



UNIVERSITE MOULOUD MAMMERI, TIZI - OUZOU
FACULTE DE GENIE ELECTRIQUE ET D'INFORMATIQUE
DEPARTEMENT : ELECTRONIQUE

Mémoire de Fin d'Etudes

En vue de l'obtention du diplôme de :

MASTER

Spécialité : Electronique

Option : Microélectronique

Soutenue le 04 juillet 2018, par :

Lamia MEDJOU DJ

Simulations d'une diode Schottky à base d'AlGaAs

Devant le jury composé de :

Mr. BELKAID Med Saïd	Professeur à l'UMMTO	Président
Mr. KHEDIR Abdelkrim	Ingénieur de soutien à la recherche au CDTA	Encadreur
Mlle. HATEM Djedjiga	Maître de conférences classe A à l'UMMTO	Co-encadreur
Mlle. HOCINE Dalila	Maître de conférences classe A à l'UMMTO	Examinatrice

Remerciements

Avant toute chose, je tiens à remercier celles et ceux qui ont contribué à la réalisation de ce travail :

Je souhaite tout d'abord remercier, mon encadreur, Mr. Abdelkarim KHEDIRI, ingénieur en microélectronique, pour avoir accepté de diriger ce travail. Sa patience, sa disponibilité et ses compétences ont grandement contribué à l'aboutissement de ce mémoire.

Mes remerciements s'étendent également à Mr. Walid FILALI, docteur en microélectronique, pour le temps qu'il a bien voulu me consacrer et pour ses précieuses explications qui m'ont été d'une aide inestimable.

Je voudrais ensuite remercier Mme. Djedjiga HATEM, enseignante à l'université de Tizi-Ouzou, pour son encadrement. Sa modestie, sa riche expérience et l'accueil chaleureux qu'elle m'a toujours réservé, tout au long de mon cursus à la faculté du génie électrique et informatique, m'ont fortement marqué.

Merci à Mme. Dalila HOCINE, enseignante à l'université de Tizi-Ouzou, de m'avoir orienté et accompagné au début de mon stage, qu'elle trouve ici ma sincère gratitude.

Je tiens aussi à remercier les membres du jury qui me font le grand honneur de mettre leurs compétences à contribution pour évaluer ce travail.

Ma reconnaissance va également à mes camarades de l'UMMTO avec qui j'ai partagé cette expérience, Massinissa et Brahim, merci pour votre présence amicale. Et une pensée particulière est enfin adressée à l'ensemble du personnel du CDTA que j'ai eu à côtoyer, en particulier l'équipe de la centrale technologique de micro-fabrication, dont j'ai apprécié la gentillesse et la bonne humeur. Merci beaucoup pour cet accueil et pour l'agréable ambiance.

Lamia MEDJOU DJ

Résumé

L'objectif du présent travail est la simulation par le simulateur SILVACO ATLAS TCAD (Technology Computer Aided Design) des propriétés électriques courant-tension (I-V) et capacité-tension (C-V) d'une diode à barrière de Schottky formée à partir de matériaux III-V, l'arséniure de gallium (GaAs) et L'arséniure Aluminium de gallium type p (p-AlGaAs), en vue d'une étude de l'influence de certains paramètres géométriques et physiques.

Mots clés

Diode , Schottky, Barrière de potentiel , dopage, silvaco, atlas, simulation, AlGaAs, GaAs.

Table des matières

Introduction générale	1
Chapitre 1 : Contact Métal-Semiconducteur -----	3
1.1 Introduction-----	3
1.2 Notions essentielles liées aux hétérostructures -----	3
1.2.1 Théorie des bandes d'énergie-----	3
1.2.2 Généralités sur le semi-conducteur -----	4
1.2.2.1 Semiconducteur intrinsèque-----	4
1.2.2.2 Semiconducteur extrinsèque -----	5
1.2.3 Travail de sortie $e\Phi_m$ -----	7
1.2.4 Affinité électronique $e\chi$ -----	7
1.3 Le contact Métal Semi-conducteur -----	8
1.3.1 Barrière de potentiel (barrière Schottky) -----	8
1.3.2 Mise en contact d'un un métal avec semi-conducteur type P -----	9
1.3.2.1 Cas $e\Phi_m = e\Phi_{sc}$ (Régime des bandes plates) -----	9
1.3.2.2 Cas $e\Phi_m > e\Phi_{sc}$ (contact ohmique) -----	10
1.3.2.3 Cas $q\Phi_m < q\Phi_{sc}$ (contact redresseur ou diode schottky) -----	11
1.3.3 Zone de charge d'espace -----	12
1.3.3.1 Champ et potentiel électrique -----	12
1.3.3.2 Capacité -----	14
1.4 Mécanismes de conduction dans une diode Schottky -----	15
1.4.1 Théories de transport des charges -----	16
1.4.1.1 Théorie de diffusion -----	16
1.4.1.2 Théorie d'émission thermoïonique -----	17
1.4.1.3 Théorie de l'émission-diffusion -----	17
1.4.2 Conduction par effet tunnel -----	18
1.4.3 Recombinaison dans la zone de charge d'espace -----	18
1.4.4 Recombinaison dans la région neutre (ohmiques) -----	19
1.4.5 Densité de courant total -----	19
1.4.6 Modèle à barrière homogène -----	20
Chapitre 2 : État de l'Art sur les matériaux III-V -----	21
2.1 Introduction -----	21
2.2 Quelques notions basiques sur les matériaux solides -----	21
2.3 Système et réseau cristallins -----	22
2.3.1 Cristal cubique -----	22
2.3.2 Définition des semiconducteurs III-V -----	22

2.3.3	Structure cristalline des semi-conducteurs III-V	24
2.4	Les matériaux semi-conducteurs III-V GaAs et AlGaAs	25
2.4.1	Arséniure de galium GaAs	25
2.4.2	L'aluminium arséniure de galium $Al_xGa_{1-x}As$	27
2.5	Conclusion	29
Chapitre 3 : Outil de simulation SILVACO		30
3.1	Introduction	31
3.2	But de la simulation d'un composant	31
3.3	Description de l'échantillon à simuler	31
3.4	Processus de simulation	32
3.5	Spécification de la structure	34
3.6	Spécification du modèle et des matériaux	39
3.7	Méthodes numériques	43
3.8	Spécification de la solution	44
3.9	Analyse	45
3.10	Introduction des pièges	45
3.11	Conclusion	46
Chapitre 4 : Résultats de simulation		47
4.1	Introduction	47
4.2	Etude de l'influence des paramètres géométriques et physiques	47
4.2.1	Simulation courant - tension (I-V)	47
4.2.1.1	Influence de la variation des paramètres au niveau de la couche d'AlGaAs	47
4.2.1.1.1	Variation de la largeur de la couche	47
4.2.1.1.2	Variation de la concentration des dopants	48
4.2.1.1.3	Influence de la variation du diamètre du contact schottky	49
4.2.1.2	Influence de la variation des paramètres au niveau de la couche « GaAs »	50
4.2.1.3	Influence de variation de la température	50
4.2.2	Simulation capacité - tension (C-V)	51
4.2.2.1	Capacité en fonction de la fréquence	51
4.2.2.2	Capacité en fonction de la fréquence avec pièges	52
4.3	Conclusion	54
Conclusion générale		55
Références		56

Liste des figures :

Figure 1-1: Diagramme des bandes d'énergie pour un conducteur, isolant et semi-conducteur.....	4
Figure 1-2: Diagramme de bandes d'énergie d'un semi-conducteur type P	6
Figure 1-3: Diagramme de bandes d'énergie d'un semi-conducteur type N	7
Figure 1-4: Diagramme des bandes d'énergie d'un métal montrant le travail de sortie.....	7
Figure 1-5: Diagramme des bandes d'énergie d'un semiconducteur incluant le travail de sortie et l'affinité électronique	8
Figure 1-6: Diagramme des bandes d'énergie à l'équilibre thermodynamique pour la jonction M-S type P et N.....	9
Figure 1-7: Diagramme des bandes d'énergie en régime des bandes plates	10
Figure 1-8 : Diagramme des bandes d'énergie en régime d'accumulation	10
Figure 1-9 : Contact M-S type P ohmique sous polarisation	11
Figure 1-10 : diagramme des bandes d'énergie en régime de déplétion	11
Figure 1-11: Contact M-S type P redresseur (diode Schottky) sous polarisation	12
Figure 1-12: Intégration successive de la densité de charge dans une diode Schottky type N à l'équilibre thermodynamique.	13
Figure 1-13: Courbe $C^{-2}(V)$	14
Figure 2-1 : (a) Cubique simple. (b) Cubique centré. (c) Cubique face centrée	22
Figure 2-2: Quelques plans cristallographiques repérés par leur « indices de Miller »	22
Figure 2-3: Largeur de bande interdite en fonction du paramètre cristallin a pour les alliages III-V.	23
Figure 2-4 : Mailles cristallographiques des structures Diamant et Zinc Blende	24
Figure 2-5 : (a) première zone de Brillouin d'un cristal Zinc-Blende, (b) Plans et directions cristallographiques d'un substrat de GaAs (norme américaine).	25
Figure 2-6 : (a) Structure cristalline du GaAs. (b) Structure de bande du GaAs	26
Figure 2-7 : Evolution de l'énergie de différentes vallées de la bande de conduction par rapport au point Γ de la bande de valence en fonction du taux d'aluminium. Résultats déduits des équations.	28
Figure 3-1: Interdisciplinarité de la simulation	30
Figure 3-2 : Echantillon NU1362 et son image MEB	31
Figure 3-3: l'interface DECKBUILD.	33
Figure 3-4: Entrées / sorties d'ATLAS	34
Figure 3-5: Ordre des commandes sous ATLAS.	34
Figure 3-6: Maillage de la structure.	36

Figure 3-7: (a) Structure avec les régions. (b) Structure avec les matériaux.	37
Figure 3-8: Structure après définition des électrodes.....	38
Figure 3-9: Structure après dopage.	38
Figure 3-10: Structure finale.	39
Figure 3-11: Définition du niveau d'énergie du piège pour les pièges accepteurs et donneurs en référence aux bords de la conduction et de la bande de valence	45
Figure 4-1: Caractéristique I-V sous polarisation direct de la diode pour différentes épaisseurs de la région AlGaAs.	48
Figure 4-2: Caractéristique I-V sous polarisation direct de structure de la diode pour différentes concentrations de dopage.	49
Figure 4-3: Caractéristique I-V sous polarisation direct de structure de la diode pour différents diamètres du contact Schottky.....	49
Figure 4-4: Caractéristique I-V sous polarisation direct de la structure schottky à différentes épaisseurs de la région GaAs.	50
Figure 4-5: Caractéristique I-V de la structure Schottky pour différentes températures	51
Figure 4-6: Caractéristique C-V de la structure Schottky pour différentes fréquences.	52
Figure 4-7: Caractéristique C-V de la structure Schottky pour différentes fréquences avec piégeage.....	53
Figure 4-8: Comparaison entre les caractéristique C-V de la structure Schottky en fonction des différentes fréquences avec et sans piégeage.	53

Liste des tableaux :

Tableau 2-1: Extrait du tableau de Mendeleïev mettant en évidence les matériaux des colonnes III et V	23
Tableau 2-2: propriétés physiques du GaAs	26
Tableau 2-3 : Propriétés électriques du GaAs	26
Tableau 2-4: Propriétés physiques de l'AlGaAs	27
Tableau 2-5 : propriétés physiques de l'AlGaAs	27
Tableau 3-1: Modèles de la mobilité	41
Tableau 3-2: Modèles dépendant de la recombinaison et génération des porteurs	41
Tableau 3-3: Modèle pour les statistiques des porteurs	42
Tableau 3-4: Modèles pour l'ionisation par impact	42
Tableau 3-5: Méthodes numériques	44

Introduction Générale

Depuis les années soixante, l'industrie de la microélectronique n'a cessé de progresser, grâce à l'augmentation des performances des circuits liée à la miniaturisation des composants.

Cependant, cette stratégie atteint actuellement des limites intrinsèques, la fréquence de fonctionnement des puces est limitée par le temps de transit de l'information dans les liaisons métalliques qui connectent les différentes unités de traitements et de calculs entre elles.

Les besoins croissants en débit d'information incitent à remplacer à terme les interconnexions métalliques par des interconnexions optiques basés sur des matériaux III-V, dans lesquelles l'information est transportée par la lumière, où les temps de transit du signal sont beaucoup plus courts. La réalisation de tels circuits intégrant à la fois l'électronique et l'optique a stimulé les recherches visant à développer des composants à base de matériaux III-V. Par ailleurs, les semiconducteurs III-V présentent des propriétés très intéressantes pour les applications dans le domaine du photovoltaïque, la microélectronique rapide digitale et analogique, les composants électroniques de puissance et l'optoélectronique intégrée.

Pour faire face au rythme accéléré de l'innovation et à la complexification des processus de fabrication des composants électroniques, les chercheurs et les industriels ont recours à des logiciels de simulation qui facilitent la prédiction et l'analyse du comportement des dispositifs. Le simulateur Atlas développé par le groupe SILVACO est l'un de ces logiciels qui est capable de prédire les caractéristiques électriques de la plupart des composants à semiconducteurs en régime continu, transitoire ou fréquentiel. Il fournit également des informations sur la distribution interne de variables telles que les concentrations des porteurs, le champ électrique ou le potentiel, etc.

Le travail exposé dans ce manuscrit a été réalisé dans le cadre d'un stage effectué au Centre de Développement des Technologies Avancées (CDTA) au sein de la centrale technologique de micro-fabrication. L'objectif du présent travail est la simulation avec le logiciel ATLAS-SILVACO des effets de température, des dimensions géométriques de la structure, et du dopage sur les propriétés électriques courant-tension et capacité-tension d'une diode à barrière de Schottky à base d'arséniure de Gallium (GaAs) et d'aluminium arséniure de gallium de type p (p-AlGaAs).

Ce document est construit sur quatre chapitres. Le premier chapitre donne, des supports théoriques nécessaires à la compréhension du fonctionnement de la structure Métal-Semiconducteur (diode Schottky), avec des définitions de phénomènes propres aux hétérostructures de façon générale et au contact Métal-Semiconducteur de façon particulière en incluant les différentes équations de base qui régissent le fonctionnement électrique.

Le deuxième chapitre est consacré à l'état de l'art des composants semiconducteurs III-V, l'arséniure de gallium (GaAs) et l'aluminium arséniure de gallium (AlGaAs)

Le troisième chapitre est destiné à l'utilisation du logiciel SILVACO, son fonctionnement et ses différentes commandes en intégrant le programme développé de la structure de la diode Schottky à base d'AlGaAs-GaAs sous forme d'exemple.

Le quatrième et dernier chapitre expose les résultats de la simulation de la structure diode Schottky à base d'AlGaAs/GaAs soumise à divers variations géométriques et physiques, avec une étude de l'influence de ces variations sur les caractéristiques courant-tension et capacité- tension.

Chapitre 1 : Contact Métal-Semiconducteur

1.1 Introduction

Le matériau semiconducteur dont l'appellation a été utilisée, selon G.Bush, pour la première fois en 1782 par A.Volta [1] est la matière première des composants électronique.

Le matériau semiconducteur le plus banalisé est le silicium, il convient aux composants électroniques courants comme les mémoires, les processeurs ou les MEMS. Mais pas aux composants optoélectroniques (LED, diodes laser...), aux détecteurs à infrarouge ou aux circuits à radiofréquences rapides. Pour ces composants avancés, les semiconducteurs III-V sont les mieux adaptés.

Pendant quelques années, l'histoire des semi-conducteurs a été centrée autour de deux propriétés importantes, à savoir le redressement de la jonction Métal-Semiconducteur et de la sensibilité des semiconducteurs à la lumière.

L'effet redresseur de la jonction Métal-Semiconducteur a été observé en premier en 1874, par K.F. Braun. En 1874, Arthur Schuster observa un redressement dans un circuit fait de fils de cuivre reliés par des vis et en 1929, Walter Schottky confirma expérimentalement la présence d'une barrière dans une jonction Métal-Semiconducteur [1].

L'effet redresseur que présente une jonction métal-semiconducteur est notamment exploité par la diode Schottky.

Dans ce chapitre nous allons décrire les propriétés électriques d'un contact Métal-Semiconducteur (M-S). Nous allons définir les notions liées aux hétérostructures, et aux semiconducteurs. Ensuite, on va s'intéresser à la structure M-S et à ses mécanismes de conduction.

1.2 Notions essentielles liées aux hétérostructures

1.2.1 Théorie des bandes d'énergie

La théorie des bandes est une modélisation des valeurs d'énergie que peuvent prendre les électrons d'un solide à l'intérieur de celui-ci. De façon générale, ces électrons n'ont la possibilité de prendre que des valeurs d'énergie comprises dans certains intervalles sous forme de bandes continues appelées bande de conduction BC et bande de valence BV, lesquels sont séparés par des bandes interdites car ces niveaux d'énergies sont inaccessibles aux électrons. Cette région interdite est appelée « gap » et sa largeur E_g est caractéristique du matériau. Notons que l'énergie du bas de la bande de conduction est notée E_c et que celle du haut de la bande valence est notée E_v . La distance entre les niveaux d'énergie est mesurée en électronvolt (eV) [2].

$$E_g = E_c - E_v \quad 1.1$$

Selon la façon dont ces bandes sont réparties, il est possible d'expliquer schématiquement les différences de comportement électrique entre un isolant, un semi-

conducteur et un conducteur. La figure 1-1 montre le positionnement de ces bandes suivant la nature électrique du matériau.

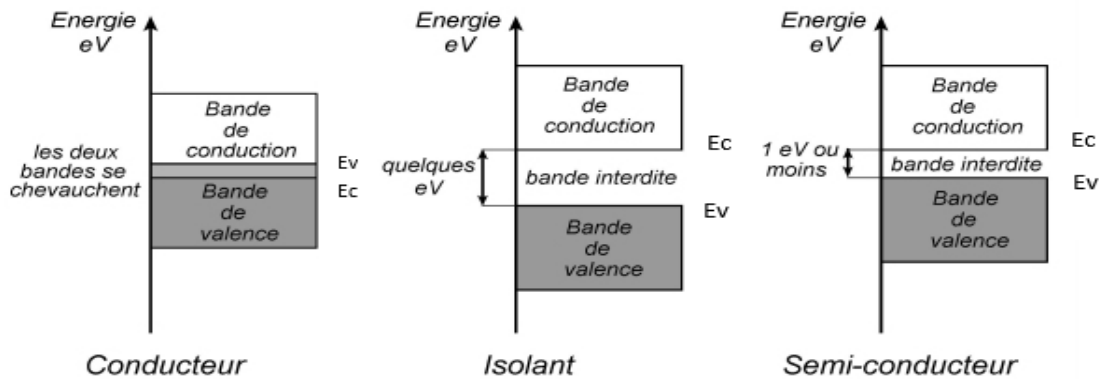


Figure 1-1 : Diagramme des bandes d'énergie pour un conducteur, isolant et semi-conducteur, respectivement de gauche à droite [3].

