RÉPUBLIQUE ALGÉRIENNE DÉMOCRATIQUE ET POPULAIRE MINISTÈRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPÉRIEUR ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE

UNIVERSITÉ DJILLALI LIABES DE SIDI BEL ABBÉS

FACULTÉ DES SCIENCES DE L'INGENIEUR

THESE

Présentée pour obtenir le diplôme de

DOCTEUR EN ELECTRONIQUE

(Spécialité : Micro-Electronique)

Par M^r ZOUGAGH NABIL

Thème

Etude des Nano-composants Nitrures/substrat III/V à base d'arséniure de gallium - caractérisation électrique et modélisation associées

Soutenue publiquement le 19/12/2012, devant les membres du jury :

M^{R}	B. AKKAL
\mathbf{M}^{me}	Z. BENAMARA
\mathbf{M}^{me}	H. MAZARI
M ^{me}	G. A. BOUAZZA
M^{R}	B. LASRI
M^{R}	M. SAHNOUN
M^{R}	M. CHELLALI

Président Encadreur Co-Encadreur Examinatrice Examinateur Examinateur Membre Invité Pr. Université de Sidi bel abbés
Pr. Université de Sidi bel abbés
Pr. Université de Sidi bel abbés
MCA. Université de Tlemcen
MCA. Université de Saïda
MCA. Université de Mascara
Pr. Université de Sidi bel abbés

Année Universitaire 2012-2013

Remerciements

Remerciements

Ce travail de thèse de doctorat s'est déroulé au Laboratoire de Microélectronique Appliquée (AMEL) de l'université Djillali Liabes de Sidi Bel Abbés.

Je tiens à remercier Monsieur SAHNOUN Mohamed Maitre de Conférences de classe A à l'Université de Mascara, Madame BOUAZZA GUEM Ahlam Maitre de Conférences de classe A à l'Université de Tlemcen ainsi que Monsieur LASRI Boumediene Maitre de Conférences de classe A à l'Université de Saïda, trouvent ici l'expression de ma gratitude pour avoir accepté de juger mon travail en tant qu'examinateurs.

Je remercie Monsieur AKKAL Boudali, Professeur à l'Université de sidi bel abbés 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 tiens à remercier Monsieur CHELLALI. Mohammed, Professeur à l'université de Sidi Bel Abbés d'avoir accepté d'être membre invité du jury. Ces orientations et discussions scientifiques m'ont été d'une aide considérable.

Un grand merci à mon co-directeur de thèse, Madame MANSOUR. Halima, Professeur à l'Université de Sidi Bel Abbés, non seulement pour m'avoir supporté toute ces années au sein de laboratoire Microélectronique Appliquée, mais aussi pour son soutien et de m'avoir insufflé le désir et la passion de la recherche.

Cette thèse à été dirigée par Madame BANAMARA. Zineb, Professeur à l'Université de Sidi Bel Abbés et directeur de Laboratoire Microélectronique Appliquée. Merci, Madame pour ta gentillesse, ta disponibilité et ta sagesse. Mercie madame pour m'avoir offert un sujet de recherche vaste, stimulant et surtout d'actualité. Je n'oublie pas non plus de remercier Monsieur Bernard GRUZZA professeur à l'Université Blaise-Pascal, responsable de l'équipe « Surfaces et Interfaces » du LASMEA de m'avoir invité dans sont laboratoire LASMEA et permis à participé aux expériences d'élaboration des échantillons de cette thèse. Mais rien de tout cela n'aurait été possible sans Monsieur Guillaume MONIER, Docteur en physique, à l'Université Blaise-Pascal qui a été un aide précieux dans ma thèse.

Bien sûr, je n'oublie pas tous les membres de Laboratoire Microélectronique Appliquée qui m'ont témoignés leur sympathie et leur gentillesse.

A mes Parents, A mes frères Hakim Mohamed & Anis, et aux gens que j'aime.

Table des matières

Table des matières

Introduction générale	10
CHAPITRE 1: Rappels des théories électriques sur les Hétéro-structures	
I.1 Introduction	13
I.2 Model de base d'une hétérojonction	13
I.2.1 Hétérojonction SC/SC	13
I.2.1.1 Diagramme de bandes d'énergie d'une hétérojonction SC/SC	13
I.2.1.2 La zone de charge d'espace d'une hétérojonction SC/SC	15
I.2.1.3 Hétérojonction polarisée	17
I.2.1.4 Mécanisme de transport dans l'hétérojonction	17
I.2.1.4.1 Modèle thermoélectronique	18
I.2.1.4.2 Courant tunnel intra-bandes	18
I.2.2 Les hétérojonctions métal/Semi-conducteur	19
I.2.2.1 Modèle général d'un contact métal-semi-conducteur	19
I.2.2.1.1 Diagramme énergétique du modèle généralisé	19
I.2.2.1.2 Zone de charge d'espace du modèle généralisé	21
I.2.2.1.3 Mécanismes de conduction dans un contact métal-semi-conducteur	25
A. Emission par dessus la barrière	26
A.1 Théorie de l'émission thermoïonique	26
A.2 Théorie de la diffusion	27
A.3 Théorie d'émission thermoïonique-diffusion	26
B. Courant par effet tunnel	31
C. Courant de recombinaison	32
I.2.2.1.4 Conduction dans le modèle généralisé	32
I.2.2.1.5 Admittance d'une diode Schottky	33
I.3 Références Bibliographiques	37

CHAPITRE 2: Technologie et Dispositifs Expérimentaux

II.1 Introduction	40
II.2 Propriétés essentielles du GaAs et du GaN	41
II.2.1 Propriétés essentielles du GaAs	41
II.2.2 Propriétés essentielles du GaN	42
II.2.2.1 Les propriétés électroniques	43
II.2.2.1.1 La largeur de la bande interdite	43

II.2.2.1.2 La mobilité électronique	
II.2.3 Les différents substrats utilisés pour la croissance du GaN	44
II.3 Description des dispositifs expérimentaux d'ultra-vide	46
II.3.1 Bâtis ultra vide	46
II.3.2 Obtention et contrôle du vide	46
II.3.3 Différents éléments constituant le bâti	47
II.3.3.1 Le porte échantillon et le système de chauffage	49
II.3.3.2 La source de production d'azote	49
II.3.3.3 Analyseurs d'électrons	50
II.3.3.3.1 Analyseur à champ retardateur (RFA)	50
II.3.3.2 L'analyseur hémisphérique (HSA)	53
II.3.3.4 Le détecteur channeltron	54
II.4 Principe et description des bancs de mesures électriques	55
II.4.1 Principe et description du banc de mesures I (V)	55
II.4.2 Principe et description du banc de mesures C (V)	56
II.5 Références Bibliographiques	57

CHAPITRE 3: Etude de la nitruration des substrats GaAs (100)

III.1. Introduction	60
III.2 Préparation des échantillons	60
III.2.1 Nettoyage chimique des substrats de GaAs	60
III.2.2 Nettoyage ionique par bombardement d'Ar+ suivi par spectroscopie XPS	62
III.3 Reconstruction de la surface après chauffage	65
III.4 La nitruration des substrats de GaAs	68
III.4.1 Procédure de réalisation des couches de GaN/GaAs	68
III.4.2 L'évolution de l'épaisseur de la couche de GaN/GaAs	69
III.5 Les défauts ponctuels dans la couche de GaN	70
III.5.1 Lacunes d'azote et de gallium	70
III.5.2 Les atomes d'impuretés dans la couche de GaN	70
III.6 References Bibliographiques	71

CHAPITRE 4: Résultats Expérimentaux et Interprétations

IV.1 Introduction	73
IV.2 Présentation des échantillons d'études	74
IV.3 Caractérisation électrique de la structure Hg/GaAs (échantillon témoin A1)	76
IV.3.1 Caractérisation Courant-Tension	76

IV.3.2 Caractérisation Capacité-Tension	
IV.4 Caractérisation électrique des structures Hg/GaN/GaAs	82
IV.4.1 Caractérisation Courant-Tension	82
IV.4.1.1 Modélisation	83
IV.4.1.2 Extraction des différents paramètres des structures nitrurées	88
IV.4.2 Caractérisation Capacité-Tension	91
IV.5 Références bibliographiques	98
Conclusion générale1	.01
Annexe A: Les techniques d'analyses	
Annexe B: Méthode de Terman	
Annexe C: Modélisation de la structure Hg/GaAs (échantillon témoin A ₁)	
Table des Figures	
Table des Tableaux	

Introduction générale

Introduction

Les semi-conducteurs contenant l'élément N offrent des possibilités intéressantes pour les dispositifs microélectronique et optoélectronique.

Le nitrure de gallium est le candidat idéal pour la fabrication de dispositif de hautes fréquences, des émetteurs bleus et des détecteurs fonctionnant dans le domaine spectral UV. La préparation des surfaces bien nettoyées, arrangées et passivées est d'importance primordiale pour la croissance du GaN et l'élaboration des composants à base de ce matériau.

Plusieurs techniques ont été développées pour la croissance de nitrure de gallium. Le nitruration de GaAs est intensivement étudié pendant les dernières années, processus de comme première étape du dépôt des monocouches de GaN ou une méthode pour la stabilisation et la passivation d'une surface de GaAs. Cette technique de nitruration est réalisée en exposant le substrat de GaAs à un flux d'azote actif crée par une source à décharge haute tension dans un bâti ultravide. Nous obtenons ainsi des hétéro-structures à différentes épaisseurs de nano- films de GaN sur substrat de GaAs. Les propriétés physiques de ces structures ont été étudiées à l'aide de spectroscopie, des électrons Auger (AES) et des photoélectrons X (XPS). Les analyses révèlent la tenue intérieure de nos structures. Enfin la grande partie du travail présenté dans cette thèse a porté sur la caractérisation électrique I(V) et C(V) des héterostructures GaN/GaAs obtenues à différentes conditions technologiques. Ainsi, les différentes paramètres électriques tel que le courant de saturation, le facteur d'idéalité, la résistance série, la tension de diffusion et la concentration de dopage sont déterminés. Ces paramètres nous aident à avoir des informations sur l'état de surface et d'interface des structures GaN/GaAs étudiées.

Ainsi, cette thèse de doctorat comprend quatre chapitres :

Le premier chapitre est un rappel théorique sur le comportement électrique des hétérojonctions à deux semi-conducteurs différents et de structure métal / semiconducteur (diodes Schottky).



Dans un deuxième chapitre, nous exposerons les caractéristiques structurelles du GaAs et du GaN, matériaux primordiaux de cette étude, après avoir décrit certaines propriétés générales des semiconducteurs. Ensuite, on présente les méthodes employées pour la croissance des films de GaN sur des substrats de GaAs. Puis, on expose les dispositifs expérimentaux, les techniques d'analyses de surface, notamment la spectroscopie, des électrons Auger (AES) et des photoélectrons X (XPS). Nous achèverons ce chapitre par la présentation des différents bancs de mesures employés dans les caractérisations électriques employées tels que le banc courant-tension I(V) et le banc capacité-tension C(V).

Enfin, le dernier chapitre est consacré aux résultats expérimentaux obtenus à partir des caractérisations électriques des structures Hg/GaN/GaAs.

Pour identifier le transport régissant les phénomènes physiques dans nos structures et de définir le comportement des ces déniées, une modélisation est associés à ce chapitre pour savoir quel type de structure à étudier.

Ainsi, nous terminerons ce chapitre par des interprétations des résultats obtenus.



Chapitre I

Rappels des théories électriques sur les Hétérostructures



I.1 Introduction

L'objectif de ce premier chapitre est l'étude des caractéristiques générales des hétérojonctions à deux semi-conducteurs différents et de structure métal / semiconducteur (diodes Schottky). Nous exposons l'ensemble des mécanismes de transport de charges dans les hétérojonctions pour expliquer les phénomènes physiques et électriques qui dominent le fonctionnement de ces dispositifs. Ainsi on partage ce chapitre en deux parties. La première partie sera consacrée à l' hétérojonction SC/SC et la deuxième partie à l' hétérojonction Métal / Semi-conducteur.

I.2 Model de base d'une hétérojonction

Une hétérostructure est formée entre deux matériaux différents, entre isolant et un semiconducteur, un métal et un semi-conducteur ou encore entre deux semi-conducteurs de natures différentes. [1]

Une hétérostructure entre deux semi-conducteurs peut être obtenue en faisant croitre une couche épitaxie d'un semi-conducteur 2 sur un semi-conducteur 1.

Cette croissance exige que les deux matériaux aient, dans le plan interracial, des distances interatomiques et des coefficients de dilatation thermique voisins. [2]

L'étude à l'équilibre d'une hétérostructure composée de deux semi-conducteurs différents se fera comme pour une homojonction ou une diode Schottky.

I.2.1 Hétérojonction SC/SC

I.2.1.1 Diagramme de bandes d'énergie d'une hétérojonction SC/SC

Il existe deux types d' hétérostructure, une hétérostructure aniso-type et iso-type.

L' hétérostructure aniso-type est formée de deux semiconducteurs de type de dopage différent p-n, caractérisés par les affinités électroniques eχ₁ et eχ₂, les bandes interdites E_{g1} et E_{g2} et les dopages représentés par les distances eΦ_{F1}et eΦ_{F2} du niveau de Fermi à la bande de conduction. Le premier exemple d'une hétérostructure aniso-type a été proposé par Anderson basé sur les travaux précédents de Schockley, le diagramme énergétique de cette hétérostructure abrupte Ge-n/GaAs-p, non polarisée (V=0), idéale et sans états d'interface est représenté par la figure [I-1]





Figure [I-1]: Diagramme énergétique d'une hétérojonction p-n aniso-type à l'équilibre thermodynamique. [3]

L'alignement des niveaux de Fermi des semiconducteurs provoqué par la différence des travaux de sortie est dû à la migration des électrons des états pleins du semiconducteur type N vers les états vides du semiconducteur type P. Cette diffusion entraîne l'apparition d'une zone de charge d'espace, positive dans le semi-conducteur à faible travail de sortie, négative dans l'autre. Comme dans l'homojonction, la tension de diffusion augmente et elle se stabilise à la valeur qui arrêtera la diffusion et définit l'état d'équilibre.

Les différences des énergies dans les bandes de conduction et de valence des deux semiconducteurs sont représentées respectivement par les équations suivantes.

$$\Delta E_{\rm C} = -q(\chi_2 - \chi_1) \tag{I.1}$$

$$\Delta E_{\rm V} = \Delta E_{\rm C} - \Delta E_{\rm g} \tag{I.2}$$

La tension de diffusion entre les deux semi-conducteurs est donnée par

$$V_d = V_{b2} + V_{b1} = \Phi_{F2} - \Phi_{F1} \tag{I.3}$$



Il faut noter que le potentiel est continu à la jonction entre les deux semi-conducteurs et qu'il varie de façon monotone si les deux semi-conducteurs sont dopés de manière homogène.

La figure [I-1] montre deux types de discontinuité au voisinage de l'interface. Le premier type illustré dans la bande de conduction, représente une **pseudo-discontinuité**, il est caractérisé par une variation monotone, c'est-à-dire une différence d'énergie s'ajoute au potentiel de diffusion. Ce type de variation ressemble fortement à la variation des bandes d'énergie d'une jonction PN classique à homojonction. Le second type représente une **forte discontinuité**. Il montre une rupture importante entre les deux bandes de valences des deux semiconducteurs.

L'hétérojonction iso-type peut être formée de deux semiconducteurs à même type de dopage (voir figure [I-2]).



Figure [I-2]: Diagramme énergétique d'une hétérojonction n-n iso-type à l'équilibre thermodynamique. [3]

I.2.1.2 La zone de charge d'espace d'une hétérojonction SC/SC

Le calcul de la distribution du potentiel au voisinage de l'interface se fait comme le cas d'une homojonction **pn** par l'intégration de l'équation de Poisson (I-4). [2]

Nous appellerons N_d excès de donneurs dans le semiconducteur 1, et N_a excès d'accepteurs dans le semiconducteur 2.

L'équation de Poisson s'écrit :

$$\frac{d^2 V(x)}{dx^2} = -\frac{\rho(x)}{\varepsilon}$$
(I.4)



avec

 $\rho(x)$: la densité de charge

 ϵ : la permittivité relative du semi-conducteur.

Après la résolution de l'équation de Poisson dans les deux cotés des semi-conducteurs on obtient les expressions de la largeur de la zone de charge d'espace dans chacun des semiconducteurs :

$$W_1 = \left(\frac{2N_a \times \varepsilon_1 \varepsilon_2}{q(\varepsilon_1 N_d + \varepsilon_2 N_a)}\right)^{\frac{1}{2}} (V_1 - V_2)^{\frac{1}{2}}$$
(I.5)

$$W_2 = \left(\frac{2N_d \times \varepsilon_1 \varepsilon_2}{qN_a(\varepsilon_1 N_d + \varepsilon_2 N_a)}\right)^{\frac{1}{2}} (V_1 - V_2)^{\frac{1}{2}}$$
(I.6)

avec

V₁ : le potentiel de la région neutre du semi-conducteur 1

V2: le potentiel de la région neutre du semi-conducteur 2

La largueur totale de la zone de depletion dans l'hétérojonction est donnée par la somme des deux expressions de la largeur de la zone de charge d'espace dans chacun des semiconducteurs :

$$\mathbf{W} = \mathbf{W}_1 + \mathbf{W}_2 \tag{I.7}$$

$$W = \left(\frac{2\varepsilon_{1}\varepsilon_{2} (N_{d} + N_{a})^{2}}{qN_{d}N_{a}(\varepsilon_{1}N_{d} + \varepsilon_{2}N_{a})}\right)^{\frac{1}{2}} (V_{1} - V_{2})^{\frac{1}{2}}$$
(I.8)

Cependant, toute variation de V entraîne une modulation de la largeur de la zone de charge d'espace W dans l'interface des deux semiconducteurs. Il en résulte que la structure présente une capacité différentielle.

La charge d'espace est donné par : [4]

$$Q_{sc1} = -Q_{sc2} = qN_dW_1 = qN_aW_2$$
(I.9)

Soit en explicitant W_1 donnée par l'expression (I.5) et l'expression (1.3) deviennent :

$$V_1 - V_2 = V_d - V$$
 (I.10)

On obtient la charge d'espace totale :

$$Q = \left(\frac{2q\epsilon_1\epsilon_2 N_d N_a}{\epsilon_1 N_d + \epsilon_2 N_a}\right)^{\frac{1}{2}} (V_d - V)^{\frac{1}{2}}$$
(I.11)



La capacité différentielle est donnée par :

$$C(V) = \left| \frac{dQ}{dV} \right| = \left(\frac{q\epsilon_2 N_d N_a}{2(\epsilon_1 N_d + \epsilon_2 N_a)} \right)^{\frac{1}{2}} (V_d - V)^{-\frac{1}{2}}$$
(I.12)

Cette expression se simplifie dans le cas où l'un des semiconducteurs est beaucoup plus dopé que l'autre. Supposons par exemple $N_a >> N_d$.

$$C(V) = \left(\frac{q\varepsilon_1\varepsilon_2 N_d}{2\varepsilon_2}\right)^{\frac{1}{2}} (V_d - V)^{-\frac{1}{2}}$$
(I.13)

Pour une hétérojonction iso-type (n-n) l'expression de la capacité différentielle est :

$$C(V) = \left(\frac{q\epsilon_{1}\epsilon_{2}N_{d1}N_{d2}}{2(\epsilon_{1}N_{d1} + \epsilon_{2}N_{d2})}\right)^{\frac{1}{2}} (V_{d} - V)^{-\frac{1}{2}}$$
(I.14)

I.2.1.3 Hétérojonction polarisée

Pour les bandes de conduction et de valence, il existe deux types de discontinuité.

Le premier correspond au cas où la tension de diffusion s'ajoute à la différence d'énergie des bandes considérées. Dans ce cas la variation d'énergie de la bande est monotone, nous appelons cette discontinuité une pseudo-continuité. Le deuxième type de discontinuité correspond au cas où la tension de diffusion et la discontinuité des gaps jouent des rôles opposés, nous qualifierons de forte discontinuité.

