

### II.5 Le courant de fuite

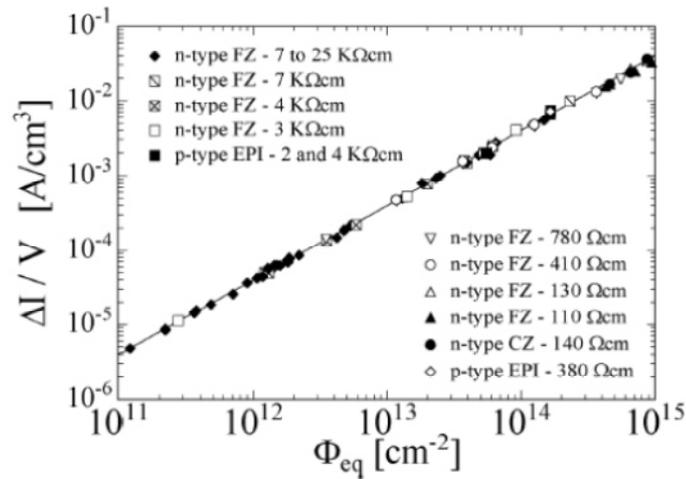
Le courant inverse d'un détecteur est lié à la génération de paires (e-t) suite à la présence de défauts correspondant à des niveaux d'énergie situés plus ou moins au milieu de la bande interdite. Il peut aussi provenir des courants de surface dus aux états formés dans l'interface Si-

## Chapitre II: les détecteurs de particules

SiO<sub>2</sub>. L'importance relative de ces deux effets est liée à la structure de la diode et au type d'irradiation. Plusieurs travaux ont montré que ce courant normalisé au volume actif V du détecteur est directement proportionnel à la fluence équivalente  $\Phi_{eq}$  (1MeV)[2].

$$\Delta I / V = \alpha \Phi_{eq} \quad (II.1)$$

où  $\Delta I$  est la différence des courants, mesurés à la déplétion totale, avant et après irradiation,  $\Phi_{eq}$  est la fluence équivalente a des neutrons de 1 MeV exprimée en particules/cm<sup>2</sup> et le paramètre  $\alpha$  est le facteur de proportionnalité. Ce dernier présente l'avantage d'être indépendant du type de détecteur (processus de fabrication, type n ou p, résistivité....) et de la nature de l'irradiation, comme on peut le constater sur la Figure II.2.



**Figure II.2:** Courant de fuite en fonction de la fluence pour différents types de détecteurs Si[26].

### II.6 Les défauts profonds

Les niveaux profonds sont dus à la présence d'impuretés, substitutionnelles ou interstitielles, ou de défauts, ponctuels ou étendus (dislocation), dans le réseau cristallin. Ces niveaux d'énergie, proches du centre de la bande interdite, sont associés à des états qui peuvent être localisés en volume, en surface ou aux interfaces de la structure à étudier.

#### II.6.1 Caractéristiques des défauts profonds

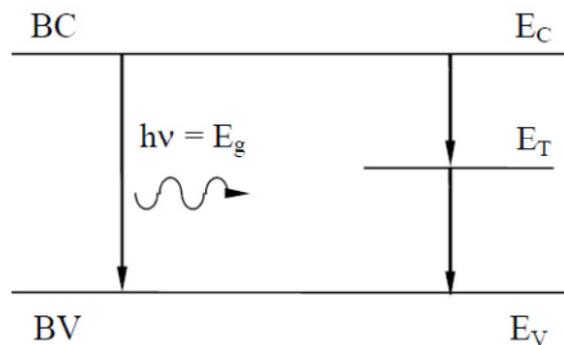
Nous entendons par défaut ponctuel toute rupture locale de périodicité du réseau cristallin, excluant tout défaut à une ou plusieurs dimensions. Il s'agit de défauts intrinsèques (lacune ou

## Chapitre II: les détecteurs de particules

interstitiels), extrinsèques (impuretés interstitielles ou substitutionnelles) ou combinaison de défauts intrinsèques et extrinsèques (défauts complexes). Ces défauts peuvent s'introduire dans la structure lors de la croissance du matériau (contamination dans la chambre de croissance, la pureté des produits de base), pendant les processus de réalisation du composant (gravures des couches, expositions au plasma) ou même au cours du fonctionnement du composant (vieillessement des lasers).

Deux types principaux de recombinaison qui contrôlent le processus de recombinaison (electron-trou) sont observés dans les semiconducteurs. Le premier, c'est la recombinaison directe entre la bande de conduction ( $B_C$ ) et la bande de valence ( $B_V$ ) suivie par l'émission de photons et de phonons. Le deuxième mécanisme, c'est la recombinaison indirecte(Shockley Read Hall)(figure II.3) a travers un niveau situé dans la bande interdite ( $B_I$ ).

La recombinaison électron-trou dans le silicium se fait a travers un centre dit centre de recombinaison



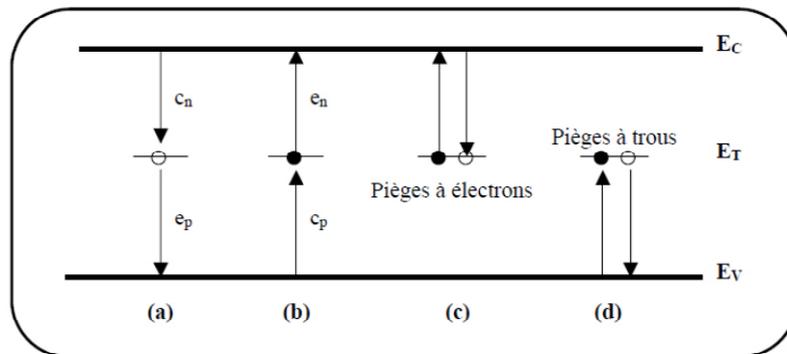
**Figure II.3:** Recombinaison directe (gauche) ou indirecte par un niveau profond (droite).

les défauts du réseau cristallin (interstitiels, lacunes, dislocations) et certaines impuretés chimiques (Au,Pt dans Si) donnent des niveaux discrets d'énergie situés vers le milieu de la BI : ce sont des niveaux profonds.

Un défaut profond dans peut se comporter comme un piège, comme un centre de recombinaison ou comme centre de génération. Si un porteur est piégé pendant un temps sur un niveau puis il est réémis vers la bande originale, le défaut est considéré comme un piège. Si un porteur de signe opposé est aussi capturé avant que le premier soit réémis, le niveau est un centre de recombinaison.

## Chapitre II: les détecteurs de particules

Les reactions possibles de ces niveaux avec les porteurs libres sont présentées dans la figure II.4.[ 27]



**Figure II.4:** Schéma illustrant l'émission et la capture d'électrons et de trous: (a) capture d'un électron; (b) émission d'un électron; (c) Piège à électrons; (d) Piège à trous.

Le processus d'émission dépend du taux d'émission ( $e_{n,p}$ ) et de la probabilité d'occupation du centre par un porteur libre, probabilité donnée par la statistique Fermi-Dirac à l'équilibre. Le processus de capture dépend du taux de capture  $C_{n,p}$  propre au défaut et de la probabilité d'occupation du défaut par un porteur libre.

Le taux d'émission et de capture des électrons et de trous peut donc être décrit par les relations suivantes:

- 1) Émission des électrons :  $e_n N_T F$
- 2) Capture des électrons :  $c_n N_T (1-F)$
- 3) Émission des trous :  $e_p N_T (1-F)$
- 4) Capture des trous :  $c_p N_T F$

Avec  $N_T$  la concentration totale des centres profonds et  $F$  la probabilité d'occupation d'un centre par un électron. Les taux de capture pour les deux types de porteurs s'écrivent:

$$c_n = \sigma_n n v_{thn} \tag{II. 2}$$

$$c_p = \sigma_p p v_{thp} \tag{II. 3}$$

où  $\sigma_{n,p}$  sont les sections efficaces de captures du défaut profond,  $v_{thn,p}$  sont les vitesses thermiques des porteurs et  $n, p$  les concentrations respectives d'électrons et de trous dans les bandes d'énergie concernées.

## Chapitre II: les détecteurs de particules

---

$$n = N_c \exp\left(-\frac{(E_c - E_F)}{k_B T}\right) \quad (\text{II. 4})$$

$$p = N_v \exp\left(-\frac{(E_F - E_v)}{k_B T}\right) \quad (\text{II. 5})$$

Les taux de capture des électrons ( $c_n$ ) et des trous ( $c_p$ ) vont déterminer les caractéristiques du défaut.

- Si  $c_n > c_p$  le niveau est un piège à électron.
- Si  $c_p > c_n$  Le niveau est un piège à trou.
- Le niveau se comporte comme un centre de recombinaison si  $c_n \cong c_p$  [28].

Donc d'après les relations II.2 et II.3, un niveau profond peut se comporter comme un piège ou comme un centre de recombinaison, non seulement en fonction de la valeur de la section efficace de capture, mais aussi de la concentration des porteurs libres dans le semiconducteur. Les sections efficaces de capture  $\sigma_{n,p}$ , traduisent l'aire dans laquelle le porteur libre doit s'approcher du centre pour être capturé. Plus cette distance est grande, plus le centre intervient facilement dans le processus de génération – recombinaison (à environ  $10^{-12} \text{cm}^2$  on parle de forte section de capture et à environ  $10^{-18} \text{cm}^2$  on parle de faible section de capture).

L'expression des coefficients d'émission est obtenue en faisant le bilan détaillé des processus d'émission et de capture à l'équilibre thermodynamique, où le taux de recombinaison net est égal à 0:

$$e_n F - c_n (1 - F) = 0 \quad (\text{II. 6})$$

Où  $F$  est la probabilité d'occupation du niveau par un électron. Conformément à la statistique Fermi Dirac à l'équilibre:

$$F(E_T) = \frac{1}{1 + \frac{1}{g} \exp\left(\frac{(E_T - E_F)}{k_B T}\right)} \quad (\text{II. 7})$$

$g$ : le degré de dégénérescence

Utilisant les équations II.2, II.3, II.4, II.5, II.6 et II.7 on obtient:

$$e_n = v_{thn} \sigma_n N_c \frac{1}{g} \exp\left(-\frac{(E_c - E_T)}{k_B T}\right) \quad (\text{II. 8})$$

## Chapitre II: les détecteurs de particules

---

Avec  $v_{thn} \equiv \sqrt{3k_B T / m_e^*} \equiv 1.2 \times 10^7 \text{ cm.s}^{-1}$  a  $T = 300 \text{ K}$  et  $N_c = 2(m_n^* k_B T / h^2)^{3/2}$

De manière similaire:

$$e_p = v_{thp} \sigma_p N_v g \exp(-(E_T - E_v) / kT) \quad (\text{II. 9})$$

$v_{thp} \equiv \sqrt{3k_B T / m_p^*} \equiv 1.2 \times 10^7 \text{ cm.s}^{-1}$  et  $N_v = 2(m_p^* k_B T / h^2)^{3/2}$

Où  $N_{c,v}$  sont les densités effectives d'états dans la bande de conduction et de valence,  $m_{n,p}^*$  les masses effectives des électrons et des trous et  $h$  la constante de Planck. Donc, la variation des taux d'émission  $e_{n,p}$  peut s'exprimer, en fonction de la température :

$$e_n = K_n \sigma_n T^2 \exp(-(E_c - E_T) / kT) \quad (\text{II.10})$$

$$e_p = K_p \sigma_p T^2 \exp(-(E_T - E_v) / kT) \quad (\text{II.11})$$

Le taux d'émission thermique est donc fonction de la profondeur du piège  $E_T$ , et de la température. Ainsi, à partir de mesures de  $e_{n,p}$  en fonction de  $T$  il est possible de déterminer les paramètres du piège: énergie d'activation  $E_T$  et la section efficace de capture  $\sigma_{n,p}$  (suppose indépendante de  $T$ ). La mesure de  $e_n, p(T)$  se fait en mesurant les modifications de la zone de charge d'espace d'une jonction (p-n ou Schottky) induite par le remplissage et le vidage en porteurs des niveaux profonds [27].

Les niveaux profonds sont identifiés par leurs deux paramètres propres:

- $E_a$ , énergie d'activation.
- $\sigma$ , Section efficace de capture.

Dans le cas d'un piège à électrons, ces grandeurs caractéristiques ( $E_{an}, \sigma_n$ ) influencent la probabilité d'émission d'un électron par ce piège à travers l'expression:

$$e_n = K_n \sigma_n T^2 \exp(-(E_{an}) / kT) \quad (\text{II.12})$$

$$\text{Avec } E_{an} = E_C - E_T \text{ et } K_n = \frac{4\pi\sqrt{6\pi}}{h^3} m_n k^2$$

$m_n$ : Masse effective des électrons,  $m_0 = 9.109 \times 10^{-31} \text{ kg}$  masse de l'électron libre.

$h$ : Constante de Planck,  $h = 6.62 \times 10^{-34} \text{ J.s}$

## Chapitre II: les détecteurs de particules

Un diagramme d'Arrhenius représentant  $\log(T^2/e_n)$  en fonction de  $1000/T$ , permet de déterminer les valeurs de l'énergie d'activation  $E_{an}$  et de la section efficace de capture  $\sigma_n$  à partir de l'équation suivante :

$$\log(T^2/e_n) = \log\left(\frac{3 \times 10^{-26}}{m_e^* \sigma_n}\right) + \frac{E_{an}}{2.3kT} \quad (\text{II.13})$$

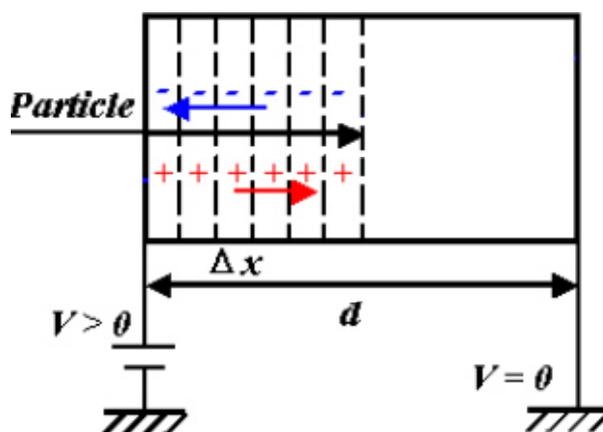
$T^2/s^{-1}$  en  $K^2/s^{-1}$ ,  $\sigma_n$  en  $cm^2$ ,  $E_{an}$  en eV

### II.7 Efficacité de collection de charge (CCE) :

le processus de collection de charge dans une jonction PN est le suivant (Figure II.5) :

- Une particule chargée est ralentie dans le matériau et perd son énergie suivant différents processus (ionisation)
- Création de paires électron-trou dans le détecteur
- Séparation des paires sous l'action d'un champ électrique
- Migration des charges vers les électrodes : les électrons vers N, les trous vers P
- Collection et formation du signal

Le nombre des charges créées se diminue au court du déplacement (par piégeage ou recombinaison). Le signal obtenu par un détecteur est proportionnel à la charge collectée.



**Figure II.5:** Le champ électrique et Les mouvements des porteurs dans le détecteur de silicium.

### II.8 Temps de relaxation

Dans un semiconducteur hors équilibre, la durée de vie est une grandeur relative aux porteurs minoritaires. Le temps de relaxation est une grandeur qui caractérise une perturbation de l'équilibre de la répartition des porteurs majoritaires.

Les semi-conducteurs de relaxation sont définis principalement par leur temps de relaxation très supérieur que leur temps de vie [8]. Le temps de relaxation est donné par l'expression suivante:

$$\tau_D = \epsilon_0 \cdot \epsilon_r / \sigma \quad (\text{II.14})$$

Où  $\sigma$  est la conductivité électrique,  $\epsilon_0$  est la permittivité du vide et  $\epsilon_r$  est la permittivité relative.

Le temps de relaxation mesure le temps nécessaire au rétablissement de la neutralité électrique. Un grand temps de relaxation est atteint quand la résistivité est assez élevée. Un matériau a une résistivité assez élevée quand sa densité de porteurs de charge et/ou la mobilité est petite. C'est ce qui se passe à une température assez basse, où les porteurs de charge sont bloqués, ou quand ils sont compensés par des niveaux profonds. Aussi dans les semi-conducteurs amorphes, l'absence de l'ordre cristallin donne lieu à des basses mobilités et par conséquent à des hautes résistivités.

Un nombre abondant de centre de recombinaison augmente le taux de recombinaison et par la suite le temps de vie devient très court. C'est à dire les semi-conducteurs amorphes et les matériaux semi-isolants à compensation obéissent facilement à la condition de relaxation.

# **Chapitre III**

**Outils de simulation physique**

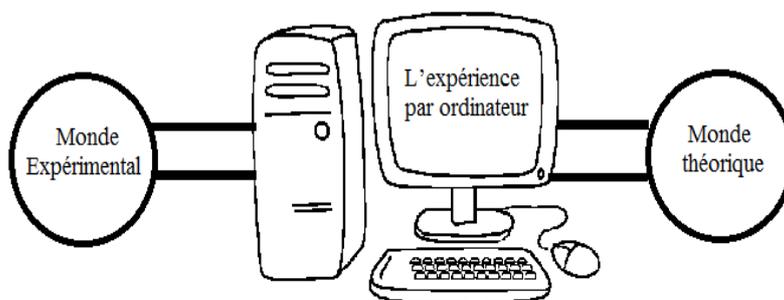
**Tcad-Silvaco**

### III.1 Introduction

Dans notre travail nous avons utilisé un logiciel de simulation technologique (TCAD), pour simuler les caractéristiques électriques des diodes Schottky, mais il faut tout d'abord connaître quelques notions principales sur la simulation en générale et ce logiciel en particulier.

### III.2 Le rôle de la simulation

La simulation fournit un lien entre le monde expérimental et le monde théorique comme le montre la figure III. 1. Elle complète la théorie et l'expérimental et construit la réalité physique dans la présence de certaines contraintes ou bien la présence d'une analyse mathématique impossible.



**Figure III.1:**Le rôle de la simulation.

### III.3 TCAD Silvaco

SILVACO est une société Américaine, «Silvaco International» ayant son siège a Santa Clara en Californie. Elle est un des principaux fournisseurs de chaines professionnelles de logiciels de simulation par éléments finis et de conception assistée par ordinateur pour les technologies de l'électronique TCAD (Technology Computer Aided Design). Ces outils sont employés par les compagnies de microélectronique dans le domaine de la recherche, du développement et de la conception de dispositifs [29].

Le TCAD-SILVACO a été fondé en 1984 par le Dr. Ivan Pesic qui a exposé les outils d'extraction des paramètres d'une structure UTMOS. Aujourd'hui ce logiciel est très utile dans le développement de beaucoup de projets de recherches. SILVACO inclut de nouveaux modèles physiques qui emploient des méthodes et des algorithmes numériques efficaces, de nouvelles

## Chapitre III : Outils de simulation physique TCAD-Silvaco

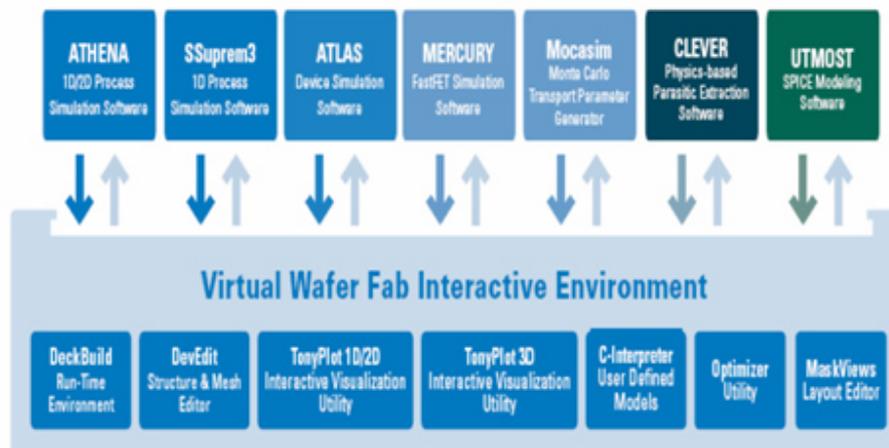
techniques de maillage, l'optimisation de solutions linéaires, etc, tout en permettant d'obtenir des résultats de simulation très proches de ceux obtenus pratiquement après conception en salle blanche.