- **Le niveau de Fermi**

Le niveau de Fermi peut être considéré comme un niveau de remplissage du solide par les électrons. C'est le niveau énergétique le plus élevé qu'un électron puisse occuper à 0°K. à l'équilibre thermodynamique, ce niveau est constant à travers un solide donné, et est continu à la jonction entre deux solides.

Son positionnement dans le diagramme des bandes d'énergie est relié à la façon dont les bandes sont occupées : dans un conducteur, le niveau de Fermi est dans la bande de conduction, dans un isolant ou un semiconducteur, le niveau de Fermi est situé dans la bande interdite.

Les électrons peuvent occuper des niveaux d'énergie supérieurs au niveau de Fermi, et la probabilité d'occupation d'un niveau d'énergie E par un électron obéit à la statistique d'occupation des niveaux d'énergie de Fermi-Dirac :

$$f(E) = \frac{1}{\exp\left(\frac{E-E_{Fsc}}{kT}\right) + 1} \quad 1.2$$

où k est la constante de Boltzmann, T est la Température et E_{Fsc} l'énergie de Fermi d'un semiconducteur.

1.2.2 Généralités sur le semi-conducteur

Un semiconducteur est un corps cristallin dont les propriétés de conductibilité électrique sont intermédiaires entre celle des métaux et celle des isolants.

1.2.2.1 Semiconducteur intrinsèque

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

Dans ce type de semi-conducteur, à chaque électron de la bande de conduction correspond un trou dans la bande de valence. De cette constatation, nous déduisons que les densités des électrons n et des trous p sont identiques pour ce type de semi-conducteur [2], soit :

$$ni = n = p \quad 1.3$$

Où n_i la densité de porteurs intrinsèques

Avec un niveau de Fermi E_F distant des extrema (E_v et E_c) de plus de $3kT$ on peut obtenir les densités des porteurs avec la simplification de la fonction de Fermi (1.4) sous une forme exponentielle.

$$\left. \begin{aligned} n &= N_c \exp\left(-\frac{E_c - E_{Fsc}}{kT}\right) \\ p &= N_v \exp\left(\frac{E_c - E_{Fsc}}{kT}\right) \end{aligned} \right\} \quad 1.5$$

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

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

$$n_i^2 = n \cdot p \quad 1.6$$

$$\text{Avec} \quad n_i = \sqrt{N_c N_v} \exp\left(-\frac{E_c - E_{Fsc}}{2kT}\right) \quad 1.7$$

1.2.2.2 Semiconducteur extrinsèque

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

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

a. Semiconducteur type P

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

La densité d'électrons n est plus faible que celle des trous p . On dit alors que les électrons sont les porteurs minoritaires et les trous, les porteurs majoritaires.

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

$$n = \frac{n_i^2}{N_A} \quad 1.8$$

$$p = N_A \quad 1.9$$

Le niveau de Fermi pour un semiconducteur type P est :

$$E_{Fsc} = E_v + kT \ln \frac{N_v}{N_A} \quad 1.10$$

Ainsi plus la densité d'accepteurs est élevée plus le niveau de Fermi se rapproche de la bande de valence. A la limite si $N_A = N_v$ le niveau de Fermi entre dans la bande de valence, on dit alors que le semiconducteur est dégénéré.

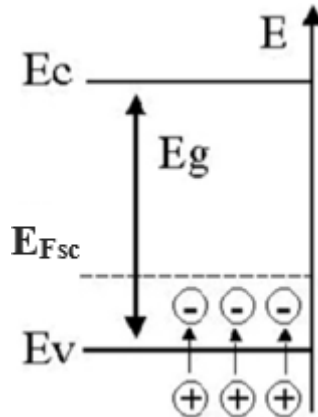


Figure 1-2: Diagramme de bandes d'énergie d'un semi-conducteur type P [4].

b. Semiconducteur type N

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

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

Par analogie avec les semiconducteurs de type P et en notant N_D la densité de donneurs, les densités de porteurs pour un semiconducteur de type N sont :

$$p = \frac{n_i^2}{N_D} \quad 1.11$$

$$n = N_D \quad 1.12$$

Le niveau de Fermi pour un semiconducteur type P est alors :

$$E_{Fsc} = E_c - kT \ln \frac{N_c}{N_D} \quad 1.13$$

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

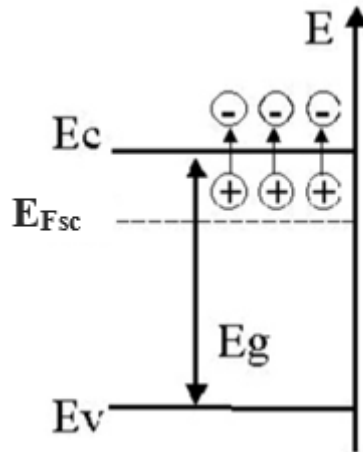


Figure 1-3: Diagramme de bandes d'énergie d'un semi-conducteur type N [4].

1.2.3 Travail de sortie $e\Phi_m$

Appelé aussi travail d'extraction, il représente l'énergie minimale requise pour retirer complètement un électron d'une surface métallique. Cette énergie dépend de la nature du métal, et est définie comme la différence entre le niveau de vide N_v et le niveau de Fermi dans le métal E_{Fm} .

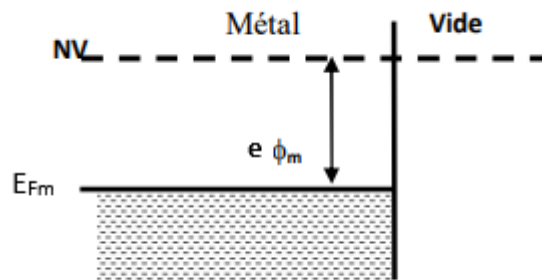


Figure 1-4: Diagramme des bandes d'énergie d'un métal montrant le travail de sortie [5].

Il est à noter que pour un semiconducteur le travail de sortie est en fonction du matériau et du dopage (puisque le niveau de Fermi est fonction du dopage).

1.2.4 Affinité électronique χ

L'affinité électronique est une constante du matériau semiconducteur, elle représente le changement d'énergie d'un atome neutre lorsqu'un électron lui est ajouté. Elle est définie comme la différence d'énergie entre le niveau de vide N_v et la bande de conduction, son unité est le KJ / mole.

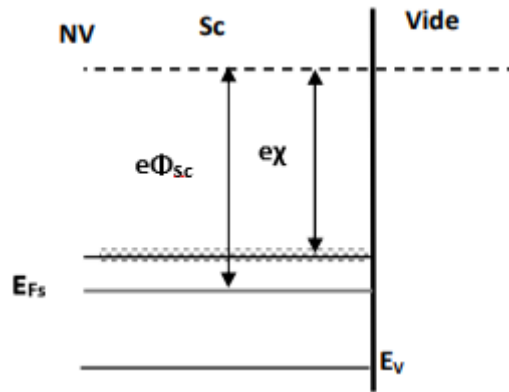


Figure 1-5: Diagramme des bandes d'énergie d'un semiconducteur incluant le travail de sortie et l'affinité électronique [5].

1.3 Le contact Métal Semi-conducteur

La structure métal semi-conducteur M-S est un semiconducteur mis en contact avec un métal, cette association peut donner lieu à un contact redresseur (Schottky) ou bien à un contact ohmique, cela dépend du type des matériaux utilisés. Dans la structure M-S un seul type de porteurs (électrons ou trous) participe de façon importante à la conduction du courant et détermine les conditions de fonctionnement du dispositif.

Afin de mieux comprendre les phénomènes résultant de cette jonction il faut s'intéresser aux diagrammes des bandes d'énergie de la structure à tous les cas de figure.

1.3.1 Barrière de potentiel (barrière Schottky)

Au contact métal semi-conducteur, un équilibre thermodynamique se crée, c'est-à-dire que les niveaux de Fermi du métal et du semi-conducteur s'alignent. Contrairement au niveau du vide, ceux de la bande de valence et de la bande de conduction conservent leurs positions respectives par rapport au niveau de Fermi du fait de la différence des travaux de sortie de chacun des matériaux, cela fait apparaître une courbure de bande du côté semi-conducteur près de la zone de contact. Cette courbure (vers le haut ou vers le bas) forme une barrière de potentiel qui s'oppose au déplacement des porteurs.

La figure 1-6 représente un diagramme de bandes d'énergie expliquant la notion de barrière qui se forme à l'interface d'un contact M-S

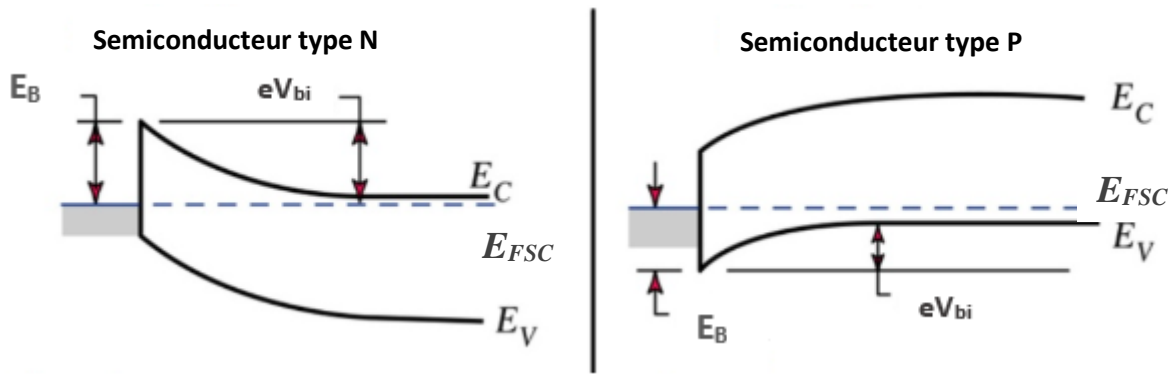


Figure 1-6: Diagramme des bandes d'énergie à l'équilibre thermodynamique pour la jonction M-S type P et N [6].

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

Vu du côté métal :

$$E_B = e\Phi_m - e\chi \quad 1.14$$

Vu de côté semiconducteur :

$$V_{bi} = \Phi_m - \Phi_{sc} \quad 1.15$$

Quant à la barrière que doivent franchir les trous voulant passer du semi-conducteur vers le métal dans le cas d'un contact M-S de type P, est donnée par :

Vu du côté semiconducteur :

$$E_B = e\chi + E_G - e\Phi_m \quad 1.16$$

Vu du côté métal :

$$V_{bi} = \Phi_m - \chi \quad 1.17$$

1.3.2 Mise en contact d'un un métal avec semi-conducteur type P

Quand un métal et un semiconducteur sont en contact, la structure des bandes d'énergie à l'interface est conditionnée par la différence éventuelle entre le travail de sortie du métal $e\phi_m$ et le travail de sortie du semiconducteur $e\phi_{sc}$ [7].

1.3.2.1 Cas $e\Phi_m = e\Phi_{sc}$ (Régime des bandes plates)

Lorsque le travail de sortie du métal $e\phi_m$ est égal au travail de sortie du semiconducteur $e\phi_s$, les niveaux de Fermi du métal E_{Fm} et du semiconducteur E_{Fsc} sont alignés en l'absence de contact car leur distance au niveau du vide est la même.

Lorsque le contact est réalisé, les niveaux de Fermi étant déjà alignés, l'équilibre thermodynamique peut se réaliser sans échange de porteurs, de ce fait, la densité des trous dans le semiconducteur reste constante et les bandes de conduction E_c et de valence E_v restent plates. C'est ce que l'on appelle le régime de bandes plates (flat-band) [7].

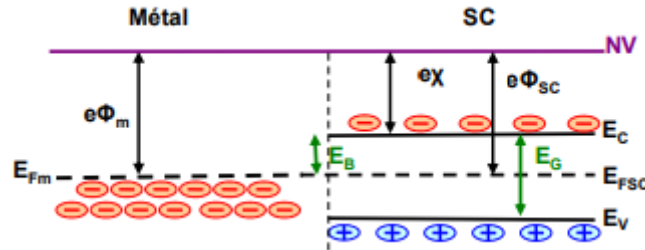


Figure 1-7: Diagramme des bandes d'énergie en régime des bandes plates [8].

1.3.2.2 Cas $e\Phi_m > e\Phi_{sc}$ (contact ohmique)

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

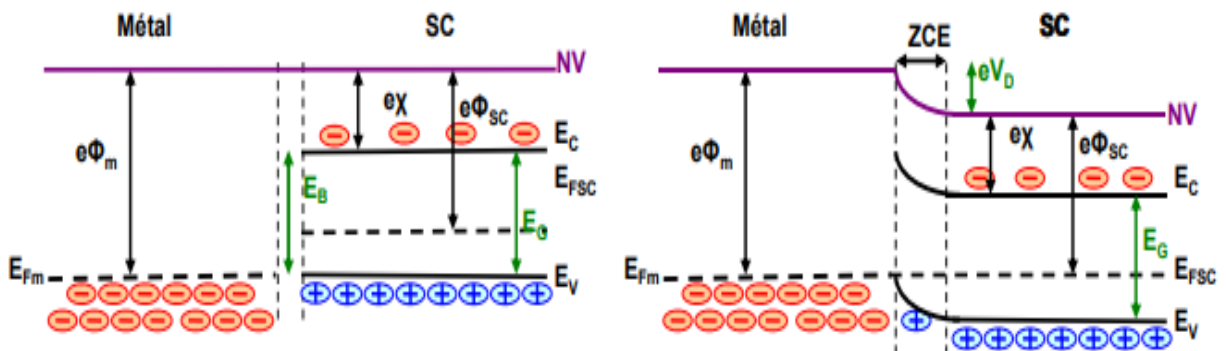


Figure 1-8 : Diagramme des bandes d'énergie en régime d'accumulation [8].

- **Sous polarisation**

Les électrons passent du semiconducteur vers le métal. Il apparaît une accumulation des trous à la surface du semiconducteur. Il n'y a donc pas de zone isolante (vide de porteurs) à l'interface, la tension est alors distribuée dans tout le SC.

A l'interface l'arrivée ou le départ d'un trou dans le semiconducteur est de suite compensée par celui d'un électron dans le métal. Le courant circule librement dans les deux sens au contact.

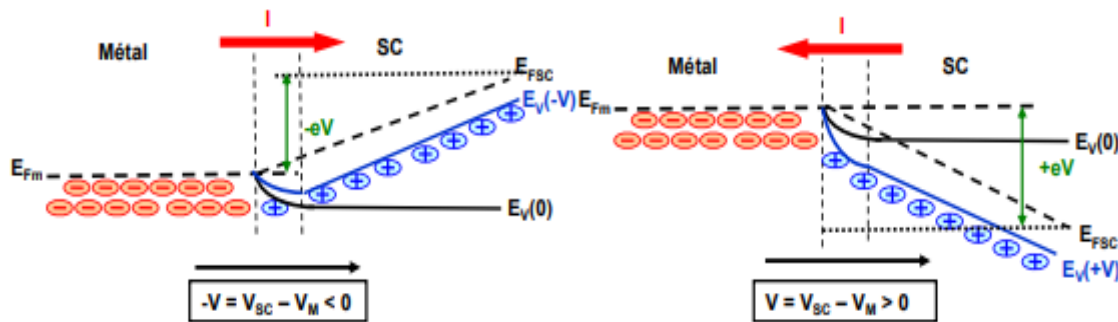


Figure 1-9 : Contact M-S type P ohmique sous polarisation [8].

1.3.2.3 Cas $q\Phi_m < q\Phi_{sc}$ (contact redresseur ou diode schottky)

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

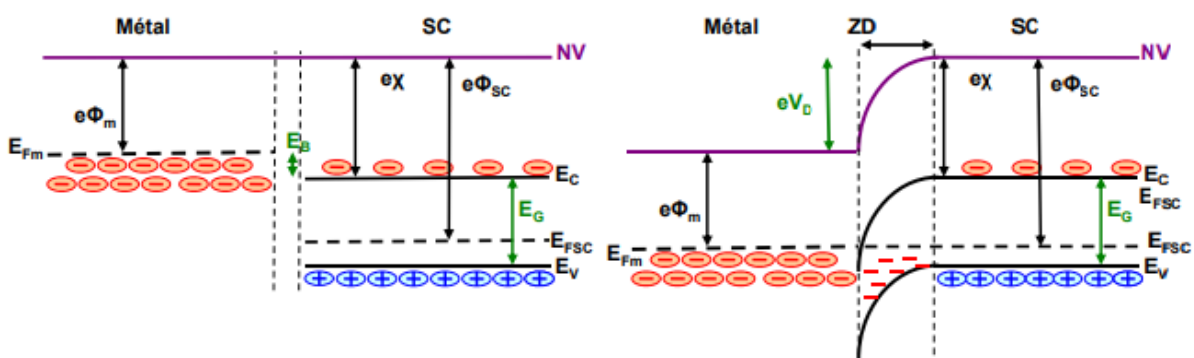


Figure 1-10 : diagramme des bandes d'énergie en régime de déplétion [8].

- **Sous polarisation**

Les électrons passent du métal vers le semiconducteur. Il apparaît un déficit d'électrons à la surface du métal. Dans le semiconducteur, les électrons qui viennent du métal se recombinent avec les trous créant une zone de déplétion due à la présence des ions $N\bar{a}$ qui ne sont plus compensés par les trous. Il apparaît ainsi une zone de charge d'espace étalée dans le

semiconducteur. Le système évolue jusqu'au moment où le champ et la tension de diffusion résultants, arrêtent la diffusion des électrons (Figure 1-11).

