

République Algérienne Démocratique et Populaire

MINISTRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR

ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE

Université Djillali Liabes 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

" **Matériaux et Composants** "

(Option : Composants et systèmes)

Par

M^r ZIANE Abderrezzaq

Thème

*Caractérisation et modélisation des structures métal/
matériaux GaAs nitrurés par les techniques capacités-
tension C-V et de conductances-tension G-V en fonction
de la fréquence*

Soutenu le **04/12/2018** devant la commission de jury :

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

Année universitaire 2018-2019

Dédicace

A mes parents

A mon frère 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 CHELLALI Mohammed, 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 SAHNOUNE Mohamed, 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 ARBOUCHE Omar, 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

Table des matières

Table des figures	VII
Liste des tableaux	IX
Introduction générale	1
Chapitre I : Métal-Semiconducteur théorie	4
I.1 Introduction	5
I.2 Diagramme des bandes d'énergie idéal :	7
I.2.1 Premier cas : $q \phi_m = q \phi_s$	7
I.2.2 Deuxième cas : $q \phi_m > q \phi_s$	8
I.2.3 Troisième cas : $q \phi_m < q \phi_s$	9
I.3 Zone de charge d'espace	10
I.3.1 Champ électrique	10
I.3.2 Potentiel électrostatique	11
I.3.3 Potentiel de diffusion	12
I.3.4 La largeur de la zone de charge d'espace	12
I.3.5 Charge totale de la zone de charge d'espace	13
I.3.6 Capacité d'un contact M-S	13
I.4 Les états d'interface	14
I.5 Capacité et conductance dans une structure Schottky	17
I.6 Mécanismes de transport dans le contact Schottky	21
I.6.1 Effet thermoïonique	21
I.6.2 Effet tunnel	21
I.6.3 Effet recombinaison	21
I.6.4 Injection de porteurs minoritaires.	21
I.6.5 Courant de recombinaison sur les états d'interface.	22
I.7 CONCLUSION :	22
Chapitre II : Propriétés et élaboration des matériaux GaAs et GaN	23
II.1 Introduction	24
II.2 Propriétés GaAs	24

II.2.1 Structure cristalline d'Arséniure de Gallium (GaAs)	24
II.2.2 Propriétés électriques et physiques du GaAs	25
II.3 Préparation du GaAs	26
II.3.1 Croissance de GaAs	26
II.3.2 Préparation des Couches Actives GaAs	28
II.4 Propriétés de GaN	29
II.4.1 Structure cristalline GaN	29
II.4.2 Propriétés électriques et physiques	31
II.5 Croissance du GaN	32
II.5.1 Substrats pour la croissance du GaN	32
II.5.2 Techniques de croissance du GaN	34
II.6 CONCLUSION :	36
<i>Chapitre III : Caractérisation des structures métal/GaAs nitrurés</i>	37
III.1 Introduction	38
III.2 Élaboration de la structure :	39
III.2.1 Nettoyage des échantillons	40
III.2.2 Nitruration des échantillons	41
III.3 Description du matériel de mesure	43
III.4 Mesures expérimentales en fonction de la fréquence	45
III.4.1 Caractéristiques C-V-f	45
III.4.2 Caractéristiques G-V-f	49
III.6 L'effet de l'épaisseur de la couche de GaN	55
III.7 Conclusion	62
<i>Chapitre IV : Modélisation et simulation de structures métal/GaAs nitrurés</i>	63
IV.1 Introduction	64
VI.2 Modélisation de capacité et de conductance de structure :	65
IV.3 Solution numérique	70
IV.4 Maillage	71
VI.5 Paramètres de simulation	73
VI .5 .1 Paramètres fixes	73

VI .5 .2 Paramètres variables _____	73
IV.6 Résultats de simulation de caractéristique C-V _____	74
IV.6.1 Effet de profils de distribution des états de l'interface _____	74
IV.6.2 Effet de la concentration de dopage _____	78
IV.6.3 Ajustement des résultats de simulation avec les mesures expérimentales C-V _____	80
IV.7 Résultats de simulation de caractéristique G-V _____	81
IV.7.1 Effet de travail de sortie de l'Or _____	81
IV.7.2 Effet de la concentration de dopage _____	82
IV.7.3 Ajustement des résultats de simulation avec les mesures expérimentales G-V _____	83
IV.8 Conclusion _____	86
Conclusion Générale _____	87
Références Bibliographique _____	91
Résumé _____	104
Abstract _____	105
المخلص _____	106

Table des figures

Figure I.1: Structure de base d'une diode Schottky.....	6
Figure I.2 : Diagramme des bandes d'énergie d'un métal et d'un semiconducteur avec $q\phi_m = q\phi_s$	8
Figure I.3: Diagramme des bandes d'énergie d'un métal et d'un semiconducteur avec $q\phi_m > q\phi_s$	9
Figure I.4 : Diagramme des bandes d'énergie d'un métal et d'un semiconducteur avec $q\phi_m < q\phi_s$	9
Figure I.5: Diagramme détaillé de la bande d'énergie d'un contact métal-n-semiconducteur avec une couche interfaciale.....	14
Figure I.6: les différents schémas électriques équivalent d'une structure MIS....	18
Figure I.7: Schéma équivalent d'une structure MIS dans le cas d'un continuum d'états d'interface.....	19
Figure I.8: Mécanismes de transport à travers d'une interface métal/semiconducteur.....	22
Figure II .1 : Réseau cristallin du GaAs (zinc de blende).....	25
Figure II.2 : Structure hexagonale de Wurtzite (a) et structure cubique en zinc blende (b).	29
Figure II.3 : Structure cubique en zinc blende et hexagonale de Wurtzite et leurs zones de Brillouin.....	30
Figure III.1: Schéma de la diode Au / GaN / GaAs.....	39
Figure III.2 : Processus de nettoyage chimique d'un substrat GaAs (100).....	40
Figure III.3 : Schéma de principe de la chambre de dépôt.....	42
Figure III.4 : Représentation du banc de mesure HP 4155 B utilisé pour la caractérisation courant-tension.....	44
Figure III.5 : Principe de la mesure capacité-tension en fonction de fréquence...	44
Figure III.6: Variation de C-V de la structure Au / GaN / GaAs à différentes fréquences	46
Figure III.7 : Variation de C-2-V de la structure Au / GaN / GaAs à différentes fréquences	47
Figure III.8 : La concentration totales des impuretés du donneur et la hauteur de la barrière par rapport à la fréquence de la structure Au / GaN / GaAs	48
Figure III.9: Variation de G/ω -V de Au / GaN / GaAs à différentes fréquences	50
Figure III.10: Capacité ajustée en fonction de la tension à différentes fréquences.....	51
Figure III.11: Conductance ajustée en fonction de la tension à différentes fréquences.....	52

Figure III.12: Variation de la résistance série par rapport à la fréquence appliquée de la structure Au / GaN / GaAs.....	53
Figure III.13: Variation de la densité de l'état de l'interface par rapport à la fréquence de la structure Au / GaN / GaAs.....	54
Figure III.14: Courant direct par rapport aux caractéristiques de tension à température ambiante des structures Au / GaN / GaAs.....	56
Figure III.15: Variation du potentiel de surface (ψ_s) avec la tension directe (V) pour les structures Au / GaN / GaAs.....	58
Figure III.16 : C-V de polarisation directe expérimentale à deux fréquences différentes de la structure Au / GaN / GaAs.....	59
Figure III.17: La distribution d'énergie de l'état d'interface des structures Au / GaN / GaAs.....	61
Figure IV.1: Profils de distribution gaussienne et exponentielle de la densité d'état continue dans la bande interdite.....	69
Figure IV.2 : Organigramme de résolution du système d'équations différentielles.....	70
Figure VI.3: Maillage à pas variable de la diode Au/GaN/GaAs pris dans la simulation numérique à une dimension.....	72
Figure IV.4: Les différents profils de distribution des états de l'interface dans l'espace d'énergie utilisé pour la simulation.....	75
Figure IV.5: La charge électrique en fonction de tension appliquée simulée pour plusieurs distributions d'états de l'interface.....	76
Figure IV.6: Les caractéristiques C-V simulées pour plusieurs distributions des états de l'interface.....	77
Figure IV.7: Les caractéristiques C-V simulées pour plusieurs concentrations de dopage.....	78
Figure IV.8: Les caractéristiques C^{-2} -V simulées pour plusieurs concentrations de dopage.....	79
Figure IV.9: Les caractéristiques C-V expérimentale et simulée en basse fréquence.....	80
Figure IV.10: Les caractéristiques G-V simulées pour plusieurs valeurs de ϕ_m de l'Or.....	81
Figure IV.11: Les caractéristiques G-V simulées pour plusieurs concentrations de dopage.....	83
Figure IV.12: Les caractéristiques G-V expérimentale et simulée en basse fréquence.....	84

Liste des tableaux

Tableau II.1 Caractéristiques du GaAs.....	25
Tableau II.2 Les paramètres cristallins de GaN.....	30
Tableau II.3: Propriétés électroniques du GaN	31
Tableau II.4: Paramètres de maille et coefficients de dilatation thermique à 800°C des substrats les plus employés pour la croissance de GaN hexagonal.....	33
Tableau II.5: Paramètres de maille et coefficients de dilatation thermique à 800°C des substrats les plus employés pour la croissance de GaN cubique.....	33
Tableau III.1. Procédure de préparation des échantillons.....	43
Tableau III.2. Paramètres expérimentaux obtenus à partir des mesures C-V G-V sur les structures Au / GaN / GaAs.....	55
Tableau III.3. Paramètres expérimentaux extraits des mesures I-V sur les structures Au / GaN / GaAs.....	57
Tableau VI.1: Valeurs des paramètres des matériaux GaN et GaAs à T=300°K..	73
Tableau VI.2: Les paramètres physiques et technologiques et leur gamme de variation utilisée dans la simulation.....	74
Tableau VI.3 les paramètres de diverses distributions de pièges d'interface dans l'espace d'énergie utilisé pour la simulation.....	75

Introduction générale

En raison de ses remarquables propriétés physiques (bande interdite directe, mobilité électronique élevée ...etc.), l'Arséniure de Gallium est utilisé notamment pour réaliser des composants micro-ondes, des circuits intégrés monolithiques hyperfréquences, des composants optoélectroniques, des diodes électroluminescentes dans l'infrarouge, des diodes laser, des cellules photovoltaïques et des fenêtres optiques. Cependant, l'inconvénient majeur du substrat GaAs est la forte recombinaison de surface qui augmente le bruit de fond et le courant de fuite. La performance des composants électroniques étant déterminée principalement par la qualité de la surface des matériaux. Pour améliorer les caractéristiques de surface du GaAs, plusieurs approches ont été adoptées. Parmi ces techniques, nous citons la restructuration de la surface en exposant un substrat de GaAs à un plasma d'azote actif créé par une source GDS de faible puissance amène à la création de couches de GaN de qualité.

Ainsi nous sommes intéressés dans ce travail à l'étude d'une diode Schottky nitrurée de type Au/GaN/GaAs. Depuis plusieurs années, de grands efforts ont été consacrés à l'étude de cette structure en utilisant les caractéristiques I-V. Néanmoins, il reste des questions intéressantes et pertinentes à traiter concernant les mesures relatives à la fréquence. Dans ce travail nous sommes intéressés par l'étude des propriétés de la diode Au / GaN / GaAs en utilisant des caractéristiques capacité- tension C-V et conductance -tension G-V mesurées pour différentes fréquences. Ces mesures nous permettent d'étudier les états d'interface et leur effet, en particulier leurs densités et leurs distributions d'énergie continue, dans le but d'établir un modèle de simulation validant les caractéristiques C-V et G-V avec distribution d'énergie continue des états d'interface.

L'essentiel de notre travail est structuré de façon suivante :

Dans le premier chapitre, nous décrirons la structure, la théorie et le fonctionnement de la diode schottky, nous rappellerons également les caractéristiques électriques du contact métal / semiconducteur

A travers le deuxième chapitre, nous exposons les caractéristiques structurelles du GaAs et du GaN, ainsi que les techniques de croissance permettant d'élaborer les structures GaN/GaAs.

Le troisième chapitre est organisé comme suit : après la description des procédures expérimentales utilisées pour élaborer notre structure de la diode Schottky, la section suivante est consacrée à l'analyse et la discussion des mesures expérimentales des caractéristiques C-V et G-V en fonction de la fréquence. Puis, nous arrivons au stade de l'analyse, la comparaison et l'interprétation de nos paramètres calculés, ensuite nous étudions l'effet de l'épaisseur de couche de GaN en utilisant la méthode de haute et basse fréquence. Enfin, la dernière section résume les résultats de ce chapitre et tire des conclusions.

Dans le dernière chapitre, nous développons un programme de simulation afin d'interpréter l'évolution des caractéristiques électriques dans une structure Schottky à base de GaAs nitruré. Pour cela, nous avons proposé un modèle mathématique des caractéristiques C-V et G-V et qui est cohérent avec 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 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 la charge électrique et par conséquent la capacité et la conductance. Dans la deuxième partie notre programme est étendu pour étudier l'effet de différents paramètres physiques sur les caractéristiques C-V et G-V. Enfin, pour valider notre modèle, nous faisons une comparaison entre le résultat de simulation avec ceux obtenus par les expériences effectués sur des diodes Schottky à base du GaAs nitruré.

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

Chapitre I : Métal-Semiconducteur théorie

I.1 Introduction

La diode Schottky 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 ont été basés sur cette structure. La plus ancienne investigation scientifique sur les systèmes de redressement métal-semiconducteur a été réalisée par Braun [1], qui observa en 1874 la dépendance de la résistance totale d'un contact ponctuel sur la polarité de la tension appliquée et sur les conditions de surface détaillées. Le redresseur à point de contact sous diverses formes a trouvé des applications pratiques à partir de 1904 [2].

En 1931, Wilson a formulé la théorie du transport des semiconducteurs basée sur la théorie de la bande des solides. Cette théorie a ensuite été appliquée aux contacts métal-semiconducteur [3]. En 1938, Schottky a suggéré que la barrière de potentiel pourrait provenir des charges d'espace stables dans le semiconducteur seul sans la présence d'une couche chimique [4]. Le modèle découlant de cette considération est connu sous le nom de barrière Schottky. En 1938, Mott a également mis au point un modèle théorique plus approprié pour les contacts métal-semiconducteurs balayés, connu sous le nom de barrière de Mott [5]. Bethe en 1942 l'a encore amélioré pour devenir le modèle d'émission thermo-ionique qui décrit avec précision le comportement électrique de la diode [6].

En raison de leur importance dans les applications à courant continu et micro-ondes et comme des parties complexes d'autres dispositifs semiconducteurs, les contacts métal-semiconducteur ont été étudiés de manière approfondie. Plus précisément, ils ont été utilisés comme photo-détecteurs, cellules solaires et comme électrode de grille du MESFET, etc. Plus important encore, le contact métallique sur un semiconducteur fortement dopé forme un contact ohmique nécessaire pour chaque dispositif semiconducteur afin de transmettre le courant hors de la dispositif [2].

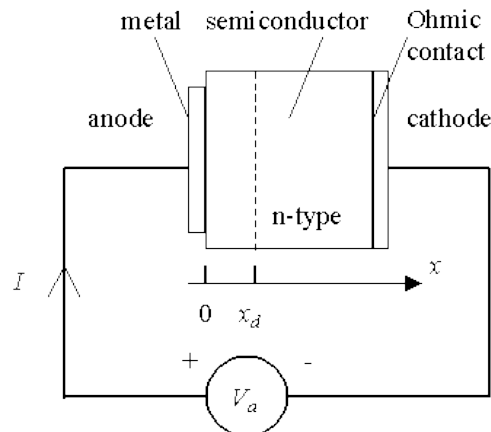


Figure I.1: Structure de base d'une diode Schottky

Les diodes Schottky ont connu trois grandes périodes d'importance industrielle : d'abord comme détecteurs radio au début des années 1900, puis comme détecteurs de radars pendant la Seconde Guerre mondiale et plus récemment comme diodes de serrage pour améliorer la vitesse de commutation des circuits intégrés bipolaires. Un autre domaine dans lequel les diodes Schottky excellent aujourd'hui est celui des diodes hyperfréquences et des grilles des transistors micro-ondes [7]. Le premier dispositif à semiconducteur métallique était la diode de contact ponctuelle qui employait un fil métallique affilé en contact avec une surface semiconductrice exposée. La pression, et parfois le recuit, ont créé une jonction alliée essentiellement hémisphérique de très petite surface de contact. En revanche, la version moderne de la diode de contact ponctuel est la diode Schottky à évaporation sous vide qui consiste en une interface métal-semiconducteur planaire avec un potentiel de contact uniforme et une distribution de courant uniforme sur la zone de jonction. Le terme barrière Schottky se réfèrent tous à un redresseur métal-semiconducteur de surface relativement grande qui n'utilise pas de point de contact. Les avantages de la diode à barrière Schottky par rapport à la diode de contact ponctuelle, comprennent ; une résistance en série inférieure, des caractéristiques de bruit plus faibles et une capacité de puissance plus élevée[7]. De plus, les barrières Schottky ont une plus grande fiabilité mécanique et sont mieux adaptées aux techniques de production de masse. Actuellement, les redresseurs Schottky satisfont des divers fonctions, dont la plupart sont basées sur l'action de commutation rapide

associée au courant des porteurs majoritaires qui prédominent ces dispositifs. En plus de leurs nombreuses utilisations en tant que diodes de redressement, les contacts de métal-électrode ont une autre application importante et c'est leur utilisation comme contacts ohmiques non-redresseurs dans tous les dispositifs semiconducteurs actifs.

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.

I.2 Diagramme des bandes d'énergie idéal :

Une barrière Schottky peut se former lorsqu'un métal entre en contact avec un semiconducteur [8], après que l'équilibre thermodynamique soit établi les niveaux de Fermi des deux matériaux s'alignent. On va prendre les trois cas possibles pour la structure M-S de type N.

I.2.1 Premier cas : $\phi_m = \phi_s$

En prenant comme référence le niveau du vide E_0 , le diagramme énergétique des deux structures avant contact est représenté sur la figure (I.2-a). Après contact, et comme le travail de sortie du métal est égal à celui du semiconducteur, l'équilibre thermodynamique se fait sans échange d'électrons et sans courbure de bande [9] (Figure I.2-b). On dit que ce système est en régime de bande plate.

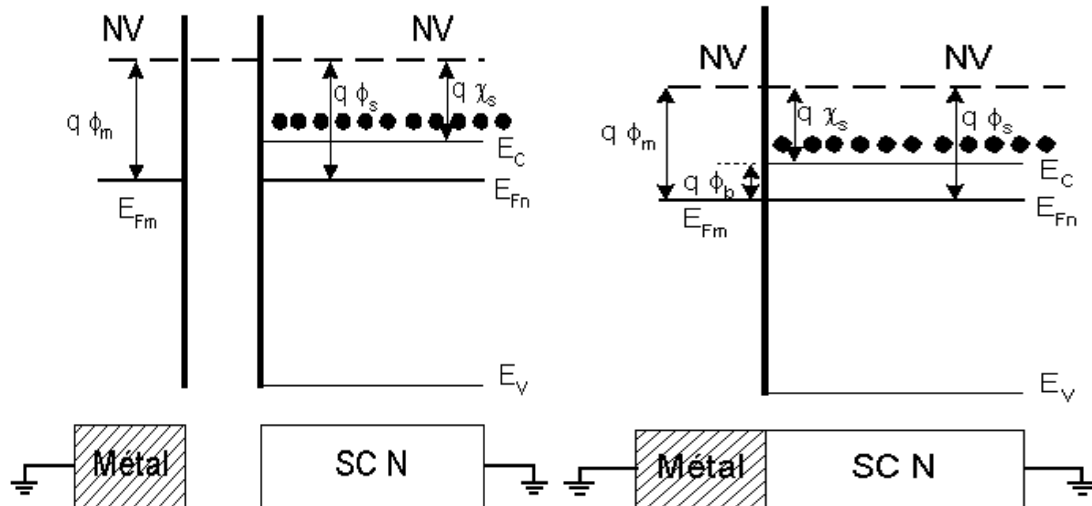


Figure I.2 : Diagramme des bandes d'énergie d'un métal et d'un semiconducteur avec $q\phi_m = q\phi_s$ a) avant contact ; b) après contact.[10]

I.2.2 Deuxième cas : $q\phi_m > q\phi_s$

Dans ce cas, la différence entre les deux travaux de sortie conduit à un transfert d'électrons, et une courbure de bande. En prenant toujours la même référence que précédemment, les diagrammes énergétiques des deux matériaux avant le contact, sont représentés par la figure (I.3-a). Après contact, et du fait que le travail de sortie du semiconducteur est inférieur à celui du métal, les électrons sont diffusés du semiconducteur vers le métal. 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, et comme la densité d'état des électrons dans le métal est supérieure à celle des ions fixes dans le semiconducteur, la zone de charge d'espace est relativement étalée à l'intérieur du semiconducteur.

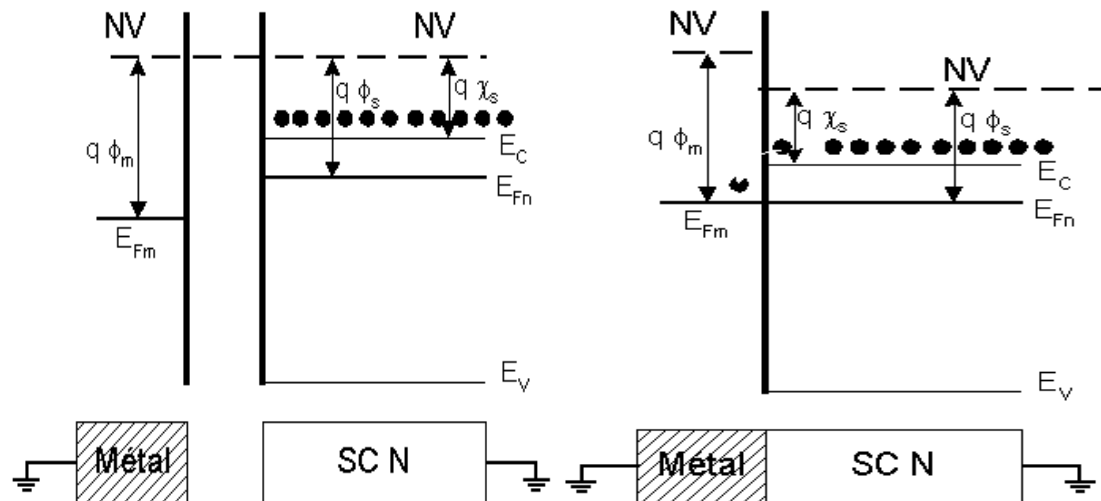


Figure I.3: Diagramme des bandes d'énergie d'un métal et d'un semiconducteur avec $q\phi_m > q\phi_s$ a) avant contact ; b) après contact.[10]

I.2.3 Troisième cas : $q\phi_m < q\phi_s$

Vu que le travail du métal est inférieur à celui du semiconducteur, les électrons sont diffusés du métal vers le semiconducteur, et le système évolue jusqu'à l'alignement des niveaux de Fermi.

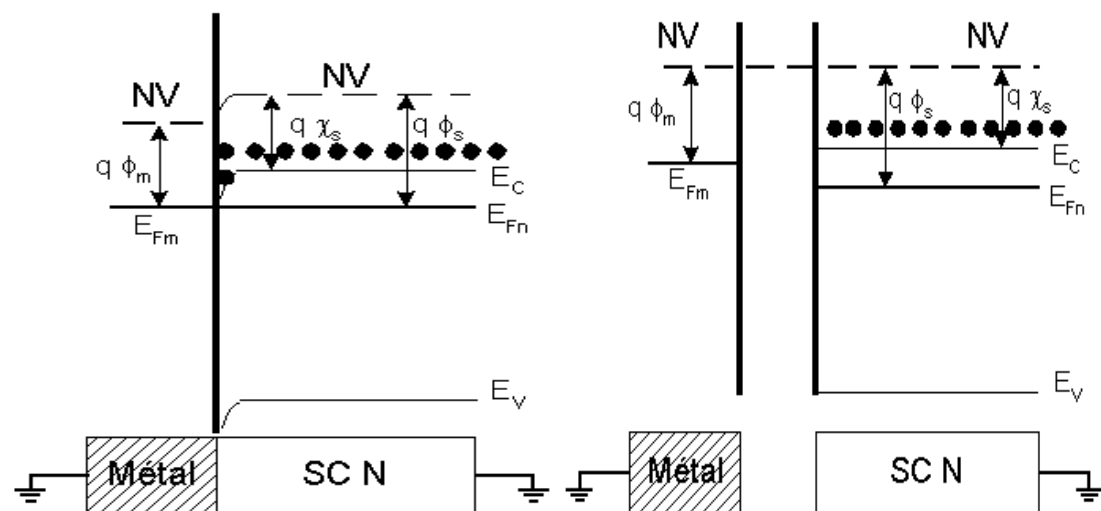


Figure I.4 : Diagramme des bandes d'énergie d'un métal et d'un semiconducteur avec $q\phi_m < q\phi_s$ a) avant contact ; b) après contact.[10]

Après le contact, les électrons, passent du métal vers le semiconducteur et font apparaître, dans le métal, un déficit d'électrons localisé à la surface, et dans le semiconducteur, une zone d'accumulation très peu étalée. Il en résulte une courbure vers le bas des bandes de valence et de conduction.

I.3 Zone de charge d'espace

La barrière Métal-semiconducteur "n" où $q\phi_m > q\phi_{sc}$ présente à l'interface du côté semiconducteur 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 [11]. 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 issues des donneurs. Donc on a :

$$\rho(x) = qN_d \quad \text{pour } 0 < x < W \quad (I.1)$$

$$\rho(x) = 0 \quad \text{pour } x \geq W \quad (I.2)$$

ρ : densité des charges dans un semiconducteur

N_d : densité des donneurs.

I.3.1 Champ électrique

On a l'équation de Poisson :

$$\frac{d^2V(x)}{dx^2} = -\frac{\rho(x)}{\epsilon_s} \quad (I.3)$$

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

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

$$\xi(x) = -\frac{dV(x)}{dx} \Rightarrow \frac{d\xi(x)}{dx} = \frac{qN_d}{\epsilon_s} \quad (I.4)$$

Donc :

$$\xi(x) = \int \frac{qN_d}{\epsilon_s} dx = \frac{qN_d}{\epsilon_s} x + C^{te} \quad (I.5)$$

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

$$\xi(x) = \frac{+qN_d}{\epsilon_s} (x - W) = -\frac{qN_d}{\epsilon_s} (W - x) \quad (I.6)$$

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

I.3.2 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 :

$$V(x) = -\int \xi(x) dx = -\int \frac{qN_d}{\epsilon_s} (x - W) dx \quad (I.7)$$

$$V(x) = -\frac{qN_d}{\epsilon_s} \left(\frac{x^2}{2} - Wx \right) + C^{te} \quad (I.8)$$

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

$$V(x) = -\frac{qN_d}{\epsilon_s} \left(\frac{x^2}{2} - Wx \right) \quad (I.9)$$

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

I.3.3 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 (1.9), on a :

$$V_d = V(x=W) - V(x=0) = -\frac{qN_d}{\epsilon_s} \left(\frac{W^2}{2} - W^2 \right) = \frac{qN_d}{2\epsilon_s} W^2 \quad (\text{I.10})$$

I.3.4 La largeur de la zone de charge d'espace

D'après la relation (I.10), on peut tirer l'expression de la largeur de la zone de charge d'espace W à l'équilibre :

$$W = \left(\frac{2\epsilon_s}{qN_d} V_d \right)^{\frac{1}{2}} = \left[\frac{2\epsilon_s}{qN_d} (\phi_m - \phi_s) \right]^{\frac{1}{2}} \quad (\text{I.11})$$

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 (I.11) devient simplement :

$$W = \left(\frac{2\epsilon_s}{qN_d} (V_d - V) \right)^{\frac{1}{2}} \quad (\text{I.12})$$

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.

I.3.5 Charge totale de la zone de charge d'espace

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 :

$$Q_{sc} = qN_d W = qN_d \left(\frac{2\epsilon_s}{qN_d} (V_d) \right)^{\frac{1}{2}} \quad (I.13)$$

I.3.6 Capacité d'un contact M-S

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

$$C_{sc} = \frac{dQ_{\text{métal}}}{dV_{\text{métal/sc}}} = - \frac{dQ_{sc}}{dV_{\text{métal/sc}}} = - \frac{dQ_{\text{métal}}}{dW} \frac{dW}{dV_{\text{métal/sc}}} \quad (I.14)$$

De la formule (I.12) nous pouvons déduire :

$$C_{sc} = \frac{\epsilon_s S}{\sqrt{\frac{2\epsilon_s}{qN_d} (V_d - V)}} = S \left[\frac{q\epsilon_s N_d}{2(V_d - V)} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (I.15)$$

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.

$$\frac{1}{C_{sc}^2} = \frac{2(V_d - V)}{q\epsilon_s N_d} \quad (I.16)$$

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

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.

$$N_d = \frac{-2}{q\epsilon_s} \frac{1}{\partial(1/C_{sc}^2)/\partial V} \quad (I.17)$$

I.4 Les états d'interface

Le diagramme des bandes d'énergie d'un contact Schottky avec un semiconducteur de type N est représenté sur la figure (I.5). Pour établir l'expression donnant la hauteur de barrière ϕ_B , il faut admettre que l'épaisseur de la couche d'interface δ est de très faible dimension et transparente aux électrons, et prendre en considération l'existence d'un dipôle dû aux états de surface. Ainsi, on définit ϕ_0 l'énergie qui correspond à ces états de surface distribués de façon continue dans la bande interdite.

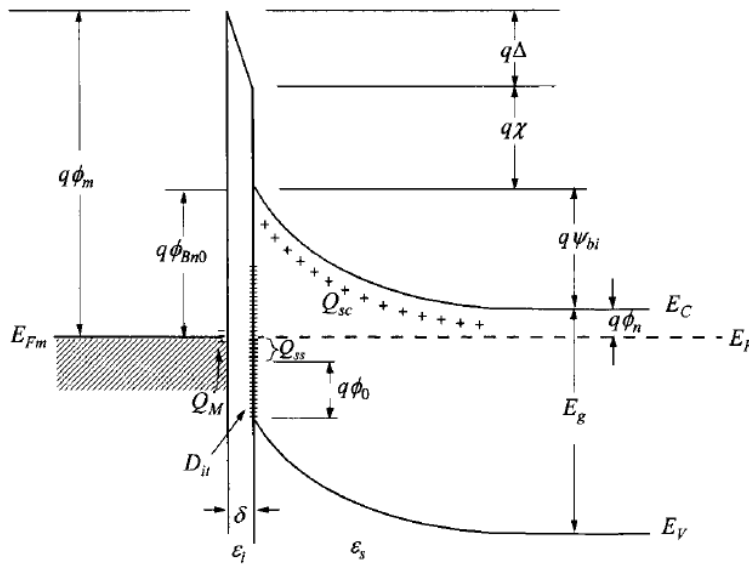


Figure I.5: Diagramme détaillé de la bande d'énergie d'un contact métal-n-semiconducteur avec une couche interfaciale [2]

L'expression de la densité de charge correspondante Q_{ss} à l'équilibre thermodynamique est donnée par [4] :

$$Q_{ss} = -q N_{ss} (E_g - q\phi_0 - q\phi_{Bn0}) \quad (I.18)$$

Où N_{ss} : la densité d'interface ; E_g : l'énergie de la bande interdite ; ϕ_{Bn0} : la hauteur de barrière.

La densité de charge d'espace positive Q_{ss} localisée dans la zone de déplétion du semiconducteur à l'équilibre thermodynamique est exprimée par :

$$Q_{sc} = qN_D W_D = \sqrt{2q \varepsilon_s N_D \left(\phi_{Bn0} - \phi_n - \frac{kT}{q} \right)} \quad (I.19)$$

Où ε_s : la permittivité du semiconducteur ; N_d : le dopage du semiconducteur.

A cause de la neutralité électrique et de l'absence de charge d'espace dans la couche interfaciale, il se développe sur la surface du métal une charge négative de densité Q_m donnée par :

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

Soit Δ le potentiel existant dans l'interface d'épaisseur δ à l'équilibre thermodynamique, en appliquant la loi de Gauss à la charge Q_m , on définit :

$$\Delta = -\frac{\delta Q_M}{\varepsilon_i} \quad (I.21)$$

Où ε_i : la permittivité diélectrique de la couche d'interface.

Nous pouvons également, d'après le diagramme de bandes d'énergie de la figure (I.5), écrire :

$$\Delta = \phi_m - (\chi + \phi_{Bn0}) \quad (I.22)$$

Ou χ : représente l'affinité électronique du semiconducteur ; ϕ_m : le travail de sortie du métal.

En éliminant Δ des équations (I.21) et (I.22) et en remplaçant Q_m par son expression donnée par l'équation (I.20), nous trouvons :

$$\phi_m - \chi - \phi_{Bn0} = \left[\frac{2q\epsilon_s N_d \delta^2}{\epsilon_i^2} \left(\phi_{Bn0} - V_n - \frac{kT}{q} \right) \right]^{\frac{1}{2}} - \frac{qN_{ss}\delta}{\epsilon_i} (E_g - q\phi_{Bn0}) \quad (I.23)$$

L'équation (I.21) peut maintenant être résolue pour ϕ_{Bn0} . Nous introduisons les quantités ;

$$c_1 = \frac{2q\epsilon_s N_d \delta^2}{\epsilon_i^2} \quad (I.24)$$

$$c_2 = \frac{\epsilon_i}{\epsilon_i + q^2 \delta N_{ss}} \quad (I.25)$$

Qui contiennent toutes les propriétés interfaciales. L'équation (I.24) peut être utilisée pour calculer c_1 si les valeurs de δ et ϵ_i sont estimées. Pour $\epsilon_s \approx 10\epsilon_0$, $\epsilon_i = \epsilon_0$, et $N_d < 10^{18} \text{cm}^{-3}$, c_1 est petit, de l'ordre de 0,01 V et le terme racine carrée dans équation (I.23) est estimé à moins de 0,1 V. On néglige ce terme de racine carrée.

Equation (I.21) réduit à :

$$\phi_{Bn0} = c_2(\phi_m - \chi) + (1 - c_2) \left(\frac{E_g}{q} - \phi_0 \right) = c_2 \phi_m + c_3 \quad (I.26)$$

Avec c_2 et c_3 connus d'expériences de ϕ_m variables, les propriétés interfaciales sont données par

$$\phi_0 = \frac{E_g}{q} - \frac{c_2 \chi + c_3}{1 - c_2} \quad (I.27)$$

$$N_{ss} = \frac{(1 - c_2)\epsilon_i}{c_2 \delta q^2} \quad (I.28)$$

En utilisant les hypothèses précédentes pour δ et ε_i , on obtenait $N_{ss} \approx 1.1 \times 10^{13} (1 - c_2)/c_2$ states/cm²-ev.

Il y a deux cas limites qui peuvent être obtenus directement à partir de l'équation (I.25):

1. Quand $N_{ss} \rightarrow \infty$, alors $c_2 \rightarrow 0$ et $q\phi_{Bn0} = E_g - q\phi_0$

Dans ce cas, le niveau de Fermi à l'interface est épinglé par les états de surface à la valeur $q\phi_0$ au-dessus de la bande de valence. La hauteur de la barrière est indépendante de la fonction de travail du métal et est entièrement déterminée par les propriétés de surface du semiconducteur.

2. Lorsque $N_{ss} \rightarrow 0$, alors $c_2 \rightarrow 1$ et $q\phi_{Bn0} = q(\phi_m - \chi)$

Cette équation pour la hauteur d'une barrière Schottky idéale où les effets de l'état de surface sont négligés.