L'entrée de SILVACO dans la technologie TCAD a été basée sur une recherche du département des dispositifs Physiques de l'Université de Stanford, ainsi apparaissent dans SILVACO « Athena » comme simulateur des processus et « ATLAS » comme simulateur des dispositifs (2D et 3D).

SILVACO n'a pas été conçu pour répondre à un seul composant semi-conducteur. En incluant des modèles plus généraux de la physique des semi-conducteurs, il permet des simulations plus étendues en balayant toute une gamme de composants électroniques.

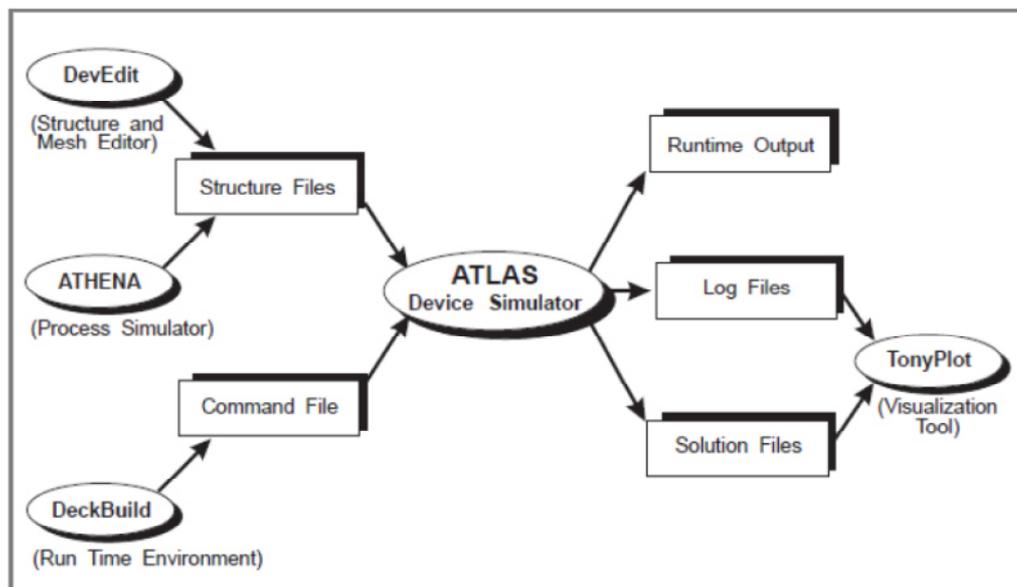
### III.4 Logiciel de simulation « Silvaco-Atlas »

La figure (III.2) montre l'environnement de fabrication virtuelle des plaquettes du logiciel « SILVACO ». Il est constitué de '7' programmes parmi lesquelles on a utilisé le logiciel « Atlas » qui permet la simulation, en deux et trois dimensions, des dispositifs électroniques à semi-conducteurs.



**Figure III.2:** Environnement virtuel de fabrication des plaquettes de Silvaco [30].

La Figure (III.3) montre les entrées et les sorties du logiciel «Atlas » dont l'environnement d'exécution «DeckBuild» reçoit les fichiers d'entrée, dans lesquelles «Silvaco-Atlas » a été appelé à exécuter le code, et « TonyPlot » a été utilisé pour afficher et visualiser la sortie de la simulation.



**Figure III.3:** les entrées et sorties du ATLAS.

### III.4.1 Présentation d'Atlas

La capacité à simuler avec précision un dispositif semi-conducteur est cruciale pour l'industrie et milieu de recherche. L'outil de simulation ATLAS est spécialement conçu pour la modélisation 2D et 3D de composants basés sur la physique des semi-conducteurs, en incluant les propriétés électriques, optiques et thermiques. Il possède une bibliothèque regroupant des matériaux prédéfinis comme il permet à l'utilisateur de définir d'autres matériaux propre à leur choix.

Il est capable de prédire les caractéristiques électriques de la plupart des composants semi-conducteurs en régime (DC), (AC), transitoire ou fréquentiel.

En plus du comportement électrique "externe", il fournit des informations sur la distribution interne de variables telles que les concentrations des porteurs, les lignes de courant, le champ électrique ou le potentiel, et des données importantes pour la conception et l'optimisation des procédés technologiques. Ceci est réalisé en résolvant numériquement l'équation de Poisson et les équations de continuité des électrons et des trous en deux dimensions en un nombre fini de points formant le maillage de la structure définie par l'utilisateur ou par le programme.

Le schéma de la Figure III.3 représente les différents types d'informations qui circulent en entrée et en sortie « d'Atlas ». La plupart des simulations réalisées sous « Atlas » utilisent deux fichiers d'entrée. Le premier fichier est un fichier texte contenant les commandes pour qu'Atlas s'exécute

(représenté par « Fichier de commande »). Le second fichier est un « Fichier de structure » contenant la structure du dispositif qui va être simulée définie dans «Athena » ou « DevEdit ». A la sortie « d'Atlas », nous avons trois types de fichiers.

Le premier de ces fichiers est la sortie « Runtime » qui donne la progression, les erreurs et les messages d'avertissements pendant la simulation. Le deuxième type de fichier est le fichier « log » qui stocke toutes les valeurs de tensions et des courants provenant de l'analyse du dispositif simulé (c'est le fichier du comportement électrique).

Le troisième fichier de sortie est le « Fichier de solution », ce fichier stocke les données 2D ou 3D concernant les valeurs des variables solutions en un point donné du dispositif (c'est le fichier physique, il contient la structure dans un état particulier). Les deux derniers fichiers sont traités par l'outil de visualisation « TonyPlot ».

### III.4.2 Ordres de commandes d'Atlas

Après la présentation de l'outil de simulation « d'Atlas » de SILVACO TCAD, sa composition interne et son fonctionnement nous allons maintenant présenter l'ordre des commandes propres à la logique de programmation « d'Atlas ». Ainsi il existe cinq groupes de commandes, ces groupes doivent être organisés correctement (Figure III.4). Si l'ordre n'est pas respecté, un message d'erreur apparaît et le programme ne s'exécute pas d'une façon correcte. Par exemple, si les paramètres ou les modèles de matériaux ne sont pas placés dans l'ordre idoine, le simulateur ne les prend pas en compte.

Les commandes fondamentales sont :

#### III.4.2.1 Spécification de la structure

La spécification de la structure est effectuée en définissant le maillage, les régions, les électrodes et le niveau de dopage.

##### III.4.2.1.a Le maillage

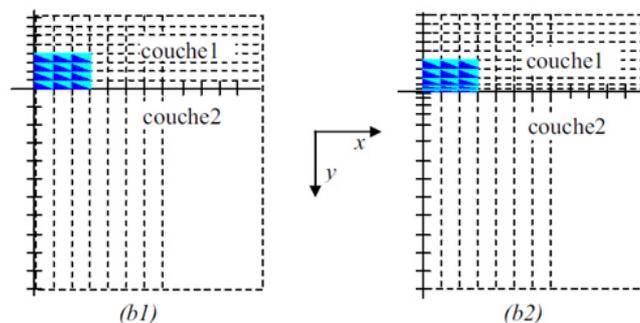
Définir un bon maillage est l'un des plus cruciaux problèmes dans la simulation physique des composants semi-conducteurs. Le maillage joue un rôle important pour l'obtention de bonnes simulations. Celui-ci doit être fait avec la plus grande attention pour garantir la fiabilité des résultats. La méthode numérique utilisée pour résoudre les équations physiques est la méthode des éléments finis Figure III.5 .Son principe de base est la discrétisation par éléments finis des

## Chapitre III : Outils de simulation physique TCAD-Silvaco

équations à traiter. Les éléments qui définissent la maille élémentaire utilisée par le simulateur sont des prismes. Le choix de maillage doit être fait de façon à avoir un compromis entre la vitesse d'exécution et l'exactitude des résultats, tel qu'un maillage épais produit une rapide simulation, mais les résultats sont moins précis. Tandis qu'un maillage fin produit un ralentissement de la simulation, mais des résultats plus précis. Donc le maillage fin est plus intéressant de point de vue résultat dans la simulation [31].

Groupe	Commandes
1. Spécification de la structure	MESH REGION ELECTRODE DOPING
2. Spécification des modèles des matériaux	MATERIAL MODELS CONTACT INTERFACE
3. Sélection de la méthode	METHOD
4. Spécification des solutions	LOG SOLVE LOAD SAVE
5. Analyse des résultats	EXTRACT TONYPLOT

**Figure III.4:** Ordre des groupes des commandes d'Atlas (Les commandes fondamentales afférentes).



**Figure III.5:** (b1) Maillage bidimensionnel avec pas constant dans la couche (cas particulier d'un élément fini trianguler). (b2) Maillage bidimensionnel avec pas adaptable d'une couche à l'autre.

Le format général de définition de maillage est:

MESH X.      LOCATION = <VALEUR>      ESPACEMENT = <VALEUR>  
MESH Y.      LOCATION = <VALEUR>      ESPACEMENT = <VALEUR>

*Spac* définit la résolution du maillage qui doit être physiquement inférieur à la longueur de Debye[32].

Cette longueur est exprimée en fonction du dopage N, par:

$$L_D = \sqrt{\frac{\epsilon K T}{2 q^2 N}} \quad (\text{III.1})$$

L'optimum de maillage consiste à choisir celui-ci en fonction des coordonnées : là où l'on suppose que les inconnues varient très rapidement on choisira un maillage très fin, relâchant ailleurs les dimensions des mailles, et les gardant relativement serrées au niveau des contacts métalliques.

Par exemple dans une jonction PN on serrera particulièrement le maillage là où est supposée exister une zone déserte de porteurs[33].

### III.4.2.1.b La spécification des régions

Après avoir défini le maillage, il est nécessaire de définir les régions dont le format de définition des régions est le suivant :

Région nombre= <integer> <material\_type> / <position des paramètres>

On peut avoir 200 régions différentes dans ATLAS.

### III.4.2.1.c Les électrodes

« Atlas » a une limite de 50 électrodes qui peuvent être définies. Le format de définition d'électrodes est comme suit:

Electrode name=<electrode name> <position\_parameters>

Les positions des électrodes sont localisées par les instructions suivantes :

*X.MIN* : Spécifie le point de départ de l'électrode.

*RIGHT* : la position de l'électrode se situe à la droite de la structure (inverse :LEFT).

*TOP* : la position de l'électrode est en haut de la structure (inverse : BOTTOM).

### III.4.2.1.d La spécification du dopage

Le dernier aspect de la spécification de la structure qui doit être défini est le dopage. Le format de la déclaration de dopage dans « Atlas » se présente comme suit:

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

Le dopage peut être de type N ou P. Le type de distribution peut être uniforme ou gaussienne.

### III.4.2.2 Spécification des matériaux et de modèles

Après la définition de la structure, il faut spécifier les modèles des matériaux, elle se compose de quatre parties : matériau, modèles, contact et interface.

#### III.4.2.2.a Matériau

Le format de la déclaration du matériau est le suivant :

Material < localisation > < définition du matériau >

Plusieurs autres paramètres peuvent être définis par la déclaration « Material », comme exemples de ces paramètres : la mobilité d'électrons (MUN) et la mobilité de trous (MUP), (TAUN0) et (TAUP0) qui sont les durées de vie des électrons et des trous respectivement.

#### III.4.2.2.b Modèles physiques

Les modèles physiques dans les semi-conducteurs ont été modélisés sous la forme d'expressions mathématiques reliant le potentiel électrostatique et la densité des porteurs.

Les modèles physiques sont classés en cinq catégories:

- mobilités des porteurs de charges
- mécanismes de génération-recombinaison
- les statistiques de transport
- l'ionisation par impact
- l'effet tunnel

La syntaxe de la déclaration du modèle est la suivante:

MODEL< paramètres générales > / < paramètres du modèle >

- Le modèle de Lombardi (pour la simulation électrique)

## Chapitre III : Outils de simulation physique TCAD-Silvaco

La mobilité des porteurs (électrons et trous) dépend du champ électrique qui accélère les électrons et les trous, la température du réseau et la concentration des dopants.

La dégradation de la mobilité se produit à l'intérieur des couches d'inversion. Cet effet est simulé dans ATLAS à l'aide de trois méthodes distinctes :

- Modèle de dégradation surfacique SURFMOB
- Modèle de champ électrique transverse SHIRAHATA
- Modèle spécifique de la mobilité de la couche d'inversion CVT, YAMAGUCHI,

TASCH.

Les modèles CVT, YAMAGUCHI, et TASCH sont conçus en tant que modèles autonomes qui incorporent tous les effets requis pour simuler la mobilité des porteurs. La modélisation de la mobilité la plus complète est basée sur le modèle de Lombardi.

C'est un modèle de mobilité qui prend en compte la variation de la mobilité avec le champ électrique, la concentration de dopants et la température. Ce phénomène est introduit par le simulateur en ajoutant CVT dans la commande MODELS

- Le modèle Shockley-Read-Hall (recombinaison-génération)

Lorsque le semi-conducteur subit une perturbation par exemple l'impact d'un ion, cette excitation introduit une génération de paires électrons/trous. Ensuite, le système revient à l'état d'équilibre par le processus de recombinaison. La simulation par ATLAS prend en compte les recombinaisons SRH sur des niveaux profonds. Le taux de recombinaison est donné par l'expression suivante :

$$R_{SRH} = \frac{np - n_i^2}{\tau_n \left( n + n_i \exp\left[\frac{E_{trap}}{KT}\right] \right) + \tau_p \left( p + n_i \exp\left[\frac{E_{trap}}{KT}\right] \right)} \quad (\text{III.2})$$

Où  $E_{trap}$  est la différence entre le niveau d'énergie du piège et le niveau de Fermi intrinsèque,  $T$  est la température du réseau en degrés Kelvin, et  $\tau_n$ ,  $\tau_p$  les durées de vie respectives des trous et des électrons. Le modèle de résolution numérique de ce phénomène est activé dans le programme de simulation en ajoutant le mot clé SRH à la commande MODELS[34].

**Tableau III.1** : Les paramètres de SRH

Paramètres	Valeur par défaut
$E_{\text{trap}}$	0 eV
$T_n$	$10^{-7}$ S
$\tau_p$	$10^{-7}$ S

S'il ya une ionisation, il existe un modèle proposé par Selberherr[34] , on introduit l'instruction :  
IMPACT SELB

### III.4.2.3 Contact

Il existe aussi les modèles qui concernent le type de contact soit contact ohmique qui connaît par défaut et le contact redresseur (contact de Schottky), ce contact est reconnu par un travail de sortie (work function) comme :

Contact num= < integer > work=< integer >

### III.4.2.4 Interface

Indique les paramètres d'interface aux frontières de semi-conducteur/isolant. Tous les paramètres s'appliquent seulement aux nœuds de frontière exceptes la ou ils sont déjà indiqués.

### III.4.3 Spécification Méthodes numériques de calcul

Après la précision du modèle de matériaux, la sélection de la méthode numérique doit être indiquée. Parmi les différentes méthodes numériques de résolution des systèmes d'équation, trois types de techniques sont utilisées dans « Silvaco-Atlas »:

- Méthode de Gummel
- Méthode de Newton
- Méthode des block

Pour la méthode de GUMMEL, elle est utilisée pour la résolution des équations a une seule inconnue et des variables fixées constantes, la résolution se faite d'une manière itérative jusqu'à

la solution est achevée. La deuxième méthode de NEWTON est la méthode la plus répandue dans le programme Atlas, elle est utilisée pour résoudre des systèmes d'équations à plusieurs inconnues. La troisième méthode est une combinaison des deux méthodes, elle est utile pour les systèmes d'équation mixtes.

### III.4.4 Spécification de Solution

#### III.4.4.1 Log

Log enregistre toutes les caractéristiques finales de simulation dans un fichier de données. N'importe quel type de données, générées par la commande SOLVE est sauvé après la commande LOG. Si dans le programme il y a plusieurs commandes LOG, chaque fois le fichier log qui a été ouvert avant est fermé, et un nouveau fichier log est ouvert.

#### III.4.4.2 Solve (Résoudre)

L'instruction SOLVE suit l'instruction LOG. Elle effectue une solution pour un ou plusieurs points de polarisation.

#### III.4.4.3 Load et Save (chargement et sauvegarde)

L'instruction LOAD introduit, à partir d'un fichier existant, pour chaque point de polarisation les solutions précédentes en tant que proposition initiale.

L'instruction SAVE permet l'enregistrement de toutes les informations obtenues pour un nœud dans un fichier de sortie.

#### III.4.4.4 Analyse des résultats

EXTRACT : les commandes de ce type sont utilisées pour extraire les valeurs bien précises des paramètres des deux types des fichiers log ou structure.

TONYPLOT : les résultats et les informations obtenues par la simulation peuvent être affichés graphiquement avec tonyplot.

Une autre commande importante est BEAM, sa position est au niveau 4 des groupes de commande. BEAM indique un signal d'entrée optique sous forme d'un faisceau de lumière (mono ou multi-spectrale) collimatée. Le faisceau ainsi déclaré est allumé et utilisé par la commande SOLVE, dans ce cas le module Lumineus est active. Donc BEAM est utilisé pour simuler des courants sous lumière ou des réponses spectrales.

### III.5 Equations de bases de la physique des semi-conducteurs

De façon très succincte, nous pouvons dire que ce simulateur de dispositifs est basé sur la résolution simultanée de l'équation de Poisson et de l'équation de continuité. Il calcule à chaque instant et en tout point de l'espace en une suite d'éléments finis, la concentration des électrons et des trous et la valeur du potentiel électrostatique [35].

L'équation de Poisson montre une relation entre le potentiel et la densité des porteurs :

$$\varepsilon \Delta V = -q(p - n + N_D^- - N_A^+) - q(N_{tD}^+ - N_{tA}^-) \quad (\text{III.3})$$

Où  $\varepsilon$  est la constante diélectrique,  $V$  le potentiel,  $\Delta V$  le Laplacien du potentiel,  $q$  est la charge élémentaire d'électrons,  $N_D^+$  et  $N_A^-$  sont les concentrations des dopants donneurs et accepteurs ionisées,  $n$  et  $p$  sont les densités des porteurs.

$N_{tD}^+$  et  $N_{tA}^-$  sont les densités des pièges donneurs et accepteurs ionisées

L'évolution temporelle des densités de porteurs obéit aux équations de continuité pour les électrons et les trous :

$$\frac{dn}{dt} = G_n - U_n + \frac{1}{q} \text{div} \vec{J}_n \quad (\text{III.4.a})$$

$$\frac{dp}{dt} = G_p - U_p + \frac{1}{q} \text{div} \vec{J}_p \quad (\text{III.4.b})$$

Où  $G$  et  $U$  sont respectivement les taux de génération et de recombinaison des porteurs,  $j_n$  et  $j_p$  sont les densités de courant des électrons et des trous respectivement.

