

République Algérienne Démocratique et Populaire

MINISTRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR

ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE

Université Djillali Liabès de Sidi Bel Abbès

Faculté de Génie Electrique

Département d'électronique



THESE

Présenté pour l'obtention du diplôme de

DOCTORAT EN SCIENCES

Dans le cadre de l'école doctorale

" Nanotechnologie pour les Matériaux et Composants Electroniques "
(Option : Nanotechnologie pour les Télécommunications)

Par

M^r RABEHI ABDELAZIZ

Thème

*Propriétés électriques et photoélectriques des diodes
Schottky à base du matériau GaAs nitruré: Mesures et
Simulation*

Soutenu le **31/01/2017** devant la commission de jury :

M ^r CHELLALI Mohammed	Professeur (UDL SBA)	Président
M ^r AMRANI Mohammed	Professeur (UDL SBA)	Directeur de thèse
M ^r SAHNOUNE Mohamed	Professeur (U.MASCARA)	Examineur
M ^r ARBOUCHE Omar	Maître de conférences (A) (U.SAIDA)	Examineur
M ^{me} BENAMARA Zineb	Professeur (UDL SBA)	Membre Invité

Année universitaire 2016-2017

A mes parents

A mes frères et mes sœurs

A ma famille

A mes amis

Remerciements

Le travail présenté dans cette thèse a été réalisé au Laboratoire de Microélectronique Appliquée (LMA) de l'Université Djillali Liabès de Sidi Bel-Abbès.

Je tiens à remercier Monsieur Mohammed CHELLALI, Professeur à l'université Djillali Liabès de Sidi Bel-Abbès pour m'avoir fait l'honneur de participer à mon jury de thèse en tant que Président. Je le suis sincèrement reconnaissant pour toutes les remarques pertinentes et pour l'intérêt qu'il a porté à ce travail.

Je remercie vivement Monsieur Mohammed SAHNOUNE, Professeur à l'université de MASCARA, qui m'a fait un grand honneur en acceptant de juger le travail de cette thèse.

Mes vifs remerciements vont également à Monsieur Omar ARBOUCHE, Maître de conférences (A) à l'université de SAIDA, d'avoir accepté d'être membre du jury de cette thèse.

Je tiens à remercier Madame Zineb BENAMARA, Professeur à l'université Djillali Liabès de Sidi Bel-Abbès et directrice du laboratoire de Microélectronique Appliquée (LMA), d'avoir accepté d'être membre invité du jury. Ses orientations et discussions scientifiques m'ont été d'une aide considérable.

Je remercie sincèrement Monsieur Mohammed AMRANI, Professeur au Département d'Electronique, Faculté des Science de l'Ingénieur, Université Djillali Liabès de Sidi Bel-Abbès, de m'avoir guidé et éclairé tout au long de ce travail. Ses conseils et ses encouragements m'ont permis de mener à terme la rédaction de cette thèse.

Enfin, je tiens à remercier tous les membres du laboratoire de Micro-électronique Appliquée AMEL, tous mes amis (es) et tous mes collègues de travail.

Sommaire

Table des matières

Table des matières.....	1
Table des figures	8
Liste des tableaux.....	13
Introduction générale	15
 Chapitre I : Notions Fondamentales.....	19
 I .1 Introduction	20
I .2 Théorie de l'effet photoélectrique	20
I .2.1 Lois de l'effet photoélectrique	20
I .2.2 Insuccès de la théorie électromagnétique	21
I .2.3 Théorie corpusculaire de la lumière d'Einstein	22
I .2.3 L'effet Photoélectrique des Semi-conducteurs	23
I .3 Absorption et génération optiques.....	24
I .3.1 Processus d'absorption et coefficient d'absorption	24
I .3.2 Génération optique des porteurs	26
I .4 La recombinaison	27
I .4.1 Recombinaison directe	28
I .4.2 Recombinaison indirecte	29
I .4.3 Recombinaison Auger	32
I .4.4 Recombinaison en surface	33
I .5 Dynamique des porteurs dans un semiconducteur éclairé.....	33
I .5.1 Equations de continuité	33

I .5.2 Diffusion des porteurs.....	34
I .5.3 Retour à l'équilibre.....	35
I .5.4 Equation Poisson :	36
I .6 Conclusion	37
Références Bibliographiques :	38
 Chapitre II : Théorie du contact Schottky	40
 II .1 Introduction	41
II .2 Diagramme de bandes d'énergie	42
II .3 Polarisation de la structure Métal -Semiconducteur	45
II .4 Zone de charge d'espace	47
a) Champ électrique	47
b) Potentiel électrostatique :	48
c) Potentiel de diffusion :	48
d) La largeur de la zone de charge d'espace :	49
e) Charge totale de la zone de charge d'espace dans le semiconducteur :	49
f) Capacité d'un contact Métal -Semiconducteur :	49
II .5 Les états d'interface	51
II .6 Abaissement de la barrière : effet Schottky	51
a) Electron dans le vide devant un plan métallique	52
b) Abaissement de barrière ; effet Schottky	53
II .7 Mécanismes de transport dans Le contact Schottky	54
II .7.1 Émission au dessus de la barrière	56
II .7.1.1 L'émission thermoïonique	56
II .7.1.2 Théorie de diffusion	57
II .7.1.3 Théorie de l'émission-diffusion.....	58

I .7.2 Courant par effet tunnel	58
II .7.3 Courant de génération-recombinaison.....	60
Références Bibliographiques	61

Chapitre III : Propriétés des matériaux GaAs et GaN : structure et élaboration.....63

III .1 Introduction.....	64
III .2 Définition des semiconducteurs III-V à base de gallium.....	65
III .3 Propriétés générales du GaAs et du GaN.....	65
III.3.1 Propriétés générales du GaAs	65
III .3.2 Propriétés générales du GaN.....	67
III.3.2.1 Les propriétés électroniques	69
III.3.3 Epitaxie du GaN	70
III.3.3.1 substrats pour la croissance du GaN.....	70
III.3.3.2 Procédés de croissance du GaN.....	71
III.3.3.2.1 L'épitaxie en phase vapeur aux hydrures (HVPE)	72
III.3.3.2.2 L'épitaxie par jets moléculaires (MBE)	72
III.3.3.2.3 L'épitaxie en phase vapeur aux organométalliques (MOCVD)	73
III.4 Les techniques d'analyses	73
III.4.1 La spectroscopie des électrons Auger (A.E.S).....	73
III.4.2 La spectroscopie des photoélectrons X (XPS ou ESCA	74
III.5 Préparation des échantillons	76
III.5.1 Nettoyage des échantillons de GaAs:.....	76
III.5.2 Nitruration des substrats de GaAs.....	78
III.5.2.1 Modélisation des couches de GaN/GaAs	78

III.6 Les défauts ponctuels dans la couche de GaN	79
III.6.1 Lacunes d'azote et de gallium.....	79
III.6.2 Les atomes d'impuretés dans la couche de GaN.....	80
Références bibliographiques	81
 Chapitre IV :Modélisation et résolution numérique.....	83
 IV.1 Introduction :	84
IV .2 Modèle mathématique :	85
IV .2.1 Système d'équations:.....	85
IV.2.2 Densité de porteurs dans les bandes :	86
IV.2.2.1 Modélisation semi conducteur en régime non dégénéré :.....	86
IV .2.2.2 Modélisation semi conducteur en régime dégénéré :.....	87
IV.3 Résolution numérique.....	88
IV .3.1 Maillage	90
IV.3.2 Linéarisation	90
IV .3.3 Discrétisation du système par la méthode de Différences finies	91
IV .3.4 Solutions initiales.....	96
IV .3.5 Conditions aux limites	96
IV .3.6 Critère de convergence et précision de calcul.....	96
IV .3.7 Itérations	96
IV .4 Calcul de densité de courant :	97
IV.5 Conclusion	98
Références Bibliographiques :	99

Chapitre V : Résultats expérimentaux.....100

V.1 Introduction.....	101
V.2 Description du matériel de mesure.....	102
V.2.1 Banc de mesure I(V)	102
V.2.2 Principe et description des mesures C (V)	102
V.3. Présentation des échantillons d'études.....	103
V.4 résultats expérimentaux et interprétations.....	105
V.4.1 Caractérisation électrique.....	105
V.4.1.1 Dans l'obscurité.....	105
V.4.1.2 Sous s'éclairement.....	110
V.4.2.Caractérisation Capacité-Tension des structures Au/GaN/GaAs	114
V.5 Conclusion	120
Références Bibliographiques :	121

Chapitre VI : Résultats et simulation123

VI. 1 Introduction.....	124
VI. 2 Modèle de distribution des états pièges dans la bande interdite	124
VI. 2.1 Les états de pièges des queues de bandes	125
VI .2.1 Les états de pièges des liaisons pendantes	126
VI .3 Paramètre physique et géométriques	127
VI .3.1 Paramètres fixes	128
VI .3.2 Paramètres variables	129
VI .3.3 Le maillage utilisé	129
VI. 4 Résultats de simulation	130

VI. 4.1 Variation du potentiel électrostatique ϕ et des concentrations de porteurs mobiles n et p	130
VI .4.2 Simulation des Caractéristiques I-V d'une diode Schottky Au/GaN/GaAs .	134
VI .4.2.1 Caractéristiques I-V sous obscurité	134
VI .4.2.1.1 Effet des états pièges des queues de bandes :.....	134
VI .4.2.1.2 Effet de la densité totale N_{dbA} :	135
VI .4.2.1.3 Effet de la concentration en dopants N_d :	136
VI .4.2.2 Caractéristiques I-V sous éclairement :	139
VI .4.2.2.1 Paramètres optiques de la photogénération :.....	139
VI .4.2.2.2 Effet de la puissance :	139
VI .4.2.2.3 Effet de la longueur d'onde :.....	140
VI .4.2.2.4 Effet de travail de sortie	141
VI .4.3 Ajustement des courbes expérimentales et les courbes simulées :.....	142
VI .5 Conclusion	145
Références bibliographiques	146
 Conclusion générale	 147
Annexe A	151
Résumé	164

Table des figures

Chapitre I : Notions Fondamentales

Figure I.1: Éjection d'électrons d'une plaque métallique de sodium par effet photoélectrique sous la présence d'une source lumineuse.....	21
Figure I.2 : Création d'une paire électron-trou par photon.....	25
Figure I.3 : Diagramme des longueurs d'onde absorbées par les semi-conducteurs.....	26
Figure I.4 : Types de recombinaison	28
Figure. I.5 : Génération/recombinaison par l'intermédiaire d'un centre recombinant (a) centre de pièges (b).....	29
Figure I.4 : (a) Variation de la concentration des porteurs dans un élément de volume d'un semiconducteur et (b) profil de la diffusion des électrons à l'intérieur du semiconducteur	34

Chapitre II : Théorie du contact Schottky

Figure II.1 : Coupe schématique d'une diode métal semiconducteur. Pour minimiser l'effet de résistance série.	41
Figure II.2 : Coupe d'une diode métal-semiconducteur intégrée. Le contact du métal sur le zone N^+ constitue un contact ohmique.....	41
Figure II.3 : Diagramme d'énergie d'un métal et d'un semiconducteur de type n faiblement dopé avant contact et après contact. Après contact, si les niveaux du vide sont décalés, une courbure de bande apparaît.	42
Figure II.4: Contact métal-semiconducteur avec $q \phi_m = q \phi_s$	43
Figure II.5: Diagramme des bandes d'énergie d'un métal-semiconducteur type(n).....	44
avec $\phi_m > q \phi_s$ (a) : avant contact (b) : après contact.....	44

Figure II.6: Diagramme des bandes d'énergie d'un métal-semiconducteur type(n) avec $\phi_m < \phi_s$	45
Figure II.7: Contact métal-semiconducteur (n) avec $\phi_m > \phi_s$ sous polarisation (a) Polarisation directe. (b) Polarisation inverse.	46
Figure II.8: Contact métal-semiconducteur (n) avec $\phi_m < \phi_s$ sous polarisation (a) Polarisation directe. (b) Polarisation inverse.	46
Figure II.9 : Variation du carré de l'inverse de la capacité en fonction de la tension. La pente de la courbe permet de déterminer la valeur de la concentration de dopant et la hauteur de barrière à l'équilibre thermodynamique.....	50
Figure II.10: Contact métal-semiconducteur avec les états d'interface.....	51
Figure II.11: Electron devant un plan métallique. F est la force coulombienne.....	52
Figure II.12: Variation de l'énergie potentielle de l'électron devant un plan métallique et en présence d'un champ électrique interne (ou appliqué) constant.....	53
Figure II.13 : Variation de la hauteur de la barrière d'énergie due à la présence du plan conducteur. L'abaissement peut rester faible devant la barrière elle-même.....	54
Figure II.14: Mécanismes de transport à travers d'une interface métal/semi-conducteur.	55

Chapitre III : Propriétés des matériaux GaAs et GaN : structure et élaboration

Figure III .1: Réseau cristallin du GaAs (zinc de blende).....	66
Figure III.2: Comparaison de la structure de bande du Si et du GaAs	66
Figure III.3: Structure cristalline blende de zinc du GaN.....	68
Figure III.4: Structure cristalline hexagonale du GaN.....	68
Figure III.5: Schéma de la structure wurzite à face Ga et à face N.	70
Figure III.6: Schéma illustrant la croissance épitaxiale	72
Figure III.6: Principe de l'émission Auger.	74
Figure III.7 : Diagramme énergétique des photoélectrons mesurés en XPS.	76

Figure III.7 : Diagramme énergétique des photoélectrons mesurés en XPS.....	76
Figure III.8: Processus de nettoyage chimique d'une surface de substrat de GaAs.....	77
Figure III.9: Différentes hypothèses de représentation de la composition surfacique du GaAs après le nettoyage ionique	78
Figure III.10: Schématisation des différentes étapes du processus nitruration pour la formation des monocouches de GaN /GaAs.	79

Chapitre IV : Modélisation et résolution numérique

Figure IV.1: Organigramme de résolution du système d'équations différentielles.	81
Figure IV.2: La nomenclature adoptée pour les différences finies	91

Chapitre V : Résultats expérimentaux

Figure V.1: Représentation du banc de mesure HP 4155 B pour la caractérisation courant-tension.	102
Figure V.2: Principe de la mesure capacité-tension en haute fréquence.....	103
Figure V.3: Caractéristiques courant-tension expérimentales des échantillons à l'échelle semi-logarithmique.....	105
Figure V.4: Représentation des fonctions G et H. pour les échantillons A1 (a), A2 (b), A3 (c), A4 (d), A5 (E).	109
Figure V.5: Caractéristiques courant-tension à l'obscurité et sous illumination de l'échantillon A5 à l'échelle semi-logarithmique.	110
Figure V.6: Représentation des fonctions G(I) et H(I) pour l'échantillon A5 sous illumination.	111
Figure V.7: Caractéristiques courant-tension à l'obscurité et sous illumination de l'échantillon A2 à l'échelle semi-logarithmique.	112
Figure V.8: le courant et la puissance de la diode A2 en fonction de tension	113

Figure V.9 : Caractéristique $C(V)$ en haute fréquence	114
Figure V.10: Caractéristiques $1/C^2(V)$	115
Figure V.11: Profil de dopage correspondant aux caractéristiques $C(V)$	116
Figure V.12: Distribution de la densité d'état dans la bande interdite des échantillons étudiés.	119

Chapitre VI : Résultats et simulation

Figure VI.1: Représentation schématique de la distribution des états pièges permis dans la bande interdite.	125
Figure VI.2: Maillage à pas variable de la diode Au/GaAs pris dans la simulation numérique à une dimension.	130
Figure VI.3 : Distribution de ϕ , n et p suivant la direction X (a) et le diagramme de bande énergétique correspondants à une diode Schottky Au/GaAs à l'équilibre thermique (b).	131
Figure VI.4: Variation du potentiel électrostatique (a) et le champ électrique (b) d'une diode Schottky Au/GaAs en fonction de la tension de polarisation.....	131
Figure IV.5: Diagrammes de bandes énergétiques d'une diode Schottky Au/GaAs en direct (a) et en inverse (b).....	133
Figure VI.6: Distribution des concentrations des porteurs $n(x)$ et $p(x)$ dans la direction X d'une diode Schottky Au/GaAs en direct (a) et en inverse (b).	133
Figure VI.7: Effet de N_{ct0} de la densité de la queue de bande de conduction.	134
Figure VI.8: Effet de la densité totale N_{db} sur la caractéristique $J(V)$	136
Figure VI.9: Effet de la concentration en dopants N_d sur la caractéristique $J(V)$ (a) Distribution de Forme U, (b) Distribution de Forme W.	137
Figure VI.10: La distribution des pièges dans la bande interdite (a) Distribution de Forme U, (b) Distribution de Forme W.....	138
Figure VI.11: Effet de la puissance d'éclairement sur la caractéristique $J(V)$	140
Figure VI.12: variations de I_{SC} et V_{OC} en fonction de la puissance d'éclairement (P).....	141

Figure VI.13: Effet de la longueur d'onde sur la caractéristique $J(V)$	141
Figure VI.14: Simulation numérique de l'impact de la variation du travail de sortie de l'or sur la caractéristique $J(V)$	142
Figure VI.15: Caractéristique expérimentale et caractéristique simulée (de la distribution en forme de U) de la diode Schottky Au/GaN/GaAs à l'obscurité (a) et sous illumination (b). ..	144

Liste des tableaux

Chapitre I : Notions Fondamentales

Tableau I.1 : Valeurs des paramètres du modèle de Shockley-Read du taux de recombinaison.....	32
Tableau I.2 : Valeurs des coefficients Auger.....	32

Chapitre III : Propriétés des matériaux GaAs et GaN : structure et élaboration

Tableau III.1: Extrait de la classification périodique des éléments.	65
Tableau III.2 : Liste de certaines propriétés structurales et électriques du GaAs	66
Tableau III.3: Relevé des valeurs des paramètres de maille du h-GaN à 300°k [9].	68
Tableau III.4: Propriétés électroniques du GaN comparées à d'autres matériaux utilisés.	69
Tableau III.5: Paramètres de maille et coefficients de dilatation thermique des substrats les plus employés pour la croissance de GaN. Les coefficients de dilatation thermique sont donnés autour de 800°C.	71

Chapitre V : Résultats expérimentaux

Tableau V.1: Les étapes technologiques des échantillons étudiés.....	104
Tableau V.2 : Les paramètres électriques obtenus à partir des courbes I-V.....	109
Tableau V.4 : Les paramètres électriques obtenus à l'obscurité et sous illumination de l'échantillon A5.	111
Tableau V.5: Les paramètres calculés des différentes structures Au/GaN/GaAs à partir des caractéristiques C(V).	117

Chapitre VI : Résultats et simulation

Tableau VI.1: Valeurs des paramètres des matériaux GaN et GaAs à $T=300^{\circ}\text{K}$	128
Tableau VI.2: Les paramètres physiques et technologiques et leur gamme de variation utilisée dans la simulation	129
Tableau VI. 3 : Tableau regroupant les paramètres utilisés sous éclairage.....	139
Tableau VI. 4 : Tableau regroupant les paramètres utilisés dans l'ajustement	143

Introduction générale

La conception de dispositifs électroniques de plus en plus performants a nécessité l'emploi de semi-conducteurs autres que le silicium. En effet, la technologie du silicium, bien que parfaitement maîtrisée, est limitée par les propriétés intrinsèques de celui-ci (faible mobilité des porteurs, structure de bande à transition indirecte, faible largeur de la bande interdite, ...). A l'inverse les semi-conducteurs III-V, qui ont des propriétés physiques remarquables, apparaissent comme parfaitement adaptés dans les applications hyperfréquences, pour l'électronique de puissance, mais également dans le domaine de l'optoélectronique (diodes photoluminescentes, diodes laser).

Cependant, bien que possédant toutes ces qualités, de nombreuses étapes sont nécessaires pour la fabrication de composants de plus en plus performants et de plus en plus petits à base de semiconducteurs III-V. Notamment les surfaces et les interfaces sont des points sensibles pouvant compromettre la qualité des dispositifs fabriqués.

La nitruration de semi-conducteurs III/V de type GaAs permet de fabriquer des structures GaN/GaAs. Ces semi-conducteurs sont aujourd'hui très prometteurs dans les domaines de la micro-électronique et de l'optoélectronique.

Plusieurs techniques ont été développées pour la croissance de nitrure de gallium. Le processus de nitruration de GaAs est intensivement étudié pendant les dernières années, comme première étape du dépôt des monocouches de GaN ou une méthode pour la stabilisation et la passivation d'une surface de GaAs. Cette technique de nitruration est réalisée en exposant le substrat de GaAs à un flux d'azote actif créée par une source à décharge haute tension dans un bâti ultravide. Nous obtenons ainsi des hétéro-structures à différentes épaisseurs de nano- films de GaN sur substrat de GaAs. Les propriétés physiques de ces structures ont été étudiées à l'aide de spectroscopie, des électrons Auger (AES) et des photoélectrons X (XPS). Les analyses révèlent la tenue intérieure de nos structures. Enfin la grande partie du travail présenté dans cette thèse a porté sur la caractérisation électrique $I(V)$ et $C(V)$ des hétérostructures GaN/GaAs obtenues à l'obscurité et sous éclairage.

Ce travail de thèse a pour objectif principal l'étude des caractéristiques électrique et photoélectrique des structures Au/GaN/GaAs, la caractérisation électrique de ces diodes à l'obscurité et sous éclairage a été renforcée par une simulation numérique. Pour ce faire,

nous avons développé un programme de résolution numérique des équations de transport (équation de Poisson et les deux équations de continuité des électrons et des trous) qui tient compte de certaines propriétés caractérisant notre structure. La méthode de discrétisation utilisée est celle des différences finies avec l'approximation de Scharfetter-Gummel.

Afin de présenter l'essentiel de notre travail, nous avons donné à la thèse, la structure suivante :

Le premier chapitre rappelle les relations fondamentales concernant le transport des charges électriques dans les matériaux semiconducteurs éclairés, associées aux mécanismes de recombinaison et de génération de porteurs à la base des techniques de caractérisation utilisées dans ce mémoire.

Le deuxième chapitre est consacré à une étude théorique du contact métal / semiconducteur (diodes Schottky).

Dans un troisième chapitre, nous exposons les caractéristiques structurales du GaAs et du GaN, matériaux primordiaux de cette étude, après avoir décrit certaines propriétés générales des semiconducteurs. Ensuite, nous présenterons les méthodes employées pour la croissance des films de GaN sur des substrats de GaAs, ensuite, les étapes technologiques utilisées pour la nitruration du GaN en passant par le nettoyage chimique et ionique jusqu'à la nitruration. Pour les équipements utilisés pour la fabrication de nos structures et techniques de préparation du vide, nous allons les décrire dans une annexe.

La modélisation numérique de notre diode Schottky est présentée dans le quatrième chapitre avec le formalisme mathématique des équations nécessaires pour la simulation caractéristique I-V. Les équations qui en découlent sont des équations différentielles partielles et non linéaires. La méthode numérique choisie est basée sur une méthode itérative proposée par Gummel. Parmi les méthodes de discrétisation, nous pouvons citer celle des différences finies qui est la plus légère du point de vue formalisme mathématique ainsi que la facilité de sa mise en œuvre informatique dans le cadre d'un langage de programmation.

Dans le cinquième chapitre, nous allons étudier expérimentalement le comportement électrique et photoélectrique des structures Schottky à base de GaAs nitruré. L'analyse des caractéristiques électriques de ces diodes va permettre d'identifier les principaux paramètres

mis en jeu dans le transport de charges, et de les corrélés aux défauts profonds présents dans le GaAs.

Dans le dernier chapitre nous présenterons les résultats, issus de notre programme de simulation développé. Nous débiterons ces résultats par le calcul des grandeurs indispensables pour le calcul de la caractéristique électrique I-V à l'obscurité et sous éclairage, tels que la distribution du potentiel électrostatique $\phi(x)$, les porteurs mobiles $n(x)$ et $p(x)$, les pseudo-niveaux de Fermi E_{FN} et E_{FP} ... etc. Nous étudierons ensuite l'effet des paramètres pouvant influencer sur les caractéristiques électrique et photoélectrique d'une diode Schottky à base de GaAs nitruré tels que, le dopage de la couche GaAs, l'épaisseur de la couche GaN, la densité et la distribution des états pièges à l'intérieur de la bande interdite, le travail de sortie de l'Or, la puissance et la longueur d'onde utilisées. Afin de valider les résultats obtenus, nous allons faire une comparaison de la simulation avec des mesures expérimentales.

Enfin, ce travail se terminera par une conclusion générale en mettant en valeur les principaux résultats obtenus.

Chapitre I

Notions Fondamentales

I.1 Introduction

Ce chapitre évoque les bases théoriques des phénomènes physiques accompagnant l'interaction de la lumière (ou laser à faible intensité) avec les semi-conducteurs.

On évoquera donc l'effet photoélectrique les phénomènes d'absorption et de génération optiques, les mécanismes de recombinaison et le transport des porteurs de charge libres.

I.2 Théorie de l'effet photoélectrique

En 1886, le physicien allemand Heinrich Rudolf Hertz réalisa expérimentalement qu'un matériau métallique exposé à la lumière pouvait émettre des particules chargées négativement (qui porteront le nom « d'électron »). Cette découverte fut baptisée au nom de l'effet photoélectrique. Malheureusement, Hertz ne fut pas en mesure d'expliquer théoriquement le phénomène, car certaines caractéristiques de cet effet ne fonctionnaient pas avec la théorie classique de l'électromagnétisme de l'époque [1].

I.2.1 Lois de l'effet photoélectrique

On a donné le nom d'effet photoélectrique au phénomène d'extraction d'électrons de la matière sous l'effet de la lumière. Il obéit notamment aux lois suivantes :

- Tout se passe comme si l'énergie contenue dans la lumière était groupée en quanta indivisibles, d'autant plus petits que la longueur d'onde est petite.
- L'énergie cinétique des photoélectrons émis est linéairement dépendante de la fréquence de la radiation incidente et indépendante de l'intensité de cette radiation.
- Il y a une fréquence limite de la radiation incidente nommée "fréquence de seuil photoélectrique" sous lequel l'effet photoélectrique ne se produit plus; cette fréquence est dépendante de la nature de la surface irradiée.
- L'effet photoélectrique est pratiquement instantané (moins de 10^{-9} s).

I .2.2 Insuccès de la théorie électromagnétique

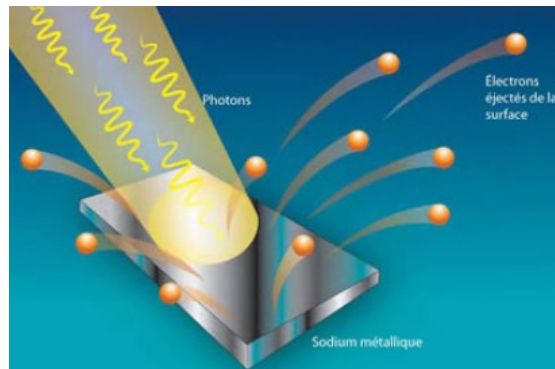


Figure I.1 : Éjection d'électrons d'une plaque métallique de sodium par effet photoélectrique sous la présence d'une source lumineuse.

La validité de la théorie classique d'une structure continue de la lumière est alors mise en doute. Elle suggérerait qu'il devrait toujours être possible, quelle que soit la longueur d'onde, de fournir une énergie suffisante pour arracher des électrons à la cathode métallique en employant un faisceau lumineux suffisamment intense.

Elle stipule en effet que :

1. Etant donné que l'énergie transportée par l'onde est proportionnelle à son intensité, l'émission d'électrons devrait être observée pour toute gamme de fréquences pourvu que l'intensité soit suffisante.

➤ contradiction avec l'observation de l'existence d'un seuil photoélectrique.

2. Si l'intensité du rayon lumineux est faible, il ne suffirait que d'attendre le temps nécessaire pour que ce peu d'énergie transmise à un électron s'accumule, et atteigne une valeur suffisante pour qu'il soit extrait du métal.

➤ contradiction avec l'observation d'un effet quasi instantané.

3. L'énergie absorbée étant croissante, les électrons recevant une plus grande quantité d'énergie devraient être émis avec une vitesse également croissante.

➤ contradiction avec l'invariance de la vitesse maximum par rapport à l'intensité.

4. L'énergie de l'onde lumineuse ne dépend pas de sa longueur d'onde.

➤ contradiction avec la variation de la vitesse maximum avec λ .

Cette théorie classique devait donc être corrigée et c'est Einstein qui en proposa une nouvelle.

I.2.3 Théorie corpusculaire de la lumière d'Einstein

EINSTEIN a expliqué pour la première fois le phénomène photo-électrique en 1905 mais son hypothèse a été acceptée seulement dès 1916, quand MILLIKAN l'a confirmée par expérience. EINSTEIN a postulé, utilisant l'hypothèse de PLANCK, qu'un faisceau de lumière se compose de petites quantités d'énergie nommées *quanta de lumière* ou *photons*. Il a considéré que la radiation doit avoir ainsi un caractère corpusculaire et de cette façon la lumière se comporte comme un ensemble de corpuscules-les photons.

L'énergie E d'un photon est proportionnelle avec sa fréquence ν ou est égale à sa fréquence multipliée avec une constante, c'est-à-dire:

$$E = h\nu \quad (I.1)$$

où h est la constante de Planck ($h=6,63 \times 10^{-34}$ Js) et ν est la fréquence des radiations.

Un photon est complètement absorbé pour chaque électron quittant le métal. Cependant, l'électron lié au métal au moment de « l'impact » est soumis à des forces intermoléculaires et il faudra donc une énergie plus grande que l'énergie de liaison entre l'électron et l'atome. Cette énergie est appelée travail d'extraction W . L'énergie cinétique E_k de l'électron s'échappant du métal s'écrit

$$E_k = h\nu - W \quad (I.2)$$

C'est l'équation qu'Einstein proposa en 1905 pour rendre compte de l'effet photoélectrique.

On interprète le travail d'extraction W de la manière suivante :

Lorsqu'un électron du métal absorbe l'énergie d'un photon, il en perd une partie à cause de plusieurs phénomènes. Les atomes situés plus en profondeur dans le métal subissent plusieurs collisions avec les atomes du métal avant d'en sortir. Mais même un électron ayant la chance de ne pas rencontrer d'atome doit aussi vaincre les forces électrostatiques qui le lient au métal ; Lorsqu'il quitte l'atome, ce dernier donne naissance un champ électrique qui tente de ramener l'électron au métal. Comme tous champs électriques, il résulte d'une différence de potentiel. On peut ainsi définir W comme étant le travail nécessaire à l'électron pour vaincre la barrière de potentiel V entre le métal et un point directement voisin. On écrit alors

$$W = eV \quad (I.3)$$

où V est le potentiel d'extraction qui varie d'un métal à l'autre.

L'équation d'Einstein explique donc les phénomènes inexpliqués jusqu'alors par la physique classique décrits à la section I.2.2 :

- existence d'un seuil photoélectrique :

$$\begin{aligned} h\nu &\geq W \Rightarrow \nu \geq \frac{W}{h} = \frac{eV}{h} \\ \Rightarrow \nu_0 &= \frac{eV}{h}; \end{aligned} \quad (I.4)$$

- effet immédiat : toute l'énergie lumineuse est concentrée dans les photons ;
- invariance de la vitesse :

$$\begin{aligned} \frac{1}{2}mv_m^2 &= h\nu - W = h(\nu - \nu_0) \\ \Rightarrow v_m &= \sqrt{\frac{2h(\nu - \nu_0)}{m}}; \end{aligned} \quad (I.5)$$

- la vitesse maximale des électrons éjectés augmente quand la fréquence augmente, mais ne dépend pas de l'intensité lumineuse.

I 2.3 L'effet Photoélectrique des Semi-conducteurs

L'effet photoélectrique des métaux a été décrit théoriquement comme un effet de surface. Ce n'est que récemment qu'on a été conduit à l'introduction d'une nouvelle théorie basée sur l'idée d'un effet de volume [1, 2]. L'effet photoélectrique des semiconducteurs par contre fut toujours considéré comme un effet de volume, surtout parce que la distribution spectrale de l'efficacité photo-électrique reflète celle de l'absorption optique qui est un effet de volume, mais électrique correspondant à une absorption aux centres d'impuretés ou de déformation du réseau ou encore à une absorption avec formation d'excitons. Mais celui-ci sera une perturbation de l'effet photoélectrique fondamental.

I.3 Absorption et génération optiques

I.3.1 Processus d'absorption et coefficient d'absorption

L'absorption de la lumière par un semiconducteur est un processus quantique où des électrons sont amenés à des niveaux d'énergie plus élevés. Cette augmentation d'électrons dans la bande de conduction correspond à un accroissement de la densité de trous dans la bande de valence, on parle dans ce cas de la création de paires électron-trou qui constitue un plasma semiconducteur.

En présence d'un champ électrique E , les porteurs de charges excédentaires vont participer au mécanisme de conduction. Cependant, il existe une compétition entre l'augmentation de la conductivité et l'augmentation de la résistivité. L'augmentation de la résistivité est due à la diffusion des porteurs dans les régions neutres ou vers les états d'impuretés. De plus, les électrons qui se trouvent dans la bande de conduction se recombinent avec les trous de la bande de valence par différents processus.

Parmi les phénomènes donnant lieu à l'absorption de photons dans les semi-conducteurs, Citons :

1. l'absorption fondamentale. Il s'agit de transitions d'électrons depuis des états de la bande de valence (ou plus profondes) vers des états de la bande de conduction (ou plus élevées), on parle de transitions "interbandes". La transition de ce type pour laquelle l'énergie est la plus faible donne lieu au "seuil fondamental d'absorption" ;
2. l'absorption par les porteurs libres. Il s'agit d'un processus dans lequel le photon est absorbé par un électron dans la bande de conduction ou un trou dans la bande de valence, ce porteur libre augmentant alors son énergie cinétique. Pour ce phénomène, on parle de transition "intrabande" puisque le porteur effectue une transition entre deux états appartenant à une même bande ;
3. l'absorption par les phonons. Un photon est absorbé par le cristal et son énergie est convertie en énergie de vibration des atomes du cristal, en d'autres termes, il y a création d'un phonon ;
4. l'absorption par les excitons. Les excitons sont des états liés d'un électron et d'un trou, ils se manifestent par un spectre hydrogénoïde apparaissant à des énergies juste inférieures au seuil fondamental.

Ces différents processus sont conditionnés par les règles qui régissent les chocs élastiques entre deux particules, ici le photon et l'électron, la conservation de l'énergie et la conservation de la quantité de mouvement p , c'est-à-dire, compte tenu ($P = \hbar K$), du vecteur d'onde k . Si on repère par les indices i et f , les états initial et final de l'électron, et par l'indice p l'état du photon, les règles de conservation s'écrivent

$$\begin{aligned} E_f - E_i &= \pm E_p \\ K_f - K_i &= \pm K_p \end{aligned} \quad (I.6)$$

où le signe $+$ correspond à l'absorption du photon et le signe $-$ à l'émission.

➤ **Condition et coefficient d'absorption**

Un photon de fréquence ν ayant une énergie $h\nu$ au minimum égale à E_G , (figure I.2), peut en cédant cette énergie faire passer un électron de la bande de valence vers la bande de conduction :

$$h\nu = h \frac{c}{\lambda} \geq E_G \quad (I.7)$$

La longueur d'onde maximale susceptible de contribuer à la création de porteurs s'obtient avec l'équation (I.8) :

$$\lambda \leq \frac{hc}{E_G} \approx \frac{1,24}{E_G} \quad (I.8)$$

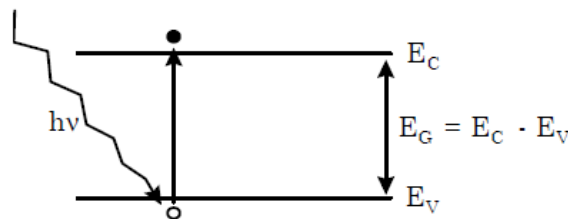


Figure I.2 : Création d'une paire électron-trou par photon.

La figure (I.3) indique une partie des semi-conducteurs pouvant être utilisés selon la longueur d'onde à détecter.

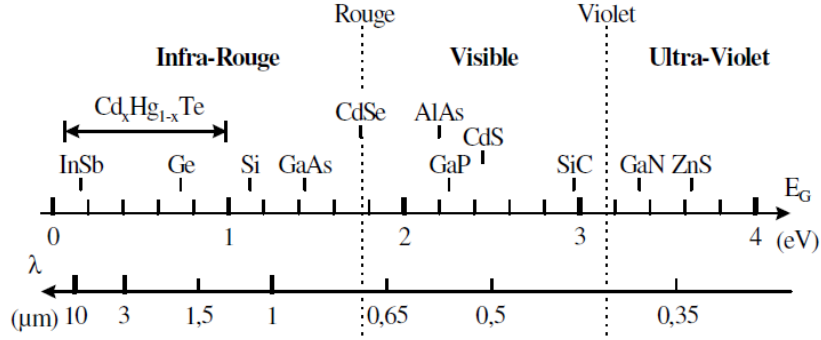


Figure I.3 : Diagramme des longueurs d'onde absorbées par les semi-conducteurs[3].

L'absorption de l'onde incidente dans le semi-conducteur se fait selon la loi de BEER LAMBERT :

$$I(x) = I_0 \exp(-\alpha x) \quad \Leftrightarrow \quad \phi(x) = \phi_0 \exp(-\alpha x) \quad (I.9)$$

où $I(x)$ est l'intensité lumineuse (et $\phi(x)$ le flux de photons) à la distance x de la surface du matériau, I_0 et ϕ_0 sont l'intensité et le flux incidents (en $x = 0$) et α le coefficient d'absorption (m^{-1}). $1/\alpha$ est la longueur moyenne de pénétration et, si l'énergie des photons est supérieure à E_G , α est de l'ordre de 10^5 à $10^8 m^{-1}$ ($1/\alpha$ de 10 à 0.01 μm).

α peut être défini par :

$$\text{Probabilité (absorption d'un photon sur la distance } dx) = \alpha dx = (-d\phi) / \phi$$

Le nombre de porteurs créés sur une distance dx s'écrit (en supposant que chaque photon absorbé crée une paire ; on dit « rendement quantique » supposé égal à 1) :

$$\begin{aligned} g_{n,p}(x)dx &= \phi(x) - \phi(x + dx) = \phi_0 [\exp(-\alpha x) - \exp(-\alpha (x + dx))] \\ &= \phi_0 [\exp(-\alpha x) - (1 - \alpha dx) \exp(-\alpha x)] \\ &= \phi_0 \alpha \exp(-\alpha x) = \alpha \phi(x) dx \end{aligned} \quad (I.10)$$

d'où l'expression du taux de création de porteurs :

$$g_{n,p}(x) = \phi_0 \alpha \exp(-\alpha x) = \alpha \phi(x)$$

I.3.2 Génération optique des porteurs

Les photons d'énergie supérieure au gap du matériau entrant dans un semiconducteur génèrent des paires électron-trous (on suppose implicitement la création d'une seule paire par photon). L'expression du taux de génération g ($cm^{-3}.s^{-1}$) dépend de la forme du faisceau et de

la surface éclairée, mais son intégrale sur tout le volume de génération donne le nombre total des photons absorbés par seconde.

Cas (1) : Dans le cas de génération homogène, par un éclairage monochromatique, sur toute l'épaisseur W d'un échantillon :

$$g = \frac{\phi_0 f_{abc}}{W} \quad (I.11)$$

ϕ_0 (*photons. $cm^{-2}.s^{-1}$*) Flux des photons incidents,

f_{abc} : fraction des photons absorbés par le semiconducteur.

Cas (2) : En éclairant une surface S d'un semiconducteur d'une façon homogène en surface mais pas en profondeur, le taux de génération à une dimension s'écrit [4] :

$$g(z) = \alpha \frac{I_0}{S} f_{abc} \exp(-\alpha z) \quad (I.12)$$

I_0 (*photons/s*) : intensité incidente.

Dans le cas où les photons incidents ne pénètrent pas jusqu'à la surface arrière de l'échantillon, on peut écrire :

$$f_{abc} = 1 - R$$

où R est la réflectivité à la longueur d'onde d'excitation.

Cas (3) : Dans le cas d'un faisceau Gaussien de rayon σ , le taux de génération à trois dimensions, s'écrit sous la forme [5] :

$$g(r, z) = I_0(1 - R) \frac{\alpha}{2\pi\sigma^2} \exp(-\alpha z) \cdot \exp\left(-\frac{r^2}{2\sigma^2}\right) \quad (I.13)$$

Avec $r = \sqrt{x^2 + y^2}$ la distance par rapport au centre de faisceau.

I.4 La recombinaison

Les électrons qui se déplacent librement à travers le cristal ont tendance à se recombiner avec les trous. De cette façon, les *EHP* (*paire électron-trou*) disparaissent. Ce phénomène est appelé recombinaison et sa vitesse est proportionnelle au nombre de trous et d'électrons libres existants. Lorsque la recombinaison se produit, l'électron et le trou cessent d'être des porteurs libres. Au cours de ce phénomène, l'électron transite dans un état d'énergie inférieure. Pour cela, il doit libérer un quantum d'énergie égale à la différence de son origine et son état final [6]. Cette énergie peut être classée en trois façons: radiative où l'émission d'un

photon (lumière), non radiative où l'émission d'un phonon (chaleur), et Auger où un transfert d'énergie cinétique à un autre électron libre ou trou [7].

La recombinaison peut être caractérisée comme suit:

- ✓ Recombinaison directe (de bande à bande)
- ✓ Recombinaison indirect (de bande aux impuretés, avec l'aide de pièges)
- ✓ Recombinaison Auger
- ✓ Recombinaison de surface

Ces processus sont présentés dans la figure I-4.

A chaque mécanisme de recombinaison des porteurs de taux R est associée une durée de vie par la relation [8] :

$$R = \frac{\Delta n}{\tau} \quad (\text{I. 14})$$

Avec Δn : concentration de porteurs en excès. La neutralité électrique du matériau étant conservée, on a : $\Delta n = \Delta p$.

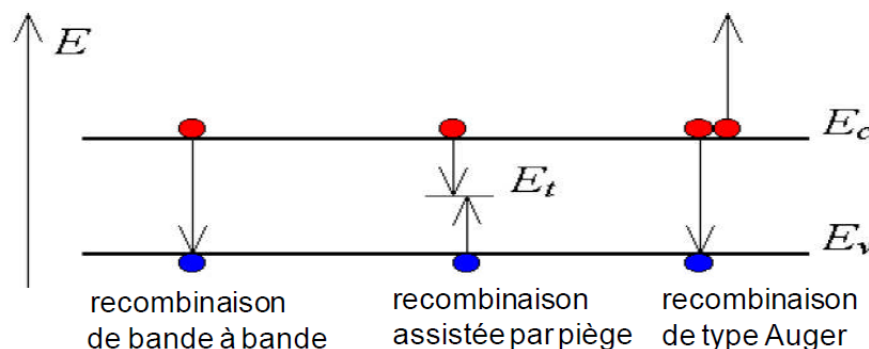


Figure I.4 : Types de recombinaison [7].

I.4.1 Recombinaison directe

La recombinaison directe est quand un électron dans la bande de conduction se combine avec un trou dans la bande de valence, sans variation d'énergie cinétique de l'électron. Ce type de recombinaison se produit dans les matériaux directs tels que le GaAs. Étant donné qu'aucune quantité de mouvement n'est nécessaire le taux de recombinaison est le plus élevé.

La durée de vie d'un porteur est l'inverse de son taux de recombinaison, par conséquent, cette durée de vie est très courte [7].

I.4.2 Recombinaison indirecte

Lorsqu'il y a des défauts dans le réseau cristallin ou la présence d'impuretés dans le matériau, le processus de génération et recombinaison des porteurs peut être indirect. Ce dernier fait intervenir des niveaux de pièges d'énergie E_t situés entre la bande de conduction et de valence. Durant cette transition un phonon est libéré. La théorie de ce processus a été décrite par Shockley-Read et Hall [8,9]. Ainsi, ce mécanisme est souvent appelé recombinaison Shockley-Read-Hall (SRH) qui est défini par quatre processus

- ✓ Capture d'électron : un électron de la bande de conduction est capté par un centre vide de l'impureté qui devient alors chargé;
- ✓ Capture de trou : un électron de l'impureté chargé se recombine avec un trou de la bande de valence. Le centre devient inoccupé;
- ✓ Émission de trou : un électron de la bande de valence est piégé par le défaut laissant un trou dans la bande de valence;
- ✓ Émission d'électron : un électron du piège occupé transite vers la bande de conduction laissant le niveau inoccupé.

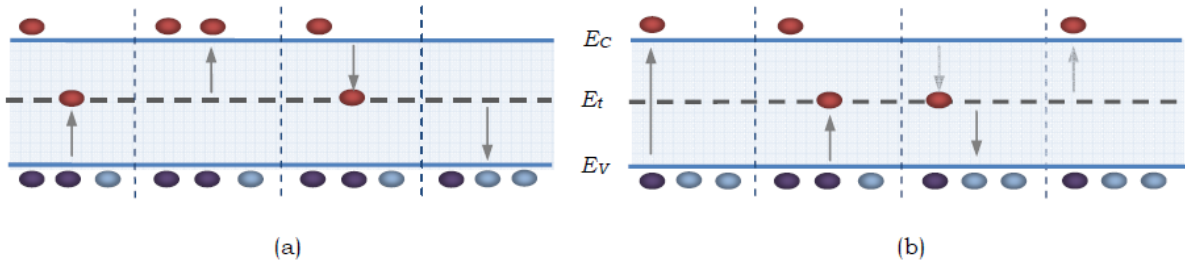


Figure. I.5 : Génération/recombinaison par l'intermédiaire d'un centre recombinant (a)
Centre de pièges (b) [6]

Les centres de génération/recombinaison sont caractérisés par une densité N_t avec une probabilité d'occupation du niveau f_t (I.15). La densité des centres occupés est donnée par $N_t f_t$ et celle des centres vides par $N_t(1-f_t)$. Soient $C_{n,p}$ et $E_{m,n,p}$ les coefficients de capture et d'émission des électrons-trous par ces centres, respectivement. C_n est la probabilité par unité de temps qu'un électron de la bande de conduction soit capturé dans le cas où le piège est vide. C_p est la probabilité par unité de temps qu'un trou soit capturé dans le cas où le piège comporte un électron. Le coefficient de capture est donné par :

$$f_t = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E_t - E_F}{kT}\right)} \quad (\text{I. 15})$$

$$C_i = N_t \sigma_{ri} v_{th} \quad (i = n, p) \quad (I.16)$$

avec σ_{rn} la section efficace de capture d'un électron libre par un centre vide, σ_{rp} la section efficace de capture d'un trou libre par un centre occupé et v_{th} la vitesse thermique des porteurs. Les taux de recombinaison des électrons et trous sont donnés respectivement par les expressions suivantes :

$$r_n = C_n n(1 - f_t) - C_n f_t n_1 \quad (I.17)$$

$$r_p = C_p p f_t - C_p (1 - f_t) p_1 \quad (I.18)$$

avec

$$n_1 = n_i \exp\left(\frac{E_t - E_F}{kT}\right) \quad (I.19)$$

$$p_1 = p_i \exp\left(\frac{E_F - E_t}{kT}\right) \quad (I.20)$$

Etant donné qu'un électron se recombine avec un trou de sorte que $r_n = r_p = r_{SRH}$, la probabilité d'occupation du centre de recombinaison s'écrit

$$f_t = \frac{C_n n + C_p p_1}{C_n (n + n_1) + C_p (p + p_1)} \quad (I.21)$$

Le taux de recombinaison indirect r_{SRH} s'exprime finalement par

$$r_{SRH} = \frac{pn - n_1 p_1}{\tau_{p0}(n + n_1) + \tau_{n0}(p + p_1)} \quad (I.22)$$

avec

$$\tau_{n0} = \frac{1}{C_n} \quad (I.23)$$

$$\tau_{p0} = \frac{1}{C_p} \quad (I.24)$$

avec τ_{n0} et τ_{p0} représentent la durée de vie des électrons et trous minoritaires, respectivement. Ces durées de vie ne dépendent pas de l'excitation optique mais sont en fonction de la section efficace de capture propre à chaque type de porteurs et de la densité des centres recombinants. Dans l'équation (I.22), le produit $n_1 p_1$ est égal à n_i^2 (n_i est la concentration intrinsèque des porteurs) et ce paramètre est indépendant du niveau de pièges E_t . On peut analyser trois cas :

- $E_t < E_F$, alors $n_l > n_i > p_l$;
- $E_t > E_F$, alors $n_l < n_i < p_l$;
- $E_t \approx E_F$, alors $n_l = p_l = n_i$.

Pour ce dernier cas, lorsque le niveau d'énergie des centres E_t se situe près du milieu du gap du semiconducteur le taux de recombinaison est à son maximum. En restant dans le cas le plus général pour lequel le niveau E_t est un centre de génération/recombinaison, le coefficient de capture des électrons et celui des trous sont égaux $C_n = C_p = C$. L'expression du taux de recombinaison, en posant $\tau_m = \frac{1}{C}$, se simplifie en

$$r_{SRH} = \frac{1}{\tau_m} \frac{pn - n_i^2}{2n_i + p + n} \quad (I. 25)$$

Le taux de recombinaison peut être positif ou négatif suivant le terme $pn - n_i^2$. Dans le cas où il est négatif, les densités de porteurs après l'arrêt de l'excitation sont inférieures aux densités d'équilibre. Ce taux de recombinaison correspond à une génération thermique des porteurs. Dans le cas où il s'agit d'un centre de piège, les coefficients de capture sont par conséquent très différents. Pour un centre qui joue le rôle de piège à électrons, alors $C_n \gg C_p$ et l'expression (I.21) de la probabilité d'occupation des centres devient

$$f_t = \frac{C_n n}{C_n(n + n_1)} \quad (I. 26)$$

Les densités des électrons et trous piégés sont données respectivement par

$$n_t = N_t \frac{n}{n + n_1} \quad (I. 27)$$

$$p_t = N_t \frac{n_1}{n + n_1} \quad (I. 28)$$

L'état de charge dépend du rapport n_l/n et donc de la position du niveau de Fermi par rapport au niveau du centre. Pour un piège à trous, l'inverse se produit et la réciproque est facilement établie.