I.5 Capacité et conductance dans une structure Schottky

La situation idéalisée d'une diode Schottky est souvent perturbée par la présence d'une couche d'oxyde entre le métal et le semiconducteur, les états d'interface à l'interface oxyde-semiconducteur et la résistance série de la diode [12]. Un modèle plus élaboré de la barrière Schottky doit contenir une couche interfaciale entre le semiconducteur et le métal qui transforme une diode Schottky en structure MIS. Typiquement, cette couche est une fine couche d'oxyde, d'épaisseur d , qui se forme naturellement à la surface d'un semiconducteur lorsqu'elle est exposée à l'air. Nous entendrons par capacité haute fréquence la capacité mesurée à une fréquence telle que les porteurs majoritaires suivent les variations du signal de mesure mais pas les états d'interface. De même, nous appellerons capacité basse fréquence la capacité mesurée à une fréquence suffisamment basse pour que les porteurs minoritaires de la couche d'inversion et les états d'interface les plus lents répondent sans retard au signal alternatif de mesure. Lorsque l'on mesure la caractéristique capacité-tension d'une structure MIS, on observe une dispersion de la mesure avec la fréquence du signal de modulation $V(t)$. Ceci montre que la structure MIS est le siège de phénomènes

dissipatifs, et ne peut être assimilée à un condensateur parfait. On est amené à associer à la capacité C , une conductance G (figure I.6-a). L'admittance complexe de la structure MIS s'écrit

$$Y(V) = G(V) + j\omega C(V) \quad (I.29)$$

L'existence d'une densité d'états d'interface N_{ss} est représentée par une capacité associée $C_{ss} = qN_{ss}$ traduisant le stockage des charges à l'interface entre l'isolant et le semiconducteur, et une résistance R_{ss} rendant compte du processus dissipatif (figure I.6-b). L'admittance complexe associée à ces sites sera notée :

$$Y_{ss} = G_{ss} + j\omega C_{ss} \quad (I.30)$$

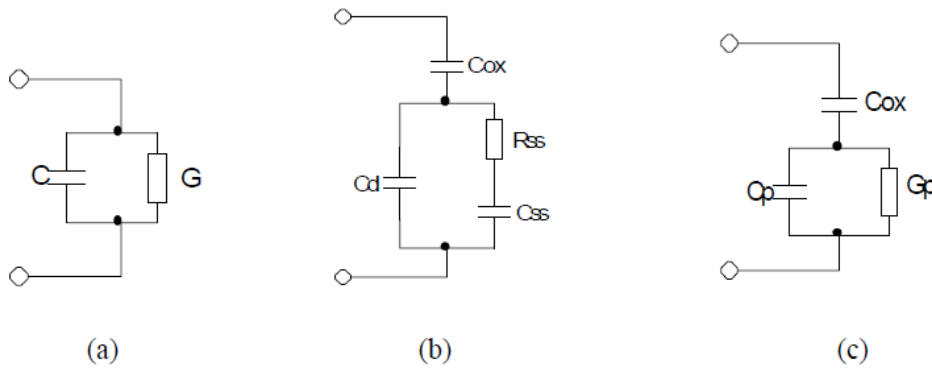


Figure I.6: les différents schémas électriques équivalents d'une structure MIS [13] :

- a- Capacité et conductance mesurées
- b- Un niveau discret d'états d'interface.
- c- Circuit parallèle

On peut montrer que l'admittance Y_{ss} d'un niveau d'interface discret proche de la bande de conduction est donnée par [14]:

$$Y_{ss} = j\omega \frac{q^2 N_{ss} f_0 (1 - f_0)}{kT (1 + j\omega f_0 / c_n n_0)} \quad (I.31)$$

Où c_n est la probabilité de capture d'un électron par les états, n_0 est la densité d'électrons libres à la surface, et f_0 est la fonction statistique de Fermi-Dirac :

$$f_0(\psi) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{\psi - \psi_s}{kT}\right)} \quad (\text{I.32})$$

En séparant les parties imaginaire et réelle de Y_{ss} , et en utilisant le schéma équivalent du circuit équivalent de la figure I.6-c, on trouve :

$$C_p = C_d + \frac{C_{ss}}{1 + \omega^2 \tau^2} \quad (\text{I.33})$$

$$\frac{G_p}{\omega} = \frac{C_{ss} \omega \tau}{1 + \omega^2 \tau^2} \quad (\text{I.34})$$

Où τ est la constante de temps du piège et ω la pulsation du signal de mesure. La courbe G_p/ω en fonction de V présente donc un maximum qui vaut $C_{ss}/2$ pour $\tau = \tau_m$ et $\omega \tau_m = 1$. On peut déterminer à la fois τ_m , N_{ss} et σ_n car $\tau = 1/(\sigma_n V_{th} n_0)$.

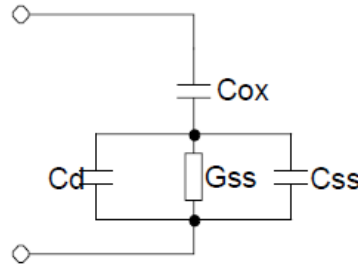


Figure I.7: Schéma équivalent d'une structure MIS dans le cas d'un continuum d'états d'interface [13] .

En général les états d'interface apparaissent comme un continuum de niveaux d'énergie distribué sur tout le gap. Pour un continuum, la capture et l'émission de porteurs majoritaires ont lieu pour des niveaux situés à quelques kT/q de part et d'autre du niveau de Fermi. L'admittance du continuum est obtenue en intégrant la relation (1.31) sur tout le gap du semiconducteur :

$$Y_{ss} = j\omega\beta q \frac{N_{ss}(\psi) f_0(\psi)(1-f_0(\psi))}{1 + j\omega f_0(\psi)/(c_n(\psi)n_0)} d\psi \quad (I.35)$$

Où N_{ss} est la densité d'états d'interface par cm^2 et par eV. Si on suppose que $N_{ss}(\psi)$ et $c_n(\psi)$ varient peu dans une gamme de quelques kT/q autour de ψ_s . En faisant la transformation :

$$f_0(1-f_0) = \frac{kT}{q} \frac{df_0}{d\psi} \quad (I.36)$$

Et en intégrant sur f_0 entre 0 et 1, on obtient :

$$Y_{ss}(\psi) = \frac{qN_{ss}(\psi_s)}{2\tau} \ln(1 + \omega^2\tau^2) + jq \frac{N_{ss}(\psi_s)}{\tau} \text{Arctg}(\omega\tau) \quad (I.37)$$

L'admittance liée à l'effet des pièges est équivalente à la mise en parallèle d'une capacité C_{ss} en parallèle avec une conductance G_{ss} figure I.7 :

$$G_{ss} = \frac{qN_{ss}}{2\tau} \ln(1 + \omega^2\tau^2) \quad (I.38)$$

$$C_{ss} = \frac{qN_{ss}}{\omega\tau} \text{Arctg}(\omega\tau) \quad (I.39)$$

La valeur maximale de $(G_p/\omega)_{\max}$ de G_p/ω est environ $0.4qN_{ss}$. on a alors $\tau=\tau_m$ tel que $\omega\tau_m=1.98$. On a donc [15] :

$$N_{ss} = \frac{1}{0.4q} \left(\frac{G_p}{\omega} \right)_{\max} \quad (I.40)$$

Pour exploiter les courbes $C(V,\omega)$ et $G(V, \omega)$, il faut extraire les grandeurs G_{ss} et C_{ss} du schéma équivalent global consistant en la mise parallèle de la capacité totale C_m et de la conductance totale G_m de la structure MIS figure (I.6-a). Il est alors possible d'exprimer le terme G_p/ω de C_p en fonction de G_m et de C_m [14] :

$$\frac{G_p}{\omega} = \frac{\omega C_{ox}^2 G_m}{G_m^2 + \omega^2 (C_{ox} - C_m)^2} \quad (I.41)$$

$$C_p = \frac{-C_{ox} [(C_m^2 - C_m C_{ox}) \omega^2 + G_m^2]}{G_m^2 + \omega^2 (C_{ox} - C_m)^2} \quad (I.42)$$

I.6 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 [2]. 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[16]:

I.6.1 Effet thermoïonique

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 semiconducteur est faiblement dopé ($\leq 10^{17} \text{ cm}^{-3}$).

I.6.2 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 semiconducteur présente une barrière de potentiel très étroite avec le métal.

I.6.3 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 semiconducteur dans le cas d'existence de centres de recombinaison.

I.6.4 Injection de porteurs minoritaires.

Un trou du métal se recombine avec un électron du semiconducteur dans la zone quasi neutre du semiconducteur.

I.6.5 Courant de recombinaison sur les états d'interface.

Les électrons du semiconducteur sont piégés au niveau d'un centre d'interface vide puis ils passent par effet tunnel dans le métal. La figure I.8 illustre les cinq mécanismes de base pour les courants existants dans le contact Schottky en polarisation directe.

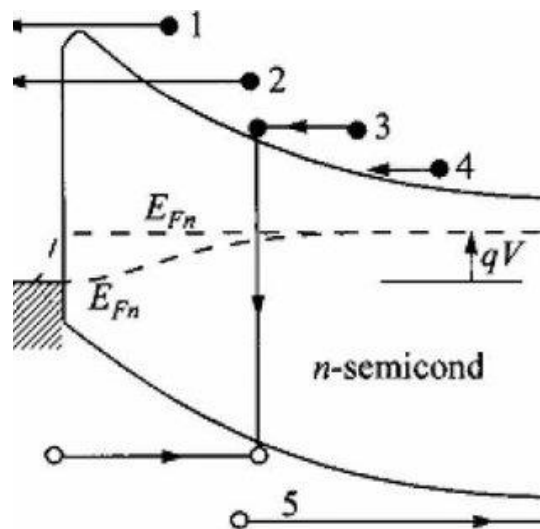


Figure I.8: Mécanismes de transport à travers d'une interface métal/semiconducteur

I.7 CONCLUSION :

Dans ce chapitre nous avons fait un rappel sur le contact métal-semiconducteurs et nous avons présentés le diagramme de bande d'énergie idéal et généralisé qui contient des états piège dans la couche interfaciale, ainsi l'utilité des mesures C-V et G-V en fonction de fréquence dans la caractérisation d'une diode schottky a été présenté.

Chapitre II : Propriétés et élaboration des matériaux GaAs et GaN

II.1 Introduction

Au cours des dernières décennies, de nombreux chercheurs ont accordé de l'importance aux dispositifs III-V et silicium dans les applications optoélectronique et haute fréquence [17]–[20]. Les études ont prouvé que les dispositifs III-V ont une haute performance contre les silicones (ou polysiloxanes) en raison de la bande interdite directe et de la mobilité électronique élevée [21]. Les structures III-V ont de nombreuses combinaisons telles InP, GaP et GaN. Parmi eux, le GaAs largement utilisé [22], [23] mais malgré ses avantages, le GaAs présente un inconvénient majeur; la recombinaison de surface élevée qui conduit à une augmentation du bruit du dispositif et des courants de fuite [21], [24], les structures de GaAs restent souhaitables pour diverses applications. La nitruration a été adoptée comme méthode appropriée pour réduire l'effet des inconvénients cités ci-dessus en raison de sa stabilité thermique et chimique [25].

Dans ce chapitre, nous insisterons sur les caractéristiques structurales du GaAs et du GaN, ainsi que les techniques de croissance permettant d'élaborer les structures GaN/GaAs.

II.2 Propriétés GaAs

II.2.1 Structure cristalline d'Arséniure de Gallium (GaAs)

L'arséniure de gallium (GaAs) est un composé de la famille III-V. Il cristallise dans la structure du Zinc Blende Figure II.1. Son réseau cristallin peut se décomposer en deux sous-réseaux cubiques à faces centrées interpénétrés, l'un étant constitué des atomes de l'élément du groupe III (Ga), l'autre des atomes de l'élément du groupe V (As); Ces deux sous-réseaux sont décalés l'un par rapport à l'autre du quart de la diagonale principale, c'est-à-dire d'une quantité de $a_0/4$ (1, 1, 1), a_0 étant le paramètre cristallin, où chaque atome se trouve donc au centre d'un tétraèdre régulier dont les sommets sont occupés par un atome de l'autre espèce [26].

Le cristal GaAs est composé de deux sous-réseaux, chacun est 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 II.1 [11].

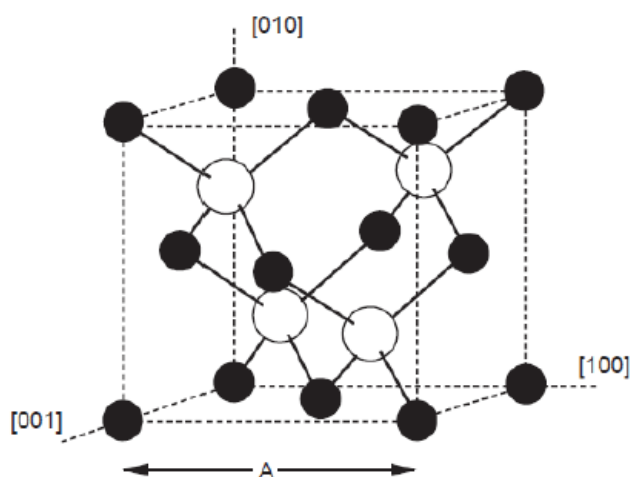


Figure II .1 : Réseau cristallin du GaAs (zinc de blende).[11]

II.2.2 Propriétés électriques et physiques du GaAs

Les propriétés physiques et électriques de l'arséniure de gallium à la température ambiante (300K°) sont regroupées dans le tableau suivant :

Paramètres	Valeurs
Structure cristalline	Zinc blinde
Poids atomique	144,63 g/mole
Structure de la bande interdit	Directe
Largeur de bande interdit	$E_g = 1,424 \text{ eV}$
Permittivité	11,6 pF/cm
Mobilité des électrons	$8500 \text{ cm}^2 \cdot \text{v}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$
Mobilité des trous	$400 \text{ cm}^2 \cdot \text{v}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$
Vitesse de saturation	$2.5 \times 10^7 \text{ cm/s}$
Champ de claquage	$> 5 \cdot 10^6 \text{ V/cm}$

Tableau II.1 caractéristiques du GaAs

II.3 Préparation du GaAs

II.3.1 Croissance de GaAs

Plusieurs techniques sont employées pour fabriquer de la croissance de GaAs, parmi ces techniques :

a. La technique de Czochralski Encapsulation Liquide (LEC)

Adapté à GaAs par Mullin et al.[27] , la méthode LEC est aujourd'hui la méthode de croissance la plus largement utilisée pour les cristaux de GaAs. La méthode a mûri pour faire pousser d'énormes monocristaux jusqu'à 6" d'un diamètre de fondu allant jusqu'à environ 28 kg [28] , en utilisant des fours de croissance à plusieurs éléments chauffants, y compris aussi après le chauffage, un refroidissement contrôlé des cristaux. Le Gallium sous forme métallique où sa température de fusion est de l'ordre de 30°C ; il réagit avec la vapeur d'Arséniure à 1240°C pour extraire l'Arséniure de Gallium fondu, il est refroidi lentement puis purifié [29] . La croissance est réalisée principalement dans une atmosphère d'argon à environ 2 MPa [28].

b. Vapour pressure controlled Czochralski (VCZ)

VCZ est l'une des techniques les plus prometteuses pour une croissance cristalline de GaAs de grands diamètres sans contrainte dans un champ de température «sur mesure» afin d'assurer par exemple des contraintes thermiques minimales. La principale caractéristique constructive est la présence d'une chambre interne conduisant à la protection du cristal et du gaz chaud en croissance des parois refroidies à l'eau du récipient haute pression externe et, par conséquent, à la condition préalable prometteuse d'une température nettement réduite dans les directions axiale et radiale [28].

c. Fully encapsulated Czochralski (FEC)

Visant une réduction du niveau de stress pendant la croissance, en particulier à la limite de contact entre les surfaces cristalline et B_2O_3 , et évitant l'évaporation sélective de l'arsenic de la surface cristalline libre, l'encapsulation complète du cristal

en croissance par l'oxyde de bore. Des propriétés électriques encourageantes ont été observées. Cependant, les principaux problèmes concernent les limitations de longueur et de diamètre des cristaux ainsi que le contrôle de la teneur en carbone. Par conséquent, cette méthode n'a pas prévalu dans la production industrielle à grande échelle [28].

d. La Technique Horizontale de Bridgman (HB)

La méthode HB a été établie depuis des décennies, pour la croissance de monocristaux GaAs par Folberth et Weiss en 1955 [30]. Les bateaux de quartz prétraités (sablés ou gravés) ainsi que les bateaux p-BN sont utilisés aujourd'hui pour réduire l'interaction entre la fonte et récipient (densité de dislocation) [28].

La méthode horizontale de Bridgman (HB) a été largement utilisée pour produire des cristaux de GaAs utilisés comme substrats pour des dispositifs optiques tels que des diodes laser et des LED. Le principal avantage de cette méthode par rapport à la méthode Czochralski (LEC), encapsulée dans un liquide, est qu'elle présente une densité de dislocations plus faible en raison d'un gradient de température plus faible. [31]. Le Ga est maintenu à une température juste au dessus de celle de fusion (1240°C) et l'As autour de (615°C) ou la pression de vapeur d'As est 1 atmosphère. L'As est transporté par diffusion de la région source vers le Ga liquide ; qui devient éventuellement un liquide de GaAs et comme la pression de vapeur de As au-dessus du GaAs liquide à (1240°C) est aussi à 1 atmosphère ; une presque parfaite stœchiométrie est atteinte [29].

e. Bridgman vertical (VB) et vertical gradient freezing (VGF)

Le Bridgman vertical et vertical gradient freezing sont des méthodes de croissance classiques qui ont été réalisées principalement dans des monocristaux d'oxyde. Dans ces méthodes, la cristallisation se poursuit du bas vers le haut dans un creuset, de sorte qu'il est impossible d'observer l'état de croissance en temps réel. Ce fait nécessite l'obtention d'une croissance stable et reproductible pour l'application à la production [31].

II.3.2 Préparation des Couches Actives GaAs

La couche active est une couche conductrice mince de l'GaAs de grande pureté, dopée avec des impuretés de type donneur, en général uniforme développé sur un substrat semi-isolant. Elle existe deux techniques de préparation de ces couches actives. L'épitaxie est une étape technologique consistant à faire croître du cristal sur du cristal. Etymologiquement, "épi" signifie "sur" et "taxis", "arrangement". On utilise le substrat comme germe cristallin de croissance et on fait croître la couche par un apport d'éléments constituant la nouvelle couche. La couche épitaxie peut être dopée ou non dopée. Elle existe trois types principaux de cette technique:

a. Technique Epitaxiale en Phase Vapeur

Cette technique consiste à faire croître le cristal à partir de sources de gaz contenant les éléments dopants. Dans le réacteur, les gaz se dissocient pour fournir par exemple le silicium qui se dépose à la surface des plaquettes. Pour assurer une bonne croissance, ces dernières sont chauffées. Suivant la température de croissance, les réactions sont très différentes et elles peuvent même conduire à des effets négatifs. Il faudra donc aussi contrôler les équilibres chimiques par injections de gaz résultant de la décomposition de la source [32].

b. Technique Epitaxiale en Phase Liquide

Cette technique consiste à faire croître le cristal par la mise en contact du substrat avec une source liquide. C'est le même principe que le tirage d'un lingot par la méthode Czochralski. Il faut bien contrôler les échanges thermiques pour éviter de liquéfier le cristal existant. Cette méthode présente l'avantage d'être très rapide, la vitesse de croissance peut être de l'ordre du micron par minute [32].

c. Hot wall épitaxie

Dans la technique HWE, la croissance des films épitaxiaux dans des conditions aussi proches que possible de l'équilibre thermodynamique est obtenue avec une perte minimale de matériau. En outre, comme il s'agit d'un système fermé, les pressions de vapeur des constituants sont maintenues et la stoechiométrie des films peut être

contrôlée facilement. Des couches épi- taxiques de GaAs ont été cultivées sur des substrats de mica, GaAs, Ge par cette technique.[32]

II.4 Propriétés de GaN

II.4.1 Structure cristalline GaN

Le nitrure de gallium (GaN) fait partie de la famille des nitrures III-N qui est composée de nitrure de bore (BN), de nitrure d'aluminium (AlN) et de nitrure d'indium (InN). Ils peuvent cristalliser sous une forme cubique ou hexagonale, mais la phase hexagonale est la plus stable que nous puissions atteindre par des conditions de croissance standard. Ces deux structures sont la blende de zinc (cubique) et la wurtzite (hexagonale) que l'on peut voir sur la figure II.2 [33].

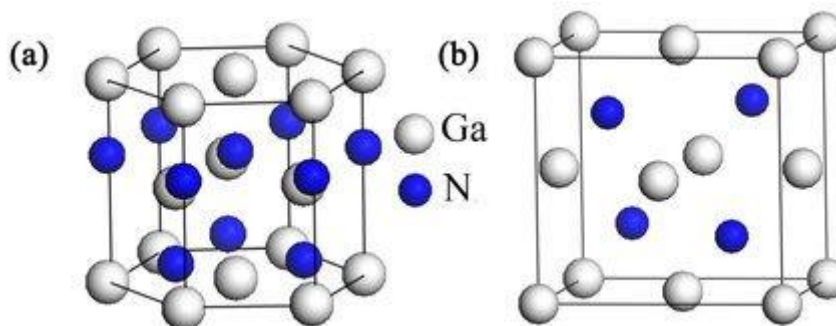


Figure II.2 : Structure hexagonale de Wurtzite (a) et structure cubique en zinc blende (b).

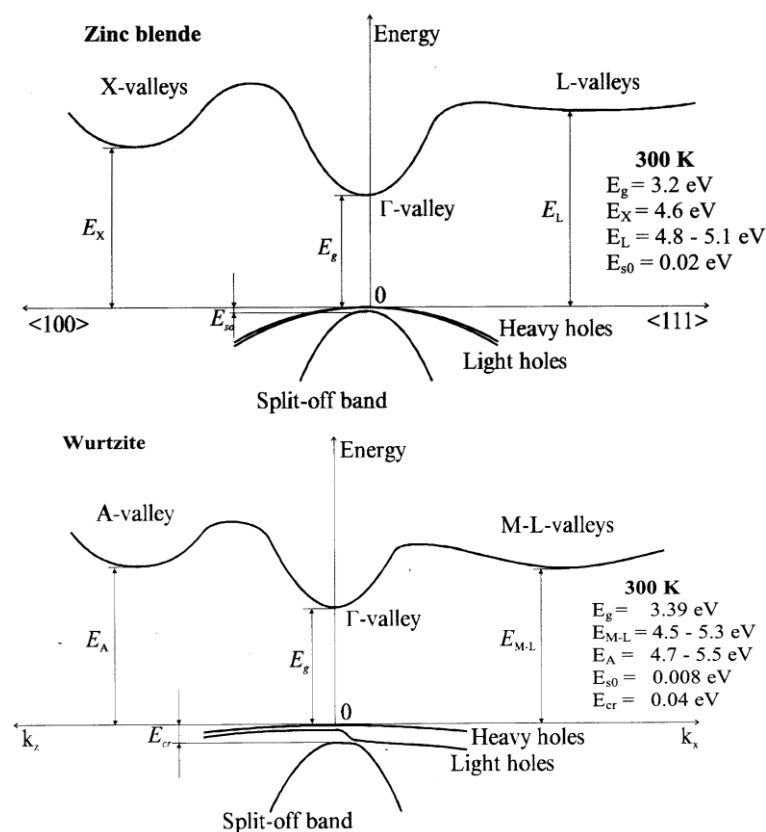
Ce dernier est celui qui est utilisé en laboratoire pour l'épitaxie des couches de GaN en raison de sa nature métastable, qui présente de nombreuses propriétés cristallines propres à l'élaboration des hétérojonctions. Le tableau II.2 montre les paramètres cristallins des deux structures.

Le rapport c/a du réseau GaN est très proche de la valeur théorique $\sqrt{8/3}$ pour une structure hexagonale parfaite. Nous pouvons donc supposer que les atomes de gallium sont dans des sites tétraédriques faiblement déformés.

	Cubique c-GaN	Hexagonal h-GaN
Paramètre cristallin	$a_{300K}=4.511\text{\AA}$	$a_{300K}=3.188\text{\AA}$ $c_{300K}=5.185\text{\AA}$

Tableau II.2 les paramètres cristallins de GaN [33].

Le GaN est un semiconducteur présentant une bande interdite directe, ce qui signifie que le minimum de bande de conduction (E_c) et le maximum de bande de valence (E_v) sont presque identiques sur le diagramme représentant l'énergie E par rapport au vecteur d'onde k . Pour GaN, ce point est situé au point Γ , centre de la zone de Brillouin ($k = 0$). Les premières zones de Brillouin et les structures de bande dans la direction principale sont représentées sur la figure II.3 [33].

**Figure II.3** - Structure cubique en zinc de blend (haut) et hexagonale de Wurtzite (bas) et leurs zones de Brillouin [33].

Les structures hexagonales et cubiques ont une bande interdite de 3,43 eV et 3,20 eV respectivement à 300 K. Ces valeurs augmentent avec les températures, comme décrit dans l'équation suivante[33] :

$$E_g = E_0 - \frac{aT^2}{T + b} \quad (\text{II.1})$$

Où $E_0 = 3,47$ eV, $a = 0,599$ meV.K⁻¹ et $b = 880$ K. Cette formule nous donne un écart de 3,424 eV pour le GaN hexagonal à une température de 300 K. Cette énergie doit être comparée à la valeur 4H-SiC de 3.240 eV et à la valeur Si de 1.103 eV à 300 K obtenue par le même calcul. Cette énergie de bande interdite est directement liée au champ de décomposition, que nous prendrons en compte plus tard. Une large bande interdite est généralement associée à une faible concentration de porteurs intrinsèques, mais le GaN non intentionnellement dopé est toujours dopé de type n et la densité électronique peut varier de 10¹⁶ à 10¹⁹ cm⁻³ en fonction des conditions de croissance. Cependant ces valeurs ne sont pas très précises car des défauts de la structure GaN contribueront à obtenir des valeurs plus élevées, alors que des phénomènes de compensation, situés à des niveaux d'énergie profonds, peuvent contribuer à l'abaissement général de ces valeurs. Les mesures en salle permettent d'obtenir des valeurs plus précises et fiables pour la densité et l'énergie d'activation du donneur en fonction de la température.

II.4.2 Propriétés électriques et physiques

Les propriétés physiques et électriques de GaN à la température ambiante (300K°) sont regroupées dans le tableau suivant :

Paramètre	Valeur
Structure cristalline	Wurtzite, Zinc Blende
Poids atomique	83.73 g/mole
Structure de la bande interdit	Directe
Largeur de bande interdit	Eg =3.43 eV
Permittivité	8.9 pF/cm

Mobilité des électrons	$900 \text{ cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$
Mobilité des trous	$170 \text{ cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$
Vitesse de saturation	$2.5 \times 10^7 \text{ cm/s}$
Champ de claquage	$> 5 \cdot 10^6 \text{ V/cm}$

Tableau II.3: Propriétés électroniques du GaN

II.5 Croissance du GaN

II.5.1 Substrats pour la croissance du GaN

Puisque les cristaux tridimensionnels de GaN ne sont pas produits à l'échelle commerciale, Ceci est dû à plusieurs contraintes, sa haute température de fusion ainsi que ses fortes pressions de vapeur saturante de ces composés, la plupart des chercheurs ne comptent que sur l'hétéroépitaxie pour préparer des dispositifs à base de GaN, il est nécessaire de choisir les cristaux avec des paramètres de maille, les caractéristiques chimiques et physiques corrélées. Dans le cas de la croissance de films cristallins sur des substrats étrangers. Le plus souvent, le paramètre de mésappariement des substrats devient un critère principal dans la sélection d'un substrat. A cet égard, un grand nombre de matériaux comprenant des métaux, des oxydes métalliques, des nitrures métalliques ainsi que des semiconducteurs ont été étudiés.

Cependant, en pratique, non seulement les constantes de réseau sont importantes, mais aussi la structure du matériau cristallin, le traitement d'une surface, la composition, la réactivité de la surface, ainsi que les propriétés chimiques, thermodynamiques et électriques du matériau. Le matériau utilisé a une grande influence sur la sélection des matériaux pour la préparation des substrats. Il convient de mentionner que l'influence dans la plupart des cas pourrait être exposée de façon assez inattendue. Juste un substrat détermine l'orientation du cristal, la polarité, le polytype, les déformations et la concentration des défauts de nitrure de gallium. Ainsi, le substrat estime pleinement, qu'un instrument puisse acquérir l'une ou l'autre qualité. Morphologie de la surface, élasticité [34].

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	$a=4.758 ; c=12.99$	$\alpha=7.5 ; c=8.5$
6H SiC	Wurtzite	$a=3.08 ; c=15.12$	$\alpha =4,2 ; c=4.68$
Si (111) (100)	Cubique	$a=5.4301$	$\alpha =3.59$
GaAs (111) (100)	Cubique	$a=5.6533$	$\alpha =6$
ZnO	Wurtzite	$a=3.250 ; c=5.213$	$\alpha =8.25 ; c=4,75$
AlN (couche tampon)	Wurtzite	$a=3.112 ; c=4.982$	$\alpha =4.2 ; c =5.3$

Tableau II.4: Paramètres de maille et coefficients de dilatation thermique à 800°C des substrats les plus employés pour la croissance de GaN hexagonal [11].

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	$a=4,36$	$\alpha \cong 5^*$
Si (100)	Cubique	$a=5,4301$	$\alpha =3,59$
GaAs (100)	Cubique	$a=5,6533$	$\alpha =6$
MgO	Cubique	$a=4,126$	$\alpha =10,5$

Tableau II.5: Paramètres de maille et coefficients de dilatation thermique à 800°C des substrats les plus employés pour la croissance de GaN cubique [11].

II.5.2 Techniques de croissance du GaN

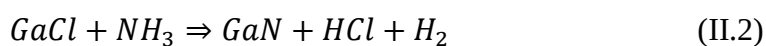
La solution la plus raisonnable économiquement pour la croissance du GaN est l'épitaxie. Nous allons donc aborder quelques techniques de croissance comme la HVPE pour « *Hybrid Vapor Phase Epitaxy* », la MBE pour « *Molecular Beam Epitaxy* » et la MOCVD « *MetalOrganic Chemical Vapor Deposition* ».

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

La croissance de HVPE avec son taux de croissance élevé jusqu'à 100 μm / h semble être une technique très attrayante pour la production de couches de GaN de haute qualité, de grand diamètre et épaisses ($> 200\mu\text{m}$) qui serviront éventuellement de substrats autoportants. Jusqu'à présent, des couches de GaN autoportantes d'une épaisseur de 230 μm et d'une surface allant jusqu'à 10 mm^2 ont été obtenues. HVPE considéré comme technique quasi-bulk pour la croissance de GaN [35].

L'épitaxie peut être réalisée dans un réacteur HVPE (Hybride Vapour Phase Epitaxy), sur un substrat porté à 1000 $^{\circ}\text{C}$, à partir d'un mélange gazeux $\text{GaCl}_3/\text{NH}_3$ comme sources de gallium et d'azote respectivement. Mais la vitesse de croissance élevée ($\sim$ plusieurs $\mu\text{m}/\text{mn}$) rend difficile le contrôle des épaisseurs de couches. En contre partie, cette vitesse permet la réalisation de couches épaisses de plusieurs centaines de microns. Cette technique permet ainsi de réaliser des couches tampon d'excellentes qualités dans les hétéroépitaxies [9].

Le réacteur contient deux zones, la zone source et la zone de croissance. Le réacteur entier est entouré de cinq éléments chauffants, qui peuvent être réglés indépendamment. Des gaz tels que HCl et NH_3 injectés dans le réacteur à travers la zone source. N_2 utilisé comme gaz vecteur pour HCl et NH_3 . Dans la zone de source, où la température autour de 860 $^{\circ}\text{C}$, le HCl autorisé à traverser un creuset contient GaCl métallique. Grâce à une pomme de douche, le GaCl injecté dans la zone de croissance. Dans la zone de croissance, GaCl et NH_3 réagissent à la surface du substrat en formant GaN selon l'équation (II.2) [35]



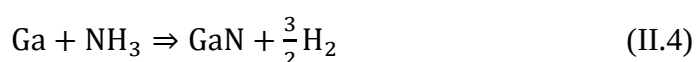
b. L'épitaxie par jets moléculaires (MBE)

La MBE peut produire des couches de haute qualité avec des interfaces très abruptes et un bon contrôle de l'épaisseur, du dopage et de la composition. MBE conventionnel ne peut pas être utilisé dans la croissance de GaN, car N₂ ne peut pas être dissocié en utilisant des cellules d'effusion classiques. Une source de plasma (plasma de résonance cyclotronique RF ou électron) peut être utilisée pour activer N₂, où un faisceau de vapeur de Ga provenant d'une cellule d'effusion et l'azote activé sont dirigés vers un substrat chauffé formant un film de GaN. En plus de Ga, la chambre MBE peut être équipée de cellules Si et Mg pour le dopage de type n et p, ainsi que de In et Al pour la croissance d'InGa_N et d'AlGa_N. L'ammoniac ou l'hydrazine est une autre source d'azote activé pouvant être craqué en azote atomique dans une cellule de craquage à haute température, l'hydrazine peut se décomposer à basse température par rapport à l'ammoniac mais leur réactivité extrême les rend dangereux à manipuler.

Les sources organométalliques peuvent être utilisées comme sources pour les éléments du groupe III qui peuvent réagir avec l'ammoniac à proximité du substrat chaud formant GaN et ses alliages. Ces sources ont abouti à des techniques hybrides ; métal organique MBE (MOMBE), épitaxie par faisceau chimique (CBE) et MBE assistée par plasma (PAMPE) [35].

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

MOCVD est un procédé de dépôt de matériaux qui utilise des composés organométalliques volatils pour transporter des atomes métalliques relativement non volatils à la température de dépôt appropriée. Les composés organométalliques sont généralement mélangés avec d'autres matériaux de source "Hydrides" qui réagissent pour former un film semiconducteur composé [35]. La réaction générale pour la croissance de composés binaires III-V décrite par les équations suivantes :



Les principales caractéristiques qui rendent le MOCVD attrayant pour la croissance des structures semi-conductrices minces sont; le processus est extensible au volume élevé , multicouches et multicomposants peuvent être réalisés en un seul passage et finalement le contrôle du processus est inhérent [32] .

II.6 CONCLUSION :

Au cours de ce chapitre, les propriétés électriques et physiques de GaAs et GaN ont été énoncées. Les techniques les plus utilisées dans la croissance de GaAs et GaN ainsi l'élaboration des couches active et techniques de dépôt ont été présentés et expliquées. Ce potentiel possédé par les matériaux GaAs nitrurés montre l'excellent avantage de leurs l'utilisation dans les domaines technologiques de la microélectronique, plus spécifiquement les diodes Schottky.

Chapitre III : Caractérisation des structures métal/GaAs nitrurés

III.1 Introduction

Les structures à base de GaAs ont été utilisées dans de nombreuses applications telles que; l'optoélectronique [22], [23] et les dispositifs à haute fréquence [20], en raison de ses remarquables propriétés physiques (bande interdite directe, mobilité électronique élevée ...) [36] . L'inconvénient majeur du substrat GaAs est la forte recombinaison de surface [24] qui augmente le bruit de fond ainsi que le courant de fuite [21]. La performance d'une diode Schottky étant déterminée principalement par la qualité d'interface entre le métal déposé et la surface du semiconducteur [37] . Pour améliorer les caractéristiques de surface du GaAs, plusieurs approches ont été adoptées. Le plus commun est la passivation GaN, en raison de sa stabilité thermique et chimique [25].

Dans ce chapitre , nous présentons une diode Schottky Au / GaN / GaAs qui a été élaborée par la nitruration du substrat GaAs, le substrat a été exposé à un flux d'azote actif créé par une source de décharge à haute tension sous ultraviolette [38].

Des études antérieures [39]–[41] ont analysés les divers aspects de la structure Au / GaN / GaAs en utilisant les caractéristiques I-V. Néanmoins, il reste des questions intéressantes et pertinentes à traiter concernant les mesures relatives à la fréquence. Dans ce travail nous nous intéressons à étudier les propriétés de la diode Au / GaN / GaAs en utilisant des caractéristiques C-V et G-V expérimentales mesurées dans différentes fréquences, afin d'analyser l'effet de la fréquence sur la densité d'état d'interface.

Ce chapitre est organisé comme suit ; après la description des procédures expérimentales utilisées pour élaborer la structure de la diode Schottky, la section suivante consacrée à l'analyse et la discussion des mesures expérimentales des caractéristiques C-V et G-V en fonction de la fréquence. Puis, nous arrivons au stade de l'analyse, la comparaison et l'interprétation de nos paramètres calculés. Ensuite nous étudions l'effet de l'épaisseur de couche de GaN sur les caractéristiques de la diode en utilisant méthode de haute et basse fréquence. Finalement, la dernière section résume les résultats de ce chapitre et tire des conclusions.

III.2 Élaboration de la structure :

La structure étudiée dans ce travail est une diode schottky Au/GaN/GaAs (figure III.1) fabriquée par la nitruration d'un substrat de GaAs. Après le nettoyage de substrat, une source de plasma d'azote à décharge radiofréquence a été utilisée pour l'élaboration de cette structure. Le plasma d'azote continu a été produit au niveau de puissance de 5W, la majorité des N espèces atomiques ont été créées (pression d'azote : 1.33×10^{-5} KPa, énergie ionique: 2.5 keV, courant d'échantillon: $1 \mu\text{A} / \text{cm}^2$). Un substrat de GaAs (100) de type n avec une concentration de $N_d = 4,9 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ et une épaisseur de $400 \pm 20 \mu\text{m}$ a été utilisée dans ce travail.

