



REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA
RECHERCHE SCIENTIFIQUE

UNIVERSITE DJILLALI LIABES DE SIDI BEL ABBES

FACULTE DE GENIE ELECTRIQUE
DEPARTEMENT D'ELECTRONIQUE

Thèse

Présentée par : KHEDIRI ABDELKRIM EL HADI

Pour l'obtention du Diplôme de Doctorat 3ème cycle LMD en Electronique

*Ecole Doctorale : « Nanostructures Intégrées dans les Dispositifs
Electroniques et Optoélectroniques »*

Thème

**Etude des nanostructures à base de nitrures des
semiconducteurs III-V
- Caractérisations électriques et analyses surfaciques
associées-**

Soutenu publiquement le 09 / 06 / 2022 devant les membres du jury :

M ^{me} A. Bouzidi	Professeur (UDL SBA)	Présidente
M ^{me} A. Talbi	MCA (UDL SBA)	Directrice de thèse
M ^r B. Lasri	Professeur (Université de Saida)	Examinateur
M ^r B. Akkal	Professeur (UDL SBA)	Examinateur
M ^{me} Z. Benamara	Professeur (UDL SBA)	Membre invité

Année universitaire 2021-2022



Remerciements

Remerciements

Ce travail de thèse de doctorat s'est déroulé au Laboratoire de Microélectronique Appliquée de l'université Djillali Liabes de Sidi Bel Abbès. Je voudrais exprimer ma profonde gratitude à Madame A. TALBI Maitre de conférences à l'université de Djillali Liabès de Sidi Bel Abbès, qui a dirigé ce travail de recherche. J'ai pu bénéficier à la fois de sa rigueur et ses compétences scientifiques, de sa patience et ses encouragements au cours de ce travail et pendant la rédaction de ce manuscrit. Je la remercie sincèrement pour les discussions fructueuses que nous avons eues et les conseils avisés qu'elle a sus me prodiguer.

Je voudrais exprimer mes sincères reconnaissances, particulièrement, a Monsieur A. SOLTANI, Professeur à l'Université de Sherbrooke (Canada) de m'avoir guidé et éclairé tout au long de ce travail à travers ses conseils et ses remarques pertinentes, ainsi que toute l'équipe du laboratoire LN2 pour leur aide précieuse qu'ils m'ont fournie.

Je remercie Madame A. BOUZIDI, Professeur à l'université de Djillali Liabès de Sidi Bel Abbès qui m'a fait l'honneur de présider ce jury de thèse. Qu'elle trouve ici l'expression de mes sentiments respectueux.

Mes remerciements vont également à Monsieur B. LASRI Professeur à l'Université de Saida et Monsieur B. AKKAL Professeur à l'Université Djillali Liabès de Sidi Bel Abbès qui m'ont fait l'honneur d'accepter de faire partie du jury de cette présente thèse.

Mes vifs remerciements vont également à Madame Z. BENAMARA, Professeur à l'Université Djillali Liabès de Sidi Bel Abbès, directrice du Laboratoire de Microélectronique Appliquée et également responsable de l'école doctorale, dans laquelle je suis inscrit, de m'avoir fait l'honneur d'accepté d'être membre invité du jury de cette thèse.

Je remercie tous les membres et collègues du Laboratoire de Microélectronique Appliquée de l'université Djillali Liabes de Sidi Bel Abbès pour l'aide qu'ils m'ont apportée durant ma formation doctorale.

Dédicace

*A mes parents
A mon épouse
A mon fils
A ma famille.*

Sommaire

Introduction générale	1
-----------------------------	---

Chapitre I : Généralités sur les nitrures d'éléments III

1. Introduction	6
2. Structure cristalline des nitrures d'éléments III-V	6
3. Propriétés optiques	8
3.a. Controverses de la bande interdite de l'InN.....	10
4. Constante diélectrique (permittivité électrique)	12
5. Polarisation spontanée et piézoélectrique	12
5.a. Polarisation spontanée.....	13
5.b. Polarisation piézoélectrique	14
6. Propriétés de transport	15
7. Champ de claquage.....	16
8. Conductivité thermique	17
9. Substrats pour la croissance des matériaux III-N	18
10. Technique de croissance des matériaux III-N.....	19
10.a. Croissance du GaN	19
10.b. Croissance de l'InN	20
11. Défauts structuraux	21
11.a. Défauts structuraux dans le GaN.....	22
11.b. Défauts structuraux dans l'InN	24
12. Caractère intrinsèque de type N dans les nitrures	25
13. Propriétés de surface	26
14. Conclusion	28
Bibliographie.....	29

Chapitre II : Pré-conditionnement de la surface de l'InP pour la synthèse de l'InN: Nitruration & Analyse de surface

1. Introduction	36
2. Préparation du substrat d'InP pour la nitruration	37
2.a. Nettoyage des substrats InP(100).....	38
2.b. Modèle théorique après bombardement ionique	40
2.c. Evolution des pics d'indium et de phosphore après bombardement ionique	42
3. Nitruration des substrats d'InP (100)	43
3. a. Modèle théorique après nitruration	44
3.b Evolution du pic d'indium après nitruration	45
3.c Evolution du pic de phosphore après nitruration	46
3.d Evolution du pic d'azote après nitruration.....	47
4. Résultats d'analyses spectroscopiques des structures d'étude.....	47
4.a. Série A	47
4.b Série B	49

4.c. Discussions et interprétations des résultats	49
5. Analyse des substrats InP nitrurés par mesure Raman	50
6. Conclusion	52
Bibliographie.....	53

Chapitre III : Pré-conditionnement de la surface de l'InP pour la synthèse de l'InN : caractérisations électriques

1. Introduction.....	57
2. Caractérisations électriques des structures Au/InN/InP(100).....	57
2.1. Caractéristiques Courant-Tension I-V	57
2.2. Caractéristiques Capacité-Tension C-V.....	58
3. Extraction des paramètres électriques.....	59
3.1. Extraction des paramètres à partir de la caractéristique I-V	59
3.1.a. Détermination du courant de saturation et du facteur d'idéalité.....	60
3.1.b. Détermination de la résistance série.....	61
3.1.c. Détermination de la résistance série par la méthode de Cheung et Cheung	61
3.2. Evaluation de la distribution de la densité d'états d'interface dans la bande interdite à partir des caractéristiques I-V et C-V en haute fréquence	62
3.3. Extraction des paramètres à partir de la caractéristique C-V.....	63
3.3.a. Détermination de la concentration en dopants et du potentiel de diffusion	64
3.3.b. Détermination de la hauteur de barrière de potentiel	64
3.4. Extraction des paramètres à partir de la caractéristique C-V en prenant en compte l'effet de la densité d'états d'interface.....	65
4. Caractérisations électriques des structures Au/InN/InP(100) en fonction de la fréquence ..	67
4.1. Caractéristiques Capacité-Tension et conductance-Tension C-V-f et G-V-f.....	67
4.2. Détermination de la résistance série à partir des courbes C-V-f et G-V-f.....	68
4.3. Détermination de la densité d'états d'interface par la méthode haute-basse fréquence	70
4.3.a. Méthode 1	70
4.3.b. Méthode 2.....	71
5. Interprétations des résultats	73
6. Conclusion	74
Bibliographie.....	75

Chapitre IV : Pré-conditionnement de la surface de l'Si pour la synthèse du GaN

1. Introduction	80
2. Motivations de l'étude du pré-conditionnement de la surface Si	80
3. Problématiques liées à la nitruration du substrat Si.....	81

4. Procédé de micro-fabrication des transistors HEMTs étudiés.....	81
5. Caractéristiques courant-tension.....	83
6. Mesure de claquage du MOS-HEMT sur Si.....	85
7. Discussion des résultats.....	86
8. Amélioration du claquage par une couche intercalaire 3C-SiC.....	86
9. Caractérisation de la couche 3C-SiC.....	87
10. Mesure de claquage du MOS-HEMT sur /SiC/Si.....	89
11. Conclusion.....	91
Bibliographie.....	92

Chapitre V : Modélisation et simulation de l'interface de Nitrure d'élément III/Substrat

1. Introduction.....	96
2. Modèles et paramètres de simulation.....	96
3. Caractéristiques courant-tension du MOS-HEMT AlGaIn/GaN.....	100
4. Modélisation du claquage du MOS-HEMT sur Si.....	101
5. Effet de la nitruration du substrat Si sur la tension de claquage.....	105
6. Simulation du claquage du MOS-HEMT sur 3C-SiC/Si.....	107
7. Conclusion.....	110
Bibliographie.....	111

Conclusion générale.....	114
--------------------------	-----

Annexe A.....	117
Annexe B.....	134
Annexe C.....	150
Annexe D.....	158

Introduction générale

Introduction générale

Depuis les années soixante, l'industrie de la microélectronique n'a cessé de progresser, grâce à l'augmentation des performances des circuits liés à la miniaturisation des composants. Cependant, cette stratégie atteint actuellement des limites intrinsèques, la fréquence de fonctionnement des circuits est limitée par le comportement dynamique de ces circuits ainsi que le temps de transit de l'information. Dans un contexte où la réduction de la consommation énergétique et le besoin croissant en débit d'information sont des enjeux internationaux, le silicium est de moins en moins adapté. La tendance actuelle est de remplacer, à terme, les interconnexions métalliques par des interconnexions optiques basées sur des matériaux III-V. L'information est véhiculée par la lumière, où les temps de transit du signal sont beaucoup plus courts. La réalisation de tels circuits intégrant à la fois l'électronique et l'optique à booster le développement des composants à base de matériaux III-V, du fait qu'ils présentent des propriétés très intéressantes en particulier leurs gaps directs. Par ailleurs, le potentiel de nitrures des composés III-V pour des applications dans les domaines de l'électronique de puissance et est reconnu, de par leurs larges énergies de bande interdite.

La fabrication des nanocomposants à base de nitrure d'indium (InN) et de nitrure de gallium (GaN) connaît actuellement une grande expansion. Ces matériaux de par leurs propriétés physico-chimiques intéressantes, représentent actuellement de très bons candidats pour la réalisation de diodes électroluminescentes (DEL) qui opèrent dans l'ensemble du spectre visible et qui peuvent s'étendre jusqu'à l'infra-rouge et l'ultraviolet [1].

Le semiconducteur nitrure d'indium (InN), matériau phare des composés nitrures III-N, intervient dans de nombreuses applications tel que l'éclairage à faible tension. Les propriétés physiques de l'InN font de lui un candidat intéressant dans le domaine de l'optoélectronique et de l'électronique rapide. Il présente un potentiel intéressant pour participer au développement d'une industrie à faible empreinte de carbone.

Les composants à base de nitrure de gallium ont fait l'objet de nombreuses études au cours de ces dernières décennies grâce à leurs propriétés physico-chimiques qui leur permettent de supporter de fortes tensions et de hautes températures, ainsi qu'à leur mobilité électronique et à leur stabilité chimique. Bien qu'ils contiennent certains défauts qui limitent leurs performances et leurs durées de vie, ces composants sont de bons candidats pour les applications en puissance et en faible bruit en hautes fréquences [2]. On peut par exemple trouver sur le marché de l'électronique des HEMTs à base de GaN fonctionnant à 18 GHz. Le développement de transistors RF a favorisé l'introduction du GaN dans le marché des composants à base semiconducteurs. Cependant, bien que théoriquement adaptés aux applications de puissance, les composants de puissance en GaN souffrent, entre autre, du phénomène de limitation de la tension de claquage causée par des défauts de surface, d'interfaces et en volume du matériau semiconducteur.

La croissance de ces nitrures, reste difficile pour plusieurs raisons tel que la difficulté d'élaborer des cristaux massifs et l'absence de substrats avec des constantes de réseaux et des coefficients thermiques proches de ceux des nitrures. De gros efforts, ont été entrepris et

plusieurs techniques ont été développées pour la croissance des nitrures et particulièrement les techniques utilisant une couche tampon entre le substrat et les nitrures d'éléments III. Cependant, comme pour la plupart des composants électroniques et optoélectroniques à base de matériaux III-N, ces dispositifs souffrent du problème de la forte densité de pièges en surface et en volume. Ces pièges interfèrent le bon fonctionnement des dispositifs et dégradent leurs performances. Les caractéristiques des hétéro-structures obtenues, sont étroitement liées à l'état de leurs surfaces et d'interfaces. Donc il est devenu essentiel de comprendre le mécanisme de formation des interfaces réalisées sur ces semiconducteurs.

Dans cette thèse nous nous sommes intéressées à l'étude de l'interface des nanostructures/substrat, qui constitue les dispositifs à base de nitrure III-V. L'étude est menée en deux axes principaux, elle se base en premier lieu sur les résultats des analyses de surface et des caractérisations électriques effectuées dans le but d'étudier l'interface InN/ InP(100). En deuxième partie, nous proposons une alternative prometteuse pour réduire les états d'interface, couches de croissance III-N, notamment, le GaN/substrat silicium. L'étude par simulations électriques vient compléter l'étude surfacique et les caractérisations électriques pour mieux comprendre le comportement de l'interface des films de nitrures/substrat.

La présente thèse se compose de cinq chapitres. Le premier chapitre présente une étude bibliographique générale et une description des matériaux étudiés dans leurs aspects fondamentaux, à savoir les structures de réseaux cristallins, les structures de bandes électroniques, et optiques des nitrures d'éléments III (essentiellement l'InN et le GaN).

Dans le deuxième chapitre, nous récapitulons les principes fondamentaux liés à la nitruration pour le pré-conditionnement de la surface de l'InP pour la synthèse de l'InN, puis nous présentons le suivi du procédé d'élaboration des structures d'études avec des analyses de surface par spectroscopie électronique de type XPS. Les caractéristiques électriques permettant de déterminer l'état de l'interface de ces structures sont étudiées dans le troisième chapitre.

Dans le quatrième chapitre de ce manuscrit, nous abordons la problématique en relation du pré-conditionnement de la surface du substrat de Si pour la synthèse du GaN. Nous commençons par un rappel des principes fondamentaux du fonctionnement des structures MOS-HEMT (création du gaz électronique bidimensionnel) puis du procédé de réalisation de ces structures. Enfin, une étude comparative des caractéristiques électriques des structures réalisées suivant deux méthodes de pré-conditionnement de la surface du substrat Si, à savoir avec et sans l'introduction d'une couche intercalaire de type 3C-SiC.

Le dernier chapitre est consacré aux résultats de simulation et de modélisation des deux transistors MOS-HEMT avec les deux méthodes pré-conditionnements. Une exploration par la simulation informatique, des phénomènes liés au pré-conditionnement qui interviennent lors du claquage, est présentée en fin du chapitre.

Une conclusion générale synthétise les résultats des travaux de la présente thèse.

Bibliographie

- [1] J.J. Huang, H.C. Kuo and S.-C. Shen, Nitride Semiconductor Light-Emitting Diodes (LEDs): Materials, Technologies, and Applications, Woodhead Publishing Series, volume A, Second Edition (2018).
- [2] K. H. Teo, Y. Zhang, N. Chowdhury, S. Rakheja, R. Ma, Q. Xie, E. Yagyu, K. Yamanaka, K. Li, T. Palacios , Emerging GaN technologies for power, RF, digital, and quantum computing applications: Recent advances and prospects, Journal of Applied Physics 130, 160902 (2021).

Chapitre I

Chapitre I : Généralités sur les nitrures d'éléments III

1. Introduction.....	6
2. Structure cristalline des nitrures d'éléments III-V.....	6
3. Propriétés optiques	8
3.a. Controverses de la bande interdite de l'InN	10
4. Constante diélectrique (permittivité électrique)	12
5. Polarisation spontanée et piézoélectrique	12
5.a. Polarisation spontanée.....	13
5.b. Polarisation piézoélectrique.....	14
6. Propriétés de transport	15
7. Champ de claquage	16
8. Conductivité thermique	17
9. Substrats pour la croissance des matériaux III-N	18
10. Techniques de croissance des matériaux III-N	19
10.a. Croissance du GaN.....	19
10.b. Croissance de l'InN	20
11. Défauts structuraux.....	21
11.a. Défauts structuraux dans le GaN.....	22
11.b. Défauts structuraux dans l'InN.....	24
12. Caractère intrinsèque de type N dans les nitrures.....	25
13. Propriétés de surface	26
14. Conclusion	28
Bibliographie.....	29

1. Introduction

Les nitrures d'éléments III sont formés par l'association d'un ou plusieurs éléments de la colonne III (Gallium (Ga), Indium (In), Aluminium (Al), Bore (B)...) et de l'Azote (N) de la colonne V de la classification du tableau périodique de Mendeleïev. Il s'agit du nitrure de gallium (GaN), du nitrure d'indium (InN), du nitrure d'aluminium (AlN), du nitrure de bore (BN) et leurs alliages ternaires et quaternaires.

Les matériaux III-N tels que le GaN et l'InN sont des matériaux très adaptés pour les applications optoélectroniques grâce notamment à leur bande interdite (gap) directe. En utilisant les alliages ternaires ou quaternaires de ces matériaux il est possible d'ajuster leur largeur de bande interdite d'énergie (gap) depuis le proche infrarouge à l'ultraviolet dans le domaine spectral. Le Nitrure d'Indium trouve aujourd'hui son application majeure dans le domaine des diodes électroluminescentes. Depuis leur apparition sur le marché au début des années 90, les LED en InN, occupent une place prépondérante du marché des LED. Les applications de ces diodes sont majoritairement civiles tel que l'éclairage et l'automobile.

L'AlN et le GaN sont considérés comme d'excellents dispositifs pour l'électronique de puissance, l'hyper-fréquence et l'optoélectronique, en raison de leurs propriétés physiques et électriques telles qu'une bonne conductivité thermique, un fort champ de claquage et une grande vitesse de saturation comparés aux semiconducteurs classiques [1]. Ils connaissent un intérêt croissant dans le monde industriel et scientifique. Cette largeur de gap élevée (à l'exception du InN), bien que différente pour chacun des matériaux III-N, leur permet d'avoir des tensions de claquage et des températures limites élevées ce qui leur offre les possibilités de supporter les fortes tensions nécessaires pour des applications de puissance.

Dans ce chapitre, nous présentons les différentes propriétés de ces matériaux III-N. Nous focalisons l'état de l'art sur les matériaux, utilisés dans la fabrication de nos structures d'étude, à savoir l'InN et le GaN.

2. Structure cristalline des nitrures d'éléments III-V

Les semiconducteurs III-N tel que l'AlN, l'InN et le GaN se présentent principalement sous deux phases cristallines (figure I-1):

- Le polytype thermodynamiquement stable est la phase hexagonale (structure wurtzite).
- Le polytype cubique (structure blende de zinc), thermodynamiquement métastable, peut être également obtenu en choisissant des conditions de croissance adaptées.

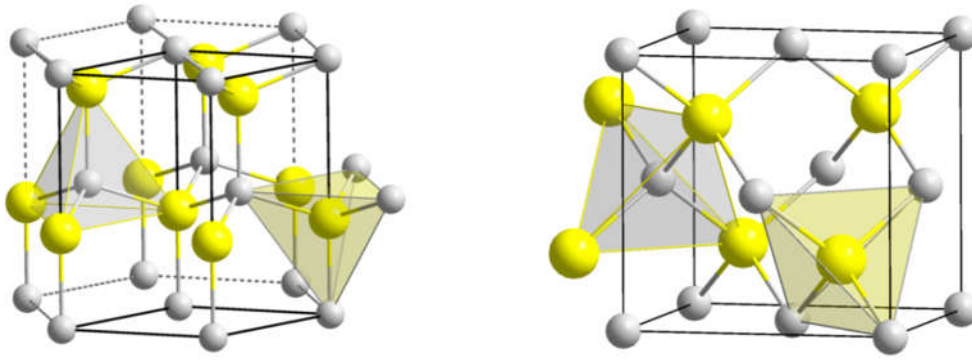


Figure. I-1: Structure cristalline des matériaux III-N
(a) Structure hexagonale. (b) Structure zinc blende. [1]

Le tableau I.1 indique le paramètre de maille.

Tableau I.1: Paramètres des mailles des principaux semiconducteurs III-N [2].

Structure	Paramètre	AlN	InN	GaN
Wurtzite	a (Å)	3.112	3.544	3.189
	c (Å)	4.98	5.718	5.185
Zinc blende	a (Å)	4.36	4.96	4.47

En ce qui concerne les alliages ternaires (AlGaIn, InAlIn, et InGaIn), les paramètres de maille obéissent à une loi linéaire (loi de Vegard [3]) en fonction de la composition x :

$$E_g^{\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}} = x \cdot a^{\text{AlN}} + (1 - x) \cdot a^{\text{GaN}} \quad (1)$$

$$E_g^{\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}} = x \cdot a^{\text{InN}} + (1 - x) \cdot a^{\text{GaN}} \quad (2)$$

$$E_g^{\text{In}_x\text{Al}_{1-x}\text{N}} = x \cdot a^{\text{InN}} + (1 - x) \cdot a^{\text{AlN}} \quad (3)$$

Où

a: représente le paramètre de maille.

La figure I-2 représente l'énergie de bande interdite et le paramètre de maille des principaux semiconducteurs. La nature et l'énergie de la bande interdite sont des données fondamentales en optoélectronique car les matériaux à bande interdite directe ont une propriété d'émission lumineuse qui se fait généralement à une énergie proche de celle de la bande interdite.

On constate que la grande majorité des semiconducteurs ont une énergie de bande interdite située dans le visible ou dans le proche infrarouge. La famille des nitrures se distingue dans le domaine de l'ultraviolet lointain.

Les énergies de bande interdite des alliages sont données par les équations suivantes:

$$E_g^{\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}} = x \cdot E_g^{\text{AlN}} + (1-x) \cdot E_g^{\text{GaN}} - b^{\text{AlGa}} \cdot x \cdot (1-x) \quad (4)$$

$$E_g^{\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}} = x \cdot E_g^{\text{InN}} + (1-x) \cdot E_g^{\text{GaN}} - b^{\text{InGa}} \cdot x \cdot (1-x) \quad (5)$$

$$E_g^{\text{In}_x\text{Al}_{1-x}\text{N}} = x \cdot E_g^{\text{InN}} + (1-x) \cdot E_g^{\text{AlN}} - b^{\text{InAl}} \cdot x \cdot (1-x) \quad (6)$$

où

b : représente le terme de non linéarité (bowing), il représente la déviation par rapport à la loi linéaire. Il vaut 1.3 eV pour l'AlGaN [6] et 2.96 eV pour l'InGaN [7]. Pour l'alliage InAlN, la valeur de 5.36 eV proposée par Sakalauskas et al. [8], est en bon accord avec les valeurs expérimentales des bandes interdites. Cependant, une étude plus précise a montré que le terme de non linéarité est fortement lié à la composition d'indium [8]:

$$b^{\text{In}_x\text{Al}_{1-x}\text{N}}(x) = \frac{A}{(1 + Cx^2)} \quad (7)$$

où $A = 6.43 \pm 0.12$ eV et $C = 1.21 \pm 0.14$ eV. D'autres coefficients ont été introduits par Iliopoulos et al. [9]: $A = 15.3 \pm 1.6$ eV et $C = 4.81 \pm 0.95$ eV

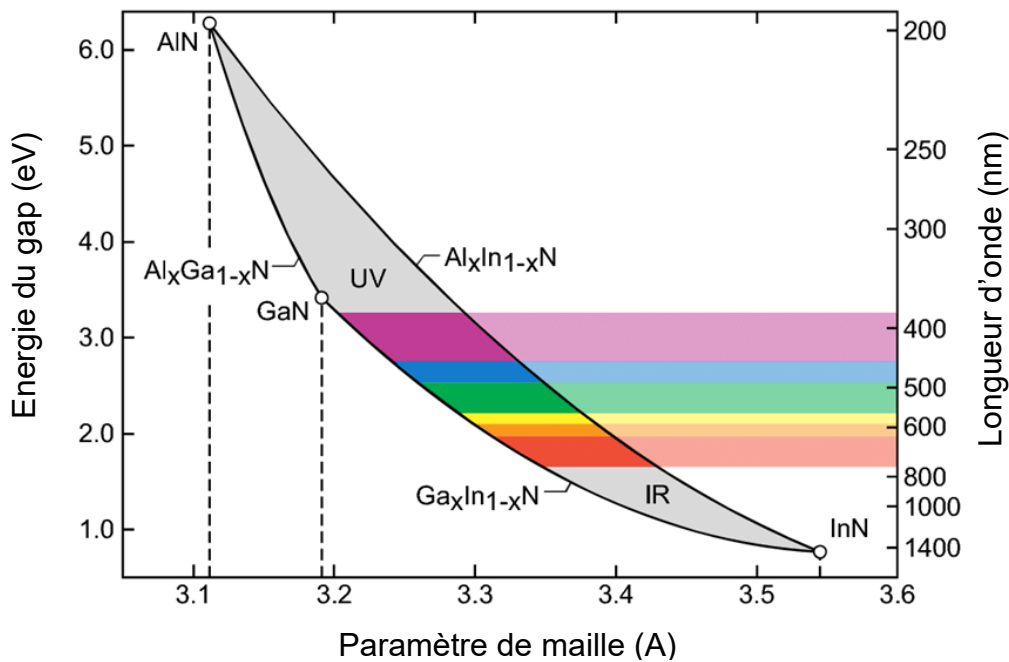


Figure 1-4: Ajustement de l'énergie de la bande interdite pour les nitrures d'éléments III: GaInN, AlGaN, AlInN. [10]

Un autre paramètre à prendre en compte, est la variation de l'énergie du gap en fonction de la température. Il est très bien connu que du fait de l'agitation thermique dans le réseau

crystallin, l'énergie de la bande interdite diminue légèrement lorsque la température augmente. Ce comportement peut être exprimé par la loi empirique de Varshni [10]:

$$E_g(T) = E_g(0) - \frac{\alpha T^2}{T + \beta} \quad (8)$$

$E_g(0)$ correspond à l'énergie de la bande interdite à $T = 0$ °K, α (meV/K) représente une constante empirique déduite par régression linéaire du gap et β (K) une constante associée à la température de Debye. Les valeurs des paramètres α et β sont données dans le tableau I.2 :

Tableau I.2: Paramètres de l'énergie de la bande interdite en fonction de la température des semiconducteurs III-N [11].

Constantes	AlN	InN	GaN
$E_g(0)$ (eV)	6.118	0.69	3.509
α (meV/K)	17.99	0.41	7.32
β (K)	1432	454	700

3.a. Controverses de la bande interdite de l'InN

Dans la toute première littérature concernant l'InN, il y a des indications de variations observées dans la bande interdite. Cependant, avec la publication des données d'absorption en 1986 [12] pour le matériau polycristallin, pulvérisé par RF à haute mobilité et à faible concentration de porteurs de Tansley et Foley [13], la bande interdite d'InN semblait être égale à une valeur de 1.89 eV. Des publications plus récentes des échantillons d'épitaxie par faisceau moléculaire (MBE), ont depuis indiqué une bande interdite inférieure, initialement signalée à environ 1,1 eV [14] mais plus tard à des valeurs progressivement plus faibles de 0,90 eV [15], puis de 0.80-0.70 eV [16, 18], ensuite 0.65-0.60 eV [19], et récemment une bande interdite aussi basse que 0.60 eV a été proposée [20]. Un certain nombre de suggestions ont été faites pour expliquer pourquoi les données plus anciennes pour les matériaux polycristallins peuvent avoir indiqué une bande interdite plus élevée. Cependant, la réalité de la situation est que la gamme complète des variations expérimentales signalées n'est pas correctement comprise. Les raisons suggérées pour les données divergentes ont été étudiées, certaines d'entre elles fournissent des explications partielles. Il semble donc, qu'il n'y a pas une raison unique à la variation, mais qu'un grand nombre de facteurs sont à l'origine de ces divergences. Le plus important parmi les facteurs connus semble être l'effet Moss-Burstein et les variations de la stoechiométrie des matériaux.

Les propriétés de l'InN peuvent être complètement transformées par la présence d'un excès d'azote. L'InN polycristallin non stœchiométrique est caractérisé par la présence de points d'InN presque stœchiométriques et sans défaut. Ces défauts, riches en azote, sont actifs à la température ambiante. Par conséquent, l'InN devient fortement dégénéré et une absorption optique significative ne peut être mesurée qu'au-dessus de 1,5 eV. La figure I-5 présente le carré du coefficient d'absorption en fonction de l'énergie.

Il est connu que les semiconducteurs possédant un gap d'énergie étroit, tels que l'InSb et l'InAs [21, 22], ont une dispersion non-parabolique au bas de leur bande de conduction. De la figure I-6, on observe que, pour des concentrations supérieures à 10^{19} cm⁻³, le gap suit une

trajectoire non-parabolique. Cela signifie qu'à partir de 10^{19} cm^{-3} électrons libres dans l'InN, son niveau de Fermi se situe dans la bande de conduction. L'absorption optique est alors interdite pour des transitions en dessous du niveau de Fermi. Elle commence à partir d'énergies plus élevées surestimant ainsi le gap intrinsèque du matériau et conduisant à l'effet Burstein-Moss. L'émission optique en dessous du niveau de Fermi, telle que la photoluminescence, est encore possible mais avec une faible intensité et un élargissement en énergie par rapport à l'émission du bord de bande intrinsèque.

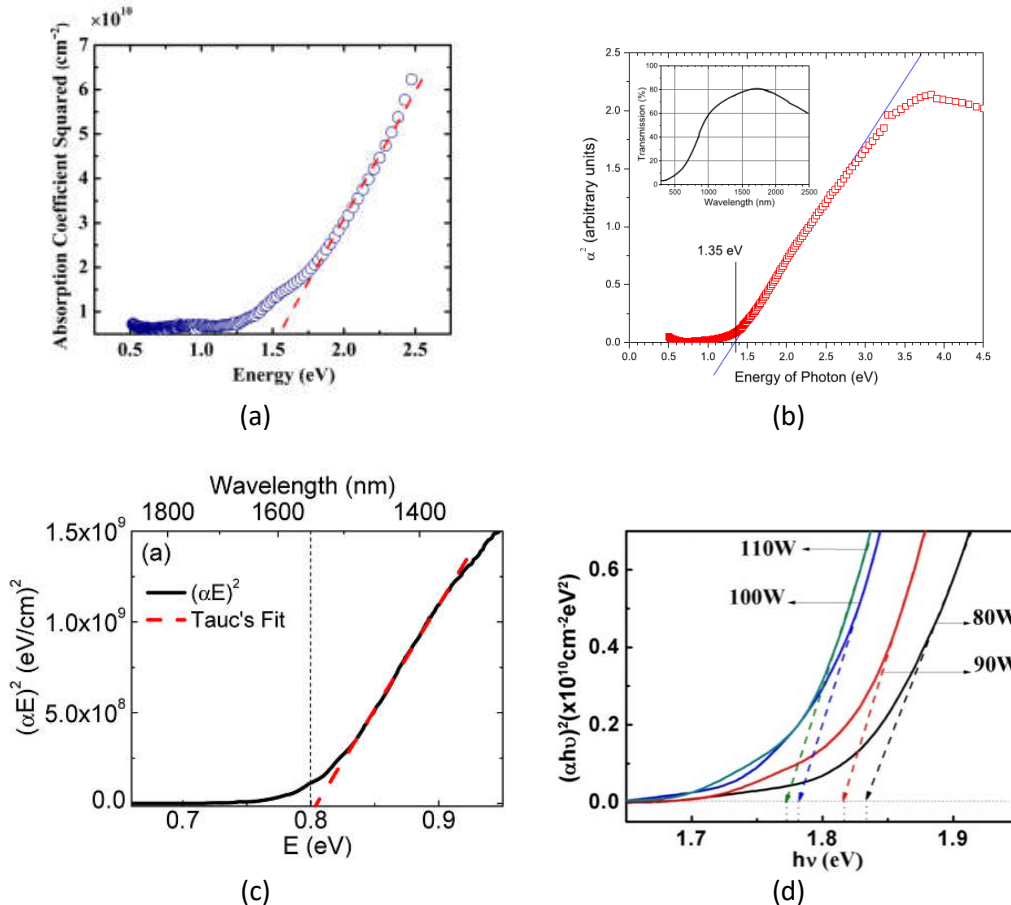


Figure 1-5: Variations du carré du coefficient d'absorption en fonction de l'énergie (a) (Diagramme de Tauc) pour l'InN [23] pour l'InN en nanofil(b), [24] (c) d'une couche d'InN de 1 µm d'épaisseur [25] (d) d'InN déposés sur des substrats de saphir à différentes puissances de pulvérisation : 80 W, 90 W, 100 W et 100 W [26].

Bien que l'alliage d'azote et l'effet Moss-Burstein puissent aider à expliquer une partie de la variation de la bande interdite observée à une concentration élevée de porteurs, les différences entre la bande interdite élevée ($\sim 1.9 \text{ eV}$) et la faible ($\sim 0.6 \text{ eV}$) pour le matériau de faible concentration de porteurs doivent encore être correctement étudiées ou comprises. Les observations récentes d'échantillons à bande interdite de 0,7 eV (mesurées par des techniques d'absorption), avec une concentration de porteurs presque aussi élevée que 10^{20} cm^{-3} [28], ne sont pas, non plus, bien comprises, mais semblent impliquer un niveau de piégeage de 0,7 eV.

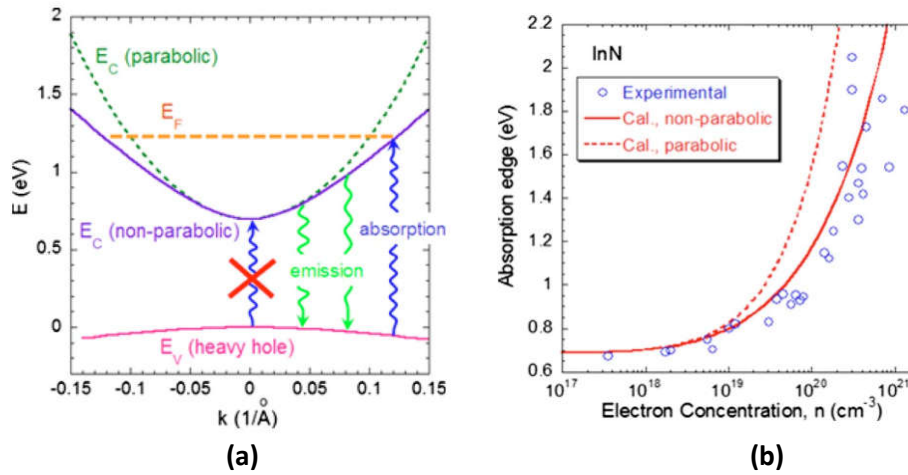


Figure I-6: Gap de l'InN calculé avec une courbe de dispersion de la bande de conduction parabolique et non-parabolique en utilisant le modèle $k.p$ avec le niveau de Fermi pour $n=10^{20} \text{ cm}^{-3}$ (a). Seuil d'absorption (gap optique) en fonction de la concentration d'électrons (b). [11, 27]

4. Constante diélectrique (permittivité électrique)

Les permittivités relatives basses fréquence des composés III-N formés à partir du GaN, de l'AlN et de l'InN, peuvent être calculées à partir des équations obtenues par interpolation linéaire [29] :

$$\varepsilon^{\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}} = 8.5 \cdot x + 8.9(1 - x) \quad (9)$$

$$\varepsilon^{\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}} = 15.3 \cdot x + 8.9(1 - x) \quad (10)$$

$$\varepsilon^{\text{In}_x\text{Al}_{1-x}\text{N}} = -4.30 \cdot x + 14.61 \quad (11)$$

5. Polarisation spontanée et piézoélectrique

Comme nous l'avons vu précédemment les Nitrures d'éléments III se présentent sous deux formes cristallines, mais la structure Wurtzite est la plus stable. Cette structure peut être représentée par deux sous-réseaux interpénétrés. Par exemple pour le GaN, un réseau d'anions d'azote est décalé de celui des cations de gallium, selon l'axe c . Dans cette structure les barycentres de ces deux sous-réseaux ne se superposent pas, créant ainsi une polarisation interne et un caractère piézoélectrique. La polarisation interne va séparer spatialement les électrons et les trous, et créer ainsi une accumulation de charge aux extrémités de la couche perpendiculairement à l'axe c (interface substrat/couche épitaxiée ou surface de la couche épitaxiée). En effet, si la première couche atomique déposée, est composée d'azote, alors la dernière sera composée d'atomes de gallium. On aura ainsi un excès de trous à la surface. Cette configuration est appelée polarisation Ga et la direction de croissance sera [0001]. Inversement, si la première couche est composée de gallium, la dernière sera composée d'azote et présentera donc un excès d'électrons. On aura alors une polarisation N et l'axe de croissance sera appelé [0001], comme illustré sur la figure I-7 :

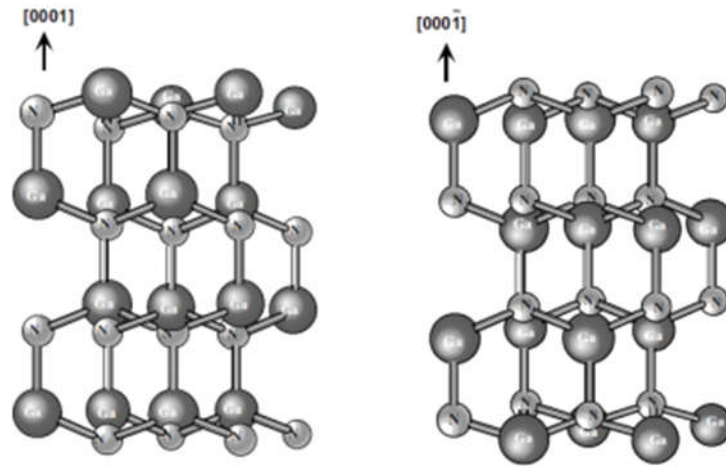


Figure I-7: Polarisations Ga et N pour le GaN. [30]

Il est très important de connaître l'orientation de la polarisation dans une direction définie pour la conception d'un composant. La polarité est déterminée par la couche de départ de la croissance, et dépend donc du substrat de départ et de la technique de croissance utilisée [31].

Cette structure est le siège de polarisations spontanée et piézoélectrique qui influent sur le fonctionnement des dispositifs à base de matériaux nitrurés.

5.a. Polarisation spontanée

Comme on a mentionné précédemment, la grande différence d'électronégativité entre le métal et l'atome d'azote entraîne un transfert de charges dans la structure en phase wurtzite, très important du côté de l'atome N qui est plus électronégatif. Ce phénomène est à l'origine de l'existence de la polarisation spontanée (P_{sp}) selon l'axe c [0001]. Cette polarisation est indépendante de l'état de contrainte du matériau.

La valeur de la polarisation spontanée des alliages ternaires ne peut être extrapolée par une loi linéaire. Ambacher et Bernardini [32] ont présenté des lois non linéaires en rajoutant à l'expression de la polarisation spontanée un terme de « bowing », tel qu'il est illustré sur la figure I-8. Ce terme représente la contribution de la déformation volumique des binaires et les effets de la contrainte interne de l'alliage. La polarisation spontanée s'écrit donc à partir des valeurs connues pour le GaN, l'AlN et l'InN par les relations empiriques suivantes [32, 33] :

$$P_{SP}^{Al_xGa_{1-x}N} = -0.090 \cdot x - 0.034 \cdot (1 - x) + 0.037 \cdot x \cdot (1 - x) \quad (12)$$

$$P_{SP}^{In_xGa_{1-x}N} = -0.042 \cdot x - 0.034 \cdot (1 - x) + 0.037 \cdot x \cdot (1 - x) \quad (13)$$

$$P_{SP}^{In_xAl_{1-x}N} = -0.042 \cdot x - 0.090 \cdot (1 - x) + 0.070 \cdot x \cdot (1 - x) \quad (14)$$

Cette polarisation est négative pour les trois matériaux AlN, GaN et InN, et vaut respectivement $-0,081 \text{ C.m}^{-2}$, $-0,029 \text{ C.m}^{-2}$ et $-0,032 \text{ C.m}^{-2}$.

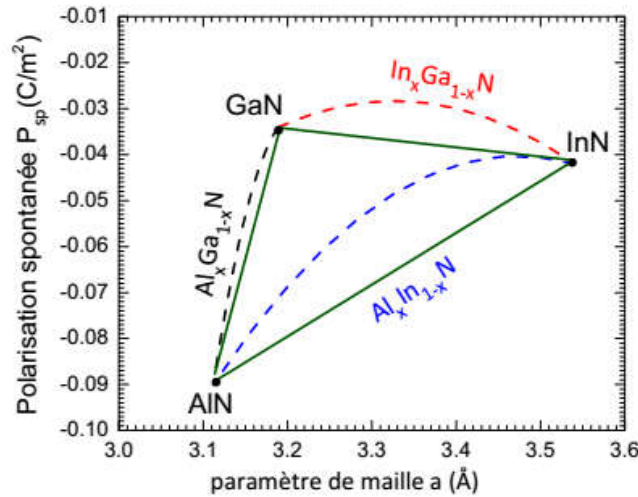


Figure 1-8: Evolution des charges de polarisation spontanée en fonction du paramètre de maille et de la fraction molaire. [33]

5.b. Polarisation piézoélectrique

Outre la polarisation interne, les nitrures d'éléments III possèdent également un caractère piézoélectrique. Cet effet est défini par la création d'un champ électrique suite à une déformation mécanique, et réciproquement par la création de déformations mécaniques lorsqu'on applique un champ électrique à un matériau. Il est dû au manque de symétrie dans la structure cristalline, à la nature fortement ionique des liaisons chimiques et aux déformations présentes dans le cristal (dues au désaccord de maille entre le matériau et le substrat) [34]. Cette polarisation piézoélectrique n'est pas orientée forcément dans la même direction que la polarisation interne. Elle dépend des propriétés du matériau. La polarisation piézoélectrique est calculée selon la loi de Hooke [35].

$$P^{PZ} = 2 \frac{a-a_0}{a_0} \left(e_{31} - e_{33} \frac{C_{13}}{C_{33}} \right) \quad (15)$$

Avec :

a, a_0 : les paramètres de maille du matériau avec et sans contrainte respectivement ;

e_{31}, e_{33} : sont les constantes piézoélectriques ;

C_{13}, C_{33} : les constantes élastiques dans le plan (x,z) et selon l'axe z respectivement.

Le tableau suivant présente un récapitulatif des constantes des matériaux AlN, InN et GaN pour le calcul des polarisations piézoélectriques [36, 37].

Tableau 1.3: Constantes pour le calcul de la polarisation piézoélectrique des principaux semiconducteurs III-N [36, 37].

Constantes	AlN	InN	GaN
a_0 (Å)	3.112	3.54	3.189
e_{31} (C/m ²)	-0.60	-0.57	-0.49
e_{33} (C/m ²)	1.46	0.97	0.73
C_{13} (GPa)	99	121	106
C_{33} (GPa)	389	182	398

Le calcul de la polarisation spontanée d'un alliage ternaire, ayant une concentration x en aluminium, est effectué suivant le modèle linéaire suivant :

$$P_{PZ}^{Al_xGa_{1-x}N} = -0.0525 \cdot x - 0.0282 \cdot x \cdot (1 - x) \quad (16)$$

$$P_{PZ}^{In_xGa_{1-x}N} = 0.148 \cdot x - 0.0424 \cdot x \cdot (1 - x) \quad (17)$$

$$P_{PZ}^{In_xAl_{1-x}N} = 0.0148 \cdot x - 0.0525 \cdot (1 - x) + 0.0938 \cdot x \cdot (1 - x) \quad (18)$$

En résumé, la polarisation totale d'un semiconducteur III-V nitruré est constituée de deux composantes : spontanée et piézoélectrique, toutes deux alignées parallèlement à l'axe c . La polarisation totale s'écrit :

$$\vec{P} = \vec{P}_{Ps} + \vec{P}_{PZ} \quad (19)$$

6. Propriétés de transport

La mobilité des électrons, notée μ_n ($\text{cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$), traduit l'aptitude des porteurs à se déplacer dans le réseau cristallin. Tandis que la vitesse de saturation notée V_{sat} (cm/s) elle correspond à la vitesse maximale qu'un porteur de charge, dans un semiconducteur, atteint en présence d'un champ électrique très élevé. Il faut noter que plus un cristal est pur, plus la mobilité est grande et que la masse effective des porteurs est faible.

L'InN se démarque par sa masse électronique effective la plus faible parmi les semiconducteurs III-N offrant ainsi la possibilité de mobilités électronique et de vitesses de saturation élevées [38]. Les simulations de Monte-Carlo prédisent une vitesse de saturation crête des électrons de $4,3 \times 10^7$ cm/s pour l'InN, significativement plus élevée par rapport à celle du GaN ($3,1 \times 10^7$ cm/s) [39] alors que les résultats expérimentaux montrent des valeurs respectives de $2,5 \times 10^7$ et $2,7 \times 10^7$ cm/s [40]. D'autre part, la mobilité des électrons mesurée expérimentalement dans l'InN de 2700 $\text{cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$ [41] reste de loin supérieure à la mobilité 900 $\text{cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$ la plus élevée rapportée pour le GaN [42]. La figure I-9 décrit la vitesse de dérive des électrons dans les composés III-N et GaAs en fonction du champ électrique appliqué.

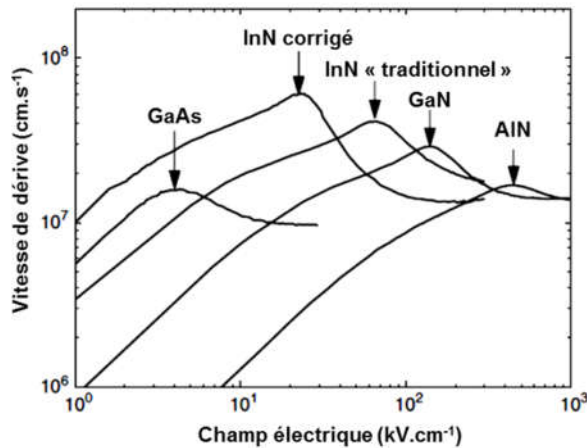


Figure I-9: Vitesse de dérive des électrons dans les composés III-N et GaAs en fonction du champ électrique, à 300 K et pour un dopage de 10^{17} cm^{-3} . [43]

Dans cette caractéristique on distingue 3 régions :

1- Une région linéaire, à faible champ

Au voisinage de son minimum, situé dans la vallée centrale Γ (figure I-3), la bande de conduction est quasi-parabolique, ce qui signifie que les porteurs ont une masse effective m^* relativement faible et donc une mobilité électronique μ_n plus élevée, elle s'écrit :

$$\mu_n = q \cdot \tau / m^* \quad (20)$$

Où q représente la charge de l'électron, m^* est sa masse effective. Le temps de relaxation τ correspond à la durée moyenne entre deux collisions successives.

Dans ce régime, la mobilité μ_n est indépendante du champ E , et la vitesse de dérive v_d évolue linéairement avec celui-ci :

$$v_d = \mu_n \cdot E \quad (21)$$

La densité de courant J_d est donnée par :

$$J_d = n \cdot q \cdot v_d = n \cdot q \cdot \mu_n \cdot E \quad (22)$$

avec n : la densité de porteurs (électrons),

2- Un régime non linéaire : apparition d'un pic de survitesse

3- Un régime de saturation

La vitesse de dérive des électrons v_d est alors limitée par leurs interactions avec le réseau cristallin via les phonons optiques, qui est le mécanisme de diffusion prédominant à fort champ. L'observation d'un pic de survitesse dans la caractéristique $v_d(E)$ est classique pour les matériaux III-V, contrairement au cas du Si. Sa présence est liée à l'existence de vallées satellites dans la bande de conduction (M, L, A) proches de la vallée centrale Γ , dont le minimum d'énergie est supérieur à celui de la vallée Γ (figure I-3). Ces vallées satellites présentent une faible courbure de bande par rapport à la vallée centrale Γ , donc une masse effective relativement élevée. Par conséquent, la mobilité des porteurs dans les vallées satellites est faible. Cette différence est particulièrement remarquée dans le cas du GaAs où la mobilité dans la vallée centrale vaut $8000 \text{ cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$ contre $100 \text{ cm}^2/(\text{V}\cdot\text{s})$ dans la vallée latérale [44].

Lorsque le champ électrique dépasse une certaine valeur, les électrons présents dans la vallée Γ de haute mobilité acquièrent une énergie suffisante pour passer vers une vallée latérale à basse mobilité. La diminution de la vitesse de dérive des électrons, alors observée, est désignée par le terme de mobilité différentielle négative. Cette mobilité différentielle négative est à la base du fonctionnement des diodes Gunn [45].

