

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:.....

Mémoire présenté en vue de l'obtention
Du diplôme de
Magister en Electronique

option
Signaux et communications

**Simulation des caractéristiques courant-tension à
base d'une diode Schottky en Phosphure d'indium InP**

Présenté par :

Kamal ZEGHDAR

Soutenu publiquement le: 19/06/2014.

Devant le jury composé de :

Pr. SENGOUGA Nouredine
Pr. DEHIMI Lakhdar
Pr. TOBECHE Souad
Pr. MEFTAH Amjad

Professeur
Professeur
Professeur
Professeur

Président
Directeur de mémoire
Examineur
Examineur

Université de Biskra
Université de Batna
Université de Biskra
Université de Biskra

Résumé :

Le phosphure d'indium est utilisé dans les applications électroniques à haute fréquence et à haute puissance, de par sa plus grande mobilité électronique comparée à celles des semi-conducteurs plus communs, comme le silicium et l'arséniure de gallium. Il possède un gap direct, ce qui le rend apte à utilisation en optoélectronique, comme par exemple dans la fabrication des diodes laser. Le phosphure d'indium est aussi utilisé comme substrat pour la croissance par épitaxie de composés optoélectroniques à base d'arséniure d'indium-gallium (InGaAs). Dans ce projet on s'intéresse à l'InP comme détecteur, l'étude de ses propriétés électriques est donc très important pour la détermination de ses effets sur les caractéristiques courant-tension.

L'analyse des caractéristiques courant-tension (I-V) des diodes Schottky à température ambiante ne donne pas des informations détaillées sur leur processus de conduction ou de la nature de la formation de la barrière à l'interface M/S. La dépendance en température des caractéristiques I-V nous permet de comprendre les différents aspects des mécanismes de conduction.

Le logiciel SILVACO-ATLAS nous a permis de simuler les caractéristiques courantes tensions (I-V), de voir l'influence de la température sur l'évolution des courbes, et d'évaluer les principaux paramètres qui caractérisent la diode Schottky tel que le facteur d'idéalité, la hauteur de la barrière, la résistance série...etc.

En effet, l'application de la méthode standard suivie par la plupart des chercheurs qu'est basée sur l'extraction des paramètres homogènes (Φ_B , n , R_s) présente certaines anomalies telle que la diminution de la hauteur de barrière (Φ_B) et l'augmentation du facteur d'idéalité (n) avec la diminution de la température, L'utilisation du modèle inhomogène proposé par Werner permet d'interpréter d'une part les anomalies observées sur les paramètres électriques extraits et de s'approcher, de l'autre part, la valeur de la constante de Richardson qui est en accord avec celle donnée par la théorie ($9.8 \text{ A/K}^2\text{cm}^2$).

Mots clés : Simulation, SDB, Silvaco, InP, Température, I-V-T.

❧ Remerciements ❧

Louange à Allah, Maître des Mondes ; et paix et salut sur celui qu'Allah a envoyé comme miséricorde pour le monde entier, ainsi que sur sa Famille, ses Compagnons et ses Frères jusqu'au Jour de la Résurrection.

Louanges à Allah qui, par sa bienfaisance, a permis et facilité la réalisation et l'achèvement de ce travail dans les meilleures conditions. Aussi, je souhaite faire ces remerciements en suivant les recommandations du prophète, que la paix et le salut soient sur lui, qui a dit : "Celui qui ne remercie pas les hommes ne remercie pas Allah".

*Je tiens, en premier lieu, à remercier Monsieur **DEHIM Lakhdar**, Professeur à l'université de Batna, pour avoir accepté de m'encadrer pour la préparation de ce mémoire de Magister. Je le remercie, et je tiens à témoigner de l'estime que j'ai pour toutes ses qualités aussi bien humaines que scientifiques.*

*Le travail présenté dans ce mémoire a été effectué au Laboratoire des matériaux métalliques et semi-conducteurs (LMSM) de l'université Mohamed Kheïdar de BISKRA, sous la direction de monsieur le professeur **SENGOUGA Nouredine**. Je le remercie sincèrement pour m'avoir accueillie au sein du laboratoire et d'avoir accepté de présider le jury.*

*J'adresse à M. **TOBECHÉ Souad**, professeur à l'université de Biskra, l'expression de ma profonde reconnaissance pour avoir voulu examiner mon travail et faire partie du jury, ainsi que pour sa contribution à ma formation.*

*J'exprime de même mes remerciements les plus sincères aux honorables M. **MEFTAH Amjad** professeur à l'université de Biskra d'avoir accepté d'être examinateur.*

Enfin je remercie infiniment tous mes amis, mes collègues et surtout ma famille qui m'a toujours aidée et encouragée pour poursuivre mes travaux.

Table des matières

Résumé	I
Remerciements	II
Table des matières	III
Introduction générale	1
 Chapitre I: Généralités : propriétés de l'InP	
 I.1- Introduction.....	 3
I.2- Matériaux Semi-conducteurs <i>III-V</i>	3
I.2.1- Les composés binaires, ternaires et quaternaires.....	4
I.2.1.1-Les composés binaires.....	4
I.2.1.2- Les composés ternaires et quaternaires.....	5
I.2.2-Bandes interdites des principaux composés <i>III-V</i>	5
I.2.3-Intérêt des semi-conducteurs <i>III-V</i>	6
I.3- Phosphure d'indium structure et propriétés.....	8
I.3.1- Structure cristalline d'InP.....	8
I-3.2-Structure de bande d'énergie	10
I-3.2 .1 Variation de la bande interdite avec la température.....	10
I-3.2.2 Composante de rétrécissement dûe au dopage (Bandgap Narrowing).....	12
I-3.3 Semi-conducteur Intrinsèque.....	12
I-3.4 Différent type de dopage.....	13
I-3.4.1 Semi- conducteur dopé <i>n</i>	13
I-3.4.2 Semi- conducteur dopé <i>p</i>	13
I-3.5 Propriété thermique du phosphure d'indium.....	13
I-3.5.1 Conductivité thermique.....	14
I-3.5.2 Température de debye.....	14
I-3.6 Phénomène de transport.....	14
I-3.7 La mobilité des porteurs dans l' InP.....	15
I-3.8 Mécanismes de recombinaison.....	18
I-3.8.1 Recombinaison Schockley-Read-Hall (SRH).....	18

I-3.8.2 Recombinaison Auger.....	19
I-3.8.3 Recombinaison radiative.....	19
I-3.8.4 Recombinaison en surface.....	20
I-3.8.5 Influences relatives des différents mécanismes de recombinaison sur la durée de vie.....	21
I-3.9- Intérêt de l'étude de l'InP.....	22

Chapitre II: Théorie du contact Schottky

II-1 Introduction.....	23
II-2 La structure Métal-Semi-conducteur.....	23
II-2.1 Travail de sortie du métal.....	23
II-2.2 Affinité électronique du semi-conducteur.....	24
II-2.3 Modèles physiques de la jonction métal semiconducteur.....	25
II-2.3.1 Modèle Schottky et Mott.....	25
II-2.3.2 Modèle de Bardeen.....	27
II-2.3.3 Modèle de Cowley et Sze	29
II-2.3.4 Modèle de MIGS (Métal Induced Gap States).....	30
II-2.3.5 Modèle unifié de défaut (UDM).....	31
II-3 Zone de charge d'espace (ZCE).....	32
II-4 Abaissement de la barrière : effet Schottky.....	34
II-5 Mécanismes de conduction dans les diodes Schottky.....	35
II.5.1 Émission au dessus de la barrière.....	36
II-5.1.1 l'émission thermoïonique (TE).....	36
II-5.1.2 Théorie de diffusion.....	37
II-5.1.3 Théorie de l'émission-diffusion.....	38
II.5.2 Mécanismes de conduction par effet tunnel.....	39
II-5.2.1 Courant d'émission par effet de champ (FE).....	39
II-5.2.2 Courant d'émission thermoïonique assistée par effet de champ (TFE)	40
II-5.3 Recombinaison dans la zone de charge d'espace.....	41
II-6 Modèle de la diode Schottky inhomogène.....	42
II-6.1 Modèle de Werner.....	42

II-6.2 Modèle de Tung.....	44
II-7 Systèmes métal/InP.....	46

Chapitre III: Logiciel de simulation ATLAS-SILVACO

III-1 Introduction.....	47
III-2 Présentation du paquet des programmes SILVACO.....	47
III-3 Présentation d'Atlas.....	49
III-4 Principe de la simulation numérique.....	51
III-5 L'ordre des commandes.....	52
III-6 Différents étapes de simulation.....	55
III-6.1 La spécification de la structure.....	55
III-6.1.1 La spécification de maillage.....	55
III-6.1.2 La spécification des régions.....	56
III-6.1.3 La spécification des électrodes.....	57
III-6.1.4 La spécification du dopage.....	58
III-6.2 La spécification du modèle et matérielle.....	59
III-6.2.1 La spécification du matérielle.....	60
III-6.2.2 La spécification du modèle.....	60
III-6.2.3 La spécification du contact.....	60
III-6.3 Les méthodes numériques.....	61
III-6.3.1 La méthode de Gummel.....	61
III-6.3.2 La méthode de Newton.....	62
III-6.4 Les solutions.....	63
III-7 Organigramme de simulation.....	64

Chapitre IV: Simulation et validation

IV-1 Introduction.....	65
IV-2 Description de la structure simulée.....	65
IV-3 Paramètres de simulation.....	66
IV-4 Simulation du dispositif.....	67
IV-5 Simulation des caractéristique I-V-T de la structure Au/n-InP.....	70
IV-6 Extraction des paramètres homogènes du contact Schottky.....	72

IV-6.1 Hauteur de barrière et facteur d'idéalité.....	72
IV-6.2 La résistance série R_s	75
IV-6.3 Constante de Richardson	76
IV-7 Modèle de la barrière Schottky inhomogène.....	77
IV-7.1 Barrière moyenne et déviation standard	79
IV-7.2 Courbe de Richardson modifié.....	80
IV-8 Etude comparative.....	81
Conclusion générale	85
Bibliographie	87



Introduction générale

Introduction générale

Le développement de nouvelles applications en microélectronique surtout celle sans fil demande des composants qui fonctionnent en hautes fréquences. De plus, la miniaturisation des systèmes pousse vers un circuit intégré qui contient toutes les fonctions.

Durant ces dernières années, le développement des composées III-V a été spectaculaire. En effet, ces composés présentent des performances bien supérieures à celles des semi-conducteurs plus classiques comme le silicium. Ce sont des matériaux de choix pour toutes les applications micro-électroniques et optoélectroniques [1].

L'InP fait partie des matériaux III-V actuellement étudiés [2], ce matériau ayant doté d'une forte mobilité électronique qui est quatre fois supérieure à celle du Silicium et d'une bande interdite directe (1,35 eV) permettant l'émission de lumière. Ces propriétés leur offrent un large champ d'applications nouvelles dans des domaines très divers, L'InP est utilisé comme une plateforme pour une grande variété de composants de communications à fibres, y compris les lasers, LED, des amplificateurs optiques semi-conducteurs, les modulateurs et les photo-détecteurs [3].

L'utilisation d'un semi-conducteur avec ces performances citées ci-dessus dans les diodes Schottky améliore de plus en plus le composant et répond aux critères de la technologie modern. Au cours des dernières années beaucoup de travaux ont concerné les contacts métal-InP [4]. En effet, les contacts sur InP ont d'une part un intérêt technologique pour la réalisation de dispositifs électroniques rapides et d'autre part jouent un rôle dans la compréhension physique des phénomènes gouvernant la formation de la barrière de Schottky.

La plupart des études de diode à barrière de Schottky (SBD) formées sur le n-InP sont limitées à la détermination de la hauteur de la barrière de Schottky (SBH) à la température ambiante par la mesure des caractéristiques courant-tension (IV) ou par la mesure de la caractéristique capacité-tension (CV) des diodes. Par conséquent, L'étude de la caractéristique courant-tension (I-V) des diodes Schottky à température ambiante ne donne pas suffisamment d'information concernant le mécanisme de transport des porteurs de charges dans ces diodes et la nature de la formation de la barrière de potentiel à l'interface métal-semiconducteur (MS) [5]. La dépendance de la caractéristique courant-tension (I-V) avec la température pour la structure diode Schottky n-InP a été étudiée expérimentalement par de nombreux chercheurs[1-2][4-8].

Le développement dans le domaine de l'informatique a connu le même essor que la micro électronique. Le cout exorbitant lors de la fabrication de nouveaux composants a poussé les chercheurs a utilisé la simulation pour mieux comprendre les phénomènes physiques et pour proposer des pistes d'améliorations des structures et de nouvelles architectures de dispositifs à moindre cout. Principalement deux sociétés internationales se partagent le marché mondial de la simulation de composants : SILVACO et SYNOPSIS (anciennement ISE).

Les objectifs de ce mémoire est La modélisation et simulation numérique par le logiciel SILVACO-ATLAS des caractéristique électriques courant-tension de la diode à barrière de Schottky (SBD) formées sur le phosphore d'indium de type n (n-InP) dans une gamme de température afin d'expliquer les résultats simulés et d'évaluer les principaux paramètres qui caractérisent la diode Schottky tel que le facteur d'idéalité, la hauteur de la barrière, la résistance série...etc.

Notre travail est organisé comme suit :

Le premier chapitre est consacré à l'étude des principales propriétés des matériaux semi-conducteurs III-V. Nous abordons ce chapitre par une présentation générale de ces matériaux, ensuite on présente une description des propriétés principales du matériau InP.

Le second chapitre, présentera les notions de base concernant la structure et les phénomènes physiques du contact métal semi-conducteur en général et la diode Schottky en particulier. ainsi que les modèles qui expliquent les phénomènes de transport de courant dans ces types de structures, à savoir le modèle à barrière homogène et le modèle à barrière inhomogène.

Dans le troisième chapitre, nous présenterons le logiciel de simulation Silvaco, ses modules et outils de simulation. Nous décrirons ensuite les procédés technologiques nécessaires à la réalisation de notre structure diode Schottky en utilisant l'outil de simulation « Atlas ».

Nous présenterons au dernier chapitre les résultats de simulation obtenus dans notre étude avec discussions.

Enfin nous terminerons notre travail par une conclusion générale où seront rassemblés nos principaux résultats et les perspectives du travail que nous avons effectué.

Chapitre I:
Généralités : propriétés de l'InP

I-1 Introduction

Durant ces dernières années, le développement des composées III-V a été spectaculaire. En effet, ces composés présentent des performances bien supérieures à celles des semi-conducteurs plus classiques comme le silicium. Ce sont des matériaux de choix pour toutes les applications micro-électroniques et optoélectroniques. Or les caractéristiques de ces matériaux et des composants sont sensibles à l'état de surface et à l'interface. L'étude du fonctionnement des différents types de composants électroniques passe par une maîtrise préalable des phénomènes physiques régissant les propriétés des électrons dans le semi-conducteur.

Nous présenterons dans ce premier chapitre, les propriétés physiques des matériaux III-V en première partie et la deuxième partie est consacrée à une description générale des propriétés du semi-conducteur InP.

I-2 Matériaux Semi-conducteurs III-V

Les matériaux semi-conducteurs III-V sont des corps composés formés à partir d'un élément de la 3^{ème} colonne et d'un élément de la 5^{ème} colonne de la classification périodique de Mendeleïev. Le tableau (I-1) regroupe un extrait de cette classification (les chiffres en haut et bas représentent respectivement le nombre atomique et la masse atomique). Ainsi de nombreux composés binaires peuvent être réalisés.

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

Tableau I-1: Extrait de la classification périodique des éléments [9].

I-2.1 Les composés binaires, ternaires et quaternaires des S/C III-V

I-2.1.1 Les composés binaires

Parmi tous les composés binaires possibles, tous n'ont pas le même intérêt potentiel. L'étude de propriétés des composés binaires, et en particulier de la structure de bandes montre que les éléments les plus légers donnent des composés dont laquelle la bande interdite est large et indirecte, et dans laquelle la masse effective des électrons est élevée.

Les composés contenant du Bore, de l'Aluminium ou de l'Azote entrent dans cette catégorie; ils ont en général peu d'intérêt pour l'électronique rapide [10], qui demande des semi-conducteurs à forte mobilité de porteurs ou pour l'optoélectronique ou une structure de bande directe est nécessaire pour que les transitions optiques soient efficaces. A l'autre extrémité, les éléments lourds comme le Thallium ou le Bismuth donnent des composés à base de Galium (GaAs, GaSb) ou d'Indium (InP, InAs,InSb) dont les propriétés sont les plus intéressantes. Le tableau (I-2) résume quelques paramètres pour différents matériaux de la famille III-V.

<i>Composé III-V</i>	$E_g (eV)$	m^*/m_0	$\mu (cm^2/V.s)$	$a (\text{Å})$
B N	7,5	-	-	3,6150
Al P	2,45	-	-	5,4510
Al As	2,16	-	-	5,6605
Al Sb	1,58	0,12	200	6,1355
B P	2,0	-	-	4,5380
Ga N	3,36	0,19	380	a=3,189 c=5,185
Ga P	2,26	0,82	110	5,4512
Ga As	1,42	0,067	8500	5,6533
Ga Sb	0,72	0,042	5000	6,0959
In P	1,35	0,077	4600	5,8686
In As	0,36	0,023	33000	6,0584
In Sb	0,17	0,0145	80000	6,4794

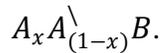
Tableau I-2 : Propriétés des principaux composés binaires III-V à 300 K [11,12].

I-2.1.2 Les composés ternaires et quaternaires

L'intérêt pratique des semi-conducteurs III-V est encore considérablement renforcé par la possibilité de réaliser des alliages par substitution partielle de l'un des éléments par un autre élément de la même colonne.

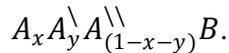
On sait par exemple obtenir des alliages ternaires, ou quaternaires qui sont identifiés de la façon suivante :

- **Ternaires** : S'il y a substitution de 2 atomes sur l'un des sous réseaux, soit



Exemple: $Ga_x In_{(1-x)} P$, lorsque la composition exacte compte peu, on écrit tout court GaInP.

- **Quaternaires 1+3** : S'il y a substitution de 3 atomes sur des sous réseaux soit:



Exemple: $Ga_x In_y Al_{(1-x-y)} As$.

- **Quaternaires 2+2** : S'il y a substitution de 2 atomes sur chacun des deux sous réseaux, soit : $A_x A_{(1-x)} B_y B_{(1-y)}$.

Exemple: $Ga_x In_{(1-x)} P_y As_{(1-y)}$.

La plupart des solutions solides ainsi réalisées sont complètes, la loi de Vegard (relation linéaire entre le paramètre de réseau et la composition) est approximativement suivie, et on observe une évolution progressive et régulière des propriétés (dont la bande interdite et les paramètres cristallins) en fonction du taux de substitution [13,14].

I-2.2 Bandes interdites des principaux composés III-V

Le diagramme de la figure (I-1) représente les variations de l'énergie de bande interdite en fonction du paramètre cristallin a qui varie lui même avec la composition. Les points du graphe figurent la position des composés binaires stœchiométriques, et les lignes représentent l'évolution du gap E_g et du paramètre cristallin a , en fonction de la composition des alliages ternaires. Certaines lignes présentent un point anguleux qui dénote une transition entre un gap direct et un gap indirect. Ce diagramme est donc très important parce qu'il permet de connaître la composition de tout alliage ternaire susceptible d'être déposé en couche mince, par épitaxie, sur

un substrat binaire comme GaAs ou InP. Les matériaux III-V offrent donc une grande variété de compositions permettant de modifier leurs propriétés électroniques [9].

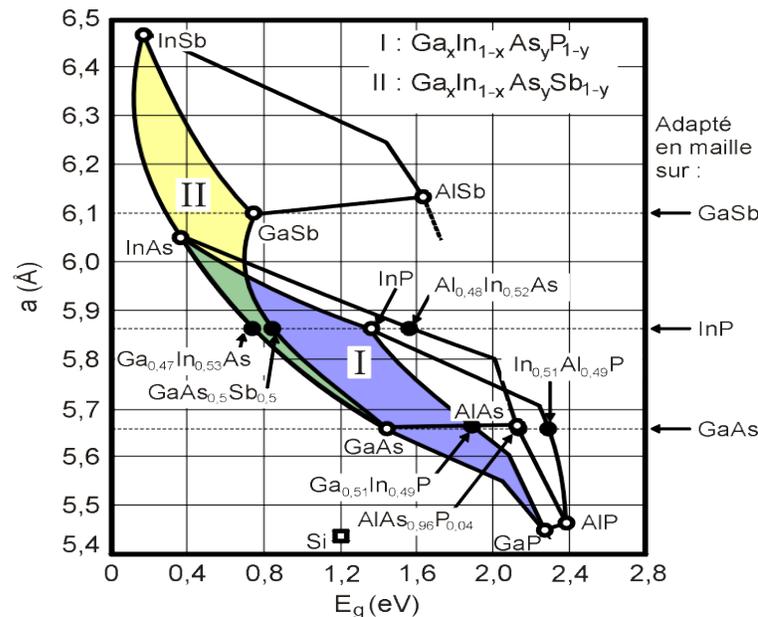


Figure I-1 : Evolutions de l'énergie de bande interdite et du paramètre cristallin des alliages de composés III-V.

I-2.3 Intérêt des semi-conducteurs III-V

Auparavant, la technologie des composants actifs est basée essentiellement sur le silicium à cause de ses propriétés intrinsèques, sa structure cristallographique et la maîtrise de la fabrication pour obtenir un dispositif avec un peu de défaut. Cependant, les propriétés de silicium limitent sa performance, notamment en matière de rapidité des circuits et de fonctionnalité optoélectronique. Donc des recherches se sont élargies sur les composés III-V en particulier le GaAs et InP. Ces matériaux présentent de nombreux avantages [3,15]:

- Mobilité des électrons 4 à 6 fois plus élevée que le silicium.
- Vitesse de saturation des électrons plus grande.
- Possibilité d'obtenir facilement un substrat semi-isolant qui permet l'isolation naturelle des circuits, donc diminue les effets capacitifs parasites et les courants de fuite
- Structures de bandes à transition directe, permettent de réaliser à la fois des fonctions optiques et électroniques.

- Effet de survitesse présent aux champs fort, utilisable dans des composants submicronique extrêmement rapides.

Fonctionnellement, on observe généralement les effets de charge importants dans des pièges à l'interface isolant-semiconducteur et dans le volume de l'isolant, ce qui crée une dispersion en fréquence des caractéristiques, une dérive du point de fonctionnement et limite les variations possibles du potentiel de surface. Les oxydes natifs ont de faibles bandes interdites et ne présentent pas a priori une stœchiométrie bien définie.

Quelques propriétés des divers composés III-V sont décelées sur tableau (I-3).

Paramètre	Ge	Si	InP	GaAs	GaP
<i>Mobilité des électrons (non dopé) en $cm^2V^{-1} s^{-1}$</i>	3900	1350	4600	8500	110
<i>Mobilité des trous (non dopé) en $cm^2V^{-1} s^{-1}$</i>	1900	475	150	400	75
<i>Bande interdite en eV à 300°K.....</i>	0.67	1.12	1.35	1.43	2.24
<i>à 4°K.....</i>	0.76	1.14	1.42	1.52	2.33
<i>Structure des bandes</i>	Indirecte	Indirecte	Directe	Directe	Indirecte
<i>Structure de cristal</i>	Diamant	Diamant	----- Zinc Blende -----		
<i>Température de fonctionnement maximal (°C)</i>	100	100	250	400	Haute
<i>Longueur d'onde associée (μm)</i>	1.85	1.13	0.97	0.87	
<i>Conductivité thermique À 300°K ($Wcm^{-2}K^{-1}$)</i>	0.7	1.45	0.68	0.54	
<i>Barrière Schottky (eV) (type n)</i>		0.27 ϕ_m -0.55	\approx 0.5	\approx 0.85	
<i>Constante diélectrique (Fm^{-1})</i>	16.0	11.9	12.35	13.13	
<i>Affinité électronique (eV)</i>	4.0	4.05	4.38	4.0	

Tableau I-3 : Comparaison des propriétés électroniques principales de Ge, Si et de certains composés III-V [3] .

I-3 Phosphure d'indium structure et propriétés

L'évolution de la technologie des semi-conducteurs III-V en général est inséparable de celle des composants actifs, ce qui a suscité un grand intérêt pour ces matériaux et en particulier l'InP dont l'importance résulte de leurs propriétés électriques intrinsèques.

Le Phosphure d'Indium est bien connu depuis 1980. Aujourd'hui, grâce à sa transparence aux longueurs d'onde des télécommunications, il est employé comme plate forme pour une variété de composants de communications à fibre, y compris des lasers, des amplificateurs à semi-conducteur, des modulateurs et des détecteurs photoélectriques optiques.

Le Phosphure d'Indium, d'après sa structure des bandes d'énergie, on trouve des diverses applications en optoélectroniques et en télécommunications. Suivant la mobilité des électrons qui est quatre fois supérieure à celle du Silicium et la bande d'énergie à gap direct de largeur 1,35 eV, l'InP est devenu un semi-conducteur prometteur pour la conception des circuits intégrés analogiques et numériques rapides à base de transistor à effet de champ [3,15].

La vitesse importante des électrons à grand champ et la transition des électrons entre les minimas de la bande de conduction, rendent l'InP un matériau semi-conducteur des plus intéressants pour la fabrication de composants fonctionnant en hautes fréquences.

I-3.1 Structure cristalline d'InP

L'InP est un semi-conducteur composé qui contient deux éléments distincts, un élément indium (In) du groupe III et le phosphore (P) du groupe V. La liaison entre l'In et le P est covalente, l'InP se cristallise dans le système blende (ZnS) (structure Zinc blende) qui consiste à interpénétrer par une translation de vecteur $r = (a/4, a/4, a/4)$ du quart de la diagonale de cube de deux réseaux cubiques à faces centrées (CFC), l'un de l'In et l'autre de P (figure I-2).

La maille élémentaire est un tétraèdre régulier, un atome III (In) est en son centre et quatre atomes V(P) sont aux sommets du tétraèdre (et vice versa). Ces liaisons forment entre elles un angle du $109,47^\circ$, le réseau réciproque de l'InP est un réseau cubique à faces centrées [15].

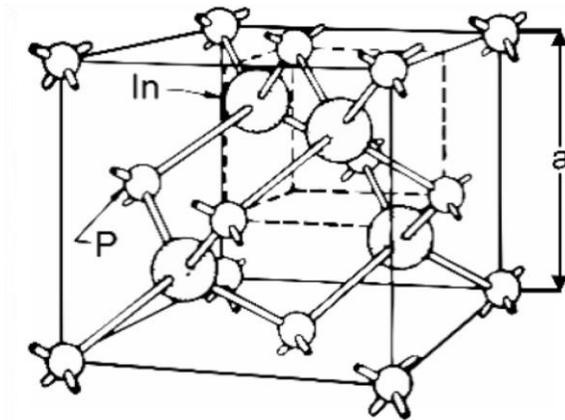


Figure I-2: Structure de Zinc-Blende.

A partir du réseau cristallin, on définit le réseau réciproque, qui est le système de coordonnées (énergie- vecteur d'onde) dans lequel on représente les variations des fréquences de vibration du réseau cristallin ou de l'énergie des états électroniques en fonction du vecteur d'onde \vec{k} caractérisant la propagation de l'onde considérée (de nature vibrationnelle ou électronique).

Le réseau réciproque associé à la structure de type zinc-blende est cubique centré. Sa maille élémentaire, qui correspond à la première zone de Brillouin est représentée sur la figure I-3.

Elle présente un centre de symétrie Γ à l'origine ($\vec{k}=0$) et des axes de symétrie :

- les axes $\langle 100 \rangle$ à symétrie d'ordre 4 (Δ),
- les axes $\langle 111 \rangle$ à symétrie d'ordre 6 (Λ),
- les axes $\langle 011 \rangle$ à symétrie d'ordre 2 (Σ).

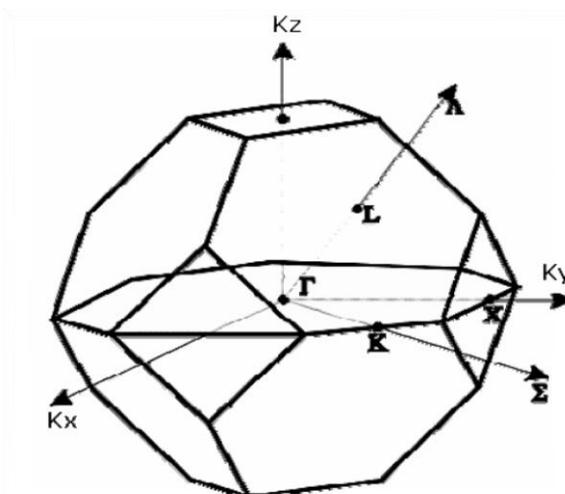


Figure I-3 : Première zone de Brillouin d'un réseau cubique à faces centrées.

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

- points X de coordonnées $(2\pi/a, 0, 0)$ sur les axes $\langle 100 \rangle$.
- points L de coordonnées $(\pi/a, \pi/a, \pi/a)$ sur les axes $\langle 111 \rangle$.
- points K de coordonnées $(0, 3\pi/2a, 3\pi/2a)$ sur les axes $\langle 011 \rangle$.

La forme et le volume de la zone de Brillouin ne dépendent que de la géométrie du réseau de Bravais, sans égard à la composition chimique ou au nombre d'atomes dans la cellule unitaires. La zone de Brillouin est une cellule unitaire primitive de réseau réciproque d'importance fondamentale pour l'étude des propriétés électroniques des cristaux, en particulier dans les semi conducteurs [13,14].

I-3.2 Structure de bande d'énergie

La structure de bande d'un corps solide est déterminée par la dépendance fonctionnelle de l'énergie par rapport au vecteur d'onde dans les différentes zones de Brillouin. Le Phosphore d'Indium est un semi-conducteur à gap direct, sa structure de bande est assez complexe, nous nous intéressons aux bandes de conduction et de valence qui interviennent dans les propriétés de transport du matériau (figure I-4).