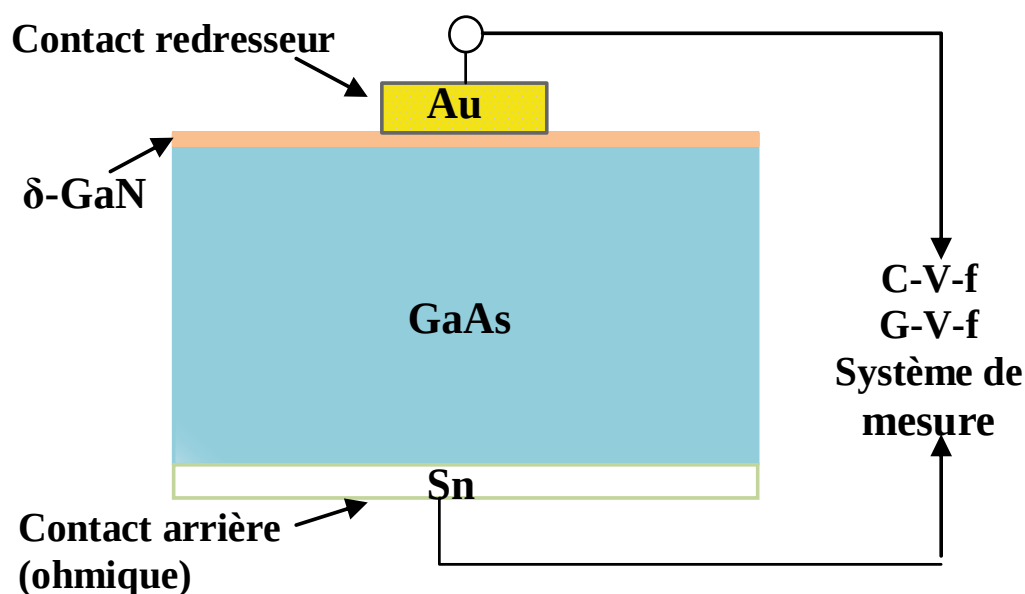


Figure III.1: Schéma de la diode Au / GaN / GaAs.

La description détaillée des différentes procédures d'élaboration est présentée comme suit :

III.2.1 Nettoyage des échantillons

La procédure de nettoyage de l'échantillon consiste en deux étapes un nettoyage chimique puis un nettoyage ionique.

a. Nettoyage chimique

Le processus de nettoyage chimique consiste à un traitement par produits chimiques séquentiellement appliqués directement sur le substrat comme suit ; H_2SO_4 , eau désionisée, froid puis méthanol chaud (tout combiné avec des ultrasons) qui est une procédure de nettoyage courante [42]–[44], le méthanol et les solutions chaudes peuvent dissoudre plus facilement les particules, les huiles et autres contaminants.

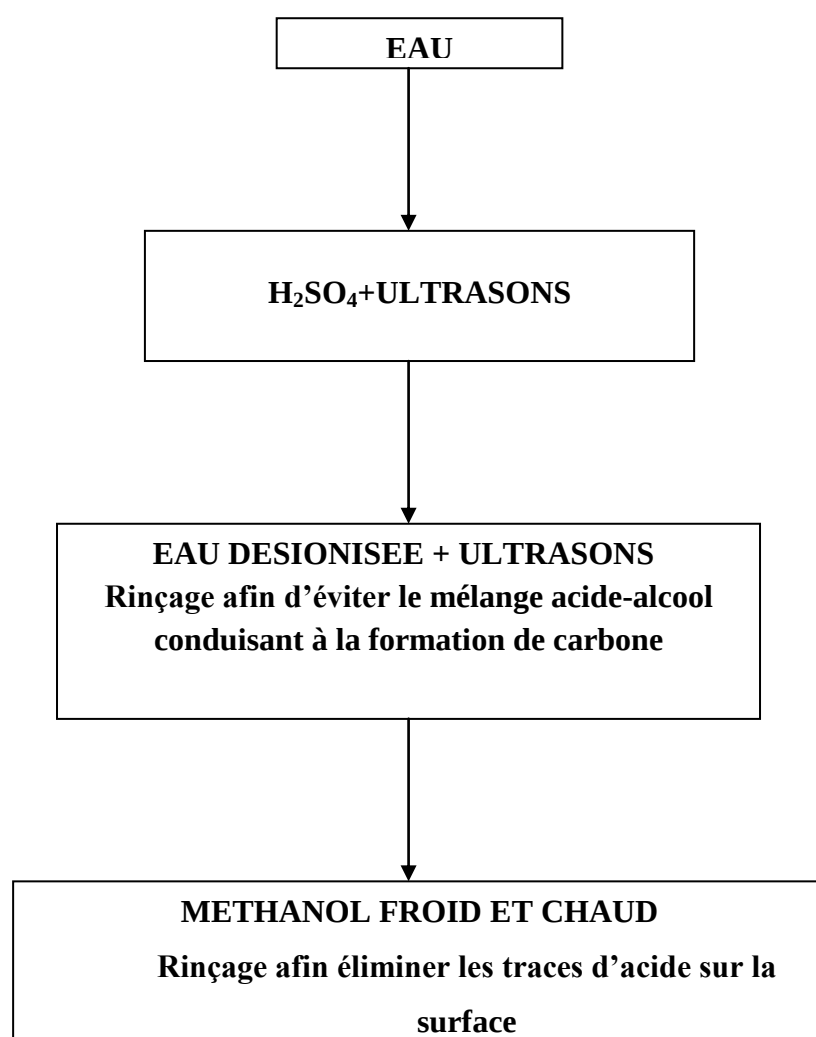


Figure III.2 : Processus de nettoyage chimique d'un substrat GaAs (100)

b. Nettoyage ionique à l'argon

Le nettoyage in-situ des échantillons est réalisé par bombardement ionique d'ions Ar^+ . Ces ions sont produits avec un canon à ions de l'argon pur à 99,999% est introduit dans la chambre sous vide par une vanne micro-fuite jusqu'à une pression de 10^{-3} Pa. Plusieurs paramètres doivent être contrôlés et optimisés lors du nettoyage des substrats ; l'énergie des ions Ar^+ (entre 0,15 et 1 KeV), l'intensité du filament de chauffage (entre 0 ; 5 A), la pression d'argon dans la chambre et la densité de courant du faisceau primaire. La régulation de ce dernier permet d'avoir un nettoyage constant tout au long de la durée du nettoyage.

III.2.2 Nitruration des échantillons

Avant la nitruration, le substrat de GaAs (100) a été chauffé à 500 °C pendant une durée de 1 h. Le chauffage du substrat est un processus typique utilisé pour reconstruire la surface du substrat GaAs [41], la température et la durée sont le résultat d'études approfondies sur le sujet [45]–[47]. Le recuit de substrat à 500°C rend les concentrations d'impureté d'interface de C et O meilleures que d'autres techniques [45], ce qui signifie une meilleure performance du dispositif. On introduit les échantillons dans la chambre de dépôts représentée dans la figure (III.3). Elle est constituée d'une source de production d'azote atomique de type plasma, d'une cellule d'évaporation de gallium métallique ainsi qu'un porte échantillon mobile chauffant.

Dans la chambre de dépôts, le nitrure est introduit à l'aide de la source d'azote de type plasma à décharge, avec une évaporation de gallium. Les échantillons ont ensuite été maintenus sous un flux d'azote pendant un temps choisi (5 min pour l'échantillon 1, 30 min pour l'échantillon 2)

Dans ce type de source, le plasma continu est produit par une grande différence de potentiel (de l'ordre de 2kV) entre l'anode et la cathode. Ce type de source présente l'inconvénient de fonctionner à des pressions élevées (de l'ordre de 1Pa). Cependant, il s'est avéré efficace pour la nitruration du substrat de GaAs (100).

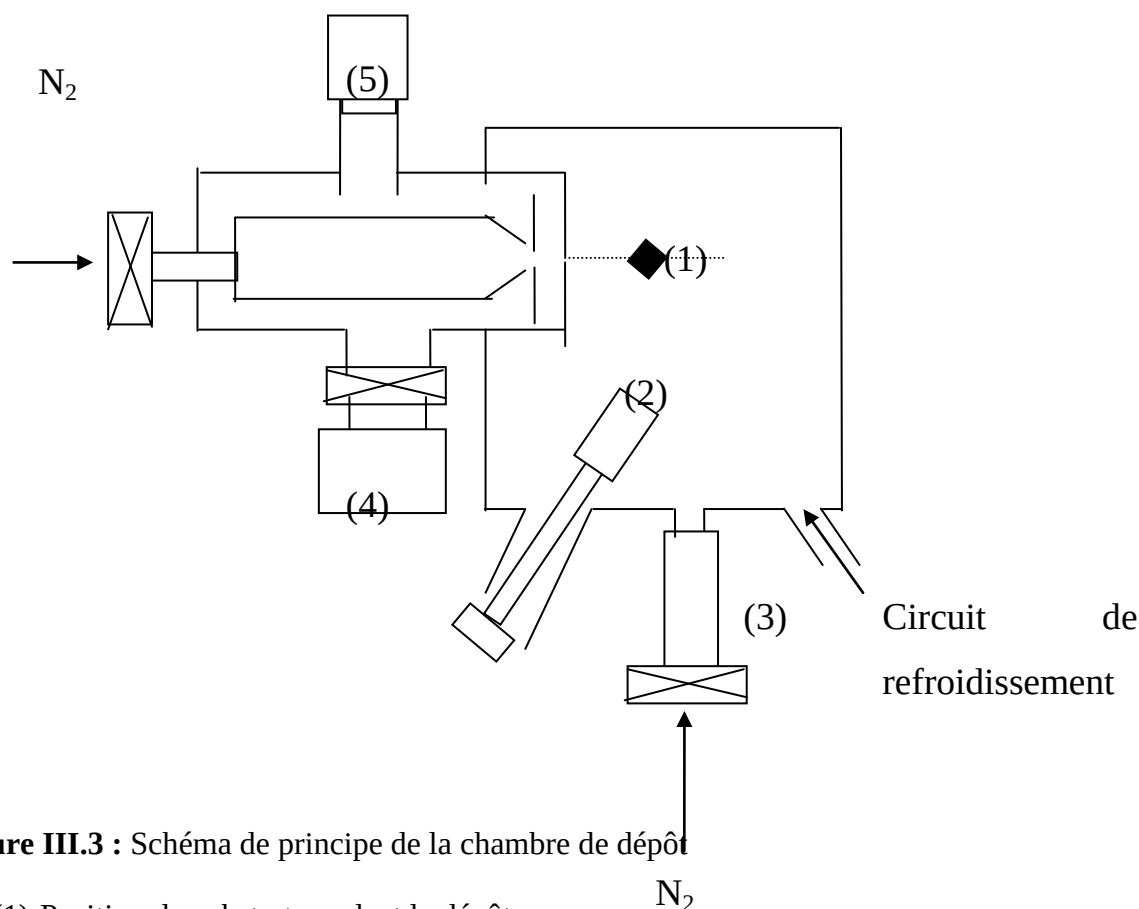


Figure III.3 : Schéma de principe de la chambre de dépôt

- (1) Position du substrat pendant le dépôt ;
- (2) Source d'évaporation de gallium ;
- (3) Source d'azote de type plasma à décharge ;
- (4) Pompe turbo moléculaire ;
- (5) Système optique d'analyse des raies d'émission du plasma RF.

Les expériences ont été réalisées dans la chambre à ultravide (UHV) et équipée avec un système de spectroscopie photoélectronique par rayons X (XPS) (source de rayons X à double anode Al-Mg et analyseur d'énergie électronique hémisphérique); cette méthode nous permet de déterminer la composition chimique et la structure cristalline des échantillons étudiés. Les expériences de spectroscopie photoélectronique par rayons X (XPS) ont été réalisées en utilisant une source de Mg K α (1253,6 eV) à un

angle d'incidence de 55 ° (détection normale, énergie de passage de l'analyseur égale à 20 eV)[40] .

Les paramètres de la procédure de préparation de nos échantillons sont indiqués dans le tableau III.1:

Paramètre	Echantillon 1	Echantillon 2
Concentration initiale de GaAs	$4.9 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$	$4.9 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$
Conditions de nitruration	500°C, 5W, 5 min	500 °C, 5W, 30 min
GaN	0.7 nm	2.2 nm
Contact Schottky	Au	Au
Contact Ohmique	Sn	Sn

Tableau III.1. Procédure de préparation des échantillons.

La structure a été testée électriquement avec un contact Au, où la surface et l'épaisseur du contact étaient $S = 4,41 \times 10^{-3} \text{ cm}^2$ et $d = 100 \text{ nm}$, respectivement. Afin d'améliorer la qualité du contact ohmique, l'étain (Sn) a été déposé sur la face arrière avec NH_4Cl à une température de 350 ° C pendant une durée de 5 minutes; afin d'empêcher la création d'oxydes et d'autres impuretés à la surface de GaAs, ce qui conduit à une meilleure diffusion de Sn dans GaAs [40] .

III.3 Description du matériel de mesure

Les mesures I-V ont été effectuées à l'aide d'un analyseur de paramètres semiconducteurs HP 4155B. Les mesures C-V ont été effectuées à des fréquences différentes 1 MHz, 500 kHz, 100 kHz, 10 KHz et 1 kHz en utilisant un analyseur C-V 590 Keithley à température ambiante.

La figure III.4 illustre le banc de mesure conçu pour cette mesure aux bornes des échantillons.

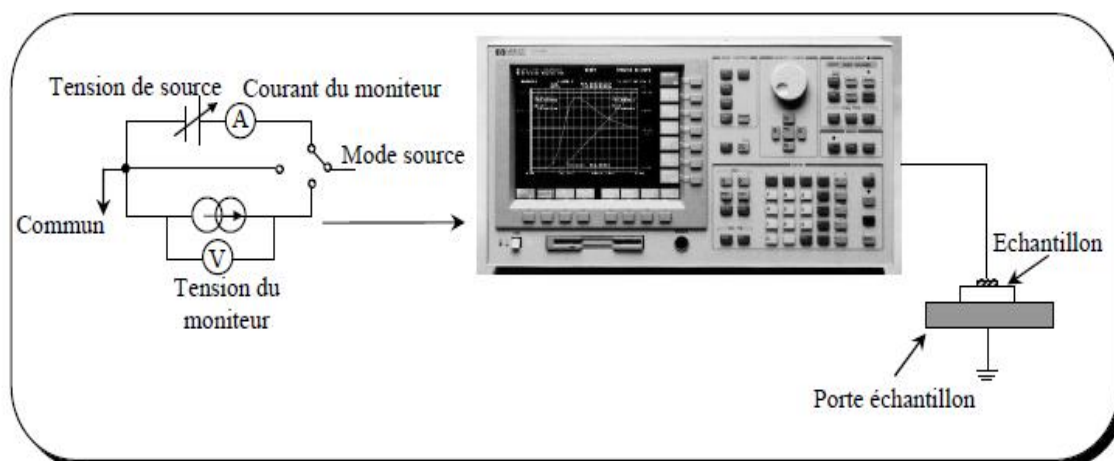


Figure III.4 : Représentation du banc de mesure HP 4155 B utilisé pour la caractérisation courant-tension.

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.

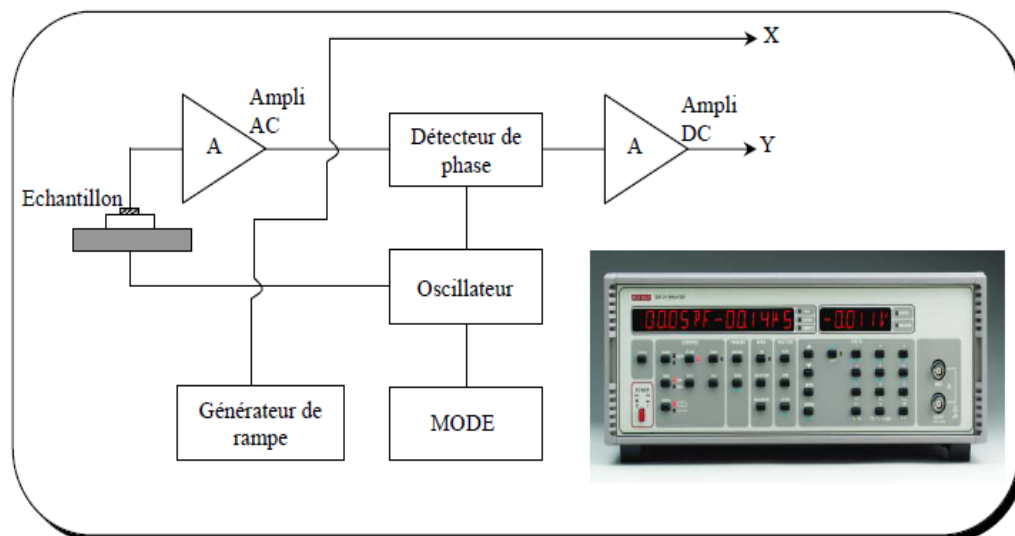


Figure III.5 : Principe de la mesure capacité-tension en fonction de fréquence.

Des mesures en différentes fréquence 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 III.5.

III.4 Mesures expérimentales en fonction de la fréquence

III.4.1 Caractéristiques C-V-f

Nous avons commencé par étudier les caractéristiques capacitance-tension de l'échantillon 1. La figure III.6 montre les caractéristiques C-V mesurées de la diode Schottky Au / GaN / n-GaAs par rapport à la polarisation appliquée pour différentes fréquences de 1kHz à 1MHz à température ambiante. Comme on peut le voir sur la figure III.6, les courbes de capacitance sont liées par la tension appliquée et la fréquence.

En polarisation directe, la capacité augmente lorsque la fréquence diminue. Cependant, en polarisation inverse, les courbes C-V restent presque inchangées pour différentes valeurs de fréquence. Typiquement, le C-V dans la région de polarisation directe n'a pas d'importance, mais dans notre cas; nous avons remarqué un pic anormal et une capacité négative (NC) qui méritaient d'être mentionnés, nous pouvons remarquer que les pics dans les caractéristiques dépendent de la variation de fréquence, leurs valeurs diminuent avec la croissance de fréquence, des résultats similaires ont été mentionnés dans la littérature [48]–[54] Ces pics peuvent être attribués ; soit à la présence d'une distribution continue des états de l'interface [50], [55], [56] , soit à des contacts inverses imparfaits et à des résistances en série [50], [57], [58] .

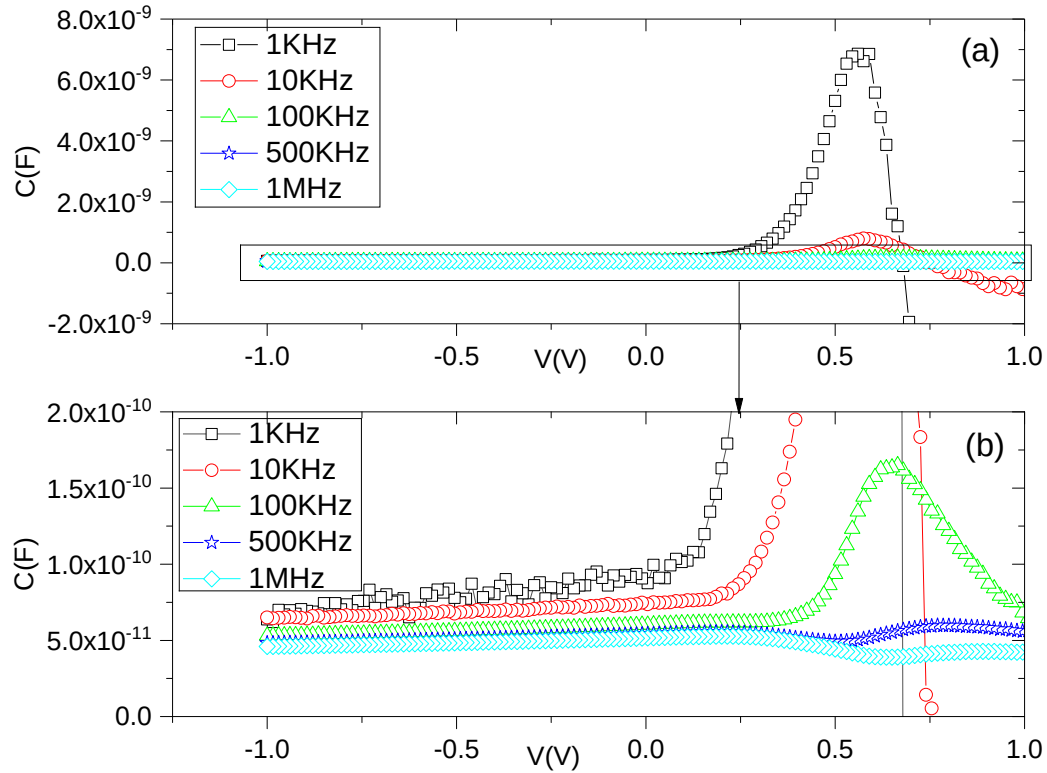


Figure III.6: (a) Variation C-V de la structure Au / GaN / GaAs échantillon 1 à différentes fréquences (b) Portion agrandie de la variation de C-V de la structure Au / GaN / GaAs à différentes fréquences.

Nous avons noté une valeur négative de la capacité en polarisation directe dans les basses fréquences (10 kHz et 1 kHz), ce phénomène a été observé sur des interfaces métal-semiconducteur avec polarisation directe [48], [59]–[64]. Wu [48] a attribué les phénomènes à la perte d'impact des électrons dans les états d'interface occupés sous forte injection d'électrons chauds. Mikhelashvili [64] a soutenu que la modulation non linéaire de la partie neutre de la conductance semi-conductrice, piégeage et détrempage aux états d'interface est la cause de la capacité négative, une autre interprétation de la capacité négative basée sur l'analyse transitoire temporelle de courant en réponse à une petite tension est donnée par Ershov [60].

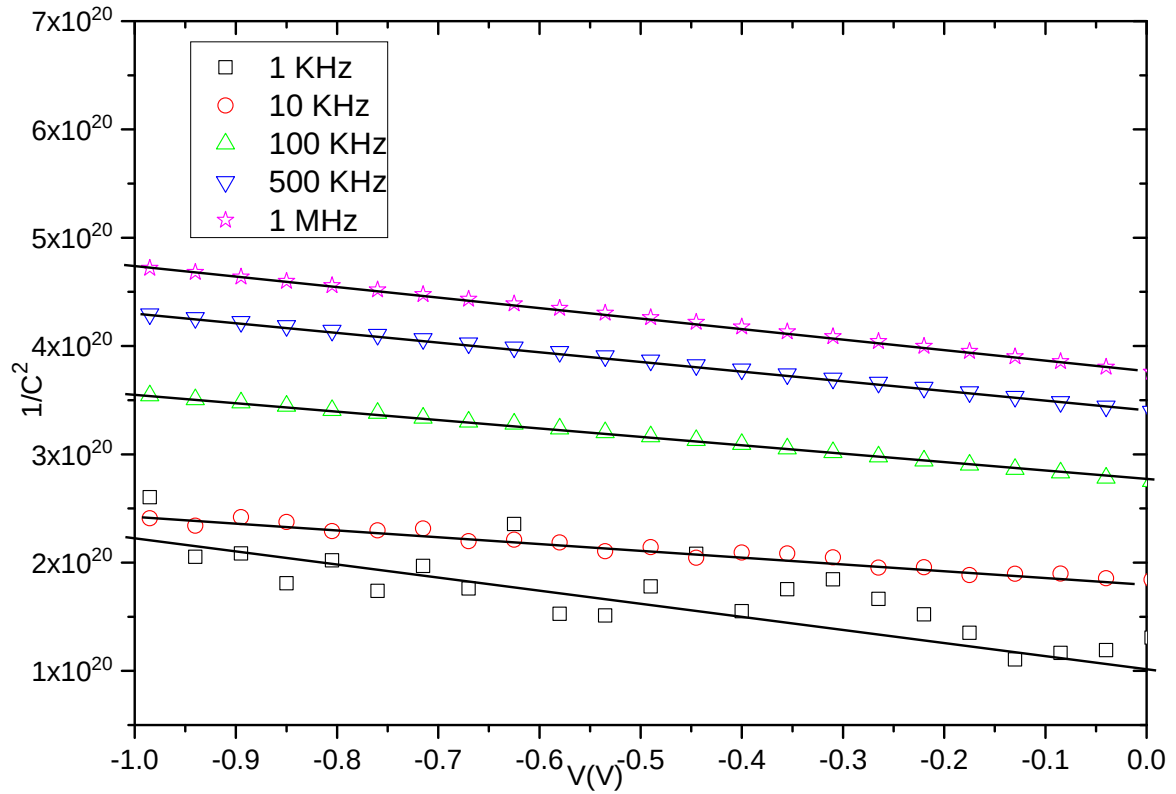


Figure III.7 Variation de C^{-2} -V de la structure Au / GaN / GaAs à différentes fréquences échantillon 1

Les caractéristiques du C^{-2} -V à la température ambiante mesurées à des fréquences différentes pour une gamme de 1 kHz à 1 MHz sont montrées sur la figure III.7. Les caractéristiques C^{-2} -V en polarisation inverse ont clairement pris une forme linéaire, cohérente avec le modèle de diode Schottky, la pente nous permet de déterminer la densité des donneurs [9] en utilisant la relation de Mott-Schottky [65] :

$$\frac{1}{C^2} = \frac{-2}{A^2 \epsilon_0 \epsilon_s q N} \left(\phi_b - V_n + V - \frac{kT}{q} \right) \quad (\text{III.1})$$

Où A est la surface de la diode, ϵ_s est la constante diélectrique de GaAs, N est la concentration totale d'impuretés accepteur, y compris la densité de défauts, q est la charge d'électrons et V est l'amplitude de la polarisation inverse.

$$\phi_b = V_n + V_d + \frac{kT}{q} \quad (\text{III.2})$$

$$V_n = \frac{kT}{q} \ln \left(\frac{N_c}{N_d} \right) \quad (\text{III.3})$$

Où N_c est la densité équivalente (ou effective) d'états dans la bande de conduction donnée par $N_c = 2 (2\pi m^* kT / h^2)^{3/2}$, où $m^* = 0,067m_0$, et sa valeur est $0,4 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ [40], l'équation qui décrit la pente C^{-2} est la suivante [65] :

$$\frac{\Delta C^{-2}}{\Delta V} = \frac{-2}{A^2 \varepsilon_0 \varepsilon_s q N} \quad (\text{III.4})$$

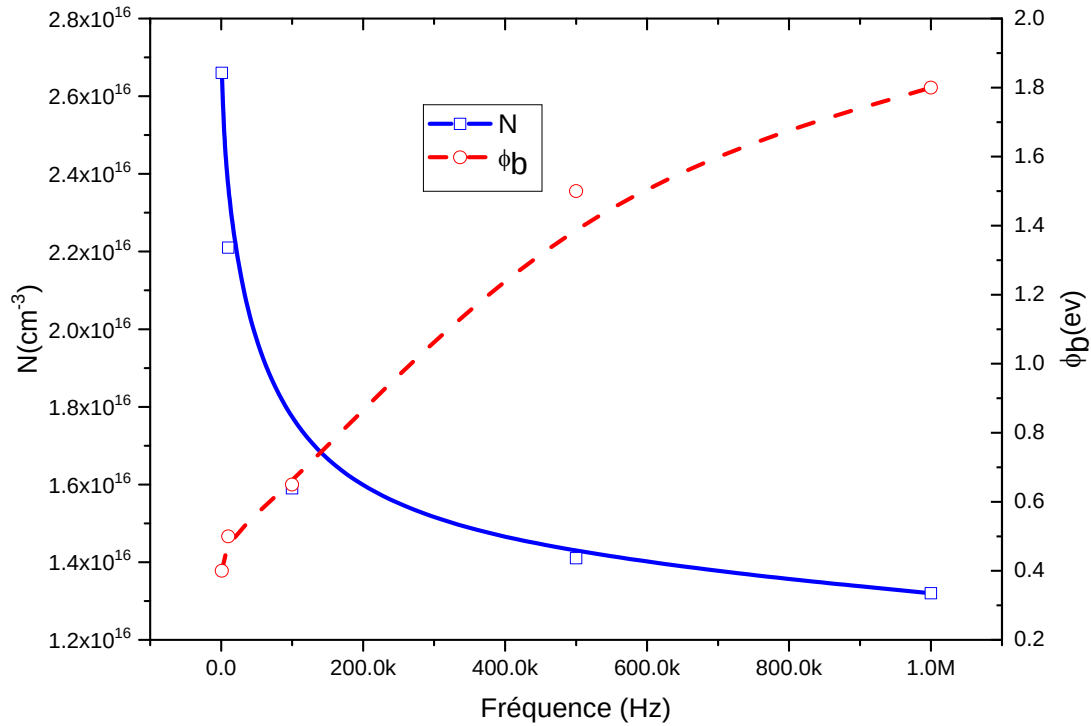


Figure III.8: La concentration totale des impuretés du donneur et la hauteur de la barrière par rapport à la fréquence de la structure Au / GaN / GaAs échantillon 1

Les concentrations totales des impuretés du donneur en fonction de la fréquence, extraites de la pente C^{-2} -V à température ambiante sont représentées sur la figure III.8. A partir de cette figure, on constate que la concentration totale diminue lorsque

la fréquence augmente ; de $2.7 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ pour la fréquence la plus basse (1kHz) à $1.3 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ pour la plus haute (1MHz), ce comportement de N s'explique par la distribution des états d'interface et le fait que les états d'interface ne puissent pas suivre les signaux alternatifs [66] .Il existe différents types d'états d'interface ayant des durées de vie différentes. Aux basses fréquences, tout l'état d'interface suit le signal appliqué, aux fréquences intermédiaires, moins d'états d'interface sont affectés par le signal alternatif, ce qui diminue la capacité mesurée. À haute fréquence, la capacité est indépendante des états de l'interface, cela se produira lorsque la constante de temps est trop longue pour permettre à la charge d'entrer et de sortir des états d'interface en réponse à un signal appliqué [49] . Nous pouvons déduire la valeur de la concentration de dopage de la courbe à haute fréquence. La valeur de la concentration de dopage déduite de C^{-2} -V est supérieure à la valeur donnée par le fournisseur et s'explique par l'effet de l'accumulation d'électrons à l'interface GaN-GaAs due à la différence d'affinité électronique des deux matériaux. Si nous utilisons la relation de Mott-Schottky, la valeur de la concentration déduite inclut la concentration de dopage et toutes les charges supplémentaires qui peuvent être contenues dans le volume de semiconducteur. La hauteur de la barrière Φ_b (C-V) augmente avec la croissance de la fréquence (comme le montre la figure III.6). Des résultats similaires ont été rapportés par plusieurs auteurs[51], [66], [67] .

III.4.2 Caractéristiques G-V-f

La conductance mesurée en fonction de la tension appliquée de l'échantillon 1 de la structure Au / GaN / GaAs à différentes fréquences dans une gamme de fréquences allant de 1 kHz à 1 MHz à la température ambiante (300 K) est montrée en figure III.9. La gamme de tension appliquée a été prise entre -2V et +2 V. Les courbes G / ω -V montrent que le G / ω est influencé par la tension de polarisation et la fréquence.

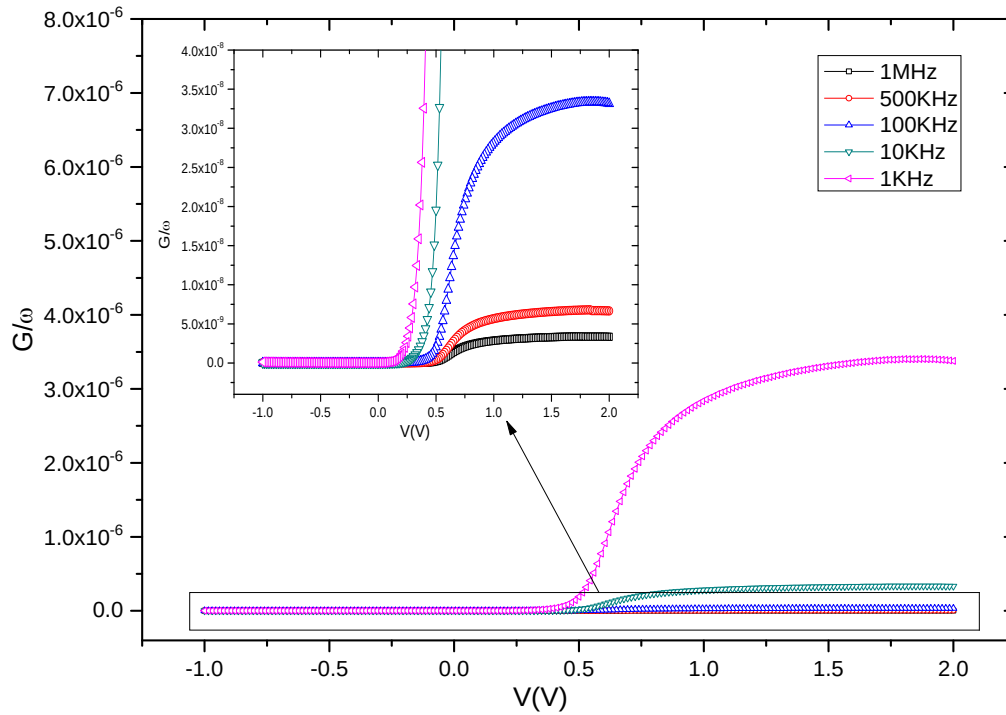


Figure III.9: Variation de G / ω - V de Au / GaN / GaAs à différentes fréquences échantillon 1

La conductance est très faible pour une polarisation inverse inférieure à 0,5 V et augmente rapidement après cela, la dépendance à la tension est le résultat des propriétés de barrière de Schottky. Nous pouvons également voir que la conductance diminue avec l'augmentation de la fréquence appliquée en raison des charges supplémentaires des états de l'interface qui répondent au signal alternatif à basse fréquence.

Les caractéristiques de capacité et de conductance de la diode Au / GaN / GaAs sont affectées par de nombreux paramètres tels que la résistance en série et la densité des états de l'interface. Ainsi, la capacité corrigée C_{aj} et la conductance corrigée G_{aj} peuvent être calculées par les relations suivantes [56], [68], [69].

$$C_{aj} = \frac{(G_m^2 + (\omega C_m)^2) C_m}{a^2 + (\omega C_m)^2} \quad (III.5)$$

$$G_{aj} = \frac{(G_m^2 + (\omega C_m)^2) a}{a^2 + (\omega C_m)^2} \quad (III.6)$$

$$a = G_m - (G_m^2 + (\omega C_m)^2) R_s \quad (III.7)$$

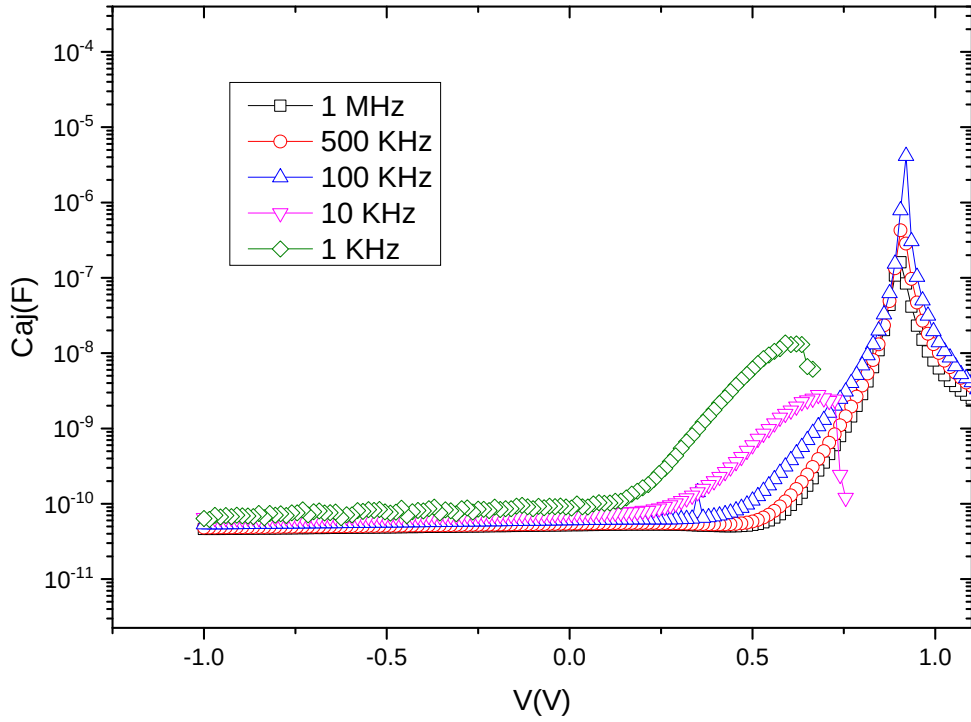


Figure III.10: Capacité ajustée en fonction de la tension à différentes fréquences
échantillon 1

C_{aj} et G_{aj} sont respectivement la capacité et la conductance ajustées pour la résistance série,. Les figues. III.10 et III.11 montrent les diagrammes C_{aj} -V et G_{aj} -V en fonction des fréquences. On observe que le C_{aj} et le G_{aj} diminuent avec l'augmentation de la fréquence. Le courbe de la conductance ajustée donne un pic, ce qui prouve que le transfert de charge peut avoir lieu à travers l'interface [50]. Les courbes de C_{aj} et G_{aj} prouvent avoir effet majeur de la résistance en série dans des conditions de haute fréquence. L'admittance Y_{ma} à travers une structure MIS en forte condition d'accumulation, en termes de capacité C_m et de conductance G_m parallèle équivalente, est donnée par [68] ;

$$Y_{ma} = [G_m + j \omega C_m] \quad (III.8)$$

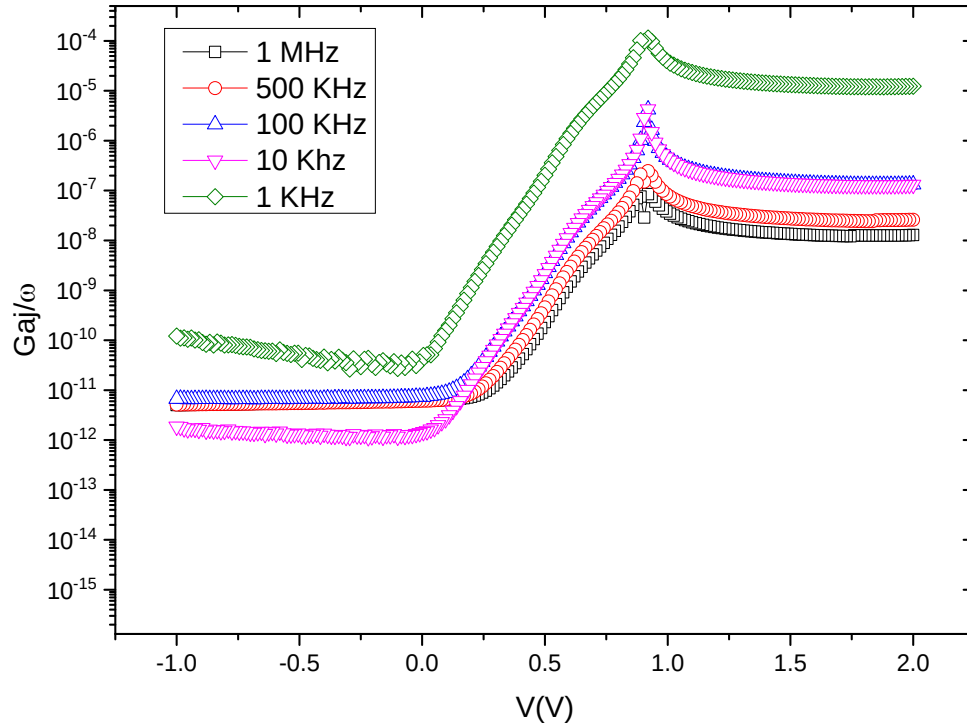


Figure III.11: Conductance ajustée en fonction de la tension à différentes fréquences échantillon 1

L'impédance mesurée (Z_{ma}) à forte accumulation en utilisant le circuit RC parallèle [14] est équivalente à l'impédance totale du circuit

$$Z_{ma} = \frac{1}{G_{ma} + j\omega C_{ma}} \quad (\text{III.9})$$

En comparant la partie réelle et imaginaire de l'impédance, la résistance en série est donnée par

$$R_s = \frac{G_{ma}}{G_{ma}^2 + (\omega C_{ma})^2} \quad (\text{III.10})$$

La résistance série (R_s) peut être déterminée à partir de la capacité mesurée (C_{ma}) et de la conductance (G_{ma}) dans une région d'accumulation forte à haute fréquence (> 500 kHz).