Les dérivations basées sur la théorie de transport de Boltzmann ont prouvé que la densité des courants dans les équations de continuité peut être définie par le modèle d'entraînement-diffusion. Les densités de courants sont exprimées en deux termes. Le premier correspond à l'entraînement des charges par le champ électrique, le second correspond à la diffusion des porteurs.

$$\vec{J}_n = qn\mu_n\vec{E} + qD_n\overrightarrow{\text{grad}n} \quad (\text{III.5.a})$$

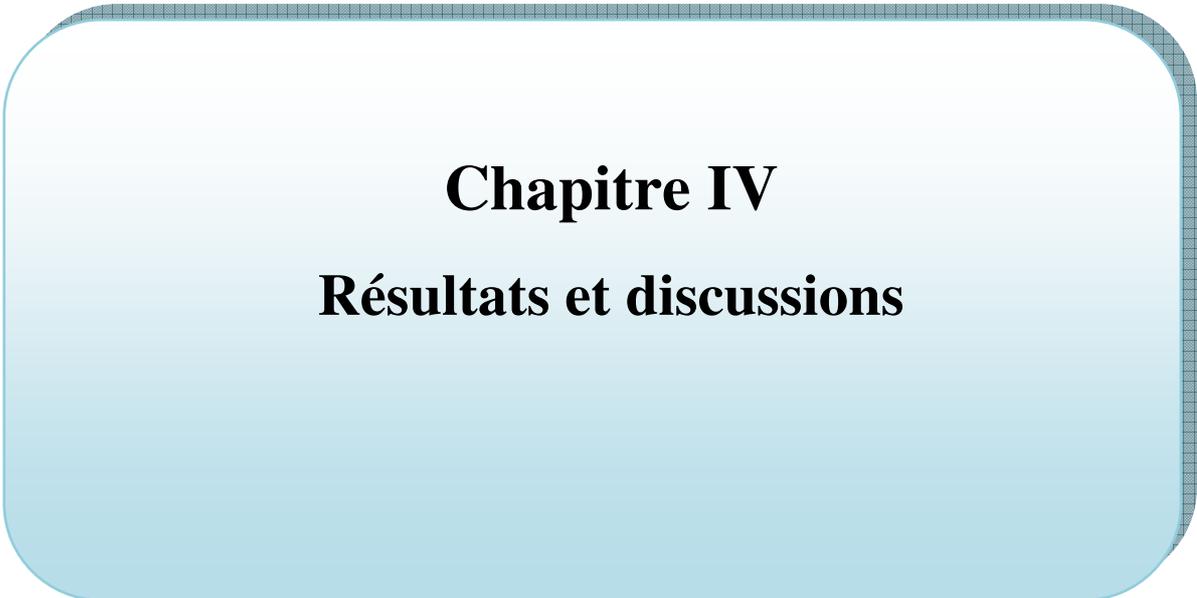
$$\vec{J}_p = qp\mu_p\vec{E} - qD_p\overrightarrow{\text{grad}p} \quad (\text{III.5.b})$$

$$\vec{E} = -\overrightarrow{\text{grad}V} \quad (\text{III.6})$$

Où :  $D_n$  et  $D_p$  sont les coefficients de diffusion.

$$D_n = \frac{kT}{q} \mu_n \quad (\text{III.7.a})$$

$$D_p = \frac{kT}{q} \mu_p \quad (\text{III.7.b})$$



**Chapitre IV**  
**Résultats et discussions**

## Chapitre IV : Résultats et discussions

---

### IV.1 Introduction

Dans ce chapitre nous allons étudier en première partie, les caractéristiques électriques, courant-tension (I-V) et capacité-tension (C-V) en polarisation directe et inverse pour une gamme de température (295-400K) d'une diode Schottky AuGeNi/p-Si/SBD. On a pu extraire les principaux paramètres tel que, le facteur d'idéalité, la barrière de potentiel et le coefficient de Richardson. Comparaison des résultats expérimentaux et simulation est menée. La deuxième partie est une étude par simulation des défauts créés par diffusion des métaux tel que l'Or, Platinium et Niobium dans un détecteur de particule à base d'une diode Schottky Au/p-Si/SBD et les comparées avec une étude expérimentale réalisée au département de physique de l'université Sud d'Afrique.

### IV.2 Diode schottky AuGeNi /p-Si

#### IV.2.1 Procédé de fabrication

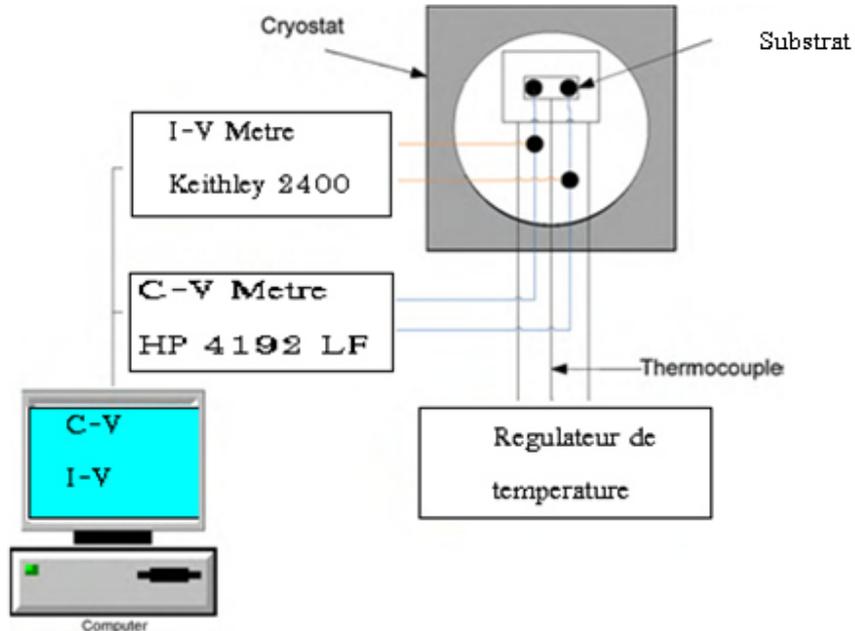
La diode AuGeNi /p-Si /SBD a été fabriquée sur une épaisseur de 375  $\mu\text{m}$ , orientation (100), avec une résistivité spécifique dans la gamme de 1-20  $\Omega\text{cm}$ , et le substrat Si de type p. Avant la métallisation, le substrat Si/p est trempé dans un solvant organique de  $\text{CHCl}_2$ ,  $\text{CH}_3\text{COOH}$  et  $\text{CH}_3\text{OH}$ , gravé dans une séquence de  $\text{H}_2\text{SO}_4$  et  $\text{H}_2\text{O}_2$ , HF 25% et une solution de  $\text{HNO}_3$ : 1HF: 40 $\text{H}_2\text{O}$ , 25% de HF et enfin trempé dans l'eau désionisée pendant un temps prolongé [36]. Le contact ohmique AuGeNi a été formé sur la surface arrière du substrat par dépôt de haute pureté d'alliage (99,999%) AuGeNi (de 83Au%, 12Ge, 5Ni%) à la chambre d'évaporation. Ce procédé de métallisation a été fait avec une épaisseur de 1500 Å à 380°C sous  $1,4 \times 10^{-6}$  mbar de vide et l'échantillon a été recuit pour 350°C pour obtenir un bon contact ohmique. Des contacts Schottky de 2 mm de diamètre au AuGeNi ont été évaporés sur la surface avant de l'échantillon à 45°C sous vide de  $6,2 \times 10^{-7}$  mbar par dépôt d'une grande pureté (99,999%) alliage de AuGeNi (de 83Au%, 12Ge, 5Ni%) avec une épaisseur de 1400 Å. Ainsi, le AuGeNi/p-Si/AuGeNi SBD était prête pour déterminer les propriétés électriques de la diode.

## Chapitre IV : Résultats et discussions

### IV.2.2 technique de mesure des caractéristiques électriques

Une station de travail Micromanipulateur, une Source de tension-courant programmable Keithley 2400 et un électromètre Keithley 614, ont été utilisés pour obtenir les caractéristiques I-V et C-V des diodes. L'échantillon a été chargé sur le mandrin du micromanipulateur. Une pompe à vide a été utilisée pour créer une aspiration afin de maintenir l'échantillon serré au mandrin.

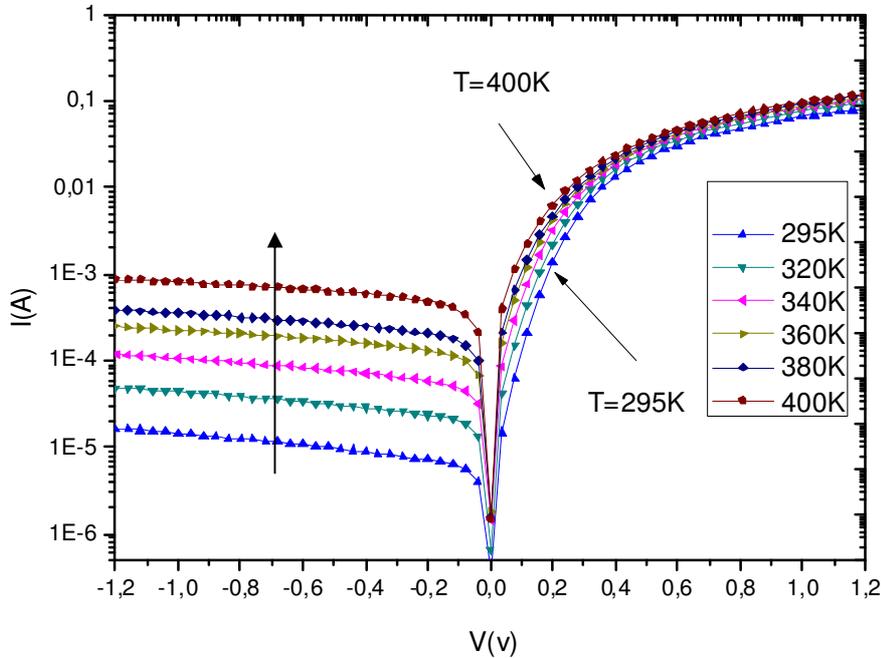
Les caractéristiques I-V de ces diodes ont été étudiés dans la polarisation inverse et directe à une tension variant jusqu'à 4V, avec un courant maximal de 100 mA imposé par les appareils utilisés pour éviter l'endommagement du dispositif sous test. Les mesures ont été effectuées dans une gamme de température de 295 à 400 K en utilisant un cryostat Janes vpf-475 à température contrôlée (Figure IV.1). Les Caractéristiques capacité-tension (C-V) de ce dispositif ont été réalisées par l'utilisation de HP4192A-LF, analyseur d'impédance (5Hz à 13 MHz). Un petit signal sinusoïdal de 40mV crête à crête d'un générateur d'impulsions de l'extérieur est appliqué à l'échantillon afin de satisfaire à l'exigence. Les ensembles de mesures électriques ont été effectuées en utilisant un micro ordinateur à travers une carte d'interface IEEE-488 dans le laboratoire « *photonics application and research* » université de Gazi a Ankara(Turque).



**Figure IV.1** : Le schéma de principe de système de mesure I-V et C-V

## Chapitre IV : Résultats et discussions

La Figure IV.2 représente les caractéristiques I-V-T expérimentaux. Cette figure montre que le courant augmente lorsque la température augmente en particulier le courant inverse.



**Figure IV.2 :** Nos résultats caractéristiques I-V-T expérimentaux de AuGeNi /p-Si /SBD

### IV.3 Simulation

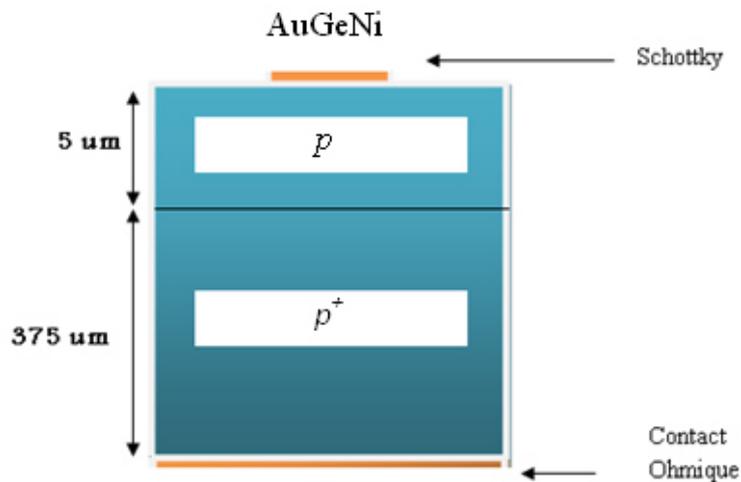
#### IV.3.1 Introduction

Pour étudier par simulation les caractéristiques électriques d'une diode Schottky AuGeNi/p-Si /SBD, un code de calcul a été développé en utilisant le simulateur ATLAS TCAD SILVACO pour simuler les caractéristiques courant- tension (I-V) et capacité-tension (C-V) en polarisation directe et inverse pour une gamme de température (295-400K). Différents paramètres sont extraits de ces caractéristiques tel que, courant de saturation  $I_0$ , facteur d'idéalité  $\eta$ , barrière de potentiel  $\phi_B$ , constante de Richardson  $A^*$  ainsi que les paramètres décrivant le modèle gaussien de la barrière de potentiel tel que:  $\phi_2$ ,  $\phi_3$ , la déviation standard  $\sigma_0$  caractérisant l'inhomogénéité seront également étudiées. Enfin une comparaison avec les résultats expérimentaux est présentée.

### IV.3.2 Description de la structure

Notre structure de référence que nous allons étudier par simulation est une diode Schottky réalisée sur un substrat en Si type  $p$ . Le contact métallique a été formé en (AuGeNi), comme le montre la figure IV.3.

Dans cette étude, nous utilisons une couche épitaxiale de type  $p$  avec une épaisseur approximative de  $5\ \mu\text{m}$  dopée à une concentration de  $2 \times 10^{15}\text{cm}^{-3}$  de Boron, sur un substrat  $p^+$  d'épaisseur de  $375\ \mu\text{m}$  dopé à une concentration de  $2 \times 10^{19}\text{cm}^{-3}$ .



**Figure IV.3:** structure de la diode Schottky AuGeNi/p-Si.

### IV.3.3 Modèles physiques utilisés

Une bonne simulation des caractéristiques électriques d'une structure donnée exige l'introduction des modèles physiques adaptés pour modéliser cette structure. Ce choix détermine le fonctionnement de la structure simulée et par conséquent ses performances. Il est donc primordial d'introduire les paramètres appropriés dans les modèles physiques considérés afin de prendre en compte tous les mécanismes qui entrent en jeu dans le fonctionnement de la structure étudiée.

La statistique de Boltzmann a été utilisée pour les populations de porteurs, les modèles de recombinaison considérés sont la recombinaison SRH(l'équation (III.2)), la recombinaison Auger utilisés pour simuler le fonctionnement de notre diode(Annexe C).

## Chapitre IV : Résultats et discussions

La mobilité des porteurs (électrons et trous) dépend aussi de la concentration de dopants du silicium et de la température. Dans ATLAS, plusieurs modèles sont implémentés pour prendre en compte cette dépendance. En ce qui nous concerne, nous avons utilisé le modèle de arora[37]. Avec ce modèle, les mobilités des électrons  $\mu_n$  et des trous  $\mu_p$  sont données par les formules suivantes :

$$\mu_{n0} = MU1N \left( \frac{T_L}{300} \right)^{ALPHAN} + \frac{MU2N \left( \frac{T_L}{300} \right)^{BETAN}}{1 + \frac{N}{NCRITN \left( \frac{T_L}{300} \right)^{GAMMAN}}} \quad \text{IV.1.a}$$

$$\mu_{p0} = MU1P \left( \frac{T_L}{300} \right)^{ALPHAP} + \frac{MU2P \left( \frac{T_L}{300} \right)^{BETAP}}{1 + \frac{N}{NCRITP \left( \frac{T_L}{300} \right)^{GAMMAP}}} \quad \text{IV.1.b}$$

N: la concentration total du dopant

Ce modèle est activé en spécifiant ARORA dans la déclaration MODÈLES. Les paramètres du modèle sont spécifiés dans la déclaration de la mobilité.

Les paramètres pour le silicium à T =300K sont présents dans l'annexe A [34].

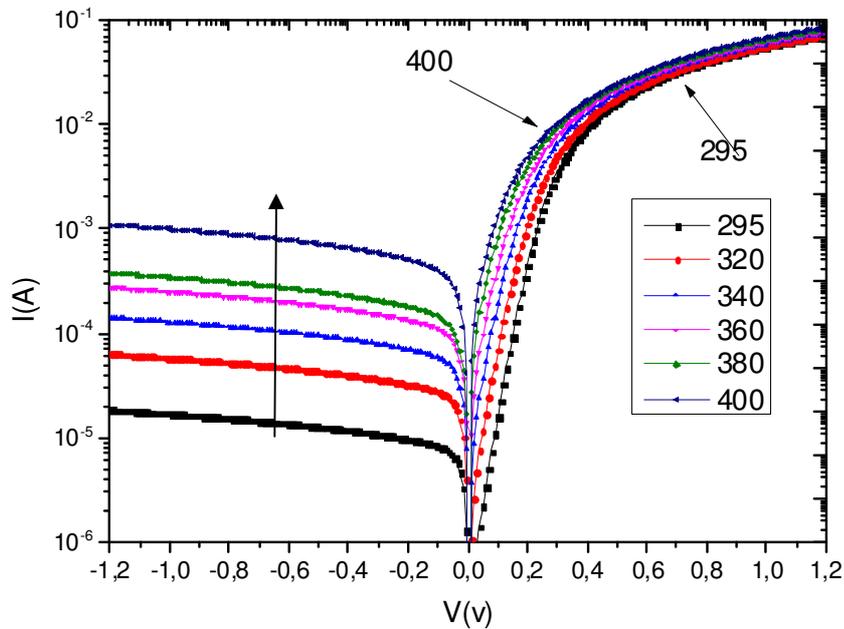
### IV.3.4 Caractéristique I-V-T de la structure AuGeNi /p-Si /SBD

Avant la modélisation de la diode Schottky suivant un modèle bien déterminé, nous avons calculé le rapport  $E_{00}/k_B T$  pour chaque température donnée et nous avons trouvé que ce rapport varie de  $12.8 \cdot 10^{-3}$  à température 295 K jusqu'à  $9.28 \cdot 10^{-3}$  à température 400 K. Ces valeurs sont très inférieures à 1. Alors le mécanisme prépondérant est l'effet thermoïonique, donc nous allons suivre ce modèle qui est décrit par l'équation (I.19). La figure IV.4 montre les caractéristiques I-V-T simulées selon le modèle thermoïonique homogène et la figure IV.5 montre celles simulées et mesurées. De ces tracés on observe plusieurs remarques :

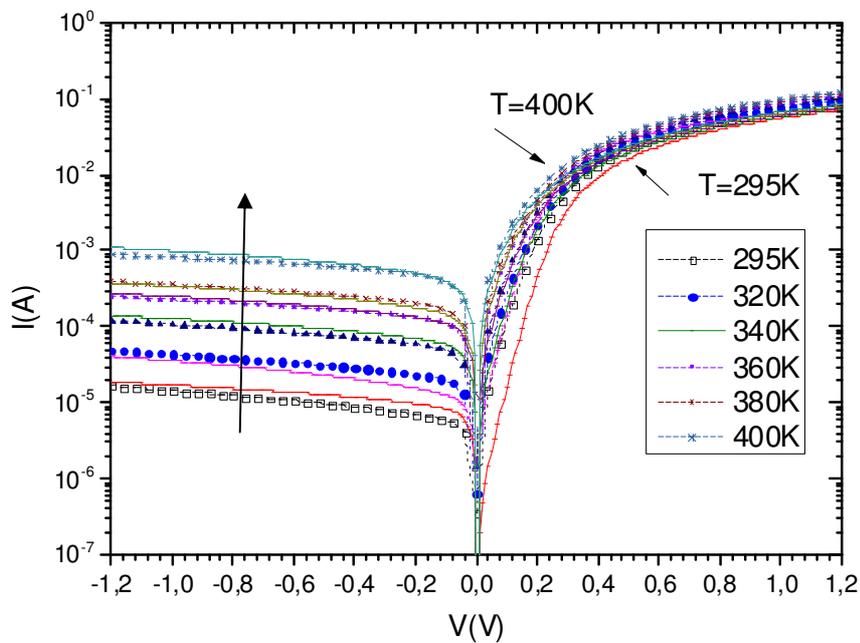
1. En polarisation directe les courbes I(V) présentent deux parties, la première semble linéaire où le mécanisme de transport est contrôlé par l'interface du contact et une deuxième qui présente une courbure où le courant est contrôlé par la résistance du contact.