La bande de conduction de l'InP présente un minimum principal de symétrie Γ au centre de la zone de Brillouin en $\vec{K} = 0$, en plus du minimum principal, la bande de conduction présente des minima secondaires dans les directions $\langle 100 \rangle$ et $\langle 111 \rangle$ correspondant respectivement aux vallées X et L .

La bande de valence comporte deux sous bandes qui se rejoignent en $\vec{K} = 0$ et une troisième située à une distance égale à la valeur de l'énergie de couplage spin-orbite. Au voisinage du centre de la zone de Brillouin, les deux sous-bandes de valence peuvent être assimilées à deux paraboles de trous dépendent de l'énergie des porteurs.

La largeur de la bande interdite non permise aux porteurs $E_g = 1.35$ eV à 300K° , cette valeur varie avec la température où la largeur du gap diminue quand la température augmente ; a $T=0\text{K}^\circ$ $E_g=1.42$ eV [3,16].

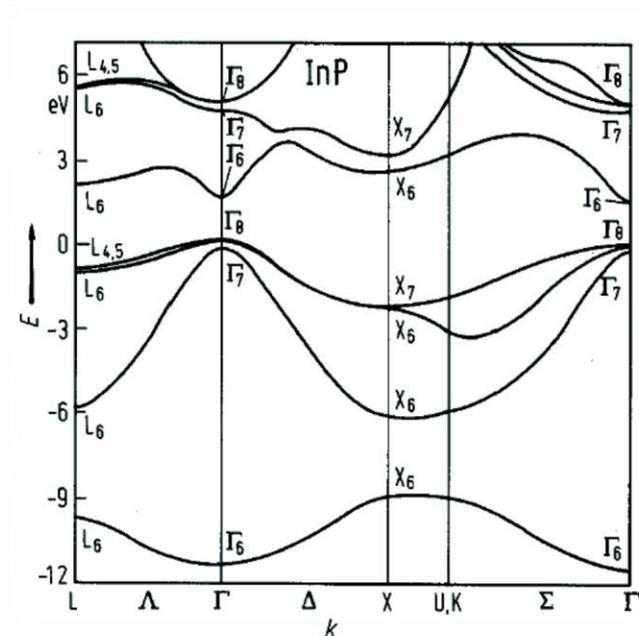


Figure I-4: Structure de bande de l' InP [17].

I-3.2 .1 Variation de la bande interdite avec la température

L'énergie de la bande interdite varie en fonction de la température selon une loi empirique donnée par [18]:

$$E_g(T) = E_g(0) - \frac{\alpha \times T^2}{\beta + T} \quad (\text{I.1})$$

Pour Le phosphure d'indium (InP) : $\alpha = 4,9 \cdot 10^{-4}$ [eV / °k]

$$\beta = 327 \text{ K}$$

$$E_g(0) = 1.421 \text{ [eV]}$$

Elle correspond à une faible diminution de la largeur de la bande interdite avec la temperature.

I.3.2.2 Composante de rétrécissement dûe au dopage (Bandgap Narrowing)

Les dopants agissent sur les semi-conducteurs en recevant, ou en libérant des électrons. En termes d'énergie, cela se traduit par l'apparition de niveaux d'énergies situés dans la bande interdite, proches soit de l'énergie de valence, soit de l'énergie de conduction selon le type donneur ou accepteur. À forte concentration, leurs niveaux d'énergie discrets s'élargissent et créent une extension des niveaux d'énergie permis. Ce phénomène provoque alors le rétrécissement de la bande interdite. Le dispositif étudié comporte des zones très dopées, il est nécessaire alors de prendre en compte cet effet.

Pour l'InP type n: $\Delta E_g \approx 22,5 \cdot 10^{-9} N_d^{1/3}$ (eV) [19].

Pour l'InP type p: $\Delta E_g \approx 10,3 \cdot 10^{-9} N_a^{1/3} + 4,43 \cdot 10^{-7} N_a^{1/4} + 3,38 \cdot 10^{-12} N_a^{1/2}$ (eV).

I-3.3 Semi-conducteur Intrinsèque

Un semi-conducteur intrinsèque est un matériau dépourvu de toute impureté susceptible de modifier la densité des porteurs. Les électrons de la bande de conduction ne pouvant résulter que de l'excitation thermique des électrons de la bande de valence, les trous et les électrons existent nécessairement par paires ($n_i = p = n$), donc on obtient les expressions suivantes, pour la concentration intrinsèque des porteurs et le niveau de Fermi intrinsèque :

L'expression de la concentration intrinsèque « n_i » en fonction de la température est donnée par :

$$n_i(T) = \sqrt{N_c N_v} \times e^{\left(-\frac{E_g(T)}{2k_B T}\right)} \quad (\text{I.2})$$

Où : N_c et N_v sont respectivement la densité effective d'états des électrons dans la bande de conduction et la densité effective d'états des trous dans la bande de valence.

$$N_c(T) = 2 \times \left(\frac{2\pi k_B T m_e^*}{h^2}\right)^{3/2} \approx 1,1 \times 10^{14} \times T^{3/2} \text{ (cm}^{-3}\text{) pour l'InP} \quad (\text{I.3})$$

$$N_v(T) = 2 \times \left(\frac{2\pi k_B T m_t^*}{h^2}\right)^{3/2} \approx 2,2 \times 10^{15} \times T^{3/2} \text{ (cm}^{-3}\text{) pour l'InP} \quad (\text{I.4})$$

I-3.4 Différent type de dopage

Les semi conducteurs intrinsèques n'ont pas une grande utilité en tant que tels ; ils servent de base aux semi conducteurs dopés : on y rajoute des impuretés pour modifier leur comportement.

Il existe deux types de semi conducteurs extrinsèques [19]:

I-3.4.1 Semi- conducteur dopé n

Matériau dopé n est un semi-conducteur dont la concentration en électrons est largement supérieure à la concentration en trous.

Dans le cas où les substrats sont dopés sur tout le volume, on retrouvera, dans le cas du type n , les dopants étain (Sn) ou soufre (S). L'étain se substitue à l'atome d'indium alors que le soufre occupe la position de l'atome de phosphore. La valeur de la concentration maximale qui a été rapportée par Thompson et al. (1970) est de $3.10^9 \text{cm}^{-3}(\text{S})$. La technique que l'on emploie le plus fréquemment pour créer une région dopée surfaciale de type n est l'implantation ionique d'atomes de silicium (Si). On crée également des couches épitaxiales dopées au soufre et au tellure (Te). Parmi les autres éléments pouvant jouer le rôle de dopant de type n , il y a le germanium (Ge) et le titane (Ti). L'apport de ces dopants s'effectue uniquement lors de la métallisation de la surface.

I-3.4.2 Semi-conducteur dopé p

Il s'agit d'un semi-conducteur dont la concentration en trous est largement supérieure à la concentration en électrons.

Les substrats de type p sont dopés avec des atomes accepteurs peu profonds tels le zinc (Zn), le béryllium (Be), le mercure (Hg) ou le cadmium (Cd). Parmi ceux-ci, c'est le zinc qui est, de loin, le plus souvent employé. La plus forte concentration de dopant qui a été rapportée dans la littérature dans le cas du substrat de type p , est de $7.10^{18} \text{cm}^{-3} (\text{Zn})$ (Tuck et al., 1977). Le magnésium (Mg) est aussi un élément qui se comporte comme un dopant de type accepteur dans l'InP.

I-3.5 Propriété thermique du phosphore d'indium

Dans les semi-conducteurs; les principales grandeurs physiques qui déterminent les propriétés thermiques sont la conductivité thermique et la température de debye [4].

I-3.5.1 Conductivité thermique

La conductivité thermique est la grandeur physique qui caractérise l'aptitude d'un corps à conduire la chaleur. Elle est symbolisée par la lettre grecque λ (lambda). La conduction thermique est le mode de transfert de chaleur associée à cette grandeur.

Plus la conductivité thermique d'un matériau est élevée, plus celui-ci conduit la chaleur, et donc moins il est isolant. Dans le système international d'unités. La conductivité thermique dépend principalement de la nature du matériau et de la température mais d'autres paramètres tels que l'humidité et la pression interviennent également.

Pour le phosphore d'indium $\lambda = 0.68 \text{ W cm}^{-1} \text{ }^\circ\text{C}^{-1}$.

I-3.5.2 Température de Debye

La température de Debye T_D définit la valeur maximale des énergies des vibrations. Cette grandeur physique peut être déterminée à partir de la chaleur spécifique ou bien à partir des coefficients élastiques. Les valeurs les plus souvent données dans la littérature est 425 K

I-3.6 Phénomène de transport

En présence d'un champ électrique E , les électrons sont accélérés et subissent diverses collisions, pour des champs faibles la vitesse V_n de dérive des électrons est donnée par la relation:

$$V_n = \mu_n \cdot E \quad (\text{I.5})$$

La constante de proportionnalité $\mu_n = \frac{q \cdot \tau}{m_e^*}$ est appelée mobilité des électrons.

τ : le temps de relaxation du moment électronique.

m : la masse de l'électron

m_e^* : la masse effective de l'électron.

La mobilité est d'autant plus importante que la masse effective m^* soit faible, c'est-à-dire quand les électrons sont dans la vallée Γ . Pour un champ électrique supérieur au champ critique E_c une partie des porteurs (électrons) a assez d'énergie pour passer des vallées latérales L et X. le comportement des électrons dans le Phosphore d'Indium est particulier, la vitesse d'entraînement décroît à champ élevé, ceci est encore dû à l'échauffement des porteurs qui sont

transférés dans des états supérieurs de la bande de conduction correspondant à une mobilité plus faible que celle des états inférieurs.

La vitesse électronique maximale est de l'ordre de 2.5×10^7 cm/s à la température ambiante, la caractéristique vitesse champ électrique est représentée sur la figure I-5. En régime stationnaire, pour les champs électriques très supérieurs à E_c , presque la totalité des électrons est répartie dans les vallées L ou X, la vitesse moyenne des électrons tend vers une valeur de saturation de l'ordre de 10^7 cm/s à 300K° [21].

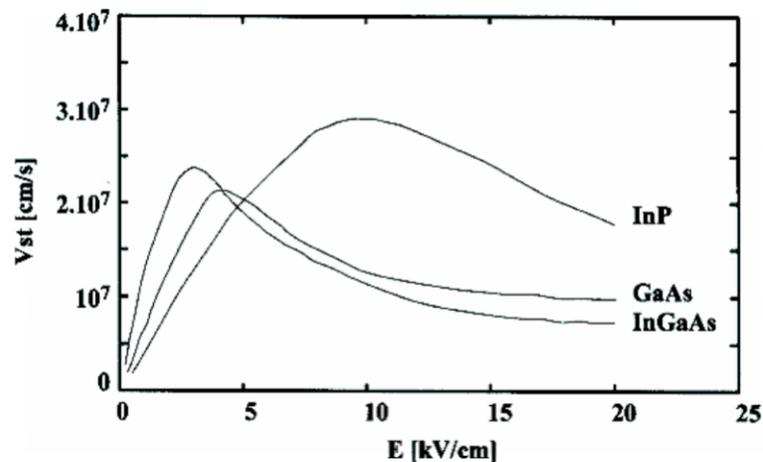


Figure I-5: La caractéristique vitesse champ électrique de l'InP.

I-3.7 La mobilité des porteurs dans InP

La mobilité μ et le temps de relaxation τ sont des paramètres phénoménologiques qui recouvrent des mécanismes de diffusion dont le traitement quantitatif fait appel à des formalismes relativement lourds et qui nécessitent des hypothèses simplificatrices.

Conformément à la définition, ces effets sont discutés en terme de mobilité et de relaxation.

Les paramètres qui influent le plus sur la mobilité des porteurs de charge sont la température et le nombre volumique d'impuretés. On distingue quatre types d'interaction entre les porteurs libres et le réseau :

- les vibrations du réseau ou phonons,
- les impuretés ionisées,
- les impuretés neutres,
- les collisions électrons-électrons ou électrons-trous.

Ces effets sont en quelque sorte des perturbations de la périodicité parfaite d'un réseau cristallin qui détermine la structure de bandes. Parmi toutes les origines de perturbation, ce sont les interactions avec les phonons (ou vibrations du réseau) et avec les impuretés qui jouent le rôle le plus important dans les semi-conducteurs. En particulier, ces mécanismes permettent d'expliquer la variation de la mobilité en fonction de la température $\mu(T)$. La mobilité des électrons (μ_n) et des trous (μ_p) sont des paramètres physiques prépondérants pour les dispositifs micro-ondes.

Sous fort champ électrique la vitesse de dérive des porteurs n'augmente pas de façon linéaire en fonction du champ électrique. Ce phénomène de saturation de la vitesse des porteurs peut être décrit comme la dégradation de la mobilité.

L'expression suivante de Caughey et de Thomas [20] est employée pour mettre en application une mobilité dépendante du champ. Ceci fournit une transition douce entre le champ de valeur basse et le comportement de champ de valeur élevée où:

$$\mu_i(N) = \mu_{min.i} + \frac{\mu_{max.i} - \mu_{min.i}}{1 + \left(\frac{N}{N_{g.i}}\right)} \quad (I.6)$$

Où $i = n, p$ pour les électrons et les trous respectivement pour l' InP.

N La concentration de dopage (cm^{-3}).

N_g Le dopage critique dépendant du matériau (cm^{-3}).

γ Une constante .

A de faibles dopages et à température ambiante, la diffusion des phonons est le mécanisme de dominant.

$$\mu_{max.i} = \mu_{L.i} \quad (I.7)$$

Où $\mu_{L.i}$ est la composante de la mobilité du réseau (phonon).

La mobilité des phonons dépend de température et s'écrit sous la forme:

$$\mu_L = \mu_L(T_0) \left(\frac{T}{T_0}\right)^{-\alpha} \quad (I.8)$$

A partir de l'Equation. (I.7) :

$$\mu_{max.i} = \mu_{max.i}(T_0) \left(\frac{T}{T_0}\right)^{-\alpha_i} \quad (I.9)$$

La contribution de l'interaction des impuretés peut être obtenue en soustrayant la contribution de phonon de la mobilité totale décrite par la relation (I.6)

$$\mu_{I,i} = \mu_{max.i} \left[\frac{\mu_{max.i}}{\mu_{max.i} - \mu_{min.i}} \frac{\mathbf{1} + \left(\frac{N}{N_{g,i}}\right)^{\gamma_i}}{\left(\frac{N}{N_{g,i}}\right)^{\gamma_i}} - \mathbf{1} \right] \quad (\text{I.10})$$

En combinant les deux équations (I.7) et (I.10) on obtient :

$$\frac{\mu_{max.i} - \mu_{min.i}}{\mathbf{1} + \left(\frac{N}{N_{g,i}}\right)^{\gamma_i}} \left(\frac{N}{N_{g,i}}\right)^{\gamma_i} = \frac{\mu_{L,i}}{\mathbf{1} + \frac{\mu_{I,i}}{\mu_{L,i}}} \quad (\text{I.11})$$

Substituant (I.11) et (I.6) et tenant en compte de

$$\mu_L = \mu_L(T_0) \left(\frac{T}{T_0}\right)^{-\alpha} \text{ et } \mu_I = \mu_I(T_0) \left(\frac{T}{T_0}\right)^{\beta} \quad (\text{I.12})$$

La relation (I.6) peut écrire sous la forme suivante:

$$\mu_i(N, T) = \mu_{max.i}(T_0) + \frac{B_i(T_0) \left(\frac{T}{T_0}\right)^{\beta_i}}{1 + B_i(T_0) \left(\frac{N}{N_{g,i}}\right)^{\alpha_i + \beta_i}} \quad (\text{I.13})$$

Où

$$B_i(N) = \left[\frac{\mu_{max.i} + \mu_{max.i} \left(\frac{N_{g,i}}{N}\right)}{\mu_{max.i} - \mu_{min.i}} \right]_{T=T_0} \quad (\text{I.14})$$

il est remarquable que les expressions (I.13) et (I.14) décrivent la dépendance de la mobilité en fonction de la température dans les limites de faibles et forts dopages.

I-3.8 Mécanismes de recombinaison

Nous présentons dans ce paragraphe les trois mécanismes les plus courants pour la Recombinaison de porteurs excédentaires [21,22]:

I-3.8.1 Recombinaison Shockley-Read-Hall (SRH)

Ce processus de recombinaison est indirect (Figure I-6). En effet, il se produit par l'intermédiaire de niveaux profonds E_t situés dans la bande interdite et s'accompagne de vibrations de réseau (émission de phonons).

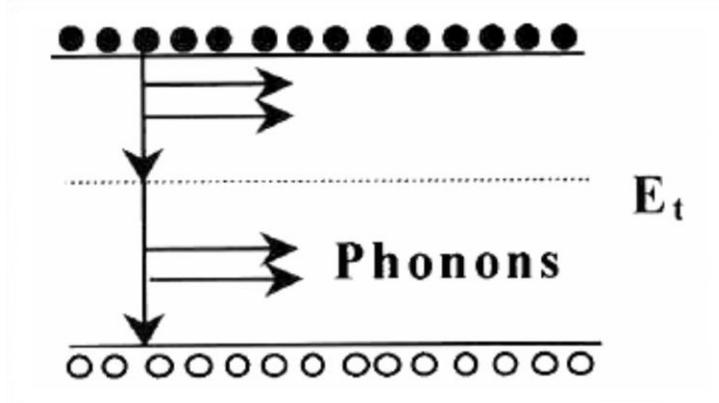


Figure I-6 : Processus de recombinaison SRH.

Le taux de recombinaison de type Shockley-Read-Hall est donné par:

$$R_{SRH} = \frac{np - n_0p_0}{\tau_p(n + n_0) + \tau_n(p + p_0)} \quad (I.13)$$

Où τ_n et τ_p sont les temps de vie des porteurs, n_0 et p_0 sont les densités de porteurs à l'équilibre thermodynamique.

Pour l'InP type n: $n_0 \sim 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ $\tau_p \sim 3 \cdot 10^{-6} \text{ s}$.

Pour l'InP type p: $p_0 \sim 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ $\tau_p \sim 2 \cdot 10^{-9} \text{ s}$.

I-3.8.2 Recombinaison Auger

Dans ce mécanisme un électron se recombine avec un trou de la bande de valence et l'énergie dissipée est gagnée par un troisième porteur. La recombinaison Auger peut être directe (Figure I-7.a) ou indirecte (Figure I-7.b). La recombinaison Auger indirecte peut se produire **lorsque le semi-conducteur est fortement dopé.**

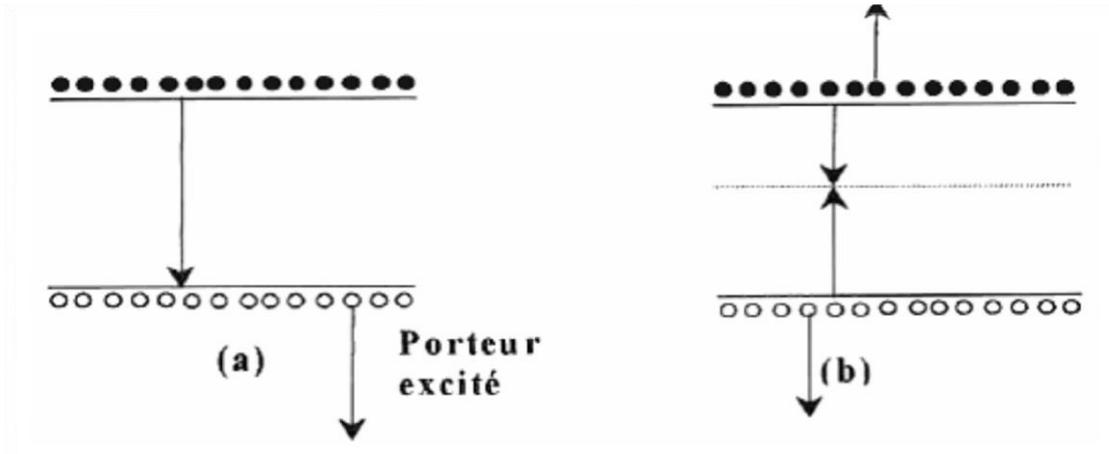


Figure I-7: Processus de recombinaison Auger : (a) directe, (b) indirecte.

Le taux de recombinaison est donné par la relation :

$$R_{Auger} = (C_n n + C_p P)(pn - n_i^2) \quad (I.14)$$

C_n et C_p sont, respectivement, les coefficients Auger pour les électrons et les trous, L'ensemble des résultats expérimentaux indique que le coefficient Auger total $C = C_n + C_p$ est de l'ordre de $9 \cdot 10^{-31} \text{ cm}^6/\text{s}$ pour le InP à $T = 300 \text{ K}$.

I-3.8.3 Recombinaison radiative

C'est une transition d'un électron de la bande de conduction à la bande de valence accompagnée de l'émission d'un photon (Figure I-8.a). La recombinaison radiative peut aussi se produire par l'intermédiaire de niveaux profonds (Figure I-8.b).

Ce processus est important pour les matériaux à bande interdite directe comme le GaAs et faible pour les matériaux à gaps indirects comme le Si. De ce fait, ce mécanisme n'influe pas

considérablement sur la durée de vie des porteurs minoritaires. Le taux de recombinaison est proportionnel à la fois au nombre d'électron et au nombre de trous :

$$R = B(pn - n_i^2) \quad (\text{I.15})$$

B est le coefficient de recombinaison radiative, il dépend de la température et sa valeur expérimentale à la température ambiante égale à $1.2 \times 10^{-10} \text{ cm}^3/\text{s}$ [19].

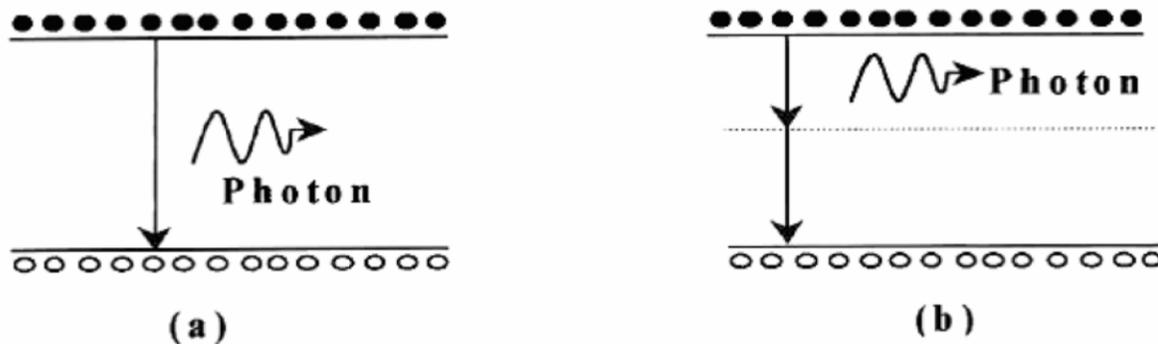


Figure I-8 : Processus de recombinaison radiative: (a) directe, (b) indirecte.

I-3.8.4 Recombinaison en surface

L'ensemble des mécanismes précédents constitue des recombinaisons ayant lieu en volume du matériau. Il faut également considérer les recombinaisons en surface dont le mécanisme est représenté sur la figure (I-9). Le formalisme du mécanisme de recombinaison SRH peut être reformulé dans ce cas, avec des recombinaisons par unité de surface plutôt que par unité de volume. Le taux de recombinaison en surface est donné par l'expression suivante :

$$R_{surf} = \frac{(pn - n_i^2)}{\tau_p^{eff}(n + n_0) + \tau_n^{eff}(p + p_0)} \quad (\text{I.16})$$

τ_n^{eff} est la durée de vie effective

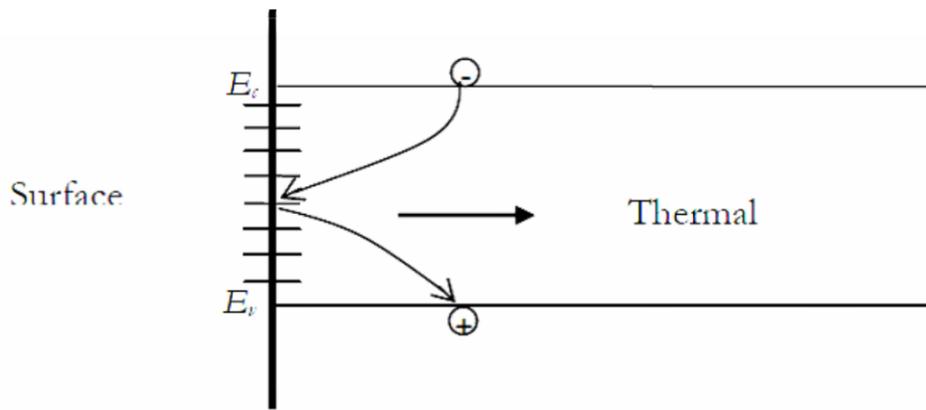


Figure I-9: Mécanisme de recombinaison en surface pour des surfaces fortement dopées, le mécanisme de recombinaison Auger domine la vitesse de recombinaison en surface.

I-3.8.5 Influences relatives des différents mécanismes de recombinaison sur la durée de vie

- ❖ La recombinaison SRH se produit lorsque des impuretés ou des défauts sont présents dans le semi-conducteur. Puisque les impuretés sont toujours présentes, ce mécanisme est toujours actif et donc toujours pris en compte. Il est particulièrement important pour les semi-conducteurs à gap indirect tels que le silicium (Si), le germanium (Ge) et le phosphore de gallium (GaP). La durée de vie SRH est inversement proportionnelle à la concentration des centres recombinants et des sections efficaces et est indirectement liée à l'énergie des impuretés via les sections efficaces de capture. Celles ci sont plus importantes pour des niveaux d'énergies proches du milieu de la bande interdite.
- ❖ La recombinaison radiative, contrairement à la recombinaison SRH, est importante pour des matériaux à gap direct comme l'arséniure de gallium (GaAs) et le phosphore d'indium (InP), l'énergie dans ce cas est dissipée sous forme de photons
- ❖ La recombinaison Auger, quant à elle, peut se produire pour les matériaux à gap direct comme pour ceux à gap indirect pour des matériaux fortement dopés.
- ❖ Les recombinaisons Auger et radiative peuvent aussi se manifester via des niveaux pièges situés dans la bande interdite.

I-3.9 Intérêt de l'InP

Grâce à ses propriétés intrinsèques notamment la grande mobilité des électrons et sa structure de bande à transition directe, le Phosphore d'Indium, qui est un semi-conducteur III-V offre un large champ d'application dans des domaines très divers incluant, l'optoélectronique intégrée, les hyperfréquences pour la télécommunication et les circuits logiques ultra-rapides. Le développement de ces dispositifs nécessite, entre autres, l'étude préalable de structures métal-semiconducteur (MS) et métal-isolant-semiconducteur (MIS) réalisées avec ce matériau.

Cependant, le gros obstacle à la réalisation de composants exploitables sur semiconducteur III-V réside dans la difficulté à contrôler de manière performante et reproductible leurs propriétés électroniques de surface. En effet, au contraire de la silice, les oxydes natifs des composés III-V ne semblent pas posséder naturellement des qualités convenables. De ce fait, la passivation de la surface des composants pour assurer leur stabilité dans le temps et en fonctionnement et plus particulièrement, l'obtention des couches isolantes propres au fonctionnement du transistor MISFET, s'avèrent très délicates. Le semi-conducteur est promis à un grand avenir par la diversité de leurs propriétés [20].



Chapitre II:

Théorie du contact schottky

II-1 Introduction

Dans ce chapitre nous intéresserons à l'étude des contacts Schottky de type n , et de présenter les bases indispensables à la compréhension du sujet. Nous nous donnons d'abord quelques notions sur la structure métal semi-conducteur et les phénomènes physiques du contact métal semi-conducteur. Ensuite nous donnons une description de certains des modèles de base qui concernent la formation de la barrière de potentiel et discutons leurs propriétés et implications générales. Puis nous étudions brièvement les mécanismes de conduction dans les diodes Schottky. Ensuite, nous présentons le modèle inhomogène de Werner où la barrière de potentiel est suppose fluctuée selon une distribution gaussienne.

II-2 La structure Métal/Semi-conducteur

La structure métal/semi-conducteur est le dispositif unipolaire le plus simple à base d'un grand nombre de structure plus complexe. Les structures métal/semi-conducteur sont particulièrement bien adaptées à la technologie des composants hyperfréquences. Elles sont souvent réalisées en ouvrant une fenêtre et en déposant sous vide un film métallique qui entre en contact intime avec le semi-conducteur.

Pour étudier la jonction métal/semi-conducteur, il faut connaître deux paramètres essentiels [23,24]:

1. Le travail de sortie du métal.

2. L'affinité électronique du semi-conducteur.

II-2.1 Travail de sortie du métal

Le travail de sortie du métal $e\phi_M$ est défini comme l'énergie minimale qu'il faut fournir à un électron situé au niveau de Fermi pour l'arracher du métal et l'amener au niveau du vide Nv .

Le travail de sortie d'un métal est donc :

$$e\phi_M = Nv - E_{FM} \quad (\text{II-1})$$

On note que $e\phi_M$: est une constant physique du métal considéré.

Le travail de sortie des métaux peut varier de 2 eV à 6 eV. Toutefois, les métaux les plus utilisables dans la fabrication des composants électroniques ont une gamme beaucoup plus

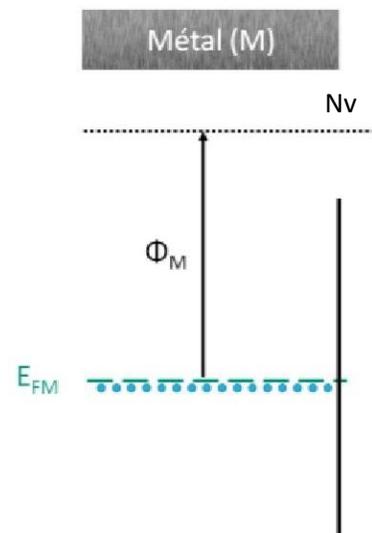


Figure II-1 : Diagrammes de bandes pour un métal

restreinte qui s'étende de 4,3 eV à 5,7 eV. Dans le tableau suivant nous donnons quelques valeurs du travail de sortie de certains métaux.