Les densités de pièges, leur niveau d'énergie et les sections efficaces des électrons et trous dans le silicium, le germanium et l'arséniure de gallium sont regroupées dans le tableau ci dessous [10] :

semiconducteur	$N_t \text{ (cm}^{-3}\text{)}$	$E_t \text{ (eV)}$	$\sigma_{r,n} \text{ (m}^2\text{)}$	$\sigma_{r,p} \text{ (m}^2\text{)}$
Si, Ge	10^{13}	0	10^{-15}	10^{-15}
GaAs	10^{16}	0.4	10^{-14}	10^{-13}

Tableau I.1 : Valeurs des paramètres du modèle de Shockley-Read du taux de recombinaison

I.4.3 Recombinaison Auger

Nous avons une recombinaison de type Auger, lorsque l'énergie de l'électron qui se recombine dans la bande de valence est transférée sous forme d'énergie cinétique à un autre électron libre. L'énergie transférée est libérée ensuite sous forme de phonons. Ce mécanisme est prédominant pour les régions fortement dopées [11].

Cette recombinaison nécessite trois particules: au moins un trou et un électron et la troisième peut être un trou ou un électron. Ce type de recombinaison est similaire à la recombinaison de bande à bande, mais la troisième particule reçoit l'énergie à partir de la recombinaison [7].

Le taux de recombinaison Auger est donné par :

$$r_{Auger} = (C_n^A n + C_p^A p)(pn - n_i^2) \approx C_n^A n^2 p + C_p^A p^2 n \quad (I.29)$$

Où C_n^A et C_p^A sont les coefficients Auger de capture des électrons et trous, respectivement. Les valeurs de ces coefficients sont données pour le silicium, le germanium et les composés III-V dans le tableau I.2. [12]

semiconducteur	$C_n^A \text{ (cm}^6\text{/s)}$	$C_p^A \text{ (cm}^6\text{/s)}$
Si, Ge	$2.8 \cdot 10^{-31}$	$9.9 \cdot 10^{-32}$
GaAs	$5 \cdot 10^{-30}$	$3 \cdot 10^{-30}$

Tableau I.2 : Valeurs des coefficients Auger

En régime de faible injection, la durée de vie associée aux recombinaisons Auger est indépendante du niveau d'injection, elle est inversement proportionnelle au carré du dopage. Par exemple pour un semiconducteur de type p : τ_A

$$\tau_A = \frac{1}{C_p^A N_A^2} \quad (I.30)$$

Alors qu'en forte injection, la durée vie Auger dépend du niveau d'injection :

$$\tau_A = \frac{1}{(C_n^A + C_p^A)\Delta n^2} \quad (I.31)$$

I.4.4 Recombinaison en surface

Les défauts des cristaux sont plus nombreux en surface qu'en volume. La rupture de la périodicité du réseau modifie les états électroniques et laisse des atomes avec une liaison pendante. L'absorption ou la fixation des impuretés à la surface comme l'atome d'oxygène entraîne son oxydation (appelée couche d'oxyde natif). Ces anomalies en surface induisent des états électroniques dont les niveaux d'énergie se situent souvent dans le gap du semiconducteur. Ces défauts peuvent constituer des centres de recombinaison surfaciques. Le taux de recombinaison est décrit de la même façon que celui de la recombinaison indirecte [13] et est donné par

$$r_s = \frac{N_{rs} C_n C_b (p_s n_s - n_i^2)}{C_n(n_s + n_0 e^{\frac{(E_F - E_r)}{kt}}) + C_p(p_s + p_0 e^{\frac{(E_F - E_r)}{kt}})} \quad (I.32)$$

avec N_{rs} la densité des centres de recombinaison par unité de surface, n_s et p_s représentent respectivement les concentrations des électrons et des trous en surface.

I.5 Dynamique des porteurs dans un semiconducteur éclairé

Dans un semiconducteur éclairé en surface, la densité de porteurs augmente et elle est contrebalancée par les différents mécanismes de recombinaison. Les différentes équations régissant le mouvement de ces porteurs sont présentées dans ce qui suit.

I.5.1 Equations de continuité

Les équations de continuité régissent les processus d'équilibre dynamique des porteurs dans le semiconducteur. Considérons un barreau semiconducteur (figure I.4(a)) d'épaisseur dz éclairé par des photons et parcouru par un flux de porteurs $F(z)$. Dans cet élément de volume, des paires électron-trou sont générées avec un taux g et se recombinent avec un taux r . L'évolution de la concentration de porteurs C par unité de temps dans cet élément de volume, résultant de tous ces mécanismes, est décrite par l'équation de continuité

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -\frac{dF}{dz} + g - r \quad (I.33)$$

Le flux de courant des électrons est égal à $-J_n/q$ et celui des trous à J_p/q . Les équations de continuité décrivant l'évolution de la concentration pour chaque type de porteurs s'écrivent

$$\frac{dn}{dt} = \frac{1}{q} \text{div}(J_n) - r_n + g_n = 0 \quad (\text{I. 34})$$

Avec J_n densité de courant électrique des électrons, r_n taux de recombinaison des électrons par unité de volume (radiative, par piège, Auger), g_n taux de photogénération des électrons par unité de volume.

$$\frac{dp}{dt} = -\frac{1}{q} \text{div}(J_p) - r_p + g_p = 0 \quad (\text{I. 35})$$

Avec J_p densité de courant électrique des trous, r_p taux de recombinaison des trous par unité de volume (radiative, par piège, Auger), g_p taux de photogénération des trous par unité de volume .

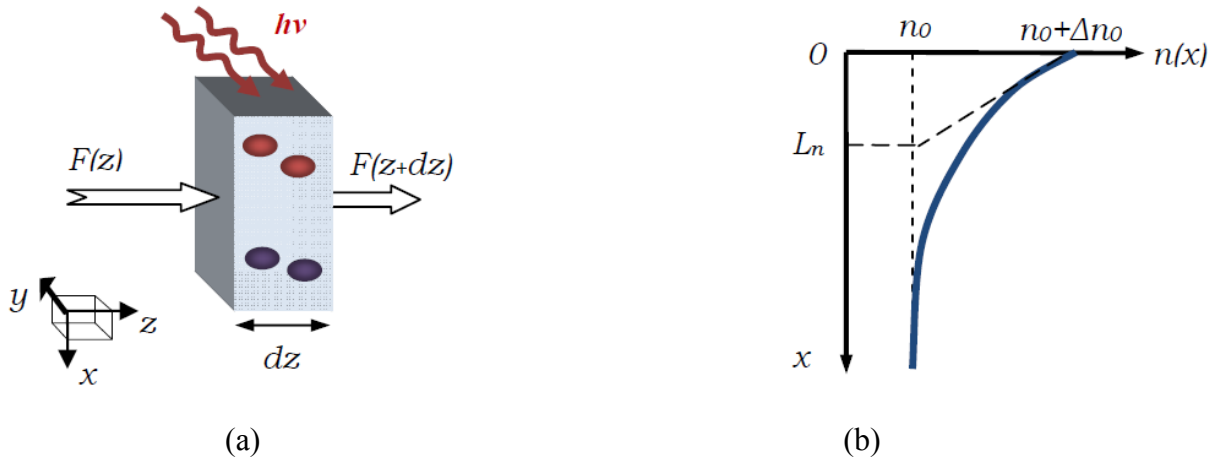


Figure I.6 : (a) Variation de la concentration des porteurs dans un élément de volume d'un semiconducteur et (b) profil de la diffusion des électrons à l'intérieur du semiconducteur

I .5.2 Diffusion des porteurs

Lorsqu'un semiconducteur est éclairé en surface (figure I.4(a)), un excès de paires électron-trou est créé sur une profondeur propre au matériau. Ces porteurs diffusent à l'intérieur du semiconducteur et créent un courant exprimé par l'expression suivante :

$$J_D = -qF \quad (I.36)$$

avec F le flux des porteurs, En considérant le cas des électrons, l'évolution de leur densité est donnée par l'expression (I.33). Sans champ électrique externe, le courant J_n est celui de diffusion exprimé par :

$$J_{Dn} = -qD_n \frac{dn}{dz} \quad (I.37)$$

Où D_n le coefficient de diffusion des électrons.

En considérant la recombinaison directe des électrons, nous obtenons alors

$$\frac{\partial n}{\partial t} = D_n \frac{\partial^2 n}{\partial x^2} + g_n - \frac{\Delta n}{\tau_n} \quad (I.38)$$

Les porteurs diffusent dans le volume du semiconducteur où le rayonnement est absent, et donc $g_n = 0$. Si l'éclairement est permanent alors

$$D_n \frac{\partial^2 n}{\partial x^2} - \frac{\Delta n}{\tau_n} = 0 \quad (I.39)$$

En posant $L_n^2 = D_n \tau_n$ qui représente la longueur de diffusion des électrons, l'intégration de l'équation précédente donne

$$\Delta n = \Delta n_0 \exp\left(-\frac{x}{L_n}\right) \quad (I.40)$$

avec $\Delta n_0 = \Delta n(x=0)$. La densité des électrons excédentaires décroît exponentiellement en pénétrant dans le semiconducteur avec une constante L_n (figure I.4(b)). La densité de trous suit la même évolution avec une constante $L_p = \sqrt{D_p \tau_p}$.

I.5.3 Retour à l'équilibre

Les variations des densités de porteurs par unité de temps d'un semiconducteur isolé et éclairé d'une manière homogène sont données par

$$\frac{\partial n}{\partial t} = g_n - r_n \quad (I.41)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = g_p - r_p \quad (I.42)$$

Considérant toujours le cas des électrons de densité $n = n_0 + \Delta n$ et qui se recombinent de façon directe, l'évolution de la densité des électrons est donnée par

$$\frac{\partial \Delta n}{\partial t} = g_n - \frac{\Delta n}{\tau_n} \quad (\text{I.43})$$

Sous éclairage continu, la variation de la densité excédentaire des électrons par unité de temps est nulle, l'équation précédente se réécrit

$$\Delta n_0 = g_n \tau_n \quad (\text{I.44})$$

A l'arrêt de l'éclairage, le processus de génération n'existe plus ($g_n = 0$) et la solution de (I.43) en tenant compte de la condition (I.44) est donnée par

$$\Delta n(t) = \Delta n_0 \exp\left(-\frac{t}{\tau_n}\right) \quad (\text{I.45})$$

La concentration des électrons excédentaires décroît exponentiellement avec une constante de temps τ_n . L'excédent de trous a la même forme de décroissance avec une constante de temps identique dans le cas où $\tau_p = \tau_n$. Lorsque les durées de vie de porteurs excédentaires sont très faibles, le retour à l'équilibre du semiconducteur est très rapide. C'est le principe de fonctionnement des dispositifs photoconducteurs ultra-rapide.

I.5.4 Equation Poisson

L'équation de poisson nous permet de calculer le champ électrique et le potentiel électrostatique dans les dispositifs à semi conducteurs

$$\text{div} E = \frac{\rho}{\varepsilon} \quad (\text{I.46})$$

E est le champs électrique, ρ densité de charge électrique, ε permittivité.

$$E = -\text{grad} \varphi \quad (\text{I.47})$$

φ est potentiel électrostatique, par remplacer (I.47) dans (I.46) ; on aura

$$\text{div}(\varepsilon \text{grad} \varphi) = -\rho \quad (\text{I.48})$$

ρ densité de charge est le nombre de charge par unité de volume. Dans ce cas, il y a six types de carier de charge : les électrons n , les trous p , les ions donneurs N_D^+ , les ions accepteurs N_A^- , les électrons piégés n_T , les trous piégés p_T .

$$\rho = q(p - n + \Sigma p_T - \Sigma n_T + N_D^+ - N_A^-) \quad (\text{I. 49})$$

q charge d'électron, en remplaçant (1.48) dans (1.47) ; on aura

$$\text{div}(\epsilon \text{grad} \phi) = q(-p + n - \Sigma p_T + \Sigma n_T - N_D^+ + N_A^-) \quad (\text{I. 50})$$

L'équation de Poisson forme avec les deux équations de continuité un système à trois équations et trois inconnues : le potentiel électrostatique et les densités des électrons et des trous. Ces trois équations sont le point de départ de l'analyse de la plupart des phénomènes électrique et photovoltaïques, elles peuvent être résolues analytiquement dans certains cas particuliers, mais dans la plupart des cas la résolution numérique de ces équations est nécessaire.

I.6 Conclusion

Dans ce premier chapitre, nous avons présenté les équations fondamentales et les phénomènes de transport qui régissent le fonctionnement des composants semiconducteurs éclairés. Les mécanismes de génération-recombinaison ont également été décrits.

Dans le chapitre suivant nous nous attacherons à présenter l'étude théorique du contact métal / semiconducteur (diodes Schottky).

Références Bibliographiques

- [1] T. Mayer et methfessel, z.
Physik, 1957, 147, 395, 419, 442.
- [2] J.MEESSEN,
J. Physique Rad., 1961, 22, 308.
- [3] P.E. Schmid,
Phys. Review B, vol. 23, 1981, pp. 5531-5536.
- [4] M.F Nuban,
Analyse par imagerie de photoluminescence des défauts induits au cours de la réalisation des composants, Thèse de doctorat, Ecole Centrale de Lyon, 1996
- [5] J.Marek,
J. Appl. Phys., vol.55, 1984, pp. 318-326.
- [6] A. Rockett,
The Materials Science of Semiconductors”, Book, University of Illinois, 2008 Springer Science©Business Media, LLC.
- [7] S. Daniel,
Modeling radiation effect on a triple junction solar cell using silvaco atlas”, Thesis Naval postgraduate school Monterey California. 2012.
- [8] M. J.Kerr,

Surface, emitter and bulk recombination in silicon and development of silicon nitride passivated solar cells, Thèse de Doctorat, Australian National University, 2002.
- [9] W.C .O'Mara.,
Handbook of Semiconductor Silicon Technology, Noyes publications, 1990.
- [10] J-P. Perez,
"Electromagnétisme: Fondements et applications", 3ème Edition Masson, 1997
- [11] J .Dziewior. and W.Schmid,
Appl. Phys. Lett. , vol.31, n°5, 1977, pp.346-348.

[12] J. Dziwior,
Appl. Phys. Lett., Vol. 31, 1977, pp. 346-348

[13] H. Mathieu,
"Physique des semiconducteurs et des composants électroniques," 5^e Edition Dunod,
1999

Chapitre II

Théorie du contact Schottky

II.1 Introduction

La diode métal semiconducteur est constituée d'un contact établi entre un métal et un semiconducteur, en général dopé. C'est le plus vieux dispositif électronique connu, datant de la fin du 19^{ème} siècle, les premiers redresseurs solides et les premiers postes à galène étant par exemple basés sur cette structure. La première théorie de fonctionnement, proposée par Bethe, ne remonte cependant qu'à 1938[1].

La structure de base est un contact direct entre un métal et un semiconducteur, peu dopé, tel que représenté figure II.1.

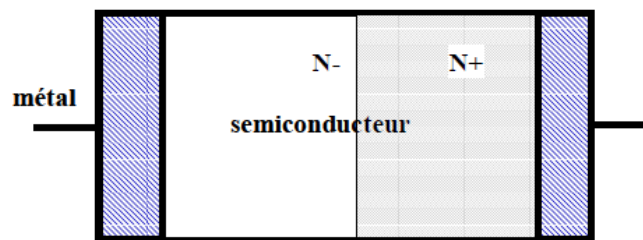


Figure II.1 : Coupe schématique d'une diode métal semiconducteur. Pour minimiser l'effet de résistance série.

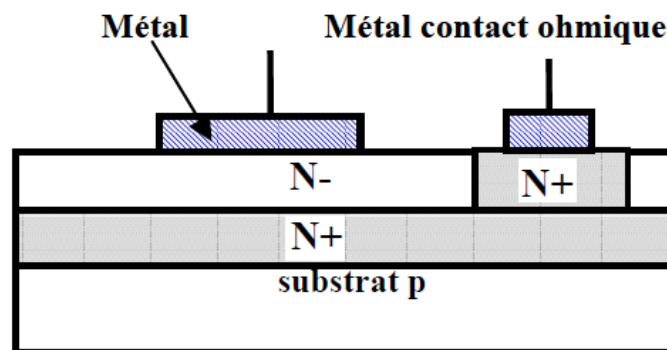


Figure II.2 : Coupe d'une diode métal-semiconducteur intégrée. Le contact du métal sur la zone N^+ constitue un contact ohmique.

Dans les diodes intégrées, la couche de semiconducteur est en général peu dopée et crue par la technique de croissance épitaxiale sur un substrat très dopé ou sur une couche très dopée enterrée afin de minimiser les effets de résistance série, l'effet diode se produisant essentiellement à proximité du contact réalisé sur la couche peu dopée. Dans ce cas les couches métalliques peuvent être constituées du même métal. Pour des effets spécifiques, les métaux peuvent aussi être différents mais cela complique le procédé de fabrication.

Le contact électrique du semiconducteur est aussi réalisé avec un métal. Dans ce cas, il faut un contact ohmique. La présence des deux types de contacts sur la même structure fait

apparaître la différence de comportement, a priori. Nous allons en premier lieu ne nous intéresser qu'à la structure simple entre un métal et un semiconducteur, moyennement dopé.

II.2 Diagramme de bandes d'énergie

Pour comprendre le diagramme d'énergie des jonctions métal semiconducteur, il faut tout d'abord tracer le diagramme des deux matériaux indépendamment. La figure II.3 (avant contact) présente le diagramme d'un métal, le niveau de Fermi étant situé dans la bande de conduction, et d'un semiconducteur, par exemple faiblement dopé n dans ce cas. Nous supposons la structure idéale, c'est à dire sans perturbation au niveau des liaisons chimiques du contact métal-semiconducteur.

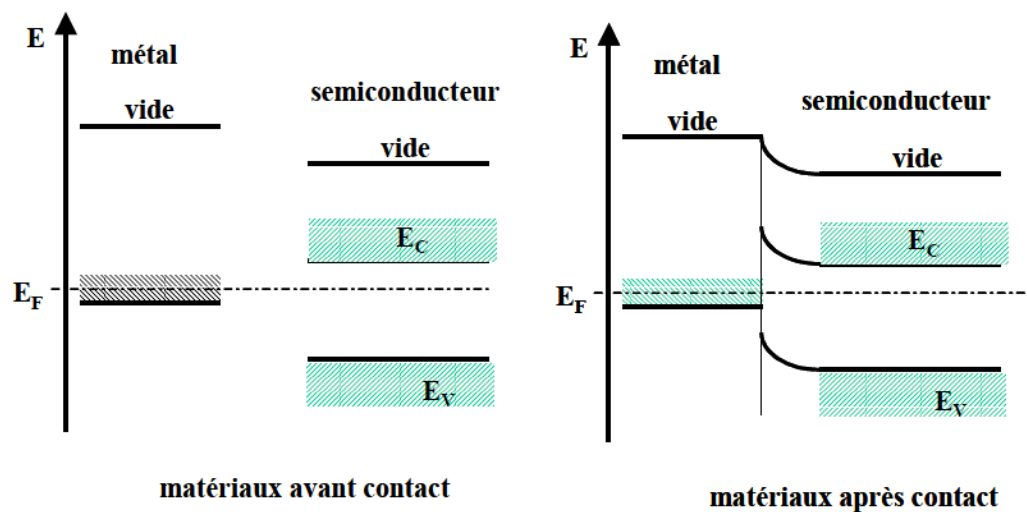


Figure II.3 : Diagramme d'énergie d'un métal et d'un semiconducteur de type n faiblement dopé avant contact et après contact. Après contact, si les niveaux du vide sont décalés, une courbure de bande apparaît.

Le contact est ensuite réalisé comme présenté figure II.3. Le principe qui en régit l'établissement physique est l'alignement des niveaux de Fermi du métal et du semiconducteur, puisque la structure est à l'équilibre thermodynamique.

Loin du contact, aussi appelé jonction, du côté semiconducteur, les niveaux des bandes de valence, de conduction et du vide, E_V , E_C et E_{vide} conservent leur position respective par rapport à E_F . Le métal, restant une équipotentielle, approximation toujours valable si les densités de courant circulant dans la diode ne sont pas trop élevées, le niveau d'énergie du vide est continu au contact. Mais si les niveaux de départ du métal et du semiconducteur sont différents, c'est-à-dire, si les travaux de sortie respectifs, ϕ_m et ϕ_s , sont différents, ce qui est le cas en général, une courbure de bande apparaît essentiellement dans le semiconducteur, près

de la zone de contact. A toute interface correspond une barrière énergétique. La structure de bande au voisinage de l'interface est conditionnée par la différence éventuelle des travaux de sortie du métal et du semiconducteur. On envisage trois cas:

a) $q\phi_m = q\phi_s$:

Si on prend le niveau de l'électron dans le vide N_V comme niveau de référence. Le diagramme énergétique dans chacun des matériaux est représenté sur la figure II.4.a.

Une fois le métal et le semiconducteur sont mis au contact, les niveaux E_{Fm} et E_{Fs} s'alignent (voir figure II.4.b). Dans la mesure où la condition $q\phi_m = q\phi_s$ reste respectée on dit que le système est en régime de bandes plates.

La barrière présentée aux électrons qui veulent transiter du métal vers le semiconducteur est.

$$q\phi_B = q\phi_m - q\chi \quad (II.1)$$

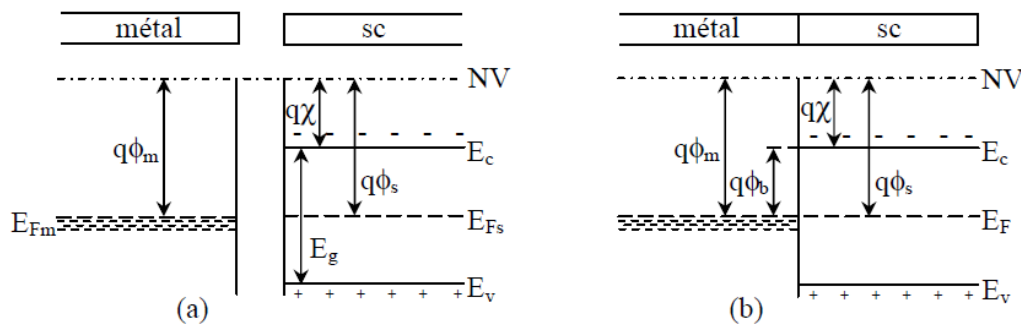


Figure II.4: Contact métal-semiconducteur avec $q\phi_m = q\phi_s$.

b) $q\phi_m > q\phi_s$:

Au contact des deux matériaux, un certain nombre d'électrons vont donc transférer vers le métal et désertir le semiconducteur. Un champ électrique interne va se créer pour lutter contre cette diffusion, un équilibre va se créer et le phénomène s'arrête lorsque l'alignement des niveaux de Fermi est réalisé. Ce passage entraîne une modification des bandes d'énergie, qui se courbent vers le haut ; les ions N_d^+ s'accumulent à l'interface en créant une zone de charge d'espace positive. Cette dernière est compensée par une charge négative due à l'accumulation d'un même nombre d'électrons du côté du métal. (voir Figure II.5.b) On dit que le système est en régime déplétion.

On a:

$$q\phi_B = q\phi_m - q\chi \quad (\text{II-2})$$

$$qV_d = q\phi_m - q\phi_{sc} \quad (\text{II-3})$$

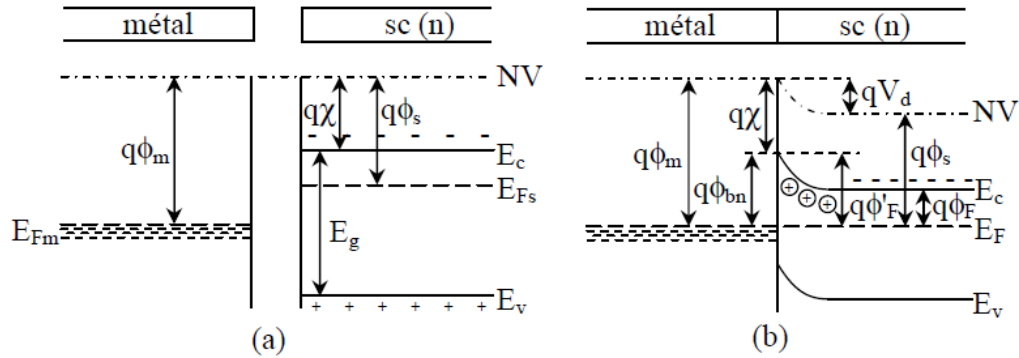


Figure II.5: Diagramme des bandes d'énergie d'un métal-semiconducteur type(n) avec $\phi_m > \phi_s$ (a) : avant contact (b) : après contact.

Le phénomène de la zone de charges d'espace illustre bien un contact redresseur, on parle d'une diode Schottky.

c) $q\phi_m < q\phi_s$:

Dans ce cas le travail de sortie du métal est inférieur à celui du semiconducteur, les électrons sont diffusés du métal vers le semiconducteur, donc les niveaux E_0 , E_C , et E_V vont subir des déformations au niveau de l'interface de la jonction par conséquent, il apparaît une zone d'accumulation très peu étalée. Il en résulte une courbure vers le bas des bandes d'énergie (voir Figure II.6), c'est le régime d'accumulation. cette dernière conduira le courant dès qu'une tension sera appliquée, Le contact est ohmique.

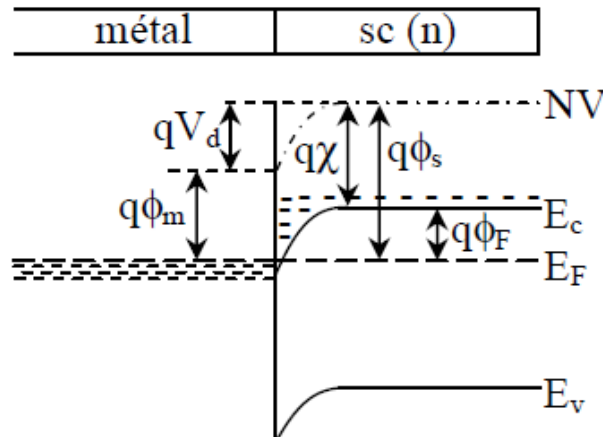


Figure II.6: Diagramme des bandes d'énergie d'un métal-semiconducteur type(n) avec $\phi_m < \phi_s$

II .3 Polarisation de la structure Métal -Semiconducteur

Nous allons voir l'effet de la polarisation de la structure MS sur les diagrammes des bandes, nous considérons les divers cas:

a) Premier cas: $q \phi_m > q \phi_{sc}$

• Polarisation directe ($V > 0$):

Nous appliquons une tension positive par rapport au semiconducteur. Le diagramme énergétique devient celui de la figure (II.7.a)

Les électrons de la bande de conduction du SC peuvent franchir la barrière de potentiel abaissée par la tension de polarisation V . Un courant direct passe (constitué des majoritaires <électrons>), c'est un courant du métal vers le semiconducteur. Donc la bande conduction du semiconducteur s'élève ce qui se traduit par une diminution de la barrière. Dans le sens métal-semiconducteur la barrière reste inchangée.

• Polarisation inverse :

Une tension négative par rapport au semiconducteur est appliquée. Les électrons du métal ne peuvent pas passer par façon significative dans le semiconducteur à cause de la barrière de Schottky. La bande de conduction du semiconducteur est abaissée et la hauteur de barrière s'élève (figure II.7.b), ce qui s'opposera à la diffusion des électrons et on a aucun flux possible dans le sens semiconducteur-métal. La jonction est bloquée.

Le courant inverse évolue donc peu avec la polarisation inverse. Cet écoulement des porteurs reste limité par cette barrière (Schottky) qui est indépendante de la tension appliquée.

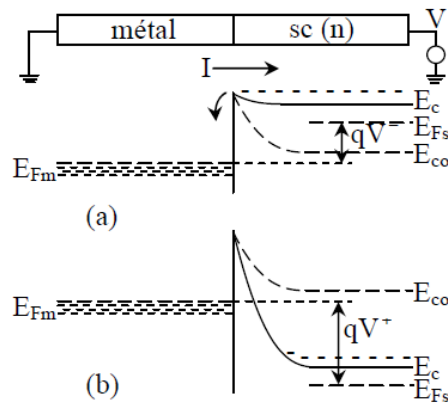


Figure II.7: Contact métal-semiconducteur (n) avec $\phi_m > \phi_s$ sous polarisation [2].
(a) Polarisation directe. (b) Polarisation inverse.

b) Second cas : $q\phi_m < q\phi_{sc}$

Appliquons une tension négative par rapport au semiconducteur. La tension de polarisation est distribuée dans tout le volume du semiconducteur. À l'équilibre la structure était en régime d'accumulation, donc tout électron qui arrive à l'interface dans le semiconducteur passe librement dans le métal ($V < 0$). Le contact est ohmique (figure II.8.b), et vice versa dans le cas ($V > 0$).

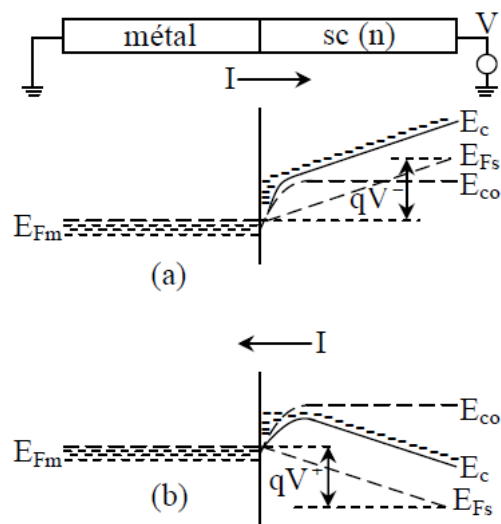


Figure II.8: Contact métal-semiconducteur (n) avec $\phi_m < \phi_s$ sous polarisation [2].
a)- Polarisation directe. b)- Polarisation inverse.

II.4 Zone de charge d'espace

La barrière Métal-semiconducteur "n" où $q\phi_m > q\phi_{sc}$ présente à l'interface du côté SC une zone de charge d'espace. Nous allons étudier cette zone par la détermination des variations du champ électrique et du potentiel dont ils régissent à travers la largeur W de cette zone. Mais surtout nous chercherons l'expression de la capacité en fonction de la tension de polarisation en absence de la densité des états d'interface.

Nous ferons les hypothèses suivantes :

- La densité des donneurs N_d du semiconducteur est homogène.
- Les donneurs sont tous ionisés à la température ambiante.

Dans ce cas, nous avons les seules charges qui existent dans la zone de charge d'espace (ZCE) sont les charges issus des donneurs. Donc on a :

$$\rho(x) = qN_d \quad \text{pour } 0 < x < W \quad (\text{II.4})$$

$$\rho(x) = 0 \quad \text{pour } x \geq W \quad (\text{II.5})$$

ρ : densité des charges dans un semiconducteur

N_d : densité des donneurs.

a) Champ électrique

On a l'équation de Poisson :

$$\frac{d^2V(x)}{dx^2} = -\frac{\rho(x)}{\epsilon_s} \quad (\text{II.6})$$

$\epsilon_s = \epsilon_0 \epsilon_{sc}$, la permittivité du semiconducteur.

Et comme on a le champ électrique $\xi(x)$ dans la zone de charge d'espace est exprimé par:

$$\xi(x) = -\frac{dV(x)}{dx} \Rightarrow \frac{d\xi(x)}{dx} = \frac{qN_d}{\epsilon_s} \quad (\text{II.7})$$

Donc :

$$\xi(x) = \int \frac{qN_d}{\epsilon_s} dx = \frac{qN_d}{\epsilon_s} x + C^{te} \quad (\text{II.8})$$

Le champ électrique est nul hors la zone de charge d'espace ($\xi(W)=0$), l'expression du champ $\xi(x)$ devient :

$$\xi(x) = \frac{+qN_d}{\epsilon_s}(x - W) = -\frac{qN_d}{\epsilon_s}(W - x) \quad (\text{II.9})$$

On déduit que $\xi(x)$ est négatif et varie linéairement dans la zone de charge d'espace (cas idéal)

b) Potentiel électrostatique

En intégrant l'équation de Poisson pour la deuxième fois, nous obtenons l'expression du potentiel électrostatique $V(x)$ dans la zone de charge d'espace :

$$V(x) = -\int \xi(x)dx = -\int \frac{qN_d}{\epsilon_s}(x - W)dx \quad (\text{II.10})$$

$$V(x) = -\frac{qN_d}{\epsilon_s} \left(\frac{x^2}{2} - Wx \right) + C^{te} \quad (\text{II.11})$$

Pour déterminer l'expression de la constante d'intégration, nous prenons l'origine des potentiels à l'interface ($V(0)=0$).

On aura :

$$V(x) = -\frac{qN_d}{\epsilon_s} \left(\frac{x^2}{2} - Wx \right) \quad (\text{II.12})$$

Les variations de potentiel électrostatique dans la zone de charge d'espace d'une structure Métal - semiconducteur suit une fonction parabolique.

c) Potentiel de diffusion

La tension de diffusion résulte de la différence des travaux de sortie du métal et du semiconducteur. Aux bornes de la zone de charge d'espace et d'après l'équation (II.12), on a :

$$V_d = V(x=W) - V(x=0) = -\frac{qN_d}{\epsilon_s} \left(\frac{W^2}{2} - W^2 \right) = \frac{qN_d}{2\epsilon_s} W^2 \quad (\text{II.13})$$

d) La largeur de la zone de charge d'espace

D'après la relation (II-13), on peut tirer l'expression de la largeur de la zone de charge d'espace W à l'équilibre :

$$W = \left(\frac{2\epsilon_s}{qN_d} V_d \right)^{\frac{1}{2}} = \left[\frac{2\epsilon_s}{qN_d} (\phi_m - \phi_s) \right]^{\frac{1}{2}} \quad (\text{II.14})$$

Dans le cas d'une polarisation de la structure, en appliquant une tension V sur le métal par rapport au semiconducteur, nous supposons que tout le raisonnement précédent reste valable, notamment que la concentration équivalente de porteurs traversant la structure reste faible par rapport à la concentration d'atomes dopants ionisés. Si la tension appliquée, V , est positive, cela revient à diminuer le champ interne et donc à diminuer la différence de potentiel totale. La formule (II-14) devient simplement :

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

Ainsi, de façon analogue à la jonction p-n, l'extension de la zone de charge d'espace diminue si une tension négative est appliquée sur la zone n.

e) Charge totale de la zone de charge d'espace dans le semiconducteur :

En considérant que la charge d'espace est essentiellement due aux atomes dopants ionisés, la densité de charge par unité de surface à l'équilibre thermodynamique s'exprime par :

$$Q_{sc} = qN_d W = qN_d \left(\frac{2\epsilon_s}{qN_d} (V_d) \right)^{\frac{1}{2}} \quad (\text{II.16})$$

f) Capacité d'un contact M-S

Nous définissons la capacité équivalente par unité de surface du semiconducteur par :

$$C_{sc} = \frac{dQ_{\text{métal}}}{dV_{\text{métal/sc}}} = - \frac{dQ_{sc}}{dV_{\text{métal/sc}}} = - \frac{dQ_{\text{métal}}}{dW} \frac{dW}{dV_{\text{métal/sc}}} \quad (\text{II.17})$$

De la formule (II.15) nous pouvons déduire :

$$C_{sc} = \frac{\epsilon_s S}{\sqrt{\frac{2\epsilon_s}{qN_d}(V_d - V)}} = S \left[\frac{q\epsilon_s N_d}{2(V_d - V)} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (\text{II.18})$$

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

$$\frac{1}{C_{sc}^2} = \frac{2(V_d - V)}{q\epsilon_s N_d} \quad (\text{II.19})$$

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

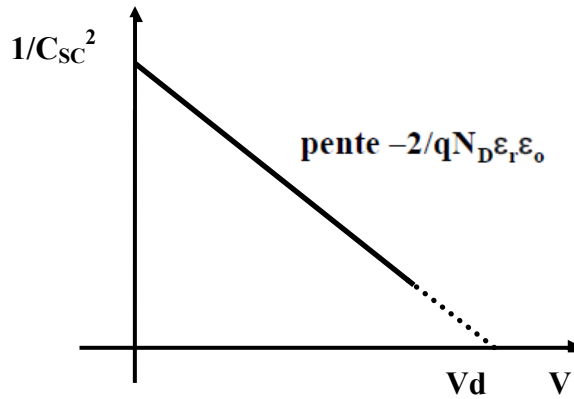


Figure II.9 : Variation du carré de l'inverse de la capacité en fonction de la tension. La pente de la courbe permet de déterminer la valeur de la concentration de dopant et la hauteur de barrière à l'équilibre thermodynamique.

Dans le cas d'une concentration variable de dopage, ce qui est très souvent le cas, il est possible de tracer l'inverse de la variation de cette pente.

$$N_d = \frac{-2}{q\epsilon_s} \frac{1}{\partial(1/C_{sc}^2)/\partial V} \quad (\text{II.19})$$

II .5 Les états d'interface [3]

Dans ce qui précède, nous avons ignoré la présence éventuelle des états d'interface. Ces états peuvent jouer un rôle important si les niveaux d'énergie qui leur sont associés sont situés dans la bande interdite du semiconducteur. En effet, lors de la mise en équilibre de la structure certains électrons se piègent sur ceux de ces états dont les niveaux d'énergie se retrouvent au-dessous du niveau de Fermi. Il en résulte une charge d'espace supplémentaire Q_{ss} localisée à la surface même du semiconducteur. Appelons Q_m la charge par unité de surface côté métal et Q_{sc} côté semiconducteur on a:

$$Q_m = -(Q_{ss} + Q_{sc}) \quad (II.20)$$

La présence d'une couche interfaciale diélectrique d'épaisseur δ introduit aussi une différence de potentiel interfaciale Δ égale à:

$$\Delta = \frac{Q_m}{\epsilon_d} \delta \quad (II.21)$$

ϵ_d : la permittivité de la couche diélectrique.

Soit le contact métal-semiconducteur de type n avec $\phi_m > \phi_s$. D'après la figure II.10, la relation de Schottky doit s'écrire:

$$\phi_{bn} = \phi_m - \chi - \Delta \quad (II.22)$$

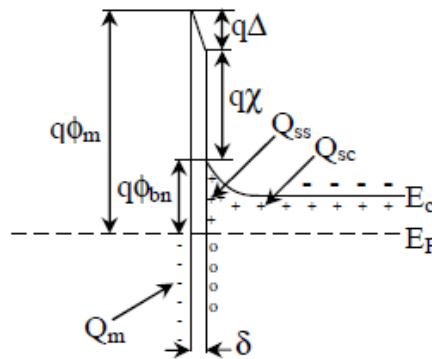


Figure II.10: Contact métal-semiconducteur avec les états d'interface.

II .6 Abaissement de la barrière : effet Schottky [4.5]

La présence d'un électron participant à la conduction dans le semiconducteur se trouve subir une force attractive par la création par effet électrostatique d'un porteur image (de signe opposé) et donc d'un champ électrique. Intégré au voisinage de l'interface, ce champ induit

une différence de potentiel et donc une variation du diagramme d'énergie. La force électrostatique induite étant attractive, la différence de potentiel énergétique créée est donc négative et correspond à un abaissement de la barrière existante. Nous allons analyser en détail ce phénomène qui aura des conséquences sur la conduction du dispositif. Pour faciliter l'approche, nous allons d'abord considérer un électron dans le vide face à plan métallique.

a) Electron dans le vide devant un plan métallique

Un électron face à un plan conducteur, à la distance x de celui-ci, est soumis à une force attractive coulombienne (figure II.11).

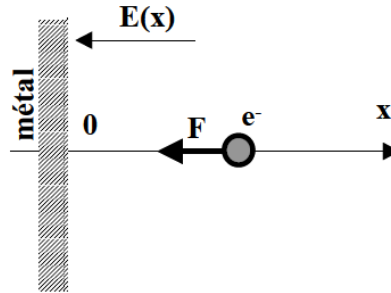


Figure II.11: Electron devant un plan métallique. F est la force coulombienne.

$$F = -\frac{q^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{(2x)^2} = -\frac{q^2}{16\pi\epsilon_0} \frac{1}{x^2} \quad (\text{II.23})$$

Le travail (et donc l'énergie) fourni par cet électron pour arriver de l'infini jusqu'à la position x , est :

$$-E(x) = \int_{\infty}^x F dx = +\frac{q^2}{16\pi\epsilon_0} \frac{1}{x} \quad (\text{II.24})$$

Cette énergie correspond à l'énergie potentielle de l'électron, référencé à l'infini. Sous l'action d'un champ électrique appliqué, $\xi(x)$, l'énergie potentielle totale est :

$$E_p(x) = -\frac{q^2}{16\pi\epsilon_0} \frac{1}{x} + q \int_0^x \xi(x) dx \quad (\text{II.25})$$

En considérant, pour simplifier le calcul, le champ appliqué constant, et orienté suivant les x négatifs, l'énergie potentielle devient :

$$E_p(x) = +\frac{q^2}{16\pi\epsilon_0} \frac{1}{x} + q \xi x \quad (\text{II.26})$$

Cette énergie est la somme de deux termes. Il est ainsi possible de représenter sa variation en fonction de x (figure II.12).

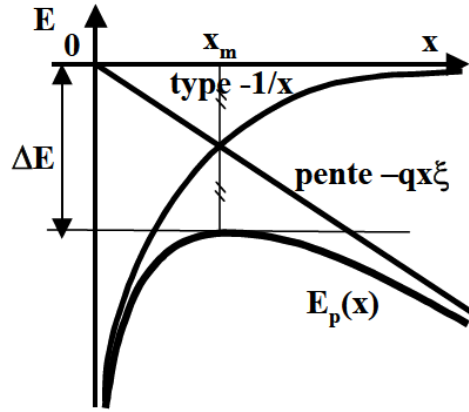


Figure II.12: Variation de l'énergie potentielle de l'électron devant un plan métallique et en présence d'un champ électrique interne (ou appliqué) constant.

Par rapport à la hauteur de barrière d'énergie maximale, la présence d'un électron devant le plan entraîne un abaissement de barrière ΔE . Cet abaissement de barrière peut être calculé simplement dans les conditions simplificatrices présentées. A partir de la détermination de la position du maximum de $E_p(x)$, il est possible de déduire sa valeur et donc ΔE .

$$E_p(x) = +\frac{q^2}{16\pi\epsilon_0} \frac{1}{x} + q\xi x$$

$$\frac{dE_p(x)}{dx} = 0 \quad \text{en } x=x_m \quad -\frac{q^2}{16\pi\epsilon_0} \frac{1}{x^2} + q\xi = 0$$

$$x_m = \sqrt{\frac{q}{16\pi\xi\epsilon_0}}$$

$$\Delta E = 2\xi(x_m)x_m = \sqrt{\frac{q\xi_m}{4\pi\epsilon_0}} \quad (\text{II.27})$$

Cet abaissement de barrière va bien évidemment se retrouver lorsque l'électron est localisé dans le semiconducteur devant le métal.

b) Abaissement de barrière ; effet Schottky

Dans le cas d'un contact métal-semiconducteur, la différence des travaux de sortie aboutie à une hauteur de barrière pour les électrons devant passer du métal vers le semiconducteur, $q\Phi_B$ (figure II.13). Dans le cas d'un dopage constant dans le semiconducteur, le champ électrique dans la zone de charge d'espace généré par la charge liée aux dopants ionisés a été exprimé par l'équation II.9. Le champ électrique varie linéairement

en fonction de x . Dans ce cas, le calcul de l'abaissement de barrière se complique beaucoup. Il suffit par contre de faire l'hypothèse que la valeur de x_m est suffisamment faible devant W pour que le champ électrique puisse être considéré constant et pratiquement égal à sa valeur maximale, à l'interface métal semiconducteur, $\xi_{\max}$.

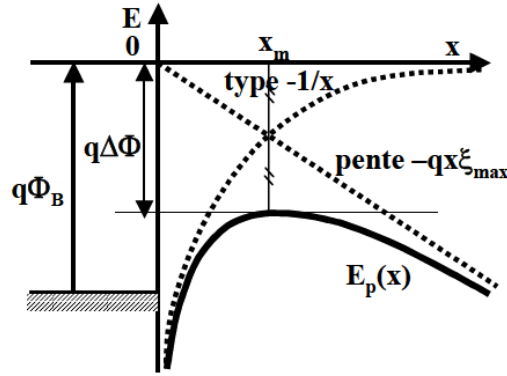


Figure II.13 : Variation de la hauteur de la barrière d'énergie due à la présence du plan conducteur. L'abaissement peut rester faible devant la barrière elle-même.

$$\xi(x_m) \approx \xi_{\max} = \frac{qN_D W}{\epsilon_r \epsilon_0} \quad (\text{II.28})$$

Nous en déduisons la valeur de l'abaissement de barrière de potentiel, $\Delta\Phi$:

$$\Delta\Phi = 2\xi_{\max} x_m = \sqrt{\frac{q}{4\pi\epsilon_r \epsilon_0} \frac{qN_D W}{\epsilon_r \epsilon_0}} \quad (\text{II.29})$$

Cet abaissement de barrière en présence d'une interface métal-semiconducteur est appelé effet Schottky.

II.7 Mécanismes De Transport Dans Le Contact Schottky

Le transport du courant dans le contact métal-semiconducteur est dû principalement aux porteurs de charges majoritaires contrairement à la diode p-n où le courant est dû aux porteurs de charges majoritaires et minoritaires [6]. L'application d'une tension directe à une diode de Schottky donne naissance à un transport de courant qui peut se résumer en cinq mécanismes [7] :

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

La figure II.14 illustre les cinq mécanismes de base pour les courants existants dans le contact Schottky en polarisation directe.

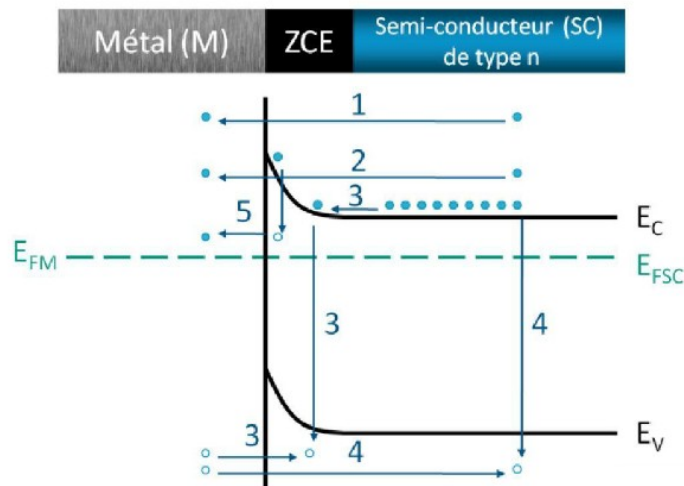


Figure II.14: Mécanismes de transport à travers d'une interface métal/semi-conducteur.

II.7.1 Émission au dessus de la barrière

II.7.1.1 L'émission thermoïonique

La théorie de l'émission thermoïonique a été abordée par de nombreux auteurs [6.8]. Le courant dû à cet effet provient des électrons ayant une énergie supérieure à celle de la hauteur de barrière de potentiel. Sa validité repose sur le respect des hypothèses suivantes :

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

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

$$J_T = J_{ST} \left(e^{\frac{qV}{kT}} - 1 \right) \quad (\text{II.30})$$

où J_{ST} est le courant de saturation donnée par l'expression suivante :

$$J_{ST} = A^* T^2 e^{\frac{-q\phi_B}{kT}} \quad (\text{II.31})$$

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

$$A^* = \frac{4\pi q m^* k^2}{h^3} \quad (\text{II.32})$$

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

h : La constante de Planck.

Dans le cas pratique il faut tenir compte de la surface (A) de la diode et d'une résistance série R_S . Il faut donc remplacer l'équation (II.30) par

$$J_T = J_{ST} \left(e^{\frac{qV - R_S I}{nkT}} - 1 \right) \quad (\text{II.33})$$

n est le facteur d'idéalité traduisant l'effet de la densité d'état d'interface N_{ss} sur les caractéristiques électriques d'une diode Schottky :

$$n = 1 + \frac{\delta}{\epsilon_i} \left[\frac{\epsilon_s}{w} + qN_{ss} \right] \quad (\text{II.34})$$

En analysant la courbe expérimentale courant tension, il est donc possible de trouver I_0 , R_s , n , et par conséquent Φ_B , pour autant que la surface A de la diode soit connue. Une manière élégante de traiter la relation (II.33) est de l'inverser, $V = f(I)$, et de trouver par fit ou simulation numérique les paramètres qui donnent la meilleure approximation de la courbe expérimentale.

II .7.1.2 Théorie de diffusion

Proposée par Schottky et Spenke en 1939 [9], cette théorie suppose que les électrons migrent du semi-conducteur au métal par dessus la barrière en traversant la zone appauvrie du semi-conducteur, ce qui restreint le courant direct. En effet ce dernier est limité par la diffusion des porteurs à travers le champ électrique dans la zone de charge d'espace. Ce modèle est basé sur les suppositions suivantes :

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

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

$$J_D = J_{SD} \left(e^{\frac{qV}{kT}} - 1 \right) \quad (\text{II.35})$$

J_{SD} étant la densité de courant de saturation de la structure retrouvée par le modèle de diffusion et exprimée par :

$$J_{SD} = \frac{q^2 D_n N_c}{kT} \left[\frac{2qN_d (V_{b0} - V)}{\epsilon_s} \right]^{\frac{1}{2}} e^{\left(\frac{-q\Phi_B}{kT} \right)} \quad (\text{II.36})$$

Où D_n est la constante de diffusion des électrons dans le semiconducteur définie par :

$$\frac{D_n}{\mu_n} = \frac{kT}{q} \quad (\text{II.37})$$

II .7.1.3 Théorie de l'émission-diffusion

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

$$J_{TD} = \frac{qN_c v_r}{1 + v_r / v_d} e^{\frac{-q\phi_{Bn}}{kT}} (e^{qV/kT} - 1) \quad (\text{II.38})$$

La vitesse de recombinaison est donnée par :

$$v_r = \frac{A^* T^2}{qN_c} \quad (\text{II.39})$$

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

$$v_d \approx \mu_n \zeta_m \quad (\text{II.40})$$

C'est I_S qui fait différencier les mécanismes de transport de courant et il est dépendant des vitesses de recombinaison v_r et v_d .

- Si $v_d \gg v_r$ le rapport $\frac{qN_c v_r}{1 + v_r / v_d}$ de l'équation (II.38) tend vers $qN_c v_r$. C'est alors le processus thermoïonique à travers la couche d'interface qui domine (I_T). Pour un semiconducteur de très grande mobilité, la probabilité $v_d \gg v_r$ est généralement vérifiée;
- Si $v_d \ll v_r$ le rapport $\frac{qN_c v_r}{1 + v_r / v_d}$ de l'équation (II.38) se réduit à $qN_c v_d$ et c'est le processus de diffusion à travers la couche d'interface (I_D) qui domine. Cette fois ci pour un semiconducteur de faible mobilité la probabilité $v_d \ll v_r$ est vérifiée.