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

$$E_B = E_g + e\chi - e\phi_m \quad 1.18$$

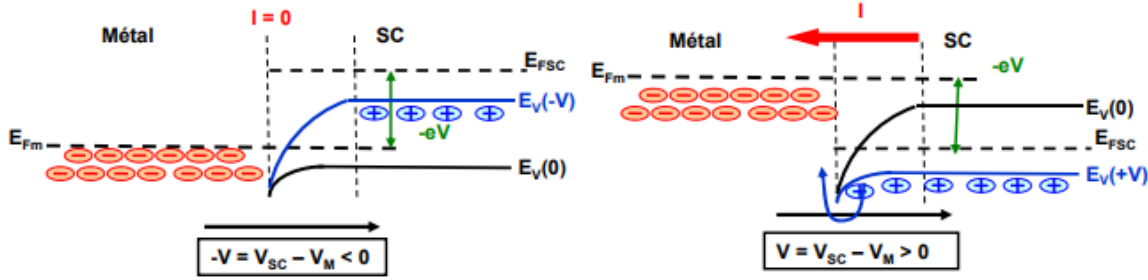


Figure 1-11: Contact M-S type P redresseur (diode Schottky) sous polarisation [8].

1.3.3 Zone de charge d'espace

La zone de charge d'espace (ZCE) correspond à la région qui apparaît dans une jonction (PN ou M-S), à l'interface du contact. Elle est appelée « zone de déplétion » ou « zone désertée » parce qu'elle est dépourvue de porteurs libres, et « zone de charge d'espace » parce qu'elle est constituée de deux zones chargées électriquement (contrairement au reste de la structure).

1.3.3.1 Champ et potentiel électrique

Considérons la structure métal-semiconducteur de type N, avec $\Phi_m > \Phi_{sc}$. On obtient la distribution du potentiel dans la zone de charge d'espace en intégrant l'équation de Poisson. Nous supposons que le semiconducteur est homogène. Avec une densité de donneurs N_D .

Nous admettrons que tous les donneurs sont ionisés à la température ambiante. Nous ferons l'hypothèse de la zone de charge d'espace vide de porteurs, W est la largeur de cette zone. Ainsi la densité de charge dans le semiconducteur (figure 1.12) s'écrit [9] :

$$0 < x < W \quad \rho(x) = e N_D \quad 1.19$$

$$x > W \quad \rho(x) = 0 \quad 1.20$$

L'équation de Poisson s'écrit :

$$\frac{d^2V}{dx^2} = \frac{-\rho(x)}{\epsilon} = \frac{dV(x)}{dx} = -E(x) = -\frac{eN_D}{\epsilon_{sc}} (x - W) \quad 1.21$$

$$\frac{dV(x)}{dx} = -E(x) = -\frac{eN_D}{\epsilon_{sc}} (x - W) \quad 1.22$$

Le champ électrique est négatif et varie linéairement dans la zone de charge d'espace (figure 1.12) sa valeur à l'interface est :

$$E_s = - \frac{eN_D}{\epsilon_{sc}} W \quad 1.23$$

En intégrant une deuxième fois en prenant l'origine des potentiels à l'interface, on obtient :

$$V(x) = - \frac{eN_D}{\epsilon_{sc}} \left(\frac{x^2}{2} - Wx \right) \quad 1.24$$

La tension de diffusion résulte de la différence des travaux de sortie du métal et du semiconducteur $V_d = \Phi_m - \Phi_{sc}$. Cette tension correspond à la différence de potentiel entre la surface du semiconducteur et son volume, c'est-à-dire aux bornes de la zone de charge d'espace

$$V_d = V(x = W) - V(x = 0) = - \frac{eN_D}{\epsilon_{sc}} \left(\frac{x^2}{2} - Wx \right) = \frac{eN_D}{2 \epsilon_{sc}} W^2 \quad 1.25$$

D'où l'expression de la largeur de la zone de charge d'espace à l'équilibre

$$W^2 = \frac{2 \epsilon_{sc}}{eN_D} V_d = \frac{2 \epsilon_{sc}}{eN_D} (\Phi_m - \Phi_{sc}) \quad 1.26$$

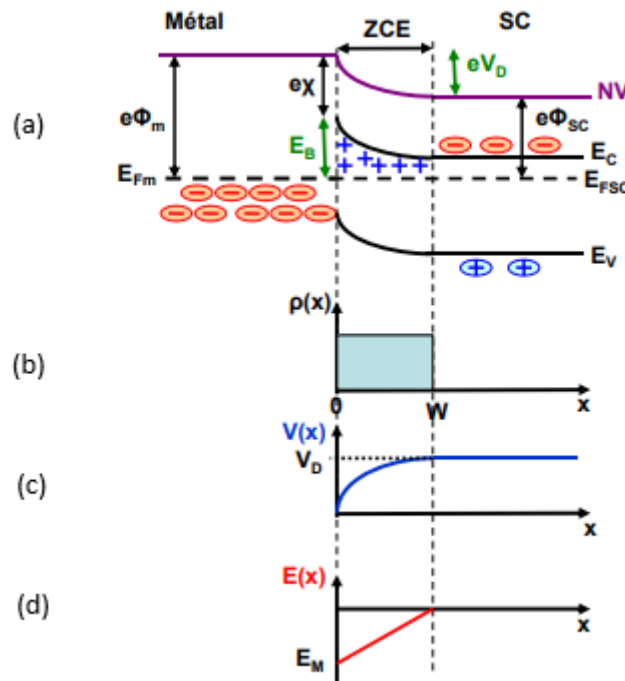


Figure 1-12: Intégration successive de la densité de charge dans une diode Schottky type N à l'équilibre thermodynamique. a) diagramme énergétique b) charge d'espace dans le semiconducteur c) potentiel électrique d) champ électrique [8].

1.3.3.2 Capacité

Pour un semiconducteur de type N, si la structure est polarisée par une tension V , supposée positive dans le sens direct c'est-à-dire quand le métal est polarisé positivement par rapport au semiconducteur, la barrière de potentiel devient $V_d - V$ et la largeur de la zone de charge d'espace devient [9].

$$W^2 = \frac{2 \varepsilon_{sc}}{e N_D} (V_d - V) \quad 1.27$$

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

$$Q_{sc} = -Q_m = e N_D W = (2 \varepsilon_{sc} e N_D (V_d - V))^{\frac{1}{2}} \quad 1.28$$

La capacité différentielle est donnée par :

$$C(V) = \left| \frac{dQ}{dV} \right| = \left(\frac{\varepsilon_{sc} \cdot e N_D}{2} \right)^{\frac{1}{2}} (V_d - V)^{-\frac{1}{2}} = \frac{\varepsilon_{sc}}{W} \quad 1.29$$

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

$$C^{-2}(V) = \frac{2}{\varepsilon_{sc} \cdot e N_D} (V_d - V) \quad 1.30$$

La courbe représentant $C^{-2}(V)$ est une droite dont la pente permet de déterminer la densité de donneurs N_D , et dont l'abscisse à l'origine permet de déterminer la hauteur de barrière V_d (figure 1-13). Si le dopage du semiconducteur n'est pas homogène, la courbe représentant $C^{-2}(V)$ n'est plus une droite [9].

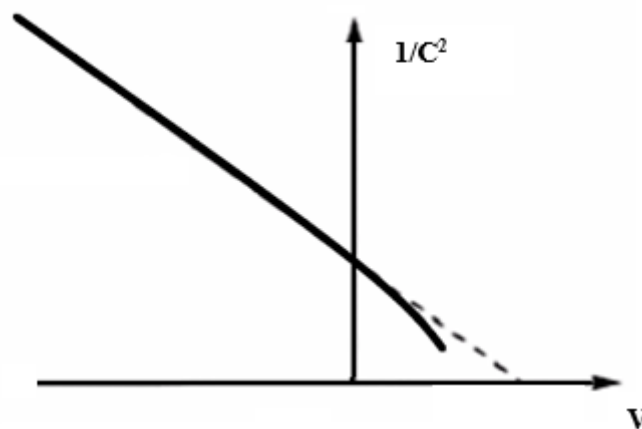


Figure 1-13: Courbe $C^{-2}(V)$ [9].

1.4 Mécanismes de conduction dans une diode Schottky

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

$$J = J_0(e^{\frac{qV}{\eta kT}} - 1) \quad 1.31$$

Avec : V : la tension appliquée, η : le facteur d'idéalité, J_0 : la densité de courant de saturation, K : la constante de Boltzmann, T : la température.

L'équation de la densité de courant de saturation J_0 est donnée sous la forme suivante :

$$J_0 = A^* T^2 e^{\frac{-q\phi_B}{KT}} \quad 1.32$$

A^* : constante de Richardson

D'où on peut extraire la hauteur de la barrière de Schottky

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

$$\ln J = \ln J_0 + qV/\eta kT \quad 1.33$$

Si A^* est connu, la hauteur de la barrière Schottky peut être calculée après que J_0 soit déterminé à partir de l'équation (a),

$$\phi_B = \frac{kT}{q} \ln \left(\frac{A^* T^2}{J_0} \right) \quad 1.34$$

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

$$\ln \left(\frac{J_0}{T^2} \right) = \ln A^* - \frac{q}{kT} \phi_B \quad 1.35$$

Pour la plupart des (Si et les semi-conducteurs III-V) diodes Schottky, cependant, on a observé une déviation de l'émission thermoïonique idéale. On observe aussi que le facteur n d'idéalité augmente considérablement quand la température est abaissée (et est beaucoup plus grand que l'unité à des températures basses). D'ailleurs, les courbes conventionnelles de Richardson $\ln (J_0/T^2) = f(1/T)$ ne sont pas linéaires. Au lieu de cela, les courbes modifiés $\ln (J_0/T^2) = f(1/\eta T)$, qui sont linéaires, sont employés pour extraire la hauteur de la barrière Schottky. Pour les semiconducteurs non dopés ou faiblement dopés, on constate que cette déviation ne peut pas être expliqué par l'effet Schottky, les effets tunnel, ou le courant de recombinaison dans la région de déplétion. Pour expliquer ces anomalies de la barrière Schottky, beaucoup de modèles ont été établi comme les états d'interface et la couche

interfaciale. Dans la section suivante, une théorie générale des mécanismes de conduction est brièvement décrite.

1.4.1 Théories de transport des charges

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

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

1.4.1.1 Théorie de diffusion

Proposée par Schottky et Spenke en 1939 [10], cette théorie suppose que les électrons migrent du semi-conducteur au métal par-dessus la barrière en traversant la zone appauvrie du semiconducteur, ce qui restreint le courant direct. En effet ce dernier est limité par la diffusion des porteurs à travers le champ électrique dans la zone de charge d'espace. La concentration des électrons pour un semiconducteur de type N, dans le côté semiconducteur de l'interface du M-S est donnée par :

$$n = N_c \exp\left[-\frac{q(E_c - E_{Fsc})}{kT}\right] \quad 1.36$$

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

$$J = qn \mu E + qDn \frac{dn}{dx} \quad 1.37$$

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

$$J = J_0 (e^{qV/kT} - 1) \quad 1.38$$

Où la densité du courant de saturation J_0 est :

$$J_0 = q \cdot N_c \cdot \mu \cdot E_{max} \cdot (e^{-q\Phi_B/kT}) \quad 1.39$$

Le champ électrique maximum dans la jonction est donné par

$$E_{max} = qN_D \frac{W}{\epsilon_s} \quad 1.40$$

W est largeur de la zone de déplétion du semiconducteur.

1.4.1.2 Théorie d'émission thermoïonique

En 1928 Owen Richardson reçut le prix Nobel sur pour son travail sur le phénomène thermoïonique et plus spécialement pour la découverte de la loi portant maintenant son nom.

Dans la théorie de l'émission thermoïonique, le gradient du quasi-niveau de Fermi est négligé. Ceci implique que le quasi-niveau de Fermi dans le semi-conducteur est plat. La concentration des électrons du côté semiconducteur type N de l'interface M-S est augmentée par un facteur $\exp(qV/kT)$ quand une tension de polarisation est appliquée [11].

$$n = N_c \exp\left[-\frac{q(\phi_B - V)}{kT}\right] \quad 1.41$$

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

$$J = J_0(e^{qV/kT} - 1) \quad 1.42$$

Où J_0 , selon la loi de Richardson, est :

$$J_0 = A^* T^2 e^{-q\phi_B/kT} \quad 1.43$$

Avec :

$$A^* = 4 \pi m^* q k^2 / h^3 \quad 1.44$$

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

1.4.1.3 Théorie de l'émission-diffusion

La théorie combinée de l'émission thermoïonique-diffusion était présentée par Crowell et Sze en 1966 [10]. Dans cette théorie on définit une vitesse de recombinaison v_r au maximum potentiel. La densité de courant au sommet de la barrière pour un semiconducteur de type N est :

$$J = q(n_m - n_0)v_r \quad 1.45$$

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

$$n_m = N_c \exp\left[-q\left(\phi_B - \frac{\phi(x_m)}{kT}\right)\right] \quad 1.46$$

Où $\phi(x_m)$ est le quasi-niveau de Fermi (en eV) à x_m sous un tension de polarisation V .
 n_0 est la densité des électrons à x_m sous la condition de quasi-équilibre :

$$n_0 = N_c \exp(-q\phi_B/kT) \quad 1.47$$

L'expression finale du courant est la même que précédemment (théorie de diffusion et de l'émission thermoïonique), la différence réside au niveau du courant de saturation comme le montre la relation suivante [11] :

$$J = A_n^{**} T^2 e^{(-q\phi_{Bn}/kT)} (e^{qV/kT} - 1) \quad 1.48$$

Où

$$A_n^{**} = \frac{\theta_n A_n^*}{1 + \theta_n \frac{v_{Rn}}{v_{Dn}}} \quad 1.49$$

θ : coefficient de transmission tunnel des porteurs majoritaires (électrons)

v_{Rn} : vitesse de recombinaison effective des électrons au sommet de la barrière.

v_{Dn} : vitesse de diffusion effective.

Si $v_{Dn} \ll v_{Rn}$, le processus de diffusion est dominé.

Si $v_{Dn} \gg v_{Rn}$, celui de l'émission thermoïonique est dominé.

1.4.2 Conduction par effet tunnel

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

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

$$J = \frac{A^{**} T^2}{kT} \int_{E_{Fm}}^{qE_b} F_{sc} T(E) (1 - F_m) dE \quad 1.50$$

F_{sc} et F_m les fonctions de distributions de Fermi Dirac pour le semiconducteur et le métal.

A^{**} constante de Richardson effective

L'expression du courant prend la forme générale suivante :

$$J = J_0 [e^{(qV/\eta kT)} - 1] \quad 1.51$$

Où η est le facteur d'idéalité.

1.4.3 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 Schockley, Read et Hall (SRH) en 1952 [10], le taux de recombinaison U dans la ZCE est donné par l'expression suivante :

$$U = \frac{n.p - n_i^2}{\tau_n(n+n_i) + \tau_p(p+n_i)} \quad 1.52$$

Où τ_n et τ_p sont la durée de vie des électrons et des trous respectivement dans le semiconducteur. La densité du courant de recombinaison est donnée par :

$$J = q \int_0^W U(x) dx \quad 1.53$$

Avec les simplifications suivantes $n \gg p \gg n_i$, et $\tau_n = \tau_p = \tau$, l'expression de la densité du courant pour des basses tensions positives est donné par [11] :

$$J = J_0 \exp\left(\frac{qV}{2kT}\right) \cdot [1 - \exp(-\frac{qV}{kT})] \quad 1.54$$

Où $J_0 = \frac{qn_iW}{2\tau} \quad 1.55$

n_i : est la concentration intrinsèque des électrons.

W : la largeur de la ZCE

1.4.4 Recombinaison dans la région neutre (ohmiques)

On a supposé que la tension, V , appliquée à la jonction apparaît en totalité dans la zone de charge d'espace. Mais en réalité, il existe des chutes de tension aux niveaux des régions neutres. Ces chutes de tension affaiblissent considérablement l'injection des charges et par conséquent le courant, surtout pour les tensions positives assez grandes. Ils sont modélisés par une résistance série (R_s). La tension appliquée à la jonction sera donc [11]:

$$V = V_a - R_s I \quad 1.56$$

1.4.5 Densité de courant total

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

$$J_T = J_{e-m} + J_R + J_{tu} \quad 1.57$$

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

J_R : densité du courant recombinaison

J_{tu} : densité du courant tunnel

Les caractéristiques courant-tension d'une diode Schottky sont généralement décrites par [9]:

$$J = J_s \left(\exp\left(\frac{q(V - JR_s)}{\eta kT}\right) - 1 \right) \quad 1.58$$

Où $J_s = A^* A T^2 \exp(-1^3 \phi_B) \quad 1.59$

q : Charge élémentaire (c)

V : Tension aux bornes de la jonction (V)

K : Constante de Boltzmann

T : Température (k)

J_s : Densité du courant de saturation de diode (A)

η : Facteur d'idéalité de la diode

1.4.6 Modèle à barrière homogène

En tenant compte de toutes ces considérations : de la résistance série et parallèle, des pertes ohmiques, de la densité du courant de fuite et de la densité du courant de recombinaison on peut modéliser la caractéristique J-V, d'une diode Schottky à barrière homogène par la relation suivante :

$$J = J_s \left[\exp\left(\frac{q(V - IR_s)}{\eta kT}\right) - 1 \right] \quad 1.60$$

Chapitre 2 : État de l'art sur les matériaux III-V

2.1 Introduction

Les matériaux III-V sont constitués des éléments des colonnes III et V de la classification périodique des éléments. Ce sont des matériaux clé de l'électronique et de l'optoélectronique. Ainsi, de nombreux composés binaires peuvent être réalisés, tel que : GaAs , InSb et InP. Ces semiconducteurs constituent un vaste domaine de recherche. Dans ce chapitre nous limiterons notre étude aux semiconducteurs de type GaAs et AlGaAs.

Le GaAs est en effet à la base des composants électroniques à grande vitesse dans les circuits hyperfréquences et les circuits intégrés logiques rapides. Associé éventuellement au ternaire AlGaAs, Le GaAs constitue à la fois le substrat de départ et/ou les couches actives de ces dispositifs.

Dans ce qui suit, nous allons définir et exposer quelques propriétés des semiconducteurs III-V, en se concentrant sur celles des composés GaAs, AlGaAs.

