Caractérisation, Modélisation et Simulation des Phénomènes de transport dans les couches de silicium déposées par les techniques PECVD et HWCVD
À mes parents

À mes frères et mes sœurs

À ma famille

À mes amis
Remerciements

Je remercie d’abord mon ALAH le tout puissant

Ce travail a été réalisé au sein du laboratoire de Microélectronique Appliquée AMEL dirigée par M\''me ZINEB. BENAMMARA Professeur à l’université Djillali Liabès de Sidi Bel-Abbès que je remercie vivement de m’avoir accepté et pour m’avoir fait l’honneur de participer à mon jury de thèse en tant que Présidente.

Mon profond respect et toute ma gratitude vont au Pr Kamel KAMEL KHEROUNI directeur du Laboratoire de Physique des Matériaux et des Nanomatériaux appliquée à l’Environnement à la Faculté des Sciences de Gabès Tunisie (PhyMNE) de m’avoir accueilli au sein de laboratoire a deux reprises dans le cadre d’un stage de courte durée sa générosité m’a fait bénéficier des premiers échantillons qu’ils ont élaboré.

Je le remercie vivement de m’avoir fait bénéficier également de son expérience professionnelle. Je remercie également toute son équipe jeune et plein d’initiatives en particulier NOHA EL GHOU et RAUIA DJEMIE.

Je remercie sincèrement mes encadreurs M\’me SHAHRAZED TIZI et M\’me BAYA ZEBENTOUT, Professeurs au Département d’Electronique, Faculté de génie électrique, Université Djillali Liabès de Sidi Bel-Abbès, de m’avoir guidé et éclairé tout au long de ce travail. Leurs conseils et leurs encouragements qu’elles permirent de mener à terme la rédaction de cette thèse.

Je remercie vivement M’ BOUMEDIENE ASRI, Professeur à l’université de Saida, qui m’a fait un grand honneur en acceptant de juger le travail de cette thèse.

Je tiens à remercier M\’me AMARIA OULDABBES, Professeur à l’université Tlemcen, d’avoir accepté d’être membre du jury de cette thèse.

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

Je tiens à remercier M\’ne HALIMA MAZARI, Professeur à l’université Djillali Liabès de Sidi Bel-Abbès d’avoir accepté d’être membre invité du jury.

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

Liste des figures ........................................................................................................................................... 7
Liste des tableaux ......................................................................................................................................... 12
Introduction générale ................................................................................................................................... 13

CHAPITRE I: Particularités du silicium et ses congénères ........................................................................... 17
I.1 Introduction: ........................................................................................................................................... 18
I.2 Différentes filières du silicium ............................................................................................................... 18
  I.2.1 Le silicium monocristallin ................................................................................................................ 18
  I.2.2 Le silicium polycristallin ................................................................................................................... 22
  I.2.3 Le silicium multicristallin ................................................................................................................ 23
  I.2.4 Le silicium amorphe hydrogéné ....................................................................................................... 24
    a) La distribution des états dans la bande interdite ................................................................................. 25
    b) Propriétés optiques du silicium amorphe hydrogéné ....................................................................... 27
    c) Activation des dopants et métastabilité du a-Si : H ........................................................................... 28
  I.2.5 Le silicium microcristallin hydrogéné ............................................................................................ 29
  I.2.6 Le silicium nanocristallin hydrogéné ............................................................................................... 30
  I.2.7 Le silicium polymorphe ................................................................................................................ 31
I.3 Conclusion ................................................................................................................................................. 32
Références de chapitre I ................................................................................................................................ 33

CHAPITRE II : Panorama des Techniques d’élaboration du Silicium Couches Minces (SCM) ..................... 35
II.1. Introduction ........................................................................................................................................... 36
II.2. Les couches minces ............................................................................................................................ 37
  II.2.1. Définition d’une couche mince ........................................................................................................ 38
  II.2.2. Intérêt et caractéristiques des couches minces .............................................................................. 36
II.3. Panorama des techniques de déposition du silicium couches minces SCM ........................................ 37
  II.3.1. Techniques d’élaboration physiques PVD ....................................................................................... 39
    II.3.1.1 Technique de pulvérisation cathodique ....................................................................................... 39
    II.3.1.2 Technique d’évaporation thermique sous vide .......................................................................... 40
    II.3.1.3 Technique d’ablation laser (Pulse Laser Deposition) ................................................................. 41
  II.3.2 Les méthodes d’élaboration chimiques ........................................................................................ 42
    II.3.2.1 LCVD (Laser CVD) .................................................................................................................. 44
III.2.2 Le dépôt chimique en phase vapeur à pression atmosphérique (APCVD) ................................ 45
II.3.2.3 Le dépôt chimique en phase vapeur à basse pression ....................................................... 45
II.3.2.4 Le dépôt chimique en phase vapeur assisté par plasma ..................................................... 46
   a) Notion d’un plasma .................................................................................................................. 46
   b) Le rôle du plasma .................................................................................................................. 47
   c) Principe de PECVD ............................................................................................................... 48
   d) Types de procédés PECVD ................................................................................................... 49
II.3.2.5 Le système de dépôt chimique en phase vapeur par filament chaud (HWCVD) .............. 50
   a) Rôle du filament .................................................................................................................... 51
II.3.3. Méthodes de cristallisation ................................................................................................. 53
   II.3.3.1 La cristallisation par laser ............................................................................................ 54
   II.3.3.2 Le recuit thermique rapide (RTA Rapid Thermal Annealing) ........................................ 55
   II.3.3.3 Le recuit SPC assisté par métal ou MILC ..................................................................... 55
II.4. Conclusion ............................................................................................................................ 55
Références de chapitre II ............................................................................................................ 57

CHAPITRE III: Généralités sur les hétérostructure ................................................................. 58
III.1 Introduction .......................................................................................................................... 60
III.2 L’hétérojonction Métal /semiconducteur ........................................................................... 60
   III.2.1 Le contact redresseur ...................................................................................................... 61
      III.2.1.1 Semiconducteur de type N ...................................................................................... 61
      III.2.1.2 Semiconducteur Type P ....................................................................................... 61
   III.2.2 Le contact ohmique ....................................................................................................... 63
      III.2.2.1 Semiconducteur de type N ...................................................................................... 63
      III.2.2.2 2 Semiconducteur de type P .................................................................................. 64
   III.2.3 La zone de charge d’espace ........................................................................................... 64
   III.2.4 Structure Métal /semiconducteur polarisée ................................................................. 65
   III.2.5 Capacité de la structure Métal / Semiconducteur ......................................................... 66
   III.2.6 Mécanismes de transport dans le contact Schottky ..................................................... 66
      III.2.6.1 Courant de l’émission thermoïonique ................................................................. 67
      III.2.6.2 Courant de diffusion .............................................................................................. 69
   III.2.7 Diode Schottky réelle ................................................................................................... 69
      II.2.7.1 Courant thermoïonique de la diode réelle .............................................................. 72
      II.2.7.2 Courant de génération-recombinaison .................................................................... 72
      III.2.7.3 Courant tunnel ........................................................................................................ 73
CHAPITRE VI: Elaboration des hétérojonctions de type Au/SCM/c-Si Caractérisations électriques, Simulations et Interprétations

IV.1 Introduction ............................................................................................................. 90

IV.2 Elaboration des couches de silicium ........................................................................ 90

IV.2.1 Présentation du Bâti et conditions de dépôt ......................................................... 91

IV.2.2 Protocole de dépôt des couches de silicium ......................................................... 93

IV.2.2.1 Préparation des substrats .................................................................................. 93

IV.2.2.2 Nettoyage du substrat ...................................................................................... 94

IV.2.2.3 Croissance des couches .................................................................................... 94

a) Croissance par PECVD ............................................................................................ 94

b) Croissance par HWCVD .......................................................................................... 95

IV.2.2.4 Recuits thermiques .......................................................................................... 95

IV.2.2.5 Réalisation des contacts ................................................................................... 96

IV.2.2.6 Structures d’étude ............................................................................................ 97

IV.3. Caractérisation électrique (I–V–T) ......................................................................... 99

IV.3.1 Modélisation électrique de la diode à jonction PN ou Schottky ............................. 101

IV.3.1.1 Méthode de Newton ......................................................................................... 102

IV.3.1.2 Méthode de Lambert ......................................................................................... 103

IV.3.2 Technique d’extraction des paramètre électrique ................................................. 104

IV.3.2.1 Méthode graphique ......................................................................................... 105

a) Détermination de n et Rs ......................................................................................... 105

b) Détermination du courant de saturation et de la résistance shunt .......................... 107

IV.3.2.2 Méthodes basées sur des programmes d’optimisation LMS ............................... 109

IV.4 Résultats et discussions ......................................................................................... 112
IV.4.1 Analyse des l’échantillons de la série A ................................................................. 112
IV.4.2 Analyse de l’échantillon B .................................................................................. 116
IV.4.2.1 Influence de la température ........................................................................... 116
   a) Extraction des paramètres électriques en fonction de la température .............. 116
   b) Application du modèle Gaussien ........................................................................ 120
   c) Validation du modèle Gaussien .......................................................................... 124
IV.4.3 Analyse des échantillons de la série C ................................................................. 127
IV.4.3.1 Analyse des caractéristiques I-V-T ................................................................. 127
IV.4.3.2 Analyse des caractéristiques C-V-F et G-V-F de la série C ......................... 134
   a) Spectroscopie d’impédance ............................................................................... 134
   b) Caractéristiques C-V-F et G-V-F ....................................................................... 135
   c) Caractéristiques Rs-V-f et Rs-f-V ...................................................................... 137
   f) Caractéristiques Nss-f ....................................................................................... 138
   g) Capacité corrigé Cc ......................................................................................... 140
IV.5 Conclusion ............................................................................................................. 141
Références de chapitre IV ............................................................................................ 144
Conclusion générale .................................................................................................... 146
**Liste des Figures**

**Chapitre I**

**Figure I.1** : Représentation tridimensionnelle de la maille élémentaire du silicium cristallin générée avec le logiciel V.Sim. Cette configuration est une forme dérivée de la structure cubique face centrée (CFC)  

**Figure I.2** : Structure de bandes du silicium cristallin et transitions possibles dans l’espace des k.  

**Figure I.3** : Positions du niveau de Fermi dans le gap du silicium cristallin intrinsèque et extrinsèque  

**Figure I.4** : (a) Structure atomique du Silicium polycristallin ; (b) Densité d’états en échelle logarithmique dans la bande interdite du silicium polycristallin en présence de défauts  

**Figure I.5** : Photographie et image de photoluminescence d’une cellule photovoltaïque en silicium multicristallin. Les joints de grains et les dislocations apparaissent en foncé sur l’image de photoluminescence  

**Figure I.6** : Réseaux (a) périodique dans le silicium cristallin et (b) aléatoire dans le silicium amorphe hydrogéné  

**Figure I.7** : Distribution des états dans la bande interdite du silicium amorphe hydrogéné  

**Figure I.8** : La distribution des états dans le gap avec le modèle Defect Pool  

**Figure I.9** : Structure du silicium microcristallin (a) .Schéma représentatif de la structure du µc-Si:H (b)  

**Figure I.10** : Image HRTEM du silicium nanocristallin hydrogéné  

**Figure I.11** : Couche de silicium polymorphe  

**Figure I.12** : Nomenclature des matériaux cristallins en fonction de la taille de grain  

**Chapitre II**

**Figure II.1** : Méthodes générales de dépôt de silicium en couches minces  

**Figure II.2** : Schéma de principe du dépôt par pulvérisation cathodique  

**Figure II.3** : Schéma de principe d’évaporation thermique sous vide  

**Figure II.4** : Schéma de principe du dépôt par ablation laser
Figure II.5 : Mécanisme de dépôt chimique en phase vapeur CVD 42
Figure II.6 : Schéma descriptif du principe de la technique APCVD 45
Figure II.7 : Schéma descriptif du principe de la technique LPCVD 46
Figure II.8 : Représentation schématique du réacteur PECVD 47
Figure II.9 : Schéma représentatif d’un plasma et les espèces réactifs présents 49
Figure II.10 : Représentation schématique des mécanismes intervenant dans les plasmas de silane et conduisant à la croissance du silicium amorphe et microcristallin 49
Figure II.11 : Fréquence d'excitation en fonction des fréquences caractéristiques du plasma 50
Figure II.12 : Représentation schématique du réacteur HWCVD 50
Figure II.13 : Chambre de dépôt par la technique HWCVD 51
Figure II.14 : Taux de dépôt en fonction de la température de dépôt 52

Chapitre III

Figure III.1 : Courbe caractéristique de la densité de courant J en fonction de la tension V (a) pour un contact Schottky ; (b) pour un contact ohmique 61
Figure III.2 : Diagrammes d’énergies à l’équilibre thermodynamique après Contact pour SC type (n)(a), SC type (p) (b) 62
Figure III.3 : Diagrammes d’énergies à l’équilibre thermodynamique après contact pour SC type (n)(a) ; SC type (p) (b). 63
Figure III.4 : Diagramme de bandes d’énergie de la diode Schottky en polarisation directe 64
Figure III.5 : Diagramme de bandes d’énergie de la diode Schottky en polarisation inverse 66
Figure III.6 : Mécanismes de transport des courants existants dans le contact Schottky polarisé avec une tension positive : (a) SC type (n),(b) SC type (p). 67
Figure III.7 : Diagramme énergétique de la diode Schottky de type n(a) et de type p (b). 70
Figure III.8 : Diagramme énergétique à deux dimensions d’un contact métal-semiconducteur inhomogène, c’est cette forme ‘montagne’ qui donne un facteur d’idéalité n>1 dans les caractéristiques (I-V) pour SC type n (a) ; SC type p (b).

Figure III.9 : Diagramme de bandes d’une hétérojonction anisotype après contact

Figure III.10 : Diagramme de bandes d’une hétérojonction abrupte du type (matériau p de grand gap / matériau n de gap réduit) en polarisation directe

Figure III.11 : Conséquence de la dissymétrie du dopage de l’hétérojonction sur l’importance de l’effet de barrière du notch ; a) cas d’un dopage(p+) ; b) cas d’un dopage(n+).

Figure III.12 : Différents mécanismes de transport des trous dans l’hétérojonction abrupte du type (matériau p de grand gap – matériau n de gap réduit). a) diffusion ; b) émission thermoïonique ; c) conduction tunnel à travers le notch ; d) recombinaison à l’interface ; e) et f) recombinaison à l’interface associée à un effet tunnel

Chapitre IV

Figure IV.1 : Bâti double chambre PECVD/HWCVD

Figure IV.2 : Branchement des débitmètres des gaz toxiques et inflammables

Figure IV.3 : Unité de commande du bâti PECVD/HWCVD

Figure IV.4 : Système de recuit thermique.

Figure IV.5 : Système de l’évaporateur sous vide

Figure IV.6 : Coupe schématique des séries d’échantillons (a) : a-Si: H(p)/c-Si(N+) pour la série A et B , (b) : a-Si: H(p)/c-Si(N–) pour la série C

Figure IV.7 : Photo du banc expérimental de mesure de la caractéristique (I-V).

Figure IV.8 : Principe du banc de mesure des caractéristiques (I-V).

Figure IV.9 : Caractéristiques semi logarithmiques (I – V) expérimentales mesurées à l’obscurité des séries d’échantillons A, B, C à température ambiante

Figure IV.10 : Schéma électrique d’une structure réelle à 1D

Figure IV.11 : Caractéristiques semi logarithmiques I-V des échantillons de la série A mesurées à l’obscurité à 300K
Figure IV.12 : La fonction H(I) de Cheng & Cheng des échantillons de la série A 106
Figure IV.13 : La fonction G/I(G) des échantillons de la série A 107
Figure IV.14 : Caractéristique semi logarithmique I-V de la tension inverse Des échantillons de la série A à 300K 108
Figure IV.15 : Caractéristique linéaires I-V mesurées des échantillons de la série A 108
Figure IV.16 : Caractéristiques semi-logarithmiques (I-V) mesurées et courbes ajustées des échantillons de la série A en utilisant l'extraction des paramètres avec le modèle de Lambert 111
Figure IV.17 : Caractéristique (C² – V) des échantillons A 113
Figure IV.18 : Caractéristiques semi logarithmique (I-V) directes expérimentales et simulées à 300K des échantillons de la série A. 115
Figure IV.19 : Caractéristiques semi logarithmiques I-V-T mesurées en polarisation directe et inverse pour différentes températures de recuit : a-(900°C), b-(800°C), c- (700°C). 117
Figure IV.20 : Courbe Arrhenius ln (Iₒ) en fonction de 1000/T pour différentes températures de recuit : a- (900°C), b- (800°C), c- (700°C) 119
Figure IV.21: Courbes conventionnelles de la constante de Richardson pour différentes températures de recuit : a-(900°C), b-(800°C), c-(700°C). 120
Figure IV.22: Variation de la barrière apparente Φap en fonction de q/2KT de la diode Schottky selon la distribution Gaussienne à différentes températures de recuit a-(900°C), b-(800°C), c-(700°C). 121
Figure IV.23: Courbes modifiées ln (Iₒ/T²)-(q²σ²)/(2kT²) en fonction de q/ (kT) pour la structure Au/a :Si:H selon la distribution Gaussienne de la barrière de potentiel à différentes températures de recuit a-(900°C), b-(800°C), c-(700°C) 122
Figure IV.24 : Variation de 1/nap en fonction de q/2KT de la structure Schottky Au/a :Si:H selon la distribution Gaussienne à différentes températures de recuit a-(900°C), b-(800°C), c-(700°C) 123
Figure IV.25 : Variation de 1/n en fonction de 1000/T de la structure Schottky Au/a :Si:H selon la distribution Gaussienne à différentes températures de recuit a-(900°C), b-(800°C), c-(700°C) 124
Figure IV.26 : Caractéristiques semi logarithmique I-V-T [160-300K] expérimentales (cercle) et simulées (line) par le modèle de Werner en polarisation directe pour les diodes Schottky Au /a :Si:H dans l'obscurité pour différentes températures de recuit a-(900°C), b-(800°C), c-(700°C). 125
Figure IV.27 : Caractéristiques semi logarithmique I-V-T mesurées en polarisation directe et inverse pour les échantillons C1, C2.

Figure IV.28 : Caractéristiques semi logarithmique I-V expérimentale et ajustée des échantillons C1, C2 à 320 K

Figure IV.29 : Variation de la résistance shunt en fonction de la température des échantillons C1, C2.

Figure IV.30 : Variation de la résistance série en fonction de la température des échantillons C1, C2

Figure IV.31 : Variation du facteur d’idéalité en fonction de la température des échantillons C1 et C2

Figure IV.32 : Variation du courant de saturation en fonction de la température des échantillons C1 et C2

Figure IV.33 : Variation du paramètre A en fonction de température pour les échantillons C1 et C2

Figure IV.34 : Courbe Arrhenius $\ln(I_0)$ en fonction de $(1000/T)$ pour les échantillons C1 et C2

Figure IV.35 : Caractéristiques semi logarithmiques (I-V) expérimentale de C1 ( sphériques) et simulée par le courant de génération - recombinaison des hétérojonctions a:Si-H/c-Si (line) aux températures de 300 et 320K à l’obscurité.

Figure IV.36 : Banc expérimental de spectroscopie d’impédance

Figure IV.37 : Caractéristiques expérimentales capacitance-tension (C-V-F) en fonction de la fréquence des échantillons C1 et C2.

Figure IV.38 : Caractéristiques expérimentales conductance-tension en fonction de la fréquence des échantillons C1et C2.

Figure IV.39 : Courbes Rs-V en fonction de la fréquence pour les échantillons C1et C2

Figure IV.40 : Courbe Rs-f en fonction de la tension de polarisation pour Les échantillons C1 et C2.

Figure IV.41 : Variation de la densité d’états d’interface (N_{SS}) en fonction de la fréquence des échantillons C1et C2

Figure IV.42 : Caractéristiques $C_m$-V et $C_c$-V à 10KHz

Figure IV.43 : La courbe du rapport $(C_c /C_m )_{\text{max}}$ en fonction de la fréquence
Liste des Tableaux

Chapitre II

Tableau II.1 : Les méthodes de CVD et leur domaine de température 44
Tableau II.2 : Les avantages et les inconvénients de PECVD et HWCVD 53

Chapitre IV

Tableau IV.1 : Conditions de dépôt des séries d’échantillon A, B et C. 98
Tableau IV.2 : Valeurs des gaps optiques et des épaisseurs des couches minces de silicium 98
Tableau IV.3 : Extraction des paramètres électriques pour les échantillons de la série A par les méthodes graphiques et LMS 110
Tableau IV.4 : Extraction des paramètres électriques des échantillons de la série A par la méthode LMS et physique 113
Tableau IV.5 : Paramètres physiques et électriques utilisés 114
Tableau IV.6 : Extraction des valeurs des paramètres \(R_{sh}, R_s, n, \Phi_B, I_0\) caractérisant l’échantillon B. 118
Tableau IV.7 : Paramètres caractérisant le contact Schottky Au/a:Si-H en utilisant le modèle Gaussien 126
INTRODUCTION

GÉNÉRALE
Actuellement, les cellules à base des plaquettes de silicium (silicium massif) poly ou monocristallin sont classées dans des rangs supérieurs. Cependant leur prix qui est élevé est l’une de leur faiblesses. Également, à cause de la difficulté d’élaborer les cellules solaires par cette filière (un nombre d’étapes élevé), une autre filière la remplace. C’est celle des couches minces. Elle contribue avec un pourcentage de 25% [1] dans la production mondiale des cellules photovoltaïques.

Les couches minces de silicium sont également utilisées en électronique de commande tels que les TFT « Thin Film Transistors »). Elles deviennent de plus en plus importantes dans la conception de dispositifs pour des raisons différentes. En effet elles permettent d’économiser des matériaux puisqu’elles nécessitent très peu de la matière première afin de les mettre en œuvre [1] et elles sont faciles à élaborer. Mais il est nécessaire de tenir compte de l’effet du substrat sur les propriétés structurales de la couche (support mécanique d’élabo- ration) puisque la nature des interactions couche-substrat influe fortement sur ces propriétés[2]. La structure peut donc varier d’une structure amorphe (ordre à courte distance) à une structure polycristalline ou monocristalline (cristalline=ordre à longue distance).

Une couche mince peut être considérée comme un système à deux dimensions puisque l’une des dimensions qui est l’épaisseur est réduite (de l’ordre de nanomètre). Dans ce cas on passe d’un matériau pour le quel les effets de bords sont négligés à une couche mince pour laquelle ces effets doivent être pris en considération. Plusieurs méthodes ont été mises en œuvre afin d’élaborer ces couches parmi lesquelles on cite les techniques chimiques d’élaboration. Dans cette famille on cite les techniques suivantes :

- le dépôt chimique en phase vapeur assisté par plasma (Plasma Enhanced Chemical Vapor Déposition (PECVD)).
- Le dépôt chimique en phase vapeur assisté par filament chaud (Hot Wire Chemical Vapor Deposition (HWCVD)).

La technique PECVD est une variante de la technique CVD, elle est la plus adaptée pour déposer des couches minces à des températures relativement faibles (inferieures à 300K) [3]. Elle est utilisée au début pour la fabrication des dispositifs électroniques. Au milieu des années 1970, elle est utilisée dans le domaine du photovoltaïque [4].

Au cours du dépôt, la réaction est activée par la présence du plasma pour obtenir à partir des précurseurs gazeux un solide qui se dépose sur la surface à couvrir du substrat [3].
L’avantage de cette technique est la possibilité de diversifier ces couches par la modification de paramètres de dépôt qui influent fortement sur ces couches élaborées telle que la pression de l’enceinte et la vitesse de dépôt.

La technique HWCVD a été inventée en 1979 [5]; elle est également utilisée pour la mise en œuvre des TFT (Thin Film Transistor) et des cellules solaires [6]. Elle est utilisée en particulier pour déposer des couches de silicium nanocristallin hydrogéné (nc-Si:H), de silicium amorphe hydrogéné (a-Si:H) et de silicium microcristallin hydrogéné (μc-Si:H [7]. Cette technique possède presque les mêmes constituants que celles de la technique PECVD tels que les systèmes de pompage et d’injection de gaz. Elle diffère seulement par la source d’excitation ; à la place du plasma la technique HWCVD est basée sur la dissociation des gaz par un filament chaud.

Dans le cadre d’une coopération bilatérale Algérie -Tunisie ces deux techniques ont été utilisées au sein du Laboratoire de Physique des Matériaux et des Nanomatériaux appliquée à l’Environnement (PhyMNE) à la Faculté des Sciences de Gabès (Tunisie) pour déposer des couches minces de silicium (amorphe, nanocristallin ou microcristallin). Ces couches sont de type P. Trois séries d’échantillons de silicium en couches minces ont été déposés sur des substrats de silicium cristallin à différentes résistivités de type N.

L’objectif visé au cours de ce travail est la caractérisation électrique de ces échantillons en utilisant différentes moyens d’analyse. Des mesures (I-V), (C-V), (G-V) vont nous permettre d’étudier l’influence des paramètres de dépôt et de la technique de dépôt sur les phénomènes de conduction. Une simulation ainsi qu’une modélisation de ces phénomènes viendront appuyer les résultats expérimentaux.

L’ensemble du travail réalisé est synthétisé dans un manuscrit composé de quatre chapitres.

Dans un premier chapitre, nous avons présenté les propriétés physiques et électriques du silicium et ses différentes filières en mettant l’accent sur le silicium cristallin et le silicium amorphe hydrogéné.

Un deuxième chapitre résume les techniques d’élaboration des couches minces de silicium en accordant plus d’importance aux techniques PECVD et HWCVD.

Le troisième chapitre sera consacré à un rappel théorique sur les propriétés électriques des hétérojonctions métal/semiconducteur et semiconducteur/semiconducteur. Nous exposerons les
différents mécanismes de transport qui régissent leur fonctionnement ainsi que les formalismes mathématiques qui déterminent leurs caractéristiques électriques.

La première partie du quatrième chapitre est dédiée à la présentation du matériel utilisé pour la réalisation des échantillons d’étude avant d’expliciter le protocole de dépôt des couches de silicium. Nous présentons ensuite l’ensemble des caractéristiques électriques mesurées.

Les mesures sont divisées en trois parties. En premier lieu, nous allons présenter les caractéristiques électriques de type (I-V) mesurées à la température ambiante pour les trois séries d’échantillons. L’influence de la température sur les phénomènes de conduction sera étudiée en présentant les caractéristiques en fonction de la température de recuit et de la température de mesure.

Les mesures de la capacité et de la conductance à différentes fréquences et différentes tensions de polarisation seront exposées en troisième lieu.

L’influence des paramètres et de la technique de dépôt sera étudiée à travers ces mesures.

Nous avons utilisé des modèles de calcul qui nous ont permis de confronter les caractéristiques théoriques et les caractéristiques expérimentales.

Le manuscrit s’achèvera par une conclusion générale et des perspectives.

Références :
CHAPITRE I:

PARTICULARITÉS DU SILICIUM
ET SES CONGÉNÈRES
I.1 Introduction:

Le silicium est un semiconducteur avec une énergie du gap égale à 1.12 eV à 300 K dans l’état cristallin, et comprise dans la gamme (1.55 - 2.1) eV [1,2] dans l’état amorphe hydrogéné. Entre ces valeurs, on trouve des matériaux composites, intégrant des nano ou micro cristaux de silicium dans des matrices amorphes, allant du silicium polymorphe au microcristallin.

Le silicium amorphe hydrogéné préparé par la technique du dépôt chimique CVD et ses variantes est une filière dont on cherche à améliorer la rentabilité. En effet, à cause des liaisons pendantes Si-Si non passivées, la structure du silicium amorphe présente des défauts, qui forment des centres de recombinaison pour les porteurs libres d’où l’apparition de nouveaux niveaux d’énergie dans la bande interdite. La densité d’état est en toute zone non nulle. Mais il existe des états localisés, où les porteurs libres ont une faible mobilité et des états libres où les porteurs ont une forte mobilité. On parle alors de « gap de mobilité ».

Les couches amorphes dopées présentent des inconvénients. En effet elles sont de mauvaise qualité et le dopage devient difficile. Alors pour diminuer la densité des défauts il faut saturer les liaisons de silicium avec l’hydrogène d’où l’obtention du silicium amorphe hydrogéné (a-Si : H).

Dans ce qui va suivre, nous allons passer en revue quelques rappels sur les structures atomiques et électroniques du silicium sous ses différentes formes en mettant l’accent sur le silicium monocristallin et le silicium amorphe hydrogéné.

I.2 Différentes filières du silicium:

I.2.1 Le silicium monocristallin:

Le silicium est un élément du groupe IV du tableau périodique. Il est le plus abondant dans la nature après l’oxygène et on peut le trouver dans le sable à base de silice et dans plusieurs roches à base de silicate.

La structure cristallographique du silicium monocristallin voir figure (I.1) est une structure cubique diamant dans laquelle deux réseaux cubiques à faces centrées s’interpénètrent. Chaque atome d’un des réseaux est entouré par quatre proches voisins équidistants formant un réseau tétraédrique [2].
Chapitre I : Particularités du silicium et ses congénères

Figure I.1 : Représentation tridimensionnelle de la maille élémentaire du silicium cristallin générée avec le logiciel V.Sim. Cette configuration est une forme dérivée de la structure cubique face centrée (CFC). [3]

Les liaisons entre les atomes sont de type covalent avec une distance interatomique de 2.35 Å et un paramètre de maille a=5.43 Å° [4]. La liaison entre les atomes les plus proches est de caractère de type 3sp^3 (angle de liaison 109° 28’).

La figure (I.2) représente la répartition des niveaux d’énergie du silicium monocristallin dans l’espace des k.