7. Champ de claquage

Le champ de claquage ou champ critique est noté ξ_c (MV/cm), il correspond à la valeur du champ maximale que peut supporter le composant. Sous une polarisation inverse, la

zone de charge d'espace (ZCE) s'élargit avec l'augmentation de la tension appliquée de part et d'autre d'une jonction (non ohmique) et entraîne l'augmentation du champ électrique à l'intérieur de cette zone. Lorsque le champ électrique atteint la valeur du champ critique, les porteurs acquièrent une énergie cinétique importante permettant d'ioniser les atomes du réseau, et ainsi de créer d'autres porteurs lors de la collision avec des atomes du réseau. Ce phénomène appelé l'ionisation par impact, entraîne le claquage par avalanche du composant. Ce champ critique correspond à une valeur de la tension inverse appliquée, appelée tension de claquage (V_{BR}).

Les matériaux à grands gap ont un champ de claquage très important par rapport au silicium ou à l'arséniure de gallium. La valeur du champ de claquage est proportionnelle au gap par la relation suivante :

$$\xi_c = \gamma \cdot E_g(T)^{3/2} \quad (23)$$

Où : γ est un coefficient qui dépend du matériau, E_g est le gap et T la température du réseau cristallin. Le fait d'avoir un gap important et donc un champ de claquage très élevé permet aux composants grands gap de supporter des tensions de polarisation importantes, ce qui est excellent pour les applications de puissance.

8. Conductivité thermique

La conductivité thermique, notée κ (W/K·cm), définit la capacité de dissipation de la chaleur par un composant. Une bonne conductivité thermique est nécessaire surtout pour les applications de puissance, puisque la chaleur non dissipée provoque une augmentation de la température dans la structure, ce qui entraîne une chute de la mobilité des électrons et ainsi une diminution des performances du composant. Le GaN présente une conductivité thermique très proche que celle du silicium ($\kappa = 1.30$ W/K·cm pour le GaN et $\kappa = 1.412$ W/K·cm pour le Si) [46]. Cette valeur est faible comparée à d'autres semiconducteurs à large bande interdite comme le 4H-SiC ($\kappa = 4.9$ W/K·cm) ou le diamant ($\kappa = 20$ W/K·cm).

Le tableau I.4 récapitule les constantes des matériaux AlN, InN et GaN pour le calcul de la conductivité thermique en fonction de la température du réseau selon la formule suivante :

$$\kappa(T) = \kappa_{300} \cdot \left(\frac{T}{300}\right)^\delta \quad (24)$$

Tableau I.4: Paramètres de conductivité thermique pour les III-N [47].

Constantes	AlN	InN	GaN
κ_{300} (W/Kcm)	2.85	0.45	1.3
δ	-1.64	0	-0.28

Les composants III-N sont principalement réalisés sur des substrats épitaxiés (voir le paragraphe suivant). La conductivité thermique du substrat influe sur la température de la couche active du composant et aussi sur ses performances. Cependant, les composants à base de GaN fabriqués sur un substrat en SiC ont une conductivité thermique bien meilleure que les composants à base de GaAs [48].

Les principales limitations de l'utilisation des III-N à haute température ne sont pas dues à leur faible conductivité thermique mais dans aux problèmes de stabilité des métallisations Schottky et ohmique [49, 50].

9. Substrats pour la croissance des matériaux III-N

Contrairement au cas des semiconducteurs tels que le Si ou le GaAs, il n'existe pas de substrat de GaN monocristallin massif disponible dans le commerce. La difficulté à obtenir ce type de cristal vient de son point de fusion très élevé et des fortes pressions de vapeur saturante des composés. Des monocristaux massifs ont été élaborés avec succès sous haute pression, mais la surface disponible actuellement est de 100 mm² pour 200 h de croissance [51]. Le principal problème rencontré pour l'épitaxie du nitrure de gallium est qu'il n'existe pas de substrat en accord de maille. Les substrats les plus utilisés avec leurs coefficients de dilatation thermique sont répertoriés dans le tableau I.5. Le dépôt de couches sur des grandes surfaces nécessite par conséquent l'utilisation de substrats différents du GaN.

Presque tous les matériaux III-N ont été développés sur un substrat de saphir pour la structure hexagonale. Le désaccord de maille entre les plans de base du h-GaN et du saphir est de 30%, cependant, lors de l'épitaxie, la maille élémentaire de h-GaN est en fait tournée de 30° par rapport à la maille des atomes d'Al du saphir, et le désaccord de maille réel est inférieur à 15% [52]. L'épitaxie est donc faite avec un désaccord de maille très important. La préférence vers ce substrat peut être attribuée à sa large disponibilité, sa symétrie hexagonale, sa facilité de manipulation, son coût relativement faible et surtout sa grande stabilité en température, mais il présente l'inconvénient d'être un isolant électrique et thermique [53, 54]. Ce substrat présente les avantages d'un coût relativement faible et surtout d'une grande stabilité en température, mais les inconvénients d'être un isolant électrique et thermique. D'autres substrats sont également employés pour la croissance tel que le SiC, Si, GaAs et l'InP. Les propriétés des différents substrats sont résumées dans le tableau ci-dessous.

Tableau I.5: Propriétés des différents substrats utilisés pour l'épitaxie des nitrures d'éléments III [51, 56].

	GaN	AlN	Saphir	Si(111)	SiC
Coefficient de dilatation thermique ($\times 10^{-6}/K$)	5.59	4.2	7.5	2.59	4.7
Résistivité ($\Omega \cdot cm$)	$>10^4$	$>10^{13}$	isolant	$>10^4$	$>10^4$
Prix de substrat 2'' (€)	≈ 3700	≈ 1000	50	3	≈ 3000
Substrats disponible	2" - 4"	2"	2" - 6"	2" - 12"	2" - 4"

Le substrat silicium est très attractif mais peu utilisé jusqu'à présent. La croissance du GaN cubique sur le silicium (001) se fait grâce à un dépôt préalable de SiC [55]. Le substrat SiC présente un paramètre de maille et un coefficient de dilatation thermique très proches de ceux du GaN [56]. Mais, il n'existe pas de technique de gravure permettant d'obtenir un état de surface approprié à l'hétéroépitaxie du GaN et ces substrats sont encore très coûteux.

10. Techniques de croissance des matériaux III-N

Une des méthodes les plus utilisées pour la croissance des couches de III-N est la croissance épitaxiale par jet moléculaire (EJM ou MBE en anglais). C'est une technique qui consiste à faire interagir des flux moléculaires (évanoués ou sublimés), sous ultra-vide, les éléments de l'alliage et éventuels dopants qui sont ensuite adsorbés à la surface d'un substrat chauffé. Dans le cas du GaN, la voie la plus employée consiste à utiliser une source solide pour le Ga, et une source gazeuse comme précurseur d'azote. Une source plasma RF (Radio Fréquence) ou ECR (Résonance Electron-Cyclotron) est nécessaire pour dissocier les molécules de la source gazeuse d'azote utilisé (soit NH_3 , soit N_2). La température du substrat, comprise entre 450°C et 850°C , permet la condensation des atomes, tout en leur conférant suffisamment d'énergie pour leur permettre de rejoindre leurs sites. L'EJM présente l'avantage de permettre un contrôle in-situ (par mesure RHEED: diffraction d'électrons rasant la surface) de la croissance et des épaisseurs des couches [57]. De plus, des interfaces abruptes dans les hétéro-structures peuvent être facilement obtenues par le contrôle précis de la quantité de chaque espèce incorporée. En revanche, les vitesses de croissance sont lentes et l'entretien des bâtis est coûteux.

L'épitaxie en phase vapeur aux hydrures (HVPE) est une autre alternative. Elle est basée sur l'utilisation des chlorures. Les températures de croissance sont comparables à celles utilisées pour la méthode de dépôt organométallique en phase vapeur (MOCVD) à des pressions atmosphériques. Son principal avantage réside dans la possibilité d'accéder à des vitesses de croissance très élevées, jusqu'à plusieurs centaines de microns par heure, alors que la MBE et la MOCVD sont limitées à environ $1 \mu\text{m}/\text{h}$. Cette technique tr des couches trouve son importance dans la croissance de couches épaisses ce qui permet d'améliorer de façon considérable leur qualité cristalline et d'atténuer les effets du substrat.

10.a. Croissance du GaN

La croissance du GaN par l'épitaxie en phase vapeur aux hydrures (HVPE) présente l'avantage de pouvoir obtenir des vitesses de croissance rapides allant de $1 \mu\text{m}/\text{h}$ jusqu'à quelques centaines de $\mu\text{m}/\text{h}$ [58]. Les premiers films de GaN ont été obtenus par cette technique sur du saphir. Cependant, ce sont les techniques de croissance par l'épitaxie en phase vapeur aux organométalliques (MOVPE) qui sont les plus utilisées. En effet, l'obtention de couches de GaN de meilleure qualité structurale ainsi que la réalisation de LED et les diodes laser dans la région légère bleue et violette [59, 60] a été possible avec ces deux techniques de croissance.

L'épitaxie par jet moléculaire (MBE) s'est avérée plus adéquate pour la croissance épitaxiale de GaN cubique en employant le substrat GaAs (001) cubique [61]. Elle facilite également le dopage des couches comme le dopage "p" qui est relativement compliqué à obtenir dans le cas du GaN [58]. L'inconvénient majeur de cette technique réside dans les vitesses de croissance qui sont beaucoup plus faibles. La croissance initiale d'épitaxie par jet moléculaire de GaN sur le GaAs (001) a été étudiée afin de voir la reconstruction de la surface du substrat.

La croissance sélective latérale nommée E.L.O (pour Epitaxial Lateral Overgrowth) est une méthode qui a permis la croissance de GaN ELO sur substrat Saphir [62]. La technique consiste à masquer partiellement le substrat par un matériau amorphe (usuellement SiO₂), puis à faire une reprise de croissance (EPVOM ou EPVH) par-dessus le masque en favorisant graduellement la direction de croissance latérale par le choix de conditions de dépôt adaptées. Les étapes de la croissance sont schématisées dans la figure I-10. Dans le cas de la croissance de GaN, une réduction du rapport V/III permet de passer d'un mode de croissance verticale à une croissance latérale.

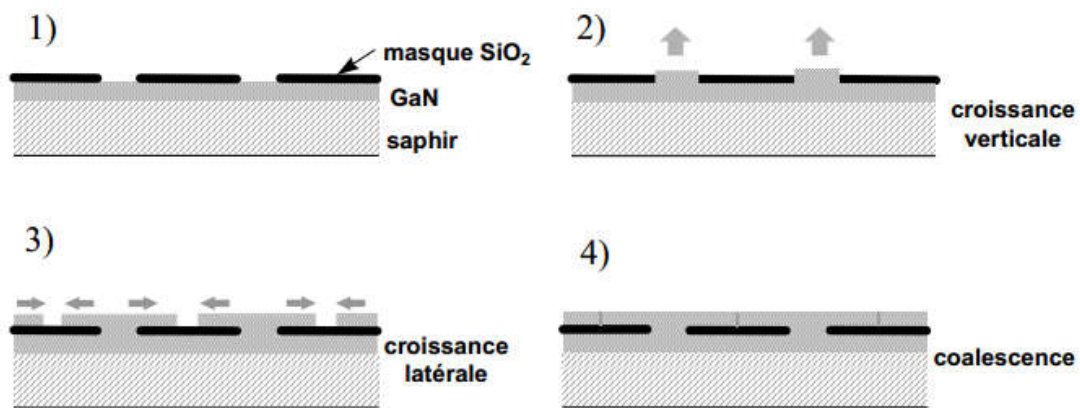


Figure I-10: Principales étapes de la croissance par reprise d'épitaxie latérale.

10.b. Croissance de l'InN

Malgré ses propriétés prometteuses, la croissance de l'InN fait face à des contraintes difficiles : sa température de dissociation est relativement faible (550°C) interdisant de ce fait la croissance d'InN à haute température, sa pression de dissociation est élevée et l'InN ne se forme pas par réaction directe entre le diazote N₂ et l'indium In. De plus il n'existe pas à l'heure actuelle de substrats massifs d'InN ni de substrats adaptés à la croissance de l'InN c'est à dire dont le paramètre de maille et le coefficient de dilatation thermique soient voisins de ceux du semiconducteur [63, 64]. Pour essayer de contourner ces difficultés, de nombreuses techniques de croissance ont été adoptées afin d'obtenir de l'InN : MOCVD, MBE, CVD assisté par laser, épitaxie en phase vapeur, bombardement d'indium avec de l'azote atomique obtenu par plasma radiofréquence, etc.

La majorité des croissances d'InN ont été effectuées à des températures d'environ 500°C. Les films d'InN sont généralement polycristallins avec des agglomérats de grains de structure colonnaire [65]. La cristallinité des films s'améliore après un court recuit d'environ 30 minutes à 450-500°C [66]. Le réarrangement de ces cristallites pourrait être à l'origine de

l'amélioration de la cristallinité des films [66]. L'emploi de couches tampons améliore également sensiblement la qualité cristalline des films d'InN notamment au niveau de la morphologie, de la croissance et des propriétés électriques [65].

Ainsi, on annonçait initialement un gap d'environ 1.9 eV [67], récemment revu à la baisse à 0.7 eV [68] et déjà apparaît une valeur de 1.2 eV [69]. Tout le monde s'accorde cependant sur un point, la photoluminescence pour ce matériau se situe aux alentours de 0,8 eV. En outre, en raison de sa stabilité thermique plutôt faible, l'InN ne peut pas être développé à des températures élevées requises par des processus de croissance d'épitaxie en phase vapeur (CVD) qui présente l'approche de croissance de nitrure la plus populaire [70].

Shinoda et al. [71] ont étudié la formation d'InN par pulvérisation d'une cible d'indium par un faisceau d'ions azote produit par un plasma radiofréquence. Un pré-bombardement a été utilisé pour nettoyer la cible d'indium de la couche de contamination. Le film d'InN analysé par XPS, démontre que le pic des liaisons N-In est le plus intense quand l'énergie du faisceau d'ions N_2^+ est la plus faible avec l'augmentation de la pression d'azote N_2 . Inversement, il paraît que le pic des liaisons N-In soit plus faible pour les fortes énergies de faisceau N_2^+ [71].

Le faisceau d'ions contient majoritairement des espèces N_2^+ . D'après les auteurs, les molécules N_2 aussi bien que les ions N_2^+ joueraient un rôle majoritaire dans la formation des liaisons N-In. Selon Natarajan et al [72] les ions N^{2+} réagissent avec les molécules N_2 pour donner de l'azote atomique et des ions N^+ selon la réaction chimique suivante : $N_2^+ + N_2 \rightarrow N_2 + N^+ + N$. L'azote atomique et les ions N^+ vont se lier ensuite avec les atomes d'indium à la surface de la cible.

Pour augmenter la concentration en azote atomique et en ions N^+ , un plasma radiofréquence est introduit et est dirigé vers la surface de la cible d'indium. L'intensité du signal XPS des liaisons N-In est ainsi augmentée, les espèces azotées N et N^+ contribuent donc bien à la formation de ces liaisons.

En résumé, les liaisons N-In augmentent lorsque l'énergie des ions N_2^+ diminue et que la pression du gaz augmente. Inversement, les liaisons N-In diminuent lorsque le flux d'ions N_2^+ augmente [66, 71]. Ces résultats suggèrent que ce sont les espèces N et N^+ qui jouent un rôle principal dans la formation des liaisons N-In.

11. Défauts structuraux

La croissance de couches minces, sur un substrat donné, peut engendrer de nombreuses imperfections dans le réseau cristallin. Ces défauts structuraux sont généralement en grande densité dans les nitrures. Ils limitent donc les performances des composants à base de nitrures. C'est pourquoi ils ont été promptement étudiés à l'aide de calculs ab initio [73, 74]. Dans un cristal, il existe plusieurs types de défauts. On peut les classer en deux catégories, les défauts ponctuels qui sont :

- les lacunes, qui représentent les sites atomiques inoccupés V_{Ga} ou V_{N} dans GaN
- les anti-sites, lorsqu'un atome occupe le site d'un autre atome, par exemple, un atome d'azote prend la place d'un gallium N_{Ga} , ou un atome de gallium prend la place d'un atome d'azote Ga_{N}
- les impuretés par substitution, quand un atome étranger occupe un site atomique, par exemple, un atome de carbone dans un site de gallium (C_{Ga}) qui peuvent venir des précurseurs ou du gaz porteur, du bâti, d'une oxydation ou d'un mauvais nettoyage de la surface du substrat, d'une diffusion d'atomes du substrat vers la couche déposée, ...etc.
- les défauts interstitiels, quand un atome du matériau ou une impureté occupe un site interstitiel, par exemple, un atome d'azote dans un site interstitiel, N_{int} ;

La deuxième catégorie de défauts, sont les défauts étendus qui sont :

- les dislocations, qui sont des discontinuités dans la structure qui proviennent généralement de la relaxation plastique d'un matériau sous contrainte ;
- les défauts d'empilement, lorsque la séquence d'empilement des atomes n'est plus respectée ;
- les inclusions : ce sont des précipités ou un changement de phase cristalline dans une zone du réseau) ;
- les joints de grain, qui représentent les frontières entre cristaux possédant des orientations différentes. Ce type de défauts est très répandu dans les couches poly ou nanocristallines ;

Les nitrures d'éléments III sont particulièrement connus pour leurs grandes densités de dislocations. Typiquement, des densités de dislocations de l'ordre 10^7 - 10^{10} cm^{-2} sont rencontrées dans des films de GaN obtenus par hétéroépitaxie sur Si, Saphir ou SiC. Ces dislocations naissent à l'interface entre les nitrures et le substrat et se propagent verticalement à travers les différentes couches.

11.a. Défauts structuraux dans le GaN

Les défauts structuraux dans le GaN ont été d'abord étudiés théoriquement à l'aide de modèles théoriques, puis expérimentalement à l'aide de la technique d'implantation. Les lacunes dans le GaN sont des défauts à charges multiples, et plusieurs niveaux de défauts peuvent apparaître dans la bande interdite. La lacune de gallium (V_{Ga}) peut être le défaut natif dominant dans le GaN de type n, tandis que la lacune d'azote (V_{N}) peut être abondamment formée dans le GaN de type p.

Neugebauer et Van de Walle [74] ont déterminé les énergies de formation et la structure électronique des différents défauts ponctuels présents dans le GaN en s'appuyant sur la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT). Ils ont obtenu les courbes présentées dans la figure I-11 représentant l'énergie de formation des différents défauts ponctuels en fonction du niveau de Fermi. Le niveau de Fermi égal à 0 eV signifie qu'il est au niveau du haut de la bande de valence. On se trouve donc dans des conditions de fort dopage de type P.

Inversement, le niveau de Fermi situé à 3.4 eV (énergie de la bande interdite du GaN), correspond au bas de la bande de conduction, soit dans des conditions de fort dopage de type N.

D'après cette figure, dans les conditions d'un dopage P, la lacune d'azote possède la plus faible énergie de formation et serait donc la plus probable dans le GaN, alors que sous les conditions d'un dopage N, c'est la lacune de gallium qui serait la plus probable. Ces faibles énergies sont dues au fait que les lacunes peuvent être chargées, ce qui va baisser significativement leur énergie de formation. Les anti-sites et les défauts interstitiels sont nettement moins favorables énergétiquement. Ils sont donc théoriquement plus rares dans le GaN [73]. Cette caractéristique rend ce matériau différent des autres semiconducteurs traditionnels comme le Si, le GaAs, dans lesquels les anti-sites et les défauts interstitiels jouent un rôle important. Ceci peut s'expliquer par le fait que le gallium et l'azote ont des rayons covalents très différents ($r_{\text{Ga}} = 1.26 \text{ \AA}$ et $r_{\text{N}} = 0.75 \text{ \AA}$). La formation d'un anti-site créerait donc une forte déformation dans le réseau environnant qui nécessiterait une grande quantité d'énergie pour être créée [74]. Neugebauer et Van de Walle [74] ont étudiés également la structure électronique des défauts natifs dans le GaN en présentant leur position énergétique et le caractère des états induits dans la structure de bande, (voir la figure I-11).

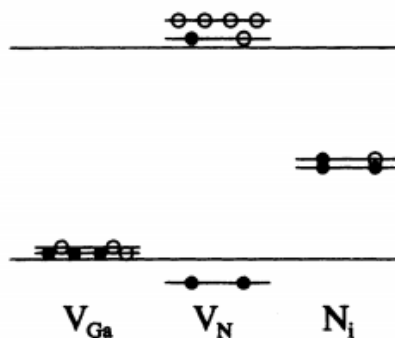


Figure I-11: Position des niveaux énergétiques des lacunes de gallium, V_{Ga} , et d'azote, V_{N} , ainsi que de l'azote interstitiel, N_{i} . Les occupations correspondent à un état de charge neutre. Les cercles pleins représentent les électrons et les cercles vides, les trous. [74]

La lacune de gallium, dans son état neutre, V_{Ga}^0 , est triplement occupée. Puisque ses niveaux énergétiques sont proches de la bande de valence, elle peut se comporter comme un triple accepteur. En revanche, la V_{Ga} est mobile dans une large gamme de températures de croissance ou de recuit. Le plus probable c'est qu'elle migre et forme des complexes avec des défauts plus stables. Les impuretés qui sont les plus susceptibles de former des complexes stables avec V_{Ga} sont des donneurs. Selon les calculs de Neugebauer et Van de Walle, les complexes $V_{\text{Ga}}\text{O}_{\text{N}}$ et $V_{\text{Ga}}\text{Si}_{\text{Ga}}$ agissent comme des doubles accepteurs dans le GaN, et leurs niveaux d'énergie sont de 1.1 et 0.9 eV respectivement. L'énergie entre le maximum de la bande de valence et les niveaux énergétiques de la lacune d'azote à l'état neutre a été calculée autour de 0.2 eV [73, 74]. Les états chargés se situent plus haut dans la bande interdite avec des énergies, entre 0,4 et 1.1 eV [73]. Du fait de la faible taille de l'atome d'azote et du fort rayon atomique de l'atome de gallium, l'absence de l'azote provoque le recouvrement des liaisons pendantes de Ga formant une liaison pseudo-métallique Ga-Ga. Cette dernière est à

l'origine du fort écartement des niveaux d'énergie, les plaçant dans la bande de valence et la bande de conduction. La lacune d'azote, V_N , étant triplement occupée, l'électron se trouve forcément dans un niveau d'énergie situé dans la bande de conduction (cf. figure I-11). La lacune agit alors comme un donneur [74]. Le défaut d'azote interstitiel, N_{int} , est positionné au niveau du gap d'énergie interdite. Il est divisé en deux niveaux d'énergie du fait de la perte de symétrie dans le réseau [74].

D'autre part, le C, Si et Ge sur les sites Ga et O, S et Se sur les sites N sont considérés comme des donneurs peu profonds dans le GaN, tandis que Be, Mg, Ca, Zn, et Cd sur les sites Ga et C, Si, et Ge sur les sites N pourrait potentiellement donner lieu à des accepteurs relativement peu profonds dans ce semiconducteur. Le dopage avec le silicium introduit un niveau de donneurs peu profond dans le GaN à $E_C-0.022$ eV [75], c'est l'impureté donneuse dominante dans un matériau non intentionnellement dopé (NID). L'oxygène est un autre donneur plus profond, il se trouve également à $E_C-0.034$ eV [75]. Il est présent en raison des précurseurs dans la croissance MOCVD.

11.b. Défauts structuraux dans l'InN

Différentes conditions de concentration d'azote dans l'InN ont été étudiées dans la bibliographie en s'appuyant toujours sur la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT). Z. Feng-qi et al. [76] ont étudié la formation de défauts structuraux dans l'InN sous différentes conditions de croissance. Selon leur étude un rapport de concentrations $[N]/[In]=1$ donne l'InN le plus stable. Dans cette condition, le défaut possédant la plus faible énergie de formation est l'anti-site complexe InN- N_{int} le long de l'axe c, ce qui signifie que deux atomes voisins N et In ont échangé leurs places. Dans des conditions de fortes concentrations d'azote où $[N]/[In]>1$, Feng-qi et al. [76] montrent que l'atome d'azote interstitiel, N_{int} , possède la plus faible énergie de formation et se comporte comme un triple donneur [77], ce qui explique la forte concentration d'électrons mesurée dans les échantillons.

Enfin, dans les conditions $[N]/[In] < 1$ ou riche en In, la lacune d'azote, V_N , a une énergie de formation bien plus faible que les autres défauts [76]. Ce résultat a également été obtenu par Stampfl et al. [78]. Les auteurs ont également étudié l'énergie de formation des impuretés O, Si et Mg dans l'InN. Ils ont déduit que les impuretés ont des énergies de formation plus faibles que la lacune d'azote, excepté pour le Mg. L'oxygène dans un site N, O_N , et le silicium dans un site In, Si_{In} , agissent comme des donneurs, ce qui explique également la source de la forte densité d'électrons présente dans le matériau. Il faut noter que l'énergie de formation des défauts natifs dans la structure wurtzite et zinc-blende sont similaires, excepté pour les défauts interstitiels où la géométrie de la structure wurtzite augmente l'énergie de formation [78]. Dans la figure I-12, on observe que les impuretés Mg qui doivent servir de dopant P peuvent facilement être compensées par des lacunes d'azote.

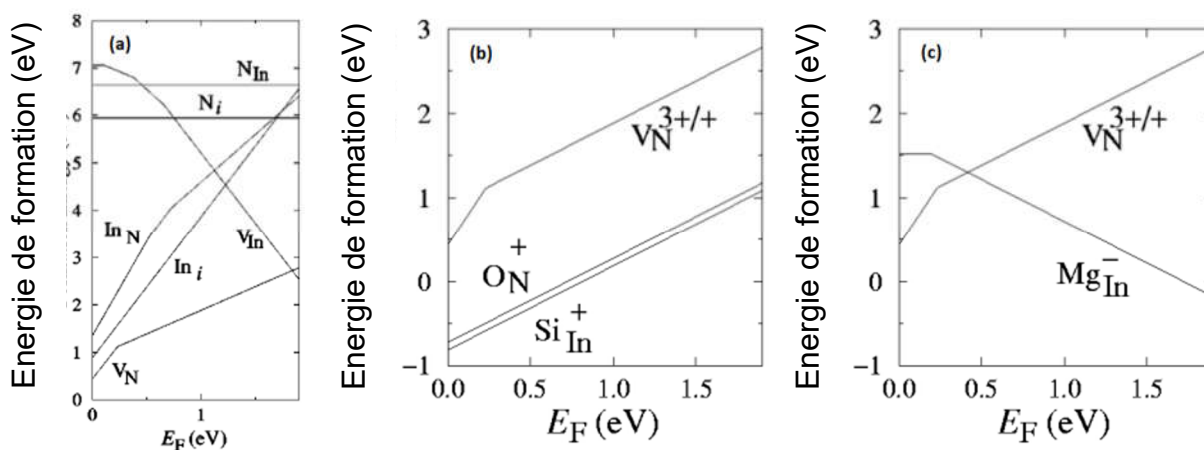


Figure I-12: Energie de formation des points de défauts natifs (a) des lacunes d'azote et des impuretés (b) et (c) dans l'InN en fonction du niveau de Fermi pour l'InN zinc blende, sous les conditions riche en In. $E_F=0$ correspond au maximum de la bande de valence. [78]

Ainsi, comme dans le GaN, la lacune d'azote joue un rôle important dans les défauts natifs de l'InN. Néanmoins, l'origine de la forte densité d'électrons n'est toujours pas formellement déterminée. Schaff et al. [79] ont montré que la concentration d'électrons dans l'InN dépend de l'épaisseur de cette couche. En effet, la concentration des électrons suit la densité de défauts dus au désaccord de maille, qui diminue avec l'augmentation de l'épaisseur des couches. C'est pourquoi les défauts, et pas les contaminants, sont la principale source d'électrons dans l'InN [80]. D'après ces études, les impuretés présentes dans le matériau influent sur les propriétés électriques du matériau [81, 80].

12. Caractère intrinsèque de type N dans les nitrures

Les lacunes d'azote sont omniprésentes dans les nitrures d'éléments III, car ils ont l'énergie de formation la plus faible et sont donc en grande quantité dans le matériau. Sachant que les lacunes d'azote ont un caractère donneur, (voir paragraphe défauts structuraux), elles peuvent alors compenser un dopage P. La figure I-13 représente les positions relatives des bandes des nitrures-III ainsi que l'énergie de stabilisation du niveau de Fermi (E_{FS}). D'après cette figure, on voit qu' E_{FS} est positionné dans la bande de conduction de l'InN et dans le haut de la bande interdite du GaN. C'est pourquoi, on prévoit que ces matériaux soient relativement faciles à doper avec des donneurs et beaucoup plus difficile à doper avec des accepteurs [81].

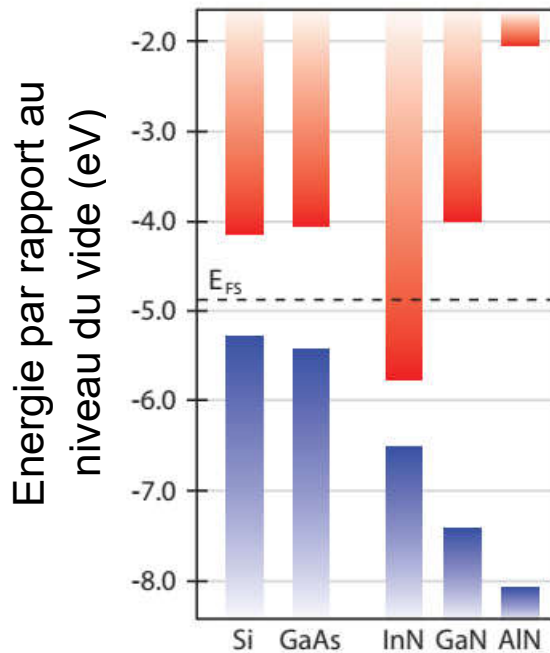


Figure I-13: Positions relatives des bandes pour le groupe des nitrures-III. Les lignes en pointillées représentent le niveau de stabilisation du niveau de Fermi. [81]

13. Propriétés de surface

La surface d'un matériau n'a pas forcément les mêmes propriétés que celles du matériau massif. En effet, la dernière couche atomique peut présenter un nombre important de liaisons pendantes. Ces liaisons pendantes sont donc très réactives. La surface cherche à minimiser son énergie en se reconstruisant par la diffusion d'atomes, en adsorbant des atomes de l'atmosphère ou en créant des défauts. Pour les nitrures, les espèces les plus adsorbées sont l'oxygène et le carbone. Il a été montré que la méthode la plus efficace et faisant le moins de dommage au matériau était une gravure chimique au HCl suivi d'un recuit thermique [82, 83].

A cause de la forte densité de défauts à la surface, le niveau de Fermi tend vers son niveau de stabilisation, E_{FS} (dans l'InN ce niveau coïncide avec le niveau de neutralité de charges [84]). C'est pourquoi une accumulation surfacique d'électrons a été remarquée dans les films d'InN. En effet, l'une des propriétés les plus remarquables de l'InN découverte à ce jour est la présence d'une couche native d'accumulation d'électrons à sa surface avec une densité qui s'élève à 10^{13} cm^{-2} [85]. Alors que tous les autres semi-conducteurs III-V de type n courants, à l'exception de l'InAs, et la grande majorité de tous les semi-conducteurs, ont des couches de déplétions à leurs surfaces. Cependant, malgré les progrès technologiques, l'origine de la concentration élevée en électrons dans l'InN fait toujours l'objet d'un débat intense.

Cette propriété influence sur la caractéristique électrique la plus basique des films d'InN; l'utilisation de la technique à effet Hall à champ unique ne donne pas les propriétés en volume d'un film d'InN. Au lieu de cela, les propriétés électriques moyennes de l'ensemble du

film d'InN sont obtenues, y compris les effets de la conduction parallèle à travers les régions de surface, de volume et d'interface. En utilisant une analyse quantitative du spectre de mobilité dans des mesures Hall à champ magnétique variable, la conduction de la couche de surface a été déconvoluée de la conduction massive en supposant un modèle de conduction à deux couches. Les mobilités de la couche de surface et massive sont trouvées égales à ~ 500 et ~ 3500 ($\text{cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$), respectivement, pour une couche d'InN à température ambiante [86]. Pour l'InN type p, la présence d'une couche d'inversion associée à la surface rend la région de type p, sous la région riche en électrons de surface, difficile à caractériser.

Dans leurs travaux, Van de Walle et al. [87] prédisent l'absence de cette accumulation d'électrons sur les surfaces non-polaires de l'InN (1100) et (1120) et sur les surfaces polaires si elles ne sont constituées que de molécules In-N. cela est confirmé par Wu et al. [88] qui n'ont pas constaté une couche d'accumulation sur des surfaces non-polaires d'InN clivées in situ.

L'accumulation d'électrons en surface fait également que presque tous les contacts métal/InN présentent un comportement ohmique et a des implications pour le comportement de dopage et les applications potentielles de dispositifs, tels que les cellules solaires [89], les transistors, la génération de rayonnement Téra Hertz [89, 90] et les capteurs de gaz et chimiques [91, 92].

14. Conclusion

Les nitrides d'éléments III possèdent des propriétés optiques et électriques très intéressantes comparés à la plupart des semiconducteurs couramment utilisés dans l'industrie de la microélectronique. De plus, la possibilité de former de nombreux alliages ternaires ou quaternaires, permettent de moduler ces propriétés à travers la composition chimique des alliages formés, ce qui sera illustré dans les chapitres suivants, à travers notamment des hétérostructures InN/InP et AlGaIn/GaN. Nous avons donc vu dans ce premier chapitre les caractéristiques et les propriétés des matériaux III-N tant sur le plan structural, qu'électronique, optique et thermique. Nous connaissons d'avantages les points faibles à savoir, la grande densité de défauts et la concentration élevée d'électrons.

Dans les chapitres suivants nous allons étudier l'importance du pré-conditionnement de la surface du substrat (InP pour la croissance l'InN et Si pour le GaN) pour la synthèse des composants à base de nitrides d'éléments III.

Bibliographie

- [1] Hadis Morkoc, Handbook of Nitride Semiconductors and Devices: Materials Properties, Physics and Growth, Vol. 1, Wiley-VCH, (2008).
- [2] U. K. Mishra, J. Singh, "Semiconductor device physics and design", Springer, (2008).
- [3] L. Vegard, Z. Phys. 5, 17–26 (1921).
- [4] Miguel Caro: Group-III nitrides, Page web: https://miguelcaro.org/wiki/index.php/Group-III_nitrides
- [5] Cláudio de Carvalho, L., Schleife, A. and Bechstedt, F., Physical Review B., Vol. 84, 195105 (2011).
- [6] Piprek, J., Peng, T., Qui, G., and Olowolafe, J., IEEE International Symposium on Compound Semiconductors, 227-229 (1997).
- [7] G. Orsal, Y. El Gmili, N. Fressengeas, J. Streque, R. Djerboub, T. Moudakir, S. Sundaram, A. Ougazzaden, and J. P. Salvestrini. Optical Materials Express, Vol. 4, (2014).
- [8] E. Sakalauskas, H. Behmenburg, C. Hums, P. Schley, G. Rossbach, C. Giesen, M. Heuken, H. Kalisch, R. H. Jansen, J. Blasing, A. Dadgar, A. Krost, and R. Goldhahn, Journal of Physics D: Applied Physics. Vol. 43 (2010).
- [9] E. Iliopoulos, A. Adikimenakis, C. Giesen, M. heuken, and A. Georgakilas, Applied Physics Letters, Vol. 92, 191907 (2008).
- [10] Y.P. Varshni, Physica, V 34 (1), 149-154 (1967).
- [11] Wu, J. Journal of Applied Physics., Vol. 106 (2009).
- [12] T.L. Tansley, C.P. Foley, J. Appl. Phys., 59, 3241(1986).
- [13] T.L. Tansley, C.P. Foley, Electron. Lett., 20, 1066 (1984).
- [14] T. Inushima, V.V. Mamutin, V.A. Vekshin, S.V. Ivanov, T. Sakon, M. Motokawa, S. Ohoya, J. Cryst. Growth, 481, 227–228 (2001).
- [15] V.Yu Davydov, A.A. Klochikhin, R.P. Seisyan, V.V. Emtsev, S.V. Ivanov, F. Bechstedt, J. Furthmuller, H. Harima, A.V. Mudryi, J. Aderhold, O. Semchinova, J. Graul, Phys. Status Solidi b, 229, R1 (2002).
- [16] Y. Nanishi, Y. Saito, T. Yamaguchi, Japan. J. Appl. Phys. 42, 2549 (2003).
- [17] V. Yu Davydov, A.A. Klochikhin, V.V. Emtsev, S.V. Ivanov, V.V. Vekshin, F. Bechstedt, J. Furthmuller, H. Harima, A.V. Mudryi, A. Hashimoto, A. Yamamoto, A.J. Aderhold, J. Graul, E.E. Haller, Phys. Status Solidi b, 230, R4 (2002).

- [18] J. Wu, W. Walukiewicz, K.M. Yu, J.W. Ager III, E.E. Haller, H. Lu, W. Schaff, Y. Saito, Y. Nanishi, *Appl. Phys. Lett.* 80, 3967 (2002).
- [19] M. Higashiwaki, T. Matsui, *J. Cryst. Growth* 269 162 (2004).
- [20] D.B. Haddad, H. Dai, R. Naik, C. Morgan, V.M. Naik, J.S. Thakur, G.W. Auner, L.E. Wenger, H. Lu, W.J. Schaff, *Mater. Res. Soc. Symp. Proc.*, 798, Y12.7.1 (2004).
- [21] Kane, E.O. *J. Phys. Chem. Solids*. Vol. 1, 249 (1957).
- [22] Michael P. Hasselbeck and Peter M. Enders, *Phys. Rev. B* 57, 9674 (1998)
- [23] P.Singh, M.Morales, F.Goubilleau, M.Wojdak, J.F.Carlin, M.Ilegems, D.Chateigner, *Superlattices and Microstructures* , 36 (4–6), 537-545 (2004).
- [24] Andreas Othonos, Matthew Zervos, Maria Pervolaraki, *Nanoscale Res Lett.* 4, 122–129 (2009).
- [25] 3 M. Jimenez-rodriguez, L. Monteagudo-Lerma, E. Monroy,2,3 M. González-herráez, and F. B. Naranjo, *Optics Express*, 25 (5), 5366-5375 (2017).
- [26] P. Trautman, K. Pakula, A.M. Witowski and J.M. Baranowski, *Acta Physica Polonica A*, Vol. 108(5), 903-908 (2005).
- [27] Wu, J., et al. *Applied Physics Letters*, 84, 2805 (2004).
- [28] K. Sugita, H. Takatsuka, A. Hashimoto, A. Yamamoto, *Phys. Status Solidi b*, 240 (2003)
- [29] Leszczynski, M., Teisseyre, H., Suski, T., Grzegory, I.,Bockowski, M., Jun, J., Porowski, S., *Appl. Phys. Lett.*, vol. 69, n° 1, 73-75 (1996).
- [30] H. Morkov. *Handbook of Nitride Semiconductors and Devices*. WILEY-VCH : Verlag GmbH and Co, (2008).
- [31] Stutzmann, M., et al., Playing with polarity. *Physica Status Solidi B-Basic Research*. 228 (2), 505-512 (2001).
- [32] O. Ambacher, B. Foutz, J. Smart, J. R. Shealy, N. G. Weimann, K. Chu, M. Murphy, A. J. Sierakowski, W. J. Schaff, and L. F. Eastman, *J. Appl. Phys.* Vol. 87, No. 1, 334-344 (2000).
- [33] Soumaya Latrach. *Optimisation et analyse des propriétés de transport électroniques dans les structures à base des matériaux AlInN/GaN*. Thèse d'Université Côte d'Azur (2020).
- [34] Liu, L. and Edgar, J.H., *Materials Science and Engineering R.*, Vol. 37, 61 (2002).
- [35] Bernardini, F., Fiorentini, V. and Vanderbilt, D., *Physical Review B.*, Vol. 56, R10024 (1997).
- [36] Sadao Adachi, *Properties of semiconductor alloys group IV, III-V and II-VI semiconductors*, Wiley (2009).

- [37] H. Mathieu, Physique des semiconducteurs et des composants électroniques, 6^e édition, Dunod (2009).
- [38] B.R. Natarajan, A. H. Eltoukhy, J. E. Greene, Thin Solid films, 69, 201(1980).
- [39] J.-D Hecht, F. Frost, T. Chassé, D. Hirsch, H. Neumann, A. Schindler, F. Bigl App. Surf. Sci, 179, 196-202 (2001).
- [40] J. Martin. Étude par Epitaxie en Phase Vapeur aux Organo-Métalliques de la croissance sélective de nano-hétéro-structures de matériaux à base de GaN. Thèse d'Université Paul Verlaine (2009).
- [41] J.-D Hecht, F. Frost, A. Sidorenko, D. Hirsch, H. Neumann, A. Schindler, S. Krasnikov, L. Zhang, T. Chassé Solid-State Electronics, 47, 413-418 (2003).
- [42] J. S. Pan, A.T.S. Wan, C.H.A. Huan, H.S. Tan, K.L. Tan J. Phys. D : Appl. Phys. 29, 2997-3002 (1996).
- [43] Stephen K. O'Leary, Brian E. Foutz, Michael S. Shur and Lester F. Eastman, Journal of Materials Science: Materials in Electronics. 21(3), 218-230 (2010).
- [44] Li, T., M. Mastro, and A. Dadgar, eds. III-V Compound Semiconductors: Integration with Silicon-Based Microelectronics. CRC Press. 603, (2010).
- [45] Shur, M.S. GaAs devices and circuits, 1st edition, Microdevices, Springer US, ISBN: 978-1-4899-1989-2 (2013).
- [46] W.Liu, A. Balandin, Appl Phys Lett. 85, n° 22, 5230–5232 (2004).
- [47] Piprek, J., Semiconductor Optoelectronic Devices: Introduction to Physics and Simulation. UCSB: Academic Press, 22 (2003).
- [48] O. Jardel. Contribution à la modélisation des transistors pour l'amplification de puissance aux fréquences microondes. Développement d'un nouveau modèle électrothermique de HEMT AlGaIn/GaN incluant les effets de pièges. Thèse d'Université de Limoges (2008).
- [49] G. Astre. Fiabilité des dispositifs HEMT en technologie GaN. Thèse d'Université de Toulouse (2012).
- [50] M. Bouya. Etude des mécanismes de défaillances et de transport dans les structures HEMTs AlGaIn/GaN. Thèse d'Université Bordeaux 1 (2010).
- [51] Porowski, S, Near defect free GaN substrates MRS Internet J. Nitride Semicond. Res., vol. 4S1, G3.1, 11. (1999).
- [52] Popovici, G., Morkoç, H., Mohammad, S.N., Deposition and properties of group III nitride by molecular beam epitaxy in Group III nitride semiconductors compound: physics and applications. B. GIL. Oxford, 19-69 (1998).
- [53] S. C. Jain, M. Willander, J. Narayan, R. Van Overstraeten, J. Appl. Phys., 87, 965 (2000).

- [54] Q. X. Guo, H. Ogawa, H. Yamano, A. Yoshida, *Appl. Phys. Lett.* 66, 715-717 (1995).
- [55] A. Philippe, Thèse de docteur de l'Institut National des Sciences Appliquées de Lyon, (1999).
- [56] O. Zsebok, J. V. Thordson, T. G. Andersson, *MRS Internet J. Nitride Semicond. Res.* 3, (1998).
- [57] W. Seifert, A. Tempel, *Phys. Stat. Sol., A* 23, K39 (1974).
- [58] Y. Ould-Metidji, Thèse de docteur de l'Université Blaise Pascal, Clermont- Ferrand II (2002).
- [59] S. Nakamura, M. Senoh, T. Mukai, *Appl. Phys. Lett.*, 62, 2390 (1993).
- [60] S. Nakamura, M. Senoh, S. Nagahama, N. Iwasa, T. Yamada, T. Matsushita, H. Kiyoku, Y. Sugimoto, T. Kozaki, H. Umemoto, M. Sano, K. Chocho, *Appl. Phys. Lett.* 72, 2014 (1998).
- [61] M. S. Liu, S. Praver, L. A. Bursill, R. Brenn, D. J. As, *Appl. Phys. Lett.*, 78 2658 (2001).
- [62] Kato, Y., Kitamura, S., Hiramatsu, K., Sawaki, N., *Journal of Crystal Growth*, vol. 144, n° 3-4, 133-140 (1994).
- [63] A. G. Bhuiyan, A. Hashimoto, A. Yamamoto, *J. Appl. Phys.* 94, 2779 (2003).
- [64] Y. Nanishi, Y. Sato, T. Yamaguchi, *Jpn. J. Appl. Phys.* 42, 2549 (2003).
- [65] B. Gil, *Group III nitride semiconductors compounds : physics and applications* Oxford Science Publications, Clarendon Press, (1998).
- [66] M. Petit, Ch. Robert-Goumet, L. Bideux, B. Gruzza, Z. Benamara, N. Bachir Bouiadjra, V. Matolin, *Appl. Surf. Sci.* 234, 451–456 (2004).
- [67] T. L. Tansley, C. P. Foley, *J. Appl. Phys.* 59, 3241 (1986).
- [68] V. Yu. Davydov, A. A. Klochikhin, V. V. Emtsev, S. V. Ivanov, V. V. Vekshin, F. Bechstedt, J. Furthmüller, H. Harima, A. V. Mudryi, A. Hashimoto, A. Yamamoto, J. Aderhold, J. Graul, E. E. Haller, *Phys. Stat. Sol. B* 230, R4 (2002).
- [69] T. V. Shubina, S. V. Ivanov, V. N. Jmerik, D. D. Solnyshkov, V. A. Vekshin, P. S. Kop'ev, A. Vasson, J. Leymarie, A. Kavokin, H. Amano, K. Shimomo, A. Kasic, B. Monemar, *Phys. Rev. Lett.* 92, 117407 (2004).
- [70] S. Strite, H. Morkoc, *Vac. Sci. Technol. B* 10, 1237 (1992).
- [71] Hiroyuki Shinoda, Nobuki Mutsukura, *Diamond and related materials* 11 896-900 (2002).
- [72] B.R. Natarajan, A. H. Eltoukhy, J. E. Greene, *Thin Solid films*, 69, 201 (1980).
- [73] Gorczyca, I., Svane, A. and Christensen, N.E., *Physical Review B.*, Vol. 60, 8147 (1999).

- [74] Neugebauer, J. and Van de Walle, C.G., Physical Review B., Vol. 50, 8067 (1994).
- [75] C. Haller, J.-F. Carlin, G. Jacopin, W. Liu, D. Martin, R. Butté, and N. Grandjean, Appl. Phys. Lett. 113, 111106 (2018).
- [76] Feng-Q. Zhao, Shi, J.-J. and Yang, M. , Communications in Theoretical Physics., Vol. 53, 145 (2010).
- [77] Duan, X.M. and Stampfl, C. Physical Review B., Vol. 79, 174202 (2009).
- [78] C. Stampfl, C. G. Van de Walle, D. Vogel, P. Krüger, and J. Pollmann, Physical Review B., Vol. 61, 7846 (2000).
- [79] W. J. Schaff, X. Chen, D. Hao, K. Matthews, T. Richards, L. F. Eastman, H. Lu, C. J. Cho, and H. Y. Cha, Phys. Status Solidi B 245, 868 (2008).
- [80]. Wu, J., Journal of Applied Physics. Vol. 106, 011101 (2009).
- [81] Miller, Nathaniel Reed. Electrical and Electrothermal Transport Properties of n- and p-type InN. Thèse d'Université de Berkeley UC (2010).
- [82] K. M. Tracy, W. J. Mecoouch, and R. F. Davis, Journal of Applied Physics. Vol. 94, 3163 (1994).
- [83] W. M. Linhart, Ö. Tuna, T. D. Veal, J. J. Mudd, C. Giesen, M. Heuken, C. F. McConville, Physica Status Solidi C, 9, 662-665 (2011).
- [84] Timothy David Veal, Christopher F. McConville, William J. Schaff, Indium Nitride and Related Alloys. Edition1. CRC Press (2009)
- [85] T. D. Veal, P. D. C. King, and C. F. McConville. Surface electronic properties of InN and related alloys. CRC Press (2010).
- [86] T.B. Fehlberg, G. A. Umana-Membreno B. D. Nener, G. Parish, C.S. Gallinat, G. Koblmuller, S. Rajan, S. Bernardis and J. S. Speck, Japanese Journal of Applied Physics. Vols. 45, Part 2, L1090 (2006).
- [87] Van de Walle, C.G. and Segev, D., Journal of Applied Physics, Vol. 101, 081704 (2007).
- [88] Wu, C.L., et al. Physical Review Letters., Vol. 101, 106803 (2008).
- [89] Boumesjed Aicha, Etude, Simulation et Caractérisation des Schottky SC, IBSC et du SSD à base de GaAsN et de GaN pour le Photovoltaïque et l'Electronique THz, thèse de doctorat d'université de Sidi Bel Abbes (2020).
- [90] Ričardas Norkus, Ramūnas Aleksiejūnas, Arūnas Kadys, Marek Kolenda, Gintautas Tamulaitis and Arūnas Krotkus, Sci Rep 9, 7077 (2019).
- [91] Rai SK, Kao K-W, Gwo S, Agarwal A, Lin WD, Yeh JA. Sensors (2018).
- [92] Kun-Wei Kao, Ming-Che Hsu, Yuh-Hwa Chang, Shangjr Gwo, J Andrew Yeh, Sensors PDPI Switzerland, 12(6), 7157-7168 (2012).