2.2 Quelques notions basiques sur les matériaux solides

Les matériaux solides sont par définition toute matière entrant dans une construction mécanique, ils se classent en deux grandes catégories :

- Les matériaux cristallins où les atomes sont rangés de façon régulière aux nœuds d'un réseau périodique, le motif (ou maille) élémentaire se répète régulièrement.
- Les matériaux amorphes où l'ordre n'est que local et non répété à « longue distance »

Dans la famille des cristallins on distingue quatre catégories de matériaux définis par rapport au type de liaison liant les atomes entre eux, ce sont :

- Les cristaux ioniques, par exemple le Na^+Cl^- où les ions sont liés par attraction coulombienne. Aucun électron n'est libre ce qui rend ces cristaux isolants et très dur (la liaison est très solide).
- Les cristaux covalent (C, Si, Ge, Sn) les quatre électrons périphériques sont mis en commun avec quatre voisins et établissement des liaisons de valence. Ces liaisons sont moins fortes que les liaisons ioniques et les propriétés des cristaux vont dépendre de la « force » de ces liaisons (C diamant est isolant, Sn est conducteur).
- Les métaux (Li, Na, K, Cu, Ag, Au) conducteurs électriques qui ont un électron libre par atome. Leur température de fusion est moins élevée que celle des cristaux covalents
- Les cristaux moléculaires tels que le sucre ou la glace, se caractérisent par la faiblesse des liaisons entre molécules ce qui entraîne des points de fusion relativement bas par rapport à d'autres solides.

2.3 Système et réseau cristallins

Un cristal peut être représenté à partir d'une cellule de base qui est répétée périodiquement, formant ainsi le réseau cristallin. Selon la nature des opérations de symétrie qui laissent la structure cristalline invariante, des systèmes cristallins sont définis, parmi lesquels le système cubique.

2.3.1 Cristal cubique

La plupart des semi-conducteurs cristallisent selon le système cubique. Le système cubique comprend trois réseaux différents possibles, selon la disposition des atomes comme indiqué figure 2.1

- Cubique simple (figure 2-1.a) : les atomes occupent les sommets du cube
- Cubique centré (figure 2.1.b) : identique au cubique simple mais avec un atome au centre du cube
- Cubique face centrée (CFC) (figure 2.1.c) : identique au cubique simple mais avec un atome au centre de chaque face

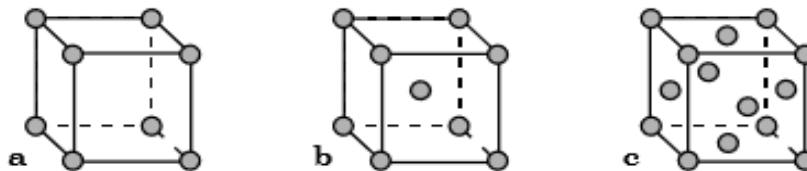


Figure 2-1 : (a) Cubique simple. (b) Cubique centré. (c) Cubique face centrée [12].

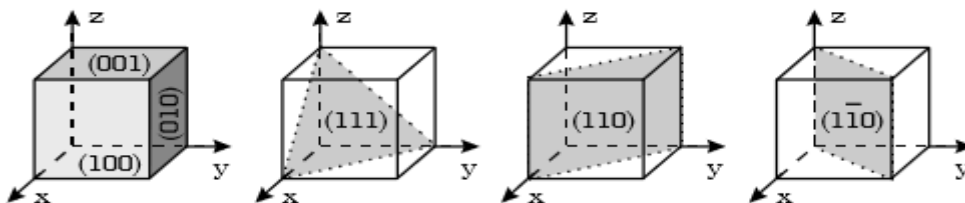


Figure 2-2: Quelques plans cristallographiques repérés par leur « indices de Miller » [12].

2.3.2 Définition des semiconducteurs III-V

Un matériau III-V est une combinaison ou un alliage de deux ou plusieurs éléments appartenant à la colonne III (bore, gallium, aluminium, indium, etc.) et à la colonne V (arsenic, antimoine, phosphore, etc.) du tableau périodique de Mendeleïev. Le tableau ci-dessous

regroupe un extrait de cette classification (les chiffres en haut et bas représentent respectivement le nombre atomique et la masse atomique).

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

Tableau 2-1: Extrait du tableau de Mendeleïev mettant en évidence les matériaux des colonnes III et V [13].

Ainsi, trois types d'alliages peuvent être réalisés pour obtenir un semi-conducteur III-V, à savoir :

- Les composés binaires : tels que l'arséniure de gallium (GaAs), l'arséniure d'indium (InAs), le nitrure de gallium (GaN), ou encore l'antimoniure de gallium (GaSb)
- Les composés ternaires : tels que l' $Al_xGa_{1-x}As$
- Les composés quaternaires : tels que $Al_xGa_{1-x}As_yP_{1-y}$

Les matériaux III-V offrent donc une grande variété de composition permettant de modifier leurs propriétés physiques. Le diagramme de la figure 2-3 présente les variations du gap en fonction des paramètres cristallin des alliages de composé III-V.

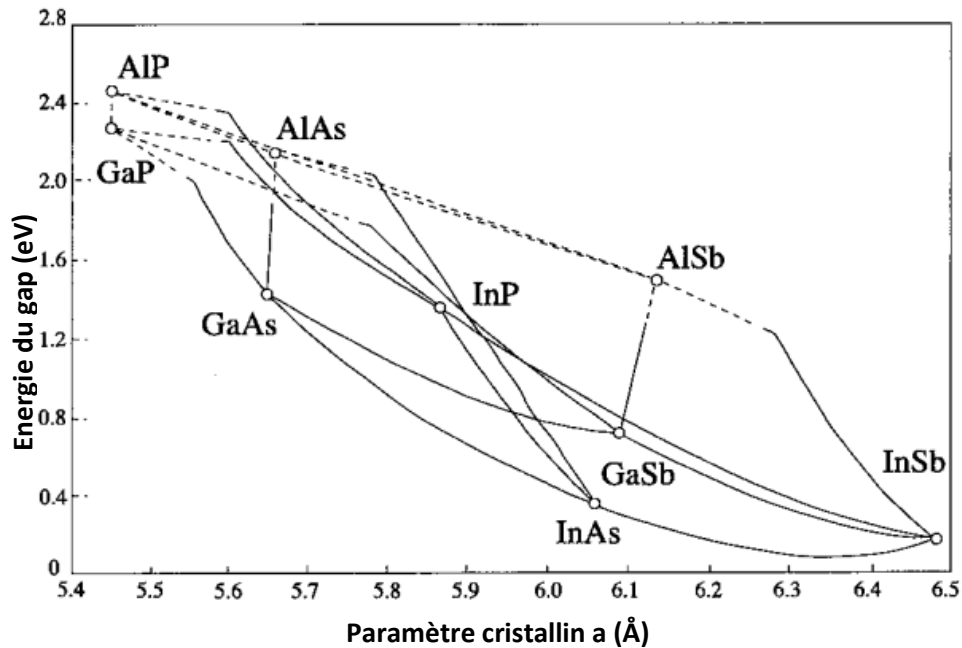


Figure 2-3 : Largeur de bande interdite en fonction du paramètre cristallin a pour les alliages III-V [13]

2.3.3 Structure cristalline des semi-conducteurs III-V

La plupart des matériaux III-V se cristallisent dans la structure "Zinc Blende" présentée sur la figure 2-4. Cette structure, qui s'apparente à celle du diamant, est constituée de deux sous-réseaux cubiques à faces centrées, l'un étant constitué des atomes de l'élément III, l'autre des atomes de l'élément V.

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

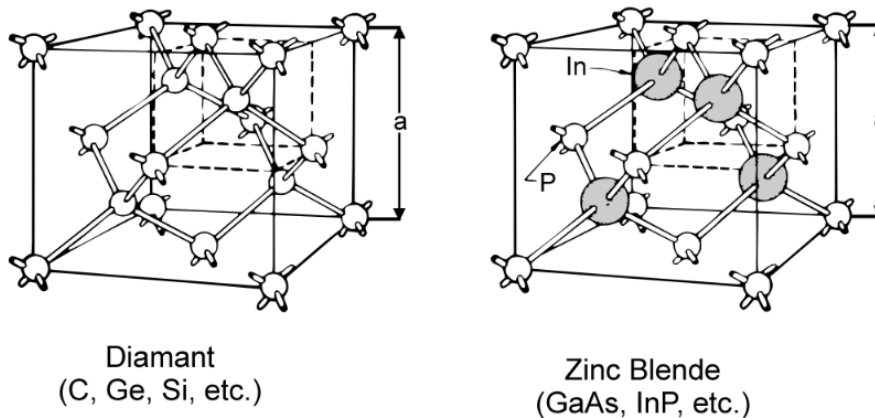


Figure 2-4 : Mailles cristallographiques des structures Diamant et Zinc Blende [14].

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

Rappelons que la zone de Brillouin des réseaux CFC a la forme d'un octaèdre tronqué par les six faces d'un cube, comme cela est illustré sur la figure 2-5. Elle présente un centre de symétrie à l'origine (noté G) 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).

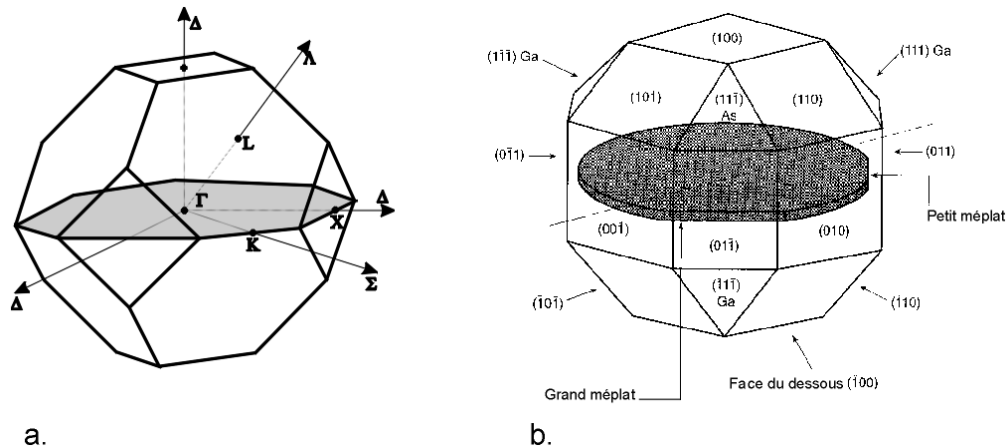


Figure 2-5 : (a) première zone de Brillouin d'un cristal Zinc-Blende, (b) Plans et directions cristallographiques d'un substrat de GaAs (norme américaine) [14].

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 [14].

2.4 Les matériaux semi-conducteurs III-V GaAs et AlGaAs

2.4.1 Arséniure de gallium GaAs

L'arséniure de gallium est un semi-conducteur de type III-V, à haute mobilité électronique et à haute vitesse de commutation par rapport au silicium, permettant aux dispositifs à base d'arséniure de gallium de fonctionner à des fréquences supérieures à 250 GHz.

Les dispositifs d'arséniure de gallium ne sont pas sensibles à la chaleur en raison de leur large bande interdite. En outre, ces dispositifs ont généralement moins de bruit que les dispositifs en silicium, en particulier à des fréquences de fonctionnement élevées [14].

- **Propriétés physiques**

Les propriétés physiques de l'arséniure de gallium sont fournies dans le tableau ci-dessous :

Poids moléculaire	144.645
Bande de gap	1.424
Type de bande de gap	Directe
Structure cristalline	Zinc Blend

Tableau 2-2: propriétés physiques du GaAs [15].

- **Propriétés électriques**

Les propriétés électriques de l'arséniure de gallium sont fournies dans le tableau ci-dessous :

Concentration de transporteur intrinsèque	$1.79 \times 10^6 \text{ cm}^{-3}$
Mobilité des électrons	$\leq 8500 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$
Mobilité des trous	$\leq 400 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$
Coefficient de diffusion des électrons	$\leq 200 \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}$
Coefficient de diffusion des trous	$\leq 10 \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}$

Tableau 2-3 : Propriétés électriques du GaAs [15].

- **Caractéristique de la structure de bande d'énergie du GaAs**

La structure de bandes du semi-conducteur GaAs est représentée sur la figure 2-6 suivant les directions de plus haute symétrie de l'espace réciproque. La bande interdite est hachurée, les bandes supérieures sont les bandes de conduction, les bandes inférieures sont les bandes de valence.

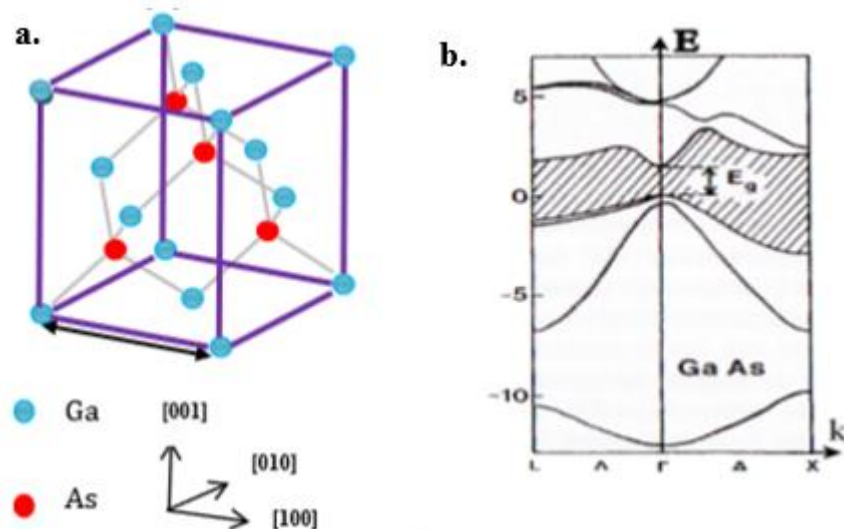


Figure 2-6 : (a) Structure cristalline du GaAs. (b) Structure de bande du GaAs [16].

A la température 0° K, la bande de valence est pleine d'électrons, la bande de conduction est vide. A température ambiante, certains électrons thermiquement excités depuis la bande de valence occupent la bande de conduction. Pour le GaAs le minimum de la bande de conduction est situé au centre de la zone de Brillouin et sur le même sur axe des vecteurs d'onde. C'est un matériau à gap directe.

2.4.2 L'aluminium arséniure de gallium $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$

L'aluminium arséniure de gallium ($\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$) est un matériau semiconducteur ayant presque la même constante de réseau que l'arséniure de gallium mais un plus grand gap. Le x dans la formule est un nombre entre 0 et 1 indiquant un alliage entre l'arséniure de gallium et l'arséniure d'aluminium.

- **Propriétés physiques**

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

Bande de gap	1.42 – 2.16 eV
Type de bande de gap	Directe quand $x < 0.4$
Structure cristalline	Zinc Blend

Tableau 2-4: Propriétés physiques de l'AlGaAs [16].

- **Propriétés électriques**

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

Concentration de transporteur intrinsèque	$x=0.1$ $2.1 \cdot 10^5 \text{ cm}^{-3}$ $x=0.3$ $2.1 \cdot 10^3 \text{ cm}^{-3}$ $x=0.5$ $2.5 \cdot 10^2 \text{ cm}^{-3}$ $x=0.8$ $4.3 \cdot 10^1 \text{ cm}^{-3}$
Mobilité des électrons	$02 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ $0.452 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$
Mobilité des trous	$370 - 970x + 740x^2 \text{ cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$
Coefficient de diffusion des électrons	$02/s$ $0.452/s$
Coefficient de diffusion des trous	$9.2 - 24x + 18.5x^2 \text{ cm}^2/s$
Résistivité	$x = 02/s$ $0.452/s$

Tableau 2-5 : propriétés physiques de l'AlGaAs [16].

• **Caractéristique de la structure de bande d'énergie de l' $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$**

L'alliage $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ est une solution solide de GaAs et de AlAs. Tout paramètre physique relatif à cet alliage peut être obtenu par combinaison des paramètres correspondants au GaAs et à AlAs. A température ambiante (300 K) le minimum de bande de conduction se trouve soit en vallée Γ quand x est inférieur à 0.45 (gap direct), ou en vallée X quand x est supérieur à 0.45 (gap indirect) (voir figure 2-7).

Les différents paramètres physiques du $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ sont donnés en fonction de x . À température ambiante l'affinité électronique χ s'écrit [17] :

$$\chi = 4,07 - 1,1 \times x \text{ pour } x < 0,45 \quad \text{et} \quad \chi = 3,64 - 0,14 \times x \text{ pour } 0,45 < x < 1$$

Les différentes valeurs de l'énergie de la bande interdite E_g en fonction de x , et l'énergie entre les différentes vallées de la bande de conduction et le haut de la vallée Γ de la bande de valence sont données en eV par les équations [17].

$$E_g = 1.424 + 1.247 \times x \quad \text{Pour } x < 0.45$$

$$\text{et } E_g = 1.9 + 0.125 \times x + 0.143 \times x^2 \quad \text{pour } x > 0.45$$

$$E_{\Gamma-\Gamma} = 1.424 + 1.155 \times x + 0.37 \times x^2$$

$$E_{X-\Gamma} = 1.9 + 0.124 \times x + 0.144 \times x^2$$

$$E_{L-\Gamma} = 1.71 + 0.69 \times x$$

Dans ces équations $E_{\Gamma-\Gamma}$, $E_{X-\Gamma}$, $E_{L-\Gamma}$ font référence respectivement de la différence d'énergie entre les vallées Γ , X et L de la bande de conduction et la vallée Γ de la bande de valence

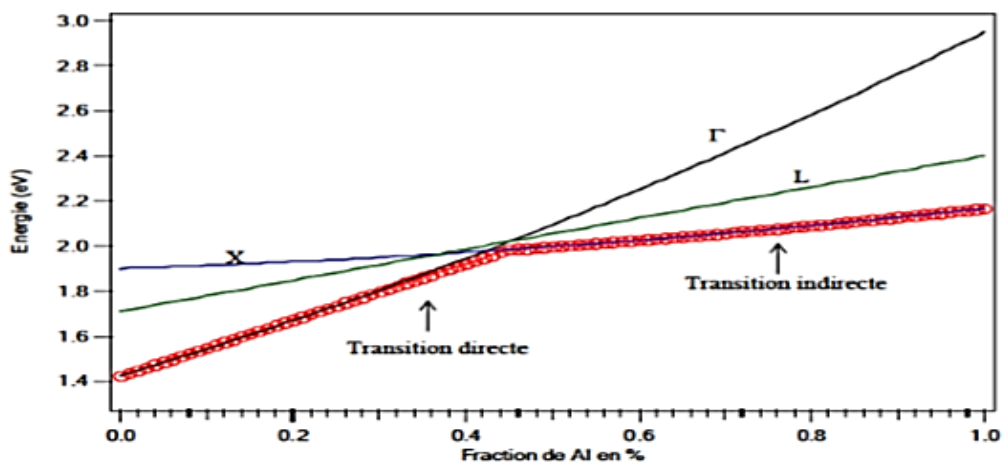


Figure 2-7 : Evolution de l'énergie de différentes vallées de la bande de conduction par rapport au point Γ de la bande de valence en fonction du taux d'aluminium. Résultats déduits des équations [17].