On remarque immédiatement que le gap du silicium est indirect : le maximum de la bande de valence la plus haute n’est pas aligné avec le minimum de la bande de conduction la plus basse, et il existe une dégénérescence d’ordre 2 du plus haut niveau de la bande de valence. Sur cette figure sont aussi représentés plusieurs types de transitions électroniques pouvant avoir lieu : le chemin (1) pour les transitions bande à bande directes, le chemin (2) pour les transitions indirectes, le chemin (3) lors de la thermalisation des électrons. Les transitions directes sont plus rares que les transitions indirectes, et pour ces dernières, la conservation du moment implique la présence d’une autre particule : le phonon. Cela implique que les recombinations radiatives sont moins nombreuses dans le silicium que dans les semiconducteurs à gap direct, se traduisant par un coefficient de recombinaison radiative faible.
Chapitre I : Particularités du silicium et ses congénères

Figure I.2: Structure de bandes du silicium cristallin et transitions possibles dans l’espace des k.

Les propriétés électroniques du silicium cristallin dépendent de paramètres intrinsèques tels que les concentrations de porteurs libres à l’équilibre $n_i$, l’énergie du gap $E_g$, la présence d’impuretés, tous reliés à la température.

Le silicium peut être dopé en introduisant des atomes dopants dans le réseau. Dans ce cas, l’énergie du système est minimale quand les dopants se substituent à un atome de silicium du réseau. Les atomes dopants tels que le phosphore, l’azote ou l’arsenic sont donneurs d’électrons lorsqu’ils sont liés à quatre atomes de silicium (partageant donc 8 électrons avec eux), un 9ème électron en excès est délocalisé de l’atome dopant (ex : ion $P^+$) et libéré dans le matériau à température ambiante. Ce matériau est alors dopé n. Les atomes accepteurs d’électrons tels que le bore, l’aluminium ou le gallium sont eux en déficit d’un électron dans cette configuration, laissant apparaître une charge négative à leur voisinage (ex : ion $B^-$) et un trou au sein du matériau à l’ambiante. Ce matériau est alors dopé p. Pour les applications photovoltaïques, le silicium est le plus souvent dopé avec des atomes de phosphore et de bore.
Les positions du niveau de Fermi dans le gap du silicium monocristallin intrinsèque, et extrinsèque dopé n et dopé p sont données dans la figure (I.3). Les niveaux des donneurs ($E_D$) et accepteurs ($E_A$) sont indiqués [3].

**Figure I.3 :** Positions du niveau de Fermi dans le gap du silicium cristallin intrinsèque et extrinsèque

Le silicium monocristallin est un matériau de très haute pureté ; il est obtenu par des procédés industriels tels que la purification, la fusion de zone et le tirage Czochralski [1]. L’élaboration de ce matériau est très chère du point de vue technique et pureté pour les applications dans l’industrie tels que les panneaux photovoltaïques. Ce qui a obligé les efforts de la recherche scientifique à accéder à d’autres solutions parmi lesquelles on cite celle de l’utilisation du silicium amorphe hydrogéné.
I.2.2 Le silicium polycristallin:

La structure du silicium polycristallin est constituée de grains dont la taille varie de quelques centaines de nanomètres à quelques millimètres suivant les conditions d’élaboration, séparés entre eux par des joints de grains. Les joints de grains délimitant les grains d’orientations différentes constituent des zones désordonnées, souvent assimilées à du silicium amorphe. La figure (I.4) représente la distribution de la densité d’états dans la bande interdite du silicium polycristallin.

Le désordre induit par les joints de grains et la distorsion des liaisons entre les atomes de silicium provoque une distribution des états électroniques. Cela se traduit par l’apparition d’états localisés dans la bande interdite au niveau des bandes de conduction et de valence sous forme de queues de bande. Les liaisons pendantes (liaisons non satisfaites) introduisent quant à elles deux états électroniques au milieu du gap.

Les grains peuvent être de différentes tailles. Leur qualité cristalline est fonction de la densité des défauts intragranulaires parmi lesquels on cite les dislocations, les sous joints et les joints de macle. En présence de ces défauts, la structure de bande du silicium peut être modifiée. D’autre part, les couches de silicium polycristallin ont un niveau de pureté moins élevé par rapport au silicium monocristallin. La présence d’impuretés telles que l’oxygène, le carbone et les métaux de transition, pouvant être incorporées dans la couche lors de la fabrication du silicium polycristallin, limite la longueur de diffusion des porteurs minoritaires dans des applications de type photovoltaïque. D’autres impuretés peuvent être introduites intentionnellement dans la couche pour le dopage ou la passivation des défauts.

En fonction de la densité des défauts dans la couche, la densité d’états peut prendre différents aspects, cependant elle sera toujours proche de celle présenté sur la figure (I.4.b), les joints de grains étant inévitables dans le silicium polycristallin.
Figure I.4 : (a) Structure atomique du Silicium polycristallin [4] ; (b) Densité d’états en échelle logarithmique dans la bande interdite du silicium polycristallin en présence de défauts [5]

I.2.3 Le silicium multicristallin :

On différencie le silicium monocrystallin (c-Si), composé d’un seul cristal, du silicium multicristallin (mc-Si), formé de nombreux cristaux séparés par des joints de grains. Ces derniers pouvant atteindre quelques centaines de nanomètres de largeur, regroupent des impuretés agrégées lors de la fabrication et qui en trop grande quantité, vont limiter les performances des composants de manière considérable. Il n’est pas rare non plus de constater la présence d’autres impuretés agrégées dans des zones inclues au sein des cristaux, connues sous le nom de dislocations voir figure (I.5). L’intérêt de ce matériau cristallin de moindre qualité est son plus faible coût de fabrication.

Figure I.5: Photographie et image de photoluminescence d’une cellule photovoltaïque en silicium multicristallin. Les joints de grains et les dislocations apparaissent en foncé sur l’image de photoluminescence [3].
I.2.4 Le silicium amorphe hydrogéné:

Contrairement au silicium cristallin, le silicium amorphe ($a$-Si) a une structure atomique désordonnée. Sa structure à courte distance est similaire à celle du silicium cristallin, par contre il n’y a pas d’ordre cristallographique ni de périodicité à longue distance. Plusieurs travaux ont montré que l’existence de l’ordre à courte distance préserve l’existence d’une bande de conduction et de valence. Avant les années 1960, le silicium amorphe était déposé principalement par pulvérisation cathodique, il n’était donc pas hydrogéné [6].

De ce fait, le matériau contenait une grande concentration de liaisons pendantes de l’ordre de $10^{19}$ à $10^{20}$ cm$^{-3}$ et donc une concentration de défauts très élevée [7]. Le silicium amorphe pur s’est révélé être un matériau peu intéressant du point de vue des applications.

De nouvelles perspectives s’ouvrent lorsque Chittick [8] et son équipe parviennent à déposer en 1969 du silicium amorphe hydrogéné ($a$-Si:H) par un plasma de silane (SiH$_4$), plus de 99.9 % des défauts étaient saturés par l’hydrogène. L’incorporation de l’hydrogène dans le silicium a pour rôle la passivation des défauts de coordination. Il améliore donc sensiblement sa qualité électronique en réduisant de façon notable la densité de défauts à des valeurs de l’ordre de $10^{15}$ à $10^{16}$ cm$^{-3}$. De plus, il a été démontré qu’introduire de l’hydrogène dans le matériau permet d’y intégrer efficacement des atomes dopants, indispensables pour les applications photovoltaïques [9]. La recherche de nouvelles ressources énergétiques, ainsi que de nouvelles applications en font un matériau actuellement encore en pleine évolution.

Le silicium amorphe hydrogéné présente un réseau aléatoire d’atomes qui conserve un ordre local à courte distance. En effet, une distribution régulière d’atomes est respectée pour les premiers voisins cependant plus on s’éloigne d’un atome donné plus les longueurs et angles de liaisons fluctuent. La figure (I.6) présente une comparaison entre le silicium amorphe hydrogéné et le silicium monocristallin. La figure (I.6.b) montre un exemple de réseau aléatoire dans le silicium amorphe hydrogéné. Certaines liaisons ne sont pas satisfaites tandis que d’autres sont reliées à des atomes d’hydrogène.
Figure I.6 : Réseaux (a) périodique dans le silicium cristallin et (b) aléatoire dans le silicium amorphe hydrogéné.

a) La distribution des états dans la bande interdite :

Le gap du silicium amorphe hydrogéné est représenté à l’aide d’une densité d’états (Density Of States ou DOS). La définition la plus utilisée pour la densité d’états correspond au modèle introduit par Davis et Mott [10]. Dans ce modèle, la DOS est constituée de deux distributions exponentielles respectivement pour les queues de bandes de conduction (QBC) et de valence (QBV), et de distributions gaussiennes (2 à 4) pour les états profonds. Les premières sont liées au désordre dans le matériau (angles et longueurs des liaisons interatomiques) tandis que les secondes dépendent de la coordination (liaisons pendantes notamment). Cette distribution est représentée dans la figure (I.7) où on peut distinguer:

✓ Les queues de bande qui sont des états en bord de bandes « Tail States », de type donneur du côté de la bande de valence et accepteur du côté de la bande de conduction et sont représentées par une distribution exponentielle décroissante. La queue de bande de conduction (QBC) est de type donneur et est neutre si elle est vide ; la queue de bande de valence (QBV) est de type accepteur et est neutre si elle est vide.
Figure I.7 : Distribution des états dans la bande interdite du silicium amorphe hydrogééné.

Les états profonds qui correspondent à des liaisons pendantes dans le silicium amorphe. Ces états profonds sont de type amphotère c'est-à-dire qu'ils peuvent contenir 0, 1 ou 2 électrons: leur charge peut être $+q$, 0 et $-q$. Les états profonds peuvent être représentés par deux distributions gaussiennes. Nous avons une gaussienne de type donneur $+/0$ (sa charge est $+q$ si elle est ionisé ou 0 sinon) et une gaussienne de type accepteur $0/-$ (sa charge est $-q$ si elle est ionisé ou 0 sinon). Les deux gaussiennes sont séparées par une énergie de corrélation $U$ qui correspond à l'énergie nécessaire pour ajouter un électron à un état occupé uniquement par un seul électron (neutre).

Autre ce modèle standard de distribution des états dans la bande interdite, il existe aussi un modèle basé sur un réservoir de défauts « Defect Pool model » en anglais.

Ce modèle, souvent cité dans la littérature, a été développé par Powell et Deane [11,12] et est basé sur l’équilibre thermodynamique entre les liaisons faibles Si-Si et les liaisons pendantes. La distribution des états dans ce modèle est représentée dans la figure (I.8).
Figure I.8: La distribution des états dans le gap avec le modèle Defect Pool.

Pour un dopage de type n, un excès d’électrons est fourni au matériau qui s’adapte en transformant des liaisons faibles en liaisons brisées qui peuvent piéger ces électrons supplémentaires et cela se traduit par une augmentation de la densité de défauts profonds près de la bande de valence. Pour un dopage de type p, nous avons une accumulation de trous dans le matériau qui réagit en créant des liaisons brisées capables de piéger ces trous supplémentaires et cela se traduit par une augmentation de la densité de défauts profonds près de la bande de conduction. Les queues de bande et les défauts profonds contrôlent le transport électronique dans le silicium amorphe par exemple via les recombinations dans ces états.

b) Propriétés optiques du silicium amorphe hydrogéné :

L’énergie de gap du silicium amorphe hydrogéné dépend de la composition atomique et structurale du matériau et peut varier de 1,55 à 2,10 eV [13], la valeur standard étant proche de 1,75 eV à 300 K. On distingue le gap de mobilité du gap optique qui dépend de l’absorption de la lumière dans le matériau et lié aux queues de bandes (états localisés). Le gap de mobilité du silicium amorphe est légèrement plus grand que le gap optique, de l’ordre de 0.1 à 0.2 eV. La valeur du coefficient d’absorption du a-Si :H est plus élevée que celle du c-Si entre 1.8 eV et 2.4 eV ce qui permet d’envisager l’utilisation de couches amorphes pour les applications photovoltaïques.
c) Activation des dopants et métastabilité du a-Si :H :

Dans le a-Si:H, même si le dopage est possible il est très peu efficace. Les mesures de spectrométrie de masse des ions secondaires (SIMS) donnent des concentrations d’atomes dopants supérieures à $10^{21}$cm$^{-3}$ [14] mais une très faible proportion est active (~ 1% de la densité de dopants). Les dopants non actifs augmentent le désordre et réduisent davantage la mobilité des porteurs. Il faut également préciser que la concentration de porteurs libres n’est pas égale à la concentration de dopants actifs. La majorité des porteurs libérés par les dopants sont piégés par les liaisons pendantes [15]. En règle générale, les forts dopages n ou p provoquent l’augmentation de la densité des défauts à l’intérieur de la bande interdite d’a-Si:H [15-19].

Quelques aspects particuliers du a-Si:H sont la possibilité d’activer les dopants avec la température, sa métastabilité sous éclairement. Dans le premier cas, on apporte de l’énergie au matériau sous forme de chaleur; on favorise ainsi la réorganisation de liaisons, pouvant conduire à l’activation des dopants (de paire avec l’augmentation de la densité d’états profonds). Cet effet se traduit par une augmentation irréversible de la conductivité et est particulièrement prononcé pour les couches minces déposées à basse température [20] en utilisant la technique du dépôt chimique en phase vapeur CVD (Chemical Vapor Deposition) et ses variantes en particulier le dépôt chimique en phase vapeur assisté par plasma PECVD (Plasma Enhanced Chemical Vapor Déposition) et le dépôt chimique en phase vapeur assisté par filament chaud HWCVD (Hot Wire Chemical Vapor Deposition).

Le cas de la métastabilité du silicium amorphe hydrogéné sous éclairement (ou “Light Soaking”), plus connu sous le nom de l’effet Staebler-Wronski [21] est lié à l’augmentation d’états profonds dans le gap sous l’apport d’énergie lumineuse (liaisons faibles brisées). Cet effet a cependant peu d’influence pour les applications photovoltaïques sur les cellules à hétérojonctions car les couches de a-Si:H utilisées sont minces pour minimiser l’absorption dans ces couches. En effet, les technologies en couches minces constituent un moyen prometteur pour la production des cellules photovoltaïques à faible coût. De plus ces technologies nécessitent beaucoup moins d’énergie que la technologie de fabrication à base de silicium cristallin c-Si.

Le silicium amorphe hydrogéné pourrait être donc une alternative prometteuse au c-Si pour des applications de grande surface et à faible coût.
I.2.5 Le silicium microcristallin hydrogéné :

Le silicium microcristallin hydrogéné µc-Si:H est un matériau qui a été utilisé pour la première fois pendant les années 90 par l’IMT (Institut of Micro-Technology) de Neuchâtel.

Il a été élaboré par les techniques PECVD (Plasma Enhanced Chemical Vapor Deposition) et HWCVD (Hot Wire Chemical Vapor Deposition) à partir de silane SiH₄ [22]. Sa structure est composée des régions cristallines et des joints de grains en colonnes qui sont séparés par des régions amorphes. Ce qui rend la mobilité dans la structure plus grande par rapport à celle du silicium amorphe hydrogéné. Ces grains (< 1 µm) sont entourés de cristallites de taille nanométrique et c’est pour cette raison que l’appellation microcristallin est un abus de langage [22,23]. La figure (I.9) schématise la morphologie du matériau qui est déposé par PECVD à hautes fréquences en illustrant la variation de la phase cristalline (à gauche) jusqu’à la phase amorphe (à droite) [23]. En réalité, les conditions de dépôt telles que la concentration de silane sont responsables de cette hybridation de structure. Plus la concentration de silane est importante plus la structure est amorphe, (la fraction volumique amorphe augmente et la présence de quelques cristallites en silicium dans la matrice amorphe diminue). En général, le silicium microcristallin est anisotrope et inhomogène en volume. Il possède un gap de l’ordre de 1.4 eV, ce qui le rend capable d’absorber une grande partie du spectre solaire.

Figure I.9: Structure du silicium microcristallin (a) [15]. Schéma représentatif de la structure du µc-Si:H (b) [14]
**I.2.6 Le silicium nanocristallin hydrogéné :**

Le silicium nanocristallin hydrogéné (nc-Si:H) est un matériau dérivé des deux matrices amorphe et microcristallin constitué de petites cristallites ayant une taille de quelques nanomètres (2 à 50 nm) noyées dans une matrice amorphe. En 1979, les savants japonais Usui et Kikuché [16] montrent que le nc-Si:H peut être élaboré par PECVD. La figure (I-10) montre la présence de nanocristallites de silicium dans la matrice amorphe dont la taille varie entre 2 et 14 nm avec une densité égale à $8.85 \times 10^{10}$ cm$^{-2}$ [17]. La diffraction d’électrons dans la couche est illustrée par la figure (I-10-b) où les cercles concentriques affirment la présence de la structure amorphe, et la figure (I-10-c) montre la cristallinité des inclusions du silicium.

Le nc-Si:H est défini selon certains critères comme la densité des défauts, la taille des cristallites, la structure cristallographique, la porosité et la compacité du matériau et la fraction du volume cristallin sur le volume amorphe. Ces paramètres dépendent totalement des conditions de dépôt telles que : les débits et la pression des gaz, la puissance électrique fournie au plasma, la température du substrat,…etc. On peut s’attendre à une forte influence de la structure sur les propriétés électriques et optiques de l’échantillon.

Les couches nc-Si:H sont caractérisées par de fortes valeurs de la conductivité $\sigma$ sous obscurité et leurs faibles valeurs de l’énergie d’activation par rapport à celles des couches a-Si:H. Typiquement, $\sigma$ mesurée à la température ambiante et sous obscurité est de l’ordre de $10^{-10}$ à $10^{-9}$ $\Omega^{-1}.cm^{-1}$ pour le a-Si:H alors qu’elle est de l’ordre de $10^{-7}$ à $10^{-2}$ $\Omega^{-1}.cm^{-1}$ pour le $\mu$/nc-Si:H et peut même dépasser $10^{-2}$ $\Omega^{-1}.cm^{-1}$.

![Figure I.10: Image HRTEM du silicium nanocristallin hydrogéné [17].](image)
L’énergie d’activation est de l’ordre de 0.9 à 0.7 eV pour le a-Si:H et de l’ordre de 0.6 à 0.2 eV pour le µ/nc-Si:H même pour les couches intentionnellement dopées.

Le silicium nanocristallin présente un gap optique qui varie de 2 à 2.7 eV. En fait, du point de vue optique, une cellule solaire à base de a-Si:H absorbe des photons de longueur d’onde supérieure à 600 nm *(bleu, vert)* alors qu’une cellule à base de nc-Si:H absorbe des photons de longueur d’onde inférieure *(rouge, proche infrarouge)*. Une combinaison de deux cellules à base de a-Si:H et nc-Si:H permet donc d’élargir le domaine spectral et donc d’améliorer l’absorption de la structure.

**I.2.7 Le silicium polymorphe :**

Le silicium polymorphe hydrogéné (pm-Si:H) est un matériau constitué de nanocristaux (d’environ 1 nm à 5 nm) incorporés dans une matrice amorphe voir figure (I.11).

L’intérêt du pm-Si:H intrinsèque par rapport au a-Si:H est d’avoir une densité de défauts plus faible, un produit mobilité-durée de vie supérieur par rapport à celui du a-Si:H intrinsèque. Avec la même température de dépôt que celle de l’a-Si:H, le pm-Si:H a un contenu en hydrogène et un gap plus important que celui de l’a-Si:H et une densité de défauts moins grande.

**Figure I.11:** Couche de silicium polymorphe

La figure (I.12) montre la dénomination des différents types de silicium en fonction de leur longueur de cohérence, directement relié à la taille des grains.
I.3 Conclusion :

Dans ce chapitre, nous avons vu que comme beaucoup d’autres éléments, le silicium peut exister à température ambiante sous différentes structures, dont les deux extrêmes sont respectivement l’état amorphe et l’état cristallin.

On a ainsi remarqué qu’à la différence des atomes du silicium cristallin, qui occupent une position bien définie et périodique, le silicium amorphe présente de faibles variations de longueur et d’angles de liaison qui ont pour conséquence d’éliminer l’ordre après quelques distances atomiques. Ce désordre engendre des queues de bandes. De plus, le réseau amorphe contient des défauts sous forme de liaisons pendantes. Ces défauts génèrent des états dans le milieu du gap qui rendent le dopage inefficace et ce matériau inutilisable pour des applications en microélectronique. Ces liaisons peuvent être passivées par l’hydrogène atomique réduisant la densité des défauts, on obtient ainsi le silicium amorphe hydrogéné avec ces propriétés semiconductrices améliorées.

Dans ce qui va suivre, nous allons exposer les différentes techniques de dépôt du silicium amorphe en couches minces en mettant l’accent sur la technique du dépôt chimique en phase vapeur assisté par plasma PECVD (*Plasma Enhanced Chemical Vapor Déposition*) et la technique du dépôt chimique en phase vapeur assisté par filament chaud HWCVD (*Hot Wire Chemical Vapor Deposition*). On verra comment l’hydrogène déposé par décomposition du gaz silane SiH4 va permettre à l’hydrogène de passiver les liaisons pendantes. Cette perspective va abaisser la coordinance moyenne du réseau amorphe et le rendre plus flexible pour les applications en électronique.

**Figure I.12.** Nomenclature des matériaux cristallins en fonction de la taille de grain [18]
Références:


CHAPITRE II:

PANORAMA DES TECHNIQUES D’ÉLABORATION DU SILICIUM COUCHES MINCES (SCM)
II.1. Introduction :

La microélectronique est un domaine particulièrement exigeant, mais malgré les barrières technologiques qui freinent son évolution, elle est toujours distinguée par son aptitude à produire régulièrement de nouvelles générations de dispositifs et par une réduction importante de ses composants. Le matériau utilisé principalement pour la fabrication de ces composants est le silicium.

Nous présentons dans ce chapitre les principales techniques de dépôt du silicium couches minces.

II.2. Les couches minces :

II.2.1. Définition d’une couche mince :

Par principe, une couche mince est une fine couche d’un matériau déposé sur un autre matériau, appelé "substrat" dont l’une des dimensions qu’on appelle l’épaisseur a été fortement réduite de telle sorte qu’elle varie de quelques "nm" à quelques "μm" (typiquement ce sont des couches de 10 … 100 nanomètres d’épaisseur). Cette faible distance entre les deux surfaces limites entraîne une perturbation de la majorité des propriétés physiques, très souvent un tel petit nombre de couches atomiques possède des propriétés très différentes [1][2].

Par exemple la réflexion optique ou l'absorption peuvent être maîtrisées de manière très précise, de même pour la conductivité électrique. La différence essentielle entre le matériau à l'état massif et celui en couches minces est liée au fait que dans l'état massif on néglige, généralement avec raison le rôle des limites dans les propriétés, tandis que dans une couche mince ce sont, au contraire, les effets liés aux surfaces limites qui sont prépondérants. Il est assez évident que plus l'épaisseur sera faible plus cet effet de bidimensionnelle sera important.

En revanche, lorsque l'épaisseur d'une couche mince dépassera un certain seuil l'effet d'épaisseur deviendra minime et le matériau retrouvera les propriétés bien connues du matériau massif.

II.2.2. Intérêt et caractéristiques des couches minces :

L'intérêt accordé aux couches minces provient essentiellement de l'utilisation économique des matériaux en rapport avec les propriétés physiques et de la simplicité des technologies mise en œuvre pour leur réalisation (élaboration facile et peu coûteuse).
Une grande variété de matériaux est utilisée pour produire ces couches minces. Citons les métaux, alliages (possibilité de faire plusieurs alliages : binaires, ternaires, quaternaires), composés réfractaires (oxydes, nitrures, carbures), les composés intermétalliques et les polymères. 

La seconde caractéristique essentielle d'une couche mince est : quelle que soit la procédure employée pour sa fabrication, une couche mince est toujours solidaire d'un support sur lequel elle est construite (même s'il arrive parfois que l'on sépare le film mince du dit support). En conséquence, il est impératif de tenir compte de ce fait majeur dans la conception, à savoir que le support influence très fortement les propriétés structurales de la couche qui y est déposée. Ainsi, une couche mince d'un même matériau, de même épaisseur, pourra avoir des propriétés physiques sensiblement différentes selon qu'elle sera déposée sur un substrat isolant amorphe tel le verre, ou un substrat monocristallin de silicium par exemple. Il résulte, de ces deux caractéristiques essentielles d'une couche mince, la conséquence suivante : une couche mince est anisotrope par construction [3].

Les cellules PV dites couche mince (Thin-film) constituent ce que certains appellent les cellules de seconde génération car elles font historiquement suite aux cellules en silicium cristallin relativement épaisses. L'intérêt de la technologie couche mince vient de la faible quantité de matériaux nécessaire à la fabrication d'une cellule comparativement aux cellules classiques. Contrairement aux cellules de silicium cristallin dites de première génération, on ne dépose que la quantité de matériau photosensible efficace pour absorber l'essentiel du rayonnement solaire (quelques microns d'épaisseurs sont suffisants). Par ailleurs, on utilise des méthodes de fabrication moins coûteuses des cellules qui permettent une intégration totale.

Dans le cadre de cette thèse, nous nous sommes intéressés à l'élaboration et l'étude de couches minces de silicium déposée par les techniques PECVD et HWCVD pour les applications PV. Dans la section suivante, nous donnons une revue sur les principales techniques de dépôt du silicium en couches minces.

**II.3. Panorama des techniques de déposition du silicium couches minces SCM:**

La phase de déposition est élaborée par une réaction chimique, qui se produit généralement sur le substrat, entre espèces en phase vapeur. La source de vapeur doit donc être constituée d'espèces volatiles à des températures modérées mais susceptibles de produire des phases à haut point de fusion.
Le matériau solide est déposé à partir de précurseurs gazeux qui réagissent sur le substrat. Ce dernier est généralement chauffé pour fournir l’énergie d’activation nécessaire au déclenchement de la réaction chimique (qui peut être une simple réaction de décomposition ou une réaction de combinaison) et pour permettre une mobilité suffisante des atomes pour former la structure désirée. Les vapeurs des précurseurs sont généralement véhiculées par un gaz vecteur (qui peut lui-même être réactif).


Plusieurs procédés de fabrication des couches minces du silicium ont été développés depuis les années 70, ces méthodes font appel à des principes physiques qui déterminent les caractéristiques structurales des matériaux déposés dont la qualité du matériau déposé diffère d’un procédé à l’autre. Parmi ces techniques :

- **Méthodes utilisant une source solide :**
  - L’évaporation par effet joule sous vide
  - La pulvérisation cathodique

- **Méthodes utilisant une source gazeuse :**
  - La technique CVD (ChemicalVaporDeposition) : soit par voies thermique, soit par plasma.
  
  Certaines de ces méthodes se sont développées plus que d’autres.

La figure (II.1) ci-dessus résume d’une manière très fine, les étapes possibles du procédé de déposition en couches minces du Silicium.
II.3.1. Techniques d’élaboration physiques PVD : [4-6]

On distingue dans le procédé physique, trois exemples de techniques de dépôt, pouvant être appliquées dans des milieux plasma ou aussi du vide poussé.

II.3.1.1 Technique de pulvérisation cathodique :

Le principe consiste à bombarder une cible de silicium mono ou polycristallin servant de cathode, avec des ions d’argon généralement d’énergie suffisante afin de lui arracher des atomes voir figure (II-2). Les ions sont produits dans un plasma par application d’une décharge électrique continu ou en Radio-Fréquence(RF).

Le procédé RF est utilisé surtout pour pulvériser les matériaux isolants, car ceux-ci ne peuvent pas écouler les charges électriques apportées par les ions : pendant l’alternance négative, les
ions sont attirés pour pulvériser la cible alors que pendant l’alternance positive ils vont la décharger. Une hydrogénation du matériau peut se faire grâce à une dilution de H₂ dans le gaz de pulvérisation. Cette technique présente l’avantage de pouvoir fournir des espèces réactives sans avoir à chauffer ni le substrat ni la cible, ce qui permet de déposer quasiment tous les matériaux.

**Figure II.2** : Schéma de principe du dépôt par pulvérisation cathodique [4] [5].

**II.3.1.2 Technique d’évaporation thermique sous vide** :

L’évaporation thermique sous vide simple pour l’obtention des films sous vide va créer un plasma.

Le principe de fonctionnement consiste à la condensation de la phase vapeur du matériau à déposer sur un substrat. La pression de la vapeur du matériau étant supérieure à celle qui règne dans l’enceinte, les atomes diffusent rectilignement vers le substrat placé dans le sommet de l’enceinte voir figure (II.3). La vapeur peut être obtenue par divers processus de chauffage : le chauffage électrique par l’intermédiaire d’une résistance chauffante (effet Joule), introduction d’un champ magnétique (bombardement électronique, laser. En plus de sa simplicité, cette technique présente quelques avantages tels qu’une vitesse de dépôt assez élevée. Aussi elle assure une isolation du milieu extérieur (pas d’injection des gaz) et par la suite, une grande pureté.
Chapitre II : Panorama des Techniques d’élaboration du Silicium Couches Minces (SCM)

II.3.1.3 Technique d’ablation laser (Pulse Laser Deposition)

Le dépôt par ablation laser ne diffère pas trop du principe de dépôt par pulvérisation cathodique. Dans ce cas, l’excitation se fait en utilisant un faisceau laser d’impulsions focalisées de haute énergie sur la cible voir figure (II.4). Seuls les atomes qui ont une énergie de même ordre que celle de l’excitation participent au dépôt à la surface du substrat [7] [8]. Il existe d’autres techniques de dépôts dans cette catégorie telle que l’épitaxie par jet moléculaire, etc.

Figure II.3 : Schéma de principe d’évaporation thermique sous vide [6].

Cependant, il reste toujours difficile de contrôler la composition de la couche résultante de cette technique, notamment dans le cas des alliages à déposer.