Métal	Cr	Fe	Ni	Al	Ag	Au	Cu	Pt
$e\phi_M(\text{eV})$	4,6	4,4	4,4	4,3	4,3	4,8	4,4	5,3

Tableau II-1: Travaux de sortie de quelques métaux

II-2.2 Affinité électronique du semi-conducteur

Dans les semi-conducteurs et les isolants, le travail de sortie est défini de la même manière. Cependant pour les semi-conducteurs la position du niveau de Fermi dépend du dopage.

Sauf pour les semi-conducteurs dégénères, il n'y a pas d'électrons au niveau de Fermi. On définit l'affinité électronique comme l'énergie qu'il faut fournir à un électron situé dans le bas de la bande de conduction pour l'amener au niveau du vide.

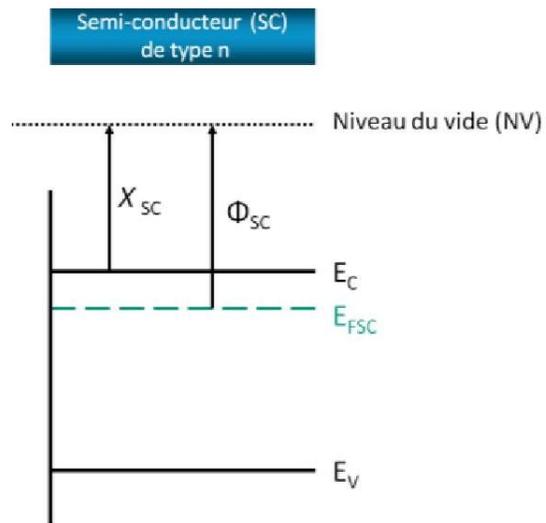


Figure II-2 : Diagrammes de bandes pour un Semi-conducteur de type (n).

Donc :

$$e\phi_{sc} = Nv - E_{FSC} \quad (\text{II-2})$$

$$e\chi_{sc} = Nv - E_C \quad (\text{II-3})$$

Cette grandeur physique est une constante du semi-conducteur. Le tableau suivant donnant l'affinité électronique de quelques semi-conducteurs.

Semi-conducteur	Si	Ge	GaP	InP	CdTe	GaAs
$e\chi_{sc}$ (eV)	4,01	4,13	4,30	4,38	4,22	4,07

Tableau II-2: Travaux de sortie et affinité électronique de quelques Sc.

II-2.3 Modèles physiques de la jonction métal semiconducteur

II-2.3.1 Modèle Schottky et Mott

En 1938, Schottky [25] et Mott [26] établissent un modèle pour évaluer la barrière d'énergie entre un métal et un semi-conducteur. Le semi-conducteur et le métal sont supposés être électriquement neutres et sans aucune charge de surface. Pour illustrer ce modèle, prenons une jonction métal/semi-conducteur de type n , Figure II-3. Lorsque les deux matériaux sont mis en contact, et quand le travail de sortie du métal est supérieur à celui du semi-conducteur ($\phi_M > \phi_{sc}$), les électrons du semi-conducteur ont une plus grande énergie que ceux du métal. Ils vont donc passer du semi-conducteur vers le métal en laissant derrière eux des donneurs ionisés qui ne sont plus compensés. A l'équilibre thermodynamique, les niveaux de Fermi sont alignés ce qui entraîne la courbure des bandes vers le haut côté semi-conducteur. Une zone de charge d'espace (ZCE) notée W (positive dans le cas étudié) apparaît alors entre les deux matériaux. Il se crée une accumulation d'électrons à l'interface côté métal. La ZCE créée s'étend davantage côté semi-conducteur alors que le nombre de charges positives côté semi-conducteur est le même que le nombre de charges négatives accumulées à l'interface côté métal. En effet, les charges négatives accumulées côté métal entraînent également la création d'une ZCE. L'importante densité d'états, présente dans le métal (10^{22} cm^{-3}), entraîne la création de cette ZCE sur quelques angströms seulement, ce qui conduit à une courbure des bandes négligeable. Côté semi-conducteur, les charges proviennent des ions donneurs qui ont une densité d'environ $10^{16} - 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ répartie dans tout le semi-conducteur, la charge d'espace est donc plus étalée et la courbure des bandes est plus étendue.

La barrière de potentiel Φ_B observée est donnée par la relation suivante:

$$\phi_B = \phi_M - \chi_{sc} \quad (\text{II.4})$$

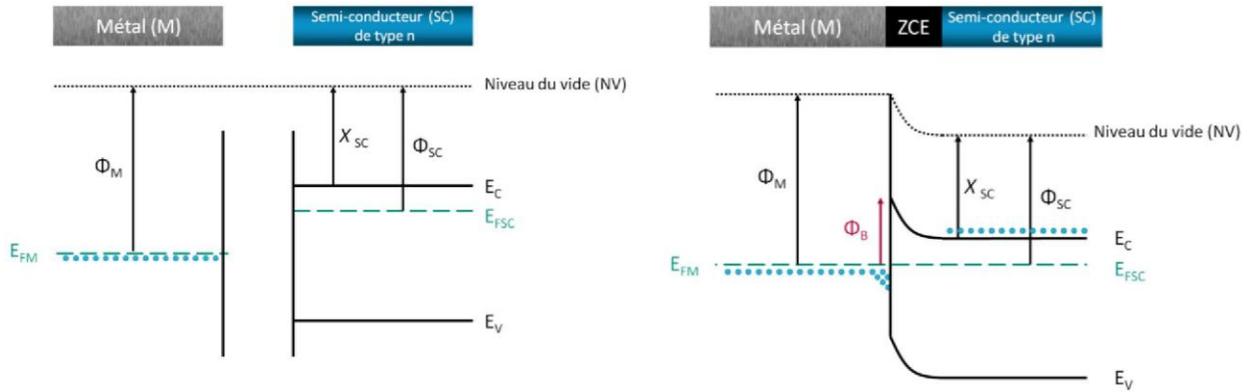


Figure II-3 : Diagramme des bandes d'énergie pour un métal et un semi-conducteur (n) lorsque $\phi_M > \phi_{sc}$ selon le modèle de Schottky et mott (a) avant mise en contact et (b) après mise en contact.

Si on applique une tension V positive entre le métal et le semi-conducteur, la bande de conduction s'élève de l'énergie qV et la courbure des bandes diminue comme le montre la Figure II-4.a. La barrière côté métal est inchangée mais celle côté semi-conducteur est réduite. L'équilibre n'existe plus, les électrons passent du semi-conducteur vers le métal en créant un courant direct I qui croît rapidement avec la polarisation.

Si on applique une tension V négative entre le métal et le semi-conducteur, la bande de conduction est abaissée de l'énergie qV ce qui augmente la hauteur de la barrière qui s'oppose à la diffusion des électrons du semi-conducteur vers le métal (Figure II-4.b).

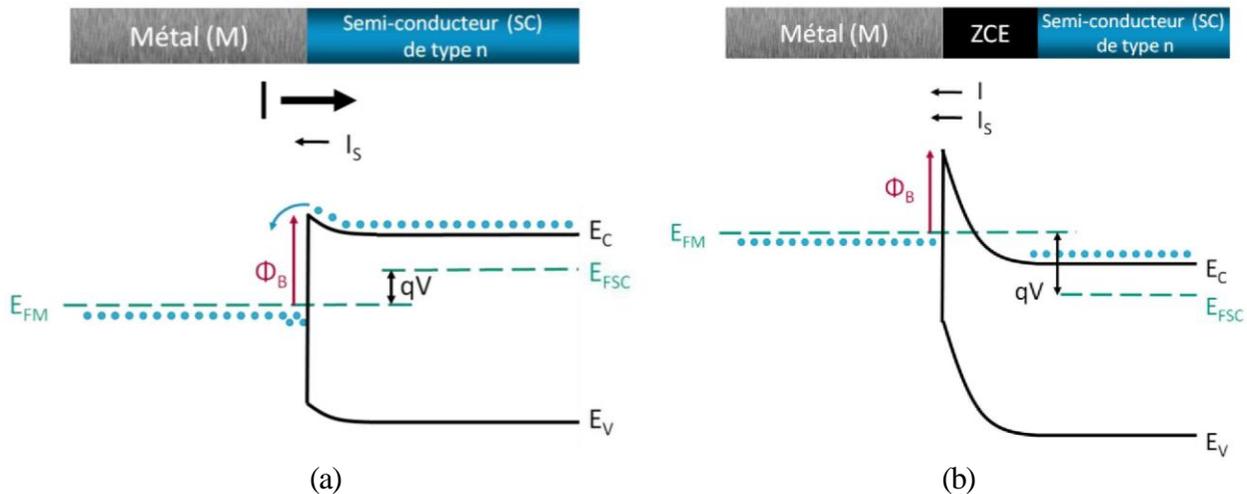


Figure II-4 : Schémas des bandes du contact métal/semi-conducteur [23] $\phi_M > \phi_{sc}$, pour une polarisation V : (a) positive et (b) négative.

Le courant d'émission entre le semi-conducteur et le métal n'existe plus, il ne subsiste que le flux de porteurs dans le sens métal-semi-conducteur qui est approximativement constant puisque

les porteurs voient toujours la même hauteur de barrière ϕ_B . Le courant inverse évolue donc peu avec la polarisation inverse. Le contact ainsi réalisé est de type Schottky.

Comme évoqué précédemment, le travail de sortie des métaux utilisés en microélectronique est supérieur à celui du semi-conducteur. L'obtention d'un contact ohmique nécessite l'utilisation d'un matériau fortement dopé sous le contact. Cet excès de dopant en surface va permettre de réduire la largeur de la zone de charge d'espace et de laisser passer les électrons à travers la barrière par effet tunnel. La Figure II-5 représente le diagramme des bandes d'un métal mis en contact avec un semi-conducteur fortement dopé en surface [27].

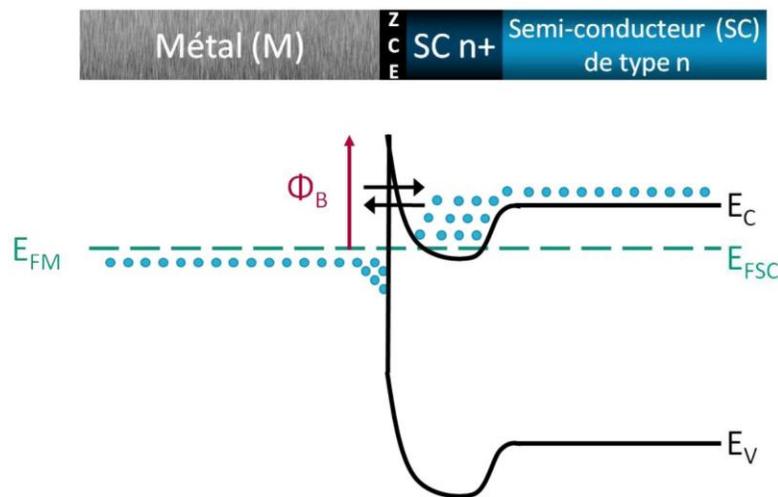


Figure II-5: Diagramme des bandes d'énergie pour un métal mis en contact avec un semi-conducteur fortement dopé.

Il faut prendre note que le modèle de Schottky suppose un contact parfait entre le métal et le semi-conducteur, c-à-d l'absence de toute couche interfaciale (oxyde). Selon ce modèle, le comportement électrique de la jonction est simplement déterminé par les valeurs des travaux de sortie, d'affinité électronique et de la largeur de la bande interdite. La hauteur de barrière dépend alors uniquement des propriétés volumiques du matériau.

II-2.3.2 Modèle de Bardeen

D'après la théorie de Schottky, la barrière de potentiel dépend de la nature du métal. Cependant, des résultats obtenus sur des jonctions réalisées à l'air ont montré que la barrière était indépendante de la nature du métal. J.Bardeen en 1947 [28], a montré que ceci était dû à la présence des états de surface existant sur le semi-conducteur. 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.

L'échange de charges par le semi-conducteur va donc se faire avec ces états et la hauteur de barrière est alors indépendante de la nature de métal déposé.

La Figure II-6 représente le diagramme d'énergie d'une jonction métal/semi-conducteur de type N en présence des états de surface. On définit le niveau neutre ϕ_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 semi-conducteur. ϕ_0 , est donc un paramètre énergétique qui caractérise les états de surface.

Lors de la formation du contact métal/semi-conducteur, 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 (Figure II-6.b):

$$\phi_B = \frac{E_g}{q} - \phi_0 \tag{II.5}$$

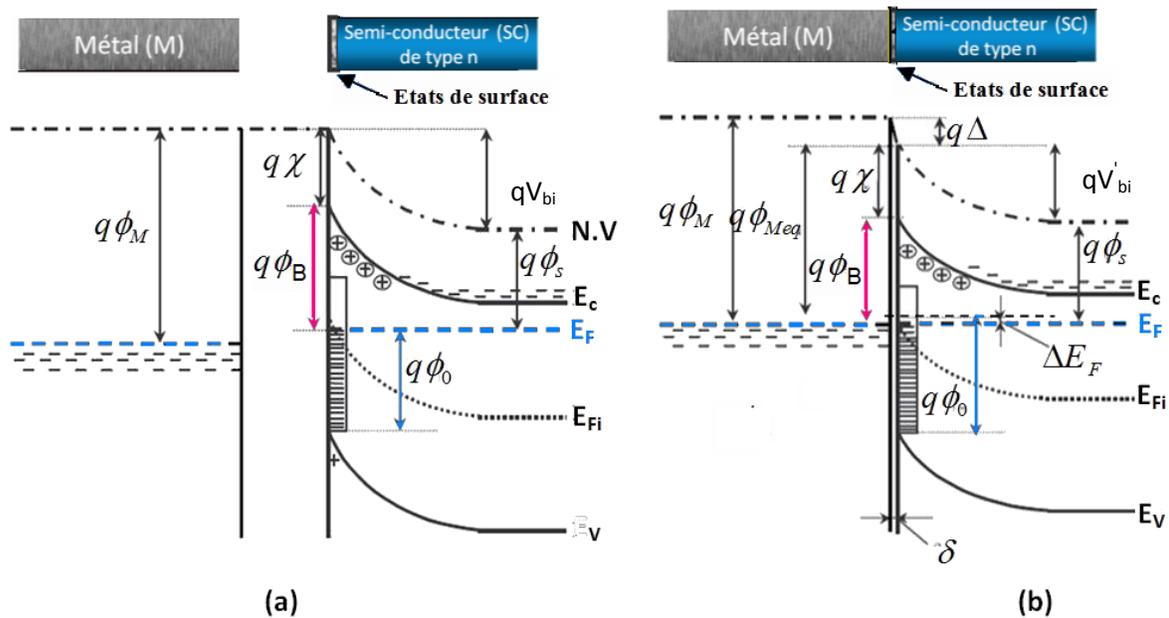


Figure II-6 : Schéma de bandes du contact métal/semi-conducteur d'après le modèle de Bardeen :

(a) avant contact et avec états de surface, (b) après contact et avec états de surface

II-2.3.3 Modèle de Cowley et Sze :

Les deux théories citées précédemment représentent chacune un cas limite. Dans un premier, la hauteur de la barrière dépend du métal et dans un deuxième, elle dépend des états de surface. Cependant le cas intermédiaire qui est d'ailleurs le plus fréquent, est celui où la barrière est gouvernée à la fois par les états de surface et par les travaux de sortie des matériaux.

A.M.Cowley et S.M.Sze [29] , ont proposé une théorie unifiant celle de Schottky et celle de Bardeen. Ils supposent l'existence entre les deux corps d'une couche interfaciale mince d'épaisseur δ .

La Figure II-7 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 [28]:

$$\phi_B = \gamma(\phi_M - x_{sc}) + (1 - \gamma) \left(\frac{E_g}{q} - \phi_0 \right) - \Delta\phi \quad (\text{II.6})$$

Où $\Delta\phi$ représente l'abaissement de la barrière par effet de la force image ou effet Schottky.

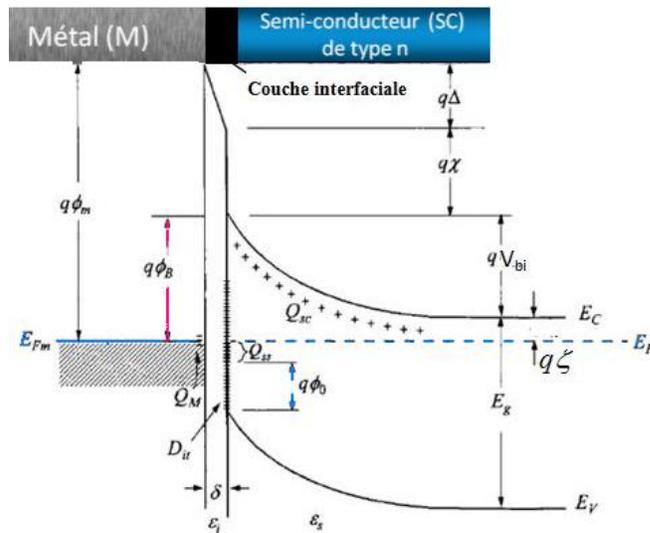
$$\Delta\phi = \left(\frac{qE}{4\pi\epsilon_{sc}} \right)^{1/2} \quad \text{et} \quad \gamma = \frac{\partial\phi_B}{\partial\phi_M} = \frac{\epsilon_i}{\epsilon_i + q^2\delta D_{it}} \quad (\text{II.7})$$

E étant le champ électrique, ϵ_s et ϵ_i représentent respectivement la permittivité du semiconducteur et de la couche interfaciale, l'épaisseur δ et D_{it} la densité des états d'interface.

γ est le rapport de la permittivité de l'interface sans états de surface à celle qui prend en compte des états de surface.

D'après l'expression (II.6), on retrouve les deux cas limites de Schottky et de Bardeen suivant que D_{it} tend vers zéro ou vers l'infini.

- si D_{it} tend vers l'infini, c'est-à dire qu'il y'a beaucoup d'états d'interface, alors γ tend vers 0 et 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).
- Si D_{it} tend vers Zéro, c'est-à dire qu'il n y'a pas d'états d'interface, alors γ tend vers l'unité. Donc, la hauteur de barrière est donnée par la relation de Mott-Schottky.



- 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
- Δ : la chute de tension dans la couche interfaciale

Figure II-7: Diagramme énergétique des bandes dans un contact métal semi-conducteur type n dans le cas général selon le modèle de Cowley et Sze.

II-2.3.4 Modèle de MIGS (Métal Induced Gap States)

Le travail de Heine [30] a été motivé par l'observation que les valeurs du paramètre γ sont fondamentalement les mêmes pour des interfaces avec et sans une couche interfaciale. Au lieu des états de surface, Heine souligne le rôle des (MIGS).

À n'importe quelle interface de solide/solide, il y a trois genres d'états électroniques : ceux qui se propagent des deux côtés de la jonction, ceux qui se propagent dans un matériel et s'affaiblissent dans l'autre matériel, et ceux qui s'affaiblissent entre les deux matériaux et sont localisé à l'interface.

Les MIGS appartiennent au deuxième groupe; ils ont des énergies dans le gap fondamental de semi-conducteur, et ils affaiblissent exponentiellement du côté semi-conducteur de la jonction.

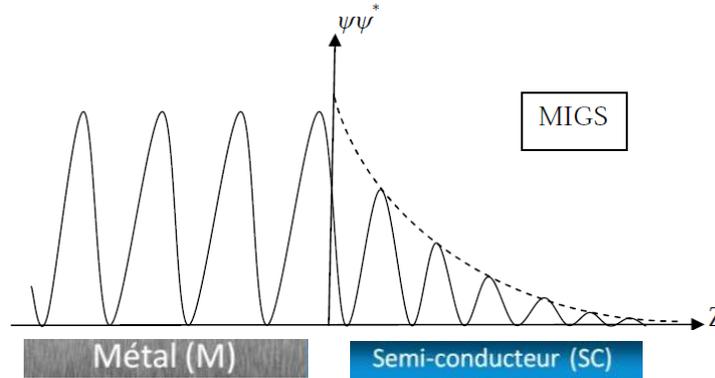


Figure II-8: Fonction d'onde aux interfaces métal / semi-conducteur.

Les queues de MIGS peuvent stocker une charge dans le semi-conducteur, à une certaine distance de la surface du métal, comme dans le cas des états de surface.

L'expression correspondante pour la pente γ a la même forme que dans le modèle de Cowley et Sze, mais D_{it} est remplacé par la densité extérieure de MIGS, D_{MIGS} , et l'épaisseur δ de couche interfaciale est remplacée par une distance efficace, connexe à la longueur d'affaiblissement δ_{MIGS} de queues de MIGS [31].

II-2.3.5 Modèle unifié de défaut (UDM)

Après le travail de Bardeen, il a été bientôt identifié que les états de surface intrinsèques du semi-conducteur ne pourraient pas d'une manière satisfaisante expliquer l'ancrage observé du niveau de Fermi aux contacts métal / semi-conducteur covalent.

En particulier, on le sait qu'il n'y a aucun tel état dans la bande interdite sur les surfaces (110) de GaAs [32], mais les contacts métal/GaAs (110) montrent toujours un ancrage du niveau de Fermi. Par conséquent, des états localisés extrinsèques ont été suggérés.

Pour des composés III-V, Spicer et Co-Workers, ont supposé que des défauts soient produits près de la surface de semi-conducteur quand le métal du contact est déposé sur cette surface. Ces défauts mènent à ancrer le niveau de Fermi. Ceci s'appelle le modèle unifié de défaut (UDM).

Hughes en 1986 a proposé que l'ancrage de NF soit provoqué par des défauts extrinsèques dans le semi-conducteur résultants de l'incorporation des impuretés ou des atomes de métal déposés dans le réseau du semi-conducteur.

II-3 Zone de charge d'espace (ZCE)

a) Zone désertée

Considérons la structure métal–semi-conducteur (n) avec $\phi_M > \phi_{sc}$, en intégrant l'équation de poisson et nous supposons que le semi-conducteur est homogène, avec une densité de donneurs excédentaires N_d ionisés à la température ambiante et que la densité d'état d'interface est négligeable [23,24].

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

$$E(x) = \frac{qN_d}{\epsilon_{sc}} (x - W) \quad (\text{II.8})$$

W est la largeur de la zone de charge d'espace et ϵ_{sc} est la constante diélectrique du Sc

La valeur du champ à l'interface est :

$$E_{Sc} = -\frac{qN_d}{\epsilon_{sc}} W \quad (\text{II.9})$$

Le potentiel scalaire est donné par :

$$V(x) = -\frac{qN_d}{\epsilon_{sc}} \left(\frac{x^2}{2} - Wx \right) \quad (\text{II.10})$$

La tension de diffusion résulte de la différence des travaux de sortie du métal et du Sc :

$$V_{bi} = \Phi_M - \Phi_{sc} \quad (\text{II.11})$$

Cette tension est correspond à la différence de potentiel entre la surface du semi-conducteur et son volume :

$$V_{bi} = V(x = W) - V(x = 0) = -\frac{qN_d}{\epsilon_{sc}} \left(\frac{W^2}{2} - W^2 \right) = \frac{qN_d}{2\epsilon_{sc}} W^2 \quad (\text{II.12})$$

D'où l'expression de la largeur de la ZCE à l'équilibre est :

$$W = \left(\frac{2\epsilon_s}{qN_d} V_{bi} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (\text{II.13})$$

Si on prend en considération la contribution des porteurs libres, la densité de charge s'écrit :

$\rho(x)=[N_d - n(x)]$ dans l'équation de poisson et la largeur devient:

$$W = \left(\frac{2\varepsilon_s}{qN_d} \left(V_{bi} - \frac{kT}{q} \right) \right)^{\frac{1}{2}} \quad (\text{II.14})$$

b) Capacité de la zone de charge d'espace

Si la structure est polarisée par une tension V , en inverse, la largeur de la ZCE devient :

$$W = \left(\frac{2\varepsilon_s}{qN_d} (V_{bi} - V) \right)^{\frac{1}{2}} \quad (\text{II.15})$$

$$C(V) = \left| \frac{dQ}{dV} \right| = \frac{\varepsilon_s}{W} \quad (\text{II.16})$$

Comme dans la jonction pn toute variation de V entraîne une modulation de W et par suite une modulation de la charge totale développée dans le Sc , il en résulte que la structure présente une capacité différentielle.

La charge d'espace est donnée par :

$$Q_{sc} = Q_M = qN_d W \quad (\text{II.17})$$

La capacité différentielle est donnée par :

$$C(V) = \left| \frac{dQ}{dV} \right| = \frac{\varepsilon_{sc}}{W} \quad (\text{II.18})$$

On peut écrire $C(V)$ sous la forme :

$$C^{-2}(V) = \frac{2}{\varepsilon_s q N_d} (V_{bi} - V) \quad (\text{II.19})$$

Cette formule est importante car elle montre qu'en traçant l'inverse du carré de la capacité en fonction de la tension, (qu'il est possible de faire varier), la variation de la pente de la courbe est directement proportionnelle au dopage (Figure II-9).

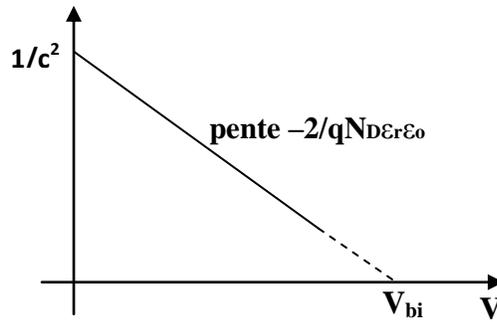


Figure II-9 : Variation du carré de l'inverse de la capacité en fonction de la tension. La pente de la courbe permet de déterminer la valeur de la concentration de dopant et la hauteur de barrière à l'équilibre thermodynamique.

II-3 Abaissement de la barrière : effet Schottky

La hauteur de la barrière ϕ_B du côté métal n'est pas exactement constante mais un peu affectée par la tension appliquée. Un abaissement de ϕ_B est observé à cause de l'effet miroir des charges produites dans le métal par les électrons dans le semi-conducteur. L'étude statistique montre que lorsqu'une charge est au voisinage d'un métal parfait, une charge miroir de même nature mais de signe opposé est créée à l'intérieur du métal à une distance égale à la distance qui sépare la surface du conducteur de la charge initiale. Par conséquent, la charge du semi-conducteur est attirée par le métal ce qui abaisse la barrière de potentiel ϕ_B . Cet abaissement de ϕ_B est appelé l'effet Schottky défini par la formule suivante [33] :

$$\Delta\phi_B = \sqrt{\frac{q\zeta_m}{4\pi\epsilon_s}} \quad (\text{II.20})$$

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

ζ_m : Champ électrique maximum appliqué.

ϵ_s : Permittivité du semiconducteur.

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

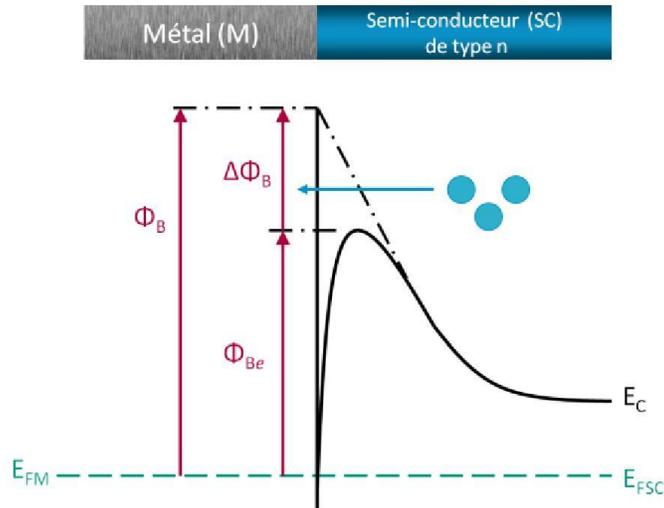


Figure II-10 : Diagramme de bande montrant l'effet Schottky dans un contact métal/semi-conducteur.

II-5 Mécanismes de conduction dans les diodes Schottky

La jonction métal/semi-conducteur est un dispositif unipolaire. Le courant est principalement dû au transport des porteurs majoritaires.

L'application d'une tension directe à une diode de Schottky donne naissance à un transport de courant qui peut se résumer en cinq mécanismes (Figure II-11) [34,35] :

- 1- Effet thermoïonique (ou effet Schottky) : Les porteurs majoritaires passent par-dessus la barrière de potentiel sous l'action d'une excitation (champ électrique) intense. Il est prédominant dans le cas où le semi-conducteur est faiblement dopé ($\leq 10^{17} \text{ cm}^{-3}$).
- 2- Effet tunnel : Les porteurs de charge franchissent directement la barrière de potentiel à sa base avec une énergie constante. Ce mécanisme est typique au cas de fort dopage où le semi-conducteur présente une barrière de potentiel très étroite avec le métal.
- 3- Effet recombinaison : c'est la recombinaison de paires électron-trou dans la zone de charge d'espace (ZCE) au travers de la bande interdite du semi-conducteur dans le cas d'existence de centres de recombinaison.
- 4- Injection de porteurs minoritaires. Un trou du métal se recombine avec un électron du semi-conducteur dans la zone quasi neutre du semi-conducteur.
- 5- Courant de recombinaison sur les états d'interface. Les électrons du semi-conducteur sont piégés au niveau d'un centre d'interface vide puis ils passent par effet tunnel dans le métal.

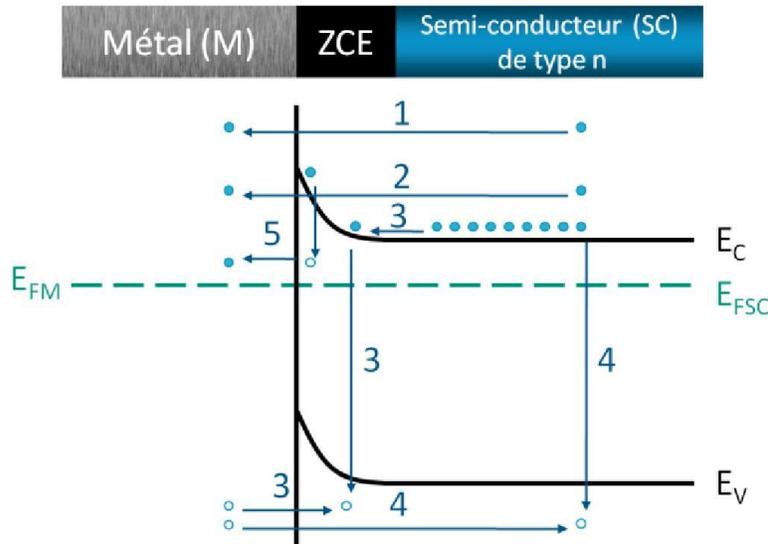


Figure II-11: Mécanismes de transport à travers d'une interface métal/semi-conducteur.