2.5 Conclusion

Dans ce chapitre on a présenté les propriétés physiques des matériaux III-V. Des perspectives très prometteuses s'offrent aux semiconducteurs composés III-V, en particulier le GaAs et les matériaux associés, en raison de leurs propriétés intrinsèques remarquables. Ils sont en effet dotés d'une forte mobilité électronique et, le plus souvent, d'une bande interdite directe permettant l'émission de lumière. Ces propriétés leur offrent un large champ d'applications nouvelles dans des domaines très divers.

Chapitre 3 : Outil de simulation SILVACO

3.1 Introduction

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

La simulation peut également être considérée comme une technique numérique pour résoudre des modèles de probabilités complexes, équation différentielle ordinaire et équation différentielle partielle, analogiquement à la façon dont nous pouvons utiliser un ordinateur pour évaluer numériquement l'intégrale d'une fonction compliquée. C'est pourquoi la science de la simulation est considérée comme un domaine interdisciplinaire [18] ainsi illustré à la figure 3.1.

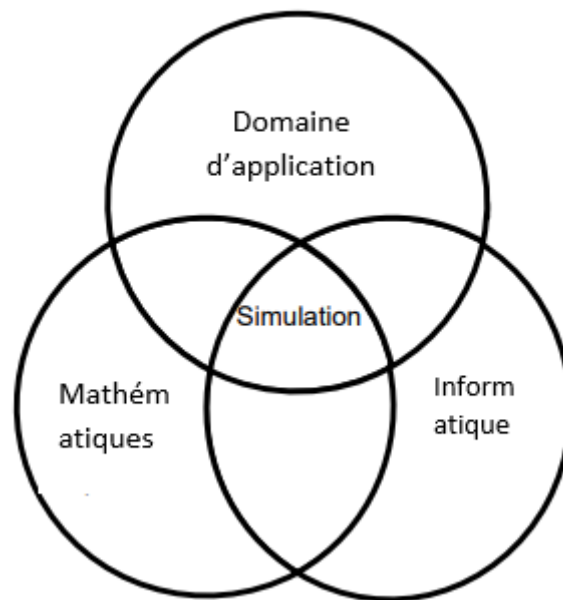


Figure 3-1: Interdisciplinarité de la simulation [18].

Le domaine de l'électronique, est parfaitement compatible avec la simulation, celle-ci joue un rôle majeur dans l'évolution que connaît ce domaine en matière de miniaturisation continue de la technologie des semi-conducteurs.

Dans ce chapitre nous allons proposer une introduction au logiciel SILVACO et à ses différents outils de simulation interactifs, qui permettent la conception et l'analyse de la plupart des dispositifs semiconducteurs.

3.2 But de la simulation d'un composant

Le rôle principal du simulateur est faire baisser le nombre des étapes d'itérations nécessaires pour la fabrication du composant avec certaines propriétés désirées. Les résultats d'une simulation sont visualisés sous les formes suivantes :

- 1) Caractéristiques I-V, C-V, Q-V, G-V...
- 2) Courbe à 2D : inclus la courbe d'une grandeur comme par exemple le potentiel en fonction de la distance verticale y d'un composant.
- 3) Courbe à 3D : inclus un autre paramètre par exemple la distance verticale z
- 4) Vecteur : contient la courbe du champ électrique ou bien la densité de courant en fonction du voltage et le vecteur de position.

3.3 Description de l'échantillon à simuler

Notre simulation s'est basée sur l'échantillon référencé NU1362 à base d'AlGaAs qui a été réalisé à l'université de Nottingham [19] par la croissance épitaxiale d'une couche $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ avec une composition d'aluminium de $x=0.29$ et une concentration de dopage en Beryllium Be ($1.10^{16} \text{ cm}^{-3}$) et sur un substrat GaAs semi-isolants (100) en utilisant un MBE Varian Gen-II. La croissance a été réalisée à une température de substrat de $680 \text{ }^\circ\text{C}$ avec une pression équivalente de 2.10^{-5} Torr .

Des contacts Schottky de différents diamètres allant de $250 \mu\text{m}$ à 1 mm ont été réalisés en évaporant du Titane et Or (Ti / Au) sur le dessus de la couche d'AlGaAs. La couche supérieure a été gravée jusqu'à 600 nm pour déposer des contacts ohmiques type Or Nickel Au/Ni/Au suivie d'un recuit à $360 \text{ }^\circ\text{C}$.

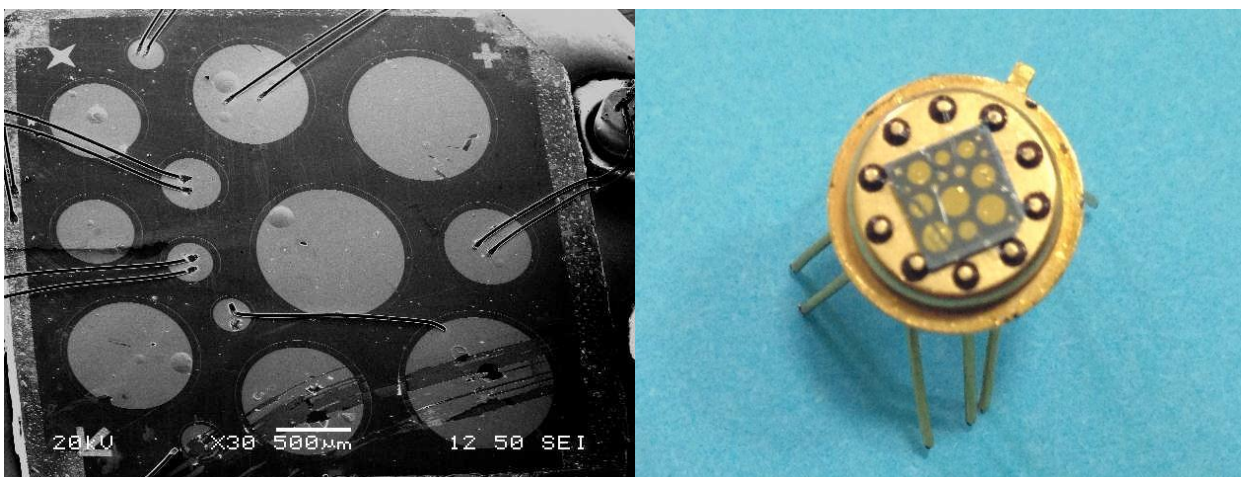


Figure 3-2 : Echantillon NU1362 (à droite) et son image MEB d'un grossissement x 30 (à gauche).

3.4 Processus de simulation

3.4.1 Présentation de SILVACO

Depuis sa création en 1984 par le Dr. Ivan Pesic, SILVACO est devenu le plus important simulateur de semi-conducteurs. SILVACO TCAD est l'abréviation de « Silicon Valley Corporation ». Il s'agit d'un logiciel de simulation de processus semiconducteurs composé de plusieurs simulateurs physiques (ATHENA, ATLAS, MERCURY... etc.) regroupés sous un environnement appelé DECKBUILD. Chacun d'eux simule différents processus. En raison du grand nombre de modules de SILVACO et de leur complexité, seuls les modules utilisés dans ce travail seront présentés [20].

- **DECKBUILD** : est un environnement d'exécution graphique interactif pour développer des ponts d'entrée de simulation de processus et de dispositifs. Il est considéré comme la fenêtre principale de SILVACO où tous les simulateurs peuvent être contrôlés.
- **ATLAS** : est un module de simulateur de dispositif à base physique qui prédit les caractéristiques électriques associées à des structures physiques et des conditions de polarisation spécifiées. Ceci est obtenu en approximant le fonctionnement d'un dispositif sur une grille (discrétisation). Le transport de porteurs à travers ce dispositif peut être simulé en appliquant un ensemble d'équations différentielles, dérivées des lois de Maxwell sur cette grille. Cela signifie qu'ATLAS fournit une plate-forme pour analyser les réponses AC, DC et temporelles pour toutes les technologies basées sur les semi-conducteurs en deux et trois dimensions.
- **TONYPLOT** : est un outil de visualisation qui trace les résultats obtenus à partir de la simulation. Il fournit des capacités de visualisation scientifique, y compris des graphiques XY avec des axes linéaires et logarithmiques, des graphiques polaires, des graphiques de surface et de contour.

3.4.2 DECKBUILD

DECKBUILD est l'interface graphique entre l'utilisateur et les simulateurs (voir figure 3-3). Il se compose de deux fenêtres ; la fenêtre de saisie (input window) dans laquelle les simulateurs peuvent être appelés et contrôlés à l'aide des commandes DECKBUILD. La deuxième fenêtre (Run-Time output) affiche les sorties et les résultats des simulateurs, notamment les erreurs de programmation et les avertissements après la compilation.

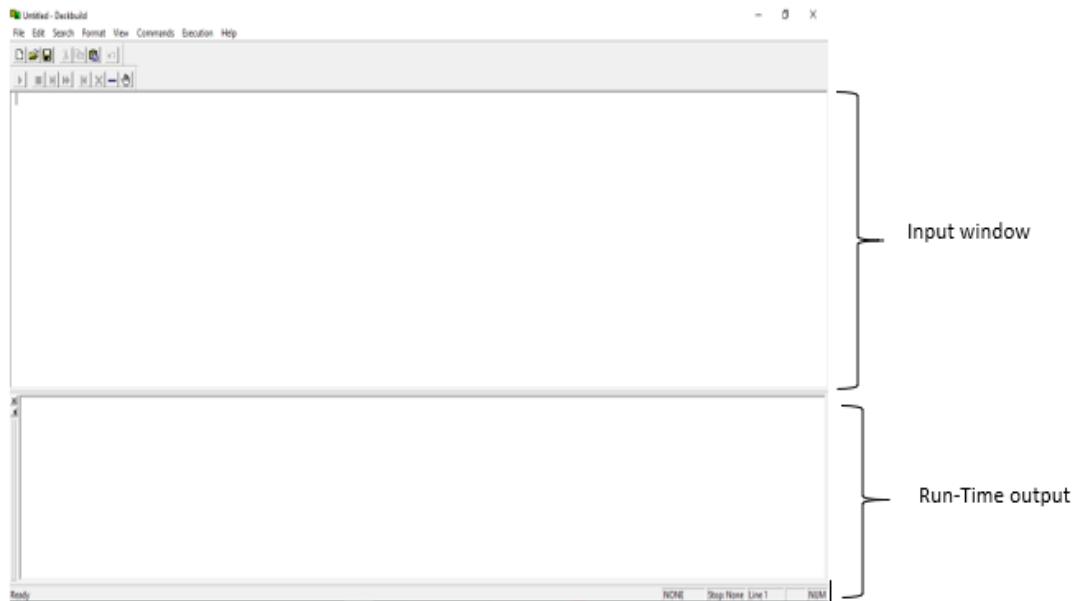


Figure 3-3: l'interface DECKBUILD.

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

- **Appel d'un simulateur** : Ceci peut être fait en utilisant l'instruction "Go" qui indique à DECKBUILD de fermer le simulateur actuel et/ou de démarrer le simulateur spécifié (par exemple Go ATLAS). Ensuite, n'importe quelle instruction du simulateur appelé peut être exécutée.
- **Déclaration de variable** : L'instruction "Set" est utilisée pour attribuer des noms (caractères) aux valeurs des variables (par exemple Set T = 300). La valeur de la variable peut être utilisée plus tard en faisant précéder son nom d'un signe dollar "\$" (par exemple Set a = \$ T, dans ce cas "a" prendra la valeur de "T", donc a = 300).
- **Mettre fin à une ligne commande** : A la fin du paquet, les simulateurs ouverts doivent être fermés à l'aide de l'instruction "Quit".

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

3.4.3 Spécification de la structure et des propriétés électriques du dispositif (ATLAS)

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

Il est possible de suivre deux méthodologies dans la définition des paramètres physiques et électriques d'un dispositif comme le montre la figure 3-4. La première méthode

consiste à générer la structure physique dans l'un des modules prévus à cet effet (ATHENA ou DevEdit) et ensuite calculer les propriétés électriques dans ATLAS. La deuxième prévoit, quant à elle, la définition tous les paramètres, physiques et électriques, dans ATLAS. C'est cette seconde méthode qui sera utilisé dans ce qui suit.

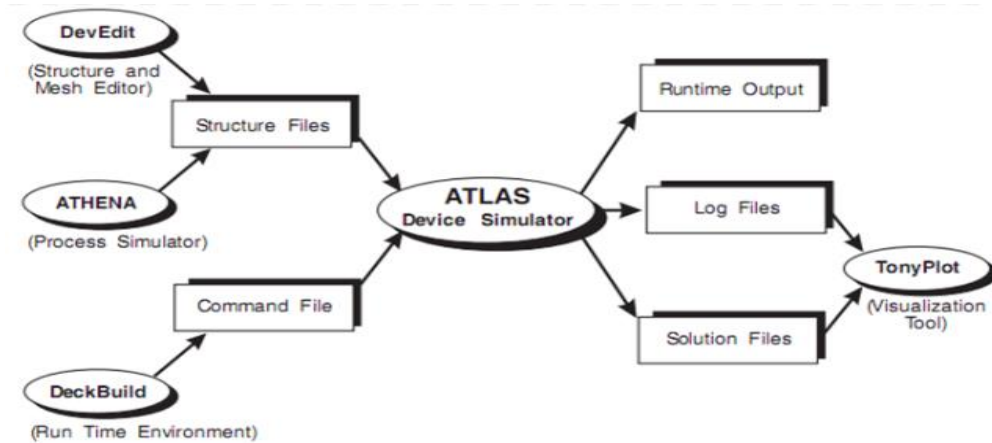


Figure 3-4: Entrées / sorties d'ATLAS [5].

L'ordre des commandes dans ATLAS

L'ordre des commandes dans ATLAS, comprend cinq groupes d'instructions qui doivent apparaître dans un ordre précis comme c'est défini dans la figure 3-5.

Groupe	Instructions
1. Spécification de la structure	<ul style="list-style-type: none"> - MESH - REGION - ELECTRODE - DOPING
2. Spécification du modèle	<ul style="list-style-type: none"> - MATERIAL - MODELS - CONTACT - INTERFACE
3. Méthode numérique	<ul style="list-style-type: none"> - METHOD
4. Solution	<ul style="list-style-type: none"> - LOG - SOLVE - LOAD - SAVE
5. Analyse	<ul style="list-style-type: none"> - EXTRACT - TONYPLOT

Figure 3-5: Ordre des commandes sous ATLAS.

3.5 Spécification de la structure

3.5.1 Le maillage

Le maillage consiste à définir des points caractérisés par leurs coordonnées, suivant deux ensembles de lignes parallèles et perpendiculaires, le croisement entre ces lignes forment

un ensemble de cellules, dit réseau, qui couvre la totalité de la surface du dispositif. Une simulation précise nécessite un maillage fin capable de résoudre toutes les équations menant à la solution. L'efficacité numérique nécessite un maillage grossier qui minimise le nombre total de points de la grille, donc une simulation rapide. Une autre condition doit être prise en considération est le nombre maximum de nœuds pris en charge par le logiciel. Dans SILVACO TCAD (ATLAS), une simulation bidimensionnelle peut comporter jusqu'à 20 000 nœuds [20].

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

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

L'instruction `meshspace.mult` introduit un facteur de multiplication entre deux lignes de maillage pour augmenter ou diminuer le nombre de lignes de maillage

La Figure 3-6 montre le maillage de notre dispositif (diode schottky AlGaAs/GaAs) généré en utilisant le code suivant:

```
Go atlas
Set DebutAlGaAs=0.5
Set DebutGaAs=1.5
Set limiteGaAs=1.95
meshspace.mult=1.0 width=400
# maillage selon x
x.mesh loc=0.0    spac=10
x.mesh loc=310   spac=10
x.mesh loc=320   spac=10
x.mesh loc= 700  spac=10
x.mesh loc=1320  spac=10
x.mesh loc=1720  spac=10
x.mesh loc=2000  spac=10
# maillage selon y
y.mesh loc=0.0          spac=0.5
y.mesh loc=0.45         spac=0.25
y.mesh loc=${DebutAlGaAs} spac=0.015
#y.mesh loc=0.6         spac=0.025
y.mesh loc=${debutGaAs}'-0.5 spac=0.05
y.mesh loc=${debutGaAs}' spac=0.015
y.mesh loc=${debutGaAs}'+0.1 spac=0.025
y.mesh loc=${limiteGaAs}'-0.1 spac=0.25
y.mesh loc=${limiteGaAs}' spac=0.015
y.mesh loc=${limiteGaAs}'+0.1 spac=0.25
y.mesh loc=${limiteGaAs}'+2 spac=0.55
```

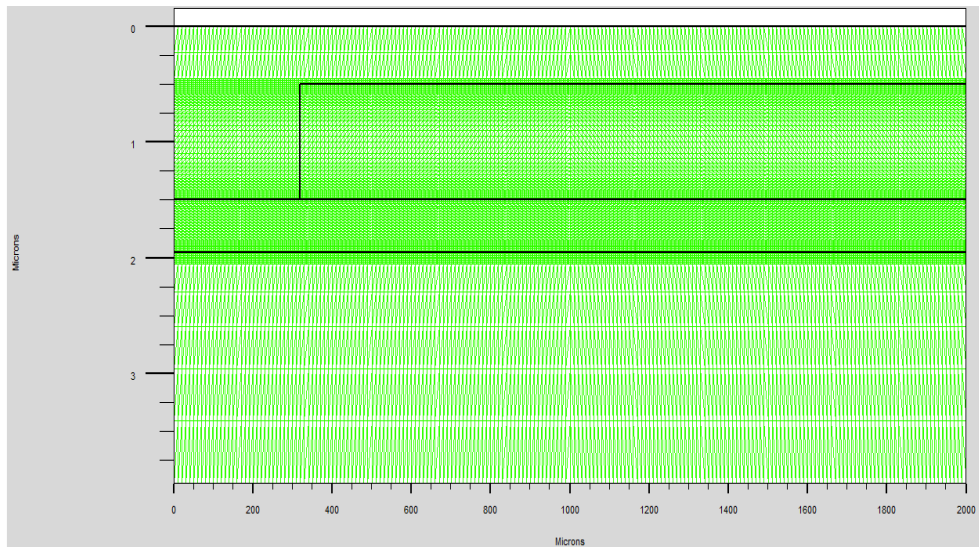


Figure 3-6: Maillage de la structure.