## Chapitre IV : Résultats et discussions

2. Les caractéristiques I-V simulées suivant le modèle thermoïonique sont bien confondues avec celles mesurées (figure IV.5).
3. Le courant augmente lorsque la température augmente en particulier le courant inverse.



**Figure IV.4 :** Caractéristiques I-V-T simulées de AuGeNi /p-Si



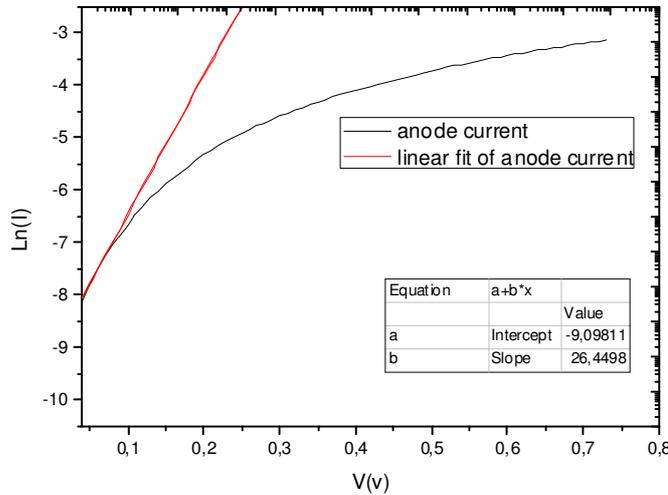
**Figure IV.5 :** Caractéristiques I-V-T simulées (ligne continu) et expérimentaux de AuGeNi/p-Si

### IV.3.5 Modèle de la barrière homogène

#### IV.3.5.1 Etude de la hauteur de barrière et facteur d'idéalité

##### IV.3.5.1.a Méthode d'extraction des paramètres

En utilisant l'équation (I.21), les valeurs du facteur d'idéalité  $\eta$  et le courant de saturation  $I_0$  sont généralement déterminées à partir de la pente et l'interception de la partie linéaire du courant direct de la courbe  $\ln(I)=f(V)$  respectivement, La méthode est présentée sur la Figure IV.6.



**Figure IV.6:** Détermination de  $I_0$  et du facteur d'idéalité  $\eta$  pour  $T=400K$ .

De la même manière, on détermine  $I_0$  et  $\eta$  pour chaque température.

$$n = \frac{q}{kT} \frac{dV}{d(\ln I)} = \frac{q}{kT} \frac{1}{b} \quad (IV. 2)$$

$$I_0 = \exp(a) \quad (IV. 3)$$

La hauteur de la barrière Schottky peut être calculée après que  $I_0$  soit déterminé à partir de l'équation (I.20).

##### IV.3.5.1.b Effet de la température

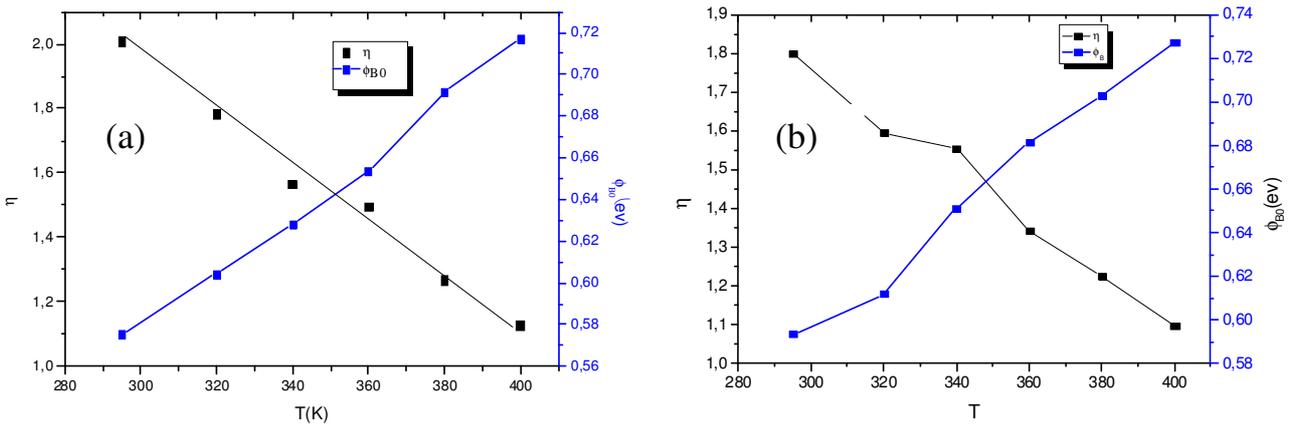
Le tableau IV.1 résume les résultats d'extraction des paramètres et la figure IV.7 représente la variation de la hauteur de barrière et le facteur d'idéalité mesurés et simulés en fonction de la température. L'augmentation de la température augmente la hauteur de barrière, cette

## Chapitre IV : Résultats et discussions

augmentation n'a pas une explication dans le cadre du modèle homogène, c'est-à-dire ce modèle ne donne pas la relation qui relie la hauteur de barrière avec la température. La hauteur de barrière ( $\Phi_B$ ) varie de 0.58 eV à 0.72eV. Par contre le facteur d'idéalité diminue avec l'augmentation de la température, l'inhomogénéité est peut-être responsable de la déviation du facteur d'idéalité à la valeur idéale 1.

**Tableau IV.1 :** Les valeurs obtenues du courant de saturation, facteur d'idéalité et la hauteur de barrière de potentiel.

T (°K)	$I_0 \times 10^{-05}$ (A)		$\eta$		$\Phi_{B0}$ (eV)	
	exp	sim	exp	sim	exp	sim
295	2.78	0.65	2.009	1.799	0.556	0.593
320	4.23	2.4	1.785	1.594	0.596	0.611
340	5.77	2.6	1.568	1.555	0.627	0.651
360	9.23	3.8	1.496	1.34	0.653	0.681
380	9.80	7.04	1.270	1.225	0.691	0.702
400	14.7	11.2	1.128	1.095	0.717	0.727

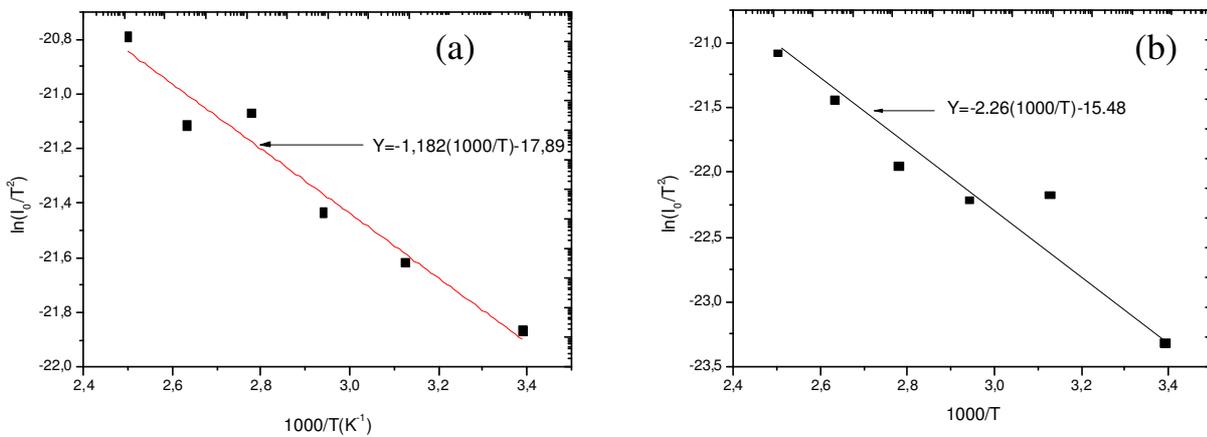


**Figure IV.7:** Variation de la barrière  $\Phi_{B0}$  et du facteur d'idéalité  $\eta$  en fonction de la température de la diode AuGeNi /p-Si ;a) expérimentale, b) simulée.

### IV.3.5.2 Plot de Richardson

La variation de  $\ln\left(\frac{I_0}{T^2}\right)$  en fonction de  $1/T$  est connue sous le nom de plot de Richardson (Figure IV.8). A partir cette courbe on peut déterminer l'énergie d'activation  $\phi_{B0}$  et la constante de Richardson  $A^*$ , selon la relation suivante qui est déduite de l'équation (I.20).

$$\ln\left(\frac{I_0}{T^2}\right) = \ln(AA^*) - \left(\frac{q}{kT}\right)\phi_{B0} \quad (IV.4)$$



**Figure IV.8:** Plot de Richardson de  $\ln(I_0/T^2)$  en fonction  $1000/T$ , a) nos résultats expérimentaux, b) résultats de simulation.

Le tracé est une droite qui permettrait de déterminer  $A^*$  et  $\phi_{B0}$  à partir de l'intersection avec l'axe de l'inverse de température et la pente de cette droite respectivement. Le tableau IV.1 résume ces deux quantités extraites de la structure AuGeNi/p-Si simulée et expérimentale.

**Tableau IV.2 :** Constante de Richardson et barrière de potentiel(modèle homogène)

	Résultats expérimentaux	Résultats de simulation
$A^*$ ( $\text{Acm}^{-2}\text{K}^{-2}$ )	$A^*=0.54 \times 10^{-6}$	$A^*=6.02 \times 10^{-6}$
$\phi_{B0}$ (eV)	$\phi_{B0}=0.135$	$\phi_{B0}=0.194$

## Chapitre IV : Résultats et discussions

Les valeurs de  $\phi_{B0}$  et  $A^*$  sont faibles, en particulier les valeurs de la constante de Richardson ( $A^*$ ) sont très faibles par rapport à la valeur théorique  $32 A/K^2cm^2$ [38]. Cette déviation de la valeur de la constante de Richardson peut être due à l'inhomogénéité de la barrière de potentiel du contact Schottky[39-43].

### IV.3.5 3 Détermination de la hauteur de barrière à partir des caractéristiques C-V-T

La hauteur de barrière Schottky peut-être obtenue à partir d'une mesure capacitive. Comme nous avons vu au premier chapitre, La capacité de la zone de déplétion est en fonction de la polarisation inverse suivant la relation suivante :

$$C = A \sqrt{\frac{q\varepsilon_s\varepsilon_0 N_A}{2(V_{bi}+V)}} \quad (IV.5)$$

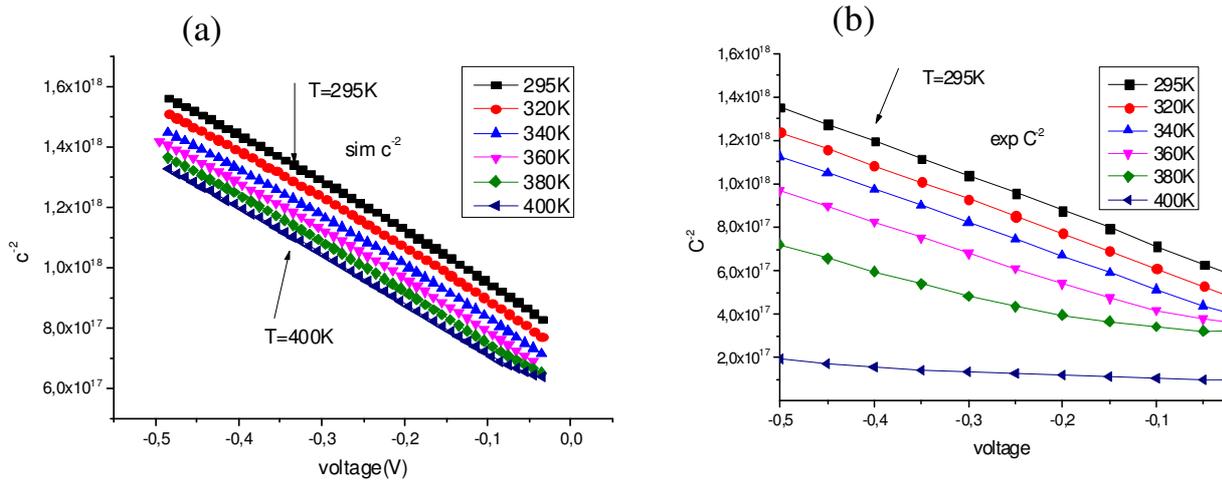
$$C^{-2} = \frac{2}{A^2} \left( \frac{V_{bi}+V}{qN_A\varepsilon_s\varepsilon_0} \right) \quad (IV.6)$$

Le tracé de  $C^{-2}$  en fonction de  $V$  doit être une droite, la pente de cette droite permet de déterminer la concentration du dopage  $N_A$  et l'extrapolation à  $C^{-2}(V)=0$  permet de déterminer la valeur de l'intersection  $V_{bi}$  de cette droite avec l'axe du voltage. La hauteur de barrière Schottky se déduit de la relation suivante [44] :

$$\phi = \frac{KT}{q} \ln \left( \frac{N_V}{N_A} \right) + V_{bi} \quad (IV.7)$$

La figure IV.9 représente les courbe de  $C^{-2}$  en fonction de  $V(f=1Mhz)$  simulées et expérimentaux. Ces tracés sont des lignes droites en accord avec l'équation (IV.7). Nos valeurs de la hauteur de barrière de potentiel et le taux de dopage  $N_A$  sont résumées dans le tableau IV.2.

## Chapitre IV : Résultats et discussions



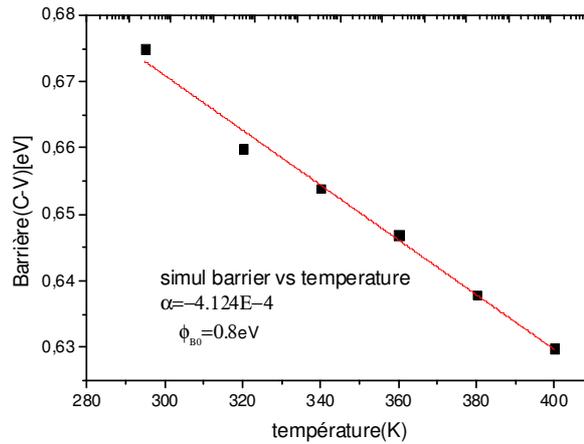
**Figure IV.9** : Caractéristiques  $C^{-2}(V)$  de la diode AuGeNi /p Si, a)simulés, b)expérimentaux

**Tableau IV.3** : Les valeurs obtenues de la hauteur de barrière de potentiel et le taux de dopage

$T(^{\circ}\text{K})$	$\Phi_{B0(\text{C-V}) \text{ sim}}[\text{eV}]$	$N_{a(\text{sim})} \times 10^{15} [\text{cm}^{-3}]$	$\Phi_{B0(\text{C-V}) \text{ exp}}[\text{eV}]$	$N_{a(\text{exp})} \times 10^{15} [\text{cm}^{-3}]$
295	0.675	7.94	0.53	8.07
320	0.660	8.0	0.50	8.39
340	0.654	8.10	0.46	8.56
360	0.647	8.16	0.41	9.05
380	0.638	8.20	0.38	9.89
400	0.630	8.21	0.32	15.2

Le tableau IV.2 révèle une grande différence entre les hauteurs de barrière de potentiel mesurées par la méthode I-V et la méthode C-V. Nous avons constaté à partir des données  $C^{-2}$ -V que la hauteur de barrière  $\Phi_{B0}$  (C-V) diminue presque linéairement avec la température (figure IV.10) et peut être exprimé par :

$$\Phi_B(\text{C-V}) = \Phi_{B0}(T = 0 \text{ K}) + \alpha T \quad (\text{IV.8})$$



**Figure IV.10** : la dépendance en fonction de la température de la hauteur de la barrière à partir de C-V pour AuGeNi /p-Si SBD.

La hauteur de barrière à la température du zéro absolu,  $\Phi_{B0}$ , et le coefficient de la hauteur de la barrière de température  $\alpha$ , sont obtenues à partir de la courbe de la figure IV.10, leurs valeurs sont 0,8eV et  $-4.12 \times 10^{-4} \text{ eV K}^{-1}$ , respectivement. Cette valeur négative du coefficient de température de la barrière est en très bon accord avec le coefficient de température de la bande d'énergie interdite du silicium ( $-4.73 \times 10^{-4} \text{ eV K}^{-1}$ )[45].

L'écart entre BHs apparent obtenus à partir de (I-V-T) et (C-V-T) a été expliqué par l'introduction d'une distribution spatiale de BHs dues à des inhomogénéités BH qui se produisent à l'interface métal/Si et en tenant compte de la microstructure de l'interface métal/semi-conducteurs où l'arrangement atomique donne une importance dans la formation de barrière Schottky [46].

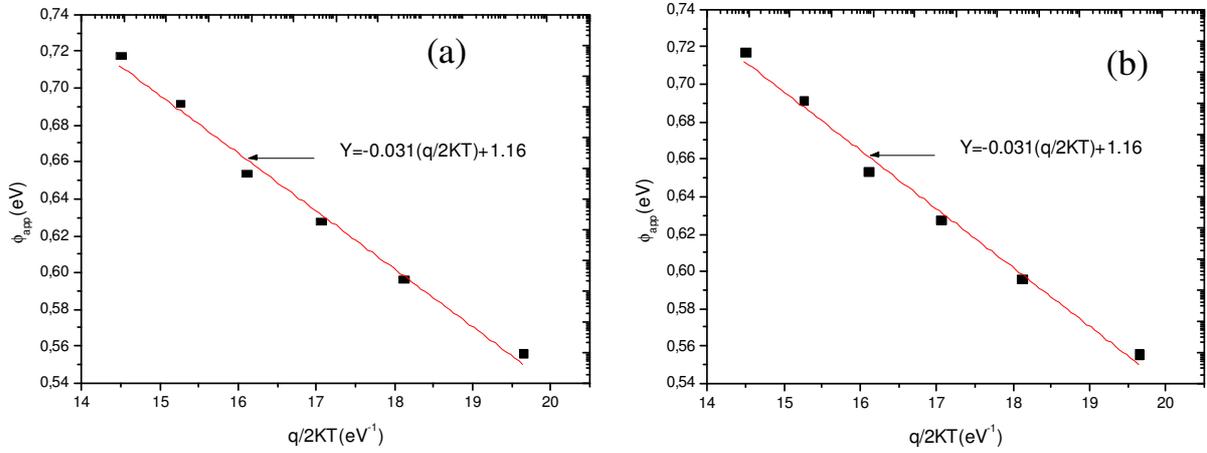
### IV.3.6 Modèle de la barrière Schottky inhomogène

#### IV.3.6.1 Barrière moyenne et déviation standard

La figure IV.11 représente la variation de la barrière de potentiel en fonction de  $1/2k_B T$  pour la structure AuGeNi /p-Si simulée et expérimentale. Ces tracés sont des lignes droites qui sont en bon accord avec l'équation théorique du modèle inhomogène proposé par Werner et Guttler [41, 43, 47,48].