Chapitre II

**Chapitre II : Pré-conditionnement de la surface d'InP pour la synthèse de l'InN:
Nitration & Analyse de surface.**

1. Introduction.....	36
2. Préparation des substrats d'InP pour la nitration.....	37
2.a. Nettoyage des substrats InP(100)	38
2.b. Modèle théorique après bombardement ionique	40
2.c. Evolution des pics d'indium et de phosphore après bombardement ionique	42
3. Nitration des substrats InP(100)	43
3. a. Modèle théorique après nitration	44
3.b Evolution du pic d'indium après nitration	45
3.c Evolution du pic de phosphore après nitration.....	46
3.d Evolution du pic d'azote après nitration.....	47
4. Résultats d'analyses spectroscopiques des structures d'étude	47
4.a. Série A :	47
4.b. Série B :	49
4.c. Discussions et interprétations des résultats.....	49
5. Analyse des substrats InP nitrurés par mesure Raman.....	50
6. Conclusion	52
Bibliographie.....	53

1. Introduction

L'InN présente un potentiel intéressant dans la fabrication des cellules solaires avec un bon rendement [1, 2] et de composants fonctionnant dans les domaines hautes fréquences grâce à ses caractéristiques de transports supérieures à celles du GaN et du GaAs [3]. Les alliages à base d'InN comme l'InAlN et l'InGaN présentent un grand intérêt dans la fabrication de diodes électroluminescentes puisque le gap de tels systèmes peut varier de 0.7 pour l'InN à 6.2 eV pour le cas de l'AlN) [4]. Cependant, la synthèse d'InN de très bonne qualité reste difficile à réaliser. La principale difficulté lors de sa fabrication par épitaxie de jet moléculaire (MBE) réside dans la production d'espèces azotées. En effet, la molécule d'azote est très stable, son énergie de liaison est égale à 9.9 eV [5]. De plus, sa température de dissociation est relativement faible (550°C) [6] interdisant de ce fait la croissance de l'InN à haute température [7], sa pression de dissociation est élevée et l'InN ne se forme pas par réaction directe entre le diazote N_2 et l'indium In. Enfin, il n'existe pas de substrats adéquats pour la croissance d'InN.

Le pré-conditionnement du substrat d'InP, peut constituer une voie pour la synthèse de l'InN. Très peu de travaux sur la croissance et la caractérisation d'InN sur un substrat InP ont été rapportés. Pan et al. ont étudié la nitruration de la surface d'InP(100) moyennant un bombardement par faisceau d'ions N_2^+ [8]. Ils ont confirmé la formation d'InN mince sur la surface d'InP nitruré, tandis que la formation de liaisons P-N n'a pas été observée. Récemment, Bhuiyan et al. ont étudié la croissance épitaxiale d'InN sur un substrat d'InP(111) en utilisant une MOVPE conventionnelle [9].

La formation de couches minces (nanométrique) d'InN par procédé de nitruration des substrats d'InP (100) a fait déjà l'objet de travaux antérieurs réalisés par plusieurs auteurs, on cite M. Petit et al. et A. Talbi et al. [10, 12] etc. Depuis plusieurs années, l'équipe « Surface et Interface » de l'institut PASCAL de l'université Clermont Auvergne de Clermont-Ferrand (France), s'intéresse aux semiconducteurs III-V ainsi qu'à la croissance de nitrures sur ces substrats. Elle a pu, dans un premier temps, mettre en évidence les mécanismes de nitruration de la face (100) du phosphure d'indium. La température optimale a été déterminée par les travaux antérieurs réalisés par Y. Ould-Metidji [12] et le temps d'exposition au flux d'azote ainsi que l'angle d'incidence du flux par rapport à la surface de l'échantillon ont été déterminés par M. Petit [10] et A. Talbi [13]. Ils ont suivi la nitruration dans les conditions optimales de croissance de la couche tampon de type InN sur l'InP (100). La figure II-1 montre une image par microscopie électronique à transmission d'un substrat InP nitruré. Dans ses travaux, S. Ben Khalifa [14] a procédé à un épaissement du film d'InN pour atteindre quatre à six monocouches atomiques de nitrure et ceci en opérant ainsi : effectuer un dépôt d'une couche d'indium métallique sur la surface d'un InP nitruré au moyen d'une cellule d'évaporation d'indium puis continuer le processus de nitruration par évaporation de plasma d'azote.

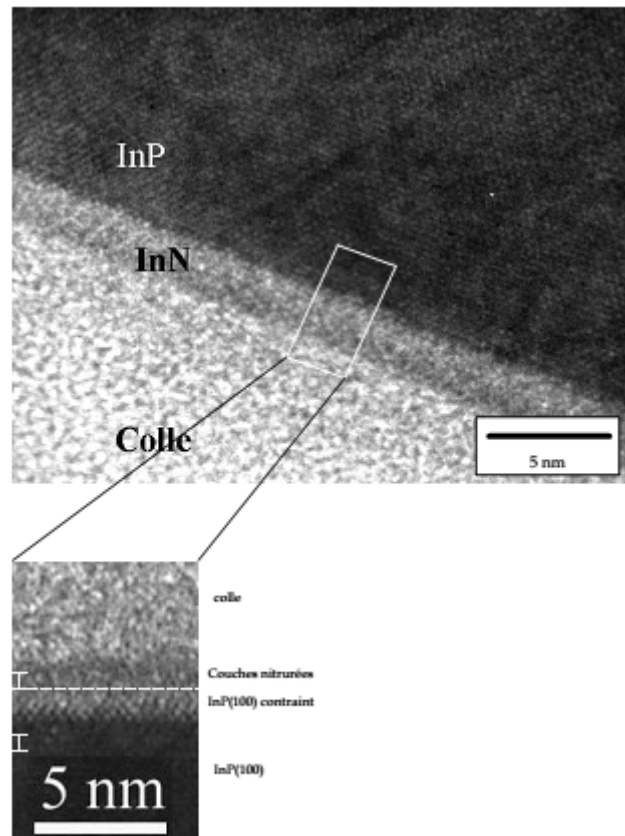


Figure II-1 : Image par microscopie électronique à transmission d'un substrat InP nitruré. [10]

En s'appuyant sur des travaux de collaborations antérieurs entre le Laboratoire de Microélectronique Appliquée (AMEL) de l'université de Sidi Bel Abbes et l'équipe « Surface et Interface » de l'institut PASCAL de l'université Clermont Auvergne de Clermont-Ferrand (France), sur la stabilisation des surfaces d'InP (100) par nitruration, nous avons effectué des études surfaciques et électriques sur deux séries d'échantillons de type InN/InP élaborés sous différentes conditions technologiques. Dans ce chapitre, nous explorons la nitruration des substrats d'InP (100), avec un suivi de la surface au moyen de spectroscopie de photoélectrons X (XPS). Ces analyses de surface permettent de déterminer la composition chimique et l'état de la surface des structures étudiées.

2. Préparation des substrats d'InP pour la nitruration

Le traitement de la surface d'InP (100) par nitruration et l'analyse de surfaces des structures obtenues nécessitent un dispositif expérimental spécifique. Ce dispositif expérimental ainsi que les techniques d'analyses spectroscopiques sont détaillés dans l'annexe B de ce manuscrit. Dans ce qui suit, nous présentons les étapes du procédé de traitement de la surface qui ont servis pour la nitruration des substrats de phosphure d'indium. Les résultats d'analyse par spectroscopie de photoélectrons X (XPS) sont décrits en détail.

2.a. Nettoyage des substrats InP(100)

Les substrats de phosphure d'indium utilisés sont des substrats commerciaux (substrat 2'' du fournisseur Crystal Impact). Ils se présentent sous la forme de plaquettes circulaires, de 50mm de diamètre et d'une épaisseur d'environ de 350 μm , réalisées par tirage de Czochralski, dopées type n avec une concentration N_d égale à 10^{16} cm^{-3} et découpées suivant l'orientation cristallographique (100).

- **Nettoyage chimique :**

Les substrats d'InP utilisés pour réaliser les structures étudiées, sont nettoyés chimiquement, avant de les introduire dans le bâti ultravide, dans le but d'enlever toute trace de contaminations due au séjour prolongé de la surface à l'atmosphère libre. Le processus de nettoyage est composé de bains successifs d'alcool, d'acide sulfurique et de brome [14, 15]. L'acide joue le rôle de solvant et le décapage chimique se fait par le brome et le méthanol. La séquence d'attaque chimique et de rinçage est de telle sorte qu'on évite les mélanges acide-alcool qui favorise la formation de carbone et brome-eau nuisibles à la qualité optique de la surface. Le processus est résumé sur la figure II-2 :

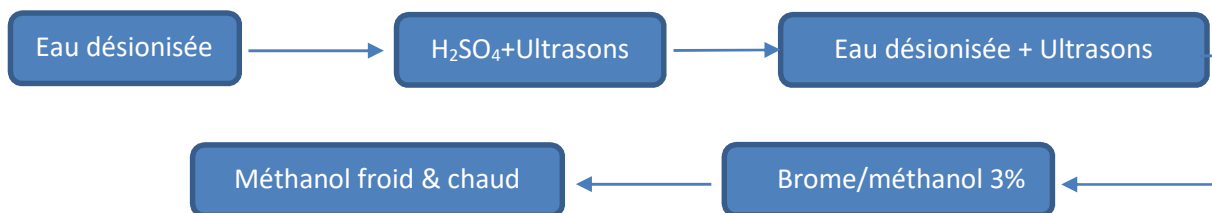


Figure II-2 : Processus de nettoyage chimique des substrats InP (100).

- **Nettoyage ionique :**

Après le nettoyage chimique des substrats d'InP, les échantillons sont introduits dans l'enceinte ultravide pour qu'ils subissent un nettoyage ionique. Le bâti ultravide est doté d'une source de rayons X pour une analyse in-situ de type XPS (X-Ray Photoélectron Spectroscopy). Tous les spectres XPS présentés dans ce qui suit ont été réalisés sous excitation X avec la raie Mg K_α d'énergie $h\nu=1253.6 \text{ eV}$. Le but de cette analyse est de connaître l'état de la surface de départ pour chaque opération de nitruration. Cette analyse a révélé la présence de carbone et d'oxygène sur la surface d'InP (100) (figure II-3). Donc, un nettoyage in situ s'avère indispensable afin d'obtenir une surface exempte de toute contamination. Cette opération se fait grâce à un bombardement de la surface par un faisceau d'ions d'argon produit par un canon à ions. Les conditions de ce nettoyage ont été déterminées lors des travaux précédents réalisés par l'équipe « Surface et Interface » de l'institut PASCAL de l'université Clermont Auvergne de Clermont-Ferrand (France); Les paramètres de nettoyage utilisés sont les suivants [15, 16] :

- Pression d'argon dans la chambre : 4×10^{-3} Pa;
- Energie cinétique des ions d'Argon : 300 eV;
- Densité de courant du faisceau : $2.2 \mu\text{A}/\text{cm}^2$;

Le bombardement ionique dans notre cas est réglé en fonction de l'atténuation du pic d'oxygène. Il est répété plusieurs fois sur des durées courtes de 10 min à 15 min avec un suivi simultané par des analyses XPS de la surface jusqu'à élimination totale de toute trace d'oxygène qui cause un problème lors de nettoyage des surfaces de phosphure d'indium (disparition totale du pic d' O_x).

La figure II-3 montre le spectre général XPS de la surface d'InP(100) après nettoyage chimique ex-situ (courbe rouge) et celui après bombardement ionique in-situ (courbe bleue). On peut conclure que toute trace de contamination (pics d'oxygène O_{1s} et C_{1s}) a disparu après le nettoyage ionique.

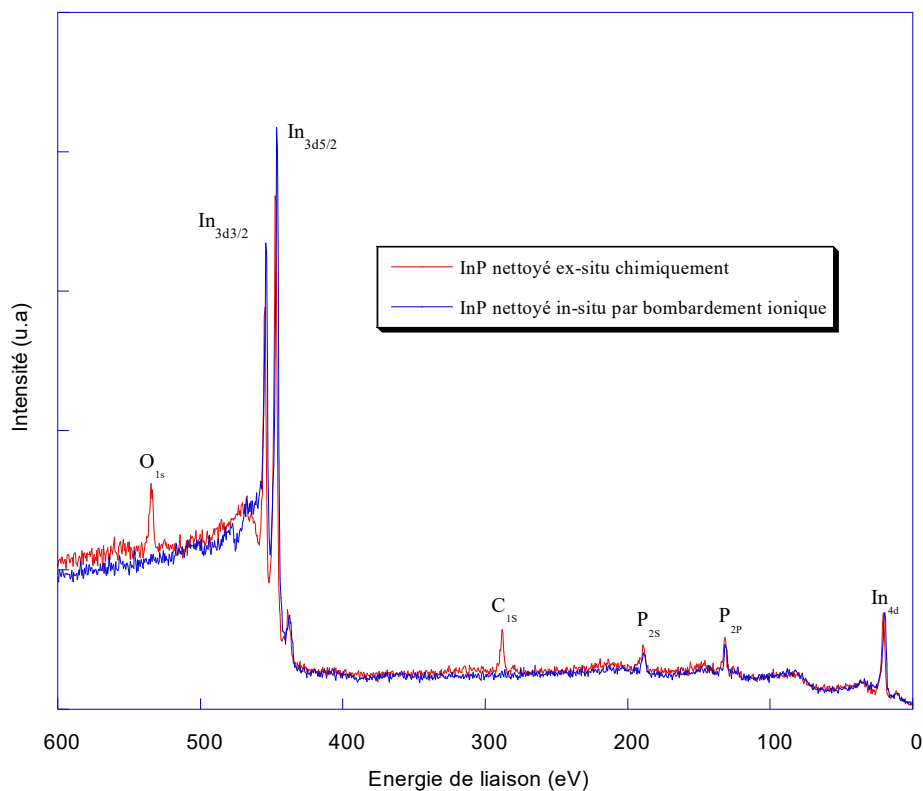


Figure II-3 : Spectre d'un substrat InP(100) après nettoyage chimique et après nettoyage ionique.
[11]

Le prolongement du bombardement entraîne la formation de cristallites d'indium métallique (avec un recouvrement de 25% de la surface et à une hauteur de quatre monocouches) à la surface du substrat par départ préférentiel du phosphore [10, 17]. Ces

crystallites créées en surface du substrat vont servir de précurseur pour former les couches de nitrures lors de la nitruration. Le processus de nettoyage ionique et de création de cristallites est présenté par le schéma de la figure II-4 :

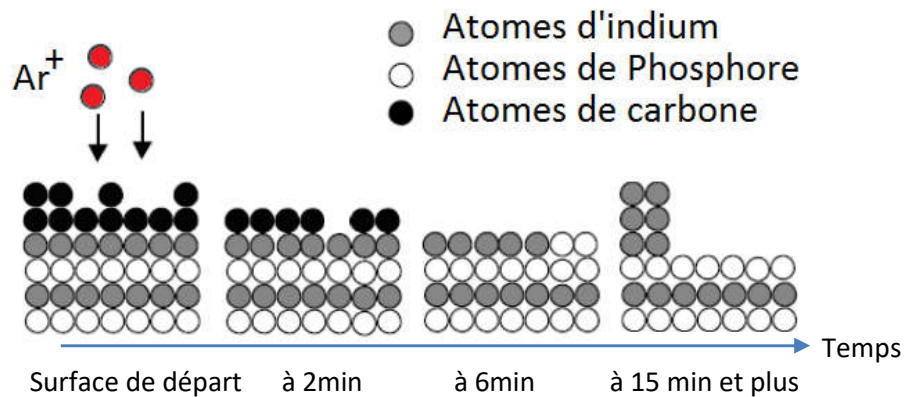


Figure II-4 : Schématisation de la surface du substrat InP (100) le nettoyage ionique.

2.b. Modèle théorique après bombardement ionique

Le modèle théorique adopté est basé sur une représentation couche atomique par couche atomique du matériau utilisé pour calculer théoriquement les intensités des signaux des différents éléments chimiques constituant le substrat.

Après le nettoyage ionique, le substrat est représenté schématiquement par la figure suivante :

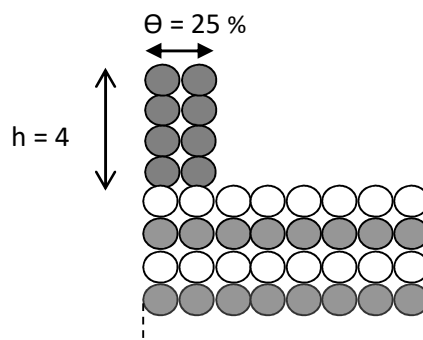


Figure II-5 : Représentation de la surface d'InP(100) après nettoyage ionique. [18]

- **L'intensité du signal de photoélectrons provenant du pic d'indium du substrat nettoyé ioniquement**

Pour calculer le signal d'indium on tient compte de : la contribution surfacique due aux cristallites d'indium métallique formées par départ préférentiel du phosphore lors du

bombardement ionique et qui couvre 25% de la surface ($\Theta=25\%$) sur une hauteur h de 4 monocouches atomiques.

La contribution volumique due à l'indium :

$$I_{\text{indium}} = 0.25 (1 + \alpha_{\text{In}} + \alpha_{\text{In}}^2 + \alpha_{\text{In}}^3) i_{\text{In}} \quad (\text{contribution des cristallites } I_{\text{In-In}})$$

$$+ (0.25 \alpha_{\text{In}}^4 + 0.75) (\alpha_{\text{In}} + \alpha_{\text{In}}^3 + \dots \alpha_{\text{In}}^{2n+3}) i_{\text{In}} \quad (\text{contribution de l'indium du substrat } I_{\text{In-P}})$$

Donc:

$$I_{\text{In-In}} = 0.25 i_{\text{In}} (1 + \alpha_{\text{In}} + \alpha_{\text{In}}^2 + \alpha_{\text{In}}^3)$$

$$I_{\text{In-P}} = (0.25 \alpha_{\text{In}}^4 + 0.75) \frac{\alpha_{\text{In}} \cdot i_{\text{In}}}{1 - \alpha_{\text{In}}^2}$$

L'intensité du pic d'indium :

$$I_{\text{indium}} = 0.25 (1 + \alpha_{\text{In}} + \alpha_{\text{In}}^2 + \alpha_{\text{In}}^3) i_{\text{In}} + (0.75 + 0.25 \alpha_{\text{In}}^4) \frac{\alpha_{\text{In}} \cdot i_{\text{In}}}{1 - \alpha_{\text{In}}^2} \quad (1)$$

avec:

i_{In} : le signal d'une monocouche d'indium.

α_{In} : le coefficient d'atténuation du signal des photoélectrons d'indium à travers une couche d'atomes de phosphore ou d'indium, il est donné par :

$$\alpha_{\text{In}} = \exp\left(-\frac{d}{0.96\lambda_{i_{\text{In}}}}\right) \quad (2)$$

$\lambda_{i_{\text{In}}}$: le libre parcours moyen inélastique des photoélectrons d'indium [18];

0.96 est une constante spécifique de l'analyseur ;

d : épaisseur d'une monocouche traversée par le signal.

- **Rapport théorique des intensités des pics photoélectrons $I_{\text{In-In}}/I_{\text{In-P}}$ après bombardement ionique**

Le rapport des intensités des pics de photoélectrons $R = I_{\text{In-In}} / I_{\text{In-P}}$ après bombardement ionique donne le rapport de la contribution des cristallites d'indium par la contribution de l'indium du substrat, il a pour expression :

$$R = \frac{0.25(1 + \alpha_{\text{In}} + \alpha_{\text{In}}^2 + \alpha_{\text{In}}^3)(1 - \alpha_{\text{In}}^2)}{(0.75 + 0.25\alpha_{\text{In}}^4)\alpha_{\text{In}}} \quad (3)$$

avec : $\alpha_{\text{In}} = 0.8$ Ce rapport est égal à la valeur de 0.39.

2.c. Evolution des pics d'indium et de phosphore après bombardement ionique

Le spectre XPS du niveau de cœur In_{4d} d'un substrat InP(100) après bombardement ionique représenté sur la figure II-6 (a), se situe à environ 20.1 eV, il correspond à celui trouvé dans la littérature [19, 20] avec un léger décalage en position d'énergie de 0.8 eV. Ce pic se décompose en deux séries de doublets ; la première série correspond aux liaisons InP et la seconde est attribuée aux liaisons In-In qui confirment la présence d'indium métallique sur la surface du substrat InP nettoyé. Ce spectre ne comporte pas de contributions liées aux oxydes d'indium situés en général vers les plus hautes énergies à 19.3 eV [19], ce qui signifie que le substrat est propre.

Le spectre XPS de la figure II-6 (b) représente le niveau de cœur P_{2p} d'un substrat InP(100) après bombardement ionique. Le niveau de cœur du phosphore après le nettoyage ionique situé à 131 eV, est légèrement décalé en énergie de liaison par rapport à celui trouvé dans la littérature et qui est de 129 ± 0.2 eV [19, 20]. Il est à remarque que ce pic ne comporte pas de contributions d'oxydes situées en général vers les plus hautes énergies de liaisons (135 eV) annoncées par d'autres auteurs [16, 19]. Ceci confirme que le substrat InP est propre après nettoyage ionique.

Les paramètres de décomposition des pics In_{4d} et P_{2p} [21, 22] ont été ajustés selon le tableau suivant :

Tableau II.1 : Paramètres de décomposition du niveau de cœur In_{4d} et du niveau de cœur P_{2p} .

	In-P (substrat)	Liaison In-In	Liaison P-In
Largeur à mi-hauteur FWHM (eV)	1.4±0.2	1.4±0.2	1.4±0.2
% Lorentzien / Gaussien	50%Lor, 50% Gauss	50%Lor, 50% Gauss	100%Lor, 0% Gauss
Ecart du doublet spin-orbite (eV)	0.9	0.9	1.2
Rapport des surfaces	1.3 -1.4	1.3 -1.4	2.2
Ecart d'énergie /au substrat (eV)	/	- 0.7	/

Pour le niveau de cœur d'indium In_{4d} , le rapport expérimental des pics d'indium métallique et d'InP (In-In/In-P) après nettoyage ionique est égale à 0.320 ce qui coïncide avec le rapport avec le rapport théorique qui est de 0.39 on peut donc conclure que nous avons formé l'équivalent d'une monocouche d'indium métallique en surface.

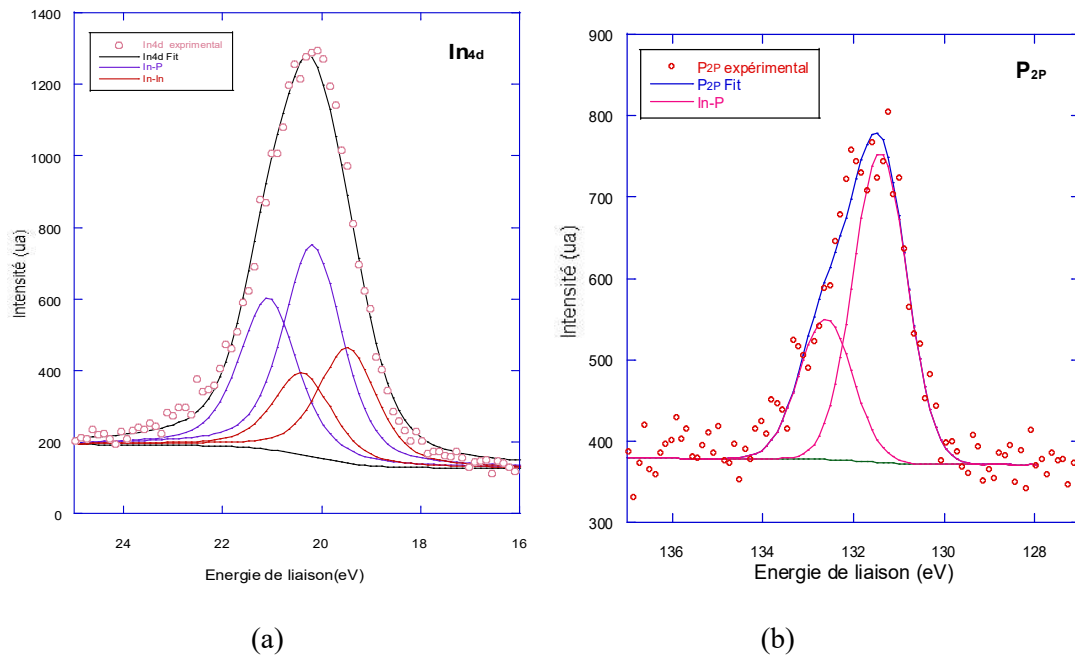


Figure II-6 : Niveaux de cœur In_{4d} et P_{2p} après bombardement ionique.

Après bombardement ionique et après la décomposition avec le logiciel XPS Peak Fit, le spectre d'indium In_{4d} est tracé à l'aide du logiciel Kaleida Graph. Le rapport expérimental des intensités des photoélectrons provenant des pics d'indium métallique et des intensités des photoélectrons des pics InP du substrat (In-In/In-P) a été déterminé et trouvé est égal à 0.4. On remarque bien que cette valeur coïncide avec la valeur de 0.39 calculée théoriquement avec le modèle couche atomiques par couche atomique adopté dans notre étude. Donc ceci confirme la création d'une quantité d'ilots d'indium équivalente à une monocouche atomique.

3. Nitruration des substrats InP(100)

La première étape de la nitruration consiste en la création d'indium métallique à la surface de l'InP par l'effet du bombardement ionique. La seconde étape dans le processus de nitruration consiste à exposer la surface du substrat InP à un flux d'azote actif (N , N^+ et N_2^+) produit par une source de type plasma à décharge (Glow Discharge Source, GDS). Ce qui permet ainsi d'obtenir de fines couches d'InN par consommation d'indium métallique présents en surface.

Les conditions de nitruration sont tels que la puissance de la source GDS est de 3W, la pression d'azote dans la chambre de dépôt est de 10^{-1} Pa, l'angle d'incidence du flux de plasma d'azote sur le substrat est de 45° . Dans ce type de source, le plasma continu est produit par application d'une grande différence de potentiel (de l'ordre de 2 kV) entre l'anode et la cathode.

Pendant l'exposition au flux d'azote, le substrat d'InP (100) est maintenu à une température de 250°C à l'aide d'un thermocouple. Cette température optimale est choisie en fonction des travaux antérieurs [10, 12, 23, 24] qui ont étudié l'influence de la température sur la nitruration des substrats d'InP (100). Le maximum de liaisons InN formées lors de la nitruration des substrats d'InP (100) avait été observé dans une plage de températures comprises entre 200 et 270°C. Le chauffage du substrat pendant le processus de nitruration entraîne une transformation latérale et un étalement des îlots d'indium métallique sur la surface des substrats d'InP (100). Cette transformation permet d'avoir de l'indium dans un état quasi liquide à la surface, ce qui favorise l'incorporation de l'azote et permet la formation des films de nitrure d'indium.

3. a. Modèle théorique après nitruration

Le modèle théorique dans ce cas est basé aussi sur une représentation couche atomique par couche atomique du matériau utilisé avec la présence des deux monocouches de nitrure d'indium réalisées en surface. Nous allons ainsi calculer théoriquement les différents rapports des intensités des pics de photoélectrons provenant de l'échantillon. La figure II-7 représente le substrat InP (100) nitruré.

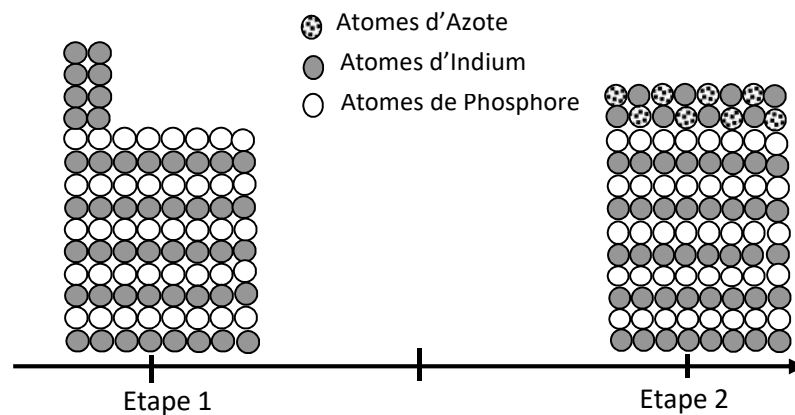


Figure II-7 : Représentation de la surface d'InP(100) après nitruration. [18]

- **Intensité du signal de photoélectrons provenant de l'indium du substrat**

$$I_{In-P} = \alpha_{In}^h (\alpha_{In} + \alpha_{In}^3 + \dots + \alpha_{In}^{2n+1}) i_{In} \quad (4)$$

$$\alpha_{In}^2 \cdot I_{In-P} = \alpha_{In}^h (\alpha_{In}^3 + \dots + \alpha_{In}^{2n+3}) i_{In}$$

$$I_{In-P} (1 - \alpha_{In}^2) = \alpha_{In}^h (\alpha_{In} - \alpha_{In}^{2n+3}) i_{In}$$

Avec h: le nombre de monocouches de nitrure formées

Pour un nombre infini de monocouches : $n \rightarrow \infty$. $\alpha_{In}^{2n+3} \rightarrow 0$ on trouve :

$$I_{In-P} = \alpha_{In}^h \cdot \frac{\alpha_{In}}{1 - \alpha_{In}^2} i_{In} \quad \text{donc} \quad I_{In-P} = \frac{\alpha_{In}^{h+1}}{1 - \alpha_{In}^2} i_{In}$$

- **Intensité du signal de photoélectrons provenant de l'indium des couches de nitrure**

$$I_{In-N} = 0.5(1 + \alpha_{In} + \alpha_{In}^2 + \alpha_{In}^3 + \dots + \alpha_{In}^{h-1})i_{In}$$

- **Rapport théorique des intensités de photoélectrons I_{In-N}/I_{In-P} après nitruration**

$R=I_{In-N}/ I_{In-P}$ représente le rapport théorique de l'intensité du signal de photoélectrons provenant de l'indium des couches nitrurées par l'intensité du signal provenant de l'indium du substrat. Ce rapport indique la proportion de liaisons In-N formées. Il a pour expression :

$$R = \frac{0.5(1 + \alpha_{In} + \alpha_{In}^2 + \alpha_{In}^3 + \dots + \alpha_{In}^{h-1})(1 - \alpha_{In}^2)}{\alpha_{In}^{h+1}} \quad (5)$$

Or le nombre de monocouches d'InN formées après nitruration par consommation de cristallites d'indium présentes en surface après nettoyage ionique ne peut dépasser un maximum à deux monocouches.

- Pour une monocouche d'InN : ($h = 1$), le rapport théorique est **$R_{th} = 0.28$** ;
- Pour deux monocouche d'InN : ($h = 2$), le rapport théorique est **$R_{th} = 0.63$** .

3.b Evolution du pic d'indium après nitruration

L'évolution des éléments de la surface d'InP(100) pendant la nitruration a été suivie par la spectroscopie de photoélectrons X.

Le graphe de la figure II-8 présente la décomposition du niveau de cœur In_{4d} après nitruration. On remarque l'apparition de la contribution liée aux liaisons In-N située à 1 eV vers les plus hautes énergies par rapport à l'InP accompagnée d'une diminution de cristallites d'indium métallique qui est presque totalement consommée pour former des couches de nitrures.

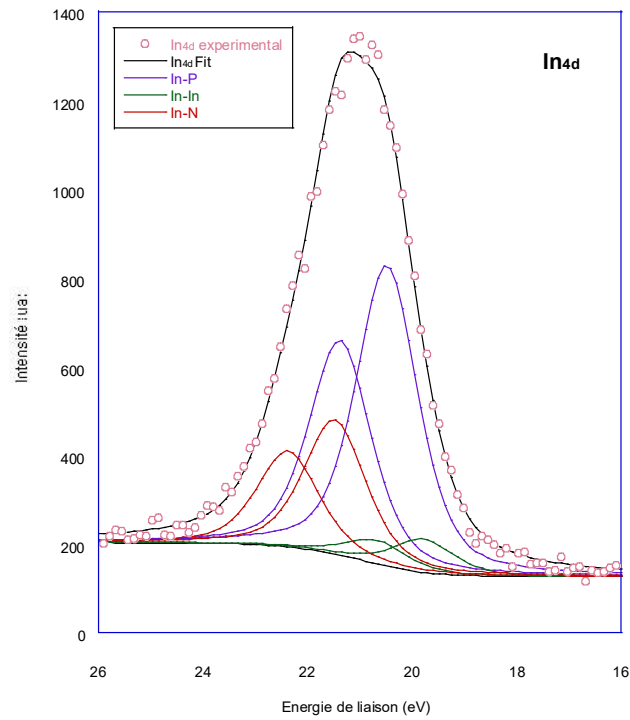


Figure II-8 : Niveau de cœur In_{4d} d'un substrat InP(100) après nitruration.

3.c Evolution du pic de phosphore après nitruration

D'autre part, le niveau de cœur P_{2p} après nitruration présente une nouvelle contribution. Elle est située à environ 4 eV vers les plus hautes énergies de liaisons par rapport aux liaisons P-In (Voir la figure II-9). Selon Losurdo et al. [21] et Suzuki et al. [22], cette nouvelle contribution est attribuée aux liaisons P-N.

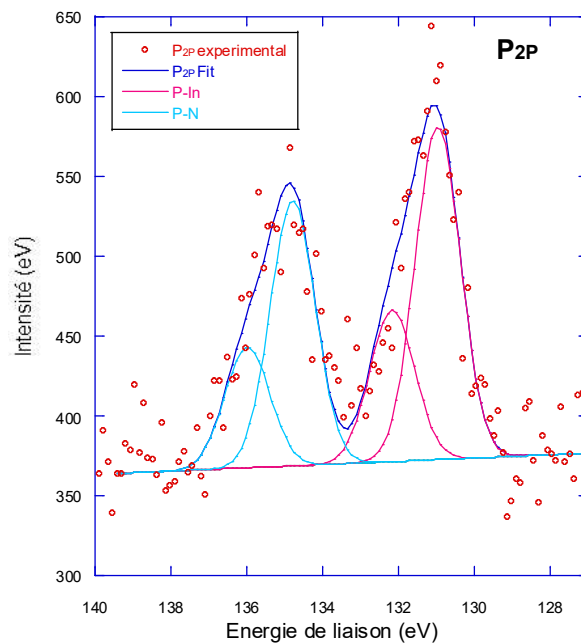


Figure II-9 : Niveau de cœur P_{2p} d'un substrat InP(100) après nitruration.

3.d Evolution du pic d'azote après nitruration

La figure II-10 représente le niveau de cœur N_{1s} . Il comporte une contribution liée aux liaisons N-In remarquée auparavant dans le pic In_{4d} sous forme de liaison In-N [21, 22]. Ce spectre comporte en plus deux pics attribués à des liaisons P-N observées aussi par Losurdo et al. [21].

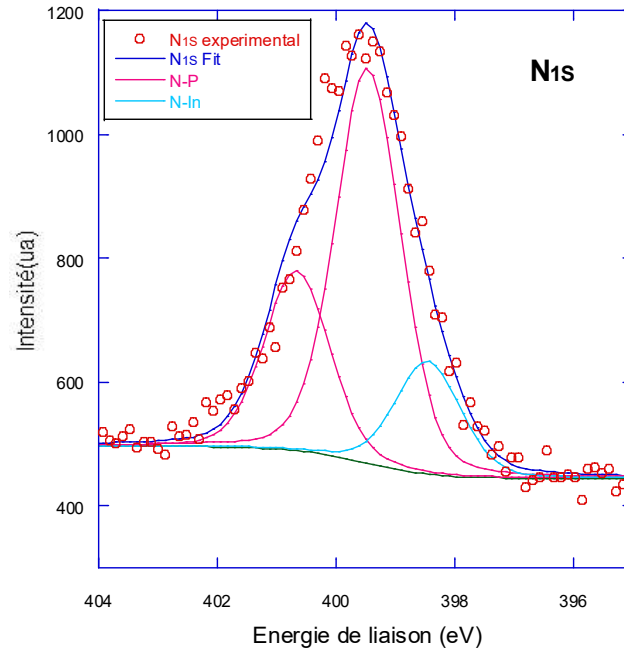


Figure II-10 : Niveau de cœur N_{1s} d'un substrat InP(100) après nitruration.

4. Résultats d'analyses spectroscopiques des structures d'étude

Les substrats utilisées pour la nitruration sont des substrats d'InP(100) de type n dopés avec une concentration N_d égale à 10^{16} cm^{-3} . L'angle d'exposition du flux d'azote par rapport à la surface d'échantillons est de 45° . Deux variantes de procédé ont été exécutées. Le tableau suivant résume les conditions technologiques de préparation des structures d'étude :

Tableau II.2: Paramètres technologiques utilisés pour la réalisation des échantillons InN/InP(100).

Série	A	B
Temps de nettoyage ionique (min)	50	40
Temps de nitruration (min)	40	50
Angle d'incidence (degré)	45	45
Recuit après nitruration	T=400°C & t=25min	//

4.a. Série A :

Les figures II-11 et II-12 présentent, respectivement, la décomposition du niveau de cœur In_{4d} après nitruration et après recuit :

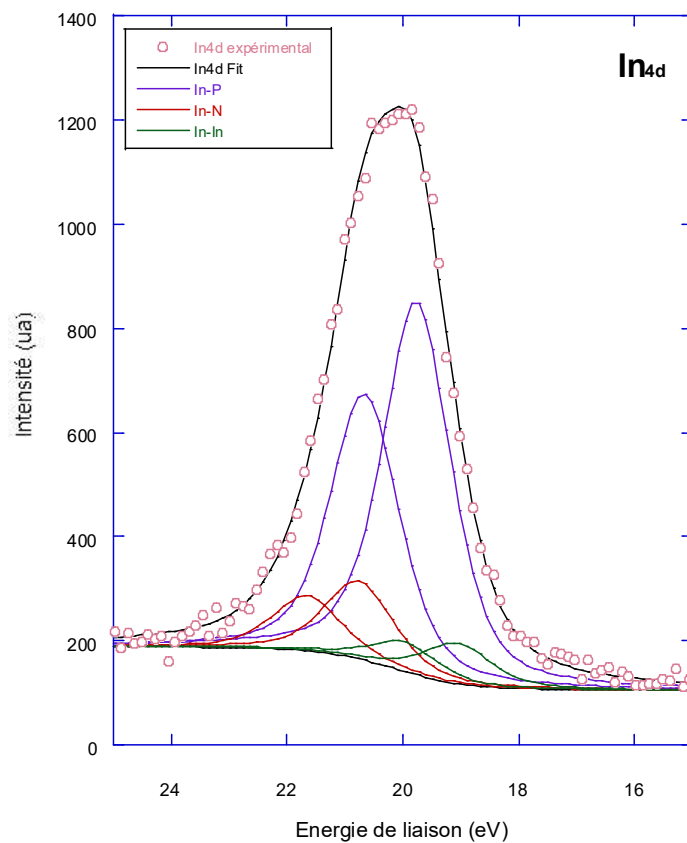


Figure II-11 : Niveau de cœur In_{4d} après nitruration de la série A.

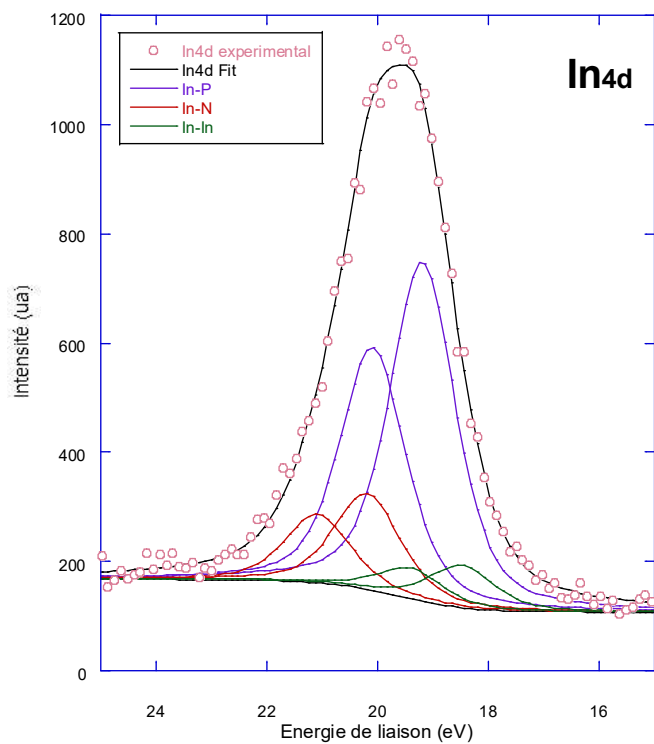


Figure II-12 : Niveau de cœur In_{4d} après recuit de la série A.

4.b. Série B :

La figure II-13 présente la décomposition du niveau de cœur In_{4d} après nitruration de la série B.

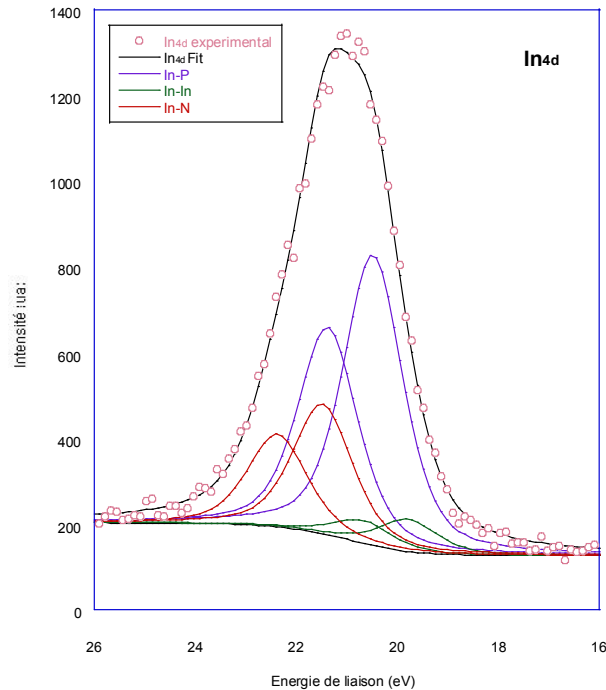


Figure II-13 : Spectre du niveau de cœur In_{4d} après nitruration de la série B.

4.c. Discussions et interprétations des résultats

D'après les figures des spectres XPS obtenus pour les substrats InP nitrurés, on remarque pour les deux séries, une diminution de la quantité d'indium métallique comparée à celle des substrats nettoyés par bombardement ionique accompagnée d'une apparition simultanée, d'une nouvelle contribution liée aux liaisons In-N. Ceci confirme la formation de couches de nitrures par la consommation des cristallites d'indium présentes en surface des substrats. Le tableau suivant résume les différents rapports extraits des spectres XPS :

Tableau II.3 : Rapports des pics expérimentaux extraits de la décomposition du niveau de cœur In_{4d}.

Etape		Après nitruration		Après recuit	
		In-N/InP	In-In/InP	In-N/InP	In-In/InP
Echantillons	Série A	0,207	0,109	0,28	0,12
	Série B	0,446	0,11	//	//

Le suivi par spectroscopie XPS des surfaces des substrats InP après nitruration, montre un rapport InN/InP plus important de deux ordres de grandeurs pour l'échantillon B (en le comparant avec l'échantillon A) ce qui signifie que la couche de nitrure InN créée sur l'échantillon B est plus épaisse. Une comparaison des rapports des pics expérimentaux et théoriques nous a permis de déterminer les épaisseurs des couches de nitrure pour les deux séries d'échantillons. D'après les valeurs des rapports expérimentaux du tableau II.3, on

remarque qu'on est arrivé à former entre une monocouche pour la série A nitrurée à 40 min et presque deux monocouches pour la série B nitrurée à 50 min. Un rapport In-In/In-P très faible de l'ordre 0.1, enregistré pour les deux séries, (très faible contributions relatives à l'indium métallique) confirme ainsi la formation des couches nitrurées par consommation des cristallites d'indium au niveau de la surface des substrats. La même conclusion a été rapportée par A. Talbi [11] dans les mêmes conditions (de temps de nitruration et d'angle d'exposition au flux d'azote). Donc ce résultat nous permet de conclure qu'on peut obtenir un substrat bien nitruré avec une couche plus épaisse dans les conditions de 50 min de nitruration et un angle de flux d'azote de 45°.

D'après le spectre XPS du niveau de cœur In_{4d} de la série A après recuit, on ne remarque pas une grande évolution dans les rapports des intensités des pics d'indium par rapport au spectre après nitruration. Ceci laisse supposé que le recuit n'influence pas vraiment sur la nature des liaisons présentes en surface.

5. Analyse des substrats InP nitrurés par mesure Raman

Les couches minces d'InN de haute qualité auraient une bande interdite de 0.7-0.9 eV. Il est très intéressant de comparer les réponses Raman dans l'InN avec des bandes interdites très différentes. Tous les modes Raman d'InN en bande interdite étroite (haute qualité) peuvent être observés dans les couches minces d'InN à grande bande interdite. La figure II-14 résume les fréquences rapportées des modes E2 (haut) et A1 (LO) en fonction de la bande interdite dans l'InN développé par différentes méthodes. Il est clair que les modes sont aussi à peu près aux mêmes fréquences de 491 et 589 cm^{-1} , respectivement. Cependant, des différences de fréquence assez nettes ont été observées dans un large intervalle de largeur de bande d'InN principalement en raison de la diversité matérielle et de l'activation du désordre, du stress et effets de la température, etc. Les différences de fréquences dans l'InN à bande interdite étroite sont très petites et les modes Raman ont des largeurs de raie étroites. Celles-ci révèlent l'uniformité et la qualité des couches minces d'InN produites.

Afin d'examiner les effets d'interface InN/GaAs, Chen et al [25] ont également effectué des mesures Raman avec différentes longueurs d'onde laser. Lorsqu'ils sont excités par un laser à 1064 nm, les signaux de diffusion proviennent principalement du substrat GaAs, La raison en est que l'énergie des photons à 1 064 nm (1.17 eV) est inférieure à la bande interdite de ce film mince InN (~ 1.9 eV), de sorte que le laser peut pénétrer toute la couche de film mince (~2 μm) et les diffusions dans le substrat apporte une contribution dominante au spectre. En revanche, le laser à 514.5 nm (2.41 eV) a une très faible profondeur de pénétration car l'énergie des photons est supérieure à la bande interdite et le coefficient d'absorption est très élevé.

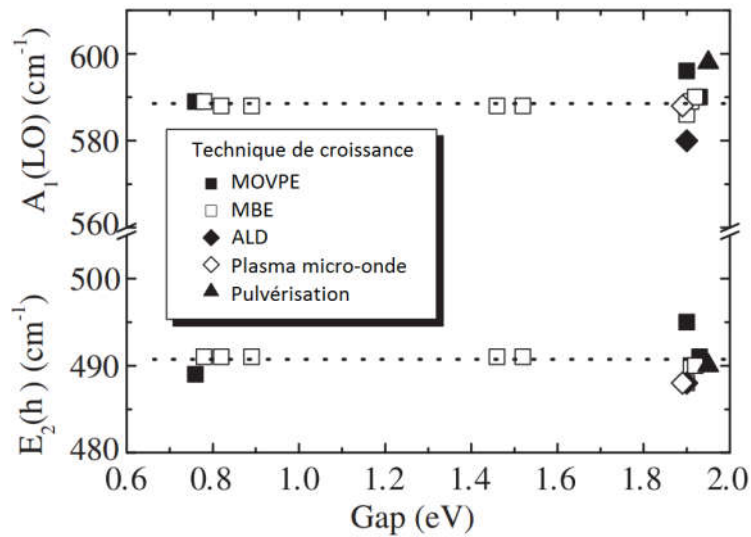


Figure II-14 : Positions des modes Raman E2 et A1(LO) en fonction du Gap d'InN rapportés avec différentes méthodes de croissance. [25, 30]

Mamutin et al. [31] ont utilisé la même technique de diffusion Raman dépendant de la longueur d'onde pour révéler les densités de défauts de différentes profondeurs dans des échantillons d'InN. Néanmoins, l'effet dépendant de la longueur d'onde le plus important est la diffusion Raman résonante (RRS), c'est-à-dire que lorsque l'énergie du photon incident s'approche de l'énergie de transition électronique réelle (telle que la bande interdite des semi-conducteurs), l'efficacité de la diffusion Raman est considérablement améliorée. Malheureusement, il n'y a pas assez d'étude de RRS pour l'InN à ce jour, bien qu'elle est utilisée dans l'étude des structures de super-réseau, de puits quantiques et de points quantiques de faibles dimensions.