3.5.2 Régions et matériaux

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

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

Pour notre structure, on a besoin de définir quatre régions dont les matériaux sont : l'air, l'arséniure de gallium (GaAs), et l'arséniure de gallium et d'aluminium (AlGaAs). Ce dernier est un composé ternaire dont la fraction $x = 0.29$ doit être déclarer sous la forme : `x.composition = <value>`.

La figure 3-7 montre le résultat généré par le code suivant :

```
Region num=1 material=air x.min=0.0 x.max=2000 y.min=0.0
y.max=1.95
```

```
Region num=2 material=AlGaAsx.composition=0.29 x.min=320
x.max=2000 y.min='$DebutAlGaAs' y.max='$DebutGaAs'
```

```
Region num=3 material=GaAsx.min=0.0 x.max=2000 y.min='$DebutGaAs'
y.max='$limiteGaAs'
```

```
region num=4 material=GaAsx.min=0.0 x.max=2000 y.min='$limiteGaAs'
y.max='$limiteGaAs'+2
```

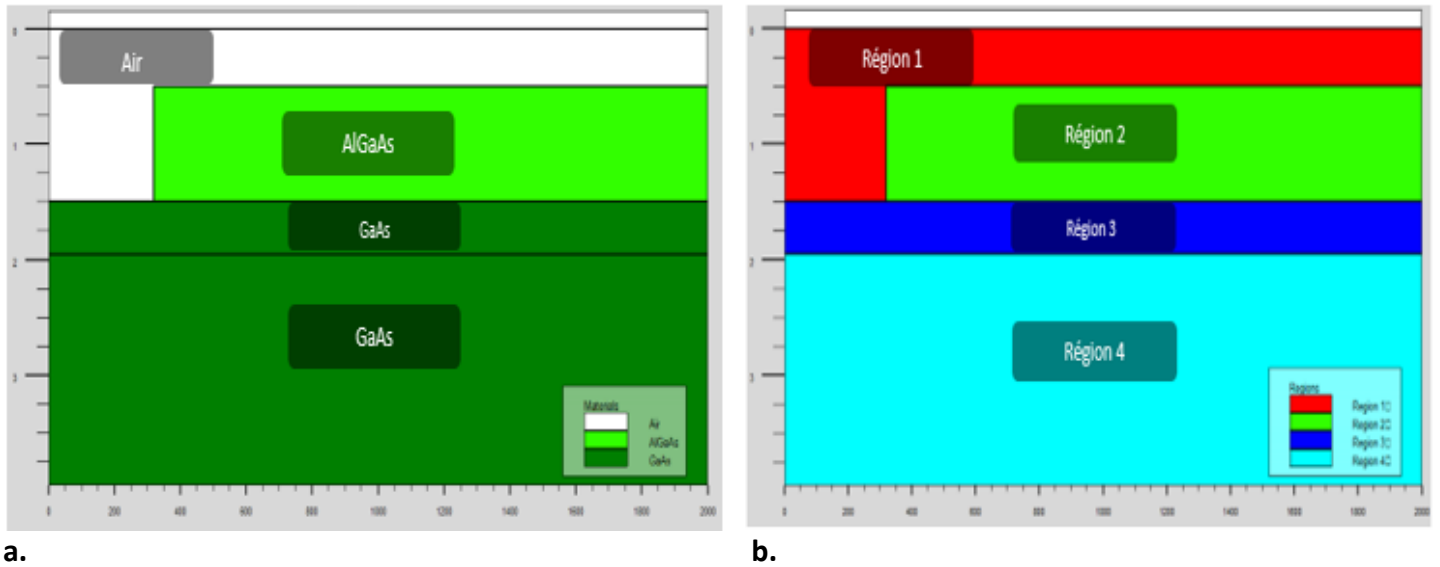


Figure 3-7: (a) Structure avec les régions. (b) Structure avec les matériaux.

3.5.3 Electrodes

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

Les électrodes sont définies par l'instruction suivante :

```
electrname =<electrodename><position_parameters>
```

Suivant cette syntaxe on a utilisé le code suivant pour notre exemple (figure 3-8)

```
electrname=anode      x.min=1320   x.max=1720   y.min=0     y.max=0.5
material=titanium/gold
```

```
electrname=cathode   x.min=10     x.max=310   y.min=$'DebutGaAs'-0.5
y.max=$'debutGaAs'
```

On a défini deux électrodes, l'anode avec le matériau titanium/or (Ti/Au) et la cathode dont la nature du métal n'est pas spécifiée, un métal par défaut lui sera attribué, à savoir l'aluminium (Al).

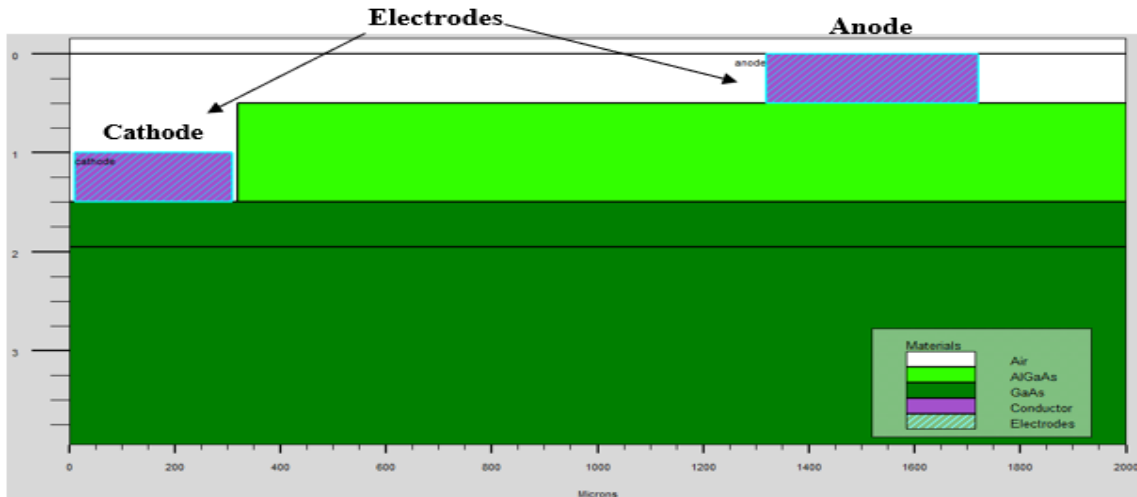


Figure 3-8: Structure après définition des électrodes.

3.5.4 Dopage

Le dopage est défini par l'instruction suivante :

```
doping<distribution_type><dopant_type><position_parameters><concentration>
```

Où le type de distribution devra être spécifier en tant qu'uniforme ou gaussienne.

Toujours dans notre exemple, on a introduit dans la région 2 (AlGaAs) un dopage avec une distribution uniforme de type P, de concentration $1.0 \text{ e}16 \text{ cm}^{-3}$. Pour la région 3 (GaAs), le dopage est uniforme, de type P avec une concentration par défaut de $1.79 \text{ e}6 \text{ cm}^{-3}$. Celle-ci sert à spécifier que le matériau est non dopé, ce dopage est introduit par la syntaxe :

```
doping uniform p.type region=2 conc=1.0e16
doping uniform p.type region=3 conc=1.79e6
```

Le résultat dans la structure est visible figure 3-9.

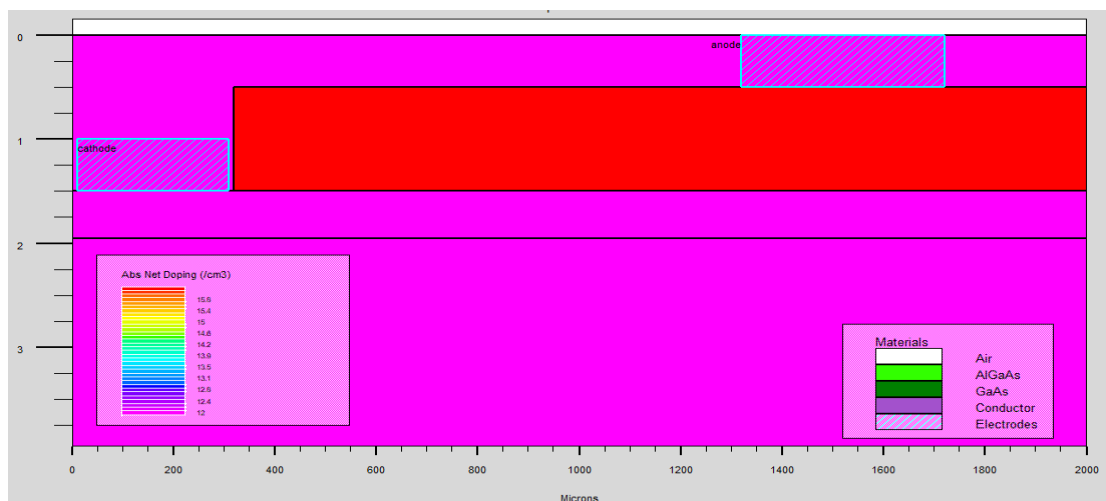


Figure 3-9: Structure après dopage.

Les schémas des différentes étapes de la réalisation de la structure ont été visualisés avec l'outil Tonyplot.

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

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

Notre structure est enregistrée sous le nom « DiodeAlGaAs_GaAs_1_1 » :

```
Save outf = DiodeAlGaAs_GaAs_1_1.str
```

Nous avons réalisé une structure virtuelle de jonction métal semi-conducteur de 3.95 μm de largeur maximum (avec contacts) et de 2000 μm de longueur. Le dimensionnement de la structure est détaillé dans la figure 3-10.

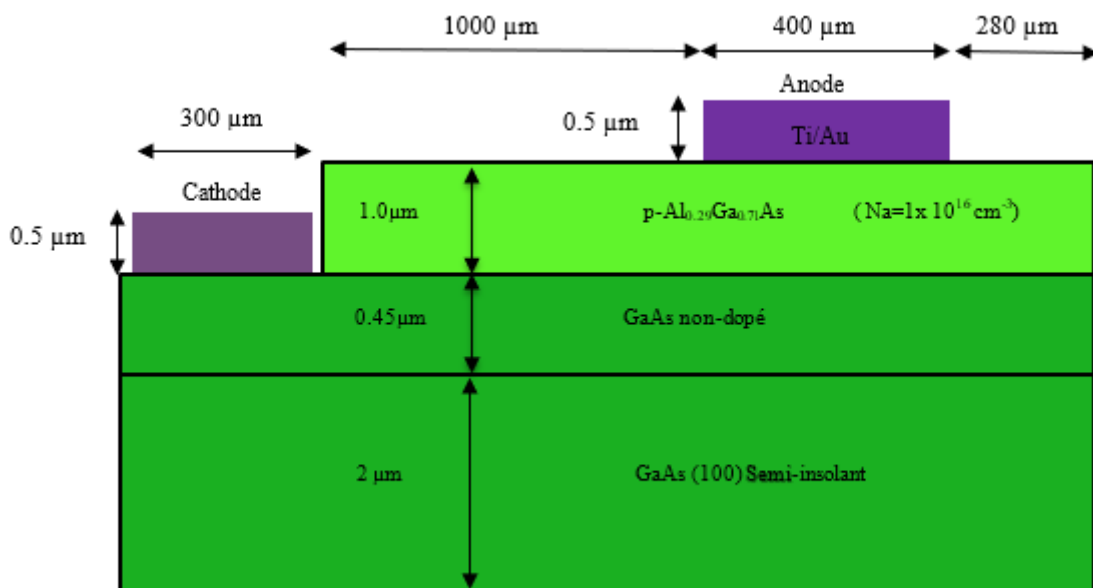


Figure 3-10: Structure finale.

Le dispositif est maintenant presque prêt pour la simulation, il reste à ajouter les propriétés électriques à la structure, comme la définition de la nature des contacts, le choix de la méthode de calcul ou encore l'introduction de pièges.

3.6 Spécification du modèle et des matériaux

3.6.1 Matériaux

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

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

Par exemple On a 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 [5] :

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

3.6.2 Modèles

Pour obtenir des résultats de la simulation réalistes, de nombreux paramètres complexes dépendants des propriétés et de l'environnement de dispositif, doivent être pris en compte, telles que la variation de mobilité en fonction de la température. Ces paramètres ne sont pas ou peu présents dans certains cas, il n'est donc pas nécessaire d'en tenir compte pour éviter les calculs supplémentaires. ATLAS fournit des modèles indépendants pour décrire chaque dépendance de propriété de périphérique seule, de sorte qu'ils peuvent être activés séparément.

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

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

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

```
Models bipolar auger srh fldmob boltzman bgn temperature=300 print
impact crowel
```

Les instructions `print` et `temperature` permettent respectivement de visualiser l'état de simulation des modèles dans la fenêtre de sortie de DECKBUILD (run-time output) et de spécifier la température générale de la structure.

Tous les modèles à l'exception de l'ionisation par impact sont spécifiés après l'instruction `Models`. L'ionisation par impact est spécifiée dans l'instruction `Impact`.

Dans ce qui va suivre nous donneront une description sommaire des modèles les plus importants et leur utilisation.

3.6.2.1 Modèles pour la mobilité

Les électrons et les trous sont accélérés par les champs électriques, mais perdent de l'élan à la suite des processus de diffusion, qui comprennent : les vibrations en réseau (phonons), les ions d'impureté, autres porteurs et les imperfections des matériaux (rugosité de surface, ...) [21].

Le tableau 3-1 contient les principaux modèles dépendants de la mobilité, leurs syntaxes.

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

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

Tableau 3-1: Modèles de la mobilité [21].

3.6.2.2 Modèles pour la recombinaison et la génération des porteurs

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

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

Tableau 3-2: Modèles dépendant de la recombinaison et génération des porteurs [22].

3.6.2.3 Statistiques de porteurs

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

L'équation de Boltzmann décrite par Boltzmann en 1872 pour modéliser la cinétique des gaz est le point de départ de tous les modèles disponibles.

Modèle	Syntaxe/instruction	Remarque
Boltzmann	<code>boltzmann</code>	Modèle par défaut
Fermi-Dirac	<code>Fermi</code>	Réduit la concentration de porteurs dans les régions fortement dopées (approche statistique)
Ionisation incomplète	<code>Incomplete</code>	Compte dans le cas de gel des dopants. Typiquement utilisé pour les basses températures
Largeur du gap (Bandgap Narrowing)	<code>Bgn</code>	Important dans les régions fortement dopées. Critique pour le gain bipolaire

Tableau 3-3: Modèle pour les statistiques des porteurs [22]

3.6.2.4 Modèles pour l'ionisation par impact

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

Dans un certain sens, l'ionisation par impact est le processus inverse de la recombinaison Auger.

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

Tableau 3-4: Modèles pour l'ionisation par impact [22].

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

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

3.6.3 Déclaration de contact

La commande "contact" permet de dire à ATLAS comment traiter l'électrode. Une électrode en contact est ohmique par défaut. Si l'on veut définir l'électrode comme contact Schottky, on doit définir la valeur du travail de sortie propre au métal, selon la syntaxe suivante :

Contact name = <electrode> workf = <value>.

3.7 Méthodes numériques

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

Les équations qui permettent le calcul des courants, des potentiels et les densités des porteurs sont données sous la forme :

- L'équation de la densité du courant 1.36 mentionnée dans le chapitre 1
- L'équation de poisson :

$$\text{div} (\epsilon \nabla V) = -\rho = -q(p - n + N_D - N_A) \quad 3.1$$

- L'équations de continuité :

$$\frac{\partial n}{\partial t} = -\frac{1}{q} \nabla J_n + U_n \quad 3.2$$

Avec n la densité des électrons, μ_n la mobilité des électrons, D_n le coefficient de diffusion des électrons et des trous, et enfin U_n représente les taux de génération recombinaison.

Il existe trois méthodes numériques pour résoudre les équations : Gummel, Newton et Block, ils peuvent être appelés dans le programme par l'instruction :

`method<method 1><method 2> <method 3>`

L'ordre d'application des méthodes est Gummel puis Block puis Newton. Si aucune méthode n'est spécifiée Newton est appliqué par défaut

On peut résumer comme suit dans le tableau 3-5 le principe des trois des méthodes :

Méthode	Principe	Remarque
Gummel	La méthode Gummel résout pour tour à tour chaque inconnue, en gardant les autres variables constantes et en répétant le processus jusqu'à ce qu'une solution stable soit atteinte.	<ul style="list-style-type: none"> • Cette méthode tolère de faibles estimations initiales • En général, utile lorsque le système d'équations est faiblement couplé mais a seulement une convergence linéaire
Block	La méthode de Block résout certaines équations entièrement couplées alors que d'autres sont découplées.	<ul style="list-style-type: none"> • Utile lorsque le chauffage du réseau ou les équations d'équilibre énergétique sont inclus.
Newton	La méthode de Newton résout le système total d'inconnues ensemble	<ul style="list-style-type: none"> • Utile lorsque le système d'équations est fortement couplé et a une convergence quadratique. • Recommandée pour la majorité des cas • Les cas suivants doivent impérativement faire appel à la méthode de Newton pour les simulations isothermes de diffusion de dérive : les conditions du courant aux limites, les éléments externes, l'analyse AC et l'ionisation par l'impact.

Tableau 3-5: Méthodes numériques [22].