I .7.2 Courant par effet tunnel

Il y a deux modes de transports par effet tunnel à travers une barrière Schottky, l'un est fonction de la température (émission thermoïonique assistée par effet de champ), l'autre est en fonction du dopage (émission par effet de champ).

Si le transport du courant est contrôlé par l'émission thermoïonique d'électrons assistés par effet de champ, la relation de la densité de courant $J_{TC}(V)$ est exprimée par [11] :

$$J_{TC} = J_s e^{\frac{qV}{E_0}} \quad (II.41)$$

avec:

$$E_0 = E_{00} \coth\left(\frac{qE_{00}}{kT}\right) \quad (II.42)$$

E_{00} , E_0 représentent les énergies caractéristiques du semiconducteur relatif à la probabilité de transmission par effet tunnel, avec :

$$E_{00} = \frac{h}{4\pi} \sqrt{\frac{N_d}{m^* \epsilon_s}} \quad (II.43)$$

Où le facteur d'idéalité n est relié à l'énergie E_0 par la relation :

$$n = \frac{qE_0}{kT} \quad (II.44)$$

La densité du courant de saturation J_s (par le mécanisme d'émission thermoïonique d'électrons assisté par effet de champ) est fonction de la température et la hauteur de barrière ainsi que d'autres paramètres du semiconducteur. Ce mécanisme de transport est limité par les valeurs de la température T , qui vérifie :

$$kT > \frac{2qE_0}{\ln[4(\phi_{Bn} - V)/V_n]} \quad (II.45)$$

Et

$$\frac{\cosh^2(qE_{00}/kT)}{\sinh^3(qE_{00}/kT)} < \frac{2(\phi_{Bn} + V_n - V)}{3E_{00}} \quad (II.46)$$

Donc, la densité du courant de saturation J_s est exprimée par:

$$J_s = qA^*T \frac{[\pi E_{00}(\phi_{B0} - V - V_n)]^{1/2}}{k \cosh(qE_{00}/kT)} \exp\left[-\frac{qV_n}{kT} - \frac{q(\phi_{B0} + V_n)}{E_0}\right] \quad (II.47)$$

Les équations (II.45) et (II.46) permettent de déterminer la gamme de température pour laquelle le transport du courant peut être expliqué par le mécanisme d'émission thermoionique assisté par effet de champ:

En haute température, dans le cas où $qE_0 \ll kT$, l'équation (II.42) se réduit à $E_0 = kT/q$. La pente $1/E_0$ de la caractéristique $\ln(J_{TC}) = f(V)$ dépend directement de la température. Ce cas correspond de l'émission thermoionique

En basse température, le paramètre E_0 est presque constant puisque le terme E_{00} est très supérieur à kT . Par conséquent, la pente de la caractéristique $\ln(J_{TC}) = f(V)$ est constante et est indépendante de la température. Le mécanisme dominant est donc l'émission par effet de champ [12].

II .7.3 Courant de génération-recombinaison [13]

Précédemment, le calcul du courant traversant la structure est effectuée en négligeant les phénomènes de génération et de recombinaison dans la zone de charge d'espace. En fait, cette zone est le siège de génération thermique et de recombinaison.

Les phénomènes de recombinaison en direct et de génération en inverse à l'intérieur de la zone de charge d'espace peuvent être importants aux faibles courants. Le courant de génération-recombinaison s'écrit alors:

$$J = J_{sgr} (e^{qV/2kT} - 1) \quad (II.48)$$

J_{sgr} est le courant de saturation (génération-recombinaison) donné par:

$$J_{sgr} = \frac{qW n_i}{\tau} \quad (II-49)$$

n_i : la concentration intrinsèque du semiconducteur;

τ : la durée de vie des porteurs.

Références Bibliographiques

- [1] Olivier Bonnaud,
Physique des Solides,des Semiconducteurs et Dispositifs , l'Université de Rennes 1, 2003
- [2] H. Mathieu,
Physique des Semiconducteurs et des Composants Électroniques, 3ième édition
Masson,(1996).
- [3] Kheira Ameer,
Thèse de doctorat, Université de Sidi Bel Abbé, 2012.
- [4] Olivier Menard,
Thèse de doctorat, université François - Rabelais (Tours),2010
- [5] A. Vapaille, R. Castagné,
Dispositifs et Circuits Intégrés Semiconducteurs, Edition Dunod, (1990).
- [6] S. M. Sze, Kwok K. NG,
Physics of Semiconductor Devices, Third Edition, JOHN Wiley & Sons, JNC, 2007.
- [7] Toumi Sihem,
Thèse de doctorat, Université de Sétif, 2012.
- [8] E. H. Rhoderick ,
Metal-semiconductor contacts, Clarendon Press Oxford, 1980.
- [9] W. Schottky,
Halbleitertheorie der Sperrschicht, Naturwissenschaften, 26, 843, 1938.(diffusion).
- [10] C. R. Crowell and V. L. Rideout,
Solid-State Electronics, Pergamon Press 1969. Vol.12.
- [11] F. A. Padovani, R. Straton,
Solid Stat. Electron. 9, 695 (1966).
- [12] P. Chattopadhyay,
Solid State Electronics, 38, 739 (1995).
- [13] A. Y. C. Yu et E. H. Snow,
Journal of applied physics 39, 7, 3008 (1968).
- [14] P. Chattopadhyay and A. N. Daw ,
Solid State Electronics, 28, 831 (1989).

- [15] Akkal Boudali,
Thèse de doctorat d'état de l'université de Sidi-Bel-Abbés (2002).
- [16] K. Ploog and H. J. Queisser,
Physical Review Letters, 57, 1080 (1986).

Chapitre III

Propriétés des matériaux GaAs et du GaN : structure et élaboration

III .1 Introduction

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

Principalement remarquables par leurs propriétés électroniques, les semi-conducteurs III-V interviennent dans presque tous les équipements électriques et optiques.

En électronique rapide et en optoélectronique [1,2], les composés semi-conducteurs III-V sont préférables que d'autres (les propriétés du silicium par exemple sont insuffisantes : mobilités des porteurs relativement petites et transition électroniques indirectes au seuil d'absorption optique). On citera pour exemple quelques composés binaires et ternaires, GaAs, InP, GaAlAs, InGaAs,... Les propriétés de ces matériaux sont très intéressantes pour les performances de ces dispositifs.

L'optimisation de la croissance de GaN massif constitue aujourd'hui un enjeu primordial. Cependant, la difficulté majeure rencontrée pour le dépôt de tous les nitrures résulte de cette absence de substrat. Ceci conduit à une hétérojonction à très fort désaccord à la fois de paramètre de maille, de structure cristalline, de polarité de surface et de coefficient de dilatation thermique. Le saphir reste le substrat le plus utilisé malgré son désaccord qui est de l'ordre de 1 % avec le GaN. Néanmoins, le GaAs représente un bon candidat pour la croissance de GaN grâce à une technique appelée nitruration qui permet la création de quelques monocouches atomiques de nitrure de galium à partir des éléments du substrat de GaAs [3].

Dans ce chapitre, certaines propriétés des semi-conducteurs III-V et des composés III-N seront présentées. Puis nous insisterons sur les caractéristiques structurales du GaAs et du GaN, ainsi que les techniques de croissance permettant d'élaborer les structures GaN/GaAs.

III.2 Définition des semiconducteurs III-V à base de gallium

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

Les semiconducteurs III-V à base de gallium se sont des semiconducteurs III-V formés à partir d'un élément de la 3^{ème} ligne de la III^{ème} colonne et d'un élément de la V^{ème} colonne de la classification périodique de Mendeliev, c.-à-d. le gallium (Ga). Par exemple GaN, GaAs...

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 III.1 : Extrait de la classification périodique des éléments.

III.3 Propriétés générales du GaAs et du GaN

III.3.1 Propriétés générales du GaAs

Le GaAs est un semi-conducteur III-V complexe composé de l'élément gallium (Ga) de la colonne III et l'élément de l'arsenic (As) de la colonne V du tableau périodique des éléments. Le GaAs a d'abord été créé par la société Goldschmidt en 1929, mais les premières propriétés électroniques de ce semi-conducteur ne furent démontrées qu'en 1952 [4].

Le cristal GaAs est composé de deux sous-réseaux, chacun cubique à faces centrées (FCC) et décalé par rapport à l'autre par la moitié de la diagonale du cube. Cette configuration cristalline est connue sous le nom blende de zinc et est représentée sur la figure III.1.

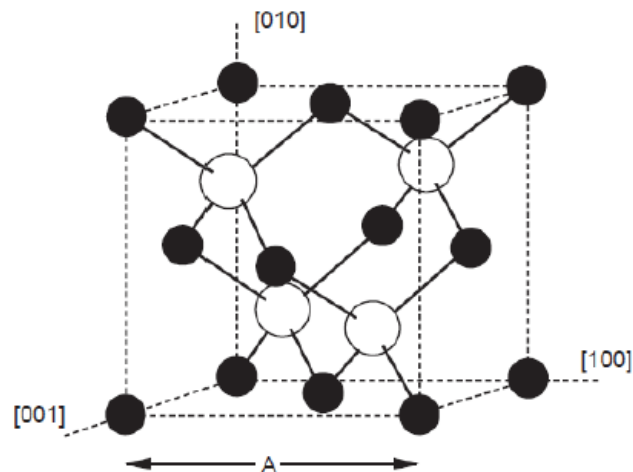


Figure III .1: Réseau cristallin du GaAs (zinc de blende).

Le tableau III-2 dresse une liste de certaines propriétés structurales et électriques du GaAs.

Propriété	Valeur
Structure cristalline	Zinc blende
Paramètre de maille	5.65 Å
Densité	5.32 g/cm ³
Densité atomique	4.5×10^{22} atomes/cm ³
Masse molaire	144.64 g/mol
Coefficient d'expansion thermique	5.8×10^{-6} K ⁻¹
Chaleur spécifique	0.327 J/g.K
Constante diélectrique	12.85
Mobilité des électrons (non dopé)	8500 cm ² /V.s
Mobilité des trous (non dopé)	400 cm ² /V.s
Point de fusion	1238 °C

Tableau III.2 : Liste de certaines propriétés structurales et électriques du GaAs.

Pour du GaAs non dopé, l'énergie de gap à température ambiante est de 1,42 eV. L'affinité électronique du GaAs, $q\chi$ (énergie nécessaire pour arracher un électron du bas de la bande de conduction jusqu'au niveau du vide) est d'environ 4.07 eV [5,6].

Le GaAs est un semi-conducteur à gap direct, ce qui signifie que le minimum de la bande de conduction est directement au-dessus du maximum de la bande de valence (figure III.2).

Les transitions entre la bande de valence et la bande de conduction nécessitent seulement un changement d'énergie, et non un changement de moment, contrairement aux semi-conducteurs à gap indirects tels que le silicium (Si). Comme nous l'avons vu, cette propriété en fait un matériau très utile pour la fabrication de diodes électroluminescentes et de lasers à semi-conducteurs, car un photon est émis quand un électron change de niveau d'énergie en passant de la bande de conduction à la bande valence. A l'inverse, un photon incident peut exciter un électron de la bande de valence à la bande de conduction, ce qui permet d'utiliser le GaAs dans les détecteurs de photovoltaïque.

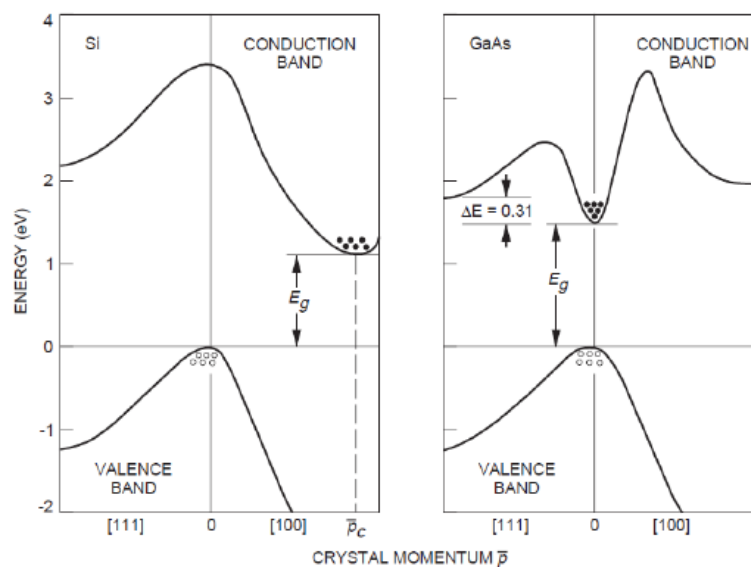


Figure III.2: Comparaison de la structure de bande du Si et du GaAs [7].

III .3.2 Propriétés générales du GaN

Le Nitrure de Galium est un matériau résultant de l'association de l'Azote et du Galium. Le GaN se cristallise sous deux formes différentes, la structure hexagonale ou wurtzite (h-GaN), et la structure cubique (blende de zinc: c-GaN). [8]

a- La structure blende de zinc

Cette structure est formée de deux sous réseaux cubiques à faces centrées comprenant chacun un type d'atomes décalés d'un quart par rapport à la diagonale de la maille. Cette structure est thermodynamiquement instable et est moins exploitée par rapport à l'autre type, la valeur de sa paramètre de maille élémentaire est de $a_0 = 4.511 \text{ \AA}$ à 300K.

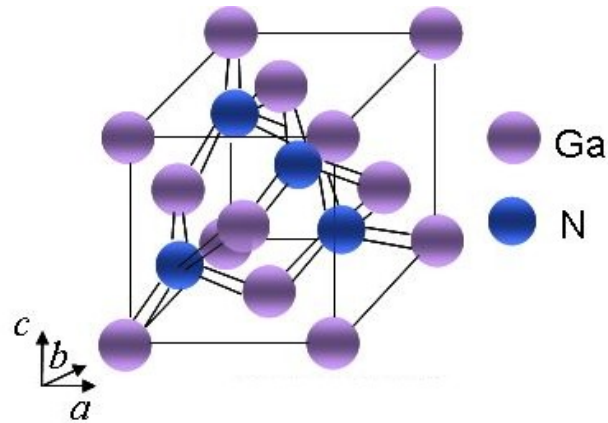


Figure III.3: Structure cristalline blende de zinc du GaN.

b- La structure wurtzite

Celle-ci par contre est constituée de deux réseaux hexagonaux, l'un avec les atomes de Gallium et l'autre avec les atomes d'azote, interpénétrés et décalés entre eux suivant l'axe c de $5/8$ de la maille élémentaire. (Figure III.4)

La structure wurtzite possède deux paramètres principaux, (a_0) le paramètre de maille latérale et (c_0) le paramètre de maille verticale. Leurs valeurs ainsi que celles d'autres semiconducteurs sont portées sur le tableau III.3. [9]

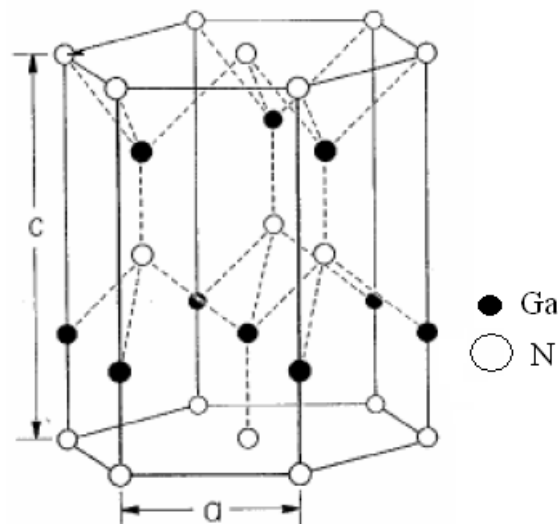


Figure III.4: Structure cristalline hexagonale du GaN

Matériaux	AlN	GaN	InN
$a_0 (Å)$	3.112	3.189	3.540
$c_0 (Å)$	4.982	5.185	5.705

Tableau III.3: Relevé des valeurs des paramètres de maille du h-GaN à 300°k [9].

La croissance de la structure hexagonale du GaN se fait sur l'axe de croissance $[0001]$ ou $[000\bar{1}]$, les atomes sont rangés en deux couches interpénétrées, décalées et formant deux espaces hexagonaux, l'un avec des cations c'est à dire des atomes de gallium (Ga) et l'autre par des anions c'est-à-dire les atomes d'azote (N). [10]

Si l'axe de polarité de la surface est $[0001]$ le sommet de la structure sera formé uniquement par des atomes de gallium, on l'appelle alors à face Ga, par contre l'axe de polarité $[000\bar{1}]$ contient uniquement des atomes d'azote à la surface, on l'appelle alors à face N (figure III.5).

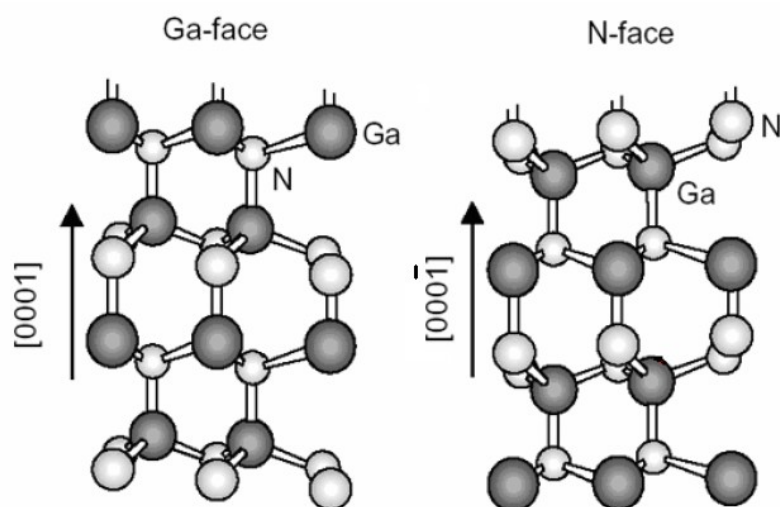


Figure III.5: Schéma de la structure wurtzite à face Ga et à face N.

III.3.2.1 Les propriétés électroniques

Les propriétés électroniques du matériau GaN sont montrées sur le tableau III-4 comparé avec d'autres semiconducteurs usuellement utilisés [11] :

Matériau	Si	GaAs	SiC	GaN
Energie de gap (eV)	1.11	1.43	3.2	3.4
Champ de claquage (V/cm)	6.0×10^5	6.0×10^5	6.0×10^6	6.0×10^6
Vitesse de saturation (cm/s)	6.0×10^7	6.0×10^7	6.0×10^7	6.0×10^7
Mobilité électronique (cm ² /V.s)	1350	6000	800	1600
Conductivité thermique (W/cm.K)	1.5	0.46	3.5	1.7
hétérostructures	SiGe/Si	AlGaAs/GaAs InGaP/GaAs AlGaAs/InGaAs	-	AlGaIn/GaN InGaIn/GaN

Tableau III.4: Propriétés électroniques du GaN comparées à d'autres matériaux utilisés.

III.3.3 Epitaxie du GaN

Les caractéristiques importantes à prendre en compte, lorsque l'on parle de croissance sur un substrat, sont les paramètres de maille et les coefficients de dilatation thermique. En effet, pour maximiser les chances d'avoir un matériau avec le moins de défauts et de contraintes possibles, il est nécessaire de faire croître le GaN sur un substrat doté d'une structure cristallographique la plus « compatible » possible avec celle du nitrure de gallium.

III.3.3.1 substrats pour la croissance du GaN

Le substrat de GaN mono-cristallin massif n'est pas disponible dans le commerce. Ceci est dû à plusieurs contraintes, sa haute température de fusion ainsi que ses fortes pressions de vapeur saturante de ces composés.

Jusqu' à présent, il n'existe pas de substrat adapté à la croissance du GaN, qui soit en bon accord de maille. Cependant, on réalise des couches de GaN sur des substrats comme le saphir ou le GaAs. Dans les conditions ambiantes, les structures thermodynamiquement stables des couches massives du GaN sont de type Wurtzite. Toutefois, des couches fines de GaN de structure blende de zinc ont été stabilisées par croissance sur des substrats cubiques tels que le GaAs. Dans ces conditions, la tendance naturelle du GaN à cristalliser dans la structure wurtzite est dominée par la compatibilité topologique entre le substrat et la couche.

Le substrat le plus utilisé pour la croissance de GaN est l'arsenic de gallium GaAs, malgré le désaccord de maille qui est très important (de l'ordre de 20%). Le tableau III.2 rassemble les substrats les plus couramment utilisés pour la croissance du GaN, ainsi que les paramètres de maille obtenus pour chaque poly type et le facteur de dilatation entre le GaN et le substrat.

GaN hexagonal			
Matériau	Structure cristalline.	Paramètre de maille (Å)	Coefficient de dilatation thermique $\Delta a/a ; \Delta c/c$ ($\times 10^{-6} \text{K}^{-1}$)
Saphir (Al_2O_3)	Hexagonale	$a=4.758 ; c=12.99$	$a=7.5 ; c=8.5$
6H SiC	Wurtzite	$a=3.08 ; c=15.12$	$a=4,2 ; c=4.68$
Si (111) (100)	Cubique	$a=5.4301$	$a=3.59$
GaAs (111) (100)	Cubique	$a=5.6533$	$a:6$
ZnO	Wurtzite	$a=3.250 ; c=5.213$	$a=8.25 ; c=4,75$
AlN (couche tampon)	Wurtzite	$a=3.112 ; c=4.982$	$a = 4.2 ; c = 5.3$
GaN cubique			
Matériau	Structure cristalline.	Paramètre de maille (Å)	Coefficient de dilatation thermique $\Delta a/a ; \Delta c/c$ ($\times 10^{-6} \text{K}^{-1}$)
3 C SiC	Cubique	$a=4,36$	$a \cong 5^*$
Si (100)	Cubique	$a=5,4301$	$a = 3,59$
GaAs (100)	Cubique	$a=5,6533$	$a = 6$
MgO	Cubique	$a=4,126$	$a = 10,5$

Tableau III.5: Paramètres de maille et coefficients de dilatation thermique des substrats les plus employés pour la croissance de GaN. Les coefficients de dilatation thermique sont donnés autour de 800°C .

III.3.3.2 Procédés de croissance du GaN

La solution la plus raisonnable économiquement pour la croissance du GaN est l'épitaxie. Nous allons donc aborder quelques techniques de croissance comme la HVPE pour « Hydrid Vapor Phase Epitaxy », la MBE pour « Molecular Beam Epitaxy » et la MOCVD « MetalOrganic Chemical Vapor Deposition ».

III.3.3.2.1 L'épitaxie en phase vapeur aux hydrures (HVPE)

La technique généralement utilisée pour fabriquer les substrats de GaN destinés à l'homoépitaxie (de GaN) ou certaines couches tampons, est l'HVPE (Hydride Vapor Phase Epitaxy) soit l'épitaxie en phase vapeur aux hydrures. Cette technique, la plus ancienne mise en place [12], fait intervenir de l'ammoniac (NH_3) comme précurseur de l'élément V et pour l'élément III, un chlorure, le GaCl, obtenu par passage du gallium liquide dans de l'acide chlorhydrique. Le GaCl réagit à température ambiante avec l'ammoniac pour former du GaN qui va condenser et se déposer sur l'échantillon porté à 1100°C :



III.3.3.2.2 L'épitaxie par jets moléculaires (MBE)

La croissance par jets moléculaires est une méthode qui consiste à envoyer les éléments constituant le matériau par jets de molécules sur un substrat chauffé entre 450°C et 850°C , en les évaporant (à partir de sources liquides) ou en les sublimant (à partir de sources solides) pour le cas du gallium. Cette technique s'effectue sous un vide très poussé ($<10^{-6}$ mbar). De la qualité de ce vide dépendra la qualité des films déposés. Les atomes arrivent avec une certaine énergie sur la surface du substrat. Si la température est trop élevée, ils ne vont pas adhérer à la surface (Figure III.6-A). Mais pour une température optimisée, ils se fixent dans les lacunes du substrat (Figure III.7-B) ou, par nucléation, à d'autres atomes déjà incorporés sur le substrat (Figure III.6 C).

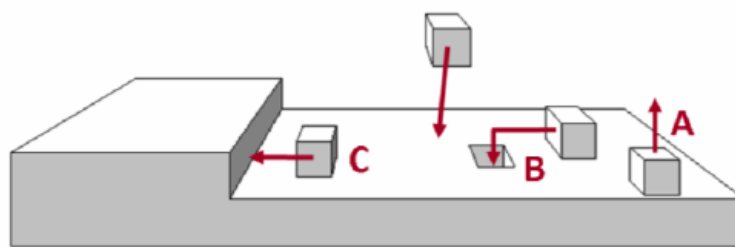


Figure III.6: Schéma illustrant la croissance épitaxiale [12].

Le matériau va ainsi croître couche atomique par couche atomique. Ce type de croissance est donc beaucoup plus lent, environ $1\mu\text{m/h}$. On va pouvoir ainsi contrôler parfaitement l'épaisseur déposée. Pour cela on utilise généralement une sonde RHEED (Reflexion High Energy Electron Diffraction) installée dans le bâti de dépôt qui va contrôler en temps réel la quantité d'éléments incorporés.

Pour le dopage du nitrure de gallium, on utilise aussi des sources solides de magnésium (dopage type p) et de silicium (type n). A ce sujet, nous verrons plus tard que les dopants incorporés lors de la croissance du matériau vont être sources de contraintes à l'origine de défauts dans la couche, pouvant mener à la destruction de ce film.

La MBE est reconnue pour donner de bons résultats concernant la croissance des matériaux III-V comme GaAs, InP, GaP. On préférera cependant la MOCVD pour la croissance des nitrures d'éléments III essentiellement pour des raisons de vitesse de croissance.

III.3.3.2.3 L'épitaxie en phase vapeur aux organométalliques (MOCVD)

Cette technique, introduite à la fin des années 60 par H. Manasevit, consiste à injecter un composé organique contenant l'atome métallique, du TMGa (Triméthylgallium) ou du TEGa (Triéthylgallium) pour le gallium, puis un gaz vecteur (dihydrogène H₂), pour véhiculer les composés vers le réacteur sur un substrat chauffé à 1000°C. Le TMGa va se décomposer avec le H₂ pour former du gallium (Equation III-2). Puis le gallium va s'associer par pyrolyse avec l'azote, provenant d'une source comme l'ammoniac (NH₃), pour former du GaN qui va se condenser sur le substrat selon l'Equation III-3 :



Il a été mentionné que les composés carbonés obtenus lors de la réaction provenant de l'utilisation des organométalliques, peuvent être une source de contamination en créant des défauts électriquement actifs [12]. En définitive, cette méthode de croissance permet des vitesses de croissance de l'ordre de 30µm/h.

III.4 Les techniques d'analyses [13]

Toutes les analyses de surface reposent sur le même principe. On excite l'échantillon avec des électrons, des ions ou une radiation électromagnétique (constituée de photons); le matériau excité émet d'autres particules que l'on analyse en énergie ou en masse. Le spectre d'énergie ou de masse obtenu fournit alors les informations sur la composition de la surface.

III.4.1 La spectroscopie des électrons Auger (A.E.S)

La spectroscopie des électrons Auger, du nom de Pierre Auger (1899-1993), physicien français découvreur du phénomène en 1923, repose sur un processus de désexcitation des

atomes appelé émission ou effet Auger [14 ,15]. Il s'agit d'un processus à trois électrons provenant d'un atome, illustré sur la figure III.6.

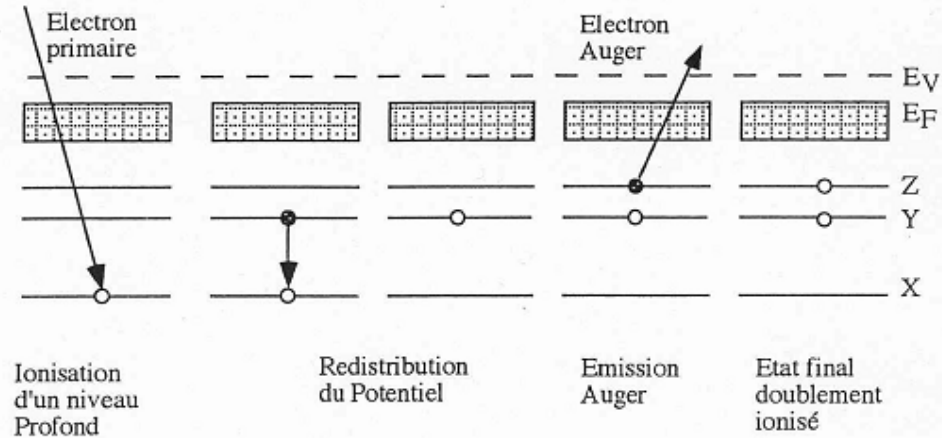


Figure III.6: Principe de l'émission Auger.

Ce processus fait intervenir trois niveaux d'énergie de l'atome, il est basé sur le fait que le bombardement d'un matériau par un faisceau d'électrons d'énergies comprise entre 1 et 3 keV peut induire l'ionisation d'un atome d'un niveau profond, en l'occurrence le niveau X suivant l'exemple pris dans la figure [III-6]. Il va émettre un électron secondaire qui résulte de la désexcitation de cet atome initialement ionisé. Lorsque cet électron est éjecté, il y a formation d'une lacune.

Ensuite par un processus interne de désexcitation, un électron d'un niveau plus externe Y, vient combler le trou créé en niveau de cœur. L'atome est maintenant ionisé au niveau Y. L'excédent d'énergie lié à ce processus peut être libéré sous deux processus différents : soit par un processus radiatif (émission d'un photon X), sous la forme d'un photon d'énergie $E_X - E_Y$, soit sous la forme d'un transfert d'énergie à un électron d'un niveau supérieur Z : C'est l'effet Auger

L'énergie cinétique de l'électron Auger émis ne dépend que des énergies des trois niveaux électroniques mis en jeu dans ce processus de désexcitation et peut s'écrire, dans une première approximation générale :

$$E_{xyz} = E_x - E_y - E_z \quad (\text{III.4})$$

où E_x , E_y , E_z , représentent les énergies de liaison des niveaux électroniques de l'atome dans l'état fondamental.

La spectroscopie Auger permet d'obtenir des informations sur les premières monocouches atomiques d'un substrat à savoir : les caractéristiques des atomes excités et d'identifier par conséquent les espèces chimiques présentes à la surface d'un substrat [16, 17]. En effet, les électrons émis ont généralement une énergie faible (100 eV à 500 eV). Donc ceux qui arrivent à la surface ne proviennent que des premières couches superficielles à cause de leur libre parcours moyen inélastique λ_i qui est de l'ordre de quelques nanomètres.

III.4.2 La spectroscopie des photoélectrons X (XPS ou ESCA)

La spectroscopie de photoélectrons X (XPS : X-Ray Photoelectron Spectroscopy), parfois aussi appelé ESCA (Electron Spectroscopy for Chemical Analysis) a été conçue par K. Siegbahn, physicien suédois, prix Nobel de physique en 1981 [18]. C'est une technique d'analyse non destructive de la composition en surface d'un matériau. En fait, sous l'effet d'un faisceau X approprié, les atomes à la surface d'un échantillon solide subissent une ionisation photoélectronique, résultant en l'expulsion d'un électron d'une couche profonde. L'énergie cinétique de cet électron dépend de la longueur d'onde du faisceau primaire, de l'énergie de liaison du photoélectron émis et du travail d'extraction. L'énergie de liaison du photoélectron émis est caractéristique de l'atome émetteur.

Dans le matériau, des électrons appartenant à des niveaux de cœur absorbent l'énergie $h\nu$ des photons X ; la conservation de l'énergie se traduit par :

$$h\nu = E_{c0} + E_{\text{liaison}}. \quad (\text{III.5})$$

Avec E_{c0} l'énergie cinétique acquise par le photoélectron dans le matériau et E_{liaison} son énergie de liaison avant l'absorption. Toutes les énergies sont référencées par rapport au niveau de Fermi du matériau. Les photoélectrons qui atteignent la surface sans perte d'énergie sont émis dans le vide avec une énergie cinétique :

$$E'_{\text{cin}} = E_{c0} - \phi_{\text{éch}} \quad (\text{III.6})$$

où $\phi_{\text{éch}}$ est le travail de sortie de l'échantillon, défini comme la différence entre le niveau de Fermi du matériau et le niveau du vide.

L'ensemble de l'appareillage est en équilibre thermodynamique avec l'échantillon (contact électrique, température, pression), ainsi les potentiels chimiques (ou niveaux de Fermi) sont égaux. Nous obtenons ainsi le diagramme énergétique de la figure [III-7], qui nous donne l'équation de la conservation de l'énergie :

$$h\nu = E'_{\text{cin}} + \phi_{\text{éch}} + E_{\text{liaison}} = E_{\text{cin}} + \phi_{\text{spectro}} + E_{\text{liaison}} \quad (\text{III.7})$$

L'énergie cinétique mesurée par les détecteurs d'électrons E_{cin} permet d'obtenir l'énergie de liaison en faisant intervenir le travail de sortie du détecteur ϕ_{spectro} .

$$E_{\text{liaison}} = h\nu - E_{\text{cin}} - \phi_{\text{spectro}} \quad (\text{III.8})$$

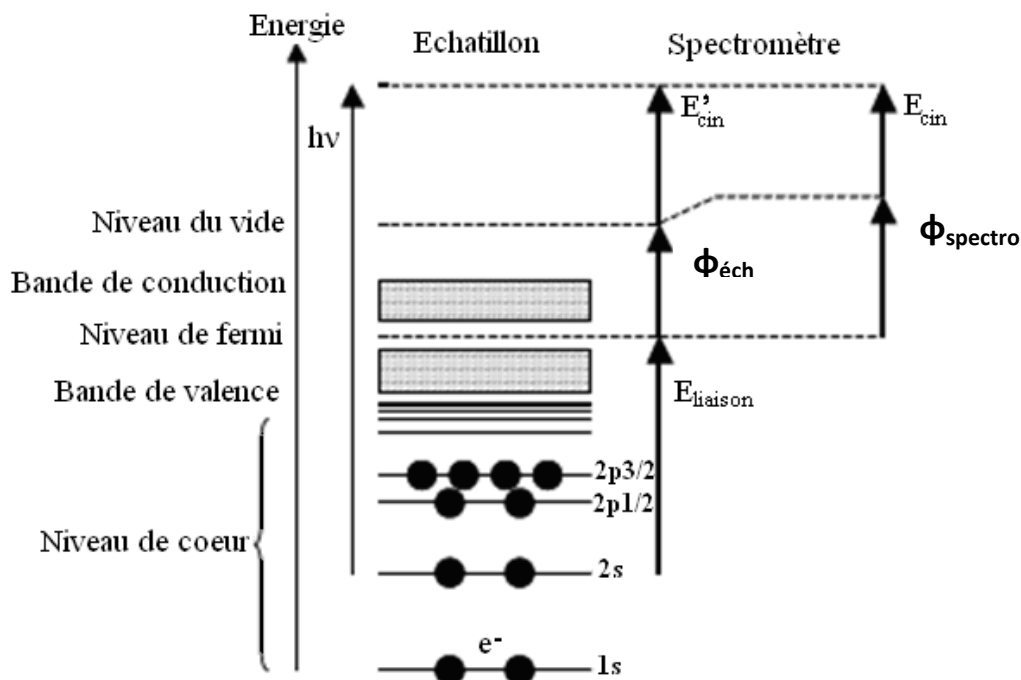


Figure III.7: Diagramme énergétique des photoélectrons mesurés en XPS.

III.5 Préparation des échantillons

Les échantillons utilisés dans notre étude sont fabriqués dans le Laboratoire des Sciences des Matériaux pour l'Electronique et d'Automatique (LASMEA) de l'université de Blaise Pascal-Clermont II. Nous présentons dans ce qui suit les différentes étapes technologiques utilisées pour la réalisation des structures GaN/GaAs.

III.5.1 Nettoyage des échantillons de GaAs

Les substrats d'arséniure de gallium utilisés pour cette étude sont des substrats présentant sous la forme de plaquettes circulaires d'une épaisseur de 400 μm et de 2 pouces de diamètre (environ 50 mm). Ces substrats sont réalisés par tirage Czochralski et sont ensuite

découpés et polis suivant le plan cristallographique (100). Ces échantillons sont dopés au silicium (type n) et ont une concentration de porteurs $N_d = 4.9 \times 10^{15}$ atomes /cm³.

a)- Nettoyage chimique:

Il est très important de nettoyer chimiquement les plaquettes d'arséniure de gallium avant toute application afin d'éliminer les diverses impuretés telles que les oxydes et les graisses. Les étapes de nettoyage chimique sont représentées sur la figure III.8

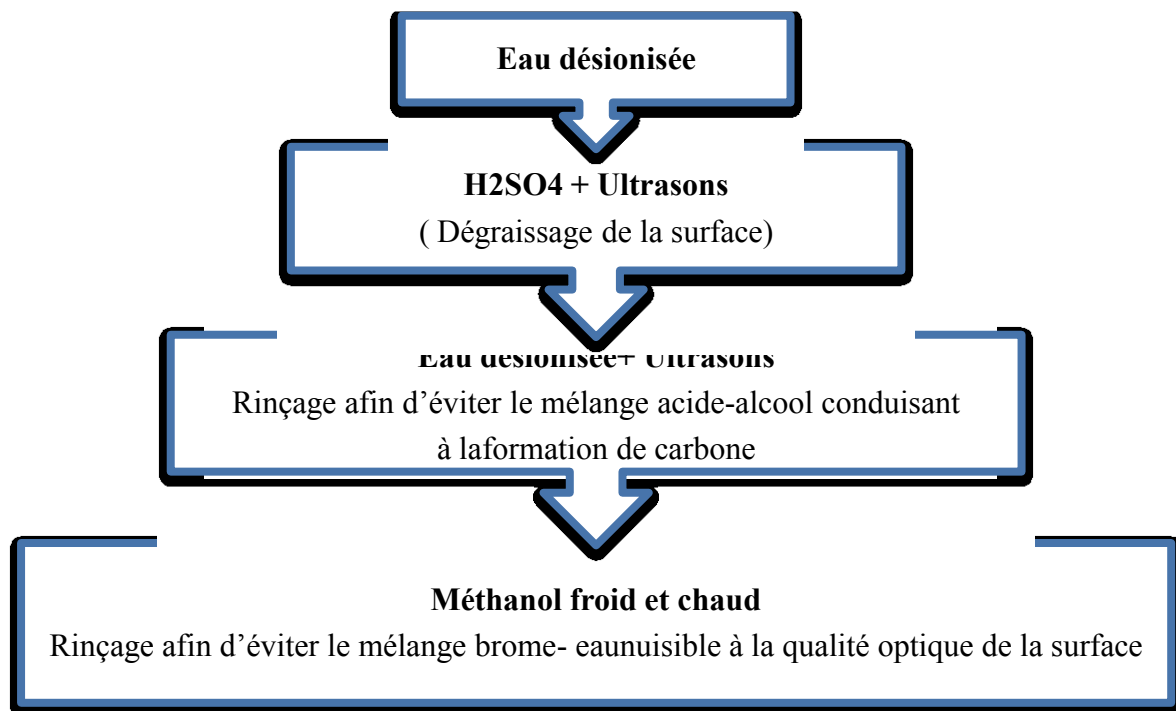


Figure III.8: Processus de nettoyage chimique d'une surface de substrat de GaAs

b)- Nettoyage ionique:

Une fois le nettoyage chimique terminé, les échantillons sont introduits dans l'enceinte ultra-vide pour qu'ils subissent un nettoyage ionique in-situ et une caractérisation par spectroscopie de photoélectrons (XPS). Les paramètres de nettoyage utilisés pour les substrats GaAs sont les suivants [19]:

- Pression d'argon dans la chambre : 1×10^{-4} Pa ;
- Energie des ions d'argon : 1000 eV ;
- Densité du courant de faisceau : 5uA/cm ;
- Durée du nettoyage : 60min ;

Comme le bombardement ionique n'implique pas la formation de gallium métallique, quatre configurations possibles (a, b, c, d) sont considérées pour la représentation de la surface (voir figure II.9).

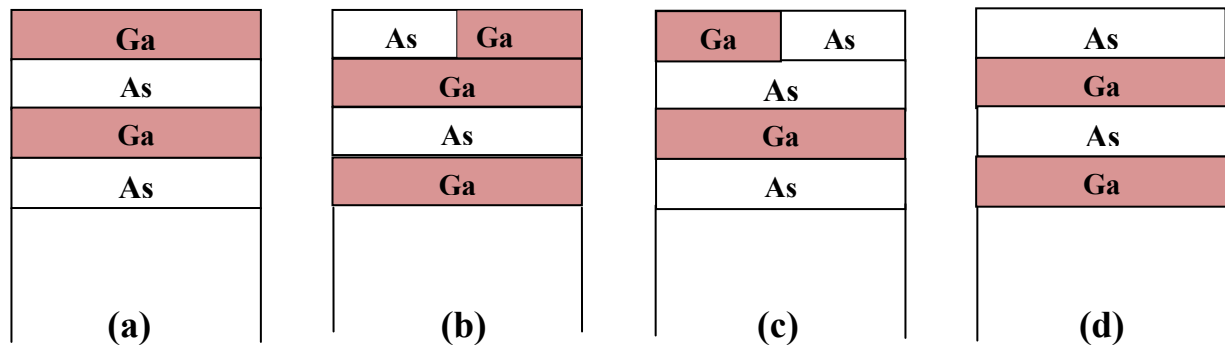


Figure III.9: Différentes hypothèses de représentation de la composition surfacique du GaAs après le nettoyage ionique

III.5.2 Nitruration des substrats de GaAs [20]

Le processus de nitruration des substrats de GaAs que nous employons est basé sur la présence de cristallites de gallium métalliques créés lors du nettoyage de la surface par le bombardement ionique. Après la création des cristallites de gallium (première étape du processus de nitruration), la surface du substrat est soumise à un flux d'azote actif (N , N^+ , N_2^+) produit par une source à décharge (Glow Discharge Cell, GDS).

La puissance de la source GDS est comprise entre 3 et 10 W, le temps d'exposition au plasma varie de 0 à 60 minutes et la température de 450 à 620 °C.

III.5.2.1 Modélisation des couches de GaN/GaAs

Le figure [III-10] représente une schématisation de l'état de la surface de du substrat de GaAs au cours des différents processus de nitruration. Ces différents états ont été déduits des résultats obtenus pas spectroscopies électroniques. Les atomes d'azote viennent se combiner aux atomes de Gallium métalliques présents à la surface de GaAs bombardée ioniquement. Les monocouches de Gallium jouent alors le rôle de précurseurs. Des couches de GaN sont alors créées par consommation de gallium sous conditions de croissance optimales (température du substrat, angle d'incidence du flux d'azote, temps de nitruration...). La surface de GaAs est alors recouverte par des couches de GaN.

Afin d'augmenté l'épaisseur de la couche de GaN il sufi de déposé une couche de Gallium en surface et refaire l'étape de nitruration

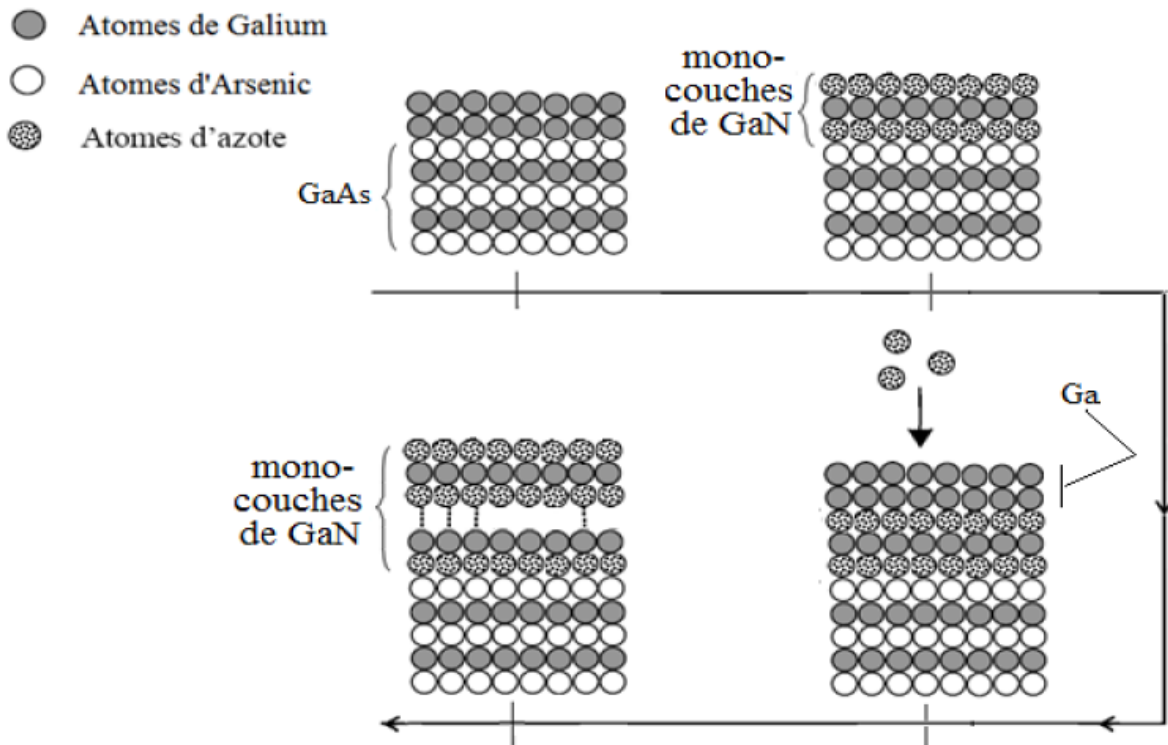


Figure III.10: Schématisation des différentes étapes du processus nitruration pour la formation des monocouches de GaN /GaAs.

III.6 Les défauts ponctuels dans la couche de GaN

III.6.1 Lacunes d'azote et de gallium

La lacune d'azote est le défaut le plus étudié théoriquement car elle est soupçonnée d'être à l'origine du dopage résiduel. Neugebauer [21] et Boguslawski [22] ont étudiées des couches de GaN cubique déposées par croissance EJM assistée par plasma RF sur des pseudo-substrats 3C SiC/Si, les précurseurs sont Ga solide et N₂ gazeux. Ils ont montré que les lacunes d'azote étaient à l'origine d'un niveau donneur léger simple dans le GaN. De manière générale, ces lacunes se formeront plus facilement sous conditions de croissance riches en gallium, alors que les lacunes de gallium qui jouent le rôle d'accepteurs seront favorisées par une croissance riche d'azote.

Les conditions de croissance optimales pour le GaN sont obtenues avec des rapports V/III très élevés [23], qui devraient défavoriser la formation de lacunes d'azote.

III.6.2 Les atomes d'impuretés dans la couche de GaN

Les impuretés souvent présentes dans les couches épitaxiales sont le silicium, l'oxygène et le carbone. Le Si provient probablement des éléments en silice des bâtis de croissance. L'oxygène peut également venir de la silice, des gaz vecteurs ou de l'ammoniac, lorsque celui-ci est utilisé comme précurseurs. Le carbone se trouve en particulier en EPVOM (Épitaxie Phase Vapeur Organo-Métallique) où il provient essentiellement des précurseurs organométalliques. Le silicium se place préférentiellement en site gallium (SiGa). Il agit alors comme donneur. Sous conditions de croissance riche en N. L'oxygène se positionne en priorité en site azote (ON) où il agit comme donneur simple.

La formation de défauts ON est favorisée sous condition de croissance riche en gallium.

L'oxygène serait un donneur relativement léger d'énergie d'activation ~ 80 meV [24], et son incorporation serait réduite en EPVOM lorsque la température de croissance augmente [25]

Le carbone est un accepteur en site azote, site qu'il occupe préférentiellement du fait des faibles différences entre les rayons des atomes de C et N. les résultats expérimentaux indiqueraient que la pollution au carbone en EPVOM décroît lorsque la température de croissance augmente [23].

Références bibliographiques :

- [1] R.CASTAGNE, J.P.DUCHEMIN, M.GLOANNEC,
Circuits Intègres en Arséniure de Gallium, Collection technique et scientifique des télécommunications, Masson (1989)
- [2] J.L.PANKOVE,
Optical processes in semiconductors, Dover publications Inc. (1971)
- [2] Matthieu Petit
Thèse de doctorat, Université Blaise Pascal, Clermont-Fd II, (2004).
- [4] H. Welker, Z. Naturforsch,
Vol. A, No. 7, p. 744, 1952.
- [5] S. M. Sze,
Semiconductor Devices Physics and Technology, J. Wiley, New York, 1985.
- [6] R. F. Pierret,
Semiconductor Fundamentals, Addison-Wesley Publishing, NewYork, 1989.
- [7] F. Manghi, G. Riegler, C. M. Bertoni, G. B. Bachelet,
Phys. Rev. B, vol. 31 (1985) p. 3680–3688.
- [8] A.Denis
Elaboration cristallogénèse et caractérisations physico-chimiques des nitrures des éléments de la colonne III-a et en particulier le GaN. Thèse de doctorat, université Bordeaux 2003.
- [9] Rongming. Chu,
AlGaIn/GaN single and double channel high electron mobility transistors, thesis MSC HongKong university of Science and technology, 2004.
- [10] E.T.Yu,
O.Manasresh, book chapter for inclusion in III-V Nitride Semiconductors: Application and Devices, université of California at Sandiego la Jolla, CA 92093-0407.
- [11] Ricardo. Borges,
GaN high electron mobility transistor (HEMT).