Nous avons caractérisé la couche d'InN avec un laser visible de longueur d'onde de 633 nm. La figure II-15 représente la réponse spectrale Raman des échantillons étudiés. Il est difficile de distinguer les modes A1 et E2 aux fréquences de 491 et 589 cm⁻¹ pour les échantillons de la série A. De même pour les échantillons de la série B, on ne peut pas confirmer avec certitude que les deux bosses -très larges- qui apparaissent très décalées appartiennent aux modes A₁ et E₂ de l'InN. La couche InN étant de l'ordre de quelques dizaines d'Angstrom le substrat InP apporte une contribution dominante au spectre.

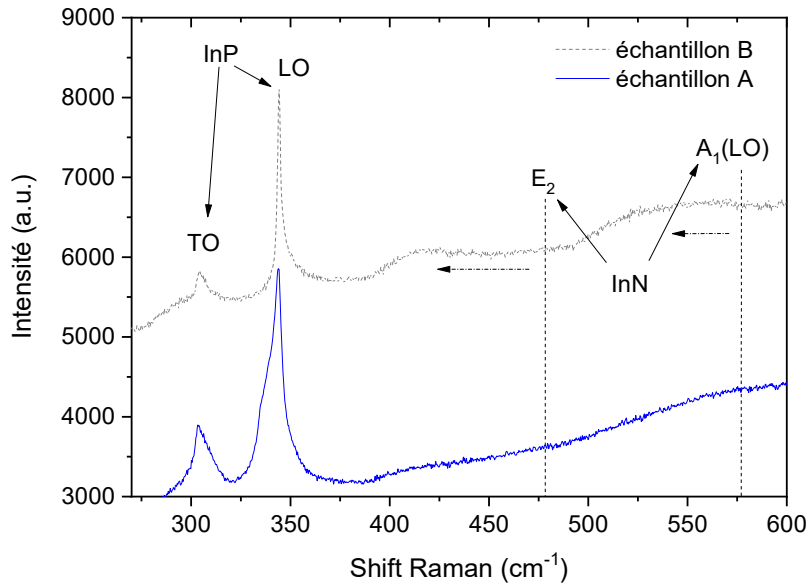


Figure II-15 : Réponse spectrale Raman des échantillons A et B (réponse au laser visible 633nm).

6. Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons étudié les différentes étapes de formation des couches de nitrure d'indium sur les substrats d'InP(100).

Des analyses de surface couplées avec des modèles de calculs de la composition de surface, nous ont permis d'avoir une quantité d'indium métallique de hauteur de 4 monocouches et recouvre 25% de la surface pour un échantillon nettoyé par bombardement ionique.

Des analyses spectroscopiques XPS nous ont permis de contrôler l'évolution de la composition de la surface d'InP et de la couche nitrurée.

Les modèles théoriques présentés comparés aux résultats spectroscopiques permettent de remonter au nombre de monocouches d'InN formées. Les meilleurs résultats de couches plus épaisses sont obtenus dans le cas de l'échantillon B nitruré pendant 50 min avec un angle de flux d'azote de 45°.

Le recuit après nitruration n'apporte pas une nette amélioration de la composition de surface et donc des rapports des intensités des pics d'indium par rapport à celui après nitruration. Ceci laisse supposer que les échantillons de la série B présentent de meilleures interfaces et qualités électroniques donc il est nécessaire de faire davantage de caractérisations électriques pour confirmer cette conclusion, ce qui fera l'objet du troisième chapitre.

Bibliographie

- [1] Qixin Guo, H. Ogawa, H. Yamano, A. Toshida, Appl. Phys. Lett. 66 (6), 715-717 (1995).
- [2] V. Yu. Malakhov, Solar Energy Materials and Solar Cells, vol. 76, issue 4, 637-646 (2003).
- [3] Qixin Guo, M. Nishio, H. Ogawa, A. Yoshida Jpn. J. Appl. Phys. Vol.38 L490-L491, (1999).
- [4] A Yamamoto, M. Adachi, T. Arita, T. Siugira, A. Hashimoto Phys. Stat. Sol. (a) 176, 595 595-598 (1999).
- [5] W. C. Hughes, W. H. Rowland, Jr., M. A. L. Johnson, Shizuo Fujita, J. W. Cook, Jr., J. F. Schetzina, J. Ren, J. A. Edmond J. Vac. Sci. Technol. B, 13(4), 1571 (1995).
- [6] J. Aderhold, V.Yu. Davydov, F. Fedler, H. Klausning, D.Mistele, T. Rotter, O.Semchinova, J. Graul Journal of Crystal Growth, 222, 701-705 (2001).
- [7] A.P. Lima, A. Tabata, J.R. Leite, S. Kaiser, D. Schikora, B. Schöttker, T. Frey, D.J. As, K. Lischka. Journal of Crystal Growth, 201/202, 396-398, (1999).
- [8] J. S. Pan, A. T. S. Wee, C. H. A. Huan, H. S. Tan, and K. L. Tan, J. Phys. D 29, 2997 (1996).
- [9] A. G. Bhuiyan, A. Yamamoto, A. Hashimoto, and R. Ishigami, Proceedings of the International Workshop on Nitride Semiconductors (IWNS' 2000), Nagoya, Japan, September 24–27, IPAP conference series 1, 343 (2000).
- [10] M. Petit. Etude par spectroscopies électroniques de la nitruration du phosphore d'indium. These d'Université Blaise Pascal, Clermont-Ferrand II (2004).
- [11] A. Talbi, Etude de la nitruration des substrats InP(100) –Analyses spectroscopique et caractérisations électriques associés. Thèse de l'université de Sidi Bel Abbas (2007).
- [12] Y. Ould-Metidji, These de docteur de l'Université Blaise Pascal, Clermont-Fd II (2002).
- [13] A. Talbi, Z. Benamara, B. Akkal, B. Gruzza, L. Bideux, C. Robert, C. Varenne, N. Chami, Materials Science and Engineering A, 437, 254–258 (2006).
- [14] S. Benkhalifa. Élaboration d'hétérostructures d'InN/InP et de semi-conducteurs III-V poreux: Caractérisations physico-chimique, optique et électrique. Thèse de doctorat, Université Blaise Pascal, Clermont-Ferrand II (2008).
- [15] G. beuchet, M. Bonet, P. Thebault, J. P. Duchemin. Journal Cristal Growth. 57, 379 (1982).
- [16] B. Gruzza, B. Achard, C. Pariset, Surf. Sci. 162, 202 (1985).
- [17] L. Bideux. Thèse de Docteur de l'Université Blaise Pascal, Clermont-Ferrand II, n° d'ordre:609 (1994).

- [18] Benamara, Mekki Abdelkader Elaboration, caractérisation et étude des propriétés physiques dans les matériaux III-V nitrurés (GaAs et InP nitrurés) thèse de docteur en physique de l'université de Sidi Bel Abbès (2014).
- [19] J. F. Moulder, W. F. Stickle, P. E. Sobol, K. D. Bomben. Hand book of X-Ray photoelectron spectroscopy. Edité par J. Chastain chez Perkin-Elmer Corporation (1992).
- [20] Hand Book of X-ray Photoelectron Spectroscopy. Edition JEOL (1991).
- [21] M. Losurdo, P. Capezzuto, G. Bruno, G. Leo, E. A. Arene, J. Vac. Sci. Technol. A, vol 17, N°4 (1999).
- [22] Y. Suzuki, H. Kumano, W. Tomota, N. Sanada, Y. Fukuda Applied Surface Science, 162-163, 172-177 (2000).
- [23] L. Bideux, Y. Ould-Metidji, B. Gruzza, V. Matolin Surf. Interface Anal. 34, 712-715 (2002).
- [24] M. Petit, Ch. Robert-Goumet, L. Bideux, B. Gruzza, Z. Benamara, N. Bachir Bouiadjra, V. Matolin, Appl. Surf. Sci. 234, 451–456 (2004).
- [25] Chen J, Shen W Z, Wang J B, Ogawa H and Guo Q X. J. Cryst. Growth, 262, 435 (2004).
- [26] Inushima T, Mamutin V V, Vekshin V A, Ivanov S V, Sakon T, Motokawa M and Ohoya, S J. Cryst. Growth, 227/228, 481 (2001).
- [27] Davydov V Yu, Klochikhin A A, Seisyan R P, Emtsev V V, Ivanov S V, Bechstedt F, Furthmuller J, Harima H, Mudryi A V, Aderhold J, Semchinova O and Graul J Phys. Status Solidi b, 229, R1(2002).
- [28] Saito Y, Harima H, Kurimoto E, Yamaguchi T, Teraguchi N, Suzuki A, Araki T and Nanishi Y, Phys. Status Solidi b, 234 796, (2002).
- [29] Matsuoka T, Okamoto H, Nakao M, Harima H and Kurimoto E, Appl. Phys. Lett. 81, 1246 (2002).
- [30] Matsuoka T, Nakao M, Okamoto H, Harima H and Kurimoto E, Japan. J. Appl. Phys. 42, 2288 (2003).
- [31] V Mamutin, A Vekshin, Davydov Yu, V Ratnikov, T Shubina, S Ivanov, P S Kopev, M Karlsteen, U Soderwall and Willander M Phys. Status Solidi a, 176, 247 (1999).

Chapitre III

Chapitre III : Pré-conditionnement de la surface d'InP(100) pour la synthèse de l'InN: caractérisations électriques.

1. Introduction.....	57
2. Caractérisations électriques des structures Au/InN/InP(100).....	57
2.1. Caractéristiques Courant-Tension	57
2.2. Caractéristiques Capacité-Tension C-V.....	58
3. Extraction des paramètres électriques.....	59
3.1. Extraction des paramètres à partir de la caractéristique I(V)	59
3.1.a. Détermination du courant de saturation et du facteur d'idéalité	60
3.1.b. Détermination de la résistance série	61
3.2. Evaluation de la distribution de la densité d'états d'interface dans la bande interdite à partir des caractéristiques I-V et C-V en haute fréquence	62
3.3. Extraction des paramètres à partir de la caractéristique C-V	63
3.3.a. Détermination de la concentration en dopants et du potentiel de diffusion.....	64
3.3.b. Détermination de la hauteur de barrière de potentiel	64
3.4. Extraction des paramètres à partir de la caractéristique C-V en prenant en compte l'effet de la densité d'états d'interface	65
4. Caractérisations électriques des structures Au/InN/InP(100) en fonction de la fréquence	67
4.1. Caractéristiques Capacité-Tension et conductance-Tension C-V-f et G-V-f.....	67
4.2. Détermination de la résistance série à partir des courbes C-V-f et G-V-f	68
4.3. Détermination de la densité d'états d'interface par la méthode haute-basse fréquence	70
4.3.a. Méthode 1	70
4.3.b. Méthode 2.....	71
5. Interprétations des résultats	73
6. Conclusion	74
Bibliographie.....	76

1. Introduction

Pour étudier la qualité électronique des structures nitrurées InN/InP(100) et compléter l'étude surfacique (Cf chapitre II) par une étude électrique, un contact métallique permanent a été réalisé par évaporation d'or sous vide à travers des masques en molybdène permettant d'obtenir des contacts circulaires d'Au avec différents diamètres. Pour les caractérisations électriques des structures Au/InN/InP(100), des mesures de type courant-tension, de capacité-tension et de la capacité et conductance en fonction de la fréquence ont été effectuées.

Le but de notre travail étant d'étudier la qualité de l'interface obtenue entre la couche d'InN et le substrat InP(100), à travers la détermination des différents paramètres électriques caractérisant les structures d'étude et déduire la qualité de la couche de nitrure réalisée. Pour remonter à ces informations, différentes méthodes et modèles de calculs ont été utilisés. Ils sont détaillés dans ce chapitre.

2. Caractérisations électriques des structures Au/InN/InP(100)

Pour les mesures électriques, les bancs de tests I-V et C-V décrits en annexe B (Dispositifs expérimentaux et techniques d'analyses) ont été utilisés.

Les paramètres technologiques des deux séries de structures étudiées sont regroupés dans le tableau III.1.

Tableau III.1: Paramètres technologiques des structures Au/InN/InP(100).

Série	A	B
Durée de nettoyage ionique (min)	50	40
Temps de nitruration (min)	40	50
Angle d'incidence (degré)	45	45
Recuit après nitruration	T=400°C & t=25min	//
Surface du contact métallique (cm ²)	3.14×10 ⁻²	7.07×10 ⁻²

2.1. Caractéristiques Courant-Tension

Les caractéristiques électriques de la densité de courant en fonction de la tension de polarisation J(V) obtenues sur les structures Au/InN/InP(100) sont représentées sur la figure III-1.

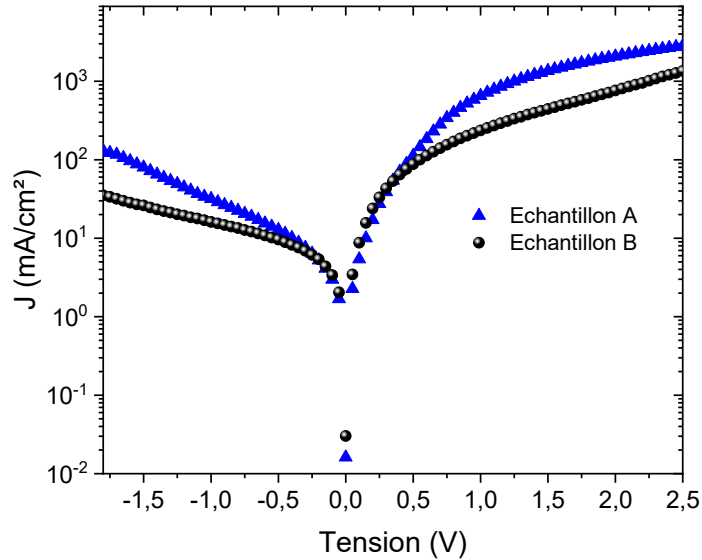


Figure III-1 : Courbes de la densité de courant en fonction de la tension de polarisation des séries A et B en échelle semi-logarithmique.

Ces figures montrent bien l'allure exponentielle des caractéristiques considérées pour les tensions de polarisation positive. En polarisation inverse, on remarque la présence d'une densité de courant de fuite plus importante dans le cas des échantillons de la série A par rapport à la série B. Cette non idéalité de la courbe peut être causée par la présence des états pièges créés à l'interface est en surface de la couche.

2.2. Caractéristiques Capacité-Tension C-V

Les caractéristiques de la capacité par unité de surface en fonction de la tension de polarisation $C(V)$ obtenues pour les structures Au/InN/InP(100), pour un signal d'excitation haute fréquence de 1MHz, sont représentées sur la figure III-2. On note que cette fréquence est la limite maximale de l'appareil de mesure.

Les mesures C-V effectuées sur les échantillons des deux séries montrent que les courbes obtenues présentent de faibles valeurs en polarisations négatives et elles commencent à croître avec la tension de polarisation pour atteindre des valeurs maximales à la valeur de zéro volt. La courbe de la capacité se stabilise pour des tensions positives avoisinant le zéro volt. Cette croissance est plus remarquable dans le cas de la série B qui montre l'allure de la capacité d'une diode Schottky proche de celle d'une structure MIS dans la région d'accumulation. Ce phénomène de stabilisation de la capacité en région d'accumulation pour les tensions positives pour les deux structures, vient de la présence de la couche tampon d'InN qui est une couche semi-intrinsèque, non dopée à l'origine. La présence de cette couche tampon d'InN à l'interface entre le métal et le semiconducteur donne naissance à une capacité en série avec la capacité du substrat InP. Ceci induit, l'augmentation de la valeur de la capacité totale de la structure. Cette valeur de la capacité est d'autant plus élevée que la

couche d'InN est plus épaisse c'est ce qui est observé dans les deux courbes de deux structures et est confirmé par les résultats spectroscopiques qui nous renseignent sur les épaisseurs des films de nitrure déposés. Donc d'après ce qui précède, on peut conclure que la capacité de la couche nitrurée intervient dans la valeur de la capacité totale des échantillons étudiés, ce qui met en évidence la présence de la couche tampon de nitrure d'indium ayant un caractère semi-isolant.

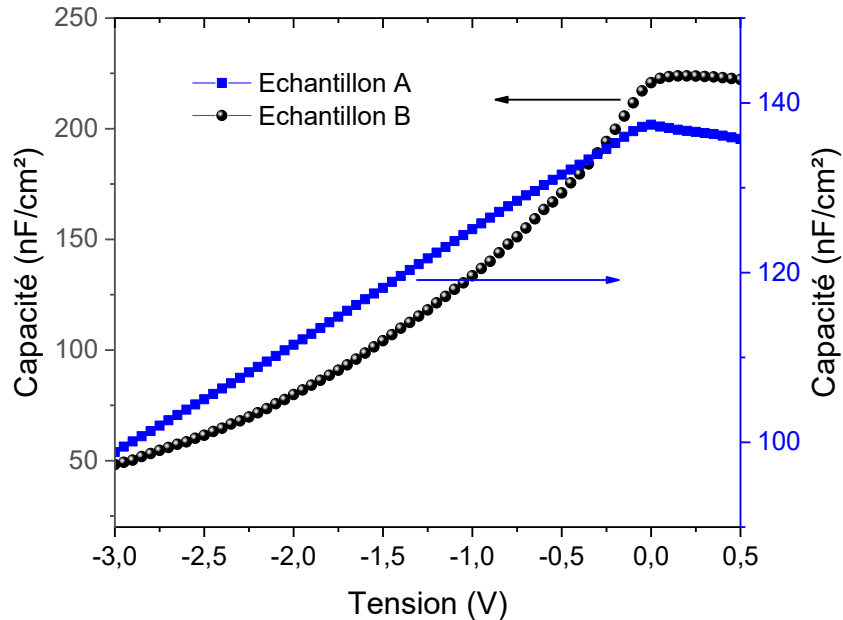


Figure III-2 : Caractéristiques capacité-tension expérimentales des séries A et B.

3. Extraction des paramètres électriques

3.1. Extraction des paramètres à partir de la caractéristique I(V)

Plusieurs paramètres électriques tel que le courant de saturation I_s , le facteur d'idéalité n , la hauteur de la barrière de potentiel Φ_{bn} et la résistance série R_s peuvent être extraits à partir de la caractéristique courant-tension d'une diode Schottky. Différentes méthodes analytiques permettent de déduire leurs valeurs.

Par une représentation semi-logarithmique, la partie linéaire de la courbe $\ln(I)$ -V pour les faibles tensions peut être extrapolée pour déterminer l'ordonnée à l'origine qui représente I_s , et la pente, qui est inversement proportionnelle au facteur d'idéalité, n .

3.1.a. Détermination du courant de saturation et du facteur d'idéalité

L'expression générale du courant thermoïonique traversant une diode est donnée par [1, 2]:

$$I = I_s \left(\exp \left(\frac{q(V - IR_s)}{nkT} \right) - 1 \right) \quad (1)$$

Avec :

- q : la charge de l'électron en Coulomb ;
- k : la constante de Boltzmann ;
- T : la température (°K).

Pour des tensions positives ($V > 0$) et supérieures à quelques kT/q , dans la région où l'effet de la résistance série n'est pas apparent, l'équation précédente devient :

$$I = I_s \left(\exp \left(\frac{qV}{nkT} \right) \right) \quad (2)$$

Pour déterminer le courant de saturation et le facteur d'idéalité des structures étudiées, nous ne considérons que la première partie linéaire des courbes $\ln(I)$ - V prise à partir d'une tension V supérieure à quelques kT/q . Cette droite doit correspondre à $\ln(I_s) + \frac{qV}{nkT}$ dont la pente est égale à q/nkT et dont l'ordonnée à l'origine est $\ln(I_s)$. L'interpolation linéaire faite pour cette partie a pour équation :

$$\ln(I) = A + B \times V \quad (3)$$

B étant la pente de la droite exprimée ; A représente l'intersection de la droite d'interpolation de $\ln(I)$ - V avec l'axe des courants.

Par conséquent, le courant de saturation est déterminé en considérant le point d'intersection de la droite d'interpolation de la courbe $\ln(I)$ - V avec l'axe des courants, donc il s'agit de trouver le courant correspondant à V nulle. Une fois I_s calculé, on peut déterminer la valeur de la hauteur de barrière de potentiel par la relation qui suit :

$$\phi_{bn} = \frac{kT}{q} \ln \left(\frac{SA^{**}T^2}{I_s} \right) \quad (4)$$

Où S est la surface du contact métallique d'or, $A^{**} = 8.78 \text{ A.cm}^{-2}.\text{K}^{-2}$: est la constante de Richardson effective (calculée avec un rapport de masse effective de l'électron m_e sur la masse de l'électron libre m_0 , $m_e/m_0 = 0.073$ [3] pour l'InP et $kT/q = 25.9 \text{ mV}$: est le potentiel thermique.

Le facteur d'idéalité est déterminé à partir de l'équation de la pente de la droite d'interpolation suivante :

$$B = \frac{d\ln(I)}{dV} = \frac{q}{nkT} \quad (5)$$

3.1.b. Détermination de la résistance série

Pour les faibles valeurs de courants, la tension de polarisation V peut être considérée comme égale à la tension V qui est appliquée aux bornes de la zone de charges d'espace. Les différents phénomènes parasites sont représentés par le facteur d'idéalité n qui traduit l'écart entre le comportement idéal et réel de la structure. Lorsque le courant devient relativement élevé, cette considération n'est plus valable et il faudra tenir compte de la tension aux bornes de la résistance série de la structure.

La figure III-1 montre clairement le changement de la pente par l'effet de la résistance série en polarisation directe. Cette résistance peut être déterminée par la relation suivante :

$$R_s = \frac{\Delta V}{I} \quad (6)$$

Le tableau III.2 regroupe les valeurs des paramètres électriques (I_s , n , R_s , ϕ_{bn}) des structures Au/InN/InP(100) étudiées.

Tableau III.2: Paramètres électriques des structures Au/InN/InP(100) des Séries A et B, déterminés à partir de l'expression du courant thermoïonique.

Paramètre		I_s (μA)	n	R_s (Ω)	ϕ_{bn} (eV)
Série	A	21.23	6.09	42	0.54
	B	12.3	1.57	38	0.64

La série B présente une meilleure barrière Schottky avec une hauteur de 0.64 eV. La faible hauteur de barrière et la valeur élevée du facteur d'idéalité trouvées dans le cas la série A expliquent la non idéalité du contact Schottky ainsi réalisé. La non idéalité de la structure A est aussi à l'origine de la présence du courant de fuite relativement élevé dans la structure en polarisation inverse. Ce qui laisse supposer l'implication d'autres phénomènes de transport dans la structure autre que celui thermoïonique tel que le transport de charges par effet tunnel.

3.1.c. Détermination de la résistance série par la méthode de Cheung et Cheung

Une autre méthode de calcul de la résistance série R_s est la méthode de Cheung et Cheung [4], confirmée par Werner et al [5]) a été utilisée dans notre étude. Cette méthode est basée sur le calcul et le tracé de deux fonctions $G(I)$ et $H(I)$ déduites à partir des équations (7) et (8) :

$$G(I) = \frac{\partial V}{\partial(\ln I)} = \frac{nkT}{q} + IR_s \quad (7)$$

$$H(I) = V - \left(\frac{nkT}{q}\right) \ln\left(\frac{I}{SA^{**}T^2}\right) = n\phi_{bn} + IR_s \quad (8)$$

Selon les équations précédentes, la pente de la partie linéaire de $G(I)$ par rapport à I donne la résistance série R_s et l'intersection $G(I)$ avec l'axe des courants donne le facteur d'idéalité n . Par contre la hauteur de la barrière de potentiel ϕ_{bn} est obtenue par l'intersection de la fonction $H(I)$ avec l'axe des courants. La résistance série peut être obtenue à partir de la valeur de la pente de la fonction $H(I)$. Les valeurs obtenues par cette méthode sont présentées

dans le tableau III.3. On constate que les valeurs de n et R_s obtenues dans ce cas sont légèrement inférieures à celles obtenues à partir de la courbe $\ln(I)$ - V mais restent toujours dans le même ordre de grandeurs.

Tableau III.3: Paramètres électriques des structures Au/InN/InP(100) déterminés par la méthode de Cheung et Cheung.

Paramètre		n	R_s (Ω)
Série	A	5.29	30
	B	1.86	19

3.2. Evaluation de la distribution de la densité d'états d'interface dans la bande interdite à partir des caractéristiques I-V et C-V en haute fréquence

Pour l'estimation de la distribution de la densité d'états d'interface N_{ss} dans la bande interdite du semiconducteur InP, nous avons calculé N_{ss} en considérant la largeur de la zone de charge d'espace W au moyen de l'équation suivante [6, 7] :

$$N_{ss} = \frac{1}{q} \left[\frac{\epsilon_i}{\delta_i} (n(V) - 1) - \frac{\epsilon_s}{W} \right] \quad (9)$$

$\epsilon_i=15.3 \times \epsilon_0$ est la permittivité de la couche d'InN, $\epsilon_s=12.1 \times \epsilon_0$ représente la permittivité du substrat InP ($\epsilon_0 = 8.85 \times 10^{-14}$ F/cm), δ est l'épaisseur de la couche d'InN considérée. Nous déterminons d'abord la largeur de zone de charge d'espace (Z.C.E.) à partir des caractéristiques C-V expérimentales. Le choix des épaisseurs des couches d'InN sont conformément aux résultats spectroscopiques. On avait estimé théoriquement une et presque deux monocouches pour l'échantillon A et B respectivement. En prenant en considération une épaisseur de transition de deux monocouches (interface), l'épaisseur de la couche d'InN considérée égale à 15 Å et 25 Å pour les échantillons des séries A et B respectivement.

Les fluctuations du facteur d'idéalité $n(V)$ sont déterminées à partir des caractéristiques I-V, selon la relation suivante :

$$n(V) = \frac{q}{kT} \frac{d(V)}{d(\ln I)} \quad (10)$$

Une fois la distribution de la densité d'états d'interface $N_{ss}(V)$ déterminée, on trace la caractéristique $N_{ss} = f(E_c - E_{ss})$, conformément à la relation qui exprime la variation de l'énergie de la densité d'états d'interface E_{ss} en fonction de la tension de polarisation V [7]:

$$E_c - E_{ss} = q(\phi_{bn} - V) \quad (11)$$

E_{ss} est référencée par rapport à l'énergie de la bande de conduction E_c .

Dans la figure III-3 on observe que les densités d'états d'interfaces obtenues avec cette méthode sont relativement élevées particulièrement pour le cas de la série A. Une diminution de la densité d'états d'interface est enregistrée lorsqu'on se rapproche du milieu de la bande interdite pour l'échantillon B à l'inverse du cas de l'échantillon A. La densité d'états dans le cas de la série B est plus faible que celle de la série A, cela veut dire qu'elle présente une bonne qualité électronique et moins de défauts et que l'interface réalisée entre la couche

niturée et le substrat est de bonne qualité. Ce résultat confirme les résultats surfaciques trouvés dans le chapitre II.

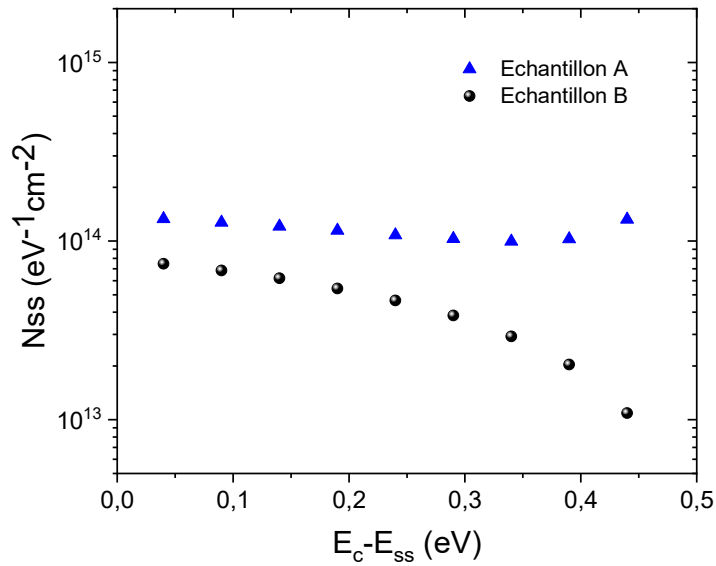


Figure III-3 : Distribution de la densité d'états d'interface dans la bande interdite des séries A et B.

3.3. Extraction des paramètres à partir de la caractéristique C-V

Afin d'extraire les paramètres électriques des structures étudiées tel que la concentration en dopants N_d du substrat, la tension de diffusion V_d ainsi que la hauteur de barrière de potentiel ϕ_{bn} à partir de la caractéristique C-V en haute fréquence, nous avons représenté les courbes $1/C^2-V$ des deux séries sur les figures III-4 et III-5.

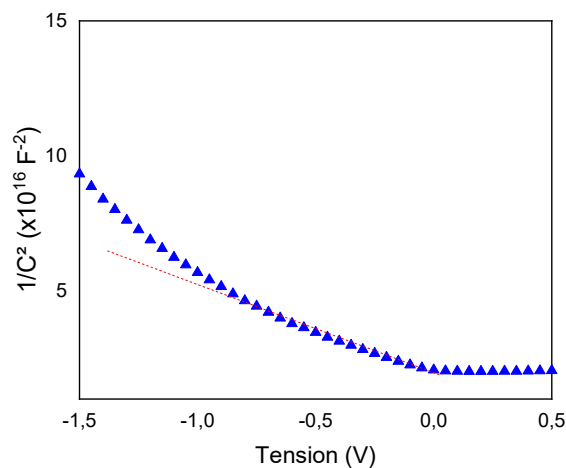


Figure III-4 : Caractéristique $1/C^2-V$ expérimentale des échantillons de la série A.

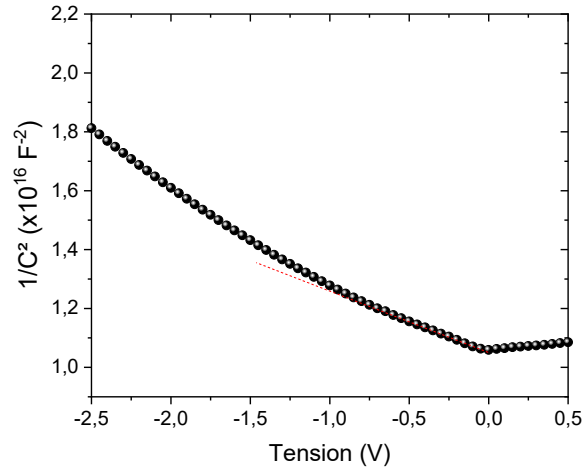


Figure III-5 : Caractéristique $1/C^2$ -V expérimentale des échantillons de la série B.

Les caractéristiques $1/C^2$ -V des structures étudiées montrent des courbes non-linéaires. Ceci est dû à la présence des niveaux donneurs discrets en surface et à l'interface des structures.

L'interpolation linéaire faite pour les caractéristiques trouvées permet d'extraire la concentration des dopants N_d de l'InP à partir de la pente de la droite. La valeur de la tension de diffusion V_d , est obtenue par l'intersection de la droite d'interpolation de $1/C^2(V)$ avec l'axe des tensions.

3.3.a. Détermination de la concentration en dopants et du potentiel de diffusion

A partir de la première pente linéaire (proche de 0V) de la caractéristique $1/C^2$ -V, nous pouvons calculer la concentration N_d à partir de l'équation suivante :

$$\frac{1}{C^2} = \frac{2(V_R + V_d)}{q\epsilon_s N_d S^2} \quad (12)$$

Le potentiel de diffusion V_d dû à la différence des travaux de sortie est obtenu par l'intersection de la première droite d'interpolation de la caractéristique $1/C^2(V)$ avec l'axe des tensions d'après l'équation (12).

3.3.b. Détermination de la hauteur de barrière de potentiel

La hauteur de barrière de potentiel ϕ_{bn} calculée à partir de la caractéristique $C(V)$ est donnée par l'équation (13) :

$$\phi_{bn} = V_d - \frac{kT}{q} \ln\left(\frac{N_d}{N_c}\right) \quad (13)$$

avec

N_c : la densité d'états effective dans la bande de conduction.

Les différents paramètres électriques calculés à partir des caractéristiques C-V des structures Au/InN/InP(100) sont regroupés dans le tableau III.4.

Tableau III.4: Paramètres électriques des structures Au/InN/InP(100) déterminés à partir des caractéristiques C-V.

Paramètre		N_d (cm ⁻³)	V_d (V)	ϕ_{bn} (eV)
Série	A	3.36×10^{17}	0.61	0.66
	B	1.16×10^{17}	0.72	0.83

A partir du tableau III.4, on remarque que la concentration N_d calculée est relativement du même ordre de grandeurs pour les deux séries d'échantillons. La concentration en donneurs des substrats d'InP donnée par le fournisseur étant égale à $N_d = 1 \times 10^{16}$ cm⁻³, alors que les concentrations extraites dépassent 10^{17} cm⁻³. Cette différence vient de l'effet de la présence des états d'interface et des états pièges dans la structure qui augmentent la quantité de charges dans les structures étudiées et par conséquent leurs concentrations. On remarque aussi que les hauteurs de barrières déterminées par les courbes C-V sont beaucoup plus élevées comparées à celles déterminées par les caractéristiques I-V.

La valeur de la barrière de potentiel des échantillons B est supérieure par rapport aux échantillons A ceci est due à la qualité de la couche d'InN, de plus le recuit après nitruration n'apporte pas une nette amélioration de la qualité électrique de la structure ceci a été observé d'après le calcul des rapports des pics XPS d'indium In_{4d} dans l'étude spectroscopiques (Cf chapitre 2). Ce résultat est confirmé par d'autres travaux par des analyses de spectroscopie Auger sur des structures de type Hg/InN/InP [8].

3.4. Extraction des paramètres à partir de la caractéristique C-V en prenant en compte l'effet de la densité d'états d'interface

La méthode, de calcul des paramètres, basée sur l'équation (12) n'élimine pas l'effet de la présence des états d'interface et des états pièges dans la structures, étant donné que la variation de la capacité des structures est influencée par ces derniers. Le paramètre α est introduit dans l'équation (12) ce qui donne la formule (14) permettant de prendre en compte l'effet de N_{ss} , dans l'extraction des paramètres électriques [9].

$$\frac{1}{C^2} = \frac{2(V_R + V_d)}{q\epsilon_s N_d S^2 (1 + \alpha)} \quad (14)$$

Où le paramètre α dépend de la densité d'états d'interface moyenne par la relation (15) suivante :

$$\alpha = \frac{q N_{ss(moy)} \delta}{\epsilon_i} \quad (15)$$

Avec δ représente l'épaisseur de la couche interfaciale d'InN.

La valeur de α est calculée à partir de l'estimation de la valeur moyenne des états d'interface $N_{ss(moy)}$, qui est égale à $1.35 \times 10^{14} \text{ eV}^{-1} \text{ cm}^{-2}$ pour la série A et $4.05 \times 10^{13} \text{ eV}^{-1} \text{ cm}^{-2}$ pour la série B.

A partir de la première pente linéaire (proche de 0V) de la caractéristique $1/C^2-V$, nous pouvons calculer la concentration N_d et la tension de diffusion V_d en prenant compte l'effet des états d'interface N_{ss} , au moyen de l'équation (14).

La concentration N_d du substrat en prenant compte l'effet des états d'interface, est calculée à partir de la pente de la droite d'interpolation de la caractéristique $1/C^2-V$ de chaque échantillon. Les valeurs de dopage estimées varient entre $1.97 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ pour la série A et $1.54 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ pour la série B. Donc en éliminant l'effet des états d'interface dans nos calculs on retrouve des valeurs plus proches de celles données par le fournisseur.

Le potentiel de diffusion V_d dû à la différence des travaux de sortie et aux états d'interface N_{ss} , est donné par l'équation suivante [9] :

$$V_d' = V_d(1 + \alpha) \quad (16)$$

La valeur de la tension V_d' est obtenue par l'intersection de la droite d'interpolation de $1/C^2-V$ avec l'axe des tensions. La hauteur de barrière de potentiel ϕ_{bn} est calculée par l'équation (13).

Les différents paramètres électriques déterminés à partir des caractéristiques C^2-V des structures Au/InN/InP(100) en prenant en compte l'effet des états d'interface N_{ss} sont regroupés dans le tableau III.5.

Tableau III.5: Paramètres électriques des structures Au/InN/InP(100) déterminés à partir des caractéristiques C-V des deux séries A et B.

Paramètre	N_d (cm^{-3})	V_d (V)	ϕ_{bn} (eV)
Série	A	1.97×10^{16}	0.23
	B	1.54×10^{16}	0.30

A partir du tableau III.5, on remarque que la concentration N_d calculée est relativement du même ordre de grandeurs pour les deux séries d'échantillons. Elles sont en bon accord avec celles données par le fournisseur. Les paramètres électriques, précisément la barrière de potentiel et la tension de diffusions, extraits des courbes I-V sont calculés à partir du courant de saturation I_s ; dont la valeur correspond au courant pour une tension de polarisation nulle $I(0)$, tandis que les valeurs de ϕ_{bn} extraites des courbes C-V non idéales sont obtenues pour une tension égale à V_d différente de zéro volt, ce qui explique la valeur faible de ϕ_{bn} obtenue par cette méthode et notamment la différence entre les résultats obtenus à partir des deux courbes.

4. Caractérisations électriques des structures Au/InN/InP(100) en fonction de la fréquence

4.1. Caractéristiques Capacité-Tension et conductance-Tension C-V-f et G-V-f

La figure III-6 montre les caractéristiques expérimentales des structures A et B en fonction de la fréquence dans l'intervalle de polarisation appliquée de -1 V à 0 V.

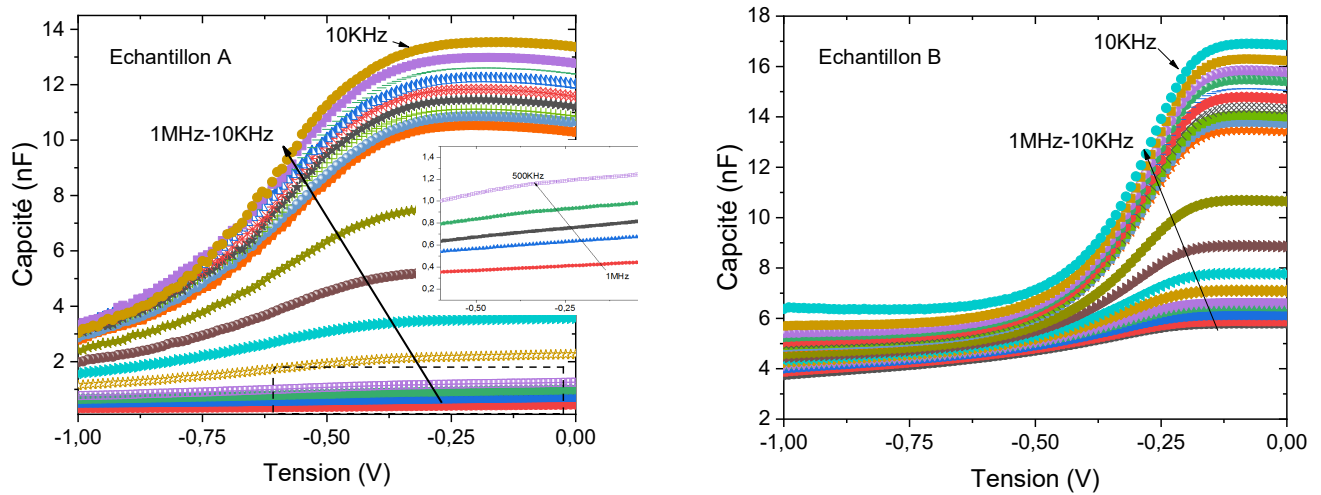


Figure III-6 : Caractéristiques C-V expérimentales des structures Au/InN/InP(100) des séries A et B en fonction de la fréquence.

D'après les courbes ci-dessus on remarque que la valeur de la capacité des deux séries d'échantillons est inversement proportionnelle à la fréquence de mesure particulièrement dans les zones de déplétion et d'accumulation, elle atteint sa valeur maximale au voisinage de zéro volt pour les plus basses fréquences.

Pour une tension de polarisation donnée on peut voir la dispersion de la capacité en fonction de la fréquence dans les courbes de la figure III-6. Une dispersion plus importante est enregistrée dans les courbes de la série A.

Les variations de la conductance G-V mesurées en fonction de la fréquence des séries A et B sont représentées par la figure III-7.

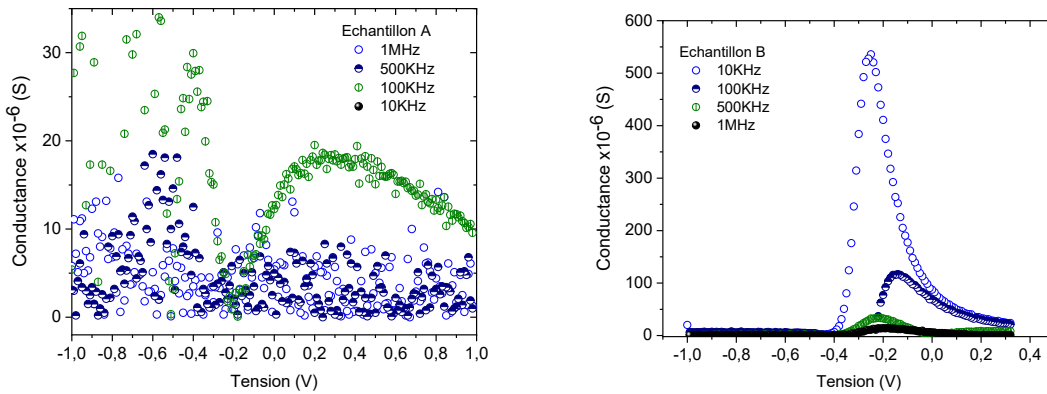


Figure III-7 : Caractéristiques G-V expérimentales des structures Au/InN/InP(100) des séries A et B en fonction de la fréquence.

Il est remarquable que les courbes de la conductance de la série A ne sont pas très nettes. Ceci est dû à la présence de bruit dans les mesures qui ne permet pas de mieux traiter les données. Dans le cas de la série B on peut constater une forte évolution de la conductance en baissant la fréquence de mesure, elle atteint des valeurs maximales au voisinage de zéro volt.

4.2. Détermination de la résistance série à partir des courbes C-V-f et G-V-f

La résistance série R_s est l'un des paramètres électriques qui peuvent dans certains cas être à l'origine de la non-idéalité des caractéristiques C-V et G-V [9-11]. La valeur réelle de la résistance série d'une diode Schottky peut être déterminée à partir des valeurs maximales de capacité et de conductance dans la région d'accumulation C_m et G_m au moyen de l'expression suivante [9-11] :

$$R_s = \frac{G_m}{G_m^2 + \omega^2 C_m^2} \quad (17)$$

En utilisant l'équation précédente et à partir des courbes expérimentales de conductance et de capacité des figures III-6 et III-7, les variations de R_s -V sont calculées pour chaque fréquence. Elles sont représentées sur la figure III-8.

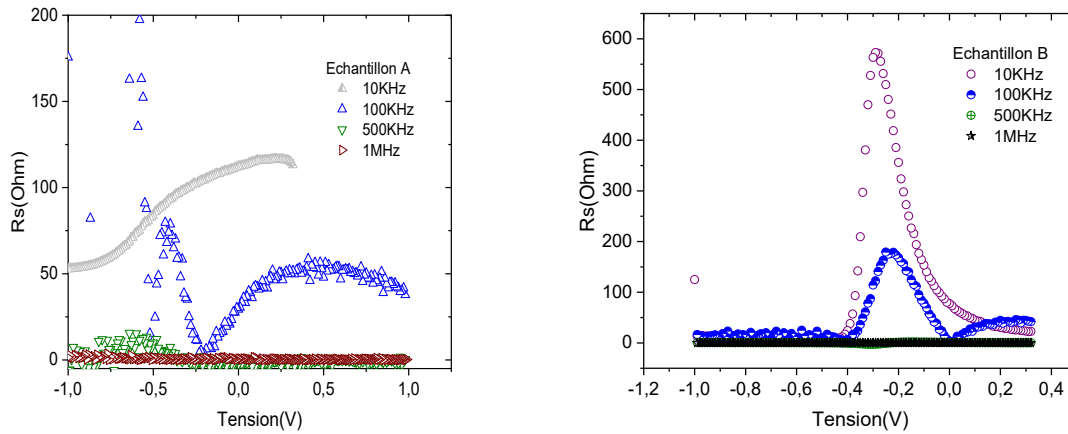


Figure III-8 : Courbes R_s -V des structures Au/InN/InP(100) des séries A et B en fonction de la fréquence.

D’après les courbes R_s -V pour les basses fréquences, on peut observer un pic important de R_s au voisinage de 0,25 V et -0.29 V pour les séries A et B respectivement. On peut également observer que lorsque la fréquence diminue la valeur des pics augmente. Ceci peut être attribué à la présence des états d’interface et à la couche interfaciale qui, dans ce cas, suivent le signal de modulation. Le tableau III.6 regroupe les positions des pics et les valeurs des résistances séries correspondantes pour différentes valeurs de fréquences.

Tableau III.6: Positions des pics et les valeurs des résistances séries correspondantes pour différentes fréquences.

Série	A				B			
	1MHz	500 KHz	100 KHz	10 KHz	1MHz	500 KHz	100 KHz	10 KHz
Position du Pic (V)	-	-0.64	-0.43	0.22	-	-0.14	-0.25	-0.29
R_s (Ω)	-	15.6	78	116	-	2.72	179	572

D’après le tableau ci-dessus on remarque que la résistance série maximale, pour chaque fréquence, diminue avec l’augmentation de la fréquence de mesure. Cette dernière atteint des valeurs maximales pour les plus basses fréquences.

On note aussi que pour la fréquence maximale de 1 MHz la résistance série est pratiquement nulle ceci est valable pour les deux séries d’échantillons. Donc on en déduit que la résistance série n’influence pas les caractéristiques C-V et G-V en haute fréquence.

4.3. Détermination de la densité d'états d'interface par la méthode haute-basse fréquence

Les caractéristiques C-V-F sont exploitées dans l'étude de l'interface InN/InP(100) réalisée et la qualité de la couche de nitrure. Dans ce qui suit la technique haute-basse fréquences est utilisée pour évaluer la densité d'états d'interface. Cette dernière repose sur les deux méthodes de calcul de N_{ss} suivantes :

4.3.a. Méthode 1

La méthode la plus simple pour déterminer la densité d'états d'interface est de quantifier la déformation de la courbe C-V d'une structure mesurée en quasi statique ou à très basse fréquence. En raison de la dépendance en fréquence de la réponse des pièges, la courbe C-V n'a pas la même forme. Dans le circuit équivalent de la structure, la capacité des états d'interface C_{it} est une capacité parallèle à la capacité de charge d'espace C_{SC} en haute fréquence car les états d'interface ne peuvent pas suivre le signal alternatif AC et ne contribuent donc pas dans la capacité totale [12].

La capacité de charge d'espace C_{SC} est égale à la capacité mesurée en haute fréquence. Une soustraction de la capacité de la ZCE (extraite de la capacité mesurée en haute fréquence C_{HF}) peut être utilisée pour obtenir la capacité des états d'interface.

Nous supposons que le signal basse fréquence est suffisamment faible pour que tous les états d'interface répondent et que le signal en haute fréquence soit suffisamment élevé pour que la durée de vie des pièges d'interface τ_{it} ne soit pas suffisamment courte pour répondre. Nous avons choisi une fréquence basse de 10 KHZ et une fréquence haute de 1 MHz pour obtenir la densité d'état d'interface N_{ss} .

La capacité des états d'interface C_{ss} peut être déterminée en soustrayant la capacité de la zone de charge d'espace (C_{ZCE} extraite de la capacité haute fréquence mesurée C_{HF}) de la capacité de la couche d'appauvrissement en parallèle avec la capacité des états d'interface (C_i extraite de la capacité basse fréquence mesurée C_{LF}). La densité d'états de l'interface N_{ss} peut être obtenue par [12, 13] :

$$N_{ss} = \frac{C_{ss}}{qS} = \frac{1}{qS} \left[\left(\frac{1}{C_{LF}} - \frac{1}{C_i} \right)^{-1} - \left(\frac{1}{C_{HF}} - \frac{1}{C_i} \right)^{-1} \right] \quad (18)$$

Avec :

$$C_i = \frac{\epsilon_i}{\delta_i} \quad (19)$$

ϵ_i est la permittivité de la couche d'InN $\epsilon_i=15.3 \times \epsilon_0$ avec $\epsilon_0 = 8.85 \times 10^{-14}$ F/cm), δ_i l'épaisseur de la couche d'InN considérée égale à 15Å et 25 Å pour les échantillons des séries A et B respectivement.

La distribution de la densité d'états d'interface N_{ss} extraite des caractéristiques capacité-tension mesurées par la méthode haute-basse fréquences est représentée sur la figure III-9. Les valeurs de N_{ss} trouvées par cette méthode de calcul confirment les résultats trouvés

précédemment, On trouve des résultats meilleurs dans le cas de la série B, ce qui prouve la bonne qualité structurale et électrique des échantillons de la série B.