II-5.1 Émission au dessus de la barrière

II-5.1.1 L'émission thermoïonique

La théorie de l'émission thermoïonique a été abordée par de nombreux auteurs [33, 36]. Le courant dû à cet effet provient des électrons ayant une énergie supérieure à celle de la hauteur de barrière de potentiel. Sa validité repose sur le respect des hypothèses suivantes :

- la hauteur de barrière d'énergie est grande devant kT .
- les électrons à l'interface du semi-conducteur sont en équilibre thermique avec ceux du volume.
- le flux du courant n'affecte pas l'équilibre.

La considération de ces hypothèses implique que le pseudo niveau de Fermi reste constant dans la région de charge d'espace. Dans ces conditions, La densité du courant dû à l'émission thermoïonique des électrons au dessus de la barrière est donnée par l'expression:

$$J = J_0(e^{qV/KT} - 1) \quad (\text{II.21})$$

Où V est la tension appliquée, J_0 la densité de courant de saturation donnée par l'expression suivante :

$$J_0 = A^*T^2 e^{(-q\phi_B/KT)} \quad (\text{II.22})$$

Où T est la température, Φ_B la hauteur de barrière, et A^* la constante de Richardson donnée par l'expression suivante :

$$A^* = \frac{4\pi m_e^* k^2}{h^3} \quad (\text{II.23})$$

m_e^* : La masse effective de l'électron dans le semi-conducteur.

h : La constante de Planck.

Dans le cas pratique il faut tenir compte de la surface (A) de la diode et d'une résistance série R_s . Il faut donc remplacer l'équation (II.21) par.

$$J = J_0 \left(e^{\left(\frac{qV - R_s I}{nkT} \right)} - 1 \right) \quad (\text{II.24})$$

En analysant la courbe expérimentale courant tension, il est donc possible de trouver I_0 , R_s , n , et par conséquent Φ_B , pour autant que la surface A de la diode soit connue. Une manière élégante de traiter la relation (II.24) est de l'inverser, $V = f(I)$, et de trouver par fit ou simulation numérique les paramètres qui donnent la meilleure approximation de la courbe expérimentale.

II-5.1.2 Théorie de diffusion

Proposée par Schottky et Spence en 1939 [37], cette théorie suppose que les électrons migrent du semi-conducteur au métal par dessus la barrière en traversant la zone appauvrie du semi-conducteur, ce qui restreint le courant direct. En effet ce dernier est limité par la diffusion des porteurs à travers le champ électrique dans la zone de charge d'espace. Ce modèle est basé sur les suppositions suivantes :

- la hauteur de barrière d'énergie est supérieure au terme kT .
- l'effet des collisions d'électron dans la zone de déplétion est inclus.
- la concentration des porteurs est indépendante du flux du courant et est identique à celle de l'équilibre.
- la concentration des impuretés de semi-conducteur est non dégénérée.

La densité de courant total modélisée par Schottky est donnée par formule suivante :

$$J_n \approx q\mu_n N_c \zeta_m \left[e^{-\frac{q\phi_B}{kT}} \right] \left[e^{\frac{qV}{kT}} - 1 \right] \approx J_D \left[e^{\frac{qV}{kT}} - 1 \right] \quad (\text{II.25})$$

μ_n : mobilité des électrons.

N_c : densité effective d'états dans la bande de conduction du semi-conducteur .

ζ_m : champ électrique maximum à l'interface métal-semi-conducteur (pour l'InP: $\zeta_m = 5.10^5 \text{V/m}$).

V : tension appliqué

On remarque bien que l'expression des densités de courants des théories de la diffusion et de l'émission thermoïonique est très similaire. Cependant, la valeur de la densité de courant de saturation J_D de la théorie de diffusion dépend de la tension appliquée et est moins sensible à la température comparé à la valeur de la densité de courant de saturation J_{th} de la théorie de l'émission thermoïonique.

II-5.1.3 Théorie de l'émission-diffusion

La théorie combinée de l'émission thermoïonique-diffusion était présentée d'abord par Crowell et Sze en 1966 [38]. Dans cette théorie on définit une vitesse de recombinaison v_r au maximum potentiel. La densité de courant au sommet de la barrière est :

$$J_{TED} = \frac{qN_c v_r}{1 + v_r/v_d} \left[e^{-\frac{q\phi_B}{kT}} \right] \left[e^{\frac{qV}{kT}} - 1 \right] \quad (\text{II.26})$$

La vitesse de recombinaison est donnée par :

$$v_r = \frac{A^* T^2}{qN_c} \quad (\text{II.27})$$

v_d : vitesse effective de diffusion des électrons et donnée par :

$$v_d \approx \mu_n \zeta_m \quad (\text{II.28})$$

De l'équation (II.14) on distingue deux cas :

1. si $v_d \gg v_r$, le courant thermoïonique-diffusion est un courant d'émission thermoïonique ($J_{TED} = J_{TE}$).
2. si $v_d \ll v_r$, le courant thermoïonique-diffusion est un courant de diffusion ($J_{TED} = J_D$).

II-5.2 Mécanismes de conduction par effet tunnel

La conduction par effet tunnel est caractérisée par le passage à travers la barrière, des porteurs par effets quanta-mécaniques lorsque leur énergie n'est pas suffisante pour pouvoir la sauter et lorsqu'elle est suffisamment mince pour se laisser traverser. En effet, lorsque le dopage du semi-conducteur augmente, la courbure de la bande à l'interface s'accroît et la largeur de la zone appauvrie diminue, ce qui facilite le passage des électrons à travers la barrière. Plusieurs types de transport par effet tunnel existent parmi les plus intéressants on peut citer [34, 35]:

- l'émission par effet de champ ou effet tunnel pur (FE).
- l'émission thermoïonique assistée par effet de champ (TFE).

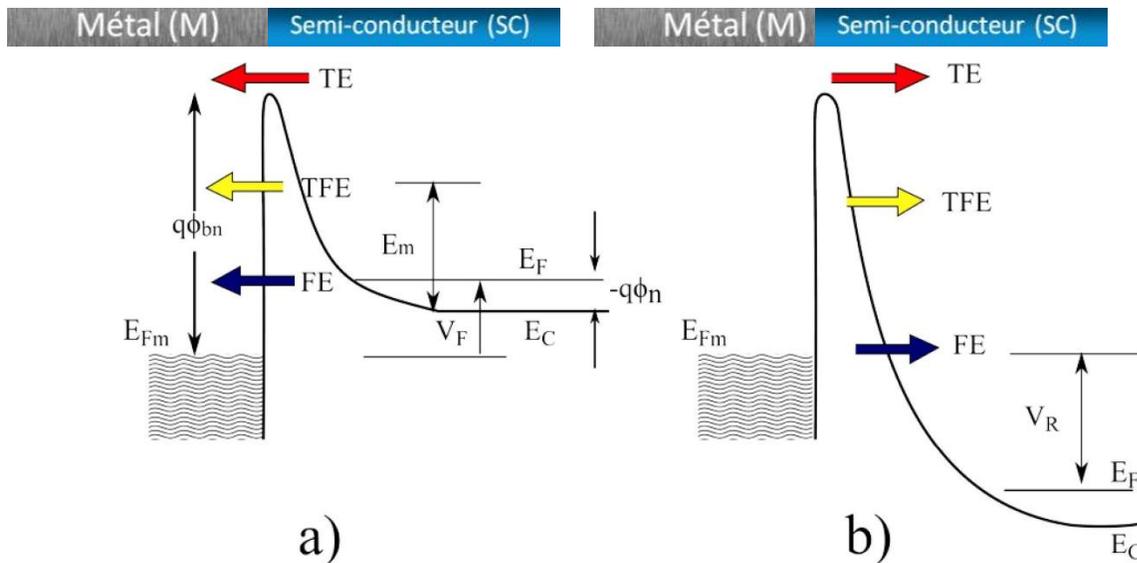


Figure II-12: Diagramme énergétique illustrant les composantes du courant tunnel dans le contact Schottky type n : (a) mode direct, (b) mode inverse, TE : émission thermoïonique ;

FE : courant tunnel; TFE : émission thermoïonique-tunnel

II-5.2.1 Courant d'émission par effet de champ (FE)

L'émission par effet de champ n'est observée que dans les semi-conducteurs fortement dopés ou dégénérés et à basses températures. Le courant est formé d'électrons ayant des énergies proches de l'énergie de Fermi du semi-conducteur.

Pour une polarisation directe, le passage se fait au bas de la bande de conduction tandis que pour une polarisation inverse, le passage est proche de l'énergie de Fermi du métal comme l'illustrent les figures (II-12.a et II-12.b).

Selon C.R.Crowell et V.L.Rideout [38], pour des tensions directes assez grandes, l'expression de la densité du courant en fonction de la tension peut se mettre sous la forme :

$$J = J_0 e^{\left(\frac{qV}{E_{00}}\right)} \quad (\text{II.29})$$

Avec E_{00} représente l'énergie caractéristique du semi-conducteur relative à la probabilité de transmission par effet tunnel :

$$E_{00} = \frac{qh}{2} \sqrt{\frac{N_D}{m_e^* \epsilon_s}} \quad (\text{II.30})$$

II-5.2.2 Courant d'émission thermoïonique assistée par effet de champ (TFE)

Dès que la température augmente, et pour une polarisation directe, les électrons ont une énergie supérieure à l'énergie de Fermi du semi-conducteur et inférieure à celle nécessaire pour passer au dessus de la barrière. A ce niveau, la largeur de la zone d'appauvrissement est faible et les électrons la traversent avec une énergie E_m qui représente le maximum de la distribution énergétique des électrons émis comme le montre la figure II-12.

En polarisation directe, la densité du courant est donnée par la formule suivante :

$$J = J_0 e^{\left(\frac{qV}{nkT}\right)} \quad (\text{II.31})$$

Avec

$$n = \frac{E_0}{kT} = \frac{E_{00}}{kT} \coth\left(\frac{E_{00}}{kT}\right) \quad (\text{II.32})$$

n étant appelé le facteur d'idéalité de la diode.

Le rapport E_{00}/kT à température donnée permet de déterminer le mécanisme majoritaire d'injection du courant [39]. En effet, pour $E_{00}/kT \ll 1$, l'émission thermoïonique (TE) est prépondérante alors que pour $E_{00}/kT \gg 1$ c'est l'émission par effet de champs (FE) qui domine, et lorsque $E_{00} \approx kT$ c'est l'émission thermoïonique assistée par effet de champ (TFE) qui domine et se combine avec (TE) et (FE).

II-5.3 Recombinaison dans la zone de charge d'espace

Le processus de recombinaison dans la région de déplétion dans une diode Schottky est lié à l'existence des centres localisés dans la bande interdite.

Selon le modèle de Shockley, Read et Hall (SRH) en 1952 [40], le taux de recombinaison dans la région de déplétion est donné par l'expression suivante :

$$U = \frac{n \cdot p - n_i^2}{\tau_n(n + n_i) + \tau_p(p + n_i)} \quad (\text{II.33})$$

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

$$J = q \int_0^W U(x) dx \quad (\text{II.34})$$

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

$$J = J_0 \left[e^{\frac{qV}{2kT}} \right] \left[1 - e^{-\frac{qV}{kT}} \right] \quad (\text{II.35})$$

Où

$$J_0 = qn_i W / 2\tau \quad (\text{II.36})$$

n_i : est la concentration intrinsèque des électrons.

W : la largeur de la zone de déplétion.

II-6 Modèle de la diode Schottky inhomogène

Le contact Schottky réel contient probablement des inhomogénéités qui causent une variation spatiale de la hauteur de barrière. Ces fluctuations peuvent être dues aux [41] :

- défauts structuraux (dislocations, joints de grains,...) à la surface du semi-conducteur.
- contamination de la surface (adsorption des atomes étrangers).
- défauts intrinsèques de la surface (inter-diffusion des atomes du métal, inhomogénéité du dopage...). Ces défauts ramènent l'interface entre le métal et le semi-conducteur rugueuse (n'est pas plane).

Deux modèles sont proposés pour tenir compte de l'inhomogénéité:

- Modèle de Werner (Werner et Guttler 1991)
- Modèle de Tung (Tung 1992).

II-6.1 Modèle de Werner

Werner et Guttler [42] ont développé un modèle basé sur une distribution continue de forme gaussienne de la barrière avec une valeur moyenne et une déviation standard qui décrit la largeur de distribution (Figure II-13.b).

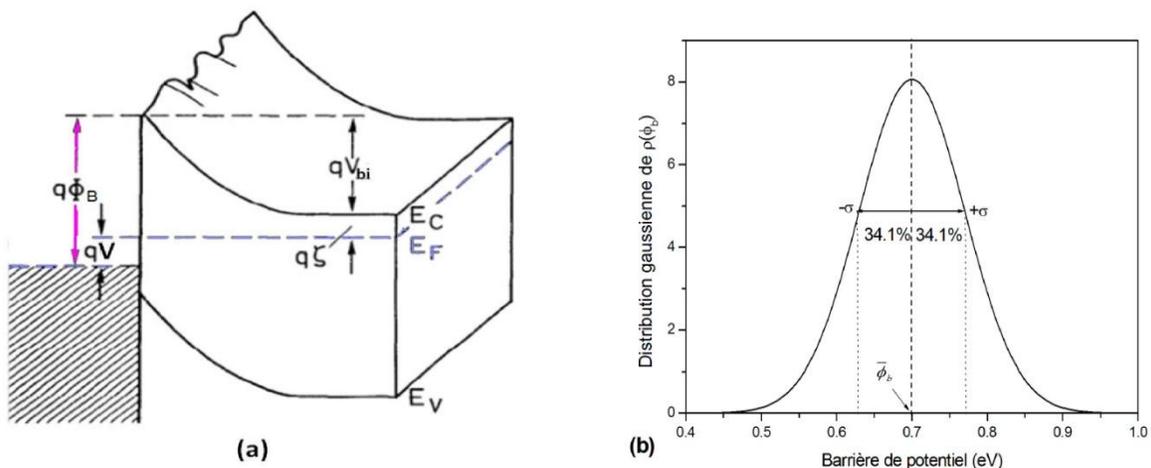


Figure II-13: (a) Modèle de la fluctuation spatiale de la barrière Schottky (b) distribution gaussienne de la fluctuation de la barrière de potentiel suivant le modèle de Werner.

En utilisant la microscopie à émission d'électrons balistiques (BEEM), plusieurs auteurs [43,44] ont confirmé l'existence d'une distribution gaussienne de la barrière Schottky. A partir de ce modèle Werner a montré que le facteur d'idéalité est toujours supérieur à 1 et établi aussi des relations qui donnent les variations de la hauteur de barrière et le facteur d'idéalité en fonction de la température. Le courant total qui traverse un contact Schottky est donné alors par la relation :

$$I = \int i(V, \Phi_B) \rho(\Phi_B) d\Phi_B \quad (\text{II.37})$$

Où $i(V, \Phi_B)$ est le courant élémentaire thermoinique émis dans la diode Schottky de barrière Φ_B et $\rho(\Phi_B)$ est la distribution gaussienne donnés par :

$$i(V, \Phi_B) = AA^* T^2 e^{-\frac{q\Phi_B}{kT}} \left[e^{\frac{qV}{kT}} - 1 \right] \quad (\text{II.38})$$

$$\rho(\Phi) = \frac{1}{\sigma_0 \sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(\Phi_B - \bar{\Phi}_{B0})^2}{2\sigma_0^2}} \quad (\text{II.39})$$

Avec $\bar{\Phi}_{B0}$ et σ_0 sont la valeur moyenne et la déviation standard de la distribution respectivement à la tension nulle. Sans tenir compte de l'effet de la résistance série de la diode, Werner a pris les limites de l'intégrale de l'équation du courant (II.37) de $-\infty$ à $+\infty$, et a trouvé l'expression analytique de courant :

$$I = I_0 (e^{\frac{qV}{kT}} - 1) \quad (\text{II.40})$$

$$I_0 = AA^* T^2 e^{-\frac{q\Phi_{B \text{ app}}}{kT}} \quad (\text{II.41})$$

Avec $\Phi_{B \text{ app}}$ est la barrière de potentiel apparente donnée par la relation :

$$\Phi_{B \text{ app}} = \bar{\Phi}_{B0} - \frac{q\sigma_0^2}{2kT} \quad (\text{II.42})$$

De la relation (II.42) et en traçant $\Phi_{B \text{ app}}$ en fonction de $(q/2kT)$ on peut déterminer la valeur moyenne $\bar{\Phi}_{B0}$ et la déviation standard σ_0 .

Supposant que $\bar{\phi}_B$ et σ^2 varient linéairement avec le potentiel V , Werner a établi une relation analytique du facteur d'idéalité (n) en fonction de la température.

$$\frac{1}{n} - 1 = -\rho_2 + \frac{q\rho_3}{2kT} \quad (\text{II.43})$$

Avec ρ_2, ρ_3 sont des coefficients qui quantifient le changement de la distribution de la barrière de potentiel avec le potentiel V donnés par:

$$\bar{\phi}_B - \bar{\phi}_{B0} = \rho_2 V \quad (\text{II.44})$$

$$\sigma^2 - \sigma_0^2 = \rho_3 V \quad (\text{II.45})$$

Où $\bar{\phi}_B$ et σ 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 ρ_2 et ρ_3 .

II-6.1 Modèle de Tung

Tung [45] Considère des petites zones de faibles barrière de potentiel (patches) de rayon R_0 noyées dans une surface uniforme de plus forte hauteur barrière de potentiel comme le montre la figure II-14.

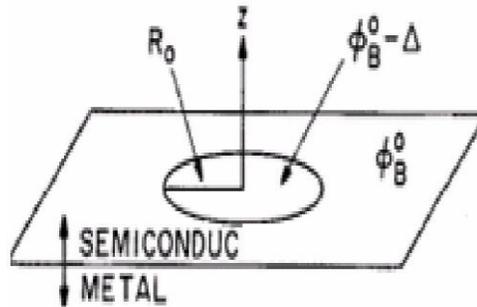


Figure II-14: Le Modèle de Tung

Dans un intervalle $0 < Z < W$: le potentiel est donné par:

$$V(0,0,z) = V_{bb} \left(1 - \frac{Z}{W}\right)^2 + \Delta \left(1 - \frac{Z}{(Z + R_0^2)^{1/2}}\right) \quad (\text{II.47})$$

Δ est le potentiel présenté dans la figure II-14.

La figure II-15. montre la variation du potentiel théorique suivant la direction (z) ainsi que sa variation pour différents rayons des patches (cas de Si) .

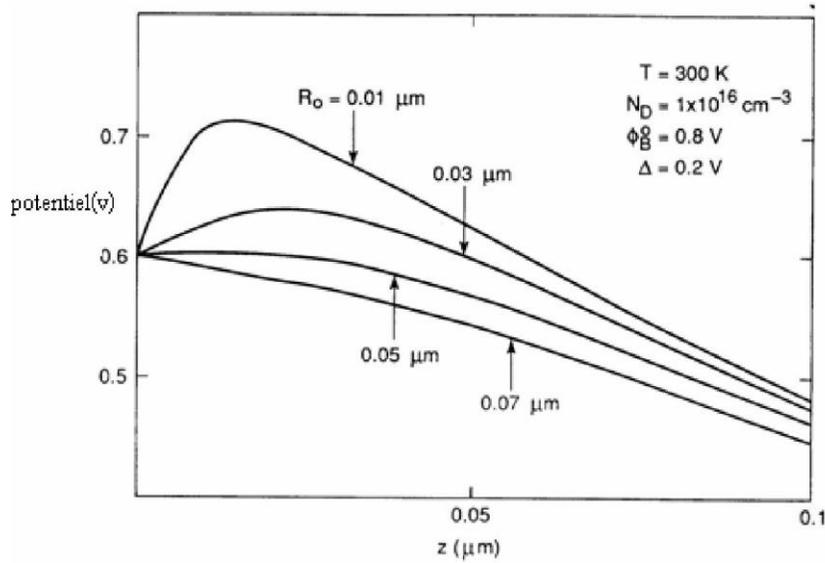


Figure II-15: La barrière de potentiel suivant la direction Z avec plusieurs diamètres de patch

Le courant total est la somme des courants des patches qui peut s'écrire après simplification :

$$I \approx A_{eff} A^* T^2 I_0 e^{-\left(\frac{q\phi_{eff}}{KT}\right)} \left(e^{\frac{q(V-R_S I)}{KT}} - 1 \right) \quad (\text{II.48})$$

$$\phi_{eff} = \phi_b^0 - \gamma \left(\frac{V_{bb}}{\eta} \right)^{1/3} \quad (\text{II.49})$$

$$A_{eff} = \frac{4\pi\gamma}{9\beta} \left(\frac{V_{bb}}{\eta} \right)^{2/3} \quad (\text{II.50})$$

A_{eff} : La surface effective;

γ : Paramètre des zones des patches;

V_{bb} : Courbure des bandes;

η et β sont des constantes;

$$\beta = \frac{\epsilon_S}{qN_D} \quad \gamma = \left(\frac{27R_0^2 \Delta}{4} \right)^{1/3}$$

La valeur de γ est presque constante.

II-7 Systèmes métal/InP

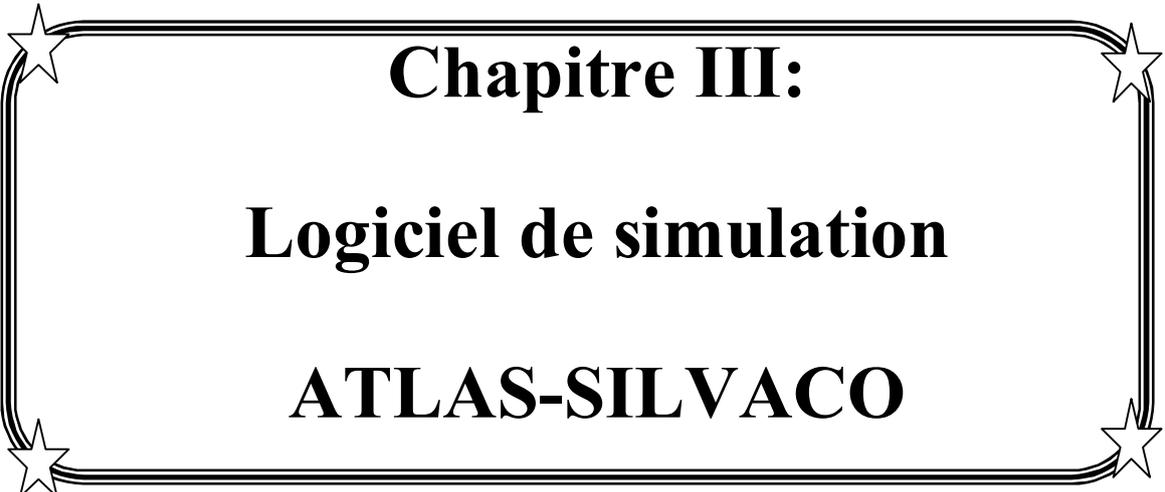
Au cours des dernières années beaucoup de travaux ont concerné les contacts métal-InP. En effet, les contacts sur InP ont d'une part un intérêt technologique pour la réalisation de dispositifs électroniques rapides et d'autre part jouent un rôle dans la compréhension physique des phénomènes gouvernant la formation de la barrière de Schottky [44].

Pour réaliser un contact redresseur (Schottky) de bonne qualité, il est indispensable de trouver d'abord le métal convenable. Le bon métal est caractérisé par les propriétés essentielles suivantes:

- (1) Il doit avoir une bonne adhérence sur le semi-conducteur afin d'assurer une bonne tenue mécanique au contact formé pour la réalisation de futurs bonding et packaging.
- (2) L'interface Métal/semi-conducteur doit présenter une hauteur de barrière (Φ_B) assez élevée pour minimiser les courants inverses du dispositif et assurer le transport de charges par effet thermoïonique.
- (3) Pour les applications hautes températures ($> 400^\circ\text{C}$), une interface de grande stabilité thermique est indispensable.
- (4) Le métal doit induire un minimum de défauts d'interface qui pourraient contribuer à dégrader les caractéristiques de la diode.

Les contacts schottky réalisés sur l'InP sont en général à base d'or. Le contact est souvent réalisé avec le dépôt d'un alliage d'or. Dans le but de prévenir toutes réactions chimiques avec le milieu extérieur et pour faciliter la connexion avec une source électrique externe. De plus, l'or possède une bonne conductivité thermique. C'est une propriété physique importante puisque cela permet d'évacuer rapidement l'énergie thermique générée à la jonction.

Les structures métal/n-InP présentent des hauteurs de barrière Φ_{Bn} , se situant entre 0,4 et 0,5eV alors que Φ_{Bp} se situe entre 0,75 et 0,85 eV.



Chapitre III:

Logiciel de simulation

ATLAS-SILVACO

III-1 Introduction:

Les simulateurs TCAD (Technology Computer-Aided Design) permettent la modélisation du comportement physique et électrique d'un composant électronique, dans le but d'économiser le temps et le coût de développement, et ainsi de pouvoir envisager et optimiser des solutions pour améliorer les performances des dispositifs. Les simulateurs existants sur le marché (ISE, SYNOPSIS, SILVACO,...) ont le même principe de fonctionnement.

Dans ce chapitre, nous présenterons le logiciel de simulation TCAD-SILVACO (ATLAS), son principe de fonctionnement et son module de simulation pour le comportement électrique des composants. Ensuite, nous présentons une description des différentes étapes de simulation.

III-2 Présentation du paquet des programmes SILVACO

Sous SILVACO l'ensemble des outils de simulation et des outils interactifs permettant la conception et l'analyse de la plus part des dispositifs semi-conducteurs s'appel VWF (Virtual Wafer Fab) [46]. Les composants de base de VWF sont (Figure III-1):

1. *Les outils de simulation (VWF core tools)*. Ces outils simulent soit leurs processus de fabrication ou soit leurs comportements électriques. Les outils de simulation sont Athena, Atlas et SSuprem3.
2. *Les outils interactifs (VWF interactive tools)*. Ces outils sont désignés pour être utilisés en mode interactif dans la construction d'un seul fichier d'entrée. En étant basé sur une interface utilisateur qui est graphique (Graphical User Interface, GUI), le travail de construction du fichier d'entrée devient plus efficient. Les outils interactifs peuvent être utilisés soit en relation avec un ensemble de fichiers, ou comme des composants intégrés dans l'environnant « VWF automation tools ».
3. *Les outils d'automatisation (VWF automation tools)*. Ces outils permettent à l'utilisateur d'exécuter sur une grande échelle des études expérimentales pour créer des résultats pour l'analyse statistique suivante. Ces outils automatiques se servent de : la technologie de base de données répartie et des méthodes de logiciels de transmissions d'interprocessus.

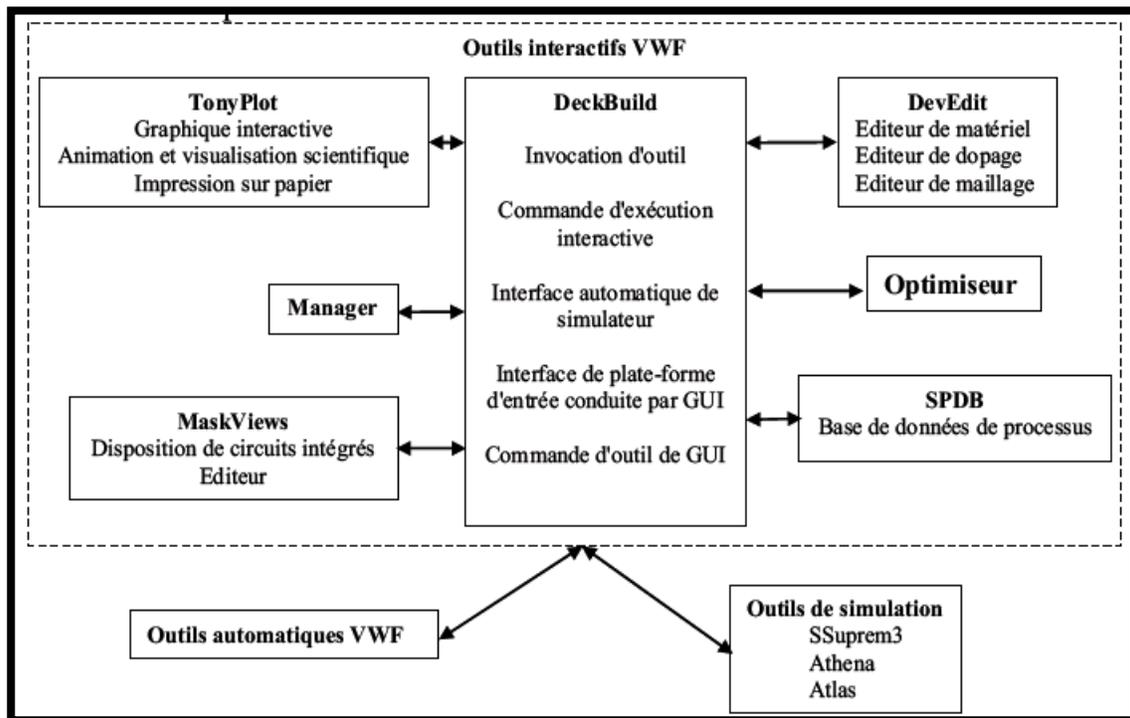


Figure III-1: Organigramme de la structure VWF.