- [12] Olivier Menard,
Développement de briques technologiques pour la réalisation de diodes schottky sur nitrure de gallium .thèse doctorat 2010.
- [13] Rafika Belroul,
Caractérisation électrique et modélisation des phénomènes de transport dans les nanocomposants à base des matériaux III-V, mémoire de magister 2011.
- [14] P. Auger,
Compt. Rend. Acad. Sci. Paris, 177 (1923) 169.
- [15] P. Auger,
J. Phys. Radium, 6 (1925) 205.
- [16] J. J. Lander,
Phys. Rev, 102 (1953) 1382.
- [17] G.A. Harrower,
Phys. Rev, 102 (1956) 340.
- [18] K.M.G. Siegbahn,
Prix Nobel de Physique en 1924. Nobel lectures, Elsevier Publishing Company, Physics (1922-1941)
- [19] Y. Ould-Metidji,
Thèse de doctorat, Université Blaise Pascal, Clermont-Fd II, (2002).
- [20] Zougagh Nabil,
Thèse de doctorat, Université de Sidi Bel Abbé, 2012.
- [21] J. Neugebauer, C. G. Van De Walle,
Phys. Rev. B.50, 11, 8067-8070 (1994).
- [22] O. Boguslaws, E. Briggs, J. Berholc,
Phys. Rev. B, 51, 23, 17255-17258 (1995).
- [23] O. Briot,
Physics and application. Edited by B. GIL. Oxford: Clarendon press, 70-122 (1998).
- [24] B. K. Meyer, Hoffmann.A, Thurian. P,
Physics and application. Edited by B. GIL. Oxford: Clarendon press, 243-306 (1998).
- [25] B. Chung, M. Gershenson,
J.Appl. Phys, 72, 2, 651-659 (1992).

Chapitre IV

Modélisation et résolution numérique

IV.1 Introduction :

Le comportement d'un dispositif semi-conducteur peut être décrit analytiquement par des expressions dérivées mais elles ne sont pas pleinement et correctement des équations décrivant le fonctionnement des dispositifs pratiques car elles dépendent fortement sur des approximations simplificatrices pouvant écarter la théorie par rapport aux courbes expérimentales. Pour ces raisons, on fait recours à des solutions basées sur des méthodes numériques pour obtenir des résultats plus précises. Cependant, la puissance de l'approche numérique est que l'on ne dispose pas de faire des hypothèses importantes qui sont nécessaires à l'approche analytique.

Dans ce chapitre, nous présenterons le modèle mathématique qui permet d'obtenir la caractéristiques I-V pour une diode Schottky. Ce modèle est généralement basé sur la résolution d'un système d'équations différentielles. La diode Schottky, comme tous les dispositifs semi-conducteurs, sont modélisés par trois équations fondamentales :

- L'équation de poisson
- Les deux équations de continuité des électrons et des trous.

Nous résolvons le système d'équations numériquement par la méthode de différences finies. Le potentiel électrostatique et les deux concentrations des porteurs mobiles n et p obtenus sont ensuite utiliser pour calculer les densités de courant en fonction de la tension appliquée aux bornes d'une diode Schottky.

IV .2 Modèle mathématique :

IV .2.1 Système d'équations :

Le système d'équation décrivant le comportement électrique d'une diode Schottky, dans un état stationnaire en deux dimensions formé par l'équation de Poisson et les deux équations de continuité qui tiennent en compte de l'effet de photo-génération. ainsi que les deux équations de transport, ce système prend la forme suivante :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} = \frac{q}{\varepsilon} (-p + n - \Sigma p_T + \Sigma n_T - N_D^+ + N_A^-) \\ -\frac{1}{q} \left(\frac{\partial^2 j_h}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 j_h}{\partial y^2} \right) = r_h - g_h \\ \frac{1}{q} \left(\frac{\partial^2 j_e}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 j_e}{\partial y^2} \right) = r_e - g_e \\ j_e = -qn\mu_n \left(\frac{\partial \varphi}{\partial x} + \frac{\partial \varphi}{\partial y} \right) + qD_n \left(\frac{\partial n}{\partial x} + \frac{\partial n}{\partial y} \right) \\ j_h = -qp\mu_p \left(\frac{\partial \varphi}{\partial x} + \frac{\partial \varphi}{\partial y} \right) + qD_p \left(\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial p}{\partial y} \right) \end{array} \right. \quad (IV. 1)$$

où n et p sont les concentrations des porteurs libres des électrons et des trous, ε est la constante diélectrique, N_A^- et N_D^+ sont les concentrations des impuretés ionisées d'accepteurs et des donneurs et $\Sigma p_T, \Sigma n_T$ sont les concentrations des états de pièges ionisés d'accepteurs et de donneurs, leurs expressions sont données par le modèle Shockley, Read et Hall (SRH).

$$\left\{ \begin{array}{l} \Sigma p_T = N_{TD} \frac{C_p p + C_n N_c \exp\left(\frac{E_{TD} - E_C}{KT}\right)}{C_n \left(n + N_c \exp\left(\frac{E_{TD} - E_C}{KT}\right) \right) + C_p \left(p + N_v \exp\left(\frac{E_V - E_{TD}}{KT}\right) \right)} \\ \Sigma n_T = N_{TA} \frac{C_p n + C_p N_v \exp\left(\frac{E_V - E_{TA}}{KT}\right)}{C_n \left(n + N_c \exp\left(\frac{E_{TD} - E_C}{KT}\right) \right) + C_p \left(p + N_v \exp\left(\frac{E_V - E_{TD}}{KT}\right) \right)} \end{array} \right. \quad (IV. 2)$$

où C_n et C_p sont les coefficients de capture et d'émission des électrons et des trous, E_{TA}, E_{TD} sont les positions énergétiques des états de pièges d'accepteurs et de donneurs.

IV.2.2 Densité de porteurs dans les bandes :

On dit qu'un semiconducteur est dégénéré lorsque le niveau de Fermi est situé dans une bande permise, bande de valence ou bande de conduction. Dans le cas contraire, qui correspond au fonctionnement de la majorité des composants, le niveau de Fermi est situé dans la bande interdite [1].

IV.2.2.1 Modélisation semi conducteur en régime non dégénéré :

Pour les semi-conducteurs non dégénérés, nous pouvons modéliser la densité de porteurs par la distribution de Boltzmann, dans ces conditions, la densité de porteurs libres s'écrit:

Dans la bande de conduction (électrons):

$$n = N_c \exp \left[\frac{-(E_c - E_{Fn})}{kT} \right] \quad (\text{IV. 3})$$

E_c : Le bas des énergies de la bande de conduction, E_{Fn} le niveau de Fermi des électrons, k est la constante de Boltzmann et T représente la température [13].

Avec N_c est la densité des états effective de la bande de conduction donnée par :

$$N_c = 2 \left(\frac{2m_c^* kT}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} \quad (\text{IV. 4})$$

Dans la bande de valence (trous):

$$p = N_v \exp \left[\frac{-(E_{Fp} - E_v)}{kT} \right] \quad (\text{IV. 5})$$

E_v énergie de la bande de valence, E_{Fp} variations de niveau Fermi des trous, K constant de Boltzmann, T temperature.

N_v c'est la densité des états effective de la bande de valence calculée par :

$$N_v = 2 \left(\frac{2m_v^* kT}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} \quad (\text{IV. 6})$$

IV .2.2.2 Modélisation semi conducteur en régime dégénéré :

En régime dégénéré on ne peut plus approximer la distribution de Fermi par une distribution de Boltzmann .En explicitant les densités d'états et les fonctions de distribution la densité, d'électrons par exemple, s'écrit :

$$n = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m_e}{\hbar^2} \right)^{3/2} \int_{E_c}^{\infty} \frac{(E - E_c)^{1/2}}{1 + e^{(E - E_F)/kT}} dE \quad (IV.7)$$

$$n = N_c F_{1/2}(\eta) \quad (IV.8)$$

$$F_{1/2}(\eta) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} \frac{\varepsilon^{1/2}}{1 + e^{\varepsilon - \eta}} d\varepsilon \quad (IV.9)$$

Ou $\eta = (E_F - E_c)/kT$ et $\varepsilon = (E - E_c)/kT$

De la même manière, en posant $\varepsilon_g = E_g/kT$, la densité de trous est donnée par :

$$p = N_v F_{1/2}(-\eta - \varepsilon_g) \quad (IV.10)$$

Les fonctions intégrales $F_{1/2}(x)$ ne sont pas d'un emploi très facile et il est parfois utile, dans l'étude de certains composants, d'étendre aux semi-conducteurs dégénérés la nature analytique des expressions des densités de porteurs utilisées pour les semi-conducteurs non dégénérés (Approximation de Boltzmann).

IV.3 Résolution numérique

La difficulté de la résolution de ce système d'équations est le nombre trop élevé des variables inconnues. Pour cela, on doit le simplifier à un système à trois inconnues qui sont le potentiel électrostatique ϕ , et les deux concentrations n et p .

A cause des termes exponentiels qui se trouvent dans les expressions de n et p et par conséquent dans les termes n et p et r , les équations formées sont donc fortement non linéaires.

Parmi les méthodes de résolution numérique d'équations différentielles, nous allons utiliser la méthode des différences finies par laquelle, après discrétisation du domaine d'étude, nous remplaçons l'équation différentielle par une équation aux différences. Pour la résolution du système, on utilise l'algorithme développé par Gummel [2]. Il consiste à résoudre successivement les trois équations du système. Chaque équation est résolue sur la base d'une solution estimée des deux autres inconnues. La valeur corrigée de chaque inconnue est ainsi mise à jour dans l'équation suivante. Ce processus itératif sera donc répété alternativement jusqu'à la convergence des trois équations (figure IV.1).

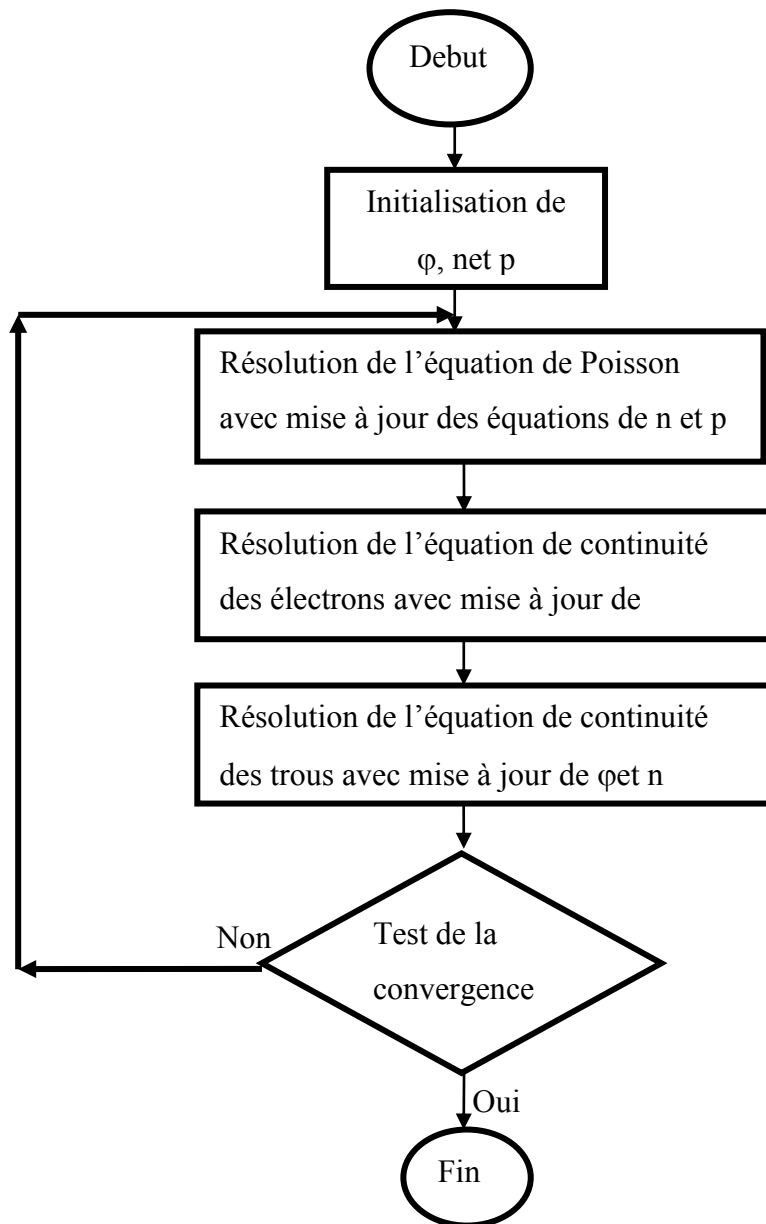


Figure IV.1: Organigramme de résolution du système d'équations différentielles.

IV .3.1 Maillage

La méthode des différences finies suppose de remplacer le problème physique contenu en un problème numérique discret adapté au traitement par l'ordinateur. Dans la méthode des différences finies, on partitionne le domaine d'étude en sous domaines par un maillage constitué en un ensemble de mailles élémentaires de forme parallélépipédique. L'intersection fournit l'ensemble des nœuds de maillage. Le calcul des potentiels se fait sur ces nœuds. Il y a trois conditions nécessaires [3] :

- La conservation du courant local le long du dispositif.
- La conservation des courants de conduction J_n et J_p entre deux points successifs du maillage.
- Une variation linéaire du potentiel électrostatique ψ entre deux points successifs du maillage.

Si le maillage est à pas constant (uniforme), il nous permet de simplifier les calculs, et de donner de bons résultats si les dimensions de la structure sont assez petites. Par contre si les dimensions sont élevées cela nécessite un nombre élevé de points, d'où un temps de calcul important. L'utilisation du maillage à pas constant entraînera l'existence de points inutiles, ce qui nous provoque un ralentissement de la résolution numérique et conduit éventuellement à la saturation de la mémoire de l'ordinateur.

Pour remédier à ces inconvénients, nous utilisons un maillage à pas variable. Dans les zones qui présentent de fortes variations de potentiel, le maillage doit être serré afin d'assurer une bonne précision sur la solution calculée.

IV.3.2 Linéarisation

La méthode de résolution numérique de la forme :

$$\text{div}(\text{agrad}(b)) = c \quad (IV.11)$$

est basée sur l'approche des différences finies et suppose connaître une solution initiale notée b_0 . Si b représente la meilleure solution de l'équation différentielle, nous pouvons donc écrire

$$b = b_0 + \delta b \quad (IV.12)$$

Avec δb un incrément petit devant b_0 .

Si on applique un développement limité de Taylor au premier ordre autour de c_0 , il vient :

$$c = c_0 + \left. \frac{\partial c}{\partial b} \right|_{\varphi=\varphi_0} \delta b \quad (\text{IV.13})$$

En remplaçant dans l'équation (V.11), il devient :

$$\nabla(a_0 + \delta a) \nabla(b_0 + \delta b) = c_0 + \left. \frac{\partial c}{\partial b} \right|_{\varphi=\varphi_0} \delta b \quad (\text{IV.14})$$

IV .3.3 Discrétisation du système par la méthode de différences finies

Nous nous limitons ici à la discrétisation classique de cinq points [4]. La nomenclature adoptée est montrée dans la figure V. 2.

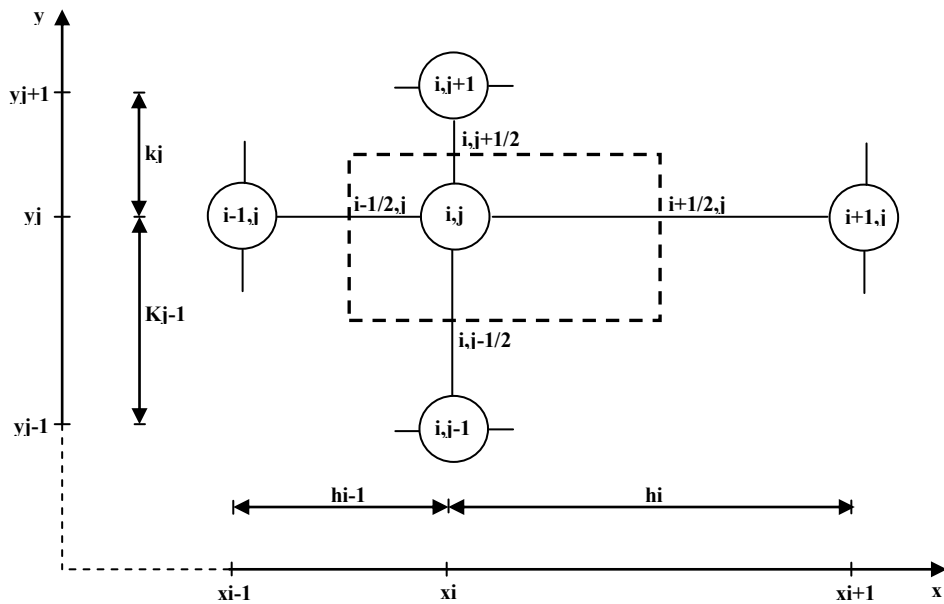


Figure IV.2 : La nomenclature adoptée pour les différences finies

Nous emploierons les abréviations suivantes :

$$h_i = x_{i+1} - x_i \quad i = 1, NX - 1 \quad (\text{IV. 15})$$

$$k_j = y_{j+1} - y_j \quad j = 1, NY - 1 \quad (\text{IV. 16})$$

Le système d'équations de base (V.1) peut être écrit aux point (i,j) : [4]

$$\begin{aligned} & \lambda^2 \left(\frac{\frac{\partial \varphi}{\partial x} \Big|_{i+1/2,j} - \frac{\partial \varphi}{\partial x} \Big|_{i-1/2,j}}{\frac{h_i + h_{i-1}}{2}} + o(h) \frac{\partial^3 \varphi}{\partial x^3} \Big|_{i,j} + \frac{\frac{\partial \varphi}{\partial y} \Big|_{i,j+1/2} - \frac{\partial \varphi}{\partial y} \Big|_{i,j-1/2}}{\frac{k_j + k_{j-1}}{2}} + o(k) \frac{\partial^3 \varphi}{\partial y^3} \Big|_{i,j} \right) - n_{i,j} \\ & + p_{i,j} + C_{i,j} \\ & = 0 \end{aligned} \quad (\text{IV. 17})$$

L'équation de continuité pour des électrons est :

$$\begin{aligned} & \frac{(-j_{nx}) \Big|_{i+1/2,j} - (-j_{nx}) \Big|_{i-1/2,j}}{\frac{h_i + h_{i-1}}{2}} + o(h) \frac{\partial^3 j_{nx}}{\partial x^3} \Big|_{i,j} + \frac{(-j_{ny}) \Big|_{i,j+1/2} - (-j_{ny}) \Big|_{i,j-1/2}}{\frac{k_i + k_{j-1}}{2}} \\ & + o(k) \frac{\partial^3 j_{ny}}{\partial y^3} \Big|_{i,j} - R(\varphi, n, p) \Big|_{i,j} + G \Big|_{i,j} = 0 \end{aligned} \quad (\text{IV. 18})$$

J_{nx} et J_{ny} sont respectivement les composants de densités de courant d'électron dans x et y.

$$j_{nx} = -qn\mu_n \frac{\partial \varphi}{\partial x} + qD_n \frac{\partial n}{\partial x} \quad (\text{IV. 19})$$

$$j_{ny} = -qn\mu_n \frac{\partial \varphi}{\partial y} + qD_n \frac{\partial n}{\partial y} \quad (\text{IV. 20})$$

De même, l'équation de continuité pour les trous est :

$$\begin{aligned} & \frac{j_{px} \Big|_{i+1/2,j} - j_{px} \Big|_{i-1/2,j}}{\frac{h_i + h_{i-1}}{2}} + o(h) \frac{\partial^2 j_{px}}{\partial x^2} \Big|_{i,j} + \frac{j_{py} \Big|_{i,j+1/2} - j_{py} \Big|_{i,j-1/2}}{\frac{k_i + k_{j-1}}{2}} + o(k) \frac{\partial^2 j_{py}}{\partial y^2} \Big|_{i,j} \\ & - R(\varphi, n, p) \Big|_{i,j} + G \Big|_{i,j} = 0 \end{aligned} \quad (\text{IV. 21})$$

J_{px} et J_{py} sont les composants de densité de courant de trou dans x et y respectivement.

$$j_{px} = p\mu_p \frac{\partial \varphi}{\partial x} + D_p \frac{\partial p}{\partial x} \quad (\text{IV. 22})$$

$$j_{py} = p\mu_p \frac{\partial \varphi}{\partial y} + D_p \frac{\partial p}{\partial y} \quad (\text{IV. 23})$$

La prochaine étape est de remplacer les valeurs des quantités, $\frac{\partial \varphi}{\partial x}$, $\frac{\partial \varphi}{\partial y}$ et J_{nx} , J_{ny} , J_{px} , J_{py} . En utilisant l'approximation de Scharfetter-Gummel[5] montré précédemment, nous obtenons alors après substitution, la forme matricielle finale suivante :

L'équation de Poisson :

$$\begin{aligned} & \varphi_{i,j-1} \lambda^2 \frac{h_{i-1} + h_i}{2k_{j-1}} + \varphi_{i-1,j} \lambda^2 \frac{k_{j-1} + k_j}{2h_{i-1}} \\ & - \varphi_{i,j} \lambda^2 \left(\frac{h_{i-1} + h_i}{2k_{j-1}} + \frac{k_{j-1} + k_j}{2h_{i-1}} + \frac{k_{j-1} + k_j}{2h_i} + \frac{h_{i-1} + h_i}{2k_j} \right) \\ & + \varphi_{i+1,j} \lambda^2 \frac{k_{j-1} + k_j}{2h_i} + \varphi_{i,j+1} \lambda^2 \frac{h_{i-1} + h_i}{2k_j} \\ & - (n_{i,j} - p_{i,j} - c_{i,j}) \frac{h_{i-1} + h_i}{2} \frac{k_{j-1} + k_j}{2} = 0 \end{aligned} \quad (\text{IV. 24})$$

L'équation de continuité des électrons:

$$\begin{aligned} & n_{i,j-1} D_n |_{i,j-1/2} B \left(\frac{\varphi_{i,j-1} - \varphi_{i,j}}{Ut} \right) \frac{h_{i-1} + h_i}{2k_{j-1}} + n_{i-1,j} D_n |_{i-1/2,j} B \left(\frac{\varphi_{i-1,j} - \varphi_{i,j}}{Ut} \right) \frac{k_{j-1} + k_j}{2h_{i-1}} \\ & - n_{i,j} \left(D_n |_{i,j-1/2} B \left(\frac{\varphi_{i,j} - \varphi_{i,j-1}}{Ut} \right) \frac{h_{i-1} + h_i}{2k_{j-1}} \right. \\ & + D_n |_{i-1/2,j} B \left(\frac{\varphi_{i,j} - \varphi_{i-1,j}}{Ut} \right) \frac{k_{i-1} + k_i}{2h_{i-1}} \\ & + D_n |_{i+1/2,j} B \left(\frac{\varphi_{i,j} - \varphi_{i+1,j}}{Ut} \right) \frac{k_{j-1} + k_j}{2h_i} \\ & + D_n |_{i,j+1/2} B \left(\frac{\varphi_{i,j} - \varphi_{i,j+1}}{Ut} \right) \frac{h_{i-1} + h_i}{2k_j} \Big) \\ & + n_{i+1,j} D_n |_{i+1/2,j} B \left(\frac{\varphi_{i+1,j} - \varphi_{i,j}}{Ut} \right) \frac{k_{j-1} + k_j}{2h_i} \\ & + n_{i,j+1} D_n |_{i,j+1/2} B \left(\frac{\varphi_{i,j+1} - \varphi_{i,j}}{Ut} \right) \frac{h_{i-1} + h_i}{2k_j} - R_{i,j} \frac{h_{i-1} + h_i}{2} \frac{k_{j-1} + k_j}{2} \\ & = 0 \end{aligned} \quad (\text{IV. 25})$$

L'équation de continuité des trous:

$$\begin{aligned}
& p_{i,j-1} D_p \big|_{i,j-1/2} B \left(\frac{\varphi_{i,j-1} - \varphi_{i,j}}{U t} \right) \frac{h_{i-1} + h_i}{2k_{j-1}} + p_{i-1,j} D_p \big|_{i-1/2,j} B \left(\frac{\varphi_{i-1,j} - \varphi_{i,j}}{U t} \right) \frac{k_{j-1} + k_j}{2h_{j-1}} \\
& - p_{i,j} \left(D_p \big|_{i,j-1/2} B \left(\frac{\varphi_{i,j} - \varphi_{i,j-1}}{U t} \right) \frac{h_{i-1} + h_i}{2k_{j-1}} + D_p \big|_{i-1/2,j} B \left(\frac{\varphi_{i,j} - \varphi_{i-1,j}}{U t} \right) \frac{k_{i-1} + k_i}{2h_{i-1}} \right. \\
& + D_p \big|_{i+1/2,j} B \left(\frac{\varphi_{i,j} - \varphi_{i+1,j}}{U t} \right) \frac{k_{j-1} + k_j}{2h_i} + D_p \big|_{i,j+1/2} B \left(\frac{\varphi_{i,j} - \varphi_{i,j+1}}{U t} \right) \frac{h_{i-1} + h_i}{2k_j} \Big) \\
& + p_{i+1,j} D_p \big|_{i+1/2,j} B \left(\frac{\varphi_{i+1,j} - \varphi_{i,j}}{U t} \right) \frac{k_{j-1} + k_j}{2h_i} + p_{i,j+1} D_p \big|_{i,j+1/2} B \left(\frac{\varphi_{i,j+1} - \varphi_{i,j}}{U t} \right) \frac{h_{i-1} + h_i}{2k_j} \\
& - R_{i,j} \frac{h_{i-1} + h_i}{2} \frac{k_{j-1} + k_j}{2} \\
& = 0
\end{aligned} \tag{IV.26}$$

$B(x)$ est la fonction de Bernoulli qui est définie comme :

$$B(x) = \frac{x}{e^x - 1} \tag{IV.27}$$

Les valeurs des diffusivités de porteurs et des mobilités des porteurs obtenues sont données par une interpolation simple :

$$D_n \big|_{i+1/2,j} = \frac{D_n \big|_{i,j} + D_n \big|_{i+1,j}}{2} \tag{IV.28}$$

Afin d'éclaircir l'emplacement des éléments dans la matrice ainsi que sa dimension, nous considérons un exemple où le domaine d'étude discrétisé est composé de 2 lignes et de 5 colonnes. La forme de la matrice ainsi composée par les équations (IV.21), (IV.22), (IV.23) est une matrice carrée d'ordre 2×5 .

On obtient donc l'écriture matricielle suivante :

$$\begin{bmatrix}
-T_{1,1} & D_{1,1} & 0 & 0 & 0 & 0 & H_{1,1} & 0 & 0 & 0 \\
G_{1,2} & -T_{1,2} & D_{1,2} & 0 & 0 & 0 & 0 & H_{1,2} & 0 & 0 \\
0 & G_{1,3} & -T_{1,3} & D_{1,3} & 0 & 0 & 0 & 0 & H_{1,3} & 0 \\
0 & 0 & G_{1,4} & -T_{1,4} & D_{1,4} & 0 & 0 & 0 & 0 & H_{1,4} \\
0 & 0 & 0 & G_{1,5} & -T_{1,5} & D_{1,5} & 0 & 0 & 0 & 0 \\
B_{2,1} & 0 & 0 & 0 & G_{2,1} & -T_{2,1} & D_{2,1} & 0 & 0 & 0 \\
0 & B_{2,2} & 0 & 0 & 0 & G_{2,2} & -T_{2,2} & D_{2,2} & 0 & 0 \\
0 & 0 & B_{2,3} & 0 & 0 & 0 & G_{2,3} & -T_{2,3} & D_{2,3} & 0 \\
0 & 0 & 0 & B_{2,4} & 0 & 0 & 0 & G_{2,4} & -T_{2,4} & D_{2,4} \\
0 & 0 & 0 & 0 & B_{2,5} & 0 & 0 & 0 & G_{2,5} & -T_{2,5}
\end{bmatrix} X \begin{bmatrix} \delta b_{1,1} \\ \delta b_{1,2} \\ \delta b_{1,3} \\ \delta b_{1,4} \\ \delta b_{1,5} \\ \delta b_{2,1} \\ \delta b_{2,2} \\ \delta b_{2,3} \\ \delta b_{2,4} \\ \delta b_{2,5} \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} V_{1,1} \\ V_{1,2} \\ V_{1,3} \\ V_{1,4} \\ V_{1,5} \\ V_{2,1} \\ V_{2,2} \\ V_{2,3} \\ V_{2,4} \\ V_{2,5} \end{bmatrix} \quad (IV.29)$$

En général, si on applique un maillage de l lignes et de c colonnes au domaine d'étude, la matrice d'ordre l.c est composée d'une diagonale principale ($-T_{1,j}$), la supradiagonale ($D_{1,j}$), l'infradiagonale ($G_{1,j}$) et ceux des deux parallèles à la diagonale écarté de c lignes ($H_{1,j}$ et $D_{1,j}$). Les éléments de ces diagonales sont seuls différents de zéro (équation (IV.23)).

Nous utilisons une méthode de résolution qui ne traite que les éléments non nuls puisque la matrice (IV.29) a l'avantage d'avoir que cinq (05) diagonales non nulles. Cette méthode aura donc l'avantage non seulement d'augmenter le nombre de nœuds mais aussi d'améliorer le temps de calcul.

Parmi les méthodes de résolution, nous avons utilisé la méthode de relaxation par ligne et par colonne [6]. Son principe est que le système sera résolu alternativement ligne par ligne, puis colonne par colonne. La matrice du système (IV.29) est composée par plusieurs blocs de matrices tri- diagonales qui ont l'avantage dans la résolution de ne traiter que les éléments non nuls et par conséquent la possibilité d'augmenter le nombre de nœuds du domaine d'étude.

IV .3.4 Solutions initiales

La résolution de ces équations, nécessite trois solutions initiales de $\psi_{i,j}$, $n_{i,j}$, $p_{i,j}$, il est clair que l'utilisation d'une bonne solution initiale permet d'atteindre plus rapidement la solution exacte recherchée.

IV .3.5 Conditions aux limites

Chaque équation du système est une équation différentielle du deuxième ordre.

L'intégration suppose connaître deux conditions aux limites. Elles sont de deux types:

- condition de Dirichlet: la valeur de la fonction à intégrer est fixée par les grandeurs influentes sur le système. Cette condition de polarisation appliquée au contact ohmique.
- Condition de Newman: on suppose qu'aux points de la frontière, la valeur de la fonction à calculer ne varie plus à partir de certaine limite. Ceci se traduit mathématiquement par:

$$\frac{\partial b}{\partial x} = 0 \text{ et } \frac{\partial b}{\partial y} = 0$$

IV .3.6 Critère de convergence et précision de calcul

La méthode utilisée ici est itérative, compte tenu de la complexité des équations à résoudre. De plus il n'est pas possible d'affirmer que le modèle développé décrive exactement le comportement du composant étudié, en ce qui concerne le critère de convergence, c'est-à-dire d'existence d'une solution.

IV .3.7 Itérations

Après la résolution du système, il reste à incrémenter la valeur de l'inconnue afin d'avoir une meilleure approximation de la solution. Ceci est possible lorsque le processus s'avère convergent. Dans nos calculs, il est possible d'atteindre une précision de l'ordre de 10^{-6} V à 2D. Le problème majeur rencontré durant les calculs est le problème de divergence du système. Ceci vient du fait que la solution de départ est souvent une mauvaise approximation de la solution finale et les valeurs calculées de δS peuvent être non négligeables devant S . Pour s'affranchir de cet inconvénient, on utilise le système

« Damping » de la solution; de façon à borner la valeur de δS en l'imposant à être inférieure à la valeur $kT/2q$.

IV .4 Calcul de densité de courant :

Une fois les trois paramètres ψ , n , p seront déterminés par la résolution bidimensionnelle du système formé par l'équation de Poisson et les équations de continuité des électrons et trous, nous pouvons calculer les densités de courant utilisant les équations de transport, vectoriellement, les densités de courant J_n et J_p sont exprimés par les expressions :

$$\vec{J}_n = \vec{J}_{nx} + \vec{J}_{ny} \quad (IV.30)$$

$$\vec{J}_p = \vec{J}_{px} + \vec{J}_{py} \quad (IV.31)$$

Où les J_{nx} et J_{ny} et J_{px} et J_{py} sont densité de courant d'électrons et de trous suivant l'axe X et Y respectivement et peuvent être calculé par le modèle dérive-diffusion :

$$j_{nx} = -qn\mu_n \frac{\partial \phi}{\partial x} + qD_n \frac{\partial n}{\partial x} \quad (IV.32)$$

$$j_{ny} = -qn\mu_n \frac{\partial \phi}{\partial y} + qD_n \frac{\partial n}{\partial y} \quad (IV.33)$$

$$j_{px} = -qp\mu_p \frac{\partial \phi}{\partial x} + qD_p \frac{\partial p}{\partial x} \quad (IV.34)$$

$$j_{py} = -qp\mu_p \frac{\partial \phi}{\partial y} + qD_p \frac{\partial p}{\partial y} \quad (IV.35)$$

Sous une forme discrétisée, les composantes de J_n et J_p peuvent s'écrire :

$$j_{px}|_{i,j} == -qp|_{i,j}\mu_p \frac{\phi|_{i+1,j} - \phi|_{i,j}}{h_{i,j}} + qD_p \frac{p|_{i+1,j} - p|_{i,j}}{h_{i,j}} \quad (IV.36)$$

$$j_{py}|_{i,j} == -qp|_{i,j}\mu_p \frac{\phi|_{i,j+1} - \phi|_{i,j}}{k_{i,j}} + qD_p \frac{p|_{i,j+1} - p|_{i,j}}{k_{i,j}} \quad (IV.37)$$

$$j_{nx}|_{i,j} == -qn|_{i,j}\mu_n \frac{\phi|_{i+1,j} - \phi|_{i,j}}{h_{i,j}} + qD_n \frac{n|_{i+1,j} - n|_{i,j}}{h_{i,j}} \quad (IV.38)$$

$$j_{ny}|_{i,j} == -qn|_{i,j}\mu_n \frac{\phi|_{i,j+1} - \phi|_{i,j}}{k_{i,j}} + qD_n \frac{n|_{i,j+1} - n|_{i,j}}{k_{i,j}} \quad (IV.39)$$

Avec $i = 2, NX - 2$ et $j = 2, NY - 2$

En analyse bidimensionnelle, pour une tension de polarisation V_a , le module de la densité de courant totale en un nœud i se calcule par l'expression :

$$mod(j_t)_i = \sqrt{j_p^2 + j_n^2} \quad (IV.40)$$

Ainsi, la densité de courant totale de la structure est calculée par la moyenne de son module suivant les directions x et y comme le montre l'expression suivante :

$$J_T = \frac{\sum_{k=1}^N mod(j_t)_k}{L_k} \quad (IV.41)$$

Où L_k désigne la longueur de la structure de cellule solaire suivant X ou suivant Y et N le nombre total de ses nœuds.

IV.5 Conclusion

Dans ce chapitre nous avons présenté le modèle physique et sa représentation mathématique décrivant le comportement d'une diode Schottky, tout en rassemblant les notions nécessaires pour comprendre la physique de ces équations.

Ensuite, nous avons présenté un algorithme de résolution de système d'équations formé par l'équation de Poisson et les équations de continuité, utilisant la méthode des différences finies avec l'approximation de Scharfetter-Gummel, dans laquelle la concentration des porteurs entre deux points successifs varie de façon à conserver un courant constant entre deux points.

La solution du système d'équations nous permet de calculer les densités de courant utilisant les équations de transport. L'optimisation de tous les paramètres comme le choix de maillage, la solution initiale, la condition aux limites et la précision imposée permet d'éliminer le risque de divergence et réduire le temps de calcul.

Références Bibliographiques :

- [1] Henry Mathieu,
Physique des semiconducteurs et des composants, 6eme édition Dunod, Paris, (2009)
- [2] H.K.Gummel,
IEEE Trans. Electron Devices 11, 455–465 (1964).
- [3] PA Farrell, E C Gartland
Computational methods for boundary and interior layers in several dimensions (1991).
- [4] S. Selberherr, Spring-Verlag,
Wien, New York (1984).
- [5] A.Ziane
Mémoire de magister, Université de Sidi Bel Abbé, 2013.
- [6] A, Rabehi
Mémoire de magister, Université de Sidi Bel Abbé, 2012.

Chapitre V

Résultats expérimentaux

V.1 Introduction

Ce chapitre, est consacré à la présentation des résultats expérimentaux de la caractérisation courant-tension et capacité-tension des structures Schottky à base de **GaAs** nitruré à l'obscurité et sous illumination.

Afin de caractériser électriquement nos échantillons, nous avons effectué dans un premier temps, des mesures dans l'obscurité de courant et de capacité en haute fréquence (1MHz).

Les courbes $I(V_G)$ obtenues expérimentalement permettent de déterminer le facteur d'idéalité, la résistance série, ainsi que la hauteur de barrière, par contre les courbes $C(V_G)$ donnent le dopage du substrat, la tension de diffusion, la hauteur de barrière, ainsi que la densité d'états d'interface métal / semi-conducteur.

Sous illumination, nous effectuerons des mesures électriques à l'aide d'un laser à hélium-néon de 632.8 nm de longueur d'onde et d'une puissance de sortie de 1 mW.

V.2 Description du matériel de mesure

V.2.1 Banc de mesure I(V)

La mesure I(V) est réalisée à partir d'un banc de mesure courant-tension «HP 4155B, Semiconductor Parameter Analyzer».

La figure V.1 illustre le banc de mesure conçu pour cette mesure aux bornes des échantillons.

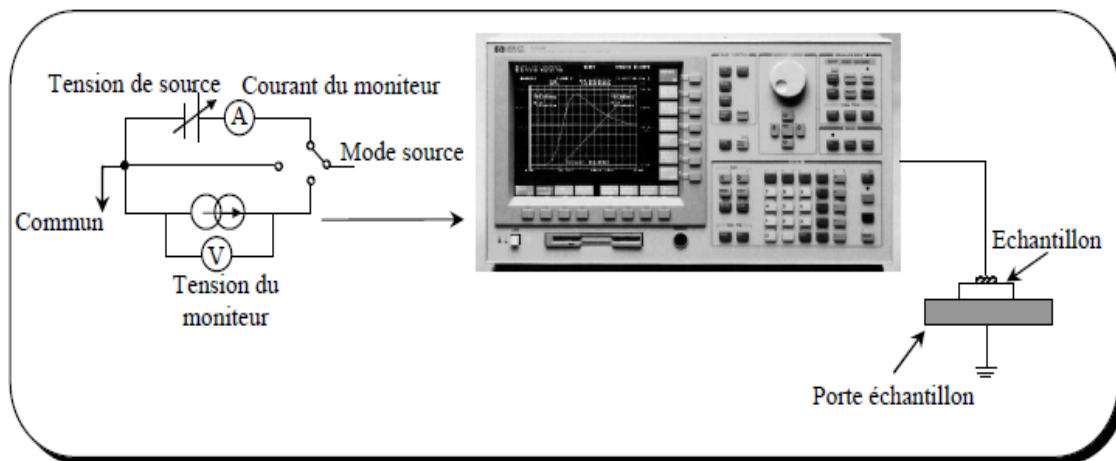


Figure V.1 : Représentation du banc de mesure HP 4155 B utilisé pour la caractérisation courant-tension [1].

L'échantillon est placé sur un plateau métallique (porte échantillon) qui est relié à ce banc. Une tension V est appliquée aux bornes de la structure et le courant qui la traverse est directement relevé. Les résultats sont directement visualisés sur l'écran du banc puis enregistrés.

V.2.2 Principe et description des mesures C (V) [2] [3]

Les mesures en haute fréquence (1MHz) sont réalisées à l'aide d'un banc de mesure Capacité - Tension de model « KEITHLEY test system. 590 CV Analyser ». Le banc fonctionne en automatique, il est constitué d'un oscillateur, d'un détecteur de phase et d'un générateur de rampe, le tout est piloté par un ordinateur relié par une carte d'interface au banc de mesure. Le logiciel adapté avec le banc de mesure nous facilite la manipulation, et les résultats sont directement visualisés sur le moniteur. Le banc fonctionne de la façon suivante :

L'oscillateur fournit une tension de modulation à l'échantillon sous test. Cette tension sert également de signal de référence au détecteur de phase. La démodulation du signal appliqué sur l'autre entrée du détecteur produit une tension continue proportionnelle à la

composante de courant relative à la capacité ou à la conductance. Le principe de mesure est donné par la figure V.2.

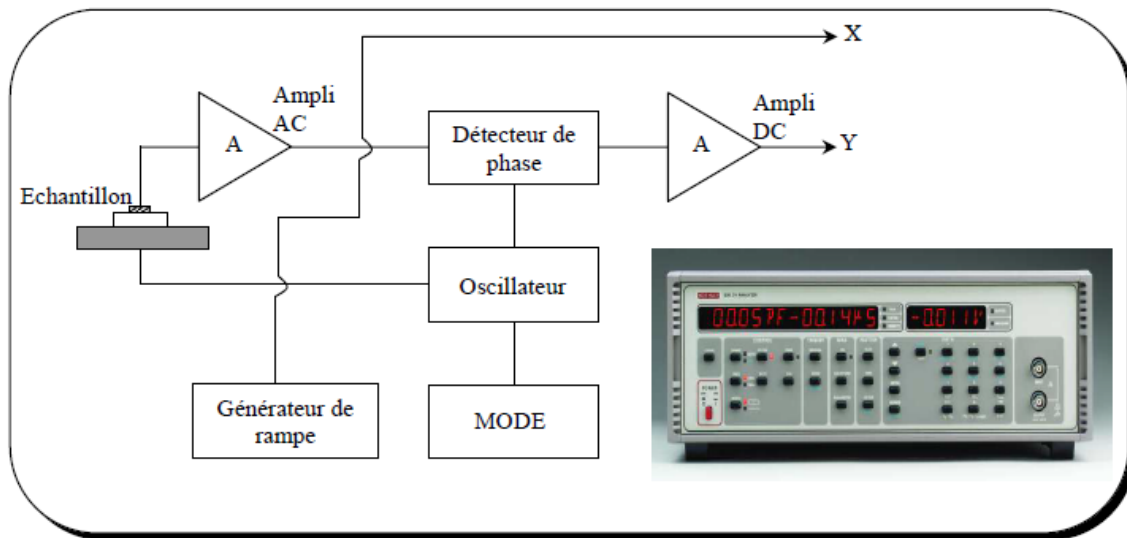


Figure V.2 : Principe de la mesure capacité-tension en haute fréquence [4].

V.3. Présentation des échantillons d'études

Les substrats d'arséniure de gallium utilisés pour cette étude se présentent sous la forme de plaquettes circulaires d'épaisseur du substrat GaAs: $400 \pm 20 \mu\text{m}$. Ces substrats sont élaborés par tirage Czochralski et sont en suite polis et découpés suivant le plan cristallographique (100). Ces échantillons sont dopés au silicium.

D'après le fabriquant, ces échantillons ont une concentration de dopants $N_d = 4.9 \times 10^{15}$ atomes / cm^3 avec une. Quatre de ces substrats ont subis une nitruration pour l'obtention de films de GaN et réalisant ainsi des hétéro-structures.

Le tableau V.1 représente les différentes étapes technologiques de nitruration des échantillons étudiés.

Echantillons	Différentes étapes de fabrication des échantillons étudiés
A1	✓ Nettoyage chimique du substrat de GaAs. ✓ 60 min de bombardement ionique, $5 \mu\text{A}/\text{cm}^2$. ✓ Une énergie des ions de 1000 eV.
A2	✓ Nettoyage chimique du substrat de GaAs. ✓ 60 min de bombardement ionique, $5 \mu\text{A}/\text{cm}^2$. ✓ Une énergie des ions de 1000 eV. ✓ Une pression de 6×10^{-5} Torr et direction perpendiculaire à la surface de l'échantillon. ✓ Nitruration: 500°C, $I=1\mu\text{A}$/ 5 min. ✓ Recuit : $620^\circ\text{C}/60$ min. ✓ Modélisation GaN : 0.7 nm avec 1 % d'oxygène.
A3	✓ Nettoyage chimique du substrat de GaAs. ✓ 60 min de bombardement ionique, $5 \mu\text{A}/\text{cm}^2$. ✓ Une énergie des ions de 1000 eV. ✓ Une pression de 6×10^{-5} Torr et direction perpendiculaire à la surface de l'échantillon. ✓ Nitruration : 500°C, $I=1\mu\text{A}$/ 5 min. ✓ Modélisation GaN : 0.8 nm avec 1 % d'oxygène.
A4	✓ Nettoyage chimique du substrat de GaAs. ✓ 60 min de bombardement ionique, $5 \mu\text{A}/\text{cm}^2$. ✓ Une énergie des ions de 1000 eV. ✓ Une pression de 6×10^{-5} Torr et direction perpendiculaire à la surface de l'échantillon. ✓ Nitruration: 500°C, $I=1\mu\text{A}$/ 30 min. ✓ Recuit : $620^\circ\text{C}/60$ min ✓ Modélisation GaN : 2 nm avec 1 % d'oxygène.
A5	✓ Nettoyage chimique du substrat de GaAs. ✓ 60 min de bombardement ionique, $5 \mu\text{A}/\text{cm}^2$. ✓ Une énergie des ions de 1000 eV. ✓ Une pression de 6×10^{-5} Torr et direction perpendiculaire à la surface de l'échantillon. ✓ Nitruration: 500°C, $I=1\mu\text{A}$/ 30 min. - Modélisation GaN : 2.2 nm avec 1 % d'oxygène.

Tableau V.1: Les étapes technologiques des échantillons étudiés.

L'épaisseur du GaN a été calculée à l'aide d'un logiciel développé par G. MONIER de l'Université, Blaise-Pascal de Clermont ferrant-France [5].

V.4 Résultats expérimentaux et interprétations

V.4.1 Caractérisation électrique

V.4.1.1 Dans l'obscurité

Les figures V.3 représentent les caractéristiques I(V) obtenues sur les structures dans l'obscurité et à la température ambiante.

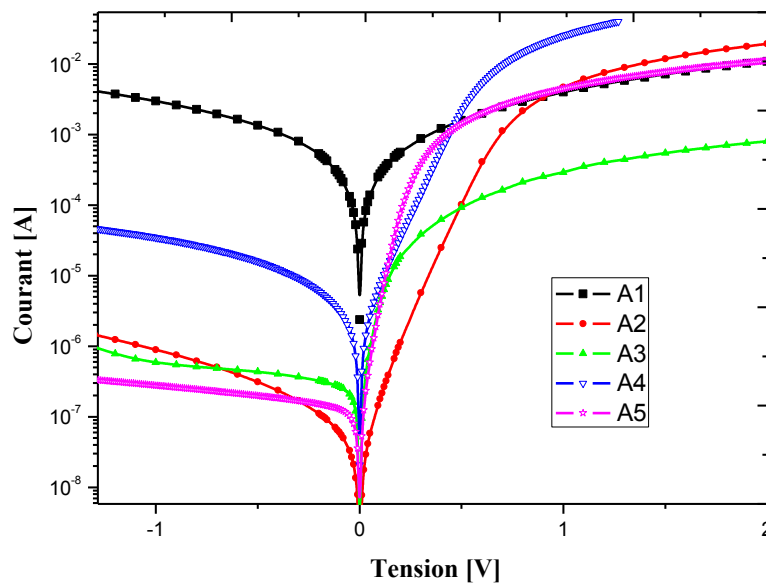


Figure V.3 : Caractéristiques courant-tension expérimentales des échantillons.

L'observation des courbes I-V montre clairement que la nitruration (échantillons A₂, A₃, A₄, A₅) améliore le comportement électrique de la diode Schottky c'est-à-dire un courant direct important et un courant inverse faible. Afin de déterminer les paramètres caractérisant ces diodes, on peut supposer que la variation de courant suit la relation suivante :

$$I = I_S \left(\exp \left(\frac{q(V - IR_S)}{nkT} \right) \right) \quad (V.1)$$

V est la tension de polarisation appliquée.

Le courant de saturation I_S est donnée par:

$$I_s = AA^* T^2 \exp\left(\frac{-q\phi_{bn}}{kT}\right) \quad (V.2)$$

Avec :

q = charge de l'électron.

K = constante de Boltzmann.

T = température absolue.

A = surface de diode efficace.

A^* = constante Richardson efficace ($8.16 \text{ A cm}^{-2} \text{ K}^{-2}$ pour GaAs. [6]).

R_s = résistance en série.

ϕ_{bn} = hauteur de barrière.

n = facteur d'idéalité.

(ϕ_{bn}, R_s, n) sont les paramètres inconnus et doivent être déterminés de façon aussi précise que possible.

Pour extraire la hauteur de barrière, le facteur d'idéalité et les résistances en série, nous avons utilisé une méthode développée par Cheung et Cheung [7] et confirmée par Werner et al [8]. Cette méthode a l'avantage d'être utilisée même pour des variations de courant direct non linéaire dans une échelle exponentielle (exemple : la variation de courant de l'échantillon A1).

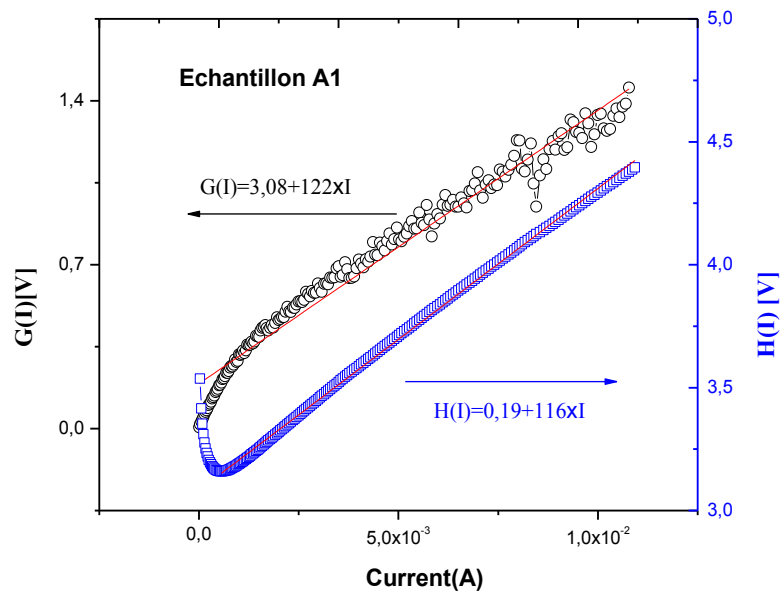
Cette méthode est basée sur le calcul et le tracé de deux fonctions $G(I)$ et $H(I)$ déduites à partir de l'équation (V.1) :

$$G(I) = \frac{\partial V}{\partial (\ln I)} = \frac{nKT}{q} + IR_s \quad (V.3)$$

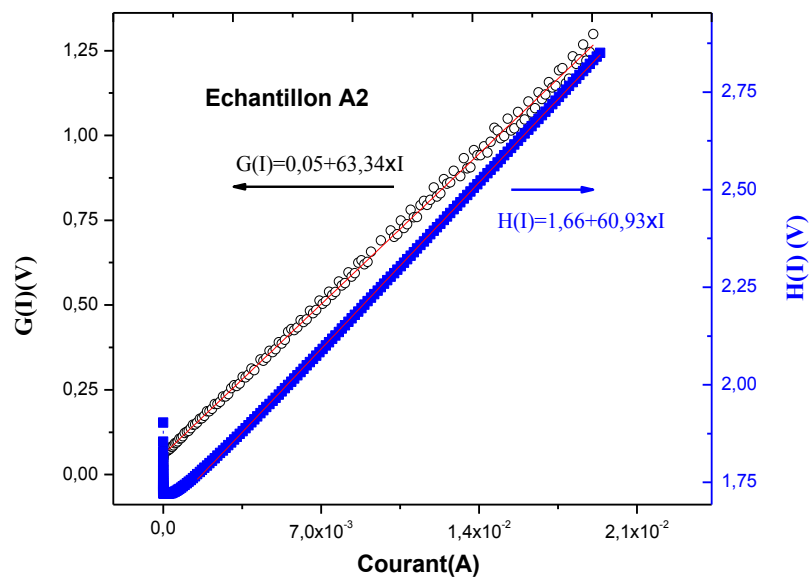
$$H(I) = V - \left(\frac{nKT}{q}\right) \ln\left(\frac{I}{AA^* T^2}\right) = n\phi_b + IR_s \quad (V.4)$$

Selon l'équation (V.3), la pente de la partie linéaire de $G(I)$ par rapport à I donne la résistance série R_s et l'intersection $G(I)$ avec l'axe des courants donne le facteur d'idéalité n . Par contre la hauteur de la barrière ϕ_b est obtenu par l'intersection de la fonction $H(I)$ avec l'axe des courants. Remarquons aussi que la résistance série peut être obtenue à partir de la valeur de la pente de la fonction $H(I)$.