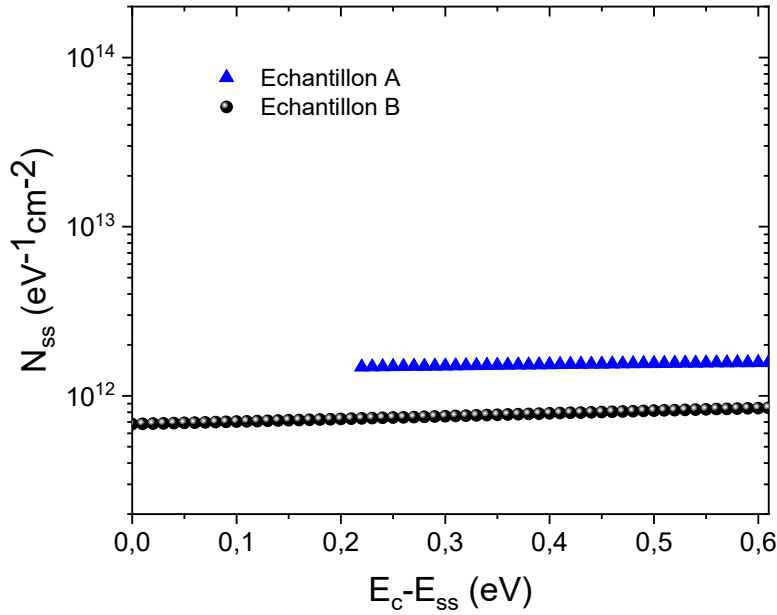


Figure III-9 : Distribution de la densité d'états d'interface N_{ss} dans la bande interdite des séries A et B, obtenue par la méthode de la capacité haute-basse fréquence.

4.3.b. Méthode 2

Afin de déterminer la distribution de la densité des états d'interface, les valeurs de potentiel de surface Ψ_s ont été extraites des caractéristiques I-V mesurées. Le courant électrique d'une diode Schottky en fonction du potentiel de surface peut être exprimé par :

$$I = SA^{**}T^2 \exp\left(\frac{-qV_n}{kT}\right) \exp\left(\frac{-q\Psi_s}{kT}\right) \quad (20)$$

Le potentiel de surface peut être calculé par l'expression analytique suivante :

$$\Psi_s = \frac{kT}{q} \ln\left(\frac{SA^{**}T^2}{I}\right) - V_n \quad (21)$$

La densité d'états effectives dans la bande de conduction est égale à $N_c = 5,7 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ pour le substrat InP [14]. La concentration de dopage N_d a été extraite de la pente des caractéristiques $1/C^2 = f(V)$ à la fréquence 1MHz et à la température ambiante.

Les états d'interface ont des vitesses de réponse différentes. En basses fréquences, tous les états d'interface suivent le signal alternatif, et la capacité basse fréquence est donnée par [15, 16] :

$$C_{LF} = \frac{\sqrt{q\varepsilon_s N_d / 2\Psi_s + qN_{ss}}}{1 + qR_s J / kT + \delta / \varepsilon_i \left(\sqrt{q\varepsilon_s N_d / 2\Psi_s + qN_{ss}} \right)} \quad (22)$$

Où, δ est l'épaisseur de la couche interfaciale, ϵ_i et ϵ_s représentent respectivement la permittivité de la couche interfaciale et celle du semiconducteur.

En haute fréquence, théoriquement aucun état d'interface ne suit le signal alternatif, donc les états de l'interface n'ont aucun effet sur la capacité, et la capacité peut être exprimée [15, 16] :

$$C_{HF} = \frac{\sqrt{q\epsilon_s N_d / 2\Psi_s}}{1 + qR_s J / kT + \delta / \epsilon_i \left(\sqrt{q\epsilon_s N_d / 2\Psi_s} \right)} \quad (23)$$

La densité d'états d'interface N_{ss} peut être déterminée à l'aide des équations (22) et (23), tels que :

$$N_{ss} \approx \sqrt{q\epsilon_s N_d / 2\Psi_s} \frac{C_{LF} - C_{HF}}{qC_{HF}} \quad (24)$$

La densité d'états d'interface N_{ss} est calculée à partir des courbes C-V expérimentales en basse et haute fréquence avec la valeur du potentiel de surface Ψ_s déterminée à partir des courbes de courant I-V . La distribution de N_{ss} dans la bande interdite est représentée sur la figure III-10. Les résultats trouvés par cette méthode sont en concordance avec les courbes de la première méthode avec une très légère différence.

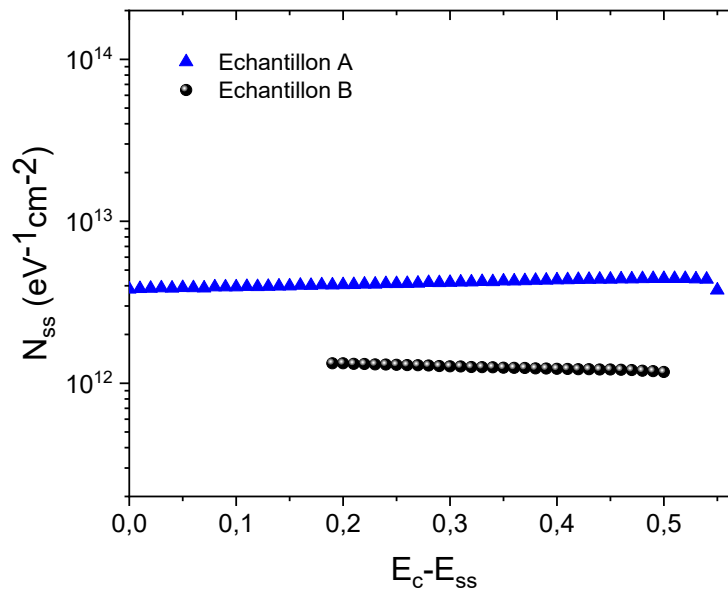


Figure III-10 : Distribution de la densité d'états d'interface dans la bande interdite des structures Au/InN/InP(100) des séries A et B, déterminées à partir des courbes de capacités en haute-basse fréquences et du potentiel de surface.

Afin de comparer la distribution des états d'interface N_{ss} obtenues par différentes méthodes, les résultats sont regroupés dans la même figure III-11.

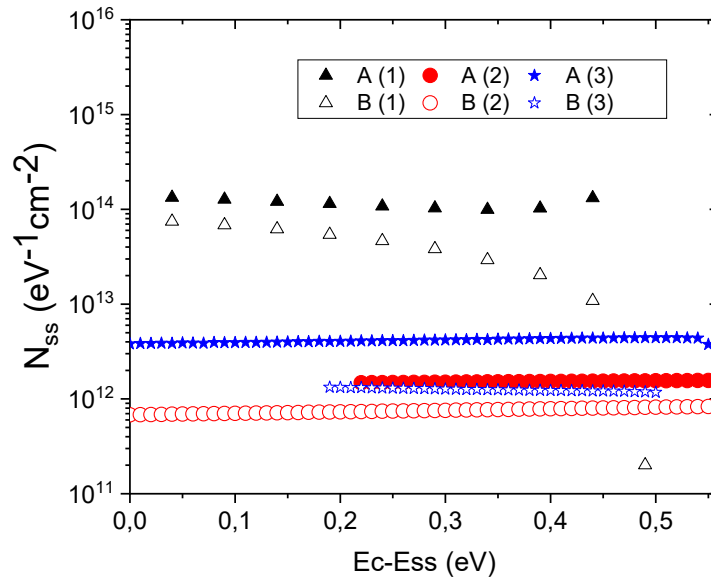


Figure III-11 : Distribution de la densité d'états d'interface dans la bande interdite des deux séries extraite par les différentes méthodes, I-V et capacités en haute fréquence (1), capacités en haute-basse fréquences(2) capacités en haute-basse fréquences et du potentiel de surface(3).

Les valeurs des densités d'états d'interface obtenues par les différentes méthodes varient entre $8 \times 10^{11} \text{ eV}^{-1} \cdot \text{cm}^{-2}$ et $1,5 \times 10^{14} \text{ eV}^{-1} \cdot \text{cm}^{-2}$. On remarque que la série B présente de meilleures interfaces par rapport à la série A. Parmi les méthodes utilisées dans notre étude, la méthode de capacité haute-basse fréquences donne des densités d'états d'interface plus faibles. Cette technique est connue par sa précision et sa fiabilité mais les limitations en hautes fréquences, de l'appareil de mesure et le bruit enregistré lors des mesures en basses fréquences influencent les résultats obtenus. Donc le choix des fréquences est d'une grande importance quant à l'utilisation de cette méthode de caractérisation.

5. Interprétations des résultats

Les caractéristiques électriques courant-tension des structures Au/InN/InP(100) montrent qu'elles forment un contact Schottky avec la présence d'un courant de fuite en inverse. L'intensité du courant inverse est corrélée avec la non idéalité de la structure et la présence d'indium métallique en surface [8]. Celui-ci est d'autant plus fort que la structure est moins nitrurée ce qui est le cas de la série A qui a subi une nitruration de 40 min (au lieu de 50 min pour la série B) et que les spectres XPS indiquent la présence de traces d'indium métallique.

La présence des états d'interface peut aussi induire une valeur importante du facteur d'idéalité. Il a été constaté que les valeurs du facteur d'idéalité sont meilleures dans les échantillons avec une couche de nitrure d'indium plus épaisse (série B) [8]. Les valeurs de capacités mesurées dépendent de la fréquence. Ces valeurs de capacité élevées aux fréquences

plus basses sont attribuées à une capacité excessive résultant des pièges à l'interface. Ces pièges ne peuvent pas suivre la modulation du signal alternatif haute fréquence.

Les valeurs de facteur d'idéalité, de résistance série et de courant de saturation sont plus élevées pour les échantillons de la série A. Ceci peut être expliqué soit par le bombardement prolongé imposé aux échantillons, et qui peut impacter fortement la surface du substrat d'InP(100) tel qu'il a été mentionné dans les travaux de G. Monier et al. [17] ou bien par le recuit après nitruration qu'ont subi les échantillons et qui n'apporte pas une nette amélioration tel qu'il a été démontré par les résultats trouvés par Benamara et al [18, 20]. Ces défauts et ces pièges créés sont une source de nombreux états d'interface qui vont provoquer la dégradation de la qualité de la diode Schottky. Ce résultat est appuyé par le calcul de la densité d'état d'interface N_{ss} montrant que la série B présente une bonne interface et moins de défauts et de pièges comparée à la série A.

L'influence des états d'interface sur les caractéristiques C-V est importante. Le calcul du dopage à partir de la capacité, en prenant compte ces états d'interface, donne des valeurs plus proches de celui du fournisseur.

Bien qu'il soit difficile de se prononcer quantitativement sur la densité d'états d'interface, du fait que les différentes méthodes utilisées dans notre étude révèlent des valeurs légèrement différentes, on peut en revanche faire une évaluation qualitative entre les deux échantillons. Toutes les méthodes utilisées confirment la présence d'une densité d'états d'interface plus importante dans la série A comparée à celle dans la série B.

6. Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons étudié les caractéristiques $I-V$, $C-V$ et $C-V-f$ et $G-V-f$ des nanostructures Au/InN/InP(100). Les valeurs du facteur d'idéalité, de la hauteur de barrière et de la densité des états d'interface ont été déterminées. Une concordance a été observée entre les résultats obtenus avec ces différentes méthodes de caractérisation. Les résultats électriques corroborent avec les résultats d'analyses spectroscopiques, ils mettent en évidence la présence de couches tampons de nitrure d'indium déposées sur le substrat InP(100) dans les conditions optimales de 50 min nitruration et d'un angle d'incidence de flux d'azote de 45°.

Les résultats de mesures révèlent aussi qu'un temps de nettoyage ionique prolongé semble affecter la qualité de la surface du substrat InP(100) et par conséquent la qualité de l'interface réalisée lors de la formation de la couche de nitrure d'indium avec des densités des états d'interface plus importante que celle d'un nettoyage ionique de 40 minutes.

Le recuit après nitruration n'apporte pas une amélioration considérable à l'interface obtenue et à la cristallinité du film d'InN. Ceci est confirmé par les spectres XPS d'indium In_{4d} analysés et par la densité d'états d'interface importante évaluée dans ce cas.

En conclusion on peut dire qu'une nitruration des substrats InP(100) avec les conditions optimales (de temps de nitruration de 50 min, d'un angle d'incidence du flux d'azote de 45° et d'une durée de nettoyage ionique de moins de 40 min) permet d'obtenir des structures de diode Schottky de bonnes qualités surfacique et électronique.

Bibliographie

- [1] A. Singh, *Solid State Electron.* 26, 815(1983).
- [2] S.M. Sze (3eme Edition), *Physics of Semiconductors Devices*, Wiley & Sons, New York, (2007).
- [3] Palic, E. D., & Wallis, R. F. *Phys. Rev.*, 123, 131–134 (1961).
- [4] S.K. Cheung, N.W. Cheung, *Appl. Phys. Lett.* 49, 85 (1986).
- [5] J.H. Werner, *Appl. Phys. A* 47, 291 (1988).
- [6] N. Zougagh, Z. Benamara, H. Mazari, N. Benseddik, K. Ameer, G. Monier .. & B. Gruzza, *Sensor Letters*, 9 (6), 2211-2214 (2011).
- [7] L. M. Terman, *Solid-State Electron.* 5, 285, (1962).
- [8] A. Talbi, *Etude de la nitruration des substrats InP(100) –Analyses spectroscopiques et caractérisations électriques associées*, Thèse de l'université de Sidi Bel Abbes (2007).
- [9] B. Akkal, *Simulation, Caractérisation électrique et structurale des diodes Shottky Au/InSb/InP(100) en fonction de la fréquence*, Thèse de l'université de Sidi Bel Abbes, (2002).
- [10] E. H. Nicollian and J. R. Brews, *MOS physics and technology*, New york Wiley (1982).
- [11] A. H. Kacha, *Caractérisation électrique et photoélectrique des hétéros structures à base des composés III-V nitrurés*, Thèse de l'université de Sidi Bel Abbes (2018).
- [12] P. Chattopadhyay, *Solid. State. Electron.* 39 (10), 1491–1493 (1996).
- [13] M. a. Ebeoğlu, T. Kiliçoğlu, and M. E. Aydin, *Phys. B Condens. Matter*, vol. 395, no. 1–2, pp. 93–97, (2007).
- [14] M. Levinstein, S. Rumyantsev and M. Shur, *Handbook Series on Semiconductor Parameters*, World Scientific, London, (1996).
- [15] S. Chattopadhyay, LK. Bera, SK Ray, PK Bose, CK Maiti., *Thin Solid Films*, 335(1-2), 142-145 (1998).
- [16] HilmiÜnlü, *Low-Dimensional and Nanostructured Materials and Devices: Properties, Synthesis, Characterization, Modelling and Applications*, Springer International Publishing, (2016).
- [17] G. Monier, L. Bideux, C. Robert-Goumet, B. Gruzza, M. Petit, J.L. Lábár, M. Menyhárd, *Surf. Sci.* 606, 1093–1099 (2012).

- [18] M. A. Benamara, Elaboration, Caractérisation et Étude des Propriétés Physiques dans les Matériaux III-V Nitrurés (GaAs et InP nitrurés), Thèse de l'université de Sidi Bel Abbes (2014).
- [19] B. Akkal, Z. Benamara, A. Boudissa, N. Bachir Bouiadjra, M. Amrani, L. Bideux, B. Gruzza, Materials Science and Engineering: B, 55(3), 162-168 (1998).
- [20] A. Talbi, M. A. Benamara, Z. Benamara, B. Akkal, B. Gruzza, C. Robert, L. Bideux, G. Monier, Journal of Optoelectronics and Advanced Materials, 115 (5-6), 509-513 (2013).

Chapitre IV

Chapitre IV : Pré-conditionnement de la surface du substrat de Si pour la synthèse du GaN

1. Introduction.....	80
2. Motivations de l'étude du pré-conditionnement de la surface Si.....	80
3. Problématiques liées à la nitruration du substrat Si	81
4. Procédé de micro-fabrication des transistors HEMTs étudiés	81
5. Caractéristiques courant-tension	83
6. Mesure de claquage du MOS-HEMT sur Si.....	85
7. Discussions des résultats	86
8. Amélioration du claquage par une couche intercalaire 3C-SiC	86
9. Caractérisation de la couche 3C-SiC	87
10. Mesure de claquage du MOS-HEMT/SiC/Si:.....	89
11. Conclusion	91
Bibliographie.....	92

1. Introduction

Grâce à sa large bande interdite et sa forte vitesse de saturation électronique, le GaN possède un potentiel très intéressant pour la réalisation de composants de puissance. Les transistors à haute mobilité électronique (HEMTs) à base d'hétérostructure AlGa_{0.3}N/GaN présentent des performances inégalées grâce à la formation d'un gaz d'électrons bidimensionnel (2DEG) à l'interface AlGa_{0.3}N/GaN. Comme pour la plupart des composants électroniques et optoélectroniques sur GaN, ces dispositifs souffrent également du problème de la forte densité de pièges en surface et en volume. Ces pièges interfèrent le fonctionnement normal des transistors et dégradent leurs performances. Le contrôle du comportement électrique des structures HEMTs reste un défi. Une qualité cristalline et une résistivité électrique suffisantes concernant l'interface avec le substrat sont nécessaires pour obtenir une tension de claquage élevée. Les approches précédentes pour repousser le claquage s'étaient concentrées sur l'amélioration des conditions de croissance de la couche tampon ou par l'augmentation de son épaisseur pour augmenter la tension de claquage [1].

L'utilisation d'inter-couche entre la couche de nucléation et le substrat de silicium est une alternative prometteuse pour réduire les états d'interface et éliminer le chemin conducteur. Le carbure de silicium cubique (3C-SiC) est proposé comme référence avec une différence réduite du paramètre de réseau avec le GaN ainsi qu'une déformation thermoélastique minimale après la croissance de la structure à base de GaN [2].

Dans ce chapitre nous nous intéressons à l'étude du pré-conditionnement de la surface du substrat Si pour la synthèse du GaN. Pour pouvoir évaluer réellement l'impact des défauts d'interface avec le substrat, nous avons choisi des transistors à haute mobilité électronique à grille isolée (MOS-HEMTs). Ces composants ont été réalisés sur des structures épitaxiées AlGa_{0.3}N/GaN. Une étude comparative du phénomène de claquage entre des structures, utilisant une couche intercalaire de 3C-SiC, et d'autres sans cette couche a été menée. Afin de minimiser les différences dans les procédés de microfabrication et s'intéresser à l'effet de la couche intercalaire, les deux types de transistors ont donc suivi les mêmes étapes technologiques.

2. Motivations de l'étude du pré-conditionnement de la surface Si

Les transistors à haute mobilité électronique (HEMT) AlGa_{0.3}N/GaN ont suscité un intérêt croissant pour l'électronique de puissance à haut rendement, bénéficiant des propriétés de transport d'électrons et du champ électrique critique élevé de ce matériau à large bande interdite. [3]. Le GaN sur silicium est très attractif en tant que technologie haute performance et à faible coût. Cependant, la forte réactivité du silicium avec les différents composés fréquemment utilisés pour la croissance des nitrures (précurseurs Ga, Al et N) rend la préparation du substrat et la nucléation plus délicates que sur un substrat comme le SiC [4]. De plus, le GaN sur Si souffre d'un risque de forte densité de dislocations ou de génération de fissures en raison de la contrainte de traction induite par le grand décalage de maille (17 %) et la différence de coefficient de dilatation thermique entre le GaN et le Si. La diffusion parasite d'espèces dopantes dans le substrat de silicium [5, 11], ainsi qu'une qualité cristalline

dégradée à l'interface III-N/Si ont été rapportées comme des origines possibles de chemin de fuite limitant la fiabilité de telles structures pour les hautes tensions, qui conduit à un claquage prématuré du transistor.

3. Problématiques liées à la nitruration du substrat Si

En pratique, l'interface III-N/Si peut typiquement être composée de couches SiN_x en raison de la diffusion d'azote des films III-N ou de la nitruration intentionnelle de la surface Si [5]. Mais, la formation de couches de SiN_x est très dépendante des conditions de croissance. Ces couches de SiN_x sont typiquement amorphes, minces et / ou discontinues et peuvent agir comme des barrières de diffusion d'autres espèces vers la surface de Si. L'effet de la couche de SiN_x sur les films III-N dans la littérature est controversé. Il a été rapporté que le SiN_x amorphe n'est pas souhaitable en raison de la formation de centres de génération de niveau profond dans la couche d'AlN [6] utilisée généralement comme couche de nucléation pour la croissance des films III-N sur Si. En contrepartie, il a été démontré qu'une telle nitruration réduit également la densité de dislocations en utilisant des inclusions de SiN_x comme couches de masquage in-situ [5]. Les différents paramètres qui influencent l'interface III-N/Si sont abordés dans l'annexe D.

4. Procédé de micro-fabrication des transistors HEMTs étudiés

La structure épitaxiée utilisée dans cette étude est une structure commerciale, illustrée par la figure IV-1. Cette dernière est élaborée par la technique MOCVD sur substrat Si (111). La structure est composée : (1) d'une couche de nucléation d'AlN, (2) Une couche tampon ('buffer') de GaN non intentionnellement dopée suivi (3) d'une couche barrière arrière d'Al_{0.18}Ga_{0.82}N d'épaisseur 1.8 μm et (4) d'une couche canal en GaN d'épaisseur 150 nm, (5) d'une couche barrière d'Al_{0.45}Ga_{0.55}N d'épaisseur 4 nm. La structure est finalisée par (6) une couche de SiN cap de 50 nm.

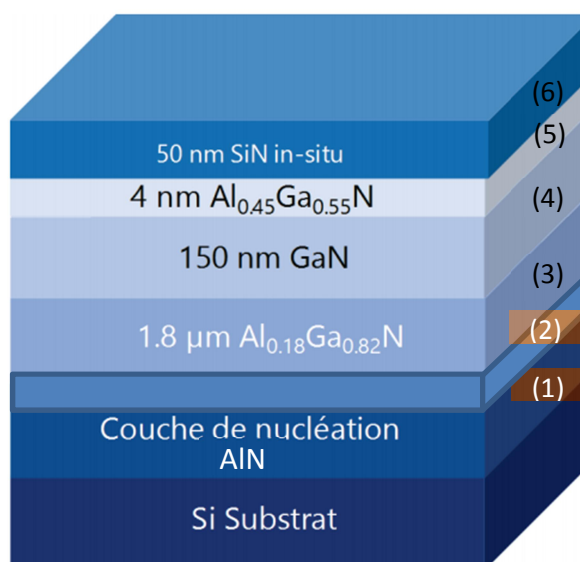


Figure IV-1: Structure épitaxiée pour la réalisation du MOS-HEMT.

Le procédé de micro-fabrication présenté dans cette étude est le fruit des développements mis en place au Laboratoire Nanotechnologies et Nanosystèmes (LN2) de l'université de Sherbrooke au Canada et particulièrement au sein du groupe microélectronique IV-V. Les briques technologiques de bases, utilisées pour la réalisation des transistors MOS-HEMTs, sont le résultat du travail de tous les membres du groupe.

La couche de SiN a d'abord été gravée par gravure sèche avant l'évaporation par faisceau électronique pour la formation de contact ohmique (Ti/Al/Ni/Au). Un recuit thermique rapide (RTA) a été effectué à une température de 875 °C pendant une durée de 30 s dans une atmosphère de N₂. L'implantation d'ions d'azote a été utilisée pour l'isolement du dispositif. Pour l'électrode de grille, la couche de protection en SiN a été gravée à l'aide d'un plasma à base de SF₆ de très faible puissance (5W). L'échantillon a été traité à l'aide d'une solution de KOH, suivi d'une immersion HCl: H₂O pendant 2 min avant le dépôt de la couche diélectrique de grille. Ensuite, une couche PECVD SiO_x de 5 nm d'épaisseur a été déposée en tant qu'isolant de grille en utilisant le processus de passivation précédemment rapporté [7]. Enfin, une grille sous la forme du signe gamma (avec une plaque de champ de 1 µm) est obtenue par évaporation par faisceau électronique (e-beam) de cibles de Nickel et Or pour former un empilement métallique Ni/Au (40/600 nm). La métallisation a été suivie d'un recuit final à 420°C pendant 20 min dans une atmosphère de N₂. L'échantillon MOS-HEMT, avec une couche 3C-SiC, a également été fabriqué selon le même procédé technologique.

La figure suivante (IV-2) représente une vue par microscope électronique à balayage du dispositif :

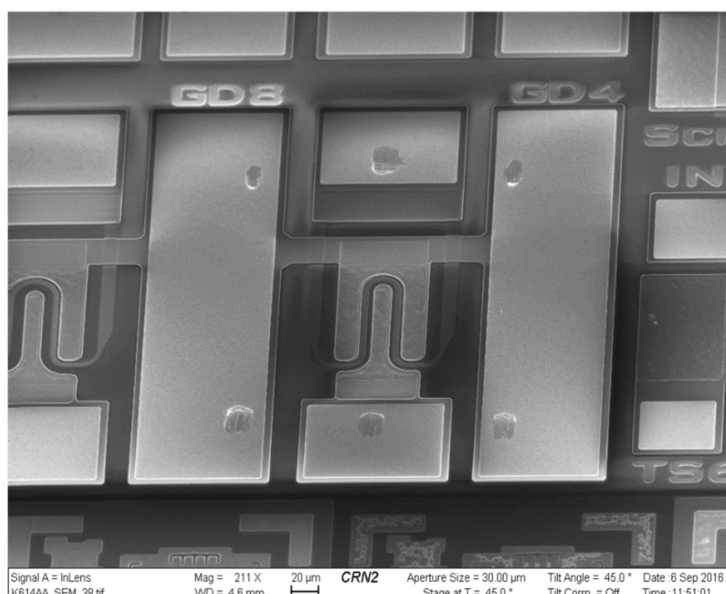


Figure IV-2: Image du dispositif MOS-HEMT par microscope électronique à balayage (MEB).

5. Caractéristiques courant-tension

Les dispositifs MOS-HEMT AlGaIn/GaN normalement passant (Normally ON) ont été réalisés sur un substrat HEMT commercial. Les transistors ont les dimensions suivantes : une longueur de grille de $1,5 \mu\text{m}$, une plaque de champ gamma de $1 \mu\text{m}$, une distance source-drain (L_{GS}) de $2 \mu\text{m}$ et une distance grille-drain (L_{GD}) de $15 \mu\text{m}$.

Tout d'abord, des mesures en courant continu (DC) ont été effectuées sur le dispositif avant de mesurer la tension de claquage. Un courant I_{DS} maximum supérieur à 570 mA/mm (les mesures sont par unité de largeur du transistor) à une valeur V_{GS} de 3 V a été mesurée. Le dispositif présente une tension de pincement de $-0,25 \text{ V}$ avec un courant de fuite inférieur à 10^{-10} A/mm . Les caractéristiques du courant de drain (I_{DS}) dans le dispositif en fonction de la tension drain-source (V_{DS}), pour des tensions grille-source (V_{GS}) variant de 0 à $+3 \text{ V}$, sont illustrées par la figure IV-3. Comme il est montré dans la figure IV-3, le dispositif présente une résistance à l'état passant (R_{ON}) de $7.3 \Omega \cdot \text{mm}$. Nous remarquons l'absence de l'effet Kink dans le dispositif élaboré dans une plage de tensions V_{DS} allant de 0 à 10 V . Les courbes de transfert expérimentales sont illustrées sur la figure IV-4.

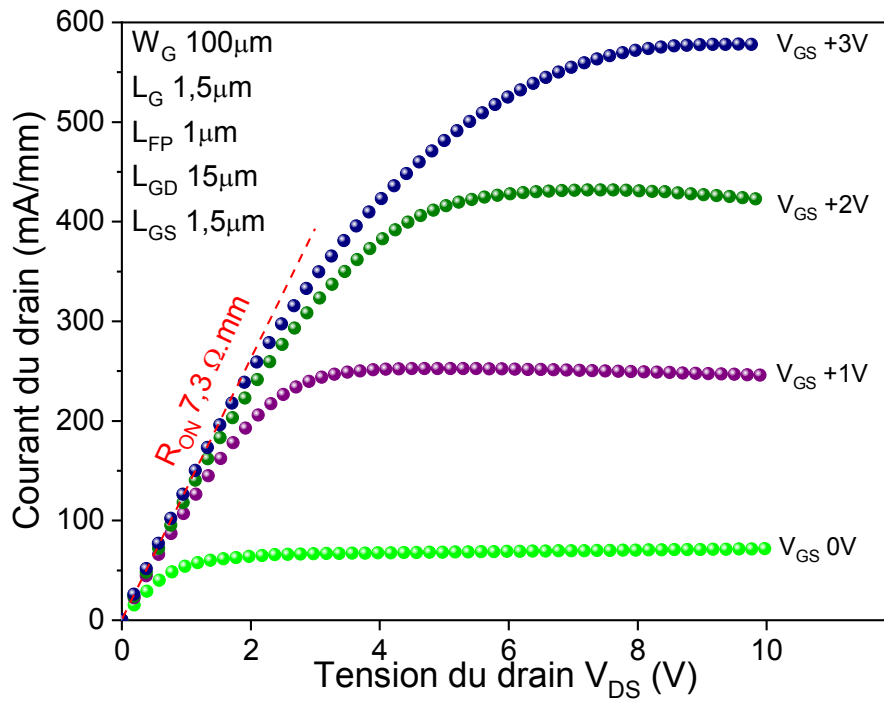


Figure IV-3: Caractéristiques de sortie expérimentales du dispositif MOS-HEMT pour V_{GS} variant de 0 à +3 V.

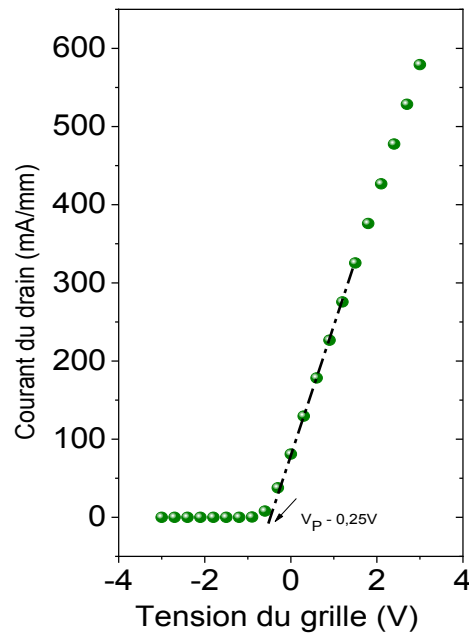


Figure IV-4: Caractéristique de transfert expérimentale (I_{DS} - V_{GS}) du dispositif MOS-HEMT AlGaIn/GaN.

6. Mesure de claquage du MOS-HEMT sur Si

Les mesures de claquage trois bornes dans des conditions de pincement ont été effectuées. La tension de claquage est d'environ 500 V, d'après la figure IV-5. Il est vérifié que le courant de grille n'a pas été le déclencheur du claquage du dispositif. L'augmentation rapide du courant de grille n'a pas été observée au claquage. En revanche, pour des tensions de drain supérieures à 330 V, le courant de drain croît rapidement.

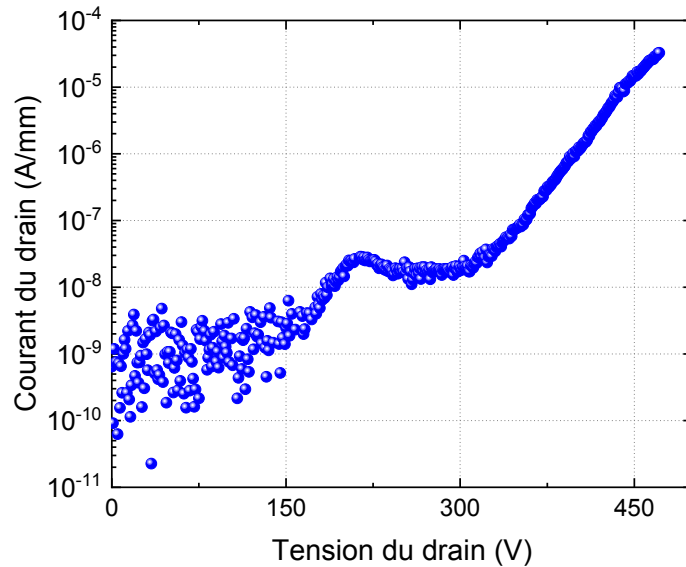


Figure IV-5: Courant de drain mesuré (I_{DS} - V_{DS}) pour un claquage en canal pincé du MOS-HEMT AlGaIn/GaN.

La figure IV-6 présente la tension de claquage mesurée pour des MOS-HEMT avec différentes longueurs grille-drain :

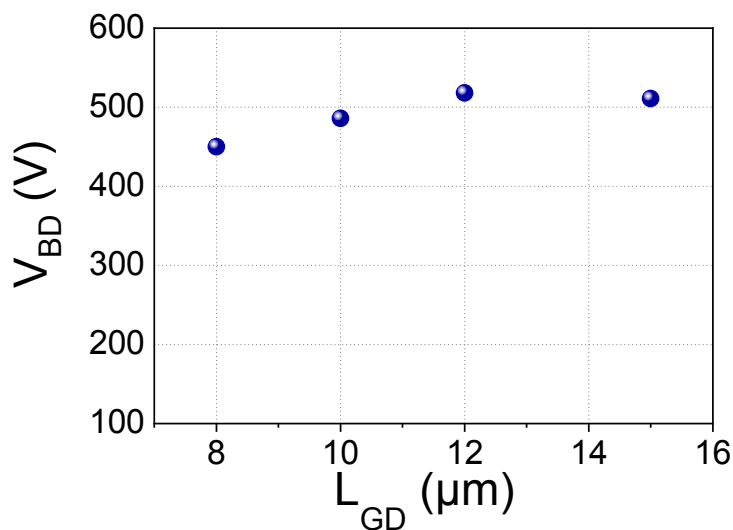


Figure IV-6: Tensions de claquage en fonction de la longueur grille – drain

7. Discussions des résultats

Avec une couche tampon (buffer) de faible résistance, on s'attend à ce que les électrons traversent la couche tampon de la source au drain, en considérant également que la source et le substrat sont tous les deux mis à la terre. Dans ce cas, la tension de claquage est tout simplement proportionnelle à la distance source-drain, chose qu'on n'avait pas remarquée dans les transistors fabriqués. La tension de claquage mesurée est quasiment la même, pour des transistors avec des distances source-drain plus petites (figure IV-6). Ceci qui écarte l'hypothèse que le chemin de fuite déterminant la rupture se produit entre les contacts de source et de drain à travers la couche tampon. Ceci dit, que les électrons sont injectés de la source à l'interface AlN/Si, puis remontent vers le drain. Ce résultat a été aussi reporté dans la bibliographie par certains auteurs [8, 9, 10]. L'élimination localisée du substrat de silicium et/ou le transfert de couche ont été proposés pour améliorer la tension de claquage (V_{BD}) pour le HEMT GaN sur Si [10]. Après élimination du Si, une tension V_{BD} supérieure à 1100 V a été mesurée dans les dispositifs avec une distance grille-drain (L_{GD}) de 15 μm comparée à des valeurs proches de 300 V pour les dispositifs avec substrat de Si.

Lorsque les dislocations et le gaz d'électrons bidimensionnel (2DEG) sont entrecroisés, ils peuvent piéger les charges et agir comme des sites de transport de charges verticaux pouvant entraîner une fuite pour une tension de drain inférieure à 330 V. Pour des tensions de drain proches de la valeur de claquage, les électrons deviennent des porteurs hautement énergétiques (électrons chauds) et sont injectés de la source vers le substrat puis piégés à l'interface AlN/Si coté substrat. En raison de la grande différence de tension entre le contact de drain et le substrat, une injection importante d'électrons peut avoir lieu du substrat dans la couche tampon (par émission thermoïonique, tunnel et saut de piège en piège). Ces électrons sont ensuite collectés par l'électrode de drain.

La formation d'une couche conductrice à l'interface Si/III-Nitride donnant lieu à des fuites dans les dispositifs GaN sur Si a été mentionnée dans de nombreuses études [11, 8]. Outre l'augmentation des pertes (effets de charge parasite pour les dispositifs RF), la présence d'un tel canal parallèle et la fuite verticale ont également été pointés du doigt dans le claquage prématuré des dispositifs GaN sur Si [11, 8].

8. Amélioration du claquage par une couche intercalaire 3C-SiC

Des approches antérieures pour améliorer la tension de claquage avaient porté sur l'amélioration des conditions de croissance de la couche tampon (en particulier l'élimination de la contrainte épitaxiale) afin de réduire les impuretés d'oxygène et les dislocations identifiées comme responsables des chemins de fuite [12]. D'autres groupes ont travaillé sur l'augmentation de l'épaisseur de la couche tampon pour augmenter le claquage [13].

Dans notre étude nous proposons une autre approche pour améliorer la tension de claquage. Elle consiste en l'utilisation d'une couche intermédiaire (intercalaire) entre la couche de nucléation d'AlN et le substrat de silicium dans le but de réduire les états d'interface entre les deux couches. Ceci permet d'améliorer l'interface et d'éliminer le chemin conducteur.

Le carbure de silicium cubique (3C-SiC) présente un bon candidat pour cette alternative puisqu'il présente un faible écart de paramètre de maille avec le GaN ainsi qu'une déformation thermoélastique réduite après la croissance de la structure à base de GaN [14].

9. Caractérisation de la couche 3C-SiC

La figure IV-7 présente les spectres Raman obtenus sur la couche 3C-SiC de $2.2 \mu\text{m}$ d'épaisseur sur le silicium (111) avec une excitation laser de longueur d'onde de 266 nm. Les spectres Raman de 3C-SiC, ont montré deux pics intenses ; le premier est situé à 972 cm^{-1} qui est attribué à la réponse phononique optique longitudinale (LO) et le deuxième à 795 cm^{-1} , attribué à la réponse phononique optique transversale (TO).

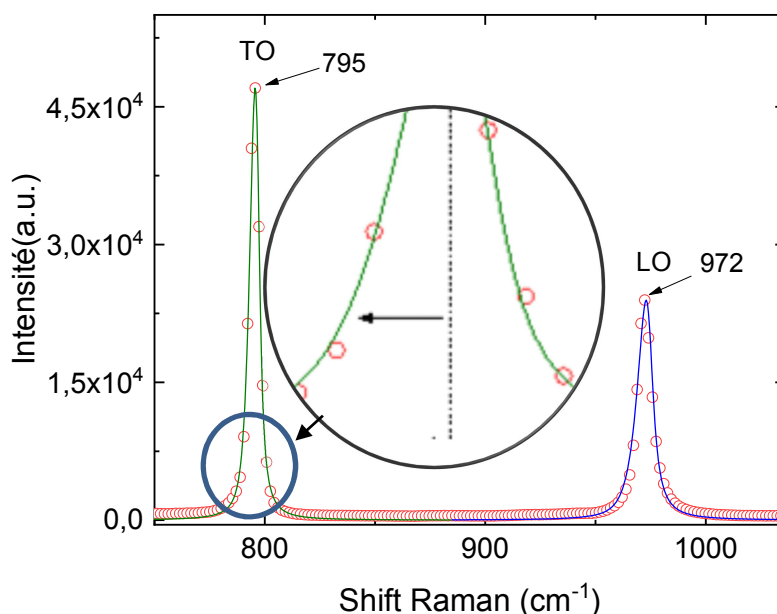


Figure IV-7: Spectre Raman expérimental de la couche 3C-SiC cultivée sur substrat Si avec bandes TO et LO identifiées. Spectre Raman calculé pour des tailles de nanocristaux 3C-SiC de 85 nm.

Les règles de sélection de la diffusion Raman dans cette couche sont les mêmes que celles observées par Mukaida [15] et Feng [16] et al. Une légère asymétrie du pic TO à 796 cm^{-1} du côté des basses fréquences est courante. Les pics de fortes intensités et l'épaulement de très faibles intensités, 747 à 786 cm^{-1} près de la bande TO, indiquent la très bonne qualité cristalline de cette couche 3C-SiC avec une présence de nanocristallites à l'interface qui génèrent un faible désordre structural. Ce désordre provoque une relaxation progressive de $q = 0$ dans la règle de sélection (voir l'annexe C), et les phonons optiques à $q \neq 0$ contribuent également à la diffusion Raman selon le modèle de confinement des phonons proposé par Campbell et Fauchet [17]. Cela conduit à une rétrogradation et à un élargissement des spectres Raman. Dans notre cas, la forme de la raie du spectre Raman est calculée par [18] :

$$I(\omega) \approx \int_0^1 \frac{\exp\left(\frac{qS}{4\pi}\right)^2 4\pi q^2}{[\omega - \omega(q)]^2 + \left(\frac{\Gamma}{2}\right)^2} dq \quad (1)$$

Où :

Γ : est la largeur à mi-hauteur (FWHM) du pic Raman du phonon TO (LO) du 3C-SiC cristallin massif ;

q : est égal à $2\pi/a$ et a est la constante de réseau 3C-SiC et le paramètre ;

$\omega(q)$: décrit la dispersion du phonon dans la zone Brillouin suivant la direction (111).

Ainsi, compte tenu de la relation de dispersion des phonons optiques LO et TO décrite par :

$$\omega_{LO}(q) = 974.79 + 22.53 (q/q_{max}) - 1168.98 (q/q_{max})^2 + 3218.12 (q/q_{max})^3 - 9792.95 (q/q_{max})^4 + 11646.89 (q/q_{max})^5 \quad (2)$$

$$\omega_{TO}(q) = 797.64 - 15.30 (q/q_{max}) - 407.73 (q/q_{max})^2 + 549.602 (q/q_{max})^3 \quad (3)$$

Les pics Raman obtenus, sont relativement larges, asymétriques et légèrement décalés vers les basses fréquences. Nous obtenons un très bon accord avec la mesure expérimentale pour une taille de nano-cristallite d'environ 85 nm. Grace à la structure cubique du Si, le SiC épouse la même structure cristalline pour former un poly-type 3C-SiC. Ceci conduit à une interface meilleure comparée à celles des matériaux III-N (AlN GaN ou AlGaN) hexagonales. Il est important de noter que l'épaule de très faible intensité, entre 747 à 786 cm^{-1} près de la bande TO, peut indiquer aussi la présence d'une très petite quantité d'un polytype SiC hexagonal dans cette couche 3C-SiC. La présence de 6H-SiC ou 4H-SiC constituent des sites de nucléation idéaux pour la croissance de matériaux hexagonaux III-V.

Afin de caractériser l'interface 3C-SiC/Si, les pertes de transmission en fonction de la fréquence jusqu'à 90 GHz sur la structure 3C-SiC/Si sont mesurées par des mesures en guide d'onde coplanaire (CPW). Les dimensions du guide d'onde ont été conçues pour obtenir des impédances caractéristiques de 50 Ω . La figure IV-8 montre une perte de transmission de 0.07 dB/mm et 0.33 dB/mm à 40 GHz et 77 GHz respectivement.

Ces résultats sont comparables voire meilleurs que ceux obtenus pour les CPW mis en œuvre sur des substrats GaN, silicium hautement résistif (HR-Si) ou Diamant. La couche 3C-SiC est cubique et aide à réduire les contraintes à l'interface avec le substrat de silicium en raison de faible désaccord de maille et d'une légère différence des coefficients thermiques. Il est bien connu que les défauts de volume et de surface du substrat dégradent les performances en termes de pertes de propagation [8, 19]. Xiao et al. [20] ont soulevé une perte de ligne de transmission de 3 dB/mm uniquement à 2 GHz pour un substrat GaN sur Si. Cette perte élevée est attribuée à la couche parasite conductrice à l'interface nucléation/substrat Si, comme on l'a remarqué dans les paragraphes précédents. Avec un guide CPW fabriqué sur des substrats GaN sur Si, une perte de 0,35 dB/mm a été signalée par Marti et al. [21] Cao et al. [22] ont signalé une perte de 0.27 dB/mm à 20 GHz avec une structure similaire. Les propriétés des guides CPWs réalisés sur divers substrats de diamant ont été rapportées par Defrance et al. [19]. Les meilleures caractéristiques de guide CPW présentent des pertes d'environ 0.15 dB/mm à 10 GHz et 0.25 dB/mm à 40 GHz.

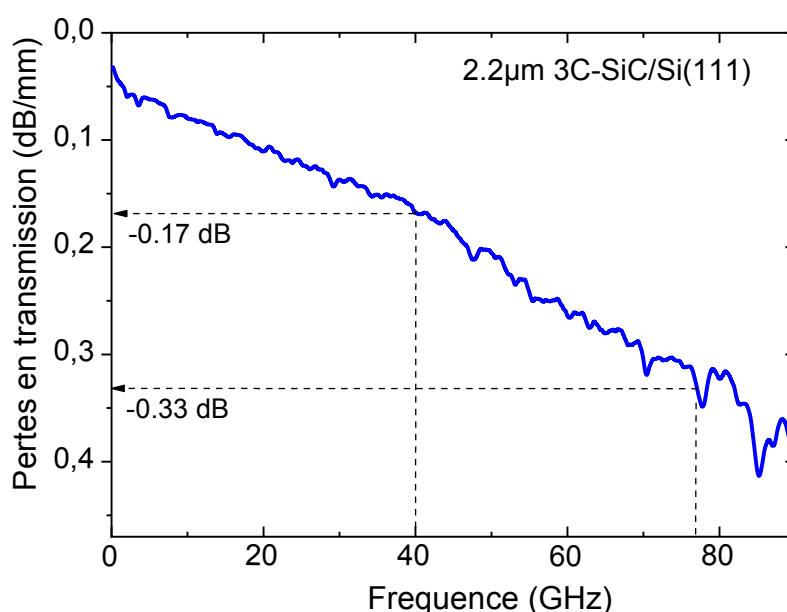


Figure IV-8: Courbe des pertes de transmission par rapport à la fréquence dans la couche 3C-SiC sur Si(111).

Le résultat obtenu de la caractéristique CPW confirme que pour minimiser l'atténuation due à l'interface nucléation/substrat Si, il est nécessaire de supprimer, ou d'au moins isoler le chemin des électrons mobiles sous la couche de nucléation. En résumé, cette caractéristique CPW montre que l'introduction d'une couche 3C-SiC permet de réduire ce chemin de fuite. Cette couche peut non seulement agir comme une couche de suppression de pertes RF mais aussi améliorer l'interface avec le substrat. Dans ce qui suit nous allons voir l'impact de l'introduction de cette couche sur la tension de claquage des transistors HEMTs.

10. Mesure de claquage du MOS-HEMT/SiC/Si:

Les caractérisations électriques ont été réalisées à l'aide d'un analyseur Keithley 4200SCS. Les mesures de la tension de claquage ont été effectuées à l'aide d'un analyseur de dispositif d'alimentation Keysight B1505A. Le dispositif présente un fonctionnement Normalement ON identique à celui présenté précédemment. La figure IV-9 montre une comparaison des tensions de claquage du HEMT AlGaIn/GaN sous pincement avec et sans couche de 3C-SiC. Le courant de fuite commence à augmenter à une polarisation de 300 V entre la source et le drain, il atteint 1 $\mu\text{A}/\text{mm}$ à une tension de 395 V pour un dispositif sans 3C-SiC, tandis qu'il atteint la même valeur pour une tension de polarisation plus élevée, de l'ordre de 1530 V, pour un dispositif avec la couche 3C-SiC.

Les caractéristiques de claquage des structures avec la couche intercalaire du 3C-SiC confirment l'amélioration du claquage grâce à l'amélioration de l'interface avec le substrat et l'élimination du chemin de fuite à cette interface. Le claquage à l'état bloqué augmente

jusqu'à 1530 V (pour un courant de $1\mu\text{A}/\text{mm}$), ce qui est trois (3) fois supérieur à celui du MOS-HEMT conventionnel (sans 3C-SiC).