3.8 Spécification de la solution

Dans cette partie on demande à ATLAS de résoudre les différentes équations en fonction des conditions physiques et électriques spécifiées. Les résultats peuvent être affichés et sauvegardés au moyen de quatre instructions : `log`, `Solve`, `Output` et `Save`. L'instruction `log` crée un fichier de sauvegarde où tous les résultats de la simulation seront enregistrés. La syntaxe utilisée dans notre programme est la suivante :

```
log outf=DiodeAlGaAs_GaAs_1_1.log
```

L'instruction `Solve` : calcule les données d'un ou plusieurs points de polarisation. Avec l'instruction `solve init` une solution initiale simplifiée (qui ne résout que l'équation de Poisson) est calculée pour obtenir une estimation initiale de la solution finale. Ensuite, l'intervalle de polarisation est spécifié selon l'instruction suivante :

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

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

```
Save outf = DiodeAlGaAs_GaAs_2_1.str
```

3.9 Analyse

La partie analyse regroupe deux instruction `extract` et `tonyplot`

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

```
Extract name="I_max" y.valfromcurve (v."anode", i."anode")
wherex.val=3
```

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

```
Extract name="courbe_IV" curve (v."anode", i."anode")"
```

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

```
tonyplot DiodeAlGaAs_GaAs_1_1.dat
```

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

3.10 Introduction des pièges

Un piège, est un point à l'intérieur d'un solide (généralement un semi-conducteur ou un isolateur) qui restreint le mouvement des électrons et des trous. Il consiste en une impureté chimique ou un défaut dans l'espacement régulier des atomes qui composent le solide.

Un piège peut capturer et immobiliser un électron ou un trou et empêcher sa recombinaison avec le porteur de la charge opposée en tant que paire électron-trou. Les porteurs de charge peuvent être libérés des pièges en ajoutant de l'énergie, par exemple en irradiant le solide avec de la lumière ou en chauffant [23]. Il peut constituer aussi, des étapes intermédiaires pour les transitions électroniques et amplifient sensiblement la recombinaison.

On peut modéliser ces pièges par des niveaux d'énergie discrets dans la bande interdite du semiconducteur. Les niveaux associés aux défauts peuvent être donneurs ou accepteurs. On parle de pièges profonds, lorsqu'ils sont éloignés des bords de bande de valence et de conduction.

Avec SILVACO, la position du piège est définie par rapport aux bandes de conduction ou de valence en utilisant `E.LEVEL`, par exemple, un piège accepteur à 0,4 eV serait 0,4 eV en dessous de la bande de conduction. La figure 3-11 montre la terminologie utilisée dans ATLAS pour définir le type de piège [21].

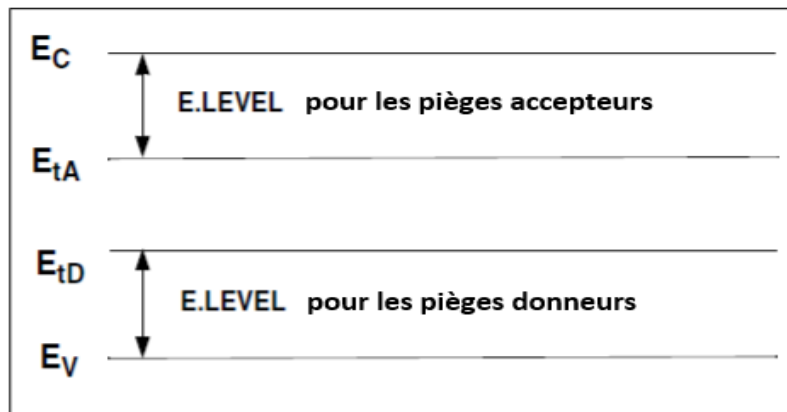


Figure 3-11: Définition du niveau d'énergie du piège pour les pièges accepteurs et donneurs en référence aux bords de la conduction et de la bande de valence [21].

L'intégration des pièges se fait par l'instruction TRAP. La syntaxe pour une distribution uniforme est sous la forme :

```
trap e.level= <value> <type> density=<value> degen=<value>
sign=<value> sigp=<value> region= <position>
```

Les paramètres déclarés dans cette syntaxe servent à [21] :

- Spécifier le type des pièges avec DONOR ou ACCEPTOR
- Spécifier le paramètre de niveau d'énergie avec E.LEVEL
- Spécifier la densité des pièges avec DENSITY
- Spécifier le facteur de dégénérescence avec DEGEN.FAC
- Spécifier les sections efficaces avec SIGN et SIGP

3.11 Conclusion

Nous avons présenté dans ce chapitre ATLAS / SILVACO l'outil de travail utilisé dans le cadre de notre stage. L'outil permet de prédire les caractéristiques électriques associées à des structures physiques et des conditions de polarisation spécifiées.

Au moyen d'un programme ATLAS, on a généré une diode Schottky à base de matériaux semiconducteurs III-V AlGaAs et GaAs. Ce programme de base va nous permettre de simuler et d'étudier la diode Schottky sous conditions divers. Les résultats seront exposés dans le prochain chapitre.

Chapitre 4 : Résultats de simulation

4.1 Introduction

Le choix des paramètres géométriques et physiques joue un rôle très important dans le processus de fabrication de tout composant électronique, ainsi des paramètres tel que le dopage, les dimensions, ou bien la température, définissent le comportement électrique du composant.

Afin de comprendre au mieux l'influence de ces paramètres sur le comportement de la diode Schottky à base de AlGaAs/GaAs, on a étudié les caractéristiques I-V et C-V, à l'aide de la simulation sous ATLAS-SILVACO.

4.2 Etude de l'influence des paramètres géométriques et physiques

4.2.1 Simulation courant - tension (I-V)

Les courbes caractéristiques I-V montrent la relation entre le courant circulant dans un dispositif électronique et la tension appliquée à travers ses bornes.

Les courbes caractéristiques I-V sont généralement utilisées comme un outil pour déterminer et comprendre les paramètres de base d'un composant ou d'un dispositif et qui peuvent également être utilisées pour modéliser mathématiquement son comportement dans un circuit électronique.

4.2.1.1 Influence de la variation des paramètres au niveau de la couche d'AlGaAs

4.2.1.1.1 Variation de la largeur de la couche

La figure 4-1 présentes les caractéristiques I-V, avec variation de l'épaisseur « y » de la région 2 « AlGaAs ».

Les courbes que nous avons obtenues ont la même allure caractéristique de la diode. On remarque que pour une tension inférieure à 0.3V le courant de la diode I_D est presque nul, tandis que pour une tension supérieure à 0.3V, I_D croît exponentiellement jusqu'à atteindre une valeur où l'effet de la résistance série devient dominant. Cela est observé pour toutes les largeurs (ou épaisseurs). On retiendra alors, que la plage utile de cette variation exponentielle se situe pour l'essentiel entre 0,3V et 0,7V en fonction de la courbe. La densité du courant J_0 est lié à la densité du courant de la diode avec l'équation (1.30) citée dans le chapitre 1.

La tension de seuil V_0 , pour laquelle la diode conduit, déminue avec l'augmentation de la largeur elle se situe entre 0.3V et 0.4V.

Pour les épaisseurs de la couche AlGaAs supérieurs à $1\mu\text{m}$, les courbes caractéristiques restent dans l'ensemble identiques. En revanche, pour une valeur inférieure

d'épaisseurs, on remarque que le terme de l'exposant change légèrement, ce qui veut dire que le coefficient d'idéalité " η " ne se rapproche pas de la valeur unité. L'extraction de paramètre η des simulations nous donne une valeur de 1.15 pour $0.5\mu\text{m}$ contre 1.11 pour $1\mu\text{m}$ d'épaisseur.

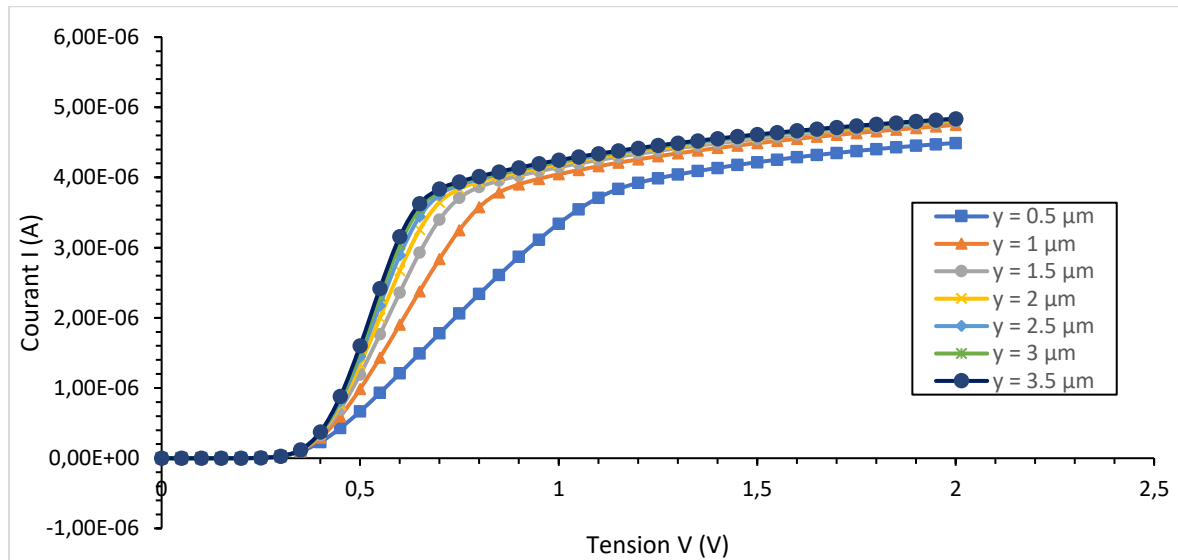


Figure 4-1: Caractéristique I-V sous polarisation direct de la diode pour différentes épaisseurs de la région AlGaAs.

Concernant la résistance série R_s , elle est équivalente à la pente de la courbe dans la région des fortes polarisations, c'est-à-dire à $V > 1.2\text{V}$. Elle peut être calculée par la relation :

$$R_s = \frac{\partial V}{\partial I} \quad 4.1$$

On remarque que la R_s diminue légèrement et les courants circulant dans les diodes, augmentent légèrement en augmentant l'épaisseur de la couche AlGaAs. Donc l'épaisseur $1\mu\text{m}$ est un bon compromis technologique pour la réalisation de la diode.

4.2.1.1.2 Variation de la concentration des dopants

La figure 4-2 montre les caractéristiques I-V, avec une variation de la concentration des dopants injectés dans la couche « p-AlGaAs ».

En comparant les courbes obtenues dans la figure 4-2 on peut remarquer que le comportement électrique de la diode dépend du profil de dopage : le courant de la diode I_D croît avec l'augmentation de la densité des dopants. Ce phénomène s'explique par la relation directe entre la conduction et la densité des dopants. En effet la conduction dans une diode schottky est assurée par les porteurs majoritaires introduits via le dopage, ce qui fait que plus il y a de porteurs de charges plus la conduction augmente.

On note que le courant reste faible pour un dopage inférieur à $5.10^{15} \text{ cm}^{-3}$ et qu'il dépasse la valeur 7.10^{-6} A avec un dopage de $3.10^{17} \text{ cm}^{-3}$. Un dopage de $1.10^{16} \text{ cm}^{-3}$ donne un courant moyen.

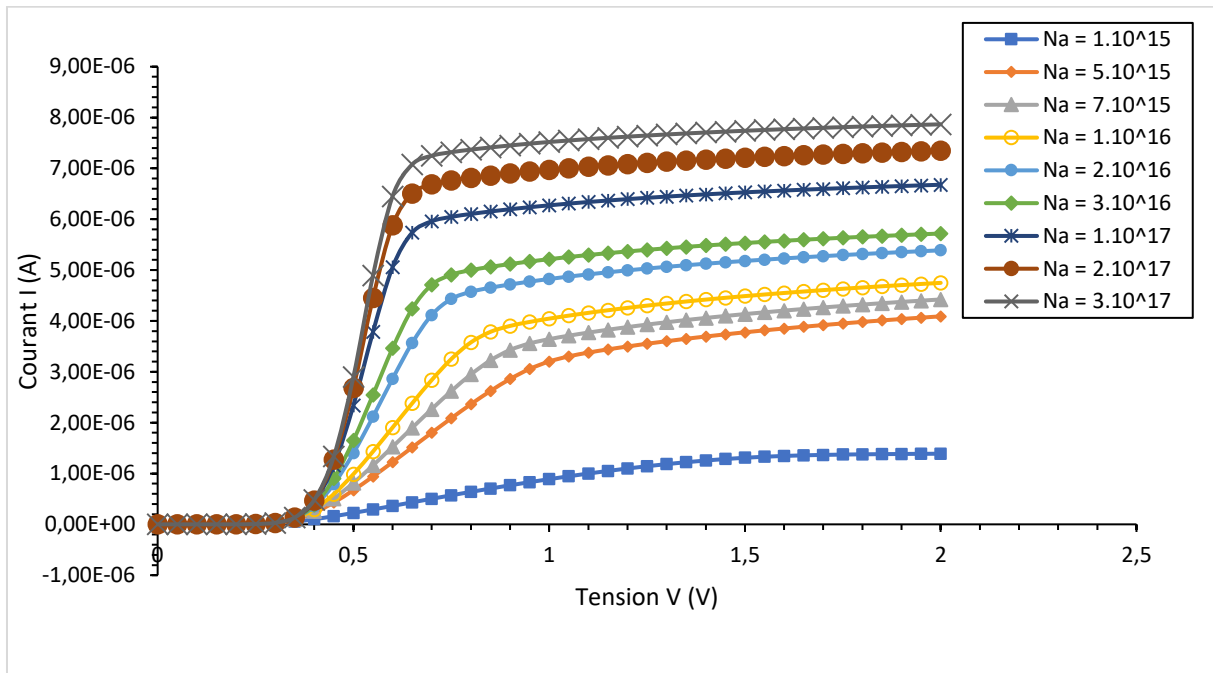


Figure 4-2: Caractéristique I-V sous polarisation direct de structure de la diode pour différentes concentrations de dopage.

4.2.1.1.3 Influence de la variation du diamètre du contact schottky

Le graphique montrant les résultats de simulation de la caractéristique courant tension pour différents diamètres de contact Schottky illustré par la figure 4-3.

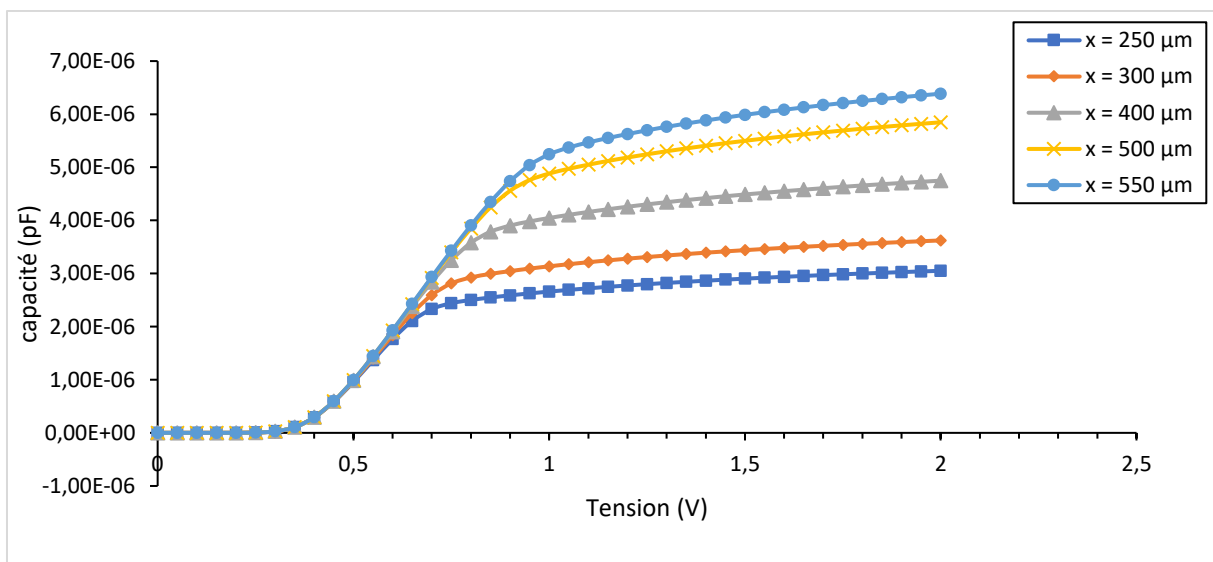


Figure 4-3: Caractéristique I-V sous polarisation direct de structure de la diode pour différents diamètres du contact Schottky

On note une nette augmentation du courant de la diode (de $2.6 \cdot 10^{-6}$ pour $x=250\mu\text{m}$ jusqu'à $5.2 \cdot 10^{-6}$ pour $x = 550\mu\text{m}$). On remarque aussi que la pente de la résistance série est pratiquement commune à toutes les courbes.

4.2.1.2 Influence de la variation des paramètres au niveau de la couche « GaAs »

4.2.1.2.1 Variation de l'épaisseur de la couche « GaAs »

La figure 4-4 présente les résultats de la simulation avec variation de l'épaisseur de la région GaAs.

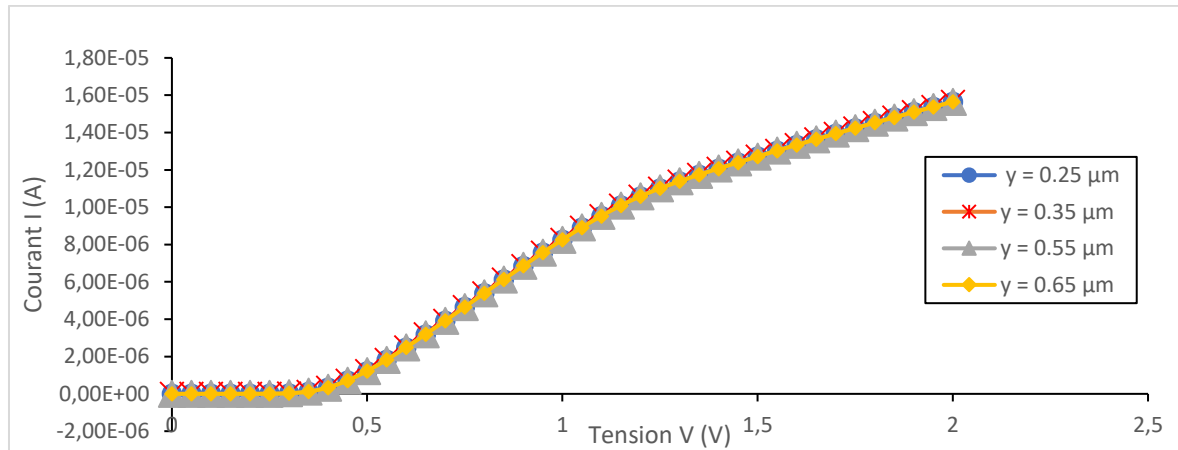


Figure 4-4: Caractéristique I-V sous polarisation direct de la structure schottky à différentes épaisseurs de la région GaAs.