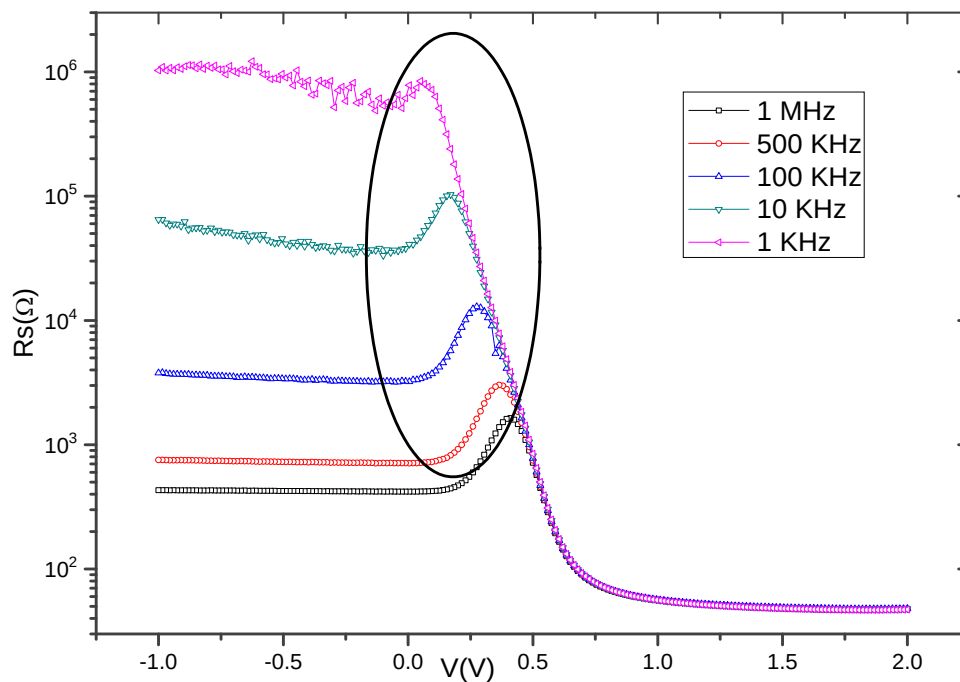


Figure III.12: Variation de la résistance série par rapport à la fréquence appliquée de la structure Au / GaN / GaAs échantillon 1

La résistance série en fonction de la tension est calculée à partir des mesures C-V et G/ω -V mesurées selon l'équation III.10 et montré sur la figure III.12 pour différentes fréquences. Nous déduisons de la figure, la résistance série dépend à la fois de la fréquence et de la tension dans la condition de polarisation inverse, la résistance série donne un pic selon la fréquence dans la plage de tension de polarisation de 0,3 V à 0,6 V. Ce phénomène a été obtenu dans d'autres travaux [50], [70]. Pour des polarisations supérieures à 0,6V, nous observons clairement que la résistance série est indépendante de la fréquence et qu'elle ne change pas significativement dans une condition de haute fréquence.

La densités d'états d'interface (N_{ss}) en fonction de fréquence a été obtenue en utilisant la technique de conductance à fréquence unique de Hill-Coleman [71]. Selon cette méthode, les valeurs N_{ss} peuvent être calculées en utilisant l'équation suivante :

$$N_{ss} = \frac{2}{qA} \frac{(G_m / \omega)_{\max}}{\left((G_m / \omega)_{\max} C_i\right)^2 + (1 - C_m / C_i)^2} \quad (\text{III.11})$$

où A est l'aire de la diode, ω est la fréquence angulaire, C_m et (G_m / ω) sont respectivement la capacité et la conductance mesurées, C_i est la capacité de la couche d'interface et peut être obtenue à partir de C_{ma} et G_{ma} dans la région d'accumulation forte (2V) à haute fréquence (1 MHz) en utilisant la relation[56]

$$C_i = C_{ma} \left[1 + \frac{G_{ma}^2}{(\omega C_{ma})^2} \right] \quad (\text{III.12})$$

La densité d'états N_{ss} calculé à partir de l'équation (III.11) en fonction de la fréquence est représentée sur la figure III.13.

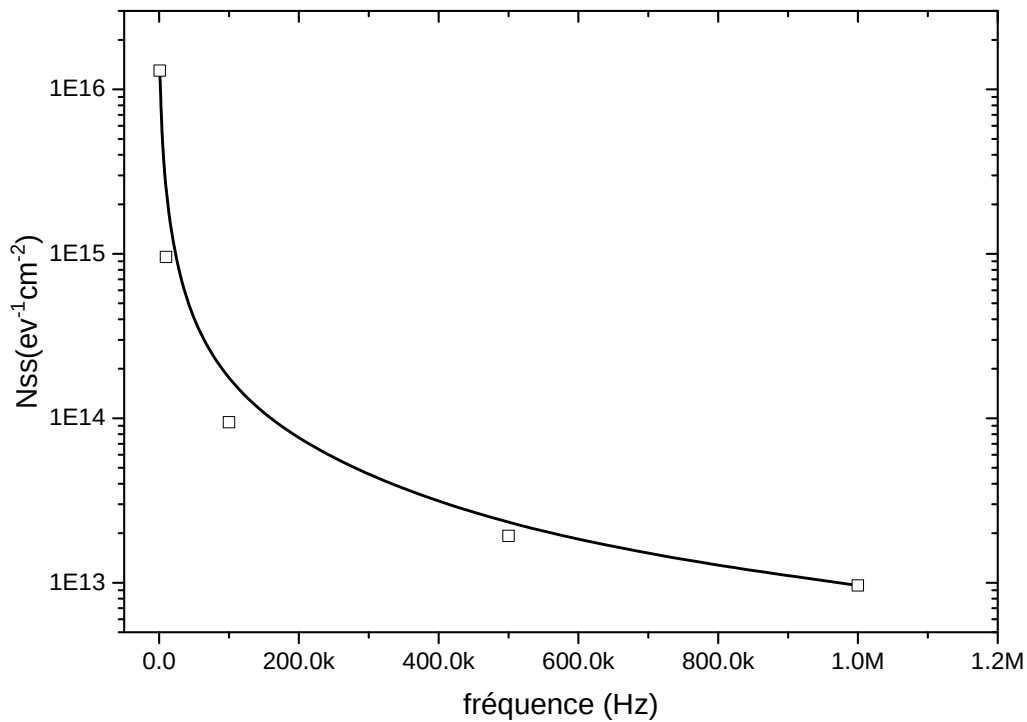


Figure III.13: Variation de la densité d'états de l'interface par rapport à la fréquence de la structure Au / GaN / GaAs échantillon 1

Les valeurs N_{ss} diminuent avec l'augmentation de fréquence. Aux basses fréquences, presque tous les états d'interface ($10^{16}\text{ev}^{-1}\text{cm}^{-2}$) répondent au signal alternatif, quand

la fréquence augmente moins les états sont affectés par le signal jusqu'à ce que la valeur minimale ($10^{13} \text{ eV}^{-1} \text{ cm}^{-2}$) soit atteinte.

Les paramètres électriques extraits des courbes C-V et G-V sont donnés dans le tableau III.2. La concentration de dopage Nd est égale à $1,3 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ et elle est très supérieure à la valeur donnée par le fournisseur du fait de l'effet de nitruration. La structure est caractérisée par une faible résistance série (47Ω) et une hauteur barrière (ϕ_b) égale à 1,8eV à haute fréquence et la valeur de la capacité d'interface est 3×10^{-7} F. La densité d'états d'interface maximale est estimée à $10^{16} \text{ eV}^{-1} \text{ cm}^{-2}$ pour des fréquences basses.

Paramètre	Valeur 1 MHz	Valeur 1 KHz
Concentration de dopage (Nd)	$1.3 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$	$2.6 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$
Résistance série (Rs)	47Ω	47Ω
Densité d'états (Nss)	$10^{13} \text{ eV}^{-1} \text{ cm}^{-2}$	$10^{16} \text{ eV}^{-1} \text{ cm}^{-2}$
Hauteur de barrière (ϕ_b)	1.8eV	0.4 eV

Tableau III.2. Paramètres expérimentaux obtenus à partir des mesures C-V G-V sur les structures Au / GaN / GaAs échantillon 1

III.6 L'effet de l'épaisseur de la couche de GaN

L'épaisseur de la couche GaN joue un rôle important sur les caractéristiques de notre dispositif, Pour étudier ces effets, nous avons utilisé une méthode basée sur le travail de Chattopadhyay [72], l'analyse des caractéristiques électriques pour les deux échantillons à différentes épaisseurs de la couche de GaN (0.7 nm et 2.2 nm) en utilisant les caractéristiques C-V expérimentales mesurées en haute et basse fréquence et les caractéristiques I-V, afin d'extraire principalement la densité d'états de l'interface et d'autres paramètres électriques comme la hauteur de la barrière (ϕ_b), le facteur d'idéalité (n) et le potentiel de surface (ψ_s). Les mesures I-V directes pour les deux échantillons à température ambiante sont montrées sur la figure III.14.

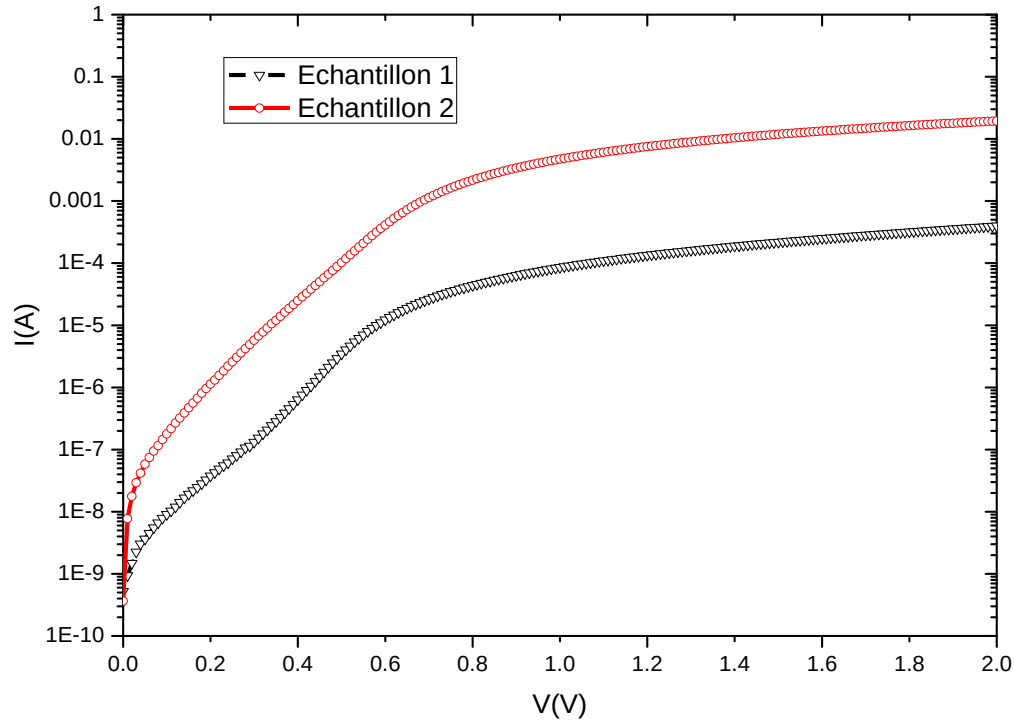


Figure III.14: Courant direct par rapport aux caractéristiques de tension à température ambiante des structures Au / GaN / GaAs.

Nous notons que le comportement de ces échantillons peut être décrit en utilisant les équations d'émission thermoïnique à polarisation directe, le courant est donné par [73]:

$$I = I_0 \exp\left(-\frac{q(V - IR_s)}{kT}\right) \quad (\text{III.13})$$

$$I_0 = AA^* T^2 \exp\left(-\frac{q\phi_b}{kT}\right) \quad (\text{III.14})$$

Où q est la charge d'électrons, k est la constante de Boltzmann, T est la température absolue, A est la surface effective de la diode, A^* est la constante de Richardson effective ($8.16 \text{ A cm}^{-2} \text{ K}^2$ pour GaAs)

A basse tension (0-500 mV), la variation des caractéristiques I-V est linéaire, néanmoins lorsque la tension appliquée augmente, plusieurs paramètres interviennent

pour perturber la linéarité des caractéristiques I-V, tels que les états d'interface Nss et les résistances série RS [40].

A partir de la figure, on peut remarquer clairement que l'amplitude du courant continu de l'échantillon 2 (l'épaisseur de la couche GaN est 2,2 nm) est supérieure à celle de l'échantillon 1 (l'épaisseur de la couche GaN est 0,7 nm), ce qui signifie que l'épaisseur de la couche GaN joue un rôle important dans les caractéristiques électriques de la structure et on peut en conclure que plus la nitruration du GaAs est importante, meilleure sera la conductivité du dispositif en polarisation directe. La hauteur de la barrière et le facteur d'idéalité avait été extrait en utilisant les caractéristiques expérimentales I-V et montré dans le tableau III.3.

Echantillon	Epaisseur GaN	Hauteur de la barrière	Facteur d'idéalité
Echantillon 1	0.7 nm	0.64	2.86
Echantillon 2	2.2 nm	0.56	1.43

Tableau III.3. Paramètres expérimentaux extraits des mesures I-V sur les structures Au / GaN / GaAs

Il est bien établi que la valeur de la hauteur de la barrière peut être réduite par l'insertion d'une couche interfaciale dans les structures de Schottky [74]–[76]; la hauteur de la barrière a diminué lorsque l'épaisseur de la couche interfaciale a augmenté, le facteur d'idéalité a considérablement diminué de 2,86 à la moitié (1,43) en raison de la nitruration. Le courant électrique d'une diode Schottky peut s'écrire en fonction du potentiel de surface.

$$I = AA^*T^2 \exp\left(-\frac{qV_n}{kT}\right) \exp\left(-\frac{q\psi_s}{kT}\right) \quad (\text{III.15})$$

Alors on peut déduire l'expression du potentiel de surface ;

$$\psi_s = \frac{kT}{q} \ln\left(\frac{AA^*T^2}{I}\right) - V_n \quad (\text{III.16})$$

La figure III.15 représente le potentiel de surface que nous avons extrait en utilisant l'équation. (III.16) et les mesures de courant électrique en remplaçant les données expérimentales en relation analytique.

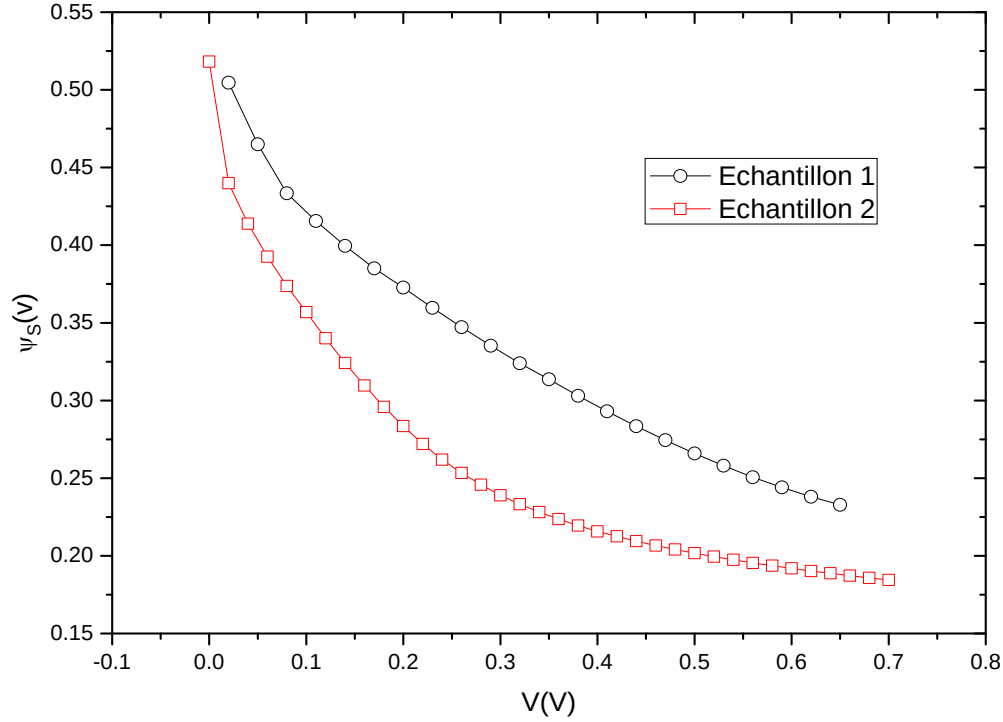


Figure III.15 Variation du potentiel de surface (ψ_s) avec la tension directe (V) pour les structures Au / GaN / GaAs

V_n est la différence de potentiel entre le bas de la bande de conduction (EC) et le niveau de Fermi (EFS) du semiconducteur donnée par [9]

$$V_n = \frac{kT}{q} \ln \left(\frac{N_c}{N_d} \right) \quad (\text{III.17})$$

La densité d'états effective dans la bande de conduction est donnée par $N_c = 2 (2\pi m^* kT/h^2)^{3/2}$, où $m^* = 0,067m_0$, et sa valeur est $0,4 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ pour GaAs [38]. La concentration de dopage N_d a été extraite de la pente des caractéristiques C^{-2} (V) à température ambiante mesurée à une fréquence de 1 MHz. A partir de la figure III.15, nous remarquons que le potentiel de surface du premier

échantillon est plus grand et plus linéaire que celui du second qui peut être attribué à l'effet de passivation de la nitruration GaAs.

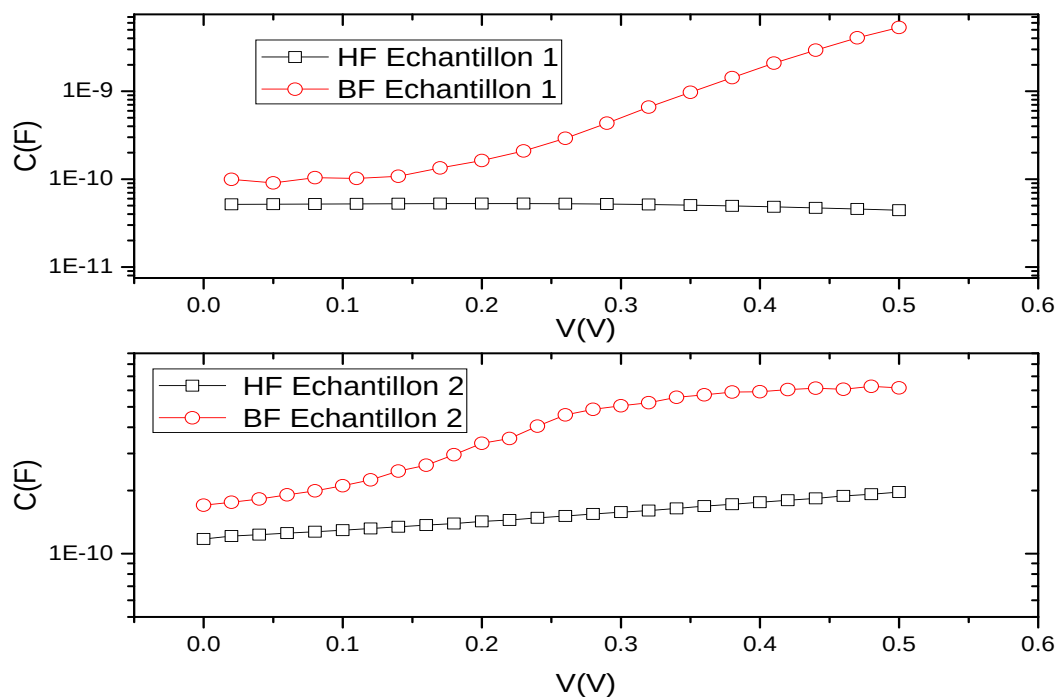


Figure III.16 : C-V de polarisation directe expérimentale à deux fréquences différentes, de la structure Au / GaN / GaAs

Les capacités à haute fréquence des deux échantillons sont fondamentalement constantes à travers les valeurs de polarisation directe alors que les capacités à basse fréquence augmentent pour des valeurs supérieures à 0,2 V, ce phénomène peut s'expliquer par la présence des états d'interface qui suivent le signal dans les basses fréquences. et ne peuvent pas le faire avec les hautes fréquences [66].

Les états d'interface ont des durées de vie différentes. Aux basses fréquences, tous les états d'interface peuvent suivre le signal alternatif, aux fréquences moyennes, moins d'états d'interface sont liés par le signal alternatif, ce qui réduit la capacité mesurée. À haute fréquence, théoriquement aucun état de l'interface suit le signal AC, donc elles n'ont aucun effet sur la capacité [49] , typiquement les basses fréquence sont de l'ordre 10 kHz ou moins et haute fréquence est 1MHz et plus [77], [78]

Les mesures C-V de la structure à deux fréquences différentes (10 kHz, 1 MHz) était représentées sur la figure III.16.

La capacité à basse fréquence augmente avec la polarisation directe, les états d'interface répondent au signal alternatif, la capacité à basse fréquence est donnée par [72], [79].

$$C_{LF} = \frac{\sqrt{q\epsilon_s N_d / 2\psi_s} + qN_{ss}}{1 + qjR_s / kT + \frac{\delta}{\epsilon_i} \left(\sqrt{q\epsilon_s N_d / 2\psi_s} + qN_{ss} \right)} \quad (\text{III.18})$$

Où d est l'épaisseur de la couche interfaciale, Nss est la densité d'état de l'interface et ϵ_i et ϵ_s représentent respectivement la permittivité de la couche interfaciale et celle du semiconducteur. La capacité à haute fréquence reste pratiquement constante, les états de l'interface ne peuvent pas suivre le signal AC, la capacité peut être exprimée comme [72], [79]

$$C_{HF} = \frac{\sqrt{q\epsilon_s N_d / 2\psi_s}}{1 + qjR_s / kT + \frac{\delta}{\epsilon_i} \left(\sqrt{q\epsilon_s N_d / 2\psi_s} \right)} \quad (\text{III.19})$$

En utilisant les équations (III.18) et (III.19), la densité d'état d'interface Nss peut être écrite comme [72], [79]

$$N_{ss} \approx \sqrt{q\epsilon_s N_d / 2\psi_s} \frac{C_{LF} - C_{HF}}{qC_{HF}} \quad (\text{III.20})$$

La densité d'état d'interface Nss, a été calculée à partir de la caractéristique C-V expérimental à basse fréquence (mesuré à 10 kHz) et de la caractéristique C-V à haute fréquence (mesuré à 1 MHz) en utilisant l'équation III.20

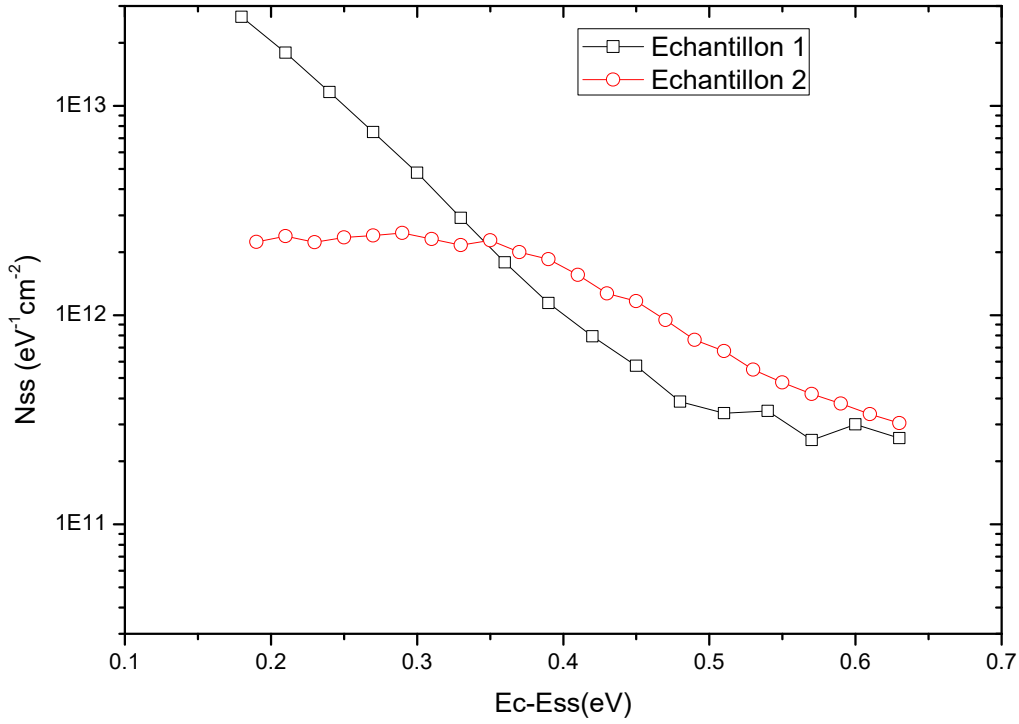


Figure III.17: La distribution d'états d'interface des structures Au / GaN / GaAs

Les états d'interface Ess par rapport au bas de la bande de conduction à la surface du semiconducteur sont donnés par [80]

$$E_c - E_{ss} = q\Phi_{bn} - qV \quad (\text{III.21})$$

L'examen de la figure III.17 montre que la densité d'états d'interface diminue à l'approche du milieu de la bande interdite, de $3,7 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2} \text{ eV}^{-1}$ en $(E_c - 0,2) \text{ eV}$ à $5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2} \text{ eV}^{-1}$ en $(E_c - 0,6) \text{ eV}$ pour l'échantillon 1 et de $4 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2} \text{ eV}^{-1}$ en $(E_c - 0,1) \text{ eV}$ à $5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2} \text{ eV}^{-1}$ en $(E_c - 0,6) \text{ eV}$ pour l'échantillon 2, la densité d'états d'interface diminue de $1,12 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2} \text{ eV}^{-1}$ à $(E_c - 0,25) \text{ eV}$ pour l'échantillon 1 (0,7nm GaN) à $3,12 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2} \text{ eV}^{-1}$ à peu près à la même position pour l'échantillon 2 (2,2 nm GaN). Cette diminution est le résultat de l'effet d'augmentation épaisseur de la couche interfaciale GaN sur GaAs.

Les résultats obtenus de Nss sont en accord avec d'autres études réalisées avec méthodes diverses telles que Kach et al [39] (méthode capacité-tension en haute

fréquence) et Rabhi et al [40] et Ebeoğlu et al [25] (méthode courant-tension avec/sans résistance série).

III.7 Conclusion

Dans ce chapitre, une diode Schottky Au / GaN / GaAs a été préparée en utilisant une source de plasma d'azote à décharge radiofréquence puis les caractéristiques de capacité-tension (C-V) et de conductance-tension (G / ω -V) à température ambiante pour différentes fréquences entre 1 kHz et 1 MHz de cette structure ont été étudiés. Les résultats ont montré que les caractéristiques C-V et G-V dépendent fortement de la fréquence, en particulier de la basse fréquence. Ce comportement indique la présence d'une distribution continue des états d'interface qui peuvent facilement suivre le signal alternatif à basse fréquence, d'autre part, à haute fréquence ; il y a un effet majeur de la résistance série sur les mesures C-V et G-V. Un phénomène de capacitance négative a été observé dans les mesures à basse fréquence. La résistance série donne un pic dépend inversement avec la fréquence, il a été montré que la densité d'états d'interface diminue exponentiellement avec l'augmentation de la fréquence.

Pour étudier les effets de l'épaisseur de la couche GaN sur les caractéristiques de notre dispositif, nous avons analysé les caractéristiques électriques pour les deux échantillons à différentes épaisseurs de la couche de GaN (0.7 nm et 2.2 nm) en utilisant les caractéristiques C-V expérimentales mesurées en haute et basse fréquence et les caractéristiques I-V

L'examen des paramètres électriques de la hauteur de la barrière, du facteur d'idéalité et du potentiel de surface extrait à l'aide d'une mesure de polarisation directe I-V a montré que la nitruration peut améliorer la conductivité et réduire la hauteur de barrière et les valeurs du facteur d'idéalité .

Les profils de distribution d'énergie du Nss ont été obtenus à partir des caractéristiques C-V mesurées à hautes et basses fréquences. La passivation de la surface du GaAs avec la formation de la couche interfaciale du GaN améliore les caractéristiques de la diode en réduisant les valeurs de densité des états d'interface.

Chapitre IV : Modélisation et simulation de structures métal/GaAs nitrurés

IV.1 Introduction

Les mesures électriques liées à la fréquence permettent d'étudier les états d'interface notamment leurs distributions d'énergie continue, la prédiction de la forme exacte de cette distribution de densité est quasi impossible en raison de la complexité de la zone d'interface [81] .

Dans ce travail, nous étudions et modélisons les propriétés électriques de la diode Au / GaN / GaAs, afin d'établir un modèle de simulation des caractéristiques C-V et G-V avec distribution d'énergie continue des états d'interface.

Dans ce chapitre, nous allons utiliser le programme de simulation que nous avons développé afin d'interpréter l'évolution des caractéristiques électriques dans une structure Schottky à base de GaAs nitruré. Pour cela, nous avons utilisé un modèle numérique de calcul des caractéristique C-V et G-V qui peuvent 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 la charge et courant électriques et par conséquence la capacité et la conductance.

Dans une deuxième partie notre programme est étendu pour étudier l'effet de différents tels que ; la forme et les valeurs de distribution des états de l'interface et le dopage ainsi que le travail de sortie d'Or.

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

VI.2 Modélisation de capacité et de conductance de structure :

La capacité différentielle est définie comme étant la somme des charges électriques du conducteur divisée par le potentiel du conducteur :

$$C = \frac{\Delta Q}{\Delta V} \quad (\text{IV.1})$$

Où ΔQ est la différence de charge induite dans la structure pour deux tensions externes très proches de différence ΔV [54] .

La conductance différentielle est la facilité avec laquelle un courant électrique passe et elle peut être calculée comme suit:

$$G = \frac{\Delta I}{\Delta V} \quad (\text{IV.2})$$

Où ΔI est la différence de courant de la structure pour deux tensions externes très proches de différence ΔV [82] .

les deux formules ci-dessus impliquent que pour calculer la capacité et la conductance, nous devons calculer la charge électrique et le courant électrique, ce qui est possible par la résolution numérique d'un système des équations de base des semi-conducteurs, y compris les équations de Poisson et de continuité et les équations de transport, comme suit :

$$\frac{\partial \phi}{\partial x} = \frac{q}{\varepsilon} (-p + n - p_t + n_t - N_D^+ + N_A^-) \quad (\text{IV.3})$$

$$\frac{1}{q} \frac{\partial j_n}{\partial x} = U_n \quad (\text{IV.4})$$

$$\frac{1}{q} \frac{\partial j_p}{\partial x} = -U_p \quad (\text{IV.5})$$

$$j_n = -qn\mu_n \frac{\partial \phi}{\partial x} + qD_n \frac{\partial n}{\partial x} \quad (\text{IV.6})$$

$$j_p = -qp\mu_p \frac{\partial \phi}{\partial x} + qD_p \frac{\partial p}{\partial x} \quad (\text{IV.7})$$

Ici, ϕ est le potentiel électrostatique, ϵ est la constante diélectrique, n et p sont la densité d'électrons et de trous, N_A^- et N_D^+ sont les concentrations des impuretés ionisées d'accepteurs et des donneurs et p_T, 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), μ_n et μ_p sont les mobilités des électrons et des trous D_n et D_p sont constants de diffusion des électrons et des trous ,respectivement.

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

1. dans la bande de conduction (électrons) :

$$n = N_c \exp \left[\frac{-(E_c - E_{Fn})}{kT} \right] \quad (\text{IV.8})$$

E_c est 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 :

$$N_c = 2 \left(\frac{2m_c^* kT}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} \quad (\text{IV.9})$$

2. Dans la bande de valence (trous) :

$$p = N_v \exp \left[\frac{-(E_{Fp} - E_v)}{kT} \right] \quad (\text{IV.10})$$

E_v est l'énergie de la bande de valence, E_{Fp} variations de niveau Fermi des trous, k la constante de Boltzmann, T température.

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

$$N_v = 2 \left(\frac{2m_v^* kT}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} \quad (\text{IV.11})$$

N_D^+ , N_A^- sont les concentrations de dopage, n_t et p_t sont les concentrations piégées des porteurs d'électrons dans les états accepteurs et les trous dans les états donateurs qui sont [83] :

$$n_t = \int_{E_v}^{E_c} y_D(E_t) f_{ct}(E_t) dE_t \quad (\text{IV.12})$$

$$p_t = \int_{E_v}^{E_c} y_A(E_t) f_{vt}(E_t) dE_t \quad (\text{IV.13})$$

Où y_A et y_D sont la densité d'états accepteur et donneur par unité de volume et d'énergie, E_t est l'énergie de l'état de défaut à l'intérieur de l'intervalle interdit. À l'équilibre thermique, $f_{ct}(E)$ et $f_{vt}(E)$ sont respectivement les fonctions d'occupation des pièges accepteurs et donateurs donnés par la cinétique de Shockley-Hall-Read [84] :

$$f_{ct}(E) = \frac{C_n^{ct} p + C_p^{vt} n_1(E)}{C_p^{vt} (p + p_1(E)) + C_n^{ct} (n + n_1(E))} \quad (\text{IV.14})$$

$$f_{vt}(E) = 1 - f_{ct}(E) = \frac{C_n^{ct} n + C_p^{vt} p_1(E)}{C_p^{vt} (p + p_1(E)) + C_n^{ct} (n + n_1(E))} \quad (\text{IV.15})$$

C_n^{ct} , C_p^{ct} , C_n^{vt} , C_p^{vt} sont respectivement les sections de capture d'électrons et les trous par la bande de valence et les bords de conduction. Pour le taux de recombinaison-génération U , on trouve

$$U = U_n = U_p = \int_{E_v}^{E_c} y_A(E) \frac{\alpha_{nA} \alpha_{pA} np - e_{nA} e_{pA}}{\alpha_{nA} n + e_{nA} + \alpha_{pA} p + e_{pA}} + y_D(E) \frac{\alpha_{nD} \alpha_{pD} np - e_{nD} e_{pD}}{\alpha_{nD} n + e_{nD} + \alpha_{pD} p + e_{pD}} dE \quad (\text{IV.16})$$

Où e_{nA} , e_{pA} , e_{nD} , e_{pD} , sont les taux d'émission et α_{nA} , α_{pA} , α_{nD} , α_{pD} sont les constantes de capture.