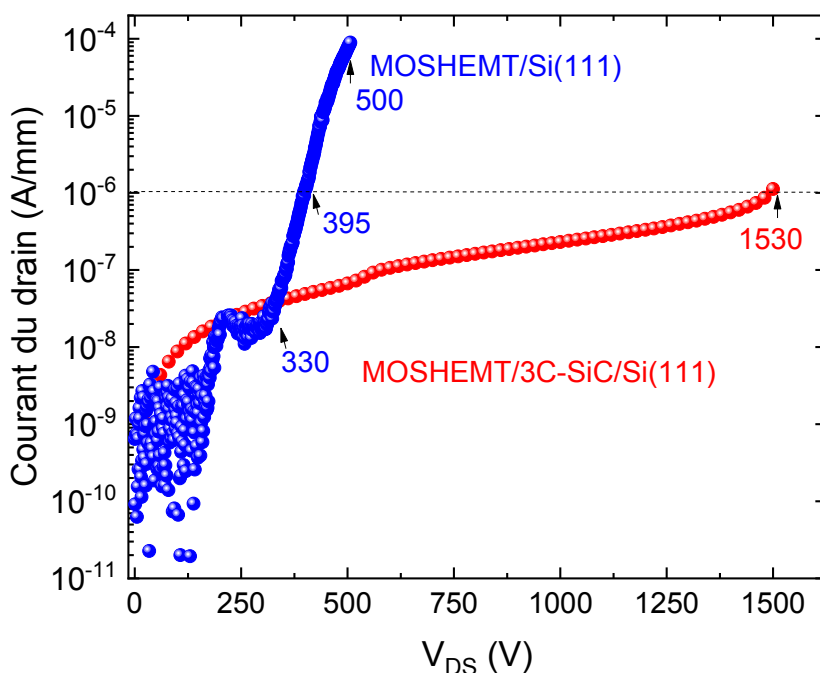


Figure IV- 9: Tension de claquage du MOS-HEMT mesurée et simulée avec et sans couche intercalaire de 3C-SiC.

Il est évident que l'utilisation de minces couches et peu coûteuses de 3C-SiC, par croissance épitaxiale sur des substrats de Si, est l'une des voies possibles pour surmonter le problème de l'interface avec le substrat. Il est important aussi de noter que pour une application de puissance, la conduction thermique et la dissipation thermique sont des paramètres importants. L'utilisation d'une couche de bonne conductivité thermique telle que le 3C-SiC est susceptible d'offrir d'excellentes caractéristiques de dispositif requises pour des applications de puissance en commutation.

Cependant, la présence de nano ou de poly cristaux à l'interface avec le substrat de silicium va sans doute dégrader la dissipation thermique en comparant avec d'autres substrats de meilleures caractéristiques thermique tel que le SiC ou le diamant, mais contrepartie, plus onéreux. Une optimisation de la qualité cristalline de la couche 3C-SiC déposée doit être faite afin d'obtenir une bonne conductivité thermique.

11. Conclusion

Dans ce chapitre nous avons mis en exergue l'importance du pré-conditionnement de la surface du substrat Si pour la synthèse des composants à base de GaN, en particulier les transistors MOS-HEMTs. Nous avons présenté les caractéristiques électriques en régime statique et de claquage du transistor MOS-HEMT AlGaIn/GaN. L'influence du canal parasite, à l'interface couche de nucléation substrat (AlN/Si), sur les performances en haute tension dans les dispositifs GaN sur Si a été discutée. Les mécanismes intervenants dans la formation du canal parasite sont multiples et complexes. Compte tenu de la diversité des facteurs énumérés dans la formation de ce canal conducteur au niveau de l'interface des composés III-N/Si, il est raisonnable de conclure que le mécanisme de formation des canaux parasites est fortement lié au substrat Si de départ, aux traitements du substrat avant la croissance, aux conditions de croissance et à l'état du matériel utilisé pour la croissance hétéro-épitaxiale. Les modifications apportées à l'un de ces facteurs peuvent favoriser une configuration interfaciale particulière qui à son tour détermine l'origine du canal parasite.

Nous avons proposé, par la suite, une alternative pour améliorer la tension de claquage. L'utilisation d'une couche intercalaire à l'interface III-N/Si telle que le 3C-SiC est susceptible d'offrir d'excellentes caractéristiques requises pour les applications de puissance en commutation. Nous avons montré que la présence de la couche intercalaire de 3C-SiC peut réduire le courant de fuite à travers l'interface avec le substrat, ce qui conduit à une tension de claquage beaucoup plus élevée. L'utilisation d'une très fine couche de 3C-SiC (2.2 μm), plutôt que d'un substrat SiC entier, réduit considérablement le coût.

Bibliographie

- [1] J. Wu, *J. Vac. Sci. Technol. A*, 37 (6), 0734-2101 (2019).
- [2] A. Asgari, *J. Appl. Phys.* 95 (3), 1185 (2004).
- [3] C. Rongming, *Appl. Phys. Lett.* 116(9), 090502 (2020).
- [4] Y. Cordier, F. Semond, J. Massies, M. Leroux, P. Lorenzini, C. Chaix, *J. Crystal Growth*, 301/302, 434-436 (2007).
- [5] H. Marchand, L. Zhao, N. Zhang, B. Moran, R. Coffie, U. K. Mishra, J. S. Speck, S. P. Den Baars and J. A. Freitas, *J. Appl. Phys.* 89, 7846 (2001).
- [6] E. Simoen, D. Visalli, M. Van Hove, M. Leys, and G. Borghs, *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 44, 475104 (2011).
- [7] Ahmed Chakroun, Hassan Maher, Elias Al Alam, Abdelkader Souifi, Vincent Aimez, Richard Arès, and Abdelatif Jaouad, *IEEE Electron Device Letters* 35 (3), 318 (2014).
- [8] T. T. Luong, F. Lumbantoruan, Y. Y. Chen, Y. T. Ho, Y. C. Weng, Y. C. Lin, S. Chang and E. Y. Chang, *Physica status solidi (a)* 214 (7), 1600944 (2017).
- [9] H. Yacoub, D. Fahle, M. Finken, H. Hahn, C. Blumberg, W. Prost, H. Kalisch, M. Heuken and A. Vescan, *Semiconductor Science and Technology* 29 (11), 115012 (2014).
- [10] Puneet Srivastava, Jo Das, Domenica Visalli, Joff Derluyn, Marleen Van Hove, Pawel E Malinowski, Denis Marcon, Karen Geens, Kai Cheng, Stefan Degroote, Maarten Leys, Marianne Germain, Stefaan Decoutere, Robert P Mertens, Gustaaf Borghs, *IEEE Electron Device Letters*, 31(8), 851-853 (2010).
- [11] Calleja, E., Sanchez-Garcia, M. A., Basak, D., Sanchez, F. J., Calle, F., Youinou, P., Munoz, E., Serrano, J. J., Blanco, J. M., Villar, C., Laine, T., Oila, J., Saarinen, K., Hautojärvi, P., Molloy, C. H., & Somerford, D. J., *Phys. Rev. B*, 58, 1550 (1998).
- [12] F. S. Choi, J. Griffiths, C. Ren, K. Lee, Z. Zaidi, P. Houston, I. Guiney, C. J. Humphreys, R. A. Oliver, and D. J. Wallis, *J. Appl. Phys.* 124, 055702 (2018).
- [13] Iruthayaraj Beaula Rowena, Susai Lawrence Selvaraj and Takashi Egawa, *IEEE Electron Device Lett.* 32, 1534 (2011).
- [14] D. J. As, S. Potthast, J. Fernandez, K. Lischka, H. Nagasawa and M. Abe., *Microelectron. Eng.*, 83, 34-36 (2006).
- [15] H. Mukaida, H. Okumura, J. H. Lee, H. Daimon, E. Sakuma, S. Misawa, K. Endo, and S. Yoshida, *Journal of Applied Physics* 62 (1), 254 (1987).

- [16] Z. C. Feng, W. J. Choyke, and J. A. Powell, *Journal of Applied Physics* 64 (12), 6827 (1988).
- [17] I. H. Campbell and P. M. Fauchet, *Solid State Commun.* 58, 739 (1986).
- [18] A. Soltani, Croissance de films minces de nitrure de bore hexagonal et cubique par dépôt chimique en phase vapeur assisté par plasma : caractérisations optiques et électriques, Thèse de l'université de Metz (2001).
- [19] N. Defrance, J. C. Gerbedoen, A. Soltani, J. C. De Jaeger, and J. Morse, *Diamond and Related Materials* 18 (5), 881 (2009).
- [20] Dongping Xiao, Dominique Schreurs, W. De Raedt, J. Derluyn, M. Germain, B. Nauwelaers, and G. Borghs, *Solid-State Electronics* 53 (2), 185 (2009).
- [21] Diego Marti, Mathias Vetter, Andreas R. Alt, Hansruedi Benedickter, and C. R. Bolognesi, *Applied Physics Express* 3 (12), 124101 (2010).
- [22] Lina Cao, Chien-Fong Lo, Hugues Marchand, Wayne Johnson, and Patrick Fay, presented at the 2017 IEEE Compound Semiconductor Integrated Circuit Symposium (CSICS), (2017).

Chapitre V

Chapitre V : Modélisation et simulation de l'interface de Nitrure d'élément III/Substrat Si

1. Introduction.....	96
2. Modèles et paramètres de simulation	96
3. Caractéristiques courant-tension du MOS-HEMT AlGaIn/GaN	100
4. Modélisation du claquage du MOS-HEMT sur Si.....	101
5. Effet de la nitruration du substrat Si sur la tension de claquage	105
6. Simulation du claquage du MOS-HEMT sur 3C-SiC/Si	107
7. Conclusion	110
Bibliographie.....	111

1. Introduction

Dans cette dernière partie de la thèse, notre étude porte sur le développement et la compréhension, par simulation numérique, des mécanismes de claquage observés dans les dispositifs HEMTs à base de nitrure de gallium (GaN). Les propriétés technologiques et structurelles des dispositifs HEMTs simulés, sont présentées en détail dans le chapitre quatre. Les structures d'étude sont élaborées au niveau du Laboratoire Nanotechnologies et Nanosystèmes (LN2), à l'Institut Interdisciplinaire d'Innovation Technologique (3iT) de l'université de Sherbrooke au Canada.

Un programme sous ATLAS-SILVACO est développé avec des modèles appropriés pour la simulation du phénomène de claquage des dispositifs HEMTs à base de matériaux III-N. De nombreux travaux ont été publiés sur la simulation des HEMT GaN avec des simulateurs TCAD [1-4]. La plupart de ces études se sont concentrées sur la zone active supérieure du transistor alors que peu d'études par simulation se sont consacrées à l'influence du substrat et des couches de nucléation sur le claquage de ces transistors. G. Longobardi et al. [5] propose une approche TCAD pour simuler la non-idéalité de la couche de nucléation AlN et de l'interface AlN/Si. X.Li et al. [6] étudie le transport des porteurs à travers la couche d'AlN à partir de différents types de dopage des substrats Si(111). Dans ce travail, nous étudions à l'aide de simulations au moyen du logiciel ATLAS-SILVACO le phénomène de claquage prématuré des dispositifs HEMTs à base de GaN.

La première étape de notre étude consiste en une simulation bidimensionnelle (2D) des caractéristiques de transfert et de sorties des transistors HEMTs à base de GaN. Les simulations sont effectuées à la température ambiante. Les modèles physiques adoptés dans les simulations sont choisis pour décrire les phénomènes de transport des porteurs dans la couche active GaN. Cette dernière correspond à la couche dans laquelle circule le gaz d'électrons bidimensionnel (2DEG) qui détermine en grande partie les propriétés électroniques du dispositif étudié.

La deuxième étape est consacrée à la présentation des résultats de simulations, du phénomène de claquage, obtenus pour différentes structures HEMTs avec et sans couches intercalaires à l'interface du substrat. Dans cette partie les couches actives intervenant dans le transport des porteurs sont les couches de transitions. En fin une interprétation physique des résultats trouvés pour les deux types de structures et une comparaison avec des résultats expérimentaux seront présentées.

2. Modèles et paramètres de simulation

Avant de passer à la modélisation de l'interface pour les deux traitements, le choix des paramètres physiques joue un rôle très important dans le comportement du MOS-HEMT, ainsi

les paramètres tels que la mobilité, la concentration et le niveau des pièges etc. définissent le comportement électrique du composant.

Les dispositifs MOS-HEMT AlGa_xN/GaN étudiés ont pour dimensions: une longueur de grille de 1.5 μm, une plaque de champ gamma de 1 μm, une distance source-drain (L_{GS}) de 2 μm et une distance grille-drain (L_{GD}) de 15 μm. La structure d'étude est illustrée dans la figure V-1.

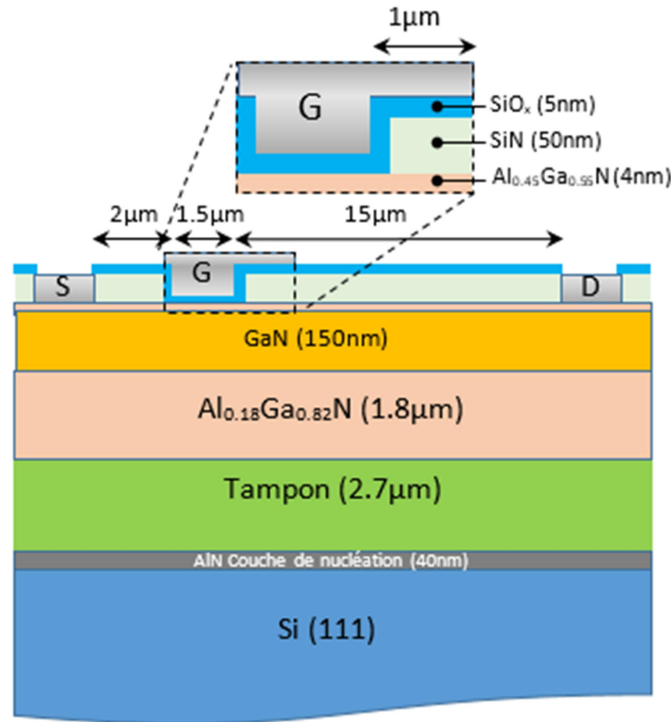


Figure V-1: Vue de coupe illustrant les dimensions du transistor MOS-HEMT.

Le dispositif est simulé à l'aide du logiciel ATLAS-SILVACO. Les équations de Poisson et de continuité, y compris les termes des niveaux profonds ionisés pour les électrons et les trous et un modèle de dérive-diffusion sont utilisés pour résoudre les équations de transport. Les simulations incluent le modèle de Shockley-Read-Hall, la recombinaison Auger et les durées de vie des porteurs. La vitesse de saturation des électrons et le modèle de mobilité sont pris selon la théorie de Farahmand [7]. Le modèle à faible champ dépendant de la teneur en Al d'Al_xGa_{1-x}N et de la température du matériau est défini par :

$$\mu_n(T, N) = m1 \cdot (T/300)^b + \frac{(m1 - m2) \cdot (T/300)^d}{1 + \left(\frac{N}{Ncr \cdot (T/300)^g} \right)^{a \cdot (T/300)^E}} \quad (1)$$

Avec : T, m1, m2 et N représentent la température du réseau, la mobilité électronique minimale, la mobilité maximale et le dopage total respectivement. Les coefficients a, b, d, g, E et Ncr sont fixés en se basant sur les calculs avec la méthode de Monte Carlo [7].

Pour la mobilité de champ élevé, un modèle de mobilité dépendant du champ spécifique du nitrure a été utilisé [7] comme décrit par l'équation suivante :

$$\mu_n = \frac{\mu_n(T, N) + V_{sat} \cdot \frac{E^{N1-1}}{E_{cn}^{N1}}}{1 + a_n \cdot \left(\frac{E}{E_{cn}}\right)^{N2} + \left(\frac{E}{E_{cn}}\right)^{N1}} \quad (2)$$

Avec :

- $\mu_n(T, N)$: La mobilité en bas champs exprimée par l'équation (1)
- E : le champ électrique appliqué
- Vsat : la vitesse de saturation
- Ecn : champ critique.

Les autres coefficients a_n , $N1$, $N2$, sont déterminés par ajustement des calculs avec la méthode de Monte Carlo [7].

Des charges de polarisation spontanées et piézoélectriques de 10^{13} cm^{-2} sont fixées à l'interface barrière/canal, et les états de surface sont inclus à travers une densité surfacique de pièges donneurs fixe de $2.3 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, distribués d'une manière uniforme à l'interface AlGaIn/Oxyde.

Dans les dispositifs de puissance à base de GaN, le carbone (C) est largement adopté comme dopage de compensation pour supprimer la conductivité involontaire dans la couche tampon (buffer) de GaN et les couches de transition sous-jacentes au canal MOS-HEMT. En outre, il est utilisé pour éviter les claquages prématurés entre source et drain sous la grille entre couche canal et couche tampon (appelé *punch-through*). Le dopant carbone est modélisé au moyen de pièges de type accepteurs et donneurs associés aux états C_N et C_{Ga} respectivement [8]. Pour le silicium de forte résistivité, nous utilisons un substrat avec un dopage uniforme de type p de concentration de dopants de $1.47 \times 10^{12} \text{ cm}^{-3}$. Le tableau V.1 regroupe les principaux paramètres physiques utilisés dans les simulations.

Tableau V.1: Paramètres physiques utilisés pour la simulation.

Mécanisme Physique	Modèle	GaN	AlGaIn(barrière arrière+ tampon)	AlN
Dimensions	-	150 nm	1.8+2.7µm	40 nm
Mobilité bas champ	Farahmand	m1=295 (cm ² .V ⁻¹ s ⁻¹) m2=1460 (cm ² .V ⁻¹ s ⁻¹) a=0.66 b=-1.02 d=-3.43 g=3.78 E=0.86 Ncr=10 ¹⁷	m1=132 (cm ² .V ⁻¹ s ⁻¹) m2=306 (cm ² .V ⁻¹ s ⁻¹) a=0.29 b=-1.33 d=-1.75 g=6.02 E=0.41 Ncr=10 ¹⁷	m1=297 (cm ² .V ⁻¹ s ⁻¹) m2=683 (cm ² .V ⁻¹ s ⁻¹) a=1.16 b=-1.82 d=-3.43 g=3.78 E=0.86 Ncr=10 ¹⁷
Mobilité Haut champ	Farahmand	Vsat=1.9 10 ⁷ (cm/S) Ecn=220 (kV/cm) N1=7.2044 N2=0.7857 an=6.1673	Vsat=1.27 10 ⁷ (cm/S) Ecn=365 (kV/cm) N1=5.3193 N2=1.0396 an=3.2332	Vsat=2.167 10 ⁷ cm/S) Ecn=447 (kV/cm) N1=17.368 N2=0.8554 an=8.7253
Dopage non-intentionnel	Niveau énergétique du défaut (eV)/ Densité (cm ⁻³)	E2 (Ec-0.4)/1×10 ¹⁵ E4 (Ec-0.74)/ 3.37×10 ¹⁵ H1 (Ev+0.86)/ 7.5×10 ¹⁵	E2 (Ec-0.4)/ 1×10 ¹⁵ E4 (Ec-0.74)/ 3.37×10 ¹⁵ H1 (Ev+0.86)/ 7.5×10 ¹⁵	E1 (Ec-0.6)/ 5×10 ¹⁶

Nous avons considéré, pour toutes les couches tampons de GaN, une répartition uniforme des pièges dans le volume avec une concentration de $3.37 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ et de $7.5 \times$

10^{15} cm^{-3} pour les pièges donneurs et accepteurs, respectivement. Ils correspondent aux défauts E2 et H1 associés au carbone [8-10]. De plus, le niveau piège E4 est utilisé dans la simulation correspond à un double niveau donneur profond situé à environ 0.74 eV en dessous de la bande de conduction, comme décrit par Ghazi et al. [8]. Ce dernier, est attribué à des défauts ponctuels natifs dans les films de GaN. Des sections efficaces de capture d'électrons et de trous de $1 \times 10^{-15} \text{ cm}^2$ sont utilisées pour tous les niveaux pièges, ce qui est en bon accord avec d'autres mesures rapportées dans la littérature [10].

Une charge de polarisation positive, égale à $5 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$, est utilisée à l'interface AlN/Si et l'accumulation d'électrons qui en résulte est générée au niveau de la même interface. Pour modéliser les mécanismes de transport, le modèle tunnel assisté par les pièges (TAT pour Traps Assisted Tunneling) [11] à travers la couche d'AlN. Le modèle TAT est utilisé avec une densité de de pièges accepteurs de $5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$, uniformément répartis dans la couche d'AlN, et positionnés à un écart d'énergie de 0,6 eV en dessous de la bande de conduction, d'après les travaux de G. Longobardi et al. [5]. L'ionisation par impact est considérée à l'origine de la génération de porteurs à champ élevé [12]. Le taux de génération locale des paires électron-trou est donné par :

$$G = \frac{1}{q} \alpha_n |J_n| + \frac{1}{q} \alpha_p |J_p| \quad (3)$$

Où J_n et J_p sont les densités de courant d'électrons et de trous, α_n et α_p sont des taux d'ionisation pour les électrons et les trous, respectivement, exprimés comme suit :

$$\alpha_n = A_n \exp\left(\frac{-B_n}{|E|}\right) \quad (4)$$

$$\alpha_p = A_p \exp\left(\frac{-B_p}{|E|}\right) \quad (5)$$

Où E est le champ électrique. A_n , B_n , A_p et B_p sont exprimés (en $\text{V} \cdot \text{cm}^{-1}$) par [12, 13] :

$$B_n = -3.55 \times 10^7 \cdot x^2 + 1.4.61 \times 10^7 \cdot x + 2.39 \times 10^7 \quad (6)$$

$$A_n = 1.84 \times 10^7 \cdot x^2 + 1.66 \times 10^7 \cdot x + 1.14 \times 10^7 \quad (7)$$

$$B_p = 3.4 \times 10^7 \quad (8)$$

$$A_p = 2.9 \times 10^8 \quad (9)$$

Où x est la teneur en Al dans l' $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$.

3. Caractéristiques courant-tension du MOS-HEMT AlGaIn/GaN

Les dispositifs MOS-HEMT AlGaIn/GaN normalement activés sont réalisés sur un substrat HEMT commercial. Les transistors possèdent les dimensions suivantes : une longueur de grille de $1.5 \mu\text{m}$, une plaque de champ gamma de $1 \mu\text{m}$, une distance source-drain (L_{GS}) de $2 \mu\text{m}$ et une distance grille-drain (L_{GD}) de $15 \mu\text{m}$. La structure épitaxiée utilisée dans cette étude est illustrée dans la figure V-1.

Dans une première étape, des mesures du courant continu (DC) ont été effectuées sur le dispositif avant de mesurer la tension de claquage. Afin de pouvoir comparer nos résultats obtenus avec celle de la littérature, les caractéristiques électriques sont représentées par unité de largeur du transistor (W), comme il est communément utilisé dans la bibliographie. Un courant I_{DS} maximal supérieur à 570 mA/mm et obtenu pour une valeur de tension V_{GS} de 3 V . Les caractéristiques de courant de drain (I_{DS}) en fonction de la tension drain-source (V_{DS}) pour une tension grille-source (V_{GS}) variant de 0 à $+3 \text{ V}$ obtenues sur le dispositif sont illustrées par la figure V-2. On remarque sur cette figure que l'appareil présente une résistance à l'état passant (R_{ON}) de $7,3 \Omega \cdot \text{mm}$. D'après les courbes mesurées dans la plage de tension V_{DS} ($0-10\text{V}$), l'effet kink, n'apparaît pas dans le dispositif élaboré ; ceci signifie que les défauts de surface ont un très faible effet dans les régions actives (canal et son voisinage). Les courbes des caractéristiques de transfert expérimentales sont illustrées par la figure V-3.

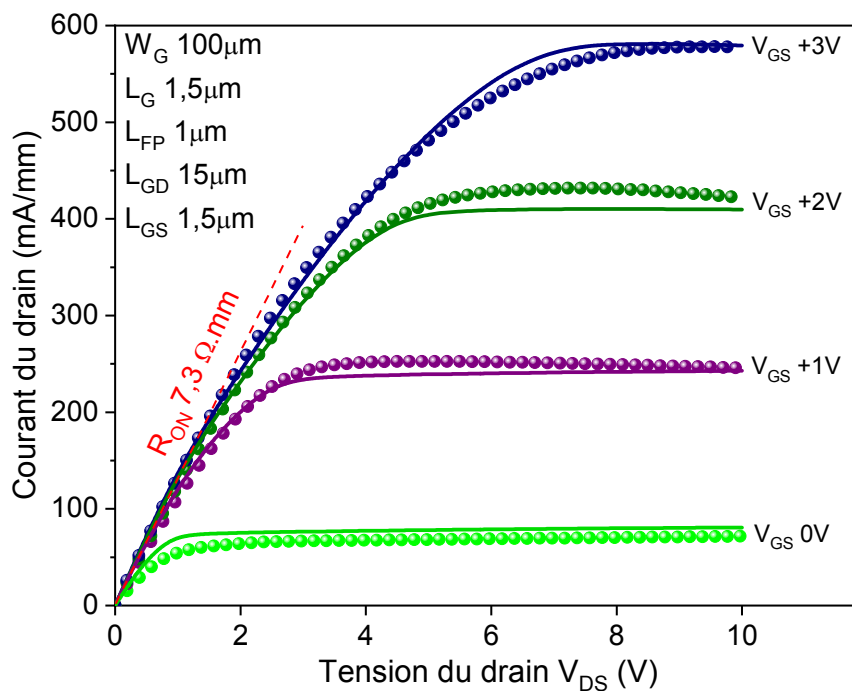


Figure V-2: Caractéristiques de sortie expérimentales (points) et simulées (lignes continues) du dispositif MOS-HEMT pour V_{GS} variant de 0 à $+3 \text{ V}$.

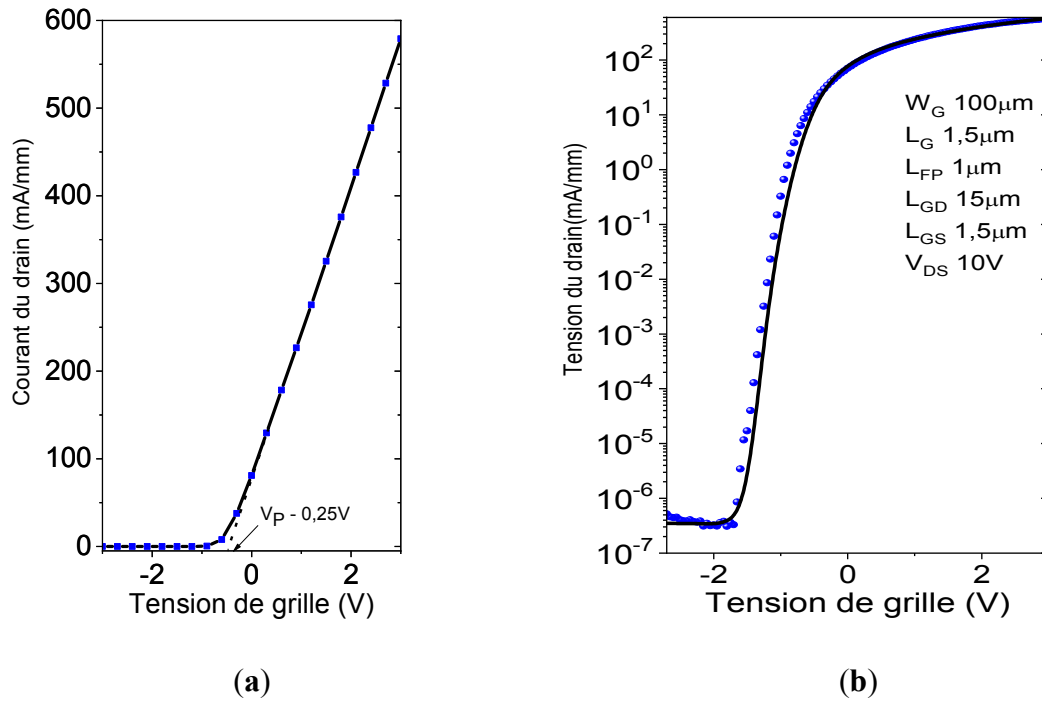


Figure V-3: Caractéristiques de transfert expérimentale (points) et simulée (ligne continue) (I_{DS} - V_{GS}) du dispositif AlGaIn/GaN MOS-HEMT à l'échelle linéaire et semi-logarithmique.

Un très bon accord entre la caractéristique de transfert expérimentale et simulée est obtenu. Le dispositif présente une tension de pincement de -0.25 V avec un courant de fuite à l'état bloqué de l'ordre de 3×10^{-10} A/mm. La tension de seuil dans ce transistor est négative, c'est à dire que pour une tension nulle le transistor est passant.

4. Modélisation du claquage du MOS-HEMT sur Si

Afin de simuler la tension de claquage (V_{BD}) à l'état bloqué, le dispositif est d'abord polarisé par pincement. Dans ce cas, la tension grille-source (V_{GS}) est égale à -8V, qui est une valeur inférieure à la tension de seuil V_T . Nous définissons la tension de claquage V_{BD} comme la valeur de la tension lorsque le courant atteint la valeur limite de la compliance (I_{cc}) expérimentale fixée dans l'instrument de mesures.

La tension de claquage obtenue est d'environ 500 V d'après la figure V-4. Pour des tensions de drain inférieures à 330 V, le courant provenant de substrat domine le courant de drain. Le courant de la grille n'est pas le déclencheur du claquage, puisqu'une augmentation rapide du courant de la grille n'a pas été observée lors de la mesure de claquage. En revanche, pour des tensions de drain élevées et supérieures à 330 V, le courant de drain augmente rapidement, il suit l'évolution du courant de la source, alors que le courant de substrat se stabilise pratiquement à la valeur obtenue pour la tension de 330 V. La première étape de claquage se produit avec l'augmentation des courants de drain et de source à 400V. Par conséquent, le courant de fuite source-drain (I_{DS}) est considéré comme le déclencheur de claquage.

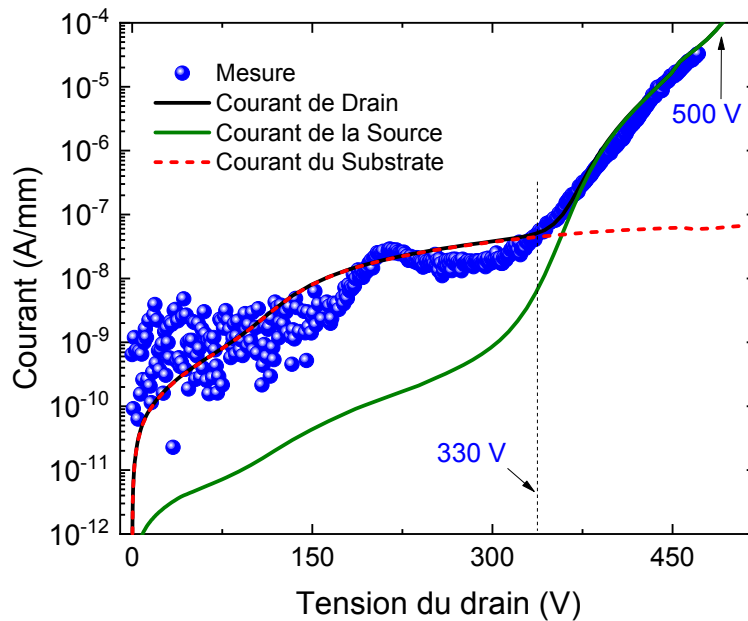


Figure V-4: Caractéristiques du claquage (points) et simulée (lignes) du transistor AlGaN / GaN MOS-HEMT.

Avec une faible résistance buffer, on s'attend à ce que les électrons traversent simplement de la source au drain, en considérant également que la source et le substrat sont tous les deux mis à la masse. Dans ce cas, la tension de claquage serait tout simplement proportionnelle à la distance source-drain, Mais ceci n'a pas été remarqué dans les transistors fabriqués. La tension de claquage mesurée est la même pour des transistors avec des distances source-drain plus faibles (Cf § la figure IV-6 du chapitre IV). Donc ceci nous amène à dire que la tension de claquage V_{BD} est indépendante de la distance grille-drain (L_{GD}). Cela écarte l'hypothèse que le chemin de fuite déterminant la rupture se produit entre les contacts de source et de drain à travers le buffer. Ceci dit, que les électrons sont injectés de la source à l'interface AlN/Si, puis remontent vers le drain. Cette hypothèse est appuyée par le fait que la différence de potentiel, entre les contacts source et drain de la structure et l'interface AlN/Si, est assez suffisante pour provoquer l'injection d'électrons comme le montre la figure V-5.

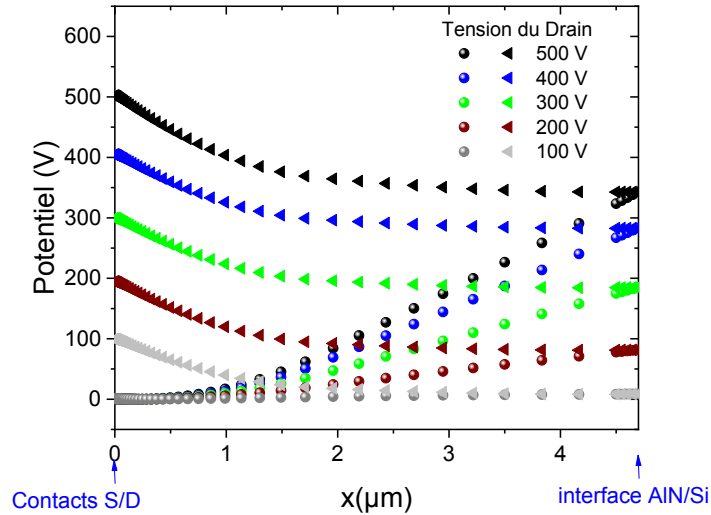


Figure V-5: Distribution du potentiel dans l'hétérostructure de la surface à l'interface avec le substrat (les cercles correspondent au profil de la source à l'interface AlN/Si et les triangles correspondent au profil de l'interface AlN/Si au drain) pour différentes tensions appliquées au drain (de 100 à 500 V).

La figure V-6 montre l'évolution du potentiel à l'interface AlN/Si en fonction de la tension de drain. Le potentiel à l'interface AlN/substrat augmente avec l'augmentation de la tension de drain donnant lieu à une différence de potentiel suffisante (source interface et interface drain) pour augmenter l'injection d'électrons de la source vers le substrat puis du substrat vers le drain.

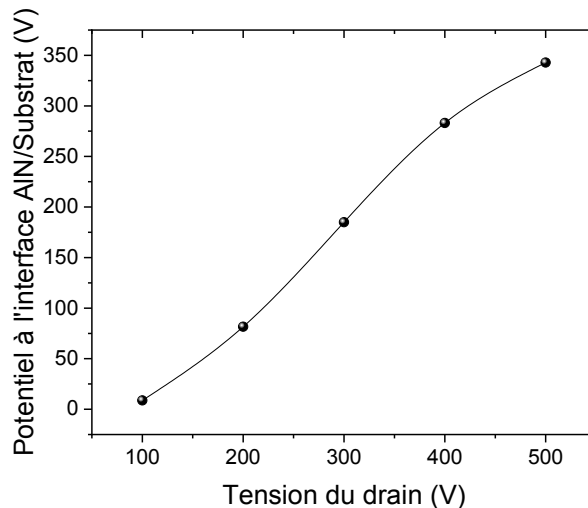


Figure V-6: Variation du potentiel à l'interface AlN/Si en fonction de la tension de drain avec la source mise à la masse.

La figure V-7 (a) montre la densité de courant dans la structure MOS-HEMT à la tension de claquage (V_{BD}). Il est évident que le trajet du courant à travers le canal électronique existant à l'interface AlN/Si favorise le claquage prématuré. En effet, l'interface entre Si et AlN est de mauvaise qualité en raison de la différence entre les structures cristallines des deux

matériaux, ainsi que le décalage de leurs paramètres de mailles et leurs coefficients thermiques. De plus, en conséquence à l'effet de polarisation d'AlN, une charge de polarisation positive se manifesterait à cette interface. Cela augmentera la concentration de charges interfaciales et par conséquent une couche d'inversion d'électrons est formée à cette interface pour un substrat de type p. Un puits de potentiel qui confine les porteurs plus près de l'interface forme un gaz électronique à deux dimensions (2DEG), comme le montrent les figures V-7 et V-8.

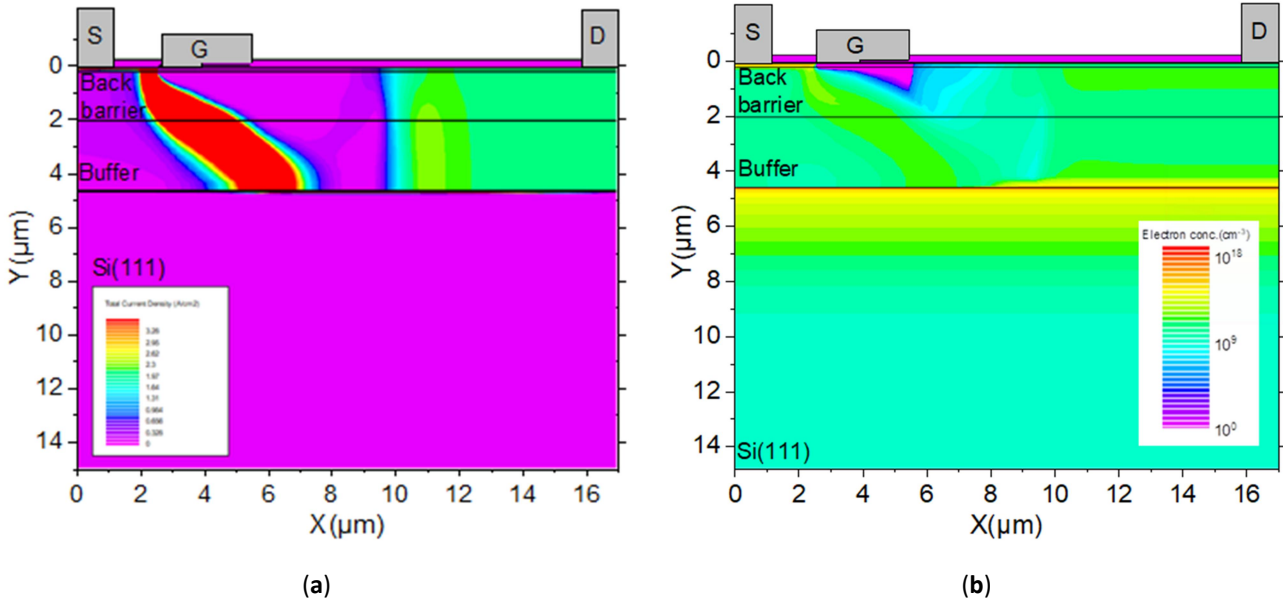


Figure V-7: Cartographie de la structure MOS-HEMT illustrant (a) la densité de courant et (b) la concentration d'électrons à la tension de claquage V_{BD} .

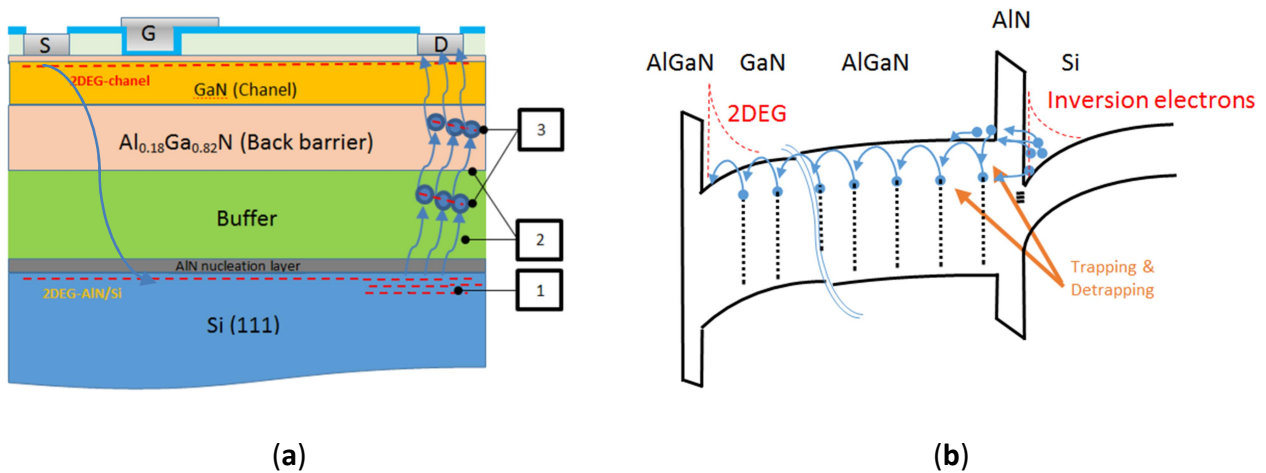


Figure V-8: Schématisation (a) du courant de fuite de l'interface AIN/Si à travers la couche d'AlN et la couche tampon jusqu'à l'électrode de drain (b) des mécanismes d'injection d'électrons à travers la barrière AIN.

Il faut noter que l'origine de canal parasite à l'interface avec le substrat a été discuté précédemment (Cf annexe D). Nous avons adopté l'hypothèse de la couche d'inversion comme étant la cause d'une couche conductrice à l'interface car la simulation colle parfaitement au résultat expérimental (figure V-4).

À partir de la figure V-8 (a), nous pouvons remarquer les mécanismes physiques responsables des fuites de courant et du claquage latéral et qui sont :

- (1) l'injection des électrons dans les couches de transition puis à l'interface AlN/Si où un 2DEG constitue la principale source d'électrons.
- (2) le courant de fuite de l'interface AlN/Si à travers l'AlN et la couche tampon jusqu'à l'électrode de drain.
- (3) Le courant est limité par le piégeage d'électrons dans des états accepteurs (SCLC pour Space Charge Limited Current).

Dans la figure V-8 (a), Il est intéressant de noter que l'ionisation par impact dans le silicium n'est pas la principale source d'électrons. Le courant du substrat n'augmente pas rapidement pour les hautes tensions et maintien des valeurs constantes. Ainsi, le facteur limitant le claquage reste le canal latéral conducteur existant à l'interface AlN/Si. Les mécanismes d'injection d'électrons à travers la barrière AlN sont présentés sur la figure V-8 (b). Ils ont été traités en détail par Longobardi et al. [5] et Meneghesso et al. [14].

5. Effet de la nitruration du substrat Si sur la tension de claquage

L'interface Si / III-nitrure est composée de couche de SiN_x en raison de la nitruration de la surface du silicium par des espèces contenant de l'azote durant le processus de croissance (par exemple le NH₃ utilisé dans le cas du MOCVD) ou à la diffusion de l'azote à partir des films III-N. Cette couche, généralement très fine et pleine de défauts, et elle peut s'étendre de quelques dizaines d'angströms à quelque dizaines de nanomètres. Le MOS-HEMT est simulé en introduisant une couche de 3 nm de SiN_x toute en gardant les mêmes paramètres de la structure décrits ci-dessus. Nous supposons que cette couche de nitrure n'affecte pas la concentration et/ou les effets dynamiques des pièges dans les couches supérieures du dispositif. Pour simuler la couche non idéale de SiN_x avec TCAD, il suffit d'activer un courant de fuite dans cette dernière. Ceci consiste à introduire un courant par effet tunnel à travers la couche de nitrure de Silicium.

Comme nous pouvons le constater sur la figure V-9, pour une tension de polarisation de drain de 500 V, les électrons sont accumulés à l'interface SiN_x/Si et le claquage n'est pas observé. Cependant, on note un petit courant de fuite d'environ 10⁻¹⁴ A/mm à travers la couche tampon. Pour des tensions de drain plus élevées, un courant tunnel d'électrons émerge avec la présence d'un champ électrique vertical intense. Ces effets tunnel s'amplifient avec l'augmentation de l'intensité du champ électrique. L'effet tunnel des électrons est largement lié à la différence de bande de conduction ainsi qu'à l'épaisseur de la couche de SiN_x. La tension de claquage à l'état bloqué du dispositif s'élève à environ 1500 V. Cette valeur est trois fois plus élevée que celle obtenue pour un MOS-HEMT sans couche intermédiaire de SiN_x. La caractéristique I_d-V_{ds} dans un MOS-HEMT avec et sans couche tampon SiN_x est représentée sur la figure V-10.

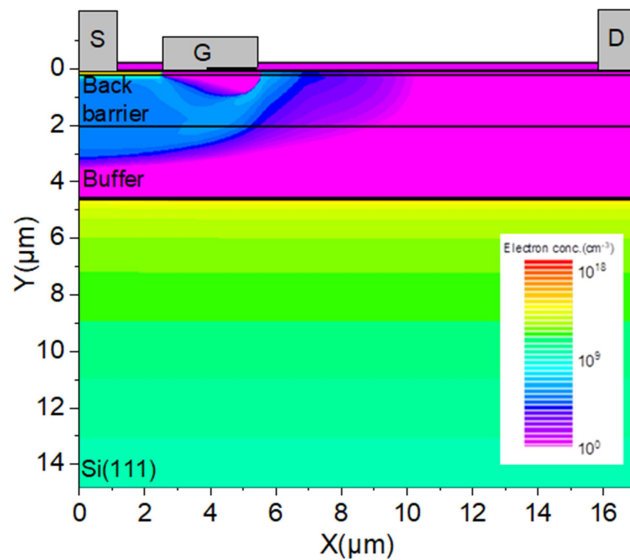


Figure V-9: Distribution de la concentration dans la structure MOS-HEMT à 500 V.

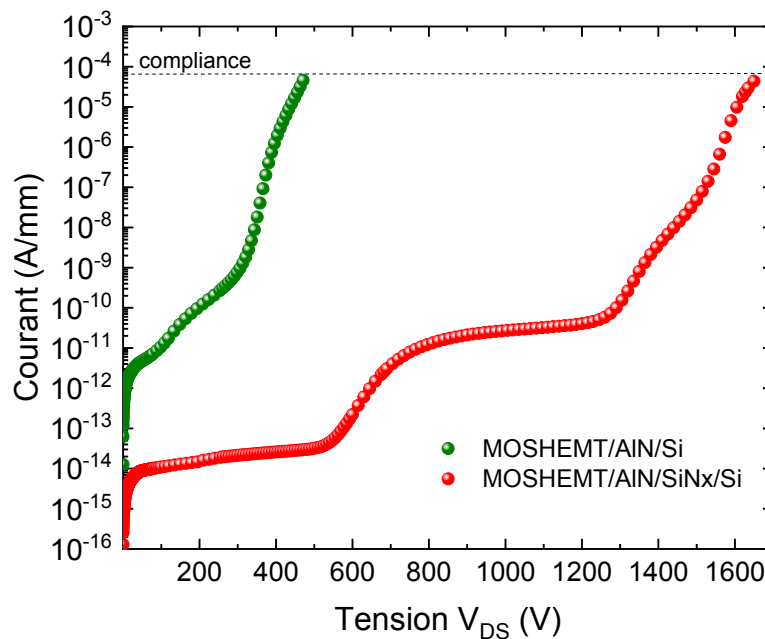


Figure V-10: Variation du courant de drain en fonction de la tension de drain du MOS-HEMT avec et sans un substrat nitruré (V_{BD} égale à 1700V et 500V respectivement).

D'après les simulations des structures étudiées, on peut dire que l'amélioration de la qualité cristalline des couches intermédiaires de SiN_x et du courant de fuite à l'interface avec le substrat Si (111) entraîne une nette amélioration considérable de la tension de claquage et elle peut atteindre la valeur de claquage théorique de GaN (avec un champ critique 3.94 MV/cm). Dans ce cas, le canal de conduction de courant à l'interface AlN/Si n'est pas éliminé avec la nitruration du silicium et une couche intercalaire SiN_x non-idéale est prise en compte dans notre simulation.

6. Simulation du claquage du MOS-HEMT sur 3C-SiC/Si

Dans l'étude précédente (§8 du chapitre IV) nous avons présenté notre approche pour améliorer le claquage du MOS-HEMT en utilisant une couche intercalaire de 3C-SiC, puisqu'il présente une structure cristalline cubique identique que celle du silicium, un faible décalage de paramètre de maille comparé au GaN ainsi qu'une déformation thermoélastique réduite après la croissance de la structure à base de GaN. Dans ce qui suit nous allons simuler les mesures de claquage trois bornes (Tri-terminaux) dans des conditions de pincement de ce dispositif.

Nous avons pu reproduire la caractéristique de claquage en utilisant les paramètres de matériau référencé par A. Arvanitopoulos et al. [15]. Pour modéliser le mécanisme de transport, l'effet tunnel assisté par pièges. Des pièges discrets dans le 3C-SiC correspondant au vanadium, l'azote et l'aluminium, comme indiqué par K. F. Dombrowski et al. [16] ont été introduit avec des concentrations de 10^{15} cm^{-3} , 10^{16} cm^{-3} et $1,6 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ respectivement. Le résultat obtenu par la simulation est représenté sur la figure V-11. Pour un courant de drain égal à $1 \mu\text{A}/\text{mm}$ la tension de claquage enregistré atteint la valeur de 1530 V. Cette valeur a été fixée par les mesures expérimentales. On remarque aussi que la tension de claquage peut croître jusqu'à 2KV pour un courant de 1 mA/mm, ce qui est 4 fois plus important que celui obtenu pour un MOS-HEMT conventionnel (sans la couche de 3C-SiC).