I.2.1.4 Mécanisme de transport dans l'hétérojonction

Les mécanismes de transport de charges aux hétérojonctions sont multiples. En particulier, la présence de fortes discontinuités de bandes d'énergie impose des modèles de transport spécifique.

Deux mécanismes principaux sont considérés dans le cadre de notre étude où une barrière de potentiel de hauteur Φ_B « spike » [5] de la bande de conduction s'oppose au passage des électrons. Soit l'énergie de l'électron est suffisante pour lui permettre de passer au dessus du cette barrière de la bande de conduction : Il s'agit alors d'une conduction thermoïonique. Soit il existe une probabilité pour que l'électron traverse la barrière de potentiel qui en résulte: Il s'agit alors d'une conduction par effet tunnel



I.2.1.4.1 Modèle thermoélectronique

Le courant est conditionné, à l'interface, par le mécanisme d'émission thermique des porteurs, et dans chacun des semi-conducteurs, par la diffusion de ces porteurs.

Pour les caractéristiques courant-tension nous considérerons un cas intéressant type n-n [3, 6]

Le mécanisme de conduction est régi par émission thermoïonique et la densité de courant est donnée par :

$$J = J_0 \left(1 - \frac{V}{V_d} \right) \left[exp\left(\frac{qV}{kT} \right) - 1 \right]$$
(I.15)

où

$$J_0 = \frac{qA^*TV_d}{k} \exp\left(-\frac{qV_d}{kT}\right)$$
(I.16)

A* est la constante effective de Richardson, V_d est la tension de diffusion [6,4] donnée par :

$$V_{d} = \frac{kT}{q} \ln \left[\frac{N_{d1} N_{c2}}{N_{d2} N_{c1}} \right] + \frac{\Delta E_{c}}{q}$$
(I.17)

Cette expression est un peu différente de celle du contact métal-semi-conducteur. La valeur de J_0 est différente à cause de sa dépendance de la température. Le courant inverse n'est jamais saturé mais croît linéairement avec les grandes tensions de polarisation.

En directe, la densité de courant J dépend de l'expression (qV/kT), et peut être approximée par une fonction exponentielle ou J~ exp (qV/nkT). [3]

n étant le facteur d'idéalité de l'hétérojonction.

I.2.1.4.2 Courant tunnel intra-bandes

Lorsque deux matériaux semi-conducteurs soumis `a un potentiel de polarisation sont sépares par une barrière de potentiel (zone interdite pour les électrons) suffisamment petite, il va y avoir une probabilité non nulle que les électrons puissent traverser cette zone et passer d'un matériau `a l'autre: c'est l'effet tunnel.

La densité de courant par effet tunnel à travers une barrière de potentiel de hauteur Φ_B suit la loi de proportionnalité suivante [3]

$$J \sim \xi^{2} \exp\left[-\frac{4\sqrt{2m^{*}}(q\Phi_{\rm B})^{\frac{3}{2}}}{3qh\xi}\right]$$
(1.18)

avec ξ étant le champ électrique, m la masse effective de l'électron, h constante de Planck et Φ_B hauteur de barrière.



I.2.2 Les hétérojonctions métal/Semi-conducteur

Si l'on met en contact un métal et un semi-conducteur, un transfert de charge va se produire, jusqu'à ce que les niveaux de Fermi coïncidents. Suivant la nature du métal et du semi-conducteur, ce contact peut aboutir soit à un contact dit ohmique, soit à un contact Schottky. L'apparition l'un de ces deux phénomènes est lié au l'affinité électronique, au dopage, à la bande interdite du semi-conducteur et dépendra aussi du travail de sortie du métal.

Cette partie du chapitre est alors, un rappel théorique sur les phénomènes physiques et électroniques intervenant dans le fonctionnement de la structure Métal / Semi-conducteur. Ainsi, on va traiter le modèle général du contact Métal-Semiconducteur de la structure Schottky, et enfin les caractéristiques I(V) et C(V) de la structure Métal-Semiconducteur.

I.2.2.1 Modèle général d'un contact métal-semi-conducteur

Nous appelons modèle général de contact métal-semiconducteur, un contact doté d'une densité d'état de surface dans le semiconducteur et sûrement d'une couche d'interface. Nous entendons par couche d'interface la présence d'une couche d'oxyde ou d'impuretés qui peuvent se déposer à l'interface lors de l'élaboration des contacts [7].

I.2.2.1.1 Diagramme énergétique du modèle généralisé

Le diagramme énergétique d'une structure métal-semi-conducteur non polarisée (V = 0) avec un semi-conducteur de substrat de type n est représenté par la figure [I-3].

Pour établir l'expression donnant la hauteur de barrière Φ_{bn} , on suppose que l'épaisseur de la couche d'interface δ est de très faible dimension.

L'expression de la densité de charges correspondantes Q_{ss} due aux états d'interface à l'équilibre thermodynamique est donnée par [3,8]:

$$Q_{ss}(0) = -qN_{ss}(E_{g} - q\Phi_{0} - q\Phi_{Bn} - q\Delta\Phi)$$
(I.19)

où N_{ss}, E_g, $\Delta\Phi$ et q Φ_0 sont respectivement la densité d'état d'interface, l'énergie de la bande interdite, l'abaissement de la barrière par l'effet Schottky et enfin l'énergie des états de surface distribués de façon continue dans la bande interdite. La quantité Φ_{Bn} est la hauteur de barrière.





Figure [I-3] : Diagramme énergétique du modèle généralisé d'un contact métalsemiconducteur (N) à l'équilibre thermodynamique.

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

$$Q_{sc}(0) = \left[2q\varepsilon_{s}N_{d}\left(\Phi_{Bn} - V_{n} + \Delta\Phi - \frac{kT}{q}\right)\right]^{\frac{1}{2}}$$
(1.20)

où ε_s , N_d sont respectivement la permittivité et le dopage du semiconducteur et V_n représente la différence de potentiel entre la bande de conduction E_c et le niveau de Fermi E_{FS} du semiconducteur. A cause de la neutralité électrique et en 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 :

$$Q_{\rm m}(0) = -[Q_{\rm sc}(0) + Q_{\rm ss}(0)] \tag{I.21}$$

Q_{ss}: densité de charge due aux états d'interface.

Soit Δ_0 le potentiel existant dans l'interface d'épaisseur δ à l'équilibre thermodynamique, en appliquant la loi de Gauss à la charge Q_m , il vient :

$$\Delta_0 = -\delta \frac{Q_m(0)}{\varepsilon_i} \tag{I.22}$$

où ε_i est la permittivité diélectrique de la couche d'interface.

Nous pouvons également, d'après le diagramme de bandes d'énergie de la figure [I-3], écrire :



$$\Delta_0 = \Phi_{\rm m} - (\chi + \Phi_{\rm Bn} + \Delta \Phi) \tag{I.23}$$

où χ représente l'affinité électronique du semiconducteur et Φ_m le travail de sortie du métal.

En éliminant Δ_0 des équations (I.22) et (I.23) et en remplaçant Q_m par son expression donnée par l'équation (I.21), nous trouvons :

$$\Phi_{\rm m} - \chi - \Phi_{\rm Bn} + \Delta \Phi = \left[\frac{2q\epsilon_{\rm s}N_{\rm d}\delta^2}{\epsilon_{\rm i}^2} \left(\Phi_{\rm Bn} + \Delta \Phi - V_{\rm n} - \frac{kT}{q} \right) \right]^2 - \frac{qN_{\rm ss}\delta}{\epsilon_{\rm i}} \left(E_{\rm g} - q\Phi_{\rm 0} - q\Phi_{\rm Bn} - q\Delta \Phi \right)$$
(I.24)

Si on adopte que la couche d'interface δ est suffisamment fine et le dopage du semiconducteur est inférieur 10^{18} cm⁻³ (N_d< 10^{18} cm⁻³) ainsi que la permittivité du semiconducteur ($\epsilon_s \approx 10\epsilon_i$), on peut exprimer la hauteur de barrière en présence des états d'interfaces comme suit [7] :

$$\Phi_{\rm Bn} = \beta (\Phi_{\rm m} - \chi) + (1 - \beta) \left(\frac{E_{\rm g}}{q} - \Phi_0\right) - \Delta \Phi \tag{I.25}$$

avec

$$\beta = \frac{\varepsilon_i}{\varepsilon_i + q^2 \delta N_{ss}} \tag{I.26}$$

Nous faisons remarquer que si la densité d'état de surface est infiniment grande, le facteur β tend vers zéro ($\beta \rightarrow 0$). Nous retrouvons alors la valeur limite de la hauteur de barrière. Par contre dans le cas, où il y a absence totale d'états de surface, le facteur β tend vers un ($\beta \rightarrow 1$) et nous nous retrouvons dans le cas d'un contact métal-semiconducteur idéal [3,9].

I.2.2.1.2 Zone de charge d'espace du modèle généralisé

L'étude de la zone de charge d'espace d'une diode Schottky revient à retrouver l'expression de la capacité en fonction de la tension de polarisation, en présence et en absence de la densité d'état de surface. Pour cette étude, nous supposons que le semiconducteur est homogène, avec une densité de donneurs N_d . D'autre part, nous ferrons les hypothèses suivantes :

- Les donneurs sont tous ionisés à la température ambiante ;
- La zone de charge d'espace est dépourvue de porteurs libres.

La figure [I-4] représente le diagramme énergétique hors équilibre thermodynamique du contact métal-semiconducteur (V \neq 0). On peut écrire les expressions (I.19) et (I.20) sous la forme:

$$Q_{ss}(0) = -qN_{ss}(E_g - qV_n - qV_b - q\Phi_0)$$
(I.27)

$$Q_{sc}(V) = \left[2q\epsilon_{s}N_{d}\left(V_{b} - \frac{kT}{q}\right)\right]^{\frac{1}{2}}$$
(I.28)



 $o\tilde{u} \quad V_b = V_{b0} - V \tag{I.29}$

V_{b0}, V_b sont respectivement le potentiel de diffusion à l'équilibre et hors équilibre thermodynamique.



Figure [I-4] : Diagramme énergétique du modèle généralisé d'un contact métal semiconducteur type N hors équilibre thermodynamique (polarisation positive)

En se basant sur le diagramme énergétique représenté par la figure [I-4], on peut écrire :

$$\Phi_{\rm m} - \Phi_{\rm s} - \mathbf{V} = \mathbf{V}_{\rm b} + \Delta \tag{I.30}$$

Où Δ est le potentiel développé à l'interface pour une tension de polarisation V définie par :

$$\Delta = \frac{\delta}{\varepsilon_{i}} \left[Q_{sc}(V) + Q_{ss}(V) \right]$$
(I.31)

En quasi-statique et pour un signal de modulation donné, la tension de polarisation change de V à V+dV. En remplaçant l'équation (I-31) dans la relation (I-30) et par différentiation de l'expression trouvée, on obtient :

$$dV = -dV_{b} - \frac{\delta}{\varepsilon_{i}} \left[dQ_{sc}(V) + dQ_{ss}(V) \right]$$
(I.32)



avec

$$f dQ_{ss} = qN_{ss}dV_b$$
(I.33)

$$dQ_{sc}(V) = C_{sc}dV_b$$
(I.34)

$$\left| C_{sc}(V) = \left(\frac{q\varepsilon_s N_d}{2}\right)^{\frac{1}{2}} \left(V_b - \frac{kT}{q} \right)^{-\frac{1}{2}} \right|$$
(I.35)

En remplaçant dans l'équation (I.32) les valeurs de dQ_{ss} et dQ_{sc} par les expressions données dans les relations (I.33) et (I.34), on obtient :

$$\frac{dV_{b}}{dV} = -\frac{1}{(1+\alpha) + C_{sc}/C_{i}}$$
(I.36)

où Ci est la capacité de la couche d'interface définie par:

$$C_i = \frac{\varepsilon_i}{\delta}$$
(I.37)

 α est une constante donnée par [10]:

$$\alpha = \frac{qN_{ss}\delta}{\varepsilon_i} \tag{I.38}$$

La capacité C de la structure est définie par:

$$C(V) = -\frac{dQ_{sc}}{dV} = -\frac{dQ_{sc}}{dV_b} \left(\frac{dV_b}{dV}\right)_{ac} = C_{sc} \left(\frac{dV_b}{dV}\right)_{ac}$$
(I.39)

Pour les fréquences suffisamment hautes, les états de surface ne suivent pas le signal de modulation (a.c), donc l'équation (I.32) devient :

$$dV = -dV_b - \frac{\delta}{\varepsilon_i} C_{sc} dV_b$$
(I.40)

En substituant l'équation (I.40) dans l'équation (I.34), l'expression de la capacité de la structure est :

$$C = \frac{C_{sc}C_i}{C_{sc} + C_i}$$
(I.41)

Pour pouvoir exploiter cette caractéristique, il est préférable de représenter la variation linéaire de la capacité en fonction de la tension appliquée ; de_ce_fait, nous représentons généralement C^{-2} en fonction de la tension appliquée V:



$$\frac{dC^{-2}}{dV} = \frac{2}{C} \frac{dC_{sc}^{-1}}{dV_b} \left(\frac{dV_b}{dV}\right)_{qs}$$
(I.42)

Si la couche d'interface δ est très mince, on a $C_i >> C_{sc}$ donc $C = C_{sc}$.

Ainsi, l'expression de $dC^{-2}(V)/dV$ s'écrit :

$$\frac{\mathrm{d}\mathrm{C}^{-2}}{\mathrm{d}\mathrm{V}} = -\frac{1}{(1+\alpha)}\frac{2}{\mathrm{q}\varepsilon_{\mathrm{s}}\mathrm{N}_{\mathrm{d}}} \tag{I.43}$$

Connaissant l'ordre de grandeur de la densité d'état d'interface N_{ss} et l'épaisseur de la couche d'interface, on peut évaluer la concentration des donneurs N_d à partir de la pente de la caractéristique expérimentale $C^{-2}(V)$.

Le potentiel de diffusion V_{b0} peut être déterminé à partir de la droite d'interpolation de la caractéristique $C^{-2}(V)$ d'où :

$$C^{-2} = \left[\frac{1}{C_{sc}} + \frac{1}{C_{i}}\right]^{2} = \left(\frac{2}{q\varepsilon_{s}N_{d}}\right) \left[\left(V_{b} - \frac{kT}{q}\right) + \frac{V_{1}}{4} + V_{1}^{\frac{1}{2}}\left(V_{b} - \frac{kT}{q}\right)^{\frac{1}{2}}\right]$$
(I.44)

avec

$$V_1 = \frac{2q\epsilon_s N_d \delta^2}{\epsilon_i^2}$$
(I.45)

En tenant compte de la relation existant entre V_b et V dans l'équation (I.29), on peut écrire :

$$C^{-2} = \left(\frac{2}{q\epsilon_{s}N_{d}}\right) \left[\left(V_{b0} - V - \frac{kT}{q}\right) + \frac{V_{1}}{4} + V_{1}^{\frac{1}{2}} \left(V_{b0} - V - \frac{kT}{q}\right)^{\frac{1}{2}} \right]$$
(I.46)

L'intersection de la droite d'interpolation avec l'axe des tensions au point V_0 correspond à une capacité nulle ($C^{-2} = 0$), donc le deuxième terme de l'équation (I.46) doit être nul, la solution donne:

$$V_0 = V_1^{\frac{1}{2}} \left(V_{b0} - \frac{kT}{q} \right)^{\frac{1}{2}} + (1+\alpha) \left(V_{b0} - \frac{kT}{q} \right) + (1-\alpha) \frac{V_1}{4}$$
(I.47)

Si le dopage du semiconducteur N_d est faible et l'épaisseur de la couche d'interface δ est fine, on peut simplifier l'expression (I.47) à :

$$V_0 = (1+\alpha) \left(V_{b0} - \frac{kT}{q} \right) \tag{I.48}$$



Dans le cas, où il y a absence totale des états d'interface N_{ss}, le facteur α tend vers zéro ($\alpha \rightarrow 0$) nous retrouvons l'expression de la pente dC⁻²/dV d'un contact métal-semiconducteur idéal:

$$\frac{\mathrm{d}\mathrm{C}^{-2}}{\mathrm{d}\mathrm{V}} = \left(-\frac{2}{\mathrm{q}\varepsilon_{\mathrm{s}}\mathrm{N}_{\mathrm{d}}}\right) \tag{I.49}$$

Alors, le potentiel de diffusion donné par l'équation (I.48) se simplifie à :

$$V_{b0} = V_0 + \frac{kT}{q}$$
 (I.50)

I.2.2.1.3 Mécanismes de conduction dans un contact métal-semi-conducteur

Dans cette partie du chapitre, nous allons exposer par la suite les différents mécanismes de conduction du courant dans le contact métal- semi-conducteur. Nous donnons l'expression simple du courant pour étudier les différents phénomènes qui interviennent dans cette conduction puis nous passons au modèle générale.

Les processus de conduction dans un contact Schottky sont essentiellement dus aux porteurs majoritaires, or le courant des porteurs minoritaires étant négligeables.

Plusieurs mécanismes sont à l'origine de ce transport, et peuvent se manifester simultanément ou séparément.

Les différents mécanismes de transport de charges à travers une barrière Schottky, du semiconducteur vers le métal, sont représentés par la figure [I-5], [11].



a)- électrons émis par dessus la barrière ;

b)- électrons émis par effet tunnel ;

c)- courant de recombinaison dans la zone de charge d'espace ;

d)- courant de recombinaison dans la région neutre.

Figure [I-5] : Mécanisme de transport à travers une barrière Schottky sous polarisation directe.



A. Emission par dessus la barrière

Le courant des majoritaires est conditionné par divers phénomènes physiques dans les différentes régions de la structure. En effet, à l'interface, il est conditionné par l'émission thermoïonique par dessus la barrière de potentiel. Dans la zone de charge d'espace du semiconducteur, il est régi par les phénomènes de diffusion.

Nous considérons successivement chacune de ces régions, dans une structure métal- semiconducteur idéale de type n, avec $\Phi_m > \Phi_s$ (voir figure [I-6]).



Figure [I-6] : Diagramme énergétique d'un contact métal-semicondicteur idéal à l'équilibre thermodynamique.

A.1 Théorie de l'émission thermoïonique

L'effet thermoïonique est le passage des électrons ayant une énergie supérieure à celle de la hauteur de barrière au-dessus de la barrière de potentiel. Sa validité repose sur le respect des hypothèses suivantes [11]:

> Les électrons à l'interface du semiconducteur sont en équilibre thermique avec ceux du volume ;

- Le flux du courant n'affecte pas l'équilibre ;
- > La hauteur de barrière est très supérieure au terme (kT/q).

Dans ce cas, l'expression de la densité de courant résultant du semiconducteur vers le métal donnée par Bethe [12] est :



$$J_{s \to m} = A^* T^2 \left(e^{\frac{-q\Phi_{Bn}}{kT}} \right) \left(e^{\frac{qV}{kT}} - 1 \right)$$
(I.51)

où A^{*} étant la constante de Richardson effective et est donnée par l'expression :

$$A^* = \frac{4\pi q m^* k^2}{h^3}$$
(I.52)

T : température de fonctionnement

k : constante de Boltzmann

On peut simplifier la densité de courant totale dans la structure, par l'expression :

$$J_{\rm T} = J_{\rm ST} \left(e^{\frac{qV}{kT}} - 1 \right) \tag{I.53}$$

où J_{ST} est le courant de saturation retrouvé par le modèle d'émission thermoïonique; ce courant a pour expression :

$$J_{ST} = A^* T^2 e^{\frac{-q \Phi_{Bn}}{KT}}$$
(I.54)

A.2 Théorie de la diffusion

Dans ce cas, les effets des collisions des électrons à l'intérieur de la zone de charge d'espace sont ici considérés [3]. La densité de courant des électrons à travers la zone de déplétion est donnée par la somme de la composante de courant de conduction et celle du courant de diffusion, en tenant compte des hypothèses suivantes :

- > Le libre parcourt moyen des électrons est petit devant la largeur w de la zone de charge d'espace ;
- La hauteur de barrière est très supérieure au terme (kT/q) ;
- La concentration des porteurs aux points x = 0 et x = w est indépendante du flux du courant et est identique à celle de l'équilibre.