Figure II.4 : Schéma de principe du dépôt par ablation laser.
II.3.2 Les méthodes d’élaboration chimiques : [8]

Les méthodes d’élaboration chimiques s’articulent autour des techniques du dépôt chimique en phase vapeur CVD voir figure (II.5) qui consiste à obtenir des couches minces à la suite de réactions chimiques qui présentent un milieu gazeux.

\[
\alpha\beta(\text{gaz}) \rightarrow \alpha(\text{gaz}) + \beta(\text{solide})
\]

Figure II.5: Mécanisme de dépôt chimique en phase vapeur CVD [8].

Les applications de ce procédé sont nombreuses. Elles concernent principalement : la microélectronique (isolants, semi-conducteurs, couches conductrices entrant dans la fabrication des transistors et des circuits intégrés, supraconducteurs), l’optique (lasers, fibres optiques), photovoltaïque (conversion du rayonnement solaire,…), la protection des pièces massives sensibles aux agressions mécaniques et/ ou chimiques, l’amélioration des propriétés des surfaces.

Le processus de dépôt est imité par des réactions chimiques qui peuvent être :
- Activées thermiquement (LPCVD, APCVD);
- Assistées par un plasma (PECVD) ;
- Assistées par filament chaud (HWCVD).

La décomposition thermique présente une faible concentration d’hydrogène, par contre pourcelle assistée par un plasma, la concentration d’hydrogène est comprise entre 5 à 30 %. Une opération de dépôt chimique en phase vapeur (CVD) activée thermiquement comporte généralement sept étapes :
Chapitre II : Panorama des Techniques d’élaboration du Silicium Couches Minces (SCM)

- Transfert de matière dans la phase gazeuse, de l’entrée du réacteur jusqu’à la surface du dépôt.
- Apport par conversion des espèces gazeuses jusqu’au voisinage du substrat;
- Réaction en phase gazeuse (pendant le transfert);
- Absorption du gaz précurseur sur la surface du solide;
- Diffusion des molécules absorbées en surface jusqu’aux sites de croissance;
- Réaction chimique éventuelle en surface : incorporation des atomes de dépôt (nucléation croissance);
- Désorption des produits de réaction;

-(a) transfert de matière des produits de réaction depuis la zone de dépôt jusqu’à la sortie du réacteur;
-(b) diffusion éventuelle d’atomes du dépôt vers le substrat.

Les gaz les plus couramment utilisés sont le silane (SiH₄) et à un degré moindre le disilane (Si₂H₆) ou le dichlorosilane (SiH₂Cl₂) pour ne mentionner que les plus importants.

Le disilane se décompose en phase gazeuse (T>300°C), en silane et silylène suivant la réaction suivante :

\[
\text{Si}_2\text{H}_6(\text{gaz}) \rightleftharpoons \text{SiH}_4(\text{gaz})+\text{SiH}_2(\text{gaz})
\]

Pour le silane

\[
\text{SiH}_4(\text{gaz}) \rightleftharpoons \text{SiH}_2(\text{gaz})+2\text{H}_2(\text{gaz})
\]

Pour le silylène

\[
\text{SiH}_2(\text{gaz}) \rightleftharpoons \text{Si(solid)}+\text{H}_2(\text{gaz})
\]

La vitesse de dépôt peut être ramenée à une expression de la forme :

\[
V_d = \text{Cte.} f(k_s, h_g).y \quad (\text{II. 1})
\]

Où \( k_s \) et \( h_g \) sont respectivement les constantes de vitesse de réaction et le coefficient de transfert de masse en phase gazeuse ;

\( y \) : La fraction molaire des espèces réactants.

Cette vitesse de dépôt obéit à deux cas selon la prépondérance de \( h_g \) devant \( k_s \) ou inversement.

Si \( h_g<k_s \) la vitesse \( V_d \) se ramène à :
Chapitre II : Panorama des Techniques d’élaboration du Silicium Couches Minces (SCM)

\[ V_d = \text{Cte. } k_s \]  

(II.2)

Comme \( k_s \), la vitesse de dépôt \( V_d \) est activée thermiquement et prend la forme d’une loi d’Arrhenius :

\[ V_d = V_{d0} \exp \left( -\frac{E_{ad}}{kT} \right) \]  

(II.3)

Où \( V_{d0} \) est une constante qui dépend de la pression et des débits et \( E_{ad} \) l’énergie apparente d’activation du dépôt.

Les méthodes de CVD sont nombreuses ; il existe des procédés CVD assistés par filament chaud (hot-wire CVD), assistés par laser (LCVD) et ceux assistés par plasma (PECVD). Citons quelque méthodes de CVD et leurs températures. Le tableau II.1 présente les méthodes de CVD et leur domaine de température.

<table>
<thead>
<tr>
<th>Méthodes de CVD</th>
<th>Domaine de température</th>
</tr>
</thead>
<tbody>
<tr>
<td>- Le dépôt chimique en phase vapeur assistés par laser (LCVD)</td>
<td>500-2500°C (du substrat) [9]</td>
</tr>
<tr>
<td>- Le dépôt chimique en phase vapeur à pression atmosphérique (APCVD)</td>
<td>400-1100°C (du substrat) [9].</td>
</tr>
<tr>
<td>Le dépôt chimique en phase vapeur à basse pression (LPCVD)</td>
<td>température de dépôt autour de 550°C</td>
</tr>
<tr>
<td>- Le dépôt chimique en phase vapeur assisté par plasma (PECVD)</td>
<td>Inférieure à 400°C du gaz [10].</td>
</tr>
<tr>
<td>- Le dépôt chimique en phase vapeur, assistés par filament chaud (Hot-WireCVD)</td>
<td>1625°C - 2027°C (du filament) [10].</td>
</tr>
</tbody>
</table>

Tableau III.1: les méthodes de CVD et leur domaine de température.

II.3.2.1 LCVD (Laser CVD)

Cette technique consiste à irradier, grâce à un faisceau laser continu ou pulsé, soit très localement la surface du substrat (auquel cas la réaction chimique a lieu par simple activation thermique), soit la phase vapeur de façon à provoquer l’excitation des molécules et ainsi
augmenter la réactivité des espèces gazeuses. Cette technique est aussi utilisée pour obtenir des dépôts dans des zones très localisées, notamment en micro-électronique, mais très limitée industriellement du fait de son coût.

II.3.2.2 Le dépôt chimique en phase vapeur à pression atmosphérique (APCVD) : [6]

Cette technique décrite par la figure II.6 a été utilisée à l’origine pour des dépôts CVD de semi-conducteurs, surtout à des températures très élevées autour de 1000 °C. Plus que pour le dépôt du silicium polycristallin ou amorphe, cette méthode était employée pour la croissance épitaxique des couches de silicium, ce qui est possible même à des température autour de 600 °C en utilisant du SiH₄Cl₂ et dessystèmes de purification de gaz[11]. Dans ce cas les vitesses de croissance ne sont plus très grandes (1 nm/ min). Les taux de transfert des espèces gazeuses et celle de la réaction de surfaces sont voisins. Dans le domaine de fabrication des couches amorphes à environ 600 °C, les vitesses atteignent environ 5-10 A°/ sec [9]. Dans l’industrie, l’APCVD a été largement remplacée par les dépôts à basse pression, car, dans ce cas, les espèces réactives diffusent plus rapidement, l’uniformité des dépôts s’en trouve améliorée.

![Figure II.6 : Schéma descriptif du principe de la technique APCVD.](image)

II.3.2.3Le dépôt chimique en phase vapeur à basse pression [9]:

La LPCVD (Low Pressure Chemical Vapor Deposition) est une technique de dépôt (figure II.7) qui se fait dans un four à paroi chaude à des températures de 550°C à 620°C [12]. Elle réalise notamment l’élaboration des couches minces de type silicium amorphe à 550°C et de type polycristallin à 620°C toutes les deux dopées au phosphore. Pour assurer la croissance du matériau à déposer, certaines conditions doivent être prises en considération telles que la température, la pression et le gaz dopant puisqu’elles influent sur la structure et la
caractérisation du matériau. De plus, c’est très rare d’avoir un matériau cristallisé avec une grande précision. Pour cela, les études actuelles montrent qu’il est préférable d’élaborer des couches minces en silicium puis on passe à un recuit de la couche à une température de 950°C qui ramène le matériau à un état de haute cristallinité [12].

**Figure II.7 :** Schéma descriptif du principe de la technique LPCVD[6] [9] [13].

II.3.2.4 Le dépôt chimique en phase vapeur assisté par plasma [12-18] :

Le mot plasma a été utilisé pour la première fois par le chercheur américain Irving Langmuir en 1928. Le PECVD est une technique qui favorise le dépôt des couches minces de type μ/nc-Si:H et α-Si:H. L’idée de base de la technique consiste à remplacer l’activation thermique (chauffage) par une activation plasmatique, ce qui permet un important abaissement de la température de dépôt (température ambiante). Cette technique connait une vaste réputation industrielle surtout dans le domaine de la microélectronique.

Cette technique consiste à réaliser un dépôt chimique en phase vapeur à basse pression, ce dépôt s’effectue normalement dans un four à mur chaud à des températures de l’ordre de 600°C.

Le gaz réactif est ionisé par formation d’un plasma généré par un champ électrique alternatif d’une fréquence de 13.56 MHz (cas général).

Turban [12] a étudié en détail les mécanismes de dissociation du silane dans un tel plasma :

\[
\text{SiH}_4(\text{gaz}) \rightarrow \text{SiH}_2(\text{gaz}) + 2\text{H}_2(\text{gaz})
\]

\[
\text{SiH}_2(\text{gaz}) \rightarrow \text{Si}(\text{solid}) + \text{H}_2(\text{gaz})
\]

a) Notion d’un plasma

Le plasma est un milieu réactif et ionisé. Il contient essentiellement des particules neutres comme les molécules, les atomes, les radicaux et d’autres charges tels que les électrons et les ions. Il est caractérisé par des propriétés différentes à celles des autres états de la matière.
(liquide, solide et gaz). Il est qualifié de quatrième état de la matière [14]. On peut l’obtenir en introduisant un gaz réactif sous l’effet d’un courant continu ou alternatif pour plusieurs domaines de fréquence: Plasma à basses fréquences, plasma à hautes fréquences, c’est le domaine des radiofréquences RF et plasma à très hautes fréquences, c’est le domaine des micro-ondes.

La figure (II.8) représente schéma représentatif d'un réacteur PECVD

**Figure II.8** : Représentation schématique du réacteur PECVD.

b) Le rôle du plasma

Le rôle du plasma est de mettre en jeu des espèces chimiques plus actives ce qui permet la réaction chimique. Ces espèces sont produites :

- soit par des collisions entre les molécules de gaz et les électrons énergétiques présents dans le plasma.
- soit à la surface du solide lors de l'impact ions-électrons ou de photons issus du plasma

Le rôle du plasma est un catalyseur pour les procédés PECVD.

Maintenant il est couramment adopté dans la technologie de conception des dispositifs microélectroniques et électroniques d’autant qu’il est à la base de dépôt des couches minces [13]. Il existe trois types de plasma dans la nature : plasmas chauds, plasmas thermiques et plasmas froids.
Les plasmas chauds possèdent une ionisation complète à des températures très élevées (T >10^6 K) [13] où les ions et les électrons partagent la même énergie cinétique.

Les plasmas thermiques sont des plasmas où l’ionisation est presque complète à des températures assez élevées (de 10^4 à 10^5) [17]; les ions et les électrons possèdent la même température et une énergie de l’ordre de l’électron Volt.

Les plasmas froids ou plasmas hors-équilibre à des températures de l’ordre de centaines de degrés (°C) [15]. Dans ce cas les électrons ont une quantité d’énergie pour assurer la production des réactions mais les ions ont une température élevée proche de celle des gaz où ils sont générés.

Ce genre de plasma est le plus utilisé dans les recherches scientifiques tel que le dépôt des couches minces, gravure, traitement de surface mais aussi dans certains domaines : médecine, électronique….

c) Principe de PECVD

Le principe consiste à appliquer une décharge électrique entre deux électrodes en présence d’un gaz qui s’ionise facilement (appelé précurseurs).

L’ionisation du gaz conduit à l’obtention d’espèces chargées ou non, libres telles que des ions, radicaux libres, atomes et molécules neutres ou excitées qui restent en température ambiante. Les électrons sont portés à haute température. Les collisions essentiellement inélastiques entre ces électrons libres et les molécules du gaz produisent les espèces précurseurs actives des réactions chimiques [16]. La figure (II.9) présente Schéma représentatif d’un plasma et les espèces réactifs. Les précurseurs utilisés pour le dépôt doivent contenir l’élément du dépôt.

Les films a-Si:H peuvent être déposées par plasma silane (SiH₄) [20], silane hydrogène (SiH₄/H₂) ou argon silane (SiH₄/H₂/Ar) [18].

La figure (II.10) décrit le schéma représentatif des mécanismes de croissance du silicium amorphe et microcristallin par PECVD.
Chapitre II : Panorama des Techniques d’élaboration du Silicium Couches Minces (SCM)

**Figure II.9** : Schéma représentatif d’un plasma et les espèces réactifs présents [18].

**Figure II.10** : Représentation schématique des mécanismes intervenant dans les plasmas de silane et conduisant à la croissance du silicium amorphe et microcristallin.

d) **Types de procédés PECVD** [18-24]

Nous différencions plusieurs types de procédés PECVD citons :

- ceux assistés par décharges radiofréquences (RF);
- ceux assistés par décharges micro-ondes (MW).
- et ceux de résonance cyclotronique électronique PECVD(ECR).
Le positionnement de la fréquence d'excitation (fex) par rapport aux fréquences caractéristiques du plasma (fpe, fpi) permet de différencier les techniques de dépôt par PECVD (Figure III.11)

**Figure II.11** : Fréquence d'excitation en fonction des fréquences caractéristiques du plasma [20].

**II.3.2.5 Le système de dépôt chimique en phase vapeur par filament chaud (HWCVD)** :

La figure (II-12) montre la disposition intérieure des accessoires dans la chambre de dépôt HWCVD. Elle est installée dans le même dispositif que celui de la technique PECVD. Les deux techniques possèdent presque les mêmes constituants tels que les systèmes de pompage et d’injection de gaz. Elles diffèrent seulement par la source d’excitation. A la place du plasma, la technique HWCVD est basée sur la dissociation des gaz par un filament chaud.

Le processus de dépôt par filament chaud se déroule selon les étapes suivantes :

1: Injection du gaz de dépôt sur la surface du filament (voir figure II-13).
2: L’évaporation des radicaux et de la collision en phase gazeuse.
3: Croissance du film sur la surface du substrat

**Figure II.12** : Représentation schématique du réacteur HWCVD.
Chapitre II : Panorama des Techniques d’élaboration du Silicium Couches Minces (SCM)

Figure II.13 : Chambre de dépôt par la technique HWCVD.

a) Rôle du filament

Les gaz sont dissociés thermiquement à cause de la haute température du filament. Donc il n’y a pas de décharge luminescente qui se produit lors de dépôt contrairement à la technique PECVD. La température élevée du filament a pour but d’introduire des fissurations aux sources gazeuses [21].

Figure II.14 : Taux de dépôt en fonction de la température de dépôt [23]

Pour déposer des couches de silicium, le silane SiH₄ est dissocié sous l’effet du filament chaud en donnant des atomes de silicium Si et d’hydrogène H. Les atomes de silicium réagissent avec les molécules SiH₄ et forment ensemble le Si₂H₄ qui contribue le plus à la formation descouches [20]. Donc à partir de cette procédure, on peut remarquer que la
température du filament est un paramètre très important puisqu’il influe à la fois sur le taux de dépôt voir figure (II.14) et sur les propriétés de la couche [23].

Deux régimes de température du filament se présentent [24] :

- Régime haute température : où la température du filament est comprise entre 1800°C et 2000°C.
- Régime faible température : où la température du filament est comprise entre 1400°C et 1600°C.

Le processus de croissance dépend fortement de la température du filament W. Pour le régime haut température, la nucléation se produit immédiatement à la surface du substrat avec une faible densité. Ceci permet d’avoir la croissance des cristallites. D’autre part, pour le régime faible température de W, la croissance se fait avec une grande densité et donc il n’apparaît que la phase amorphe dans la couche [24].

Trois types de filament sont souvent utilisés : le filament de tungstène W, le filament de Tantale Ta et le filament molybdène Mo. Le filament de tungstène peut changer de température soudainement ainsi qu’il peut subir une rupture lors du dépôt. Le filament de tantale présente une longue durée de vie [24].

Pour le silicium, les études ont montré que la contamination de la couche par le filament de tungstène est possible et que le taux de dépôt est plus sensible à la température de ce type de filament [24]. L’utilisation d’un filament de tungstène porté à des hautes températures entraine son évaporation et donc contamination des couches. Si ce filament est porté à des faibles températures, on aura la formation du silicate de tungstène sur le filament qui le fragilise [22].

Rappelons que dans cette thèse, On s’est basé sur les techniques PECVD et HWCVD et ce contexte, on a donné un tableau (II.2) qui présente un résumé sur les avantages et les inconvénients de chaque technique cité précédemment.
Chapitre II : Panorama des Techniques d’élaboration du Silicium Couches Minces (SCM)

<table>
<thead>
<tr>
<th>Technique</th>
<th>Avantages</th>
<th>Inconvénients</th>
</tr>
</thead>
</table>
| PECVD     | - La technique PECVD permet d’élaborer des dépôts en couches minces par voie sèche. Donc on n’a pas besoin de se débarrasser du solvant restant à la fin de la réaction par séchage ou évaporation. Contrairement aux autres techniques qui nécessitent ce type de traitement tel que la technique sol-gel.  
  - La vitesse de croissance assez élevée (de 20 à 80 nm/min) est un bénéfice dans le domaine de l’industrie [25]. | - La présence des électrons et des ions et des charges, ce qui contribue à la formation d’une poudre dans la chambre de dépôt.  
- Utilisation à haute température nécessaire pour l’activation de la réaction, ce qui provoque parfois une température insupportable par des substrats qui sont instables thermiquement |
| HWCVD     | - L’absence des électrons, des ions et des charges (contrairement à la technique PECVD) ce qui évite la formation d’une poudre dans la chambre de dépôt.  
  - Les précurseurs sont dissociés avec un taux élevé ce qui permet d’augmenter le taux de dépôt.  
  - La simplicité (pas de décharge).  
  - Elle présente un taux de dépôt élevé.  
  - Elle évite les effets néfastes des électrons, des ions et des charges de surface sur la couche. [22], [25], [26] | - L’utilisation d’un filament de tungstène porté à des haute températures entraîne son évaporation et donc contamination des couches [20]  
  - Quand le filament est porté à des faibles températures, on va avoir la formation du silicate de tungstène sur le filament qui le fragilise [22].  
  - Utilisation à haute température nécessaire pour l’activation de la réaction, ce qui provoque parfois une température insupportable par des substrats qui sont instables thermiquement  
  - Permet d’avoir des couches inhomogènes. |

**Tableau II.2 :** les avantages et les inconvénients de PECVD et HWCVD

**II.3.3. Méthodes de cristallisation**

Une fois le Silicium est déposé par une des différentes méthodes de déposition citées ci-dessus, d’autres opérations seront introduites sur ce matériau afin de lui améliorer son rendement et ses

53
performances, il est donc nécessaire de le traiter chimiquement à différentes températures par des techniques appelées : *techniques de cristallisation*.

Le principe de cristallisation d’un matériau consiste à fournir suffisamment d’énergie aux atomes de la couche déposée de manière à ce qu’ils puissent s’arranger selon le réseau cristallin du silicium. Le système passe alors de l’état métastable à l’état stable cristallin.

Lors de la cristallisation il se produit un phénomène appelé nucléation. Elle est définie par l’apparition des germes et la croissance des grains, ces phénomènes sont soumis à deux cinétiques différentes dépendantes de la température. C’est la compétition entre eux qui détermine la structure cristalline du silicium, la taille des grains, leur orientation cristallographique et la rugosité de la couche. La densité de défauts intra granulaires et inter granulaires dépend également de la température de recuit[25]. Ceci conduit au choix de paramètres donnant la meilleure qualité pour la couche.

La nucléation dans ces conditions se fait de préférence à l’interface couche-substrat. Il s’ensuit une croissance verticale des grains conduisant à une structure colonnaire.

**II.3.3.1 La cristallisation par laser**

Cette méthode s’effectue en phase solide et le silicium est fondu [26], elle a été très sollicitée depuis que le Silicium polycristallin est devenu le matériau de base des transistors destinés aux écrans plats. Ce type de cristallisation s’opère en déplaçant le front solide-liquide en laissant la zone fondue se refroidir.

L’avantage de cette technique est que le matériau est porté à très haute température et que les conditions de cristallisation sont nettement meilleures. Il s’ensuit des densités de défauts cristallins moindres qui conduisent à des propriétés électriques remarquables, proches de celle du monocristal. Ce procédé diffère selon le type de laser employé, Il existe deux types:

a- un laser à gaz excimère émettant dans l’*ultraviolet* car il fournit des densités d’énergie suffisantes. Cependant l’ultraviolet est très absorbé dans le silicium amorphe et la cristallisation par laser ne s’applique jusqu’à présent qu’aux couches très minces, de l’ordre de 100nm.

b- un laser solide de type YAG à balayage émettant dans le vert qui permet alors la fusion de couches d’une épaisseur supérieure à 200nm.

La qualité et la taille des grains varie selon la nature du laser : la cristallisation par laser excimé donne lieu à une nucléation homogène alors qu’avec un laser de type YAG, la totalité de la couche est fondue et les grains sont étirés par balayage.
II.3.3.2 Le recuit thermique rapide (RTA Rapid Thermal Annealing)

Le procédé de recuit rapide se réfère à un procédé de traitement [27], qui porte le substrat à haute température allant de 700 à 800°C, obtenue par chauffage à l’aide de lampes de grande intensité durant un temps très court, de quelques secondes à une minute. Le substrat doit être redescendu en température assez lentement, sinon il se brise (à cause du choc thermique).

Ces procédés sont utilisés dans une large variété d'applications dans la fabrication de semiconducteurs incluant l'activation des dopants, l'oxydation thermique, la mise en forme de métaux et le dépôt par voie chimique.

II.3.3.3 Le recuit SPC assisté par métal ou MILC

Cette technique fait appel à un métal, en général l'aluminium ou le nickel [30]. Une fine couche métallique est déposée sur une couche de silicium amorphe. L'ensemble subit un recuit SPC au cours duquel les atomes du métal diffusent dans la couche de silicium induisant une cristallisation MIC (Metal Induced Crystallization). L'avantage de ce procédé est la possibilité de diminuer la température de recuit (jusqu’à 500°C) et d'obtenir des grains plus larges que ceux obtenus par un recuit SPC conventionnel. La vitesse de cristallisation (MILC) est élevée et peut être augmentée par application d'un champ jusqu'à 20µm/h pour un champ électrique de l'ordre de 50V/cm[31]. L'inconvénient majeur reste cependant la présence d'atomes de métal dans la couche, préjudiciables en application de conversion photovoltaïque du fait de leur rôle de "tueur de durée de vie".

Afin d’optimiser les propriétés du silicium un grand nombre d’études a été entrepris, car malgré son inconvénient cette méthode reste la plus adaptée dans l’industrie.

II.4. Conclusion :

Dans ce chapitre nous avons présenté les principales techniques de croissance des couches de silicium soit physique ou chimique. Les méthodes CVD présentent plusieurs performances par rapport à la PVD citons par exemple:
- Une meilleure conformité des films due à la participation active de la surface du substrat dans le procédé de dépôt
- Un meilleur contrôle de la composition
- Les dépôts peuvent être sélectifs dans certaines conditions
- Les recuits ne sont pas toujours nécessaires
Chapitre II : Panorama des Techniques d’élaboration du Silicium Couches Minces (SCM)

- La capacité de traitement importante qui permet de baisser les coûts de production.

Par suite, on a fait l’accent sur les deux techniques de dépôt chimique (PECVD et HWCVD) qui feront l’objectif de la thèse.

Donc, le plasma en général est généré par un signal alternatif RF, sa fréquence autours de 13.56MHz par contre le filament chaud est généré par une tension DC. Les paramètres de dépôt tels que le débit de diborane ou phosphine, le rapport entre silane et hydrogène, la puissance de plasma, et la température de filament peuvent donner naissance à des couches de silicium dont les propriétés physiques, électriques et optiques très différentes affecteront d’une façon directe les performances du dispositif destiné pour une application spécifique (électronique de commande tels que Les TFT « Thin Film Transistors ») et conversion photovoltaïque.
Références :


CHAPITRE III:
GÉNÉRALITÉS SUR LES HÉTÉROSTRUCTURES
Chapitre III : Généralités sur les hétérostructures

III.1 Introduction:

L'hétérojonction est à la base des télécommunications longue distance, des lecteurs CD ou DVD, des appareils photo numériques. En effet, les hétérojonctions permettent de créer des composants à semiconducteurs (lasers, diodes électroluminescentes, photodétecteurs, cellules solaires) plus performants que leurs équivalents à homojonctions.

Une hétérojonction est une jonction formée de deux semiconducteurs différents ou d'un métal et un semiconducteur. La structure de bandes dépend des paramètres des deux matériaux en contact : la valeur des largeurs des bandes interdites, des affinités électroniques et des niveaux de dopage.

Contrairement aux homojonctions, les propriétés de transport des porteurs dans ces structures sont généralement dominées par des phénomènes de piégeage au niveau de l'interface. Le transport dans la zone de déplétion est lié aux niveaux d’énergie présents à l’interface (combinaison des recombinations et du courant tunnel).

Ce chapitre sera consacré à un rappel théorique sur les propriétés électriques des hétérojonctions métal/semiconducteur et semiconducteur/semioconducteur. Nous exposerons les différents mécanismes de transport qui régissent leur fonctionnement ainsi que les formalismes mathématiques qui déterminent leurs caractéristiques électriques.

III.2 L’hétérojonction Métal /semiconducteur:

Dans la pratique, les contacts (MS) peuvent se comporter soit comme des contacts redresseurs (Schottky) ou des contacts ohmiques.

La figure (III.1) illustre la caractéristique de la densité du courant en fonction de la tension pour un contact redresseur et un contact ohmique. Le contact redresseur bloque le passage du courant en inverse et possède une faible tension de seuil en direct comme le montre la figure (III.1a). Le contact ohmique, quant à lui, laisse passer le courant quelle que soit la polarisation comme le montre la figure (III.1b)[2]
Chapitre III : Généralités sur les hétérostructures

Figure III.1 : Courbe caractéristique de la densité de courant J en fonction de la tension V (a) pour un contact Schottky ; (b) pour un contact ohmique [1]

Lorsqu’un métal est mis en contact avec un semiconducteur[3-6], l’échange des électrons ou trous est conditionné par la différence éventuelle des travaux de sortie des deux matériaux (\(q\Phi_m\) pour un métal et \(q\Phi_{sc}\) pour un semiconducteur).

On note que le travail de sortie du métal \(q\Phi_m\) est l’énergie nécessaire pour faire éjecter du métal un électron depuis le niveau de Fermi d’énergie \(E_{Fsc}\). De même, le travail de sortie du semiconducteur \(q\Phi_{sc}\) est défini comme étant l’énergie qu’il faut fournir pour extraire un électron depuis le niveau de Fermi \(E_{Fsc}\). L’affinité électronique \(q\chi\) est défini par la différence énergétique entre le niveau du vide et celui de la bande de conduction du semiconducteur [7].

III.2.1 Le contact redresseur:

III.2.1.1 Semiconducteur de type N:

Lorsque le travail de sortie métal est supérieur au travail de sortie du semiconducteur (\(q\Phi_m > q\Phi_{sc}\)) voir figure (III.2.a) ; les électrons de la bande de conduction du semiconducteur passent vers le métal jusqu'à alignement des deux niveaux de Fermi. Il en résulte une courbure des bandes vers le haut.

Le passage des électrons dans le métal laisse dans le semiconducteur une charge positive (cette charge est due aux donneurs ionisés). Cependant, les électrons s'accumulent à la surface du métal. La hauteur de la barrière de potentiel (dite aussi potentiel électrique) vue du côté du semiconducteur est alors égale à la différence entre le travail de sortie du métal et celui du semiconducteur. Un champ électrique apparaît entre les deux matériaux repoussant les électrons du semiconducteur loin de la surface, il y a donc apparition d’une zone appauvrie en électrons au
niveau du semiconducteur au voisinage de l’interface. La zone de charge d’espace d’accumulation du côté métal est négligeable en raison de la très forte densité d’électrons libres qui se présentent, cette dernière ne s’étend que sur quelques Angströms et conduit à une courbure des bandes dans le métal caractérisé par l’énergie de la barrière de Schottky :

\[ \Phi_B = \Phi_m - \chi \]  

(III. 1)

La barrière présentée aux électrons qui veulent transiter du semiconducteur vers le métal \( qV_d \) est donnée par:

\[ qV_d = q\Phi_m - q\Phi_{sc} \]  

(III. 2)

![Figure III.2: Diagrammes d’énergies à l’équilibre thermodynamique après Contact pour SC type (n)(a), SC type (p) (b)](image)

### III.2.1.2 Semiconducteur Type P:

Lorsque le travail de sortie du semiconducteur est plus important que celui du métal \( (q\Phi_m < q\Phi_{sc}) \) voir figure (III.2.a), les trous passent du semi-conducteur vers le métal, il apparaît un enrichissement des trous à la surface du métal.

Un champ électrique apparaît entre les deux matériaux repoussant les trous du semi-conducteur loin de la surface, il y a donc apparition d’une zone appauvrie en trous au niveau du semi-conducteur au voisinage de l’interface. La zone de charge d'espace d’accumulation du côté
métal est négligeable en raison de la très forte densité des trous libres qui se présentent, cette dernière ne s’étend que sur quelques Angströms et conduit à une courbure des bandes dans le semiconducteur.