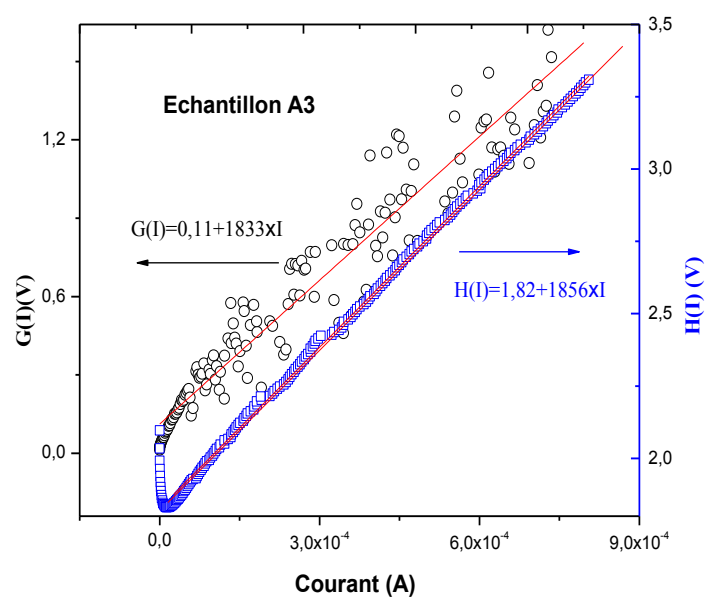
Les caractéristiques de $dV/d(\ln I)-I$ et $H(I)-I$ sont représentées par la figure V.4 et le tableau V.2 regroupe les valeurs des paramètres (n , R_s , ϕ_b) des structures Au/GaAs et Au/GaN/GaAs.



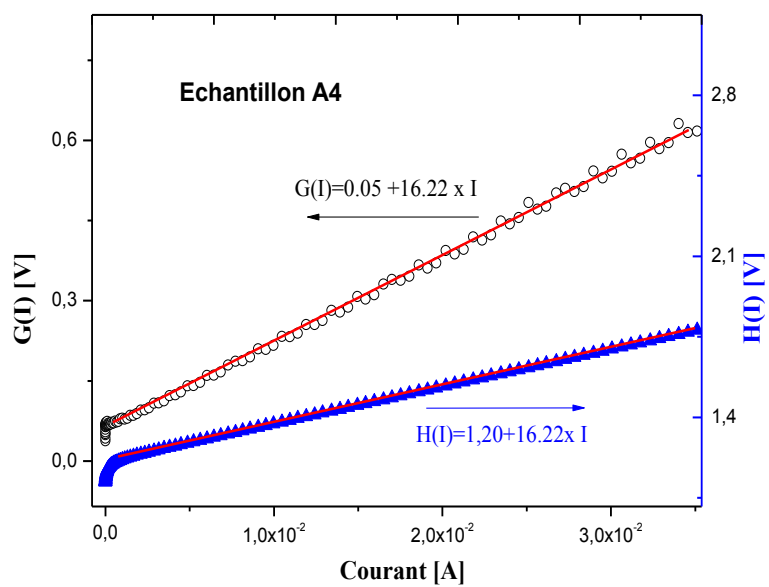
(a)



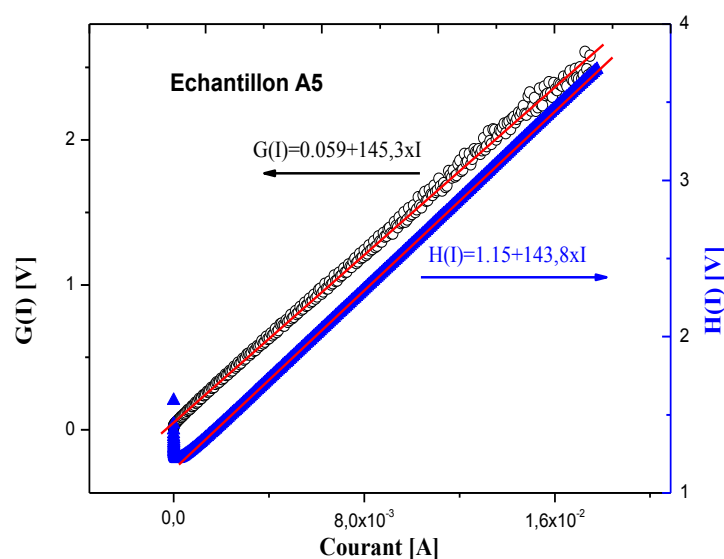
(b)



(c)



(d)



(E)

Figure V.4 : Représentation des fonctions G et H. pour les échantillons A1 (a),A2 (b),A3 (c),A4 (d),A5 (E).

Echantillon	Facteur d'idéalité (n)	RésistanceSéries(Ω)		Hauteur de barrière ϕ_B (eV)	Courant de saturation I_s (A)
		par H(J)	par G(J)		
A1	7,3	116	122	0,41	$9,50 \times 10^{-5}$
A2	2,27	63	60	0,73	$3,51 \times 10^{-08}$
A3	3,31	1833	1856	0,55	$4,61 \times 10^{-07}$
A4	1,92	16,22	16,22	0,62	$3,42 \times 10^{-07}$
A5	2,26	145,34	143,8	0,54	$4,46 \times 10^{-07}$

Tableau V.2 : Les paramètres électriques obtenus à partir des courbes I-V par la méthode de Cheung.

D'après les résultats obtenus dans le tableau V.2, nous remarquons que les valeurs du facteur d'idéalité, la résistance série et le courant de saturation sont plus élevés pour l'échantillon A1 en comparaison avec d'autres mesures effectuées sur une diode Schottky Au/GaAs [8]. Cette différence peut être expliquée par le fait que l'échantillon A1 a été bombardé par des ions Ar^+ , ce bombardement induit un grand impact sur la surface de GaAs telle qu'elle est décrite par certains auteurs [9]. Ces défauts et ces pièges induits sont une source de nombreux états d'interface qui vont bloquer la recombinaison de surface et donc

dégrader la qualité de la diode Schottky. Ce résultat est soutenu par le calcul de la densité de l'état N_{SS} montrant que l'échantillon A1 présente un nombre élevé de défauts et de pièges.

Après l'opération de nitruration le courant de saturation, le facteur d'idéalité ainsi que la résistance série diminuent lorsqu'on effectue un recuit. En effet, la couche de GaN est éventuellement amorphe par conséquent le recuit a permis probablement de restructurer et de réarranger le film de GaN [10]. Ceci a été confirmé par une autre étude utilisant des images TEM haute résolution sur des échantillons nitrurés avec et sans recuit [11]. Dans cette étude on a constaté que la couche de GaN était amorphe avant le recuit. Après le processus de recuit, les images montrent que le GaN a été cristallisé et a formé une structure zinc blende [10].

V.4.1.2 Sous s'éclairement

a) Caractérisation électrique sous illumination d'un échantillon sans recuit :

Pour étudier les caractéristiques électriques sous l'illumination, nous utilisons un laser à hélium-néon de 632,8 nm de longueur d'onde et d'une puissance de sortie de 1 mW. L'énergie du laser utilisée est de l'ordre de 1,96 eV, elle est plus grande que l'énergie de la bande interdite du GaAs, est donc suffisante pour extraire les électrons de la bande de valence.

La figure V.5 représente les caractéristiques $I(V)$ obtenues sur l'échantillon (A5) qui n'a subi aucun recuit, dans l'obscurité et sous illumination à la température ambiante.

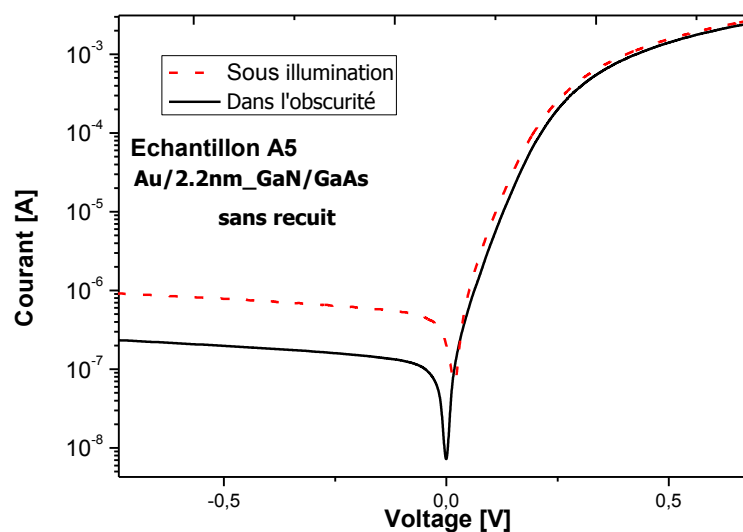


Figure V.5 : Caractéristiques courant-tension à l'obscurité et sous illumination de l'échantillon A5 à l'échelle semi-logarithmique.

Les caractéristiques de $dV/d(\ln I)-I$ et $H(I)-I$ pour l'échantillon A5 sous illumination sont représentées par la figure. IV.6et le tableau V.4 résume les valeurs des paramètres (n , R_s , ϕ_b).

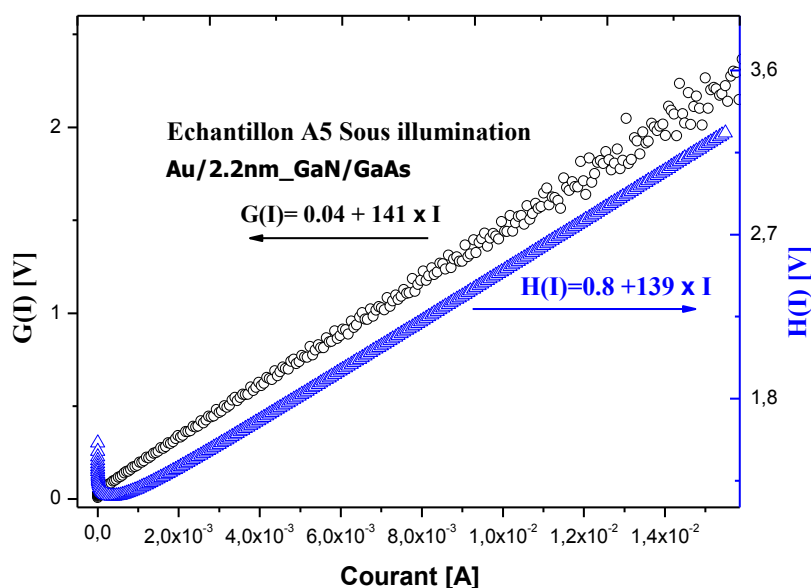


Figure V.6 : Représentation des fonctions $G(I)$ et $H(I)$ pour l'échantillon A5 sous illumination.

	A l'obscurité	Sous illumination
I_s (A)	$4,46 \times 10^{-07}$	$5,64 \times 10^{-07}$
n	2,26	1,53
$R_s(\Omega)$	145,34	139
$\phi_{bn}(V)$	0,54	0,52

Tableau V.4 : Les paramètres électriques obtenus à l'obscurité et sous illumination de l'échantillon A5.

D'après le tableau V.4, On remarque que les valeurs de n , R_s et ϕ_{bn} subissent un changement significatif sous illumination, le facteur d'idéalité sont évalués à 2,26 et 1,53 à l'obscurité et sous éclaircissement, respectivement. le courant de saturation et la resistance serie sont évalués de l'ordre de $4,46 \times 10^{-07}$ A et 145,34 Ω respectivement à l'obscurité et $5,46 \times 10^{-07}$ A et 139 Ω sous éclaircissement. Le courant de saturation est donc amélioré sous illumination et donne un gain de courant d'environ 1,26. La diminution de la resistance serie sous illumination est due à la photo-génération des porteurs supplémentaires.

b) Caractérisation électrique sous illumination d'un échantillon avec recuit :

L'effet de l'illumination a été effectué sur un échantillon qui a subi une nitruration avec un recuit et donc c'est une structure qui présente de bonne qualité électrique. On représente dans la figure V.7, la caractéristique courant-tension de l'échantillon A2 avec et sans illumination.

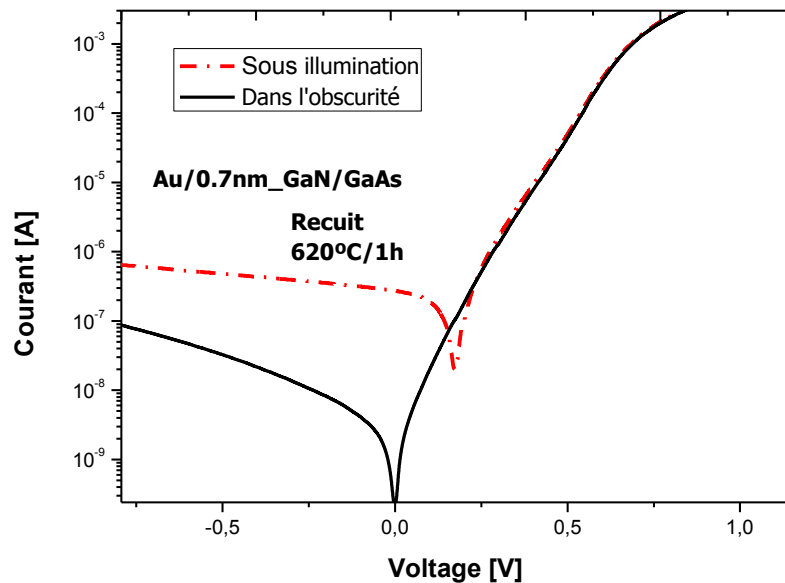


Figure V.7 : Caractéristiques courant-tension à l'obscurité et sous illumination de l'échantillon A2 à l'échelle semi-logarithmique.

Le principe de superposition est bien reflété dans l'échantillon qui a été recuit que l'échantillon qui n'a subi aucun recuit (figure V.5). Les caractéristiques de I-V de la diode Schottky sont les mêmes que les caractéristiques I-V à l'obscurité, mais elles sont décalées vers le bas sous l'effet de la densité de courant photo-généré I_{ph} . Le courant dans le sens inverse est fortement augmenté sous l'effet d'éclairement. Ceci suggère que la structure Au/GaN/GaAs a des propriétés d'un photodétecteur. Ce comportement fournit des informations utiles sur les paires électron-trou, qui ont été effectivement générées dans la couche semi-conductrice par des photons incidents entrants.

A partir de la caractéristique I-V sous illumination en inverse, nous pouvons déduire la puissance fournie par la diode qui est le produit de courant par la tension appliquée aux bornes de cette diode. La figure V.8 représente le courant et la puissance de la diode Schottky (A2) en fonction de la tension.

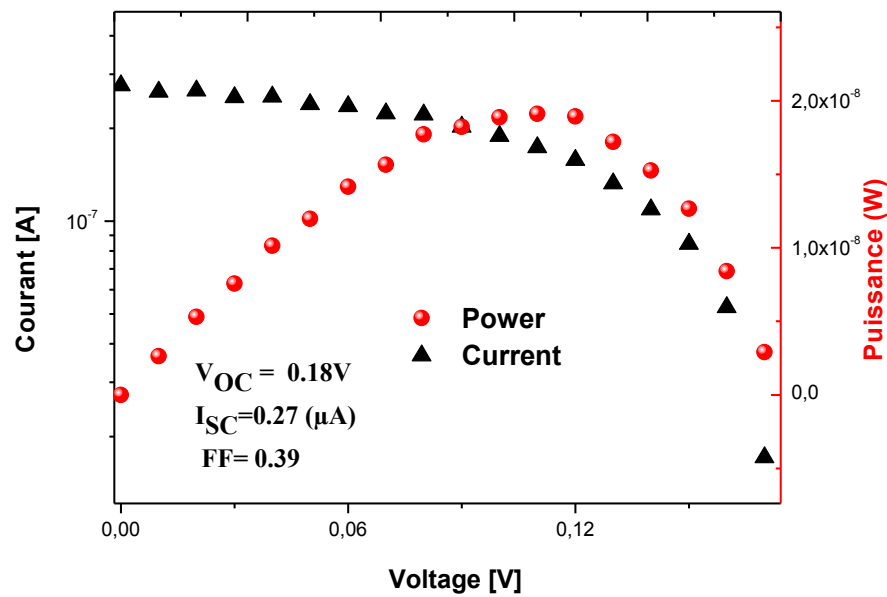


Figure V.8 : le courant et la puissance de la diode A2 en fonction de tension

A partir des deux figures, nous pouvons déduire les paramètres photovoltaïques ; le courant de court-circuit I_{CC} et tension en circuit ouvert V_{CO} ainsi que le facteur de forme FF.

$$\left\{ \begin{array}{l} I_{cc} = 0,27 \mu A. \\ V_{co} = 0,18V. \\ FF = 0,39. \end{array} \right.$$

L'ordre de grandeurs des valeurs de ces paramètres sont comparables avec celles obtenues sur des photodiodes et des capteurs optiques similaires à les nôtres. Ces résultats montrent que nos structures présentent des propriétés photovoltaïques intéressantes qui leur permettent d'être de bons candidats dans la technologie des cellules solaires [12, 13, 14,15]. Les propriétés photovoltaïques des diodes peuvent être améliorées si on prend en considération les propriétés physiques et optiques des matériaux utilisés dans la technologie d'une cellule solaire.

V.4.2. Caractérisation Capacité-Tension des structures Au/GaN/GaAs

Les caractéristiques $C(V)$ obtenues en haute fréquence (1MHz) des structures Au/GaN/GaAs sont représentées par la figure V.9.

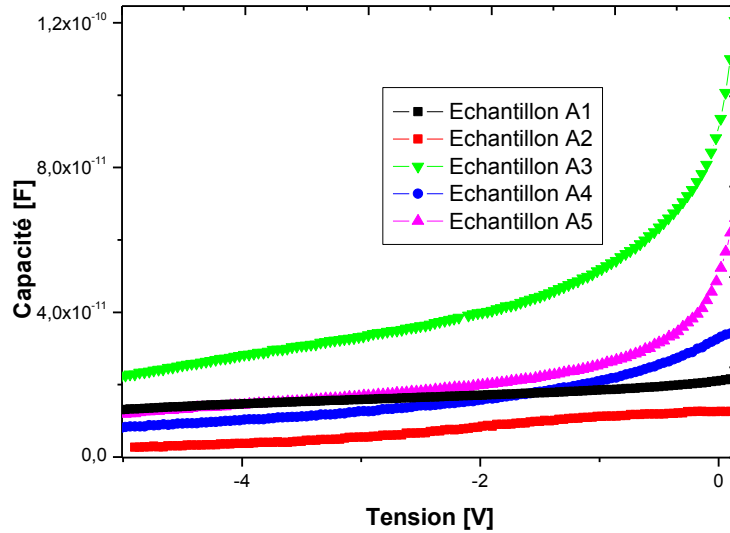


Figure V.9 : Caractéristiques $C(V)$ en haute fréquence

Les mesures $C(V)$ en haute fréquence effectuées sur les différents échantillons nitrurés montrent que les structures présentent un comportement Schottky et non pas un comportement MIS observés sur certaine technologie similaires [16].

Pour extraire les paramètres électriques des structures étudiées à partir de la caractéristique $C(V)$, nous devons représenter la caractéristique $1/C^2(V)$ permettant de donner la concentration en dopant N_d du substrat ainsi que la tension de diffusion V_d . Les caractéristiques $1/C^2(V)$ des structures étudiées sont illustrées par les figures V.10.

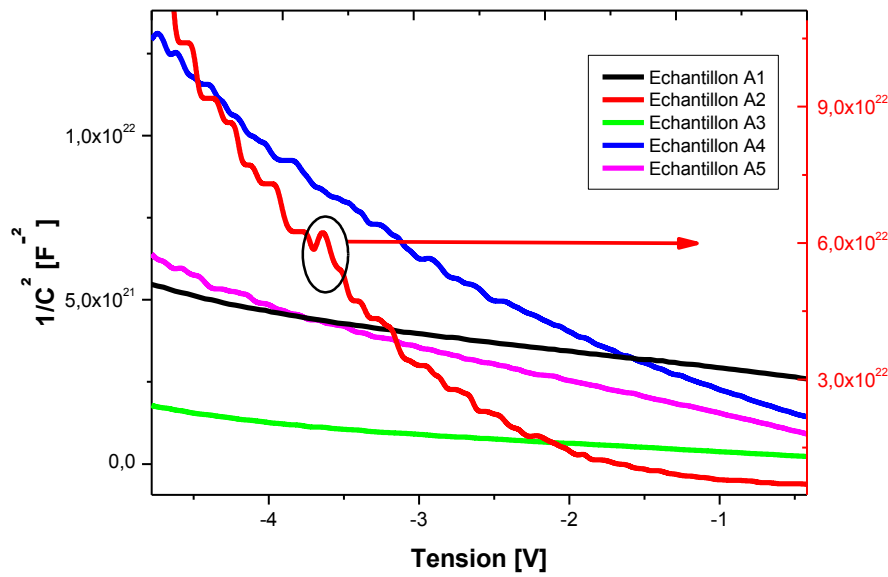


Figure V.10 : Caractéristiques $1/C^2(V)$.

Les caractéristiques $1/C^2(V)$ des figures précédentes montrent une non linéarité des courbes C^{-2} en fonction de la tension inverse appliquée. Ceci est dû principalement à la présence des niveaux donneurs discrets qui sont peut-être dus aux atomes d'impuretés présents en surface. Il est donc possible que ces niveaux discrets contrôlent la variation de $1/C^2(V)$.

Dans le cas des caractéristiques non linéaire, la variation des concentrations de dopage dans la zone de charge d'espace est déduite des courbes $1/C^2(V)$ données dans la figure (V.10) en utilisant la méthode suivante [17] :

- Nous déterminons d'abord la largeur de zone de charge d'espace par :

$$W = A \cdot \frac{\varepsilon_0 \varepsilon_r}{C} \quad (V.5)$$

Avec A : surface de la diode.

- Le niveau de dopage est donc déduit par :

$$N_d(W) = - \frac{2}{(q \varepsilon_0 \varepsilon_r A^2) \frac{d^2 1/C^2}{dV}} \quad (V.6)$$

Le résultat obtenu des profils de dopage de nos structures est représenté dans la figure V.11 et une estimation de la concentration de dopage Nd est donnée dans le tableau V.5.

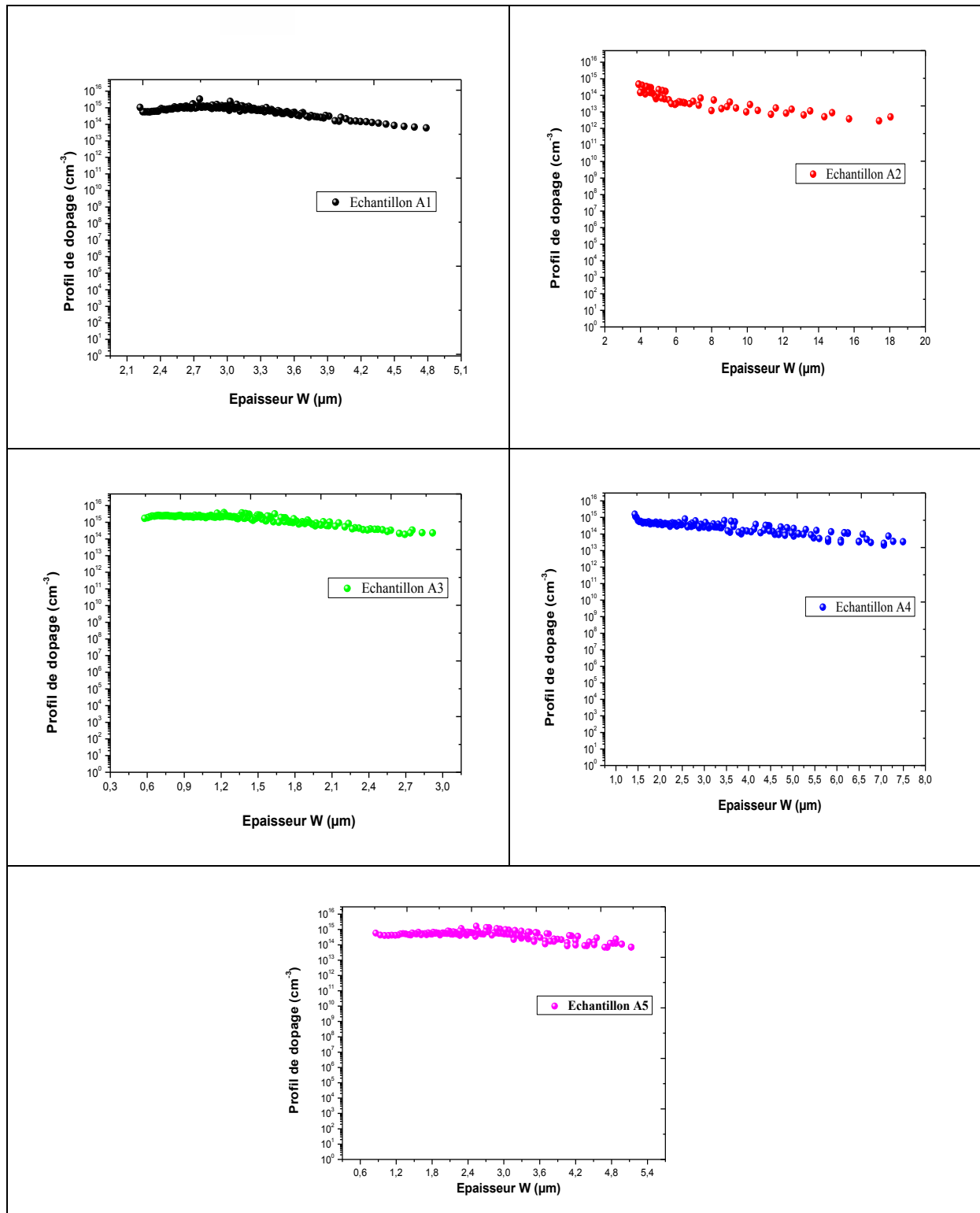


Figure V.11 : Profil de dopage correspondant aux caractéristiques C (V).

La figure V.11 montre les variations des profils des dopages de nos structures à l'intérieur de la zone de charge d'espace. La concentration apparente de dopage Nd (W) varie relativement en fonction de la position. Nous pensons que l'éventuelle dégradation du dopage peut être expliqué d'une part, par la présence de la couche d'interface métal-semiconducteur et la présence de la couche GaN, qui modifieront la valeur du dopage calculée à partir des mesures C(V). Dans le cadre de cette hypothèse, on obtient une concentration de dopage au voisinage de la surface (de l'ordre de $(8\pm 4)\times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$). Ces valeurs sont donc proches de la valeur de la concentration du substrat de GaAs ($N_d = 4,9\times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$); et d'autre part par la présence des charges négatives dans le volume peuvent diminuer la concentration du dopage hors équilibre. En général, nous observons un bon accord entre ces résultats et les profils de dopage donnés par les mesures C(V) effectués par A. Philippe [18] et M. Zouaoui [19].

L'intersection de la droite d'interpolation de $C^{-2}(V)$ avec l'axe des tensions nous permet de lire la valeur de V_d (voir tableau V.5).

Pour le calcul de la hauteur de barrière ϕ_{bn} , on introduit la valeur de V_d dans l'équation suivante :

$$\phi_b = V_d + \frac{kT}{q} \ln \frac{N_C}{N_D} \quad (\text{V.7})$$

Les différents paramètres électriques calculés à partir des caractéristiques C(V) des structures Au/GaAs et Au/GaN/GaAs sont regroupés dans le tableau V.5.

paramètres	A1	A2	A3	A4	A5
Nd (cm^{-3})	$3,7\times 10^{15}$	$4,41\times 10^{14}$	$2,45\times 10^{15}$	$4,77\times 10^{14}$	$7,05\times 10^{14}$
Vd(V)	0,46	0,73	0,44	0,41	0,33
ϕ_{bn} (V)	0,67	0,97	0,60	0,62	0,53

Tableau V.5: Les paramètres calculés des différentes structures Au/GaN/GaAs à partir des caractéristiques C(V).

Le tableau V.5 indique que la concentration Nd calculée au voisinage de (0 V) de la diode Au/GaAs (l'échantillon A1) est de l'ordre $3,7\times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ et qui concorde avec la concentration de dopage du substrat du GaAs donnée par le fournisseur ($N_d = 4,9\times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$). Après l'opération de nitruration les concentrations du dopage diminuent, ils sont évaluées de l'ordre $2,45\times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ et $7,05\times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ pour les échantillons A3 et A5, respectivement. Ce phénomène de diminution de la concentration de dopage après nitruration a été aussi observé dans une étude similaire qui montre que le profil de dopage du substrat GaAs calculé

était de l'ordre de $6,46 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ si on considère un dopage initial de $1,4 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ (donné par la fabricant) [3]. Ceci peut s'expliquer par l'effet de la couche de GaN qui est non intentionnellement dopée. Etant donné que le dopage du GaAs est élevé, il se crée donc une zone d'inter-diffusion entre les deux couches et par conséquent on observe une diminution des quantités de charges par unité de volume. Les échantillons A2 et A4 qui subissent un recuit présentent des concentrations Nd de l'ordre $4,41 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ et $4,47 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$, respectivement. Ces concentrations sont inférieures à la concentration Nd des échantillons qui n'ont pas subi de recuit, Ceci peut s'expliquer par la redistribution des porteurs de charges mobiles, lors du recuit [5]. Néanmoins, pour les structures non recuites les valeurs calculées de la concentration du dopage restent proches à la valeur donnée par le fournisseur.

Les hauteurs de barrières déterminées par les courbes C(V) sont beaucoup plus élevées comparées à celles déterminées par les caractéristiques I(V). Ceci indique que la théorie simple de la diode Schottky est loin d'être applicable pour évaluer la hauteur de barrière ϕ_{bn} à partir de la caractéristique C(V). Donc, la capacité mesurée peut probablement correspondre à la capacité d'une hétérojonction n-n [3].

Notons que la valeur de la hauteur de barrière ϕ_{bn} calculée à partir de la caractéristique C(V) (mesure à 1MHz) est moins précise que celle calculée à partir de la caractéristique I(V) [3].

A partir des caractéristiques C(V) expérimentale, on détermine la variation de la zone de déplétion W(V) ainsi que les valeurs de la fluctuation du facteur d'idéalité n(V) évaluée à partir des caractéristiques I(V) pratiques.

Pour évaluer la distribution des états d'interface dans la bande interdite du semi-conducteur GaAs, nous avons calculé N_{ss} à l'aide de l'équation suivante [20]:

$$N_{ss} = \frac{1}{q} \left(\frac{\epsilon_i}{\delta_i} (n(V) - 1) - \frac{\epsilon_s}{W} \right) \quad (\text{V.8})$$

En remplaçant dans l'expression (V.8), les valeurs de n(V) et W(V), nous pouvons évaluer la distribution de la densité d'état d'interface $N_{ss}(V)$.

Pour tracer la caractéristique $N_{ss} = f(E_C - E_{ss})$, nous avons établi la correspondance entre l'énergie de la densité d'état d'interface E_{ss} et la tension de polarisation V au moyen de la relation suivante : [20]

$$E_C - E_{ss} = q(\Phi_{Bn} - V) \quad (\text{V.9})$$

La figure V.11 présente la distribution des états d'interface dans la bande interdite pour les structures Au/ δ -GaN/GaAs.

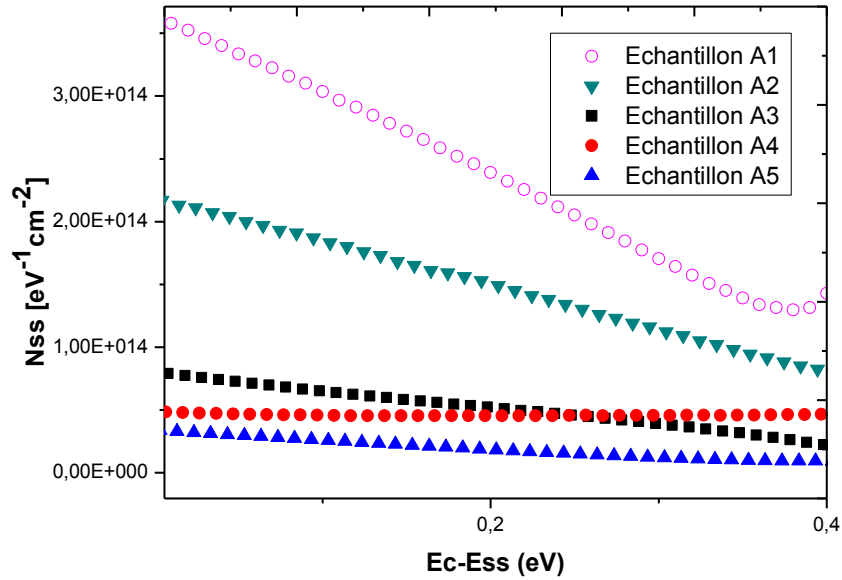


Figure V.11 : Distribution de la densité d'état dans la bande interdite des échantillons étudiés.

La figure V.11 montre que la densité d'état d'interface N_{SS} calculée de la structure Au/GaN/GaAs apporte moins de défauts et pièges que la structure Au/GaAs, aussi que la densité d'état est largement réduite avec l'augmentation de l'épaisseur de la nitruration.

En effet on peut expliquer ces résultats par le fait que la nitruration du GaAs arrive à la proximité de la surface impactée par le bombardement d' Ar^+ . En fait, la nitruration a modifié la partie moins cristallisée de la surface du substrat GaAs en remplaçant les atomes As par des atomes N pour former la niture de Gallium GaN [21], et par conséquent cette opération diminue les états d'interfaces.

V.5 Conclusion

Nous avons étudié expérimentalement le comportement électrique et photoélectrique d'une diode Schottky à base de GaAs nitruré. L'analyse des caractéristiques électriques de diodes Schottky nous a permis d'identifier les principaux paramètres mis en jeu dans le transports de charges, et de les corrélés aux défauts profonds présents dans le GaAs. Nous avons montré qu'après l'opération de nitruration les paramètres électriques tels que le courant de saturation, le facteur d'idéalité et la résistance série s'améliorent lorsqu'on a effectué un recuit.

Pour la structure Au/GaN (2,2nm)/GaAs, les facteurs d'idéalité sont évalués à 2,26 et 1,53 respectivement à l'obscurité et sous éclairage. Le courant de saturation et la résistance série sont évalués de l'ordre de $4,46 \times 10^{-07}$ A et 145,34 Ω et $5,46 \times 10^{-07}$ A et 139 Ω respectivement à l'obscurité et sous éclairage. Le courant de saturation est amélioré sous illumination et produit par conséquent un gain de courant d'environ 1,26.

Les mesures C(V) en haute fréquence effectuées sur les différents échantillons nitrurés montrent que les structures présentent aussi un comportement Schottky et que la densité d'état d'interface N_{ss} calculée de Au/GaN/GaAs apporte moins de défauts et piège que Au/GaAs, aussi que la densité d'état est largement réduite avec l'augmentation de l'épaisseur de la nitruration.

Cependant, et afin d'analyser le comportement électrique et photoélectrique de la diode Schottky à base de GaAs nitruré. Nous nous sommes intéressés à mettre en place un programme de simulation 1D des phénomènes de transport de courant dans une structure Schottky à base de GaAs nitruré. Ce programme tient en compte la distribution en forme (U et W) des états piège dans la bande interdite du GaAs. Ce travail fera l'objet du prochain chapitre.

Références Bibliographiques :

- [1] [http://HP_4155B / 4156B New Semiconductor, Product Note –1, Differences from HP4155A/4156A.](http://HP_4155B_4156B_New_Semiconductor_Product_Note_-1_Differences_from_HP4155A/4156A)
- [2] Bachir Boudjra Nacera,
Thèse de magister d'université de Sidi-Bel-Abbès, 1995.
- [3] Kheira Ameer,
Thèse de doctorat, Université de Sidi Bel Abbé, 2012.
- [4] Votre source pour keithley 590 C-V Analyzer:
[http:// www.teknetelectronics.com/DataSheet/KEITHLEY/KEITH_590105226.pdf](http://www.teknetelectronics.com/DataSheet/KEITHLEY/KEITH_590105226.pdf).
- [5] G. Monier,
Thèse de Doctorat, l'Université Blaise Pascal, Clermont-Ferrand II, N° d'ordre D. U. 2142 (2011).
- [6] B. Akkal, Z.Benamara, H. Abid, A. Talbi, & B. Gruzza,
Materials chemistry and physics, 85(1), 27-31. (2004).
- [7] Z. Çaldıran, R. Deniz, M. Coşkun. A.Yeşildağ A. &D.Ekinci,
Journal of Alloys and Compounds,584, 652-657. (2014).
- [8] M. Ambrico, M. Losurdo, P. Capezzuto, G. Bruno, T. Ligonzo, L. Schiavulli, I. Farella, V. Augelli, Solid State Electron. 49 (2005) 413–419.
- [9] G. Monier, L. Bideux, C. Robert-Goumet, B. Gruzza, M. Petit, J.L. Lábár, M. Menyhárd, Surf. Sci. 606 (2012) 1093–1099.
- [10] A. Rabehi, M. Amrani, Z. Benamara, B. Akkal, A.H. Kacha, C.Robert-Goumet,, ... & B .Gruzza,
Eur. Phys. J. Appl. Phys. 72: 10102. (2015).

- [11] V. Matolín, S. Fabík, J. Glosík, L. Bideux, Y. Ould-Metidji, & B. Gruzza, Vacuum, 76(4), 471-476. (2004).
- [12] P.R. Barry, J. Genoe, P. Heremans, J. Poortmans, Prog. Photovol. Res. Appl. 15(2007) 659- 676.
- [13] M. Soylu, F. Yakuphanoglu Thin Solid Films 519 (2011) 1950–1954.
- [14] H. He, X. Yun, Y. Wu, X. Mu, H. Zhu, S. Yuan, D. Yang, Nano Energy (2015) 16, 91–98.
- [15] A. Rabehi, M. Amrani, Z. Benamara, B. Akkal, A.H. Kacha, Optik-International Journal for Light and Electron Optics 127 (16), 6412-6418.
- [16] N. Mecirdi, Mémoire de magister, Université de Sidi-Bel-Abbès, Avril 2004.
- [17] S. M. Sze, Kwok K. NG, Physics of Semiconductor Devices, Third Edition, JOHN Wiley & Sons, JNC, 2007.
- [18] Agnès Philippe, Thèse de doctorat, Institut National Des Sciences Appliquées De Lyon, N° d'ordre : 99ISAL .0110, Année 1999.
- [19] Mouna Zouaoui Thèse de doctorat, Institut National Des Sciences Appliquées De Lyon, N° d'ordre : 2013ISAL0092, Année 2013.
- [20] N. Zougagh, Z. Benamara, H. Mazari, N. Benseddik, K. Ameer, G. Monier .. & B. Gruzza, Sensor Letters, 9 (6), 2211-2214. (2011).
- [21] M. Losurdo, P. Capezzuto, G. Bruno, E.A. Irene, Phys. Rev. B 58 (1998) 15878.

Chapitre VI

Résultats de simulation et ajustement

VI. 1 Introduction

Dans ce chapitre, nous allons utiliser le programme de simulation que nous avons développé dans le chapitre IV afin d'interpréter l'évolution des caractéristiques électriques dans une structure Schottky à base de GaAs nitruré. Pour cela, nous allons développer un modèle numérique de calcul de la caractéristique I-V qui peut vérifier les mesures expérimentales effectuées sur les diodes Schottky. Le modèle géométrique de notre structure doit tenir compte non seulement de la couche GaN formée entre le métal et le substrat GaAs mais aussi de la densité et la distribution des états pièges à l'intérieur de la bande interdite. Le principe de calcul de notre programme est basé sur la résolution numérique des équations de Poisson et de continuité qui permet de calculer le potentiel électrostatique et les deux concentrations des porteurs mobiles n et p . Ces trois paramètres à leur tour servent à extraire les densités des courants J_n et J_p ,

Dans une deuxième partie notre programme est étendu pour étudier l'effet photoélectrique en fonction des paramètres optiques caractérisant ce phénomène, en particulier, la puissance lumineuse, la longueur d'onde, etc...

Enfin, pour valider notre modèle, nous faisons une comparaison entre le résultat de simulation avec ceux obtenus par l'expérience effectués sur des diodes Schottky à base du GaAs nitruré.

VI.2 Modèle de distribution des états pièges dans la bande interdite

Le désordre d'une structure atomique est la caractéristique principale qui différencie un matériau amorphe d'un autre cristallin. Dans un cristal parfait, les atomes sont ordonnés, le réseau est périodique. Les différents types de défauts peuvent créer des états des pièges dans les bandes interdites. Pour ce qui est de la structure amorphe, les atomes sont disposés de façon non périodique. L'ordre atomique à grande distance a disparu mais l'existence d'un ordre local préserve l'existence d'une bande de valence et d'une bande de conduction.

L'étude bibliographique concernant les propriétés physiques du matériau amorphe a montré l'existence des défauts qui sont dus soit aux impuretés ionisées soit aux déformations du réseau. Ces dernières génèrent des liaisons pendantes ou des queues de bandes.

Le modèle de distribution des états permis dans la bande interdite retenu dans notre simulation numérique est la somme de deux distributions, habituellement modélisées sous la forme d'un U ou W [1] [2] :

- distribution gaussienne provenant des liaisons pendantes,
- distribution exponentielle provenant des queues de bandes,

La figure (VI.1) donne une représentation schématique du modèle de distribution des états pièges montrant les paramètres caractéristiques qui seront explicités dans ce qui suit.

Une connaissance de la nature et des propriétés des différentes distributions est nécessaire à l'élaboration du modèle.

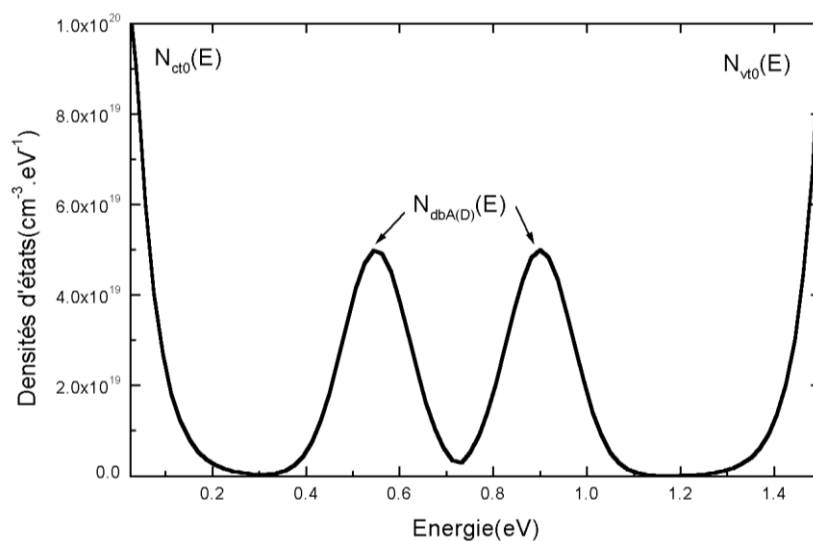


Figure VI.1 : Représentation schématique de la distribution des états pièges permis dans la bande interdite.

VI.2.1 Les états de pièges des queues de bandes

Les mesures de CTS (spectroscopie de capacité transitoire) ou DLTS (spectroscopie transitoire des niveaux profonds) semblent bien établir que les distributions d'états de queues de bandes sont de forme exponentielle [3] dérivante d'une distribution de Boltzmann. Elles sont exprimées par :

- Pour la queue de bande de valence :

$$N_{VT}(E) = N_{VT0} \cdot \exp\left(\frac{E_V - E}{kT_V}\right) \quad (\text{VI-1})$$

- pour la queue de la bande de conduction

$$N_{CT}(E) = N_{CT0} \cdot \exp\left(\frac{E - E_C}{kT_C}\right) \quad (\text{VI-2})$$

avec :

kT_C et kT_V : les niveaux caractéristiques respectivement des états donneurs et accepteurs.

N_{CT0} , N_{VT0} : les densités par unité d'énergie respectivement en bord de la bande de conduction et de valence.

VI.2.1 Les états de pièges des liaisons pendantes

Du fait des perturbations dues au désordre spatial dans le matériau amorphe, chacun des niveaux d'ionisation des pièges accepteurs et donneurs ne peut être identique d'une liaison pendante à une autre. Ceci conduit à la formation d'une bande de niveaux d'énergie permise pour les défauts, ces derniers seront alors distribués en énergie. La distribution généralement considérée est de type gaussien [2]. Les densités d'états chargés des liaisons pendantes sont exprimées par :

- Pour les états pièges donneurs:

$$N_{dbd}(E) = N_{GD} \cdot \exp\left[-\left(\frac{E - E_{GD}}{W_{GD}}\right)^2\right] \quad (\text{VI-3})$$

- pour les états pièges accepteurs

$$N_{dbA}(E) = N_{GA} \exp \left[- \left(\frac{E - E_{GA}}{W_{GA}} \right)^2 \right] \quad (\text{VI-4})$$

où (N_{dbA}, N_{dbD}) représente la densité totale des liaisons pendantes, (W_{GA}, W_{GD}) la déviation standard de la distribution gaussienne et (E_{GD}, E_{GA}) leur niveau d'énergie moyen .

Ainsi, la densité d'état piège totale ionisée s'exprime par [4] :

- pour la queue de bande de conduction

$$Q_{ct}(n, p) = \int_{E_v}^{E_c} (N_{ct}(E) + N_{GA}(E)) f_{ct}(E) dE, \quad (\text{VI-5})$$

- pour la queue de bande valence :

$$Q_{vt}(n, p) = \int_{E_v}^{E_c} (N_{vt}(E) + N_{GD}(E)) [1 - f_{ct}(E)] dE. \quad (\text{VI-6})$$

$f_{ct}(E)$ et $f_{vt}(E)$ sont respectivement les fonctions d'occupation des pièges accepteurs et donneurs données par la cinétique de SCHOCKLEY- HALL- READ [11], soit :

$$f_{ct}(E) = \frac{C_n^{ct} p + C_p^{vt} n(E)}{C_p^{vt} (p + p_1(E)) + C_n^{ct} (n + n_1(E))}, \quad (\text{VI-7})$$

$$1 - f_{ct}(E) = \frac{C_n^{ct} n + C_p^{vt} p(E)}{C_p^{vt} (p + p_1(E)) + C_n^{ct} (n + n_1(E))}. \quad (\text{VI-8})$$

C_n^{ct} , C_p^{ct} , C_n^{vt} , C_p^{vt} sont respectivement les sections de capture des électrons et les trous par les queues de bande de valence et de conduction.

Le taux net de recombinaison exprimé par [5] :

$$G = G_{ct}(n, p) + G_{vt}(n, p). \quad (\text{VI-9})$$

$G_{ct}(n, p)$, $G_{vt}(n, p)$: Sont le taux net de recombinaison dans la bande de conduction et de valence respectivement, soit :

$$G_{ct(vt)}(n,p) = \int_{E_v}^{E_c} \frac{(N_{ct(vt)}(E) + N_{GA(GD)}(E)) C_n^{ct(vt)}(n,p-n_i^2)}{C_p^{ct(vt)}[p+p_l(E)] + C_n^{ct(vt)}[n+n_l(E)]} d(E) \quad (VI-10)$$

VI.3 Paramètres physiques et géométriques

La procédure de calcul suivie pour la simulation de la caractéristique I(V) du modèle de la distribution en forme U est similaire à celle étudiée précédemment. On précise seulement que les expressions de ρ et G changent, soit :

$$\rho = (n - p - dop + Q_{ct}(n,p) - Q_{vt}(n,p)) \quad (V-11)$$

$$G = G_{ct(vt)}(n,p) = \int_{E_v}^{E_c} \frac{(N_{ct(vt)}(E) + N_{GA(GD)}(E)) C_n^{ct(vt)}(n,p-n_i^2)}{C_p^{ct(vt)}[p+p_l(E)] + C_n^{ct(vt)}[n+n_l(E)]} d(E) \quad (V-12)$$

Ce calcul utilise des paramètres physiques (densité des états pièges) et électriques (mobilité, résistivité) du matériau.

Nous avons classé ces derniers en deux catégories :

VI .3 .1 Paramètres fixes

Ce sont des paramètres liés à la nature physique des matériaux GaN et GaAs tels que, les densités d'états effectives dans les bandes de conduction et de valence, la largeur de la bande interdite, l'affinité électronique, etc.