Le courant dans la zone de charge d'espace dépend du gradient de concentration $\partial n/\partial x$ et du champ électrique ξ ; par conséquent, il s'écrit sous la forme :

$$J(x) = \left[n(x)\mu_n\xi + D_n\frac{\partial n}{\partial x}\right] = qD_n\left[-\frac{qn(x)}{kT}\frac{\partial V(x)}{\partial x} + \frac{\partial n}{\partial x}\right]$$
(I.55)

où D_n est la constante de diffusion des électrons dans le semi-conducteur définie par :

$$\frac{D_n}{\mu_n} = \frac{kT}{q}$$
(I.56)



En multipliant l'expression précédente par $e^{-qV(x)/kT}$ et en intégrant entre 0 et w, nous aurons:

$$J \int_{0}^{W} e^{-\frac{qV(x)}{kT}} dx = q D_n \left[n(x) e^{-\frac{qV(x)}{kT}} \right]_{0}^{W}$$
(I.57)

En utilisant les conditions aux limites suivantes :

$$\geq \operatorname{Pour} \begin{cases} V(0) = -\Phi_{Bn} \\ n(0) = N_{c} e^{\frac{-q\Phi_{Bn}}{kT}} \end{cases}$$
(I.58)

$$\geq \operatorname{Pour} \begin{cases} V(W) = -(V_n - V) \\ n(W) = N_c e^{-\frac{qV_n}{kT}} \end{cases}$$
(I.59)

En substituant les équations (I.58) et (I.59) dans la relation (I.57), on obtient :

$$J_{\rm D} = J_{\rm SD} \left(e^{\frac{qV}{kT}} - 1 \right) \tag{I.60}$$

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

$$J_{SD} = \frac{q^2 D_n N_c}{kT} \left[\frac{2q N_d (V_{b0} - V)}{\epsilon_s} \right]^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{q \Phi_{Bn}}{kT}}$$
(I.61)

A.3 Théorie d'émission thermoïonique-diffusion

La théorie combinée de l'émission thermoïonique-diffusion était présentée d'abord par Crowell et Sze [3,15].

Dans les deux modèles, les expressions du courant sont proportionnelles à $(e^{qVMT} - 1)$, la seule variation entre les deux modèles réside dans les expressions du courant de saturation J_{ST} et J_{SD} .

La figure [I-7] présente le diagramme énergétique hors équilibre d'une diode Schottky, cette dernière visualise les deux courants, courant thermoïonique et courant de diffusion situés entre x_m et la zone de déplétions et entre x_m vers le métal respectivement.





Figure [I-7] : Diagramme énergétique d'une structure idéal d'un contact métal-semi-conducteur.

L'expression de la densité de courant dans la zone de déplétion est définie par :

$$J_n = -q\mu_n n(x) \frac{d\Phi(x)}{dx}$$
(I.62)

où μ_n , $\Phi(x)$ sont respectivement la mobilité d'électrons et le potentiel électrostatique du semiconducteur et n(x) est la densité d'électrons hors équilibre exprimée par :

$$n(x) = N_{c} e^{-\frac{q(\Phi(x) - \Psi(x))}{kT}}$$
(I.63)

En remplaçant n(x) par son expression donnée par l'équation (I.63) et en intégrant entre x_m et w avec $\Phi(w) = -V$, on obtient :

$$e^{\left(\frac{qV}{kT}\right)} - \frac{J_n}{k T N_c \mu_n} \int_{x_m}^{W} e^{\frac{-q\Psi(x)}{kT}} dx = e^{\frac{-q\Phi(x_m)}{kT}}$$
(I.64)

La seconde région est située entre le métal et la valeur $x = x_m$, la densité de courant dans cette région est fonction de la vitesse de recombinaison V_{Rn} .

$$J_{n} = q V_{Rn}[n(x_{m}) - n_{0}(x_{m})]$$
(I.65)

avec

$$V_{Rn} = \frac{A^* T^2}{q N_c}$$
(I.66)



N_c est la densité d'état effective des électrons.

 $n_o(x_m)$, $n(x_m)$ sont respectivement la densité des électrons au point $x = x_m$ avant et après le contact :

$$n_0(x_m) = N_c e^{\frac{-q \Phi_{Bn}}{kT}}$$
(I.67)

$$n(x_{m}) = N_{c}e^{-\frac{q(\Phi(x_{m}) + \Phi_{Bn})}{kT}}$$
(I.68)

En se basant sur les équations (I.67) et (I.168), on peut écrire l'expression (I.65) sous la forme:

$$\frac{J_n}{qN_cV_{Rn}}e^{\frac{q\Phi_{Bn}}{kT}}+1=e^{\frac{-q\Phi(x_m)}{kT}}$$
(I.69)

En éliminant le terme $e^{-q\Phi(X_m)/kT}$ entre les équations (I.64) et (I.69), l'expression de la densité de courant d'émission thermoïonique-diffusion est :

$$J_{TD} = \frac{qN_{c}V_{Rn}}{1 + V_{Rn}/V_{Dn}} e^{\frac{-q\Phi_{Bn}}{kT}} \left(e^{\left(\frac{qV}{kT}\right)} - 1 \right)$$
(I.70)

où V_{Dn} est la vitesse de diffusion donnée par [16, 17] :

$$V_{Dn} = \left[\frac{q}{kT\mu_{n}} \int_{x_{m}}^{W} e^{\frac{-q(\Psi(x) + \Phi_{Bn})}{kT}} dx\right]^{-1}$$
(I.71)

Les différents mécanismes de transport du courant diffèrent par le courant de saturation I_s . Ce dernier dépend des vitesses de recombinaison V_{Rn} et de diffusion V_{Dn} .

> Si V_{Dn} >> V_{Rn} , le rapport $\frac{qN_cV_{Rn}}{1+V_{Rn}/V_{Dn}}$ de l'équation (I.70) tend vers qN_cV_{Rn} . C'est alors le

processus thermoïonique à travers la couche d'interface qui domine (I_T).

Pour un semiconducteur de très grande mobilité, l'équation V_{Dn}>>V_{Rn} est généralement vérifiée :

➢ Si V_{Dn} << V_{Rn}, le rapport $\frac{qN_cV_{Rn}}{1+V_{Rn}/V_{Dn}}$ de l'équation (I.70) se réduit à qN_cV_{Dn}, et c'est le processus de diffusion à travers la couche d'interface (I_D) qui domine, généralement l'équation V_{Dn} << V_{Rn} est vérifiée pour un semiconducteur de faible mobilité.



B. Courant par effet tunnel

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

Si le transport du courant est contrôlé par l'émission thermoïonique d'électrons assistés par effet de champ, la relation de la densité de courant $J_{TC}(V)$ est exprimée par [13] :

$$J_{\rm TC} = J_{\rm s} e^{\frac{{\rm q}V}{{\rm E}_0}} \tag{I.72}$$

avec

$$E_0 = E_{00} \operatorname{coth}\left(\frac{qE_{00}}{kT}\right) \tag{I.73}$$

 E_{00} , E_o représentent les énergies caractéristiques du semi-conducteur relatives à la probabilité de transmission par effet tunnel

avec

$$E_{00} = \frac{h}{4\pi} \sqrt{\frac{N_d}{m^* \varepsilon_s}}$$
(I.74)

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

$$n = \frac{qE_0}{kT}$$
(I.75)

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

$$kT > \frac{2qE_0}{Ln[4(\Phi_{Bn} - V)/V_n]}$$
 (I.76)

et

$$\frac{\cos h^{2}(qE_{00}/kT)}{\sin h^{3}(qE_{00}/kT)} < \frac{2(\Phi_{Bn}+V_{n}+V)}{3E_{00}}$$
(I.77)

donc la densité du courant de saturation J_s est exprimée par :



$$J_{s} = qA^{*}T \frac{[\pi E_{00}(\Phi_{B0} - V - V_{n})]^{1/2}}{k \cosh\left(\frac{qE_{00}}{kT}\right)} e^{\left[-\frac{qV_{n}}{kT} - \frac{q(\Phi_{B0} + V_{n})}{E_{0}}\right]}$$
(I.78)

Les équations (I.76) et (I.77) permettent de déterminer la gamme de température pour laquelle le transport du courant peut être expliqué par le mécanisme d'émission thermoïonique assisté par effet de champ.

En haute température, dans le cas où $qE_{oo} \ll kT$, l'équation (I.73) se réduit à $E_0 = kT/q$. La pente $1/E_0$ de la caractéristique Ln (J_{TC}) = f (V) dépend directement de la température. Ce cas correspond de l'émission thermoïonique.

En basse température, le paramètre E_0 est presque constant puisque le terme E_{00} est très supérieur à kT. Par conséquent, la pente de la caractéristique $Ln(J_{TC}) = f(V)$ est constante et est indépendante de la température. Le mécanisme dominant est donc l'émission par effet de champ [18].

C. Courant de recombinaison

Les études sur les courants de recombinaison dans les diodes Schottky ont toutes pour point de départ l'article de l'auteur [22], les hypothèses énoncées sont identiques à celle des jonctions P-N, celles Hall, Shockley et Read.

Dans ces conditions, l'expression du courant de recombinaison se met sous la forme :

$$J_{R} = J_{R0} \left(e^{\frac{qV}{2kT}} - 1 \right)$$
(I.79)

En fait, bien souvent le courant de recombinaison non identifiable se superpose au courant thermoïonique, $J = J_{th}+J_r$, est responsable de la valeur élevée de n. [22,23]

I.2.2.1.4 Conduction dans le modèle généralisé

La formation du contact métal-semiconducteur ne se fait que par le biais des pièges qui se trouvent dans la couche isolante inter-faciale. Par ailleurs, elle diminue le flux d'électrons transmis du semiconducteur vers le métal. Elle entraîne en outre, un abaissement de la hauteur de barrière Φ_{Bn} d'une quantité proportionnelle à la chute de tension Δ_0 à travers la couche isolante (figure I-3).

Afin de traduire l'influence de la densité d'états d'interface N_{ss} sur la caractéristique couranttension, l'expression de la densité de courant s'écrit [19, 20] :

$$J_n = J_s \left(1 - e^{\frac{-qV}{kT}} \right) e^{\frac{qV}{nkT}}$$
(I.80)



n est le facteur d'idéalité traduisant l'effet de la densité d'état d'interface N_{ss} sur les caractéristiques électriques d'une diode Schottky [10] :

$$n = 1 + \frac{\delta}{\varepsilon_{i}} \left[\frac{\varepsilon_{s}}{W} + q N_{ss} \right]$$
(I.81)

J_s est la densité du courant de saturation définie par [21] :

$$J_{s} = A^{*}T^{2}e^{\frac{-q \Phi_{Bn}}{kT}}$$
(I.82)

avec

A^{*} est la constante de Richardson effective exprimée par :

$$A^* = A \frac{m^*}{m_e}$$
(I.83)

où:

m* : la masse éffective de l'électron ;

m_e: masse de l'electron.

I.2.2.1.5 Admittance d'une diode Schottky

Avant de représenter le schéma équivalent d'une diode Schottky, on va d'abord déterminer l'expression de l'admittance de ce composant en fonction de la tension de polarisation et de la fréquence, en appliquant à la structure un signal de modulation (a.c) de faible amplitude. La tension de polarisation $V_o(t)$ est alors la somme d'une composante continue V (due à la polarisation) et une composante alternative δV (correspondant au signal de modulation).

$$V_0(t) = V + \delta V \tag{I.84}$$

Si l'on suppose que $V_0(t)$ suit une variation sinusoïdale, alors :

$$\delta V = V_M e^{jW_p t}$$
 avec $V_M << kT/q$ (I.85)

L'effet de l'addition de la composante alternative δV se traduit par un abaissement du potentiel électrostatique V_b(t) [24].

$$V_{b}(t) = V_{b} - \delta V_{b}(t) \qquad \text{avec } \delta V_{b}(t) << kT/q \qquad (I.86)$$



L'expression de la densité du courant thermo-ionique définie par l'expression (I.53) peut s'écrire en fonction du potentiel électrostatique en présence de la composante alternative sous la forme [13, 15] :

$$J_{th}(t) = A^* T^2 e^{-\frac{qV_n}{kT}} e^{-\frac{q(V_b - \delta V_b(t))}{kT}} \qquad \text{pour } V \gg kT/q$$

$$=J_{dc}\left(1+\frac{q}{kT}\delta V_{b}(t)\right)=J_{dc}+\delta J_{ac}(t)$$
(I.87)

avec

$$\delta J_{ac}(t) = J_{dc} \frac{q \delta V_b(t)}{kT}$$
(I.88)

La condition de neutralité électrique permet d'écrire [16] :

$$Q_{ss} = -\left(Q_m + Q_{sc}\right) \tag{I.89}$$

Q_{ss} est la charge des états d'interface et Q_m la charge présente à l'interface du coté métal.

Les états de surface sont des pièges à l'interface métal-semiconducteur et induisent des niveaux d'énergie dans la bande interdite du semiconducteur. Un changement de charge des états de surface se produit lorsque les niveaux d'énergie des pièges traversent le niveau de Fermi E_{FS} . Les états de surface vont modifier les caractéristiques électriques de la structure.

La variation du potentiel électrostatique $\delta V_b(t)$ facilite la capture et l'émission des électrons entre la bande de conduction et les pièges d'interface. Ce phénomène se traduit par la naissance du courant des états d'interface $J_{ss}(t)$ exprimé par [16] :

$$J_{ss}(t) = \frac{dQ_{ss}(t)}{dt} = (G_{ss} + jw_p C_{ss})\delta V_b(t)$$
(I.90)

C_{ss}, G_{ss} sont respectivement la capacité et la conductance des pièges.

De même à l'aide de l'équation (I.89), on peut écrire :



$$\begin{aligned} \frac{dQ_{ss}(t)}{dt} &= -\left(\frac{dQ_{m}(t)}{dt} + \frac{dQ_{sc}}{dt}\right) \\ &= -\left(\frac{dQ_{m}(t)}{d[V_{0}(t) - V_{b}(t)]} \frac{d[V_{0}(t) - V_{b}(t)]}{dt} + \frac{dQ_{sc}}{dV_{b}(t)} \frac{dV_{b}(t)}{dt}\right) \\ &= -jw_{p}C_{i}(\delta V_{0}(t) - \delta V_{b}(t)) - jw_{p}C_{sc}\delta V_{b}(t) \end{aligned}$$
(I.91)
On pose

On pose

$$C_{sc} + C_i = C \tag{I.92}$$

donc :

$$J_{ss}(t) = -jw_p C_i \delta V(t) - jw_p C_{\Sigma} \delta V_b(t)$$
(I.93)

L'admittance mesurée peut s'écrire sous la forme [7] :

$$Y = G + Jw_p C = \frac{\delta J_{ac}(t)}{dV(t)} + Jw_p C_{HF}$$
(I.94)

G et C représentent respectivement la conductance et la capacité mesurées.

La combinaison des équations (I.90), (I.93) et (I.94) permet d'établir les relations de la capacité et de la conductance mesurées en fonction de la capacité et de la conductance des pièges.

$$G = \frac{qJ_{dc}}{kT} \frac{C_i(C_{\Sigma} + C_{ss})}{(C_{\Sigma} + C_{ss})^2 + (G_{ss}/w_p)^2}$$
(I.95)

$$C = \frac{qJ_{dc}}{kT} \frac{C_i G_{ss} / w_p^2}{(C_{\Sigma} + C_{ss})^2 + (G_{ss} / w_p)^2} + C_{HF}$$
(I.96)

Exploitant les résultats obtenus, le schéma équivalent d'une diode Schottky peut se resumer par le circuit illustré dans la figure [I-8].



Figure [I-8]: Schéma équivalent d'une diode Schottky métal-semiconducteur.


Chapitre I

Les deux quantités C_{ss} et G_{ss} contiennent beaucoup d'informations sur la distribution des états d'interface. L'analyse des équations (I.95), (I.96) permet d'évaluer les expressions de la conductance et de la capacité des pièges.

$$G_{ss} = \frac{qJ_{dc}}{kT} \frac{w_p^2 C_i (C - C_{HF})}{G^2 + w_p^2 (C - C_{HF})^2}$$
(I.97)

$$C_{ss} = \frac{qJ_{dc}}{kT} \frac{GC_i - C_{\Sigma} |G^2 + w_p^2 (C - C_{HF})|}{G^2 + w_p^2 (C - C_{HF})^2}$$
(I.98)

La relation entre C_{ss} , G_{ss} et la densité d'état d'interface N_{ss} est définite par [25] :

$$C_{ss} = \frac{SqN_{ss}}{w_{p}\tau} \operatorname{arctg}(w_{p}\tau)$$
(1.99)

$$G_{ss} = \frac{SqN_{ss}}{2\tau} Ln(1 + w_p^2 \tau^2)$$
(I.100)

 τ est la constante de temps des piéges définie par [25] :

$$\tau = \frac{1}{V_{\rm th}\sigma_{\rm n}N_{\rm d}} e^{\frac{qV_{\rm b0}}{kT}} \tag{I.101}$$

τ dépend de la section efficace de capture des électrons σ_n et de la vitesse thermique des porteurs V_{th} $\approx 10^7$ cm.s⁻¹.



I.3 Références Bibliographiques

[1]	K. F. Brennan and A. S. Brown
	Wiley New York 14 (2002)
[2]	A. Vapaille, R. Castagne
	Dispositifs des semi-conducteurs et des composants électroniques. Edition DUNOD, (1990)
[3]	S. M. Sze
	Physics of Semiconductor Devices, 2nd ed. (Wiley, New York, 245) (1981).
[4]	H. Mathieu
	Physique des semi-conducteurs et des composants électroniques. Edition MASSON, (2009).
[5]	Jean-Christophe MARTIN
	Thèse de docteur d'université, Université Bordeaux 1, N° d'ordre : 2853 (2004).
[6]	M. Ahmetoglu (Afrailov)
	Thin Solid Films 516 12227-1231 (2008).
[7]	Akkal Boudali
	Thése de doctorat d'état de l'université de Sidi-Bel-Abbés (2002).
[8]	E. H. Rhoderik
	IEE, 129, 1 (1972).
[9]	W. Schottky
	Naturwiss. 26, 843 (1938).
[10]	B. Akkal, Z. Benamara, N. Bachir Bouiadjra, S. Tizi, B. Gruzza
	Applied Surface Science 253, 1065–1070 (2006).
[11]	E. H. Rhoderik
	Clarendo Press Oxford (1980)
[12]	H.A. Bethe
	MIT Radiation Laboratory report 43, 12 (1942).
[13]	F. A. Padovani, R. Straton,
	Solid Stat. Electron. 9, 695 (1966).
[14]	P. Cova. And A. Singh
	Solid State Electronics, 33,11 (1990).
[15]	C. R. Crowell and V. L. Rideout,
	Solid-State Electronics Pergamon Press 12, 89-105 (1969).
[16]	P. Chattopadhyay
	Solid State Electronics, 36, 1641 (1993).



[17]	E. H. Nicollian, and A. Goetzberger
	Bell syst. Tech. J, 46, 1055 (1967).
[18]	P. Chattopadhyay
	Solid State Electronics, 38, 739 (1995).
[19]	A. Singh
	Solid State Electronics, 26, 815 (1983).
[20]	H. C. Card, E. H. Rhoderik
	J. Appl. Phys, 4, 1589, (1971).
[21]	E.H. Rhoderick, R.H. Williams
	Metal-Semiconductor Contacts, Clarendon Press, Oxford (1988).
[22]	A. Y. C. Yu et E. H. Snow
	Journal of applied physics 39, 7, 3008 (1968).
[23]	E. H. Rhoderik
	Clarendo Press Oxford (1978)
[24]	P. Chattopadhyay and A. N. Daw
	Solid State Electronics, 28, 831 (1989).
[25]	K. Ploog and H. J. Queisser

Physical Review Letters, 57, 1080 (1986).