## Chapitre IV : Résultats et discussions

$$\phi_{B\ app} = \bar{\phi}_{B0} - \frac{q\sigma_0^2}{2kT} \quad (IV.9)$$



**Figure IV.11** : Hauteur de barrière en fonction de  $1/2k_B T$ . a) expérimentale, b) simulée

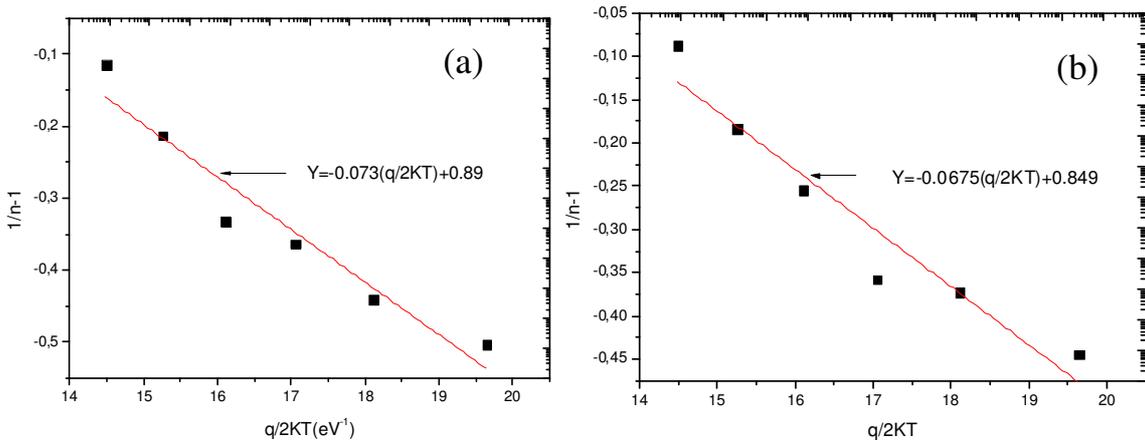
L'intersection avec l'axe des y et la pente de ces droites nous permettent de déterminer la barrière de potentiel moyenne ( $\bar{\phi}_{B0}$ ) et la déviation standard ( $\sigma_0$ ) à la tension nul. Le tableau IV.3 résume les différentes valeurs de la barrière moyenne et de la déviation standard.

**Tableau IV.4** : Barrières moyennes et déviations standard extraites de la structure AuGeNi /p-Si SBD.(modèle inhomogène).

	Résultats expérimentaux	Résultats de simulations
$\bar{\phi}_{B0}$ (eV)	1.16	1.116
$\sigma_0$ (V)	0.176	0.164

Le tracé de  $(\frac{1}{n} - 1)$  en fonction de  $q/2kT$  pour la structure AuGeNi /p-Si est représenté à la figure IV.12. La courbe représente une ligne droite, qui est en accord avec celle proposé par Werner.

$$\frac{1}{n_{app}} - 1 = -\rho_2 + \frac{q\rho_3}{2kT} \quad (IV.10)$$



**Figure IV.12:** La variation de  $(1/n - 1)$  en fonction de  $q/2KT$  de la diode Schottky selon la distribution gaussienne. a) expérimentale, b) simulée

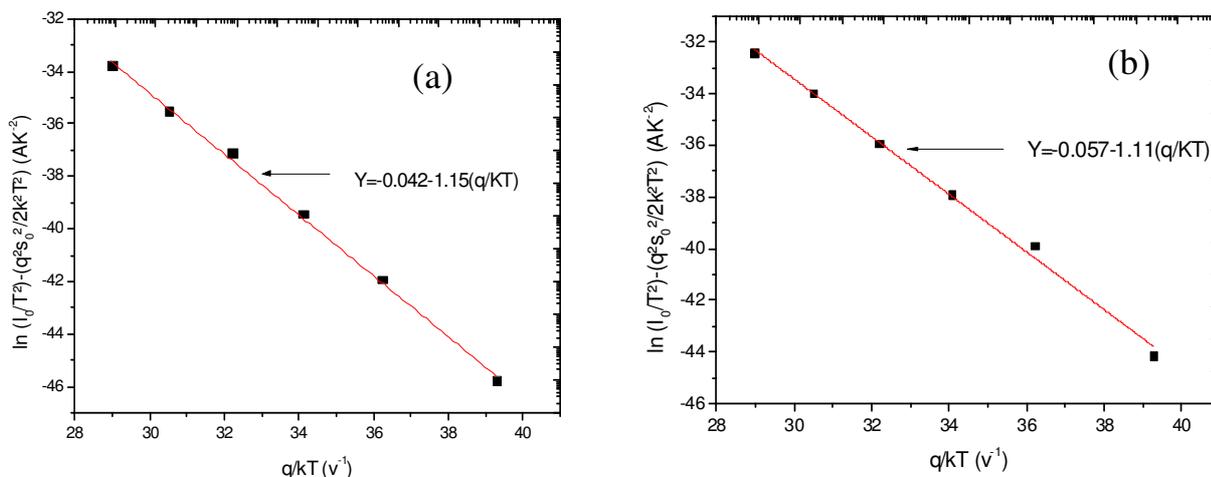
L'analyse de ces courbes donne les valeurs des coefficients de tension suivantes :  $\rho_2 = -0.890$  et  $\rho_3 = 0.073$  V pour les résultats expérimentaux, et  $\rho_2 = -0.849$  et  $\rho_3 = 0.0675$  V pour la structure simulée.

### IV.3.6.2 Plot de Richardson modifié

En substituant l'équation (IV.7) dans l'équation (IV.2) on obtient la relation suivante :

$$\ln\left(\frac{I_0}{T^2}\right) - \left(\frac{q^2 \sigma_0^2}{2k_B^2 T^2}\right) = \ln(AA^*) - \left(\frac{q\bar{\phi}_{B0}}{kT}\right) \quad (IV.11)$$

La variation de  $\ln\left(\frac{I_0}{T^2}\right) - \left(\frac{q^2 \sigma_0^2}{2k_B^2 T^2}\right)$  en fonction de  $(q/kT)$  est le tracé de Richardson modifié, qui devrait être aussi une ligne droite. L'extrapolation et la pente de cette droite nous donne la valeur de  $A^*$  et  $\bar{\phi}_{B0}$  respectivement. La figure IV.13 montre clairement une excellente linéarité dans tout le domaine de température.



**Figure IV.13:** Plot de Richardson modifié de  $\ln(I_0/T^2) - (q^2\sigma_0^2/2k^2T^2)$  en fonction de  $(q/kT)$ . a) expérimentale, b) simulé

Le tableau IV.4 résume nos valeurs de  $\bar{\Phi}_{B0}$  et  $A^*$  obtenues à partir des courbes  $\ln(I_0/T^2) - (q^2\sigma_0^2/2k^2T^2)$  en fonction de  $(q/kT)$ .

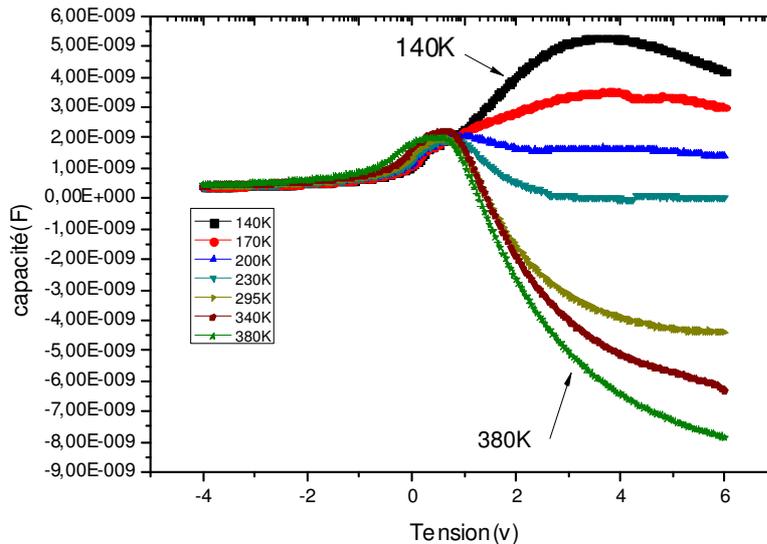
**Tableau IV.5:** Barrières moyennes et valeurs de la constante de Richardson(modèle inhomogène) .

	Résultats expérimentaux	Résultats de simulation
$A^* (Acm^{-2}K^{-2})$	30.53	33.74
$\bar{\Phi}_{B0}(eV)$	1.15	1.11

On remarque que la valeur de la barrière moyenne  $\bar{\Phi}_{B0}$  obtenue à partir de tracé de Richardson modifié) est égale à celle obtenue précédemment par le tracé de  $\Phi_B = f(q/2KT)$  de la figure IV.11 . De plus la nouvelle valeur de la constante de Richardson est pratiquement proche à la valeur théorique du Si type p ( $A^* = 32 A/K^2cm^2$ ).

### IV.4 Analyse de la capacité (C-V-T)

Les courbes C-V-T en polarisation directe montrent un comportement anormal qui change à des valeurs négatives après une certaine tension de polarisation, les valeurs de C diminuent considérablement lorsque la température augmente (figure IV.14)

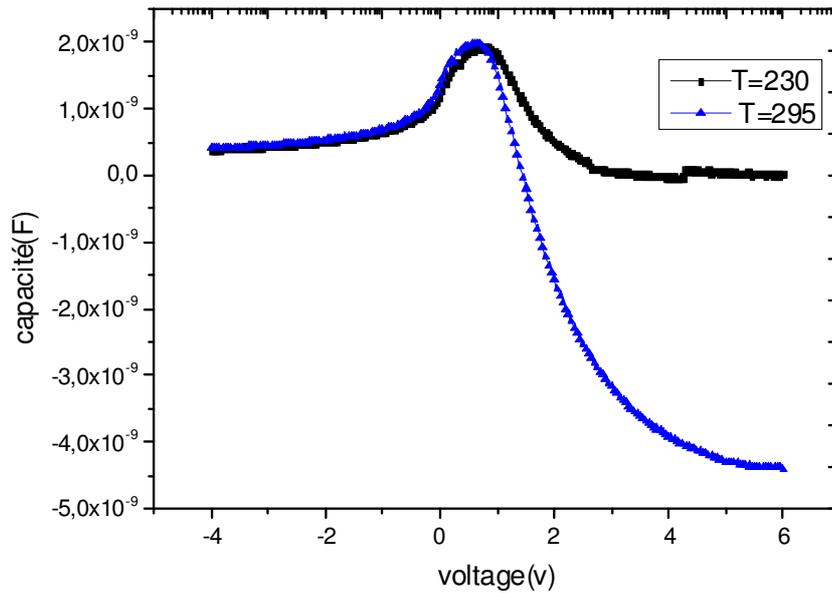


**Figure IV.14:**Caractéristiques C-V-T expérimentales de AuGeNi /p-Si /SBD(f=1Mhz)

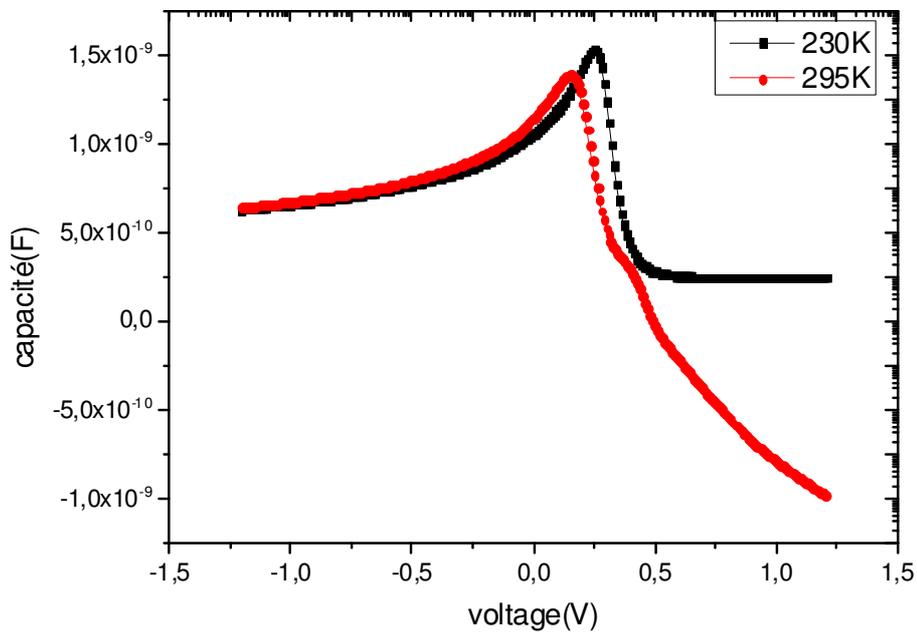
La figures IV.15 et IV.16 présentent deux courbes de capacité expérimentaux et simulation l'une et positive et l'autre négative pour deux température à T=295K et T=230K.

Cette observation de la capacité négative est importante Car elle implique qu'une augmentation de tension de polarisation produit une diminution de la charge sur les électrodes [49]. On pense que la capacité négative qui est causée par l'injection des porteurs minoritaires peut être observée seulement pour une tension de polarisation positive appliqué.

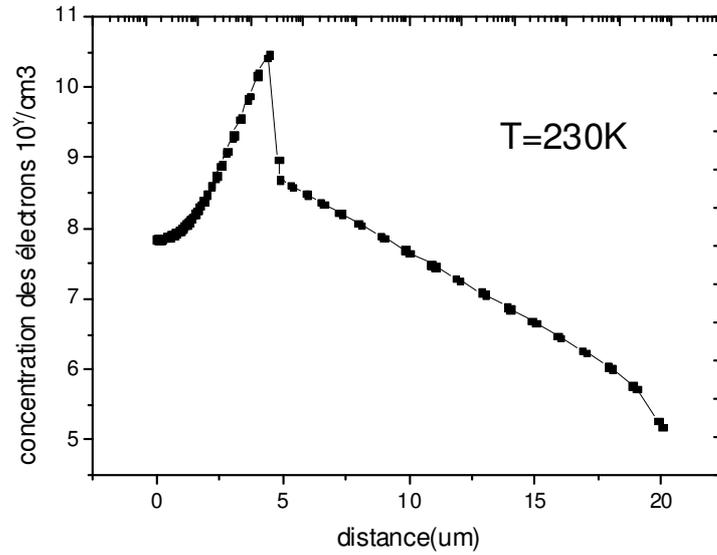
On remarque que la concentration des électrons dans la figure IV.17 (capacité négative pour T=295K a une polarisation de 1V) est plus grande que la concentration des électrons pour la capacité positive pour T=230K pour une polarisation de 1V (figure IV.18).



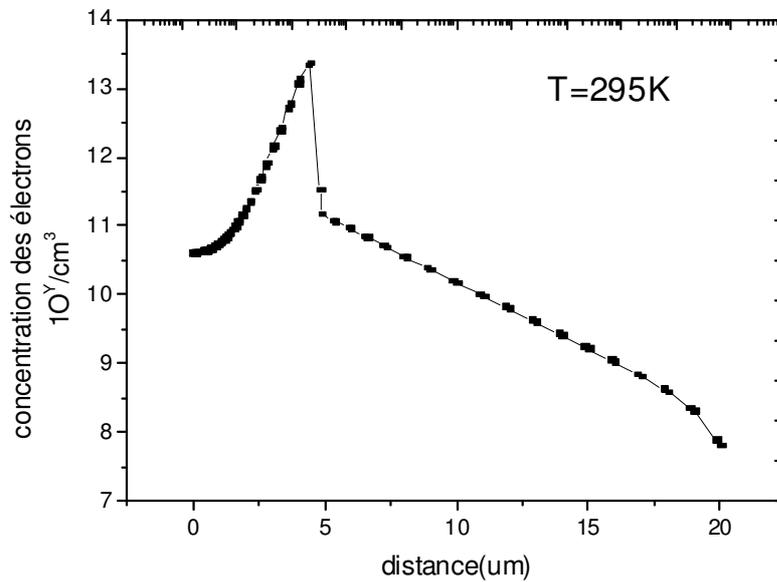
**Figure IV.15 :** Caractéristiques C-V expérimentaux de AuGeNi /p-Si /SBD pour deux températures( $T=295$ K et  $T=230$ K)



**Figure IV.16:** Caractéristiques C-V simulées de AuGeNi/p-Si/SBD pour deux températures( $T=295$ K et  $T=230$ K)



**Figure IV.17:** La concentration des électrons pour la capacité positive (T=230K) à V=1V



**Figure IV.18:** La concentration des électrons pour la capacité négative (T=295K) à V=1V

### IV.5 L'effet des pièges sur le détecteur de particule a base d'une diode Schottky Au /p-Si

#### IV.5.1 Introduction

Plusieurs façons d'améliorer la résistance du détecteur ou la dureté à l'irradiation. Parmi ceux-ci le dopage par de prétendus éléments tueurs du temps de vie tels que l'or, le platine et le niobium. Ces éléments créent des niveaux d'énergie dans le gap, de sorte que leurs effets est de réduire la durée de vie des porteurs minoritaires et d'augmenter la résistivité du semi-conducteur[50]

#### IV.5.2 Dopage par des métaux

Le dopage du silicium avec des métaux a été initialement réalisé pour réduire le temps de commutation de dispositifs électroniques [51]. L'or était préféré principalement parce que dans le silicium, il agit comme un tueur de temps de vie. Puisque la durée de vie des porteurs est réduite dans ce cas, il résulte que le matériau serait dans un état de relaxation. Ainsi, le dopage par l'Or était initialement effectué de manière à réduire la durée de vie mais plus tard, il était fait pour supprimer les effets de l'exposition du dispositif à rayonnement aussi bien .Cependant, les métaux dans le silicium créent aussi les niveaux de défauts [52] dont certains peuvent avoir des effets similaires à ceux qui sont créés par l'exposition au rayonnement. Ces défauts généralement rendre le matériau inutile tandis que d'autres peuvent rendre le matériau utile pour la fabrication de détecteurs de particules [53]. Par conséquent, il est important que la quantité et la nature des métaux introduits dans le silicium sont commandés de telle sorte que les propriétés souhaitées sont améliorée tandis que les indésirables sont minimisés. Cela peut être effectué en étudiant les effets de divers métaux introduits dans le silicium.

Dans ce travail, les diodes Schottky ont été fabriqués sur métal-silicium non dopé et le métal-silicium-dopé. Les métaux utilisés sont : l'or, le platine et le niobium. La diffusion de l'or et platine dans le silicium se produit par les mécanismes interstitiels et vacance. Où par ces métaux créent des niveaux de défauts dans la bande d'énergie interdite du silicium. L'Or dans le silicium crée trois différents niveaux de défauts à  $E_c-0.34\text{eV}$ , à  $E_c-0.55\text{eV}$  et à  $E_v+0.34\text{eV}$  [54]. Puisque l'or crée un centre de recombinaison forte dans le silicium [52], il est attendu que, après le dopage par l'or, la conductivité du matériau sera réduite parce que les porteurs mobiles deviennent recombines. Le Platine aussi en silicium crée trios différents niveaux de défauts à  $E_c-0.23\text{eV}$ , à  $E_c-0.52\text{eV}$  et à  $E_v+0.36\text{eV}$  [55]

## Chapitre IV : Résultats et discussions

---

Le niveau de donneur dans la moitié inférieure de la bande d'énergie interdite est plus actif que le niveau d'accepteur dans la moitié supérieure [52]. Il est donc attendu après le dopage par le platine, le niveau donneur compense n'importe quels porteurs majoritaires, la conductivité du matériau sera réduite.