<i>Paramètres</i>	<i>GaAs</i>	<i>GaN</i>
-Largeur de la bande interdite : E_G (eV)	1.42	3.4
-Affinité électronique : χ (eV)	4.07	4.1
- Constante diélectrique relative : ϵ	12.9	9.5
- Mobilité des électrons en non dopé μ_n (cm ² . V ⁻¹ .s ⁻¹)	8400	400
-Mobilité des trous en non dopé μ_p (cm ² . V ⁻¹ .s ⁻¹)	1000	350
-Dopage	10 ¹⁵ -10 ¹⁸	10 ¹⁰
-Épaisseur	3μm	2nm

Tableau VI.1: Valeurs des paramètres des matériaux GaN et GaAs à T=300°K.

VI .3 .2 Paramètres variables

Cette deuxième catégorie englobe les paramètres liés au modèle physique de la distribution des états pièges dans la bande interdite et les paramètres caractéristiques décrivant ces états. Tous ces paramètres sont regroupés dans le tableau (VI.2). On donne aussi, leurs valeurs prises par défaut pendant la simulation ainsi que leur fourchette de variation qui sont pour la plupart d'entre eux pris à partir des données bibliographiques.

Paramètres	Valeur par défaut	Etendu de variation
<u>Queues de bandes :</u>		
$N_{ct0} \text{ (cm}^{-3} \cdot \text{eV}^{-1})$	1.10^{18}	$1.10^{17} - 1.10^{21}$
$N_{vt0} \text{ (cm}^{-3} \cdot \text{eV}^{-1})$	1.10^{18}	$1.10^{17} - 1.10^{21}$
$K_{tA} \text{ (meV)}$	80	
$K_{tD} \text{ (meV)}$	80	
<u>Liaisons pendantes:</u>		
$N_{dba} \text{ (cm}^{-3})$	10^{17}	$1.10^{12} - 1.10^{20}$
$N_{dbd} \text{ (cm}^{-3})$	10^{17}	$1.10^{12} - 1.10^{20}$
$w_{GD} \text{ (meV)}$	0,1	
$w_{GA} \text{ (meV)}$	0,1	
$E_{GA} \text{ (eV)}$	0,55	
$E_{GD} \text{ (eV)}$	0,55	

Tableau VI.2: Les paramètres physiques et technologiques et leur gamme de variation utilisée dans la simulation [3][4][5][6].

VI.3.3 Le maillage utilisé

La définition du pas du maillage est très importante pour une simulation, la précision sera meilleure si le maillage est serré dans les zones de forts gradients et souple dans les zones où la variation spatiale est faible.

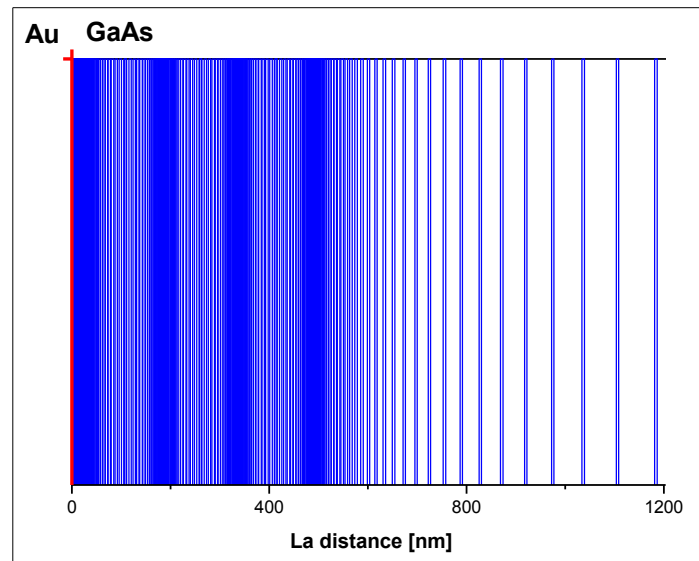


Figure VI.2: Maillage à pas variable de la diode Au/GaN/GaAs pris dans la simulation numérique à une dimension.

La Figure (VI.2) montre le maillage choisi dans notre structure, Nous utilisons un maillage à pas variable, pour aboutir à une bonne précision et pour éviter les problèmes de divergence; le maillage doit être suffisamment serré dans les zones qui présentent un fort gradient de potentiel (telles que les jonctions métallurgiques)

VI. 4 Résultats de simulation

Nous commençons notre simulation sur une structure simple d'une diode Schottky Au/GaAs. Avant d'entamer le calcul de la caractéristique I-V d'une diode Schottky a base de GaAs nitruré, nous allons déterminer d'abord certains paramètres dont ils peuvent intervenir tels que le potentiel électrostatique, le champ électrique, ainsi que les concentrations des porteurs mobiles des électrons et des trous à l'intérieur de la structure polarisée.

VI. 4.1 Variation du potentiel électrostatique ϕ et des concentrations de porteurs mobiles n et p

Ces trois paramètres sont le résultat de la résolution numérique du système formé par l'équation de Poisson et les deux équations de continuité des électrons et des trous, à partir desquels, nous déduisons la caractéristique courant-tension (I-V) des dispositifs électroniques.

Nous allons donc examiner l'évolution de ces trois paramètres en considérant une diode Schottky Au/n-GaAs avec une concentration de dopage $N_d = 1.10^{16} \text{cm}^{-3}$.

La figure (VI.3.a) illustre la distribution des trois paramètres suivant la direction X dans le cas d'une diode Schottky Au/GaAs à l'équilibre thermique. Nous pouvons remarquer l'apparition d'une zone de charge d'espace de l'ordre de 350 nm avec une hauteur de barrière égale à V_d ($V_{bi}=0.93$ V).

Nous remarquons aussi que la résolution du système vérifie que les pseudo-niveaux de Fermi E_{Fn} et E_{Fp} sont alignés à l'équilibre thermodynamique ($V_p=0$) comme le montre le diagramme de bande énergétique calculé (figure (VI.3.b)).

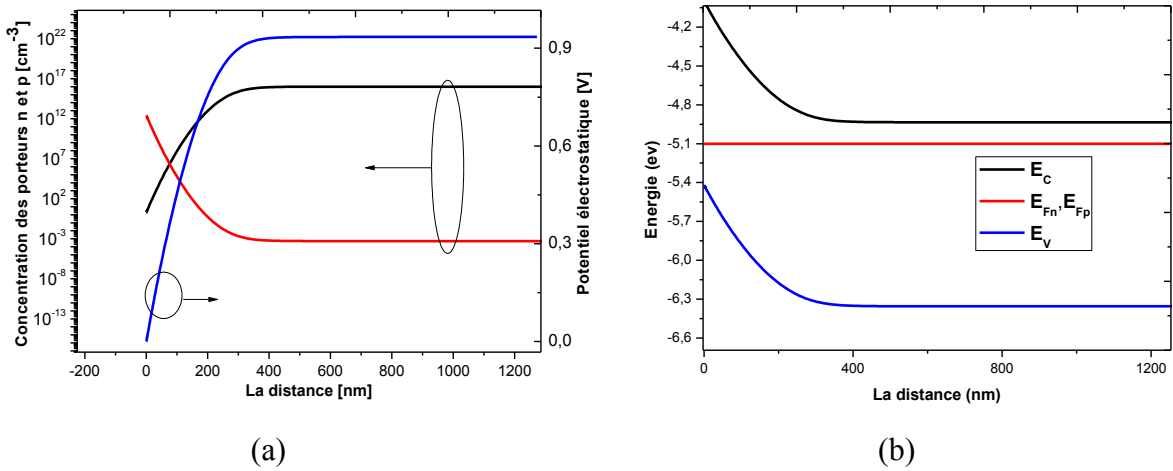


Figure VI.3: Distribution de ϕ , n et p suivant la direction X (a) et le diagramme de bande énergétique correspondants à une diode Schottky Au/GaAs à l'équilibre thermique (b).

La figure (VI-4) représente la variation du potentiel électrostatique (figure (VI.4.a)) et le champ électrique (figure (VI.4.b)) dans la direction X à différentes tensions de polarisation V_p (-0.5V, 0V et 0.5V).

Nous observons que la largeur de la zone de charge d'espace du contact métallurgique varie proportionnellement à la tension inverse, ce qui conduit à une augmentation de la hauteur de la barrière de potentiel ainsi que le champ électrique maximal qui est donné par l'équation suivante:

$$E_{\max} \approx \frac{qN_d}{\epsilon} W_{zce} \quad (\text{VI. 13})$$

D'autre part la largeur de la zone de charge d'espace du contact métallurgique est inversement proportionnelle à la tension directe, ce qui conduit à une diminution de la hauteur de la barrière de potentiel.

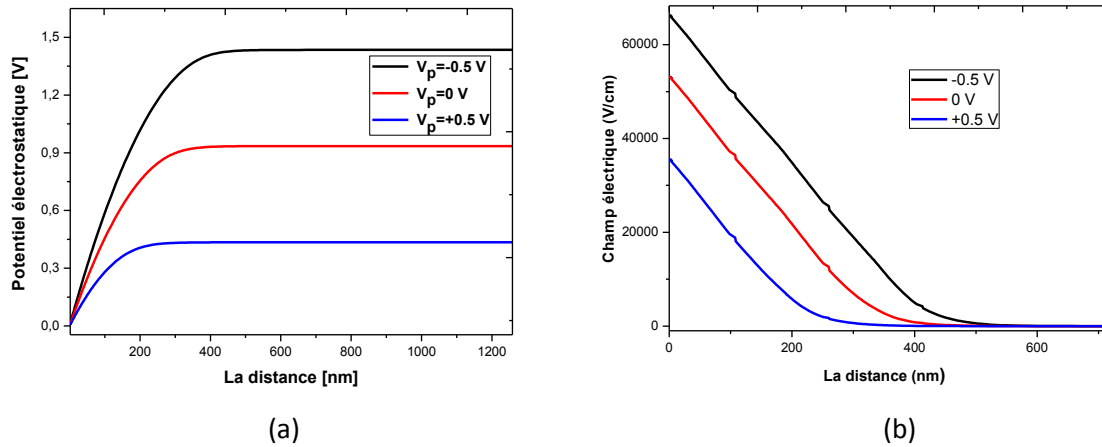


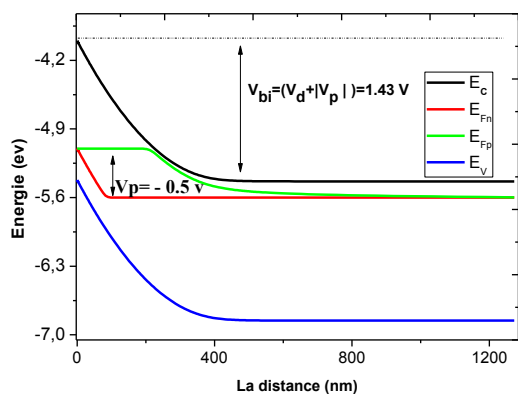
Figure VI.4: Variation du potentiel électrostatique (a) et le champ électrique (b) d'une diode Schottky Au/GaAs en fonction de la tension de polarisation.

Dans la figure (VI.5), on récapitule les diagrammes de bandes énergétiques dans la direction X d'une diode Schottky Au/GaAs polarisée en direct avec une tension V_p égale à 0.5V (figure (VI.5.a)), et en inverse avec une tension V_p égale à -0.5V (figure (VI.5.b)). Lorsqu'on polarise la diode avec une tension V_p négative, la différence de potentiel aux bornes de la zone de charge d'espace augmente et la hauteur de barrière de potentiel devient

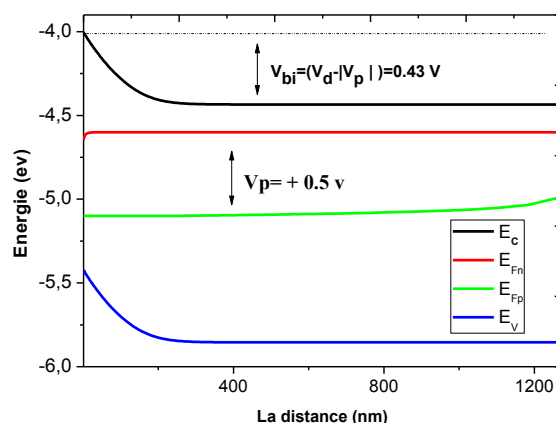
$$V_{bi} = (V_d + |V_p|) = 1.43 \text{ V}.$$

Mais, lorsqu'on la polarise avec une tension V_p positive, la largeur de la zone de charge d'espace diminue et la hauteur de barrière de potentiel devient $V_{bi} = (V_d - |V_p|) = 0.43 \text{ V}$.

On remarque que la différence entre les pseudo-niveaux de Fermi où les quasi-niveaux de Fermi dans la zone quasi-neutre est bien égale à la tension de polarisation V_p . Ces entités permettent donc d'écrire les densités des porteurs mobiles hors-équilibre et donc le niveau de Fermi à l'équilibre doit être remplacé par les quasi-niveaux de Fermi hors équilibre.



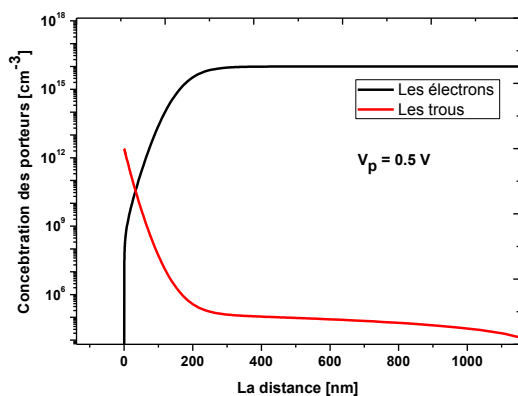
(a)



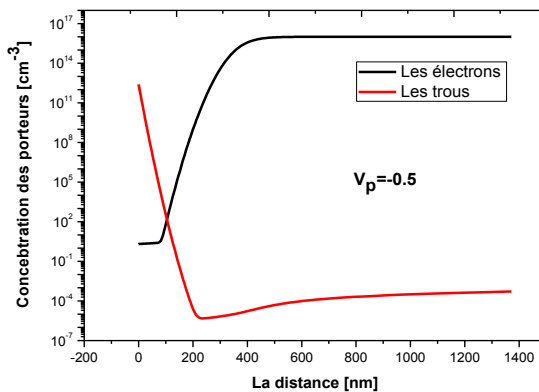
(b)

Figure VI.5: Diagrammes de bandes énergétiques d'une diode Schottky Au/GaAs en inverse (a) et en Direct (b).

Les densités des concentrations n et p , correspondantes aux variations des pseudo-niveaux calculées précédemment en régime direct et en régime inverse, sont illustrés dans la figure (VI.6).



(a)



(b)

Figure VI.6: Distribution des concentrations des porteurs $n(x)$ et $p(x)$ dans la direction X d'une diode Schottky Au/GaAs en direct (a) et en inverse (b).

VI.4.2 Simulation des Caractéristiques I-V d'une diode Schottky Au/GaN/GaAs

VI.4.2.1 Caractéristiques I-V sous obscurité

VI.4.2.1.1 Effet des états pièges des queues de bandes

Les états de queue de bandes sont caractérisés par la valeur de la queue de bande de conduction (N_{ct0} , KT_A) et celle de la valeur de la queue de bande de valence (N_{vt0} , KT_D). En fixant la concentration en dopant $N_d = 1.10^{16} \text{ cm}^{-3}$, $N_{dbA} = N_{dbD} = 1.10^{12} \text{ cm}^{-3}$, $N_{vt0} = 10^{18} \text{ eV cm}^{-3}$, la figure (VI-7) donne la variation du paramètre caractérisant la queue de bande de conduction N_{ct0} sur la caractéristique $J(V)$ de la diode Schottky polarisée en direct.

Nous remarquons que le paramètre N_{ct0} de la densité de queue de bande de conduction influe très faiblement sur la densité de courant pour les faibles tensions. Mais pour les tensions supérieures à 0.3V, la caractéristique $J(V)$ reste quasi-constante. Elle est contrôlée par la résistance série qui augmente quand N_{ct0} augmente.

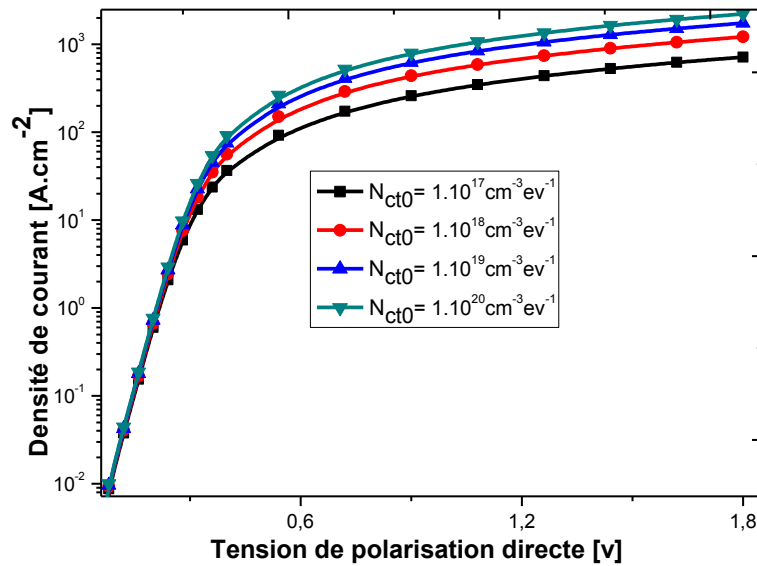


Figure VI.7: Effet de N_{ct0} de la densité de la queue de bande de conduction.

VI.4.2.1.2 Effet de la densité totale N_{dbA}

La figure (VI.8) montre l'effet de la densité totale des liaisons pendantes sur la caractéristique simulée $J(V)$ de la diode Schottky polarisée en direct. La densité totale symétrique par rapport au milieu du gap est prise en compte dans la simulation avec des

caractéristiques identiques ($N_{dbD} = N_{dbA}$), En fixant la concentration en dopant $N_d = 5.10^{16} \text{ cm}^{-3}$, $N_{ct0} = 1.10^{18} \text{ cm}^{-3} \text{ eV}$. $N_{vt0} = 1.10^{18} \text{ cm}^{-3} \text{ eV}$.

Nous remarquons que pour une densité N_{dbA} inférieure à $10^{16} \text{ cm}^{-3} \text{ eV}^{-1}$, le courant ne varie plus car cette densité est inférieure à celle du dopage ($1.10^{16} \text{ cm}^{-3}$). Pour des densités supérieures à 10^{16} , nous remarquons que la densité totale des liaisons pendantes influe très fortement sur la densité de courant. Pour une tension appliquée de 0.5V, la densité de courant diminue brusquement jusqu'à cinq décades lorsque N_{dbA} varie de 10^{17} à 10^{18} cm^{-3} , l'évolution de la densité de courant est comme prédite de la théorie développée par Taylor et Simmons [7]. La zone de recombinaison est limitée par le plateau de la fonction d'occupation et la largeur de ce plateau augmente avec la diminution de la DOS (density of states). Dans ce cas les porteurs de charges se déplacent d'un état localisé à un autre état de la bande de conduction par émission de l'état de départ vers l'état étendu, cette émission est suivie par la capture par un autre état localisé.

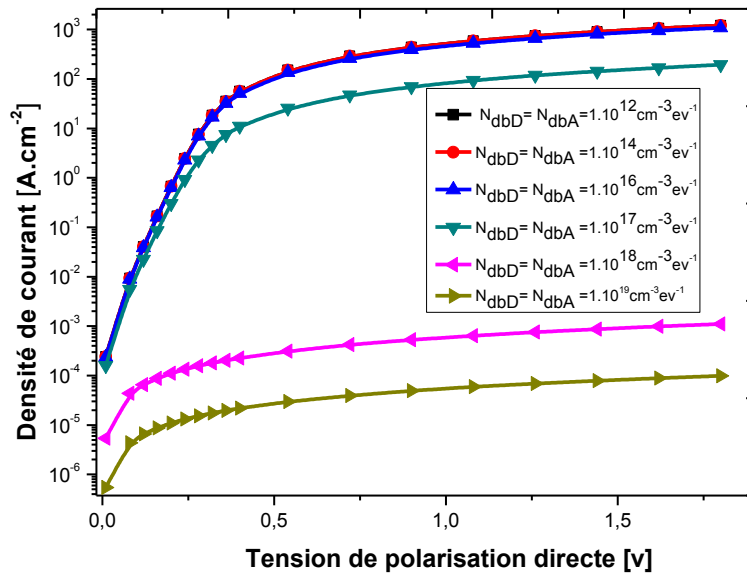


Figure VI.8: Effet de la densité totale N_{db} sur la caractéristique $J(V)$.

VI.4.2.1.3 Effet de la concentration en dopants N_d :

Dans la figure (VI.9a et b) nous présentons l'effet du dopage sur la variation de la densité de courant directe $J(V)$, nous utilisons deux modèles de distribution des doses en

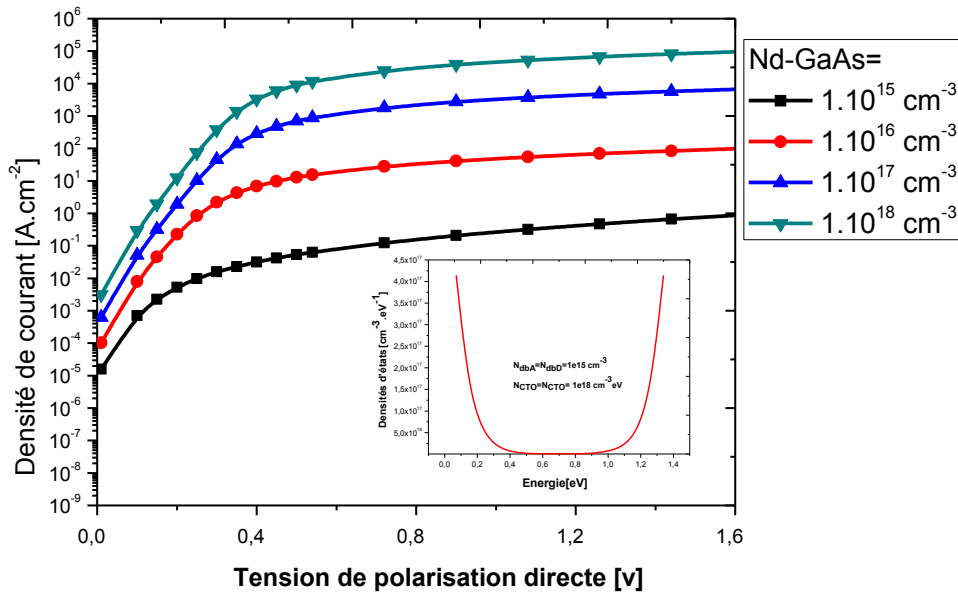
forme W et en forme U (voir figure (VI.10)), En fixant la concentration en dopant $N_{ct0}=1.10^{18} \text{ cm}^{-3} \text{ eV}$, $N_{vt0}=1.10^{18} \text{ cm}^{-3} \text{ eV}$.

La figure (VI.9.a) montre que la densité de courant augmente lorsque le dopage augmente. A forte injection cette augmentation est plus importante. Le facteur d'idéalité calculé pour ces courbes varie de 1.20 à 1.93 lorsque le dopage passe de 10^{15} cm^{-3} à 10^{18} cm^{-3} . Ces valeurs de n (supérieur à 1) confirment que le modèle de conduction thermoïonique ne peut expliquer seul la variation du courant dans ce dispositif. C'est le courant de recombinaison des porteurs dans les zones de charge d'espace qui s'ajoute au courant thermoïonique. Le courant dû au mécanisme de recombinaison est généralement exprimé par [8] :

$$J_R = \frac{qn_i w}{2\tau} \exp\left(\frac{qV_a}{2kT}\right).$$

Avec w : la largeur de la zone de charge d'espace.

Pour le modèle de distribution en forme W, il est représenté dans la figure (VI.8.b) nous remarquons que le paramètre $N_{dbA(D)}$ influe très fortement sur la densité de courant. Pour une tension appliquée de 0.5V, la densité de courant augmente brusquement jusqu'à trois décades lorsque le dopage de GaAs varie de 1.10^{16} à $2.10^{16} \text{ cm}^{-3}$.



(a)

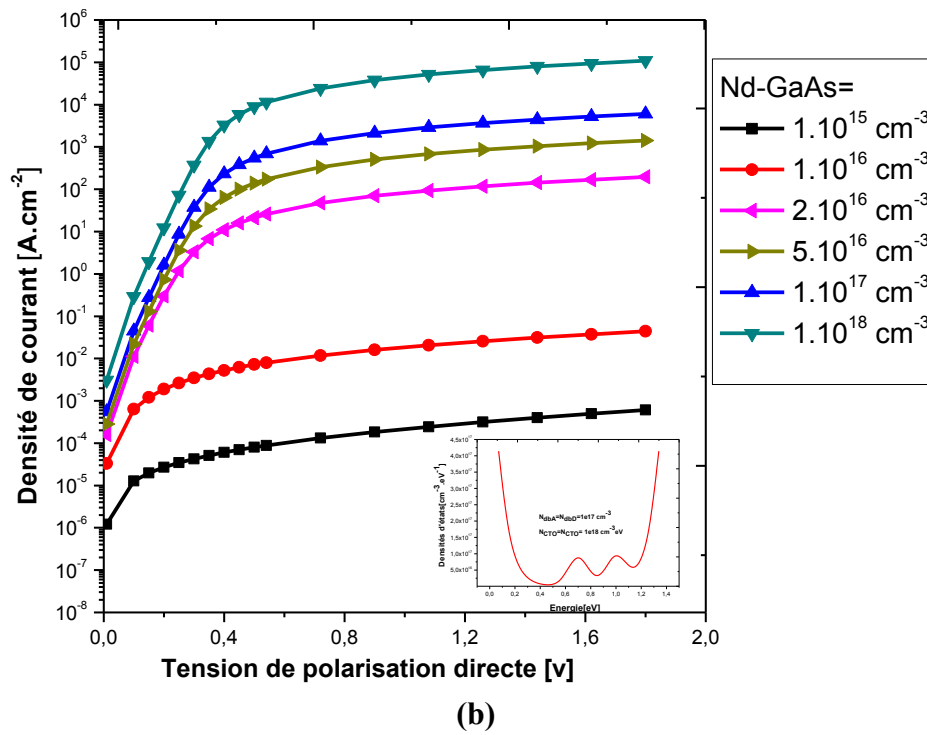
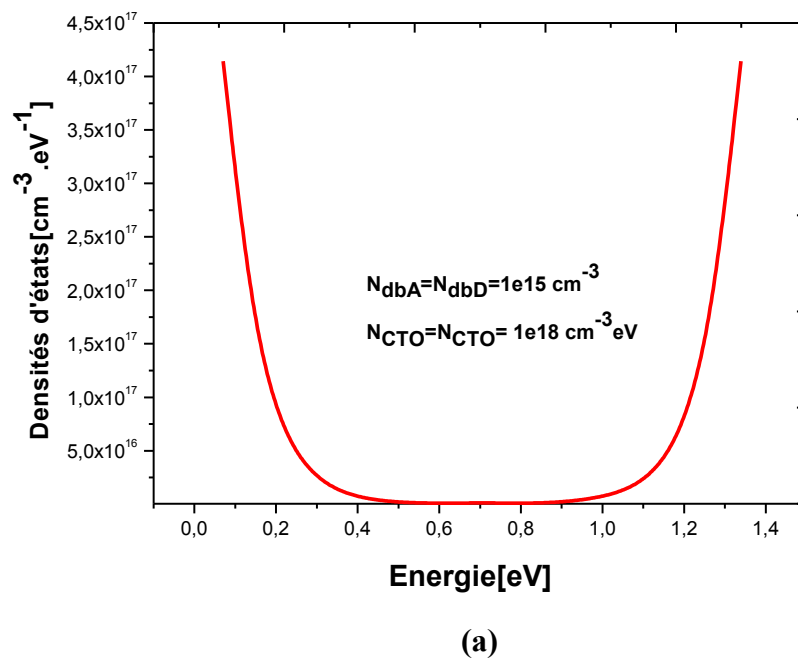
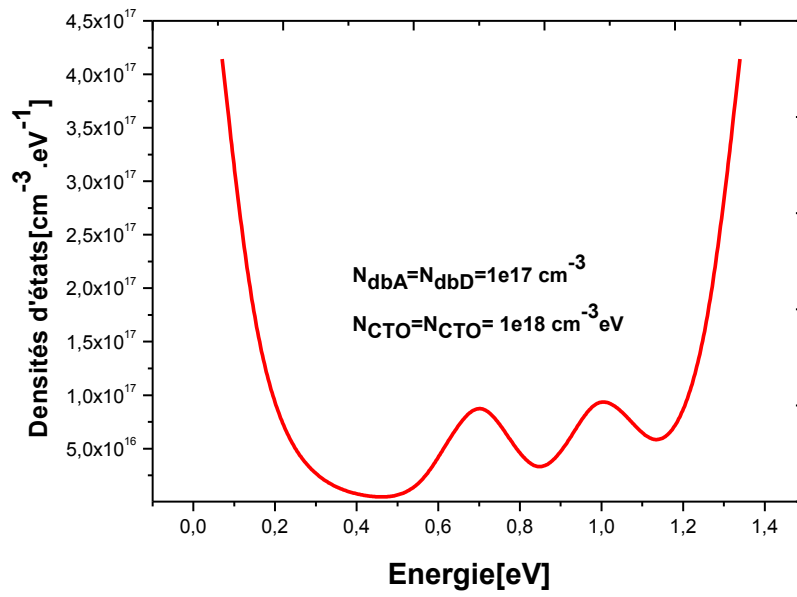


Figure VI.9 : Effet de la concentration en dopants N_d sur la caractéristique $J(V)$.

(a) Distribution de Forme U, (b) Distribution de Forme W.





(b)

Figure VI.10: La distribution des pièges dans la bande interdite.

(b) Distribution de Forme U, (b) Distribution de Forme W.

VI .4.2.2Caractéristiques I-V sous éclairement

VI .4.2.2.1Paramètres optiques de la photogénération

Les paramètres optiques sont introduits dans le programme via les deux équations de continuité par l'expression du taux de génération $G(x)$:

$$\frac{dn}{dt} - \frac{1}{q} \text{div}(i_e) + r_e - G_e(x) = 0 \quad (\text{VI.14})$$

$$\frac{dp}{dt} + \frac{1}{q} \text{div}(i_h) + r_h - G_h(x) = 0 \quad (\text{VI.15})$$

Le taux de photogénération pour chaque longueur d'onde à profondeur x est calculé par l'équation (VI.16) :

$$G(\lambda x) = \alpha(\lambda) I_0(\lambda) e^{-\alpha(\lambda)x} \quad (\text{VI.16})$$

Dans notre programme de simulation nous utilisons un éclairement monochromatique, Les principaux paramètres caractérisant notre structure d'étude sous éclairement sont regroupés dans le tableau suivant :

Paramètres	Valeurs
Puissance d'éclairement (mW)	0.25 -3
Longueur d'onde (nm)	400-632
Travail de sortie Φ_m d'Or (eV)	4.8-5.47 [9][10]

Tableau VI. 3 : Tableau regroupant les paramètres utilisé sous éclairement.

VI .4.2.2.2 Effet de la puissance

La figure (VI.11) montre l'effet de la puissance d'illumination sur la caractéristique simulée $J(V)$ de la diode Schottky. La densité des doses symétriques par rapport au milieu du gap sont prises en compte dans la simulation avec des caractéristiques identiques, En fixant la concentration en dopant $N_d = 5.10^{16} \text{ cm}^{-3}$, $N_{abD(A)} = 1.10^{12} \text{ cm}^{-3}$, $N_{ct0} = 1.10^{18} \text{ cm}^{-3} \text{ eV}$. $N_{vt0} = 1.10^{18} \text{ cm}^{-3} \text{ eV}$. La longueur d'onde $\lambda = 632.8 \text{ nm}$, travail du sortie d'Or $\phi_m = 5.1 \text{ eV}$.

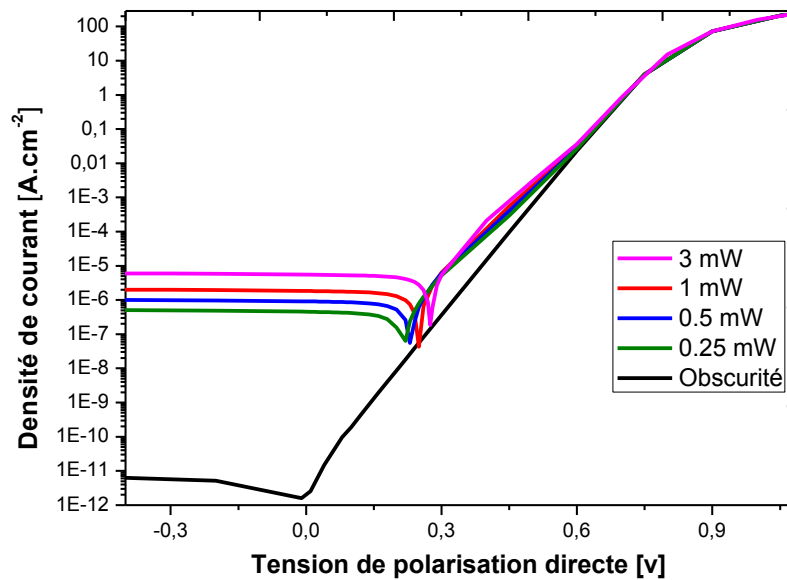


Figure VI.11 : Effet de la de la puissance d'éclairement sur la caractéristique $J(V)$.

Nous remarquons que les caractéristiques courant-tension de la diode Au/GaN/GaAs sous éclairage dépendent de l'intensité lumineuse. Le courant de polarisation inverse du dispositif augmente avec l'augmentation de l'intensité lumineuse.

Le photocourant est plus élevé que le courant d'obscurité à la polarisation inverse. Ceci suggère que la lumière générée porteuse contribuant photo courant dû à la production de paires électron-trou à la suite de l'absorption de lumière. Nous remarquons aussi que le principe de superposition est reproduit. Les caractéristiques de I-V de la diode illuminée sont les mêmes que les caractéristiques I-V sous obscurité, mais elle est décalée par la densité de courant photo-généré J_{ph} . Ceci justifie que le comportement de la structure Au/GaN/GaAs est un comportement conventionnel d'une photodiode.

Comme on le voit sur la figure (VI.11), les caractéristiques courant-tension de la diode sous éclairage donnent un courant de court-circuit I_{SC} , et une tension de circuit ouvert V_{OC} . Les variations de I_{SC} et V_{OC} en fonction de la puissance d'éclairage (P) sont présentées à la figure (VI.12). Ce résultat montre que les valeurs du courant de court-circuit I_{SC} , et tension de circuit ouvert, V_{OC} augmentent avec l'augmentation de l'intensité lumineuse.

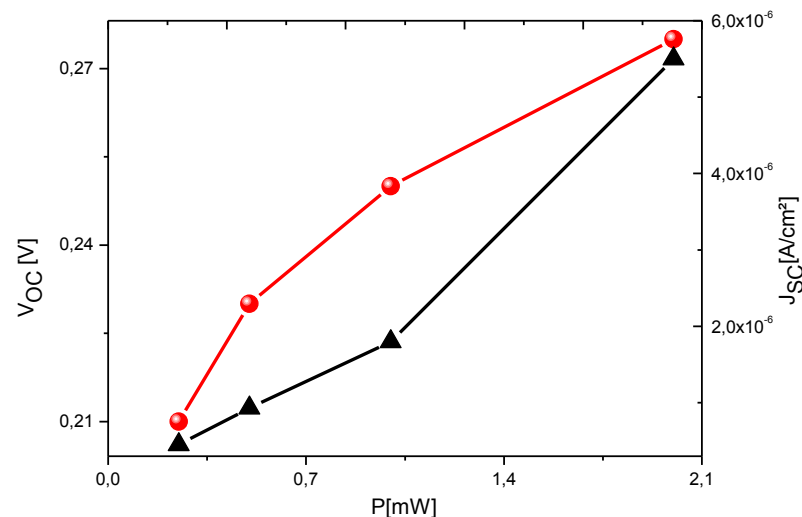


Figure VI.12: Variations de I_{SC} et V_{OC} en fonction de la puissance d'éclairage (P).

VI.4.2.2.3 Effet de la longueur d'onde

La figure (VI.13) montre l'effet de la longueur d'onde sur la caractéristique simulée $J(V)$ de la diode Schottky. La densité des doses symétriques par rapport au milieu du gap sont prises en compte dans la simulation avec des caractéristiques identiques, En fixant la

concentration en dopant $N_d = 5.10^{16} \text{ cm}^{-3}$, $N_{dbD(A)} = 1.10^{12} \text{ cm}^{-3}$, $N_{ct0} = 1.10^{18} \text{ cm}^{-3} \text{ eV}$, $N_{vt0} = 1.10^{18} \text{ cm}^{-3} \text{ eV}$. La puissance d'éclairement $P = 1 \text{ mW}$, travail de la sortie d'or $\phi_m = 5.1 \text{ eV}$.

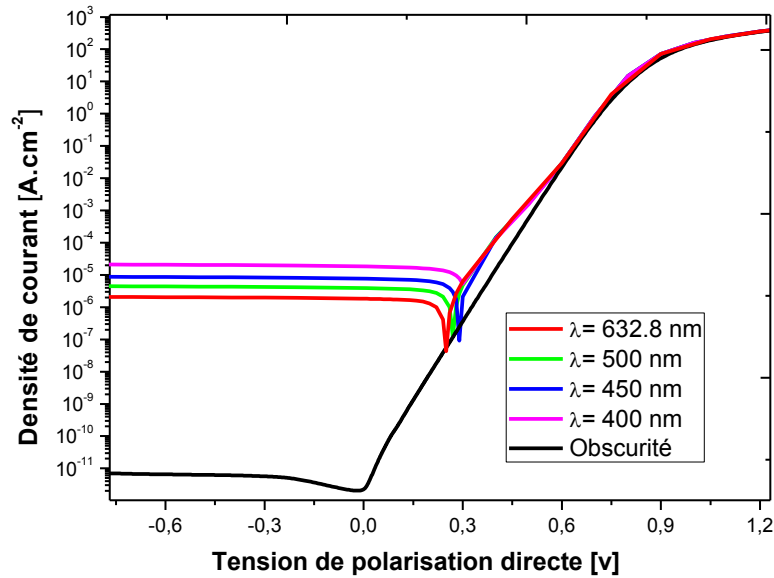


Figure VI.13 : Effet de la longueur d'onde sur la caractéristique $J(V)$.

Dans la figure (VI.13), nous remarquons que les caractéristiques photoélectriques sont inversement proportionnelles à la longueur d'onde. Lorsque la longueur d'onde est très courte, la couche GaAs absorbe la lumière et augmente fortement le courant dans le sens inverse par la création de paires électron/trou.

VI .4.2.2.4 Effet de travail de sortie de l'Or

Le travail de sortie de l'Or, acceptée pour être d'environ 4,7 eV jusqu'à 1966, a depuis été jugée beaucoup plus élevée. Dans les dernières années, de nombreuses recherches [9][10][11], ont rapporté des valeurs de fonction de travail de l'Or regroupés entre 4,8 et 5,47 eV.

L'impact de ces variations sur les caractéristiques courant-tension d'une structure Schottky Au/GaN/GaAs est étudié. La figure (VI.14) montre l'effet de la variation du travail de sortie sur la caractéristique simulée $J(V)$ de la diode Schottky Au/GaN/GaAs. En fixant la concentration en dopant $N_d = 5.10^{16} \text{ cm}^{-3}$, $N_{dbD(A)} = 1.10^{12} \text{ cm}^{-3}$, $N_{ct0} = 1.10^{18} \text{ cm}^{-3} \text{ eV}$, $N_{vt0} = 1.10^{18} \text{ cm}^{-3} \text{ eV}$. La puissance lumineuse $P = 1 \text{ mW}$, La longueur d'onde $\lambda = 632.8 \text{ nm}$.

Sous éclairage, la variation du travail de sortie influence fortement les caractéristiques courant-tension en régime direct, alors qu'en inverse il est inchangeable pour des valeurs de ϕ_m supérieur à 5,1 eV. On remarque que le principe de superposition n'est pas vérifié quand ϕ_m est relativement inférieur à la valeur précédente.

On montre que l'augmentation de la différence de travail de sortie entre le métal et le niveau de Fermi du semiconducteur conduit à un accroissement de la tension de circuit ouvert V_{CO} .

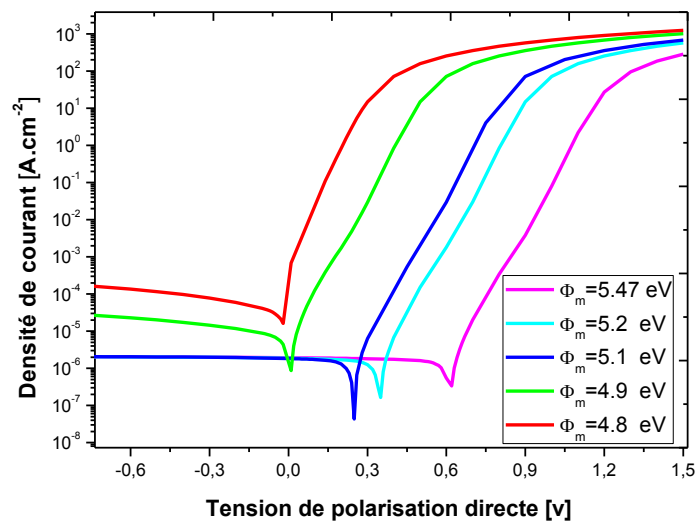


Figure VI.14 : Simulation numérique de l'impact de la variation du travail de sortie de l'or sur la caractéristique $J(V)$ sous illumination.

VI.4.2.3 Ajustement des courbes expérimentales et les courbes simulées

Un des buts de la simulation est d'évaluer les paramètres physiques non mesurables en faisant un ajustement des courbes expérimentales avec celles simulées. Avant cela, il est donc nécessaire de limiter l'étendue des variations de ces paramètres. L'étude de l'influence des paramètres mis en jeu dans la variation de la caractéristique électrique montre que le phénomène de transport de courant dépend du dopage du substrat GaAs, la densité des états pièges, la distribution en forme (U et W) des états pièges dans la bande interdite du GaAs, et le travail de sortie du métal.

Ce modèle aura donc plusieurs degrés de liberté. L'ajustement de la courbe simulée avec la courbe expérimentale devient difficile, il faut donc diminuer le nombre de degré de liberté par le biais d'autres mesures.

L'analyse des mesures C-V effectuée précédemment sur nos échantillons montre bien que la distribution des états d'interface N_{ss} prend généralement la forme U. Ceci a été aussi confirmé par plusieurs études expérimentales [12, 13, 14]. Pour cela on admet la distribution des états piège dans la bande interdite du GaAs en forme de U et dans ce qui suit on va considérer la densité totale des liaisons pendantes $N_{dbA(D)}$ comme un paramètre fixe et la densité d'états de queues de bandes N_{ct0} comme un paramètre d'ajustement.

Le travail de sortie de l'Or sera considéré comme un deuxième paramètre d'ajustement.

Dans la figure (VI-15) nous représentons le fit des caractéristiques $I(V)$ expérimentales à l'obscurité et sous illumination.

Les paramètres fixes ayant réalisés l'accordement des caractéristiques expérimentales et simulées sont regroupés dans le tableau VI.4

Paramètres	Valeurs
Puissance d'éclairement (mW)	1
Longueur d'onde (nm)	632
Concentration en dopant N_d (cm^{-3})	$4,9.10^{15}$
N_{dbD} (cm^{-3})	1.10^{13}
N_{dbA} (cm^{-3})	1.10^{13}
Epaisseur de la couche GaN (nm)	2,2
La distribution des états piège	en forme de U

Tableau VI. 4 : Tableau regroupant les paramètres utilisé dans l'ajustement

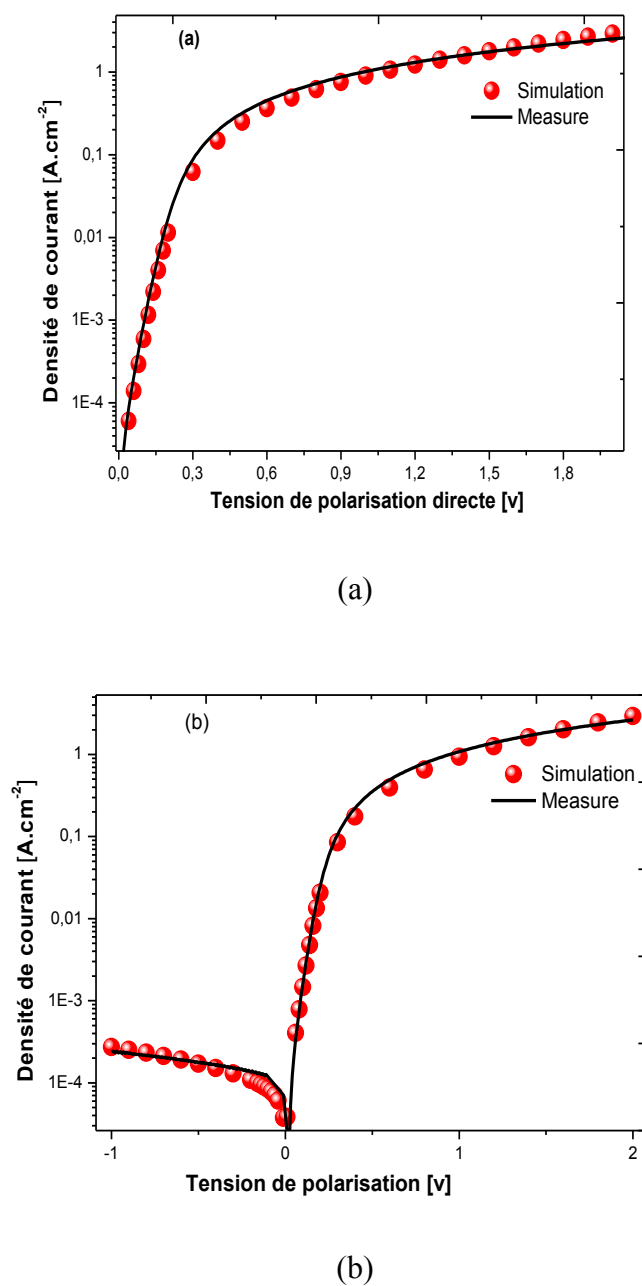


Figure VI.15: Caractéristique expérimentale et caractéristique simulée (de la distribution en forme de U) de la diode Schottky Au/GaN/GaAs à l'obscurité (a) et sous illumination (b).

L'ajustement des deux caractéristiques expérimentales et simulées est réalisé afin d'estimer la valeur de densité d'états de queues de bandes et la valeur d'une bonne précision du travail de sortie de l'Or. Nous trouvons ($N_{\text{ct}0} = N_{\text{vt}0} = 3 \cdot 10^{18} \text{cm}^{-3} \text{eV}$) et $\phi_{\text{m}} = 4,8 \text{ eV}$.

VI.5 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons développé un programme de simulation de la caractéristique courant–tension à l’obscurité et sous éclairage d’une diode Schottky Au/GaN/GaAs tenant en compte la distribution des états pièges dans la bande interdite en forme de U et en forme W.

À l’obscurité nous avons étudié l’effet des états pièges dans la bande interdite sur les caractéristiques courant–tension.

Sous éclairage, les caractéristiques courant-tension de la diode donnent un courant de court-circuit I_{SC} , et tension de circuit ouvert, V_{OC} varient proportionnellement à l’intensité lumineuse. La variation du travail de sortie de l’Or influence fortement les caractéristiques courant-tension en régime direct.

Nous avons montré aussi que l’augmentation de la différence de travail de sortie entre le métal et le niveau de Fermi du semi-conducteur conduit à une augmentation de la tension de circuit ouvert V_{CO} .

Nous avons complété notre travail par une comparaison entre des courbes expérimentales et des courbes simulées à l’obscurité et sous illumination qui justifient que la forme de distribution des pièges en forme de U rend bien compte les variations des courants I-V.

Références bibliographiques

- [1] P. Münster , M. Sarret, T. Mohammed - Brahim, and O. Bounnaud,
in 16th , european photovoltaic solar energy conference, Glasgow (James & James,
2000) pp.634-637.
- [2] J. Werner and M. Peisl,
phys. rev. b, 31, 10 (1985), p.-6881-6883.
- [3] T. Smail and M. Brahim,
philosophical magazine b, 1991, 64, 6 (1991), p.-675-688.
- [4] J. C. Carter and A. G. R. Evans,
microelectronics group, 1995/6 research journal.
- [5] M. Stöger,
solar energy materials & solar cells 63 (2000), p-177–184.
- [6] H. Flietner,
solid-state electronics 91 (1987), p. 153
- [7] JG. Simmons et GW .Taylor,
physical review b, vol. 4, no. 2, page 502, 1971.
- [8] S. M. Sze,
physics of semiconductor devices 2nd edition Wiley and Sons ed New York 1981
- [9] CRC handbook of chemistry and physics version 2008, p. 12–114.
- [10] A. Paul A. Anderson,
phys. rev. 115, 553 – published 1 August 1959.
- [11] Jeremy Brian Trombley,
Thèse doctorat, Département de Physique. CASE Western Reserve UNIVERSITY. 2014
- [12] Sanguan Anantathanasarn and Hideki Hasegawa
J. Vac. Sci. Technol. B 19(4), 1071-1023 ,Jul/Aug 2001
- [13] Mehmet Ali Ebeoglu,
Physica B 403 (2008) 61–66 .
- [14] Z. Benamara, N. Mecirdi, B. Bachir, L. Bouiadjra, B. Bideux, C. Gruzza, M. Robert
Miczek, B. Adamowicz, Applied Surface Science 252, 7890–7894 (2006).

Conclusion générale

L'intérêt de cette étude est de caractériser et simuler les caractéristiques électriques et photoélectriques d'un contact Au/GaAs nitruré. Le but est de connaître l'effet de la couche de nitruration GaN sur les paramètres électriques et optiques de la structure Schottky Au-GaAs.

La caractérisation électrique des structures Au/GaN/GaAs effectuée à l'obscurité nous a permis de déterminer les différents paramètres électriques, tels que le courant de saturation I_s , le facteur d'idéalité n , la résistance série R_s , la tension de diffusion V_d ainsi que le dopage N_d . Pour étudier les caractéristiques électriques sous l'illumination, nous avons utilisé un laser à hélium-néon de 632.8 nm de longueur d'onde et d'une puissance de sortie de 1 mW.