Chapitre II

Technologie et Dispositifs Expérimentaux



II.1 Introduction

Les semiconducteurs III-N connaissent un intérêt croissant dans le monde scientifique. Ceci se justifie par le fait que ces semiconducteurs sont intéressants et possèdent une conductivité thermique ainsi qu'un point de fusion élevés ; et de plus, ils ont une bande interdite directe. Ils représentent actuellement les matériaux idéaux pour l'élaboration de diodes électroluminescentes (DEL) opérant dans la gamme vert-bleue pour l'affichage couleur, la signalisation ou encore l'uv (ultra violet) ou la lumière blanche pour l'éclairage, les diodes laser (LDs) bleues ou violettes pour l'impression ou le stockage optique, les détecteurs UV "solar blind" pour la détection des incendies, l'identification ou le guidage des missiles, ou encore le dosage personnel des UV, et enfin les transistors "haute fréquence – haute puissance" pour la communication ou les radars fonctionnant à haute température (applications spatiales). Parmi ces semi-conducteurs, on trouve principalement le nitrure d'aluminium (AlN), le nitrure de gallium (GaN) et le nitrure d'indium (InN) [1].

L'optimisation de la croissance de GaN massif constitue aujourd'hui un enjeu primordial. Cependant, la difficulté majeure rencontrée pour le dépôt de tous les nitrures résulte de cette absence de substrat. Ceci conduit à une hétérojonction à très fort désaccord à la fois de paramètre de maille, de structure cristalline, de polarité de surface et de coefficient de dilatation thermique [2, 3]. Le saphir reste le substrat le plus utilisé malgré son désaccord qui est de l'ordre de 16% avec le GaN [4]. Néanmoins, le GaAs représente un bon candidat pour la croissance de GaN grâce à une technique appelé nitruration qui permet la création de quelques monocouches atomiques de nitrure de galium à partir des éléments du substrat de GaAs.

Dans ce deuxième chapitre, nous présenterons les différentes propriétés cristallographiques et électroniques du GaAs et du GaN, puis nous décrirons les dispositifs expérimentaux tels que les bâtis ultravides et leurs éléments utilisés pour la nitruration des substrats de GaAs. Les différentes spectroscopies employées telles que la spectroscopie XPS et la spectroscopie Auger sont exposé dans l'Annexe. Ces méthodes d'analyse, complémentaires entre elles, permettent de déterminer la composition chimique et la structure cristalline des surfaces étudiées. Ensuite, nous présenterons les différents bancs de mesures que nous avons employés dans les caractéristiques électriques des substrats nitrurés tels que le banc I(V) et le banc C(V).

II.2 Propriétés essentielles du GaAs et du GaN

II.2.1 Propriétés essentielles du GaAs

Le GaAs est un semi-conducteur III-V complexe composé de l'élément de gallium (Ga) de la colonne III et l'élément de l'arsenic (As) de la colonne V du tableau périodique des éléments. Le GaAs a d'abord été créé par la société Goldschmidt en 1929, mais les premières propriétés électroniques de ce semi-conducteur ne furent démontrées qu'en 1952 [5].

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



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

Le tableau [II-1] dresse une liste de certaines propriétés structurales et électriques du GaAs. [6]

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

Tableau [II-1] : Propriétés du GaAs à température ambiante (300 K) [6]



Pour du GaAs non dopé, l'énergie de gap à température ambiante est de 1,42 eV. L'affinité électronique du GaAs, q χ (énergie nécessaire pour arracher un électron du bas de la bande de conduction jusqu'au niveau du vide) est d'environ 4.07 eV [7, 8].

II.2.2 Propriétés essentielles du GaN

Le nitrure de gallium se présente sous trois formes cristallines représenté dans la figure [II-2] : les structures de type wurtzite, Zinc blende et NaCl. Celle de type wurtzite est la plus stable thermodynamiquement. Celle de type NaCl est la variété à haute pression de GaN [9].



Figure [II-2]: Les différentes structures de GaN : (a) wurtzite, (b) Zinc blende et (c) NaCl [9].

- La phase Wurtzite appartient au système hexagonal. Elle est constituée de deux sous-réseaux hexagonaux compacts décalés de 5/8 de la hauteur de la maille selon l'axe C.
- La structure blende de zinc cristallise quant à elle dans le système cubique. Elle consiste en deux réseaux cubiques à faces centrées décalés d'un quart de la diagonale du cube.
- La structure de type NaCl est composée de deux sous réseaux cubiques faces centrées d'atomes d'azote et de gallium, décalés de a/2. La phase de type NaCl est stable à des hautes pressions.

Parmi celles-ci, à température et pression ambiantes, la wurtzite est thermo-dynamiquement la plus stable pour les couches massives. Les structures sont caractérisées par deux paramètres : a pour le côté de l'hexagone et c qui correspondant à la hauteur du prisme, dont les valeurs sont données dans le tableau [II-2] pour une température de 300K.

	GaN structure Wurtzite	GaN structure cubique	GaAs structure cubique
Gap à 300 K (eV)	3.39	3.23	1.42
Paramètre de réseau (a ; c) (Å)	(3.19; 5.19)	4.52	5.65
Coef. d'expansion thermique $(10^{-6} \times \text{K}^{-1})$	(5.6; 3.2)	3.17	5.8

Tableau [II-2]: Comparaison de propriétés des semi-conducteurs GaN et GaAs [10-11].

Pour le nitrure de gallium, il existe deux arrangements possibles des atomes de gallium et d'azote lors de la croissance. Dans le cas où le Ga dans la liaison Ga-N est pointé vers la surface, on dit que l'on a une polarité gallium (figure [II-3]). Dans le cas contraire, on a une polarité azote. Il convient de noter que la polarité d'une couche ne présage pas de la nature des atomes en surface. Par exemple, une couche à polarité gallium peut aussi bien se terminer par des atomes de gallium que par des atomes d'azote en surface [12].



Figure [II-3]: Polarisation dans le cas du GaN.

II.2.2.1 Les propriétés électroniques

II.2.2.1.1 La largeur de la bande interdite

La valeur de la bande interdite Eg constitue un paramètre essentiel pour la fabrication de dispositifs. Les premières mesures de la bande interdite de GaN à basse température, qui datent des années 1970, ont donné des valeurs ~ 3, 5 eV [13, 14]. Depuis, le gap des nitrures a été le sujet de nombreuses études [15, 16].



II.2.2.1.2 La mobilité électronique

Une propriété électrique importante dans les semi-conducteurs est la capacité de déplacement des électrons sous l'effet d'un champ électrique, appelée mobilité électronique. La mobilité électronique dépend fortement de la qualité cristallographique du matériau. La mobilité de GaN peut atteindre 1000 cm²/V.s [17]

II.2.3 Les différents substrats utilisés pour la croissance du GaN

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

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

La majorité des couches de GaN élaborées à l'heure actuelle sont déposées sur substrat saphir. Ce substrat présente les avantages d'un coût relativement faible et surtout d'une grande stabilité en température, mais les inconvénients d'être un isolant électrique et thermique. 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%) [18, 19].

Le tableau [II-3] rassemble les substrats les plus couramment utilisés pour la croissance du GaN, ainsi que les paramètres de maille obtenus pour chaque polytype et le facteur de dilatation entre le GaN et le substrat.



GaN hexagonal				
Matériau	Structure cristalline.	Paramètre de maille (Å)	Coefficient de dilatation thermique $(\Delta a/a; \Delta c/c) (x10^{-6} k^{-1})$	
Saphir (Al ₂ O ₃)	Hexagonale	a=4.758 ; c=12.99	a=7.5 ; c=8.5	
6H SiC	Wurtzite	a=3.08 ; c=15.12	a=4.2 ; c=4.68	
Si (111) (100)	Cubique	a=5.4301	a=3.59	
GaAs (111) (100)	Cubique	a=5.6533	a=6	
ZnO	Wurtzite	a=3.250 ; c=5.213	a=8.25 ; c=4.75	
AlN (couche tampor	n) Wurtzite	a=3.112 ; c=4.982	a = 4.2 ; c =5.3	
GaN cubique				
Matériau Structure cristalline.		Paramètre de maille (Å)	Coefficient de dilatation thermique $(\Delta a/a; \Delta c/c) (x10^{-6}k^{-1})$	
3 C SiC	Cubique	a=4.36	a ≅5	
Si (100) Cubique		a=5.4301	a =3.59	
GaAs (100) Cubique		a=5.6533	a = 6	
MgO	Cubique	a=4.126	a =10.5	

Tableau [II-3] : Paramètres de maille et coefficients de dilatation thermique autour de 300°Cdes substrats les plus employés pour la croissance de GaN. [18, 19]



II.3 Description des dispositifs expérimentaux d'ultra-vide

II.3.1 Bâtis ultra vide

L'étude des propriétés de la surface à l'échelle atomique nécessite de placer l'échantillon dans une enceinte en acier inoxydable dont la pression est inférieure à 10-8 Pa: vide très poussé, qualifié d'ultra vide (Ultra High Vacuum). Cela permet d'éviter toute contamination de la surface de l'échantillon et de réaliser des caractérisations dans un environnement propre et contrôlé.

II.3.2 Obtention et contrôle du vide

Pour assurer un vide poussé dans l'enceinte, il est nécessaire de coupler plusieurs types de pompes:

Une pompe à palettes

Permet de ramener la pression atmosphérique à une pression de l'ordre 10⁻¹ Pa. Elle est constituée d'un rotor muni de palettes, excentré à l'intérieur d'un stator, pouvant donner une vitesse de pompage de 50 l/s. La rotation du rotor entraine les particules de l'enceinte, qui vont ensuite être compressées entre les palettes. Cette compression commande alors l'ouverture de la vanne de sortie, permettant le rejet des particules vers le milieu extérieur

> Une pompe turbo-moléculaire : (pompage secondaire)

Permet d'atteindre un vide de l'ordre $de10^{-5}$ Pa. Elle se compose d'une série de roues à ailettes qui tournent à une vitesse de

72 000 tours/min. Les particules sont entrainées vers le système de refoulement qui est assuré par une pompe primaire ;

Afin de poursuivre la descente en pression, il est nécessaire d'étuver l'enceinte. Cet étuvage consiste à chauffer pendant le pompage, l'ensemble du dispositif expérimental. Ce chauffage s'effectue grâce à des cordons chauffants et à une lampe à émission infrarouge d'une puissance de 1500 W située à l'intérieur du bâti.

> Une pompe ionique à diodes

Permet d'obtenir un vide de l'ordre de 10⁻⁸ Pa. Son fonctionnement continuel maintient l'ultra-vide indispensable à l'intérieur du bâti. Son principe est basé sur deux phénomènes : l'ionisation des molécules de gaz puis le piégeage des molécules ionisées qui sont adsorbées ensuite sur des plaques de titane.



	Primaire		Secondaire		Ultravide
10	10-1	10 ⁻³	10 ⁻⁵	10 ⁻⁷	10 ⁻⁹ Pa
Pompe primaire Pompe turbo-moléculaire					
				Pompe	ionique

La figure suivante résume les étapes essentielles pour l'obtention des différents niveaux de vide :

Figure [II-4] : Plages d'utilisations des différentes pompes.

II.3.3 Différents éléments constituant le bâti

Le bâti est constitué de deux bâtis ultra-vides différents permettant une analyse complète de la surface d'un échantillon

L'interconnexion de ces enceintes en environnement ultravide est devenue inévitable, pour pouvoir transférer des échantillons d'une enceinte à l'autre sans polluer la surface des échantillons.

Ce nouveau dispositif expérimental se divise en trois parties (fig [II-5]): une chambre d'introduction rapide, une première chambre de préparation et d'analyse comprenant un analyseur RFA (Retarding Field Analyser) et des cellules d'évaporation ainsi qu'une deuxième chambre d'analyse constitue d'un analyseur HSA (Hemi Spherical Analyser) et d'une source à rayons X.



Figure [II-5]: schématisation du bâti ultra vide.



- (1) Analyseur hémisphérique (HSA), (2) Analyseur à champs retardateur (RFA), (3) Canon à ions,
- (4) Canon à électrons, (5) Porte échantillon chauffant et parking, (6) Porte échantillon non chauffant,
- (7) Cellule d'évaporation d'or, (8) Source de rayon X, (9) Canne de transfert,
- (10) Fourchette pour le positionnement de l'échantillon sur le porte échantillon.





Figure [II-6] : (a) photographies du bâti ultra vide, (b) l'intérieur de la chambre d'analyse et (c) l'intérieur de la chambre de préparation



II.3.3.1 Le porte échantillon et le système de chauffage

Le bâti est équipé d'un porte échantillon multidirectionnel qui se situe au centre de l'enceinte. La chambre de préparation et d'analyse (fig. [II-6]) peut recevoir 3 échantillons. Les portes échantillons sont composés de deux parties : une partie que l'on appelle parking qui permet de stocker deux échantillons et une partie analyse. Le porte échantillon en cuivre permet une bonne conduction thermique et électrique et possède un système de chauffage. Le thermocouple chromel /alumel contrôle la température. Une cage de Faraday, positionnée au dessus des échantillons est isolée du porte échantillon par une céramique, permet de mesurer le courant du faisceau d'électrons primaire (fig [II-6c]).

II.3.3.2 La source de production d'azote

En fait, la molécule d'azote est très stable (énergie de liaison : 9,9 eV [20]) ce qui rend difficile la production d'espèces azote atomique, pour cela il est préférable d'utiliser une source de type à décharge plasma qui permet de produire l'azote atomique en cassant la molécule N_2 .

Dans la source de production d'azote à décharge par plasma (fig [II-7]), on utilise une tension continue de 2 kV entre l'anode et la cathode créant ainsi un plasma. L'anode est constituée par un cylindre en acier inoxydable enchâssé dans un tube de quartz. Ce cylindre est porté à la haute tension. La cathode, reliée à l'enceinte ultravide, est percée d'un trou de diamètre 1,5 mm permettant aux espèces azotées de sortir vers l'enceinte.



Figure [II-7] : Schéma de la source d'azote de type plasma à décharge [21]



Il y a une arrivée latérale pour l'introduction du di-azote pur à 99,999% provenant d'une bouteille. L'inconvénient d'une telle source réside dans son fonctionnement à une pression d'azote diatomique relativement élevée (10^{-1} Pa dans l'enceinte). Dans la quantité d'ions azote N⁺ produits, le courant d'échantillon mesuré (N_2^+ N⁺) est de l'ordre du micro-ampère par centimètres carré.

II.3.3.3 Analyseurs d'électrons

Nous allons décrire les deux analyseurs présent dans le Laboratoire des Sciences des Matériaux pour l'Electronique et d'Automatique LASMEA: l'analyseur à champ retardateur appelé RFA et l'analyseur hémisphérique ou HSA. Nous allons décrire leur principe de fonctionnement.

II.3.3.3.1 Analyseur à champ retardateur (RFA)

Il est constitué principalement de trois éléments (fig [II-8]) :

- une source d'excitation : canon à électrons
- ➤ un collecteur d'électrons : écran métallique C
- un système de filtre passe-haut pour les électrons composé des quatre grilles G1, G2, G3, G4. (fig [II-8]).



Figure [II-8]: Schéma du RFA



Les électrons d'énergie primaire E0 et d'intensité I0 sont focalisés perpendiculairement à l'échantillon :

- La grille Gi est à la masse de façon à assurer un espace sans champ entre elle-même et l'échantillon, relié à la masse également. Dans cet espace, les électrons induits par l'excitation de l'échantillon (électrons rétrodiffusés ou émis) ne sont ni déviés, ni décélérés.
- Les grilles G₂ et G₃ sont portées à un potentiel retardateur VR. Ce potentiel définit une barrière pour les électrons : seuls ceux possédant une énergie supérieure à eVR peuvent traverser ce champ et franchir les grilles.
- La grille G4, liée à la masse, placée entre les grilles G2, G3, permet de soustraire l'influence du potentiel appliqué à ces grilles retardatrices sur l'écran collecteur [22].
- L'écran collecteur, porté à un potentiel de 300 V, permet de collecter les électrons filtrés à la sortie des grilles en les accélérant.
- L'intensité des électrons recueillis par le collecteur est définie comme suit :

$$I(E) = \int_{e_{V_R}}^{E_P} T(E) N(E) dE$$
(II.1)

où

T(E) est la transmission de l'analyseur ;

N(E) représente la distribution énergétique des électrons collectés.

L'évolution de la transmission en fonction de l'énergie pour un analyseur RFA a été déterminée, selon deux méthodes différentes, par R.Schmid et al. [23] et par B.Gruzza [24]. Ces travaux ont permis de donner une expression mathématique de celle-ci (fig [II-9]):

 $T(E)=0.96326*E^{-0.161}$ [23, 24].





Figure [II-9]: Courbe de transmission T(E) pour un RFA [25]

Le spectre est obtenu en enregistrant la variation de l'intensité du signal à la sortie de la détection synchrone en fonction de l'énergie. Après détection et traitement, le signal est transmis à un ordinateur qui pilote toute la manipulation.

L'avantage du RFA par rapport à d'autres analyseurs est son importante luminosité.

Le RFA permet d'enregistrer avec une résolution moyenne la distribution N (E) des électrons réémis élastiquement. Le principe même de fonctionnement de cet appareil (un champ retardateur) engendre la création d'un important bruit de fond. En effet, le système des quatre grilles a un rôle de filtre passe-haut. Par conséquent, tous les électrons ayant une énergie au moins égale à la tension de filtrage passent cette barrière, mais également ceux ayant une énergie supérieure. Il en résulte un niveau de fond continuel. Cette faible résolution rend plus difficile les acquisitions expérimentales fines.



II.3.3.3.2 L'analyseur hémisphérique (HSA)

Le bâti ultravide n° 2 est équipé d'un analyseur hémisphérique décrit par la figure [II-10]. Dans un tel analyseur, de type dispersif, les électrons sont déviés par un champ électrostatique. La distribution énergétique est obtenue en faisant varier le champ électrique et en collectant les électrons dans une fenêtre d'énergie constante. Le filtrage se fait dans un intervalle d'énergie étroit.



Figure [II-10]: L'analyseur hémisphérique

L'analyseur hémisphérique est basé sur le modèle de M.D. Bui [26], il est composé de trois parties : l'optique d'entrée, l'analyseur qui est constitué de deux hémisphériques et l'optique de sortie.

L'optique d'entrée est composée de trois lentilles (L_1, L_2, L_3) de filtrage qui sont des électrodes cylindriques creuses. Elle présélectionne les électrons à étudier [26].

Les lentilles L_1 et L_3 sont portées à un potentiel retardateur V_R qui permet de freiner les électrons jusqu'à l'énergie de passage E_p .

La lentille L₂ permet d'appliquer le potentiel de focalisation V_f et de faire converger ainsi le faisceau d'électrons issus de l'échantillon jusqu'à l'entrée des deux hémisphères. Entre ceux-ci est appliquée une différence de potentiel $\Delta V = k E_p$, (k étant une constante dépendante de la géométrie de l'analyseur) et ces deux hémisphères permettent un second filtrage des électrons.



Le facteur de transmission défini comme étant : $V_f/\Delta V$ a été fixé à une valeur égale à 6. Cette valeur permet une focalisation optimale du faisceau d'électrons sur la fente de sortie [27].

A la sortie de l'analyseur, les électrons sont recueillis par un channeltron (multiplicateur d'électrons) de gain 2×10^8 sous une tension d'alimentation de 3,2 kV [21]. Le channeltron est placé après la fente de sortie de l'analyseur. Cela permet d'amplifier le courant d'électrons et d'utiliser un mode de comptage en impulsions. L'ensemble est relie à un ordinateur muni d'un programme d'acquisition automatique.

La luminosité de l'analyseur hémisphérique est très faible mais la résolution en énergie est bien meilleure qu'avec un RFA par exemple.

II.3.3.4 Le détecteur channeltron

On distingue deux familles de détecteurs d'électrons : les photomultiplicateurs à dynodes et les channeltrons. Les photomultiplicateurs à dynodes de type cuivre/béryllium sont les plus anciens et présentent l'avantage de pouvoir produire des courants de sortie importants (supérieur à 100μ A). Cependant, ils ont l'inconvénient d'être relativement instables après plusieurs expositions à l'air.