Ainsi les modules de VWF sont les suivants :

a/ Les outils interactifs VWF

- **TonyPlot:** outil de visualisation et d'analyse graphique 1D et 2D des résultats des simulations.
 - **Manager:** outil de gestion des fichiers utilisés et créés par VWF.
 - **MaskViews:** outil de dessin des masques (layouts).
 - **DeckBuild:** environnement d'exécution interactif qui permet la simulation des processus et de dispositifs (mais principalement il est l'interface avec les outils de simulation)
 - **DevEdit:** outil d'édition de structure, on peut créer des nouvelles structures ou même modifier des structures existantes, on peut définir des maillages ou raffiner les maillages existants
 - **Optimiseur :** outil d'optimisation automatique.
 - **SPDB :** (Semiconductor Process Data Base), c'est un produit séparé, ça n'est pas un outil interactif, mais il peut être utilisé avec DeckBuild. Il a été conçu pour stocker un grand nombre de profils de dopage mesurés expérimentalement ainsi que les données qui décrivent les conditions des expériences.

b/ Les outils de simulation

- **SSuprem3** : simulateur de procédé 1D avec prolongements simples de simulations des dispositifs
- **Athena** : simulateur 2D de procédés technologiques qui permet de simuler les différentes étapes effectuées en Salles Blanches et ainsi d'obtenir la structure du dispositif (couches constitutives, dimensions, géométrie) avec les profils de dopage
- **Atlas** : simulateur 2D ou 3D de dispositifs semi-conducteurs qui permet d'obtenir leurs caractéristiques électriques (statiques ou dynamiques)

Le projet réalisé dans le cadre de ce travail de mémoire, a été basé principalement sur les interfaces graphiques « DevEdit » et « DeckBuild » et sur l'outil de simulation par éléments finis « Atlas ».

La structure créée sous DevEdit implique la définition des couches (dimensions, type de matériel (métal, semi-conducteur, isolant), si c'est le cas, le type de dopant et la forme du dopage (uniforme, gaussien, trapézoïdal, etc.) ainsi que le maillage (avec des pas fixes, adaptable d'une couche à l'autre et plus ou moins raffiné)). La structure ainsi créée est à travers « DeckBuild » importée sous « Atlas ». Mais « Atlas » met aussi à notre disposition un outil propre de définition de la structure qui simplifie beaucoup le travail du programmeur. Une difficulté rencontrée a été le fait que l'importation de la structure créé sous « DevEdit » n'est pas tout le temps parfaite, « Atlas » a une façon d'interpréter le maillage qui est légèrement différente. « DevEdit » a l'avantage de nous aider didactiquement et graphiquement pour réaliser nos structures en créant en final le code à exporter. Enfin une fois la simulation effectuée sous « Atlas », la visualisation des résultats se fait via le logiciel « TonyPlot ».

Par la suite nous allons développer la présentation de l'outil « Atlas » que nous avons utilisé principalement pour effectuer la simulation de notre structure

III-3 Présentation d'Atlas

Le logiciel de simulation ATLAS est un simulateur de modélisation bidimensionnelle de composants semi-conducteurs. Il est capable de prédire les caractéristiques électriques de la plupart des composants semi-conducteurs en régime continu, transitoire ou fréquentiel.

En plus du comportement électrique, exemple $I(V)$, il fournit des informations sur la distribution interne des variables électrique telles que le courant ou la tension (lignes de champ).

Ceci est réalisé en résolvant numériquement les équations de Poisson et de continuité des électrons et des trous (à deux dimensions) en un nombre fini de points formant le maillage de la structure défini par l'utilisateur ou par le programme.

Ce simulateur est composé de deux parties :

- une partie de traitement numérique (méthode d'intégration, de discrétisation...),
- une partie formée des modèles physiques des composants semi-conducteurs les plus courants : modèles de recombinaison (Shockley Read Hall), d'ionisation par impact (Pearson et Monte Carlo), ainsi que les modèles de mobilité, et les statistiques de Fermi-Dirac et Boltzmann.

ATLAS permet de simuler le comportement électrique d'un composant semi-conducteur créé et modélisé comme par exemple une diode ou un transistor. Le composant étudié est représenté comme une structure maillée où chaque noeud a des propriétés qui lui sont associées telles que le type de matériau, le type de dopage, la concentration du dopant, etc.

Ainsi, pour chaque noeud, la concentration de porteurs, le champ électrique, etc. peuvent être calculés. Les électrodes sont représentées par des surfaces sur lesquelles les conditions aux limites sont imposées, comme par exemple, les tensions appliquées.

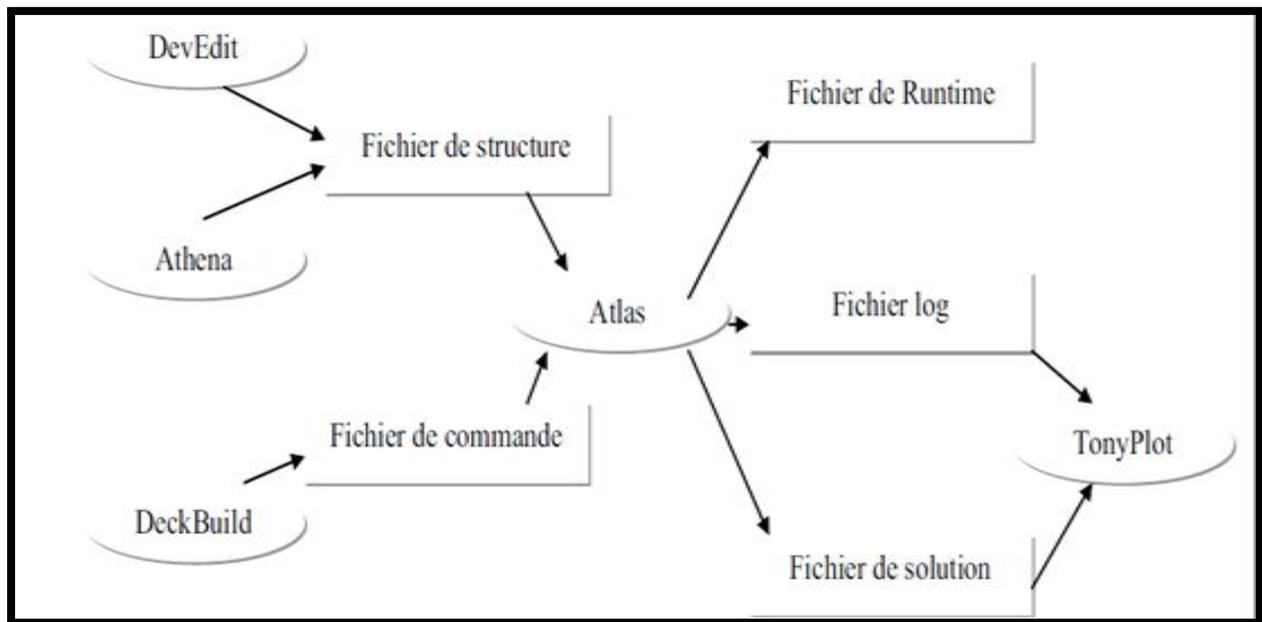


Figure III-2: Entrées et sorties d'Atlas.

Dans le schéma de la figure III-2 nous voyons les types d'informations qui circulent en entrée et en sortie « d'Atlas ». La plupart des simulations réalisées par « Atlas » utilisent deux fichiers d'entrée.

Le premier fichier est un fichier script contenant les commandes pour que Atlas s'exécute (représenté par « Fichier de commande »). Le second fichier est un « Fichier de structure » qui définit la structure qui va être simulée.

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 dans le dispositif en un point donné (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 Principe de la simulation numérique

L'étude de la plus part des dispositifs à semi-conducteurs est basée sur la résolution simultanée de l'équation de Poisson et de l'équation de continuité. avec pour problématique la détermination d'un grand nombre d'inconnues : le potentiel, les concentrations d'électrons et de trous, le champ électrique, les densités de courant, etc. Ces grandeurs physiques internes évoluent au sein du composant dans le temps et l'espace. Elles apparaissent sous une forme discrétisée, comme une suite d'éléments finis. Sous cette condition, les équations traitées dans ces simulateurs peuvent être résolues de façon dynamique en tout point.

L'équation de Poisson établit un premier système d'équations différentielles entre le potentiel et la densité des porteurs :

$$\varepsilon \Delta V = -q(p - n + N_D^- - N_A^+) \quad (\text{III.1})$$

Où :

ε est la constante diélectrique,

V le 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.

L'évolution temporelle des densités de porteurs doit obéir aux équations de continuité (conservation des charges) pour les électrons et les trous :

$$\frac{dn}{dt} = G_n - U_n + \frac{1}{q} \operatorname{div} \vec{J}_n \quad (\text{III.2})$$

$$\frac{dp}{dt} = G_p - U_p + \frac{1}{q} \operatorname{div} \vec{J}_p \quad (\text{III.3})$$

Où : \mathbf{G} et \mathbf{U} sont respectivement les taux de génération et de recombinaison des porteurs.

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 et le second correspond à la diffusion des porteurs.

$$\vec{J}_n = qn\mu_n \vec{E} + qD_n \overrightarrow{\operatorname{grad}n} \quad (\text{III.4})$$

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

Où : D_n et D_p sont les coefficients de diffusion.

Les trois équations (l'équation de Poisson plus les deux équations de continuité pour les électrons et les trous), à résoudre localement en tout point, sont des équations différentielles non linéaires couplées (n et p dépendent non linéairement du potentiel). Leur résolution numérique ne peut se faire qu'en remplaçant les accroissements différentiels par des accroissements finis.

Pour les variations spatiales, ces accroissements sont ceux définis entre les noeuds d'une grille préalablement fixée. Cette grille, appelée maillage, a pour fonction première de subdiviser l'intérieur de la structure en cellules élémentaires.

III-5 L'ordre des commandes

Après la présentation de la chaîne progicielle TCAD de SILVACO, sa composition interne et le fonctionnement « d'Atlas » 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-3). 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 [47,48].

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

Figure III-3: Ordre des groupes des commandes dans un programme Atlas (les commandes fondamentales afférentes).

Les commandes fondamentales sont :

- MESH : cette commande produit un maillage ou lit un maillage qui a été défini auparavant. L'élément de maille utilisé est le triangle.
- REGION : indique l'endroit des matériaux dans une maille précédemment définie. Chaque triangle doit être définie comme matériel.
- ELECTRODE : indique l'endroit et les noms des électrodes dans une maille précédemment définie.
- DOPING : indique analytiquement des profils de dopage ou prend de tels profils déjà prédéfinis dans les fichiers dédiés.
- MATERIAL : associe des paramètres physiques aux matériaux dans la maille. (Il faut faire attention parce que le logiciel a des paramètres de matériau définis par défaut pour les semi-conducteurs standard)
- MODELS : indique les carreaux constitutifs du modèle, ils indiquent les inclusions de différents mécanismes physiques, de modèles ou des autres paramètres comme par exemple

la température globale pour la simulation.

- CONTACT : indique les attributs physiques d'une électrode.
- INTERFACE : indique les paramètres d'interface aux frontières de semi-conducteur/isolant. Tous les paramètres s'appliquent seulement aux nœuds de frontière exceptés la où ils sont déjà indiqués.
- METHOD : place les méthodes numériques à employer pour résoudre les équations et les paramètres liés à ces algorithmes.
- LOG : permet à toutes les caractéristiques finales de simulation d'être sauvées dans un fichier (ouvre un fichier de type log (log en minuscule veut dire le type de fichier, LOG en majuscule veut dire la commande dans le programme)). N'importe quel type de donnée, qu'elle soit C.C., transitoire ou C.A., générée par la commande SOLVE et sauvée après la commande LOG (donc les informations sauvées sont de type électrique et elles sont, par exemple, en fonction de la tension de polarisation ou de la source de lumière). Aussi n'importe quel paramètre spécifié par la commande PROBE est stocké dans le fichier de type 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.
- SOLVE : ordonne à l'Atlas d'exécuter une solution pour un ou plusieurs points de polarisation.
- LOAD : charge des solutions précédentes à partir de fichiers en tant que conjectures initiales à d'autres points de polarisation.
- SAVE : sauve toutes les informations d'un point nœud du maillage dans un fichier de sortie (les fichiers de sortie sont de type structure). Les informations sauvées correspondent à un état électrique bien précis.
- 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 : démarre le programme « TonyPlot » de post processus graphique des donnés.

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 Luminous est activé. Donc BEAM est utilisé pour simuler des courants sous lumière ou des réponses spectrales.

III-6 Différents étapes de simulation

Pour mieux expliquer l'outil ATLAS de manière rapide et simple nous avons jugé dans notre cadre de travail d'illustrer le fonctionnement de cet outil par l'intermédiaire d'exemple concret [41,49].

Dans cet exemple nous allons simuler les caractéristiques courant-tension d'une diode Schottky Métal/Silicium avec un travail de sortie 4.97eV.

La géométrie et les dimensions du composant étudié sont données par la figure III-4.

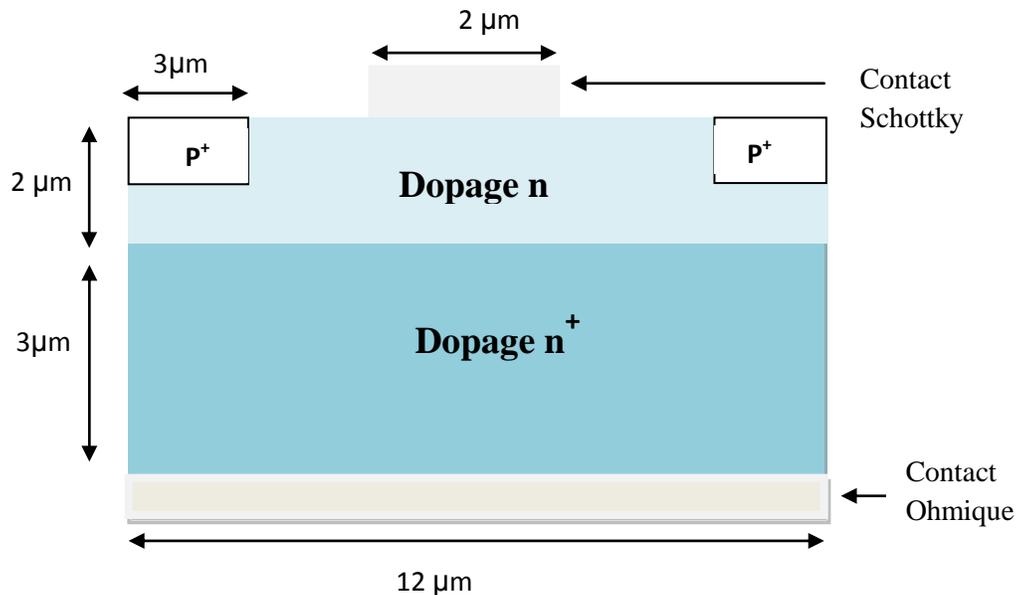


Figure III-4: Diode Schottky M/Si.

III-6.1 La 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-6.1.1 La spécification de maillage

Le maillage joue un rôle important pour l'obtention de bonnes simulations. Celui-ci doit être fait avec la plus grande attention pour garantir la fiabilité des résultats. La méthode numérique utilisée pour résoudre les équations physiques est la méthode des éléments finis.

Son principe de base est la discrétisation par éléments finis des 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 [46].

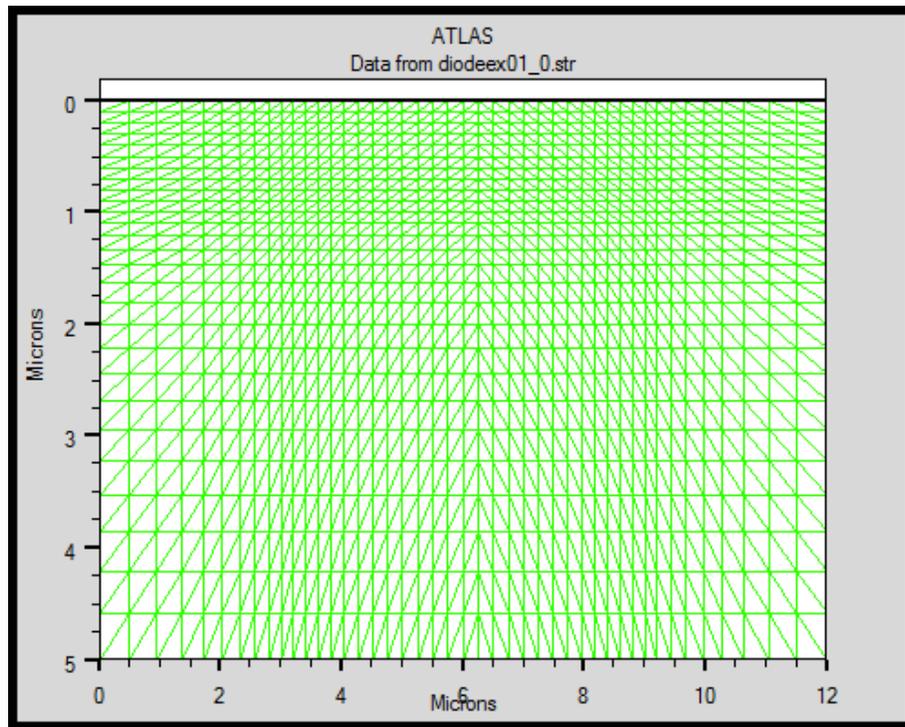


Figure III-5: Maillage à deux dimensions (x,y).

Le format général de définition de maillage est:

X.MESH LOCATION=<VALUE> **SPACING**=<VALUE>

C'est une instruction qui définit le maillage proprement dit.

X.mesh définit le maillage dans la direction x.

x.mesh loc=0.00 spac=0.5

x.mesh loc=3.00 spac=0.2

Loc définit l'intervalle de maillage (dans notre cas entre $x=0 \mu\text{m}$ et $x=3 \mu\text{m}$).

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

Dans notre cas, le maillage aura une résolution de $0.5 \mu\text{m}$ à partir de $x=0$ et terminera par une résolution de $0.2 \mu\text{m}$ à $x=3$.

Y.MESH LOCATION=<VALUE> **SPACING**=<VALUE>

Y.mesh définit le maillage dans la direction Y.

III-6.1.2 La spécification des regions

Après avoir déterminé le maillage, il est maintenant nécessaire de définir les régions.

Le format pour définir les régions est comme suit :

REGION number=<integer> <material_type> <position parameters>

En peut avoir 200 régions différentes dans ATLAS.

Dans notre exemple une seule région de silicium occupe tout le maillage de la structure par :

```
region num=1 silicon
```

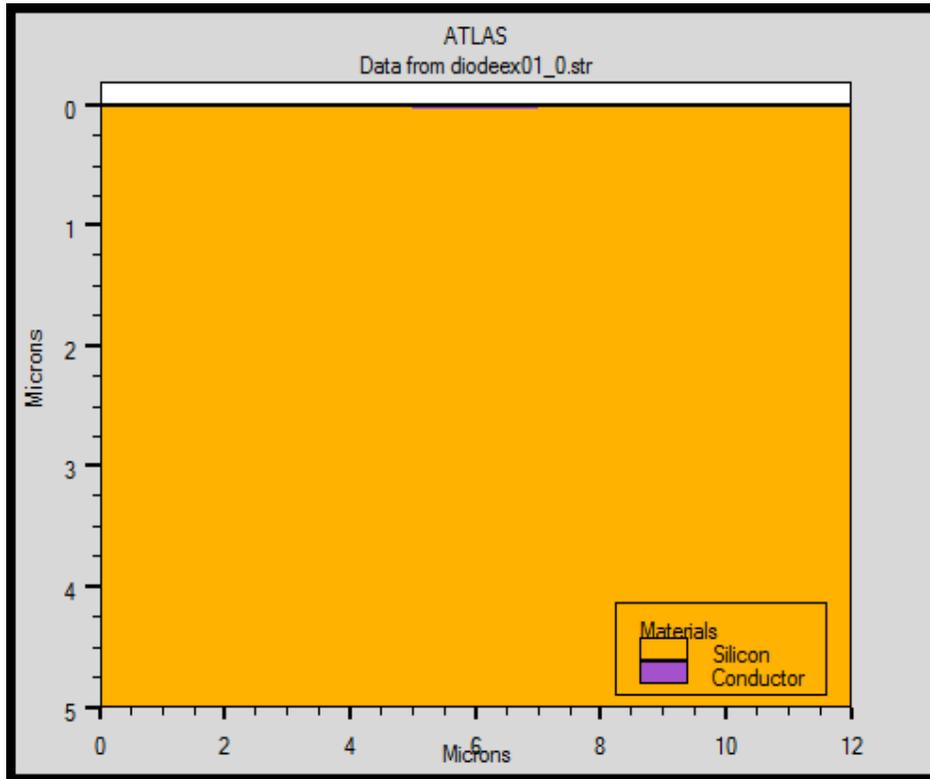


Figure III-6: Définition des régions.

III-6.1.3 La spécification des 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 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).

Dans notre exemple une anode en haut de la structure avec une longueur de 2 μm et une

cathode en bas de la structure traduites par les instructions suivantes :

```
electr name=anode x.min=5 length=2 top
```

```
electr name=cathode bottom
```

La figure (III-6) montre la position de l'anode et la cathode par des valeurs de x et de y.

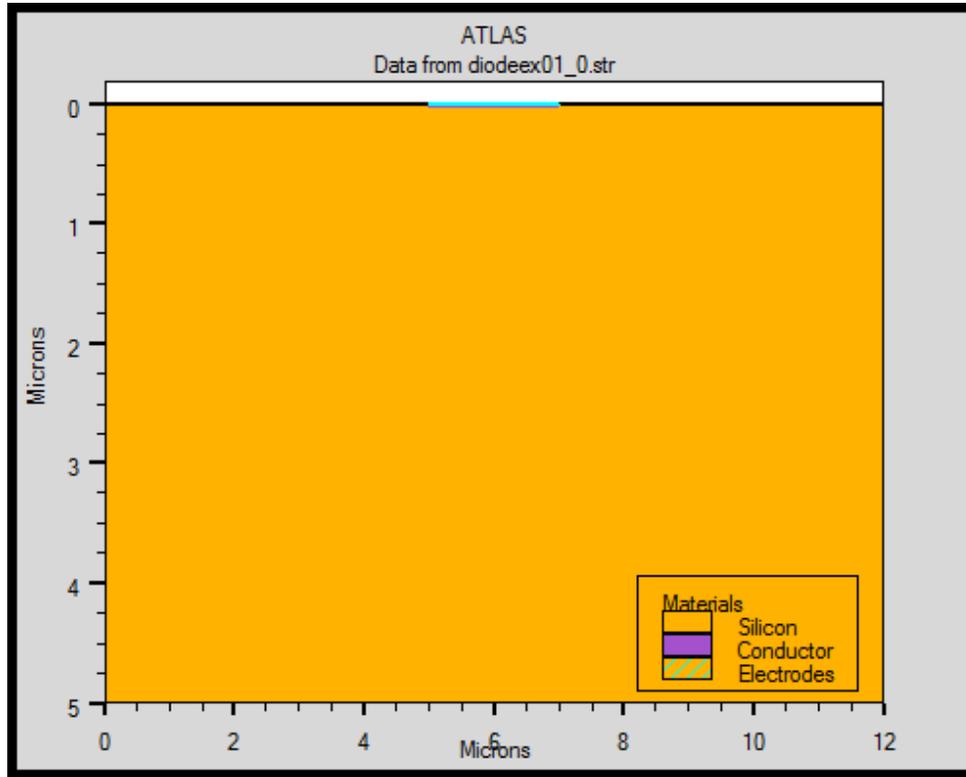


Figure III-6: Définition d'électrodes

III-6.1.4 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>
```

Toujours dans notre exemple, un dopage avec une distribution uniforme de type n et d'une valeur $5 \cdot 10^{16} / \text{cm}^3$ est donné par :

```
Doping n.type conc=5.e16 uniform
```

Si on veut réaliser une distribution gaussienne de type p dans l'endroit spécifié, avec une jonction pn à $y=1 \mu\text{m}$, et d'une variance de 0.6 on introduit les instructions :

```
Doping gauss p.type conc=1e19 x.min=0 x.max=3 junc=1 rat=0.6
```

Doping gauss p.type conc=1e19 x.min=9 x.max=12 junc=1 rat=0.6

La dernière instruction permet de construire un dopage avec une distribution uniforme de type n+ et d'une valeur 1.e20 /cm³.

Doping n.type conc=1e20 x.min=0 x.max=12 y.top=2 y.bot=5 uniform

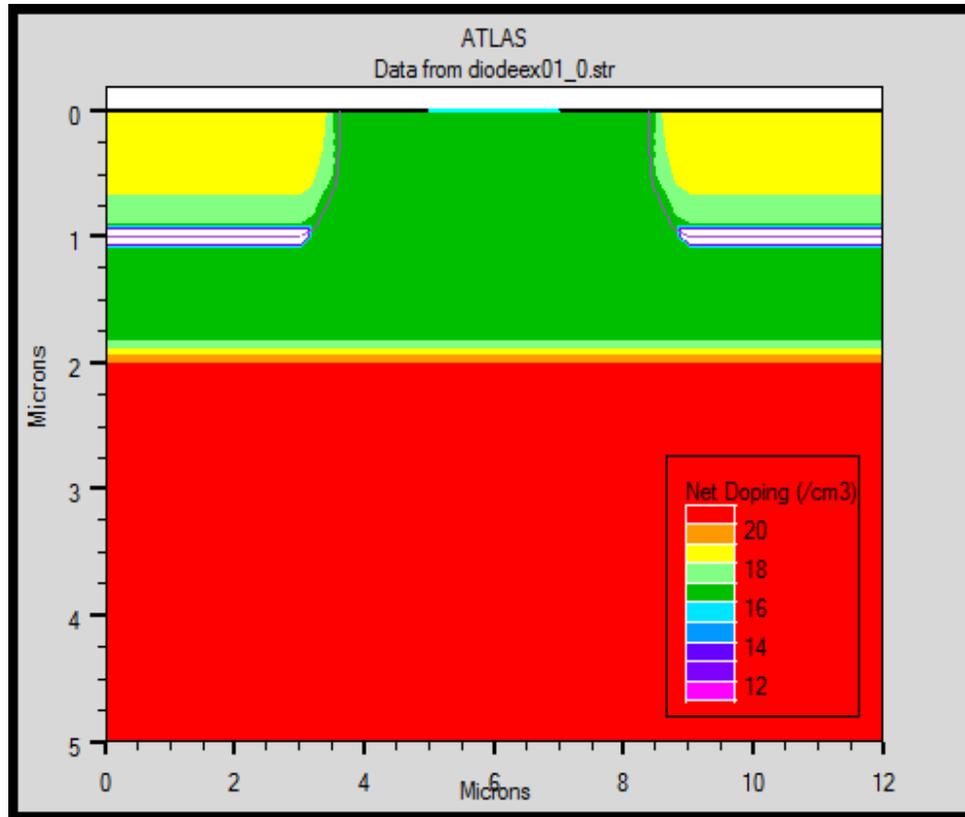


Figure III-8: Définition de dopage

Une fois la structure définie on peut enregistrer ces informations dans un fichier de type.str.

Ceci peut être accompli par l'instruction suivante : *save outf=diodeex01_0.str*

De la même manière on peut visualiser le schéma de la structure à l'aide de l'outil Tonyplot en utilisant l'instruction suivante **Tonyplot** diodeex01_0.str

III-6.2 La spécification du modèle et matérielle

Après la spécification du maillage et du dopage, on peut facilement modifier les caractéristiques des matériaux utilisés (électrodes, substrat) et changer leurs paramètres qu'ATLAS les prend par défaut et définir notre choix du modèle physique qui sera utilisé pendant la simulation. Ces actions sont accomplies par les instructions suivantes : CONTACT, MATERIAL et MODELS.

III-6.2.1 La spécification du matérielle

Touts les matériaux sont classés selon leurs propriétés physiques comme par exemple:

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

exemple :

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

MATERIAL MATERIAL=Silicon EG300=1.12 MUN=1100 TAUN0=2e-7 TAUP0=1e-5

III-6.2.2 La spécification du modèle

Tous les modèles physiques sont spécifiés par les deux instructions MODELS et IMPACT. Pour spécifier:

- La dépendance de la mobilité en fonction de la concentration des porteurs on introduit le modèle **CONMOB**,
- la dépendance de la mobilité du champ électrique par **FLDMOB**,
- Le facteur de génération recombinaison par **SRH**,
- La distribution Fermi Dirac par **FERMIDIRAC**
- Si la bande interdite devient étroite dans le cas d'un fort dopage par **BGN** D'autres modèles peuvent être introduits comme l'effet AUGER, Effet Tunnel etc..

Dans notre exemple :

MODELS CONMOB FLDMOB SRH FERMIDIRAC BGN AUGER

III-6.2.3 La spécification du contact

Si une électrode est en contact avec un semi-conducteur, par défaut, ATLAS le reconnaît comme un contact ohmique.

Si l'instruction *Workfunction*, spécifiant le travail de sortie en eV, est ajoutée, le contact est considéré comme un contact Schottky, par fois on introduit le nom du métal comme *tungsten* pour le tungstène, l'instruction est donnée par:

CONTACT NAME=Anode WORKFUNCTION=4.97

III-6.3 Les méthodes numériques

Après la spécification complète de la structure (géométrie et physique) ATLAS commence à résoudre une série d'équations (équations de continuité, équation de poisson, équations de diffusion) pour calculer les densités des porteurs, les potentiels et les courants.

Parmi les différentes méthodes numériques de résolution des systems d'équation, trois types de techniques sont utilisée dans « Silvaco-Atlas »:

- Méthode de Gummel
- Méthode de Newton
- Méthode des blocs

III-6.3.1 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 :

$$\begin{aligned} \delta V(i-1) - \left[2 + \frac{n_t}{N} \Delta^2 x (\exp(\bar{V}(i)) - \exp(-\bar{V}(i))) \right] \delta V(i) + \delta V(i+1) \\ = -\bar{V}(i-1) + 2\bar{V}(i) - \bar{V}(i+1) + \frac{n_t}{N} \Delta^2 x \left[\exp(\bar{V}(i)) - \exp(-\bar{V}(i)) + \frac{N_A - N_D}{n_i} \right] \end{aligned} \quad (\text{III.6})$$

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 Φ_n et Φ_p) et ainsi le nouveau potentiel de surface par un processus itératif.

$$a_n(i-1)\Phi_n(i-1) - \left[a_n \left(i + \frac{1}{2} \right) + a_n \left(i - \frac{1}{2} \right) \right] \Phi_n(i) + a_n \left(i + \frac{1}{2} \right) \Phi_n(i+1) = \Delta^2 x U(i) \quad (\text{III.7})$$

$$a_p(i-1)\Phi_p(i-1) - \left[a_p \left(i + \frac{1}{2} \right) + a_p \left(i - \frac{1}{2} \right) \right] \Phi_p(i) + a_p \left(i + \frac{1}{2} \right) \Phi_p(i+1) = \Delta^2 x U(i) \quad (\text{III.8})$$

III-6.3.2 La méthode de Newton

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

$$\begin{aligned} W_v(v,n,p) &= 0 \\ W_n(v,n,p) &= 0 \\ W_p(v,n,p) &= 0 \end{aligned}$$

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:

$$\begin{bmatrix} \frac{\delta W_v}{\delta v} & \frac{\delta W_v}{\delta n} & \frac{\delta W_v}{\delta p} \\ \frac{\delta W_n}{\delta v} & \frac{\delta W_n}{\delta n} & \frac{\delta W_n}{\delta p} \\ \frac{\delta W_p}{\delta v} & \frac{\delta W_p}{\delta n} & \frac{\delta W_p}{\delta p} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta v \\ \Delta n \\ \Delta p \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} W_v \\ W_n \\ W_p \end{bmatrix} \quad (\text{III.9})$$

Les solutions sont alors obtenus par:

$$V(k+1) = V(k) + \Delta v(k) \quad n(k+1) = n(k) + \Delta n(k) \quad p(k+1) = p(k) + \Delta p(k) \quad (\text{III.10})$$

Où k indique le nombre d'itération, et le système d'équation II.9 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.

La solution est définie par l'instruction suivante :

METHOD GUMMEI NEWTON

Dans notre exemple :

init : trouver la valeur initiale de la solution par la méthode de Gummel

solve init

method newton

III-6.4 Les solutions

Dans le cas d'un courant continu (DC), et si le pas est 0,05V, la valeur initiale de la tension est 0.05 V et la valeur finale est 2 V, l'instruction qui permet de trouver les solutions (courant, potentiel, porteurs, etc..) est donnée par :