Le dopage du silicium par le niobium crée trois différents niveaux de défauts à  $E_c-0.29\text{eV}$ , à  $E_c-0.58\text{eV}$  et à  $E_v+0.16\text{eV}$  [56]. Le très faible niveau  $E_v+0.16\text{eV}$  devrait compenser tous porteurs majoritaires. Il est donc prévu qu'après le dopage par le niobium la conductivité du matériau sera réduite parce que les porteurs majoritaires sont compensés.

L'irradiation par des neutrons de 1 MeV crée également des niveaux de défauts dans le silicium. Ceux-ci sont situés à  $E_c-0.42\text{ eV}$ , à  $E_c-0.55\text{eV}$  et à  $E_v+0.36\text{ eV}$  [57]. On prévoit que le rayonnement aura les mêmes effets sur les propriétés du silicium comme les métaux, principalement parce que tout les métaux créent le défaut situé près de la moitié du gap ( $0.56\text{eV}$ ).

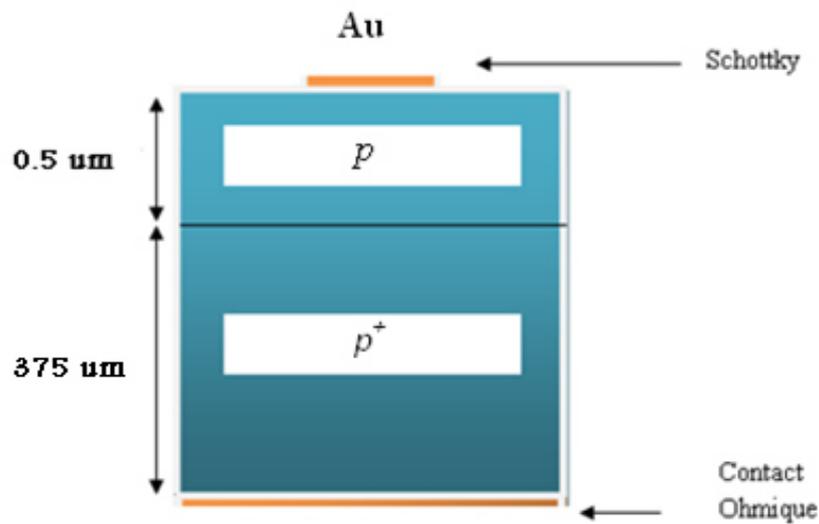
### IV.5.3 Simulation de la diode

Dans ce travail, on a simulé une diode Schottky qui était fabriqué et étudié par MOLOI[51], dont la structure est présentée dans la figure IV.19, nous avons utilisé une couche épitaxiale de silicium avec une épaisseur approximative de  $0.5\text{ }\mu\text{m}$  dopée à une concentration en accepteurs de  $2 \times 10^{15}\text{cm}^{-3}$ , et substrat  $p^+$  d'épaisseur de  $375\text{ }\mu\text{m}$  dopée à une concentration de  $2 \times 10^{18}\text{cm}^{-3}$ .

Les modèles physiques utilisés sont(Annexe C) :

- La dépendance de la mobilité en fonction de la concentration des porteurs, on introduit le modèle CONMOB
- la dépendance de la mobilité en fonction de la température par ARORA
- Le facteur de recombinaison par SRH
- La distribution Boltzmann
- On introduit l'instruction IMPACT SELB pour simuler le phénomène de claquage.

La polarisation inverse est utilisée pour déterminer le courant de fuite et la tension de claquage. La polarisation directe est utilisée pour extraire le courant de saturation, le facteur d'idéalité et la hauteur de la barrière [44].

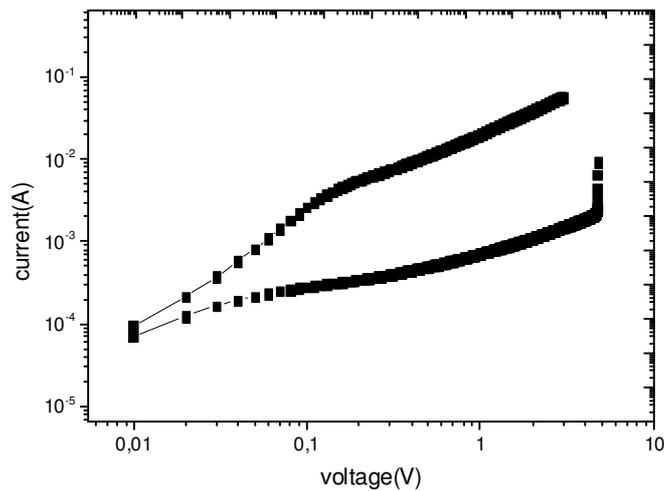


**Figure IV.19:** structure de la diode Schottky Au/p-Si.

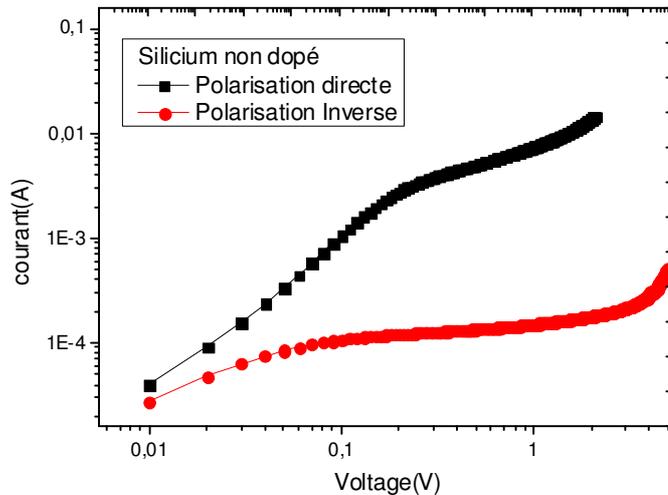
### IV.5.4 Caractéristique (I –V) de la simulation

#### IV.5.4.1 Diode non dopée

Les caractéristiques courant-tension d'une diode Schottky Au/p-Si non dopée simulée et fabriquée est présentée dans la figure IV.20 et IV.21



**Figure IV.20 :** Caractéristique I-V de Au/p-Si /SBD non dopé simulé



**Figure IV.21** : Caractéristique I-V de Au /p-Si /SBD non dopé fabriqué[51].

La figure IV.20 représente les caractéristiques logarithmiques I-V en polarisation inverse et en directe pour le silicium non dopé. En polarisation inverse, une tension de claquage est observée presque à 4V.

Les valeurs calculées du courant de saturation, le facteur d'idéalité et la hauteur de barrière Schottky pour cette diode, on suivant les étapes cités auparavant sont données en tableau IV.7

**Tableau IV.6** : Les paramètres extraits à partir des caractéristiques I-V pour la diode non dopée(simulée).

Paramètre	Diode non dopée
$I_0(\mu A)$	328.82
H	1.34
$\Phi_B(eV)$	0.51

### IV.5.4.2 Diode dopée par l'Or

Les figures IV.22 et IV.23 représentent les caractéristiques I-V pour la diode simulée et fabriquée sur silicium dopé par l'Or.

Les défauts introduits dans cette simulation sont :

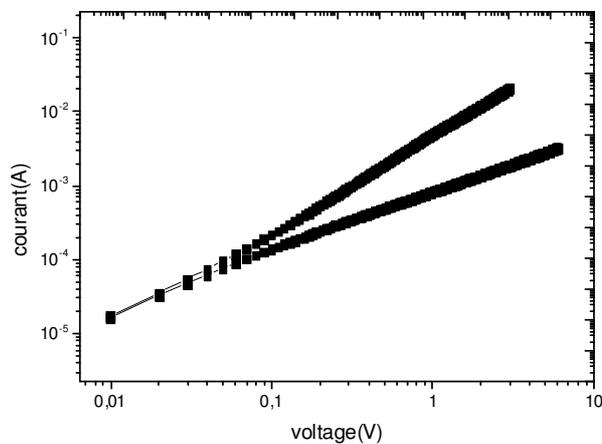
## Chapitre IV : Résultats et discussions

trap e.level=0.55 acceptor density=5.0e16 degen=1 sign=8.3e-17 sigp=6.5e-15

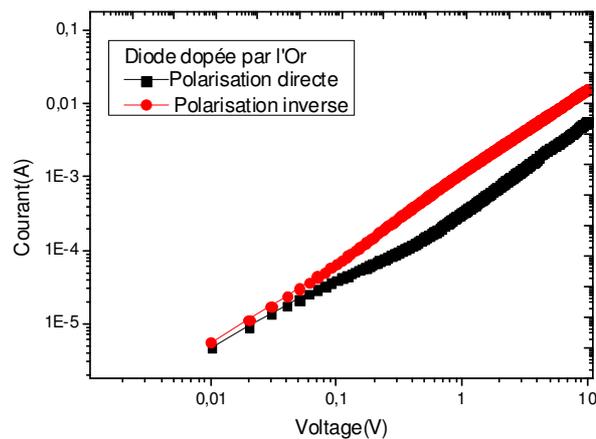
trap e.level=0.34 acceptor density=5.0e16 degen=1 sign=8.3e-17 sigp=6.5e-15

trap e.level=0.34 donor density=5.0e16 degen=1 sign=3.0e-15 sigp=3.4e-16

La courbe montrant une différence marquée de celle de la Figure IV.20, en particulier la caractéristique de polarisation inverse, le courant augmente linéairement avec la tension et ne montre pas une tendance vers la saturation ou le claquage. Il est prévu que pour une tension plus grande, cette tendance ne changera pas. En polarisation directe, le courant augmente linéairement avec la tension.



**Figure IV.22** : Caractéristique I-V simulée de Au /p-Si /SBD dopé par l'Or.



**Figure IV.23** : Caractéristique I-V expérimentale de Au /p-Si /SBD dopée par l'Or[51].

## Chapitre IV : Résultats et discussions

Une autre observation de la figure, est que les deux courbes directe et inverse sont rapprochées les uns aux autres, surtout à basses tensions. Ce sont des caractéristiques typiques de diodes fabriqués sur matériau de relaxation [58]. Ainsi, l'or transforme le silicium de type p en un matériau de relaxation comme il le fait pour le silicium de type n.

Le tableau IV.6 montre les paramètres extraits du courant direct de la diode dopée par l'Or(simulée).

**Tableau IV.7 :** Les paramètres extraits à partir des caractéristiques I-V pour la diode dopée par l'Or

Paramètre	Diode dopée par l'Or
$I_0(\mu A)$	31.04
H	1.60
$\Phi_B(eV)$	0.75

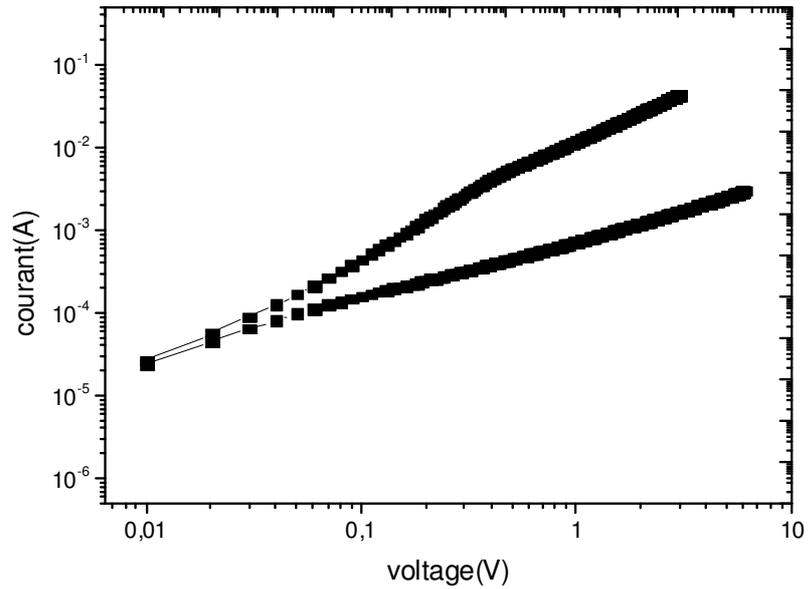
### IV.5.4.3 Diode dopée par le Platine

Les figures IV.24 et IV.25 montrent les caractéristiques I-V pour la diode simulée et fabriquée sur silicium dopée par le platine.

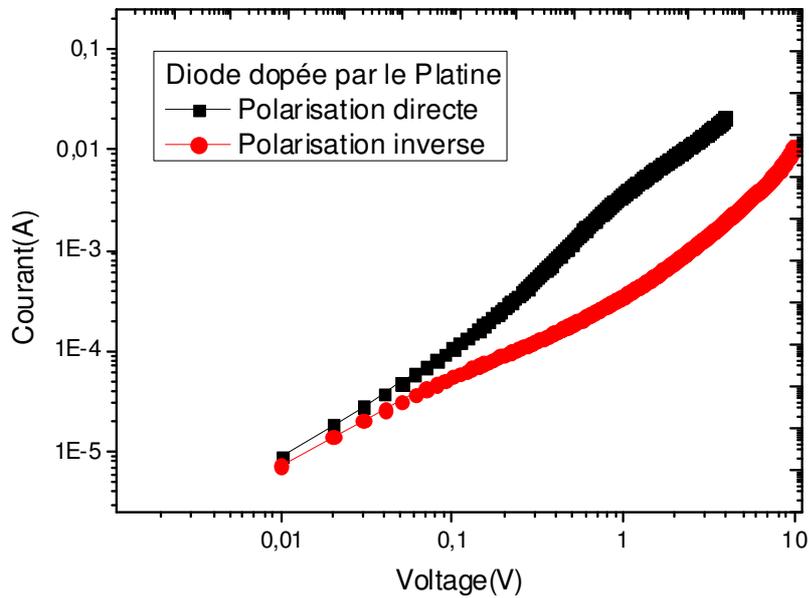
Les défauts introduits dans cette simulation sont :

```
trap e.level=0.52 acceptor density=1.0e16 degen=1 sign=4.5e-15 sigp=4.5e-14
trap e.level=0.23 acceptor density=1.0e16 degen=1 sign=5.3e-15 sigp=5.3e-14
trap e.level=0.36 donor density=1.0e16 degen=1 sign=3.4e-15 sigp=3.4e-16
```

Ce qui est remarquable est que le courant inverse qui est observé augmenter et la tension de claquage non observable comme vue dans la diode dopée par l'Or. Ces résultats montrent que le platine dans le silicium rend également le courant devenu Ohmique. Dans la Figure IV.24 et IV.25 l'écart entre les deux courants directe et inverse à faible tension est presque égale à l'écart observé sur la Figure IV.22 et IV.23 de la diode dopée par l'Or [58]. Ces résultats montrent que le platine dans le silicium a des effets similaires à l'Or.



**Figure IV.24** : Caractéristique I-V de Au /p-Si /SBD dopé par Pt simulée



**Figure IV.25** : Caractéristique I-V expérimentale de Au /p-Si /SBD dopée par le Pt[51].

## Chapitre IV : Résultats et discussions

Les paramètres extraits pour la diode simulée dopée par le platine sont présentés dans le tableau IV.8.

**Tableau IV.8** : Les paramètres extraits à partir des caractéristiques I-V pour la diode dopée par le platine

Paramètres	Diode dopée par le Platine
$I_0(\mu A)$	45.7
H	1.40
$\Phi_B(eV)$	0.56

### IV.5.4.4 Diode dopée par le Niobium

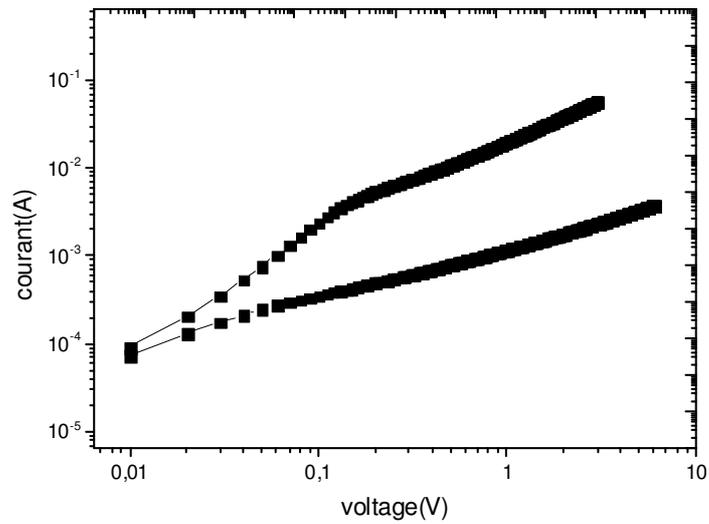
La figure IV.26 et IV.27 montre des caractéristiques I-V pour la diode simulée et fabriquée sur le silicium dopée par le Niobium.

Les défauts introduits dans cette simulation sont :

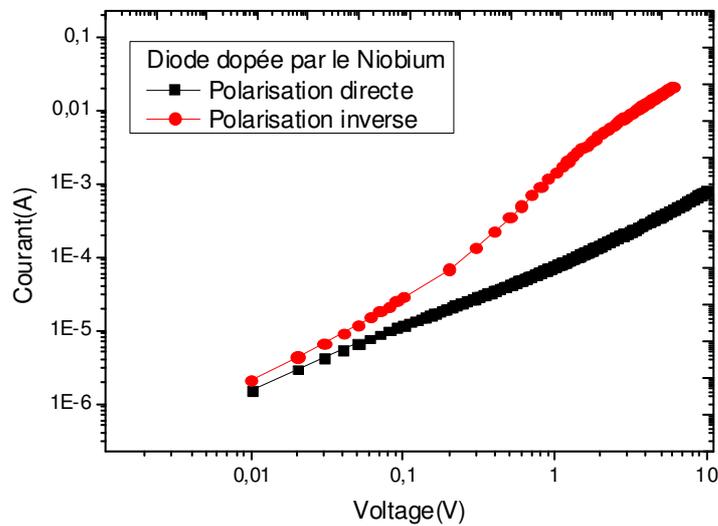
trap e.level=0.58 acceptor density=5.0e16 degen=1 sign=4.5e-16 sigp=4.5e-14  
trap e.level=0.29 acceptor density=5.0e16 degen=1 sign=5.3e-16 sigp=5.3e-14  
trap e.level=0.163 donor density=5.0e16 degen=1 sign=3.4e-14 sigp=3.4e-16

Le courant inverse augmente linéairement avec la tension allant jusqu'à la limite de courant. La tendance du courant direct est similaire à celle présentée à la Figure IV.20 pour le silicium non dopé.

Ces résultats montrent que le niobium dans le silicium se comporte d'une manière semblable que l'or et le platine. Ces métaux éliminent les effets de claquage et rendent le composant ohmique. Ils rendent aussi le courant inverse égal au courant direct, en particulier pour les faibles tensions. Ces effets sont similaires à ceux induits par l'irradiation avec des neutrons de 1 MeV [59]. Donc ces métaux dans le silicium ont des effets similaires que l'irradiation.



**Figure IV.26:** Caractéristique I-V simulée de Au /p-Si /SBD dopé par Nb



**Figure IV.27 :** Caractéristique I-V expérimentale de Au /p-Si /SBD dopée par le Nb[51].

## Chapitre IV : Résultats et discussions

---

Les paramètres extraits pour la diode simulée dopée par le niobium sont présentés dans tableau IV.9.