De nouvelles structures de photomultiplicateurs fabriquées en aluminium sont moins susceptibles de se dégrader, mais la nouvelle génération de détecteurs de type channeltron a largement remplacé les photomultiplicateurs à dynode [27]. En effet, ce type de détecteur est plus adapté à des applications qui nécessitent des expositions fréquentes à l'atmosphère. Ils peuvent fonctionner, soit en mode analogique particulièrement adapté à la détecter de faibles signaux jusqu'à une limite maximum de comptage de 10⁷ coups par seconde [28]. Ils se présentent sous forme de tubes courbés (fig [II-11]) ayant un diamètre intérieur de environ 1 mm et un diamètre extérieur de 2, 3 ou 6 mm est construit à partir d'une formule spéciale de verre : silicate de plomb.





Figure [II-11]: Vue en coupe d'un channeltron

La production d'électrons secondaires se fait dans la couche d'épaisseur 200A° de surface. Cette surface qui présente une grande résistance électrique de l'ordre de $10^9 \Omega$ devient équivalente à une dynode continue (électrode qui permet la multiplication d'électrons secondaires) sous l'effet d'une différence de potentiel appliqué entre les deux électrodes du tube.

Les électrons générés sont accélérés par la différence de potentiel ΔV au bore du tube ils rencontrent de nouveau la paroi interne. Cette succession de collisions produit un grand nombre d'électrons à la sortie du channeltron.

II.4 Principe et description des bancs de mesures électriques

II.4.1 Principe et description du banc de mesures I (V)

Le banc de mesure utilisé, pour relever la caractéristique courant- tension, est constitué essentiellement d'un porte substrat relié directement au banc de mesure automatique de model « HEWLETT PACKARD 4155B semiconductor parameter analyzer ». Ce dernier applique une tension V sur la structure et mesure directement le courant qui la traverse. Les résultats sont directement enregistrés et visualisés sur l'écran du banc.

Dans une application de mesure, le substrat repose sur un plateau métallique (porte substrat), qui est relié au banc et considéré comme masse. Le contact avant est obtenu par l'intermédiaire de la sonde par laquelle on polarise l'échantillon. A partir des contacts avant et arrière, on polarise le substrat. La figure [II-12] illustre le fonctionnement du banc de mesure courant – tension I(V) de la caractéristique électrique.





Figure [II-12]: Circuit de mesure des caractéristiques I (V).

II.4.2 Principe et description du banc de mesures C (V)

Les mesures en haute fréquence (1MHz) sont réalisées à l'aide d'un banc de mesure Capacité - Tension de model « KEITHLEY test system. 590 CV Analyser » (voir figure [II-13]). Le banc fonctionne en automatique, il est constitué d'un oscillateur, un détecteur de phase et 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 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 [II-13].



Figure [II-13]: Principe de la mesure C (V).



II.5 Références Bibliographiques K.S.A. Butcher et T.L. Tansley [1] Superlattices and Microstructures, 38, 1 (2005). [2] T.S. Cheng, C.T. Foxon, G.B. Ren, J.W. Orton, Y.V. Melnik, I.P. Nikitina, A.E. Nikolaev, S.V. Novikov, V.A. Dmitriev, Semicond. Sci. Technol. 12, 917 (1997). L. Liu, J.H. Edgar, Mater. [3] Sci. Eng. R 37, 61 (2002). [4] H. C. Adelmann Thèse de Doctorat de l'Université Joseph Fourier – Grenoble 1 (2002). H. Welker, Z. Naturforsch, [5] Vol A, 7, 744 (1952). NMS Archive : http://www.ioffe.ru/SVA/NSM/Semicond/. [6] [7] S. M. Sze, "Semiconductor Devices Physics and Technology", J. Wiley, New York (1985). [8] R. F. Pierret, "Semiconductor Fundamentals", Addison-Wesley Publishing, NewYork (1989). [9] I. Akasaki, H. Amano, Properties of group III nitride, J. EDGAR, Datareview series 11, 3-6 (1994). [10] Q. Chen, J.W. Yang, M. Blasingame, Material Science and Engineering. B, 59, 395 (1999). [11] A. Philippe, Thèse de Docteur d'Université, Institut national des Sciences Appliquées de Lyon 99, 0110 (1999). Fabrice ENJALBERT [12] Thèse de doctorat, l'Université Joseph Fourier – Grenoble (2004). R. Dingle, D. D. Sell, S. E. Stokowski, M. Ilegems [13] Phys. Rev. B 4, 1211 (1971). [14] M. Ilegems, R. Dingle, R. A. Logan J. Appl. Phys, 43, 3797 (1972). [15] W. M. Yim, E. J. Stofko, P. J. Zanzucchi, J. I. Pankove, M. Ettenberg, S. L. Gilbert, J. Appl. Phys. 44, 292 (1973).



- [16] V. Yu. Davydov, A. A. Klochikhin, R. P. Seisyan, V. V. Emtsev, S. V. Ivanov,
 F. Bechstedt, J. Furthmuller, H. Harima, A. V. Murdryi, J. Aderhold, O. Semchinova,
 J. Graul *Phys. Stat. Sol, B 203, R4 (2002).*
- [17] V. W. L. Chin, T. L. Tansley, and T. Osotchan, J. Appl. Phys. 75, 11 (1994).
- [18] Yamina Ould-Metidji.
 Thèse de docteur d'université. Université Blaise Pascal, Clermont-Fd II, N° d'ordre : 1382 (2002).
- [19] A. Philipe Thèse de docteur d'université d'institue des sciences appliquée de Lyon (1999).
- [20] W.C. Hughes, W.H. Rowland, M.A.L. Johnson, S. Fujita, J.W. Cook, J.F. Schetzina, J. Ren, J.A. Edmond,
 J. Vac. Sci. Technol. B 13 1571(1995).
- [21] Sana Ben Khalifa
 Thèse de docteur d'université. Université Blaise Pascal, Clermont-Fd II, N° d'ordre : D.U.
 1864 (2008).
- [22] N.J. Taylor, *Rev. Sci. Instrum. 40, 792 (1969).*
- [23] R. Schmidt, K.H. Gaukler, H. Seiler,
 Scanning Electron Microscopy (1983) /II SEM Inc., Chicago, 501 (1983).
- [24] B. Gruzza, P. Bondot, A. Porte, C. Jardin, G. Gergely, Acta Physica Polonica A 81,159 (1992).
- [25] Luc Bideux.
 Thèse de Docteur de l'Université Blaise Pascal, Clermont-Ferrand II, N° d'ordre 6095 (1994).
- [26] M.D. Bui, C. Jardin, J.P. Gauthier, P. Michel,*J. Phys. E : Sci .Instrum. 12, 43 (1979).*
- [27] E. Bauer, J. Vac. Sci. Technol. 7, 3 (1970).
- [28] Channeltron Electron Multplier, Handbook for Mass Spectroscopy Applications, edition GALILEO (1991).

Chapitre III

Etude de la nitruration des substrats GaAs(100)



III.1. Introduction

Le GaAs présente de nombreux avantages dans la croissance de monocouches de GaN. D'abord, le GaAs est un semi-conducteur, ce qui permet de facilité l'intégration de structures à base de nitrures dans des dispositifs microélectroniques et optoélectroniques. Ainsi la nitruration des substrats de GaAs est utilisée pour fabriquer des films minces de GaN qui servant de précurseur sur substrat de GaAs pour initier à la croissance de GaN massif.

Cependant, la première partie de ce chapitre sera consacrée à la préparation des substrats de GaAs (100), notamment leur nettoyage chimique et ionique et voir l'effet de nettoyage aux moyens des spectroscopies XPS et Auger. Ensuite, nous étudierons le processus de nitruration sur ces substrats de GaAs nettoyé suivi par des analyses de surface effectuées par spectroscopies Auger.

III.2 Préparation des échantillons

Les substrats d'arséniure de gallium utilisés pour cette étude sont des substrats présentent sous la forme de plaquettes circulaires d'une épaisseur de 400 μ m et de 2 pouces de diamètre (environ 50 mm). Ces substrats sont réalisés par tirage Czochralski et sont ensuite découpés et polis suivant le plan cristallographique (100). Ces échantillons sont dopés au silicium (type n) et ont une concentration de porteurs N_d = 4.9×10^{15} atomes /cm³.

III.2.1 Nettoyage chimique des substrats de GaAs

Les substrats du GaAs de type N utilisés, sont nettoyés chimiquement avant de les introduire dans les enceintes ultravide.

Le processus de nettoyage est composé de bains successifs de méthanol, d'acide sulfurique et de brome. L'acide joue le rôle de solvant et le décapage chimique se fait par le brome et le méthanol. La succession de bains est telle qu'elle évite les mélanges acide-alcool (qui favorise la formation de carbone) et brome-eau nuisibles à un bon état optique de la surface. La séquence de nettoyage est expliquée sur la figure [III-1].



Eau desionisée

 $H_2SO_4 + ultrasons$

(Dégraissage de la surface)

Eau desionisée + ultrasons

Rinçage afin d'éviter le mélange acide alcool conduisant à la formation de carbone

Méthanol froid et chaud

Rinçage afin d'éviter le mélange brome- eau nuisible à la qualité optique de la surface

Figure [III-1]: Processus de nettoyage chimique d'une surface de substrat de GaAs



III.2.2 Nettoyage ionique par bombardement d'Ar⁺ suivi par spectroscopie XPS

Après le nettoyage chimique, les substrats sont introduits directement dans le bâti ultravide. Ils vont subir un nettoyage par bombardement ionique. Or les spectres Auger réalisés révèlent la présence de carbone et d'oxygène mais en plus faible quantité (figure [III-2].

A noté que, le bâti ultravide appartient au laboratoire LASMEA de l'université blaise pascale Clermont II en France avec qui nous avons une collaboration dans le cadre d'un contrat CMEP

L'obtention d'une interface de bonne qualité entre le substrat GaAs et les futures couches de nitrures nécessite l'élimination de ces impuretés. Cette élimination se fait grâce à un bombardement de la surface par un faisceau d'ions argon produit par le canon à ions. Ce choix d'ions est dicté par le fait qu'il s'agit d'une opération non destructive.

Les conditions de ce nettoyage ont été déterminées lors de travaux précédent réalisés par l'équipe « Surface et Interface » du laboratoire LASMEA [1] :

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

La figure [III-2] montre que les échantillons sont recouverts d'une couche d'oxyde ainsi que d'éléments carbonés provenant de l'exposition à l'air après le nettoyage chimique.





Figure [III-2]: Spectre XPS d'un substrat de GaAs(100) nettoyé chimiquement [1]

La figure [III-3]) représente l'évolution des signaux provenant des pics Ga3d, As3d et O1s en fonction du temps de bombardement pour un échantillon de GaAs. Nous pouvons observer la disparition de certains signaux au cours de l'abrasion jusqu'à l'obtention d'une surface propre constituée uniquement de GaAs





Figure [III-3]: Variations de la surface des pics As-Ga (cercles pleins), d'oxydes et de fluorure d'arsenic As-X (cercles ouverts), Ga-As (carrés pleins), d'oxydes et de fluorure de galium Ga-X (carrés vides) et O1s (diamants) avec le temps de pulvérisation [2].

Le but de l'analyse XPS est de connaître la surface de départ pour chaque expérience. Elle nous permet d'estimer le temps de bombardement nécessaire pour éliminer toutes les couches de contaminations et avoir un rapport Arsenic/Galium intéressant. Cette étape est cruciale et permet d'obtenir la quantité de galium métallique nécessaire pour le processus de nitruration.

La figure **[III-4]** illustre le nettoyage ionique par bombardement d' Ar^+ en éliminons les impuretés jusqu'à la création des couches de Galium sous forme liquide étalé en surface. C'est pour cela qu'avant chaque expérience de nitruration, un contrôle de la surface est effectué pour vérifier l'état de celle-ci, s'assurer qu'aucune couche de contamination ne subsiste et veiller à que l'on obtienne bien la quantité de Galium voulue.





Figure [III-4]: Représentation de la surface de GaAs (100) : A) surface juste avant le bombardement ionique, B) surface bombardé par l'Ar+, C) surface propre après le bombardement ionique D) surface après un bombardement ionique prolongé : présence de Galium métallique.

III.3 Reconstruction de la surface après chauffage

Une étude fait par L. Bideux et al [3] montre que le chauffage d'une surface de GaAs sur laquelle ont été déposé 3 monocouches de Ga amène, d'une part, à la restructuration de ce gallium métallique en une couche 2D pour une température de 450 °C et d'autre part, à l'évaporation de celle-ci pour une température supérieure à 500 °C. La figure [III-5] illustre ces résultats est présente l'évolution du rapport des signaux XPS Ga3d/As3d en fonction de la température. Après un chauffage à 450 °C, le rapport Ga_{3d}/As_{3d} est de 1.35, ce qui correspond à trois monocouches de Ga



étalées sur la surface. Au-dessus de 500 °C, ce rapport diminue à 0.75 montrant ainsi l'évaporation du gallium métallique.



Figure [III-5]: Evolution du rapport des signaux XPS Ga₃d/As₃d en fonction de la température pour un échantillon de GaAs recouvert de 3 monocouches de gallium [3].



R. Katayama et K. Onabe [4] ont montré à l'aide d'un Micrographe à balayage électronique (SEM) et à différente température (680°C, 700°C et 720°C) que le recuit ou le chauffage de l'hétérostructure GaN/GaAs recristallise et réarrange cette dernière (Voir figure [III-6]). Ce résultat est en bon accord avec celui de A.P Lima et al [5].



Figure [III-6]: Image d'un Micrographe à balayage électronique (SEM) d'une hétéro-structure GaN/GaAs : A) 680°C, B) 700°C et C) 720°C. [4]



III.4 La nitruration des substrats de GaAs

Le processus de nitruration des substrats de GaAs que nous employons est basé sur la présence de cristallites de galium métalliques créés lors du nettoyage de la surface par le bombardement ionique. Après la création des cristallites de galium (première étape du processus de nitruration), la surface du substrat est soumise à un flux d'azote actif (N, N+, N2+) produit par une source à décharge (Glow Discharge Cell, GDS).

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

III.4.1 Procédure de réalisation des couches de GaN/GaAs

Le figure [III-7] représente une schématisation de l'état de la surface de du substrat de GaAs au cours des différents processus de nitruration. Ces différents états ont été déduits des résultats obtenus pas spectroscopies électroniques [1], [3]. Les atomes d'azote viennent se combiner aux atomes de Galium métalliques présents à la surface de GaAs bombardée ioniquement. Les monocouches de Galium jouent alors le rôle de précurseurs. Des couches de GaN sont alors créées par consommation de gallium sous conditions de croissance optimales (température du substrat, angle d'incidence du flux d'azote, temps de nitruration...). La surface de GaAs est alors recouverte par des couches de GaN.

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





Figure [III-7]: Schématisation des différentes étapes du processus nitruration pour la formation des monocouches de GaN /GaAs.

III.4.2 L'évolution de l'épaisseur de la couche de GaN/GaAs

La figure [III-8] transcrit les rapports des spectres XPS en fonction de l'épaisseur de GaN créée.



Figure [III-8]: Calcul des rapports théoriques Ga3d/As3d, N1s/Ga3d et Ga-N/Ga-As en fonction du nombre de couches de GaN/GaAs(100).



III.5 Les défauts ponctuels dans la couche de GaN

III.5.1 Lacunes d'azote et de gallium

La lacune d'azote est le défaut le plus étudié théoriquement car elle est soupçonnée d'être à l'origine du dopage résiduel. Neugebauer [6] et Boguslawski [7] ont étudiées des couches de GaN cubique déposées par croissance EJM assistée par plasma RF sur des pseudo-substrats 3C SiC/Si, les précurseurs sont Ga solide et N₂ gazeux. Ils ont montré que les lacunes d'azote étaient à l'origine d'un niveau donneur léger simple dans le GaN. De manière générale, ces lacunes se formeront plus facilement sous conditions de croissance riches en gallium, alors que les lacunes de galium qui jouent le rôle d'accepteurs seront favorisées par une croissance riche d'azote.

Les conditions de croissance optimales pour le GaN sont obtenues avec des rapports V/III très élevés [8], qui devraient défavoriser la formation de lacunes d'azote.

III.5.2 Les atomes d'impuretés dans la couche de GaN

Les impuretés souvent présentes dans les couches épitaxiées sont le silicium, l'oxygène et le carbone. Le Si provient probablement des éléments en silice des bâtis de croissance.

L'oxygène peut également venir de la silice, des gaz vecteurs ou de l'ammoniac, lorsque celui-ci est utilisé comme précurseurs. Le carbone se trouve en particulier en EPVOM (Epitaxie Phase Vapeur Organo-Métallique) où il provient essentiellement des précurseurs organométalliques. Le silicium se place préférentiellement en site gallium (Si_{Ga}). Il agit alors comme donneur. Sous conditions de croissance riche en N. L'oxygène se positionne en priorité en site azote (O_N) où il agit comme donneur simple.

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

L'oxygène serait un donneur relativement léger d'énergie d'activation ~80 meV [9], et son incorporation serait réduite en EPVOM lorsque la température de croissance augmente [10]

Le carbone est un accepteur en site azote, site qu'il occupe préférentiellement du fait des faibles différences entre les rayons des atomes de C et N. les résultats expérimentaux indiqueraient que la pollution au carbone en EPVOM décroit lorsque la température de croissance augmente [8].



III.6 Références Bibliographiques

- G. Monier, L. Bideux, C. Robert-Goumet, B. Gruzza, M. Petit, J.L. Lábár, M. Menyhárd Surface Science, SUSC-19616-19623 (2012).
- [2] G. Monier, L. Bideux, O. Desplats, C. Fontaine, C. Robert-Goumet, B. Gruzza *Applied Surface Science*, 256, 4150-4153 (2008).
- [3] L. Bideux, G. Monier, V. matolin, C. Robert-Goumet, B. Gruzza, *Applied Surface Science*, 254, 4150-4153 (2008).
- [4] R. Katayama and K. Onabe,J. Cryst. Growth 278, 431 (2005).
- [5] A.P. Lima, T. Frey, U. Ko[°] hler, C. Wang, D.J. As, B. Scho[°] ttker, K. Lischka, D. Schikora, J. *Crystal Growth 197, 31 (1999).*
- [6] J. Neugebauer, C. G. Van De Walle, *Phys. Rev. B.50, 11, 8067-8070 (1994).*
- [7] O. Boguslaws, E. Briggs, J. Berholc,
 Phys. Rev. B, 51, 23, 17255-17258 (1995).
- [8] O. Briot,
 Physics and application. Edited by B. GIL. Oxford: Clarendon press, 70-122 (1998).
- [9] B. K. Meyer, Hoffmann.A, Thurian. P,
 Physics and application. Edited by B. GIL. Oxford: Clarendon press, 243-306 (1998).
- [10] B. Chung, M. Gershenzon,*J.Appl. Phys*, 72, 2, 651-659 (1992).


Chapitre IV

Résultats Expérimentaux et Interprétations



IV.1 Introduction

Dans ce chapitre, on présente les résultats expérimentaux à savoir : les caractérisations courant-tension I(V), capacité-tension C(V) relevée en haute fréquence (1MHz) des dispositifs étudiés.

Afin de s'assurer de la qualité du contact ohmique, nous avons déposé de l'étain, sur la face arrière des substrats, avec du N₄HCl. L'ensemble est chauffé à une température de 350° C pendant 5 minutes, ceci afin de permettre la diffusion de l'étain dans le substrat de GaAs.

A partir des courbes I(V) obtenues par les mesures électriques, nous allons extraire les paramètres suivants:

 I_s : le courant de saturation ;

n: le facteur d'idéalité ;

R_s: la résistance série ;

 $\Phi_{Bn}[I(V)]$: la hauteur de barrière de potentiel calculée à partir des courbes I(V).

Également et à partir des courbes C(V) obtenues par les mesures électriques, nous allons extraire les paramètres suivants:

 N_d : le dopage de la structure;

V_d: la tension de diffusion;

 $\Phi_{Bn}[C(V)]$: la hauteur de barrière de potentiel calculée à partir des courbes C(V).



IV.2 Présentation des échantillons d'études

Nous avons comparé les résultats obtenus des différentes structures étudiées à noter qu'il s'agit d'un échantillon témoin de GaAs non nitruré, une série substrats de GaAs nitrurés à différentes conditions.