On constate un chevauchement des courbes, c'est-à-dire que le courant ne change pas en fonction de la dimension de la région GaAs, celle-ci n'a pas d'influence sur les caractéristiques électriques de la diode. Ces résultats peuvent être expliqués par le fait que la jonction schottky est établie entre l'anode (contact schottky) et la région AlGaAs, c'est-à-dire que la région active reste la couche d'AlGaAs et que la zone GaAs est peut-être une couche tampon pour des raisons technologiques de réalisation.

4.2.1.3 Influence de variation de la température

Les paramètres physiques tels que la mobilité, le gap ou la vitesse de saturation dépendent étroitement de la température. La variation de la température a un impact direct sur les paramètres physiques de la diode et par conséquent sur son comportement électrique.

On observe que pour les basses températures (en dessous de 300K) l'allure des courbes est très faible, le courant maximum est de l'ordre de $3 \cdot 10^{-8}$ A pour une tension de 2V. Il diminue dramatiquement en dessous de cette température, ceci peut expliquer la nature thermo-ionique de la conduction du courant. A très basses températures un phénomène de gel des porteurs peut être responsable de ce résultat.

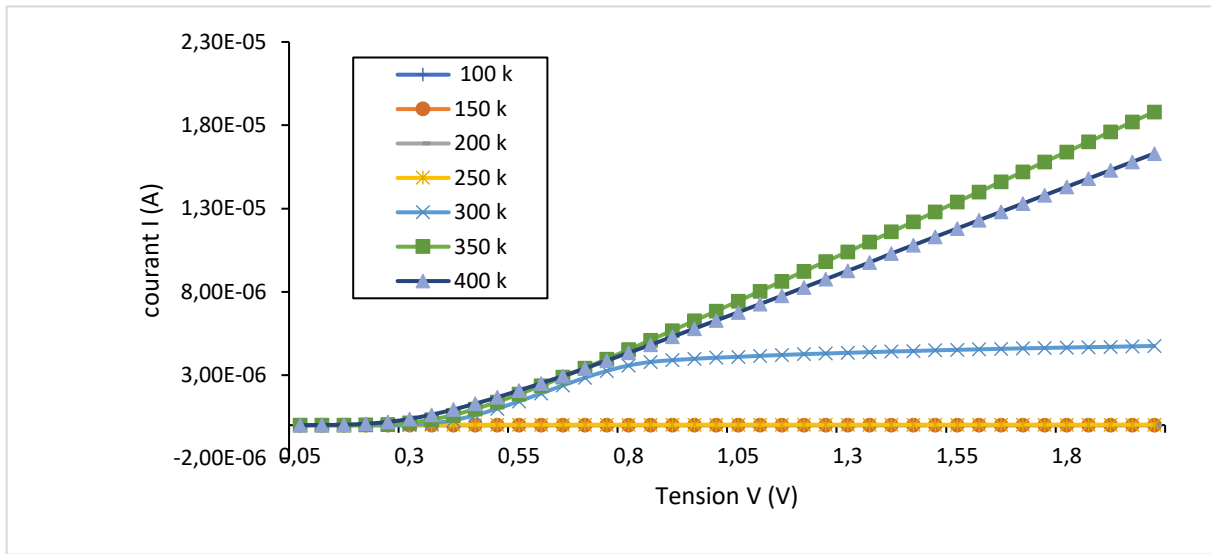


Figure 4-5: Caractéristique I-V de la structure Schottky pour différentes températures

4.2.2 Simulation Capacité - Tension (C-V)

La mesure de La capacité en fonction de la tension C-V, est une technique de caractérisation des matériaux et des dispositifs semi-conducteurs. La tension appliquée est variée, et la capacité est mesurée et tracée en fonction de la tension. Cette technique est utilisée dans plusieurs dispositifs dont la jonction métal – semiconducteur (barrière Schottky) pour créer une région d'épuisement, une région qui est vide de la conduite des électrons et des trous, mais peut contenir des donneurs ionisés et des défauts ou des pièges électriquement actifs. La région d'épuisement avec ses charges ionisées à l'intérieur se comporte comme un condensateur. En variant la tension appliquée à la jonction, il est possible de varier la largeur d'épuisement. La dépendance de la largeur d'épuisement sur la tension appliquée fournit des informations sur les caractéristiques internes du semi-conducteur.

4.2.2.1 Capacité en fonction de la fréquence :

La Figure 4-6 montre la caractéristique C-V de la diode Schottky à l'étude pour différentes fréquences.

Selon les courbes obtenues, la capacité diminue avec l'augmentation de la fréquence. En fait, les porteurs ne peuvent pas suivre le signal modulant, ce qui se traduit par une baisse de capacité à haute fréquence.

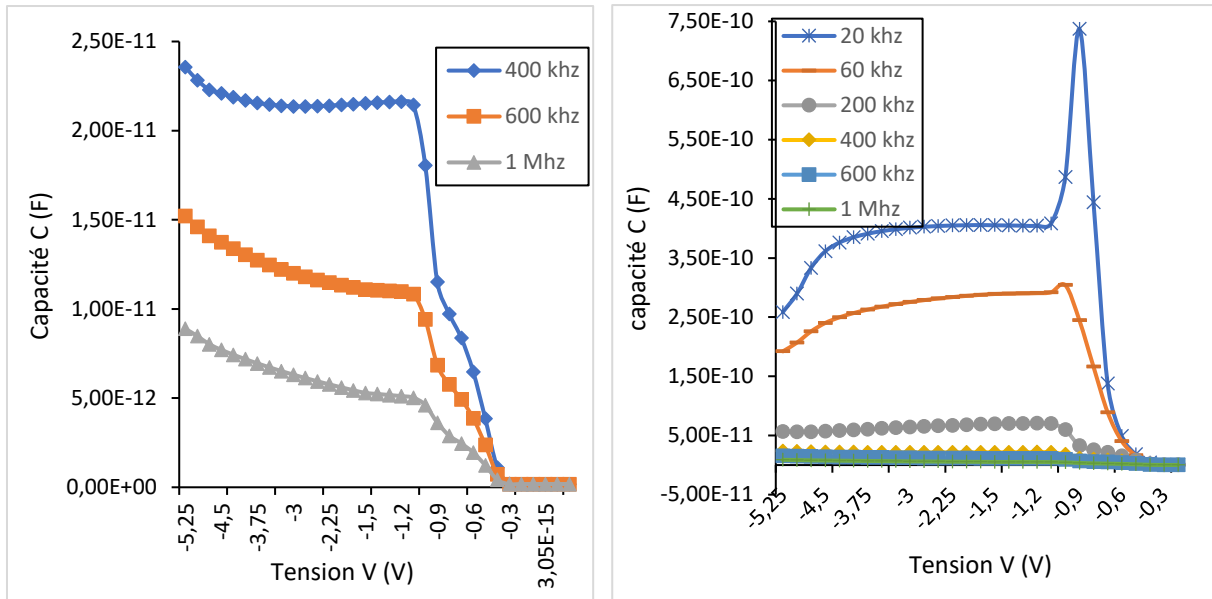


Figure 4-6: Caractéristique C-V de la structure Schottky pour différentes fréquences.

Lorsque le courant à travers la diode augmente, les états d'interface se saturent graduellement et la capacité atteint son maximum. Avec la diminution de la région de déplétion en polarisation directe au-delà du seuil, la capacité commence à diminuer jusqu'à devenir nulle.

4.2.2.2 Capacité en fonction de la fréquence avec pièges

- Paramètres des pièges

Les niveaux pièges ont été obtenus par Mari et al. [24] au moyen d'une caractérisation de défauts profonds dite DLTS (pour : Deep-level transient spectroscopy DLTS). Il s'agit d'une technique très utile pour caractériser les niveaux profonds électriquement actifs dans la bande interdite du semiconducteur [25]. Selon les caractérisations expérimentales (DLTS) de Mari et al. [24] on a trois niveaux de défauts HA1, HA2 et HA3.

Comme nous l'avons vu au chapitre 3, certains paramètres définissent ces défauts profonds dans ATLAS. Parmi ces paramètres on note la densité des états pièges, niveaux énergétiques, le coefficient de capture des électrons et des trous, et enfin la dégénérescence.

Les données expérimentales extraites de DLTS n'offrent pas toutes ces informations. En fait, la section de capture des électrons et des trous les facteurs de dégénérescence sont inconnus. Ces deux paramètres sont liés à la nature des défauts. Dans notre cas, nous avons pris un facteur de dégénérescence égale à 2. Le rapport de coefficient de capture n'a pas d'influence sur les caractéristiques C-V. Ce rapport varie de 1 à 100 pour un piège accepteur et de 0.01 à 1 pour un piège donneur [25]. Dans nos calculs, cette valeur prise par défaut égale à 100. La distribution des pièges est supposée être uniforme dans la couche AlGaAs.

4.3 Conclusion

Dans ce chapitre nous avons étudié l'influence de certains paramètres géométriques et physiques sur le comportement électrique de la diode Schottky à base de AlGaAs/GaAs par simulation électrique sous ATLAS- SILVACO.

Les caractéristiques courant-tension obtenues présentent des allures exponentielles et montrent une forte résistance de série due à l'éloignement des deux contacts (anode et cathode).

L'épaisseur $1\mu\text{m}$ de la couche AlGaAs est un bon compromis technologique pour la réalisation de la diode. Tandis que pour le dopage et la position des contacts, les performances de la diode peuvent être améliorées en augmentant le dopage ($> 1.10^{16} \text{ cm}^{-3}$) et en rapprochant les deux contacts pour diminuer la résistance série.

Pour les simulations capacité-tension, on a constaté une évolution, des courbes en prenant compte les pièges, similaire aux courbes obtenues sans pièges. Ces résultats peuvent être différents avec d'autres paramètres de pièges. Des recherches plus approfondies peuvent être menées dans ce sens.

Conclusion générale

Nous avons vu que l'utilisation des composés III-V dans la fabrication des semi-conducteurs a donné un grand pas pour le développement de l'électronique et de l'optoélectronique. Nous avons présenté dans ce manuscrit une étude par simulation de Atlas-SILVACO des caractéristiques électriques I-V et C-V d'une diode Schottky à base de matériaux III-V (p-AlGaAs / GaAs).

L'allure typique de la courbe d'une diode a pu être reproduite par les simulations I-V et C-V, l'augmentation de la surface au niveau de la couche AlGaAs entraîne une augmentation des courants de diode toute en abaissant la résistance série et rapprochant le facteur d'idéalité à l'unité.

L'augmentation du dopage fait augmenter le courant car le dopage introduit des porteurs majoritaires qui sont responsables de la conduction.

Le changement de température a une influence remarquable sur le comportement de la diode, vu que la densité et la mobilité des porteurs de charges dépendent étroitement de ce paramètre. Les basses températures causent le gel des porteurs et par conséquent une diminution du courant. En revanche, les hautes températures augmentent la mobilité, ce qui amène une augmentation du courant.

La simulation de C-V en fonction de la fréquence avec et sans intégration des pièges à distribution uniforme montre que ces niveaux pièges peuvent déminuer à certaines tensions les caractéristiques C-V.

En conclusion de ce travail, des perspectives sont pointées pour faire une étude plus profonde de ce composant. On cite, par exemple, l'intégration des états d'interface en se basant sur les résultats expérimentaux, une étude plus approfondie de l'effet des pièges avec une distribution non uniforme, et enfin, l'étude C-V en fonction de température. Cela permettra une meilleure compréhension du fonctionnement de la diode.

Références

1. L. Lukasiak & A. Jakubowski, « History of Semiconductors », Journal of telecommunications and information technology, Janvier 2010, 3-9.
2. N. SEVAGENT, « Physique des semiconducteur : Fondamentaux ». Mise à jour en avril 2008. Ecole des Mines de Nantes, Université du Mans, Cours. [En ligne] http://www.optique-ingenieur.org/fr/cours/OPI_fr_M05_C02/co/Grain_OPI_fr_M05_C02.html (consulté le 01 avril 2018)
3. MAXICOURS.com, « Cours de Physique-Chimie-Conducteurs, semi-conducteur, supraconducteurs ». [En ligne] <http://www.maxicours.com/se/fiche/3/6/417936.html> (consulté le 01 avril 2018)
4. N. BAUDUIN, « Dépôt de couches minces d'oxyde d'Etain pur ou dopé par procédé plasma CVD basse pression », Thèse Doctorat, Université l'université Paris VI, (2001). [En ligne] <http://n.bauduin.free.fr/french/chapitre1.html> (consulté le 01 avril 2018)
5. F. BOUROUBBA, « Modelisation et simulation des contacts metal-semiconducteur à barrière inhomogène », Mémoire Magistère, Université de Sétif « Ferhat Abbas », 2010. [En ligne]. <https://www.univ-setif.dz/MMAGISTER/images/facultes/sciences/2010/bouroubaFarid.pdf>
6. O. BLLAOUHAMOU, « Le contact Métal Semiconducteur, La diode schottky ». Mise à jour le 13 janvier 2017. Université Ibn Tofail, Cours. [En ligne] <https://www.slideshare.net/omarbllaouhamou1/cours-master-phys-sc-chap-4-2015> (consulté le 01 avril 2018)
7. B. BOITTIAUX, « Chapitre 5 : Structure Métal-Semiconducteur ». Mise à jour le 30 mars 2004. Polytechnique de Lille, Cours. [En ligne] <http://www.polytech-lille.fr/cours-atome-circuit-integre/unip/unip500.htm> (consulté le 01 avril 2018)
8. C. ALGANI, « Composant électronique », Conservatoire National des Art des des Métiers, Cours. [En ligne] http://easytp.cnam.fr/algani/images/ELE101_CNAM_1_2008.pdf (consulté le 03 avril 2018)
9. S. GHACHAME, « Caractéristiques électriques d'une diode à barrière de Schottky (SBD) avec et sans couche isolante SiO₂ à la température ambiante (300K », Mémoire Master, Université Mohammed Kheider, Biskra. (2014). [En ligne] <http://dSPACE.univ-biskra.dz:8080/jspui/bitstream/123456789/6545/1/mimooire%20samah.pdf> (consulté le 03 avril 2018)

10. B. NEDJEDIA, « Etude des propriétés électriques en régime statique d'une structure Schottky », Mémoire Magistère, Université de Batna, (2010). [En ligne] http://theses.univ-batna.dz/index.php/theses-en-ligne/doc_download/1689-etude-des-proprietes-electriques-en-regime-statique-dune-structure-schottky (consulté le 03 avril 2018)
11. N. HERISSI, « Extraction des paramètres des structures Métal-Semiconducteurs (Ti/Pt/Au-GaAs) à partir des caractéristiques courants-tensions (I-V) », Mémoire Magister, Université de Tébessa, (2012). [En ligne] http://www.univ-tebessa.dz/fichiers/Theses_dissertations/docs/ThesesMag/Sciencesmatiere/physiquematcond/HerissiNaima.pdf (consulté le 04 avril 2018)
12. A. CHAVOT & P. MASSON, « Physique des semi-conducteurs », Ecole Polytechnique Universitaire de Marseille, Cours, (2004/2005)
13. B Akkal « Simulation, caractérisation électrique et structurale des diodes Schottky Au/InP(100) et Au/InSb/InP(100) en fonction de la fréquence », (2002)
14. P. CHEVALIER, « Transistors HEMT sur les matériaux III-V », Mise à jour le 19 février 1999, Université de Lille, Cours. Site réalisé dans le cadre de l'Atelier de Recherches Pédagogiques de l'EUDIL, [En ligne]. <http://www.polytech-lille.fr/cours-transistor-effet-champ/hemt/hemt.htm>
15. AZo Materials, « Gallium Arsenide (GaAs) Semiconductors », Mise à jour le 27 mars 2013, [En ligne]. <https://www.azom.com/article.aspx?ArticleID=8349> (consulté le 09 avril 2018)
16. AZo Materials, « Aluminium Gallium Arsenide Semiconductors », Mise à jour le 02 mai 2013, [En ligne]. <https://www.azom.com/article.aspx?ArticleID=8365> (consulté le 09 avril 2018)
17. R. KHLIL, « Étude d'un gaz bidimensionnel d'électrons dans des hétérostructures AlGaAs/GaAs par des mesures courant-tension et bruit basses fréquences en température », Thèse Doctorat, Université de Reims Champagne-Ardenne, (2005)
18. J. Kumar, « System Simulation and Modeling », System Simulation and Modeling , Modeling and simulation, [En ligne]. <http://www.ddegjust.ac.in/studymaterial/mca-5/mca-504.pdf>
19. R. H. Mari, « Electrical characterisation of defects in III-V compound semiconductors by DLTS », (2011)
20. R. BOUMARAF, « Simulation de l'effet de la température et les défauts sur les caractéristiques électriques des diodes à base de GaAs », Thèse Doctorat, Université de Biskra « Mohamed Khider », (2015). [En ligne]. http://thesis.univ-biskra.dz/1552/1/Phy_d1_lmd_2015.pdf.

21. SILVACO international, « ATLAS User's Manual : Device simulation software », 7 décembre 2006.
22. M. C. Allia, « Numerical methods (2) », Device simulation ST, 07 décembre 2006
23. The Editorsof Encyclopaedia Britanica, « Traps, solid- state physics », 20 juillet 1998
24. Mari et al.: « Electrical characterisation of deep level defects in Be-doped AlGaAs grown on (100) and (311) A GaAs substrates by MBE ». Nanoscale Research Letters, (2011)
25. Aurangzeb et al: « Deep Level Transient Spectroscopy: A Powerful Experimental Technique for Understanding the Physics and Engineering of Photo-Carrier Generation, Escape, Loss and Collection Processes in Photovoltaic Materials, Solar Cells, IntechOpen», (2015)