La barrière présentée aux trous qui veulent transiter du métal vers le semiconducteur $q \Phi_B$ est donnée par:

$$\Phi_B = (\chi + E_g) - \Phi_m$$  \hspace{1cm} (III. 3)

La barrière présentée aux électrons qui veulent transiter du semiconducteur vers le métal $qV_d$ est donnée par:

$$qV_d = q\Phi_{sc} - q\Phi_m$$  \hspace{1cm} (III. 4)

$\Phi_B$: Barrière de potentiel dans le métal  
$\Phi_{sc}$: Travail de sortie du métal  
$\chi$: affinité électronique

### III.2.2 Le contact ohmique

#### III.2.2.1 Semiconducteur de type N:

Lorsque le travail de sortie du semiconducteur est plus important que celui du métal ($q\Phi_m < q\Phi_{sc}$) voir figure (III.3.a), l’échange des électrons se fait dans l’autre sens, c’est à dire du métal vers le semiconducteur.

Figure III.3: Diagrammes d’énergies à l’équilibre thermodynamique après contact pour SC type (n)(a) ; SC type (p) (b).
Chapitre III : Généralités sur les hétérostructures

A l’établissement de l’équilibre, les deux niveaux de Fermi s’alignent, une zone riche en électrons apparaît au voisinage de l’interface (une zone d’accumulation), le contact est ohmique.

III.2.2 2 Semi-conducteur de type P:

Lorsque le travail de sortie du semi-conducteur est plus faible que celui du métal ($q \Phi_m > q \Phi_{sc}$), l’échange des trous se fait dans l’autre sens, c’est à dire du métal vers le semi-conducteur.

A l’établissement de l’équilibre, les deux niveaux de Fermi s’alignent, une zone riche en trous apparaît au voisinage de l’interface (une zone d’accumulation), le contact est ohmique.

III.2.3 La zone de charge d’espace:

La courbure des bandes d’énergie se produit dans une zone d’énergie variant de $qV_d$ telle que représentée sur la figure (III.3). $V_d$ correspond au potentiel interne à l’équilibre thermodynamique ou encore « built-in potential » en anglais puisqu’il est créé par fabrication. C’est cette barrière de potentiel que doivent vaincre les électrons de la bande de conduction du semi-conducteur pour passer dans le métal. Ce potentiel $V_d$ est compté positivement dans le sens métal-semi-conducteur.

Pour déterminer l’extension de cette zone, nous utilisons l’équation de Poisson. Dans un modèle unidimensionnel et en supposant les dopages constants, nous pouvons écrire [8] :

\[
\frac{\partial^2 V}{\partial x^2} = - \frac{\rho}{\varepsilon_r \varepsilon_0} \quad (\text{III. 5})
\]

\[
\frac{\partial E}{\partial x} = \frac{\rho}{\varepsilon_r \varepsilon_0} = \frac{q}{\varepsilon_r \varepsilon_0} (p - n + N) \quad (\text{III. 6})
\]

Avec $n$: la concentration des électrons, $p$: la concentration des trous, $N$: le dopage, $\varepsilon_r$: la permittivité relative et $\varepsilon_0$: la permittivité du vide.

En première approximation, nous pouvons négliger dans la zone de charge d’espace $p$ et $n$ devant $N$.

Cette hypothèse est bien évidemment fausse en limite de zone lorsque la concentration des porteurs libres avoisine celle des ions dopants. Dans ce cas il faut intégrer complètement l’équation et nous retrouvons la formule de Kingston Neustader[8].

\[
E(x) = \frac{qN}{\varepsilon_r \varepsilon_0} (x - W) \quad (\text{III. 7})
\]
Chapitre III : Généralités sur les hétérostructures

\[ V(x) = - \int E(x) \, dx = \frac{qN}{\varepsilon_r \varepsilon_0} \left( Wx - \frac{x^2}{2} \right) + \text{cste} \quad (\text{III. 8}) \]

Pour \( x=W \), \( V(x)=V_d \)

\[ V_d = \frac{qN}{\varepsilon_r \varepsilon_0} \left( \frac{W^2}{2} \right) \quad (\text{III. 9}) \]

On déduit :

\[ W = \sqrt{\frac{2\varepsilon_r \varepsilon_0}{qN} V_d} \quad (\text{III. 10}) \]

S est la surface de la grille métallique et \( \varepsilon_r \) : la permittivité du semiconducteur.

### III.2.4 Structure Métal /semiconducteur polarisée :

En polarisation directe, on applique une tension positive \( V \) sur la structure métal-semiconducteur le (+) sur le côté métal, le (-) sur le côté semiconductor). La barrière de potentiel du semiconducteur \( V_i \) diminue (de \( V_d \) à \( V_d-V \)), ce qui donne la possibilité à un grand nombre d'électrons de passer du semiconducteur vers le métal. Dans ce cas, un courant net du semiconducteur est observé parce que la barrière du métal \( \Phi_B \) ne change pas voir figure (III.4).

![Diagramme de bandes d'énergie de la diode Schottky en polarisation directe](image)

**Figure III.4** : Diagramme de bandes d’énergie de la diode Schottky en polarisation directe  

En inversant la polarisation, la barrière \( V_d \) du semiconducteur augmente de \( V_i \) à \( V_d+V \). Un petit courant inverse est observé circulant du métal vers le semiconducteur voir figure (III.5).
Figure III.5: Diagramme de bandes d’énergie de la diode Schottky en polarisation inverse.

III.2.5 Capacité de la structure Métal/ Semiconducteur :

La présence de la zone de charge d'espace génère une capacité statique donnée par:

\[
C(V) = \frac{\varepsilon_r}{W(V)} S
\]  

(III.11)

\[
C(V) = S \sqrt{\frac{q\varepsilon_r \varepsilon_0 N}{2(V_d - V)}}
\]  

(III.12)

Soit la capacité à l’équilibre (V=0):

\[
C(0) = S \sqrt{\frac{q\varepsilon_r \varepsilon_0 N}{2V_d}}
\]  

(III.13)

III.2.6 Mécanismes de transport dans le contact Schottky :

Dans cette partie, on décrit les différents phénomènes responsables du transport des porteurs de charges dans les diodes Schottky.

Le transport du courant dans le contact métal-semiconducteur est dû principalement aux porteurs de charges majoritaires contrairement à la diode p-n où le courant est dû aux porteurs de charges majoritaires et minoritaires [9]. La figure (III.6) illustre les cinq mécanismes de base pour les courants existants dans le contact Schottky en polarisation directe.
Figure III.6 : Mécanismes de transport des courants existants dans le contact Schottky polarisé avec une tension positive : (a) SC type (n), (b) SC type (p).

On cite alors les mécanismes suivants :

(1.6): Emission des trous ou des électrons du semiconducteur vers le métal à travers la barrière \( \Phi_B \), c’est le mécanisme dominant pour les contacts Schottky avec des semiconducteurs à dopage modéré à la température ambiante.

(2.7): Courant des trous ou des électrons à travers la barrière \( \phi_B \) par effet tunnel. Ce courant est très important dans les semiconducteurs fortement dopés et il est responsable du processus de conduction dans la plus part des contacts ohmiques.

(3.8): Courant de recombinaison dans la zone de charge d’espace identique à celui de la jonction p-n.

(4.9): Diffusion des trous ou des électrons dans la région de déplétion.

(5.10): Diffusion des électrons ou des trous du métal dans le semiconducteur.

III.2.6.1 Courant de l’émission Thermoïonique :

La théorie qui modélise le courant thermoïonique [10], [11], est basée sur les suppositions suivantes :

- \( q \Phi_B \ll kT \)
- L’équilibre thermique est établi dans le plan qui détermine l’émission de porteurs de charges.
- L’existence d’un flux de courant qui n’affecte pas cet équilibre.
Alors, on peut superposer deux flux de courant dans le contact Schottky, l’un circule du métal vers le semiconducteur, l’autre du semiconducteur vers le métal. En tenant compte de ces suppositions, le courant dépend seulement de la hauteur de la barrière. Le courant traversant le métal est donnée par la relation (III.14). Ce courant dépend de la concentration des trous ou des électrons ayant suffisamment d’énergie pour franchir la barrière de potentiel $\Phi_B$.

$$I_{S\rightarrow m} = ST^2A^*\exp\left(-\frac{q\Phi_B}{kT}\right)\exp\left(\frac{qV}{kT}\right)$$ (III.14)

$$A^* = \frac{4\pi qm^*k^2}{h^3}$$ (III.15)

S: surface de la diode

$A^*$ : constante de Richardson de l’émission thermoïonique

T : température

$m^*$ : masse effective des porteurs de charge électrons ou trous

h : constante de Planck

V : tension appliquée.

On définit le courant de saturation :

$$I_{th0} = ST^2A^*\exp\left(-\frac{q\Phi_B}{kT}\right)$$ (III.16)

Etant donné que la hauteur de la barrière pour les électrons circulant du métal vers le semiconducteur reste la même sous tension, le flux du courant dans le semiconducteur n’est pas affecté par la tension appliquée. Ce courant est égal au courant circulant du semiconducteur vers le métal à l’équilibre thermique.

$$I_{m\rightarrow S} = -SAT^2A^*\exp\left(-\frac{q\Phi_B}{kT}\right)$$ (III.17)

Le courant total dans le contact métal-semiconducteur est la somme des deux courants $I_{m\rightarrow S}$ et $I_{S\rightarrow m}$ :

$$I_{th} = ST^2A^*\exp\left(-\frac{q\Phi_B}{kT}\right)\left[\exp\left(\frac{qV}{kT}\right) - 1\right]$$ (III.18)
Chapitre III : Généralités sur les hétérostructures

\[ I_{th} = I_{th0} \left[ \exp \left( \frac{qV}{kT} \right) - 1 \right] \]  
(III.19)

### III.2.6.2 Courant de Diffusion :

Le modèle théorique qui prédit le courant de diffusion proposé par Schottky [12] est basé sur les suppositions suivantes :

- \( q\Phi_B \gg kT \)
- L’effet des collisions des électrons dans la région de déplétion est inclus (diffusion).
- La concentration des porteurs de charge à \( x=0 \) et \( x = W \) (largeur de la région de déplétion) n’est pas affectée par le flux du courant.
- La concentration de dopage est inférieure à la densité effective d’états dans les bandes de conduction \( N_c \) et de valence \( N_v \) du semicondcteur et le niveau de Fermi est de quelques ordres de \( kT \) en dessous du niveau de conduction \( E_v \) pour les trous, au dessus du niveau de conduction \( E_c \) pour les électrons.

Le courant total modélisé par Schottky est donnée par la relation suivante :

\[ I_D = S \mu N E \exp \left( - \frac{q\Phi_B}{kT} \right) \left[ \exp \left( \frac{qV}{kT} \right) - 1 \right] \approx I_{D0} \left[ \exp \left( \frac{qV}{kT} \right) - 1 \right] \]  
(III.20)

\( \mu \) : mobilité des porteurs de charges ;
\( N \) : densité effective d’états dans la bande de valence ou de conduction du semiconducteur ;
\( E \) : champ électrique maximum à l’interface métal-semiconducteur (pour le Si : \( E=2.5.10^5 \) V/m) ;
\( V \) : tension appliquée.

On remarque bien que les expressions du courant de diffusion et de l’émission thermoïonique sont très similaires. Cependant, l’expression du courant de saturation \( I_{D0} \) de la théorie de diffusion dépend de la tension appliquée et est moins sensible à la température comparé à celle du courant de saturation \( I_{th0} \) de la théorie de l’émission thermoïonique.

### III.2.7 Diode Schottky réelle:

En réalité dans le contact MS, on a :

- Entre le métal et le semiconducteur une couche interfaciale \( \delta \). Cette dernière est transparente aux électrons et est le siège d’une différence de potentiel.
Chapitre III : Généralités sur les hétérostructures

- Des états de surface de Bardeen[13].
- Des pièges profonds à l'intérieur de la bande interdite.

C'est pourquoi les valeurs de la hauteur de la barrière mesurées expérimentalement diffèrent de celles déterminées théoriquement.

Un diagramme énergétique bien détaillé sur le contact Schottky réel est illustré dans la figure(III.7) pour les semiconducteurs de type n et P.

Les paramètres, $\Delta$ et $\delta$ sont respectivement, la chute de tension à travers la couche d'isolant d'interface, et l'épaisseur de la couche d'isolant. Le paramètre $\Phi_0$ est communément défini comme le niveau neutre des états de surface pris du bord de la bande de surface semi-conductrice [14]. Une expression générale de la barrière $\Phi_B$ de la structure métal-semiconducteur est obtenue sur la base de suppositions suivantes:
- la transparence aux électrons de l'interface métal-semiconducteur.
- les états d’interfaces par unité de surface par unité d’énergie sont une propriété de la surface du semiconducteur et ils sont indépendants du métal.

\[
\Phi_B = C_2(\Phi_m - \chi) + (1 - C_2)(E_g - \Phi_0)
\]  \hspace{1cm} (III.21)

**Figure III.7:** Diagramme énergétique de la diode Schottky de type n(a) et de type p (b).

- **Semiconducteur type n:**

Les électrons circulant du métal vers le semiconducteur doivent franchir une barrière de potentiel $\Phi_B$ donnée par la formule suivante:
Chapitre III :  

Généralités sur les hétérostructures

Où $C_2$ est un paramètre caractérisant les propriétés d’interface donné par l’équation :

$$C_2 = \frac{\varepsilon_i}{\varepsilon_i + q^2 \delta N_{ss}} \quad \text{(III. 22)}$$

Lorsque $N_{ss}$ tend vers l’infinie, $C_2=0$ :

$$\Phi_B = (E_g - \Phi_0) \quad \text{(III. 23)}$$

Dans ce cas, la barrière de potentiel est indépendante du travail de sortie du métal, elle est déterminée entièrement par les propriétés du semiconducteur à la surface.

Lorsque $N_{ss}=0$, $C_2=1$

$$\Phi_B = (\Phi_m - \chi) \quad \text{(III. 24)}$$

Cette équation définit la barrière d’un contact Schottky idéal où les effets des interfaces sont négligés.

- **Semiconducteur type P**:

Les trous circulant du métal vers le semiconducteur doivent franchir une barrière de potentiel $\Phi_B$ donnée par la relation suivante:

$$\Phi_B = C_2 (E_g - \Phi_m + \chi) + (1 - C_2) \Phi_0 \quad \text{(III. 25)}$$

Lorsque $N_{ss}$ tend vers l’infinie, $C_2=0$ :

$$\Phi_B = \Phi_0 \quad \text{(III. 26)}$$

Dans ce cas, la barrière de potentiel est indépendante du travail de sortie du métal et l’énergie du gap. Elle est déterminée entièrement par les propriétés du semiconducteur à la surface.

Lorsque $N_{ss}=0$, $C_2=1$ :

$$\Phi_B = (E_g - \Phi_m + \chi) \quad \text{(III. 27)}$$
Cette équation définit la barrière d’un contact Schottky idéal où les effets des interfaces sont négligés.

**II.2.7.1 Courant Thermoïonique de la diode réelle :**

Gard et Rhoderick[15] ont établi l’expression du courant thermoïonique en présence des états d’interface et d’une couche interfaciale; elle est donnée par:

\[
I_{th} = ST^2A^* \exp \left(-\chi^{1/2}\delta \right) \exp \left(-\frac{q\Phi_B}{kT} \right) \left[\exp \left(\frac{qV}{nkT}\right) - 1 \right]
\]

(III. 28)

où \( n \) est le facteur d’idéalité et \( \chi \): la hauteur de barrière moyenne présentée par le film (ou la couche interfaciale).

**II.2.7.2 Courant de Génération-recombinaison**

Précédemment, nous avons calculé le courant traversant la structure en négligeant les phénomènes de génération-recombinaison dans la zone de charge d'espace. En fait, la zone de charge d'espace est le siège de générations thermiques et de recombinaisons [13].

Lorsque le semiconducteur présente des centres profonds de génération-recombinaison, alors sous polarisation directe, les porteurs peuvent se recombiner. C’est la recombinaison des paires électron-trou assistée par des défauts.

Lorsque le semiconducteur présente des centres profonds de Génération-recombinaison, sous polarisation inverse et dans la zone désertée, des paires électron-trou peuvent être générés. C’est la génération des paires électron-trou assistée par défauts.

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

\[
I_{GR} = I_{GR0} \left[\exp \left(\frac{qV}{2kT}\right) \right]
\]

(III.29)

Dans ce cas le facteur d’idéalité est égal à 2 et \( I_{GR0} \) le courant de saturation de génération-recombinaison s’exprime par [17]:
Chapitre III : Généralités sur les hétérostructures

\[ I_{GR0} = \frac{SqWn_i}{\tau} \]  \hspace{1cm} (III. 30)

\( \tau \): la durée de vie des porteurs.

Avec

\[ W(V) = \sqrt{\frac{2\varepsilon_s(V_d - V)}{qN}} \]  \hspace{1cm} (III. 31)

### III.2.7.3 Courant Tunnel

Pour les semiconducteurs fortement dopés ou pour les applications à basse température, le courant par effet tunnel devient le mécanisme dominant pour le transport de charges. La formulation de ce courant est basée sur les travaux de Padovani et Straton [16]. La contribution de ce courant dépend de l’énergie thermique \( kT \) et de \( E_{00} \) définie par :

\[ E_{00} = \frac{qh}{4\pi} \sqrt{\frac{N}{m_{h,t}^* \varepsilon_s}} \]  \hspace{1cm} (III. 32)

Avec :

\( N \): concentration des porteurs de charges

\( \varepsilon_s \): permittivité électrique du semiconducteur.

\( m_{h,t} \): la masse effective des trous ou électrons dans le semiconducteur,

\( h \): la constante de Planck \( (6.63 \times 10^{-34} \text{ J.S}) \).

\[ I_{TU} = I_{TU0} \exp \left(\frac{qV}{E_0}\right) \]  \hspace{1cm} (III. 33)

Le terme \( E_0 \) s’exprime sous la forme :

\[ E_0 = E_{00} \coth \left(\frac{E_{00}}{kT}\right) \]  \hspace{1cm} (III. 34)

\( E_{00}, E_0 \) représentent les énergies caractéristiques du semiconducteur relatives à la probabilité de transmission par effet tunnel. Lorsque la valeur de \( N \) donnée par \( E_{00} \) est plus élevée que le dopage du semiconducteur, on dit que le courant tunnel est assisté par des défauts présents en surface.
[17]. \( I_{TU0} \) est le courant de saturation tunnel calculé par Crowell et Rideout [18]: Pour le SC de type n ou P:

\[
I_{TU0} = \frac{sqA^*T\pi exp\left(\frac{-qV_{n,p}}{kT} - q\left(\frac{\Phi_B + V_{n,p}}{E_0}\right)\right)}{k\cosh\left(\frac{qE_{00}}{kT}\right)}
\]  

(III.35)

\( V_{n, V_p} \) est la différence de potentiel entre le niveau de Fermi et la bande de conduction ou de valence dans la région neutre pour un semiconducteur (n) et (p) respectivement.

En plus, à cause de la haute de la valeur du champ électrique, un courant de fuite (edge leakage) peut avoir lieu au bord du contact ohmique ou à l’interface du métal-semiconducteur.

### III.2.7.4 Modèle de Werner

Les techniques expérimentales utilisées pour la mesure de la barrière \( \Phi_B \) de la diode Schottky sont : les caractéristiques courant-tension (I-V), les mesures capacité-tension (C-V) et les mesures photoélectriques. Bien que la majorité des modèles interprétant la formation de la barrière de potentiel dans le contact Schottky suppose une interface métal-semiconducteur homogène, plusieurs anomalies ont été observées dans la valeur du facteur d’idéalité n et de la barrière \( \Phi_B \) [10].

Warner et son équipe de recherche [19] ont proposé un modèle de distribution spatiale de \( \Phi_B \) de type gaussien pour expliquer ces anomalies observées dans le contact Schottky.

En effet, l’analyse des données expérimentales s’appuyant sur le modèle homogène, a révélé plusieurs anomalies dont un facteur d’idéalité n supérieur à 1. L’origine de cette anomalie n’a pas trouvé une explication convaincante.

L’une des origines possibles de ces anomalies observées et non interprétées avec la théorie thermoïonique (qui suppose un contact parfait entre le métal et le semiconducteur), sont les fluctuations de la barrière de potentiel \( \Phi_B \), il s’agit plus exactement de l’inhomogénéité spatiale de la barrière de potentiel \( \Phi_B \). En effet, le modèle de la barrière inhomogène tient en compte l’effet de la rugosité de l’interface entre le métal et le semiconducteur et les alternances spatiales de la barrière \( \phi_B \) qui en résultent. Dans ce modèle, la barrière \( \Phi_B \) est supposée répartie de façon spatiale continue selon une loi gaussienne de valeur moyenne \( \overline{\Phi_B} \) et de déviation standard \( \sigma \) voir équation (III.36).
La figure (III.8) montre la fluctuation spatiale de la barrière de potentiel à l’interface de la diode Schottky [19].

**Figure III.8** : Diagramme énergétique à deux dimensions d’un contact métal-semiconducteur inhomogène, c’est cette forme ‘montagne’ qui donne un facteur d’idéalité n>1 dans les caractéristiques (I-V) pour SC type n (a) ; SC type p (b).

\[
P(\Phi_B) = \frac{1}{\sigma \sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(\Phi_B - \overline{\Phi_B})^2}{2\sigma^2}\right) \quad \text{(III.36)}
\]

Le courant I est relié à la tension V par la relation :

\[
I = \int i(V, \Phi_B) P(\Phi_B) d\Phi_B \quad \text{(III.37)}
\]

La solution analytique de l’équation (III.37) est représentée dans l’équation suivante :

\[
I = I_S \exp\left(\frac{q(V - IR_S)}{n_{app}kT}\right) - 1
\]

\[
I_S = SAT^2A^* \exp\left(-\frac{q\Phi_{app}}{kT}\right) \quad \text{(III.39)}
\]

Le \(\Phi_B\) et n dans le modèle de Werner nommé \(\Phi\) apparent \(\Phi_{app}\) et n apparent \(n_{app}\)
\[ \Phi_{ap} = \Phi_B(T = 0) - \frac{q\sigma^2}{2kT} \quad (\text{III.} 40) \]

\[ \left( \frac{1}{n_{ap}} - 1 \right) = -\rho_2 + \frac{q\rho_3}{2kT} \quad (\text{III.} 41) \]

\( \rho_2 \) et \( \rho_3 \) sont des coefficients de tension indépendants de la température et quantifiant la déformation de la distribution de la barrière de potentiel lors de l’application d’une tension [20].

Si on introduit le logarithme Népérien à l’équation (III.39), on obtient l’équation suivante :

\[ \ln \left( \frac{I_S}{T^2} \right) = \ln(SA^*) - \frac{q}{k} \Phi_{B0} \frac{1}{T} + \frac{1}{2} \left( \frac{q\sigma}{kT} \right)^2 \quad (\text{III.} 42) \]

En tenant en compte les suggestions de Chand et Kumar [21-22], la barrière de potentiel \( \Phi_B \) et la déviation standard \( \sigma \) varient tous les deux linéairement avec la tension appliquée \( V \) selon les équations suivantes :

\[ \Phi_B - \Phi_{B0} = ZV \quad (\text{III.} 43) \]

\[ \bar{\sigma} - \sigma = \zeta V \quad (\text{III.} 44) \]

\( Z \) et \( \zeta \) : respectivement la variation linéaire de barrière de potentiel \( \Phi_B \) et la déviation standard \( \sigma \) avec la tension appliquée \( V \) [23].

\[ \left( \frac{1}{n_{ap}} - 1 \right) = -Z + \frac{q\sigma \zeta}{kT} \quad (\text{III.} 45) \]

En une identification entre (III.45) et (III.41) on obtient (III.46)

\[ \zeta = \frac{\rho_3}{2\sigma}, Z = \rho_2 \quad (\text{III.} 46) \]
III.3 L’hétérojonction semi-conducteur/semi-conducteur

Une telle hétérojonction est obtenue lorsque deux matériaux semi-conducteurs sont associés. Sa réalisation s’effectue par croissance cristalline d’un matériau sur l’autre et nécessite l’utilisation de semi-conducteurs ayant des propriétés cristallines voisines (la taille des atomes doit notamment être assez proche).

Les types des hétérojonctions se signifient selon le type de dopage: les premières sont les hétérojonctions isotypes, pour lesquelles les deux semi-conducteurs sont de même type de dopage. Les secondes sont les hétérojonctions anisotypes, pour lesquelles les deux semi-conducteurs sont dopés différemment.

Dans ce qui suit, on prend le cas de l’hétérostructure anisotype avec la mise en contact d’un semi-conducteur de type p grand gap et semi-conducteur de type n à gap réduit.

III.3.1 Hétérojonction à l’équilibre thermique

III.3.1.1 Diagramme de bandes d’énergie :

La structure de bandes dépend de plusieurs paramètres des deux matériaux en contact: la valeur des largeurs des bandes interdites $E_{g1}$ et $E_{g2}$, des affinités électroniques $\chi_1$ et $\chi_2$ contrairement aux homojonctions.

Le diagramme de bandes à l’équilibre thermique de l’hétérojonction est donné à la figure (III.9).

![Diagramme de bande d’une hétérojonction anisotype après contact.](image)

**Figure III.9**: Diagramme de bandes d’une hétérojonction anisotype après contact.
Les inégalités entre les gaps et entre affinités électroniques des deux matériaux, associent à la discontinuité du niveau Ec(ΔEc) une dépression appelée « Spike » et un maximum aigu (ΔEv) appelé « Notch ». On la qualifie de discontinuité forte car elle influence sous polarisation la nature des mécanismes de déplacement des trous dans la bande de valence. Au contraire, la discontinuité du niveau Ec n’introduit pas de rupture de monotonie et n’est donc pas de nature à modifier les mécanismes de déplacement des électrons dans la bande de conduction.

En faisant l’hypothèse que les quasi-niveaux de Fermi ne varient pas à travers les zones de déplétion comme pour une homojonction, on obtient les relations suivantes [24]:

\[ ΔE_C = q(χ_2 - χ_1) \]  \[(III.47)\]

\[ ΔE_v = q(χ_1 - χ_2) + E_{g2} - E_{g1} \]  \[(III.48)\]

\[ qV_d = qV_{d1} + qV_{d2} = E_{g1} - (E_{g1} + χ_1 - Φ_{SC1}) - (E_{g2} + χ_2 - Φ_{SC2}) + ΔE_C \]  \[(III.49)\]

Avec \( V_{d1}, V_{d2} \) : tensions de diffusion de chaque région ;

\( Φ_{SC1} \) et \( Φ_{SC2} \) : différences d’énergie entre le niveau de Fermi et le niveau du vide dans les deux semiconducteurs.

\[ E_{g1} + χ_1 - Φ_{SC1} = E_F - E_v \]  \[(III.50)\]

\[ E_C - E_F = kT\ln\left(\frac{N_C}{N_d}\right) \]  \[(III.51)\]

\[ E_F - E_v = kT\ln\left(\frac{N_v}{N_a}\right) \]  \[(III.52)\]

### III.3.2 Hétérojonction polarisée:

Sous l’effet d’une tension de polarisation externe directe, le diagramme de bandes de l’hétérojonction se modifie selon la figure (III.10).

En polarisation directe, le décalage des quasi-niveaux de Fermi diminue la différence de potentiel entre les deux régions quasi neutres de l’hétérojonction qui devient égale à \( (V_d - V_a) \). Le déplacement des porteurs majoritaires est facilité par l’abaissement des barrières de potentiel qui
s’opposent à leur déplacement. En polarisation inverse, ces mêmes barrières s’élèvent, renforçant ainsi leur effet déblocage.

Figure III.10 : Diagramme de bandes d’une hétérojonction abrupte du type (matériau p de grand gap / matériau n de gap réduit) en polarisation directe.

III.3.3 Capacité C(V) de l’hétérojonction :

Considérons tout d’abord à l’équilibre thermodynamique l’hétérojonction de type anisotype. Le calcul de la distribution du potentiel et des extensions de la zone de charge d’espace dans les deux semiconducteurs se fait comme dans le cas de l’homojonction par la résolution de l’équation de Poisson. Le calcul est développé en régime de déplétion en supposant, comme dans le cas de l’homojonction, que la zone de déplétion est vide de porteurs libres.

Dans le semiconducteur 1, on a : \( \rho(x) = qN_a \);  
Dans le semiconducteur 2, on a : \( \rho(x) = qN_d \);

Toute variation de V entraîne une modulation de la largeur W de la zone de charge d’espace et par suite une modulation de la charge développée dans chacun des semiconducteurs. Il en résulte que la structure présente une capacité différentielle.

La quantité de charges est donnée par [24]

\[
Q_1 = -Q_2 = qN_a W_1 = qN_d W_2
\]  

(III.53)
Alors

\[ W_1 = \frac{N_d W_2}{N_a} \quad (III.54) \]

\[ W = W_1 + W_2 = \left( \frac{N_a + N_d}{N_a} \right) \sqrt{\frac{2\varepsilon_s N_a}{q N_d} \frac{1}{(N_a + N_d)}} (V_d - V) \quad (III.55) \]

La largeur de la zone de charge d’espace totale est :

\[ W = \sqrt{\frac{2\varepsilon_s (N_a + N_d)}{q N_a N_d}} (V_d - V) \quad (III.56) \]

La capacité différentielle est donnée alors par:

\[ C(V) = \frac{dQ}{dV} = \frac{\varepsilon_s}{W(V)} S = S \sqrt{\frac{q\varepsilon_s N_a N_d}{2(N_a + N_d)(V_d - V)}} \quad (III.57) \]

III.3.4 Mécanismes de transport dans le contact SC1/SC2 :

Les propriétés de transport des porteurs sont généralement dominées par des phénomènes de piégeage au niveau de l’interface entre la région p et la région n. Le transport dans la zone de déplétion est lié aux niveaux d’énergie présents à l’interface (combinaison des recombinations et du courant tunnel). Plusieurs modèles sont utilisés:

- Le modèle d’Anderson sans états d’interface : le principe de ce modèle repose sur la prise en compte des propriétés électroniques des matériaux utilisés : permittivité électrique \( \varepsilon_{SC} \), affinité électronique \( \chi \) et largeur de la bande interdite \( E_g \)[25].