Nous pouvons conclure à partir de l'ensemble des résultats expérimentaux que :

- ✓ A l'obscurité et Après l'opération de nitruration le courant de saturation, le facteur d'idéalité ainsi que la résistance série diminuent lorsqu'on effectue un recuit. En effet, les mesures de microscopie haute résolution et de diffraction ont montré que les films de GaN créés dans les conditions optimisées sont amorphes. Cependant un recuit à 620 °C de cette couche amène à sa cristallisation en une structure cubique de type zinc blende.

- ✓ les facteurs d'idéalité sont évalués à 2,26 et 1,53 à l'obscurité et sous éclairage, respectivement. le courant de saturation et la résistance série sont évalués de l'ordre de $4,46 \times 10^{-07}$ A et 145,34 Ω respectivement à l'obscurité et $5,46 \times 10^{-07}$ A et 139 Ω sous éclairage. Le courant de saturation amélioré sous illumination donne un gain de courant d'environ 1,26.

- ✓ Le principe de superposition est bien reflété dans l'échantillon qui a été recuit (A2) que l'échantillon qui n'a subi aucun recuit.

Les mesures $C(V)$ effectuées sur les différents échantillons étudiés, montrent que les courbes obtenues présentent une allure de diode Schottky. Elles montrent aussi que la densité des états d'interface N_{ss} calculée de la diode Au/GaN/GaAs apporte moins de défauts que celle de la diode Au/GaAs.

L'exploitation de la caractéristique $C^{-2}(V)$ nous a permis d'estimer la concentration en dopants N_d et la tension de diffusion V_d . On observe une légère diminution du dopage pour les échantillons nitrurés, comparé à la concentration du substrat de GaAs

($N_d = 4.9 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$). Ceci a été expliqué par l'effet de la couche de GaN non intentionnellement dopée qui a créé une zone d'inter diffusion. .

Nous avons développé un programme de simulation 1D de la caractéristique électrique et photoélectrique de la diode Schottky Au/GaN/GaAs. Il est basé sur la résolution 1D du système formé par l'équation de Poisson et les deux équations de continuité en utilisant la méthode des différences finies avec l'introduction de l'approximation de Scharfetter-Gummel. Cette dernière suppose que la concentration des porteurs entre deux points successifs varie de façon à conserver un courant constant entre deux points. L'optimisation du maillage, la solution initiale, la condition aux limites et la précision imposée permet d'éliminer le risque de divergence et réduire le temps de calcul.

Grace à ce programme, nous avons étudié l'effet de quelques paramètres technologiques et physiques sur la caractéristique I-V à l'obscurité et sous éclairage de la diode Schottky Au/GaN/GaAs. Nous avons montré que :

- ✓ Le modèle de la distribution des états pièges dans la bande interdite de forme (U) est suffisant pour expliquer le mécanisme de transport dans les diodes Schottky que le modèle de forme (W).
- ✓ Sous éclairage, la variation du travail de sortie de l'Or influence fortement les caractéristiques courant-tension en régime direct, alors qu'en inverse il est interchangeable pour des valeurs de ϕ_m supérieur à 5,1 eV.
- ✓ On a remarqué que le principe de superposition n'est pas vérifié quand ϕ_m est inférieur à la valeur 5,1 eV.
- ✓ On a montré que l'augmentation de la différence de travail de sortie entre le métal et le niveau de Fermi du semiconducteur conduit à une augmentation de la tension de circuit ouvert V_{CO} .

Tous ces résultats que nous avons présenté montre que la nitruration a contribué à changer les propriétés électroniques des structures Schottky Au/GaAs et ceci s'est traduit par une nette diminution de la résistance série et du facteur d'idéalité ainsi que courant de saturation, et une nette amélioration de la densité d'états d'interface. Le recuit que nous avons effectué sur les structures A2 et A4, a permis d'améliorer encore plus les qualités électriques de la diode.

Finalement, La recherche dans le domaine de nitrure est vaste et nous avons fait qu'effloré une partie de ces aspects dans cette thèse, et puisque la porte de la recherche est grande ouverte sur les nitrures, on peut dire que la nitruration du GaAs n'a pas encore révélé tous ses secrets.

En perspective, nous pouvons compléter cette étude en apportant plus d'informations sur le comportement électriques de ces structures, en effectuant les procédures suivantes :

- ❖ Des mesures $I(V)$ et $C(V)$ en fonction de la température et des mesures $C(V)$ en fonction de la fréquence.
- ❖ mise au point d'un programme de simulation numérique en 2D des caractéristiques $I-V$ à fin d'étudier l'effet du pourcentage du GaN formé à la surface du GaAs.
- ❖ Elaboration des techniques et des modèles de prédiction pour gérer la distribution des états de pièges à l'intérieur de la bande interdite. en utilisant les techniques d'intelligences artificielles telles que : les réseaux de neurones (ANN), Support Vector Machine (SVM), Guassian Process Regression (GPR).

Annexe A

A. 1. Moyens expérimentaux et techniques de préparation du vide

A .1.1 Les bâtis ultravides

Les techniques du vide et de l'ultravide ont pris une place de plus en plus importante au cours des dernières années, tant dans la recherche que dans la production industrielle.

Dans le secteur de la microélectronique, en particulier, où elles sont largement utilisées pour les traitements de surface et le dépôt de couches minces, elles sont associées à tous les progrès et succès enregistrés. Mais c'est sans doute dans le développement de méthodes d'analyse physique que leurs apports furent les plus importants, en particulier dans celui des méthodes d'analyse des surfaces qui sont à l'origine du développement de la technologie ultravide ($P=10^{-9}$ Pa). Dans ce dernier cas, la nécessité de maintenir la surface hors contamination pendant la durée de l'analyse a nécessité l'obtention d'une pression résiduelle de plus en plus basse.

A .1.2 Obtention et contrôle du vide

Pour atteindre l'ultra-vide, plusieurs types de pompes sont nécessaires ayant chacune différentes plages d'utilisation (figure A.1) [1,2].

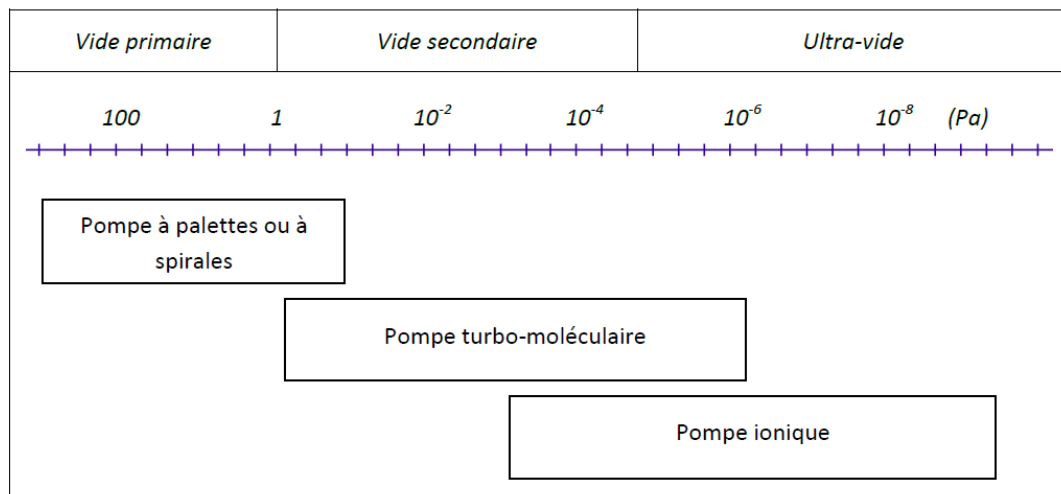


Figure A.1 : Plages d'utilisation des différentes pompes.

- **Une pompe à palettes**

Permet de ramener la pression atmosphérique à une pression de l'ordre 10^{-1} Pa. Elle est constituée d'un rotor muni de palettes, excentré à l'intérieur d'un stator, pouvant donner une vitesse de pompage de 50 l/s. La rotation du rotor entraîne les particules de l'enceinte, qui

vont ensuite être compressées entre les palettes. Cette compression commande alors l'ouverture de la vanne de sortie, permettant le rejet des particules vers le milieu extérieur.

- **Pompe turbo-moléculaire**

Permet d'atteindre un vide de l'ordre de 10^{-5} Pa. Elle se compose d'une série de roues à ailettes qui tournent à une vitesse de 72 000 tours/min. Les particules sont entraînées vers le système de refoulement qui est assuré par une pompe primaire ;

Afin de poursuivre la descente en pression, il est nécessaire d'étyver l'enceinte. Cet étuvage consiste à chauffer pendant le pompage, l'ensemble du dispositif expérimental. Ce chauffage s'effectue grâce à des cordons chauffants et à une lampe à émission infrarouge d'une puissance de 15 située à l'intérieur du bâti.

- **Une pompe ionique à diodes**

Permet d'obtenir un vide de l'ordre de 10^{-8} Pa. Son fonctionnement continuuel maintient l'ultra-vide indispensable à l'intérieur du bâti. Son principe est basé sur deux phénomènes : l'ionisation des molécules de gaz puis le piégeage des molécules ionisées qui sont adsorbées ensuite sur des plaques de titane.

A.1.3 Différents éléments constituant le bâti [3]

Le bâti est constitué de deux bâtis ultra-vides différents permettant une analyse complète de la surface d'un échantillon L'interconnexion de ces enceintes en environnement ultravide est devenue inévitable, pour pouvoir transférer des échantillons d'une enceinte à l'autre sans polluer la surface des échantillons.

Ce nouveau dispositif expérimental se divise en trois parties (figure A.2): une chambre d'introduction rapide, une première chambre de préparation et d'analyse comprenant un analyseur RFA (Retarding Field Analyser) et des cellules d'évaporation ainsi qu'une deuxième chambre d'analyse constitue d'un analyseur HSA (Hemi Spherical Analyser) et d'une source à rayons X.

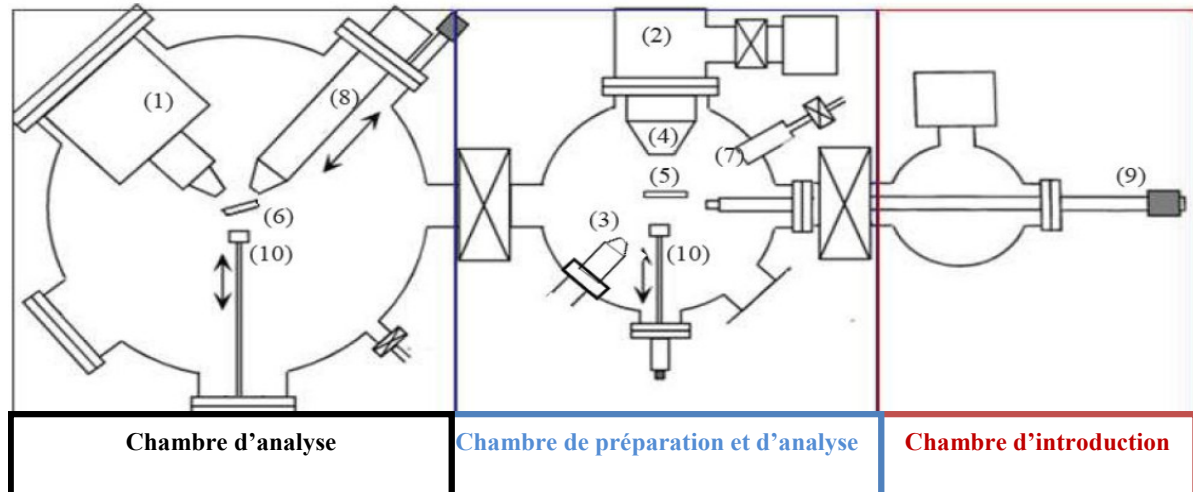


Figure A.2: schématisation du bâti ultra vide.

- (1) Analyseur hémisphérique (HSA).
- (2) Analyseur à champs retardateur (RFA).
- (3) Canon à ions.
- (4) Canon à électrons.
- (5) Porte échantillon chauffant et parking.
- (6) Porte échantillon non chauffant.
- (7) Cellule d'évaporation d'or.
- (8) Source de rayon X.
- (9) Canne de transfert.
- (10) Fourchette pour le positionnement de l'échantillon sur le porte échantillon.

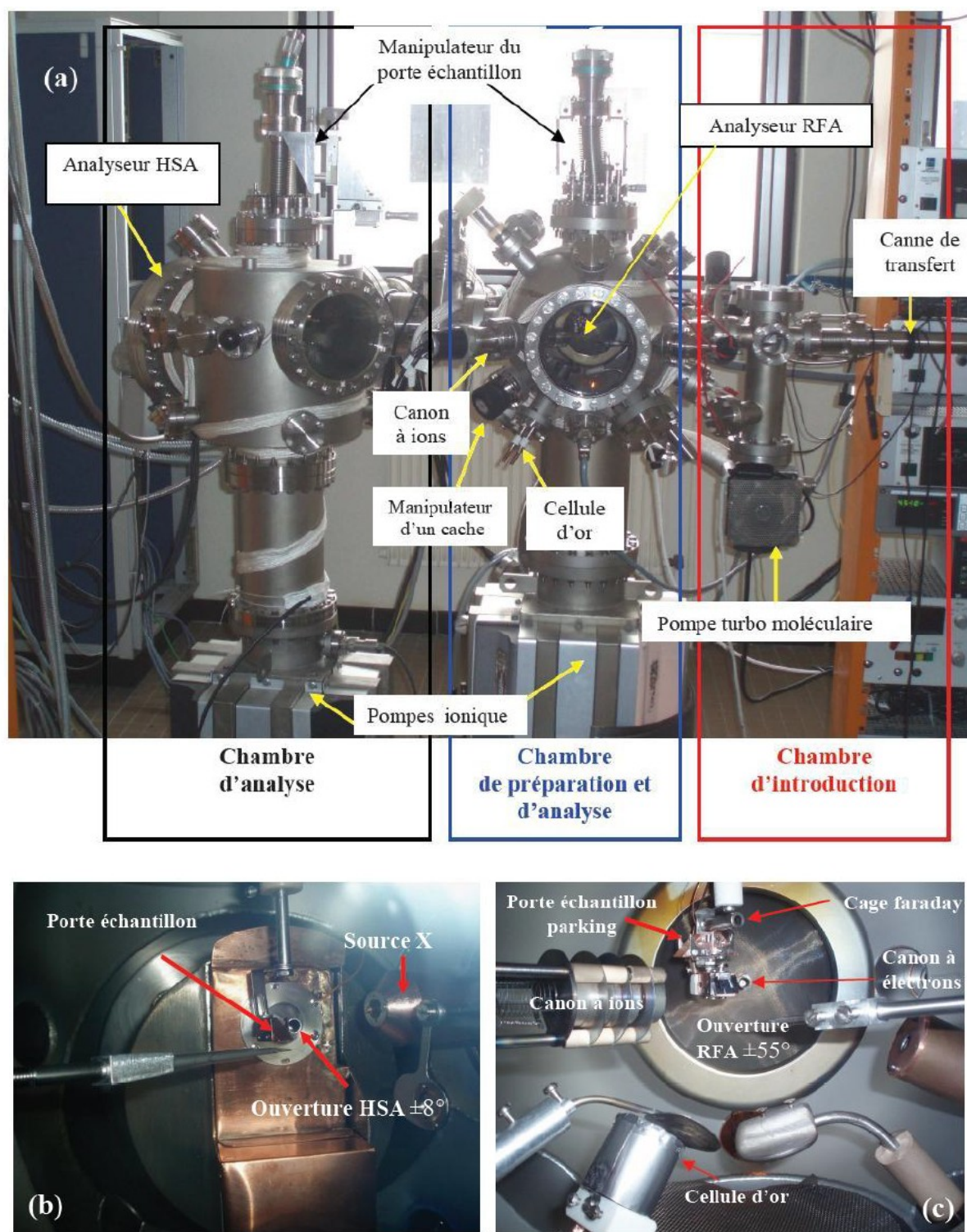


Figure A.3 : (a) photographies du bâti ultra vide, (b) l'intérieur de la chambre d'analyse et (c) l'intérieur de la chambre de préparation.

A.1.3.1 Le porte échantillon et le système de chauffage

Le bâti est équipé d'un porte échantillon multidirectionnel qui se situe au centre de l'enceinte. La chambre de préparation et d'analyse (figure A.3) peut recevoir 3 échantillons. Les portes échantillons sont composés de deux parties : une partie que l'on appelle parking qui permet de stocker deux échantillons et une partie analyse. Le porte échantillon en cuivre permet une bonne conduction thermique et électrique et possède un système de chauffage. Le thermocouple chromel/alumel contrôle la température. Une cage de Faraday, positionnée au dessus des échantillons est isolée du porte échantillon par une céramique, permet de mesurer le courant du faisceau d'électrons primaire (figure A.3c).

A.1.3.2 La source de production d'azote

En fait, la molécule d'azote est très stable (énergie de liaison : 9,9 eV [4]) ce qui rend difficile la production d'espèces azote atomique, pour cela il est préférable d'utiliser une source de type à décharge plasma qui permet de produire l'azote atomique en cassant la molécule N₂.

Dans la source de production d'azote à décharge par plasma (figure A.4), on utilise une tension continue de 2 kV entre l'anode et la cathode créant ainsi un plasma. L'anode est constituée par un cylindre en acier inoxydable enchâssé dans un tube de quartz. Ce cylindre est porté à la haute tension. La cathode, reliée à l'enceinte ultravide, est percée d'un trou de diamètre 1,5 mm permettant aux espèces azotées de sortir vers l'enceinte.

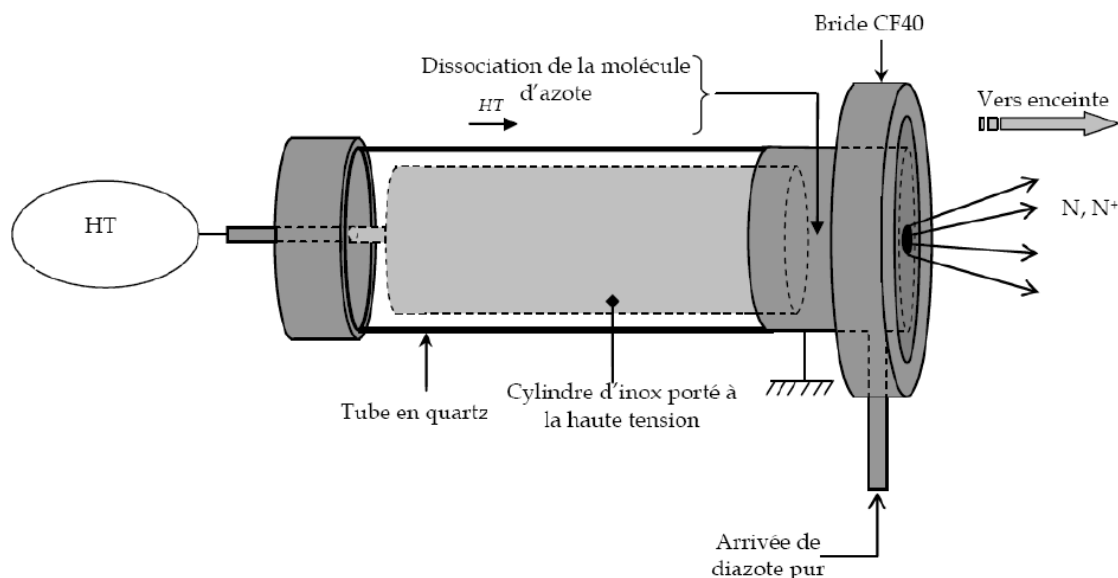


Figure A.4 : Schéma de la source d'azote de type plasma à décharge [5]

Il y a une arrivée latérale pour l'introduction du di-azote pur à 99,999 % provenant d'une bouteille. L'inconvénient d'une telle source réside dans son fonctionnement à une pression d'azote diatomique relativement élevée (10^{-1} Pa dans l'enceinte). Dans la quantité d'ions azote N^+ produits, le courant d'échantillon mesuré ($N_2^+ N^+$) est de l'ordre du micro-ampère par centimètres carré.

A .1.3.3 Les systèmes d'analyses :

Nous allons décrire le principe de fonctionnement des deux analyseurs présents dans le Laboratoire des Sciences des Matériaux pour l'Electronique et d'Automatique LASMEA. Il s'agit d'un analyseur à champ retardateur (RFA) présent sur le bâti n°1, et d'un analyseur hémisphérique (HSA) qui équipe le deuxième bâti.

A .1.3.3.1 L'analyseur à champ retardateur (RFA) :

Il est constitué principalement de trois éléments (figure A.5) :

- Une source d'excitation : canon à électrons.
- Un collecteur d'électrons : écran métallique C.
- Un système de filtre passe-haut pour les électrons composé des quatre grilles G1, G2, G3, G4.

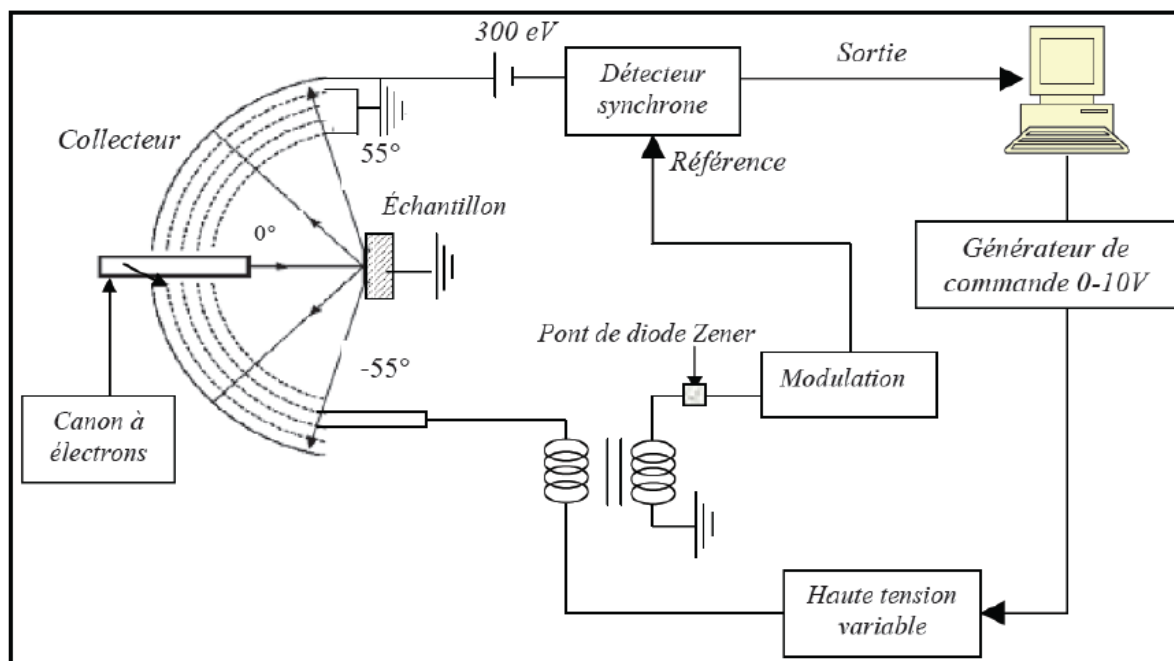


Figure A.5: Schéma de principe de l'appareillage RFA.

Les électrons d'énergie primaire E_0 et d'intensité I_0 sont focalisés perpendiculairement à l'échantillon :

- La grille G_1 est à la masse de façon à assurer un espace sans champ entre elle-même et l'échantillon, relié à la masse également. Dans cet espace, les électrons induits par l'excitation de l'échantillon (électrons rétrodiffusés ou émis) ne sont ni déviés, ni décélérés.
- Les grilles G_2 et G_3 sont portées à un potentiel retardateur V_R . Ce potentiel définit une barrière pour les électrons : seuls ceux possédant une énergie supérieure à eV_R peuvent traverser ce champ et franchir les grilles.
- La grille G_4 , liée à la masse, placée entre les grilles G_2 , G_3 , permet de soustraire l'influence du potentiel appliqué à ces grilles retardatrices sur l'écran collecteur [6].
- L'écran collecteur, porté à un potentiel de 300 V, permet de collecter les électrons filtrés à la sortie des grilles en les accélérant.

L'intensité des électrons recueillis par le collecteur est définie comme suit :

$$I(E) = \int_E^{E_0} T(E)N(E)dE \quad (A.1)$$

Où $T(E)$ est la transmission de l'analyseur

$N(E)$ représente la distribution énergétique des électrons collectés.

L'évolution de la transmission en fonction de l'énergie pour un analyseur RFA a été déterminée, selon deux méthodes différentes, par R.Schmid et al. [7] et par B.Gruzza [8]. Ces travaux ont permis de donner une expression mathématique de celle-ci (voir figure A.6):

$$T(E) = 0,96326 * E^{-0,161} \quad [7], [8].$$

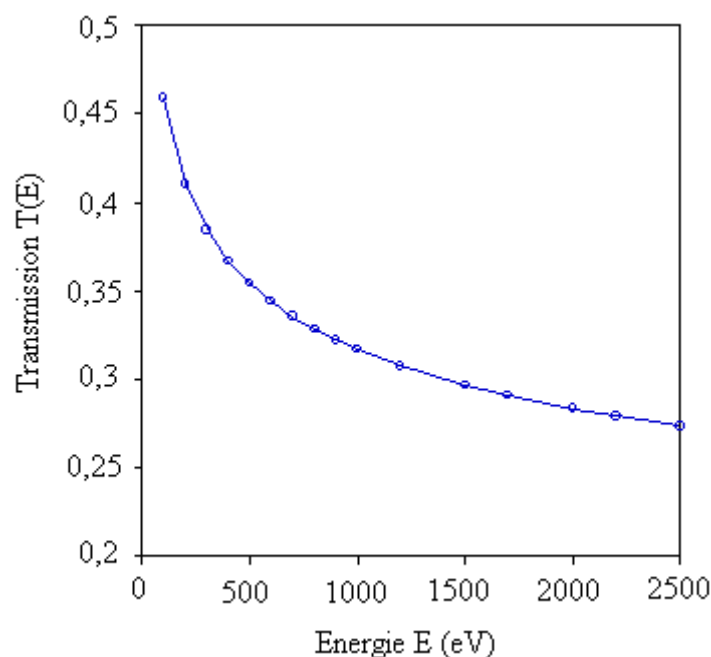


Figure A.6: Courbe de transmission $T(E)$ pour un analyseur à champ retardateur (RFA) [7], [8]

Le spectre est obtenu en enregistrant la variation de l'intensité du signal à la sortie de la détection synchrone en fonction de l'énergie. Après détection et traitement, le signal est transmis à un ordinateur qui pilote toute la manipulation.

L'avantage du RFA par rapport à d'autres analyseurs est son importante luminosité.

Le RFA permet d'enregistrer avec une résolution moyenne la distribution $N(E)$ des électrons réémis élastiquement. Le principe même de fonctionnement de cet appareil (un champ retardateur) engendre la création d'un important bruit de fond. En effet, le système des quatre grilles a un rôle de filtre passe-haut. Par conséquent, tous les électrons ayant une énergie au moins égale à la tension de filtrage passent cette barrière, mais également ceux ayant une énergie supérieure. Il en résulte un niveau de fond continu. Cette faible résolution rend plus difficile les acquisitions expérimentales fines.

A .1.3.3.2 L'analyseur hémisphérique (HSA) :

Le bâti ultravide n°2 est équipé d'un analyseur hémisphérique décrit par la figure (A.7). Dans tel analyseur, de type dispersif, les électrons sont déviés par un champ électrostatique. La distribution énergétique est obtenue en faisant varier le champ électrique et

en collectant les électrons dans une fenêtre d'énergie constante. Le filtrage se fait dans un intervalle d'énergie étroit.

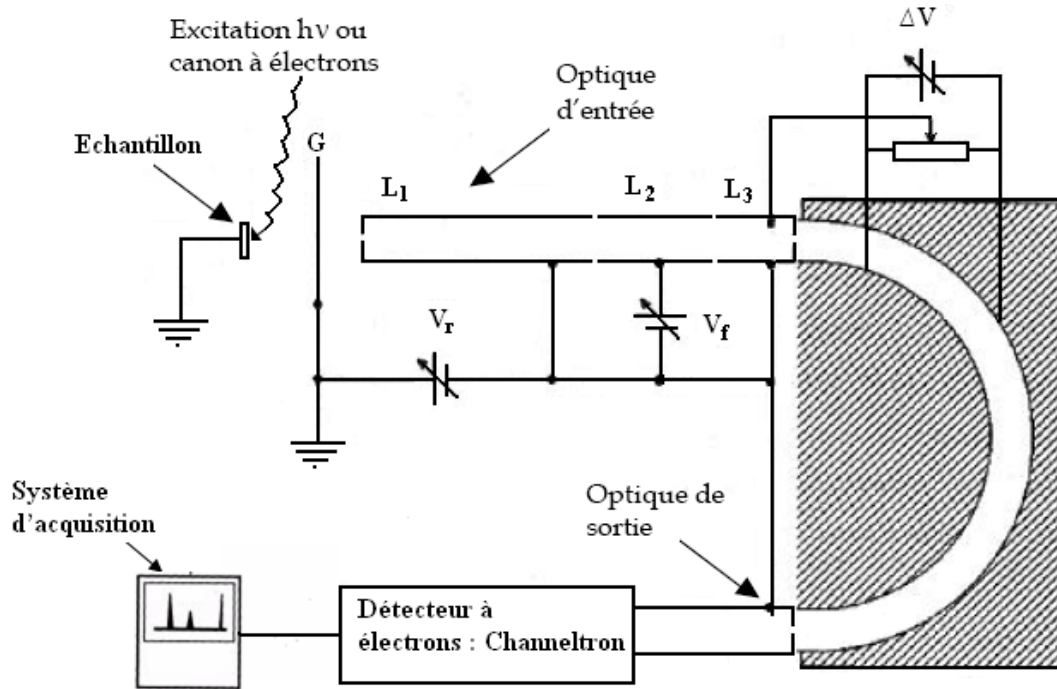


Figure A.7: L'analyseur hémisphérique

L'analyseur hémisphérique est basé sur le modèle de M.D. Bui [9], il est composé de trois parties : l'optique d'entrée, l'analyseur qui est constitué de deux hémisphériques et l'optique de sortie.

L'optique d'entrée est composée de trois lentilles (L_1 , L_2 , L_3) de filtrage qui sont des électrodes cylindriques creuses. Elle présélectionne les électrons à étudier [10].

Les lentilles L_1 et L_3 sont portées à un potentiel retardateur V_R qui permet de freiner les électrons jusqu'à l'énergie de passage E_p .

La lentille L_2 permet d'appliquer le potentiel de focalisation V_f et de faire converger ainsi le faisceau d'électrons issus de l'échantillon jusqu'à l'entrée des deux hémisphères. Entre ceux-ci est appliquée une différence de potentiel $\Delta V = k E_p$, (k étant une constante dépendante de la géométrie de l'analyseur), et ces deux hémisphères permettent un second filtrage des électrons.

Le facteur de transmission défini comme étant : $V_f/\Delta V$ a été fixé à une valeur égale à 6. Cette valeur permet une focalisation optimale du faisceau d'électrons sur la fente de sortie [9].

A la sortie de l'analyseur, les électrons sont recueillis par un channeltron (multiplicateur d'électrons) de gain 2×10^8 sous une tension d'alimentation de 3,2 kV [5]. Le channeltron est

placé après la fente de sortie de l'analyseur. Cela permet d'amplifier le courant d'électrons et d'utiliser un mode de comptage en impulsions. L'ensemble est relié à un ordinateur muni d'un programme d'acquisition automatique.

La luminosité de L'analyseur hémisphérique est très faible mais la résolution en énergie est bien meilleure qu'avec un RFA par exemple.

A .1.3.3.3 Le détecteur channeltron :

On distingue deux familles de détecteurs d'électrons : les photomultiplicateurs à dynodes et les channeltrons. Les photomultiplicateurs à dynodes de type cuivre/béryllium sont les plus anciens et présentent l'avantage de pouvoir produire des courants de sortie importants (supérieur à $100\mu\text{A}$). Cependant, ils ont l'inconvénient d'être relativement instables après plusieurs expositions à l'air.

De nouvelles structures de photomultiplicateurs fabriquées en aluminium sont moins susceptibles de se dégrader, mais la nouvelle génération de détecteurs de type channeltron a largement remplacé les photomultiplicateurs à dynode [7]. En effet, ce type de détecteur est plus adapté à des applications qui nécessitent des expositions fréquentes à l'atmosphère. Ils peuvent fonctionner, soit en mode analogique particulièrement adapté à la détection d'ions positifs, soit en mode de comptage d'impulsions. Dans ce mode, ils sont capables de détecter de faibles signaux jusqu'à une limite maximum de comptage de 10^7 coups par seconde [8]. Ils se présentent sous forme de tubes courbés (voir figure A.8) ayant un diamètre intérieur de environ 1 mm et un diamètre extérieur de 2, 3 ou 6 mm est construit à partir d'une formule spéciale de verre : silicate de plomb.

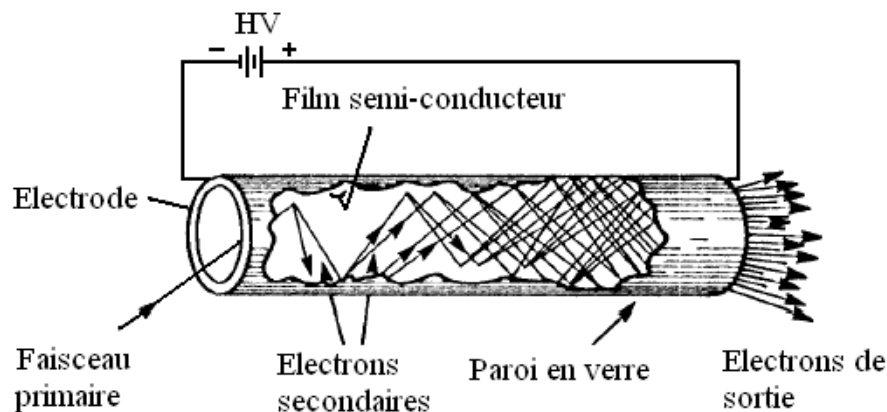


Figure A.8: Vue en coupe d'un channeltron.

La production d'électrons secondaires se fait dans la couche d'épaisseur $200\text{\AA}$ de surface. Cette surface qui présente une grande résistance électrique de l'ordre de $10^9 \Omega$ devient équivalente à une dynode continue (électrode qui permet la multiplication d'électrons secondaires) sous l'effet d'une différence de potentiel appliqué entre les deux électrodes du tube.

Les électrons générés sont accélérés par la différence de potentiel ΔV au bore du tube ils rencontrent de nouveau la paroi interne. Cette succession de collisions produit un grand nombre d'électrons à la sortie du channeltron.

Références Bibliographiques :

- [1] Le vide et ses intervenants, Guide à l'usage des utilisateurs de techniques du vide, Vide 98, SFV.
- [2] A. Richardt, A. M. Durand.
« La pratique du vide et des dépôts de couches minces », Edition In Fine, 1995.
- [3] Zougagh Nabil,
Thèse de doctorat, Université de Sidi Bel Abbé, 2012.
- [4] W.C. Hughes, W.H. Rowland, M.A. L. Johnson, Shizuo Fujita, J.W. Cook, J.F. Schetzina,
J. Ren, J.A. Edmond, J. Vac. Sci. Technol. B 13 (1995) 1571.
- [5] Sana Benkhalifa.
Thèse de docteur d'université, Université Blaise Pascal, Clermont-Fd II, n° d'ordre 1864.
- [6] N.J. Taylor,
Rev. Sci. Instrum. 40 (1969) 792.
- [4] R. Schmidt, K.H. Gaukler, H. Seiler,
Scanning Electron Microscopy 1983/II (SEM Inc. Chicago, 1983) p. 501.
- [7] B. Gruzza, P. Bondot, A. Porte, C. Jardin, G. Gergely,
Acta Physica Polonica A 81 (1992) 159.
- [8] M.D. Bui, C. Jardin, J.P. Gauthier, P. Michel,
J. Phys. E : Sci .Instrum. 12 (1979) 43.
- [9] E. Bauer, J. Vac.
Sci. Technol. 7 (1970) 3.
- [10] Channeltron Electron Multiplier,
Handbook for Mass Spectroscopy Applications, edition GALILEO (1991).

Résumé

Le matériau GaAs présente des propriétés physiques remarquables, apparaissent comme parfaitement adaptés dans les applications hyperfréquences, pour l'électronique de puissance, mais également dans le domaine de l'optoélectronique (diodes photoluminescentes, diodes laser).

L'intérêt de cette étude est de caractériser et simuler les caractéristiques photoélectriques d'un contact métal/GaAs nitruré. Le but est de connaître l'effet de la couche de nitruration GaN sur les paramètres électriques et optiques de la structure Schottky. La simulation en question est de mettre au point un programme de calcul 1D de la tension photoélectrique qui sera comparée à celle obtenue par mesure expérimentale. Le programme est basé sur une résolution stationnaire simultanée de l'équation de Poisson et les deux équations de continuité des électrons et des trous, estimés à l'aide d'une méthode des différences finies. L'effet photoélectrique de surface est obtenu en effectuant des mesures de courant à l'obscurité et sous illumination (lumière). Le fit des mesures expérimentales estimant d'une part les valeurs des différents paramètres électriques et optiques du matériau et d'autre part valider le modèle développé.

Abstract

GaAs material has outstanding physical properties, appear perfectly matched in microwave applications, power electronics, but also in the field of optoelectronics (photodiodes, laser diodes).

The interest of this study is to characterize and simulate the photoelectric characteristics of a metal contact/ GaAs/nitrided. The goal is to know the effect of nitriding GaN layer on the electrical and optical parameters of the Schottky structure. Simulation in question is to develop a computer program 1D of the photovoltage to be compared with that obtained by experimental measurement. The algorithm is based on the resolution of the system composed by Poisson's and continuities equations, approximated using a finite difference method. The photoelectric effect is obtained by performing current measurements in the dark and under illumination (light). The fitting of experimental curve made considering the one hand the values of different electrical and optical material parameters and other share validate the developed model.

EPJ AP

Applied Physics

EPJ.org

your physics journal

Eur. Phys. J. Appl. Phys. (2015) 72: 10102

DOI: 10.1051/epjap/2015150140

Study of the characteristics current-voltage and capacitance-voltage in nitride GaAs Schottky diode

Abdelaziz Rabehi, Mohamed Amrani, Zineb Benamara, Boudali Akkal, Arslane Hatem-Kacha,
Christine Robert-Goumet, Guillaume Monier, and Bernard Gruzza

 **edp sciences**

The title "The European Physical Journal" is a joint property
of EDP Sciences, Società Italiana di Fisica (SIF) and Springer

Study of the characteristics current-voltage and capacitance-voltage in nitride GaAs Schottky diode

Abdelaziz Rabehi^{1,a}, Mohamed Amrani¹, Zineb Benamara¹, Boudali Akkal¹, Arslane Hatem-Kacha¹, Christine Robert-Goumet², Guillaume Monier², and Bernard Gruzza²

¹ Laboratoire de Micro-électronique Appliquée, Université Djillali Liabès de Sidi Bel Abbès, BP 89, 22000 Sidi Bel Abbès, Algeria

² Laboratoire des Sciences des Matériaux pour l'Electronique et d'Automatique, Université Blaise Pascal de Clermont II, Les Cézeaux, 63177 Aubière, France

Received: 9 March 2015 / Received in final form: 20 May 2015 / Accepted: 27 August 2015
Published online: 30 September 2015 – © EDP Sciences 2015

Abstract. This article reports the study of Au/GaN/GaAs Schottky diodes, where the thin GaN film is prepared by nitridation of GaAs substrates with thicknesses of 0.7 and 0.8 nm. The resulting GaN sample with thickness 0.8 nm is then treated with an annealing operation (heating to 620 °C) to improve the current transport. The current-voltage (I - V) and capacitance-voltage (C - V) of the Au/GaN/GaAs structures were investigated at room temperature. In fact, the I - V characteristics show that the annealed sample has low series resistance (R_s) and ideality factor (n) (63 Ω , 2.27 respectively) when compared to the values obtained in the untreated sample (1.83 k Ω , 3.31 respectively). The formation of the GaN layer on the gallium arsenide surface is investigated through calculation of the interface state density N_{SS} with and without the presence of series resistance R_s . The value of the interface state density $N_{SS}(E)$ close to the mid-gap was estimated to be in the order of $4.7 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2} \text{ eV}^{-1}$ and $1.02 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2} \text{ eV}^{-1}$ with and without the annealing operation, respectively. However, nitridation with the annealing operation at 620 °C improves the electrical properties of the resultant Schottky diode.

1 Introduction

The design of high-performance electronic devices has required the use of semiconductors other than silicon. In fact, despite the fact that silicon technology has reached a high level of maturity, it is still limited by its intrinsic properties (low carrier mobility, indirect bandgap transition, narrow bandgap, etc.). Conversely III-V semiconductors, which have remarkable physical properties, show a perfect adaptation in microwave applications [1], power electronics [2] and high-frequency field effect transistors, as well as in the field of optoelectronics (photodiodes, laser diodes) [3]. However, despite having these qualities, many steps are required for the manufacture of increasingly efficient and miniaturised components based on III-V semiconductors. In particular, surfaces and interfaces are sensitive issues that could compromise the quality of manufactured devices.

Nitridation of GaAs surfaces is of great interest for the development technology based on III-V semiconductors. For GaAs-based devices, the presence of a thin GaN film can effectively reduce the high surface state density,

and hence improve the surface quality and device performance [4,5].

In this paper, Au/GaN/GaAs Schottky diodes are realised, where the nitridation is performed by exposing the GaAs substrate to a flow of active nitrogen created by a discharge source with high voltage in ultra-high vacuum [6]. We obtain Au/GaN/GaAs Schottky diodes with various thicknesses of GaN nano-films on GaAs substrates [7]. The purpose of this work is to investigate the I - V and C - V characteristics of the Au/GaN/GaAs Schottky diodes allowing the evaluation of different electrical parameters, such as the saturation current (I_s), the ideality factor (n), the series resistance (R_s), the diffusion tension (V_D) and the doping concentration (N_d).

2 Experimental procedures

A singular glow discharge source (GDS) described in detail elsewhere [8] was used for the nitridation.

In this kind of nitrogen cell, continuous plasma was produced at a power level of 5 W and a majority of N atomic species were created (nitrogen pressure: 10^{-4} torr, ion energy: 2.5 keV, sample current: $1 \mu\text{A cm}^{-2}$).

^a e-mail: rab_ehi@hotmail.fr

Table 1. Preparation procedure for all samples.

	Concentration	Conditions of nitridation	Annealing	GaN thickness
Sample 1	$4.9 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$	Pure GaAs	–	–
Sample 2	$4.9 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$	500 °C, 5 W, 5 min	–	0.8 nm
Sample 3	$4.9 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$	500 °C, 5 W, 30 min	620 °C for 60 min	0.7 nm

Commercially available GaAs (100) wafers have been used in this work.

These substrates are *n*-type, with concentration $N_d = 4.9 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ and thickness $400 \pm 20 \text{ }\mu\text{m}$. The cleaning procedure of the samples consists of two steps:

- Step 1: chemical cleaning sequentially in H_2SO_4 , deionised water, cold and finally hot methanol (all combined with ultrasound), followed by drying with N_2 ;
- Step 2: Ar^+ ion bombardment (ion energy: 1 keV, sample current: $5 \text{ }\mu\text{A cm}^{-2}$, time: 1 h) in UHV chamber. Nitridation was performed using a GDS N_2 plasma source with a power range of 5–10 W.

Before nitridation, the GaAs (100) substrates were heated to 500 °C for a duration of 1 h. The samples were then kept under a flow nitrogen for a chosen time. The process of annealing was performed at a temperature of 620 °C after 60 min of nitridation.

The experiments were carried out in a home-built UHV chamber equipped with an XPS system (dual anode Al-Mg X-ray source and hemispherical electron energy analyser); this method allows us to determine the chemical composition and crystal structure of the studied samples. The XPS experiments were performed using a Mg $K\alpha$ source (1253.6 eV) at an incident angle of 55° (normal detection, pass energy of the analyser equal to 20 eV) [9].

The preparation procedure for our samples is shown in Table 1.

Estimation of the GaN thickness is performed by comparing experimental spectra and a theoretical model of the XPS peak intensity. It is based on the analysis of Ga 3*d*, As 3*d* and N 1*s* core levels in the GaAs substrate and determination of values of Ga 3*d*/As 3*d* and N 1*s*/Ga 3*d* peak surface ratio variations [4, 9].

The structures were tested electrically with an Au contact, where the area and thickness of the contact were $S = 4.41 \times 10^{-3} \text{ cm}^2$ and $d = 100 \text{ nm}$, respectively.

In order to improve the quality of the ohmic contacts, Tin (Sn) was deposited on the back face with NH_4Cl at a temperature of 350 °C for a duration of 5 min [10]; the reason for this is when heating strongly (above 340 °C), NH_4Cl , thermally decomposes into a mixture of gaseous ammonia and HCl. HCl is effective in preventing the formation of oxides and other impurities on the surface of GaAs, in particular in the presence of ammonia, which leads to better diffusion of Sn in GaAs.

The *I-V* measurements were performed using a HP4155B semiconductor parameter analyzer. The *C-V* measurements were performed at 1 MHz using a Keithley test system 590 *C-V* analyzer.

The *I-V* and *C-V* characteristics of the Au/GaN/GaAs Schottky diodes were studied at room temperature and in the dark.

3 Results and discussions

3.1 I-V characteristics

The typical electrical characteristics of Au/GaN/GaAs investigated by *I-V* measurements at room temperature are shown in Figure 1.

We observed clearly that the behaviour of these samples is that of a Schottky diode and it can be assumed that the forward bias current can be expressed as:

$$I = I_s \left(\exp \left(\frac{q(V - IR_s)}{nkT} \right) \right), \quad (1)$$

where V is the applied bias voltage.

The saturation current I_s is given by:

$$I_s = AA^*T^2 \exp \left(\frac{-q\phi_{b_n}}{kT} \right), \quad (2)$$

where q is the electron charge, k is the Boltzmann constant, T is the absolute temperature, A is the effective diode area, A^* is the effective Richardson constant ($8.16 \text{ A cm}^{-2} \text{ K}^2$ for GaAs [11]), R_s is the series resistance, ϕ_{b_n} is the barrier height and n the ideality factor.

(R_s, ϕ_{b_n}, n) are the unknown parameters and should be determined as accurately as possible.

In the curves plotted on a linear scale (see Fig. 1a), we see clearly that the behaviour of all samples consistent with a Schottky contact. In direct bias voltage, the structure is conductive and the current varies exponentially with the bias voltage. In reverse bias voltage, the variations of the current are low except in sample 1, where the reverse current and direct current are equivalent.

In a semi-logarithmic scale, we note a linear variation of the *I-V* characteristics at low voltage (0–250 mV). However, when the applied voltage increase, the linearity of the *I-V* characteristics changes abruptly. This is due to the effects of diverse range of parameters, such as interface states N_{ss} and series resistances R_s . To extract the barrier height, the ideality factor and the series resistances, we have used the method developed by Cheung and Cheung [12] and confirmed by Werner et al. [13].

The values of the series resistance can be determined from the following functions:

$$G(I) = \frac{\partial V}{\partial (\ln I)} = \frac{nKT}{q} + IR_s. \quad (3)$$

According to equation (3), the slope of a linear portion of $dV/d(\ln I)$ vs. I gives the series resistance R_s and

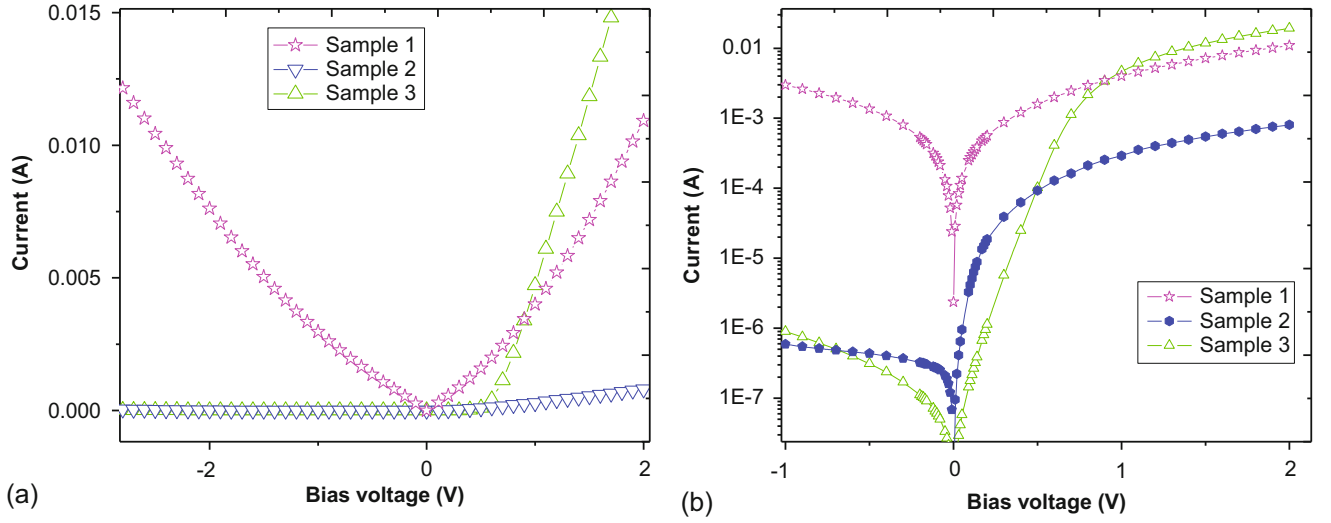


Fig. 1. Measured current-voltage (I - V) characteristics with (a) linear scale and (b) semi-logarithmic scale.

its intercept on the current axis gives nkT/q . To obtain the barrier height, Cheung and Cheung [12] defined the following functions:

$$H(I) = V - \left(\frac{nKT}{q} \right) \ln \left(\frac{I}{AA^*T^2} \right) = n\phi_{b_n} + IR_s. \quad (4)$$

Using the value of the ideality factor determined from equation (3), a plot of $H(I)$ vs. I also yields a straight line, with a y -axis intercept that is equal to $n\phi_{b_n}$. The slope of this plot allows a second determination of R_s that can be used to check the consistency of this approximation. The plots of $dV/d(\ln I) - I$ and $H(I) - I$ are shown in Figure 2 and the obtained values of the parameters are shown in Table 2.