Les cinq substrats d'arséniure de gallium utilisés pour cette étude se présentent sous la forme de plaquettes circulaires. Ces substrats sont élaborés par tirage Czochralski et sont ensuite polis et découpés suivant le plan cristallographique (100). Ces échantillons sont dopés au silicium de type n. Quatre de ces échantillons ont une concentration de dopants $N_d = 4.9 \times 10^{15}$ atomes /cm³ et le dernier échantillon a une concentration de porteurs $N_d = 1.4 \times 10^{18}$ atomes /cm³. Quatre de ces substrats ont subis une nitruration pour l'obtention de filmes de GaN et réaliser ainsi des hétéro-structures. Nous présentons dans le tableau [IV-1] les caractéristiques technologiques des différentes structures étudiées:

Echantillons	GaAs	GaN/GaAs			
	A ₁	A ₂	A ₃	A ₄	A ₅
Nitruration	Non	Oui	Oui	Oui	Oui
Dopage (cm ⁻³)	4.9×10 ¹⁵	4.9×10 ¹⁵	4.9×10 ¹⁵	4.9×10 ¹⁵	1.4×10 ¹⁸
Orientation cristalline	100	100	100	100	100
Diamètre du plot métallique (cm)	~0.1	~0.1	~0.1	~0.1	~0.1

Tableau [IV-1] : Les caractéristiques des échantillons d'étude

Le tableau [IV-2] représente les différentes étapes technologiques de nitruration des échantillons étudiés.



Echantillons		Différentes étapes de fabrication des échantillons étudiés		
Hg/GaAs	A_1	Nettoyage chimique, épaisseur du substrat GaAs: $400 \pm 20 \ \mu m$		
		 Nettoyage chimique du substrat de GaAs, 60 min de bombardement par une densité de courant de 5 μA/cm², Une énergie des ions de 1000 eV, Une pression de 6×10⁻⁵ Torr et une direction perpendiculaire à la surface de l'échantillon. Nitruration : 300°C, I=1μA/60 min Modélisation GaN : 26 Å (11.5MC) avec 8% d'oxygène ** Recuit : 400°C/60 min Modélisation GaN : 28 Å (12.5MC) avec 9% d'oxygène ** 		
Hg/GaN/GaAs	A ₃	 Nettoyage chimique du substrat de GaAs, 60 min de bombardement ionique, 5 μA/cm², Une énergie des ions de 1000 eV, Une pression de 6×10⁻⁵ Torr et direction perpendiculaire à la surface de l'échantillon. Nitruration : 300°C, I=1μA/ 60 min Modélisation GaN : 24 Å (10.5MC) avec 10% d'oxygène ** 		
A ₄		 Nettoyage chimique du substrat de GaAs, 60 min de bombardement ionique, 5 μA/cm², Une énergie des ions de 1000 eV, Une pression de 6×10⁻⁵ Torr et direction perpendiculaire à la surface de l'échantillon Nitruration: 300°C, I=1μA / 20 min Modélisation GaN : 18 Å (8MC) avec 0% d'oxygène ** Recuit : 300 °C/60 min Modélisation GaN : 18 Å (8MC) avec 2% d'oxygène ** 		
	\mathbf{A}_5	 Nettoyage chimique du substrat de GaAs, 60 min de bombardement ionique, 8 μA/cm², Une énergie des ions de 1000 eV, Une pression de 6×10⁻⁵ Torr Déposition du Ga (6 min; source de Ga à 780 °C; l'échantillon à 550 °C); Nitruration (1 h, 8×10⁻⁴ Pa, 550 °C); Déposition du GaN (3 h, 550 °C); Déposition du GaN : 250 Å (en utilisant la méthode de la capacité maximale) 		

Tableau [IV-2]: Les étapes technologiques des échantillons étudiés.

^{**} Calcul de l'épaisseur du GaN à l'aide d'un logiciel développé par Dr Guillaume MONIER de l'Université, Blaise-Pascal de Clermont ferrant-France [1].

IV.3 Caractérisation électrique de la structure Hg/GaAs (échantillon témoin A1)

Nous proposons d'étudier dans l'ordre subséquent, les caractéristiques électriques I(V) et C(V) de l'échantillon témoin de GaAs nettoyé chimiquement. Ensuite, une caractérisation électrique I(V) et C(V) des échantillons de GaAs nitrurés (A₂, A₃, A₄ et A₅) à différentes conditions de nitruration associée à une modulation.

Le contact de grille est assuré par une sonde à mercure (la section de la grille est de 7.85×10^{-5} cm²).

IV.3.1 Caractérisation Courant-Tension de l'échantillon témoin A1

La figure [IV-1] illustre la courbe I (V) de l'échantillon témoin A₁.



Figure [IV-1] : Caractéristique courant - tension de la structure Hg/GaAs.

La tension appliquée à la structure varie de -6 V à 6 V.

L'observation de la courbe I(V) permet de dire que le contact obtenu par le mercure sur le substrat de GaAs, est un contact redresseur. En effet, il présente en directe une caractéristique d'une allure exponentielle et un très faible courant de fuite en caractéristique inverse qui reflète la très bonne qualité électronique de la structure.

Pour la détermination des paramètres électriques, nous exploiterons la formule générale du courant qui est de la forme suivante [2] :

$$I = I_{s} \left[1 - \exp\left(\frac{-qV}{kT}\right) \right] \exp\left(\frac{qV}{nkT}\right)$$
(IV.1)

avec

I_s : courant de saturation ; k : constante de Boltzmann ;

T : température de fonctionnement ;

n: facteur d'idéalité.

A partir de cette équation, on peut tracer la courbe Ln [I/(1-exp(-qV/kT))] en fonction de la tension de polarisation V (voir figure [IV-2]).



Figure [IV-2]: Variation de Ln [I/ (1-exp (-qV/kT))] en fonction de la tension de polarisation de la structure Hg/GaAs.



L'intersection de la droite d'interpolation de la première région linéaire de la courbe Ln $[I/(1-\exp(-eV/kT))] = f(V)$ avec l'axe des courants permet de déterminer le courant de saturation I_s et le facteur d'idéalité de l'échantillon A₁.

La droite d'interpolation a pour équation Y = A X + B

$$A = q / (n \times k \times T)$$
 (IV.2)

$$\mathbf{B} = \ln\left(\mathbf{I}_{s}\right)$$

(IV.3)

Connaissant l'équation des droites d'interpolation, obtenues par « fitting » linéaire, nous avons obtenu les résultats suivants :

 I_s (courant de saturation obtenue) = 5×10⁻¹² A;

n (facteur d'idéalité) = 1.3;

Le facteur d'idéalité n, traduit l'écart entre le comportement d'une structure réelle qui est perturbé par les états d'interface et une structure idéale.

Ce résultat est en très bon accord avec les résultats trouvés dans la littérature [3].

La modélisation de la caractéristique courant-tension (voir annexe C) nous confirme le mécanisme de conduction de l''échantillon témoin A_1 comme étant un courant thermoïonique aux faibles tensions, nous pourrons dans ce cas déterminer la hauteur de barrière Φ_{Bn} à partir de la relation (I.82):

$$I_{s} = S.\overset{*}{A}T^{2}e^{\frac{-q\Phi_{Bn}}{kT}}$$
(IV.4)

A partir de la relation (IV.4), on peut exprimer la hauteur de barrière Φ_{Bn} (à l'origine de polarisation nulle) qui s'écrit :

$$\Phi_{Bn} = -\frac{kT}{q} Ln \left(\frac{I_s}{S.A^* T^2} \right)$$
(IV.5)

avec

A : constante de Richardson effective qui est égale à $8.16 \text{ A/cm}^2\text{K}^2$ pour le GaAs [4];

S : surface du plot de mercure qui est égale à 785×10^{-5} cm²;

T : température prise égale à 300 °K.

En remplaçant la valeur du courant de saturation de l'échantillon A_1 dans l'équation précédente, on obtient la valeur de la hauteur de barrière qui est de 0.9 V.

Pour la seconde région de la courbe des caractéristiques ln (I/1-exp (-qV/kT)), l'effet de la résistance série R_s , ne peut être négligé. Pour le calcul de ce paramètre, il suffit d'appliquer la relation suivante:



$R_s = \Delta V / I.$

(IV.6)

La résistance série estimée est alors de l'ordre de 107 Ω .

IV.3.2 Caractérisation Capacité-Tension

La caractéristique C(V) en haute fréquence (**1MHz**) de l'échantillon témoin A_1 est représentée sur la figure [IV-3].



Figure [IV-3] : Caractéristique capacité-tension de la structure Hg / GaAs.

La courbe obtenue est de forme parabolique ce qui confirme que notre échantillon est un contact Schottky.

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

Pour évaluer la distribution des états d'interface dans la bande interdite du semi-conducteur GaAs, nous avons calculé N_{ss} à l'aide de l'équation suivante [5] :

$$N_{ss} = \frac{1}{q} \left[\frac{\varepsilon_i}{\delta} \left(n(V) - 1 \right) - \frac{\varepsilon_s}{W(V)} \right]$$
(IV.7)

 $\label{eq:entropy} \mbox{En remplaçant dans l'expression (IV.7), les valeurs de n(V) et W(V), nous pouvons évaluer la distribution de la densité d'état d'interface N_{ss}(V).$



Pour tracer la caractéristique N_{ss} = f ($E_c - E_{ss}$), nous avons établi la correspondance entre l'énergie de la densité d'état d'interface E_{ss} et la tension de polarisation V au moyen de la relation suivante : [6]

$$E_{\rm C} - E_{\rm ss} = q \left(\Phi_{\rm Bn} - V \right) \tag{IV.8}$$

La figure [IV-4] présente la distribution des états d'interface dans la bande interdite pour la structure Hg/GaAs (échantillon témoin A₁).





La valeur de N_{ss} estimée au milieu de la bande interdite est de l'ordre de $7 \times 10^{10} \text{ eV}^{-1} \text{ cm}^{-2}$, ce qui montre la bonne qualité électronique du dispositif. Ce résultat est similaire à celui trouvé par S. Anantathanasarn et H. Hasegawa [7].

Pour calculer la tension de diffusion V_d ainsi que le dopage N_d , nous avons tracé la caractéristique $1/C^2$ en fonction de la tension et dont l'équation est [8]:

$$\frac{1}{C^2} = \frac{2}{\varepsilon_s \cdot q \cdot S^2 \cdot N_d} \frac{\left(V_d' - V_G\right)}{\left(1 + \alpha\right)}$$
(IV.9)



telle que V_d ' est la tension de diffusion due à la différence de travail de sortie et aux états d'interface. Elle représente l'intersection de la droite d'interpolation de $1/C^2$ avec l'axe des tensions et elle est exprimée par la relation suivante:

$$V_d' = V_d . (1+\alpha) \tag{IV.10}$$

où

$$\alpha = \frac{q.N_{SS(moy)}\delta}{\epsilon_{i}}$$
(IV.11)

avec

 δ : l'épaisseur de la couche inter-faciale du GaAs qui est prise égale à ~25 Å [9].

 ε_i : permittivité de la couche inter-faciale qui vaut 3,5 ε_0 [10].

 ε_s : permittivité relative de la couche de GaAs qui vaut 12,5 ε_0 [11].

La courbe $1/C^2 = f(V)$ obtenue est représentée sur la figure [IV-5]:



Figure [IV-5]: Caractéristique $1/C^2$ en fonction de la tension V.

Nous analysons la région linéaire correspondant à un niveau de dopant. Connaissant l'équation de la droite obtenue par fit linéaire, nous obtenons la tension V_d '= 1.6 V. A partir de l'équation (IV.10), on calcule la tension de diffusion V_d qui est de l'ordre de 1.2 V.

Le dopage N_d calculé est de 3×10^{15} cm⁻³. Cette dernière est dans la même gamme de dopage donnée par le fournisseur.



Pour le calcul de la barrière de potentiel, on introduit la valeur de V_d dans l'équation suivante [12] :

$$\Phi_{Bn} = V_{d} + \frac{kT}{q} ln \left(\frac{N_{c}}{N_{d}} \right)$$
(IV.12)

La valeur de Φ_{Bn} trouvée par les caractéristiques C(V) est de 1.3 V. Cette valeur est plus grande que celle trouvée par les caractéristique I(V) et cela est dû à la fréquence de 1MHz utilisée dans le banc de mesure C(V). Cette dernière n'est probablement pas tout à fait de la très haute fréquence pour nos structures électroniques à base des matériaux III-V. Cependant, une limitation de nos appareillages nous restreint à travailler à 1 MHz.

IV.4 Caractérisation électrique des structures Hg/GaN/GaAs

IV.4.1 Caractérisation Courant-Tension

Les caractéristiques I(V) des échantillons A₂, A₃ et A₄ de la structure Hg/GaN/GaAs (100) sont présentées dans la figure [IV-6].



Figure [IV-6]: Caractéristique I (V) des échantillons nitrurés à différents épaisseurs GaN/GaAs.



Les caractéristiques I(V) des échantillons A_2 , A_3 , A_4 et A_5 montrent le comportement d'un contact redresseur qui diffère d'un échantillon à l'autre. On a une meilleur conduction du courant quand l'épaisseur de la couche de GaN set élevée, sauf pour l'échantillon A_3 qui a un faible redressement. Cela est dû probablement au fait que ce dernier n'a subit aucun recuit. Par-contre, les autres échantillons ont subits un recuit à 400°C/60min, 300°C/60min et 550-600°C/2h pour les échantillons A_2 , A_4 et A_5 respectivement. On observe aussi un très faible courant inverse.

IV.4.1.1 Modélisation

Avant d'extraire les paramètres électriques à partir des courbes expérimentales de nos structures nitrurées, nous avons fait une simulation des caractéristiques courant en fonction de la tension de polarisation avec différents mécanismes de transport gouvernant le passage du courant à travers la structure. Cette étude à été effectuée dans notre laboratoire Microélectronique Appliqué à l'aide d'un logiciel développée par le Dr K. Ameur [13]. Les différents types de courant se résument en un courant total correspondant à la somme des courants thermoïonique I_{TE} , le courant génération-recombinaison I_{GR} , le courant tunnel I_{TU} et enfin le courant de fuite I_{FU} [14]. Ces courants simulés permettent d'identifier la conduction dans chaque structure et ainsi d'interpréter nos courbes expérimentales.

Le courant thermoïonique est exprimé par [15]:

$$I_{TE} = I_{TE0} \exp\left(\frac{q(V - R_s I)}{nkT} - 1\right) = S \stackrel{*}{A} T^2 \exp(-\chi^{0.5} \delta) \exp\left(-\frac{q\Phi_{Bn}}{kT}\right) \times \left(\exp\left(\frac{q(V - R_s I)}{kT}\right) - 1\right) \quad (IV.13)$$

où:

 I_{TE0} : courant de saturation thermoïonique;

R_s: résistance série qui dépend de l'épaisseur de la couche épitaxie, de la concentration de dopage et de la mobilité électronique [16] ;

 δ : l'épaisseur de la couche inter-faciale ;

 χ : la hauteur de barrière moyenne causée par l'épaisseur de la couche inter-faciale.

A noter que le facteur d'idéalité n est supposé égal à 1, parce qu'on prend en considération le courant génération-recombinaison I_{GR} , le courant tunnel I_{TU} et le courant de fuite I_{FU} .



Le courant de génération-recombinaison est exprimé par :

$$I_{GR} = I_{GR0} \exp\left(\frac{q(V - R_{S}I)}{2kT}\right) = \frac{q S W n_{i}}{2\tau} \exp\left(\frac{q(V - R_{S}I)}{2kT}\right)$$
(IV.14)

où:

IGR0 : courant génération-recombinaison de saturation;

W: largeur de la zone de charge d'espace ;

n_i : concentration intrinsèque;

S: surface du plot de mercure ;

 τ : durée de vie.

 I_{TU} : courant courant tunnel s'exprimé par :

$$I_{TU} = I_{TU0} \exp\left(\frac{q(V - R_s I)}{E_0}\right)$$

où:

I_{TU0}: courant tunnel de saturation;

E₀: paramètre dépendant de la transparence de la barrière, suggéré par Padovani et Strattson [17]: avec:

$$E_0 = E_{00} \operatorname{coth}\left(\frac{E_{00}}{kT}\right)$$
(IV.15)

$$E_{00} = \frac{q h}{4\pi} \sqrt{\frac{N_D}{\varepsilon_s m_n^*}}$$
(IV.16)

où:

 ϵ_{S} : permittivité du semiconducteur;

 \boldsymbol{m}_n^* : masse effective des électrons



Finalement, le courant de fuite I_{FU} s'écrit:

$$I_{FU} = \frac{V - R_s I}{R_p}$$
(IV.17)

où:

R_p: résistance parallèle qui traduit les défauts et l'inhomogénéité de l'interface métal/semiconducteur.

Les paramètres de simulation pris en compte dans notre étude sont récapitulés dans le tableau [IV-3].

Echantillons	A ₂	A ₃	A_4	A ₅
$N_d (cm^{-3})$	4.9×10 ¹⁵	4.9×10 ¹⁵	4.9×10 ¹⁵	1.4×10^{18}
Constante de Richardson $\stackrel{*}{A}$ (A cm ⁻² K ⁻²) [18]	26.4	26.4	26.4	26.4
τ (s) [17]	10 ⁻⁸	10 ⁻⁸	10-8	10-8
Masse effective des electrons m_n^* [18]	0.22 m ₀	0.22 m ₀	0.22 m ₀	0.22 m ₀
R _p (ohms) (introduit)	1.5×10^{6}	7.0×10^5	10 ⁷	5×10 ⁶
E ₀ (meV) (introduit)	105	128	75	65
I _{TU} (introduit) (A)	5.5×10 ⁻⁹	3.38×10 ⁻⁸	3.0×10 ⁻¹⁰	3.0×10 ⁻⁵
I _{TE} (introduit) (A)	5.5×10 ⁻⁹	3.38×10 ⁻⁸	3.0×10 ⁻¹⁰	3.0×10 ⁻⁷
I _{GE} (calculé par le programme) (A)	9.26×10 ⁻¹⁵	4.88×10 ⁻¹⁵	9.35×10 ⁻¹⁵	1×10 ⁻¹⁸

Tableau [IV-3] : Paramètres utilisés dans le logiciel de simulation.



Les figures suivantes représentent les résultats de la simulation de nos structures nitrurées, développé à l'aide d'un logiciel cité auparavant. Ces figures nous aident à identifier le courant qui domine dans nos échantillons, en comparant les courbes des courants simulés de chaque structure à sa courbe expérimentale.



Figure [IV-7]: Caractéristiques I(V) des courbes théoriques et expérimentale de la structure A2





Figure [IV-8]: Caractéristiques I(V) des courbes théoriques et expérimentale de la structure A₃



Figure [IV-9]: Caractéristiques I(V) des courbes théoriques et expérimentale de la structure A4





Figure [IV-10]: Caractéristiques I(V) des courbes théoriques et expérimentale de la structure A₅

On constate d'après les figures [IV-7], [IV-8], [IV-9] et [IV-10] que les courbes simulées rejoignent quasiment les courbes expérimentales lorsqu'on tient compte uniquement de trois mécanismes de transport tel que l'effet du courant tunnel, l'effet du courant de génération-recombinaison et enfin l'effet du courant de fuite observable pour les faibles tensions. On constate aussi, d'après la courbe expérimentale de l'échantillon A_5 , présentée dans la figure [IV-10], qu'on à un courant thermoïonique à faible tension, ce courant change à un courant tunnel en allant vers les hautes tensions.

Enfin, la modélisation a permis d'authentifier les phénomènes de transport présents dans les résultats expérimentales, que nos échantillons sont des structures Schottky.



IV.4.1.2 Extraction des différents paramètres des structures nitrurées

La figure [IV-11] montre les caractéristiques $Ln(I) = f(V_G)$ pour les différentes échantillons étudiés. (voir tableau [IV-2])

Les facteurs d'idéalité déterminés à partir des premières zones linéaires des différentes courbes expérimentales sont : 2.5, 2.8, 1.4 et 1.35 pour les échantillons A₂, A₃, A₄ et A₅ respectivement. Les valeurs élevées des facteurs d'idéalité des échantillons A₂ et A₃ sont probablement dues à la présente d'un courant tunnel à l'interface métal/semi-conducteur.