- Des modèles prenant en compte l’influence des états d’interface ainsi que le transport par effet tunnel.

Dans une hétérojonction polarisée, les grandeurs caractéristiques vis-à-vis du passage du courant sont les barrières voir figure (III.11) s’opposant respectivement au déplacement des trous majoritaires de la région p vers la région n, et des électrons majoritaires de la région n vers la région p. Contrairement à ce qui se passe dans une homojonction, ces barrières sont différentes.
l’une de l’autre et différentes de la barrière de potentiel qui n’est pas ici la grandeur la plus significative.

Figure III.11 : Conséquence de la dissymétrie du dopage de l’hétérojonction sur l’importance de l’effet de barrière du notch ; a) cas d’un dopage(p⁺) ; b) cas d’un dopage(n⁺).

Dans l’hétérojonction, le courant pour chaque type de porteurs est limité (contrôlé) par le transport de ces porteurs dans la région où ils sont minoritaires. Au contraire, des électrons qui n’ont pas d’autre possibilité qu’un déplacement dans la région p par diffusion (comme ils feraient dans une homojonction), les trous sont susceptibles de se déplacer dans la région n de l’hétérojonction selon différents mécanismes de transport. Ces mécanismes qui peuvent cohabiter sont représentés sur la figure (III.12).

Si le notch n’introduit pas d’effet de barrière voir figure (III.12.a), le courant des trous est contrôlé comme dans une homojonction, par la diffusion des trous minoritaires dans la région n. A cette composante principale, se rajoute une composante de recombinaison dans la zone de transition (la continuité du flux des trous traversant la région p étant alors assurée par un flux des électrons traversant la région n).

Dans une hétérojonction contrairement à l’homojonction, l’activité dominante de recombinaison est localisée à l’interface voir figure (III.12.d). Le processus peut se compliquer à un effet tunnel voir figures(III.12.e) et (III.12.f).
Figure III.12 : Différents mécanismes de transport des trous dans l’hétérojonction abrupte du type (matériau p de grand gap – matériau n de gap réduit). a) diffusion ; b) émission Thermoïonique ; c) conduction Tunnel à travers le notch ; d) recombinaison à l’interface ; e) et f) recombinaison à l’interface associée à un effet Tunnel.

Quand le notch introduit un effet de barrière voir figure (III.12.b), le courant des trous est contrôlé par un processus d’émission thermoïonique des trous comme dans un contact métal-semi conducteur Schottky : la barrière de potentiel n’est franchie que par les trous possédant une énergie thermique suffisante. Il peut aussi exister simultanément une conduction tunnel d’électrons à travers le sommet du notch à des niveaux d’énergie où celui-ci est suffisamment fin, ce qui implique la contribution d’une assistance thermique voir figure (III.12.c).

Une fois que les trous ont d’une manière ou d’une autre franchi le notch, leur transport s’effectue par diffusion. Dans une telle situation où plusieurs mécanismes s’exercent (en série), c’est le franchissement du notch qui limite le courant et en fixe la loi de variation. Là encore, se rajoutent les composantes associées à l’activité de recombinaison dans les états d’interface.
III.3.4.1 Courant de l'émission Thermoïonique :

Dans une hétérojonction, on a un phénomène d'émission thermoïonique. L'amplitude du courant s'écrit [24]:

$$I = S A_{e1}^* \exp \left( -\frac{q(\Phi_{b2} - V_2)}{kT} \right) - A_{e2}^* \exp \left( -\frac{q(\Phi_{b2} - V_1)}{kT} \right)$$  \hspace{1cm} (III.58)

A l'équilibre, les coefficients devant les exponentielles de $V_1$ et $V_2$ sont égaux, de sorte que le courant s'écrit :

$$I = S A_{e1}^* \exp \left( -\frac{q\Phi_{b2}}{kT} \right) \left( \exp \left( \frac{qV_2}{kT} \right) - \exp \left( \frac{-qV_1}{kT} \right) \right)$$  \hspace{1cm} (III.59)

Ou en explicitant $V_1$ et $V_2$ en fonction de $V$ :

$$I = S A_{e1}^* \exp \left( -\frac{q\Phi_{b2}}{kT} \right) \left( \exp \left( \frac{q(1 - \alpha)V}{kT} \right) - \exp \left( \frac{-q\alpha V}{kT} \right) \right)$$  \hspace{1cm} (III.60)

$$I = I_{th0} \exp \left( -\frac{q\alpha V}{kT} \right) \left( \exp \left( \frac{qV}{kT} \right) - 1 \right)$$  \hspace{1cm} (III.61)

$$I_{th0} = S A_{e1}^* \exp \left( -\frac{q\Phi_{b2}}{kT} \right) = S q N_a \nu_T \exp \left( -\frac{q\Phi_{b2}}{kT} \right)$$  \hspace{1cm} (III.62)

$\Phi_{b2}$ est la fraction de la tension de diffusion développée dans le semiconducteur 2, de sorte que

$$\Phi_B = (1 - \alpha)V_d$$  \hspace{1cm} (III.63)

D'où l'expression de $I_{th0}$ :

$$I_{th0} = S q N_a \nu_T \exp \left( \frac{q(1 - \alpha)V_d}{kT} \right)$$  \hspace{1cm} (III.64)

$$\nu_T = \sqrt{\frac{k \times T}{2 \times \Pi \times m_v}}$$  \hspace{1cm} (III.65)
La variation du courant avec la tension de polarisation est conditionnée par le paramètre $\alpha$. Ce paramètre est fonction de la nature de chaque zone de charge d'espace, c'est-à-dire du type de chaque semiconducteur [24]. Ainsi le paramètre $\alpha$ est donné par :

$$\alpha = \frac{\varepsilon_2 N_d}{(\varepsilon_1 N_a + \varepsilon_2 N_d)} \quad (\text{III.66})$$

Si $\varepsilon_1 = \varepsilon_2$, $\alpha$ devient :

$$\alpha = \frac{N_d}{(N_a + N_d)} \quad (\text{III.67})$$

La caractéristique courant-tension est alors fonction des rapports de dopage entre les deux semiconducteurs.

Si $N_d \gg N_a$, $\alpha=1$

$$I = SqN_a \nu_T \exp\left(-\frac{qV}{kT}\right)\left(\exp\left(\frac{qV}{kT}\right) - 1\right) \quad (\text{III.68})$$

Si $N_a \gg N_d$, $\alpha=0$

$$I = SqN_a \nu_T \exp\left(\frac{qV_a}{kT}\right)\left(\exp\left(\frac{qV}{kT}\right) - 1\right) \quad (\text{III.69})$$

**III.3.4.2 Courant de Diffusion** :

Pour une hétérojonction de silicium, les densités de porteurs intrinsèques $n_{i1}$ et $n_{i2}$ sont différentes. De plus important de faire remarqué que le courant de diffusion de SC1 et plus important que SC2, en raison de dopage.

$$I_{P0} = qS \left(\frac{n_{i1}^2}{n_01} \sqrt{\frac{D_n}{\tau_{n,\text{eff}}}} + \frac{n_{i2}^2}{P_{02}} \sqrt{\frac{D_p}{\tau_{p,\text{eff}}}}\right) \quad (\text{III.70})$$

avec $q$ la charge élémentaire, $S$ la surface, $D_n$ et $D_p$ les coefficients de diffusion des porteurs minoritaires dans le silicium amorphe et le cristallin, $\tau_{n,\text{eff}}$ et $\tau_{p,\text{eff}}$ leurs durées de vie effectives.
III.3.4.3 Courant de Génération-recombinaison :

La présence de discontinuités à l’interface va jouer un rôle important dans les phénomènes de transport des charges. En effet, les porteurs minoritaires du SC2 sont dans chaque cas confrontés à une barrière à l’interface, favorisant leur accumulation et pouvant être à l’origine de recombinations. D’autre part, les porteurs majoritaires du SC1 sont eux aussi face à une barrière, qui tend à les éloigner du SC2 et améliorer leur collecte en face arrière. Enfin, on constate la présence d’une région de forte inversion du SC1, pouvant favoriser le transport latéral. La hauteur de ces barrières peut donc favoriser autant les recombinations des porteurs que leur collecte, ce qui implique de développer une ingénierie des bandes afin de contrôler ces processus.

\[ I_{GR0} = q s \left( \frac{n_{i1} W_1}{2 \tau_1} + \frac{n_{i2} W_2}{2 \tau_2} \right) \]  

(III.71)

\( \tau_1 \) et \( \tau_2 \) : les durées de vie attribuées aux recombinations assistées par les défauts dans la zone de charge d’espace.

avec \( W_1 \) et \( W_2 \) les largeurs de zone de charge d’espace respectivement dans le semiconducteur 1 et semiconducteur 2. [24]

\[ W_1 = \sqrt{\frac{2 e N_d}{qN_a (N_a + N_d)}} (V_d - V) \]  

(III.72)

\[ W_2 = \sqrt{\frac{2 e N_a}{qN_d (N_a + N_d)}} (V_d - V) \]  

(III.73)

En cas a-Si:H/c-Si, on peut dire que le courant \( I_{GR0} \) de SC1 plus élevée que SC2 due que les paramètres de transport du première sont considérablement plus petit [22, 26, 27].

III.4 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons vu que le transport du courant dans le contact métal-semiconducteur idéal est dû principalement aux porteurs de charges majoritaires. Le courant dépend seulement de la hauteur de la barrière. Ce courant dépend de la concentration des trous ou des électrons ayant suffisamment d’énergie pour franchir la barrière de potentiel\( \Phi_B \).
Dans le contact MS réel, on a la présence d’une couche interfaciale et des pièges profonds à l’intérieur de la bande interdite qui font que les valeurs de la hauteur de la barrière mesurées expérimentalement diffèrent de celles déterminées théoriquement. La zone de charge d’espace est le siège de générations thermiques et de recombinations. Lorsque le semiconducteur présente des centres profonds de Génération-recombinaison, alors sous polarisation directe, les porteurs peuvent se recombiner. C’est la recombinaison des paires électron-trou assistée par des défauts. Lorsque le semiconducteur présente des centres profonds de Génération-recombinaison, sous polarisation inverse et dans la zone désertée, des paires électron-trou peuvent être générés. C’est la génération des paires électron-trou assistée par défauts.

Werner et son équipe de recherche ont montré que l’une des origines possibles des anomalies observées et non interprétées avec la théorie thermoïonique dans la structure MS réelle, sont les fluctuations de la barrière de potentiel $\Phi_B$.

Dans une hétérojonction semiconduteur /semiconduteur, la discontinuité due à l’inégalité entre les gaps et entre affinités électroniques des deux semiconducteurs influence sous polarisation les mécanismes de déplacement des porteurs. Dans cette hétérojonction contrairement à l’homojonction, l’activité dominante de recombinaison est localisée à l’interface ; le processus peut se compliquer à un effet Tunnel.
Références :

CHAPITRE VI:
ELABORATION DES HÉTÉROJONCTIONS DE TYPE AU/SCM/C-SI
CARACTÉRISATIONS ÉLECTRIQUES, SIMULATIONS ET INTERPRÉTATIONS
IV.1 Introduction

L’alternance des techniques CVD, les conditions de dépôt telles que: l’influence de la puissance et la température de dépôt, le rapport des débits hydrogène/diborane ou hydrogène/phosphine, la nature du substrat ainsi que les contacts influent sur les performances du dispositif destiné pour les applications électroniques ou optoélectroniques.

Dans notre étude, les deux techniques PECVD et HWCVD ont été utilisées pour l’élaboration des couches minces de silicium (amorphe, nanocristallin ou microcristallin). En particulier, pour les applications photovoltaïques, ces couches déposées sont de type P [1]. C’est dans cette voie que trois séries d’échantillons de silicium en couches minces ont été déposés sur des substrats de silicium cristallin à différentes résistivités de type N.

La première partie de ce chapitre est dédiée à la présentation du bâti du dépôt utilisé pour l’élaboration des échantillons d’étude avant d’expliciter le protocole de dépôt PECVD et HWCVD des couches de silicium. Nous présentons ensuite les moyens de caractérisations électriques (I-V), (C-V) et (G-V) en fonction de la température et de la fréquence.

Les mesures effectuées sont divisées en trois parties :

- présentation des caractéristiques électriques de type (I-V) mesurées à la température ambiante pour trois séries d’échantillons ;
- étude de l’influence de la température de recuit et de la température de mesure sur les phénomènes de conduction ;
- les mesures de la capacité et de la conductance à différentes fréquences et différentes tensions de polarisation seront exposées en troisième lieu.

L’influence de la technique et des paramètres de dépôt sera analysée à travers ces mesures. Des modèles de calcul sont introduits afin de confronter les caractéristiques théoriques et les caractéristiques expérimentales.

IV.2 Elaboration des couches de silicium:

Trois séries d’échantillons A, B et C ont été déposées par la méthode PECVD et/ou HWCVD au sein du Laboratoire de Physique des Matériaux et des Nanomatériaux appliquée à l’Environnement à la Faculté des Sciences de Gabès (Tunisie).
IV.2.1 Présentation du Bâti et conditions de dépôt

Le dispositif représenté dans la figure (IV.1) comporte essentiellement les deux techniques de dépôt : PECVD et HWCVD. Le banc de dépôt PECVD des couches minces de silicium comporte :

- Une chambre de chargement LLC (Load Lock Chamber) qui assure le chargement du porte-substrat dans la chambre de dépôt. Une fois le porte-substrat est dans la chambre de chargement, un vide primaire est réalisé par l’action d’une pompe à palette. La pression est mesurée à l’aide d’une jauge de Pirani branchée sur le circuit de pompage.
- Une chambre DPC2 (Deposition Process Chamber 2) consacrée pour le dépôt par PECVD et une chambre DPC1 pour le dépôt par HWCVD. A l’intérieur de la chambre DPC2, se trouve deux électrodes parallèles : une électrode supérieure liée à la masse et au porte-substrat et une électrode inférieure reliée à une génératrice radiofréquence RF qui permet d’exciter les gaz et créer le plasma. La source du plasma utilisée est une source radiofréquence (f = 13.56 MHz) à couplage capacitif. Le vide dans la chambre de dépôt est contrôlé par une jauge de Penning. Les chambres de dépôt DPC1 et DPC2 sont reliées à un système de pompage qui

Figure IV.1: Bâti double chambre PECVD/HWCVD.
Permet d’avoir un vide jusqu’à une pression de $10^{-8}$ mbar. L’ouverture et la fermeture des chambres sont assurées à travers des vannes pneumatiques.

Les débitmètres voir figure (IV.2) des gaz précurseurs pour la déposition des couches sont :

- Les sources des gaz inflammables le silane (SiH$_4$), l’hydrogène (H$_2$) et le méthane (CH$_4$))
- Les sources des gaz toxiques : la phosphine (PH$_3$) pour le dopage de type N et le diborane (B$_2$H$_6$) pour le dopage de type P. Ils sont installés à l’extérieur du bâti dans une niche à gaz et sont acheminés au bâti par des lignes en acier inoxydable. Les bouteilles de gaz non toxiques l’azote (N$_2$), l’argon (Ar) et l’hélium (He)) sont placées dans la salle du bâti.

![Figure IV.2](image)

**Figure IV.2** : Branchement des débitmètres des gaz toxiques et inflammables.

- Un compresseur pour commander les vannes pneumatiques.
- Un circuit d’eau qui assure le refroidissement des pompes.
- Une unité de commande voir figure (IV.3) pour commander et contrôler le mécanisme de dépôt des couches et qui est décomposée en deux parties essentielles :
Partie de génération :

- Générateur RF pour PECVD à une fréquence de 13.56MHz
- Générateur de tension continue pour HWCVD

Partie d’affichage :

- Débit des gaz
- Température des deux chambres DPC1 et DPC2
- La pression de dépôt

Figure IV. 3 : Unité de commande du bâti PECVD/HWCVD.

IV.2.2 Protocole de dépôt des couches de silicium

IV.2.2.1 Préparation des substrats :

Les substrats utilisés au niveau du laboratoire la PhyMNE sont: le verre ordinaire, verre microscope, verre Corning et les substrats de silicium cristallin (c-Si) de type P et N avec différentes résistivités. Pour la caractérisation électrique, les substrats c-Si sont utilisés et pour la caractérisation optique, les substrats en verre sont les mieux adaptés en raison de leurs propriétés de transparence.
IV.2.2.2 Nettoyage du substrat

Avant le dépôt de la couche de silicium, les substrats subissent un processus de nettoyage qui se déroule en deux étapes : le dégraissage et l'attaque chimique. Tout d'abord, ces deniers sont d’abord immergés dans un bain de trichloréthylène sous ultrason pendant 15min pour éliminer les graisses puis dans un bain d’acétone sous ultrason pendant 10 min suivi d’un bain d’éthanol. Les substrats c-Si sont ensuite attaqués chimiquement par l’acide fluorhydrique (HF) afin d’éliminer l’oxyde natif. Enfin, les substrats sont rincés à l’eau désionisée afin d’éliminer les acides, en terminant avec un séchage par un flux d’azote.

IV.2.3 Croissance des couches:

a) Croissance par PECVD :

Une fois le substrat est nettoyé, on l’introduit immédiatement dans la chambre de chargement où est réalisé par la suite un vide primaire de l’ordre de 30 mTorr. On déplace ensuite le substrat à l’aide d’un bras de chargement vers la chambre de dépôt DPC2 où règne un vide secondaire d’environ $10^{-7}$ Torr. On démarre le chauffage dans la chambre pour l’obtention d’un substrat isotherme à la température désirée. Cette étape prend une période d’environ 2 heures. Pour les substrats c-Si, un décapage par un plasma d’argon est effectué pour nettoyer la surface des oxydes résiduels. Les conditions de croissance sont ainsi réalisées, on remplit alors les lignes par les gaz précurseurs et on ferme ensuite les bouteilles des gaz pour des mesures de sécurité. Avant de déclencher la phase du dépôt, on fixe les paramètres intervenant dans la croissance : les débits des gaz, la pression de dépôt (dans le réacteur) qui sera stabilisée à l’aide d’une vanne papillon, et la puissance du plasma (du générateur RF). Finalement, on déclenche le plasma qui coïncide avec le démarrage du dépôt. Les gaz seront distribués de façon uniforme dans la chambre à partir d’un injecteur monté en face du porte-substrat. Une fois la durée de dépôt choisie est achevée, on éteint le générateur RF, on arrête le chauffage, on ferme les vannes d’entrées des gaz et on ouvre la vanne papillon pour vider la chambre. Le pompage durant 5 à 10 minutes est succédé d’un balayage d’argon pendant 3 minutes afin de dégager les gaz résiduels de la chambre. Pour accélérer le refroidissement de l’échantillon, on le déplace de la chambre de dépôt vers la chambre de chargement.
b) Croissance par HWCVD

On déplace le porte substrat vers la chambre de croissance, ensuite on démarre le chauffage et on attend la stabilisation de la température afin d’obtenir une couche homogène. On ouvre des flacons à gaz (azote, sélénium, hydrogène, hélium ...). Ensuite, on fonctionne le générateur de tension continue et on règle les valeurs des tensions (on augmente la tension doucement pour éviter les chocs électriques au filament) afin de chauffer le filament. Quand le dépôt s’achève, les débitmètres sont fermés et les valeurs de tension chutent doucement jusqu’à 0V puis on va fermer les lignes des gaz. Après, les échantillons sont évacués vers la chambre de chargement mise sous vide primaire puis sortis après refroidissement.

IV.2.2.4 Recuits thermiques

Le recuit d’une pièce métallique ou d’un matériau est un procédé correspondant à un cycle de chauffage. Celui-ci consiste en une étape de montée graduelle en température suivie d’un refroidissement contrôlé. Cette procédure, courante en sciences des matériaux, permet de modifier les caractéristiques physiques du métal ou du matériau étudié. Elle est particulièrement employée pour faciliter la relaxation des contraintes pouvant s’accumuler au cœur de la matière, sous l’effet de contraintes mécaniques ou thermiques, intervenant dans les étapes de synthèse et de mise en forme des matériaux. Au cours des recuits thermiques la mobilité des espèces augmente. Il en résulte :

- un déplacement de matière pour former des grains de plus grande taille ;
- une évaporation de certaines espèces ;
- la rupture de certaines liaisons chimiques ;
- l’établissement de certaines liaisons chimiques ;
- une transition de phase (modification au niveau de la structure, des contraintes, …).
- une diffusion ou exo diffusion d’espèce… Les recuits thermiques peuvent être un moyen de supprimer ou d’introduire des défauts.

Ils peuvent modifier toutes les paramètres des matériaux (physicochimique, structurale, optique électrique, magnétique, …) La figure (IV.4) représente le système de recuit thermique qui comporte :
IV.2.2.5 Réalisation des contacts

Le dépôt des contacts est réalisé dans un évaporateur thermique sous vide décrit par la figure (IV.5), muni d’une pompe à vide de type turbo-moléculaire assurant un vide secondaire et d’une chambre sous vide.

Dans cette chambre, est fixé vers le haut le porte substrat contenant les échantillons, alors qu’en bas, nous trouvons un creuset de tungstène contenant le métal à évaporer (Aluminium, Or, Argent…) et qui sera chauffé par effet Joule. Par conséquent, le métal est sublimé et une condensation de la phase vapeur aura lieu sur la face désirée de l’échantillon.

Pour éviter la fusion du creuset, la température d’évaporation du matériau à déposer doit être inférieure à celle de fusion du tungstène (creuset). On utilise aussi des masques pour les échantillons qui nous permettent de contrôler la forme et le positionnement du contact.

Une cache pivotante bloque la diffusion de la vapeur vers le substrat une fois on atteint l’épaisseur de l'ordre 5Å°. Une balance à quartz est installée dans le dispositif de dépôt pour contrôler l’épaisseur du film métallique déposé. La valeur mesurée de l’épaisseur est indiquée sur un afficheur lié au dispositif.
IV.2.2.6 Structures d'étude

La figure (IV.6) présente une coupe schématique des séries d'échantillons A, B et C élaborés sur des substrats très dopés et moyennement dopées avec des contacts Aluminium (Al) et Argent (Ag).

![Coupe schématique des séries d'échantillons](image)

*Figure IV.6*: Coupe schématique des séries d'échantillons (a): a-Si: H(p)/c-Si(N⁺) pour la série A et B, (b): a-Si: H(p)/c-Si(N⁻) pour la série C.

Le tableau (IV.1) regroupe les conditions de dépôt des trois séries d'échantillons élaborés par les techniques PECVD et/ou HWCVD avec la température du substrat de 300°C et dopé P.
Chapitre IV : Elaboration des hétérojonctions de type Au/SCM/c-Si : Caractérisations électriques, Simulations et Interprétations

### Tableau IV.1 : Conditions de dépôt des séries d’échantillon A, B et C.

La détermination du gap optique et de l’épaisseur des couches minces de silicium déposé sont effectuées par les mesures simultanées de réflexion (R), d’absorption (A), et de transmission (T) grâce à un spectrophotomètre de type Shimadzu UV 3101 PC par l’équipe des chercheurs du laboratoire La PhyMNE. Le calcul du gap se fait par la méthode de Tauc, et la mesure de l’épaisseur est déterminée par la méthode de réflectivité pour les séries A et B et la méthode de profilométrie pour la série C. Le tableau (IV.2) présente les valeurs du gap optique et les épaisseurs des couches des trois séries d’échantillons.

<table>
<thead>
<tr>
<th>Série</th>
<th>A₁</th>
<th>A₂</th>
<th>A₃</th>
<th>B</th>
<th>B</th>
<th>C₁</th>
<th>C₂</th>
</tr>
</thead>
<tbody>
<tr>
<td>Substrat</td>
<td>SiN⁺</td>
<td>SiN⁺</td>
<td>SiN⁺</td>
<td>SiN⁺</td>
<td>SiN⁺</td>
<td>SiN⁺</td>
<td></td>
</tr>
<tr>
<td>Couches</td>
<td>I : Type p</td>
<td>II : Type p</td>
<td>I : Type p</td>
<td>II : Type p</td>
<td>I : Type p</td>
<td>II : Type p</td>
<td>Type p</td>
</tr>
<tr>
<td>V-CVD(*)</td>
<td>PE CVD</td>
<td>PE CVD</td>
<td>PE CVD</td>
<td>HW CVD</td>
<td>HW CVD</td>
<td>PE CVD</td>
<td>HW CVD</td>
</tr>
<tr>
<td>p(tor)</td>
<td>1</td>
<td>1.2</td>
<td>1</td>
<td>1.2</td>
<td>1</td>
<td>1.2</td>
<td>1</td>
</tr>
<tr>
<td>P(mW)</td>
<td>50</td>
<td>5</td>
<td>50</td>
<td>5</td>
<td>5</td>
<td>3</td>
<td>3</td>
</tr>
<tr>
<td>V₀(V)</td>
<td>40</td>
<td>40</td>
<td>40</td>
<td></td>
<td></td>
<td></td>
<td></td>
</tr>
<tr>
<td>Iₛ(A)</td>
<td>10.3</td>
<td>10.8</td>
<td>12.2</td>
<td></td>
<td></td>
<td></td>
<td></td>
</tr>
<tr>
<td>T(s)</td>
<td>300</td>
<td>1500</td>
<td>300</td>
<td>1500</td>
<td>300</td>
<td>1500</td>
<td>180</td>
</tr>
<tr>
<td>SiH₄(scm)</td>
<td>10</td>
<td>10</td>
<td>10</td>
<td>10</td>
<td>10</td>
<td>10</td>
<td>20</td>
</tr>
<tr>
<td>H₂(scm)</td>
<td>188</td>
<td>88</td>
<td>188</td>
<td>88</td>
<td>188</td>
<td>88</td>
<td>40</td>
</tr>
<tr>
<td>B₂H₆(scm)</td>
<td>2</td>
<td>2</td>
<td>2</td>
<td>2</td>
<td>2</td>
<td>2</td>
<td>1</td>
</tr>
</tbody>
</table>

### Tableau IV.2 : Valeurs des gaps optiques et des épaisseurs des couches minces de silicium.

<table>
<thead>
<tr>
<th>Échantillon</th>
<th>A₁</th>
<th>A₂</th>
<th>A₃</th>
<th>B</th>
<th>C₁</th>
<th>C₂</th>
</tr>
</thead>
<tbody>
<tr>
<td>Energie du Gap</td>
<td>2.2</td>
<td>2.3</td>
<td>1.55</td>
<td>-</td>
<td>1.6</td>
<td>1.64</td>
</tr>
<tr>
<td>Épaisseur (nm)</td>
<td>400</td>
<td>180</td>
<td>380</td>
<td>55</td>
<td>198</td>
<td>197</td>
</tr>
</tbody>
</table>
IV.3. Caractérisation électrique (I–V):

Les mesures courant-tension I(V) sont effectuées par le banc de mesure illustré par la figure (IV.7)

**Figure IV.7:** Photo du banc expérimental de mesure de la caractéristique (I-V).

Ce banc de mesure est composé de:

1: Un cryostat à azote liquide permettant de varier la température entre 77 et 320 K.
2: Un régulateur de température Lake Shore 331. Il permet d’afficher et de réguler la température de l’échantillon.
3: Une source de courant Keithley 220 délivrant des courants d’intensité variant de $10^{-9}$ à $10^{-10}$ A, avec un changement de polarité.
4: Un multimètre Agilent 34401, permettant la lecture directe de la tension ou de la résistance.
5: Un microordinateur qui permet de tracer la caractéristique I(V) au cours de la mesure à travers un programme écrit en turbo-pascal.
6: $R_p (\approx 10 \, \Omega)$ est une résistance de protection.

Le montage de principe pour la mesure de la caractéristique I(V) est schématisé par la figure (IV.8)
Chapitre IV : Elaboration des hétérojonctions de type Au/SCM/c-Si : Caractérisations électriques, Simulations et Interprétations

**Figure IV.8**: Principe du banc de mesure des caractéristiques (I-V).

La figure (IV.9) présente les caractéristiques (I-V) mesurées et tracées à l’échelle semi-logarithmique des séries d’échantillons A, B et C à la température ambiante en direct et en inverse.

**Figure IV.9**: Caractéristiques semi logarithmiques (I – V) expérimentales mesurées à l’obscurité des séries d’échantillons A, B, C à température ambiante.

Les caractéristiques (I-V) montrent un comportement non idéal pour les échantillons des séries A et B. Les courants direct et inverse sont équivalents donc un faible taux de redressement. On remarque par contre que pour les échantillons de la série C, le taux de redressement est amélioré. Cela est certainement dû à la technique et aux conditions de dépôt.
Pour une première constatation, les échantillons de la série A et B avec substrat de type N fortement dopé présentent un comportement électrique similaire à celui d’un contact Métal-Semiconducteurou Schottky. Par contre, les échantillons de la série C où le substrat est toujours de type N mais avec une concentration moyenne ont probablement un comportement mixte Métal/Semiconducteur et/ou Semiconducteur/Semiconducteur.

Dans ce sens et pour déduire la nature de la réponse électrique courant-tension, nous avons utilisé un formalisme mathématique avec lequel nous avons analysé les anomalies observées sur les caractéristiques courant-tension directes et inverses.