```
Solve Vanode=0.05 Vstep=0.02 Vfinal=1.0 Name= Anode
```

Dans notre exemple, si on veut récolter les caractéristiques électriques, on a besoin de l'instruction *log* (qui ne signifie pas le logarithme), qui enregistre ces caractéristiques dans un fichier nommé *diodeex01.log*.

Pour visualiser le fichier de données ainsi enregistrés, l'instruction *Tonyplot*, est très bien adaptée pour ce *log* outfile=diodeex01.log

```
solve vanode=0.05 vstep=0.05 vfinal=1 name=anode
```

```
tonyplot diodeex01.log genre de solutions.
```

La fin du programme est marqué par l'instruction **Quit**, les résultats obtenus seront affichés immédiatement sous *Tonyplot*.

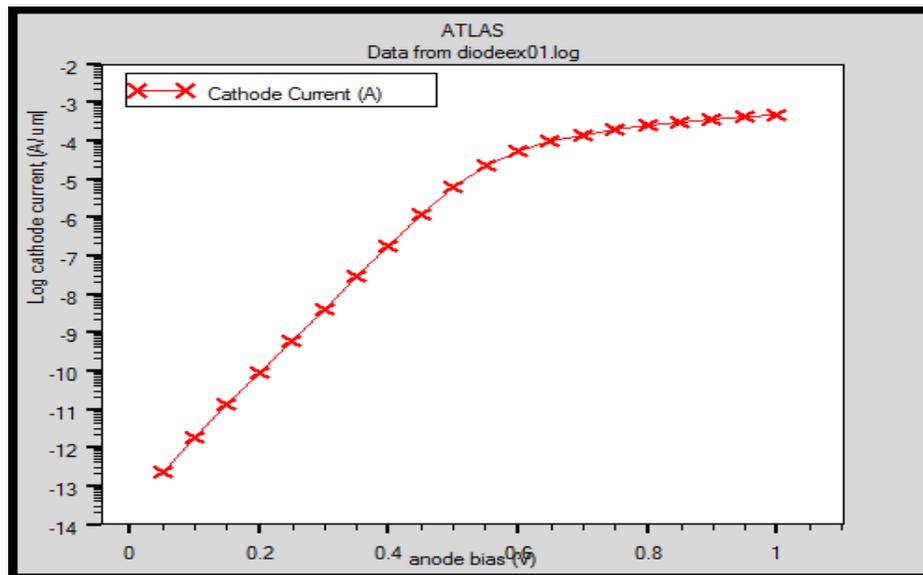


Figure III-9: La caractéristique courant-tension sous Tonyplot.

III-7 Organigramme de simulation

En vue d'intensifier la compréhension, à contribuer à développer davantage de part et d'autre et pour éviter toutes répétitions et confusion inutiles, l'organigramme de la figure III-10 permet de présenter le programme de simulation d'une diode schottky qui contient des sections principales structurées.



Figure III-10: Organigramme du programme de simulation [46].



Chapitre IV:

Simulation et validation

IV-1 Introduction

Dans ce chapitre, nous exposons les principaux résultats obtenus pour la structure diode Schottky Au/n-InP simulée dans le cas d'une barrière homogène et inhomogène.

L'effet de la température, l'extraction des différents paramètres: courant de saturation I_0 , résistance série R_s , facteur d'idéalité n , barrière de potentiel ϕ_B , constante de Richardson A^* ainsi que les paramètres décrivant le modèle gaussien de la barrière de potentiel tel que : ϕ_2 , ϕ_3 , la température T_0 et la déviation standard σ_0 caractérisant l'inhomogénéité seront également étudiées. Enfin une comparaison avec les résultats expérimentaux est donnée.

IV-2 Description de la structure simulée

Notre structure de référence que nous allons étudier (par simulation) est une diode Schottky réalisée sur un substrat en InP type n . Le contact métallique a été formé en or (Au) [5], comme le montre la figure IV-1.

Dans cette étude, nous utilisons une couche épitaxiale de type n avec une épaisseur approximative de $0.7 \mu\text{m}$ dopée à une concentration en donneurs de $1 \times 10^{16} \text{cm}^{-3}$, Et substrat n^+ d'épaisseur de $300 \mu\text{m}$ dopée à une concentration de $1 \times 10^{19} \text{cm}^{-3}$.

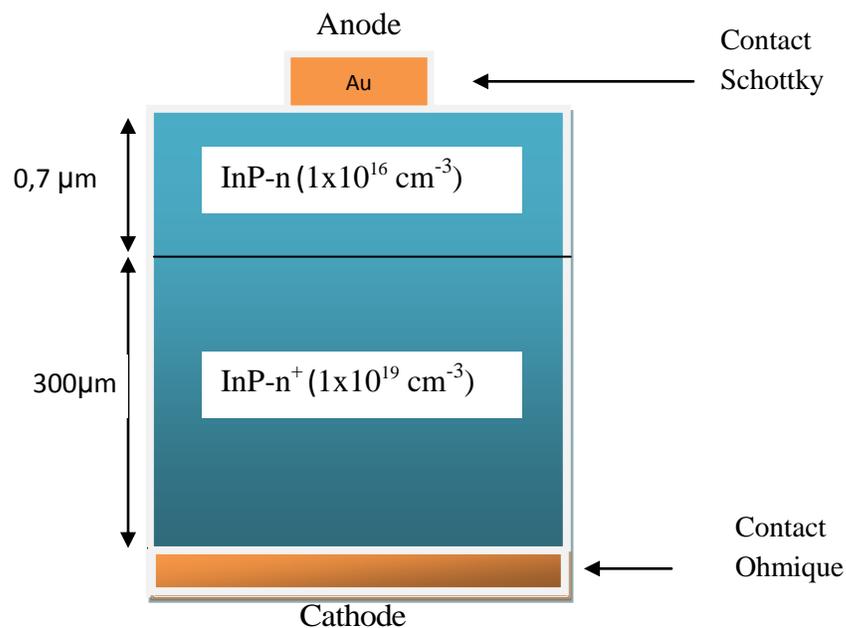


Figure IV-1: Diode Schottky Au/n-InP.

IV-3 Paramètres de simulation

Le tableau IV.1 donne des paramètres physiques, électriques et technologiques utilisés dans la simulation.

Paramètres	Valeurs
Bande interdite (eV)	1.35
Affinité électronique χ_{InP} eV	4.38
la constante de Richardson pour les électrons A^* $A/K^2 \text{cm}^2$	9.8
Permittivité ϵ_r	12.5
Densité d'états des électrons $N_c \times 10^{17} \text{cm}^{-3}$	5.68
Densité d'états des trous $N_v \times 10^{18} \text{cm}^{-3}$	8.87
Durée de vie des électrons et des trous τ_{n0} et τ_{p0} ns	0.2

Tableau IV-1: Paramètres électriques et physiques utilisés dans la simulation.

Mobilité

Pour notre étude, on a utilisé le modèle de Caughey-Thomas, la mobilité dépendante de la concentration des porteurs définie par l'expression :

$$\mu(N) = \mu_{\min} + \frac{\mu_{\max} - \mu_{\min}}{1 + \left(\frac{N}{N_g}\right)^\gamma} \quad (\text{IV.1})$$

- N la concentration de dopage cm^{-3} .
- N_g le dopage critique dépendant du matériau cm^{-3} .
- γ une constante .

Les valeurs de ces différents paramètres sont regroupées dans le tableau IV.2

Porteur	Paramètre	Valeur
Electrons	$\mu_{\min,e} \text{ cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$	80
	$\mu_{\max,e} \text{ cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$	1100
	$\gamma \text{ s.d}$	1
	$N_{g,e} \text{ cm}^{-3}$	3×10^{17}

Tableau IV-2: Paramètres utilisés dans le calcul de la mobilité des électrons en fonction de la concentration de dopage [50] [51].

IV-4 Simulation du dispositif

Pour effectuer une simulation sous environnement SILVACO, il est nécessaire de bien définir la structure utilisée. On doit spécifier le domaine physique de la simulation, les différents matériaux qui constituent cette structure, les électrodes et le dopage des différentes régions afin de dessiner le maillage adéquat à l'étude de notre structure. Le contact métallique en haut est défini par son travail de sortie.

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 celle des éléments finis. Son principe de base est la discrétisation par éléments des équations à traiter. Pour obtenir des résultats fiables et précis, la finesse du maillage doit être définie en fonction des variations des grandeurs physiques. Le choix de maillage doit être fait de façon à avoir un compromis entre la vitesse d'exécution et l'exactitude des résultats.

Dans notre étude, le maillage utilisé est le maillage cylindrique, dans ce type de maillage on n'introduit que la moitié de la structure puis Tonyplot visualise toute la structure.

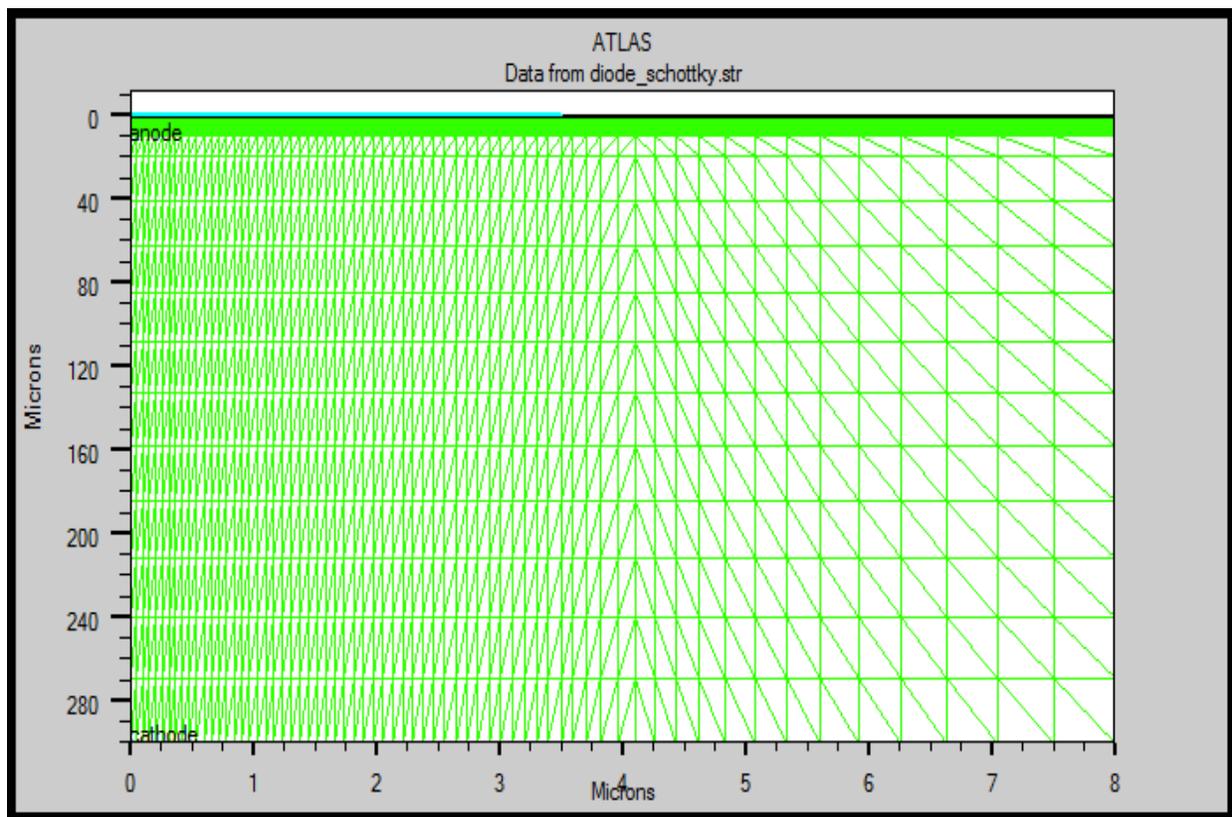


Figure IV-2: Maillage du dispositif.

Une fois le maillage effectué, chaque zone de celui-ci doit être attribuée aux différents types de matériaux constituant notre structure.

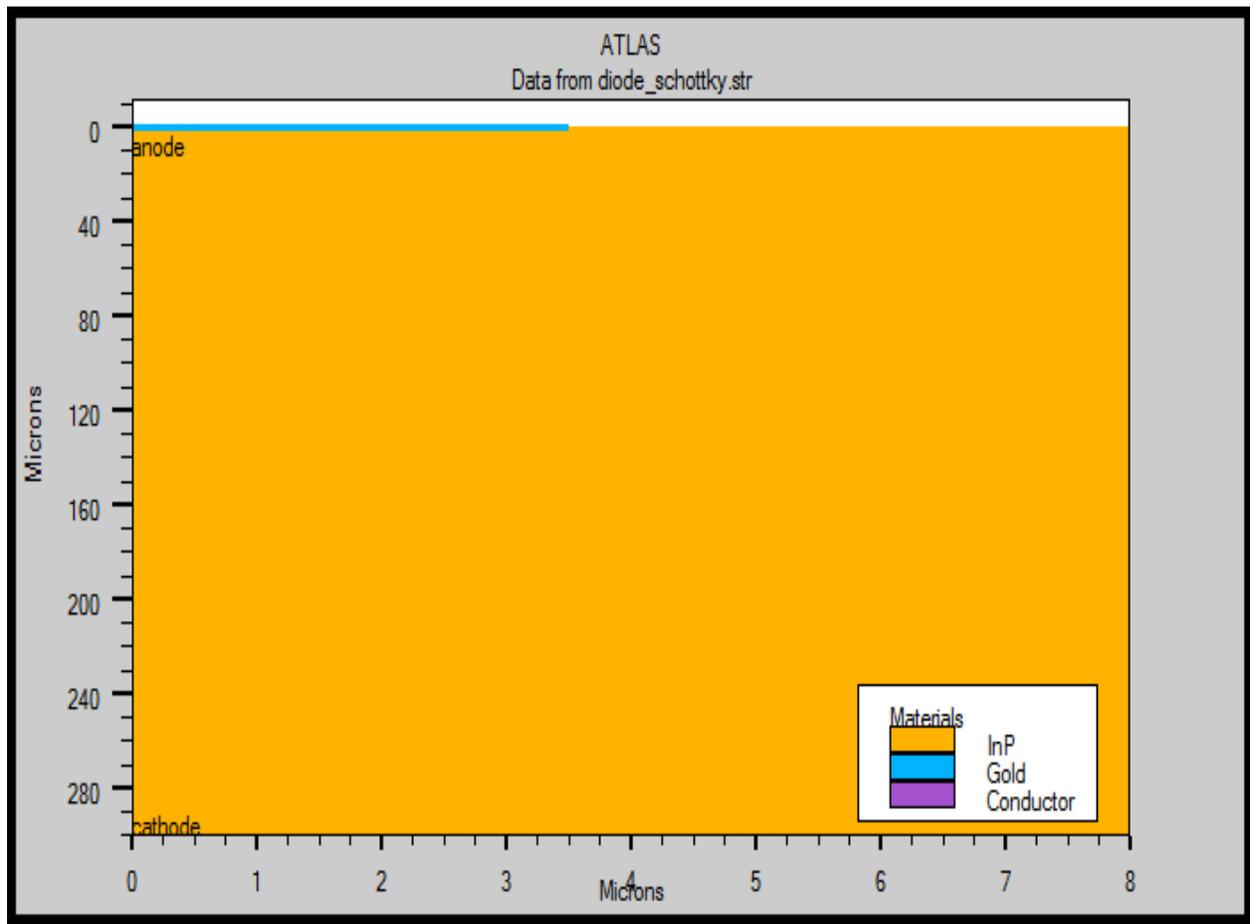


Figure IV-3: Structure bidimensionnelle d'une diode Schottky Au/InP.

Une fois les régions et les matériaux spécifiés, il faut spécifier les modèles des matériaux, elle se compose de: matériau, modèles et contact. Dans notre cas, deux électrodes sont utilisées, l'anode et la cathode.

Après la précision du modèle de matériaux, la sélection de la méthode numérique doit être indiquée. Dans ce travail, les équations sont résolues par la méthode Newton.

La modélisation de cette structure et la simulation par SILVACO, nous ont permis d'obtenir la caractéristique I-V comme le montre la figure IV-4.

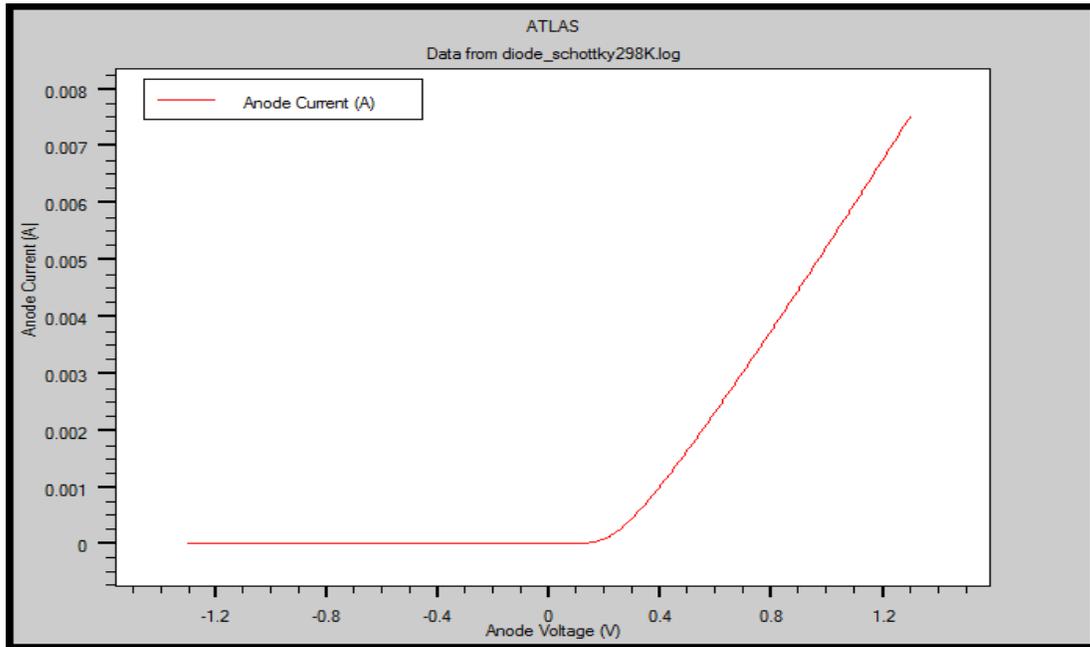
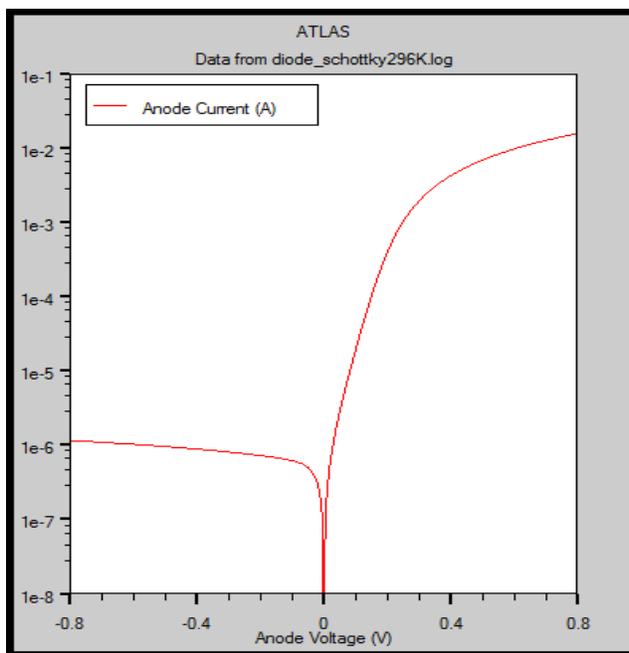
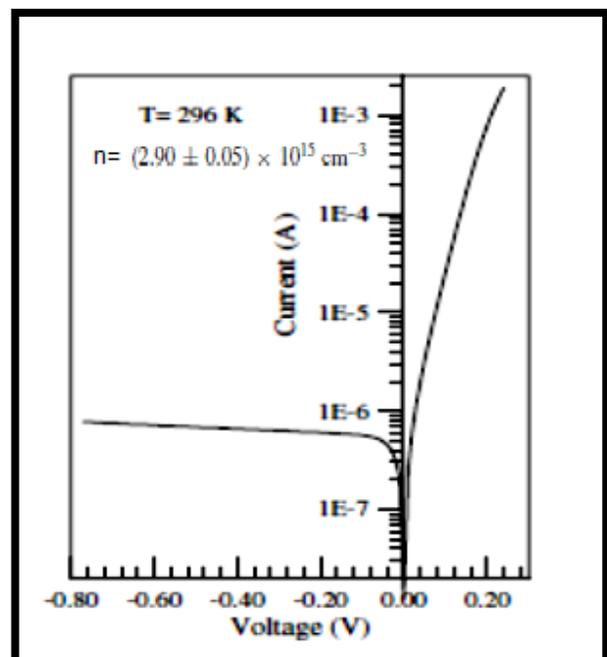


Figure IV-4: Caractéristique courant-tension à la température ambiante (échelle linéaire).

En polarisation directe, le courant augmente exponentiellement avec la tension appliquée à l'échelle linéaire comme le montre la figure IV-4. à l'échelle semi-logarithmique, cette caractéristique a une allure linéaire pour les basses tensions (Figure IV-5.a) mais dévie considérablement de la linéarité due à l'effet de la résistance série.



(a)



(b)

Figure IV-5: Caractéristique courant-tension (échelle semi-logarithmique), (a). Résultats de simulation b). Résultats expérimentales [52].

Nos résultats de simulation acceptent un bon accord avec les résultats expérimentaux publiés par **Cimilli et Saglam** [52], comme le montre les figures. IV-5.a et IV-5.b.

IV-5 Simulation des caractéristiques I-V-T de la structure Au/n-InP

L'étude de la caractéristique courant-tension (I-V) des diodes Schottky à température ambiante ne donne pas suffisamment d'information concernant le mécanisme de transport des porteurs de charges dans ces diodes et la nature de la formation de la barrière de potentiel ϕ_B à l'interface métal-semiconducteur (MS).

La dépendance de la caractéristique courant-tension (I-V) avec la température permet de bien comprendre les différents processus de la conduction.

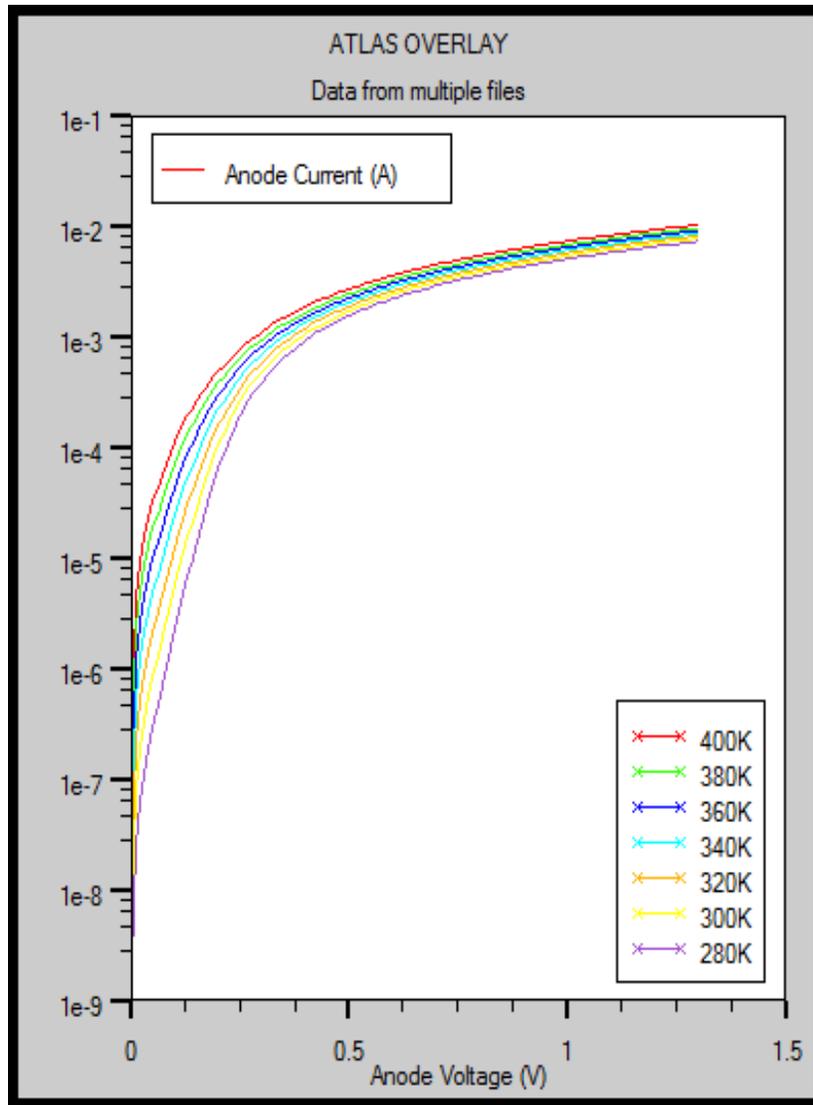


Figure IV-6: Caractéristiques courant tension (I-V-T) du contact Au/n-InP en direct simulées pour la gamme de température [280-400] K.

En polarisation directe les courbes log (I)-V présentent deux parties, la première semble linéaire entre 0 et 0.2V et une deuxième au delà de 0.2V qui présente une courbure due à l'influence de la résistance série et/ou aux états d'interface.

On peut voir que Le courant est augmenté lorsque la température augmente, pour des polarisations supérieures à 0.1V, les caractéristiques simulées sont très proches, cependant pour des polarisations inverses les caractéristiques sont légèrement différentes, comme le montre la figure IV-7.

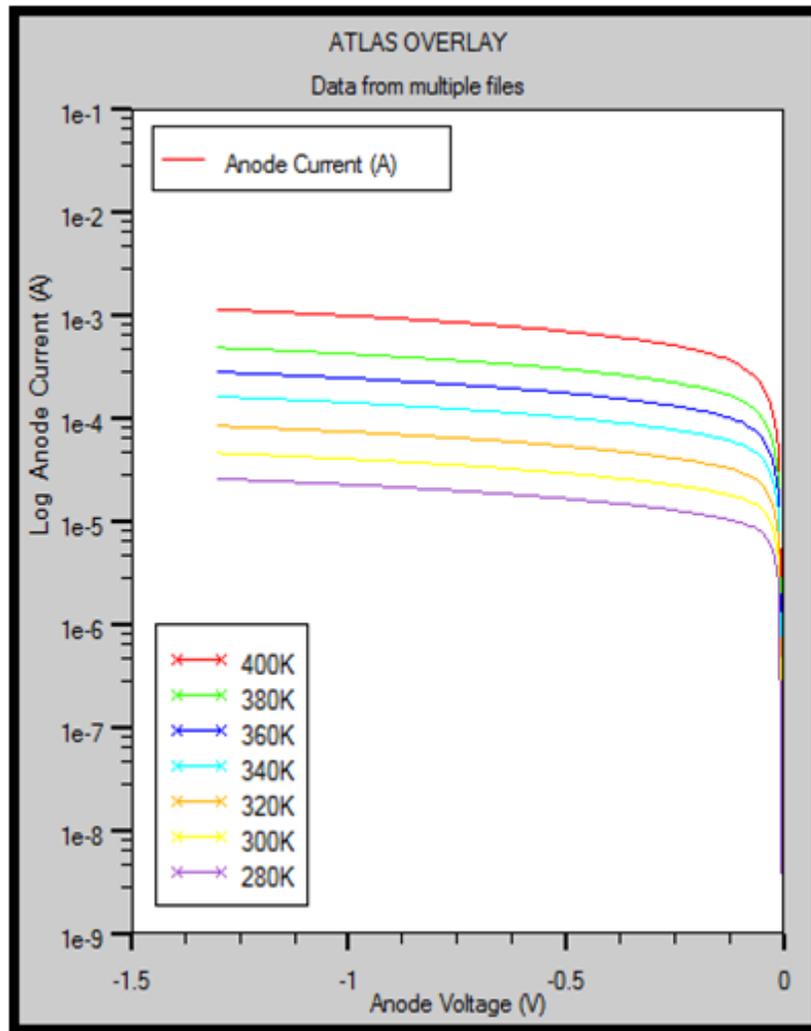


Figure IV-7: Caractéristiques courant tension (I-V-T) du contact Au/n-InP en inverse simulées pour la gamme de température [280-400] K.

En calculant les paramètres n , ϕ_B , R_s avec la méthode de Cheung [53], on peut déduire le paramètre responsable du non linéarité de la caractéristique log(I)-V.

IV-6 Extraction des paramètres homogènes du contact Schottky

Le modèle homogène est le plus utilisé pour analyser les courbes courant-tension, ce modèle suppose un contact parfait entre le métal et le semi-conducteur. La hauteur de barrière reste constante comme le montre la figure IV-8.

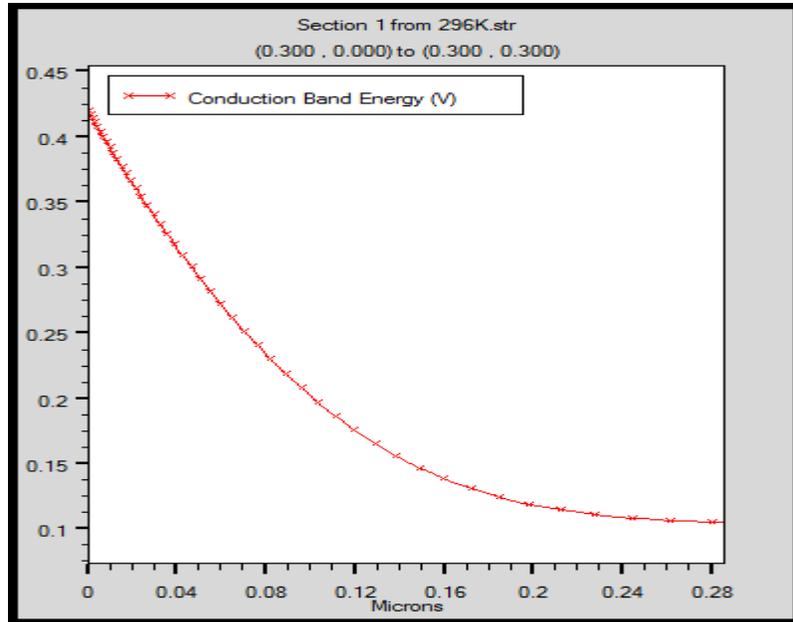


Figure IV-8: Diagramme énergétique illustrant la barrière homogène du contact Au/n-InP.

IV-6.1 Extraction de la barrière de potentiel et du facteur d'idéalité

Nous avons calculé le rapport E_{00}/kT pour chaque température donnée et nous avons trouvé que ce rapport varie de $0.16 \cdot 10^{-2}$ à température 280 K jusqu'à $0.11 \cdot 10^{-2}$ à température 400K. 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 (IV.2).

$$I = I_0 \left[\exp \frac{q(V - R_s I)}{nkT} - 1 \right] \quad (\text{IV.2})$$

Où

V : La tension appliquée

k : Constante de Boltzmann,

T : La température,

n : Facteur d'idéalité,

I_0 : Courant de saturation.

(IV.3)

$$I_0 = A A^* T^2 e^{(-q\phi_B/kT)}$$

A^* est la constante de Richardson.

Si on ne tient pas compte de l'effet de la résistance de fuite due au courant de saturation I_0 , ce dernier est négligé devant le courant total I . Ceci est possible dans la mesure où $V > 3 kT/q$. Par conséquent l'équation (IV.2) devient :

$$I = I_0 \left(\exp \frac{q(V-R_s I)}{nkT} \right) \tag{IV.4}$$

Pour les faibles tensions de polarisation, la tension $R_s I$ est négligée devant V . Par conséquent, les valeurs de I_0 et le facteur d'idéalité n peuvent être obtenus à partir de l'interception et de la pente b des courbes $\log(I) = f(V)$, respectivement, La méthode est présentée sur la Figure IV-9.

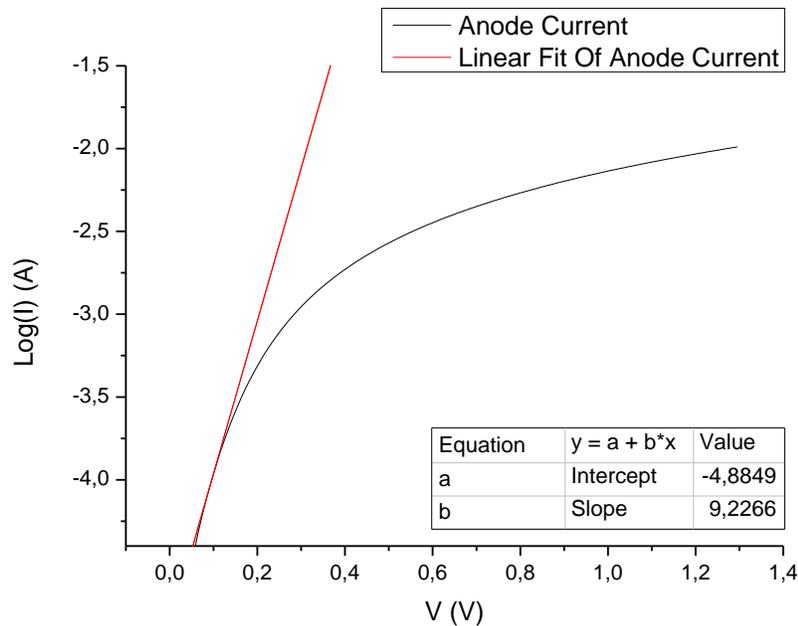


Figure IV-9: Détermination de I_0 et du facteur d'idéalité n pour $T=400K$.

Ainsi pour chaque température, on détermine I_0 et n . On a :

$$n = \frac{q}{kT} \frac{dV}{d(\ln I)} = \frac{q}{kT} \frac{1}{2.303 b} \tag{IV.5}$$

La hauteur de la barrière Schottky peut être calculée après que I_0 soit déterminé à partir de l'équation (IV.4),

$$\phi_B = \frac{kT}{q} \ln \left(\frac{AA^*T^2}{I_0} \right) \quad (\text{IV.6})$$

La variation des paramètres n et ϕ_B dans gamme de température [280-400]K est représentée dans la figure IV-10.

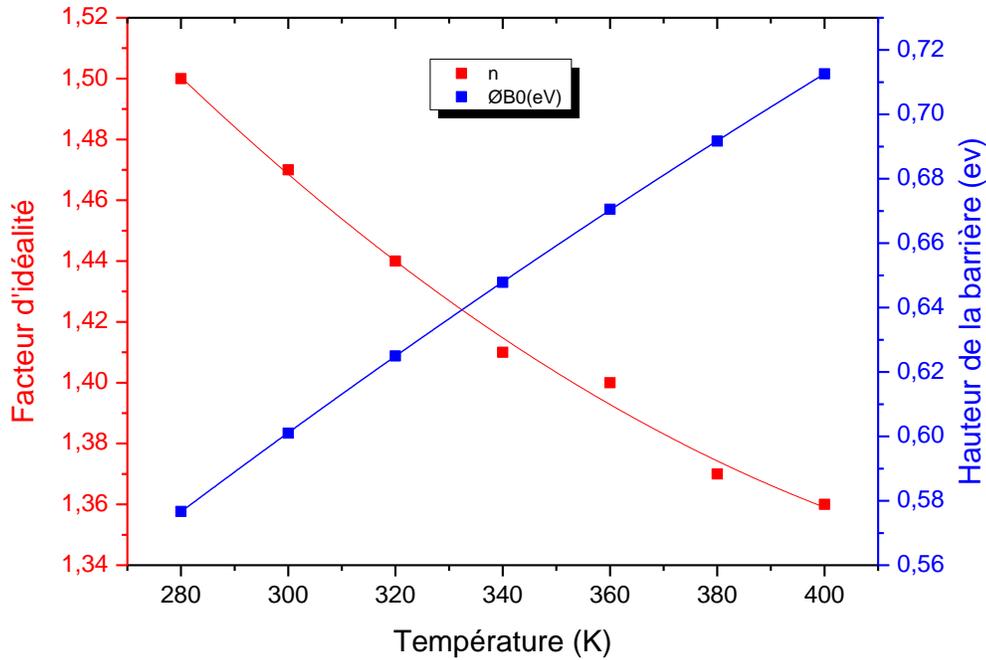


Figure IV-10: Variation de la barrière ϕ_B (eV) et du facteur d'idéalité n en fonction de la température.

On constate que la valeur du facteur d'idéalité n augmente avec la diminution de la température alors que la valeur de la barrière de potentiel ϕ_B diminue avec la diminution de la température T .

Le facteur d'idéalité varie presque linéairement avec la température inverse (Figure IV-11) en tant que:

$$n(T) = n_0 + \frac{T_0}{T} \quad (\text{IV.7})$$

n_0 et T_0 sont des constantes, l'intersection avec l'axe des ordonnées et la pente de ce droite nous permettent de déterminer la constante n_0 et la constante T_0 respectivement ($n_0=1.024$, $T_0=133.1$ K).

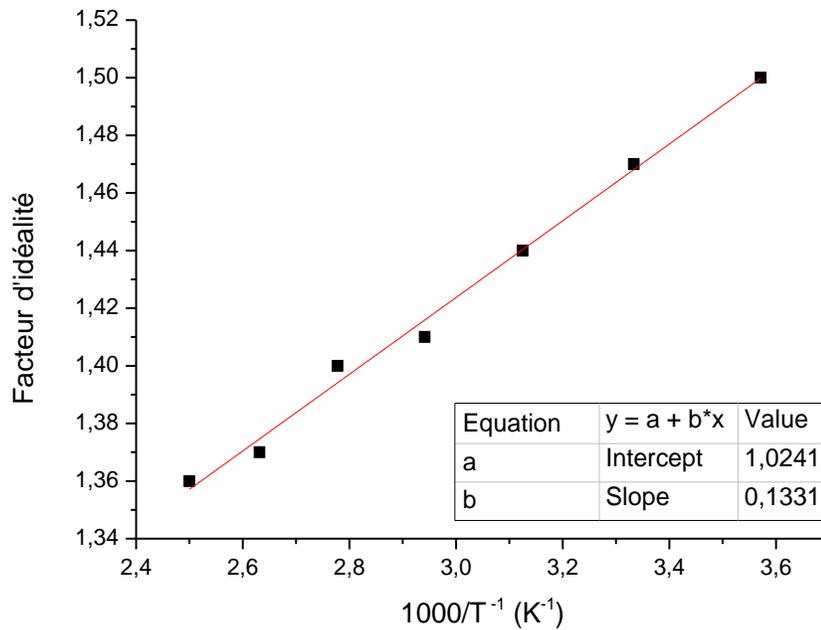


Figure IV-11: Variation de n avec l'inverse de T .

IV-6.2 La résistance série R_s

Un autre paramètre important pour une diode Schottky est sa résistance série à l'état passant, le calcul de R_s est effectué dans la partie non linéaire du caractéristique $\log(I)=f(V)$ correspondant aux fortes tensions de polarisation directe.

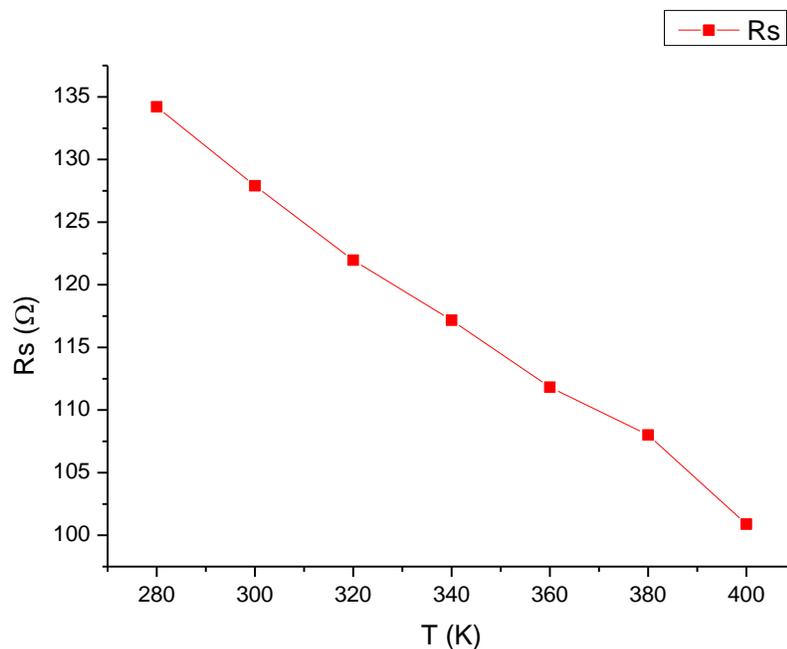


Figure IV-12: Variation de la résistance série R_s en fonction de la température.

La figure IV-12 représente la résistance série en fonction de la température. Elle diminue lorsque la température augmente.

IV-6.3 Constante 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-13). De cette courbe on peut déterminer l'énergie d'activation (ϕ_B) et la constante de Richardson A^* , selon la relation suivante qui est déduite de l'équation (IV.3) :