Les courants de saturations sont de l'ordre de 5.5×10^{-9} A, 3×10^{-8} A, 3×10^{-10} A et 5.64×10^{-7} A pour les échantillons A₂, A₃, A₄ et A₅ respectivement. Nous remarquons que les courants de saturation des structures A₂, A₃ et A₄ sont inférieures à celui de la structure A₅. Ceci, est peut être dû au fait que cette dernière présente un substrat plus dopé et une épaisseur de la couche de GaN plus importante.



Figure [IV-11]: Variation de Ln [I/ (1-exp (-qV/kT))] en fonction de la tension de polarisation pour les échantillons nitrurés.



Les hauteurs de barrière déduites sont : 0.75 V, 0.78 V et $0.83 \text{ pour les échantillons A}_2$, A_3 et A_4 respectivement. Les valeurs sont comparables à celles obtenues par M. Ambrico et al [19]. La hauteur de barrière de l'échantillon A_5 est de 0.6 V, inférieure aux autres. Cela est dû aux conditions technologiques différentes pour la réalisation de cet échantillon. (Voir tableau [IV-2])

La hauteur de barrière des échantillons A_2 , A_4 et A_5 ayant subit un recuit, est plus faible que celle obtenue pour l'échantillon A_3 qui n'a subit aucun recuit. Cela s'explique, en effet par le recuit qui recristallise la couche de GaN amorphe et réarrange les atomes dans la structure, ce qui facilite le passage des porteurs du semi-conducteur vers le métal, en diminuant la hauteur de barrière. La diminution de la hauteur de barrière après recuit est confirmée par les travaux de Nuhoglu et al [20].

La figure **[IV-11]** montre que pour des tensions élevées à 0.7 V on ne peut négliger l'effet de la résistance série. On observe un changement de pente de la caractéristique Ln(I)=f(V) au delà de 0.7 V. Les résistances séries, évaluées pour les différents échantillons sont de l'ordre de 49 Ω , 117 Ω , 86 Ω et 45 Ω pour les échantillons A₂, A₃, A₄ et A₅ respectivement.

Les échantillons qui ont subit un recuit présentent une résistance plus faible. Cette opération a probablement permis la recristallisation, le réarrangement et la restructuration de la couche amorphe du GaN. Ce résultat est confirmé par les traveaux de Katayama et Onabe [21].

Echantillons	I _s (A)	n	$R_s(\Omega)$	$\Phi_{Bn}\left(V\right)$
A ₁ (GaAs)	5.00×10 ⁻¹²	1.30	107	0.90
A2 (GaN_28 Å /GaAs)	5.50×10 ⁻⁹	2.50	49	0.75
A ₃ (GaN_24 Å /GaAs)	3.00×10 ⁻⁸	2.80	117	0.78
A4 (GaN_18 Å /GaAs)	3.00×10 ⁻¹⁰	1.40	86	0.83
A ₅ (GaN_250 Å /GaAs)	5.64×10 ⁻⁷	1.35	45	0.6

Le tableau [IV-4] regroupe l'ensemble de ces résultats trouvés à partir des mesures I(V).

Tableau [IV-4]: Résultats extraites des caractéristiques I (V) des échantillons étudiés.

IV.4.2 Caractérisation Capacité-Tension

La figure [IV-12] représente les caractéristiques C(V) relevées en haute fréquence (**1MHz**) des échantillons A₂, A₃ et A₄. En ce qui concerne l'échantillon A₅ et ayant un comportement capacitif différent, il sera étudié ultérieurement.



Figure [IV-12]: Caractéristique C(V) en haute fréquence des échantillons A2, A3 et A4

Les mesures C(V) effectuées sur les différents échantillons nitrurés montrent que les courbes obtenues présentent une allure de diode Schottky lorsqu'elles sont polarisées en inverse. On remarque que l'échantillon A_3 a une capacité plus élevée par rapport aux échantillons A_2 et A_4 , cela est dû probablement au non homogénéité de la couche de GaN de l'échantillon A_3 . Cet échantillon n'a pas subit de recuit.

La figure [IV-13] présente les caractéristiques $1/C^2 = F(V)$ mesurées à une fréquence de 1MHz. Les concentrations évaluées sont de l'ordre de 9.5×10^{15} cm⁻³, 7.2×10^{16} cm⁻³ et 3.5×10^{15} cm⁻³ pour les échantillons A₂, A₃ et A₄, respectivement.





Figure [IV-13]: Caractéristique C^{-2} (V) des échantillons A₂, A₃ et A₄

On observe une légère augmentation du dopage pour les échantillons nitrurés en comparaison avec l'échantillon témoin A_1 (GaAs pure) (voir tableau [IV-5]). Cette augmentation de la concentration de dopage est probablement dû au dopage résiduel dû aux lacunes d'azote qui sont connues pour agir en tant que niveaux de donneurs dans la surface et le volume de la couche de GaN [22].



La figure [IV-14] montre la courbe obtenue de mesure C (V) effectuée sur l'échantillon nitruré A₅. Ce dernier est présenté à part dans la figure [IV-14], car la gamme de sa capacité est plus faible que les autres échantillons, et son comportement capacitif est différent.



Figure [IV-14]: Caractéristiques C(V) et $C^{-2}(V)$ de l'échantillon A₅.

La mesure C(V) effectuée sur l'échantillon nitruré A_5 montre, que l'allure de sa capacité est comparable à celle d'une capacité MIS. En effet, elle augmente en fonction de la tension et devient constante au delà d'une certaine tension. C'est pour cela que nous l'avons exploité par deux méthodes (méthode Schottky et méthode de la structure MIS).

Par la première méthode, pour calculer la tension de diffusion ainsi que le dopage, nous avons tracé la caractéristique $1/C^2$ en fonction de la tension. La courbe obtenue est représentée sur la figure [IV-14]. Le dopage estimé pour l'échantillon A₅ est de l'ordre 7×10^{17} cm⁻³ et qui concorde avec celui donné par le fournisseur. La tension de diffusion obtenue pour l'échantillon A₅ est de 4.2 V. Celle-ci, est plus grande par-rapport aux tensions de diffusion des autres échantillons, ceci peut être expliqué par le fait que la structure A₅ a un comportement d'une structure MIS (voir figure [IV-14]). En effet et puisque l'épaisseur de la couche de GaN est plus grande dans cette structure, la présence de cette couche à l'interface joue un rôle de diélectrique.



A cet effet, nous avons décidé de calculer l'épaisseur de l'isolant (GaN) et le dopage, en nous basant sur la méthode de Terman (voir Annexe B). D'après la figure [IV-14], la valeur de la capacité maximale est de l'ordre de 77×10^{-11} F. Si la couche de GaN se comporte comme un diélectrique, la capacité maximale de la structure devrait correspondre à la capacité de la couche de GaN en régime d'accumulation. Cette dernière est inversement proportionnelle à l'épaisseur de l'isolant et s'exprime comme suit:

$$C_{\max} = \frac{\varepsilon_0 \varepsilon_r}{d_i} \times S \tag{IV.18}$$

avec

- ϵ_0 : permittivité du vide.
- ϵ_r : permittivité relative de la couche de GaN qui vaut 9,5 ϵ_0 [11].

d_i : l'épaisseur de la couche de GaN

S : surface du plot métallique.

Après calcul, nous obtenons une épaisseur de l'isolant égale à 250 Å et qui correspond à l'épaisseur estimée pour la couche de GaN lors de sa réalisation. Donc, notre structure se comporte comme une structure MIS et dans ce cas, la couche de GaN joue vraiment le rôle d'un « diélectrique ». Ceci explique, en effet la valeur élevée de V_d trouvée par la méthode Schottky.

Le dopage estimé en utilisant la méthode de Terman (voir Annexe B) pour l'échantillon A_5 est de l'ordre 6.5×10^{17} cm⁻³ et qui concorde avec la concentration de dopage donnée par le fournisseur.

Nous avons aussi essayé de faire une comparaison et une simulation des courbes C(V) théorique et expérimentale.

La figure [IV-15] représente la caractéristique C(V) expérimentale et théorique de la structure Hg/GaN/GaAs. Notons que la caractéristique théorique a été effectuée dans notre laboratoire Microélectronique Appliqué à l'aide d'un logiciel développée par le Pr. S.Tizi [23] et dont l'organigramme est donné dans l'annexe B





Figure [IV-15]: Courbes expérimentale et théorique de la structure Hg/GaN/GaAs (A5)

En comparant la courbe théorique et expérimentale, nous observons une bonne concordance entre les deux courbes avec une capacité de bande plate de 740 pF, qui résulte à une tension de bande plate égale à 0.76 V. Le leger décalage est dû d'une part à l'existence des états de surface et d'autre part à la présence de charges à l'interface entre la couche diélectrique GaN et le semiconducteur GaAs.

Echantillons	V _d '(V)	N_d (cm ⁻³)	$\Phi_{Bn}(V)$
A ₁ (GaAs)	1.6	3×10 ¹⁵	1.72
A ₂ (GaN_28Å/GaAs)	0.6	9.5×10 ¹⁵	0.72
A ₃ (GaN_24Å/GaAs)	1.8	7.2×10 ¹⁶	1.88
A ₄ (GaN_18Å/GaAs)	0.55	3.5×10^{15}	0.69
A5 (GaN_250Å/GaAs)	4.2	$\begin{array}{c} 7 \times 10^{17} \text{ (model Schottky)} \\ 6.5 \times 10^{17} \text{ (model capacité min)} \end{array}$	4.3

Le tableau [IV-5] réunit l'ensemble des résultats obtenus par les caractéristiques C(V)

 Tableau [IV-5]: Résultats extraites des caractéristiques C (V) des échantillons étudiés.



Les hauteurs de barrière présentées par les échantillons A_2 et A_4 , qui ont subis un recuit, sont plus faible que celles présentées par les échantillons A_1 et A_3 n'ayant subis aucun recuit. Ceci confirme que la hauteur de barrière diminue après recuit et on est en bon accord aves les résultats obtenus par les mesures I(V)

Aussi, on a tracé les courbes de la densité d'état d'interface Nss en fonction de Ec $-E_{ss}$ des échantillons A₁, A₂, A₃ et A₄, en utilisant l'équation (IV.7) et (IV.8) (Voir figure [IV-16]). Parailleurs, le tracé de la courbe de la densité d'état d'interface Nss en fonction de Ec $-E_{ss}$ de l'échantillon A₅ est faite, en utilisant l'équation (IV.19).

$$N_{SS} = \frac{C_i}{qA} \frac{d(\Delta V)}{d\psi_S}$$
(IV.19)

avec

C_i : capacité maximale ;

A : surface de plot ;

 $\frac{d(\Delta V)}{d\psi_S}$: variation du potentiel de surface ($\Psi s)$ en fonction de la tension de polarisation.



Figure [IV-16]: Distribution de la densité d'état dans la bande interdite des échantillons étudiés.



Les valeurs estimées des Nss près du milieu de la bande interdite des échantillons étudiés sont 7×10^{10} eV ⁻¹ cm ⁻², 4×10^{11} eV ⁻¹ cm ⁻², 1×10^{12} eV ⁻¹ cm ⁻² et 3×10^{11} eV ⁻¹ cm ⁻² pour les échantillons A₁, A₂, A₃ et A₄ respectivement. Ce paramètre est calculé par la méthode du model Schottky.

Pour l'échantillon A₅, N_{ss} est estimée par la méthode de Terman et est égale à 10^{12} eV $^{-1}$ cm $^{-2}$.

Les valeurs des densités d'état d'interface des échantillons nitrurés sont un peu plus élevées par-rapport à la densité d'état de l'échantillon témoin A_1 . Ceci s'explique d'une part, par la présence de la couche de GaN très riche en défauts cristallins et en dislocations et d'autre part par la fréquence de travail du banc de mesure C(V) qui est égale à 1MHz et qui semble être insuffisante pour geler tous les états pièges.

IV.5 Références bibliographiques

- [1] G. Monier
 Thèse de Docteur de l'Université Blaise Pascal, Clermont-Ferrand II, N° d'ordre D. U. 2142 (2011).
- [2] Z. Benamara, B. Akkal, A. Talbi, B. Gruzza, L. Bideux, *Mater. Sci. Eng. C 21*, 287 (2002).
- [3] D. Kahng,Bell Syst. Tech. J.43, 215 (1964).
- [4] M. Biber, C. Coşkun, A. Türüt, Eur. *Phys. J. Appl. Phys. 31, 79 (2005).*
- [5] H. Mazari, Z. Benamara, K. Ameur, N. Benseddik, O. Bonnaud, R. Olier, and B. Gruzza, *Mater. Chem. Phys.* 118, 1 (2009).
- [6] C. Barret, A. Vapaille, Solid State Electron. 19, 73 (1976).
- [7] S. Anantathanasarn, H. Hasegawa,
 Applied Surface Science 190, 343–347 (2002).
- [8] B. Akkal, Z. Benamara, N. Bachir Bouiadjra, S. Tizi, B. Gruzza, *Applied Surface Science 253*, 1065–1070 (2006).
- [9] M.K. Hudait, S.B. Krupanidhi, *Materials Science and Engineering 87, 141–147 (2001).*
- [10] H. Mazari, Z. Benamara, K. Ameur, N. Benseddik, O. Bonnaud, R. Olier, and B. Gruzza, *Mater. Chem. Phys. 118*, 1 (2009).
- [11] R. Hull, R. M. Osgood, Jr, J. Parisi, and H. Warlimont, Gallium Nitride Electronics, Springer Series in Materials Science 21, 96 (2008).
- [12] B. Akkal, Thèse de doctorat d'état, Université de Sidi-Bel-Abbès. Mai (2002).
- K. Ameur, H. Mazari, S. Tizi, R. Khelifi, Z. Benamara, N. Benseddik, A. Chaib,
 N. Zougagh, M. Mostefaoui, L. Bideux, G. Monier, B. Gruzza, and C. Robert-Goumet Sensor Letters 9, 2268–2271 (2011).
- [14] 10. D. Donoval, M. Barus, and M. Zdimal, Solid-State Electronics 34, 1365 (1991).
- [15] H.C.Card, E.H. Rhoderick,*J. Appl. Phys.D*, 4 (1971).



[16]	B.J. Baliga,
	Modern Power devices, Wiley, New York, (1987).
[17]	F. A. Padovani, R. Straton,
	Solid Stat. Electron. 9, 695 (1966).
[18]	S. M. Sze,
	Physics of Semiconductor Devices, 2nd edn., Wiley, New York (1981).
[19]	M. Ambrico, M. Losurdo, P. Capezzuto, G. Bruno, T. Ligonzo, L. Schiavulli, I. Farella, and
	V. Augelli,
	Solid-State Electron. 49, 413 (2005).
[20]	C. Nuhoglu, C. Temirci, B. Bati, M. Biber, and A. Turut,
	Solid State Commun. 115, 291 (2000).
[21]	R. Katayama and K. Onabe,
	J. Cryst. Growth 278, 431 (2005).
[22]	Y. Kribes, I. Harrison, B. Tuck, T.S. Cheng, C.T. Foxon.
	Journal of Crystal Growth 189/190, 773-777 (1998).
[23]	S.Tizi.
	Thèse de diplôme docteur d'états, Université de Sidi Bel Abbes, (2002).



Conclusion générale



Conclusion

La micro et nano-structuration de surface sont actuellement des étapes technologiques clés pour le développement de dispositifs nanocomposants et optoélectroniques avancés. Cependant, les semiconducteurs III-N possèdent toutes les qualités nécessaires pour la fabrication de composants performants et plus petits.

Ainsi, nous nous sommes intéressés dans cette thèse à la structuration et la nitruration de la surface de GaAs. Ceci, en exposant les substrats de GaAs à un flux d'azote actif crée par une source à décharge haute tension dans un bâti ultravide. Les composants obtenus à différentes épaisseurs de nano- films de GaN sur substrat de GaAs sont ensuite étudiées à l'aide de spectroscopie, des électrons Auger (AES) et des photoélectrons X (XPS) avant d'être analysées par des mesures électriques Courant-Tension I(V) et Capacité-Tension C(V).

Dans ce travail, nous avons élaboré une série d'échantillons nitrurées de structures GaN/GaAs à différentes conditions. Ces structures sont comparées à un échantillon témoin (GaAs) non nitruré. Les caractéristiques électriques effectués sur ces structures nous ont permis de déterminer les différents paramètres électriques, tels que le courant de saturation I_s , le facteur d'idéalité n, la résistance série R_s , la tension de diffusion V_d ainsi que le dopage N_d . Mais, avant d'extraire ces paramètres, nous avons effectué une modélisation pour identifier le modèle de conduction le plus adéquat de la réalité électronique. Les résultats de la simulation révélant que nos échantillons ont un comportement d'un contact Schottky dans certains cas et un comportement MIS dans un autre cas. Les courbes simulées rejoignent quasiment les courbes expérimentales lorsqu'on tient compte uniquement de trois mécanismes de transport tels que l'effet du courant tunnel, l'effet du courant de génération-recombinaison et enfin l'effet du courant de fuite, ceci dans la première catégorie d'échantillon.

Les caractéristiques I(V) des échantillons nitrurés, montrent qu'on a une meilleure conduction du courant quand l'épaisseur de la couche de GaN augmente, sauf pour l'échantillon A_3 où le redressement est plus faible. Cela est probablement dû au fait que ce dernier n'a subit aucun recuit. Cependant, les autres échantillons ont subits un recuit à 400°C/60min, 300°C/60min et 550-600°C/2h respectivement pour les échantillons A_2 , A_4 et A_5 . D'après les paramètres électriques déterminés, certains échantillons nitrurées tels que le A_2 et le A_3 présentent respectivement des valeurs de facteur d'idéalité élevées de 2.5 et 2.8, comparées à 1.4 et 1.3 trouvés respectivement pour les échantillons A_4 et A_5 . Ceci s'explique probablement par la présence d'un courant tunnel à l'interface métal/semiconducteur dans les structures A_2 et A_3 .

Les caractéristiques I(V) révèlent un courant de saturation de 5.64×10^{-7} A pour l'échantillon A₅, supérieur à ceux des autres structures. Ceci, est dû au fait que la structure A₅ est plus dopée et sa couche de GaN est plus épaisse.

Les valeurs des hauteurs de barrière calculées varient de 0.6 V à 0.9 V. On a constaté, que la hauteur de barrière diminue dans les échantillons recuits et possédant une épaisseur de la couche de GaN plus élevée. Cela est du, à l'opération de recuit qui a permis la recristallisation, le réarrangement et la restructuration de la couche de nitrure qui initialement était amorphe après sa croissance. La diminution de la hauteur de barrière après l'opération de recuit est confirmée par des travaux trouvés dans la littérature.

En effet, les faibles valeurs des résistances série des échantillons ayant subit un recuit confortent parfaitement cette hypothèse.

Les mesures C(V) effectuées sur les différents échantillons étudiés, montrent que les courbes obtenues présentent une allure de diode Schottky. On constate cependant, que, la capacité de l'échantillon A_5 croît avec la tension de polarisation puis elle se stabilise. Cela donne à l'échantillon un caractère de structure MIS, ceci s'explique par la présence de la couche de GaN, plus épaisse dans cet échantillon. La capacité maximale de la structure correspond parfaitement à la capacité de la couche de GaN en régime d'accumulation.

L'exploitation de la caractéristique $C^{-2}(V)$ nous a permis d'estimer la concentration en dopants N_d et la tension de diffusion V_d . On observe une légère augmentation du dopage pour les échantillons nitrurés A_2 , A_3 et A_4 , comparé à l'échantillon témoin A_1 . Cette différence de dopage est peut-être due au dopage résiduel des lacunes d'azote qui sont connues pour agir en tant que niveaux donneurs dans la surface et le volume de la couche de GaN. Par-ailleurs, le dopage estimé par la méthode Schottky et la méthode de Terman pour l'échantillon A_5 sont en accord avec à celui donné par le fournisseur. Les tensions de diffusion différente d'un échantillon à l'autre, elles varient de 0.6 V et 0.55 V pour les échantillons A_2 et A_4 . Nous rappelons que ces structures ont subis un recuit. Ces valeurs sont plus faibles que celles présentées par les échantillons A_1 et A_3 ; ces derniers n'ayant subis aucun recuit et qui valent respectivement 1.6 V et 1.8 V.