**IV.3.1. Modélisation électrique de la diode à jonction PN ou Schottky**

En général, la caractéristique courant-tension I-V est définie par le modèle à une exponentielle ou 1D qui est représenté par l’équation (IV.1) [1,2]. Le circuit électrique schématisé dans la figure (IV.10) représente ce modèle:

\[ I = I_0 \left[ \exp \left( \frac{q}{n_i kT} (V - R_S I) \right) - 1 \right] + \frac{V - R_S I}{R_{sh}} \]  \hspace{1cm} (IV.1)

$I_0$: courant de saturation qui peut être explicité selon le mécanisme prépondérant : Diffusion, Recombinaison, Thermoionique ou Tunnel

*Figure VI.10:* Schéma électrique d’une structure réelle à 1D.
Où $V$ est la chute de tension appliquée à la jonction, $q$ est la charge électronique, $k$ est la constante de Boltzmann, $T$ est la température absolue en Kelvin, $n_i$ est le facteur d'idéalité de la diode, $R_s$ est la résistance série, $R_{sh}$ est la résistance shunt et $I_0$ est le courant de saturation lié aux propriétés du matériau semi-conducteur. La résistance série $R_s$ tient compte des pertes ohmiques dues à une couche d'interface native entre le métal et le semi-conducteur.

Le courant de fuite à travers la diode est représenté par la résistance de shunt $R_{sh}$. Le facteur d'idéalité $n_i$ fournit des informations sur la qualité de la jonction.

Les caractéristiques (I-V) représentées par la figure (IV-9) sont similaires au modèle à une seule exponentielle 1D réduit à l’équation :

$$I = I_0 \exp \left( \frac{q}{nkT} (V - IR_s) \right) + \frac{V - R_s I}{R_{sh}}$$  \hspace{1cm} \text{(IV.2)}

Dans ce qui suit, nous présentons les méthodes de résolution analytique qui nous ont permis de tracer les caractéristiques théoriques (I-V).

IV.3.1.1 Méthode de Newton:

La méthode de Newton est une procédure classique pour résoudre des équations du type $f(x) = 0$ par un processus itératif. Les Grecs ont utilisé déjà une variante pour trouver les racines carrées : on part d’une estimation ; cette estimation en fournit une meilleure, et, en réitérant le procédé, on obtient une valeur qui converge vers la solution. Ce procédé est rapide, car le nombre de décimales gagnées (en précision) double en général à chaque étape. La répétition étant le point fort des ordinateurs, le procédé fait merveille en informatique, où il s’applique à une grande variété [3]. Cette méthode est définie par la relation suivante :

$$x_n = x_{n-1} - \frac{f(x_{n-1})}{f'(x_{n-1})}$$  \hspace{1cm} \text{(IV.3)}

Avec

$$|x_n - x_{n-1}| \leq \varepsilon$$  \hspace{1cm} \text{(IV.4)}

En faisant une identification avec l’équation (IV.2) qui représente le modèle à une seule exponentielle, on a :
Chapitre IV : Elaboration des hétérojonctions de type Au/SCM/c-Si : Caractérisations électriques, Simulations et Interprétations

I = x

\[ f(I) = 1 - I_0 \left[ \exp \left( \frac{q}{nkT} (V - R_S I) \right) - 1 \right] - \frac{V - R_S I}{R_{sh}} \quad (IV.5) \]

\[ f'(I) = 1 + \left( \frac{qI_0 R_S}{nkT} \right) \left[ \exp \left( \frac{q}{nkT} (V - R_S I) \right) \right] + \frac{R_S}{R_{sh}} \quad (IV.6) \]

IV.3.1.2 Méthode de Lambert:

L’utilité de la fonction de Lambert W est bien illustrée dans le modèle des jonctions non idéales avec une résistance série \( R_s \) et une résistance shunt \( R_{sh} \) dans les caractéristiques (I-V) des diodes [1]. La fonction de Lambert W est un outil mathématique qui a été introduite en 1758 dans les travaux de Lambert, ensuite elle a été étudiée par Euler en 1779. Enfin, elle a été étudiée en 1959 par E.M.Wright. Le nombre d’applications de la fonction de Lambert W a considérablement augmenté dans les dernières années. La fonction de Lambert W est définie comme étant la fonction qui vérifie la relation suivante [4]

\[ W(Z) \exp(Z) = Z \quad (IV.7) \]

Z : argument de la fonction W.

On a :

\[ \ln(A + Bx) + Cx = \ln D \quad (IV.8) \]

\[ x = \frac{1}{C} W \left[ \frac{CD}{B} \exp \left( \frac{AC}{B} \right) \right] - \frac{A}{B} \quad (IV.9) \]

Alors pour faire une analyse de l’équation (IV.6), on a :

\[ \ln \left( \left( \frac{N + R_S G_P}{N I_S} \right) I - \left( \frac{V G_P}{N I_S} - 1 \right) \right) + \left( \frac{R_S}{n V_T} \right) I = \ln \left( \exp \left( \frac{V}{n V_T} \right) \right) \quad (IV.10) \]

D’après les équations (IV.7) et (IV.8), on a identifié les paramètres A, B, C et D.
Chapitre IV : Elaboration des hétérojonctions de type Au/SCM/c-Si : Caractérisations électriques, Simulations et Interprétations

\[ A = - \left( \frac{VG_P}{NI_S} - 1 \right) \]  (IV. 11)

\[ B = \left( \frac{N + R_SG_P}{NI_S} \right) \]  (IV. 12)

\[ C = \left( \frac{R_S}{nVT} \right) \]  (IV. 13)

\[ D = \left( \exp \left( \frac{V}{nVT} \right) \right) \]  (IV. 14)

\[ V_T = \frac{kT}{q} \]  (IV. 15)

\[ G_p = \frac{1}{R_{Sh}} \]  (IV. 16)

N: présente le nombre de termes exponentiels dans l’équation si on prend N=1, on obtiendra:

\[ I = \frac{nVT}{RS} W \left[ I_S R_S \exp \left( \frac{V}{nVT} \right) \exp \left( \frac{V + I_S R_S}{nVT(1 + R_SG_P)} \right) \right] + \frac{VG_P - I_S}{1 + R_SG_P} \]  (IV. 17)

En utilisant le langage de programmation Turbo Pascal, on introduit les paramètres suivants:

\[ W(Z) = L_1 - L_2 + \frac{L_2}{L_1} + \frac{L_2(-2 + 2L_2)}{2L_1^2} + \frac{L_2(6 - 9L_2 + 2L_2^2)}{2L_1^2} + \frac{L_2(-12 + 36L_2 + 22L_2^2 + 3L_2^3)}{2L_1^4} \]

\[ + o \left( \left\{ \frac{L_2}{L_1} \right\}^5 \right) \]  (IV. 18)

\[ Z = x, L_1 = \ln(x), L_2 = \ln(\ln(x)) \]  (IV. 19)

On note que la méthode de Newton est une méthode itérative qui consiste à choisir une solution initiale, c’est la raison pour laquelle la méthode de Lambert est plus utilisée.

**IV.3.2 Techniques d’extraction des paramètres électriques:**

Plusieurs méthodes ont été développées afin de pouvoir extraire les paramètres électriques tels que le facteur d’idéalité n, le courant de saturation I₀, la résistance série Rₙ et la résistance shunt R_{Sh} à partir des courbes (I-V).
Pour se faire, nous avons utilisé les échantillons de la série A pour les quelles nous représentons dans la figure (IV.13) les caractéristiques (I-V).

**Figure IV.11:** Caractéristiques semi logarithmiques I-V des échantillons de la série A mesurées à l’obscurité à 300K.

### IV.3.2.1 Méthodes graphiques

Ces méthodes sont basées sur le calcul des conductances faibles signaux à partir de la caractéristique I-V. Elles supposent que le courant est modélisé par la relation (IV.2).


#### a) Détermination de n et Rs:

- **Méthode de Cheung et Cheung:**

Cette méthode permet de calculer seulement Rs et n. Nous avons tracé la fonction H(I) défini dans le modèle de Cheung & Cheung voir figure (IV.12). Cette fonction s’écrit [5]:

\[
H(I) = R_s I + n V_{th}
\]  

(IV.20)

Avec
Le principe du modèle de Cheung & Cheung est de tracer la variation de la tension en fonction du courant traversant la diode. Rs correspond donc à la pente de la partie linéaire du tracé de la fonction $H(I)$.

$H(I) = \frac{dV}{d\ln(I)}$ (IV.21)

**Figure IV.12** : La fonction $H(I)$ de Cheng & Cheng des échantillons de la série A

- **La méthode de Werner**

  J.Werner a proposé une méthode graphique très efficace pour extraire la résistance série Rs, le facteur d’idéalité nen négligeant le courant de fuite. L’équation (IV.22) montre que le graphe qui représente la variation du rapport de la conductance et du courant de la diode $(G/I)$ en fonction de la conductance $G$ voir figure (IV.13) est une droite de pente $(-Rs/(nV_T))$ et d’intersection avec l’axe (oy) de valeur $B/(nV_{th})$ [89].
Chapitre IV : Elaboration des hétérojonctions de type Au/SCM/c-Si : Caractérisations électriques, Simulations et Interprétations

\[ \frac{G}{I} = - \frac{R_S}{nV_T} G + \frac{1}{nV_T} \]  \hspace{1cm} (IV. 22)

avec :

\[ G = \frac{dI}{dV} \] : dérivé numérique du courant I de la diode par rapport à la tension V.

\[ G = \frac{dI}{dV} \] : dérivé numérique du courant I de la diode par rapport à la tension V.

**Figure IV.13** : La fonction \( G/I(G) \) des échantillons de la série A.

**b) Détermination du courant de saturation et de la résistance shunt**

Pour déterminer le courant de saturation \( I_0 \), il suffit de tracer une droite d’intersection entre l’axe du courant et la caractéristique semi logarithmique I-V voir la figure (VI.14). Pour la résistance shunt, il suffit de déterminer la pente de la caractéristique linéaire (I-V) à très basses tensions quelle soit inverse ou directe voir la figure (VI.15).
Chapitre IV : Elaboration des hétérojonctions de type Au/SCM/c-Si : Caractérisations électriques, Simulations et Interprétations

Figure IV.14 : Caractéristique semi logarithmique I-V de la tension inverse Des échantillons de la série A à 300K.

Figure IV.15 : Caractéristique linéaires I-V mesurées des échantillons de la série A
IV.3.2.2 Méthodes basées sur des programmes d’optimisation LMS:

Plusieurs chercheurs ont choisi d’extraire les paramètres de la diode par un programme d’optimisation. La plupart de ces méthodes sont basées sur une estimation au sens des moindres carrés (Least Mean Square LMS) entre le courant expérimental (I_{exp}), et le courant simulé ou théorique avec les paramètres extraits (I_{th}). Les valeurs théoriques sont obtenues en utilisant un certain modèle du courant pour un certain ensemble de paramètres. On cherche les valeurs des paramètres qui minimisent le critère d’arrêt par optimisation [10, 11].

\[
S = \sum_{i=0}^{N-1} \left( \frac{I_{exp} - I_{th}}{I_{th}} \right)^2
\]

(V.23)

Ce modèle est régi par les équations suivantes :

\[
y = ax + b , \quad S_X = \sum_{i=1}^{N} x_i , \quad S_Y = \sum_{i=1}^{N} y_i , \quad S_{XX} = \sum_{i=1}^{N} x_i^2 , \quad S_{XY} = \sum_{i=1}^{N} y_i x_i
\]

(V.24)

\[
a = \frac{NS_{XY} - S_X S_Y}{NS_{XX} - S_X S_X}
\]

(V.25)

\[
b = \frac{S_Y - aS_X}{N}
\]

(V.26)

On applique ce modèle aux caractéristiques (I-V) décomposées en trois régions essentielles :

- Une première région qui représente le courant de fuite pour des tensions \( \leq \frac{3KT}{q} \).

\[
I_L = \frac{V - IR_S}{R_{sh}} = 0 \quad a = \frac{1}{R_{sh}} \quad B = 0
\]

(V.27)

A très basses tensions, \( IR_S/R_{sh} = 0 \)

- Une deuxième région qui représente le terme exponentiel de l'équation (IV.1) lorsque le courant logarithmique est une fonction linéaire avec la tension de polarisation positive.

\[
\ln \left( \frac{V - I R_S}{R_{sh}} \right) = \frac{q}{n \times k \times t} \times (V - I R_S) + \ln(I_0)
\]

(V.28)

Alors :
Chapitre IV : Elaboration des hétérojonctions de type Au/SCM/c-Si : Caractérisations électriques, Simulations et Interprétations

\[ a = \frac{q}{n \times k \times T} \quad I_0 = \exp(B) \quad (IV.29) \]

Le terme \((V-\text{IR}_s)\) représente l’un parmi les problèmes de détermination de \(n\) et \(R_s\). Pour cela, on a déterminé \(R_s\) par itération. Les conditions aux limites ont été définies pour limiter la plage d’itération et garantir que les paramètres extraits correspondent aux paramètres réels du périphérique avec un minimum d'erreurs. L’une de ces conditions est le pourcentage de tolérance qui est basé sur la différence entre le courant calculé et le courant mesuré. La condition de tolérance détermine si un ensemble adéquat de paramètres a été déterminé. La valeur d'écart-type et \(R^2\) ont été utilisés pour déterminer la courbe d'ajustement optimale.

Ainsi pour extraire les paramètres électriques des échantillons de la série A, on a utilisé le langage Pascal comme outil informatique.

<table>
<thead>
<tr>
<th>Échantillons</th>
<th>Paramètres</th>
<th>A₁</th>
<th>A₂</th>
<th>A₃</th>
</tr>
</thead>
<tbody>
<tr>
<td><strong>Méthode Graphique</strong></td>
<td></td>
<td></td>
<td></td>
<td></td>
</tr>
<tr>
<td>Chung</td>
<td>(I_0)</td>
<td>(3 10^{-5})</td>
<td>(1.61 10^{-6})</td>
<td>(3 10^{-4})</td>
</tr>
<tr>
<td></td>
<td>(R_{sh}(\Omega))</td>
<td>418</td>
<td>1.6 (10^4)</td>
<td>153</td>
</tr>
<tr>
<td></td>
<td>(R_s(\Omega))</td>
<td>17.02</td>
<td>73.44</td>
<td>8.66</td>
</tr>
<tr>
<td></td>
<td>(n)</td>
<td>3.5</td>
<td>3.4</td>
<td>3.36</td>
</tr>
<tr>
<td></td>
<td>Tolérance (%)</td>
<td>25</td>
<td>18</td>
<td>14</td>
</tr>
<tr>
<td>Werner</td>
<td>(R_s(\Omega))</td>
<td>16.95</td>
<td>69.45</td>
<td>9.28</td>
</tr>
<tr>
<td></td>
<td>(n)</td>
<td>3.56</td>
<td>3.31</td>
<td>3.12</td>
</tr>
<tr>
<td></td>
<td>Tolérance (%)</td>
<td>24</td>
<td>21</td>
<td>18</td>
</tr>
</tbody>
</table>

| **Méthode Optimisation** | \(I_0\) | 8.78 \(10^{-5}\) | 9.58 \(10^{-7}\) | 3.48 \(10^{-6}\) |
| | \(R_s(\Omega)\) | 18 | 80.2 | 9.32 |
| | \(n\) | 3.55 | 3.3 | 3.08 |
| | \(R^2\) | 0.998 | 0.999 | 0.999 |
| | Tolérance (%) | 10 | 7.62 | 3.27 |

*Tableau IV.3: Extraction des paramètres électriques pour les échantillons de la série A par les méthodes graphiques et LMS.*
L'écart type et les valeurs $R^2$ des courbes ajustées sont répertoriés dans le tableau (IV.3) qui représente les résultats de l’extraction des paramètres avec les méthodes graphiques et de programmation. Le tableau IV.3 montre que les valeurs de tolérance de la méthode de programmation LSE présente sont inférieures à celles des méthodes graphiques.

La tolérance est le coefficient de corrélation calculé à partir des tensions positives.

Pour valider la méthode LMS, on a tracé les caractéristiques (I-V) par la méthode de Lambert voir figure (IV.16). On remarque que les courbes ajustées présentent un très bon accord avec les caractéristiques semi logarithmiques I-V expérimentales en polarisation directe et inverse pour l’échantillon de la série A3. On conclue que la méthode LMS est mieux adaptée que les méthodes graphiques.

![Graphes de caractéristiques (I-V)](image)

**Figure IV.16** : Caractéristiques semi-logarithmiques (I-V) mesurées et courbes ajustées des échantillons de la série A en utilisant l'extraction des paramètres avec le modèle de Lambert.
IV.4 Résultats et discussions :

Pour analyser les mécanismes de transport et les propriétés électriques des échantillons élaborés, nous avons utilisé les mesures (I-V) qui nous ont permis d’étudier l’influence de la technique et des paramètres de dépôt. Ils nous ont permis également de voir l’influence de la température du recuit sur l’échantillon B à différentes températures de mesure. Pour les échantillons de la série C qui ont donné de meilleures caractéristiques, une investigation a été menée à travers des caractérisations (C-V) et (G-V) en fonction de la température et de la fréquence afin de mieux analyser les propriétés électriques de ces derniers.

IV.4.1 Analyse des échantillons de la série A

On a utilisé les caractéristiques (I-V) de la série A à température ambiante 300K avec un recuit de 400°. Le dopage et la tension de diffusion sont déterminés à partir de la pente des caractéristiques (C-V) et l'intersection de la tangente à la courbe (C-V) en régime de déplétion et l'axe des tensions voir figure (IV.17). La densité de porteurs est donnée alors par la relation:

\[ N_a = \frac{2}{q\varepsilon_{sc}\varepsilon_0 A^2} \frac{d(C^2)}{dV} \]  

(IV.30)
Chapitre IV : Elaboration des hétérojonctions de type Au/SCM/c-Si : Caractérisations électriques, Simulations et Interprétations

Figure IV.17: Caractéristique ($C^2 - V$) des échantillons A

Les résultats de l’extraction des paramètres électriques des échantillons A1, A2, A3 en utilisant la méthode LMS sont résumés dans le tableau (IV-4).

<table>
<thead>
<tr>
<th></th>
<th>$R_{sh}$(Ω)</th>
<th>$R_s$(Ω)</th>
<th>$n$</th>
<th>$I_0$(A)</th>
<th>$\Phi_0$(eV)</th>
<th>$V_d$</th>
<th>$Na$(cm$^{-3}$)</th>
</tr>
</thead>
<tbody>
<tr>
<td>A1</td>
<td>440</td>
<td>18</td>
<td>3.55</td>
<td>$8.78\times10^{-5}$</td>
<td>0.56</td>
<td>0.49</td>
<td>$1.5\times10^{16}$</td>
</tr>
<tr>
<td>A2</td>
<td>39000</td>
<td>80.2</td>
<td>3.3</td>
<td>$9.58\times10^{-7}$</td>
<td>0.67</td>
<td>0.45</td>
<td>$5\times10^{16}$</td>
</tr>
<tr>
<td>A3</td>
<td>150</td>
<td>9.32</td>
<td>3.08</td>
<td>$3.48\times10^{6}$</td>
<td>0.65</td>
<td>0.41</td>
<td>$1.5\times10^{17}$</td>
</tr>
</tbody>
</table>

Tableau IV.4: Extraction des paramètres électriques des échantillons de la série A par la méthode LMS et physique

On remarque que le facteur d’idéalité est supérieur à 1 pour tous les échantillons de la série A, ce qui nous laisse dire que ce n’est pas le phénomène de diffusion qui domine le mécanisme de transport. L’inhomogénéité de la couche de silicium couches minces déposée est dû certainement à :
- présence des états pièges localisés dans le volume du SCM ;
- présence des états de surface ;
Et éventuellement
- l’effet de la présence d’une couche d’oxyde de silicium.
- un courant de fuite important lié au passage des porteurs par effet Tunnel.
Pour confronter les courbes expérimentales, une simulation analytique moyennant les modèles classiques du courant de fuite, Thermoïonique (équation (III.14)) et Tunnel (équation (III.33)) des caractéristiques (I-V) du contact Schottky a été menée. Pour se faire, certains paramètres physiques et électriques caractérisant le métal (Au) et le silicium sont nécessaires et sont reportés dans le tableau IV.5.

<table>
<thead>
<tr>
<th>Paramètres physiques</th>
<th>Valeurs</th>
</tr>
</thead>
<tbody>
<tr>
<td>m_T</td>
<td>0.56m_0</td>
</tr>
<tr>
<td>Travail de sortie du métal (\Phi_m)</td>
<td>4.8eV</td>
</tr>
<tr>
<td>Affinité électronique du S/C (\chi_{sc})</td>
<td>3.8eV</td>
</tr>
<tr>
<td>(A^*)</td>
<td>32 A .cm(^{-2}).K(^{-2})</td>
</tr>
<tr>
<td>(N_c = N_v \times (10^{20}\text{cm}^{-3}))</td>
<td>2.5</td>
</tr>
<tr>
<td>(I_{Ta0}(A1)) (A)</td>
<td>(8 \times 10^{-5})</td>
</tr>
<tr>
<td>(I_{Ta0}(A2)) (A)</td>
<td>(9 \times 10^{-7})</td>
</tr>
<tr>
<td>(E_{0A1}) (meV)</td>
<td>91</td>
</tr>
<tr>
<td>(E_{0A2}) (meV)</td>
<td>85</td>
</tr>
</tbody>
</table>

**Tableau IV.5 :** Paramètres physiques et électriques utilisés

La figure (IV.18) présente les caractéristiques (I-V) simulées et tracées par la méthode de Lambert en associant le courant Tunnel et de fuite pour les échantillons A1 et A2 voir figure (IV.18.a) et (IV.18-b) et les courants Thermoïoniques et de fuite pour l’échantillon A3 voir figure (IV.18.c). Ces caractéristiques sont comparées à celles mesurées.

Nous remarquons que dans le cas des échantillons A1 et A2, les courbes I(V) sont quasi symétriques en directe et en inverse, ceci est dû soit à un comportement ohmique, soit à un courant inverse qui croît avec la tension inverse appliquée semblable à un courant Tunnel.
Pour l’échantillon A3, le courant thermoïonique domine quand la tension est supérieure à 0.4V par contre le courant de fuite domine quand la tension est inférieure à 0.4 V.

**Figure IV.18:** Caractéristiques semi logarithmique (I-V) directes expérimentales et simulées à 300K des échantillons de la série A.

On peut conclure que :

- la valeur importante du facteur d’idéalité reflète d’une part l’inhomogénéité de la barrière de potentiel suite à la présence des défauts à l’interface M/SC [12].

On pense également que cela est dû aux conditions de dépôt des techniques et /ou PECVD/HWCVD (puissance de dépôt et teneur d’hydrogène) et sachant que des caractérisations Optiques faites par l’équipe du laboratoire PhyMNE ont donné des énergies de la bande interdite des échantillons A1, A2 et A3 respectivement de 2.2eV, 2.3eV et 1.55 eV, les couches de
silicium déposé en couches minces sont plus amorphes pour les échantillons A1 et A2, de l’amorphe voire nanocristallin pour l’échantillon A3.

IV.4.2 Analyse de l’échantillon B

L’échantillon B élaboré par la technique HWCVD a présenté un comportement plus intéressant en ajustant la teneur en hydrogène. Ce dernier va faire dans ce qui suit l’objet d’autres investigations (effet de la température de recuit, caractérisation en fonction de la température).

IV.4.2.1 Influence de la température :

L’étude de la caractéristique courant-tension (I-V) des hétérojonctions à température ambiante ne donne pas suffisamment d’informations concernant le mécanisme de transport des porteurs de charges dans ces couches. La dépendance de la caractéristique courant-tension I-V-T avec la température permet de distinguer les différents processus de conduction (diffusion, génération-recombinaison, thermoïonique, Tunnel,…).

Dans cette partie, nous avons caractérisé les contacts Schottky de l’échantillon B qui ont subit des températures de recuit 700 °C, 800°C et 900° à des températures de caractérisation allant de 80 K à 300 K.

a) Extraction des paramètres électriques en fonction de la température :

Les caractéristiques I-V-T de la structure Au/a-Si:H(p)/c-Si (n⁺) de l’échantillon B mesurées sont présentées dans la figure (IV.19).
Figure IV.19 : Caractéristiques semi logarithmiques I-V-T mesurées en polarisation directe et inverse pour différentes températures de recuit : a- (900°C), b- (800°C), c- (700°C).

La déviation des caractéristiques au comportement idéal peut être attribuée à la présence à l'interface d'une couche mince d'oxyde natif et donc une large distribution de l'inhomogénéité de la barrière. La couche d'oxyde d'interface peut être formée soit pendant la préparation de la surface et/ou l'évaporation du métal.

Les variations de la résistance shunt, série, du courant de saturation, de la barrière $\Phi_B$ et du facteur d'idéalité n en fonction de la température sont présentés dans le tableau (IV.6) pour différentes températures de recuit.

On remarque que :

- le facteur d'idéalité diminue avec l'augmentation de la température, sa valeur élevée pour les basses températures est interprétée par la présence d'une densité d'états d'interface qui accentue le passage des porteurs par effet Tunnel [14,15]. On remarque également que la température de recuit agit sur la passivation des défauts présents dans les couches de SCM entrainant l'amélioration du facteur d'idéalité et de la résistance série.
Tableau IV.6 : Extraction des valeurs des paramètres ($R_{sh}$, $R_s$, $n$, $\Phi_B$, $I_0$) caractérisant l’échantillon B.

- Le courant de saturation augmente sur toute la gamme de températures et augmente avec la température de recuit.

Les caractérisations I-V-T permettent également le calcul de la valeur de l’énergie d’activation $E_a$ qui est effectuée à partir des courbes Arrhenius $\ln (I_0)$ en fonction de $1/kT$ en utilisant l’équation (IV.31):

<table>
<thead>
<tr>
<th></th>
<th>80K</th>
<th>120K</th>
<th>160K</th>
<th>200K</th>
<th>240K</th>
<th>300K</th>
</tr>
</thead>
<tbody>
<tr>
<td>$R_{sh} (\Omega)$</td>
<td>407</td>
<td>365</td>
<td>323</td>
<td>294</td>
<td>256</td>
<td>192</td>
</tr>
<tr>
<td>$R_s (\Omega)$</td>
<td>8.85</td>
<td>9.10</td>
<td>9.30</td>
<td>9.60</td>
<td>9.80</td>
<td>10.1</td>
</tr>
<tr>
<td>$n$</td>
<td>10.6</td>
<td>7.02</td>
<td>5.3</td>
<td>4.21</td>
<td>3.52</td>
<td>2.85</td>
</tr>
<tr>
<td>$I_0 (\mu A)$</td>
<td>18.3</td>
<td>20</td>
<td>22.5</td>
<td>25</td>
<td>32.6</td>
<td>45</td>
</tr>
<tr>
<td>$\Phi_B (eV)$</td>
<td>0.12</td>
<td>0.19</td>
<td>0.26</td>
<td>0.33</td>
<td>0.41</td>
<td>0.51</td>
</tr>
<tr>
<td>$R_{sh} (K\Omega)$</td>
<td>14.3</td>
<td>12.2</td>
<td>10.7</td>
<td>7.9</td>
<td>4.009</td>
<td>338</td>
</tr>
<tr>
<td>$R_s (\Omega)$</td>
<td>650</td>
<td>900</td>
<td>295</td>
<td>200</td>
<td>130</td>
<td>32</td>
</tr>
<tr>
<td>$n$</td>
<td>12.9</td>
<td>9.8</td>
<td>7.84</td>
<td>6.61</td>
<td>5</td>
<td>2.9</td>
</tr>
<tr>
<td>$I_0 (\mu A)$</td>
<td>1.32</td>
<td>1.95</td>
<td>3.22</td>
<td>4.46</td>
<td>7.2</td>
<td>18.4</td>
</tr>
<tr>
<td>$\Phi_B (eV)$</td>
<td>0.16</td>
<td>0.24</td>
<td>0.32</td>
<td>0.40</td>
<td>0.49</td>
<td>0.6</td>
</tr>
<tr>
<td>$R_{sh} (K\Omega)$</td>
<td>1.526</td>
<td>9.76</td>
<td>7.49</td>
<td>5.84</td>
<td>9.45</td>
<td>8.62</td>
</tr>
<tr>
<td>$R_s (\Omega)$</td>
<td>30</td>
<td>80</td>
<td>700</td>
<td>850</td>
<td>114</td>
<td>104</td>
</tr>
<tr>
<td>$n$</td>
<td>14.27</td>
<td>10.57</td>
<td>12.27</td>
<td>9.36</td>
<td>4.68</td>
<td>4.015</td>
</tr>
<tr>
<td>$I_0 (\mu A)$</td>
<td>6.84</td>
<td>35</td>
<td>5.39</td>
<td>6.28</td>
<td>7.44</td>
<td>10.8</td>
</tr>
<tr>
<td>$\Phi_B (eV)$</td>
<td>0.15</td>
<td>0.21</td>
<td>0.32</td>
<td>0.4</td>
<td>0.49</td>
<td>0.61</td>
</tr>
</tbody>
</table>
Chapitre IV : Elaboration des hétérojonctions de type Au/SCM/c-Si : Caractérisations électriques, Simulations et Interprétations

$I_0(t) = I_0 \left( \exp \left( \frac{-E_a}{k \times T} \right) \right)$

(IV.31)

Les valeurs sont représentées dans la figure (IV.20) pour les trois températures de recuit.

**Figure IV.20 :** Courbe Arrhenius $\ln(I_0)$ en fonction de $1000/T$ pour différentes températures de recuit : a- (900°C), b- (800°C), c- (700°C).

Nous remarquons que la valeur $E_a$ augmente en fonction de la température de recuit. Un résultat similaire a été trouvé par d’autres travaux [12]. Pi et al. [16] ont signalé que toutes les impuretés ne peuvent pas agir comme dopants pour fournir plus de porteurs libres, une partie des atomes de bore peuvent exister à la surface du silicium au lieu de rester à l’intérieur, ce qui peut réduire la mobilité des porteurs, augmenter l’énergie d’activation et donc diminuer la conductivité.