**Tableau IV.9 :** Les paramètres extraits à partir des caractéristiques I-V pour la diode dopée par le Niobium

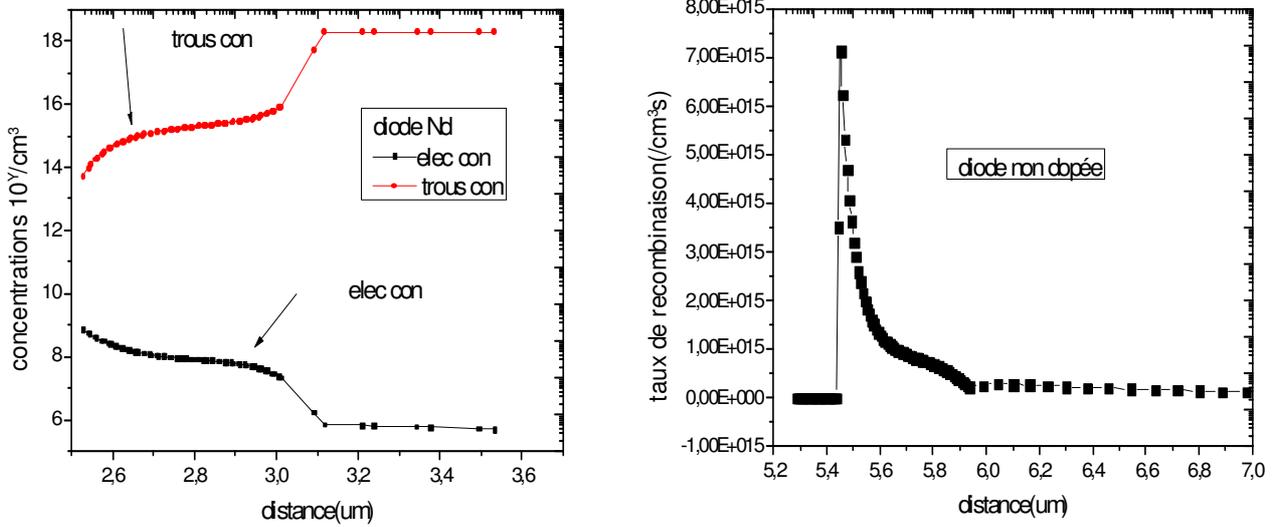
Paramètres	Diode dopée par Niobium
$I_0(\mu A)$	241.17
$\eta$	1.56
$\Phi_B(eV)$	0.52

### IV.5.5 Discussion des résultats

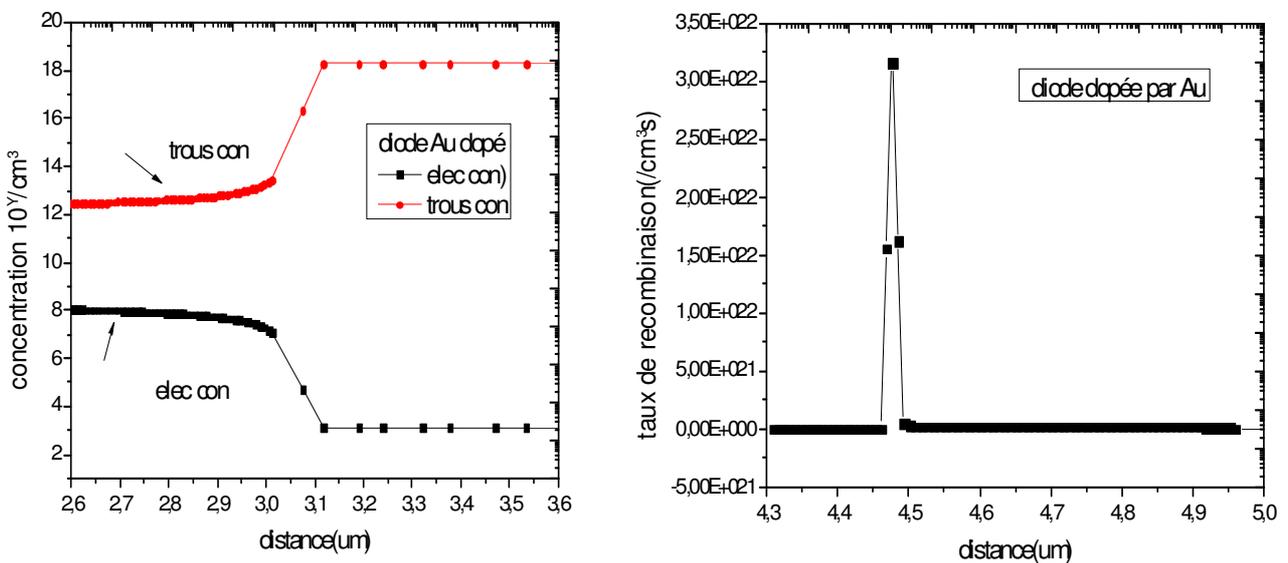
D'après les résultats obtenus, les effets des métaux sur le silicium de type p peuvent alors être déduites.

La valeur du facteur d'idéalité qui est supérieur à l'unité implique la non idéalité des diodes a cause de la présence des impuretés ou pourrait également être dû à la couche d'interface présente entre le métal et le silicium [60]. Le courant de saturation de la diode dopée par l'Or ( $31\mu A$ ) est inférieur à celle de la diode fabriqué en silicium non dopé ( $328.82\mu A$ ). Le courant de saturation inférieur est dû à des défauts qui sont créées par l'Or dans la bande d'énergie interdite [61]. Puisque le courant est réduit, les défauts présents agissent comme centres de recombinaison et ils piègent les porteurs mobiles disponibles pour réduire la conductivité Figure IV.28 et Figure IV.29.

## Chapitre IV : Résultats et discussions



**Figure IV.28** Concentration des porteurs et taux de recombinaison pour la structure Au/p-Si /SBD non dopée a  $V=2V$



**Figure IV.29** : Concentration des porteurs et taux de recombinaison pour la structure Au/p-Si /SBD dopée par l'Or a  $V=2V$

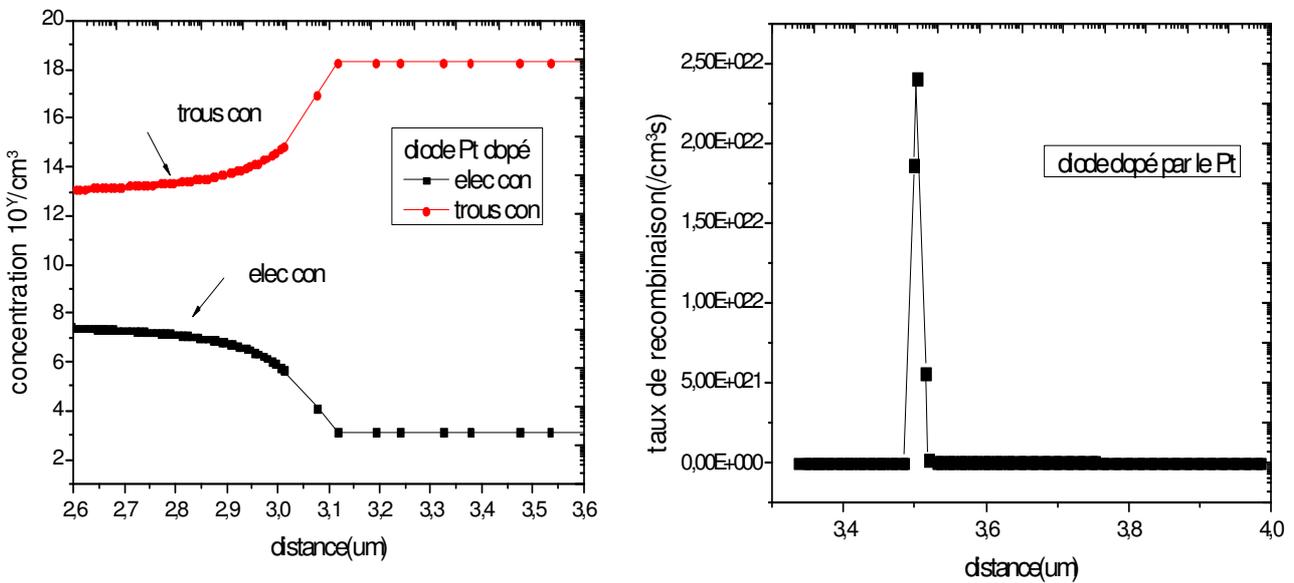
## Chapitre IV : Résultats et discussions

On remarque que les porteurs de charge électron et trous dans la figure IV.29(diode dopée par l'Or) sont inférieures a celles dans la figure IV.28 (diode non dopée) dans la zone active.

Cela signifie que le mécanisme de recombinaison est dominant et ceci est confirmé par la valeur élevée de facteur d'idéalité (1.60)

Il a été rapporté [62] que les niveaux donneurs dans les semi-conducteurs de type p présentent dans la bande d'énergie interdite sont responsables de la valeur élevée de la hauteur de barrière de Schottky. La valeur élevée que nous avons extraite (de 0.75eV) montre que les niveaux donneurs ont été créés par l'Or. Ces niveaux donneurs compensent les porteurs majoritaires (trous) afin de réduire la conductivité et donc d'augmenter la résistivité. De cette façon, alors, l'Or crée des niveaux qui se recombinent [52] ainsi que de compenser [62].

Le courant de saturation de la diode dopée par le platine est réduit (de  $45\mu\text{A}$ ) de celle de la diode fabriqué sur silicium non dopé. Le facteur d'idéalité de la diode (de 1.40) est supérieure à celle d'une diode non dopé (de 1.34) mais plus faible que celle de la diode dopée par l'or (de 1.60). La hauteur de la barrière Schottky de la diode (0.56eV) est supérieure à celle de la diode non dopé (0.51eV). Cette valeur élevée de la hauteur de la barrière Schottky montre que le platine dans le silicium crée des niveaux de donneurs dans la bande d'énergie interdite, qui compensent des trous pour réduire la conductivité du matériau Figure IV.30.

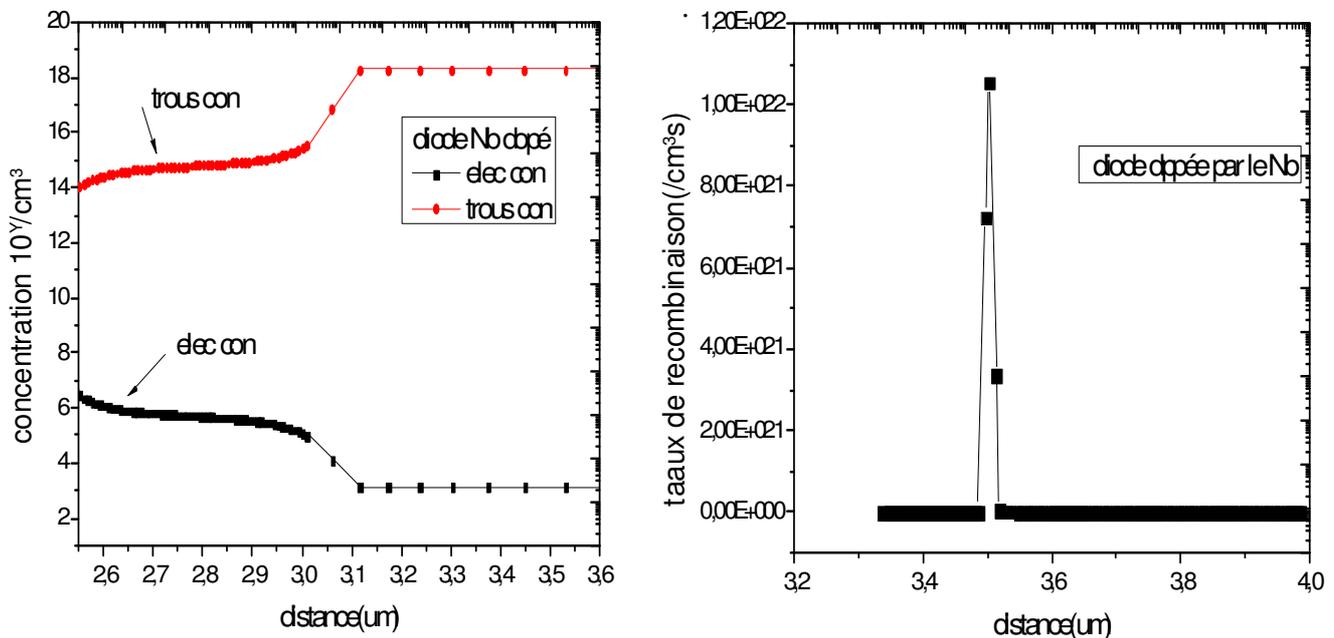


**Figure IV.30** : Concentration des porteurs et taux de recombinaison pour la structure Au/p-Si /SBD dopée par le platine à  $V=2\text{V}$

## Chapitre IV : Résultats et discussions

Cette diminution de la conductivité, comme il a été dit avant pour l'or, montre que l'or et le platine créent des fortes centres de recombinaison. Cela implique que les niveaux de donneurs dans la moitié bas sont plus actifs que les niveaux d'accepteurs dans la moitié supérieure de la bande interdite.

Le courant de saturation de la diode dopée par le niobium (de  $241.17\mu\text{A}$ ) est inférieur à celle de la diode non dopée. D'une manière similaire à celle de la diode dopée par le platine et l'Or, les défauts qui sont créés par le niobium compensent également les porteurs majoritaires dans la bande d'énergie interdite et réduit la conductivité des matériaux Figure IV.31.



**Figure IV.31 :** Concentration des porteurs pour la structure Au/p-Si /SBD dopée par le niobium a  $V=2\text{V}$

Le facteur d'idéalité de 1,56 est inférieur à celle de la diode dopée par l'or (1,60), mais supérieure à celle de la diode non dopée (1,34) et la diode dopée par le platine (1,40). La hauteur de barrière Schottky de la diode est de 0.52 eV est supérieure que celle de la diode non dopée. Cela montre que le niobium crée des niveaux de donneurs dans la bande d'énergie interdite de silicium qui compensent les trous pour réduire la conductivité.

## Chapitre IV : Résultats et discussions

---

Une comparaison des métaux montre que l'or, le platine et le niobium créent des centres de recombinaison qui causent la diminution de la conductivité. Cependant, dans tous les cas, le courant est ohmique et tous les métaux génèrent le défaut du mid-gap, qui est commun dans tous les cas. Il est donc clair que le comportement ohmique du courant est provoqué par le défaut mid-gap[50] .

## **Conclusion générale**

### Conclusion générale

Dans ce travail, nous rapportons des résultats expérimentaux d'une diode de barrière Schottky AuGeNi/p-Si. L'étude des caractéristiques courant-tension simulées par le logiciel Tcad Silvaco et mesurées dans la gamme de température de 295 à 400K est faite. Cette étude est basée sur l'analyse de la dépendance des paramètres extraits tels que le facteur d'idéalité, hauteur de barrière Schottky et le courant de saturation et le coefficient Richardson. Bien que le facteur d'idéalité diminue, la hauteur de barrière Schottky augmente lorsque la température augmente. La valeur de la constante de Richardson obtenu  $A^* = 11,5 \times 10^{-7} \text{ A cm}^{-2} \text{ K}^{-2}$  est très faible par rapport à la valeur théorique.

Pour réaliser notre but on a utilisé le modèle de Werner qui explique les anomalies causées par l'inhomogénéité de la barrière de potentiel  $\phi_B$ . Ce modèle a été utilisé pour l'extraction des paramètres caractérisant l'inhomogénéité tel que:  $\phi_B$ ,  $\sigma_0$ ,  $\rho_2$ ,  $\rho_3$ ,  $A^*$ ,  $\eta$  pour les diodes Schottky,

Le tracé de Richardson modifiée à donné la hauteur de barrière Schottky moyenne et la constante de Richardson 1,15eV et  $30.53 \text{ A m}^{-2} \text{ K}^{-2}$ , respectivement. La dépendance en température des caractéristiques courant-tension de la diode à barrière AuGeNi/p-Si Schottky ont été expliqués avec succès sur la base du mécanisme d'émission thermo-ionique avec distribution gaussienne de la barrière de Schottky.

Les résultats de ce travail mettent en évidence l'inhomogénéité des structures étudiées. Nous avons constaté aussi que le modèle de Werner s'applique bien dans ces structures. D'après ce modèle, l'origine des anomalies observées sont les fluctuations spatiales de la barrière de potentiel à l'interface du métal-semiconducteur

La simulation obtenue et les résultats expérimentaux sont en bon accord.

L'étude de capacité négative pour des polarisations directes et pour des températures supérieur à  $T=260 \text{ K}$  à montré que la capacité négative est causée par l'injection des porteurs minoritaires.

## Conclusion générale

---

Dans la deuxième partie de cette thèse le travail est consacré pour l'étude des défauts sur le détecteur de particule à base d'une diode Schottky Au/p-Si /SBD.

Une diode Schottky est simulée et une étude faite pour le dopage de cette diode par des métaux lourds tel que l'Or, le platine et le niobium.

La diffusion des métaux dans le silicium crée des niveaux de défauts dans la bande interdite, ces niveaux sont représentés par des accepteurs et donneurs.

L'extraction des paramètres tels que la hauteur de la barrière, courant de saturation et le facteur d'idéalité est faite pour la diode non dopée et la diode dopée par les métaux. Nous avons remarqué une convergence entre le courant direct et inverse en particulier pour les basses tensions pour les diodes dopées et la disparition de la tension de claquage.

Le courant de saturation est démultiplié, le facteur d'idéalité et la hauteur de la barrière augmente dans tous les cas de la diode dopée, par l'Or, platine et le niobium.

La diminution du courant de saturation est dû aux défauts qui sont créés par les métaux dans la bande d'énergie interdite.

Puisque le courant est réduit, les défauts présents agissent comme centres de recombinaison et ils piègent tous les porteurs mobiles disponibles pour réduire la conductivité.

Cela signifie que le mécanisme de recombinaison est dominant et ceci est confirmé par la valeur élevée de facteur d'idéalité.

Il a été rapporté que des niveaux donneurs dans les semi-conducteurs de type p présentent dans la bande d'énergie interdite sont responsables de la valeur élevée de la hauteur de barrière de Schottky.

Une comparaison des métaux montre que l'or, le platine et le niobium créent des centres de recombinaison qui causent la diminution de la conductivité. Cependant, dans tous les cas, le courant est devenu presque ohmique et tous les métaux génèrent le défaut du midgap, qui est commune dans tous les cas. Il est donc clair que le comportement ohmique du courant est provoqué par le défaut midgap.

## Conclusion générale

---

En outre, cela signifie que le dopage du silicium avec l'un des trois métaux à un effet similaire à une irradiation par des neutrons de 1 MeV. Il devrait que les détecteurs fabriqués par le silicium dopé par le l'Or, le Platine ou le Niobium serait résistant à tout type de rayonnement.

En perspectives, il serait très intéressant d'étudier les caractéristiques courant-tension en basse température et l'effet des pièges sur la caractéristique capacité-tension.

# **Bibliographie**

## **Bibliographie**

- 1) M.Hassen Hamrita ,2005 « Réponse en courant des détecteurs silicium aux particules chargées et aux ions lourds » thèse PhD, Université de PARIS
- 2) Assouak S., 2006 « Les senseurs de CMS étude de leur résistance aux flux intenses de neutrons rapides », thèse de doctorat en sciences, Université catholique de Louvain.
- 3) A.Saadoune, 2009« Paramétrisation des propriétés électriques d'une diode au silicium soumise à des hautes fluences de particules », thèse de doctorat en sciences, Université de Biskra.
- 4) K. Bekhouche et al. , 2015 « Numerical simulation of the effect of gold doping on the resistance to neutron irradiation of silicon diodes », Journal of Semi-conducteurs, Vol. 36, No. 1
- 5) S.J. Moloi et al. ,2009« Current–voltage behaviour of Schottky diodes fabricated on p-type silicon for radiation hard detectors » Physica B 404, 2251–2258
- 6) A. Latreche, 2012 « Non-homogénéités dans les structure métal/semiconducteurs », thèse de doctorat en sciences, Université de Sétif.
- 7) J.P. Colinge and C.A. , New York , 2002« Coligne Physics of Semiconductor Devices » by Academic Kluwer Publishers
- 8) H. Mathieu, 2001 « Physiques des semi-conducteurs et composants électroniques »
- 9) Bardeen J, 1947 « Surface States and Rectification at a Metal Semiconductor Contact », Phys.Rev., vol. 71, no. 10, pp. 717-727.
- 10) Vellas N, 2003 « Etudes expérimentales de transistors de la filière nitrure de gallium pour des applications de puissance hyperfréquences », thèse PhD, Université de Scien.Tech de Lille.
- 11) Cowley A.M et Sze S.M ,1965« Surface States and Barrier Height of Metal-Semiconductor Systems », J. Appl. Phys., vol. 36, no. 10, p. 3212-3220.
- 12) Bonnaud O, 2003 « Physique des Solides, des Semiconducteurs et Dispositifs », Université de Rennes.
- 13) Dominic Pearman ,2007« Electrical Characterisation and Modelling of Schottky barrier metal source/drain MOSFETs » Thesis Doctor of Philosophy ,University of Warwick.
- 14) Romain BODEUX, 2009« Rôle des interfaces sur les propriétés diélectriques de condensateurs à base de CCTO déposé par PLD », thèse PhD, Université de Francois-Rabelais de tour.