From Table 2, it can be observed that the ideality factor is highest for sample 1 (pure GaAs). The rationale behind this might be the existence of a current tunnel in the interface semiconductor metal, and non-uniform distribution of the interfacial charges [14]. After nitridation, the ideality factor decreases to 3.31 and 2.27 for samples prepared without and with the annealing operation, respectively. This effect can be explained by restructuring and reorganisation of the inhomogeneous film of GaN. A high resolution TEM performed on structures made under the same conditions as our structures and without the annealing operation shows that the GaN layer is amorphous. After annealing, the images show a crystallisation of the GaN layers in a zinc blende structure [9].

The increase in the series resistance after nitridation from 116 Ω to 1.83 k Ω can be explained by the reduction of the free carrier concentration due to the trapping of carriers at the interface. Once the charge carrier concentration decreases, the series resistance values may increase [12]. In the case of sample 3, the low value of the series resistance (63 Ω) is also attributed to the restructuring and rearrangement of the GaN layer.

The saturation currents I_s are estimated to 4.61×10^{-7} A and 3.51×10^{-8} A for the samples 2 and 3, respectively. After the nitridation operation, the barrier height

ϕ_{b_n} increases from 0.45 to 0.73 eV. This result is similar to that obtained by Ambrico et al. [15]. In addition to Cheung functions, an alternative method was proposed by Norde to obtain the value of the barrier height. The function of Norde is as follows [16]:

$$F(V) = \frac{V}{\gamma} - \frac{kT}{q} \ln \left(\frac{I(V)}{AA^*T^2} \right), \quad (5)$$

where γ is the first integer greater than the ideality factor, and I is the current obtained from the I - V curve. When the minimum of the $F(V)$ plot is determined, the Schottky barrier height can be found using:

$$\phi_{b_n} = F(V_0) + \frac{V_0}{\gamma} - \frac{kT}{q}, \quad (6)$$

where $F(V_0)$ is the minimum point of $F(V)$, and V_0 is the minimum voltage of the $F(V) - V$ plot [17].

Figure 3 presents the $F(V) - V$ plot of the structure. The values obtained using the Norde method are shown in Table 3.

As shown in Table 3, the barrier height values obtained from the two methods are different (the ϕ_{b_n} values obtained by Norde's method are systematically higher than those obtained by Cheung's method). These differences may be attributed to the extraction of information from different regions of the forward-bias current-voltage plot [18], and perhaps because while Cheung's functions are only executed for the non-linear region of the forward bias I - V curve, Norde's functions are executed for the whole forward bias region of the I - V curve. These results are in good agreement with those obtained by Ocak et al. [19].

The interface states play an important role at the metal-semiconductor contact, and the density distribution curves of the interface states (N_{ss}) can be determined from the experimental data of the forward I - V characteristics by taking into account the bias dependence of the effective barrier height with and without series resistance (R_s).

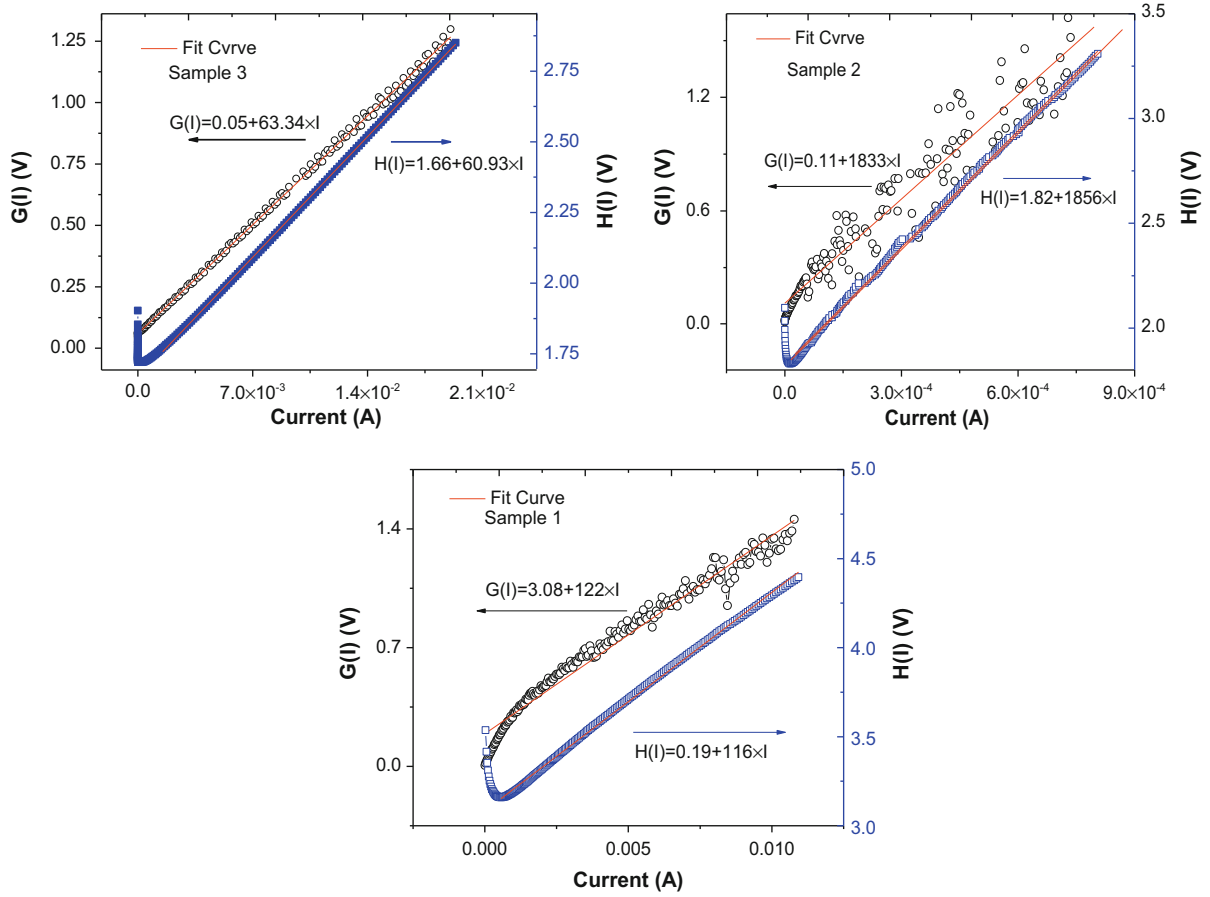


Fig. 2. Illustration of the functions G and H allowing the calculation of n , R_s , I_S and ϕ_{b_n} .

Table 2. Electrical parameters obtained from I - V curves of Au/GaN/n-GaAs Schottky diode.

	Ideality factor (n)	Series resistance (Ω)		Barrier height ϕ_{b_n} (eV)	Saturation current I_S (A)
		by $H(J)$	by $G(J)$		
Sample 1	7.3	116	122	0.41	9.50×10^{-5}
Sample 2	3.31	1833	1856	0.55	4.61×10^{-07}
Sample 3	2.27	63	60	0.73	3.51×10^{-08}

The interface state density N_{SS} has been obtained from:

$$n = \left[1 + \frac{q^2 \delta N_{SS}}{\varepsilon_i} \right], \quad (7)$$

where ε_i is the permittivity of the interfacial layer and δ is the thickness. In an n -type semiconductor, the energy of the interface states E_{ss} with respect to the bottom of the conduction band at the surface of the semiconductor is given by [20,21]:

$$E_c - E_{ss} = q\phi_{b_n} - qV, \quad (8)$$

where V is the applied voltage drop across the depletion layer and ϕ_{b_n} is the barrier height.

The graph of N_{SS} vs. $E_c - E_{ss}$ was obtained as shown in Figure 4.

As can be seen from Figure 4, the interface state density calculated without taking R_s into account has

increased exponentially from $1.1 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2} \text{ eV}^{-1}$ in (Ec-0.55) eV to $3.3 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2} \text{ eV}^{-1}$ in (Ec-0.02) and from $5.4 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2} \text{ eV}^{-1}$ in (Ec-0.5) eV to $3.3 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2} \text{ eV}^{-1}$ in (Ec-0.02) for samples 2 and 3, respectively. The N_{SS} obtained by taking into account the series resistance has remained constants with values of $6 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2} \text{ eV}^{-1}$ and $1.5 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2} \text{ eV}^{-1}$ for samples 2 and 3, respectively, in the same interval.

This is attributed to the passivation of the GaAs surface due to the GaN interfacial layer. These results are in agreement with the results of Ebeoğlu [7] and Karataş et al. [18]. Thus, these explanations clearly show that the series resistance value should be taken into account in determining the interface state density distribution profile and other main diode parameters, such as barrier height and ideality factor [21].

It is clear in the Figure 4 that the determined value of N_{SS} near the mid-gap was in the range of $10^{13} \text{ cm}^{-2} \text{ eV}^{-1}$

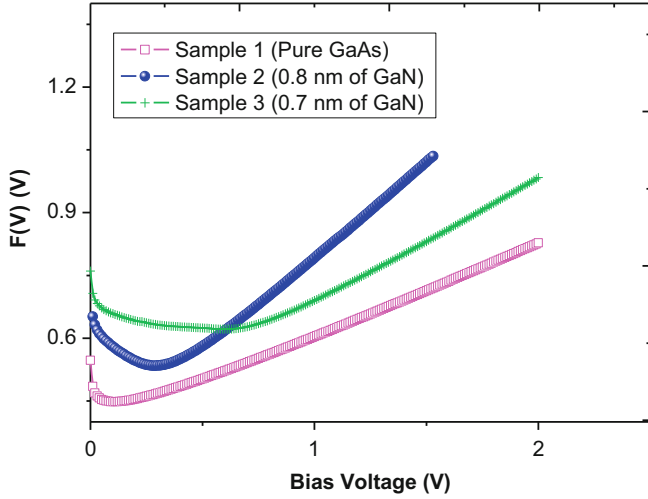


Fig. 3. The $F(V)$ vs. V plot of the Au/GaN/n-GaAs Schottky diodes.

Table 3. Comparison of the barrier height (ϕ_{bn}) obtained using Cheung and Norde methods.

Method	ϕ_{bn} (eV)	
	$F(V)$ vs. V	$H(I)$ vs. I
Sample 1	0.44	0.41
Sample 2	0.65	0.55
Sample 3	0.79	0.73

without annealing; this high value may be due to the inhomogeneities of ultrathin GaN layer on the GaAs surface. This inhomogeneities can generate a large number of interface states at the semiconductor surface that strongly influence the electrical properties of the device [22]. In the case of annealing operation, the obtained N_{SS} value is lower than the first case ($4.7 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2} \text{ eV}^{-1}$), we can deduce that the nitridation with annealing operation perform significantly (decreased the traps effects at the interface) which allow a good electronic quality for our structures.

3.2 C(V) characteristics

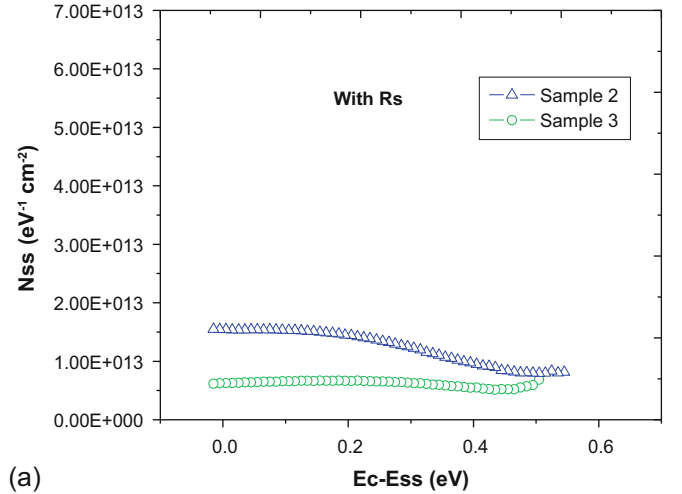
The C - V measurement is one of the most popular electrical measurement techniques used to characterise a Schottky diode. Generally, the capacitance measured in the Schottky diode depends on the reverse bias voltage and frequency.

The depletion layer capacitance can be expressed as [23]:

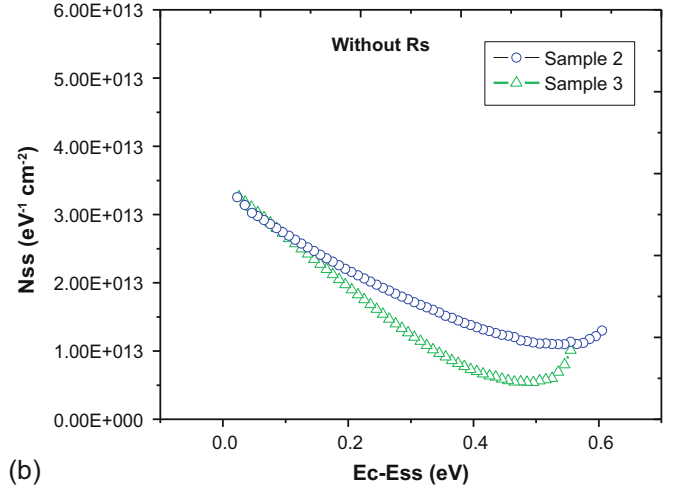
$$\frac{1}{C^2} = \frac{2}{A^2 N_D \epsilon_0 \epsilon_S} \left(\phi_{bn} - V_n + V - \frac{kT}{q} \right), \quad (9)$$

$$\phi_{bn} = V_d + V_n + \frac{kT}{q}, \quad (10)$$

$$V_n = \frac{kT}{q} \ln \frac{N_C}{N_D}, \quad (11)$$



(a)



(b)

Fig. 4. The interface state energy distribution curves of the samples Au/GaN/GaAs Schottky diode with taking into account the series resistance (a) and without taking into account the series resistance (b).

where ϵ_S is the permittivity of the semiconductor ($\epsilon_{S(\text{GaAs})} = 12.5$), N_D is the donor concentration, A is the area of the Schottky contact, V is the applied voltage, and V_n is the potential difference between the conduction band (E_C) and the Fermi level (E_{FS}) of the semiconductor. The value of V_d can be obtained from the voltage axis intercept of the graph of C^{-2} vs. V , provided it is approximately linear. The density of states in the conduction band edge is given by $N_C = 2(2\pi m^* kT/h^2)^{3/2}$, where $m^* = 0.067m_0$, and its value is $0.4 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ for GaAs [24]. Figure 5 shows the $C^{-2}(V)$ characteristics at room temperature measured at a frequency of 1 MHz. The doping concentration, extracted from the slope, is equal to $5.53 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ and $3.12 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ for samples 2 and 3, respectively; these values are lower than those provided by the supplier. This can be explained by the migration of carriers of GaAs to the GaN layers, which are at the origin of unintentionally doped layers [11].

The value of V_d obtained from the intercept of the plot of C^{-2} vs. V with the axis is equal to 0.43 V and 0.71 V

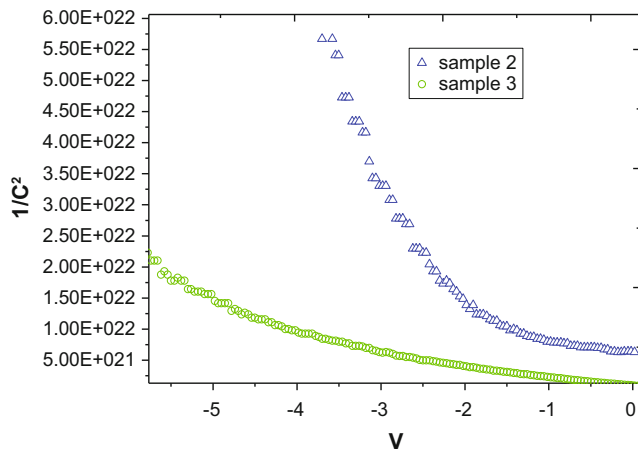


Fig. 5. $1/C^2$ characteristics of Au/ δ -GaN/GaAs Schottky diode.

for samples 2 and 3, respectively. The calculated values of N_D and V_d were substituted into equation (10) to determine the value of ϕ_{b_n} , which was found to be 0.97 eV and 0.60 eV for the samples with and without the annealing operation, respectively. It can be seen that ϕ_{b_n} increases after annealing. These results are similar to those obtained by consideration of the (I - V) characteristics. The C - V curves give values of ϕ_{b_n} higher than those obtained from the I - V measurements. This difference is due to the nature of the I - V and C - V measurement techniques; the barrier heights deduced from them are not always the same. The inconsistency is as expected according to references [18,25,26]. According to Werner and Güttler [26], spatial inhomogeneities at the metal-semiconductor interface of a Schottky contact can also cause such differences in the barrier height as determined from I - V and C - V measurements. The DC current (I) across the interface is exponentially dependent on ϕ_{b_n} , and hence the current in the I - V measurement is dominated by the current which flows through the region of low barrier height. In contrast, the capacitance is insensitive to potential fluctuations on a length scale less than the space charge width, and hence that the C - V measurement averages over the whole area [18].

4 Conclusion

In this paper, Au/GaN/GaAs Schottky diodes have been prepared and the characteristics (I - V , C - V) of these structures have been investigated. From these experiments, we can conclude that the nitridation of GaAs (100) substrates with annealing at 620 °C results in improved electrical properties. Furthermore, the energy distribution profiles of the N_{SS} obtained from the I - V characteristics, with and without taking into account the series resistance (R_s), were investigated at room temperature. The N_{SS} values obtained taking into account the series resistance (R_s) are lower than those obtained without considering the series resistance. Thus, as can be seen from the

previous results, in order to make an accurate determination of the interface state density distribution from the I - V characteristics, the series resistance value should be taken into account.

The value of N_{SS} obtained with the annealing operation ($4.7 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2} \text{ eV}^{-1}$) is lower than that obtained without the annealing operation ($1.02 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2} \text{ eV}^{-1}$). We can deduce that nitridation with the annealing operation at 620 °C decreased the effect traps at the interface and so produced good electronic quality in our structures.

References

1. B.F. Chu-Kung et al., Appl. Phys. Lett. **89**, 082108, (2006)
2. Y. Itoh, K. Honjo, IEICE Trans. Electron. **E86C**, 108 (2003)
3. S.P. Kumar, A. Agrawal, S. Kabra, M. Gupta, R.S. Gupta, Microelectronics J. **37**, 1339 (2006)
4. L. Bideux, G. Monier, V. Matolin, C. Robert-Goumet, B. Gruzza, Appl. Surf. Sci. **254**, 4150 (2008)
5. Q.J. Xu, X.M. Ding, X.Y. Hou, X. Wang, Appl. Surf. Sci. **104**, 468 (1996)
6. N. Zougagh et al., Sen. Lett. **9**, 2211 (2011)
7. M.A. Ebeoğlu, Physica B: Condens. matter **403**, 61 (2008)
8. V. Matolín, S. Fabík, J. Glosík, L. Bideux, Y. Ould-Metidji, B. Gruzza, Vacuum **76**, 471 (2004)
9. G. Monier, L. Bideux, C. Robert-Goumet, B. Gruzza, M. Petit, J.L. Lábár, M. Menyhárd, Surf. Sci. **606**, 1093 (2012)
10. N. Wiberg, *Holleman-Wiberg's Inorganic Chemistry* (Academic Press, New York, 2001)
11. B. Akkal, Z. Benamara, H. Abid, A. Talbi, B. Gruzza, Mater. Chem. Phys. **85**, 27 (2004)
12. S.K. Cheung, N.W. Cheung, Appl. Phys. Lett. **49**, 85 (1986)
13. J.H. Werner, Appl. Phys. A **47**, 291 (1988)
14. X. Zhang, J. Zhai, X. Yu, L. Ding, W. Zhang, Thin Solid Films **548**, 623 (2013)
15. M. Ambrico, M. Losurdo, P. Capezzuto, G. Bruno, T. Ligonzo, L. Schiavulli, I. Farella, V. Augelli, Solid-State Electron. **49**, 413 (2005)
16. H. Norde, J. Appl. Phys. **50**, 5052 (1979)
17. W. Gao, P.R. Berger, R.G. Hunsperger, G. Zydzik, W.W. Rhodes, H.M. O'Bryan, A.Y. Cho, Appl. Phys. Lett. **66**, 3471 (1995)
18. Ş. Karataş, N. Yildirim, A. Türit, Superlattices Microstruct. **64**, 483 (2013)
19. Y.S. Ocak, M. Kulakci, T. Kılıçoğlu, R. Turan, K. Akkılıç, Synth. Met. **159**, 1603 (2009)
20. C. Barret, A. Vapaille, Solid-State Electron. **19**, 73 (1976)
21. M.K. Hudait, S.B. Krupanidhi, Mat. Sci. Eng. B **87**, 141 (2001)
22. Ö. Güllü, S. Asubay, Ş. Aydoğan, A. Türit, Physica E: Low-Dimens. Syst. Nanostruct. **42**, 1411 (2010)
23. E.H. Rhoderick, R.H. Williams, *Metal-Semiconductor Contacts* (Clarendon Press, Oxford, 1988)
24. H. Mathieu, H. Fanet, *Cours et Exercices Corrigés* (Dunod, 2009)
25. C. Coskun, S. Aydoğan, H. Efeoglu, Semicond. Sci. Technol. **19**, 242 (2004)
26. J.H. Werner, H.H. Güttler, J. Appl. Phys. **69**, 1522 (1991)



Original research article

Electrical and photoelectrical characteristics of Au/GaN/GaAs Schottky diode

A. Rabehi^{a,b,*}, M. Amrani^a, Z. Benamara^a, B. Akkal^a, A.H. Kacha^a^a Laboratoire de Micro-électronique Appliquée, Université Djillali Liabès de Sidi Bel Abbès, BP 89, 22000 Sidi Bel Abbès, Algeria^b Unité de Recherche Appliquée en Energies Renouvelables, URAER, Centre de Développement des Energies Renouvelables, CDER, 47133 Ghardaïa, Algeria

ARTICLE INFO

Article history:

Received 3 March 2016

Accepted 20 April 2016

Keywords:

Au/GaN/GaAs

Photovoltaic effect

Schottky diode

Photoelectrical

ABSTRACT

The electrical and photovoltaic properties of Au/GaN/GaAs Schottky diode have been investigated in dark conditions and under illumination. The forward and reverse bias current (I–V) measurements were performed at room temperature. The diode has been fabricated in a simple way using nitridation process of GaAs substrate followed by an annealing process at 620 °C. The tin (Sn) Ohmic contact, was deposited on the back face of the sample with the use of NH₄Cl. The diode has been characterized by I–V measure. The results show that annealed samples with an Ohmic contact has lower values of the series resistance (Rs) and ideality factor n (16.22 Ω and 1.92, respectively) compared to the values obtained for the sample without metallization (9.2 kΩ, and 5.38). Furthermore, measurement of illumination impact on the device performance has been performed, in the forward bias the superposition principle is reflected in the samples which underwent annealing process. Furthermore some photovoltaic parameters were estimated, such as: short circuits current (I_{SC}), open-circuits voltage (V_{OC}) and fill factor (FF).

© 2016 Elsevier GmbH. All rights reserved.

1. Introduction

Metal-semiconductor (MS) contact made of III–V based semiconductors, such as: GaAs or GaN, is active topic in an electronic industry but at the same time is the subject of considerable controversy [1]. To the main applications of MS contacts we can include: microwave field effect transistors, high-temperature electronics, high-density optical data storage devices, space solar cells, blue/green diode lasers and light emitting diodes [2].

A good MS contact is essential for the successful operation of aforementioned electronic devices. Furthermore, an important role in controlling the electrical performances of semiconductor devices are Schottky contact and Schottky barrier height (SBH), which are important parameters that determine the electrical characteristics of the MS contacts [3]. It is well known that the electrical characteristics of a Schottky contact can be controlled mainly by its interface properties [4,5], and the overall performance of diodes depends on the surface and interface state density (N_{ss}). For instance, GaAs surface can be covered with a layer of few nm of native oxide allowing to pin the surface Fermi level within the band gap of semiconductor. In this case the surface states act as recombination generation centers that cause a reduction of carrier lifetime, an increase of the device noise and of the leakage currents. Accordingly, surface of the device needs to be passivated in order

* Corresponding author at: Laboratoire de Micro-électronique Appliquée, Université Djillali Liabès de Sidi Bel Abbès, BP 89, 22000 Sidi Bel Abbès, Algeria.
E-mail address: rab.ghi@hotmail.fr (A. Rabehi).

Table 1
Preparation procedure.

	Sample 1	Sample 2	Sample 3	Sample 4
GaAs concentration	$4.9 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$	$4.9 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$	$4.9 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$	$4.9 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$
Nitridation conditions	500 °C, 5W, 5 min	500 °C, 5W, 30 min	500 °C, 5W, 30 min	500 °C, 5W, 30 min
Annealing	620 °C at 60 min	620 °C at 60 min	620 °C at 60 min	–
GaN thickness	0.7 nm	2 nm	2 nm	2.2 nm
Schottky contact	Au	Au	Au	Au
Ohmic contact	Sn	–	Sn	Sn

to reduce electronically active surface states [6,7]. It has been reported, that the gallium nitride (GaN) has been successively investigated as an alternative interlayer for stable passivation of gallium arsenide (GaAs) surface [8].

Several papers previously published concerning the GaAs (100) nitridation, for instance Benamara et al. [9] solved the problem of contactless determination of interface state density ($N_{SS}(E)$) on GaN/GaAs (100) interfaces using the photoluminescence surface state spectroscopy (PLS³) method. Zougagh et al. [10] and Ameer et al. [11] investigate the detailed electrical transport properties of Hg/GaN/GaAs structures using the I–V and C–V measurements. Rabehi et al. [12] investigated the formation of the GaN layer on the GaAs surface through calculation of the N_{SS} with and without the presence of series resistance. Ebeoğlu [13] proposed wide band gap semiconductor GaN interfacial layer at Au/GaAs interface achieved by chemical anodic nitridation method for the calculation of the interface state density with and without taking into account the series resistance to see whether this interfacial layer has a passivation effect on I–V electrical characteristics and Au/GaN/GaAs Schottky contact has a rectification behavior or not.

In the present work we report the electrical and photoelectrical properties of diode, based on GaAs and created additional interface GaN layer using chemical processes. The thin GaN film is realized by nitridation of GaAs substrates with different thicknesses and variable conditions of nitridation process. The I–V characteristics and the optoelectronic properties of the fabricated Au/GaN/GaAs Schottky diode have been investigated at room temperature. The analysis of these characteristics allows the determination of the electrical parameters, such as: saturation current, ideality factor, barrier height; in addition optoelectronic properties such as open circuit voltage or short circuit current were estimated as well.

2. Experimental procedures

Commercially available GaAs ($N_d = 4.9 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$, thickness $400 \pm 20 \text{ }\mu\text{m}$, face 100) wafers have been used in this work. Before sample fabrication the substrate was cleaned according to the following procedure:

the substrates were subsequently cleaned chemically in concentrated H_2SO_4 and H_2O with ultrasonication treatment, rinsed with hot and cold methanol, dried with nitrogen gas, and treated with argon plasma (ion energy: 1 keV, sample current: $5 \text{ }\mu\text{A}/\text{cm}^2$) for 1 h in UHV chamber. In order to reconstruct of the surface of the GaAs, the substrate was heated for 1 h at 500 °C before the nitridation process.

A singular glow discharge source, described in detail elsewhere [14], was used for the nitridation process. Low power (5–10 W) nitrogen continuous plasma was produced by a high voltage (about 2.5 kV) and a majority of N atomic species were created (nitrogen pressure: of 10^{-4} Torr, sample current: $1 \text{ }\mu\text{A}/\text{cm}^2$). Nitridation process was carried out at a power of the glow discharge source 5 W for 5 and 30 min in the UHV chamber. The temperature during the process was kept at 500 °C. Finally, in situ annealing was realized for 1 h at the temperature of 620 °C.

The home-built UHV chamber was equipped with a XPS system (dual anode Al–Mg X-ray source and hemispherical electron energy analyser), which allows to determine the chemical composition and crystal structure of the studied samples. The XPS experiments were performed using a Mg K α source (1253.6 eV) at an incident angle of 55° (normal detection, pass energy of the analyzer: 20 eV). The details of preparation procedure of the samples are shown in Table 1.

Estimation of the GaN thickness (0.7, 2 and 2.2) is performed by comparing experimental spectra and a theoretical model of the XPS peak intensity. It is based on the analysis of Ga3d, As3d and N1s core levels in the GaAs substrate and determination of values of Ga3d/As3d and N1s/Ga3d peak surface ratio variations [12].

The fabricated structure was tested electrically with an Au contact, where the area and thickness of the contact are $4.41 \times 10^{-3} \text{ cm}^2$ and 100 nm, respectively. The Ohmic contact, was deposited on the back side of the sample with the use of NH_4Cl , and followed by annealing at 350 °C for 5 min. During heating process of NH_4Cl solution thermally decomposes into a gaseous mixture of NH_3 and HCl. HCl is effective in preventing of the formation of oxides and other impurities on the surface of GaAs, from the other hand the presence of NH_3 leads to better diffusion of Sn into the GaAs layer [12].

The I–V measurements were performed using a HP4155B semiconductor parameter analyzer in the dark conditions and under illumination, at room temperature. In order to study the properties of fabricated devices (under illumination), the He–Ne laser of 1 mW power and 632.8 nm wavelength was used. The wavelength of 632.8 nm was chosen to be greater than the optical band gap of GaAs. The Schematic structure of the Au/GaN/GaAs diode, fabricated in this study is shown in Fig. 1.

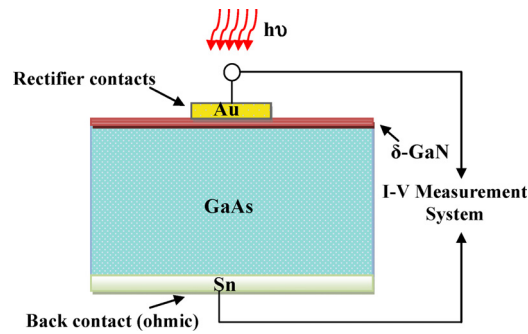


Fig. 1. Schematic structure of Au/GaN/GaAs diode.

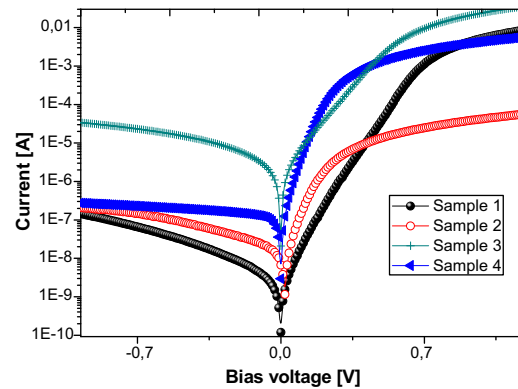


Fig. 2. I–V characteristic of Au/GaN/GaAs diode.

3. Results and discussion

3.1. Electrical measurement

3.1.1. Dark condition

The I–V characteristics of the Au/GaN/GaAs diode in dark conditions was recorded at room temperature, and the results are shown in Fig. 2. As it can be seen, the current gain characteristics change depending on a few parameters, such as: the thickness of the nitride layer, annealing treatment and metallization of the back side of the sample. From this results it can be clearly seen, that the samples with Ohmic metallization have very high current gain compared with that which were not treated with metallization process; as well as the conduction is strongly related to thickness of the GaN and increases as the thickness increases. Furthermore, it was observed that the behavior of proposed in this research structure of the diode is that of a Schottky diode. Accordingly, as follows the forward bias current (I) and the saturation current (I_s) can be expressed as given in Eqs. (1) and (2), respectively:

$$I = I_s \left(\exp\left(\frac{q(V - IR_s)}{nkT}\right) \right)$$

$$I_s = AA^*T^2 \exp\left(\frac{-q\phi_{bn}}{kT}\right) \quad (2)$$

where V is the applied bias voltage, q is the electron charge, k is the Boltzmann constant, T is absolute temperature, A is the effective diode area, A^* is the effective Richardson constant ($8.16 \text{ A/cm}^2 \text{ K}^2$ for GaAs) [15], R_s is the series resistance, ϕ_{bn} is the barrier height and n the ideality factor.

As it can be seen in Fig. 2, a linear variation of the I–V characteristics was observed at low voltages in the range from 0 to 0.3 V. However, when the applied voltage increased, the linearity of the I–V curve changes abruptly. This is related to several phenomenon, such as interface states and series resistance [12,16].

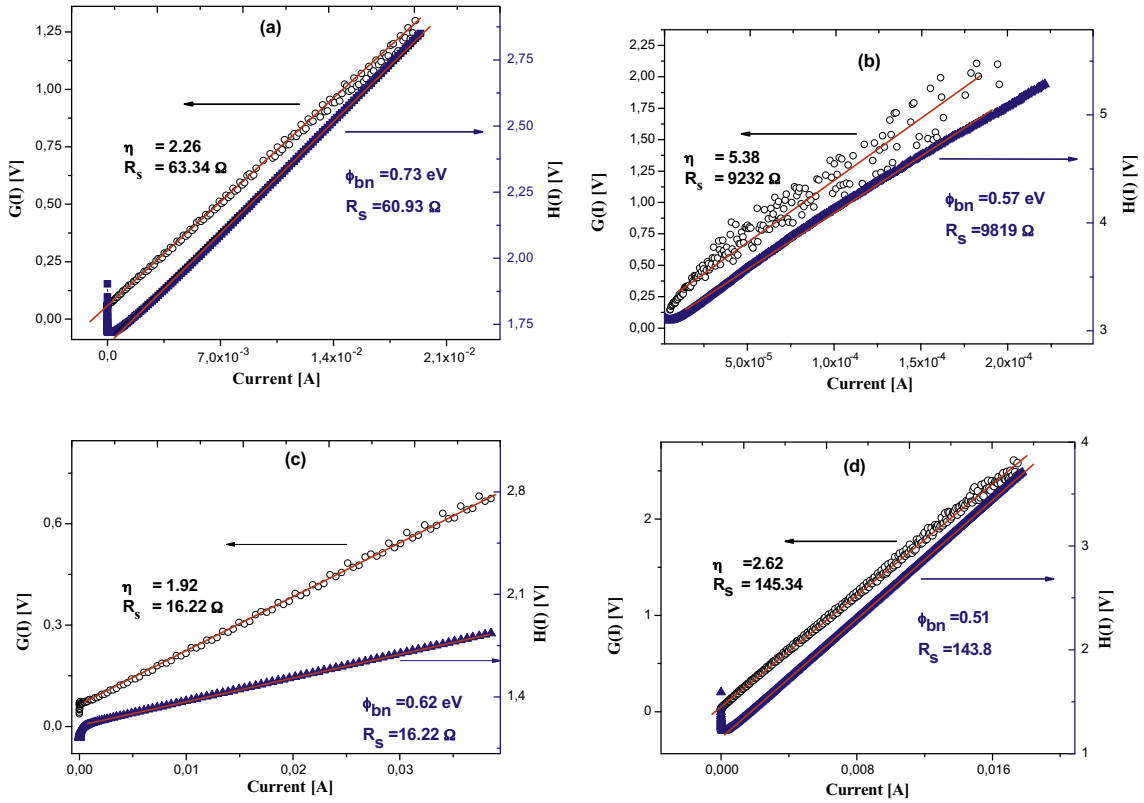


Fig. 3. Plot of the G and H functions of sample 1 (a), sample 2 (b), sample 3 (c) and sample 4 (d).

Table 2

Electrical parameters obtained from I–V measurement of Au/GaN/GaAs diode.

	Sample 1	Sample 2	Sample 3	Sample 4
regression equation of $H(I)$	$H(I) = 1.66 + 60.93 \times I$	$H(I) = 3.12 + 9819 \times I$	$H(I) = 1.20 + 16.22 \times I$	$H(I) = 1.15 + 143.8 \times I$
regression equation of $G(I)$	$G(I) = 0.05 + 63.34 \times I$	$G(I) = 0.14 + 9232 \times I$	$G(I) = 0.05 + 16.22 \times I$	$G(I) = 0.059 + 145.3 \times I$
Ideality factor (n)	2.27	5.38	1.92	2.26
Series resistance (Ω)	By $H(I)$ 63	9819	16.22	145.34
	By $G(I)$ 60	9232	16.22	143.8
Barrier height ϕ_{bn} (eV)	0.73	0.57	0.62	0.51
Saturation current I_s (A)	3.51×10^{-08}	1.31×10^{-08}	3.42×10^{-07}	4.46×10^{-07}

In order to determine the barrier height, the ideality factor and the series resistance, the method developed by Cheung and Cheung [17] and further confirmed by Werner [18] was used. Accordingly, the values of the series resistance can be determined using following equation:

$$G(I) = \frac{\partial V}{\partial(\ln I)} = \frac{nKT}{q} + IR_s \quad (3)$$

According to Eq. (3), the slope of a linear plot of $dV/d(\ln I)$ versus I gives the series resistance, and the intercept on the current axis gives nKT/q . To obtain the barrier height, Cheung and Cheung [17] defined the following function:

$$H(I) = V - \left(\frac{nKT}{q} \right) \ln \left(\frac{I}{AA^*T^2} \right) = n\phi_{bn} + IR_s \quad (4)$$

Using the value of the ideality factor determined from Eq. (3), a plot of $H(I)$ versus I yields a straight line, with a y-axis intercept equal to $n\phi_{bn}$. The slope of this plot allows to determine the R_s , in order to confirm the consistency of this approximation. The plots of $dV/d(\ln I)$ – I and $H(I)$ – I are shown in Fig. 3a–d, and the obtained values of the parameters are collected in Table 2.

As it can be seen from Table 2, the obtained values of ideality factor and series resistance of reference sample (Sample 2) are 5.38 and 9.8 k Ω , respectively, and are quite high. After metallization of the back side of the device (Sample 3) the values of ideality factor and series resistance decreased to 1.92 and 16.22 Ω , respectively, due to the improvement of the current distribution in the Au/GaN/GaAs diode. Comparing Sample 1 and 3 with Sample 4, the presented results show that

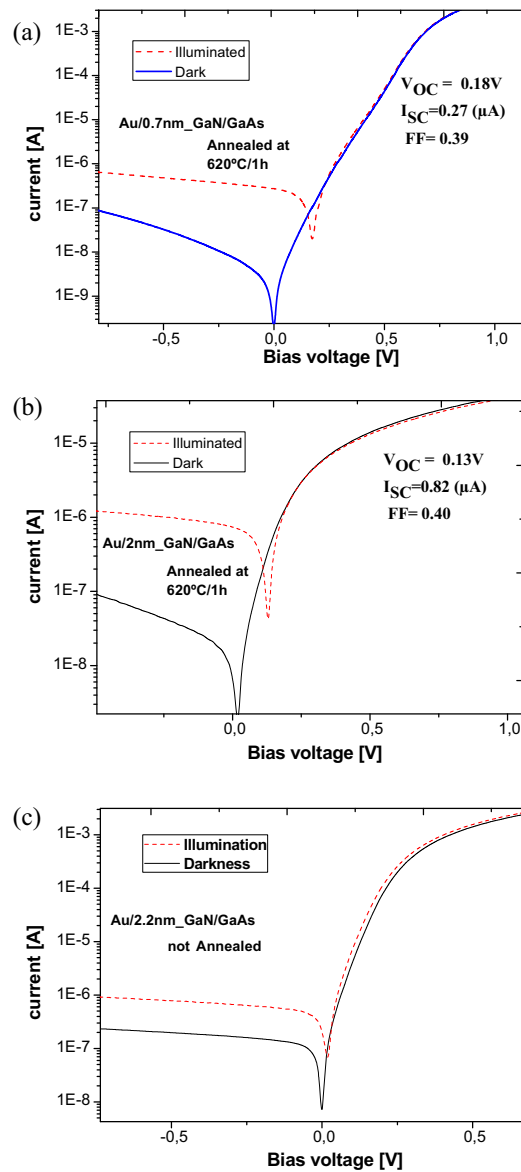


Fig. 4. I–V characteristics of Au/ δ -GaN/GaAs in dark conditions and under illumination, after annealing process (a) and (b), and without annealing (c).

the annealing process decreases the ideality factor and series resistance. This might be related to the reorganization of the atoms in the inhomogeneous film of GaN. This has been confirmed by high resolution transmission electron microscopy (HR-TEM) technique performed on the material before and after annealing. It was found that the GaN layer is amorphous. After annealing process the images show that the GaN crystallized and formed a zinc blende structure. The HR-TEM images of the samples are given and discussed in details elsewhere [19]. The saturation currents were estimated to be 3.51×10^{-08} , 3.42×10^{-07} , and 4.46×10^{-07} A for Sample 1, 3, and 4, respectively. The average barrier heights extracted for each diode was found to be 0.73 and 0.62 eV for annealed samples 1 and 3, respectively, and 0.51 for not annealed sample 4. These values were confirmed by Ambrico et al. [5], Kacha et al. [8] and Rabehi et al. [12].

3.2. Under illumination

In order to study the electric characteristics of the diodes under illumination, the He–Ne laser of 1 mW power and 632.8 nm wavelengths, with the photon energy of 1.96 eV was used.

Fig. 4 shows the I–V characteristics Au/GaN/GaAs Schottky diodes measured in dark and under red light illumination conditions. As it can be clearly seen, the diodes exhibit a photosensitive response. The GaAs layer absorbs the light of 632 nm wave length and increases strongly the current in the reverse direction by photo-illumination. The current in reverse

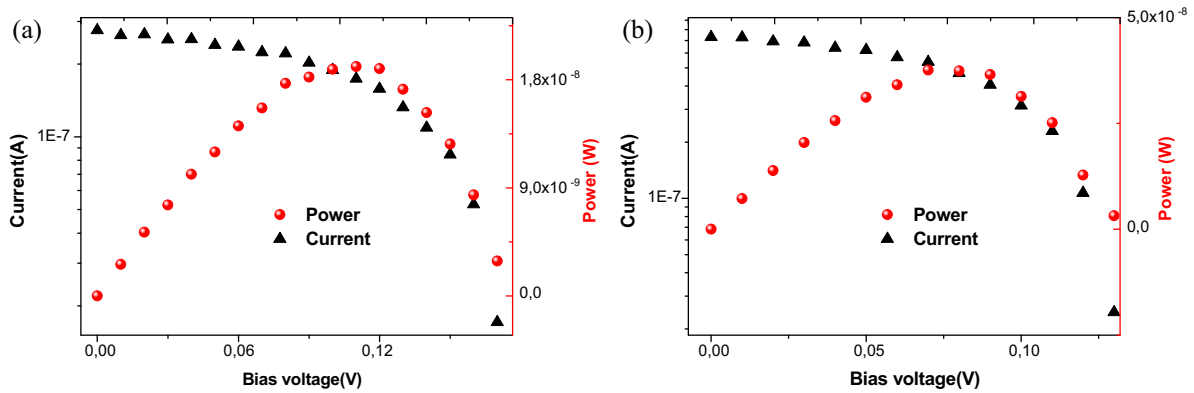


Fig. 5. Current (I) versus voltage (V) characteristics (black line) and output power (red line) of the fabricated Au/ δ -GaN/GaAs Schottky with (a) Au/0.7nm-GaN/GaAs and (b) Au/2nm-GaN/GaAs under illumination (1 mW). (For interpretation of the references to color in this figure legend, the reader is referred to the web version of this article.)

Table 3

Parameters of I–V characteristics of diodes under illumination.

	V_{OC} [V]	I_{SC} [μ A]	FF
Au/0.7 nm-GaN/GaAs	0.18	0.27	0.39
Au/2 nm-GaN/GaAs	0.13	0.82	0.40

direction is strongly increased by illumination. This suggests that the Au/GaN/GaAs Schottky diodes have properties of photodetector. This behavior yields useful information concerning the electron–hole pairs, which were effectively generated in the semiconductor layer by incoming incident photons.

It is also worth to notice, that the photocurrent is higher than the dark current at the same reverse bias, which suggests that the absorbed light generates carrier contributing to the photocurrent, resulted from the electron–hole pairs [20,21]. The generation of the photo induced electron–hole pairs and their collection at the barrier occurred due to the potential difference at the metal semiconductor interface, during illumination of the diode.

It can be clearly seen that in the forward bias the superposition principle is reflected in the samples which underwent annealing process. The I–V characteristics of the light illuminated Au/GaN/GaAs diodes are the same as the one under dark conditions, and are shifted down by the photo-generated current density (I_{ph}).

The main parameters that are used to characterize the performance of Au/GaN/GaAs diodes are the short-circuit current density (I_{SC}), the open-circuit voltage (V_{OC}), and the fill factor (FF). These parameters are determined from the results obtained for the samples treated with light, where the I–V characteristics are illustrated in Fig. 4a and b. The fill factor can be estimated from the following equation [22]:

$$FF = \frac{I_m V_m}{I_{SC} V_{OC}} \quad (5)$$

where $I_m V_m$ is a maximum power point illustrated in Fig. 5. FF is in another word a precision parameter for photovoltaic applications comparing to V_{OC} and I_{SC} [23]. The photovoltaic parameters of the annealed samples (V_{OC} , I_{SC} , and FF) are collected in Table 3.

As it can be seen from Table 3, the values of I_{SC} and FF increases with increase of the GaN thickness. Photosensitivity of Au/ δ -GaN/GaAs which underwent annealing process with δ of 0.7 and 2 nm was around 15 and 20 times bigger than the one without annealing process (sample with δ of 2.2). Due to the photovoltaic properties of proposed in this study Au/ δ -GaN/GaAs Schottky diode it can have a potential application as a photo diode or optical sensor for optoelectronic applications [24]. At the moment we are working on the improvement of the photovoltaic properties of the diode designed in this study, which could be a good candidate for application in solar cell technology. In order to improve the efficiency of the studied Schottky diode, the properties of materials constructing a solar cell must be taken into consideration.

4. Conclusions

In this study the Au/GaN/GaAs Schottky diode was fabricated and its electrical and photovoltaic properties were investigated. The I–V characteristics of these devices show that the thickness of the GaN layer has strong influence on the conductivity of the devices and increases with the increasement of the film thickness. Furthermore, it was found that the satisfactory results of low series resistance and ideality factor can be obtained for the samples after annealing process. The metallization of samples with additional Sn layer on the back side of the diodes decreases the values of ideality factor and series resistance from 5.38 k Ω to 1.92 Ω and from 9.8 k Ω to 16.22 Ω , respectively. The I–V measurements showed a

photovoltaic effect present in the diode, confirming its potential application in solar cell technology or as a photodiode for visible light determination.

References

- [1] Y.M. Reddy, M.K. Nagaraj, S.S. Naik, V.R. Reddy, *J. Mod. Phys.* 3 (2012) 538–545.
- [2] H. Tachibana, T. Ishido, M. Ogawa, M. Funato, S. Fujita, S. Fujita, *J. Cryst. Growth* 196 (1999) 41–46.
- [3] V.R. Reddy, Y.M. Reddy, R. Padmasuvarna, T.L. Narasappa, *Procedia Mater. Sci.* 10 (2015) 666–672.
- [4] E.H. Rhoderick, R.H. Williams, *Metal–Semiconductor Contacts*, Clarendon, Oxford, 1988.
- [5] M. Ambrico, M. Losurdo, P. Capezzuto, G. Bruno, T. Ligonzo, L. Schiavulli, I. Farella, V. Augelli, *Solid State Electron.* 49 (3) (2005) 413–419.
- [6] M. Richardson, contract FA95500510397 Femtosecond laser passivation GaAs detector material- Final Report.
- [7] Gottscho, Patent 5179029, Hydrogen plasma passivation of gallium arsenide (1993).
- [8] A.H. Kacha, B. Akkal, Z. Benamara, M. Amrani, A. Rabhi, G. Monier, B. Gruzza, *Superlattices Microstruct.* 83 (2015) 827–833.
- [9] Z. Benamara, N. Mecirdi, B. Bachir Bouiadjra, L. Bideux, B. Gruzza, C. Robert, M. Miczek, B. Adamowicz, *Appl. Surf. Sci.* 252 (2006) 7890–7894.
- [10] N. Zougagh, Z. Benamara, H. Mazari, N. Benseddik, K. Ameur, G. Monier, L. Bideux, B. Gruzza, *Sens. Lett.* 9 (2011) 2268–2271.
- [11] K. Ameur, H. Mazari, S. Tizi, R. Khelifi, Z. Benamara, N. Benseddik, A. Chaib, N. Zougagh, M. Mostefaoui, L. Bideux, G. Monier, B. Gruzza, C. Robert-Goumet, *Sens. Lett.* 9 (2011) 2211–2214.
- [12] A. Rabehi, M. Amrani, Z. Benamara, B. Akkal, A.H. Kacha, C. Robert-Goumet, B. Gruzza, *Eur. Phys. J. Appl. Phys.* 72 (2015) 10102.
- [13] M.A. Ebeoğlu, *Physica B* 403 (2008) 61–66.
- [14] V. Matolián, S. Fabiák, J. Glosík, L. Bideux, Y. Ould-Metidji, B. Gruzza, *Vacuum* 76 (4) (2004) 471–476.
- [15] B. Akkal, Z. Benamara, H. Abid, A. Talbi, B. Gruzza, *Mater. Chem. Phys.* 85 (1) (2004) 27–31.
- [16] K. Akkılıç, F. Yakuphanoglu, *Microelectron. Eng.* 85 (8) (2008) 1826–1830.
- [17] S.K. Cheung, N.W. Cheung, *Appl. Phys. Lett.* 49 (1986) 85.
- [18] J.H. Werner, *Appl. Phys. A* 47 (1988) 291.
- [19] G. Monier, L. Bideux, C. Robert-Goumet, B. Gruzza, M. Petit, J.L. Lábare, M. Menyárde, *Surf. Sci.* 606 (2012) 1093–1099.
- [20] F. Yakuphanoglu, S. Nihat Tugluoglu, *Karadeniz Phys. B* 392 (2007) 188–191.
- [21] F. Yakuphanoglu, *Physica B* 388 (2007) 226–229.
- [22] M.M. El-Nahass, H.S. Metwally, H.E.A. El-Sayed, A.M. Hassanien, *Synth. Met.* 161 (2011) 2253–2258.
- [23] D. Gupta, S. Mukhopadhyay, K.S. Narayan, *Sol. Energy Mater. Sol. Cells* 94 (2010) 1309–1313.
- [24] P.R. Barry, J. Genoe, P. Heremans, J. Poortmans, *Prog. Photovolt. Res. Appl.* 15 (2007) 659–676.