Le calcul de la valeur de la constante de Richardson $A^*$ à partir de la courbe conventionnelle $\ln(I_0/T^2)$ en fonction de $1000/(T)$ pour la structure d’étude voir figure (IV.21)) en utilisant l’équation (III.14) montre un désaccord entre la valeur théorique $A^*=32A/cm^2K$ et les valeurs expérimentales de cette constante.
Chapitre IV : Elaboration des hétérojonctions de type Au/SCM/c-Si : Caractérisations électriques, Simulations et Interprétations

Figure IV.21 : Courbes conventionnelles de la constante de Richardson pour différentes températures de recuit : a-(900°C), b-(800°C), c-(700°C).

L’interpolation de la courbe Ln (Io/T^2) donne les valeurs de A^*: 1.6 ×10^{-9}, 1.1×10^{-9} et 6 ×10^{-10} A/cm²K^2 respectives pour des recuits 900°C, 800°C, 700°C.

Ces résultats ne sont pas en accord avec la théorie de l’émission thermoïonique classique (voir chapitre III). L’augmentation de la valeur de la barrière Φ_B et la diminution du facteur d’idéalité n avec l’augmentation de la température signifie la présence d’une inhomogénéité dans la distribution spatiale de cette barrière du contact Schottky. L’origine de cette anomalie est due à l’interaction atomique à l’interface métal-semiconducteur [17].

b. Application du modèle Gaussien:

Pour expliquer ces anomalies observées, on a utilisé le modèle de Werner de la distribution Gaussienne de la barrière de potentiel Φ_B explicité dans le chapitre III paragraphe (III.7.4) où on a défini la notion de la barrière de potentiel apparente et celle du facteur d’idéalité apparent.
La variation de la barrière apparente $\Phi_{ap}$ (voir l'équation (III.40)) en fonction de $q/2kT$ de la diode Schottky Au/a-Si: H/c Si selon la distribution Gaussienne est donnée par figure (IV.22).

![Figure IV.22](image)

**Figure IV.22** : Variation de la barrière apparente $\Phi_{ap}$ en fonction de $q/2KT$ de la diode Schottky selon la distribution Gaussienne à différentes températures de recuit a-(900°C), b-(800°C), c-(700°C).

Les valeurs de $\Phi_{B0}$ sont 0.769 eV, 0.90 eV, 0.918 eV avec une inhomogénéité d’interface égale à $\sigma = 0.119V$, 0.127V, 0.132V respectivement pour des recuits 900°C, 800°C et 700°C.

Pour déduire les valeurs de la constante de Richardson $A^*$, on a tracé les courbes représentant la relation modifiée $\ln(I_0/T^2)-(q2\sigma^2)/2kT$ en fonction de $q/(kT)$ (voir l’équation (III.42)) pour la structure d’étude selon la distribution Gaussienne de la barrière de potentiel et qui sont représentées dans la figure (IV.23).
Chapitre IV : Elaboration des hétérojonctions de type Au/SCM/c-Si : Caractérisations électroniques, Simulations et Interprétations

Figure IV.23 : Courbes modifiées $\ln (I_0/T^2)-(q^2/2kT^2)$ en fonction de $q/(kT)$ pour la structure Au/a :Si:H selon la distribution Gaussienne de la barrière de potentiel à différentes températures de recuit a-(900°C), b-(800°C), c-(700°C)

Les valeurs ainsi trouvées sont : $A^*$= 27.11 A/cm² K², 39.64 A/cm² K² et 66.68 A/cm² K² respectivement pour les températures des recuits 900°C, 800°C et 700°C. Les valeurs de $A^*$ égales à 27.11 A/cm² K² et 39.64 A/cm² K² sont proches de la valeur théorique ($A^*$= 32A/cm² K²) pour le silicium de type P.

La variation de $1/n_{ap}$ en fonction de $q/2kT$ selon la distribution Gaussienne est représentée dans la figure (IV.24) en utilisant l’équation (III.41).

Les valeurs du coefficient $\rho_2$ sont égales à 0.47, 0.55 et 0.54 pour des recuits respectifs de 900°C, 800°C et 700°C ; celles du coefficient $\rho_3$ sont égales à 9.44, 78 et 106.9 mV. Un comportement similaire a été obtenu par d’autres travaux de recherche [12].
Figure IV.24 : Variation de $1/n_{ap}$-1 en fonction de $q/2KT$ de la structure Schottky Au/a :Si-H selon la distribution Gaussienne à différentes températures de recuit a-(900°C), b-(800°C), c-(700°C)

Avec ces résultats trouvés, on définit un effet $T_0$ pour lequel le facteur d’idéalité augmente avec la diminution de la température. Cet effet est typique à celui d’une barrière inhomogène dans les diodes Schottky. Selon Saxena [18], ce comportement est typique pour la barrière de potentiel de la diode Schottky (SBD). Le facteur d’idéalité $n$ peut être alors décrit selon la relation (IV.31).

$$n(T) = n_0 + \frac{T_0}{T}$$  \hspace{1cm} \text{ (IV.31)}

La figure (IV.25) présente la variation de $n$ en fonction de $1000/T$. La variation linéaire du facteur d’idéalité en fonction de l’inverse de la température particulièrement pour le recuit 900° permet de déterminer les valeurs des coefficients $n_0$ et $T_0$. 
Les valeurs de $n_0$ et $T_0$ sont égales respectivement à 0.03 et 849 pour un recuit 900°C. Ce résultat est similaire à celui trouvé par d’autres travaux de recherche [12].

La dépendance en température de $n$ suggère que le mécanisme de conduction est contrôlé par l’émission du champ Thermoïonique (TFE) [19,20]. Cela implique que, dans cet échantillon, les effets des états de surface sont plus prononcés en raison de la répartition spatiale de l’épaisseur de la couche d’interface de l’isolant entre le métal et le semi-conducteur.

**Figure IV.25** : Variation de $n_{ap}$ en fonction de $1000/T$ de la structure Schottky Au/a :Si-H selon la distribution Gaussienne à différentes températures de recuit a-(900°C), b-(800°C), c-(700°C)

**c) Validation du modèle Gaussien :**

Pour valider le modèle de Werner, on a fait une simulation analytique en utilisant l’équation (III.38) à des températures de 160, 200, 240 et 300K. Les caractéristiques sont comparées avec les courbes expérimentales pour les températures de recuit de 900°C, 800°C et 700°C voir la figure (IV.26).
Figure IV.26 : Caractéristiques semi logarithmique I-V-T [160- 300K] expérimentales (cercle) et simulées (line) par le modèle de Werner en polarisation directe pour les diodes Schottky Au/a :Si-H dans l’obscurité pour différentes températures de recuit a-(900°C), b-(800°C), c-(700°C).

- A la température de recuit 900°C, la figure (IV.27-a) montre un bon accord entre les courants expérimentaux et simulés ($\phi_{B0}=0.78\text{eV}$, $\sigma=0.115\text{V}$) aux températures 300K, 160K et une convergence aux températures 240, 200K.

- A la température de recuit 800°C, la figure (IV.27-b) montre un très bon accord entre les courants expérimentaux et simulés ($\phi_{B0}=0.90\text{eV}$, $\sigma=0.132\text{V}$) à la température de 300 K et une convergence à la température de 240K et un désaccord aux températures de 200 et 160K.
- A température de recuit 700°C, la figure (IV.27) montre un très bon accord entre les courants expérimentaux et simulés ($\Phi_{B0}=0.93\text{eV}$, $\sigma=0.137\text{V}$) à température de 300 K et un bon accord à 200K et une convergence à 240K et un désaccord à 160K.

Le tableau IV.7 résume les paramètres caractérisant le contact Schottky Au/a :Si-H en utilisant le modèle Gaussien.

<table>
<thead>
<tr>
<th>Température de recuit</th>
<th>900</th>
<th>800</th>
<th>700</th>
</tr>
</thead>
<tbody>
<tr>
<td>$\Phi_{B0}$ (eV)</td>
<td>0.769</td>
<td>0.9036</td>
<td>0.92</td>
</tr>
<tr>
<td>$\Phi_{B0}$ simulé (eV)</td>
<td>0.78</td>
<td>0.90</td>
<td>0.93</td>
</tr>
<tr>
<td>$\sigma$ (V)</td>
<td>0.119</td>
<td>0.127</td>
<td>0.131</td>
</tr>
<tr>
<td>$\sigma$ simulé (V)</td>
<td>0.115</td>
<td>0.132</td>
<td>0.137</td>
</tr>
<tr>
<td>$\rho_3$ (V)</td>
<td>-0.00944</td>
<td>-0.078</td>
<td>-0.1069</td>
</tr>
<tr>
<td>$\rho_2$</td>
<td>-0.4782</td>
<td>-0.558</td>
<td>-0.5466</td>
</tr>
<tr>
<td>$A^*_1$ (A.cm$^{-2}$.K$^{-2}$)</td>
<td>$1.6 \times 10^{-9}$</td>
<td>$1.1 \times 10^{-9}$</td>
<td>$6 \times 10^{-10}$</td>
</tr>
<tr>
<td>$A^*_2$ (A.cm$^{-2}$.K$^{-2}$)</td>
<td>27.11</td>
<td>39.64</td>
<td>66.68</td>
</tr>
<tr>
<td>$\zeta$</td>
<td>-0.0394</td>
<td>-0.3</td>
<td>-0.4095</td>
</tr>
<tr>
<td>$Z$</td>
<td>-0.4782</td>
<td>-0.558</td>
<td>-0.5466</td>
</tr>
<tr>
<td>$n_0$</td>
<td>0.03</td>
<td>0.75</td>
<td>2.3</td>
</tr>
<tr>
<td>$T_0$ (K)</td>
<td>849</td>
<td>1026</td>
<td>1031</td>
</tr>
<tr>
<td>$E_a$ (meV)</td>
<td>30</td>
<td>21</td>
<td>13</td>
</tr>
</tbody>
</table>

Tableau IV.7 : Paramètres caractérisant le contact Schottky Au/a :Si-H en utilisant le modèle Gaussien.

La diminution de la barrière de potentiel en fonction de la température de recuit entraîne probablement la diminution de l’épaisseur d’oxyde [21] et la diffusion des atomes d’hydrogène et la répartition uniforme du dopage ce qui donne un réarrangement du réseau [22].
**IV.4.3 Analyse des échantillons de la série C**

Pour des applications photovoltaïques, les hétérojonctions a-Si:H(p)/c-Si(n) ont donné un rendement très intéressant. Dans ce sens, des échantillons a-Si: H(P)/c-Si(N−) ont été élaborés par la technique PECVD.

Les propriétés matérielles des couches déposées dans un réacteur PECVD dépend fortement de l’interaction entre le flux de croissance et la surface du film. Il a été amplement démontré dans la panoplie d'applications du silicium amorphe hydrogéné a-Si: H que les meilleures performances acquises sont dues à la relation entre propriétés du matériau et paramètres de dépôt (température, pression, débit des gaz précurseurs (SiH₄), H₂, gaz dopants (B₂H₆, PH₃, ...)).

Dans cette section, on a exploité les caractéristiques I-V-T, C-V-F et G-V-F dans le but de connaître l’évolution de la densité des défauts en fonction de la température et de la fréquence des échantillons de la série C : a-Si: H(P)/c-Si(N−) pour différents rapports des débits Hydrogène (H₂)/Diborane(B₂H₆). Leur résistivité est de l’ordre de 10Ω.cm⁻¹.

**IV.4.3.1 Analyse des caractéristiques I-V-T :**

La figure (IV.27) présente les caractéristiques semi logarithmiques I-V-T en polarisation inverse et directe mesurées à l’obscurité pour les échantillons C1 et C2 dans l’intervalle de températures [100- 320] avec un pas de 20K.

*Figure IV.27 :* Caractéristiques semi logarithmique I-V-T mesurées en polarisation directe et inverse pour les échantillons C1, C2.
On remarque que le courant dépend de la tension de polarisation et de la température pour les tensions positives. En polarisation inverse, on remarque une forte dispersion en fonction de la température pour l’échantillon C2 alors que pour l’échantillon C1, celle-ci est faible.

L’extraction des paramètres électriques n, Rs, Rsh et I0 a été faite par la méthode LMS dans l’intervalle de températures [100 - 320K].

La figure (IV.28) présente les caractéristiques semi logarithmiques I-V expérimentales en polarisation inverse et directe à l’obscurité, comparées aux caractéristiques ajustées pour les échantillons C1 et C2 à température de 320K.

**Figure IV.28 :** Caractéristiques semi logarithmique I-V expérimentale et ajustée des échantillons C1, C2 à 320 K.

On montre un bon accord entre les caractéristiques expérimentales et ajustées en polarisation directe et inverse.

Dans la figure (IV.29), on présente la variation de la résistance shunt en fonction de la température. Leurs valeurs importantes concordent avec les valeurs habituellement trouvées dans la littérature montrant un bon contact Métal/Semiconducteur.
Figure IV.29: Variation de la résistance shunt en fonction de la température des échantillons C1, C2.

La figure (IV.30) présente la variation de la résistance série en fonction de la température pour les échantillons C1 et C2.

Figure IV.30 : Variation de la résistance série en fonction de la température des échantillons C1, C2

Les valeurs des résistances série sont égales à 9.19MΩ, 8.69 MΩ à 100K respectivement pour C1, C2 et vont diminuer respectivement jusqu'à 30KΩ, 10 KΩ à 320K. Ces valeurs élevées de la résistance sont peut être dues à la tension de polarisation de la mesure qui a été limitée à 0.5V.

La figure (IV.31) présente la variation du facteur d'idéalité en fonction de la température.
Figure IV.31 : Variation du facteur d'idéalité en fonction de la température des échantillons C1 et C2.

Le facteur d'idéalité est inversement proportionnel à la température. Sa valeur est de 6.92, 9.85 respectivement pour C1, C2 à 100K. Il diminue respectivement jusqu'à 1.74, 2.64 à 320K. La figure (IV.32) présente la variation du courant de saturation en fonction de la température.

Figure IV.32 : Variation du courant de saturation en fonction de la température des échantillons C1 et C2.

Le facteur d'idéalité varie en fonction de la température ; il est nettement supérieur à 1 pour les deux échantillons suggérant un mécanisme de transport complexe. Le mécanisme de transport
dominant peut être déterminé en analysant la dépendance en température du paramètre A donné par l’équation (IV.32).

\[ A(T) = \frac{q}{(k \times T \times n(T))} \]  

(IV.32)

Si le paramètre A dépend de la température, le mécanisme dominant est la diffusion si \( n = 1 \).
Si \( 1 < n \leq 2 \), on a une recombinaison. Par contre si A est constant, on a un effet Tunnel qui domine [23,24]

La figure (IV.33) montre la dépendance du paramètre A en fonction de la température pour les échantillons C1 et C2.

![Figure IV.33](image.png)

**Figure IV.33** : Variation du paramètre A en fonction de température pour les échantillons C1 et C2.

Notons que ce paramètre est presque constant entre 180 et 280K pour l’échantillon C1 et entre 100 et 260K pour l’échantillon C2. La dépendance en température des caractéristiques I-V est par conséquent expliquée par l’effet Tunnel multi-step [24,25].

Quand la température est au-delà de 280K, le paramètre A de l’échantillon C1 n’est pas constant. On peut donc dire qu’aux basses températures, les porteurs sont piégés par les défauts
présents à l'interface a: Si-H / c-Si et lorsque la température augmente, les défauts sont ionisés rendant progressivement plus de porteurs disponibles pour la conduction.

Pour confirmer ce résultat, nous avons analysé également la dépendance en température du courant de saturation $I_0$ donné par l'équation (IV.31). Pour cela, on a utilisé le tracé d'Arrhenius représenté dans la figure (IV-34) constitué de deux régions avec des énergies d'activation de 80meV dans la gamme de températures 180K-280K et 10meV dans la gamme de températures 100K-140K pour l'échantillon C1. Elle est de 116meV dans la gamme de températures 280K-320K et 42meV dans la plage de température de 100K-260K pour l'échantillon C2.

**Figure IV.34** : Courbe Arrhenius $\ln(I_0)$ en fonction de $(1000/T)$ pour les échantillons C1 et C2

Les résultats rapportés dans la littérature montrent que le tracé d'Arrhenius peut avoir une seule pente [23,26] ou une double pente [27]. Une pente unique suggère que l'effet Tunnel se produit via un seul type de défauts / impureté, par conséquent l'énergie d'activation ne change pas en fonction de la température. Par contre la double pente observée dans cette étude et l'indépendance de A avec la température est une indication que le courant Tunnel passe par ou
moins deux types de défauts qui sont impliqués dans le processus du courant Tunnel assisté par les défauts de capture /émission [27].

Pour l’échantillon C1, quand la température dépasse 280K, la valeur du facteur d’idéalité est autour de 2 ce qui implique que le courant de génération recombinaison (voir l’équation III.71) est le phénomène responsable de la conduction aux températures 300K et 320K.

La figure (IV.35) présente les caractéristiques semi logarithmiques expérimentale de C1 et simulé par le courant de Génération recombinaison de l’hétérojonction a:Si-H/c-Si aux températures de 300 et 320K. Les caractéristiques montrent un très bon accord avec une durée de vie de 0.1µs et un dopage de 5 \(10^{14}\)cm\(^{-3}\) [28].

![Courant en fonction de la tension](image.png)

**Figure IV.35** : Caractéristiques semi logarithmiques (I-V) expérimentale de C1 (sphériques) et simulée par le courant de génération recombinaison des hétérojonctions a:Si-H/c-Si (line) aux températures de 300 et 320K à l’obscurité.

Les caractéristiques I-V ont mis en évidence l’éventualité de la présence des défauts à l’interface a-Si :H/c-Si. A cet effet, l’exploitation des caractéristiques C-V et G-V en fonction de la fréquence est un outil efficace pour estimer la densité de ces défauts.
IV.4.3.2 Analyse des caractéristiques C-V-F et G-V-F de la série C :

La densité d’états d’interface joue un rôle important dans l’étude des propriétés électriques et les mécanismes de conduction des hétérojonctions ; tout l’intérêt est de connaître leur densité et comment les réduire afin d’améliorer la qualité d’interface.

a) Spectroscopie d’impédance :

La spectroscopie d’impédance consiste à mesurer la réponse (capacité, conductance etc.) en appliquant une excitation de faible amplitude (tension alternative) sur une large gamme de fréquences (40Hz-110MHz).

La figure (IV.36) représente le banc de spectroscopie d’admittance utilisé pour mesurer les caractéristiques capacité-tension C(V) conductance-fréquence G(V) des échantillons.

Figure IV.36 : Banc expérimental de spectroscopie d’impédance.

Le montage comporte :
1: Un régulateur de température de type Lake shore 335 qui permet la mesure et la régulation de la température de l’échantillon.
2: Un pont d’impédance Agilent 4294 A.
3: Un cryostat à azote liquide Janis VPF-800 permettant de varier la température entre 77 K et 800 K.
4: Une pompe primaire Alcatel.
5: Un ordinateur.
6: Un multimètre Agilent 34401A permettant la lecture de la tension.
7: Un générateur de courant Keithley 220 délivrant des courants d’intensité variant de $10^{-9}$ à 0.1A.
On commence par fixer l’échantillon en le collant par une laque d’argent sur une plaquette de céramique (sert à isoler l’échantillon). L’échantillon est lié (par l’intermédiaire de fils de contacts) aux électrodes du cryostat par soudure d’indium (cas fil d’or) ou d’étain (cas fil de cuivre). La manipulation est faite à différentes températures. Pour cela, l’échantillon est placé dans un cryostat. Celui-ci est constitué d’un réservoir intérieur entouré par un réservoir extérieur.

Un vide est réalisé entre les deux réservoirs pour assurer l’isolation thermique (former une paroi adiabatique). Les mesures à basses températures sont réalisées en ajoutant de l’azote liquide (on peut descendre jusqu’à 80 K). Le refroidissement est assuré par la conduction à travers une tige en acier émergent dans le réservoir intérieur. On peut augmenter la température jusqu’à 800 K. Le chauffage de l’échantillon est assuré par une résistance chauffante qui est commandée par le régulateur de température (la résistance chauffe la plaque de cuivre sur laquelle l’échantillon est collé). Une diode en silicium placée à côté de l’échantillon, permet de mesurer la température.

b) Caractérisation C-V-F et G-V-F:

Les caractéristiques capacité-tension-fréquence (C-V-F) et de conductance-tension-fréquence (G-V -F) mesurées donnent des informations importantes sur la distribution des états de surface et sur la résistance série de la structure MIS [29]. Cette technique a également été adaptée pour les diodes à hétérojonction Au / a-Si: H / c-Si [30].

Figure IV.37 : Caractéristiques expérimentales capacitance-tension (C-V-F) en fonction de la fréquence des échantillons C1 et C2.
Les figures (IV.37) et (IV.38) montrent les caractéristiques expérimentales (C-V –F) et (G-V –F) pour les hétérojonctions a-Si: H (p) / c-Si(n) mesurées en fonction de la tension [-3 3V] pour diverses fréquences [10K-1MHZ] à température ambiante.

![Graphique C1 et C2](image)

**Figure IV.38 :** Caractéristiques expérimentales conductance-tension en fonction de la fréquence des échantillons C1 et C2.

On note que les caractéristiques C-V ont des régions d’accumulation, d’appauvrissement et d’inversion typiques d’une diode à hétérojonction pour chaque fréquence. La valeur de la capacité diminue avec l’augmentation de la tension de polarisation appliquée avec un pic observable quand la tension est de -1,5 V. La valeur maximale de la capacité dans la région de polarisation inverse diminue avec la croissante de la fréquence. La position de crête est décalée lorsque la tension de polarisation augmente.

Ce pic peut être attribué à la distribution de la densité d’états Nss selon Ho [29] qui peut facilement suivre un signal alternatif externe à basses fréquences mais ne peut pas suivre les variations du signal hautes fréquences. Aux basses fréquences, la densité de charges à la surface donne une capacité excédentaire qui s’ajoute à la mesure de la capacitance. Après la position de pointe, la capacité commence à se décliner rapidement.

Contrairement à la capacité, nous montrons sur la figure (IV.38) que la conductance augmente avec la croissance de la fréquence. Il est clair que le changement de la capacité et de la conductance devient plus efficace en particulier dans les régions d’appauvrissement et d’inversion alors qu’il est négligeable dans l’accumulation.
L’anomalie du pic dans les courbes C-V en polarisation inverse a été également observée dans des études expérimentales dans la littérature. Werner [31] et Bati [32] ont montré que l’anomalie du pic est également due à la résistance série $R_s$ et à l’injection des porteurs minoritaires et probablement à la présence d’une couche d’oxyde interfaciale.

c) **Caractéristiques $R_s$-V et $R_s$-f-V** :

La résistance série est un paramètre très important qui affecte le comportement idéal des caractéristiques C-V et G-V. La valeur réelle de $R_s$ peut être obtenue à partir de la méthode l'admittance développée par Nicollian et Brews [33].

$$R_s = \frac{G_m}{G_m^2 + (\omega C_m)^2} \quad (IV.33)$$

Les valeurs de $R_s$ sont obtenues à partir des valeurs $C_m$ et $G_m$ données sur les figures (IV.38) et (IV.39) pour une tension de polarisation donnée pour chaque fréquence. La figure (IV.39), montre que $R_s$ diminue avec une fréquence croissante.

**Figure IV.39** : Courbes $R_s$-f en fonction de la fréquence pour les échantillons C1 et C2.

Les courbes $(R_s-V)$ montrent un double pic pour C2 entre 0 V et -1 V et un seul pic pour C1 à environ -0.5 V qui disparaît à des fréquences suffisamment élevées. On voit clairement que la résistance série dépend également de la tension de polarisation.
Dans la figure (IV.40), nous avons obtenu la dépendance en fréquence de $R_s$ à diverses tensions de polarisation directe et inverse. Les valeurs de la résistance série ont été obtenues dans la gamme de 5000-75Ω pour l’échantillon C1 et 8480-80Ω pour l’échantillon C2.

On note que le banc de spectroscopie d’impédance nous a permis de faire des mesures avec des tensions de polarisation allant jusqu’à 3V.

A partir de ces résultats, nous remarquons que les valeurs de la résistance série ne sont pas affectées par les hautes fréquences; la charge à l’interface ne peut pas suivre le signal AC [34-36] aux hautes fréquences, l’échantillon C2 a une plus grande résistance.

Figure IV.40 : Courbe Rs-f en fonction de la tension de polarisation pour Les échantillons C1 et C2.

d) Caractéristiques Nss-f :

La dépendance en fréquence du profil N$_{ss}$ est également obtenue en utilisant la méthode Hill-Coleman [37]. La valeur de N$_{ss}$ peut être déterminée à partir de la capacité et de la conductance G /$\omega$. Les valeurs pour chaque fréquence sont données comme suit:

$$qAN_{ss} = C_{ss}$$  (IV.34)
Chapitre IV : Elaboration des hétérojonctions de type Au/SCM/c-Si : Caractérisations électriques, Simulations et Interprétations

\[ N_{SS} = \frac{2}{qA} \left( \frac{(G/\omega)_m}{C_i} \right)^2 + \left( \frac{1 - C_m/C_i}{2} \right)^2 \]  

(IV.35)

Où A est la zone de la diode, \( \omega \) est la fréquence angulaire

(\( \omega = 2\pi f \)), \( C_m \) et \( (G/\omega) \) sont la capacité et la conductance mesurées qui correspondent aux valeurs de pointe et \( C_i \) est la capacité de la couche interfaciale. Les valeurs de \( C_i \) sont obtenues à partir des mesures C-V-f et G-V-f en accumulation en utilisant la relation suivante [38]:

\[ C_i = C_m \left( 1 + \frac{G_m^2}{\omega^2 C_m} \right) \]  

(IV.36)

Comme on peut le voir sur la figure (IV.41), les valeurs de \( N_{SS} \) de l'échantillon C2 augmentent aux basses fréquences.

\[ \text{Figure IV.41: Variation de la densité d'états d'interface (} N_{SS} \text{) en fonction de la fréquence des échantillons C1 et C2} \]

Cela suggère que les états d'interface sont plus importants que celles à haute fréquence. Cependant pour l'échantillon C1, les valeurs de \( N_{SS} \) dans la gamme de fréquence de 10-100 kHz diminuent avec une fréquence croissante mais à la fréquence égale à 300 kHz, la courbe (\( N_{SS-f} \)) montre un pic. Cela est peut être attribué à la distribution de la densité particulière des charges à l'interface ou des pièges présents dans les couches minces de a-Si: H ou à l'hétérogénéité de la couche déposée.
Les valeurs des densités d'état l'interface ont été obtenues dans les plages de $7 \times 10^{11} - 2.3 \times 10^{11}$ cm$^{-2}$ eV$^{-1}$ pour l'échantillon C1 et $2.1 \times 10^{12} - 7 \times 10^{10}$ cm$^{-2}$ eV$^{-1}$ pour l'échantillon C2.

e) Capacité corrigée $C_c$:

Les valeurs de la capacité et de la conductance mesurées $C_m$ et $G_m$ sont corrigées en éliminant l'effet de la résistance série par les expressions suivantes [39]:

$$C_c = \frac{[G_m^2 + (\omega C_m)^2]C_m}{a^2 + (\omega C_m)^2}$$  \hspace{1cm} (IV.37)

$C_c$ est la capacité corrigée avec le paramètre $a$ défini par :

$$a = C_m - [G_m^2 + (\omega C_m)^2]R_S$$  \hspace{1cm} (IV.38)

La figure (IV.42) illustre la variation de $C_c$ et de $C_m$ en fonction de la tension de polarisation à 10 kHz.

![Figure IV.42: Caractéristiques $C_m$-V et $C_c$-V à 10KHz.](image)

Pour la polarisation négative, on note une augmentation de la capacité $C_c$ par rapport à $C_m$, aussi le changement est au niveau du régime d’accumulation pour C1 et au niveau du régime d’accumulation et d’appauvrissement pour C2. Ces résultats montrent la présence de la couche d’oxyde dans C1 et C2.
La figure (IV.43) illustre la variation de \((C_c/C_m)_{\text{max}}\) en fonction de la fréquence pour les échantillons C1 et C2. Elle montre que pour C2, le rapport de \((C_c/C_m)_{\text{max}}\) est décroissant avec la croissance de la fréquence dans l’intervalle \([10K-1MHZ]\), Cela est prévisible par la réponse des états d’interface de la phase amorphe qui domine à basses fréquences, par contre pour C1 le rapport de \((C_c/C_m)_{\text{max}}\) est décroissant avec la croissance de la fréquence dans l’intervalle de \([10K-100KHz]\) et \([100K-1MHz]\).Dans ce cas, l’échantillon C1 est formé d’une alternance des phases amorphe et nanocristalline. Nous avons donc attribué la décroissance de \((C_c/C_m)_{\text{max}}\) en fonction de la fréquence à la réponse des états d’interface de la phase amorphe et l’augmentation de \((C_c/C_m)_{\text{max}}\) en fonction de la fréquence à la réponse des états d’interface de la phase nanocristalline.

**Figure IV.43:** La courbe du rapport \((C_c/C_m)_{\text{max}}\) en fonction de la fréquence.

A partir des caractéristiques I-V-T, C-V-F et G-V-F obtenues, on remarque que l’échantillon C1 est plus performant que l’échantillon C2 ; cela est dû au flux du gaz d’hydrogène \(H_2\) qui a certainement endommagé la surface c-Si par excès des \(H\) radicaux et font augmenter la densité des états d'interface avec l’absence de la température de recuit \([40]\).

**IV.5 Conclusion :**

Dans ce chapitre après avoir donné les différentes étapes de réalisation des structures d'étude, nous avons présenté les différents moyens de caractérisation électrique qui nous ont
permis de tracer les caractéristiques électriques de type (I-V) mesurées à la température ambiante et à différentes températures de recuit et de mesure ainsi que les caractéristiques de type (C-V) et (G-V) mesurées à différentes fréquences et différentes tensions de polarisation.

A travers ces mesures, nous avons mis en évidence l’effet des paramètres de dépôt des techniques d’élaboration PECVD et ou HWCVD en analysant les mécanismes de transport pour les trois séries d’échantillons en utilisant un formalisme mathématique.