Il existe différents modèles de la distribution continue des états pièges tels que : modèle exponentiel, modèle gaussien et du modèle uniforme [85]. Hasegawa et al.[86] indiquent que la densité des états de l'interface de la structure GaAs est un continuum d'état localisé en forme de U s'étendant sur toute la largeur de la bande interdite, augmentant exponentiellement du midgap au bord de la bande.

$$N_{VT}(E) = N_{VT0} \exp\left(\frac{E_V - E}{kT_V}\right) \quad (IV.17)$$

$$N_{CT}(E) = N_{CT0} \exp\left(\frac{E - E_C}{kT_C}\right) \quad (IV.18)$$

Ici, kT_C and kT_V sont les niveaux caractéristiques respectivement des états accepteur et donneur et N_{CT0} , N_{VT0} sont les densités par unité d'énergie respectivement au bord de la bande de conduction et de valence.

Plusieurs études ont suggéré une distribution gaussienne dans les structures MIS nitruré [87]–[90]. La distribution gaussienne des états pour les états pièges des donneurs et des accepteurs. :

$$N_{dbd}(E) = N_{GD} \exp\left(-\left(\frac{E - E_{GD}}{W_{GD}}\right)^2\right) \quad (IV.19)$$

$$N_{dba}(E) = N_{GA} \exp\left(-\left(\frac{E - E_{GA}}{W_{GA}}\right)^2\right) \quad (IV.20)$$

Où N_{GA} , N_{GD} sont les densités maximales des états d'interface accepteur et donneur respectivement, W_{GA} , W_{GD} sont les écart-type de la distribution gaussienne et E_{GD} , E_{GA} sont les positions de crête de la distribution des états de l'interface.

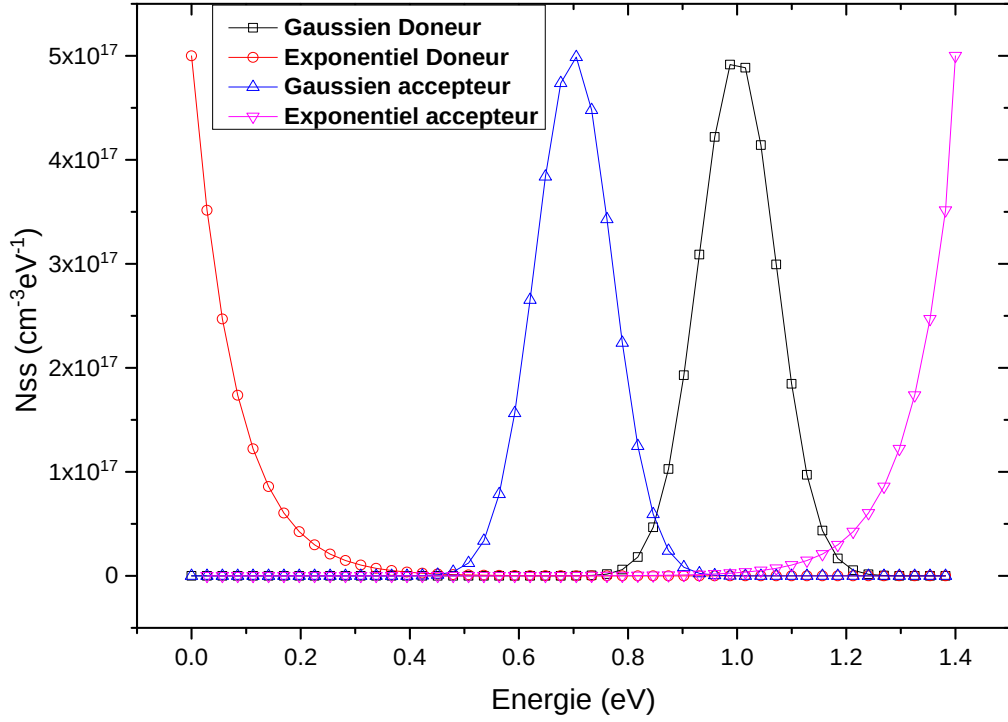


Figure IV.1: Profils de distribution gaussienne et exponentielle de la densité des états continue dans la bande interdite de GaAs

Dans notre étude, nous avons utilisé les deux types de distribution (gaussienne et exponentielle) pour obtenir une forme plus généralisée. La distribution énergétique des états de l'interface est la superposition de deux distributions exponentielles et de deux distributions gaussiennes de l'accepteur et du donneur (figure IV.1). La distribution totale des états de l'interface pour l'accepteur et le donneur sont respectivement :

$$y_A(E) = N_{VT0} \exp\left(\frac{E_v - E}{kT_v}\right) + N_{GA} \exp\left(-\left(\frac{E - E_{GA}}{W_{GA}}\right)^2\right) \quad (\text{IV.21})$$

$$y_D(E) = N_{CT0} \exp\left(\frac{E - E_c}{kT_C}\right) + N_{GD} \exp\left(-\left(\frac{E - E_{GD}}{W_{GD}}\right)^2\right) \quad (\text{IV.22})$$

IV.3 Solution numérique

La difficulté de résoudre ce système d'équations est trop de variables inconnues. Pour cela, il faut le simplifier à un système avec trois inconnues qui sont le potentiel électrostatique ϕ , et les deux concentrations n et p ou (J_n , et J_p). En raison des termes exponentiels trouvés dans les expressions de n et p , les équations ainsi formées sont fortement non linéaires. Les équations aux dérivées partielles sont discrétisées par l'utilisation de la méthode des différences finies. La grille a été construite avec des points non équidistants, la discrétisation appliquée étant suffisamment nette dans la jonction (GaN / GaAs) pour permettre un calcul précis [91].

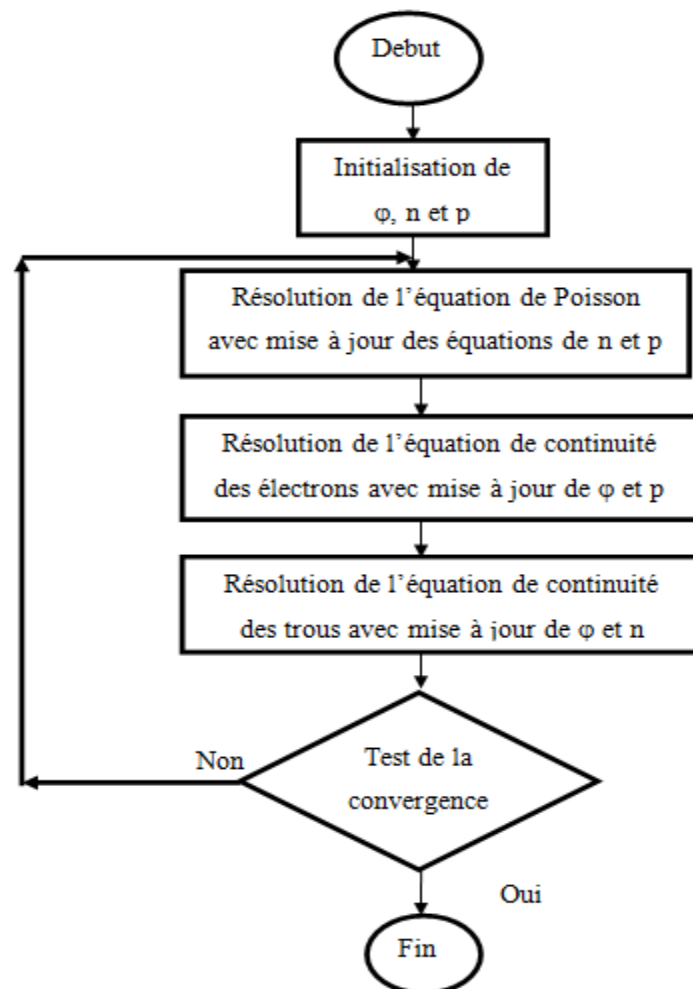


Figure IV.2 : Organigramme de résolution du système d'équations différentielles.

Parmi les méthodes numériques pouvant résoudre les équations différentielles, nous utiliserons la méthode des différences finies dans laquelle, après discrétisation du domaine d'étude, nous remplaçons l'équation différentielle par une équation aux différences. L'algorithme développé par Gummel [92] est utilisé pour résoudre le système. L'algorithme est basé sur la résolution successive des trois équations du système. Chaque équation est résolue sur la base d'une estimation de deux autres solutions inconnues. La valeur corrigée de chaque inconnue est mise à jour dans l'équation suivante. Ce processus itératif sera répété alternativement jusqu'à la convergence de trois équations. La figure IV.2 illustre l'organigramme de résolution du système d'équations différentielles.

IV.4 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 [40] :

- 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.

La définition du pas de 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.

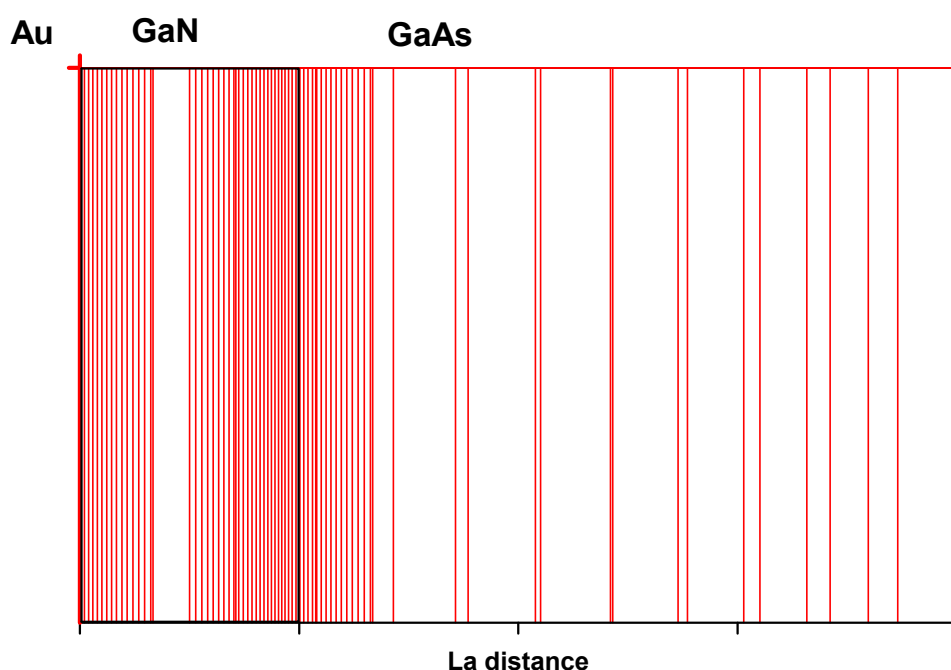


Figure VI.3: Maillage à pas variable de la diode Au/GaN/GaAs pris dans la simulation numérique à une dimension.

La Figure (VI.3) 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 et les interfaces)

VI.5 Paramètres de simulation

-Les paramètres de simulation sont divisés en deux types :

VI .5 .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.

Paramètres	GaAs	GaN
-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 ($\text{cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$)	8400	400
-Mobilité des trous en non dopé μ_p ($\text{cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$)	1000	350
-Épaisseur	3 μm	0.7 nm

Tableau VI.1: Valeurs des paramètres des matériaux GaN et GaAs à $T=300^\circ\text{K}$.

VI .5 .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
-Dopage	10^{14}	10^{13} - 10^{15}
-Travail de sortie d'Or	4.8	4.6-5.2
Queues de bandes : Nct ₀ (cm ⁻³ .eV ⁻¹) Nvt ₀ (cm ⁻³ .eV ⁻¹) Kt _A (meV) Kt _D (meV)	1.10^{18} 1.10^{18} 80 80	1.10^{17} - 1.10^{21} 1.10^{17} - 1.10^{21}
Liaisons pendantes: N _{dba} (cm ⁻³) N _{dbd} (cm ⁻³) w _{GD} (meV) w _{GA} (meV) E _{GA} (eV) E _{GD} (eV)	10^{17} 10^{17} 0,1 0,1 0,55 0,55	1.10^{12} - 1.10^{20} 1.10^{12} - 1.10^{20}

Tableau VI.2: Les paramètres physiques et technologiques et leur gamme de variation utilisée dans la simulation

IV.6 Résultats de simulation de caractéristique C-V

Nous avons étudié l'effet de deux paramètres majeurs dans la caractérisation des structures semi-conductrices en nitrure métallique : la distribution continue de l'énergie des paramètres d'états d'interface et la concentration de dopage du GaAs Nd.

IV.6.1 Effet de profils de distribution des états de l'interface

La première application de notre modèle pour la structure Au / GaN / GaAs a été faite pour différents profils de distribution des états de l'interface (exponentielle, gaussienne et les deux) avec une valeur maximale de $7 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2} \text{ eV}^{-1}$ au jusqu'à minimum de $7 \times 10^5 \text{ cm}^{-2} \text{ eV}^{-1}$ comme illustré sur la figure IV.4 et avec concentration de dopage ND = 10^{14} cm^{-3} .

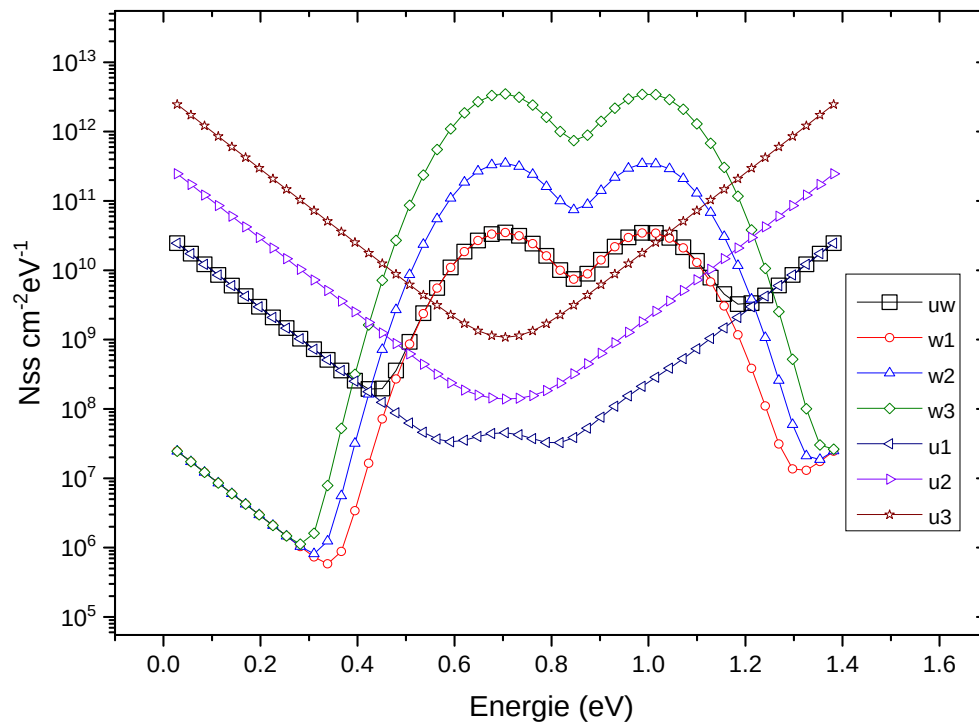


Figure IV.4: Les différents profils de distribution des états de l'interface dans l'espace d'énergie utilisé pour la simulation

		N_{CT}	N_{VT}	N_{db}
Exponentielle	U1	$5 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2} \cdot \text{eV}^{-1}$	$5 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2} \cdot \text{eV}^{-1}$	$5 \times 10^7 \text{ cm}^{-2} \cdot \text{eV}^{-1}$
	U2	$5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2} \cdot \text{eV}^{-1}$	$5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2} \cdot \text{eV}^{-1}$	$5 \times 10^7 \text{ cm}^{-2} \cdot \text{eV}^{-1}$
	U3	$5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2} \cdot \text{eV}^{-1}$	$5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2} \cdot \text{eV}^{-1}$	$5 \times 10^7 \text{ cm}^{-2} \cdot \text{eV}^{-1}$
Gaussienne	W1	$5 \times 10^7 \text{ cm}^{-2} \cdot \text{eV}^{-1}$	$5 \times 10^7 \text{ cm}^{-2} \cdot \text{eV}^{-1}$	$5 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2} \cdot \text{eV}^{-1}$
	W2	$5 \times 10^7 \text{ cm}^{-2} \cdot \text{eV}^{-1}$	$5 \times 10^7 \text{ cm}^{-2} \cdot \text{eV}^{-1}$	$5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2} \cdot \text{eV}^{-1}$
	W3	$5 \times 10^7 \text{ cm}^{-2} \cdot \text{eV}^{-1}$	$5 \times 10^7 \text{ cm}^{-2} \cdot \text{eV}^{-1}$	$5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2} \cdot \text{eV}^{-1}$
Exponentielle+ Gaussienne	UW	$5 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2} \cdot \text{eV}^{-1}$	$5 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2} \cdot \text{eV}^{-1}$	$5 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2} \cdot \text{eV}^{-1}$

Tableau VI.3 les paramètres de différents profils de distribution des états de l'interface dans l'espace d'énergie utilisé pour la simulation

Les courbes de charge totale dans la structure Au/GaN/GaAs simulées pour différents profils de distribution des états de l'interface à basse fréquence sont montrées dans la figure IV.6. L'analyse des caractéristiques simulées de charge totale en fonction de la tension indique l'effet du profil de la distribution continue des états de l'interface sur la forme de la courbe.

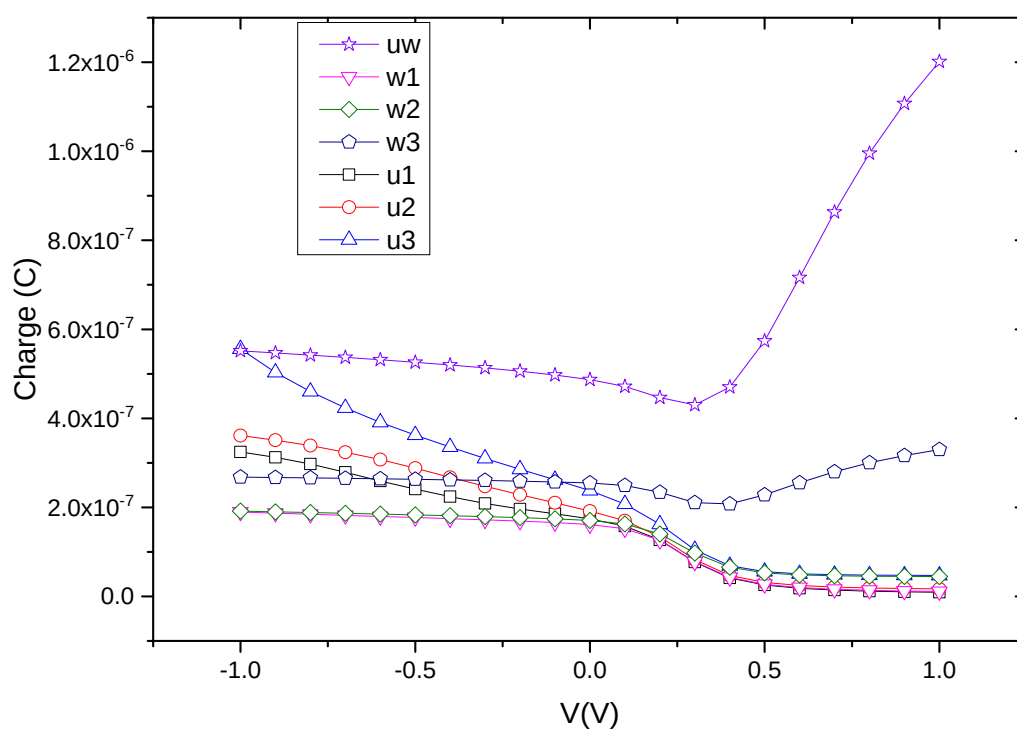


Figure IV.5: La charge électrique en fonction de tension appliquée simulée pour plusieurs distributions d'états de l'interface

Pour les profils de w1, w2, u1 et u2 ; l'allure des courbes de charge totale est pratiquement similaire, avec une valeur de 2×10^{-7} à 3×10^{-7} C dans la polarisation inverse puis elle diminue légèrement jusqu'à une stabilisation de 10^{-7} C en régime de polarisation directe. Le profil w3 rend le courbe de charge presque constant à 3×10^{-7} C pour toutes les valeurs de tensions appliquées. Pour u3, la charge totale commence avec une valeur équivalente à 6×10^{-7} C et elle diminue lorsque la tension appliquée augmente.

La courbe de charge totale pour le profil de distribution uw (Exponentielle+Gaussien) est légèrement constante à la valeur 6×10^{-7} C dans le cas d'une polarisation inverse, ensuite elle augmente linéairement avec la tension directe pour aboutir à une valeur maximale de l'ordre de 1.2×10^{-6} C à 1 V.

Les caractéristiques simulées de la caractéristique capacité-tension à basse fréquence sont illustrées dans la figure IV.6. L'analyse de ces courbes montre clairement l'influence de la forme de la distribution des états d'interface sur la forme de la courbe, à polarisation inverse, la capacité reste pratiquement constante sauf pour le profil U3 qui a une forte distribution des états ($7 \times 10^{13} \text{cm}^{-2} \text{eV}^{-1}$) sur les deux queues de bandes supérieures et inférieures. La valeur négative de la capacité calculée est le résultat des états occupés à l'interface métal-semiconducteur avec des densités considérablement élevées [48] et la capture et l'émission des porteurs à partir des états d'interface [93].

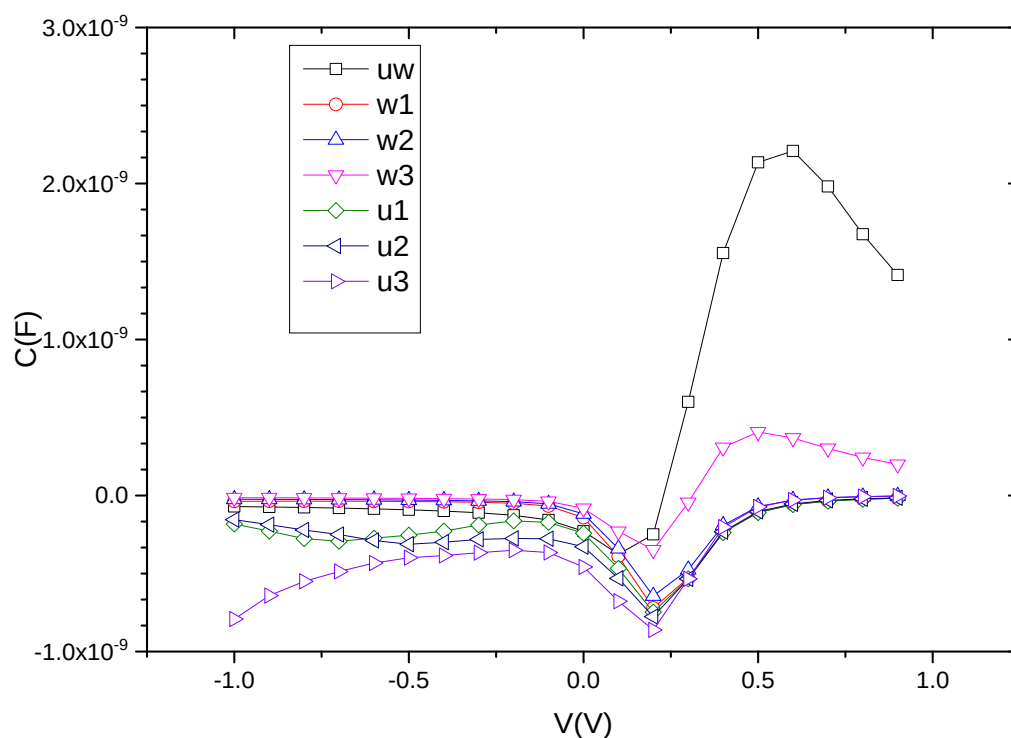


Figure IV.6: Les caractéristiques C-V simulées pour plusieurs distributions des états de l'interface

Dans le cas d'une polarisation directe, toutes les courbes u et w sont presque identiques sauf le cas de la distribution des états w_3 (pic à $7 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2} \text{ eV}^{-1}$) par contre le profil uw présente un pic autour du 0.6V qui coïncide parfaitement avec les observations expérimentales, cette forme est la somme des distributions exponentielles et gaussiennes qui font que plus des états pièges interfèrent avec le signal et créent une capacité excessive et un pic anormal [94].

IV.6.2 Effet de la concentration de dopage

L'effet de la concentration de dopage a été étudié en utilisant la simulation des caractéristiques de la capacité à basse fréquence à l'aide de notre modèle en faisant varier les valeurs de la concentration de dopage uniforme de 2×10^{13} à 10^{15} cm^{-3} comme illustré dans la figure IV.7.

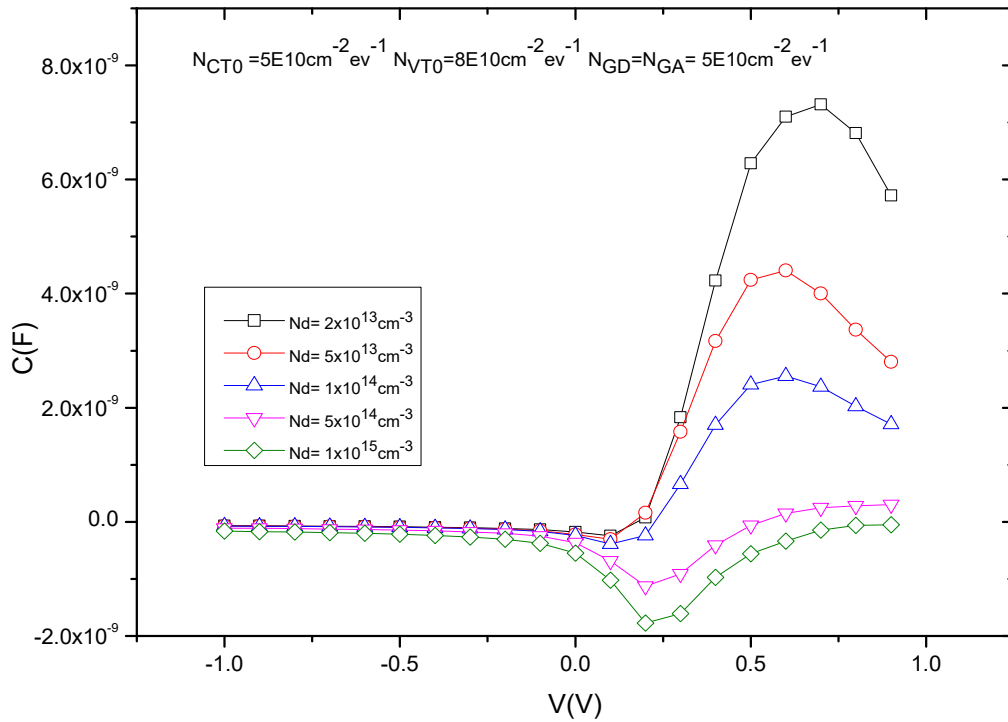


Figure IV.7: Les caractéristiques C-V simulées pour plusieurs concentrations de dopage

On peut remarquer que les courbes C-V ne changent pas significativement dans le régime de polarisation inverse lorsque la concentration de dopage change, cependant

la variation est visible seulement dans le cas des variations C^{-2} -V comme montré sur la figure IV.8.

D'autre part, les courbes dans la polarisation directe, présentent des pics d'environ 0,6V et ses valeurs maximales diminuent progressivement quand la concentration de dopage augmente ; de $7,3 \times 10^{-9}$ F pour $2 \times 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ de dopage à 3×10^{-10} F pour $5 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ de dopage .

L'explication possible de ce comportement est que la densité des états de l'interface devient de plus en plus négligeable alors que la concentration de dopage augmente.

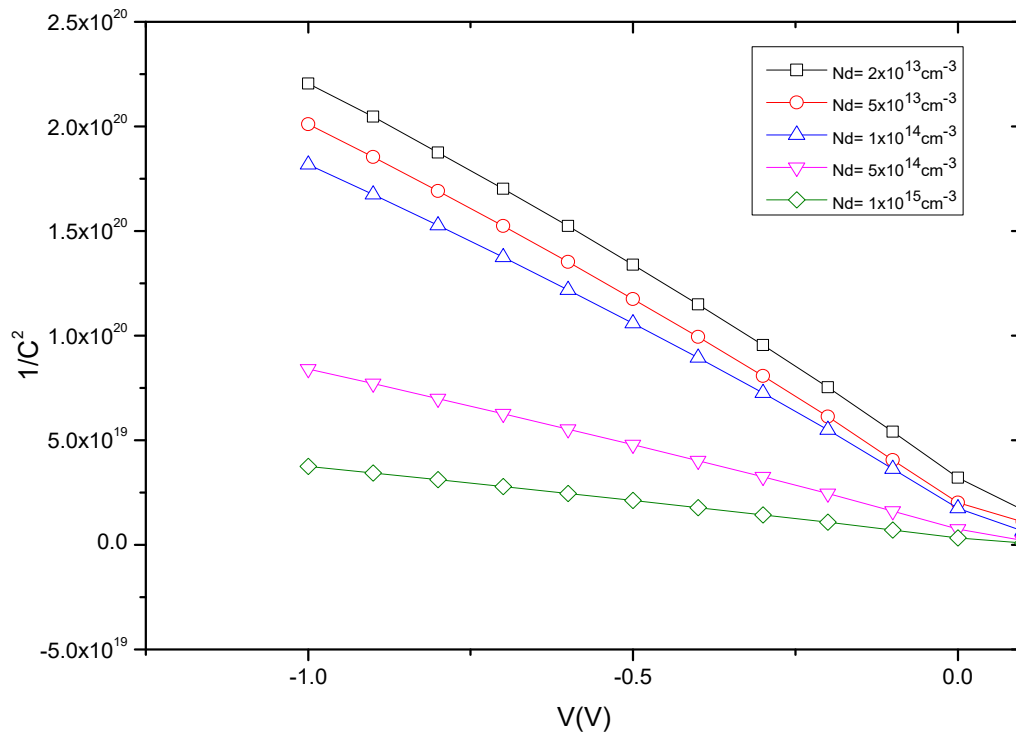


Figure IV.8: Les caractéristiques C^{-2} -V simulées pour plusieurs concentrations de dopage

Il est clair que la courbe est linéaire et que la pente a une relation directe avec la concentration N_d comme cela il a été démontré et discuté précédemment à la fois par l'expérience et par les équations analytiques de Mott-Schottky.

IV.6.3 Ajustement des résultats de simulation avec les mesures expérimentales C-V

Pour valider notre modèle, nous avons comparé la courbe simulée quasi-statique C-V avec des mesures expérimentales à basse fréquence (1 kHz), les paramètres d'ajustement sont : la concentration de dopage et la distribution des états de l'interface.

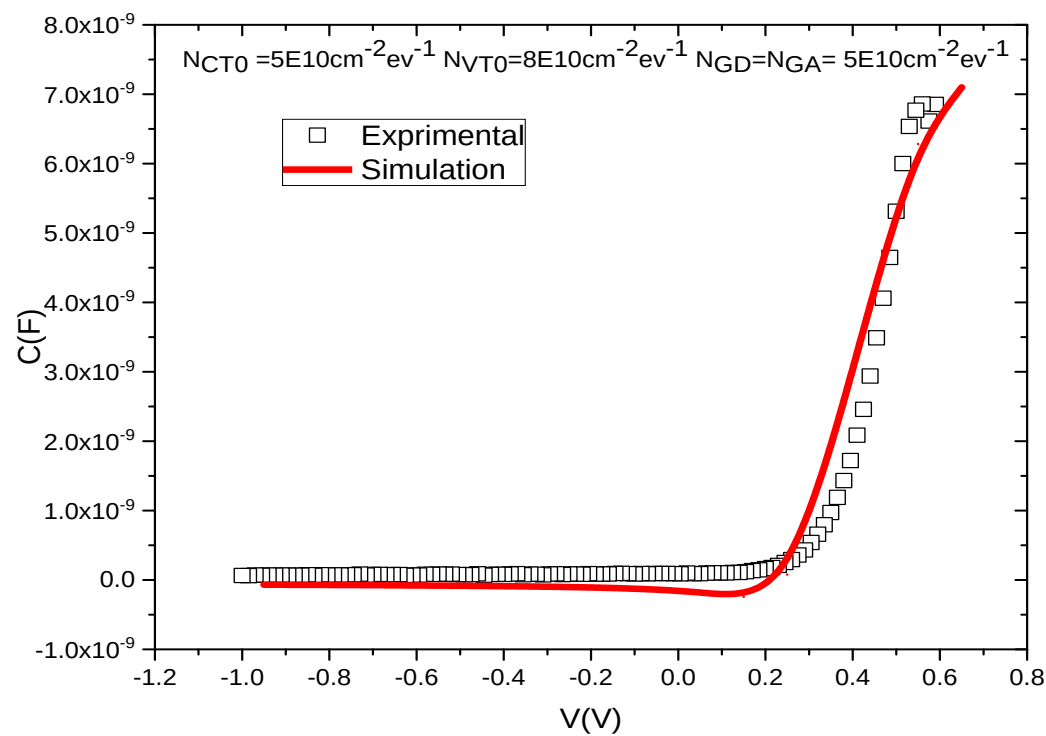


Figure IV.9: Les caractéristiques C-V expérimentale et simulée en basse fréquence

L'analyse des caractéristiques C-V calculées montre que pour obtenir un pic aigu à 0,6V la distribution N_{ss} doit prendre à la fois la forme exponentielle et gaussienne et la concentration de dopage N_D est inférieure à 10^{14} cm^{-3} . Nous pouvons constater clairement sur la figure IV.9 que les caractéristiques expérimentales C-V à basse fréquence (1 KHz) concordent bien avec celles de la simulation. Cet ajustement a été obtenu pour les valeurs des états de queue des bandes de densité :

($N_{CT0} = 5 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2} \text{ eV}^{-1}$ $N_{VT0} = 8 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2} \text{ eV}^{-1}$) et des paramètres de pics gaussiens ($N_{GD} = N_{GA} = 5 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2} \text{ eV}^{-1}$).

IV.7 Résultats de simulation de caractéristique G-V

Dans cette partie nous allons étudier l'impact de deux paramètres sur les caractéristiques conductance-tension à basse fréquence : le travail de sortie de l'Or ϕ_m et la concentration de dopage du GaAs Nd.

IV.7.1 Effet de travail de sortie de l'Or

Le travail de sortie est l'énergie minimum, mesurée en électron-volts, nécessaire pour arracher un électron depuis le niveau de Fermi d'un métal jusqu'à un point situé à l'infini en dehors du métal (niveau du vide). En électronique le travail de sortie est une grandeur importante pour la conception des jonctions métal-semi-conducteur des diodes Schottky. Dans les dernières années, de nombreuses recherches ont estimé les valeurs de fonction de travail de l'Or entre 4,8 et 5,47 eV [11], [95]–[98].

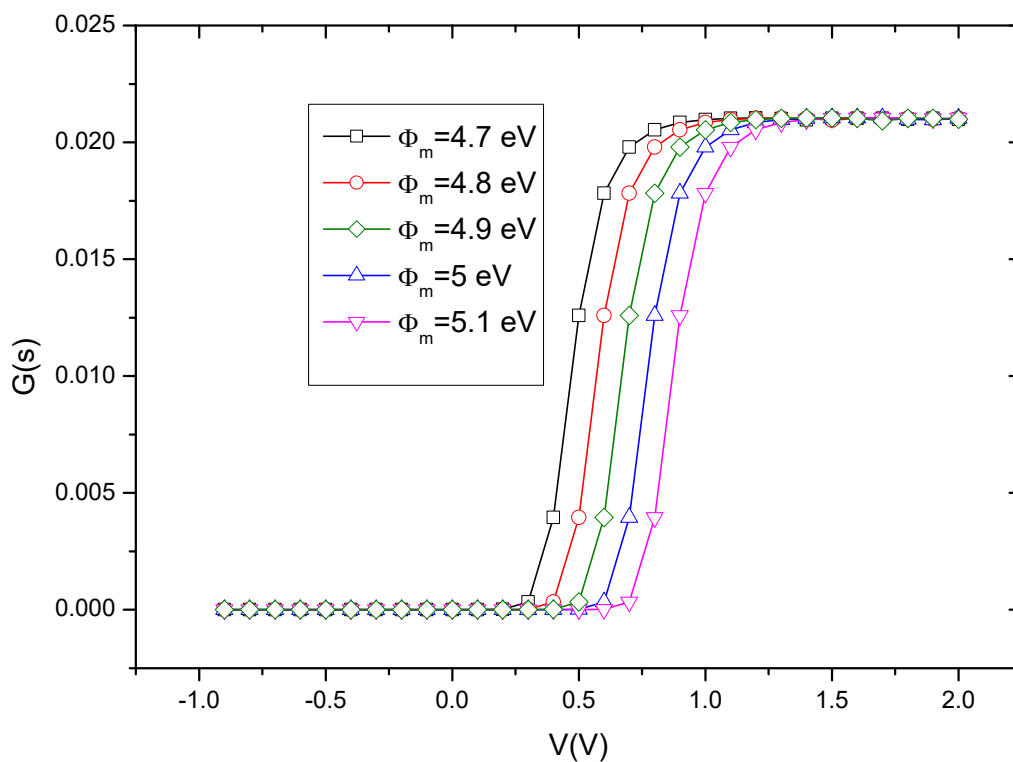


Figure IV.10: Les caractéristiques G-V simulées pour plusieurs valeurs de ϕ_m de l'Or

Nous avons étudié l'effet de ces variations sur les caractéristiques conductance-tension d'une structure Schottky Au/GaN/GaAs utilisant le programme développé.