- 15) Gabriel CIVRAC, 2009 «Vers la réalisation de composants haute tension, forte puissance sur diamant CVD. Développement des technologies associées », thèse PhD, Université de Toulouse.
- 16) E.H. Rhoderick and R.H. Williams, (1988) « Metal Semiconductor Contacts», Clarendon Press, Oxford.
- 17) Liu Chang Yan, 1982 «Technologie des contacts métal semiconducteur application a la réalisation de modulateurs et limiteurs hyperfréquences sur arséniure de Gallium », thèse PhD, Université de Lille.
- 18) Dieter K. Schroder , « Semiconductor material and device characterization », Third Edition, Arizona State University Tempe, AZ.
- 19) Jurgen H. Werner et al., «Barrier inhomogeneities at Schottky contacts », J. Appl. Phys, Vol.69, No.3, pp 1523-1533, 1991
- 20) J. H. Werner and H. H. Güttler, 1993 «Temperature dependence of schottky barrier heights on Silicon », Journal of Applied Physics, vol. 73, no. 3, pp. 1315–1319.
- 21) Subhash Chand et al. , 2005 « Analysis of current–voltage characteristics of inhomogeneous Schottky diodes at low temperatures » Applied surface science, Vol.252, no.2, pp.358–363
- 22) Chikhaoui Walf, 2011 « Etude des mécanismes physiques responsables des dysfonctionnements des transistors HEMTs à base d'hétérostructures AlGa<sub>N</sub>/Ga<sub>N</sub> et AlIn<sub>N</sub>/Ga<sub>N</sub> » thèse PhD, Université de Lyon.
- 23) Ch. Bourgeois, 1994 « Physique nucléaire instrumentale: Des éléments pour un bon choix » Ecole internationale Joliot-Curie de France.
- 24) Casse Gianluigi ,1998 «The effect of hadron irradiation on the electrical properties of particle detectors made from various silicon materials», thèse PhD, University of Grenoble 1
- 25) Celine Lebel, 2007 « Effets de rayonnement sur les détecteurs au silicium à pixels du détecteur ATLAS », thèse d' doctorat Université de Montréal
- 26) McPherson M. ,1997 «Irradiated Silicon Detectors as Relaxation Devices », PhD Thesis, Lancaster University.
- 27) Gassoumi malek, 2006 « Etude des défauts électriquement actifs dans les composants hyperfréquences de puissance dans les filières SiC et Ga<sub>N</sub> », thèse PhD, Université de Lyon.
- 28) R.K Willardson and A.C Beer, 1988 « Semiconductors and semimetal », New-Yor: Academic Press, Vol. 26, p.144-229

- 29) Razvan NEGRU, 2008 « Conception et modélisation de pixels de photodétection », thèse PhD, Université de France.
- 30) Baldomero Garcia jr., 2007 « Indium gallium nitride multijunction solar cell simulation using SILVACO/ATLAS » Master's Thesis, Naval Postgraduation School, Monterey, California.
- 31) H. Michael, 2007 « Modeling of operating temperature performance of triple junction solar cells using silvaco's ATLAS », Master's Thesis, Naval School California,.
- 32) L. Reggiani, 1985 « Hot Electron Transport in Semiconductors » Springer Topics in Applied Physics vol 58, (Berlin: Springer) p 227
- 33) Khaled A., 2012 « Simulation physique du bruit basse fréquence stationnaire, dans les composants semi-conducteurs », thèse PhD, Université de Limoges .
- 34) Atlas user's manual.
- 35) D. Truyen, 2007 « Etude par simulation composant 3D des effets singuliers SEU et SET induits par ions lourds sur le noeud technologique CMOS bulk 180 nm », thèse PhD, Université de Montpellier II.
- 36) B. Kin et al., 2012 "Electrical characterization of Au/ZnO/TiO<sub>2</sub>/n-Si and (Ni/Au)ZnO/TiO<sub>2</sub>/n-Si Schottky diodes by using current voltage Measurements", Journal of Optoelectronics and Advanced Materials, 14(11-12), 959-963
- 37) N.D. Arora et al., 1982 « Electron and hole mobilities in silicon as a function of concentration and temperature », , IEEE Trans. Electron Devices, Vol. 29, pp. 292-295
- 38) O. Pakma, 2008 « The influence of series resistance and interface states on intersecting behavior of *I-V* characteristics of Al/TiO<sub>2</sub>/p-Si (MIS) structures at low temperatures » Semicond. Sci. Technol. , Vol. 23, No 10
- 39) S. Shankar Naik, V. Rajagopal Reddy, 2010 « Analysis of current-voltage-temperature (I-V-T) and capacitance-voltage-temperature (C-V-T) characteristics of Ni/Au Schottky contacts on n-type InP » , Super lattices and Microstructures, Vol. 48, pp. 330-342
- 40) F.E. Cimilli, M. Saglam, H. Efeoğlu, A. Türüt, 2009 « Temperature-dependent current-voltage characteristics of the Au/n-InP diodes with inhomogeneous Schottky barrier height », Physica B, 404, 1558-1562
- 41) V. Janardhanam, et al., 2009 « Study of current-voltage-temperature (I-V-T) and capacitance-voltage-temperature (C-V-T) characteristics of molybdenum Schottky contacts on n-InP (100) », Journal of Alloys and Compounds, 485, 467-472

- 42)** H. Korkut, N. Yıldırım, A. Turut. , 2009 «Thermal annealing effects on I–V–T characteristics of sputtered Cr/n-GaAs diodes», *Physica B*, 404, 4039-4044
- 43)** M. Bhaskar et al., 2009 «Current–Voltage temperature (I–V–T) characteristics of Pd/Au Schottky contacts on n-InP (111) », *Current Applied Physics* 9 , 972-977
- 44)** S. M. Sze « *Physics of Semiconductor Devices* », Third Edition
- 45)** H. Uslua et al. 2010 « The interface states and series resistance effects on the forward and reverse bias I–V, C–V and  $G/\omega$ -V characteristics of Al–TiW–Pd<sub>2</sub>Si/n-Si Schottky barrier diodes », *Journal of Alloys and Compounds* 503, pp. 96–102
- 46)** Sakir Aydoğan et al. ,2004 «Temperature dependence of reverse bias capacitance–voltage characteristics of Sn/p-GaTe Schottky diodes » *Semiconductor Science and Technology* Vol.19, no 2
- 47)** H. Altuntas et al. ,2009 «Electrical characterization of current conduction in Au/TiO<sub>2</sub>/n-Si at wide temperature range», *Materials Science in Semiconductor Processing*, Vol. 12, pp. 224–232
- 48)** F.E.Cimilli et al. ,2009 «Temperature-dependent current–voltage characteristics of the Au/n-InP diodes with inhomogeneous Schottky barrier height», *Physica B*, 404, pp.1558- 1562
- 49)** Engin Arslan, 2010« Temperature dependent negative capacitance behavior in (Ni/Au)/AlGa<sub>N</sub>/AlN/GaN heterostructures », *Journal of Non-Crystalline Solids* 356 ,pp.1006–1011
- 50)** K. Bekhouche<sup>1</sup> et al. ,2015 « Numerical simulation of the effect of gold doping on the resistance to neutron irradiation of silicon diodes », *Journal of Semiconductors*, Vol. 36, No.1
- 51)** S.J. Moloi et al. , 2009 «Current–voltage behaviour of Schottky diodes fabricated on p-type silicon for radiation hard detectors », *Physica B* 404, pp. 2251–2258
- 52)** Klaus Graff « *Metal Impurities in Silicon-Device Fabrication* », Second Revised Edition.
- 53)** M.Moll et al. ,1999 « Leakage current of hadron irradiated silicon detectors - material dependence » *Nucl. Instr. & Meth. in Phys. Res. A* 426, 87-93
- 54)** Kikuo Watanabe ,1993 « Recombination lifetime in a gold-doped p-type silicon crystal» *Semicond. Sci. Technol.* 8, 23W235
- 55)** Y.K.Kwon et al. ,1987 « Properties of platinum-associated deep levels in silicon », *J.Appl.Phys.*, Vol.61,No.3

- 56)** H Pettersson et al. (1993) « Electrical and optical characterization of niobium-related centres in silicon », *Semicond. Sci. Technol.* 8 ,pp.1247-1252.
- 57)** McPherson et al. ,2004 « The space charge relaxation behaviour of silicon diodes irradiated with 1 MeV neutrons », *Nucl. Instr. Meth. A* 517, 42–53
- 58)** Jones B. K., et al. ,1998 « Negative Capacitance effects in Semiconductor diodes, *Solid-State Electronics*», Vol. 107, No. 2, pp. 47-50
- 59)** S.J. Moloi et al. ,2009 « The current and capacitance response of radiation-damaged silicon PIN diodes » *Physica B* 404, 3922–3929
- 60)** H Cetin ,2005 « Ti/p-Si Schottky barrier diodes with interfacial layer prepared by thermal oxidation » *Physica B: Condensed Matter* 364 (1), pp.133-141
- 61)** Rajinder Sharma, 2010«Temperature Dependence of I-V Characteristics of Au/n-Si Schottky Barrier Diode, *Journal of Electron Devices*», Vol. 8, pp. 286-292
- 62)** S. Asubay et al., 2008 « Determination of the laterally homogeneous barrier height of thermally annealed and unannealed Au/p-InP/Zn-Au Schottky barrier diodes » *Applied Surface Science* 254, pp. 3558–3561

# **Annexe**

## Annexe A

### 1 La méthode de Gummel

La méthode de Gummel résout le système d'équations DD via une procédure découplée. En premier, la solution de l'équation de poisson est résolue séparément à l'équilibre (tension nulle) pour calculer le potentiel de surface en utilisant l'équation suivante :

$$\begin{aligned} \delta V(i-1) - \left[ 2 + \frac{n_i}{N} \Delta^2 x (\exp(\bar{V}(i)) - \exp(-\bar{V}(i))) \right] \delta V(i) + \delta V(i+1) \\ = -\bar{V}(i-1) + 2\bar{V}(i) - \bar{V}(i+1) + \frac{n_i}{N} \Delta^2 x \left[ \exp(\bar{V}(i)) - \exp(-\bar{V}(i)) + \frac{N_A - N_D}{n_i} \right] \end{aligned} \quad (1)$$

Une fois le potentiel de surface calculé, et pour une tension appliquée bien déterminé (l'équation de poisson change), le potentiel de surface ainsi obtenu est substitué dans l'équation de continuité et l'équation de courant afin de calculer les quasi niveaux de Fermi (qui servent à calculer les densités des porteurs  $\Phi_n$  et  $\Phi_p$ ) et ainsi le nouveau potentiel de surface par un processus itératif.

$$a_n \left( i - \frac{1}{2} \right) \phi_n(i-1) - \left[ a_n \left( i + \frac{1}{2} \right) + a_n \left( i - \frac{1}{2} \right) \right] \phi_n(i) + a_n \left( i + \frac{1}{2} \right) \phi_n(i+1) = \Delta^2 x U(i) \quad (2)$$

$$a_p \left( i - \frac{1}{2} \right) \phi_p(i-1) - \left[ a_p \left( i + \frac{1}{2} \right) + a_p \left( i - \frac{1}{2} \right) \right] \phi_p(i) + a_p \left( i + \frac{1}{2} \right) \phi_p(i+1) = \Delta^2 x U(i) \quad (3)$$

DD: drift-diffusion

### 2 La méthode de Newton

C'est une procédure qui résout les équations en ensemble, on écrit les équations précédentes sous la forme résiduelle :

$$W_v(v, n, p) = 0$$

$$W_n(v, n, p) = 0$$

$$W_p(v, n, p) = 0$$

Au début et en partant avec des valeurs initiales  $v_0, n_0, p_0$ , les corrections  $\Delta v, \Delta n, \Delta p$  sont calculées par le système jacobien suivant:

$$\begin{bmatrix} \frac{\delta W_v}{\delta v} & \frac{\delta W_v}{\delta n} & \frac{\delta W_v}{\delta p} \\ \frac{\delta W_n}{\delta v} & \frac{\delta W_n}{\delta n} & \frac{\delta W_n}{\delta p} \\ \frac{\delta W_p}{\delta v} & \frac{\delta W_p}{\delta n} & \frac{\delta W_p}{\delta p} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta v \\ \Delta n \\ \Delta p \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} W_v \\ W_n \\ W_p \end{bmatrix} \quad (4)$$

Les solutions sont alors obtenus par:

$$V(k+1) = V(k) + \Delta v(k) \quad n(k+1) = n(k) + \Delta n(k) \quad p(k+1) = p(k) + \Delta p(k) \quad (5)$$

Où k indique le nombre d'itération, et le système d'équation 4 a trois équations pour chaque point du maillage.

En général la méthode de Gummel est préférée à une polarisation faible, à cause de sa rapidité de convergence avec moins d'itérations dans le calcul. A forte polarisation la méthode la plus utilisée est la méthode de Newton.

## Annexe B

Les paramètres d'Arora pour le silicium à  $T=300K$ .

Table 3-32 User-Specifiable Parameters for Equations 3-184 and 3-185			
Statement	Parameter	Default	Units
MOBILITY	MU1N . ARORA	88.0	$\text{cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$
MOBILITY	MU1P . ARORA	54.3	$\text{cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$
MOBILITY	MU2N . ARORA	1252.0	$\text{cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$
MOBILITY	MU2P . ARORA	407.0	$\text{cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$
MOBILITY	ALPHAN . ARORA	-0.57	
MOBILITY	ALPHAP . ARORA	-0.57	
MOBILITY	BETAN . ARORA	-2.33	
MOBILITY	BETAP . ARORA	-2.33	
MOBILITY	GAMMAN . ARORA	2.546	
MOBILITY	GAMMAP . ARORA	2.546	
MOBILITY	NCRITN . ARORA	$1.432 \times 10^{17}$	$\text{cm}^{-3}$
MOBILITY	NCRITP . ARORA	$2.67 \times 10^{17}$	$\text{cm}^{-3}$

## Annexe C

### 1 Distribution de Boltzmann

La fonction  $f_n(E)$  est la probabilité d'occupation (à l'équilibre) d'un niveau d'énergie  $E$  par un électron et elle est donnée par (statistique de Fermi-Dirac) :

$$f_n(E) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - E_F}{KT}\right)} \quad (1)$$

$E_F$  étant le niveau de Fermi, qui correspond à une probabilité d'occupation égale à  $\frac{1}{2}$ .

Dans le cas où la différence  $E - E_F$  est supérieure à quelques  $kT$ , l'équation (1) se simplifie en constatant que le terme en exponentiel est fortement supérieur à 1 d'où :

$$f_n(E) \approx \frac{1}{\exp\left(\frac{E - E_F}{KT}\right)} = \exp\left(-\frac{E - E_F}{KT}\right) \quad (2)$$

Ce qui correspond à la statistique de Boltzmann

### 2 Effet Auger

L'effet Auger a été découvert en 1923 par Pierre Auger. Lorsqu'un solide est excité par un rayonnement X ou par un faisceau d'électrons, il y a émission d'électrons, tels que les électrons Auger ou les électrons secondaires.

Le mécanisme de recombinaison Auger est un processus de recombinaison bande à bande impliquant trois particules. Dans ce processus, l'énergie libérée par la recombinaison d'un électron avec un trou n'est pas émise sous forme d'un photon, comme dans le cas de la recombinaison radiative, mais elle est transmise à un autre porteur (électron ou trou) qui de cette façon est transféré à un niveau énergétique plus élevé. Le taux total de la recombinaison Auger est donné par :

$$R_{\text{Auger}} = (C_n n + C_p p)(pn - n_i^2) \quad (3)$$

Où  $C_n$  et  $C_p$  sont les coefficients de AUGER

$$C_n = 2.8 \times 10^{-31} \text{ cm}^6/\text{s} \quad \text{et} \quad C_p = 9.9 \times 10^{-32} \text{ cm}^6/\text{s}$$

### 3 Création de porteurs par porteurs chauds (Impact Ionization)

Ce phénomène, appelé aussi ionisation par impact, se produit pour des champs électriques supérieurs à  $100 \text{ kV.cm}^{-1}$ , par exemple dans la zone de charge d'espace d'une jonction en inverse. Un porteur accéléré par un tel champ voit croître son énergie cinétique jusqu'à pouvoir se comporter comme une radiation ionisante, c'est-à-dire qu'il peut céder une partie de son énergie pour créer une paire électron-trou. Les porteurs ainsi créés subissent également l'accélération du champ électrique et peuvent créer d'autres paires, ce qui donne lieu au phénomène d'avalanche, puis au claquage de la jonction.

Le taux de génération est donnée par :

$$G_{ipmact} = \frac{1}{q} [\alpha_n |J_n| + \alpha_p |J_p|] \quad (4)$$

Où  $\alpha_n$  et  $\alpha_p$  sont les coefficients d'ionisation et  $J_n$  et  $J_p$  les densités de courant d'électrons et de trous.

## Annexe D

### Propriétés du Si

Propriété (300K)	Si	Unité
Affinité électronique ( $\chi$ )	4.01	V
Concentration intrinsèque ( $n_i$ )	$1.45 \times 10^{10}$	$\text{cm}^{-3}$
Constante de diffusion		
- électrons ( $D_n$ )	37.5	$\text{cm}^2 \text{s}^{-1}$
- trous ( $D_p$ )	13	$\text{cm}^2 \text{s}^{-1}$
Constante diélectrique ( $\epsilon_r$ )	11.7	—
Densité effective d'états		
-dans la bande de conduction ( $N_c$ )	$2.9 \times 10^{19}$	$\text{cm}^{-3}$
-dans la bande de valence ( $N_v$ )	$1.1 \times 10^{19}$	$\text{cm}^{-3}$
Energie d'ionisation ( $E_{ion}$ )	3.65	$\text{eV (ehp)}^{-1}$
Gap d'énergie ( $E_g$ )	1.12	eV
Longueur de Debye intrinsèque ( $L_{Di}$ )	24	$\mu\text{m}$
Masse effective		
-électron ( $m_n$ )	$1.18 m_0$	kg
-trous ( $m_p$ )	$0.81 m_0$	kg
Mobilité spontanée		
-électrons ( $\mu_n$ )	1450	$\text{cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$
-trous ( $\mu_p$ )	500	$\text{cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$
Point de fusion	1412	°C
Résistivité maximale ( $\rho_{\max}$ )	$3.19 \times 10^5$	$\Omega \cdot \text{cm}$
Vitesse thermique d'électron ( $v_{th}$ )	$1.075 \times 10^7$	$\text{cm s}^{-1}$