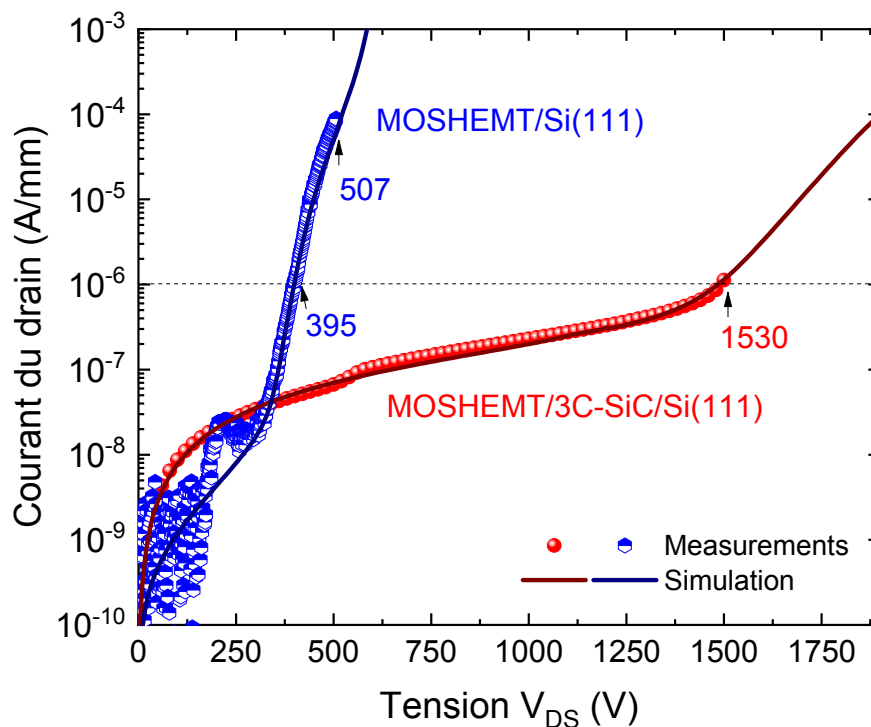


Figure V-11: Tensions de claquage MOS-HEMT mesurées et simulées avec et sans la couche intercalaire de 3C-SiC.

La figure V-12 montre la distribution de la concentration électronique dans la structure sur 3C-SiC/Si avant et après le claquage. Les simulations confirment à travers la figure V-13, l'absence d'un chemin de courant de fuite à l'interface avec le substrat Si zone dans laquelle se produisait le claquage pour les dispositifs conventionnel (sans 3C-SiC). Ce mécanisme de claquage n'est pas observé dans la structure avec la couche de transition 3C-SiC. Le trajet du courant se fait à travers le volume du silicium mais à une tension de polarisation plus élevée.

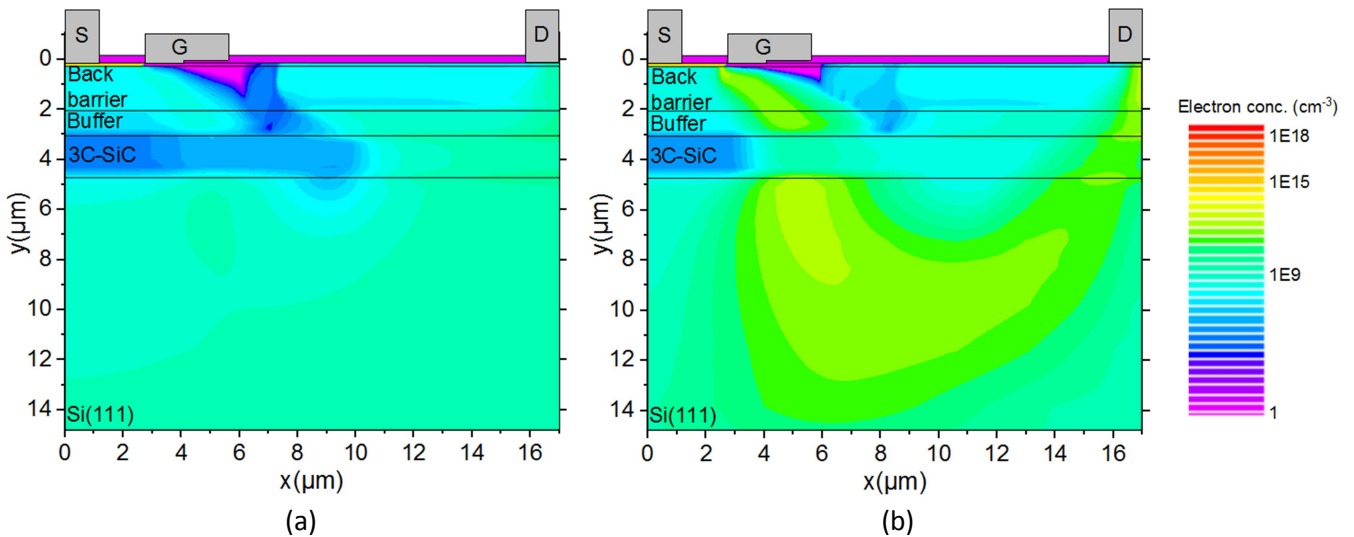


Figure V-12: Cartographie de la structure MOS-HEMT avec la couche intercalaire 3C-SiC (a) avant et (b) après claquage à 1300 V et 1700 V respectivement.

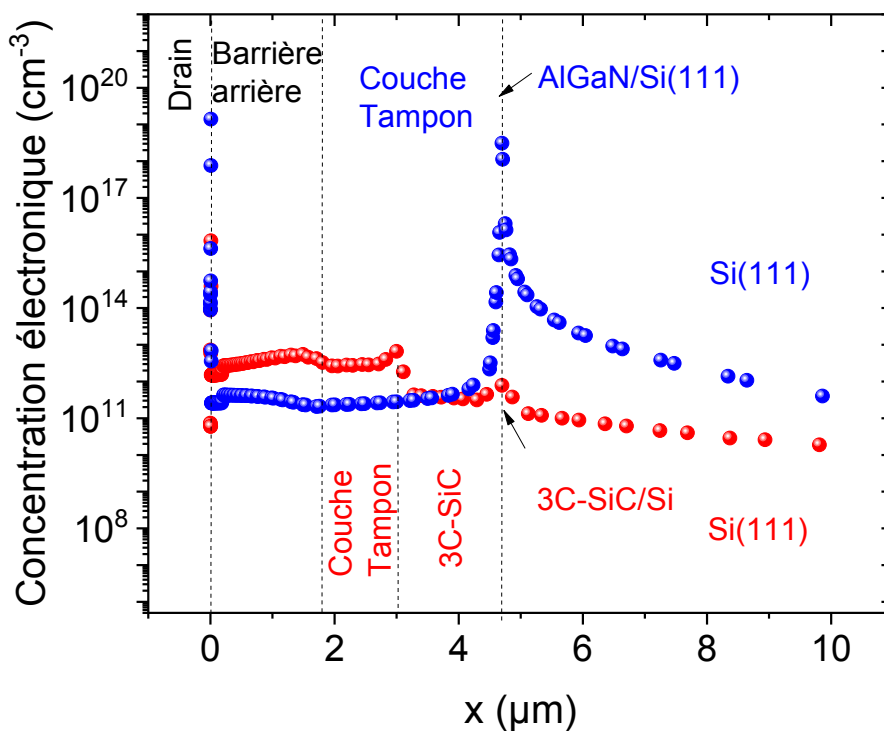


Figure V-13: Profil de concentration d'électrons dans des conditions de claquage sous les drains dans les structures avec et sans la couche intercalaire de 3C-SiC.

Le mécanisme de conduction du courant limité par piégeage de charge (SCLC) domine la conduction du courant de fuite ($J \propto V^m$ avec $1.5 < m < 2$ [6]) pour une tension de polarisation inférieure à 500 V. Au-delà de cette valeur, le courant de fuite présente une forte augmentation. La théorie SCLC ne peut pas à elle seule expliquer l'augmentation observée du courant dans le dispositif. Comme le montre la figure V-14, le taux de génération dû à l'ionisation par impact est également élevé, dans la couche 3C-SiC, ce qui provoque cette augmentation du courant. Cette génération par impact apparait du fait que le gap 3C-SiC est relativement plus faible que celui du GaN et de l'AlGaN. Cette apparition peut être considérablement retardée pour une épaisseur de couche buffer supérieure à 1.7 μm . Les simulations prouvent que le chemin de courant de fuite à l'interface Si où le courant circule à des hautes tensions provoquent le claquage précoce de la structure en l'absence de la couche intercalaire de 3C-SiC.

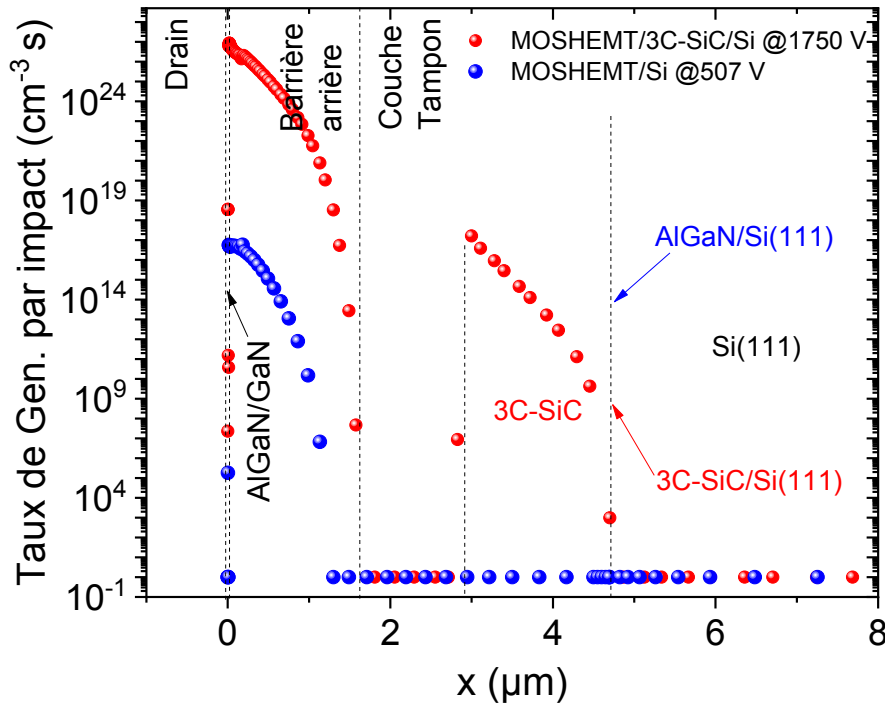


Figure V-14: Taux d'ionisation par impact au claquage sous les drains avec et sans couche intercalaire de 3C-SiC.

En résumé, les simulations des structures avec la couche intercalaire de 3C-SiC confirment l'amélioration du claquage grâce à l'élimination du chemin du courant de fuite à l'interface. Il est évident que l'utilisation de couches minces et peu coûteuses de 3C-SiC cultivées par épitaxie sur des substrats de Si est l'une des voies possibles pour résoudre ce problème. La simulation prouve, donc, l'efficacité de la suppression du chemin de courant d'interface.

7. Conclusion

Les résultats des simulations des caractéristiques de claquage courant-tension (I-V), pour les deux structures MOS-HEMT étudiées avec et sans la couche intercalaire de 3C-SiC, sont en bon accord avec les résultats expérimentaux. Ainsi, l'étude de l'influence de la nitruration du substrat nous a permis de comprendre l'effet du pré-conditionnement du substrat Si sur les caractéristiques de claquage des structures étudiées d'une part. D'un autre côté nous avons montré que le 3C-SiC peut éliminer le passage de courant à travers d'interface des dispositifs III-N/Si ce qui permet d'atteindre des tensions de claquage très élevées.

Nous avons démontré que les HEMT GaN réalisés sur Si avec des couches intercalaires de 3C-SiC présentent d'excellentes caractéristiques de dispositif requises pour les applications de puissance et en commutation. L'utilisation d'une très fine couche de 3C-SiC de 2.2 μm d'épaisseur, plutôt que d'un substrat SiC entier, réduit considérablement le coût.

Bibliographie

- [1] Shinya Akiyama, Masahiro Kondo, Leona Wada and Kazushige Horio, *Jpn. J. Appl. Phys.* 58 (6), 068003 (2019).
- [2] Hideyuki Hanawa and Kazushige Horio, *Phys. Status Solidi A.* 211(4), 784–787 (2014).
- [3] Nicolò Zagni, A. Chini; F. M. Puglisi; P. Pavan; M. Meneghini; G. Meneghesso Enrico Zanoni, G. Verzellesi, *IEEE International Reliability Physics Symposium (IRPS)*, Dallas, TX, USA (2020).
- [4] W. Saito, *Microelectron. Reliab.*, 55, 1682–1686 (2015).
- [5] G. Longobardi, D. Pagnano, F. Udrea, J. Sun, R. Garg, M. Imam and A. Charles, *Jpn. J. Appl. Phys.* 58 (SC), SCCD12 (2019).
- [6] Xiangdong Li, M. Van Hove, M. Zhao, B. Bakeroot, S. You, G Groeseneken, S. Decoutere, *IEEE Trans. Electron Devices.* 65, 1721-1727 (2018).
- [7] Maziar Farahmand, Carlo Garetto, Enrico Bellotti, Kevin F. Brennan, Michele Goano, Enrico Ghillino, Giovanni Ghione, John D. Albrecht, and P. Paul Ruden, *IEEE Trans. Electron Devices*, 48(3), 535-542 (2001).
- [8] Unhi Honda, Yujiro Yamada, Yutaka Tokuda, and Kenji Shiojima, *Jpn. J. Appl. Phys.* 51, 04DF04 (2012).
- [9] Enrico Zanoni, Matteo Meneghini, Gaudenzio Meneghesso, Davide Bisi, Isabella Rossetto, and Antonio Stocco, *IEEE 3rd Workshop on Wide Bandgap Power Devices and Applications (WiPDA)*, Blacksburg Virginia, USA, November 2-4, (2015).
- [10] H. E. L. Ghazi, A. Jorio, I. Zorkani, and M. Ouazzani-Jamil. *Opt. Commun.* 281, 3314 (2008).
- [11] Chakrabarti, P., A. Gawarika, V. Mehta, D. Garg, *J. Microw. Optoelectron. Electromagn. Appl.*, 5 (1), 1-14 (2006).
- [12] C. Bulutay, *Semiconductor Science and Technology* 17 (10), L59 (2002).
- [13] Ismail H. Oğuzman, Enrico Bellotti, Kevin F. Brennan, Ján Kolník, Rongping Wang, and P. Paul Ruden, *Journal of Applied Physics*, 81 (12), 7827 (1997).
- [14] G. Meneghesso, M. Meneghini, I. Rossetto, D. Bisi, S. Stoffels, M. Van Hove, S. Decoutere, and E. Zanoni, *Semiconductor Science and Technology*, 31 (9), 093004 (2016).
- [15] Anastasios Arvanitopoulos, Neophytos Lophitis, Konstantinos N Gyftakis, Samuel Perkins, and Marina Antoniou, *Semiconductor Science and Technology*, 32 (10), 104009 (2017).

[16] K. F. Dombrowski, U. Kaufmann, M. Kunzer, K. Maier, J. Schneider, V. B. Shields, and M. G. Spencer, *Applied Physics Letters* **65** (14), 1811 (1994).

Conclusion générale

Conclusion générale

Nous avons vu, au cours de cette thèse, l'influence du pré-conditionnement de la surface des substrats semiconducteurs sur la qualité de l'interface avec les matériaux III-N à savoir l'InN et le GaN. Notre étude est scindée en deux axes principaux, elle a abouti des résultats scientifiques intéressants, qui ont fait l'objet de publications dans des revues internationales ou/et de communications dans des conférences nationales et internationales.

Dans une première partie, l'étude concerne la nitruration sous ultravide de la surface du substrat InP (100). La nitruration se fait par la consommation de cristallites d'indium créées lors d'un nettoyage ionique moyennant un bombardement avec des ions d'Ar⁺. Cette étape est cruciale car elle permet non seulement d'éliminer toutes les traces de contaminations tels que le carbone, l'oxygène, les graisses, etc., mais aussi d'obtenir la quantité de cristallites d'indium métallique, par départ préférentiel du phosphore de la surface, nécessaire pour le processus de nitruration. Ces cristallites d'indium métalliques sont ensuite consommées par le flux de plasma d'azote, produit par la source de production de type plasma à décharge, pendant la nitruration. Les analyses XPS des substrats d'étude ont révélé qu'un temps de nitruration prolongé de 50 minutes avec un flux de plasma d'azote de 45° permet d'obtenir des structures avec des couches de nitrure d'indium plus épaisses (de l'ordre de deux monocouches) et de bonnes qualités avec une très faible quantité d'indium métallique et aucune trace d'oxygène. Ce résultat a été démontré par la comparaison des rapports des pics expérimentaux trouvés sur les pics In_{4d} d'indium avec les rapports des pics calculés par le modèle théorique.

Des mesures électriques de type courant-tension, capacité-tension et (capacité, conductance)-fréquence ont été effectuées sur les structures étudiées en utilisant un contact permanent d'or. Les paramètres électriques caractérisant nos structures tel que le courant de saturation le facteur d'idéalité, de la hauteur de barrière de potentiel, la résistance série et la densité des états d'interface ont été calculés par différentes méthodes. Les caractéristiques électriques courant-tension des structures Au/InN/InP(100) montrent qu'elles forment un contact Schottky avec la présence d'un courant de fuite en inverse. L'intensité du courant inverse est corrélée avec la non idéalité de la structure et la présence d'indium métallique en surface. Celui-ci est d'autant plus fort que la structure est moins nitrurée.

Les mesures C(V) effectuées sur les échantillons des deux séries d'études montrent que les courbes obtenues présentent de faibles valeurs de capacité en polarisations négatives et elles commencent à croître avec la tension de polarisation pour atteindre des valeurs maximales à la valeur de zéro volt. La courbe de la capacité se stabilise pour des tensions positives avoisinant le zéro volt. Ce qui montre que la capacité de la couche nitrurée intervient dans la valeur de la capacité totale des échantillons.

Les concentrations des dopants calculées à partir de la caractéristique C-V en prenant en compte l'effet des états d'interface pour chaque série. Elles sont estimées à $1.97 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ pour la série A et $1.54 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ pour la série B. Ces valeurs sont très proches de celles

données par le fournisseur. Les valeurs de capacités mesurées dépendent de la fréquence. Ces valeurs de capacité plus élevées aux fréquences plus basses sont attribuées à une capacité excessive résultant des pièges d'interface.

La distribution de la densité d'états d'interface N_{ss} extraite des caractéristiques C-V-f par les méthodes haute-basse fréquences donnent des valeurs de N_{ss} plus faibles pour les structures avec une couche plus épaisse de nitrure d'indium. Ceci confirme les résultats trouvés précédemment et montre la bonne qualité structurale et électrique de ces structures.

Les résultats électriques viennent appuyer les résultats spectroscopiques, car ils révèlent qu'un temps de nettoyage ionique prolongé de 50 minutes conduit à la formation d'une couche d'InN riches en défauts avec une densité des états d'interface plus importante.

La deuxième partie de ce travail est consacrée à l'étude de l'importance du pré-conditionnement de la surface du substrat (Si) pour la synthèse des composants à base de GaN, en particulier les transistors MOS-HEMTs dédiés aux applications de puissance et en commutation. Nous avons présenté les caractéristiques électriques en régime statique et de claquage du transistor MOS-HEMT AlGaN/GaN. L'interface couche de nucléation-substrat (AlN/Si) joue un rôle important dans les performances en haute tension dans les dispositifs GaN-sur-Si. L'implication du canal parasite à l'interface couche de nucléation/substrat sur ces performances a été discutée. Les mécanismes impliqués dans la formation d'un tel canal parasite sont multiples et complexes. Ils dépendent fortement du substrat Si de départ, des traitements du substrat avant la croissance, des conditions de croissance et l'état du matériel utilisé pour la croissance hétéroépitaxiale. Les modifications apportées à l'un de ces facteurs peuvent favoriser une configuration interfaciale particulière qui à son tour détermine l'origine ou le type du canal parasite.

Nous avons proposé, par la suite, une alternative pour améliorer la tension de claquage. Elle consiste en l'introduction d'une couche intercalaire 3C-SiC à l'interface III-N/Si. Nous avons montré que grâce à cette couche de 3C-SiC on peut réduire le courant de fuite à travers l'interface avec le substrat, ce qui conduit à une tension de claquage plus élevée.

Les résultats de simulation numérique des caractéristiques courant-tension (I-V), de claquage pour les deux structures étudiées avec et sans couche 3C-SiC, montrent un bon accord avec les résultats expérimentaux. Ainsi, l'étude de l'influence de la nitruration du substrat nous a permis de comprendre l'importance du pré-conditionnement du substrat Si sur les caractéristiques de claquage des dispositifs III-N/Si.

Nous avons démontré que les HEMT GaN réalisés sur Si avec des couches intercalaires 3C-SiC ont le potentiel d'offrir d'excellentes caractéristiques de dispositif requises pour les applications de dispositifs de puissance et en commutation. L'utilisation d'une très fine couche de 3C-SiC (2,2 μm), plutôt que d'un substrat SiC entier, réduit considérablement le coût de réalisation des structures.

Annexe A

Annexe A : Rappels théoriques sur le contact Métal-Semiconducteur.

1. Introduction

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

Afin de mieux comprendre les phénomènes résultants de cette jonction il faut étudier aux diagrammes des bandes d'énergie de la structure.

2. Barrière de potentiel (barrière Schottky)

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

La figure A-1 représente un diagramme de bandes d'énergie expliquant la notion de barrière qui se forme à l'interface d'un contact métal-semiconducteur

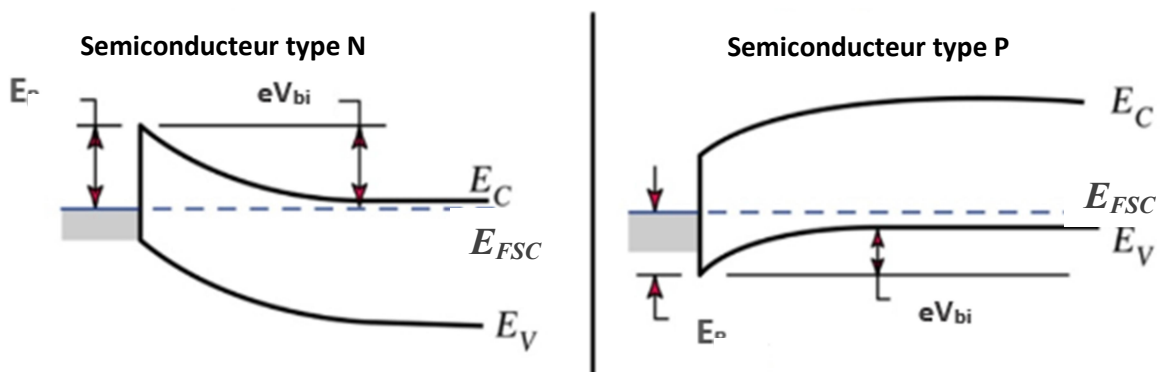


Figure A-1: Diagramme de bandes d'énergie d'une jonction metal-semiconducteur de type N et P à l'équilibre thermodynamique [1].

Dans un contact métal-semiconducteur de type N, La barrière vue par les électrons qui veulent transiter du métal vers le semiconducteur, est donnée par :

$$E_B = q\Phi_m - q\chi \tag{1}$$

Vu de côté semiconducteur la barrière est égale :

$$V_{bi} = \Phi_m - \Phi_{sc} \tag{2}$$

Avec :

E_B : l'énergie de la barrière

$q\Phi_m$: travail de sortie du métal

$q\Phi_{sc}$: travail de sortie du semiconducteur

χ : L'affinité électronique

3. Mise en contact d'un un métal avec semi-conducteur type N

Dans un cas idéal, quand un métal et un semiconducteur sont mis en contact, la structure des bandes d'énergie à l'interface est régie par la différence éventuelle entre le travail de sortie du métal $q\Phi_m$ et le travail de sortie du semiconducteur $q\Phi_{sc}$ [2].

3.1 Cas $q\Phi_m = q\Phi_{sc}$ (Régime de bandes plates)

Lorsque le travail de sortie du métal $q\Phi_m$ est égal au travail de sortie du semiconducteur $q\Phi_{sc}$, les niveaux de Fermi du métal E_{Fm} et du semiconducteur E_{Fsc} sont alignés en l'absence de contact car leur distance au niveau du vide est la même. L'équilibre thermodynamique peut se réaliser sans échange de porteurs, de ce fait, la densité des électrons dans le semiconducteur reste constante et les bandes de conduction E_c et de valence E_v restent plates (voir la figure A-2). C'est ce que l'on appelle le régime de bandes plates (flat-band) [2].

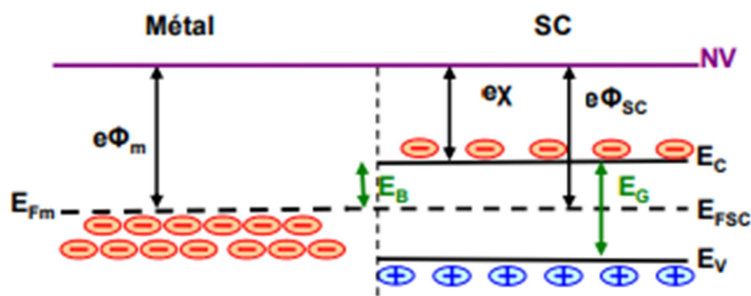


Figure A-2: Diagramme de bandes d'énergie en régime de bandes plates [3].

3.2 Cas $q\Phi_m < q\Phi_{sc}$ (contact ohmique)

Dans le cas d'un travail de sortie du métal $q\Phi_m$ inférieur au travail de sortie du semiconducteur $q\Phi_{sc}$ (voir la figure A-3). Lors de la mise en contact du métal et du semiconducteur, les niveaux de Fermi vont s'aligner, du fait de la continuité du niveau de

vide. Il y aura une courbure des bandes E_v et E_c au niveau de la jonction ce qui provoque une accumulation des porteurs (électrons) à l'interface et fait apparaître une zone d'accumulation dans le semiconducteur. Dans cette zone d'accumulation le niveau de Fermi E_{FS} très proche de de la bande de conduction E_c à cause de la très grande population d'électrons. Il n'y a pas de zone dépourvue de porteurs majoritaires dans la structure. Cette dernière va conduire un courant dès qu'une tension sera appliquée. Le contact est ohmique.

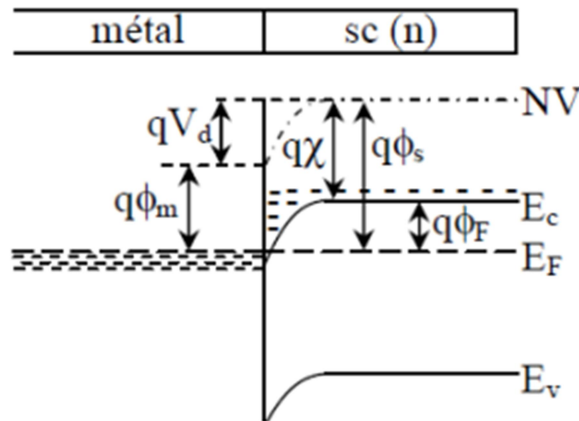


Figure A-3: Diagramme de bandes d'énergie d'un contact métal-semiconducteur de type N avec $\phi_m < \phi_{sc}$ [4].

3.2.1 Contact ohmique sous polarisation

L'absence de barrière de potentiel et de zone désertée, tel qu'il est montré sur la figure A-4 ne limite pas le transport au contact et le courant circule librement dans les deux sens du contact. Dans ce cas le contact électrique est appelé « ohmique ».

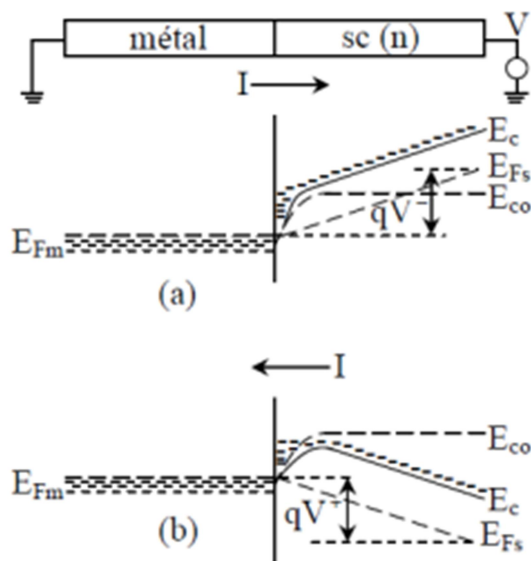


Figure A-4: Contact métal-semiconducteur de type N ohmique sous polarisation [4].

3.3 Cas $q\Phi_m > q\Phi_{sc}$ (contact redresseur ou diode Schottky)

Dans le cas de la figure A-5 (a), le travail de sortie du métal $q\Phi_m$ est supérieur au travail de sortie du semiconducteur $q\Phi_{sc}$. Lors de la mise en contact du métal et du semiconducteur (voir la figure A-5 (b)), le niveau de Fermi s'éloigne de E_c et se rapproche donc de E_v au voisinage de la jonction métallurgique pour s'aligner avec le niveau de Fermi du métal et un équilibre thermodynamique est établi à travers le transfert d'électrons depuis la bande de conduction du semiconducteur vers le métal. Ceci cause une courbure, vers le haut, des bandes de conduction et de valence. Il y a donc appauvrissement en porteurs libres du côté semiconducteur de type n dans la zone de contact et par conséquent création d'une zone de charge d'espace, provenant des atomes dopants ionisés, de largeur W . Cette charge positive est compensée à la surface du métal par une charge négative, donc très près de la jonction métallurgique. Du fait de la très forte concentration électronique dans le métal, l'extension de la zone de charge d'espace se crée du côté du semiconducteur.

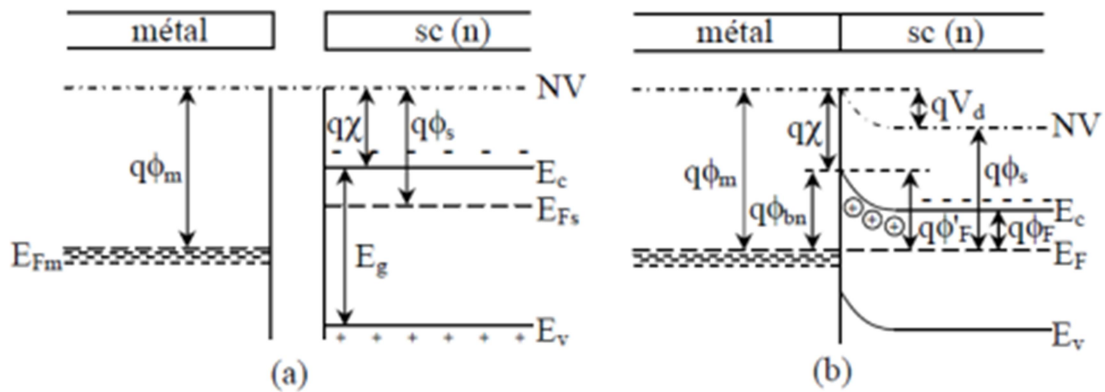


Figure A-5: diagramme des bandes d'énergie avec $q\Phi_m > q\Phi_{sc}$ [4].

Il est clair que, d'une part la désertion du semiconducteur, et d'autre part la création d'une barrière d'énergie vont limiter la conduction à travers la structure. La hauteur de barrière énergétique de la diode Schottky est définie par :

$$q\Phi_{bn} = (E_c - E_{Fs}) \quad (3)$$

3.3.1 Contact redresseur sous polarisation

En polarisation directe, on applique une tension positive V_a sur la structure (le (+) sur le côté du métal, le (-) sur le côté du semiconducteur), la bande conduction du semiconducteur s'élève ce qui se traduit par une diminution de la barrière (voir la figure A-6 (a)). Mais dans le sens métal-semiconducteur la barrière reste inchangée. Les électrons de la bande de conduction du semiconducteur peuvent franchir la barrière de potentiel abaissée par la tension de polarisation V_a . Un courant d'électrons passe du métal vers le semiconducteur.

Si une tension V_a négative est appliquée, la bande de conduction du semiconducteur est abaissée et la hauteur de barrière coté semiconducteur s'élève (voir la figure A-6 (b)), ce qui s'opposera à la diffusion des électrons. Aucun flux d'électrons possible dans le sens semiconducteur-métal. Les électrons du métal ne peuvent pas franchir de façon significative la barrière Schottky pour passer du côté semiconducteur. La jonction est donc bloquée. En réalité, un très faible courant inverse existe mais évolue très peu avec la tension inverse appliquée. Car le flux des porteurs électrons est limité par la présence de la barrière Schottky qui est indépendante de la tension appliquée.

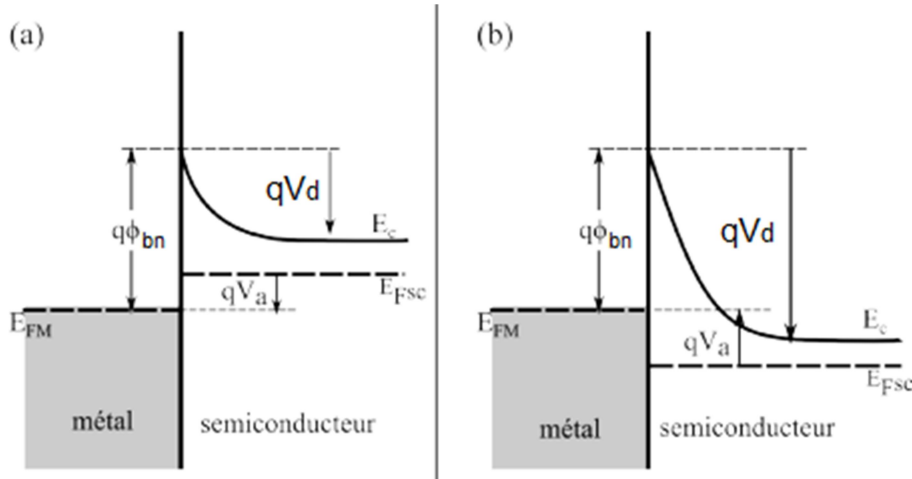


Figure A-6: Contact redresseur (diode Schottky) métal-semiconducteur de type N sous polarisation (a) : polarisation directe, (b) : polarisation inverse [4].

3.3. 2 Zone de charge d'espace

La zone de charge d'espace (ZCE) correspond à la région qui apparaît dans une structure, au niveau de la jonction métallurgique. Elle est appelée « zone de déplétion » ou « zone désertée » parce qu'elle est dépourvue de porteurs libres, et « zone de charge d'espace » parce qu'elle est chargée électriquement par des ions fixes positifs dans le cas d'un semiconducteur de type N. Ces ions sont obtenus après ionisation des atomes dopants. (Contrairement au reste de la structure qui est neutre électriquement).

3.3. 3 Champ et potentiel électrique

Considérons la structure métal-semiconducteur de type N, avec $\Phi_m > \Phi_{sc}$, de la figure A-7 (a). On obtient la distribution du potentiel dans la zone de charge d'espace en intégrant l'équation de Poisson. Nous supposons que le semiconducteur est homogène. Avec une concentration de dopants donneurs N_D .

Nous admettrons que tous les donneurs sont ionisés à la température ambiante. Nous ferons l'hypothèse de la zone de charge d'espace vide de porteurs libres, W est la largeur de cette zone. Ainsi la densité de charge dans le semiconducteur (figure A-7 (b)) s'écrit [5] :

$$0 < x < W \quad \rho(x) = e N_D \quad (4)$$

$$x > W \quad \rho(x) = 0 \quad (5)$$

L'équation de Poisson s'écrit :

$$\frac{d^2V}{dx^2} = \frac{-\rho(x)}{\epsilon_{sc}} \Rightarrow \frac{dV(x)}{dx} = -E(x) = -\frac{eN_D}{\epsilon_{sc}}(x - W) \quad (6)$$

$$\frac{dV(x)}{dx} = -E(x) = -\frac{eN_D}{\epsilon_{sc}}(x - W) \quad (7)$$

Le champ électrique est négatif et varie linéairement dans la zone de charge d'espace (figure A-7 (d)) sa valeur à l'interface est maximale et égale à :

$$E_{max} = \left| -\frac{eN_D}{\epsilon_{sc}} W \right| \quad (8)$$

En intégrant une deuxième fois l'équation de Poisson en prenant l'origine des potentiels à l'interface métal-semiconducteur, on obtient l'expression suivante du potentiel :

$$V(x) = -\frac{eN_D}{\epsilon_{sc}} \left(\frac{x^2}{2} - Wx \right) \quad (9)$$

La tension de diffusion résulte de la différence des travaux de sortie du métal et du semiconducteur $V_d = \Phi_m - \Phi_{sc}$. Cette tension correspond à la différence de potentiel entre la surface du semiconducteur et son volume (voir figure A-7 (c)), c'est-à-dire aux bornes de la zone de charge d'espace

$$V_d = V(x = W) - V(x = 0) = -\frac{eN_D}{\epsilon_{sc}} \left(\frac{x^2}{2} - W^2 \right) = \frac{eN_D}{2 \epsilon_{sc}} W^2 \quad (10)$$

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

$$W^2 = \frac{2 \epsilon_{sc}}{eN_D} V_d = \frac{2 \epsilon_{sc}}{eN_D} (\Phi_m - \Phi_{sc}) \quad (11)$$

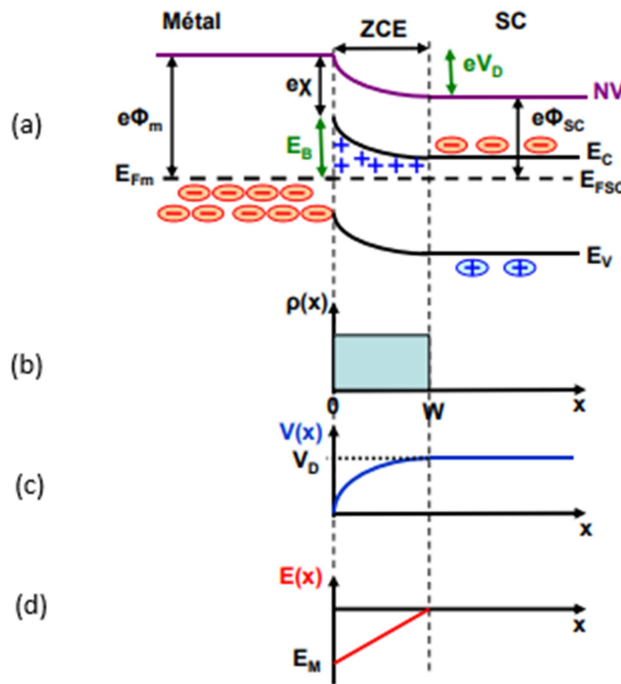


Figure A-7: Intégration successive de la densité de charge dans une diode Schottky type N à l'équilibre thermodynamique. a) diagramme énergétique b) charge d'espace dans le semiconducteur c) potentiel électrique d) champ électrique [3].

3.3.3 Capacité de la jonction

Pour un semiconducteur de type N, si la structure est polarisée par une tension V , la barrière de potentiel devient $V_d - V$ et la largeur de la zone de charge d'espace devient [5].

$$W^2 = \frac{2 \varepsilon_{sc}}{e N_D} (V_d - V) \quad (12)$$

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

$$Q_{sc} = -Q_m = e N_D W = (2 \varepsilon_{sc} e N_D (V_d - V))^{\frac{1}{2}} \quad (13)$$

La capacité différentielle est donnée par :

$$C(V) = \left| \frac{dQ}{dV} \right| = \left(\frac{\varepsilon_{sc} \cdot e N_D}{2} \right)^{\frac{1}{2}} (V_d - V)^{-\frac{1}{2}} = \frac{\varepsilon_{sc}}{W} \quad (14)$$

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

$$C^{-2}(V) = \frac{2}{\varepsilon_{sc} \cdot e N_D} (V_d - V) \quad (15)$$

La courbe représentant $C^{-2}(V)$ est une droite dont la pente permet de déterminer la concentration de donneurs N_D , et dont l'abscisse à l'origine permet de déterminer la hauteur de barrière V_d . Si le dopage du semiconducteur n'est pas homogène, la courbe représentant $C^{-2}(V)$ n'est plus une droite ce qui signifie l'existence de plusieurs niveaux de dopage dans la structure. [5].

4. Mécanismes de conduction dans une diode Schottky

Les caractéristiques courant-tension d'une diode Schottky sont généralement décrites par l'émission thermoïonique. Le courant dû à cet effet provient des électrons ayant une énergie supérieure à celle de la hauteur de barrière de potentiel. Cette théorie repose sur les hypothèses suivantes :

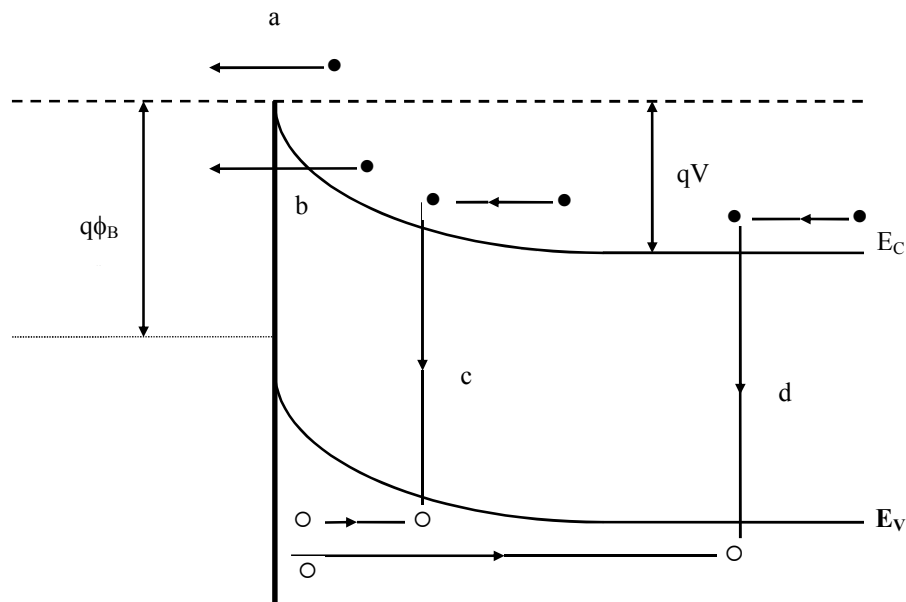
- la hauteur de barrière d'énergie est grande devant kT .
- les électrons à l'interface du semi-conducteur sont en équilibre thermique avec ceux du volume.
- le flux du courant n'affecte pas l'équilibre.

5. Théories de transport de charges dans une diode Schottky

Dans une barrière Schottky, différents mécanismes de transport de charges peuvent exister simultanément ou séparément et qui sont à l'origine de la conduction de courant électrique dans la jonction.

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

Les différents mécanismes de transport de charges à travers une barrière Schottky, du semiconducteur vers le métal [3, 9], sont représentés par la figure A-8.



- a)- électrons émis par-dessus la barrière ;
- b)- électrons émis par effet tunnel ;
- c)- courant de recombinaison dans la zone de charge d'espace ;
- d)- courant de recombinaison dans la région neutre.

Figure A-8: Mécanismes de transport à travers une barrière Schottky sous polarisation directe.

5.1 Théorie de diffusion

Proposée par Schottky et Spence en 1939 [6], cette théorie suppose que les électrons migrent du semi-conducteur vers métal par-dessus la barrière en traversant la zone appauvrie du semiconducteur, ce qui restreint le courant direct. En effet ce dernier est limité par la diffusion des porteurs à travers le champ électrique dans la zone de charge d'espace. Ce modèle est basé sur les suppositions suivantes :

- La hauteur de barrière d'énergie est supérieure au terme kT .
- L'effet de collisions d'électrons dans la zone de déplétion est inclus.
- La concentration de porteurs est indépendante du flux du courant et est identique à celle de l'équilibre.
- Le semiconducteur est non dégénéré

La concentration des électrons, dans le côté semiconducteur à l'interface métal-semiconducteur de type N est donnée par :

$$n = N_c \exp\left[-\frac{q(E_c - E_{Fsc})}{kT}\right] \quad (16)$$

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

$$J = qn\mu_n E + qD_n \frac{dn}{dx} \quad (17)$$

Où

E : le champ électrique

D_n : le coefficient de diffusion

μ_n : la mobilité des électrons

L'équation finale de la densité de courant dans la structure en fonction de la tension appliquée est la suivante :

$$J = J_s (e^{qV/kT} - 1) \quad (18)$$

Où la densité du courant de saturation J_s est :

$$J_s = \frac{q^2 \cdot N_c \cdot D_n}{kT} \left[\frac{2qN_D(V_{b0} - V)}{\epsilon_s} \right]^{1/2} \cdot (e^{-q\phi_{Bn}/kT}) \quad (19)$$

Où D_n est définie par :

$$\frac{D_n}{\mu_n} = \frac{kT}{q} \quad (20)$$

5.2 Théorie d'émission thermoïonique

Dans la théorie de l'émission thermoïonique, le gradient du quasi-niveau de Fermi est négligé. Ceci implique que le quasi-niveau de Fermi dans le semiconducteur est plat. La concentration des électrons du côté semiconducteur type N de l'interface est augmentée par un facteur $\exp(qV/KT)$ lorsqu'une tension de polarisation V est appliquée [7].

$$n = N_c \exp\left[-\frac{q(\phi_{Bn} - V)}{kT}\right] \quad (21)$$

Où

N_c : la densité d'états effectifs des électrons dans la bande de conduction du semiconducteur,

ϕ_{Bn} : la hauteur de la barrière Schottky (en V),

V : la tension appliquée.

La densité de courant dû à l'émission thermoïonique des électrons par-dessus la barrière est donnée par l'expression :

$$J = J_s(e^{qV/kT} - 1) \quad (22)$$

Avec

V : la tension appliquée,

n: le facteur d'idéalité,

J_s : la densité de courant de saturation,

k : la constante de Boltzmann,

T: la température.

L'équation de la densité de courant de saturation J_s est donnée par:

$$J_s = A^{**}T^2 e^{-\frac{q\phi_{Bn}}{kT}} \quad (23)$$

A^{**} : constante de Richardson, qui est égale à :

$$A^{**} = \frac{4\pi q k^2 m_e^*}{h^3} \quad (24)$$

m_e^* : la masse effective de l'électron dans le semiconducteur,

h : la constante de Planck.

Pour une diode Schottky idéale, le facteur d'idéalité n, est égale à l'unité, et la hauteur de la barrière de potentiel est indépendante de la température et de la tension de polarisation.

5.3 Théorie de l'émission-diffusion

La théorie combinée de l'émission thermoïonique-diffusion était présentée par Crowell et Sze en 1966 [6]. Dans cette théorie on définit une vitesse de recombinaison v_r au maximum potentiel. La densité de courant au sommet de la barrière pour un semiconducteur de type N est :

$$J = q(n_m - n_0)v_r \quad (25)$$

Où

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

$$n_m = N_c \exp\left[-\frac{q\phi_{Bn} - E_{Fn}(x_m)}{kT}\right] \quad (26)$$

Où

$E_{Fn}(x_m)$: le quasi-niveau de Fermi (en eV) à x_m sous une tension de polarisation V,

n_0 : est la densité des électrons à x_m sous la condition de quasi-équilibre.

$$n_0 = N_c \exp(-q\phi_{Bn}/kT) \quad (27)$$

L'expression finale du courant est la même que précédemment (théorie de diffusion et de l'émission thermoïonique), la différence réside au niveau du courant de saturation comme le montre la relation suivante [8] :

$$J = A_n^{**} \cdot T^2 \cdot e^{(-q\phi_{Bn}/kT)} (e^{qV/kT} - 1) \quad (28)$$

Où

$$A_n^{**} = \frac{\theta_n A_n^*}{1 + \theta_n \frac{v_{Rn}}{v_{Dn}}} \quad (29)$$

θ_n : coefficient de transmission tunnel des porteurs majoritaires (électrons),
 v_{Rn} : vitesse de recombinaison effective des électrons au sommet de la barrière,
 v_{Dn} : vitesse de diffusion effective,
 Si $v_{Dn} \ll v_{Rn}$, le processus de diffusion est dominant,
 Si $v_{Dn} \gg v_{Rn}$, celui de l'émission thermoïonique est dominant.