Nous avons constaté que les caractéristiques (I-V) des échantillons de la série A et B avec substrat de type N fortement dopé présentent un comportement électrique similaire à celui d’un contact Métal-Semiconducteur ou Schottky.

Dans le cas des échantillons A1 et A2, la valeur importante du facteur d’idéalité reflète d’une part l’inhomogénéité de la barrière de potentiel suite à la présence des défauts à l’interface M/SC ou éventuellement à la présence d’une couche d’oxyde natif entre le métal et le semiconducteur. Les courbes I(V) sont quasi symétriques en directe et en inverse, ceci est dû soit à un comportement ohmique, soit à un courant inverse qui croît avec la tension inverse appliquée semblable à un courant Tunnel.

Pour l’échantillon A3, le courant Thermoïonique domine quand la tension de polarisation est supérieure à 0.4V par contre le courant de fuite domine quand la tension est inférieure à 0.4 V.

Ce comportement électrique est corrélate aux conditions de dépôt des techniques et /ou PECVD/HWCVD (puissance de dépôt et teneur d’hydrogène). L’utilisation des deux techniques alternées montrent que l’alternance HWCVD/PECVD utilisée pour l’échantillon A3 est mieux adaptée que l’alternance PECVD/HWCVD pour l’échantillon A2.

Pour la série B, l’analyse des caractéristiques I-V-T en fonction de la température de recuit a montré une augmentation de la valeur de la barrière ΦB et une diminution du facteur d’idéalité n avec l’augmentation de la température qui signifie la présence d’une inhomogénéité dans la distribution spatiale de la barrière du contact Schottky.

L’inhomogénéité de la barrière est expliquée par le modèle de Werner. La validation de ce modèle à température [160- 300K] montre que pour la température de recuit 900°C, on a une bonne convergence entre les caractéristiques expérimentales et simulées. Ce résultat est dû certainement à la diminution de la couche d’oxyde, la diffusion des atomes dopants et la passivation de l’hydrogène.
Pour les échantillons de la série C qui présentent une hétérojonction à :Si(p)-H/c-Si(n) avec un substrat toujours de type N mais avec une concentration moyenne, le facteur d’idéalité varie en fonction de la température ; il est nettement supérieur à 1 pour les deux échantillons suggérant un mécanisme de transport complexe. Le mécanisme de transport dominant est déterminé en analysant la dépendance en température du paramètre A.

Le paramètre A est indépendant de la température alors on a un courant Tunnel multi step assisté au moins par deux défauts 10 meV et 80 meV pour C1 sur l’intervalle [100 -280K], 42meV et 116meV pour C2 sur l’intervalle [100- 320K].

Quand la température dépasse 280K, le courant de génération -recombinaison est le phénomène responsable de la conduction pour l’échantillon C1. L’échantillon C1 est plus idéal par rapport à C2.

L’étude des caractéristiques C-V et G-V en fonction de la fréquence montrent que :
-les courbes R$_S$ –f donnent un seul pic pour l’échantillon C1 et un double pic pour l’échantillon C2 qui diminue avec l’augmentation de la fréquence; les valeurs de R$_S$ de l’échantillon C1 sont inférieures à celles de l’échantillon C2.

- Pour une fréquence inférieure à 200 kHz, les valeurs de N$_{SS}$ obtenues pour l’échantillon C1 sont inférieures à celles de l’échantillon C2.

- Un pic est observable aux environs de 300 kHz pour l’échantillon C1, cela est attribué à la densité particulière des charges à l’interface ou aux pièges présents dans les couches de a-Si: H ou à l’hétérogénéité de la couche déposée. La bonne réponse électrique de l’échantillon C1 par rapport à C2 est due essentiellement au flux du gaz H2 qui endommage la surface de c-Si par excès des H radicaux et augmente la densité des états d’interface.
Chapitre IV : Elaboration des hétérojonctions de type Au/SCM/c-Si : Caractérisations électriques, Simulations et Interprétations

Référence :

CONCLUSION

GÉNÉRALE
L’objectif de cette thèse est la Caractérisation, Modélisation et Simulation des phénomènes de transport dans les couches de silicium déposées par les techniques PECVD et HWCVD.

Des échantillons ont été élaborés par la méthode PECVD et/ou HWCVD au sein du Laboratoire de Physique des Matériaux et des Nanomatériaux appliquée à l’Environnement à la Faculté des Sciences de Gabès la PhyMNE (Tunisie).

Un rappel sur les propriétés physiques et électriques du silicium et ses congénères a été donné dans le premier chapitre. Le deuxième chapitre a fait l’objet de la description des différentes techniques de dépôt du silicium couches minces SCM en mettant l’accent sur la technique de dépôt chimique en phase vapeur assisté par plasma (PECVD) et la technique de dépôt chimique en phase vapeur assisté par filament chaud (HWCVD).

Dans le troisième chapitre, on a donné des généralités sur les différents types d’hétérostructures qui sont à l’origine de dispositifs à semiconducteurs. On a rappelé le formalisme mathématique qui détermine la caractérisation, la modélisation et la simulation des propriétés électriques des dispositifs élaborés. Le quatrième chapitre a été consacré à un compte rendu des mesures expérimentales effectuées et des résultats de simulation obtenus.

Ainsi, Nous pouvons conclure à partir de l’ensemble des résultats obtenus que:

**Pour les échantillons de la série A**

L’étude est faite en fonction de la puissance de dépôt et de l’alternance des techniques. Nous remarquons que le facteur d’idéalité est supérieur à 2 pour les trois échantillons A1, A2, A3 qui ont un comportement électrique similaire à celui d’une diode Schottky.

Les valeurs des résistances série sont égales respectivement à 18, 80.2, 9.32 Ω pour A1, A2 et A3. Les valeurs des résistances shunts sont 440, 39K, 150Ω respectivement pour A1, A2, et A3. Les énergies de la barrière de potentiel sont égales à 0.56eV, 0.67eV, et 0.65 eV respectivement pour A1, A2 et A3.

La comparaison des caractéristiques (I-V) simulées de la série d’échantillons A avec les caractéristiques expérimentales montrent que les mécanismes de transport dominants sont :

- L’effet tunnel assisté par défauts est prédominant presque sur toute la gamme de tension de polarisation pour A1 et A2.
Pour A3, le courant thermoïonique est le mécanisme responsable de la conduction quand la tension dépasse 0.4V, la valeur du facteur d’idéalité met en évidence la présence de l’inhomogénéité de la barrière.

L’effet du courant de fuite est observable pour les faibles tensions pour les ‘échantillons A1 et A2.

Les résultats montrent que l’augmentation de la puissance de dépôt provoque la déformation de la surface ou la présence des gravures sur la couche.

L’alternance des techniques PECVD/HWCVD ou HWCVD/PECVD a aussi une importance, les résultats obtenus montrent que A3 (HWCVD/PECVD) a une meilleure performance que A2.

Pour l’échantillon de la série B

L’étude est faite en fonction de la température de recuit dans l’intervalle de température [80 300K]. L’extraction des paramètres électriques à partir des caractéristiques I-V-T de la structure Au/a:Si-H, montre que :

Le facteur d’idéalité décroit en fonction de la température de mesure et en fonction de la température du recuit. Les valeurs diminuent respectivement pour des recuits de 900°C, 800°C et 700°C jusqu’à 2.85, 2.9, 4.015 à la température 300K.

Les valeurs de la barrière ΨB sont inversement proportionnelles à la température de recuit. Les valeurs des énergies d’activation sont aussi en fonction de la température du recuit.

Le tracé de la courbe conventionnelle ln(Io/T^2) en fonction de 1000/(T) pour déterminer la constante de Richardson A* montre qu’il y a un désaccord entre les valeurs théoriques et expérimentales pour des recuits 900°C, 800°C et 700°C, ceci s’explique par la présence d’une inhomogénéité dans la distribution spatiale de la barrière du contact Schottky.

L’explication est faite par le modèle de Werner qui détermine les paramètres suivants :

Les valeurs de ΦB0 sont 0.769eV, 0.90eV et 0.918 eV avec une inhomogénéité d’interface 0.119V, 0.127V et 0.132V respectivement pour des recuits 900°C, 800°C et 700°C.

Les valeurs de A* modifiées trouvées A* = 27.11 A/cm²K², 39.64 A/cm²K² respectivement pour la température du recuit 900°C, 800°C sont proches à celle donnée par la théorie (A*= 32A/cm²K²) pour la structure Au/a-Si:H.
La validation du modèle se fait par une simulation analytique des caractéristiques I-V-T, la comparaison avec la caractéristique expérimentale a montré qu’à la température de recuit 900°C, le modèle de Werner donne une très bonne convergence avec les caractéristiques expérimentales dans la gamme des températures [160- 300K]. Ce résultat obtenu pour l’échantillon B à température de recuit 900°C est certainement due aux états de surface qui sont plus prononcés en raison de la répartition spatiale de l’épaisseur de la couche isolante native entre le métal et le semi conducteur.

**Pour les échantillons de la série C**

L’étude est faite en fonction du rapport entre les débits hydrogène et diborane

💡 **A partir des caractéristiques I-V-T :**

L’extraction des paramètres électriques à partir de la structure a : Si(p)-H/c-Si(n-) dans la gamme de températures [100- 320K] montre que :

Le facteur d’idéalité décroit en fonction de la température pour les deux échantillons C1 et C2. Les courants de saturation sont proportionnels à la température pour les deux échantillons C1 et C2. Les valeurs des résistances série sont inversement proportionnelles à la température.

Le tracé du paramètre A en fonction de la température montre que le courant Tunnel est le mécanisme responsable de la conduction dans l’intervalle de températures [100- 280K] pour C1 et [100-320K] pour C2.

Les allure de Arrhenius montrent que le courant Tunnel assisté par au moins deux types de défauts, de 80meV dans la gamme de température [180-280K] et 10meV dans la gamme de température [100-140K] pour l’échantillon C1, et 116meV dans la gamme de température [280-320K] et 42meV dans la plage de température de [100-260K] pour l’échantillon C2 est le phénomène responsable de la conduction. Par contre pour C1, quand la température de mesure dépasse 280K, le facteur d’idéalité est autour de 2 ce qui montre que le courant de Génération- recombinaison est responsable de la conduction, cela à été confirmé par la simulation analytique du modèle de Génération recombinaison avec une durée de vie de 100ns.
A partir des caractéristiques C-V-F et G-V-F

Le pic observé dans les caractéristiques C-V-F et G-V-F montrent :

- La présence de la résistance série
- La présence des états d’interface N_{ss}.

Les valeurs des résistances obtenues par la méthode de Nicollian et Brews sont dans la gamme de 5000-75Ω pour l'échantillon C1 et 8480-80Ω pour l'échantillon C2 dans la gamme de fréquences [10K-1MHz].

Le double pic est aussi observé pour C2 entre 0 V et -1 V et un seul pic pour C1 à environ -0,5 V qui disparaît à des fréquences élevées.

Les caractéristique et Nss-F montre que :

- Pour les basses fréquences et les fréquences intermédiaires : Les pièges peuvent suivre plus ou moins le signal de modulation (a.c). Ce phénomène se traduit par une capacité C_{ss} supplémentaire due aux états d’interfaces N_{ss}.
- Pour les hautes fréquences, les pièges ne peuvent pas suivre le signal de modulation (a.c) et la capacité totale de la diode est égale à la capacité différentielle du semiconducteur C_{sc}.
- Les valeurs des états d’interface N_{ss} obtenues par la méthode Hill et Coleman sont dans la gamme de $7 \times 10^{11}$ - $2.3 \times 10^{11}$ cm$^{-2}$ eV$^{-1}$ pour l'échantillon C1 et $2.1 \times 10^{12}$ - $7 \times 10^{10}$ cm$^{-2}$ eV$^{-1}$ pour l'échantillon C2.

La courbe $(N_{SS-f})$ montre un pic autour de 300kHz pour C1, ceci est dû essentiellement à la distribution de la densité particulière des charges à l'interface ou des pièges présents dans les couches a-Si: H ou l’hétérogénéité de la couche déposée.

La bonne réponse électrique de l'échantillon C1 par rapport à C2 est due essentiellement au flux du gaz H2 qui endommage la surface de c-Si par excès des H radicaux et augmentent la densité des états d'interface.

On conclut pour dire que les paramètres électriques et le taux du redressement des échantillons de la série C sont meilleurs que ceux des séries A et B cependant la valeur de la résistance série est importante cela est due essentiellement au problème d’oxydation du contact Argent ; l’absence de la température de recuit du contact, et la diminution du débit de la bouteille de diborane en fonction du temps (Année, mois, jours) qui a donné des couches faiblement dopées.
Nous espérons que ce travail contribuera à la compréhension de la croissance du silicium en couches minces par les techniques les plus utilisées PECVD et HWCVD à travers des caractéristiques électriques en moyennant les méthodes d’extraction des paramètres permettant de prédire le meilleur comportement et les mécanismes responsables de conduction électrique.

Nous pensons, par contre, que la caractérisation par d’autres méthodes s’avère nécessaire pour avoir plus d’informations sur les propriétés des couches de SCM en particulier la densité de défauts surtout le produit mobilité× durée de vie ($\mu \times \tau$), SSPC (Steady State Photoconductivity) ou MPC (Modulated Photo Current). Ces caractérisations supplémentaires permettront de discerner les conditions optimales des couches SCM de bonne qualité électronique pour les applications photovoltaïques.
Analysis of Capacitance–Frequency (C–V–F) and Conductance–Frequency (G–V–F) Characteristics of a-Si:H/c-Si Heterojunction

N. Bouziane1,∗, S. Tizi1, B. Zebentout1, R. Djemai2, N. El Ghoul2, and K. Khirouni2

For the study structures, the effect of B2H6 and H2 gases during the deposition of a-Si:H layers by PECVD technique has been clearly identified on the measured capacitance and conductance curves. The increase of the capacitance for the low frequencies highlights the presence of a density of interface states (Nss) usually found in the amorphous silicon deposited by the different variants of CVD techniques (LPCVD, PECVD, HWCVD, . . . ). Furthermore, the voltage and frequency dependence of the series resistance were calculated from (C–V–F) and (G–V–F) measurements and plotted as a function of voltage and frequency for the samples where some differences are noted. The distribution profile of Rss–V shows a difference between the two samples where the peak is more significant for the sample S2 than for the sample S1. The values of interface state densities and series resistance from capacitance–voltage–frequency (C–V–F) and conductance–voltage–frequency (G–V–F) measurements are obtained in the ranges of (7 × 1011–2.3 × 1012 cm−2 eV−1; 5000–75 Ω) for the S1 sample and (2.1 × 1012–7 × 1013 cm−2 eV−1; 8480–80 Ω) for the S2 sample. The obtained results confirm that the interface states density (Nss) and series resistance (Rss) are important parameters which have a direct impact on the electrical behavior of Au/a-Si–H/c-Si/Ag heterojunctions.

Keywords: Amorphous Silicon, Heterojunction, PECVD Deposition, (C–V–F) and (G–V–F) Characteristics, Interface States Density.

1. INTRODUCTION

Hydrogenated amorphous silicon (a-Si:H) is the non-crystalline form of silicon used for large area electronics, with major applications in displays, image sensing and photovoltaic applications.

The main interest of a-Si:H comes from thin film deposition technology by employing a low-temperature and low cost substrates. The method basically is a special form of Chemical Vapor Deposition (CVD), which is known as Plasma Enhanced Chemical Vapor Deposition (PECVD). The material properties of layers deposited in a PECVD reactor strongly depend on the interaction between the growth flux and the film surface.1 It has been amply demonstrated in the panoply of a-Si:H applications that the best performances acquired are due to the relation between material properties and deposition parameters.2

The intention of this paper falls within the scope of the a-Si:H applications in solar cells based on a-Si:H/c–Si heterojunction which have reached high efficiency. However, interfaces quality and its transport properties are critical and all the interest is to know their density and how to reduce them in order to improve the interface quality and device performance.

In this work, the Au/a-Si–H/c-Si heterojunction diodes were fabricated as follows: the a-Si:H is deposited using plasma-assisted chemical vapor deposition (PECVD) technique to control hydrogen content and doping layer. This deposition technique uses the chemical decomposition of silane (SiH4). The hydrogenated material is doped by incorporating the diborane (B2H6) into the deposition chamber. We investigated how the (H2) and the (B2H6) gases flow rates affected the electrical characteristics.

It is also known when a voltage is applied across the structure; the combination of the interface states density,
and series resistance $R_s$ of the device will share applied bias voltage.

In the literature, for the estimation of the series resistance, the most commonly used method is the conductance technique developed by Nicollian and Goetzberger.\(^3\)

In this technique, the forward and reverse-bias capacitance–voltage-frequency ($C–V–F$) and conductance–voltage-frequency ($G–V–F$) measurements give the important information about the distribution of surface states and about series resistance of the MIS structure.\(^4\) This technique was also adapted for Au/$a$-Si:H/c-Si heterojunction diodes.\(^5\)

When localized interface states exist, the device behaviour is different than ideal case due to their presence which can drastically reduce the expected performance. This behaviour is obtained at low frequencies when the surface states can easily follow the AC signal and yield an excess capacitance, which depends on the relaxation time of the surface states and the frequency of AC signal.

In contrary, at high frequencies the charges at the surface states cannot follow an AC signal. The purpose of this contribution is to show the effect of the density of interface states and that of the series resistance on the $C–V–F$ and $G–V–F$ characteristics by varying the frequency.

### 2. EXPERIMENTAL PROCEDURE

The heterojunction diodes were fabricated by depositing a layer of $p$-type $a$-Si:H on $n$-type of $c$-Si wafer chips (orientation of (100) and resistivity of 10 $\Omega$·cm) by using PECVD (Plasma-Enhanced Chemical Vapor Deposition) with conventional (13.56 MHz) radio frequency (RF). All non-crystalline silicon layers were deposited from a silane-hydrogen gas mixture with Silane concentration equal to $SC = [\text{SiH}_4]/[\text{SiH}_4 + \text{H}_2]^6$ and diborane ($\text{B}_2\text{H}_6$, diluted with hydrogen (1%)) gas which are used as gas precursors. All the steps of the wafer cleaning as well as the metal contacts of the front and rear faces of the Au/$a$-Si:H/c-Si/Ag heterojunction are the same reported in the works of N. El Ghoul and al.\(^7\) The difference of samples is in the $\text{H}_2$ and $\text{B}_2\text{H}_6$ gases. The Table I gives the deposition conditions of the elaborated samples.

<table>
<thead>
<tr>
<th>Table I.</th>
<th>Conditions of PECVD deposition of $a$-Si:H for S1 and S2 samples.</th>
</tr>
</thead>
<tbody>
<tr>
<td>Deposition conditions</td>
<td>Sample S1</td>
</tr>
<tr>
<td>Substrate (10 $\Omega$·cm)</td>
<td>c-Si(N)</td>
</tr>
<tr>
<td>T ($^\circ$C)</td>
<td>300</td>
</tr>
<tr>
<td>Pressure (Torr)</td>
<td>0.5</td>
</tr>
<tr>
<td>Power plasma (mW)</td>
<td>3</td>
</tr>
<tr>
<td>Time deposition (min)</td>
<td>30</td>
</tr>
<tr>
<td>Flow $\text{SiH}_4$ (scm)</td>
<td>20</td>
</tr>
<tr>
<td>Flow $\text{H}_2$ (scm)</td>
<td>20</td>
</tr>
<tr>
<td>Flow $\text{B}_2\text{H}_6$ (scm)</td>
<td>20</td>
</tr>
</tbody>
</table>

The capacitance-voltage $C–V$ and conductance $G–V$ characteristics are measured by an impedance analyzer Agilent 4294A from 10 kHz to 1 MHz.

### 3. RESULTS AND DISCUSSION

Figures 1 and 2 show the experimental $C–V–F$ and $G–V–F$ characteristics for the two types of $a$-Si:H(p)/c-Si(n) heterojunction diodes measured as a function of forward and reverse voltage for various frequencies at room temperature.

It will be noted in Figure 1 that the $C–V$ characteristics have accumulation, depletion and inversion regions typical of a heterojunction diode for each frequency.

The value of the capacitance decreases with increasing applied bias voltage at about $–1.5$ V and it shows an anomalous peak. The peak value of capacitance in the reverse bias region decreases with increasing frequency. The peak position is shifted when the bias voltage increases.

This peak can be attributed to the density distribution of $N_i$, according to Ho and al.\(^4\) and which can easily follow an external AC signal at low frequencies but cannot follow it at high frequencies.

At low frequencies, the charge density at the surface gives an excess capacitance that adds to the measured capacitance. After the peak position, the capacitance begins to decline rapidly.

Contrary to the capacitance, we show in Figure 2 that conductance increases with increasing frequency.

It is clear that the change in capacitance and conductance becomes more effective especially in depletion and inversion regions while it is negligible in the accumulation region.

The anomalous peak in the reverse bias $C–V$ plots was also observed in number of experimental studies in the literature. Werner and al.\(^8\) and Bati and al.\(^9\) have shown
that the anomalous peak is due also to the series resistance $R_s$ and to the minority carrier injection.

The series resistance is then a very important parameter which affects the ideal behavior of $C-V$ and $G-V$ characteristics. The real value of $R_s$ can be obtained from the admittance method developed by Nicollian and Brews.\(^\text{10}\) The $R_s$ values were obtained from $C_m$ and $G_m$ values given in Figures 1 and 2 for a given bias voltage for each frequency using the following relation:1\(^\text{11}\)

$$R_s = \frac{G_m}{\omega^2 C_m^2 + G_m^2}$$

As shown in Figure 3, the value of $R_s$ decreases with increasing frequency for S1 and S2 samples. The $(R_s-V)$ plots show double peak for S2 between 0 V and $-1$ V and a single peak for S1 at about $-0.5$ V and disappears at sufficiently high frequencies. It is clearly seen that the series resistance is also dependent on bias voltage.

In Figure 4, we obtained the frequency dependence of $R_s$ at various forward bias voltages. The values of series resistance were obtained in the range of 5000–75 $\Omega$ for the S1 sample and 8480–80 $\Omega$ for the S2 sample.

From this result, we notice that the values of the series resistance are not affected for the high frequencies; the charges at interface cannot follow the AC signal.\(^\text{4,12–14}\) At the low frequencies, the sample S2 has a greater resistance. This is probably due to the effect of the flow rates of $(B_2H_6)$ and $(H_2)$ gases.

Frequency dependence of the $N_{ss}$ profile was also obtained by using the Hill-Coleman method.\(^\text{15}\)

The value of $N_{ss}$ can be determined from capacitance and $G/\omega$ values for each frequency as following:

$$N_{ss} = \frac{2}{qA} \frac{(G/\omega)_m}{((G/\omega)_m/C_i^2 + ((1 - C_m/C_i)^2))}$$

Where $A$ is the diode area, $\omega$ is the angular frequency ($= 2\pi f$), $C_m$ and $(G/\omega)_m$ are the measured capacitance and conductance which correspond to the peak values and $C_i$ is the capacitance of the interfacial layer. The $C_i$ values are obtained from the $C-V-F$ and $G-V-F$ measurements in accumulation using the following relation:\(^\text{16}\)

$$C_i = C_m \left(1 + \frac{G_m^2}{\omega^2 C_m^2}\right)$$

As can be seen in Figure 5, the $N_{ss}$ values of S2 sample are increased at low frequencies. This suggests that the interface charges are important than those at high frequencies.\(^\text{17}\) However for the S1 sample, the $N_{ss}$ values in frequency range of 10–100 kHz are decreased with increasing frequency but in frequency equal to 300 kHz,
the \(N_{\text{SS}}\) plots show a peak. This can be attributed to the particular density distribution of charges at the interface or traps present in \(\alpha\)-Si:H layers. The values of interface state densities were obtained in the ranges of \(7 \times 10^{11}\)–\(2.3 \times 10^{11}\) cm\(^{-2}\) eV\(^{-1}\) for the S1 sample and \(2.1 \times 10^{12}\)–\(7 \times 10^{10}\) cm\(^{-2}\) eV\(^{-1}\) for the S2 sample.

4. CONCLUSION

In this study, the capacitance-voltage \((C-V-F)\) and the conductance-voltage \((G-V-F)\) characteristics of the \(\text{Au/}\alpha\text{-Si/H/c-Si}\) heterojunction were investigated by considering the interface states density \(N_{\text{SS}}\) and the series resistance \(R_s\) effect in the frequency and applied bias voltage ranges of 10 kHz to 1 MHz and \(-3\) V, \(+3\) V respectively at room temperature. The experimental results showed that the \(C-V\) and \(G-V\) are strongly function of frequency and applied bias voltages.

The resistance was obtained using Nicollian and Brews method, the \(R_s\) plots give a single peak for S1 sample and double peak for S2 sample which decreasing with increasing frequencies; the \(R_s\) values of S1 sample are lower than those of the S2 sample.

Also, the values of \(N_{\text{SS}}\) are obtained using the Hill-Coleman method for each frequency. The S1 sample show a peak behavior at about 300 kHz which is attributed to the particular density of charges at the interface or traps present in \(\alpha\)-Si:H layers. For frequency less than 200 kHz, the \(N_{\text{SS}}\) values of S1 sample are lower than S2 sample. This is assumed to be due to the increase in the rate of H\(_2\) gas flow which damages the \(c\)-Si surface by excess H radicals and probably increased interface states density.

The improvement of the electrical properties of the elaborated structures can be obtained by annealing the metal and ohmic contacts and by suitable adjustment of the ratio between \(B_2H_6\) and \(H_2\) flow gases.

Acknowledgment: We gratefully acknowledge the technological and electrical characterizaiton part for this work from Laboratory Physics of Materials and Applied Nanomaterials in Environment (LaPhyMNE) as part of a bilateral cooperation project (Algeria–Tunisia) on thin film silicon solar cells.

References and Notes

Résumé
Le silicium amorphe hydrogéné a-Si: H est la forme de silicium non cristallin utilisée pour l'électronique de grande surface, avec des applications majeures dans les écrans d'affichage, la détection d’images et le photovoltaïque.

Le travail accompli dans cette thèse s’inscrit dans le cadre de l’étude des propriétés du silicium amorphe hydrogéné a-Si: H appliqué aux cellules solaires basées sur les hétérojonctions a-Si: H(p)/c-Si(n) qui ont atteint un rendement élevé. La qualité de l’interface et ses propriétés de transport sont essentielles et tout l’intérêt est d’évaluer la densité des défauts et de savoir comment les réduire afin d’améliorer la qualité et les performances du dispositif.

C’est dans ce contexte que différents échantillons d’hétérojonctions sont élaborés. Le matériau a-Si: H a été préparé avec la technique PECVD (dépôt chimique en phase vapeur amélioré par plasma) et/ou HWCVD (dépôt chimique en phase vapeur par fil chaud) en utilisant un mélange gazeux SiH$_4$/H$_2$. Nous avons étudié l’impact de la technique d’élaboration et des conditions de dépôt sur les caractéristiques électriques des hétérojonctions élaborées.

Dans la première partie, la dépendance en température des paramètres électriques de l’hétérojonction a-Si: H(p)/c-Si(n) a été étudiée en utilisant les caractéristiques courant-tension I-V-T dans la plage de températures allant de 100 à 300K. Les paramètres électriques tels que le facteur d’idéalité n est fortement dépendant de la température. Au-dessus de 280K, n est approximativement égal à 2; la recombinaison domine probablement via les états d’interface dans la région d’appaupravissement du silicium cristallin tandis que l’effet Tunnel domine aux basses températures.

Dans la deuxième partie, nous avons étudié l’effet de la densité des états d’interface et de la résistance série sur les caractéristiques C-V-F et G-V-F en faisant varier la fréquence.

La résistance a été obtenue par la méthode de Nicollian et Brews. Les valeurs de N$_{SS}$ sont obtenues en utilisant la méthode de Hill-Coleman pour chaque fréquence.

Les résultats obtenus confirment que la densité d'états d'interface $N_{SS}$ et la résistance série $R_S$ sont des paramètres importants qui ont un impact direct sur le comportement électrique des hétérojonctions a-Si: H(p)/c-Si(n).

Abstract:
Hydrogenated amorphous silicon a-Si:H is the non crystalline form of silicon used for large area electronics, with major applications in displays, image sensing and photovoltaic.

The work done in this thesis is part of the study of the properties of hydrogenated amorphous silicon a-Si: H applied to solar cells based on the heterojunctions a-Si: H (p)/c-Si (n) which have reached high efficiency. Interface quality and its transport properties are critical and all the interest is to evaluate the density of defects and how to reduce them in order to improve the quality and device performance.

It was in this context, various heterojunction samples are elaborated. The a-Si: H material was prepared with PECVD technique (Plasma Enhanced Chemical Vapor Deposition) and/or HWCVD (Hot Wire Chemical Vapor Deposition) by using SiH$_4$/H$_2$ mixture gas. We investigated how the technique of elaboration and the deposition conditions affected the electrical characteristics of the elaborated heterojunctions.

In the first part, the temperature dependence of the electrical parameters of a-Si: H (p)/c-Si (n) has been investigated using current-voltage I-V-T characteristics in the temperature range 100-300K.

The electrical parameters such as the ideality factor $n$ are found to be strongly temperature dependent. Above than 280K, $n$ is approximately equal to 2; Recombination dominates probably via the interface states in the crystalline silicon depletion region whereas a Tunneling mechanism dominates at low temperatures.

In the second part, we study the effect of the density of interface states and that of series resistance on the C-V-F and G-V-F characteristics by varying the frequency.

The resistance was obtained using Nicollian and Brews method. The values of $N_{SS}$ are obtained using the Hill-Coleman method for each frequency.

The obtained results confirm that the interface states density $N_{SS}$ and series resistance $R_S$ are important parameters which will have a direct impact on the electrical behavior of a-Si: H (p)/c-Si (n) heterojunctions.