La figure (IV.10) montre l'impact de la variation du travail de sortie sur la caractéristique G-V de la diode Schottky Au/GaN/GaAs. En fixant les autres paramètres : la concentration de dopage $N_d = 5 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ et le profil de distributions d'états de l'interface avec valeurs des états de queue des bandes de densité ($N_{CT0} = 10^{10} \text{ cm}^{-2} \text{ eV}^{-1}$ $N_{VT0} = 10^{10} \text{ cm}^{-2} \text{ eV}^{-1}$) et des paramètres de pics gaussiens ($N_{GD} = N_{GA} = 10^{10} \text{ cm}^{-2} \text{ eV}^{-1}$).

Nous remarquons que la valeur du travail de sortie de l'Or influence les caractéristiques conductance-tension de la structure plus précisément la tension de seuil, l'augmentation travail de sortie de l'Or déplace la courbe vers l'haut, et augment la tension de seuil

IV.7.2 Effet de la concentration de dopage

L'effet de la concentration de dopage a été examiné à l'aide de notre programme de simulation de la conductance à basse fréquence en faisant varier la concentration de dopage uniforme de $2 \cdot 10^{13}$ à 10^{15} cm^{-3} comme illustré dans la figure IV.11.

L'examen de la figure IV.11 indique que la concentration de dopage a une relation directe avec la conductance de la structure dans le régime de polarisation directe, par contre en régime inverse, l'effet de la concentration de dopage est négligeable. La valeur maximale de la conductance augmente de $8 \cdot 10^{-4} \text{ s}$ pour une concentration de dopage égale à $2 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ et à $4 \cdot 10^{-2} \text{ s}$ pour une concertation de dopage de l'ordre $1 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-3}$.

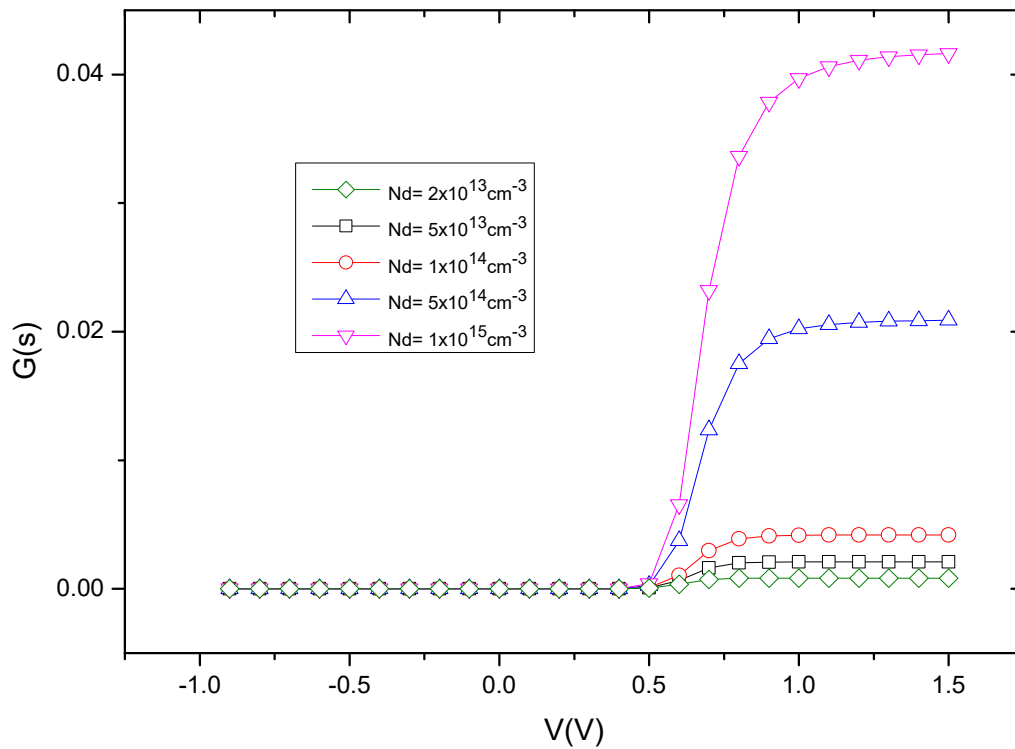


Figure IV.11: Les caractéristiques G-V simulées pour plusieurs concentrations de dopage

Lorsque la concentration de dopage s'accroît, la valeur maximale de la conductance de la diode augmente, ceci peut s'expliquer par le fait que le dopage ajoute des porteurs de charge à la structure qui contribuent à la conductivité et augmentent le flux de courant par conséquent.

IV.7.3 Ajustement des résultats de simulation avec les mesures expérimentales G-V

La comparaison entre la courbe simulée quasi-statique G-V avec les mesures expérimentales à basse fréquence (1 kHz), est représentée dans la figure IV.12.

Nous avons ajusté les deux courbes avec les paramètres suivants : le travail de sortie de l'Or, la concentration de dopage et ainsi la distribution des états de l'interface.

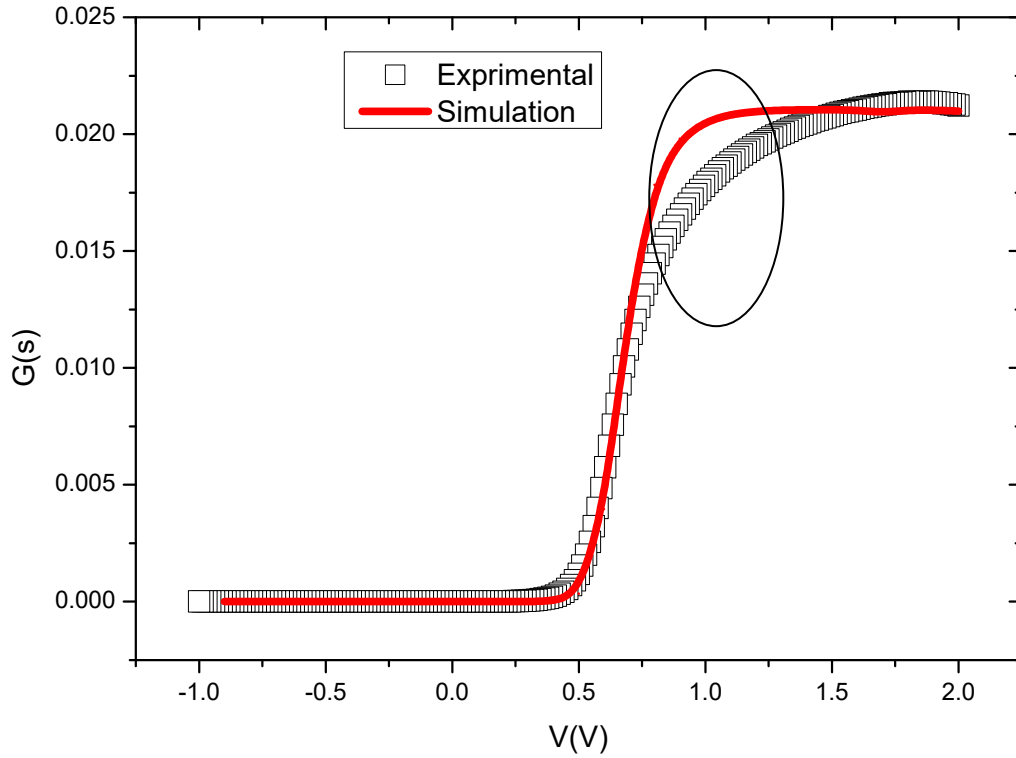


Figure IV.12: Les caractéristiques G-V expérimentale et simulée en basse fréquence

Nous pouvons voir sur la figure IV.12 que les caractéristiques expérimentales G-V à basse fréquence (1 KHz) et les caractéristiques G-V simulées ont accord suffisant. Cet ajustement a été obtenu pour profil de distribution des états de l'interface uw (gaussien et exponentielle) l'interface avec des valeurs des états des queues de bandes de densité ($N_{CT0} = 10^{10} \text{ cm}^{-2} \text{ eV}^{-1}$ $N_{VT0} = 10^{10} \text{ cm}^{-2} \text{ eV}^{-1}$) et des paramètres de pics gaussiens ($N_{GD} = N_{GA} = 10^{10} \text{ cm}^{-2} \text{ eV}^{-1}$) et de concentration de dopage de 10^{14} cm^{-3} et un travail de sortie de l'Or de 4.9 eV.

Les résultats obtenus indiquent que la concentration de dopage estimé par la simulation est inférieure à celle donnée par le fournisseur, ce qui peut être attribué à l'effet du recuit sur la concentration en porteurs; plusieurs études ont montré que le recuit à des températures supérieures à 600 ° C pourrait réduire considérablement la concentration de porteurs [99], [100].

Notre programme est basé sur un modèle quasi-statique valable pour les basses fréquences, qui peut être légèrement en désaccord avec les caractéristiques expérimentales notamment ; la caractéristique G-V

En perspective, nous proposons de compléter cette étude par développant un programme de simulation numérique des caractéristiques CV et GV en fonction de fréquence. Ce programme basé sur un modèle plus général ; Analyse du comportement petit signal *Small Signal Analysis*

Small Signal Analysis

$$V = v_0 + \tilde{v} e^{j\omega t} \quad (\text{IV.23})$$

$$\psi = \psi_0 + \tilde{\psi} e^{j\omega t} \quad (\text{IV.24})$$

$$n = n_0 + \tilde{n} e^{j\omega t} \quad (\text{IV.25})$$

$$p = p_0 + \tilde{p} e^{j\omega t} \quad (\text{IV.26})$$

$$\tilde{n} = n_0 \frac{q\tilde{\psi} + \tilde{F}_n}{kT} \quad (\text{IV.27})$$

$$\tilde{p} = -p_0 \frac{q\tilde{\psi} + \tilde{F}_p}{kT} \quad (\text{IV.28})$$

$$f_t(x, t) = f_t^0(x) + \tilde{f}_t(x) e^{j\omega t} \quad (\text{IV.29})$$

$\tilde{\psi}, \tilde{p}, \tilde{n}, \tilde{F}_n, \tilde{F}_p, \tilde{f}_t$ sont des quantités complexes ψ_0, n_0, p_0, f_t^0 solution stationnaire

$$\nabla(\varepsilon \nabla \tilde{\psi}) = -q(\tilde{p} - \tilde{n} + \tilde{c}_t) \quad (\text{IV.30})$$

$$\tilde{c}_t = -\tilde{n}_t \quad (\text{IV.31})$$

$$\tilde{n}_t = \int_{E_v}^{E_c} D_t(E_t) \tilde{f}_t(E_t) dE_t \quad (\text{IV.32})$$

$$j\omega \tilde{n} = \frac{1}{q} \nabla \tilde{j}_n - \tilde{R}_{bb} - \tilde{R}_{nt} \quad (\text{IV.33})$$

$$j\omega\tilde{p} = -\frac{1}{q}\nabla\tilde{j}_p - \tilde{R}_{bb} - \tilde{R}_{pt} \quad (\text{IV.34})$$

La résolution numérique system d'équations complexes comportant des parties réelles et imaginaires.

IV.8 Conclusion

Un modèle numérique a été développé pour étudier l'effet des paramètres physiques et électriques sur les caractéristiques de capacité-tension à basse fréquence dans la diode Schottky Au / GaN / GaAs. La mise en œuvre du programme était une tâche très difficile qui exigeait beaucoup de raffinement des problèmes qui s'étaient posés au cours des exécutions. Nous avons considéré à la fois la distribution exponentielle et la distribution gaussienne des états pièges dans la bande interdite. Un bon accord est obtenu entre les caractéristiques C-V et G-V expérimentales et calculées à basse fréquence, et l'ajustement a été obtenu pour un profil de distribution des états d'interface a une forme à la fois Gaussienne et exponentielle) et un travail de sortie de l'Or de 4.9 eV. Les résultats obtenus indiquent que la concentration de dopage estimé par la simulation est inférieure à celle donnée par le fournisseur, ce qui peut être attribué à l'effet du recuit sur la concentration en porteurs.

-

Conclusion Générale

Dans ce travail, une diode Schottky Au / GaN / GaAs a été préparée en utilisant une source de plasma d'azote à décharge radiofréquence, suivi par une étude de différentes caractéristiques de la capacité-tension (C-V) et de la conductance-tension (G / ω -V) à température ambiante pour différentes fréquences (allant entre 1 kHz et 1 MHz) de cette structure. Les différents résultats ont montrés que les caractéristiques C-V et G-V dépendent fortement de la fréquence, particulièrement pour des fréquences basses. Ce comportement indique la présence d'une distribution continue des états d'interface qui peuvent facilement suivre le signal alternatif à basse fréquence, d'autre part, à hautes fréquences; l'effet de la résistance série sur les mesures C-V et G-V est considérable, et elle donne un pic inversement proportionnel avec la valeur de la fréquence. Un phénomène de capacité négative a été observé dans les mesures à basse fréquence. Il a été montré que la densité d'états d'interface diminue exponentiellement avec l'augmentation de la fréquence.

Pour étudier les effets de l'épaisseur de la couche GaN sur les caractéristiques électriques de notre structure, nous avons étudié et analysé les caractéristiques électriques de deux échantillons avec différentes épaisseurs de la couche de GaN (0.7 nm et 2.2 nm), et pour cela, nous avons exploité des méthodes qui utilisent des caractéristiques C-V mesurées expérimentalement à hautes et basses fréquences, ainsi que des mesures de caractéristiques I-V

L'analyse des paramètres électriques tel que ; la hauteur de la barrière, le facteur d'idéalité et le potentiel de surface, qu'on a extrait à l'aide d'une mesure de polarisation directe I-V ont montrés que la nitruration peut améliorer la conductivité et réduire la valeur de la hauteur de barrière ainsi celle de facteur d'idéalité.

Les profils de distribution d'énergie du Nss ont été obtenus à partir des caractéristiques C-V mesurées à hautes et basses fréquences. La passivation de la surface de GaAs avec la formation de la couche interfaciale de GaN améliore les caractéristiques de la diode en réduisant les valeurs de densité des états d'interface.

Dans une deuxième partie, nous avons développé un programme de simulation à 1D des caractéristiques électriques de la diode Schottky Au/GaN/GaAs. Ce programme

est basé sur la résolution 1D du système formé par l'équation de Poisson et les deux équations de continuité. La méthode utilisée dans ce travail est celle 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 permettent d'éliminer le risque de divergence et réduire le temps de calcul. Le modèle numérique a été développé pour étudier l'impact des paramètres physiques et électriques sur les caractéristiques de capacité-tension pour les basses fréquences.

La mise en œuvre du programme était une tâche très difficile qui exigeait beaucoup de raffinement des problèmes qui s'étaient posés au cours des exécutions. Nous avons considéré à la fois la distribution exponentielle et la distribution gaussienne des états des pièges dans la bande interdite. Un bon accord est obtenu entre les caractéristiques C-V et G-V mesurées et calculées pour les basses fréquences, ainsi l'ajustement a été obtenu pour un profil de distribution des états de l'interface qui ont une forme à la fois Gaussienne et exponentielle.

Grace à ce programme, nous avons étudié l'effet de quelques paramètres technologiques et physiques sur les caractéristiques C-V et G-V de la diode Schottky Au/GaN/GaAs. Nous avons constaté que :

- Le profil de la distribution des états d'interface a une influence sur la forme de la courbe C-V et la présence des pics dans régime de polarisation directe, d'autre part, à la polarisation inverse la capacité reste pratiquement constante.
- Les valeurs maximales des pics des courbes C-V diminuent progressivement, quand la concentration de dopage augmente
- Les résultats obtenus indiquent que la concentration de dopage estimé par la simulation est inférieure à celle donnée par le fournisseur, ce qui peut être attribué à l'effet du recuit sur la concentration en porteurs

En perspective, nous proposons de compléter cette étude en apportant plus d'informations sur le comportement électriques de ces structures, et cela par la mise au point d'un programme de simulation numérique en 2D des caractéristiques C-V et G-V , avec un modèle plus general base sur analyse du comportement petit signal *Small Signal Analysis* et la résolution numérique d'équations complexes comportant des parties réelles et imaginaires à fin d'étudier et optimiser la nitruration des structures à base de GaAs.

Références Bibliographique

- [1] F. Braun, “Ueber die Stromleitung durch Schwefelmetalle,” *Ann. der Phys. und Chemie*, vol. 229, no. 12, pp. 556–563, 1875.
- [2] S. M. Sze and Kwok K. Ng, *Physics of Semiconductor Devices*, Third edit. 2007.
- [3] A. H. Wilson, “The Theory of Electronic Semi-Conductors,” *Proc. R. Soc. A Math. Phys. Eng. Sci.*, vol. 133, no. 822, pp. 458–491, Oct. 1931.
- [4] W. Schottky, “Halbleitertheorie der Sperrschicht,” *Naturwissenschaften*, vol. 26, no. 52, pp. 843–843, Dec. 1938.
- [5] N. F. Mott, “Note on the contact between a metal and an insulator or semiconductor,” *Math. Proc. Cambridge Philos. Soc.*, vol. 34, no. 04, p. 568, Oct. 1938.
- [6] H. A. Bethe, “Theory of the Boundary Layer of Crystal Rectifiers,” in *Semiconductor Devices: Pioneering Papers*, WORLD SCIENTIFIC, pp. 387–399, 1991.
- [7] V. L. Rideout, “A REVIEW OF THE THEORY, TECHNOLOGY AND APPLICATIONS OF METAL-SEMICONDUCTOR RECTIFIERS,” *Thin Solid Films*, vol. 48, no. 3, pp. 261–291, 1978.
- [8] E. H. Rhoderick and R. H. Williams, *Metal-Semiconductor Contacts Second Edition*, Second edi. Clarendon Press Oxford, 1988.
- [9] H. Mathieu and H. Fanet, *Physique des semiconducteurs et des composants électroniques: Cours et exercices corrigés*. 2009.
- [10] B. Boittiaux, “La structure Métal-Semiconducteur,” 2004. .
- [11] A. Rabehi, “Propriétés électriques et photoélectriques des diodes Schottky à base du matériau GaAs nitruré: Mesures et Simulation,” These Doctorat Université Djillali Liabes de Sidi Bel Abbès, 2017.

- [12] P. Chattopadhyay and B. Raychaudhuri, "Frequency dependence of forward capacitance-voltage characteristics of Schottky barrier diodes," *Solid. State. Electron.*, vol. 36, no. 4, pp. 605–610, 1993.
- [13] T. Mouet, "Etude et caractérisation des structures MIS sur InP et des nanostructures à base de ZnO," These Doctorat, Université Mentouri - Constantine, 2011.
- [14] E. Nicollian and J. Brews, *MOS/metal oxide semiconductor/physics and technology*. 1982.
- [15] A.m.cowley, "surface states and barrier height pf metal-semiconductor systems," *J. Appl. Phys.*, vol. 36, no. 10, p. 3212, 1965.
- [16] S. Toumi, "Etudes Des Composants Electroniques (Cellules Solaires, Diodes Schottky) En Utilisant Les Algorithmes Genetiques Et Le Langage Vhdl Ams," These Doctorat ,Université Ferhat Abbas-Setif, 2012.
- [17] R. A. Soref, "Silicon-Based Optoelectronics," *Proc. IEEE*, vol. 81, no. 12, pp. 1687–1706, 1993.
- [18] D. L. Mathine, "The integration of III-V optoelectronics with silicon circuitry," *IEEE J. Sel. Top. Quantum Electron.*, vol. 3, no. 3, pp. 952–959, 1997.
- [19] H. Föll, J. Carstensen, S. Langa, M. Christophersen, and I. M. Tiginyanu, "Porous III–V compound semiconductors: formation, properties, and comparison to silicon," *Phys. Status Solidi*, vol. 197, no. 1, pp. 61–70, 2003.
- [20] F. Schwierz and J. J. Liou, "RF transistors: Recent developments and roadmap toward terahertz applications," *Solid. State. Electron.*, vol. 51, no. 8, pp. 1079–1091, 2007.
- [21] M. Ambrico, M. Losurdo, P. Capezzuto, G. Bruno, T. Ligonzo, L. Schiavulli, I. Farella, and V. Augelli, "A study of remote plasma nitrided nGaAs/Au Schottky barrier," *Solid. State. Electron.*, vol. 49, no. 3, pp. 413–419, 2005.

- [22] O. Wada, "Optoelectronic integration based on GaAs material," *Opt. Quantum Electron.*, vol. 20, no. 6, pp. 441–474, 1988.
 - [23] C. J. Sudha Mokkalapati, S. Mokkalapati, and C. Jagadish, "III-V compound SC for optoelectronic devices," *Mater. Today*, vol. 12, no. 4, pp. 22–32, 2009.
 - [24] R. J. Nelson, J. S. Williams, H. J. Leamy, B. Miller, H. C. Casey, B. A. Parkinson, and A. Heller, "Reduction of GaAs surface recombination velocity by chemical treatment," *Appl. Phys. Lett.*, vol. 36, no. 1, pp. 76–79, 1980.
 - [25] M. A. Ebeoğlu, "Current-voltage characteristics of Au/GaN/GaAs structure," *Phys. B Condens. Matter*, vol. 403, no. 1, pp. 61–66, 2008.
 - [26] S. Khemissi, "Modélisation non lineaire des composants a effet de champ," Université Mentouri Constantine, 2009.
 - [27] J. B. Mullin, B. W. Straughan, and W. S. Brickell, "Liquid encapsulation techniques: The use of an inert liquid in suppressing dissociation during the melt-growth of InAs and GaAs crystals," *J. Phys. Chem. Solids*, vol. 26, no. 4, pp. 782–784, Apr. 1965.
 - [28] P. Rudolph and M. Jurisch, "Bulk growth of GaAs an overview," *J. Cryst. Growth*, vol. 198–199, no. PART I, pp. 325–335, 1999.
 - [29] Y. Beddiafi, "Modélisation d'un transistor MESFET en GaAs en utilisant le simulateur atlas-silvaco," These Doctorat, Université Mohamed Khide, Biskra, 2013.
 - [30] O. G. Folberth and H. Weiss, "Herstellung und elektrische Eigenschaften von InP und GaAs," *Zeitschrift für Naturforsch. A*, vol. 10, no. 8, pp. 615–619, Jan. 1955.
 - [31] M. R. Brozel and C. E. Stillman, *Properties of Gallium Arsenide*. 1996.
 - [32] K. R. Murali, M. Jayachandran, and N. Rangarajan, "Review of techniques on growth of GaAs and related compounds," *Bull. Electrochem. Mater. Sci.*, vol.
-

- 3, no. 3, pp. 261–265, 1987.
- [33] R. Meunier, “Optimization of the elaboration of insulating layers for the gate structures and the passivation of MIS-HEMT transistors on GaN,” These Doctorat, Université Toulouse 3 Paul Sabatier, 2016.
- [34] S. A. Kukushkin, A. V. Osipov, V. N. Bessolov, B. K. Medvedev, V. K. Nevolin, and K. A. Tcarik, “Substrate for epitaxy of gallium nitride: new materials and techniques,” *Rev. Adv. Mater. Sci.*, vol. 17, pp. 1–32, 2008.
- [35] N. . Nasser, Y. Z. Zhen, L. Jiawei, and X. Y. Bou, “GaN Heteroepitaxial Growth Thechniques,” *J. Microwaves Optoelectron.*, vol. 2, no. 3, pp. 16–18, 2001.
- [36] J. Yoon, S. Jo, I. S. Chun, I. Jung, H.-S. Kim, M. Meitl, E. Menard, X. Li, J. J. Coleman, U. Paik, and J. a Rogers, “GaAs photovoltaics and optoelectronics using releasable multilayer epitaxial assemblies,” *Nature*, vol. 465, no. 7296, pp. 329–33, 2010.
- [37] M. K. Hudait and S. B. Krupanidhi, “Interface states density distribution in Au/n-GaAs Schottky diodes on n-Ge and n-GaAs substrates,” *Mater. Sci. Eng. B Solid-State Mater. Adv. Technol.*, vol. 87, no. 2, pp. 141–147, 2001.
- [38] N. Zougagh, Z. Benamara, H. Mazari, N. Benseddik, K. Ameer, G. Monier, L. Bideux, and B. Gruzza, “The dc Electrical Characterization of Hg/<I>δ</I>-GaN/<I>n</I>-GaAs Devices, with Different Thicknesses of the GaN Thin Layers,” *Sens. Lett.*, vol. 9, no. 6, pp. 2211–2214, 2011.
- [39] A. H. Kacha, B. Akkal, Z. Benamara, M. Amrani, A. Rabhi, G. Monier, C. Robert-Goumet, L. Bideux, and B. Gruzza, “Effects of the GaN layers and the annealing on the electrical properties in the Schottky diodes based on nitrated GaAs,” *Superlattices Microstruct.*, vol. 83, pp. 827–833, 2015.
- [40] A. Rabehi, M. Amrani, Z. Benamara, B. Akkal, a. H. Kacha, C. Robert-Goumet, G. Monier, and B. Gruzza, “Study of the Characteristics Current–
-

- Voltage and Capacitance—Voltage in nitride GaAs Schottky diode,” *Eur. Phys. J. Appl. Phys.*, vol. 72, no. 1, p. 10102, 2015.
- [41] A. Rabehi, M. Amrani, Z. Benamara, B. Akkal, and A. H. Kacha, “Electrical and photoelectrical characteristics of Au/GaN/GaAs Schottky diode,” *Opt. Int. J. Light Electron Opt.*, vol. 127, no. 16, p. 6412, 2016.
- [42] Z. H. Lu, C. Lagarde, E. Sacher, J. F. Currie, and A. Yelon, “A surface analytical study of GaAs(100) cleaning procedures,” *J. Vac. Sci. Technol. A Vacuum, Surfaces, Film.*, vol. 7, no. 3, pp. 646–650, 1989.
- [43] T. Tiedje, P. C. Wong, and K. A. R. Mitchell, “UV PHOTOEMISSION STUDY OF SULFIDE PASSIVATED GaAs SURFACES,” *Solid State Commun.*, vol. 70, no. 3, pp. 389–392, 1989.
- [44] L. L. Smith, S. W. King, R. J. Nemanich, and R. F. Davis, “Cleaning of GaN surfaces,” *J. Electron. Mater.*, vol. 25, no. 5, pp. 805–810, 1996.
- [45] K. D. Choquette, M. Hong, H. S. Luftman, S. N. G. Chu, J. P. Mannaerts, R. C. Wetzell, and R. S. Freund, “GaAs surface reconstruction obtained using a dry process,” *J. Appl. Phys.*, vol. 73, no. 4, pp. 2035–2037, 1993.
- [46] M. Losurdo, P. Capezzuto, G. Bruno, and E. Irene, “Chemistry and kinetics of the GaN formation by plasma nitridation of GaAs: An in situ real-time ellipsometric study,” *Phys. Rev. B - Condens. Matter Mater. Phys.*, vol. 58, no. 23, pp. 15878–15888, 1998.
- [47] M. Losurdo, P. Capezzuto, and G. Bruno, “In situ real time ellipsometry monitoring during GaN epilayers processing,” *Mater. Sci. Eng. B Solid-State Mater. Adv. Technol.*, vol. 59, no. 1–3, pp. 150–154, 1999.
- [48] X. Wu, E. S. Yang, and H. L. Evans, “Negative capacitance at metal-semiconductor interfaces,” *J. Appl. Phys.*, vol. 68, no. 6, pp. 2845–2848, 1990.
- [49] A. Tataroğlu and Ş. Altındal, “Characterization of current-voltage (I-V) and
-

- capacitance-voltage-frequency (C-V-f) features of Al/SiO₂/p-Si (MIS) Schottky diodes,” *Microelectron. Eng.*, vol. 83, no. 3, pp. 582–588, 2006.
- [50] A. Tataroğlu and Ş. Altındal, “Analysis of electrical characteristics of Au/SiO₂/n-Si (MOS) capacitors using the high-low frequency capacitance and conductance methods,” *Microelectron. Eng.*, vol. 85, no. 11, pp. 2256–2260, 2008.
- [51] B. Tataroğlu, Ş. Altındal, and A. Tataroğlu, “The C-V-f and G/V-f characteristics of Al/SiO₂/p-Si (MIS) structures,” *Microelectron. Eng.*, vol. 83, no. 10, pp. 2021–2026, 2006.
- [52] K. S. Kim, R. K. Gupta, G. S. Chung, and F. Yakuphanoglu, “Effects of illumination on capacitance characteristics of Au/3C-SiC/p-Si/Al diode,” *J. Alloys Compd.*, vol. 509, no. 41, pp. 10007–10013, 2011.
- [53] İ. Taşcıoğlu, W. a. Farooq, R. Turan, Ş. Altındal, and F. Yakuphanoglu, “Charge transport mechanisms and density of interface traps in MnZnO/p-Si diodes,” *J. Alloys Compd.*, vol. 590, pp. 157–161, 2014.
- [54] J. Osvald, R. Stoklas, and P. Kordoš, “Low- and high-frequency capacitance of aluminum gallium nitride/gallium nitride heterostructures with interface traps,” *Mater. Sci. Semicond. Process.*, vol. 31, pp. 525–529, 2015.
- [55] B. Akkal, Z. Benamara, B. Gruzza, and L. Bideux, “Characterization of interface states at Au / InSb / InP (100) Schottky barrier diodes as a function of frequency,” *Vacuum*, vol. 57, pp. 219–228, 2000.
- [56] S. Karataş, F. Yakuphanoglu, and F. M. Amanullah, “Capacitance voltage and conductance voltage characteristics of Ag/n-CdO/p-Si MIS structure prepared by solgel method,” *J. Phys. Chem. Solids*, vol. 73, no. 1, pp. 46–51, Jan. 2012.
- [57] J. Werner, A. F. J. Levi, R. T. Tung, M. Anzlowar, and M. Pinto, “Origin of the Excess Capacitance at Intimate Schottky Contacts,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 60, no. 1, pp. 53–56, 1988.
-

- [58] B. Bati, C. Nuhoglu, M. Saglam, E. Ayyildiz, and A. Turut, “On the Forward Bias Excess Capacitance at Intimate and MIS Schottky Barrier Diodes with perfect or imperfect ohmic back contact,” *Phys. Scr.*, vol. 61, pp. 209–212, 2000.
- [59] K. S. A. Butcher, T. L. Tansley, and D. Alexiev, “An instrumental solution to the phenomenon of negative capacitances in semiconductors,” *Solid. State. Electron.*, vol. 39, no. 3, pp. 333–336, 1996.
- [60] M. Ershov, H. C. Liu, L. Li, M. Buchanan, Z. R. Wasilewski, and A. K. Jonscher, “Negative capacitance effect in semiconductor devices,” *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. 45, no. 10, pp. 2196–2206, 1998.
- [61] D. Korucu, Ş. Altındal, T. S. Mammadov, and S. Özçelik, “Origin of anomalous peak and negative capacitance in the forward bias C-V characteristics of Au/n-InP Schottky Barrier Diodes (SBDs),” *J. Optoelectron. Adv. Mater.*, vol. 11, no. 2, pp. 192–196, 2009.
- [62] E. Arslan, Y. Şafak, Ş. Altındal, Ö. Kelekçi, and E. Özbay, “Temperature dependent negative capacitance behavior in (Ni/Au)/AlGaIn/AlN/GaN heterostructures,” *J. Non. Cryst. Solids*, vol. 356, no. 20–22, pp. 1006–1011, 2010.
- [63] M. Gökçen, H. Altuntaş, Ş. Altındal, and S. Özçelik, “Frequency and voltage dependence of negative capacitance in Au/SiO₂/n-GaAs structures,” *Mater. Sci. Semicond. Process.*, vol. 15, no. 1, pp. 41–46, 2012.
- [64] V. Mikhelashvili, R. Padmanabhan, B. Meyler, S. Yofis, and G. Eisenstein, “Negative capacitance in optically sensitive metal-insulator-semiconductor-metal structures,” *J. Appl. Phys.*, vol. 120, no. 22, p. 224502, 2016.
- [65] E. H. Rhoderick and R. H. Williams, *Metal-semiconductor contacts*, no. 19. 1988.
- [66] D. A. Aldemir, M. Esen, A. Kökce, S. Karataş, and A. F. Özdemir, “Analysis

- of current-voltage and capacitance-voltage-frequency characteristics in Al/p-Si Schottky diode with the polythiophene-SiO₂ nanocomposite interfacial layer,” *Thin Solid Films*, vol. 519, no. 18, pp. 6004–6009, 2011.
- [67] S. Zeyrek, E. Acaroğlu, Ş. Altındal, S. Birdoğan, and M. M. Bülbül, “The effect of series resistance and interface states on the frequency dependent C-V and G/w-V characteristics of Al/perylene/p-Si MPS type Schottky barrier diodes,” *Curr. Appl. Phys.*, vol. 13, no. 7, pp. 1225–1230, 2013.
- [68] E. H. Nicollian and A. Goetzberger, “The Si-SiO₂ Interface -Electrical Properties as Determined by the Metal-Insulator- Silicon Conductance Technique,” *Bell Syst. Tech. J.*, vol. XLVI, no. 6, p. 1055, 1967.
- [69] I. S. Yahia, M. Fadel, G. B. Sakr, S. S. Shenouda, and F. Yakuphanoglu, “Effect of the frequency and temperature on the complex impedance spectroscopy (C–V and G–V) of p-ZnGa₂Se₄/n-Si nanostructure heterojunction diode,” *J. Mater. Sci.*, vol. 47, no. 4, pp. 1719–1728, 2012.
- [70] M. M. Bülbül and S. Zeyrek, “Frequency dependent capacitance and conductance-voltage characteristics of Al/Si₃N₄/p-Si(1 0 0) MIS diodes,” *Microelectron. Eng.*, vol. 83, no. 11–12, pp. 2522–2526, 2006.
- [71] W. A. Hill and C. C. Coleman, “A single-frequency approximation for interface-state density determination,” *Solid. State. Electron.*, vol. 23, no. 6, pp. 987–993, 1980.
- [72] P. Chattopadhyay, “Capacitance technique for the determination of interface state density of metal-semiconductor contact,” *Solid. State. Electron.*, vol. 39, no. 10, pp. 1491–1493, 1996.
- [73] M. a. Ebeoğlu, T. Kiliçoğlu, and M. E. Aydin, “Low- and high-frequency C-V characteristics of the contacts formed by adding a solution of the nonpolymeric organic compound on p-type Si substrate,” *Phys. B Condens. Matter*, vol. 395, no. 1–2, pp. 93–97, 2007.
-

- [74] H.-S. Wong, L. Chan, G. Samudra, and Y.-C. Yeo, "Effective Schottky Barrier Height Reduction Using Sulfur or Selenium at the NiSi/n-Si (100) Interface for Low Resistance Contacts," *IEEE Electron Device Lett.*, vol. 28, no. 12, pp. 1102–1104, Dec. 2007.
 - [75] J. Y. J. Lin, A. M. Roy, A. Nainani, Y. Sun, and K. C. Saraswat, "Increase in current density for metal contacts to n-germanium by inserting TiO₂ interfacial layer to reduce Schottky barrier height," *Appl. Phys. Lett.*, vol. 98, no. 9, pp. 5–8, 2011.
 - [76] Z. Yuan, A. Nainani, Y. Sun, J. Y. J. Lin, P. Pianetta, and K. C. Saraswat, "Schottky barrier height reduction for metal/n-GaSb contact by inserting TiO₂ interfacial layer with low tunneling resistance," *Appl. Phys. Lett.*, vol. 98, no. 17, pp. 1–4, 2011.
 - [77] S. Ghosh and P. C. Srivastava, "Interface States of Fe₃O₄/Si interfacial structure and effect of magnetic field," *J. Electron. Mater.*, vol. 43, no. 11, pp. 4357–4363, 2014.
 - [78] A. O. Cetinkaya, S. Kaya, A. Aktag, E. Budak, and E. Yilmaz, "Structural and electrical characterizations of BiFeO₃ capacitors deposited by sol-gel dip coating technique," *Thin Solid Films*, vol. 590, pp. 7–12, 2015.
 - [79] S. Chattopadhyay, L. K. Bera, S. K. Ray, P. K. Bose, and C. K. Maiti, "Extraction of interface state density of Pt/p-strained-Si Schottky diode," *Thin Solid Films*, vol. 335, no. 1–2, pp. 142–145, 1998.
 - [80] Ç. Nuhoglu, C. Temirci, B. Bati, M. Biber, and a. Türüt, "Effect of thermal annealing on Co/n-LEC GaAs (Te) Schottky contacts," *Solid State Commun.*, vol. 115, no. 6, pp. 291–295, 2000.
 - [81] M. Sakhaf and M. Schmeits, "Capacitance and conductance of semiconductor heterojunctions with continuous energy distribution of interface states," *J. Appl. Phys.*, vol. 80, no. 12, p. 6839, 1996.
-

- [82] J. Jasiński and B. Majkusiak, “Small-signal admittance model as a characterization tool of the MOS tunnel diode,” *J. Vac. Sci. Technol. B, Nanotechnol. Microelectron. Mater. Process. Meas. Phenom.*, vol. 31, no. 1, p. 01A111, 2013.
- [83] M. Schmeits, “Small-signal analysis of semiconductor heterojunctions with interacting interface states,” *Semicond. Sci. Technol.*, vol. 12, no. 1297, pp. 1217–1225, 1999.
- [84] D. K. Schroder, *Semiconductor material and device characterization third edition*, vol. 44, no. 4. 2006.
- [85] N. Inoue, D. J. Lichtenwalner, J. S. Jur, and A. I. Kingon, “Analysis of Interface States in LaSi_xO_y Metal–Insulator–Semiconductor Structures,” *Jpn. J. Appl. Phys.*, vol. 46, no. 10A, pp. 6480–6488, 2007.
- [86] H. Hasegawa and T. Sawada, “Electrical modeling of compound semiconductor interface for FET device assessment,” *Electron Devices, IEEE Trans.*, vol. 27, no. 6, pp. 1055–1061, 1980.
- [87] S. Anantathanasarn and H. Hasegawa, “Photoluminescence and capacitance-voltage characterization of GaAs surface passivated by an ultrathin GaN interface control layer,” *Appl. Surf. Sci.*, vol. 190, no. 1–4, pp. 343–347, 2002.
- [88] T. Hashizume and H. Hasegawa, “Effects of nitrogen deficiency on electronic properties of AlGaIn surfaces subjected to thermal and plasma processes,” *Appl. Surf. Sci.*, vol. 234, no. 1–4, pp. 387–394, 2004.
- [89] M. Miczek, C. Mizue, T. Hashizume, and B. Adamowicz, “Effects of interface states and temperature on the C-V behavior of metal/insulator/AlGaIn/GaN heterostructure capacitors,” *J. Appl. Phys.*, vol. 103, p. 104510, 2008.
- [90] B. Bakeroort, S. You, J. Hu, M. Van Hove, B. De Jaeger, K. Geens, S. Stoffels, and S. Decoutere, “On the origin of the two-dimensional electron gas at AlGaIn / GaN heterojunctions and its influence on recessed-gate metal-insulator-

- semiconductor high electron mobility transistors,” *J. Appl. Phys.*, vol. 116, p. 134506, 2014.
- [91] M. Amrani, H. Sehil, R. Menezla, Z. Benamara, and F. Raoult, “Study of lateral polysilicon PN diodes C–V characteristics: Modeling and experiments,” *Solid. State. Electron.*, vol. 42, no. 11, pp. 1925–1931, 1998.
- [92] H. K. Gummel, “A Self-Consistent Iterative Scheme for One-Dimensional Steady State Transistor Calculations,” *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. 11, no. 10, pp. 455–465, 1964.
- [93] W. Z. Shen and A. G. U. Perera, “Effect of interface states on negative capacitance characteristics in GaAs homojunction far-infrared detectors,” *Appl. Phys. A*, vol. 72, no. 1, p. 107, 2001.
- [94] Q. Wang, J. Chen, H. Tang, and X. Li, “Anomalous capacitance in temperature and frequency characteristics of a TiW/ p -InP Schottky barrier diode,” *Semicond. Sci. Technol.*, vol. 31, no. 6, p. 065023, 2016.
- [95] D. R. Lide, *CRC Handbook of Chemistry and Physics*. 2005.
- [96] N. Miura, T. Nanjo, M. Suita, T. Oishi, Y. Abe, T. Ozeki, H. Ishikawa, T. Egawa, and T. Jimbo, “Thermal annealing effects on Ni/Au based Schottky contacts on n-GaN and AlGaN/GaN with insertion of high work function metal,” *Solid. State. Electron.*, vol. 48, no. 5, pp. 689–695, 2004.
- [97] H. B. Michaelson, “The work function of the elements and its periodicity,” *J. Appl. Phys.*, vol. 48, no. 11, pp. 4729–4733, 1977.
- [98] J. Freeouf and J. Woodall, “Schottky barriers: An effective work function model,” *Appl. Phys. Lett.*, vol. 10598, no. November, pp. 727–729, 1981.
- [99] M. Ogawa and T. Baba, “Heavily si-doped gaas and alas/n-gaas superlattice grown by molecular beam epitaxy,” *Jpn. J. Appl. Phys.*, vol. 24, no. 8, pp. L572–L574, 1985.
-

- [100] N. Watanabe, T. Nittono, and K. Watanabe, “Annealing effect on the carrier concentration in heavily Si-doped $n^+-\text{InGaAs}$,” *Appl. Phys. Lett.*, vol. 61, no. 16, pp. 1945–1947, 1992.