Puisque, la tension de diffusion est liée à la hauteur de barrière, on constate, que la hauteur de barrière diminue après recuit et ce résultat est en bon accord aves les résultats obtenus par les mesures I(V).

La tension de diffusion obtenue pour l'échantillon A_5 (4.2 V) est plus grande par-rapport aux tensions de diffusion des autres échantillons, ceci peut être expliqué, par le fait que la structure A_5 se comporte comme une structure MIS. En utilisant la méthode de Terman, on a calculé l'épaisseur de la couche de nitrure et qui vaut 250 Å. Ceci, correspond bien à l'épaisseur estimée de la couche de GaN lors de l'élaboration de cette structure. Donc, cette dernière joue vraiment le rôle d'un « diélectrique » et la structure correspondante se comporte comme une structure MIS.

Les valeurs estimées des Nss près du milieu de la bande interdite des échantillons nitrurées varient de 3×10^{11} eV $^{-1}$ cm $^{-2}$ à 1.7×10^{12} eV $^{-1}$ cm $^{-2}$. Ces valeurs sont l'égerment plus élevés que celle de la structure A₁. Ceci est du à la présence de la couche de GaN très riche en défauts cristallins et en dislocations.

Enfin, et en ce qui concerne les projets pour l'avenir, on a bien sûr l'intention de compléter cette étude, apporter plus d'informations sur le comportement électrique des structures GaN/GaAs et poursuivre ce travail par des mesures de type capacité- tension en variant les paramètres tels que la température et la fréquence. Les films de nitrures réalisés dans notre étude peuvent servir de précurseur pour élaborer des couches massives de GaN par des méthodes conventionnelles (MOCVD, MBE). Ceci permettrait de résoudre le problème de désaccord de maille entre le substrat et les couches de nitrures.



Annexes



Annexe A

Les techniques d'analyses

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

• Le libre parcours moyen inélastique

Le libre parcours moyen inélastique est définit comme étant « la distance moyenne mesurée le long de la trajectoire, que les particules ayant une énergie donnée traversent entre deux collisions inélastiques dans un matériau" [1].

Ainsi, seuls les électrons générés prés de la surface de l'échantillon analysé peuvent être émis élastiquement hors du solide.

On peut calculer la valeur du libre parcours moyen inélastique en fonction de l'énergie E des électrons et du matériau à partir de la formule nommée IMFP-TPP2M [2]:

$$\lambda_{i} = \frac{E}{\left[E_{p}^{2}\left(\beta \ln\left(\gamma E\right) - \frac{C}{E} + \frac{D}{E^{2}}\right)\right]}$$
(A-1)

E : Energie de l'électron

 E_p , β , γ , C et D sont des constantes dépendantes des caractéristiques du matériaux comme :

 ρ , Eg, N_v et M sont respectivement, la densité volumique, le gap du matériau, le Nombres d'électrons de valence par atome ou molécule et le poids atomique ou moléculaire.

• La spectroscopie des électrons Auger (A.E.S) :

La spectroscopie des électrons Auger, du nom de Pierre Auger (1899-1993), physicien français découvreur du phénomène en 1923, repose sur un processus de désexcitation des atomes appelé émission ou effet Auger [3], [4]. Il s'agit d'un processus à trois électrons provenant d'un atome, illustré sur la figure [A-1].





Figure [A-1]: Principe de l'émission Auger.

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

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

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

$$\mathbf{E}_{\mathbf{x}\mathbf{y}\mathbf{z}} = \mathbf{E}_{\mathbf{x}} - \mathbf{E}_{\mathbf{y}} - \mathbf{E}_{\mathbf{z}} \tag{A-2}$$

où

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

La spectroscopie Auger permet d'obtenir des informations sur les premières monocouches atomiques d'un substrat à savoir : les caractéristiques des atomes excitées et d'identifier par conséquent les espèces chimiques présentes à la surface d'un substrat [5], [6].



En effet, les électrons émis ont généralement une énergie faible (100 eV à 500 eV). Donc ceux qui arrivent à la surface ne proviennent que des premières couches superficielles à cause de leur libre parcours moyen inélastique λ_i qui est de l'ordre de quelques nanomètres.

• La spectroscopie des photoélectrons X (XPS ou ESCA) :

La spectroscopie de photoélectrons X (XPS : X-Ray Photoelectron Spectroscopy), parfois aussi appelé ESCA (Electron Spectroscopy for Chemical Analysis) a été conçue par K. Siegbahn, physicien suédois, prix Nobel de physique en 1981 [7]. C'est une technique d'analyse non destructive de la composition en surface d'un matériau. En fait, sous l'effet d'un faisceau X approprié, les atomes à la surface d'un échantillon solide subissent une ionisation photoélectronique, résultant en l'expulsion d'un électron d'une couche profonde. L'énergie cinétique de cet électron dépend de la longueur d'onde du faisceau primaire, de l'énergie de liaison du photoélectron émis et du travail d'extraction. L'énergie de liaison du photoélectron émis est caractéristique de l'atome émetteur.

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

$$h\nu = E_{c0} + E_{\text{liaison}}.$$
 (A.3)

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

$$E'_{cin} = E_{c0} - \phi_{\acute{e}ch} \tag{A.4}$$

où

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

L'ensemble de l'appareillage est en équilibre thermodynamique avec l'échantillon (contact électrique, température, pression), ainsi les potentiels chimiques (ou niveaux de Fermi) sont égaux. Nous obtenons ainsi le diagramme énergétique de la figure [A-2], qui nous donne l'équation de la conservation de l'énergie :

$$h\nu = E'_{cin} + \phi_{\acute{e}ch} + E_{liaison} = E_{cin} + \phi_{spectro} + E_{liaison}$$
(A.5)

L'énergie cinétique mesurée par les détecteurs d'électrons Ecin permet d'obtenir l'énergie de liaison en faisant intervenir le travail de sortie du détecteur $\phi_{spectro}$.


(A.6)

$E_{liaison} = h\nu - E_{cin} - \phi_{spectro}$



Figure [A-2] : Diagramme énergétique des photoélectrons mesurés en XPS.



Références Bibliographiques

- [1] Standard E673, Annual Book of the ASTM Standards,
 American Society for Testing and Materials, West Conshohocken, PA, 3, 6 (1998).
- [2] S. Tanuma, C.J. Powell, D.R. Penn, Surf. Interface Anal. 21,165 (1993)
- [3] P. Auger,*Compt. Rend. Acad. Sci. Paris* 177, 169 (1923)
- [4] P. Auger,*J. Phys. Radium 6, 205 (1925)*
- [5] J. J. Lander*Phys. Rev. 102, 1382 (1953)*
- [6] G.A. Harrower,*Phys. Rev. 102, 340 (1956)*
- K.M.G. Siegbahn,
 Prix Nobel de Physique en 1924. Nobel lectures, Elsevier Publishing Company, Physics (1922-1941).



Annexe B

Méthode de Terman

En haute fréquence et en forte inversion, la capacité minimale de la structure est donnée par la relation :

$$C_{\min} = \frac{C_{D\min}.C_{i}}{C_{D\min} + C_{i}}$$
(B.1)

avec

$$C_{D\min} = \frac{\varepsilon_0 \varepsilon_r}{w_{\max}}$$
(B.2)

$$w_{max} = \sqrt{\frac{4\varepsilon_0\varepsilon_r}{qN_d}\frac{kT}{q}\log(\frac{N_d}{n_i})}$$
(B.3)

Pour résoudre ces équations, il faut utiliser des méthodes numériques.

A partir de l'équation (B.3), nous obtenons la relation suivante :

$$\frac{\log \frac{N_d}{n_i}}{\frac{N_d}{n_i}} - \frac{\beta q n_i w^2_{max}}{4 \varepsilon_0 \varepsilon_r} = 0$$
(B.4)

La résolution de cette équation, nous permet de déterminé le dopage. Connaissant le dopage, on peut déduire la résistivité du semi-conducteur.

$$\rho_{sc} = \frac{1}{qN_d\mu_n} \tag{B.5}$$



Détermination de la tension de bande plate

En haute fréquence, la capacité de bandes plates C_{BP} de la structure MIS réelle est donnée par la même formule que pour la structure MIS idéale à $V_G = 0$

$$C_{BP} = \frac{1}{\frac{d_i}{\varepsilon_0 \varepsilon_i} + \frac{L_D}{\sqrt{2}\varepsilon_0 \varepsilon_r}}$$
(B.6)

avec

 L_D : la longueur de Debye ;

$$L_{\rm D} = \sqrt{\frac{2\varepsilon_0 \varepsilon_{\rm r}}{q\beta N_{\rm d}}} \tag{B.7}$$

Après la détermination du dopage et l'épaisseur de l'isolant d_i , on calcule la valeur de la capacité de bandes plates, puis on détermine la tension de bandes plates $V_G=V_{BP}$ à partir de la courbe expérimentale.

Le tracé de la courbe $C(V_G)$ théorique en haute fréquence est fait au moyen d'un programme dont l'organigramme est donné par la figure (B-1).





Figure [B-1]: Algorithme du tracé des courbes théoriques C(V_G) en haute fréquence.



Détermination de la densité d'état d'interface

Le principe de cette méthode repose sur la comparaison en haute fréquence de la courbe théorique $C(V_{th})$ et la courbe expérimentale $C(V_G)$. L'apparition de charges à l'interface isolant semiconducteur a pour effet de décaler, par apport à la courbe idéale, la courbe expérimentale parallèlement à l'axe des tensions.

Pour un potentiel de surface ψ_s donné, la charge additionnelle ΔQ_{SS} engendrée par les états de surface peut être calculée en mesurant ΔV (écart entre les courbes théorique et expérimentale) pour la valeur de la capacité correspondant à ψ_s

$$\Delta Q_{\rm SS} = C_{\rm i} \Delta V \tag{B.8}$$

Où : C_i est la capacité de l'isolant.

La densité d'états d'interface N_{SS} est alors donnée par :

$$N_{SS} = \frac{1}{qA} \frac{d(\Delta Q_{SS})}{d\psi_S}$$
(B.9)

et en remplace ΔQ_{SS} par sa valeur, on obtient :

$$N_{SS} = \frac{C_i}{qA} \frac{d(\Delta V)}{d\psi_S}$$
(B.10)

avec

$\frac{d(\Delta V)}{d\psi_s}$: la variation du potentiel de surface en fonction de la tension de polarisation.

Notons que, pour tracer les variations de la densité d'états d'interface en fonction de la différence d'énergie (E_{C} - E), on établit une correspondance entre celle- ci et le potentiel de surface par la relation suivante :

$$E_{\rm C} - E = \frac{E_{\rm g}}{2} - q(\psi_{\rm S} - \psi_{\rm B}) \tag{B.11}$$

avec

$$\psi_{\rm B} = \frac{E_{\rm F} - E_{\rm i}}{q} \tag{B.12}$$

 $\psi_{\rm B}$ représente le potentiel de Fermi dans le semi-conducteur.



Cette méthode est basée sur la comparaison de l'écart entre les courbes $C(V_G)$ théorique et expérimentale.

La procédure de calcul de la densité des états d'interface est faite au moyen d'un programme dont l'organigramme est donné par la figure (B-1).



La figure C représente le tracé des différents courants simulés: thermoïonique I_{TE} , génération-recombinaison I_{GR} , tunnel I_{TU} et le courant de fuite I_{FU} , en comparaison avec la courbe expérimentale.



Figure C : Caractéristiques I(V) des courbes théoriques et expérimentales de l'échantillon témoin A_1

La modélisation montre bien que le courant thermoïonique est prédominant aux faibles tensions. Les équations de ces derniers sont représentées en détail dans le paragraphe IV.4.1.1.

Table des Figures



Table des Figures

Chapitre 1

Figure [I-1]: Diagramme énergétique d'une hétérojonction p-n aniso-type à l'équilibre	
thermodynamique14	ł
Figure [I-2]: Diagramme énergétique d'une hétérojonction n-n iso-type à l'équilibre thermodynamique 15	5
Figure [I-3] : Diagramme énergétique du modèle généralisé d'un contact métal-semiconducteur (N) à	
l'équilibre thermodynamique)
Figure [I-4] : Diagramme énergétique du modèle généralisé d'un contact métal semiconducteur type N	
hors équilibre thermodynamique (polarisation positive)	2
Figure [I-5] : Mécanisme de transport à travers une barrière Schottky sous polarisation directe	5
Figure [I-6] : Diagramme énergétique d'un contact métal-semicondicteur idéal à l'équilibre	
thermodynamique	5
Figure [I-7] : Diagramme énergétique d'une structure idéal d'un contact métal-semi-conducteur)
Figure [I-8]: Schéma équivalent d'une diode Schottky métal-semiconducteur	5

Chapitre 2

Figure [II-1] : Réseau cristallin du GaAs (zinc de blende)	41
Figure [II-2]: Les différentes structures de GaN : (a) wurtzite, (b) Zinc blende et (c) NaCl	42
Figure [II-3]: Polarisation dans le cas du GaN	43
Figure [II-4] : Plages d'utilisations des différentes pompes	47
Figure [II-5]: schématisation du bâti ultra vide	47
Figure [II-6] : (a) photographies du bâti ultra vide, (b) l'intérieur de la chambre d'analyse et (c)	
l'intérieur de la chambre de préparation	48
Figure [II-7] : Schéma de la source d'azote de type plasma à décharge	49
Figure [II-8]: Schéma du RFA	50
Figure [II-9]: Courbe de transmission T(E) pour un RFA	52
Figure [II-10]: L'analyseur hémisphérique	53
Figure [II-11]: Vue en coupe d'un channeltron	55
Figure [II-12]: Circuit de mesure des caractéristiques I (V).	56
Figure [II-13]: Principe de la mesure C (V).	56

Chapitre 3

Figure [III-1]: Processus de nettoyage chimique d'une surface de substrat de GaAs	61
Figure [III-2]: Spectre XPS d'un substrat de GaAs(100) nettoyé chimiquement [1]	63



Figure [III-3]: Variations de la surface des pics As-Ga (cercles pleins), d'oxydes et de fluorure d'arsenic	
As-X (cercles ouverts), Ga-As (carrés pleins), d'oxydes et de fluorure de galium Ga-X (carrés vides) et	
O1s (diamants) avec le temps de pulvérisation	64
Figure [III-4]: Représentation de la surface de GaAs (100) : A) surface juste avant le bombardement	
ionique, B) surface bombardé par l'Ar ⁺ , C) surface propre après le bombardement ionique D) surface	
après un bombardement ionique prolongé : présence de Galium métallique	65
Figure [III-5]: Evolution du rapport des signaux XPS Ga3d/As3d en fonction de la température pour un	
échantillon de GaAs recouvert de 3 monocouches de gallium [3]	66
Figure [III-6]: Image d'un Micrographe à balayage électronique (SEM) d'une hétéro-structure	
GaN/GaAs : A) 680°C, B) 700°C et C) 720°C. [4]	67
Figure [III-7]: Schématisation des différentes étapes du processus nitruration pour la formation des	
monocouches de GaN /GaAs.	69
Figure [III-8]: Calcul des rapports théoriques Ga3d/As3d, N1s/Ga3d et Ga-N/Ga-As en fonction du	
nombre de couches de GaN/GaAs(100).	69

Chapitre 4

Figure [IV-1] : Caractéristique courant - tension de la structure Hg/GaAs	76
Figure [IV-2]: Variation de Ln [I/ (1-exp (-qV/kT))] en fonction de la tension de polarisation de la	
structure Hg/GaAs	77
Figure [IV-3] : Caractéristique capacité-tension de la structure Hg / GaAs	79
Figure [IV-4]: Distribution de la densité d'état dans la bande interdite de la structure Hg/GaAs	80
Figure [IV-5]: Caractéristique $1/C^2$ en fonction de la tension V	81
Figure [IV-6]: Caractéristique I (V) des échantillons nitrurés à différents épaisseurs	82
GaN/GaAs	86
Figure [IV-7]: Caractéristiques I(V) des courbes théoriques et expérimentale de la structure A2	86
Figure [IV-8]: Caractéristiques I(V) des courbes théoriques et expérimentale de la structure A ₃	87
Figure [IV-9]: Caractéristiques I(V) des courbes théoriques et expérimentale de la structure A4	87
Figure [IV-10]: Caractéristiques I(V) des courbes théoriques et expérimentale de la structure A5	88
Figure [IV-11]: Variation de Ln $[I/(1-\exp(-qV/kT))]$ en fonction de la tension de polarisation pour les	
échantillons nitrurés	89
Figure [IV-12]: Caractéristique C(V) en haute fréquence des échantillons A ₂ , A ₃ et A ₄	91
Figure [IV-13]: Caractéristique $C^{-2}(V)$ des échantillons A_2 , A_3 et A_4	92
Figure [IV-14]: Caractéristiques C(V) et C ⁻² (V) de l'échantillon A ₅	93
Figure [IV-15]: Courbes expérimentale et théorique de la structure Hg/GaN/GaAs (A5)	95
Figure [IV-16]: Distribution de la densité d'état dans la bande interdite des échantillons étudiés.	96



Table des Tableaux



Chapitre 2

Tableau [II-1] : Propriétés du GaAs à température ambiante (300 K)	41
Tableau [II-2]: Comparaison de propriétés des semi-conducteurs GaN et GaAs.	43
Tableau [II-3] : Paramètres de maille et coefficients de dilatation thermique autour de 300°C	45

Chapitre 4

. 74
.75
. 85
. 90
. 95



Etude des Nano-composants Nitrures/substrat III/V à base d'arséniure de gallium - caractérisation électrique et modélisation associées

Ce travail se rapporte sur l'étude des structures à base de nitrures de galium, réalisé sur des substrats de GaAs en vue de réalisation de composants électroniques en particulier l'étude d'hétérostructures nitrures/matériaux III-V appliqués dans des domaines optoélectroniques qu'à la réalisation de transistors hyper fréquence. Il permet de fabriquer des composants stables à hautes températures et à hautes fréquences.

Pour mieux comprendre les phénomènes physiques et technologiques mis en jeu pour le fonctionnement de tels dispositifs nitrures/III-V et avoir la possibilité d'optimisé ces dernier, nous avons élaboré une série des échantillons de GaAs nitrurées à différentes épaisseurs comparés à un échantillon témoin (GaAs), à l'aide de spectroscopie, des électrons Auger (AES) et des photoélectrons X (XPS) avant d'être analysées in-situ par des mesures électriques I (V) et C(V). Les caractéristiques électriques effectués sur ces structures nous ont permis de déterminer les différents paramètres électriques, tels que le courant de saturation I_s, le facteur d'idéalité n, la résistance série R_s, la tension de diffusion V_d ainsi que le dopage N_d. Ces paramètres diffèrent d'un échantillon à l'autre. Une modélisation précède l'extraction de ces paramètres pour savoir quel modèle de conduction est prédominant dans nos structures à étudié.

Les résultats obtenus confirment que nos structures sont de type diode Schottky.

Mots clés : Nitruration, Caractérisations électriques, Hétéro-structures, GaN/GaAs,

Recuit, modélisation.



Study of the Nano-components Nitrides/substrateIII/V at base gallium arsenide – characterization electric and modeling associated.

This work presents the study of the effect of a thin gallium nitride (GaN) layer, deposited on GaAs substrate. Auger electron spectroscopy (AES) and X-ray electron spectroscopy were used to follow the different steps of the nitridation process. The electrical characteristics I(V) and C(V) measurements, associate with a modeling are realized.

The I(V) characteristics of these structures show the behavior of rectifying contacts.

According to I(V) characteristics, a sufficiently high thickness of the GaN layer followed by an annealing of the GaN/GaAs structure improves the conduction phenomena of the current.

Keywords: GaN, Electrical Characterization, Modeling, Schottky Diode.