$$\ln\left(\frac{I_0}{T^2}\right) = \ln(AA^*) - \left(\frac{q}{kT}\right)\phi_B \quad (\text{IV.8})$$

Le tracé est une droite qui permettrait de déterminer A^* et ϕ_B à partir de l'intersection avec l'axe des potentiels et la pente de cette droite respectivement.

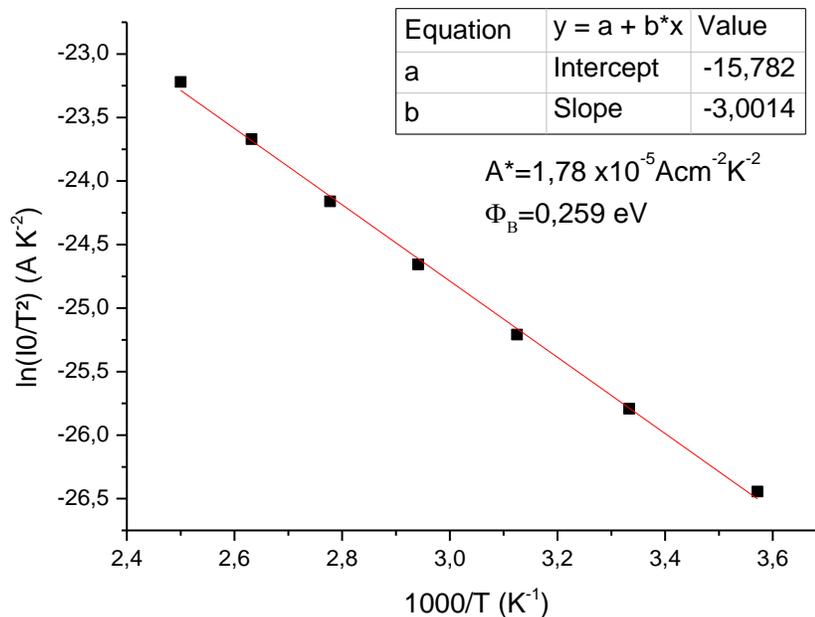


Figure IV-13: Plot de Richardson de $\ln(I_0/T^2)$ en fonction $1000/T$.

Les valeurs de ϕ_B et A^* sont faibles, en particulier les valeurs de la constante de Richardson (A^*) sont très faibles par rapport à la valeur théorique $9.8 \text{ A/K}^2 \text{ cm}^2$. Cette déviation de la valeur de la constante de Richardson peut être due à l'inhomogénéité de la barrière de potentiel du contact Schottky [54].

L'analyse des caractéristiques I-V des diodes Schottky basées sur la théorie de l'émission thermoionique 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.

-la valeur de la constante de Richardson qui reste inférieur à la valeur théorique.

Plusieurs modèles théoriques expliquent ces variations par la présence d'inhomogénéités à l'interface [42][45]. Ces inhomogénéités peuvent être liées à la non-uniformité de la couche interfaciale, à une réaction entre le métal et le semiconducteur, à des contaminations de surface, à des défauts, à des contraintes locales, Leur origine est le plus souvent non intentionnelle.

IV-7 Modèle de la barrière Schottky inhomogène

Différentes approches ont été proposées pour tenir compte de l'effet de ces inhomogénéités. Une première approche suppose une distribution gaussienne [42] des hauteurs de barrière de Schottky (HBS). Cette méthode a l'avantage d'être analytique et donc de donner des relations explicites pour les variations de la HBS et du facteur d'idéalité en fonction de la température. Une autre approche proposée par Tung [45] considère des petites zones de faibles HBS noyées dans une surface uniforme de plus forte HBS, comme le montre la figure IV-14.

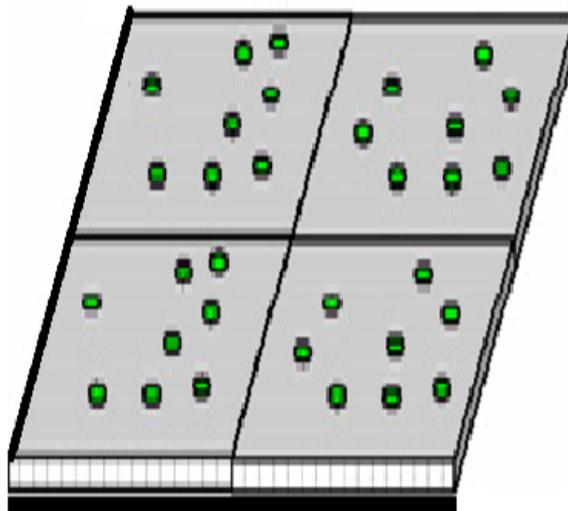


Figure IV-14: Modèle de tung.

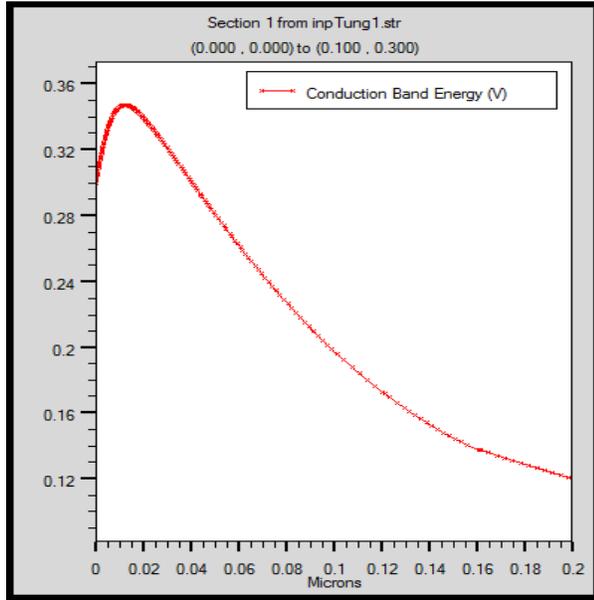
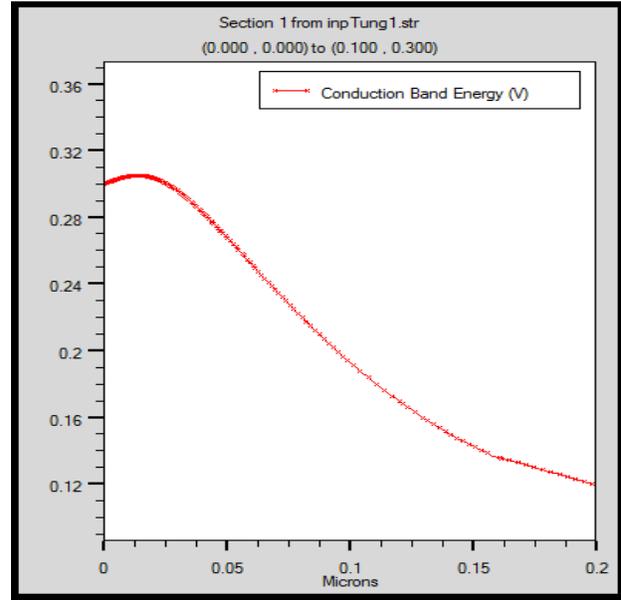
(a) $R_0=0.01\mu\text{m}$ (b) $R_0=0.03\mu\text{m}$

Figure IV-15: Diagramme énergétique illustrant la barrière inhomogène du contact Au/n-InP suivant le modèle de tung.

La figure (IV-15) montre le diagramme énergétique de la diode Schottky à barrière inhomogène suivant le modèle de tung. Nous remarquons un abaissement de la barrière Schottky par rapport aux diagrammes énergétiques de diode à barrière homogène. Cet abaissement dépend du rayon du patch (R_0). La courbure diminue si le diamètre augmente.

Pour bien expliquer les anomalies observées dans le modèle de la barrière Schottky homogène, on utilise le modèle de Werner de la distribution gaussienne de la barrière de potentiel Φ_B décrite par l'équation (IV.9). (Inhomogénéité de la barrière de potentiel).

$$\rho(\Phi) = \frac{1}{\sigma_0 \sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(\Phi_B - \bar{\Phi}_{B0})^2}{2\sigma_0^2}} \quad (\text{IV.9})$$

avec :

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

Φ_B : barrière de potentiel de la diode Schottky (SBH)

σ_0 : déviation standard.

Le courant total circulant dans la diode Schottky en tenant compte de cette distribution est donc :

$$I = \int i(V, \Phi_B) \rho(\Phi_B) d\Phi_B \quad (\text{IV.10})$$

où : $i(V, \Phi_B)$: courant élémentaire de la diode Schottky d'une barrière Φ_B soumise à une tension V donné par l'équation (IV.2).

L'intégrale de l'équation (IV.10) donne [55] :

$$I = I_0 \left(e^{\frac{qV}{n_{app} kT}} - 1 \right) \quad (IV.11)$$

Avec $I_0 = AA^* T^2 e^{-\frac{q\phi_{B, app}}{kT}}$ (IV.12)

Et $\phi_{B, app} = \bar{\phi}_{B0} - \frac{q\sigma_0^2}{2kT}$ (IV.13)

$$\frac{1}{n_{app}} - 1 = -\rho_2 + \frac{q\rho_3}{2kT} \quad (IV.14)$$

IV-7.1 Barrière moyenne et déviation standard

La figure IV-16 représente la variation de la barrière de potentiel en fonction de $q/2kBT$. Ces tracés sont des lignes droites qui sont en bon accord avec l'équation théorique du modèle inhomogène proposé par Werner et Guttler [42].

$$\phi_{B, app} = \bar{\phi}_{B0} - \frac{q\sigma_0^2}{2kT} \quad (IV.15)$$

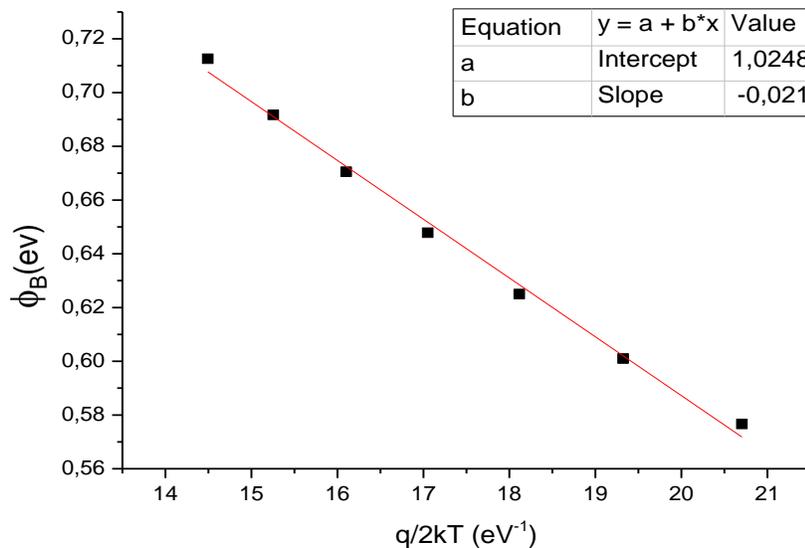


Figure IV-16: Variation de la barrière ϕ_B en fonction de $q/2KT$ de la diode Schottky Au/InP selon la distribution gaussienne.

L'intersection avec l'axe des ordonnées et la pente de ce droites nous permette de déterminer la barrière de potentiel moyenne ($\bar{\phi}_{B0}$) et la déviation standard (σ_0) à la tension nul ($\bar{\phi}_{B0} = 1.02 \text{ eV}$, $\sigma_0 = 0.14 \text{ V}$).

Le tracé de $(\frac{1}{n} - 1)$ en fonction de $q/2kT$ pour la structure Au/n-InP est représenté à la figure IV-17. Le tracé représente une ligne droite, qui est en accord avec celle proposé par Werner.

$$\frac{1}{n_{app}} - 1 = -\rho_2 + \frac{q\rho_3}{2kT} \tag{IV.16}$$

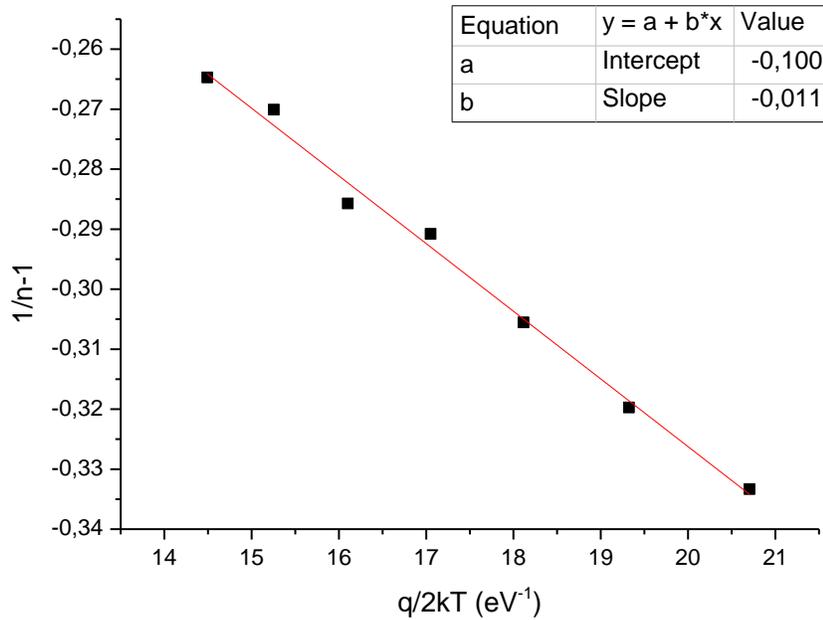


Figure IV-17: Variation de $(1/n - 1)$ en fonction de $q/2kT$ de la diode Schottky Au/InP selon la distribution gaussienne.

L'analyse de ce tracé donne les valeurs des coefficients de voltage suivantes : $\rho_2=0.1V$ et $\rho_3= -0.011 V$ pour Au/n-InP, Ces valeurs ont le même ordre de grandeur que des travaux publiés sur la structure Au/n-InP ([1],[2],[5]).

La barrière de potentiel $\bar{\phi}_B$ et la déviation standard σ varient tous les deux linéairement avec la tension appliquée V selon les équations suivantes :

$$\bar{\phi}_B - \bar{\phi}_{B0} = \rho_2 V \quad \text{et} \quad \sigma^2 - \sigma_0^2 = \rho_3 V$$

IV-7.2 Courbe de Richardson modifié

En substituant l'équation (IV.15) dans l'équation (IV.8) on obtient la relation suivante :

$$\ln\left(\frac{I_0}{T^2}\right) - \left(\frac{q^2 \sigma_0^2}{2k_B^2 T^2}\right) = \ln(AA^*) - \left(\frac{q\bar{\phi}_{B0}}{kT}\right) \tag{IV.17}$$

Le tracé de $\ln\left(\frac{I_0}{T^2}\right) - \left(\frac{q^2\sigma_0^2}{2k_B^2T^2}\right)$ 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 aussi la valeur de A^* et $\bar{\Phi}_{B0}$ respectivement. La figure IV-15 qui présente notre mesure montre clairement une excellente linéarité dans tout le domaine de température.

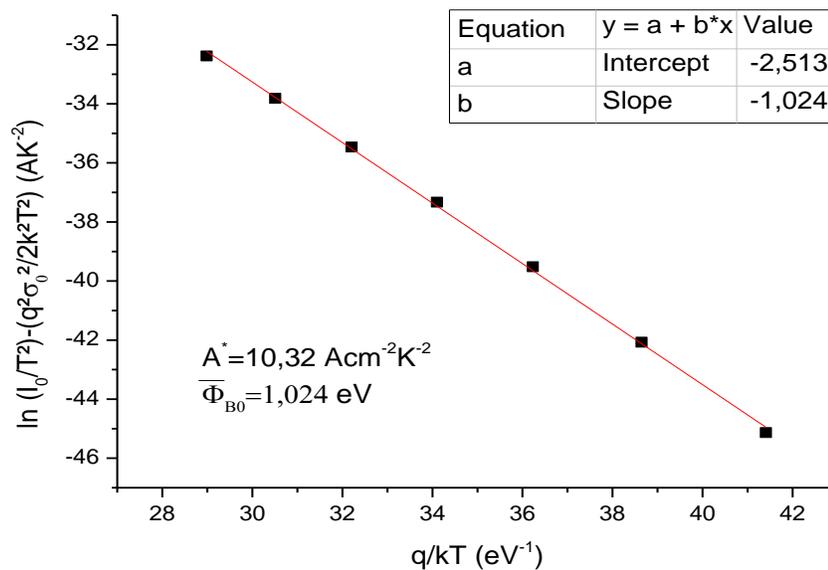


Figure IV-18: Plot de Richardson modifié de $\ln(I_0/T^2) - (q^2\sigma_0^2/2k^2T^2)$ en fonction de (q/kT) .

on remarque que la valeur de la barrière moyenne ($\bar{\Phi}_{B0} \approx 1.02 \text{ eV}$) obtenue à partir de tracé de Richardson modifié est confondue avec celle obtenue précédemment par le tracé de $\Phi_B = f(q/2KT)$ de la figure IV-16 . De plus la nouvelle valeur de la constante de Richardson est pratiquement proche à la valeur théorique du InP ($A^* = 9.8 \text{ A/K}^2\text{cm}^2$).

Pour la diode Schottky Au/n-InP L'utilisation du modèle de Werner avec la distribution gaussienne de la barrière de potentiel donne des valeurs de $\bar{\Phi}_{B0}$ et A^* en très bon accord avec les valeurs données par la littérature, ce qui permet aussi une bonne compréhension du comportement physique de la structure métal-semiconducteur.

IV-8 Etude comparative

Afin d'examiner la validité du modèle exposé, nous avons comparé les résultats de la simulation avec ceux de l'expérience existants dans la littérature [5].

Les figures (II-19.a) et (II-19.b) illustrent la comparaison entre les résultats des données expérimentales et nos résultats obtenus par silvaco pour les caractéristiques I-V-T.

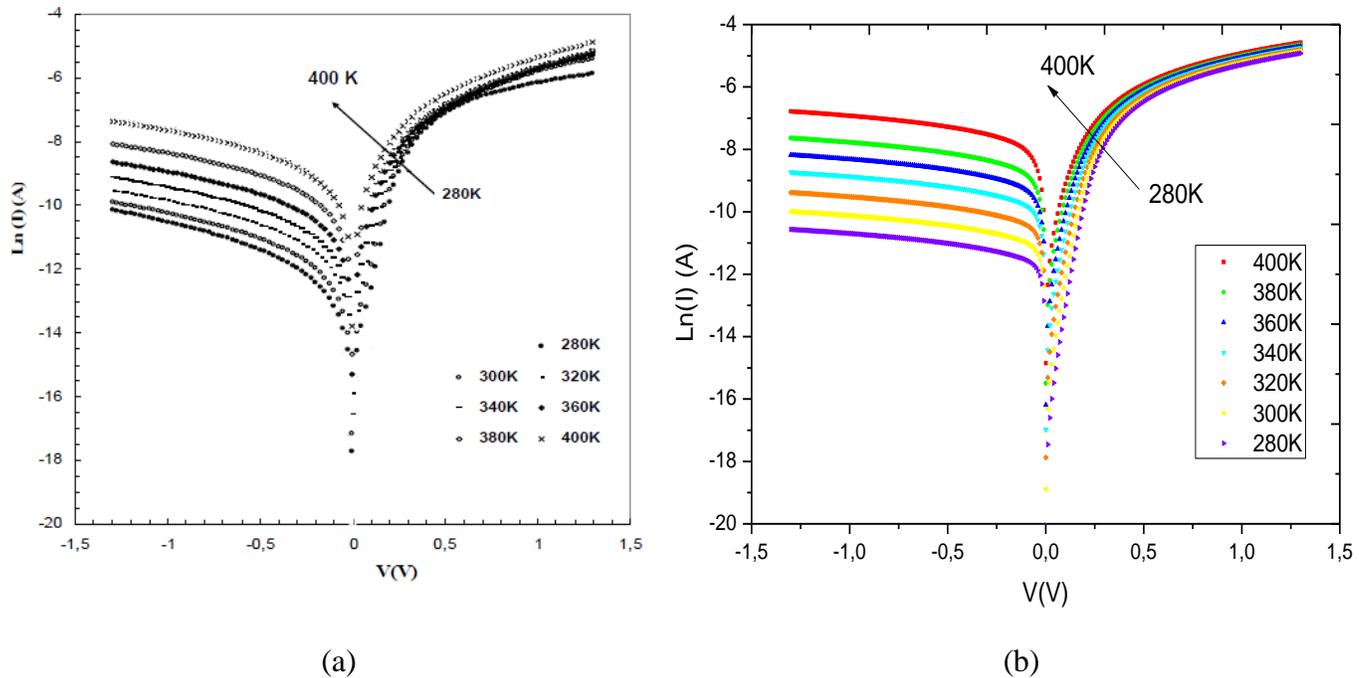


Figure IV-19: Comparaison entre les résultats des données expérimentales (a) et nos résultats obtenus par silvaco (b) pour la caractéristique I-V-T.

En examinant la figure IV-19, nous pouvons voir que les caractéristiques I-V-T simulées sont bien confondues avec celles mesurées.

Le tableau IV-3 illustre les paramètres I_0 , n , ϕ_B et R_s extraits des résultats de simulation obtenus et d'expérimentation pour une gamme de température.

T (K)	Les paramètres extraits à partir des caractéristiques (I-V-T) simulées par SILVACO				Les paramètres extraits à partir des caractéristiques (I-V-T) mesurées			
	I_0 (A)	n	ϕ_B (eV)	R_s (Ω)	I_0 (A)	n	ϕ_B (eV)	R_s (Ω)
280	2,5704E-07	1,50	0,576	134	2,77E-7	1,60	0,574	-
300	5,66239E-07	1,47	0,601	128	5,46E-7	1,53	0,601	-
320	1,15345E-06	1,44	0,626	122	1,08E-6	1,47	0,626	-
340	2,26464E-06	1,41	0,650	117	1,98E-6	1,40	0,651	-
360	4,16869E-06	1,40	0,676	112	3,76E-6	1,37	0,673	-
380	7,58578E-06	1,37	0,697	108	6,66E-6	1,36	0,695	-
400	1,31826E-05	1,36	0,721	101	1,37E-5	1,35	0,711	-

Tableau IV-3: Données expérimentales et résultats obtenus par Silvaco pour la gamme de température [280-400] K.

La comparaison entre ces paramètres extraits à partir des caractéristiques (I-V-T) simulées et mesurées est illustrée par les figures (IV-20, IV-21, IV-22) qui représentent les variations du courant de saturation, facteur d'idéalité, et hauteur de la barrière en fonction de la température respectivement.

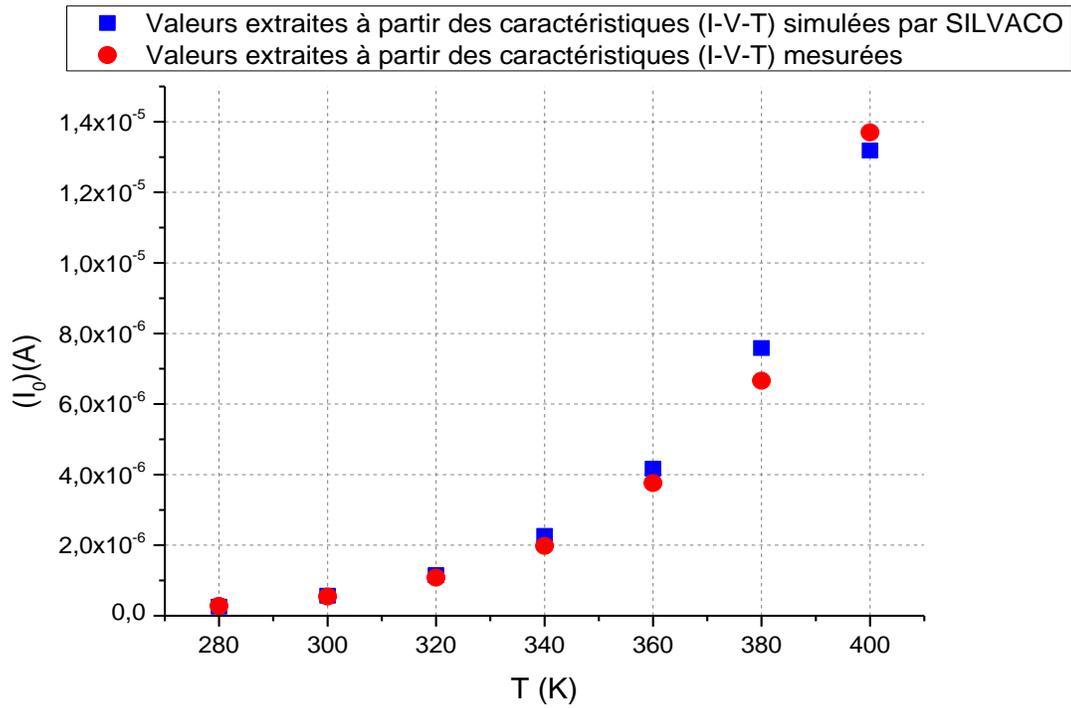


Figure IV-20: Comparaison entre les résultats des données expérimentales et nos résultats obtenus à partir des caractéristiques (I-V-T) simulées par SILVACO pour la variation du courant de saturation en fonction de la température.

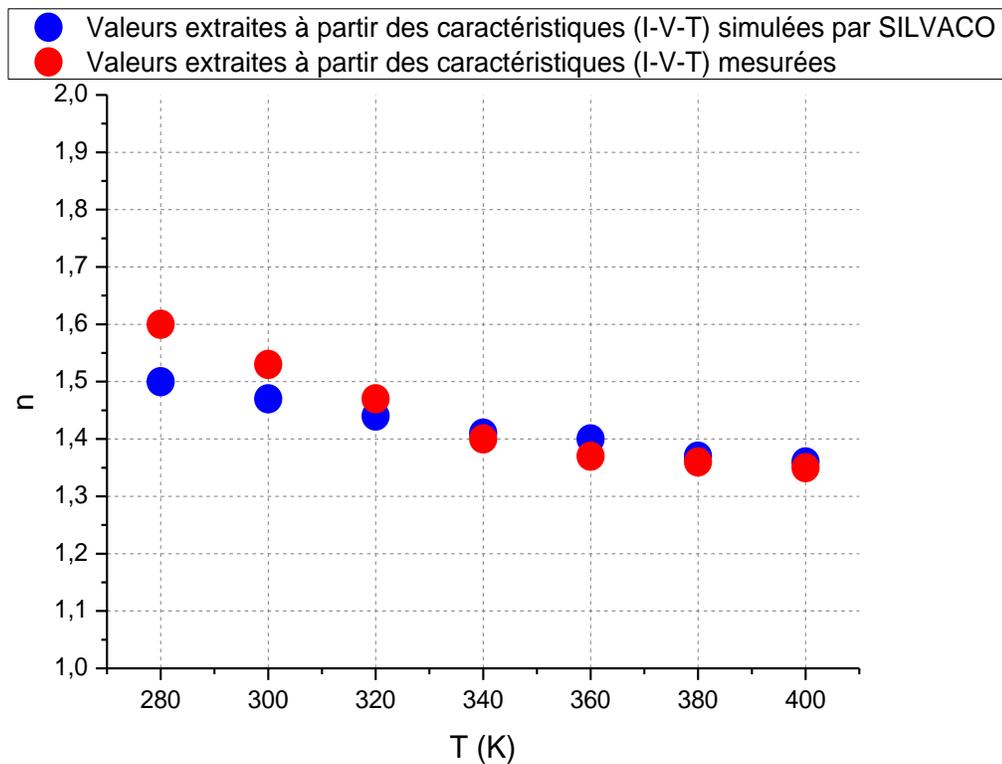


Figure IV-21: Comparaison entre les résultats des données expérimentales et nos résultats obtenus à partir des caractéristiques (I-V-T) simulées par SILVACO pour la variation du facteur d'idéalité en fonction de la température.

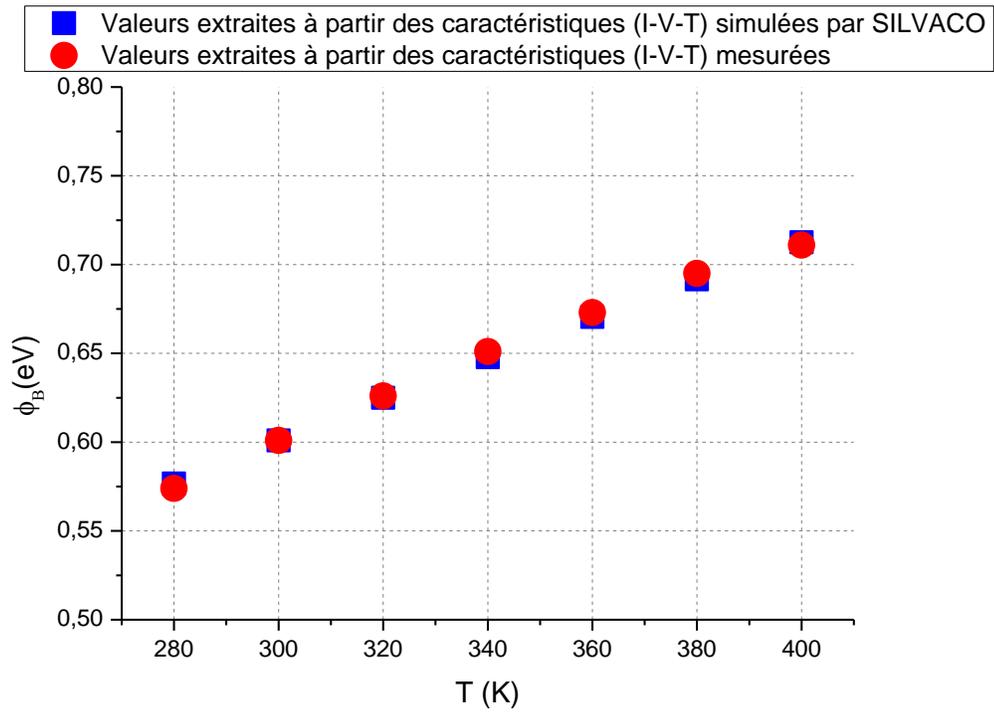
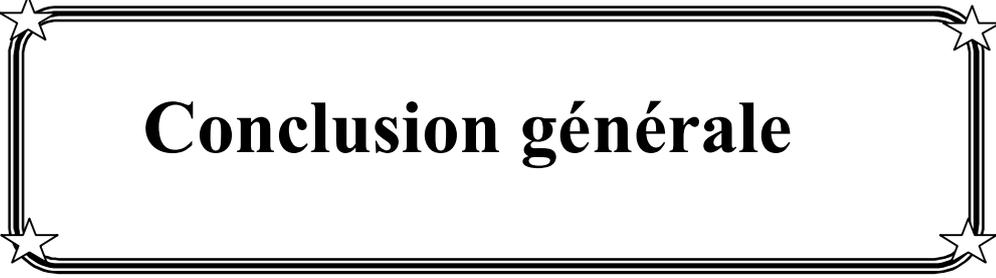


Figure IV-22: Comparaison entre les résultats des données expérimentales et nos résultats obtenus à partir des caractéristiques (I-V-T) simulées par SILVACO pour la variation de la hauteur de la barrière en fonction de la température.

On remarque que les paramètres extraits à partir des caractéristiques (I-V-T) simulées par SILVACO sont en très bon accord avec ceux extraits à partir des caractéristiques (I-V-T) mesurées.



Conclusion générale

Conclusion générale

Les composants électroniques à base des jonctions, telles que les diodes de Schottky et les cellules photovoltaïques, connaissent une grande focalisation scientifique et technique dans les dernières années, car elles présentent un grand intérêt économique, énergétique et environnemental.

La structure traitée dans notre travail est la diode Schottky d'or réalisée sur un substrat InP type n : Au/InP. En effet, les contacts sur InP ont d'une part un intérêt technologique pour la réalisation de dispositifs électroniques rapides et d'autre part jouent un rôle dans la compréhension physique des phénomènes gouvernant la formation de la barrière de Schottky.

Le fonctionnement de ce composant est décrit généralement par la caractéristique courant-tension qui permet de donner des informations sur les mécanismes du transport électrique interne et sur les imperfections des étapes technologiques de ses fabrications.

Le logiciel ATLAS-SILVACO nous a permis de simuler les caractéristiques courant-tension (I-V) de la diode à barrière de Schottky (SBD) formées sur le phosphore d'indium de type n (n-InP) à des températures (280-400 K) et de voir l'influence de la température sur l'évolution des courbes. Les caractéristiques courant-tension simulées sont en bon accord avec l'expérience.

Ces caractéristiques dépendent de plusieurs paramètres électriques, tels que la résistance série R_s , le courant de saturation I_0 et le facteur d'idéalité n . La connaissance, de ces paramètres, permet de comprendre et d'expliquer certains phénomènes électriques dans ces jonctions.

Nous avons appliqué la méthode standard suivie par la plupart des chercheurs pour extraire les paramètres homogènes (Φ_B , n , R_s) et nous avons trouvé que le facteur d'idéalité n augmente considérablement quand la température est abaissée, la valeur de la barrière de potentiel Φ_B diminue avec la diminution de la température T et la résistance série R_s augmente avec la diminution de la température T , cependant le calcul de la valeur de la constante de Richardson A^* à partir de la courbe conventionnelle $\ln(I_s/T^2)$ en fonction de $q/(kT)$ montre qu'il n'y a pas de désaccord entre les valeurs théoriques et simulées de cette constante.