Résumé

Le travail de cette thèse se rapporte dans un premier temps sur la caractérisation électrique des caractéristiques capacité-tension et conductance-tension structures métal/ matériaux III-V nitruré (GaAS nitruré). Des mesures de capacités-tension et de conductances-tension en fonction de la fréquence et des caractérisations physiques seront aussi effectuées sur ces structures. Ensuite le travail se poursuit par la modélisation des caractéristiques C-V et G-V des structures métal/semi conducteur à base de matériaux III-V nitruré (GaAS nitruré) et le développement des programmes de simulation permettant ainsi d'étudier les effets des paramètres électriques des structures. Les résultats obtenus par modélisation seront comparés aux résultats expérimentaux. L'analyse permettra de prévoir des optimisations physiques et technologiques qui mèneront à une amélioration des performances des dispositifs à base de ces matériaux.

Abstract

The work of this thesis relates initially to the electrical characterization of the characteristics capacitance-voltage and conductance-voltage structures metal / materials III-V nitrided (GaAs nitrided). Capacitance-voltage and frequency conductance-voltage measurements as well as physical characterizations will also be performed on these structures. Then the work continues with the modeling of the C-V and G-V characteristics of the metal / semiconductor structures based on nitrided III-V materials (nitrided GaAs) and the development of the simulation programs thus making it possible to study the effects of electrical parameters of structures. The results obtained by modeling will be compared with the experimental results. The analysis will predict physical and technological optimizations that will lead to an improvement in the performance of devices based on these materials.

الملخص

يتعلق عمل هذه الأطروحة في البداية بالتوصيف الكهربائي للخصائص السعة-الجهد والموصلية-الجهد لأجهزة المعدن /شبه ناقل نتريد III-V (نتريد غاليوم زرنيخ). كما سيتم إجراء قياسات السعة -الجهد والموصلية-الجهد للترددات وكذلك الخصائص الفيزيائية على هذه الأجهزة. ثم يستمر العمل مع نمذجة خصائص السعة -الجهد والموصلية-الجهد لأجهزة المعدن / أشباه الموصلات على أساس المواد (نتريد غاليوم زرنيخ) وتطوير برامج المحاكاة مما يجعل من الممكن دراسة آثار المعلمات الكهربائية على هذه الأجهزة . سيتم مقارنة النتائج التي تم الحصول عليها عن طريق النمذجة مع النتائج التجريبية. سوف يتنبأ التحليل بتحسينات فيزيائية وتكنولوجية ستؤدي إلى تحسين في أداء الأجهزة القائمة على هذه المواد.

.

Modeling and Simulation of Capacitance–Voltage Characteristics of a Nitride GaAs Schottky Diode

Abderrezzaq Ziane, Mohammed Amrani, Zineb Benamara & Abdelaziz Rabehi

Journal of Electronic Materials

ISSN 0361-5235

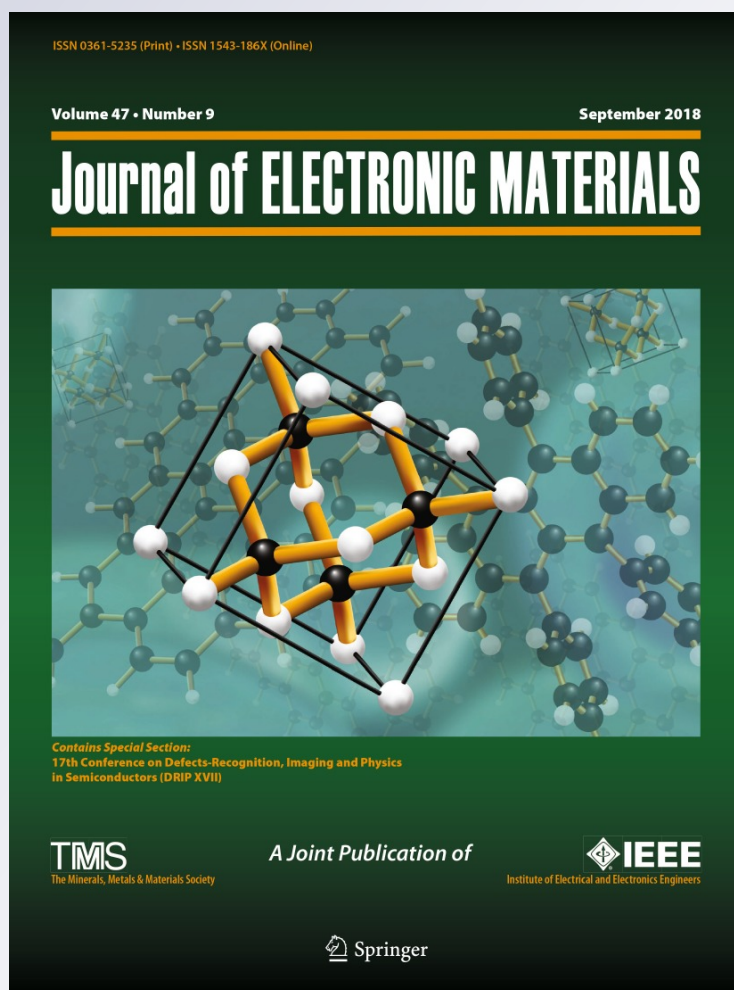
Volume 47

Number 9

Journal of Elec Materi (2018)

47:5283-5290

DOI 10.1007/s11664-018-6408-1



Your article is protected by copyright and all rights are held exclusively by The Minerals, Metals & Materials Society. This e-offprint is for personal use only and shall not be self-archived in electronic repositories. If you wish to self-archive your article, please use the accepted manuscript version for posting on your own website. You may further deposit the accepted manuscript version in any repository, provided it is only made publicly available 12 months after official publication or later and provided acknowledgement is given to the original source of publication and a link is inserted to the published article on Springer's website. The link must be accompanied by the following text: "The final publication is available at link.springer.com".

Modeling and Simulation of Capacitance–Voltage Characteristics of a Nitride GaAs Schottky Diode

ABDERREZZAQ ZIANE,^{1,2,3} MOHAMMED AMRANI,¹
 ZINEB BENAMARA,¹ and ABDELAZIZ RABEHI¹

1.—Laboratoire de Micro-électronique Appliquée, Département d'électronique, Université Djillali Liabès de Sidi Bel Abbès, 22000 Sidi Bel Abbès, Algeria. 2.—Unité de Recherche en Energies Renouvelables en Milieu Saharien, URERMS, Centre de Développement des Energies Renouvelables, CDER, 01000 Adrar, Algeria. 3.—e-mail: A.ziane@urerms.dz

A nitride GaAs Schottky diode has been fabricated by the nitridation of GaAs substrates using a radio frequency discharge nitrogen plasma source with a layer thickness of approximately 0.7 nm of GaN. The capacitance–voltage (C – V) characteristics of the Au/GaN/GaAs structure were investigated at room temperature for different frequencies, ranging from 1 kHz to 1 MHz. The C – V measurements for the Au/GaN/GaAs Schottky diode were found to be strongly dependent on the bias voltage and the frequency. The capacitance curves depict an anomalous peak and a negative capacitance phenomenon, indicating the presence of continuous interface state density behavior. A numerical drift–diffusion model based on the Scharfetter–Gummel algorithm was elaborated to solve a system composed of the Poisson and continuities equations. In this model, we take into account the continuous interface state density, and we have considered exponential and Gaussian distributions of trap states in the band gap. The effects of the GaAs doping concentration and the trap state density are discussed. We deduce the shape and values of the trap states, then we validate the developed model by fitting the computed C – V curves with experimental measurements at low frequency.

Key words: MIS structure, C – V , frequency, negative capacitance, trap states, W–U-shaped distribution, surface nitridation

INTRODUCTION

Structures based on GaAs have been utilized in many applications, such as optoelectronics^{1,2} and high-frequency devices,³ as a result of their remarkable physical properties (e.g., direct band gap, high electron mobility).⁴ The major drawback of a GaAs substrate is its high surface recombination,⁵ which increases the device noise and the leakage current⁶; furthermore, the performance of a Schottky diode is determined mainly by the interface quality between the deposited metal and the semiconductor surface.⁷ To improve GaAs surface

characteristics, several approaches have been adopted, such as oxidation and nitridation; however, unlike group III oxides,⁸ nitrides are stable compounds⁹ for two main reasons: the high chemical stability of Ga–N bonds and the high electronegativity of nitrogen. In addition, nitridation can significantly reduce the surface recombination velocity.¹⁰ The goal of this study is to develop a Schottky diode.

For several years, great efforts have been devoted to the study of nitride GaAs Schottky diodes. Benamara¹¹ used x-ray photoelectron spectroscopy (XPS) and photoluminescence surface state spectroscopy to determine the properties of GaN/GaAs (100). Ebeoğlu⁹ studied the current–voltage characteristics of the Au/GaN/GaAs structure achieved

(Received October 24, 2017; accepted May 25, 2018; published online June 5, 2018)

by a chemical anodic nitridation method. Kacha¹² investigated the effects of GaN layers and the annealing process on the electrical properties of Schottky diodes based on nitrided nitrated GaAs. The electrical and photoelectrical properties of GaN/Au/GaAs were studied by Rabehi.^{13,14}

In this article, the Au/GaN/GaAs Schottky diode was elaborated by the nitridation of a GaAs substrate, which was exposed to a flow of active nitrogen created by a discharge source with high voltage in ultrahigh vacuum (UHV) conditions.¹⁵

Previous studies^{12–14} have analyzed various aspects of the Au/GaN/GaAs structure using a linear logarithmic scale of I – V characteristics. Nevertheless, there are still some interesting and relevant issues to be addressed regarding frequency-related measurements. Those measurements allow us to study the interface states, especially their continuous energy distributions; the prediction of the exact form of this density distribution is almost impossible due to the complexity of the interface area.¹⁶

In this work, we are interested in the study and modeling of the Au/GaN/GaAs diode interface properties using experimental capacitance–voltage (C – V) characteristics measured under different frequencies in order to establish a valid simulation model of the C – V characteristics with the continuous energy distribution of interface states.

MATERIALS AND METHODS

Structure Elaboration

A singular glow radio frequency discharge nitrogen plasma source, described in detail in the work of Matolín,¹⁷ was used for the nitridation. A continuous nitrogen plasma was produced at 5-W power, and the majority of N atomic species were created (nitrogen pressure: 1.33×10^{-5} kPa, ion energy: 2.5 keV, sample current: $1 \mu\text{A cm}^{-2}$). An n -type GaAs (100) substrate with a concentration of $N_d = 4.9 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ and a thickness of $400 \pm 20 \text{ m}$ was used in this work. The cleaning procedure of the sample consisted of a sequential chemical cleaning process in H_2SO_4 , deionized water, and cold then hot methanol (all combined with ultrasound), which is a common cleaning procedure^{18–20}; methanol and hot solutions can more easily dissolve particulates, oils and other contaminants.

This procedure was followed by drying with N_2 , then Ar^+ ion bombardment (ion energy: 1 keV, sample current: 5 A cm^{-2} , time: 1 h) in a UHV chamber. Before nitridation, the GaAs (100) substrate was heated to 500°C for 1 h. Then, the samples were put under nitrogen flow for a chosen time (5 min).

The experiments were carried out in a home-built ultrahigh vacuum chamber equipped with an XPS system (dual anode Al-Mg x-ray source and hemispherical electron energy analyzer); this method allowed us to determine the chemical composition and crystal structure of the studied samples. The

Table I. Preparation parameters of the sample

Parameter	Value
GaAs concentration	$4.9 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$
Nitridation conditions	500°C , 5 W, 5 min
Annealing	620°C at 60 min
GaN thickness	0.7 nm
Schottky contact	Au
Ohmic contact	Sn

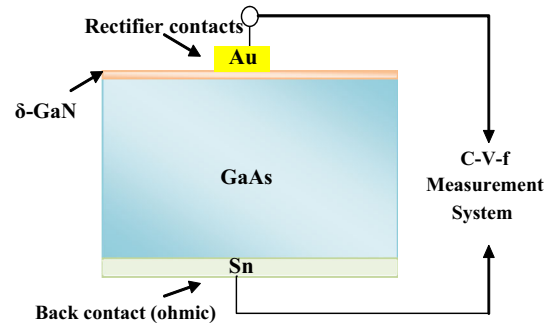


Fig. 1. Schematic of the Au/GaN/GaAs diode.

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 analyzer equal to 20 eV).¹⁴ The preparation parameters for our sample are shown in Table I.

The structure was tested electrically with a Au contact, where the area and the thickness of the contact were $S = 4.41 \times 10^{-3} \text{ cm}^2$ and $d = 100 \text{ nm}$, respectively.

To improve the quality of the Ohmic contact, tin (Sn) was deposited on the back face with NH_4Cl at a temperature of 350°C for 5 min to prevent the creation of oxides and other impurities on the surface of the GaAs, which leads to better diffusion of Sn in GaAs (Fig. 1).¹⁴

C – V measurements were performed at different frequencies, 1 MHz, 500 kHz, 100 kHz, 10 kHz, and 1 kHz, using a Keithley test system 590 C – V analyzer at room temperature.

C – V Characteristics

We started by investigating the C – V characteristics of the structure. Figure 2 depicts the measured C – V characteristics of the Au/GaN/ n -GaAs Schottky diode versus the applied bias at the frequency range of 1 kHz–1 MHz at room temperature. As seen in Fig. 3, the capacitance curves are bonded by the applied voltage and the frequency.

At forward bias, the capacitance increases when the frequency decreases. However, in reverse bias, the C – V plots remain almost unchanged for different values of frequency. Typically, the C – V in the forward bias region has no significance, but in our case, we noticed an anomalous peak and a negative

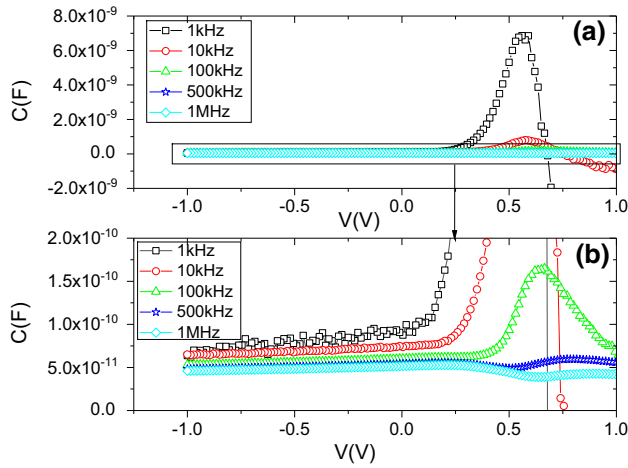


Fig. 2. (a) Variation in C – V of the Au/GaN/GaAs structure at different frequencies. (b) Zoomed portion of the variation in C – V of the Au/GaN/GaAs structure at different frequencies.

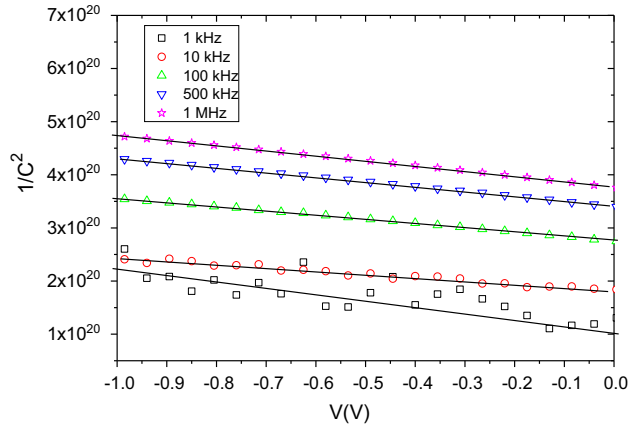


Fig. 3. Variation in $C^{-2}(V)$ of the Au/GaN/GaAs structure at different frequencies.

capacitance (NC), which are worth mentioning; we noticed that peaks in the characteristics depend on variations in frequency, with their values decreasing with increasing frequency; similar findings have been mentioned in the literature.^{21–28} These peaks can be attributed to the presence of either a continuous distribution of the interface states^{24,25,29} or imperfect back-contacts and series resistance.^{24,30,31}

We noticed a negative value of the capacitance in direct polarization under low frequencies (10 kHz and 1 kHz); this phenomenon has been observed at metal–semiconductor interfaces under forward bias.^{25,28,32–37} Wu²⁸ attributed the phenomenon to the impact-loss of electrons at the occupied interface states under high injection of hot electrons. Mikhelashvili³⁷ argued that the nonlinear modulation of the neutral part of the semiconductor conductance and the trapping and detrapping at interfacial states are the cause of negative capacitance; another interpretation of negative capaci-

tance based on the analysis of the time domain transient current in response to a small voltage is given by Ershov.³⁶

The $C^{-2}(V)$ characteristics at room temperature measured at different frequencies between 1 kHz and 1 MHz are shown in Fig. 3. The $C^{-2}(V)$ characteristics in reverse bias clearly took a linear form, which is consistent with the Schottky diode model; the slope allows us to determine the density of donors³⁸ using the Mott–Schottky relationship³⁹:

$$\frac{1}{C^{-2}} = \frac{-2}{A^2 \epsilon_0 \epsilon_s q N} \left(\phi_b - V_n + V - \frac{kT}{q} \right) \quad (1)$$

where A is the area of the diode, ϵ_s is the dielectric constant of GaAs, N is the total concentration of acceptor impurities, including the defect density, q is the electron charge, and V is the magnitude of the reverse bias.

$$\phi_b = V_n + V_d + \frac{kT}{q} \quad (2)$$

$$V_n = \frac{kT}{q} \ln \left(\frac{N_C}{N_d} \right) \quad (3)$$

The density of states in the conduction band edge is given by $N_C = 2(2\pi m^* kT/h^2)^{3/2}$, where $m^* = 0.067 m_0$, and its value is $0.4 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ for GaAs¹⁴; the equation that describes the C^{-2} slope is as follows³⁹:

$$\frac{\Delta C^{-2}}{\Delta V} = \frac{-2}{A^2 \epsilon_0 \epsilon_s q N} \quad (4)$$

The frequency dependent on the total concentration of donor impurities extracted from the C^{-2} – V slope at room temperature is represented in Fig. 4, from which it can be seen that the total concentration decreases when the frequency increases from $2.7 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ for the lowest frequency (1 kHz) to $1.3 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ for the highest (1 MHz); this behavior of N is explained by the interface state distribution and the fact that the interface states cannot follow the ac signals.⁴⁰ There are different types of interface states with different lifetimes. At low frequency, all the interface states follow the applied signal; at intermediate frequencies and fewer interface states are affected by the ac signal, which decreases the measured capacitance. At high frequency, the capacitance is independent of the interface states; this will occur when the time constant is too long to allow the load to move in and out of the interface states in response to an applied signal.²⁶ We can deduce the doping concentration value from the C^{-2} – V curve at high frequency. The value of the deduced doping concentration from C^{-2} – V is higher than the value given by the supplier, and this can be explained by the effect of electron accumulation at the GaN/GaAs interface due to the difference in electronic affinity of the two materials. If we use the

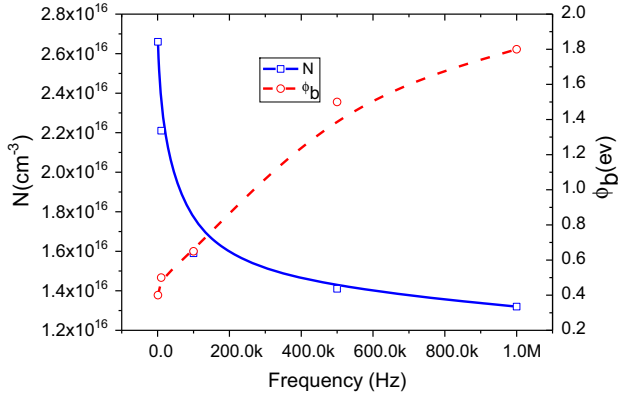


Fig. 4. The donor carrier concentration and barrier height versus the frequency of the Au/GaN/GaAs structure.

Mott–Schottky relationship, the value of the deduced concentration includes the doping concentration and any additional charges that may be contained in the semiconductor volume. The barrier height, Φ_b , increases with increasing frequency (as shown in Fig. 4). Similar results have been reported by several authors.^{27,40,41}

Structure Modeling

The Au/GaN/GaAs heterostructure can be modeled by the basic semiconductor Poisson and continuity equations as follows:

$$\frac{\partial \phi}{\partial x} = \frac{q}{\varepsilon} (-p + n - p_T + n_T - N_D^+ + N_A^-) \quad (5)$$

$$\frac{1}{q} \frac{\partial j_n}{\partial x} = U_n \quad (6)$$

$$\frac{1}{q} \frac{\partial j_p}{\partial x} = -U_p \quad (7)$$

Here, ϕ is the electrostatic potential, ε the dielectric constant, n and p are the densities of electrons and holes, respectively, N_D^+ and N_A^- are the doping concentrations with the assumption of completely ionized impurities, and n_t and p_t are the concentrations of trapped carriers of electrons in the acceptor states and holes in the donor states, respectively, which are⁴²

$$n_t = \int_{E_V}^{E_C} y_D(E_t) f_{ct}(E_t) dE_t \quad (8)$$

$$p_t = \int_{E_V}^{E_C} y_A(E_t) f_{vt}(E_t) dE_t \quad (9)$$

where y_A and y_D are the densities of acceptor and donor states, respectively, per unit volume and energy, and E_t is the energy of the defect state inside the forbidden gap. At thermal equilibrium, $f_{ct}(E)$ and $f_{vt}(E)$ are the functions of the occupation of the acceptor and donor traps, respectively, given by the kinetics of Shockley–Hall–Read⁴³:

$$f_{ct}(E) = \frac{C_n^{ct} p + C_p^{vt} n_1(E)}{C_p^{vt} (p + p_1(E)) + C_n^{ct} (n + n_1(E))} \quad (10)$$

$$f_{vt}(E) = 1 - f_{ct}(E) = \frac{C_n^{ct} n + C_p^{vt} p_1(E)}{C_p^{vt} (p + p_1(E)) + C_n^{ct} (n + n_1(E))} \quad (11)$$

where C_n^{ct} , C_p^{ct} , C_n^{vt} , and C_p^{vt} are the electron- and hole-capture sections by the valence and conduction band edges. For the generation–recombination rate, U , one finds

$$U = U_n = U_p = \int_{E_V}^{E_C} \left[y_A(E) \frac{\alpha_{nA} \alpha_{pA} n p - e_{nA} e_{pA}}{\alpha_{nA} n + e_{nA} + \alpha_{pA} p + e_{pA}} + y_D(E) \frac{\alpha_{nD} \alpha_{pD} n p - e_{nD} e_{pD}}{\alpha_{nD} n + e_{nD} + \alpha_{pD} p + e_{pD}} \right] dE \quad (12)$$

where e_{nA} , e_{pA} , e_{nD} , and e_{pD} are the emission rates, and α_{nA} , α_{pA} , α_{nD} , and α_{pD} are the capture constants.

There are various models of the continuous distribution of trap states: the exponential model, the Gaussian model and the uniform model.⁴⁴

The interface state density of the GaAs structure was observed by Hasegawa et al.⁴⁵ to be a U-shaped localized state continuum extending over the entire bandgap meaning that the interface state density increases exponentially from the midgap to the band edge.

$$N_{VT}(E) = N_{VT0} \exp\left(\frac{E_V - E}{kT_V}\right) \quad (13)$$

$$N_{CT}(E) = N_{CT0} \exp\left(\frac{E - E_C}{kT_C}\right) \quad (14)$$

Here, K_{TC} and K_{TV} are the characteristic levels of the acceptor and donor states, respectively, and N_{CT0} and N_{VT0} are the densities per unit of energy at the edge of the conduction and valence bands, respectively.

Several studies have suggested a Gaussian distribution for nitride MIS structures^{46–49}; the Gaussian distribution of states for donor and acceptor trap states are

$$N_{\text{dbd}}(E) = N_{\text{GD}} \exp\left(-\left(\frac{E - E_{\text{GD}}}{W_{\text{GD}}}\right)^2\right) \quad (15)$$

$$N_{\text{dba}}(E) = N_{\text{GA}} \exp\left(-\left(\frac{E - E_{\text{GA}}}{W_{\text{GA}}}\right)^2\right) \quad (16)$$

where $(N_{\text{GA}}, N_{\text{GD}})$ is the maximum density of the interface state, $(W_{\text{GA}}, W_{\text{GD}})$ is the standard deviation of the Gaussian distribution, and $(E_{\text{GD}}, E_{\text{GA}})$ is the peak position of the interface state distribution.

In our study, we used both distributions (Gaussian and exponential) in order to obtain more generalized shapes, the energetic distribution of the trap states is the superposition of two exponential distributions and the two Gaussian distributions of the acceptor and the donor, as seen in Fig. 5. The total interface state distribution for the acceptor and the donor are, respectively:

$$y_{\text{A}}(E) = N_{\text{VT0}} \exp\left(\frac{E_{\text{v}} - E}{kT_{\text{V}}}\right) + N_{\text{GA}} \exp\left(-\left(\frac{E - E_{\text{GA}}}{W_{\text{GA}}}\right)^2\right) \quad (17)$$

$$y_{\text{D}}(E) = N_{\text{CT0}} \exp\left(\frac{E - E_{\text{c}}}{kT_{\text{C}}}\right) + N_{\text{GD}} \exp\left(-\left(\frac{E - E_{\text{GD}}}{W_{\text{GD}}}\right)^2\right) \quad (18)$$

The differential capacitance of the structure has been calculated as follows:

$$C = \frac{\Delta Q}{\Delta V} \quad (19)$$

where ΔQ is the difference in the charge induced in the structure for two very close external voltages with difference ΔV .²³

Numerical Solution

The obtained equation system has too many unknown variables, which makes it difficult to solve. For this, we must simplify it to a system of three equations with three unknown variables, which are the electrostatic potential, ϕ , and the two concentrations, n and p . The equations are considered highly nonlinear due to the exponential terms found in the expressions of n and p .

The partial differential equations are discretized using the finite differences method. The grid was built with nonequally spaced points with applied discretization and is sufficiently sharp in the junction (GaAs/GaN) to allow an accurate calculation.⁵⁰

Among numerical methods existing in the literature that can solve the equation system, we used the finite difference method: after discretization of the studied domain, we replaced the differential equa-

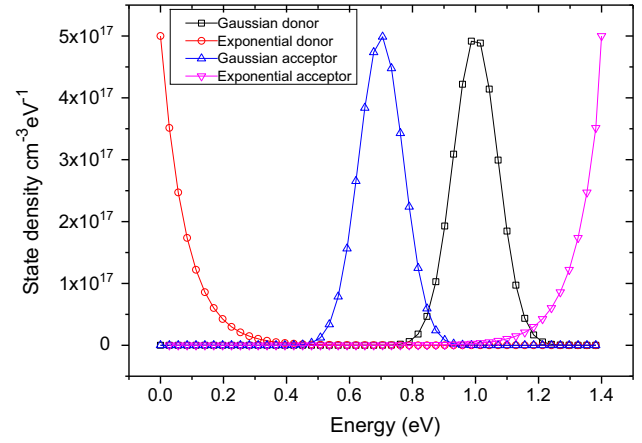


Fig. 5. Gaussian and exponential distribution profiles of continuous state density in the bandgap.

tion by a difference equation. The algorithm developed by Gummel⁵¹ was used to solve for the system. The algorithm is based on successively solving the three equations of the system. Each equation is solved based on the estimation of the other unknown solutions. The corrected value of each unknown variable is updated in the next equation. This iterative process will be repeated alternately until the convergence of the three equations.

RESULTS AND DISCUSSION

After the characterization of the Schottky structure, we investigated the effects of two major parameters on the nitride metal semiconductor structure characteristics: continuous energy distribution of interface state parameters and the doping concentration of GaAs ND.

The first application of our model for the Au/GaN/GaAs structure was carried out for various interface trap distribution profiles: Gaussian ($w1, w2, w3$), exponential ($u1, u2, u3$) and the sum both (uw), with maximum values up to $7 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}\text{eV}^{-1}$ and minimum values down to $7 \times 10^6 \text{ cm}^{-2}\text{eV}^{-1}$, as illustrated in Fig. 6, and a doping concentration of $ND = 10^{14} \text{ cm}^{-3}$. The simulated C–V characteristics at low frequency are shown in Fig. 7.

The examination of the simulated C–V characteristics clearly shows the influence of the trap distribution shape on the C–V curve form: at reverse polarization, the capacitance stays practically constant, except for the $u3$ profile, which has a heavy distribution of the traps ($7 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}\text{eV}^{-1}$) at both edges of the bandgap. The negative value of the computed capacitance is a result of occupied states at metal–semiconductor interfaces with considerably high densities²⁸ and carrier capture and emission from the interface states.⁵²

In direct bias, all the u and w curves are similar, except for the $w3$ trap distribution (peak $7 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}\text{eV}^{-1}$). On the other hand, the uw profile exhibits a peak at approximately 0.6 V, which coin-

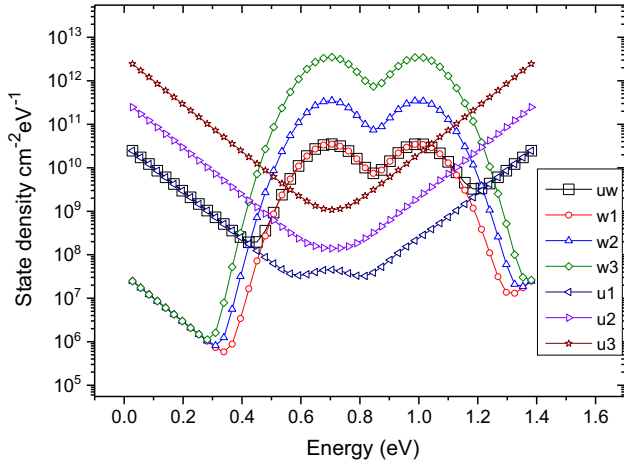


Fig. 6. Various Gaussian ($w1$, $w2$, $w3$), exponential ($u1$, $u2$, $u3$) and the sum of both (uw) interface trap distributions in the energy gap used for capacitance curve simulations.

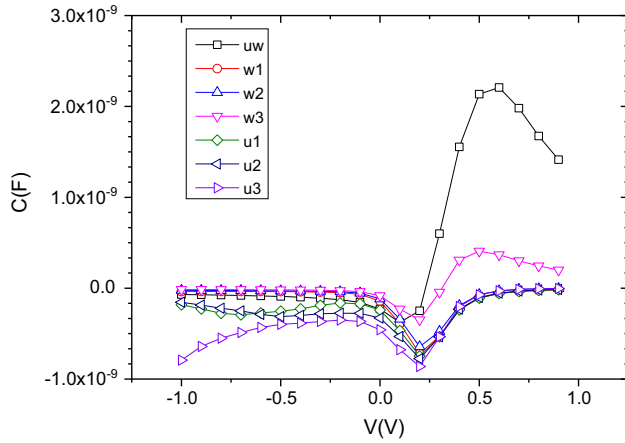


Fig. 7. Simulated capacitance curves for several interface trap distributions.

cides perfectly with the experimental observations; this form is the sum of the exponential and Gaussian distributions, which made more interface traps follow the signal and created excess capacitance and anomalous peaks.⁵³

The effect of doping concentration was investigated by simulating the capacitance characteristics at low frequency using our model with several values of GaAs uniform doping concentration, ranging between 2×10^{13} and 1×10^{15} with the uw interface trap distribution form, which gave good results in the first simulation and is illustrated in Fig. 8. We notice from the $C-V$ curves that there is no significant change in reverse bias as the doping concentration changes; the variations are only visible in the $C^{-2}-V$ curves shown in Fig. 9.

It is clear that the curve is linear, and that the slope has a direct relationship with ND , as has been demonstrated and discussed previously, both by experiments and analytical Mott-Schottky equa-

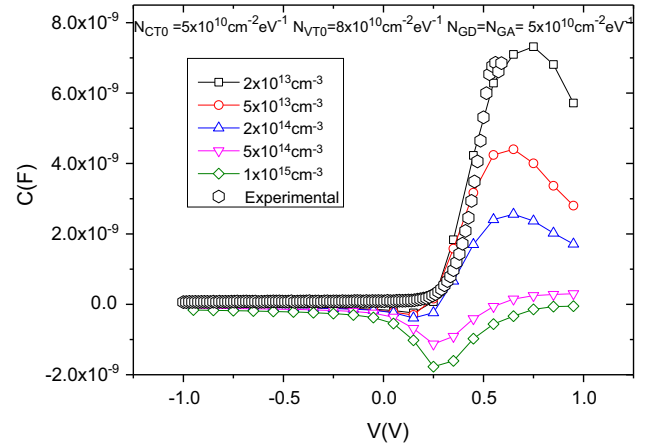


Fig. 8. Simulated capacitance curves for several values of doping concentration with experimental results.

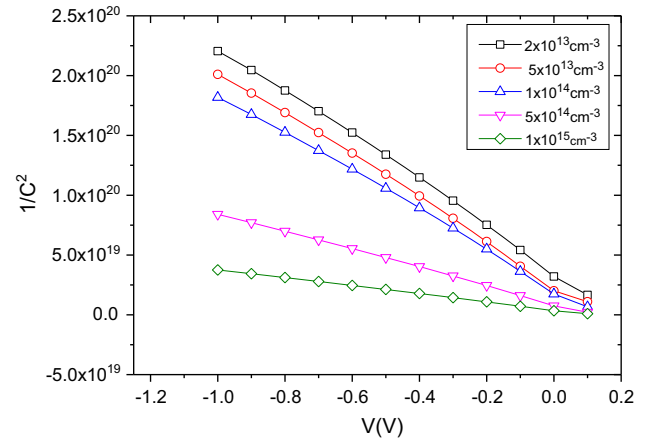


Fig. 9. Simulated $C^{-2}-V$ curves for several values of the doping concentration.

tions. The direct bias $C-V$ curves exhibit peaks at approximately 0.6 V, and the maximum values decrease gradually as the doping concentration increases, from 7.3×10^{-9} F at 2×10^{13} cm^{-3} to 3×10^{-10} F at 5×10^{14} cm^{-3} . A possible explanation for this behavior is that the interface trap state density becomes increasingly negligible, while the doping concentration increases.

To validate our model, we compared a simulated quasi-static $C-V$ curve with low-frequency (1 kHz) experimental measurements; the fitting parameters were doping concentration and distribution of interface trap states.

The analysis of computed $C-V$ characteristics shows that, in order to obtain a sharp peak at 0.6 V, the N_{ss} distribution must take both exponential and Gaussian forms and have a doping concentration ND below 10^{14} cm^{-3} . The low GaAs speculation of the simulation can be attributed to the effect of annealing on the carrier concentration; several studies have reported that annealing with a tem-

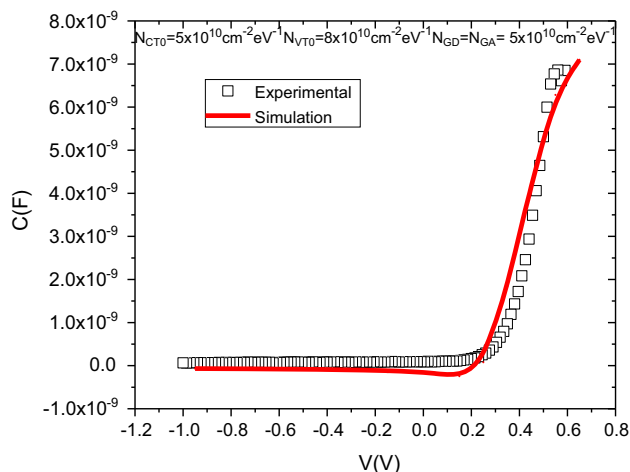


Fig. 10. Experimental and simulated low-frequency capacitance curves.

perature above 600°C could significantly reduce the concentration of carriers.^{54,55}

As seen in Fig. 10, the experimental low-frequency (1 kHz) C – V characteristics have good agreement with computed C – V characteristics. This adjustment was obtained for the density values of the band tail states ($N_{CT0} = 5 \times 10^{10} \text{ cm}^{-3} \text{ eV}^{-1}$, $N_{VT0} = 8 \times 10^{10} \text{ cm}^{-3} \text{ eV}^{-1}$), Gaussian peak parameters ($N_{GD} = N_{GA} = 5 \times 10^{10} \text{ cm}^{-3} \text{ eV}^{-1}$) and work function $\phi_m = 4.8 \text{ eV}$.

CONCLUSION

In this study, a Au/GaN/GaAs Schottky diode was elaborated and its frequency-dependent capacitance–voltage characteristics were investigated. The experimental C – V curves exhibit an anomalous peak and negative capacitance phenomena caused by the continuous distribution of the interface state density, especially at low frequencies. Structure parameters for this diode, such as carrier concentration N and barrier height ϕ_{bn} , have been calculated via C – V measurements at several frequencies.

A numerical model was developed to study the effects of the physical and electrical parameters on the low-frequency capacitance–voltage characteristics of the Au/GaN/GaAs Schottky diode. The implementation of the program was a very difficult task, which required a great deal of refinement with the problems that had arisen during the implementation. We considered both the exponential and Gaussian distributions of trap states in the band gap. A good agreement was obtained between the experimental and computed C – V characteristics at low frequency. Adjustments were obtained for the density values of the band tail states ($N_{CT0} = 5 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3} \text{ eV}^{-1}$, $N_{VT0} = 8 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3} \text{ eV}^{-1}$), Gaussian peak parameters ($N_{GD} = N_{GA} = 5 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3} \text{ eV}^{-1}$) and work function of gold $\phi_m = 4.8 \text{ eV}$.

REFERENCES

- O. Wada, *Opt. Quantum Electron.* 20, 441 (1988).
- C.J. Sudha Mokkaapati, S. Mokkaapati, and C. Jagadish, *Mater. Today* 12, 22 (2009).
- F. Schwier and J.J. Liou, *Solid State Electron.* 51, 1079 (2007).
- J. Yoon, S. Jo, I.S. Chun, I. Jung, H.-S. Kim, M. Meitl, E. Menard, X. Li, J.J. Coleman, U. Paik, and J.A. Rogers, *Nature* 465, 329 (2010).
- R.J. Nelson, J.S. Williams, H.J. Leamy, B. Miller, H.C. Casey, B.A. Parkinson, and A. Heller, *Appl. Phys. Lett.* 36, 76 (1980).
- M. Ambrico, M. Losurdo, P. Capezzuto, G. Bruno, T. Ligonzo, L. Schiavulli, I. Farella, and V. Augelli, *Solid State Electron.* 49, 413 (2005).
- M.K. Hudait and S.B. Krupanidhi, *Mater. Sci. Eng. B Solid-State Mater. Adv. Technol.* 87, 141 (2001).
- K.W. Vogt and P.A. Kohl, *J. Appl. Phys.* 74, 6448 (1993).
- M.A. Ebeoğlu, *Phys. B Condens. Matter* 403, 61 (2008).
- S. Anantathanasarn and H. Hasegawa, *J. Vac. Sci. Technol. B Microelectron. Nanometer Struct.* 19, 1589 (2001).
- Z. Benamara, N. Mecirdi, B.B. Bouiadjra, L. Bideux, B. Gruzza, C. Robert, M. Miczek, and B. Adamowicz, *Appl. Surf. Sci.* 252, 7890 (2006).
- A.H. Kacha, B. Akkal, Z. Benamara, M. Amrani, A. Rabhi, G. Monier, C. Robert-Goumet, L. Bideux, and B. Gruzza, *Superlattices Microstruct.* 83, 827 (2015).
- A. Rabehi, M. Amrani, Z. Benamara, B. Akkal, and A.H. Kacha, *Opt. Int. J. Light Electron. Opt.* 127, 6412 (2016).
- A. Rabehi, M. Amrani, Z. Benamara, B. Akkal, A.H. Kacha, C. Robert-Goumet, G. Monier, and B. Gruzza, *Eur. Phys. J. Appl. Phys.* 72, 10102 (2015).
- N. Zougagh, Z. Benamara, H. Mazari, N. Benseddik, K. Ameer, G. Monier, L. Bideux, and B. Gruzza, *Sens. Lett.* 9, 2211 (2011).
- M. Sakhaf and M. Schmeits, *J. Appl. Phys.* 80, 6839 (1996).
- V. Matolin, S. Fabik, J. Glosik, L. Bideux, Y. Ould-Metidji, and B. Gruzza, *Vacuum* 76, 471 (2004).
- Z.H. Lu, C. Lagarde, E. Sacher, J.F. Currie, and A. Yelon, *J. Vac. Sci. Technol. A Vac. Surf. Film* 7, 646 (1989).
- T. Tiedje, P.C. Wong, and K.A.R. Mitchell, *Solid State Commun.* 70, 389 (1989).
- L.L. Smith, S.W. King, R.J. Nemanich, and R.F. Davis, *J. Electron. Mater.* 25, 805 (1996).
- K.S. Kim, R.K. Gupta, G.S. Chung, and F. Yakuphanoglu, *J. Alloys Compd.* 509, 10007 (2011).
- İ. Taşcıoğlu, W.A. Farooq, R. Turan, Ş. Altındal, and F. Yakuphanoglu, *J. Alloys Compd.* 590, 157 (2014).
- J. Osvald, R. Stoklas, and P. Kordoš, *Mater. Sci. Semicond. Process.* 31, 525 (2015).
- A. Tataroğlu and Ş. Altındal, *Microelectron. Eng.* 85, 2256 (2008).
- S. Karataş, F. Yakuphanoglu, and F.M. Amanullah, *J. Phys. Chem. Solids* 73, 46 (2012).
- A. Tataroğlu and Ş. Altındal, *Microelectron. Eng.* 83, 582 (2006).
- B. Tataroğlu, Ş. Altındal, and A. Tataroğlu, *Microelectron. Eng.* 83, 2021 (2006).
- X. Wu, E.S. Yang, and H.L. Evans, *J. Appl. Phys.* 68, 2845 (1990).
- B. Akkal, Z. Benamara, B. Gruzza, and L. Bideux, *Vacuum* 57, 219 (2000).
- J. Werner, A.F.J. Levi, R.T. Tung, M. Anzlowar, and M. Pinto, *Phys. Rev. Lett.* 60, 53 (1988).
- B. Bati, C. Nuhoglu, M. Saglam, E. Ayyildiz, and A. Turut, *Phys. Scr.* 61, 209 (2000).
- M. Gökçen, H. Altuntaş, Ş. Altındal, and S. Özçelik, *Mater. Sci. Semicond. Process.* 15, 41 (2012).
- K.S.A. Butcher, T.L. Tansley, and D. Alexiev, *Solid State Electron.* 39, 333 (1996).
- E. Arslan, Y. Şafak, Ş. Altındal, Ö. Kelekçi, and E. Özbay, *J. Non. Cryst. Solids* 356, 1006 (2010).

35. D. Korucu, Ş. Altındal, T.S. Mammadov, and S. Özçelik, *J. Optoelectron. Adv. Mater.* 11, 192 (2009).
36. M. Ershov, H.C. Liu, L. Li, M. Buchanan, Z.R. Wasilewski, A.K. Jonscher, and I.E.E.E. Trans, *Electron Devices* 45, 2196 (1998).
37. V. Mikhelashvili, R. Padmanabhan, B. Meyler, S. Yofis, and G. Eisenstein, *J. Appl. Phys.* 120, 224502 (2016).
38. H. Mathieu and H. Fanet, *Physique Des Semiconducteurs et Des Composants Electroniques: Cours et Exercices Corrigees* (2009).
39. E.H. Rhoderick and R.H. Williams, *Metal-Semiconductor Contacts*, 2nd ed. (Oxford: Clarendon Press, 1988), p. 42.
40. D.A. Aldemir, M. Esen, A. Kökce, S. Karataş, and A.F. Özdemir, *Thin Solid Films* 519, 6004 (2011).
41. S. Zeyrek, E. Acaroğlu, Ş. Altındal, S. Birdoğan, and M.M. Bülbül, *Curr. Appl. Phys.* 13, 1225 (2013).
42. M. Schmeits, *Semicond. Sci. Technol.* 12, 1217 (1999).
43. D.K. Schroder, *Semiconductor Material and Device Characterization*, 3rd ed. (New Jersey: Wiley, 2006), p. 393.
44. N. Inoue, D.J. Lichtenwalner, J.S. Jur, and A.I. Kingon, *Jpn. J. Appl. Phys.* 46, 6480 (2007).
45. H. Hasegawa and T. Sawada, *Electron Devices IEEE Trans.* 27, 1055 (1980).
46. B. Bakeroot, S. You, J. Hu, M. Van Hove, B. De Jaeger, K. Geens, S. Stoffels, and S. Decoutere, *J. Appl. Phys.* 116, 134506 (2014).
47. M. Miczek, C. Mizue, T. Hashizume, and B. Adamowicz, *J. Appl. Phys.* 103, 104510 (2008).
48. T. Hashizume and H. Hasegawa, *Appl. Surf. Sci.* 234, 387 (2004).
49. S. Anantathanasarn and H. Hasegawa, *Appl. Surf. Sci.* 190, 343 (2002).
50. M. Amrani, H. Sehil, R. Menezla, Z. Benamara, and F. Raoult, *Solid State Electron.* 42, 1925 (1998).
51. H.K. Gummel, *IEEE Trans. Electron Devices* 11, 455 (1964).
52. W.Z. Shen and A.G.U. Perera, *Appl. Phys. A Mater. Sci. Process.* 72, 107 (2001).
53. Q. Wang, J. Chen, H. Tang, and X. Li, *Semicond. Sci. Technol.* 31, 65023 (2016).
54. M. Ogawa and T. Baba, *Jpn. J. Appl. Phys.* 24, L572 (1985).
55. N. Watanabe, T. Nittono, and K. Watanabe, *Appl. Phys. Lett.* 61, 1945 (1992).

Low- and High-Frequency C–V Characteristics of Au/n-GaN/n-GaAs

Abderrezzaq Ziane^{*,†,‡}, Mohamed Amrani^{*},
 Abdelaziz Rabehi^{*} and Zineb Benamara^{*}

^{*}*Laboratoire de Micro-électronique Appliquée
 Université Djillali Liabès de Sidi Bel Abbès
 BP 89, 22000, Sidi Bel Abbès, Algeria*

[†]*Unité de Recherche en Energies Renouvelables
 en Milieu Saharien, URERMS*

*Centre de Développement des Energies Renouvelables, CDER
 01000, Adrar, Algeria*

[‡]*a.ziane@urerms.dz*

Received 22 February 2018

Accepted 10 July 2018

Published 5 October 2018

Au/GaN/GaAs Schottky diode created by the nitridation of n-GaAs substrate which was exposed to a flow of active nitrogen created by a discharge source with high voltage in ultra-high vacuum with two different thicknesses of GaN layers (0.7 nm and 2.2 nm), the I–V and capacitance–voltage (C–V) characteristics of the Au/n-GaN/n-GaAs structures were studied for low- and high-frequency at room temperature. The measurements of I–V of the Au/n-GaN/n-GaAs Schottky diode were found to be strongly dependent on bias voltage and nitridation process. The electrical parameters are bound by the thickness of the GaN layer. The capacitance curves depict a behavior indicating the presence of interface state density, especially in the low frequency. The interface states density was calculated using the high- and low-frequency capacitance curves and it has been shown that the interface states density decreases with increasing of nitridation of the GaAs.

Keywords: Thin film; Schottky; GaAs; nitridation; C–V.

1. Introduction

In the recent decades, many researchers gave importance to the III–V and silicon devices in Optoelectronics and High-Frequency applications.^{1–4} The studies proved that the III–V devices have a high performance against silicon ones as a result of direct band gap and higher electron mobility.⁵

The III–V structures have many combinations, such InP GaP and GaN. Among them, GaAs is

widely used.^{6,7} In spite of its advantage, the GaAs has a major drawback; the high surface recombination which leads to increasing of the device noise and of the leakage currents.^{5,8} Yet, the GaAs structures remain desirable for various applications. Nitridation was adopted as a suitable method to reduce the effect of the drawbacks cited above due to its thermal and chemical stability.⁹

The nitridation technique has been used on the GaAs Schottky diode and studied for several years,

Benamara *et al.* determined the properties of the GaN/GaAs (100) using XPS technique.¹⁰ Rabehi *et al.* studied the electrical and photoelectrical properties of GaN/Au/GaAs.^{11,12} The effects of annealing on the electrical properties in the Schottky diodes based on nitrated GaAs were investigated by Kacha *et al.*¹³

In this work we have used an Au/GaN/GaAs Schottky diode created by the nitridation of GaAs substrate which was exposed to a flow of active nitrogen created by a discharge source with high voltage in ultra-high vacuum. We have adopted a different approach than conventional method based on linear logarithmic scale of I-V characteristics^{9,11,13} to study the Au/GaN/GaAs diode characteristics and the interface quality between the deposited metal and the semiconductor surface, which is an important factor in the Schottky diode performance.

The method is based on the work of Chattopadhyay^{14,15} by using experimental C-V characteristics measured in high- and low-frequency and the I-V characteristics. The main criteria that defines low frequency is that all the trap states can follow the applied AC signal by contrast and it is typically 10 kHz and lower, in high frequency none of the trap states follow the applied AC signal and it is typically 1 MHz and higher.

We aim to extract mainly the state interface density alongside other electrical parameters like the barrier height (ϕ_b), the ideality factor (n) and surface potential (ψ_s).

2. Experimental Procedures

A singular glow discharge source (GDS) described in the work of Matolín¹⁶ was used for the nitridation.

Before nitridation, the GaAs (100) substrate was heated to 500°C for duration of 1 h. Heating the substrate is a typical process used in order to reconstruct the surface of the GaAs,¹² the temperature and the duration are a results of extensive past studies on the subject.^{17–19} For substrates annealed at 500°C, the interface impurity concentrations of C and O are better than other techniques,¹⁷ which means better device performance.

The samples were then kept under flow nitrogen for a chosen time (5 min sample 1, 30 min sample 2).

The procedures were performed in a home-built UHV chamber equipped with an XPS system

Table 1. Preparation procedure of samples.

Concentration	Condition of nitridation	GaN thickness	Contact
4.9×10^{15}	500°C, 5 W, 5 min	0.7 nm	Au
4.9×10^{15}	500°C, 5 W, 30 min	2.2 nm	Au

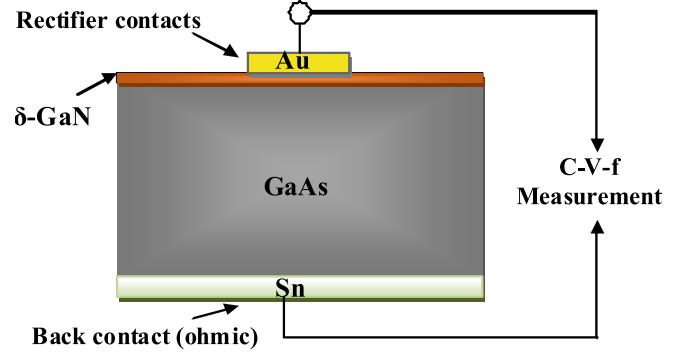


Fig. 1. Schematic of Au/n-GaN/n-GaAs diode.

(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 α source (1253.6 eV) at an incident angle of 55° (normal detection, pass energy of the analyzer equal to 20 eV).¹¹

The preparation procedure for our samples is shown in Table 1.

The structure (Fig. 1) was 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.

The I-V measurements were performed using a HP4155B semiconductor parameter analyzer. The C-V measurements were performed at 1 MHz and 10 KHz using a KEITHLEY test system 590 C-V analyzer at room temperature.

3. Results and Discussions

The typical electrical characteristics of Au/GaN/GaAs investigated by I-V measurements at room temperature are shown in Fig. 2.

We note that the behavior of these samples can be described using the forward bias thermionic emission equations, the current is given by²⁰

$$I = I_0 \exp \left(-\frac{q(V - IR_s)}{kT} \right), \quad (1)$$

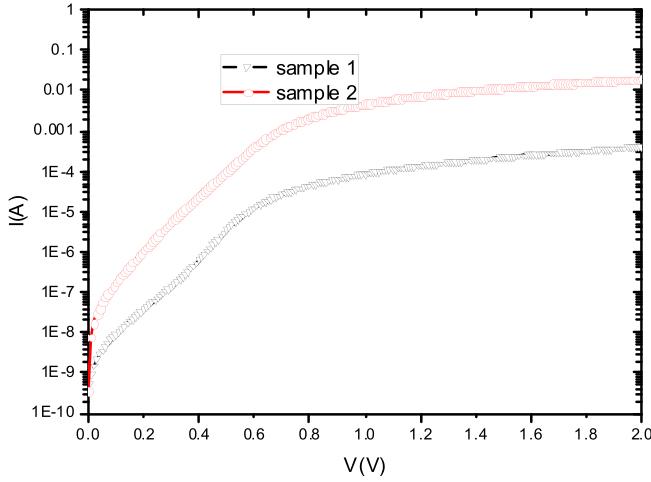


Fig. 2. Forward current versus voltage characteristics at room temperature of the Au/GaN/GaAs structures.

$$I_0 = AA^*T^2 \exp\left(-\frac{q\phi_b}{kT}\right), \quad (2)$$

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).

At low voltage (0–500 mV), the variation of the I–V characteristics is linear, nevertheless when the applied voltage increases, several parameters intervene to disturb the linearity of the I–V characteristics, such as interface states D_{it} and series resistances R_s .¹¹

From the figure, it can be noticed clearly that the magnitude of direct current of the Sample 2 (GaN 2.2 nm) is greater than those of Sample 1 (GaN 0.7 nm), which means that the thickness of the GaN layer plays an important role in the electrical characteristics of the structure and it can be concluded that the more nitridation of the GaAs, the better conductivity of the device in forward polarization.

The barrier height, the ideality factor, had been extracted using the experimental I–V characteristics using Eqs. (1) and (2), as shown in Table 2.

It is well establish that the value of barrier height can be reduced using insertion of interfacial layer in

Table 2. Experimental parameters extracted from I(V) measurements on Au/GaN/GaAs structures.

Sample	The barrier height	The ideality factor
Sample 1	0.64	2.86
Sample 2	0.56	1.43

Schottky structures,^{21–23} in Table 2 we can see that the barrier height decreased when the thickness of the interfacial layer increased, also the ideality factor reduced significantly from 2.86 to half (1.43) as a result of nitridation.

The electrical current of a Schottky diode can be written as a function of the surface potential

$$I = AA^*T^2 \exp\left(-\frac{qV_n}{kT}\right) \exp\left(-\frac{q\psi_s}{kT}\right). \quad (3)$$

Figure 3 represents the surface potential which we had extracted using Eq. (4) and the electrical current measurements by replacing experimental data in analytical the relation

$$\psi_s = \frac{kT}{q} \ln\left(\frac{AA^*T^2}{I}\right) - V_n. \quad (4)$$

Here, V_n is the potential difference between the conduction band (EC) and the Fermi level (EFS) of the semiconductor, given by²⁴

$$V_n = \frac{kT}{q} \ln\left(\frac{N_C}{N_d}\right). \quad (5)$$

The density of states in the conduction band edge is given by $N_C = 2(2\pi m^* kT/h^2)^{3/2}$, where $m^* = 0.067 m_o$, and its value is $0.4 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ for GaAs.²⁵

Nd doping concentration was extracted from the slope of $C^{-2}(V)$ characteristics at room temperature measured at a frequency of 1 MHz.

From Fig. 3, we can notice that the surface potential of first sample is greater and more linear than that of the second, which can be attributed to effect of passivation of GaAs nitridation.

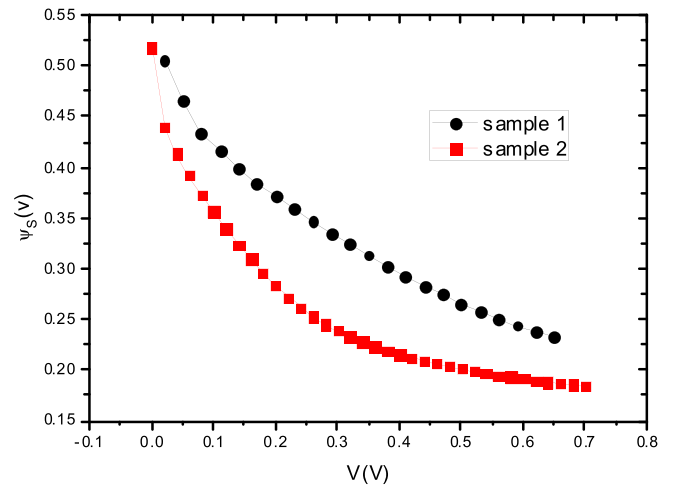


Fig. 3. Variation of surface potential (ψ_s) with forward voltage (V) for the Au/GaN/GaAs structures.

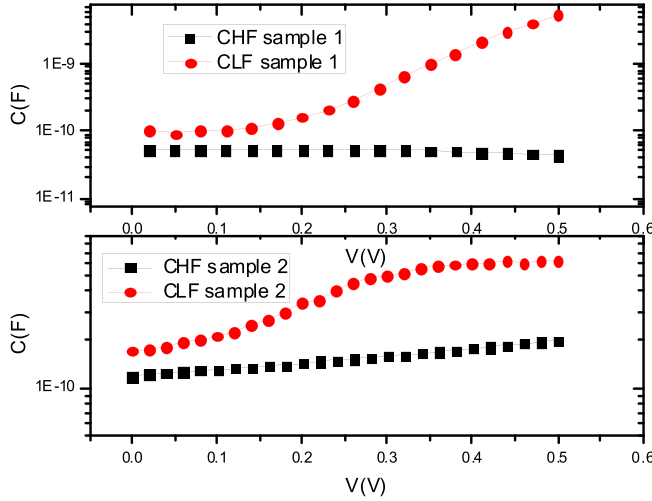


Fig. 4. Experimental forward-bias capacitance-voltage at two different frequencies and room temperature, of the Au/GaN/GaAs structure.

The interface states have different lifetimes. At low frequencies, all the interface states follow the AC signal, at average frequencies, fewer interface states are bound by the AC signal, which reduces the measured capacitance. At high frequency, theoretically none of the interface states follows the AC signal, therefore the interface states have no effect on the capacitance,²⁶ typically, low frequency is 10 kHz or less and high frequency is 1 MHz.^{27,28} The C-V measurement of the structure at two different frequencies (10 kHz, 1 MHz) was represented in Fig. 4.

The high frequency capacitances of both samples are basically constant across the values of direct polarization, contrariwise the low-frequency capacitances augment for values superior than 0.2 V, this phenomenon can be explained by the presence of the interface states which follow the signal in low frequencies and cannot do that with high frequencies.^{29,30}

The capacitance at low frequency increases with the forward bias, the interface states respond to the AC signal, the low-frequency capacitance is given

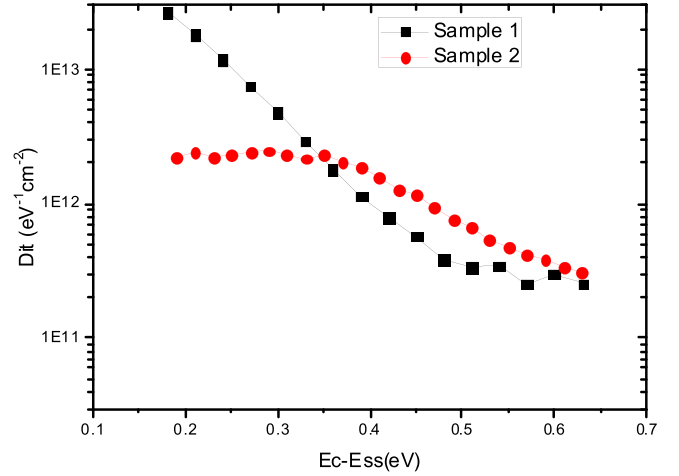


Fig. 5. The interface state energy distribution of the Au/GaN/GaAs structures.

by^{15,31}

$$C_{LF} = \frac{\sqrt{q\epsilon_s N_d / 2\psi_s} + qD_{it}}{1 + qjR_s / kT + \frac{\delta}{\epsilon_i} \left(\sqrt{q\epsilon_s N_d / 2\psi_s} + qD_{it} \right)}, \quad (6)$$

where d is the thickness of the interfacial layer, D_{it} is the interface state density and ϵ_i and ϵ_s represent the permittivity of the interfacial layer and that of the semiconductor, respectively. The high frequency capacitance stays practically constant, the interface states cannot follow the AC signal, the capacitance can be expressed as^{15,31}

$$C_{HF} = \frac{\sqrt{q\epsilon_s N_d / 2\psi_s}}{1 + qjR_s / kT + \frac{\delta}{\epsilon_i} \left(\sqrt{q\epsilon_s N_d / 2\psi_s} \right)}. \quad (7)$$

Using Eqs. (6) and (7), the interface state density D_{it} can be written as^{15,31}

$$D_{it} \approx \sqrt{q\epsilon_s N_d / 2\psi_s} \frac{C_{LF} - C_{HF}}{qC_{HF}}. \quad (8)$$

The interface state density, D_{it} , has been calculated from the experimental C-V at low frequency

Table 3. The comparison of our results with the available data on Au/GaN/GaAs structures.

Reference	Used method	Gap edge D_{it}	Midgap D_{it}
Kacha <i>et al.</i> ¹³	HF C-V	$3.5 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2} \text{ eV}^{-1}$	$9.5 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2} \text{ eV}^{-1}$
Rabehi <i>et al.</i> ¹¹	I-V without R_s	$3.5 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2} \text{ eV}^{-1}$	$4.7 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2} \text{ eV}^{-1}$
Ebeoğlu <i>et al.</i> ⁹	I-V without R_s	$4 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2} \text{ eV}^{-1}$	$4.2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2} \text{ eV}^{-1}$
Sample 1	HF LF C-V	$3.7 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2} \text{ eV}^{-1}$	$5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2} \text{ eV}^{-1}$
Sample 2	HF LF C-V	$4 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2} \text{ eV}^{-1}$	$5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2} \text{ eV}^{-1}$

(measured at 10 kHz) and C–V at high frequency (measured at 1 MHz) by using Eq. (8).

The surface potential ψ_s values have been extracted from measured I–V characteristics. The interface states E_{ss} with respect to the bottom of the conduction band at the surface of the semiconductor is given by³²

$$E_c - E_{ss} = q\Phi_{bn} - qV. \quad (9)$$

The examination of Fig. 5 shows that the interface state energy density decreases when approaching the middle of the band gap, from $3.7 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2} \text{ eV}^{-1}$ in $(E_c - 0.2) \text{ eV}$ to $5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2} \text{ eV}^{-1}$ in $(E_c - 0.6) \text{ eV}$ for Sample 1 and from $4 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2} \text{ eV}^{-1}$ in $(E_c - 0.1) \text{ eV}$ to $5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2} \text{ eV}^{-1}$ in $(E_c - 0.6) \text{ eV}$ for Sample 2, the interface state energy density decreases from $1.12 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2} \text{ eV}^{-1}$ at $(E_c - 0.25) \text{ eV}$ for Sample 1 (0.7 nm GaN) to $3.12 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2} \text{ eV}^{-1}$ at about the same position for the Sample 2 (2.2 nm GaN). This decrease is the result of the passivation effect of GaN interfacial layer on GaAs.

The comparison of our results with available data on the subject is summarized in Table 3.

We can see clearly that the obtained results of the gap band edge D_{it} are in agreement with the past findings that used different methods; Sample 1 D_{it} of $3.7 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2} \text{ eV}^{-1}$ is close to the results of Kacha *et al.*¹³ Rabehi *et al.*¹¹ with $3.5 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2} \text{ eV}^{-1}$ and the Sample 2 D_{it} of $4 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2} \text{ eV}^{-1}$ is the same as the work of Ebeoğlu *et al.*⁹ but on the other hand, the results of D_{it} at midgap is different and lower with our method than the others which can be explained by the fact that capacitance measurement especially at low frequency are more sensitive to the interface density states than I–V measurement.

4. Conclusion

The article presents a low-frequency and high-frequency capacitance study of Au/GaN/GaAs structure realized by GDS nitridation of GaAs surface.

The examination of electrical parameters of the barrier height, ideality factor and surface potential extracted using I–V forward bias measurement showed that the nitridation can enhance conductivity and reduce the barrier height and ideality factor values.

The energy distribution profiles of the D_{it} were obtained from the C–V characteristics measured in high and low frequencies.

The interface state density is found to decrease with an increase in energy from the edge of the conduction band. The passivation of GaAs surface with the formation of the GaN interfacial layer improves the diode characteristics by reducing the density values of the interface states.

References

1. R. A. Soref, *Proc. IEEE* **81**, 1687 (1993), doi: 10.1109/5.248958.
2. D. L. Mathine, *IEEE J. Sel. Top. Quantum Electron.* **3**, 952 (1997), doi: 10.1109/2944.640649.
3. H. Föll, J. Carstensen, S. Langa, M. Christophersen and I. M. Tiginyanu, *Phys. Status Solidi* **197**, 61 (2003), doi: 10.1002/pssa.200306469.
4. F. Schwierz and J. J. Liou, *Solid-State Electron.* **51**, 1079 (2007), doi: 10.1016/j.sse.2007.05.020.
5. M. Ambrico *et al.*, *Solid-State Electron.* **49**, 413 (2005), doi: 10.1016/j.sse.2004.11.007.
6. O. Wada, *Opt. Quantum Electron.* **20**, 441 (1988), doi: 10.1007/BF00635747.
7. S. C. J. Mokkapati, *Mater. Today* **12**, 22 (2009), doi: 10.1016/j.synthmet.2011.03.019.
8. R. J. Nelson *et al.*, *Appl. Phys. Lett.* **36**, 76 (1980), doi: 10.1063/1.91280.
9. M. A. Ebeoğlu, *Phys. B Condens. Matter* **403**, 61 (2008), doi: 10.1016/j.physb.2007.08.008.
10. Z. Benamara *et al.*, *Appl. Surf. Sci.* **252**, 7890 (2006), doi: 10.1016/j.apsusc.2005.09.056.
11. A. Rabehi *et al.*, *Eur. Phys. J. Appl. Phys.* **72**, 10102 (2015), doi: 10.1051/epjap/2015150140.
12. A. Rabehi, M. Amrani, Z. Benamara, B. Akkal and A. H. Kacha, *Opt. Int. J. Light Electron. Opt.* **127**, 6412 (2016), doi: 10.1016/j.ijleo.2016.04.113.
13. A. H. Kacha *et al.*, *Superlattices Microstruct.* **83**, 827 (2015), doi: 10.1016/j.spmi.2015.04.017.
14. P. Chattopadhyay and B. Raychaudhuri, *Solid State Electronics* **36**, 605 (1993).
15. P. Chattopadhyay, *Solid-State Electron.* **39**, 1491 (1996), doi: 10.1016/0038-1101(96)00058-5.
16. V. Matolín, S. Fabík, J. Glosík, L. Bideux, Y. Ould-Metidji and B. Gruzza, *Vacuum* **76**, 471 (2004), doi: 10.1016/j.vacuum.2003.12.163.
17. K. D. Choquette *et al.*, *J. Appl. Phys.* **73**, 2035 (1993), doi: 10.1063/1.353148.
18. M. Losurdo, P. Capezzuto, G. Bruno and E. Irene, *Phys. Rev. B Condens. Matter Mater. Phys.* **58**, 15878 (1998), doi: 10.1103/PhysRevB.58.15878.
19. M. Losurdo, P. Capezzuto and G. Bruno, *Mater. Sci. Eng. B Solid-State Mater. Adv. Technol.* **59**, 150 (1999), doi: 10.1016/S0921-5107(98)00384-5.
20. M. A. Ebeoğlu, T. Kiliçoğlu and M. E. Aydin, *Phys. B Condens. Matter* **395**, 93 (2007), doi: 10.1016/j.physb.2007.02.063.

21. H.-S. Wong, L. Chan, G. Samudra and Y.-C. Yeo, *IEEE Electron. Device Lett.* **28**, 1102 (2007), doi: 10.1109/LED.2007.910003.
22. J. Y. J. Lin, A. M. Roy, A. Nainani, Y. Sun and K. C. Saraswat, *Appl. Phys. Lett.* **98**, 5 (2011), doi: 10.1063/1.3562305.
23. Z. Yuan, A. Nainani, Y. Sun, J. Y. J. Lin, P. Pianetta and K. C. Saraswat, *Appl. Phys. Lett.* **98**, 1 (2011), doi: 10.1063/1.3584862.
24. H. Mathieu and H. Fanet, *Physique Des Semiconducteurs et Des Composants Electroniques*, Cours et Exercices Corrigees (Dunod, France, 2009).
25. N. Zougagh et al., *Sens. Lett.* **9**, 2211 (2011), doi: 10.1166/sl.2011.1817.
26. A. Tataroğlu and Ş. Altındal, *Microelectron. Eng.* **83**, 582 (2006), doi: 10.1016/j.mee.2005.12.014.
27. A. O. Cetinkaya, S. Kaya, A. Aktag, E. Budak and E. Yilmaz, *Thin Solid Films* **590**, 7 (2015), doi: 10.1016/j.tsf.2015.07.053.
28. S. Ghosh and P. C. Srivastava, *J. Electron. Mater.* **43**, 4357 (2014), doi: 10.1007/s11664-014-3392-y.
29. D. A. Aldemir, M. Esen, A. Kökce, S. Karataş and A. F. Özdemir, *Thin Solid Films* **519**, 6004 (2011), doi: 10.1016/j.tsf.2011.04.011.
30. A. Ziane, M. Amrani, Z. Benamara and A. Rabehi, *J. Electron. Mater.* **47**, 1 (2018), doi: 10.1007/s11664-018-6408-1.
31. S. Chattopadhyay, L. K. Bera, S. K. Ray, P. K. Bose and C. K. Maiti, *Thin Solid Films* **335**, 142 (1998), doi: 10.1016/S0040-6090(98)00892-X.
32. Ç. Nuhoglu, C. Temirci, B. Bati, M. Biber and A. Türüt, *Solid-State Commun.* **115**, 291 (2000), doi: 10.1016/S0038-1098(00)00193-9.