La variation du facteur d'idéalité et la hauteur de barrière de potentiel avec la température n'ont pas une explication dans le cadre du modèle homogène puisque le modèle homogène ne donne pas l'évolution des deux paramètres en fonction de la température.

L'application de la méthode standard du modèle inhomogène de Werner donne des valeurs constantes en fonction de la température de la barrière moyenne ($\bar{\phi}_{B0}$) et la déviation standard (σ_0).

On a vu que la valeur de $\sigma_0 = 0,14$ V n'est pas petite devant la valeur moyenne de $\bar{\phi}_{B0} = 1,02$ eV, ce qui indique la présence des inhomogénéités d'interface. Le tracé Richardson modifié nous a donné une valeur de $\bar{\phi}_{B0} = 1,02$ eV et $A^* = 10,32$ A/cm²K². Ces valeurs sont en très bon accord avec les valeurs données par la littérature, ce qui permet aussi d'avoir une bonne compréhension du comportement physique de la structure métal-semiconducteur.

Nous avons conclu que la dépendance en température des caractéristiques I-V peut être expliquée avec succès sur la base du mécanisme thermoionique avec une distribution gaussienne de la barrière de potentiel.

En termes de perspective, il serait très intéressant d'étudier les caractéristiques I-V et C-V dans les structures Au/InP à basse température, tout en introduisant l'aspect quantique dans le mécanisme de transport du courant électrique dans ces composants électroniques.

Bibliographie

- [1] F.E. Cimilli et al," Temperature-dependent current voltage characteristics of the Au/n-InP diodes with inhomogeneous Schottky barrier height ",*Physica B* 404 ,p.1558-1562,2009.
- [2] M. Soyly, B. Abay," Barrier characteristics of gold Schottky contacts on moderately doped n-InP based on temperature dependent I–V and C–V", *measurements Microelectronic Engineering*,Vol.86,p.88-95,2009.
- [3] T.Mouet, " Etude et caractérisation des structures MIS sur InP et des nanostructures à base de ZnO", thèse de doctorat, Université de Constantine, 2011.
- [4] S. Shankar Naik, V. Rajagopal Reddy,"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", *Superlattices and Microstructures*,Vol.48,p.330-342,2010.
- [5] D.Korucu, T.S.Mammadov, "Temperature-dependent current-conduction mechanisms in Au/n-InP Schottky barrier diodes (SBDs)", *Journal of Optoelectronics And Advanced Materials*,Vol.14,p.41-48,2012.
- [6] V. Janardhanam, A. Ashok kumar,V.R. Reddy,"studies of Schottky contacts on indium phosphide", Lambert academic publishing, 2011.
- [7] M. Bhaskar Reddy et al, "Current–voltage–temperature (I–V–T) characteristics of Pd/Au Schottky contacts on n-InP (111)", *Current Applied Physics*,Vol.9,p.972-977,2009.
- [8] F.E. Cimilli et al," Determination of the lateral barrier height of inhomogeneous Au/n-type InP/In Schottky barrier diodes",*Semicond. Sci. Technol*,p.851-854,2007.
- [9] P.Chevalier," Conception et réalisation de transistors à effet de champ de la filière AlInAs/GaInAs sur substrat InP. Application à l'amplification faible bruit en ondes millimétriques", thèse de doctorat, Université de Lille I, 1998.
- [10]R. Castagné et all,"Circuits Intégrés en arséniure de Gallium., Physique, technologie et règles de conception",*Masson et Cinet ENST Paris*, 1989.
- [11]H. Mathieu, "Physique des semi-conducteurs et des composants électroniques", *Masson*, 1987.
- [12]Gerald Bastard," Wave mechanics applied to semiconductor heterostructures", les éditions de physique, paris, 1988.
- [13]S. Dehimi, "Etude de lasers à base des composes semi-conducteurs (InP, GaAs, GaP)", mémoire de Magistère, Université de Batna, 2011.

- [14] K. Benatmane, " Etude de lasers à base de semi-conducteurs III-V", mémoire de Magistère, Université de Batna, 2011.
- [15] M. N. Zencirci, Thèse de Doctorat, Ecole centrale de Lyon (France), 1987.
- [16] B. K. Ridley, J. Appl. Phys, 1977.
- [17] J. R. Chelikowsky, M. I. Cohen, Phys. Rev. B 14, 556, 1976.
- [18] S. Selberherr. "Analysis and simulation of semiconductor devices " .Springer verlag, 1984.
- [19] <http://www.ioffe.ru/SVA/NSM/Semicond/InP>.
- [20] D.M. Caughey and R. E. Thomas, "Carrier Mobilities in Silicon Empirically Related to Doping and Field", Proc. IEEE 55, p. 2192-2193, 1967.
- [21] S.M. Sze, " Physics of Semiconductor Device"s, 2nd ed., Wiley, New York, 1981.
- [22] Y. ayad, "Détermination de la longueur de diffusion des porteurs de charge minoritaires dans le silicium cristallin par interaction lumière matière ", thèse de doctorat, l'Institut National des Sciences appliquées de Lyon, 2009.
- [23] H. Mathieu, "Physique des semiconducteurs et des composants électroniques", 6^{ème} Edition, Dunod, Paris, 2009.
- [24] S. Khemissi, "Modelisation non lineaire des composants a effet de champs", Thèse de doctorat, Université Mentouri de Constantine, 2009.
- [25] W. Schottky, "Halbleiterttheorie der sperrschicht. Naturwissenschaften", 26(52) :843. doi : 10.1007/BF01774216, Jun 1938.
- [26] N. F. Mott, "Note on the contact between a metal and an insulator or semi-conductor", Proceedings of the Cambridge Philosophical Society, 34 :568, 1938.
- [27] A. E. Bazin, "Conception de diodes Schottky sur 3C-SiC epitaxié sur silicium", Thèse de doctorat, Université François - Rabelais Tours, 2009.
- [28] M. J. Turner and E. H. Rhodbrick, "Solid-State Electronics", Pergamon Press , Vol.11, 1968.
- [29] A.M.Cowley and S.M.Sze, J. App. Phys., Vol. 36, 1965.
- [30] C. Berthod, Thèse de doctorat, Ecole polytechnique fédérale de Lausanne, 1998.
- [31] T. Jaouen, " Isolant dans la limite ultra-mince : proprietes électroniques de barrières tunnel de MgO", thèse de doctorat, Université de Rennes 1, 2012.
- [32] Z. pang, "Schottky contacts to indium phosphide and their applications", Thèse de doctorat, Université McMaster, 1997.
- [33] S. M. Sze, Kwok K. NG, "Physics of Semiconductor Devices", Third Edition, JOHN Wiley & Sons, JNC, 2007.

- [34] A. Latreche, "Non-homogénéités dans les structure métal/semiconducteurs", thèse de doctorat, Université de Sétif, 2012.
- [35] N. Benaziez, "Etude des propriétés électriques en régime statique d'une structure Schottky", mémoire de Magistère, université de Batna, 2010.
- [36] E. H. Rhoderick, "Metal-semiconductor contacts", Clarendon Press Oxford, 1980.
- [37] W. Schottky and E. Spenke, *Wiss, Verrof, Simmens Werke*, Vol. 18, Ed. 67, 1932.
- [38] C. R. Crowell and V. L. Rideout, "Solid-State Electronics", Pergamon Press 1969. Vol.12.
- [39] J. Crofton, L. M. Porter, J. R. Williams, "The Physics of Ohmic Contacts to SiC", *phys. stat. sol.* (b), vol. 202, 1997.
- [40] W. Shockley and W. T. Read, JR, *Phys. Rev.* Vol. 87, N°5, 1952.
- [41] F. Bourouba, "Modilisation et simulation des contacts metal-semiconducteur à barrier inhomogene" INHOMOGENE Mémoire de Magistère, Université de Sétif, 2010.
- [42] J. H. Werner et H. H. Guttler, "Barrier inhomogeneities at Schottky contacts", *J. Appl. Phys.*, vol. 69, 1991.
- [43] G. M. Vanalme, R. L. Van Meirhaeghe et al, "A ballistic electron emission microscopy (BEEM) study of the barrier height change of Au/n-GaAs Schottky barriers due to reactive ion etching", *Semicond. Sci. Technol.*, vol.12, 1997.
- [44] S. Zhu, R. L. Van Meirhaeghe et al, "Barrier height inhomogeneities of epitaxial CoSi₂ Schottky contacts on n-Si (100) and (111)", *Solid-State Electronics*, vol. 44, 2000.
- [45] R. T. Tung, "Electron transport at metal-semiconductor interfaces: General theory", *Phys. Rev. B* 45 no. 23, 13509-13523, 1992.
- [46] R. NEGRU, "Conception et modélisation de pixels de photodétection -photodiodes PIN- en vue de leurs utilisation comme détecteurs de particules", Thèse de Docorat, Ecole Polytechnique, Plaiseau France, 2008.
- [47] Atlas user's manual, Silvaco international, 2004.
- [48] Silvaco International, <http://www.silvaco.com>.
- [49] TCAD Tutorial and Examples, Volume I, Silvaco international, 1999.
- [50] S. Adachi, "Handbook on Physical Properties of Semiconductors, III-V Compound semiconductors", volume 2, Kluwer Academic, Boston, 2004.
- [51] M. Mahmoodi and A. Feyzi, "Electron Mobility in InP at Low Electric Field Application", *International Archive of Applied Sciences and Technology*, Volume 3, pp. 99-104, March 2012.

- [52] F. E. Cimilli, M. Saglam and A. Turut, "Determination of the lateral barrier height of inhomogeneous Au/n-type InP/In Schottky barrier diodes, *Semicond. Sci. Technol.*, vol. 22, , pp. 851-854, 2007.
- [53] S.K.Cheung, N.W.Cheung, "Extraction of Schottky diodes parameters from forward current-voltage characteristics", *journal de physique appliqué*, 1986.
- [54] S.Acar, S.Karadeniz and al, "Gaussian distribution of inhomogeneous barrier height in Ag/p-Si (1 0 0) Schottky barrier diodes", *Appl. Sur. Sci.*, vol. 233, pp. 373-381, 2004.
- [55] S.Toumi, A.Ferhat-Hamida, and al, " Gaussian distribution of inhomogeneous barrier height in tungsten/4H-SiC (000-1) Schottky diodes", *Microelectron. Eng.*, Vol.86, pp 303-309, 2009.

Abstract:

InP is used in high-power and high-frequency electronics because of its superior electron velocity with respect to the more common semiconductors silicon and gallium arsenide. It also has a direct bandgap, making it useful for optoelectronics devices like laser diodes. InP is also used as a substrate for epitaxial indium gallium arsenide based opto-electronic devices.

In this project we are interested in InP as a detector, so the study of its electrical properties is very important in order to determine the different effects on the current-voltage characteristics.

Analysis of the I-V characteristics of the Schottky barrier diode (SBDs) at room temperature only does not give detailed information about their conduction process or the nature of barrier formation at the M/S interface. The temperature dependence of the I-V characteristics allows us to understand different aspects of conduction mechanisms.

TCAD simulator allowed us to simulate the current-voltage characteristic (IV), to see the effect of temperature on the evolution of curves and assess the main parameters that characterize the Schottky diode as the ideality factor, the height of the barrier and the series resistance.

Indeed, the application of the standard method, (used by most researchers) which is based on the extraction of homogeneous parameters (Φ_B , n , R_s) has some defects such that the decrease in the barrier height (Φ_B) and increase of ideality factor (n) when decreasing temperature, The use of inhomogeneous model proposed by Werner enables the explanation of the abnormalities observed on the extracted electrical parameters on one hand. On the other hand; the use of this model allows bringing closer the value of the Richardson constant which is consistent with that given by the theory ($9.8 \text{ A/K}^2\text{cm}^2$).

Keywords :: Simulation, SDB, Silvaco, InP, Temperature, I-V-T.

ملخص

يستعمل فسفيد الأنديموم في الإلكترونيات فائقة الطاقة وعالية التردد وهذا بسبب سرعة الإلكترون التي تفوق سرعة السليسيوم (شبه الموصل الأكثر شيوعاً) وزرنيخيد الغاليوم، وهو أيضا ذو فجوة نطاق من النوع المباشر، مما يجعله شائع الاستعمال في أجهزة الإلكترونيات الضوئية كثنائى الليزر، فسفيد الأنديموم يستعمل أيضا كقاعدة لتضيد زرنيخيد انديوم الغاليوم التي تشكل اساس الإلكترونيات الضوئية، ينصب اهتمامنا في هذا المشروع على فسفيد الأنديموم باعتباره كاشف، وبالتالي فإن دراسة خصائصه الكهربائية جد مهمة من أجل تحديد مختلف الخواص تيار-فولتية.

تحليل الخواص تيار-فولتية للثنائيات شوتكي في درجة حرارة الغرفة لا تزويدنا بمعلومات مفصلة حول عملية التوصيل أو طبيعة تكوين الحاجز في الواجهة (معدن/شبه موصل). إن علاقة الخواص تيار-فولتية بدرجة الحرارة يسمع بفهم مختلف جوانب اليات التوصيل.

لقد سمع برنامج المحاكاة TCAD بمعاينة الخصائص تيار فولتية لمعرفة تأثير درجة الحرارة على منحنيات التطور، وتقييم المعايير الأساسية التي تمثل ثنائى شوتكي مثل معامل المثالية، حاجز الجهد والمقاومة المتواليه.

في الواقع، استعمال الطريقة القياسية المتبعة من طرف العديد من الباحثين والتي تعتمد على استخراج المعلومات المتجانسة (Φ_B, n, R_s) تبين وجود عدة نقائص كإنخفاض حاجز الجهد وارتفاع معامل المثالية بانخفاض الحرارة، في حين يسمع إستعمال النموذج غير المثالي المقترح من طرف فانر بتفسير النقائص الملاحظة على المعلومات الكهربائية المستخلصة من جهة، ومن جهة أخرى يسمع بتقريب قيمة ثابت ريشاردسون الذي يوافق القيمة النظرية ($9.8 \text{ cm}^2 \text{ K}^2 / \text{A}$).