5.4 Conduction par effet tunnel

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

Le courant tunnel est proportionnel au coefficient de transmission (probabilité Tunnel) et à la probabilité d'occupation dans le semiconducteur et de non occupation dans le métal [7].

$$J_{s \rightarrow m} = \frac{A^{**} T^2}{kT} \int_{E_{Fm}}^{q\phi_{bn}} F_{sc} \cdot T(E) (1 - F_m) dE \quad (30)$$

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

A^{**} : constante de Richardson effective

L'expression du courant prend la forme générale suivante :

$$J = J_s [e^{(qV/nkT)} - 1] \quad (31)$$

Où

n : le facteur d'idéalité. Il est relié à une énergie caractéristique du semiconducteur relative à la probabilité de transmission par effet tunnel :

$$n = qE_0/kT \quad (32)$$

L'énergie E_0 est décrite par la relation :

$$E_0 = E_{00} \coth\left(\frac{E_{00}}{kT}\right) \quad (33)$$

Avec :

$$E_{00} = \frac{h}{4\pi} \sqrt{\frac{N_D}{m^* \epsilon_s}} \quad (34)$$

5.5 Recombinaison dans la zone de charge d'espace

Le calcul du courant traversant la structure est effectué précédemment en négligeant les phénomènes de génération et de recombinaison dans la zone de charge d'espace. En réalité, cette zone est le siège de phénomènes de génération thermique et de recombinaison. Le processus de recombinaison dans la région de déplétion dans une diode Schottky est lié à l'existence des centres localisés dans la bande interdite. Selon le modèle de Shockley, Read et Hall (SRH) en 1952 [6], le taux de recombinaison U dans la ZCE est donné par l'expression suivante :

$$U = \frac{n \cdot p - n_i^2}{\tau_n(n + n_i) + \tau_p(p + n_i)} \quad (35)$$

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

$$J = q \int_0^W U(x) dx \quad (36)$$

En adoptant les approximations suivantes $n \cdot p \gg n_i$, et $\tau_n = \tau_p = \tau$, l'expression de la densité du courant de recombinaison, pour de faibles tensions positives, est donnée par [8] :

$$J = J_s \exp\left(\frac{qV}{2kT}\right) \cdot [1 - \exp(-\frac{qV}{kT})] \quad (37)$$

Où

$$J_s = \frac{qn_i W}{2\tau} \quad (38)$$

n_i : est la concentration intrinsèque des électrons.

W : la largeur de la ZCE

τ : la durée de vie des porteurs.

5.6 Recombinaison dans la région neutre ohmique

On a supposé que la tension V , appliquée à la jonction existe en totalité dans la zone de charge d'espace. Mais en réalité, on retrouve une partie de la tension appliquée, au niveau de la région neutre du semiconducteur. Cette dernière limite considérablement l'injection de charges et par conséquent le courant dans la jonction, lorsque la tension appliquée est assez élevée. Ce phénomène est modélisé par une résistance série (R_s) . La tension appliquée à la jonction sera donc [8]:

$$V_j = V - R_s I \quad (39)$$

6. Densité totale de courant

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

$$J_T = J_{s \rightarrow m} + J_R + J_{tu} \quad (40)$$

$J_{s \rightarrow m}$: densité de courant émission thermoionique-diffusion,

J_R : densité du courant recombinaison,

J_{tu} : densité du courant tunnel

La caractéristique courant-tension d'une diode Schottky est généralement décrite par [5]:

$$J = J_s \left(\exp \left(\frac{q(V - JR_s)}{nkT} \right) - 1 \right) \quad (41)$$

Où :

$$J_s = A^{**} T^2 \exp(-q\phi_B/kT) \quad (42)$$

q : charge élémentaire (c),

V : tension aux bornes de la jonction (V),

k : constante de Boltzmann,

T : température (k),

J_s : densité du courant de saturation de diode (A),

R_s : résistance série

n : facteur d'idéalité de la diode.

7. Admittance d'une diode Schottky

L'expression de l'admittance et le schéma équivalent du composant peuvent être déterminés en appliquant à la structure un signal de modulation (a.c) de faible amplitude. La tension de polarisation $V_0(t)$ est alors la somme d'une composante continue V (due à la polarisation) et une composante alternative δV (correspondant au signal de modulation).

$$V_0(t) = V + \delta V \quad (43)$$

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

$$\delta V = V_M e^{j\omega_p t} \quad \text{avec } V_M \ll \frac{kT}{q}$$

L'effet de l'addition de la composante alternative δV se traduit par un abaissement du potentiel électrostatique $V_b(t)$ [9].

$$V_b(t) = V_b - \delta V_b(t) \quad \text{avec } \delta V_b \ll kT/q$$

L'expression de la densité du courant thermoionique définie par l'expression (22) peut s'écrire en fonction du potentiel électrostatique en présence de la composante alternative sous la forme [10, 11] :

$$J_{th}(t) = A^* T^2 e^{-\frac{qV_n}{kT}} e^{-\frac{q(V_b - \delta V_b(t))}{kT}} \quad \text{pour } V \gg kT/q \quad (44)$$

$$J_{Th}(t) = J_{dc} \left(1 + \frac{q}{kT} \delta V_b(t) \right) = J_{dc} + \delta J_{ac}(t) \quad (45)$$

Avec :

$$\delta J_{ac}(t) = J_{dc} \frac{q \delta V_b(t)}{kT} \quad (46)$$

La condition de neutralité électrique permet d'écrire [9] :

$$Q_{ss} = -(Q_m + Q_{sc}) \quad (47)$$

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

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

Un courant des états d'interface $J_{ss}(t)$ se produit à cause de cette variation du potentiel électrostatique $\delta V_b(t)$ qui facilite la capture et l'émission des électrons entre la bande de conduction et les pièges d'interface. Le courant des états d'interface $J_{ss}(t)$ est exprimé par [9, 11] :

$$J_{ss}(t) = \frac{dQ_{ss}(t)}{dt} = (G_{ss} + j\omega_p C_{ss}) \delta V_b(t) \quad (48)$$

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

De même, à l'aide de l'équation (47), on peut écrire :

$$\frac{dQ_{ss}(t)}{dt} = -\frac{dQ_m(t)}{dt} - \frac{dQ_{sc}(t)}{dt} \quad (49)$$

$$= \frac{dQ_m(t)}{d[V_0(t) - V_b(t)]} \frac{d[V_0(t) - V_b(t)]}{dt} - \frac{dQ_{sc}(t)}{dV_b(t)} \frac{dV_b(t)}{dt} \quad (50)$$

$$= j\omega_p C_i (\delta V_0(t) - \delta V_b(t)) - j\omega_p C_{sc} \delta V_b(t) \quad (51)$$

On pose :

$$C_{sc} + C_i = C_\Sigma \quad (52)$$

Donc :

$$J_{ss}(t) = j\omega_p C_i \delta V(t) - j\omega_p C_\Sigma \delta V_b(t) \quad (53)$$

L'admittance mesurée peut s'écrire sous la forme [12] :

$$Y = G + j\omega_p C \equiv \frac{\delta J_{ac}(t)}{dV(t)} + j\omega_p C_{HF} \quad (54)$$

C , G représentent la capacité et la conductance mesurées.

La combinaison des équations (48), (53) et (54) permet d'établir les relations de la capacité et de la conductance mesurée en fonction de la capacité et de la conductance des pièges.

$$G = \frac{qJ_{dc}}{kT} \frac{C_i(C_{\Sigma} + C_{ss})}{(C_{\Sigma} + C_{ss})^2 + (G_{ss}/w_p)^2} \quad (55)$$

$$C = \frac{qJ_{dc}}{kT} \frac{C_i G_{ss}/w_p^2}{(C_{\Sigma} + C_{ss})^2 + (G_{ss}/w_p)^2} + C_{HF} \quad (56)$$

En Exploitant les résultats obtenus, le schéma équivalent d'une diode Schottky en quasi-statique peut se résumer par le circuit illustré sur la figure A-9.

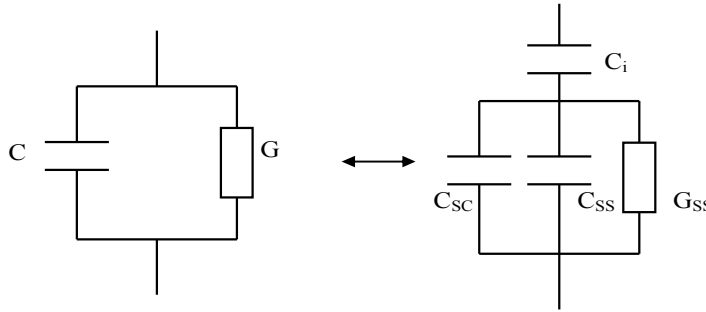


Figure A-9: Schéma équivalent d'une diode Schottky métal-semiconducteur.

Les deux quantités C_{ss} et G_{ss} contiennent beaucoup d'informations sur la distribution des états d'interface. L'analyse des équations (55) et (56) permet d'évaluer les expressions de la conductance et de la capacité des pièges.

$$G_{ss} = \frac{qJ_{dc}}{kT} \frac{w_p^2 C_i (C - C_{HF})}{G^2 + w_p^2 (C - C_{HF})^2} \quad (57)$$

$$C_{ss} = \frac{qJ_{dc}}{kT} \frac{GC_i - C_{\Sigma} [G^2 + w_p^2 (C - C_{HF})]}{G^2 + w_p^2 (C - C_{HF})^2} \quad (58)$$

La relation entre C_{ss} , G_{ss} et la densité d'état d'interface N_{ss} est définie par [13] :

$$C_{ss} = \frac{SqN_{ss}}{w_p \tau} \arctg(w_p \tau) \quad (59)$$

$$G_{ss} = \frac{SqN_{ss}}{2\tau} \ln(1 + w_p^2 \tau^2) \quad (60)$$

τ est la constante de temps des pièges définie par [14] :

$$\tau = \frac{1}{V_{th} \sigma_n N_d} \exp\left(\frac{qV_{b0}}{kT}\right) \quad (61)$$

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

Bibliographie

- [1] O. Bllaouhamou, « Le contact Métal Semiconducteur, La diode schottky ». Mise à jour le 13 janvier 2017. Université Ibn Tofail, Cours. [En ligne] <https://www.slideshare.net/omarbllaouhamou1/cours-master-phys-sc-chap-4-2015>
- [2] B. BOITTEAUX, « Chapitre 5 : Structure Métal-Semiconducteur ». Mise à jour le 30 mars 2004. Polytechnique de Lille, Cours. [En ligne] <http://www.polytech-lille.fr/cours-atomecircuit-integre/unip/unip500.htm>
- [3] C. ALGANI, « Composant électronique », Conservatoire National des Art des des Métiers, Cours. [En ligne] http://easytp.cnam.fr/algani/images/ELE101_CNAM_1_2008.pdf
- [4] A. CHAVOT & P. MASSON, «Physique des semi-conducteurs », Ecole Polytechnique Universitaire de Marseille, Cours, (2004/2005).
- [5] S. GHACHAME, Caractéristiques électriques d'une diode à barrière de Schottky (SBD) avec et sans couche isolante SiO₂ à la température ambiante, Mémoire Master, Université Mohammed Kheider, Biskra (2014).
- [6] B. NEDJEDIA, Etude des propriétés électriques en régime statique d'une structure Schottky, Mémoire Magistère, Université de Batna, (2010).
- [7] S. M. Sze, Physics of Semiconductor Devices, 2nd ed. Wiley, New York, 245 (1981).
- [8] N. HERISSI, Extraction des paramètres des structures Métal-Semiconducteurs (Ti/Pt/AuGaAs) à partir des caractéristiques courants-tensions (I-V), Mémoire Magister, Université de Tébessa, (2012).
- [9] P. Chattopadhyay, Solid State Electronics, 38 739 (1995).
- [10] P. Chattopadhyay and A. N. Daw, Solid State Electronics, 28, 831 (1985).
- [11] P. Chattopadhyay, Solid State Electronics, 36, 1641 (1993).
- [12] K. Ploog and H. J. Queisser, Physical Review Letters, 57, 1080 (1986).
- [13] E. H. Nicollian and A. Goetzberger, Bell syst. Tech. J. 46, 1055 (1967).
- [14] A. Singh, Solid State Electronics, 28, 223 (1985).

Annexe B

Annexe B : Dispositifs expérimentaux et techniques de caractérisations.

1. Introduction

Cette thèse porte sur l'étude des propriétés physico-chimiques, et électriques des structures Au/InN/InP(100) et MOS-HEMTs sur substrats de silicium. Elle s'est déroulée au Laboratoire de Microélectronique Appliquée (AMEL) de l'Université de Sidi Bel Abbès. Ce travail a été mené en étroites collaborations avec :

- L'équipe surface et interface de l'institut PASCAL de l'université Clermont Auvergne de Clermont-Ferrand (France) pour la réalisation et les analyses de surface et d'interface (XPS) des nanostructures de type Au/InN/InP(100).
- Centre de Développement des Technologies Avancées (CDTA) pour les caractérisations électriques et Raman.
- Le Laboratoire Nanotechnologies et Nanosystèmes (LN2) de l'université de Sherbrooke au Canada pour la réalisation et la caractérisation électrique des structures HEMTs.

Les dispositifs expérimentaux utilisés pour l'élaboration et la caractérisation des structures d'études sont décrits ci-dessous.

2. Bâties utilisés pour l'élaboration des nanostructures InN/InP(100)

Le dispositif expérimental décrit ci-dessous est disponible au niveau de l'institut PASCAL de l'université Clermont Auvergne de Clermont-Ferrand (France). Celui-ci a été utilisé pour l'élaboration des structures d'études InN/InP(100). Les bâties ultravioletes sont constituées d'installations permettant un suivi de l'opération de nitruration par des analyses complètes de la surface d'échantillon. Dans les bâties, les chambres sont séparées par des vannes, et une canne de transfert permet de faire circuler l'échantillon entre les chambres sous ultraviolet sans polluer la surface des échantillons.

Le dispositif expérimental se compose de trois parties (figure B-1): une chambre d'introduction rapide, une première chambre de préparation des échantillons comprenant le canon à ions et la cellule d'évaporation d'azote, ainsi qu'une deuxième chambre d'analyse dotée d'un analyseur hémisphérique HSA (Hemi Spherical Analyser) et d'une source à rayons X pour les analyses XPS (bâti 2); d'un analyseur à champ retardateur RFA (Retarding Field Analyser) et d'un Canon à électrons pour les analyses d'électrons Auger (bâti 1).

Les deux bâties ultravioletes possèdent un certain nombre d'appareils, tel que :

- Chambre d'introduction rapide d'échantillons ;
- Porte échantillons chauffant ;
- Canon à ions ;
- Source d'azote de type plasma à décharge ;
- Les pompes (primaire, turbo moléculaire et ionique).

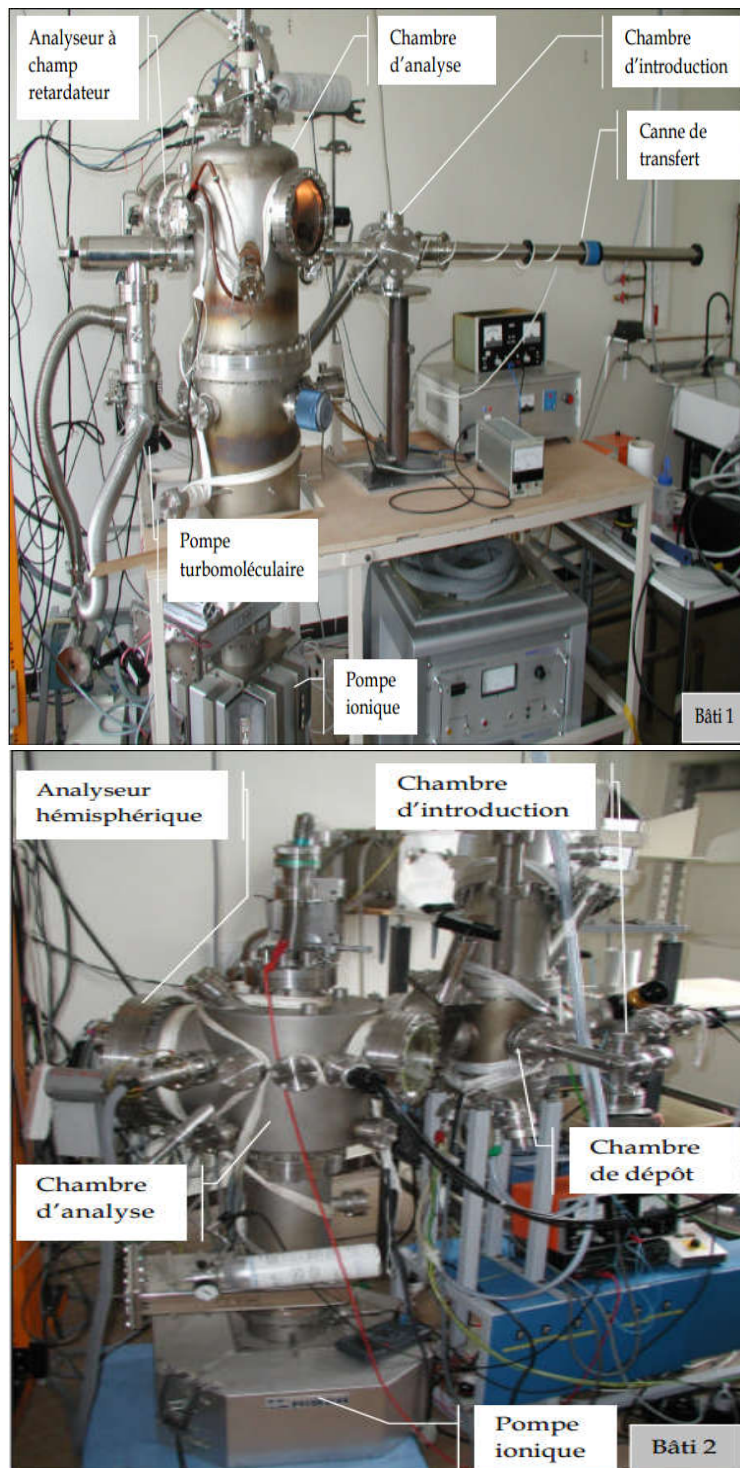


Figure B-1 : images des deux bâtis ultravide utilisés pour la nitruration et les analyses in situ [1]

Le canon à ions permet le nettoyage in situ des échantillons par bombardement avec des ions argon (Ar^+). Il est composé d'un filament, d'une cage et d'un système de focalisation. Une pression d'argon pur de 10^{-2} Pa est maintenue dans la chambre grâce à une vanne micro-fuite. Les électrons, produits par le filament incandescent, traversent la cage portée à un potentiel positif, ils heurtent ainsi les molécules d'argon et les ionisent. Les ions créés sont ensuite accélérés par la cage et focalisés par des lentilles sur l'échantillon. Ainsi l'énergie des ions, comprise entre 150 et 2000 eV, est contrôlée par le potentiel de la cage et l'intensité du filament

régule la quantité de molécules ionisées et donc la densité de courant d'ions Ar- bombardant l'échantillon (mesurée grâce à un ampèremètre).

Lors du nettoyage ionique, il faut prêter attention à la valeur de différents paramètres de façon à garantir un nettoyage ionique identique pour chaque échantillon. Ces paramètres sont la pression d'argon, l'énergie des ions (fixée à 300 eV pour le nettoyage des échantillons d'InP) et la densité de courant ionique (fixée à $2 \text{ mA}\cdot\text{cm}^{-2}$) qui permet de connaître la dose d'ions projetés à la surface de l'échantillon [2].

La source à rayons X comporte un filament qui génère des électrons suite à son échauffement. Les électrons sont ensuite accélérés sous une différence de potentiel de 15 keV appliquée entre le filament et l'anode. Les électrons ionisent l'anode (magnésium/aluminium) qui émet un rayonnement X non monochromatique caractéristique du matériau dont elle est constituée.

Une plate-forme en acier inoxydable amagnétique supporte les portes échantillons. Cette plate-forme est formée de deux parties : une partie qui regroupe cinq petits portes échantillons permettant de stocker des substrats et d'une partie analyse (bâti 1). Un manipulateur permet de transférer les échantillons du parking à la position d'analyse. Le porte-échantillon chauffant fabriqué en cuivre pour une bonne conduction thermique et électrique, il est composé de deux parties, une mobile et l'autre fixe, cette dernière est équipée d'un thermocouple pour assurer le chauffage de l'échantillon indispensable durant l'opération de nitruration. La partie mobile quant à elle sert à fixer l'échantillon [2].

Cellule d'évaporation d'azote

Dans la source de production d'azote par plasma à décharge (bâti 1), la molécule de diazote est brisée par une différence de potentiel d'environ 2 kV entre une anode et une cathode créant ainsi un plasma d'espèces azotées. L'anode est constituée d'un cylindre en acier inoxydable enchâssé dans un tube de quartz. Ce cylindre est porté à la haute tension. La cathode, reliée à l'enceinte ultravide, est à la masse. Elle est percée d'un trou de diamètre 1,5 mm permettant aux espèces azotées de sortir vers l'enceinte [1].

La molécule de diazote est dissociée par une différence de potentiel de 2.5 kV entre une anode et une cathode fournissant un courant de décharge de 2mA et créant ainsi un plasma contenant des espèces réactives (N , N^+ , N^{2+}) (figure B-2). L'anode est constituée par un cylindre en acier inoxydable enchâssé dans un tube en Pyrex. Ce cylindre est porté à la haute tension positive. La cathode, reliée à l'enceinte ultra-vide, est à la masse. La configuration du champ électrique, assuré par la géométrie de la source, concentre les espèces actives vers le trou de sortie. Ce trou, de 1.5 mm de diamètre, permet aux espèces azotées créées de s'échapper grâce à la différence de pression existant entre la cellule et l'enceinte pompée par une pompe turbomoléculaire. La cathode a un deuxième trou latéral admettant l'introduction régulée du diazote N_2 pur à 99,999% provenant d'une bouteille. L'inconvénient d'une telle source réside dans son fonctionnement à une pression d'azote diatomique relativement élevée (10^{-1} Pa dans l'enceinte) et dans la quantité d'ions azote N^{2+} , N^+ produits : le courant échantillon mesuré est de l'ordre du micro-ampère par centimètres carré. La puissance de cette source est très faible, elle ne dépasse pas les 10W [3].

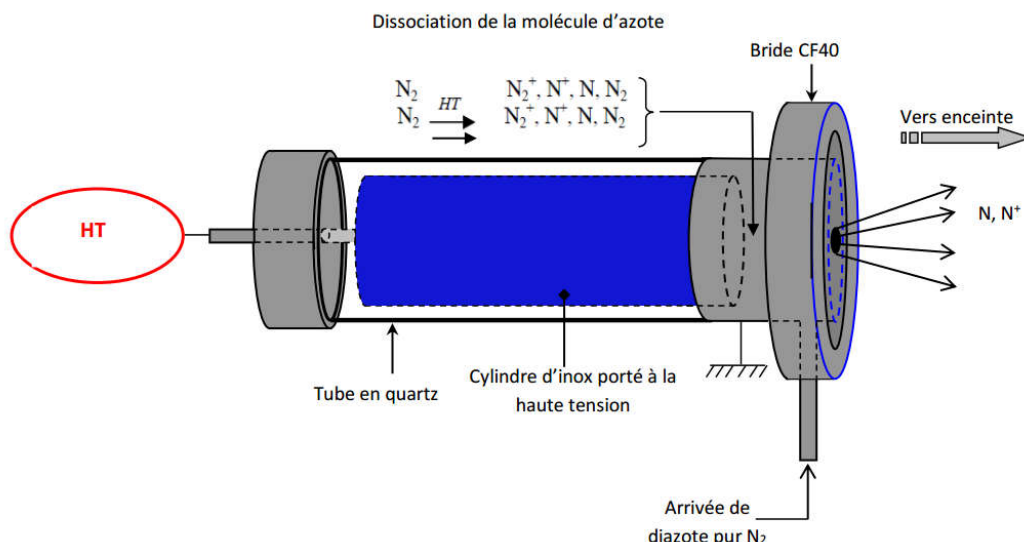


Figure B-2 : schéma de la source d'azote utilisé pour la nitruration [1]

3. Les spectroscopies utilisées :

Les spectroscopies que nous avons employées, pour l'analyse de la surface et d'interface d'échantillons, sont basées sur le recueil de signal par un substrat soumis à une excitation. Ces signaux proviennent d'une interaction rayonnement avec le matériau soit élastique, soit inélastique puis suivent un cheminement élastique, c'est à dire sans perte d'énergie, dans la matière jusqu'à ressortir du matériau. Dans les présents travaux de recherche, deux principales sources d'excitation ont été utilisées : l'excitation au moyen d'un faisceau laser focalisé sur la surface (Raman) ou l'excitation par un faisceau de photons X (XPS). Dans ce qui suit, ces deux techniques spectroscopiques seront présentées.

3.1. Spectroscopie de photoélectrons sous excitation X [3-6]:

La spectroscopie de photoélectrons induits par des rayons X a été découverte par K.Siegbahn, physicien suédois, prix Nobel de physique en 1981 [4]. Elle est couramment appelée XPS (X-ray Photoelectron Spectroscopy) ou ESCA (Electron Spectroscopy for Chemical Analysis) et est utilisée pour l'étude de la nature et de la composition chimique des surfaces.

Le principe général de cette technique consiste à envoyer un faisceau de rayons X, qui interagit avec la surface de l'échantillon. En réponse, l'échantillon examiné renvoie plusieurs rayonnements spécifiques, qui sont détectés et analysés par l'analyseur. Le rayonnement analysé provient d'une zone très proche de la surface, d'une profondeur de quelques nanomètres.

Il faut dans un premier temps préparer l'échantillon. La taille peut varier de quelques millimètres à quelques centimètres, selon l'appareil et surtout selon la technologie utilisée.

L'échantillon est introduit dans une première enceinte (dite chambre d'entrée). Cette enceinte est mise sous vide grâce à un pompage secondaire (pompage permettant d'atteindre un vide inférieur à 10^{-5} Pa). Une fois ce vide atteint, l'échantillon est transféré en chambre d'analyse et l'étude XPS peut commencer.

Le vide dans cette chambre d'analyse varie de 10^{-6} à 10^{-9} Pa. Le dessin suivant résume d'une manière schématique le principe d'acquisition d'un spectre XPS.

Une fois dans le vide, grâce à l'analyseur d'électrons, les électrons ayant une énergie de liaison avant de quitter l'atome sont collectés. L'intensité (nombre d'électrons) en fonction de cette énergie de liaison permet d'obtenir un spectre de photoélectrons X. La figure B-3 représente une schématisation du dispositif expérimental de la chambre d'analyse par spectroscopie de photoélectrons. A chaque énergie correspond un type d'atome. L'aire d'un pic est proportionnelle à l'intensité (nombre d'atomes) de l'élément étudié. En calculant le rapport de chacune de ces aires au spectre total, on obtient la composition chimique de l'échantillon.

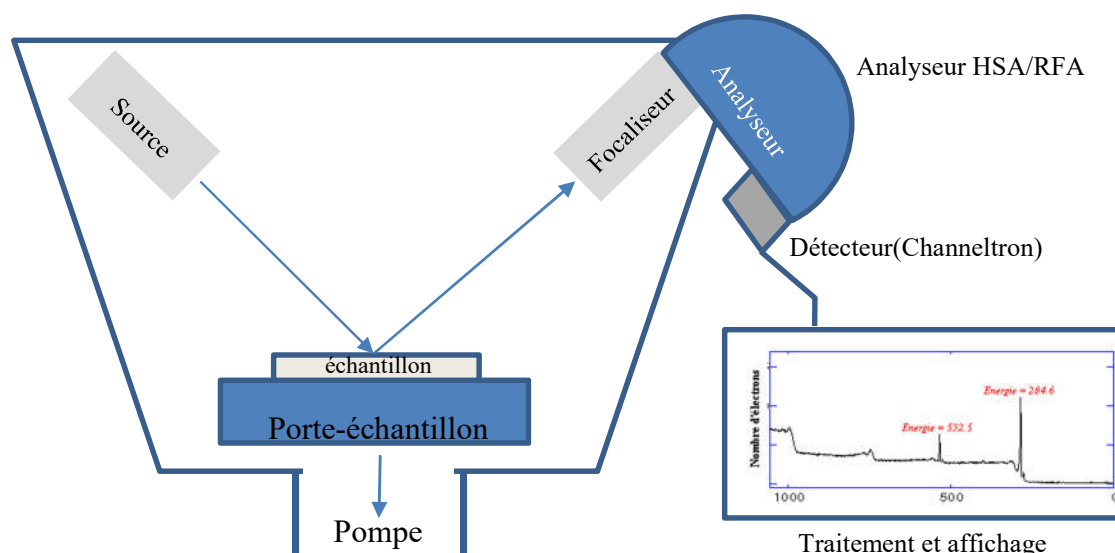


Figure B-3 : schématisation du dispositif expérimental de la chambre d'analyse par spectroscopie de photoélectrons.

En absorbant un photon, un atome reçoit une quantité d'énergie $h\nu$. Il émet alors un électron afin de conserver son état de stabilité initial. L'électron ainsi prend la totalité de l'énergie du photon incident et se libère de l'atome, puis de la matière et se déplace grâce à son énergie cinétique. En XPS, les photons incidents possèdent généralement une énergie de 1 à 2 KeV. Ils peuvent provenir d'une source classique avec une anode en magnésium, comme c'est le cas de notre étude (la source est $Mg\ \alpha$), et/ou aluminium ou bien d'un rayonnement synchrotron.

La désexcitation peut s'effectuer par émission radiative (fluorescence) ou par transition Auger. Le principe de la conservation de l'énergie permet d'écrire le bilan énergétique suivant, lors de l'absorption d'un photon :

$$h\nu = E_{\text{cinétique}} + E_{\text{liaison}} + \chi \quad (1)$$

$h\nu$: Energie incidente du faisceau de rayon X.

$E_{\text{cinétique}}$: Energie cinétique de l'électron à la sortie de l'échantillon.

E_{liaison} : Energie de liaison de l'électron dans l'atome.

χ : Travail de sortie.

Pour déterminer l'énergie de liaison l'électron dans la matière, il est indispensable de connaître son énergie cinétique à la sortie. Un système de lentilles de focalisation attire l'électron vers un analyseur hémisphérique. Cet analyseur est constitué de deux plaques, portées à un potentiel. L'électron en entrant dans l'analyseur est soumis à un champ électrique dont les forces résultantes lui font décrire une trajectoire répondant à l'équation.

$$F = qE = m(V^2/R) \quad (2)$$

F : Force;

V : vitesse ;

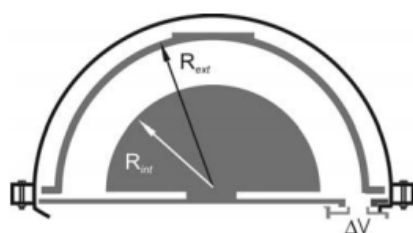
R : rayon de la trajectoire ;

E : champ électrique résultant du potentiel ΔV ;

m : masse de l'électron ;

q : charge de l'électron ;

À un champ électrique donné et donc à un potentiel U, correspond une énergie cinétique.



$$E_{\text{cinétique}} = |q| \cdot \Delta V \left(\frac{R_{\text{ext}}^2 \cdot R_{\text{int}}^2}{R_{\text{ext}} - R_{\text{int}}} \right) \quad (3)$$

Figure B-4 : Représentation schématique des deux demi-sphères de l'analyseur hémisphérique.

Où R_{int} et R_{ext} représentent les rayons intérieur et extérieur, respectivement, des deux demi-sphères de l'analyseur, tel qu'il est représenté sur la figure B-4, et q la charge élémentaire portée par l'électron. L'équation (3) indique qu'il existe une relation de proportionnalité entre l'énergie cinétique que l'on veut déterminer et la différence de potentiel aux bornes de l'analyseur. Dans certains cas, le potentiel de l'analyseur est maintenu constant ; on fait alors varier, à l'entrée de l'analyseur, un potentiel appelé retardateur qui sert de filtre énergétique.

Après passage dans l'analyseur, le courant électronique est amplifié et détecté par plusieurs systèmes, notamment avec l'utilisation d'un détecteur d'électrons et d'un multiplicateur d'électrons (Channel Electron Multiplier ou Channeltron).

Le spectre XPS contient de nombreux pics, car les photoélectrons proviennent de plusieurs niveaux d'énergie dans l'atome. On définit les états quantiques des électrons avec les trois nombres suivants: le nombre quantique principal $n = 1,2,3,\dots$, exprimant les couches K, L, M, ..., le nombre quantique secondaire $\ell = 0,1, 2,\dots,(N-1)$, désignant les sous-couches s, p, d, f, et le nombre quantique du spin $s = \pm 1/2$. Le moment angulaire total de l'électron correspond au nombre $j = (\ell + s)$. Le système utilisé pour désigner les pics varie suivant les méthodes

d'analyses. Le tableau 3 montre la notation employée pour désigner les pics XPS et la nomenclature rayons X.

Tableau B.1 : Désignation des pics XPS et nomenclature des rayons X [7]

nombre quantique			Symbol du niveau	Pics XPS	Notation Auger
n	ℓ	j			
1	0	1/2	$^1S_{1/2}$	1s _{1/2}	K
2	0	1/2	$^2S_{1/2}$	2s _{1/2}	L ₁
2	1	1/2	$^2P_{1/2}$	2p _{1/2}	L ₂
2	1	3/2	$^2P_{3/2}$	2p _{3/2}	L ₃
3	0	1/2	$^3S_{1/2}$	3s _{1/2}	M ₁
3	1	1/2	$^3P_{1/2}$	3p _{1/2}	M ₂
3	1	3/2	$^3P_{3/2}$	3p _{3/2}	M ₃
3	2	3/2	$^3D_{3/2}$	3d _{3/2}	M ₄
3	2	5/2	$^3D_{5/2}$	3d _{5/2}	M ₅

Le suivi du processus de nitruration des substrats InP a été effectué en analysant la surface par la spectroscopie XPS pour déterminer la composition chimique. Les positions des niveaux de cœur des photoélectrons de la surface d'InP(100) nitruré sont regroupées dans le tableau suivant :

Tableau B.2 : Position en énergie des niveaux de cœur de photoélectrons de la surface d'InP nitrurée

Liaisons	In (3d _{5/2})	In (4d _{5/2})	P (2p _{3/2}) et (2p _{5/2})	N (1s)
In-P	444,3 [8]	17,6 [11]		
	444,1 [9]	17,7 [12]		
	444,7 [10]	17,27-17,86 [13]		
In-In		16,7 [11]		
		16,6 [12]		
		16,92 [13]		
In-N	445,9 [8]			
	445,6 [8]			
	445,2 [9]			
	443,3 [10]			
	445,5 [10]			
In-N-P			129,5 [9]	397,8 [9]
P-In			128,4 [9]	
			128,8 [10]	
P-N			133,4-134,5 [8]	
			131,8 [9]	
N-In				397,1 [8]
				396,6 [8]
				396,8 [9]
				396,7 [10]
				397,2 [14,15]

3.2. Spectroscopie Raman

En 1928, Monsieur Raman découvre qu'en bombardant des molécules (organiques à cette époque) avec un rayonnement dans le visible ces dernières réémettent des photons de la même fréquence que le rayonnement incident mais aussi des photons de fréquences très légèrement différentes (absolument non présentes dans le rayonnement incident). Sir C.V. Raman qui a découvert ce phénomène et a obtenu le prix Nobel de physique en 1930 pour ses travaux.

Lorsque les photons heurtent la matière, Une grande partie de ces photons diffusés ne changent pas de longueur d'onde, ils gardent la même énergie. La lumière dispersée a la même couleur, par conséquent s'il n'y a pas d'échange d'énergie entre la molécule et le photon incident, alors la diffusion est dite élastique et la longueur d'onde du photon diffusé n'est pas décalée, ce phénomène est appelé diffusion Rayleigh.

Cependant, un autre phénomène apparaît, il concerne une petite partie des photons diffusés avec une longueur d'onde différente. Dans ce cas, les photons échangent de l'énergie avec les électrons des atomes de l'échantillon, cela se produit généralement par rapport aux vibrations moléculaires. On parle aussi de diffusion inélastique. Ce phénomène de dispersion est appelé l'effet Raman. La figure B-5 résume les différentes diffusions d'une excitation lumière laser par la matière.

La spectroscopie Raman est, donc, une technique optique d'analyse physico-chimique non destructive (sous réserve d'adapter la puissance du laser) et non invasive de milieux très divers (solides ou liquides, organiques ou minéraux, semi-conducteurs ou isolants, cristaux ou verres, polymères, etc.). Il s'agit d'une spectroscopie vibrationnelle (tout comme la spectroscopie infrarouge) qui repose sur un phénomène de diffusion inélastique de la lumière (interaction lumière-matière avec échange d'énergie). En collectant la lumière diffusée par l'échantillon, on obtient un spectre Raman qui nous renseigne sur sa structure : liaisons chimiques, arrangement cristallin, symétrie, ...etc. La figure B-6 illustre l'acquisition d'un spectre Raman.

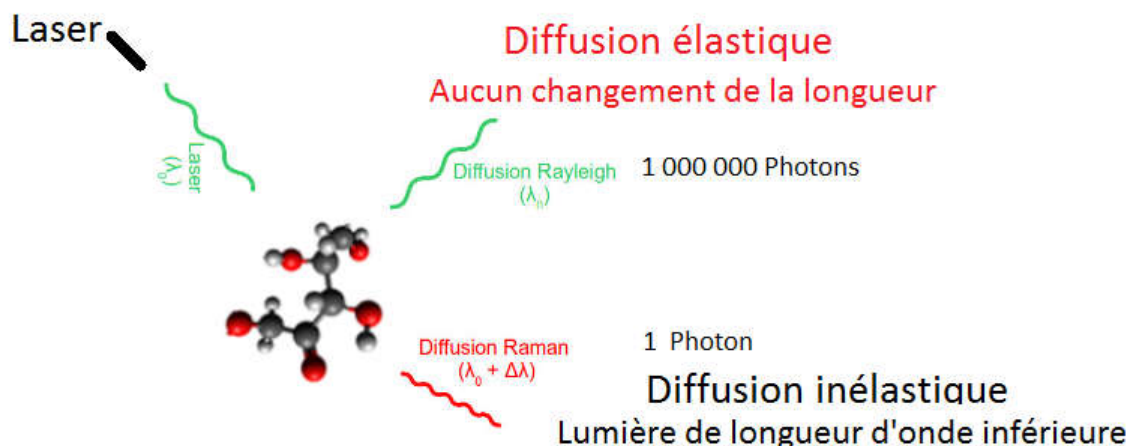


Figure B-5 : Diffusion élastique (Rayleigh) et inélastique (Raman) de la lumière par une matière soumise à une excitation Laser.

La structure d'un milieu étant sensible à l'environnement (contrainte, température...), la spectroscopie Raman peut aussi être utilisée pour extraire un paramètre physique externe ou interne au milieu : déformation, concentration et composition d'un produit, caractéristiques d'une transition de phase, degré d'ordre d'une structure, anharmonicité, etc.

Lors d'une analyse de spectre, on s'intéresse essentiellement à trois paramètres caractérisant une raie Raman (ou bande vibrationnelle) : la position, l'intensité et la largeur à mi-hauteur. La position permet d'identifier une espèce (à travers les liaisons), l'intensité d'une raie peut souvent être reliée à la concentration de l'espèce et la largeur à mi-hauteur permet de donner des indications sur le désordre structural et dynamique d'un élément. L'évolution d'une raie ou d'un ensemble de raies permet également d'obtenir des informations sur l'état de l'échantillon. Ainsi, un décalage d'une raie par exemple peut se produire en fonction de la température ou de l'état de contrainte mécanique.

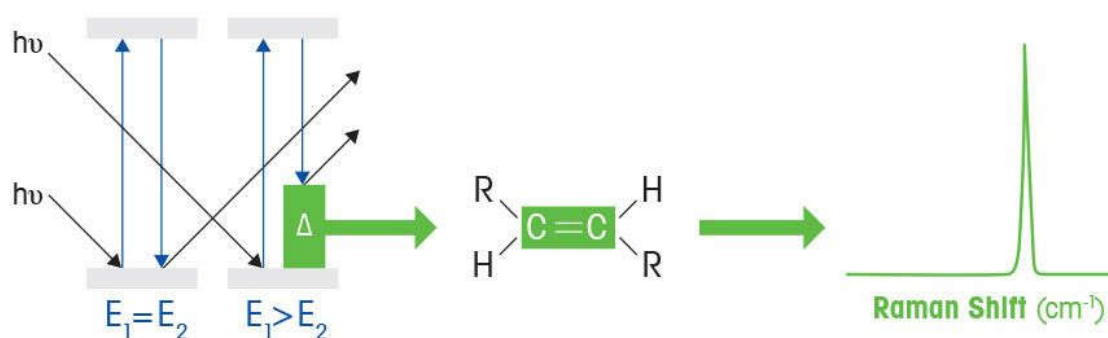


Figure B-6 : Illustration d'acquisition d'un spectre Raman.

Un faible nombre de photons, environ 1 photon pour un million, va se diffuser à une fréquence différente des photons excitateurs. Le rendement Raman est donc très faible. Il nécessite des lasers focalisés et des puissances (quelques centaines de milliwatts) qui peuvent détériorer (brûler) les échantillons. Une analyse des vibrations possibles de la molécule excitée (élongation, torsion, rotation ...) démontre qu'à chaque différence de longueur d'onde entre la longueur d'onde d'origine du laser et une raie correspond un mode de vibration. En effet une différence de longueur d'onde correspond à une énergie. Un mode de vibration correspond à une énergie nécessaire à mettre en œuvre pour entrer en résonance. Ces 'delta' d'énergies correspondent d'ailleurs à ceux observés en infra rouge. Cependant certaines vibrations sont actives en IR et pas en Raman et vice versa.

Dans un cristal, ces deux techniques ne sont pas sensibles aux mêmes types de vibrations et sont donc complémentaires. Parmi les phonons présents dans la structure wurtzite, les deux modes E2 ont une réponse Raman, les modes A1 et E1 ont une réponse Raman et infrarouge, et les modes B1 ne répondent pas, ils sont dits silencieux. Bien que les modes B1 soient silencieux, il est tout de même possible de les observer dans un matériau désordonné par mesure de diffusion inélastique de rayons X, à cause de la perte de symétrie dans le réseau [16]. Les valeurs des phonons pour le GaN et l'InN sous forme wurtzite et le 3C-SiC sont présentées dans le tableau B.3.

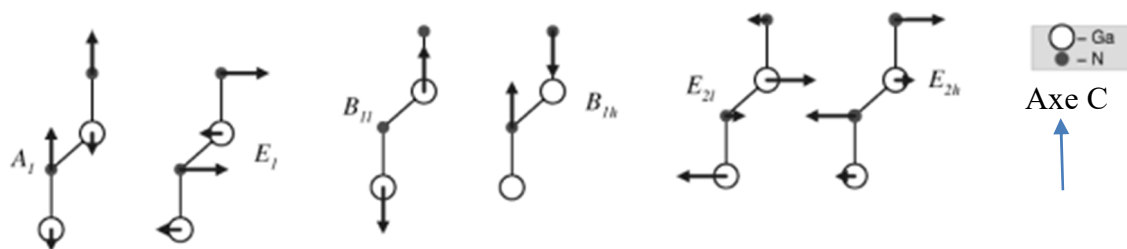


Figure B-7 : Déplacements atomiques des six phonons présents dans la structure wurtzite, exemple dans le GaN [17].

Tableau B.3 : Phonons présents dans la structure wurtzite du GaN, de l’InN et du 3C-SiC.

Phonons (cm ⁻¹)	GaN [18,19, 20]			InN[20, 21,22]			3C-SiC [23]
E ₂ (bas)	144	144	138*	83*	88	93*	
B ₁ (bas)			334*	225*		202*	
A ₁ (TO)	531.8	531	550*	443*	440	443*	796
E ₁ (TO)	558.8	560	572*	467*		470*	
E ₂ (haut)	567.6	568	574*	483*	490	492*	491
B ₁ (haut)			690*	456*		568*	
A ₁ (LO)	734		733*	586*	590	589*	590
E ₁ (LO)	741		737*	595*		605*	

Les valeurs avec l’indice * sont issues de simulations.

4. Description du matériel de caractérisations électriques

Les mesures électriques ont été réalisées à l’aide de bancs de mesure disponibles en salle de caractérisations électriques du Centre de Développement des Technologies Avancées (CDTA). Le banc de mesure est décrit par la figure B-8 :

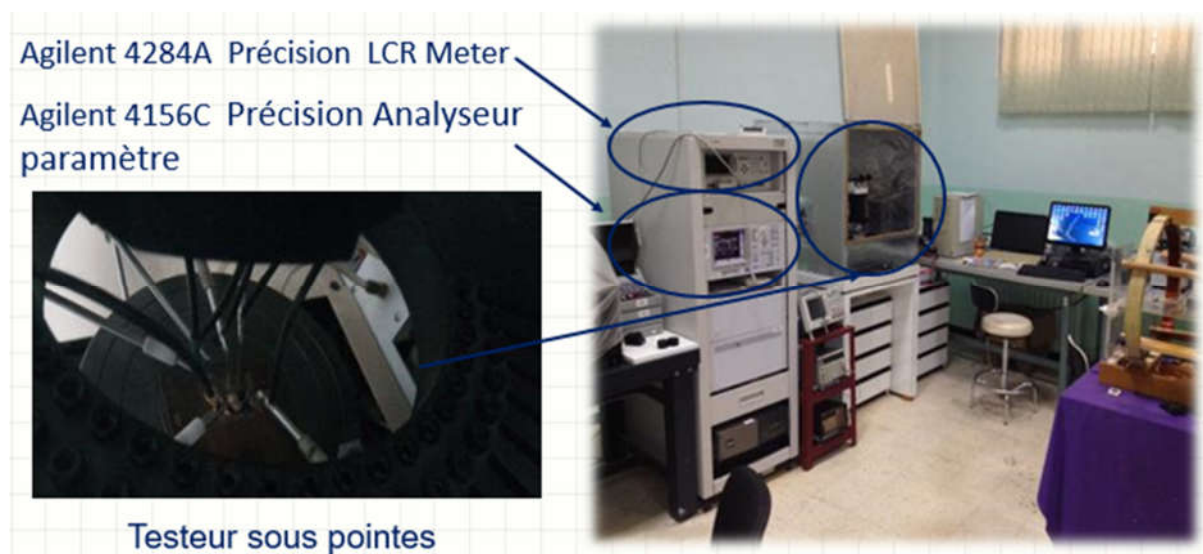


Figure B-8: Image du banc de mesures électriques.

4.1. Banc de mesure I-V

Les mesures électriques ont été réalisées à partir d'un banc de mesure courant-tension. Il s'agit d'un analyseur de paramètre type Agilent4156C. La figure B-9 illustre le banc de mesure aux bornes des diodes.

L'échantillon est placé sur une station sous pointe reliée au banc de mesure. On applique une tension V à la structure et on relève directement le courant qui la traverse. Les résultats sont directement visualisés sur l'écran du banc puis enregistrés au moyen d'un programme d'acquisition développé en Labview.

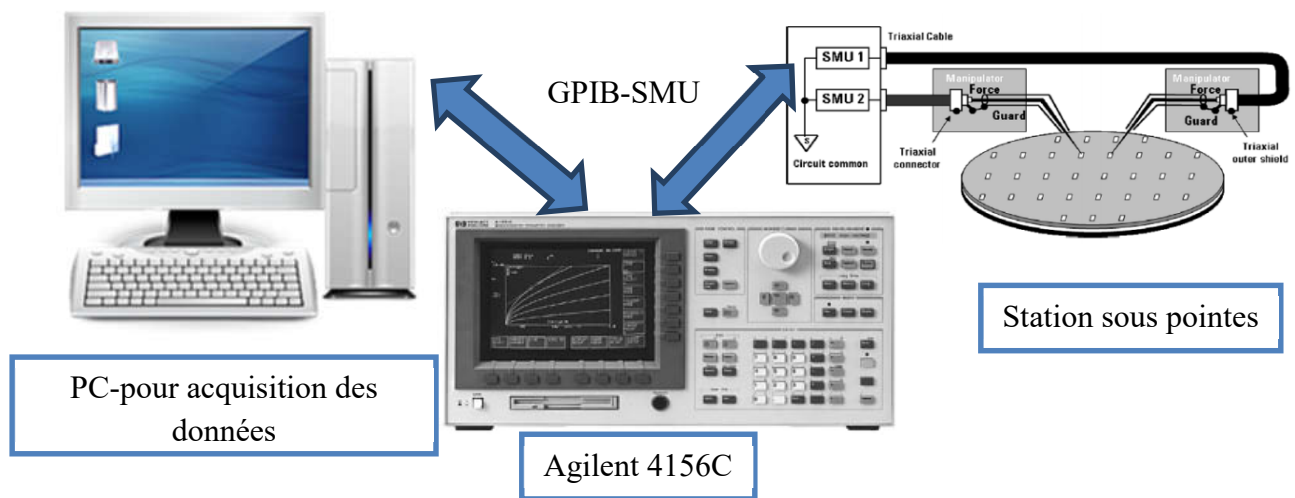


Figure B-9: Représentation du banc de mesure pour la caractérisation courant-tension.

4.2. Banc de mesure C-V

Les mesures $C-V$ et $G-V$ en fonction de la fréquence sont réalisées à l'aide d'un banc de mesure capacité-tension, «Agilent 4284A Précision LCR Meter» travaillant à un maximum de 1 MHz de fréquence. Le principe de mesure est donné par la figure B-10.

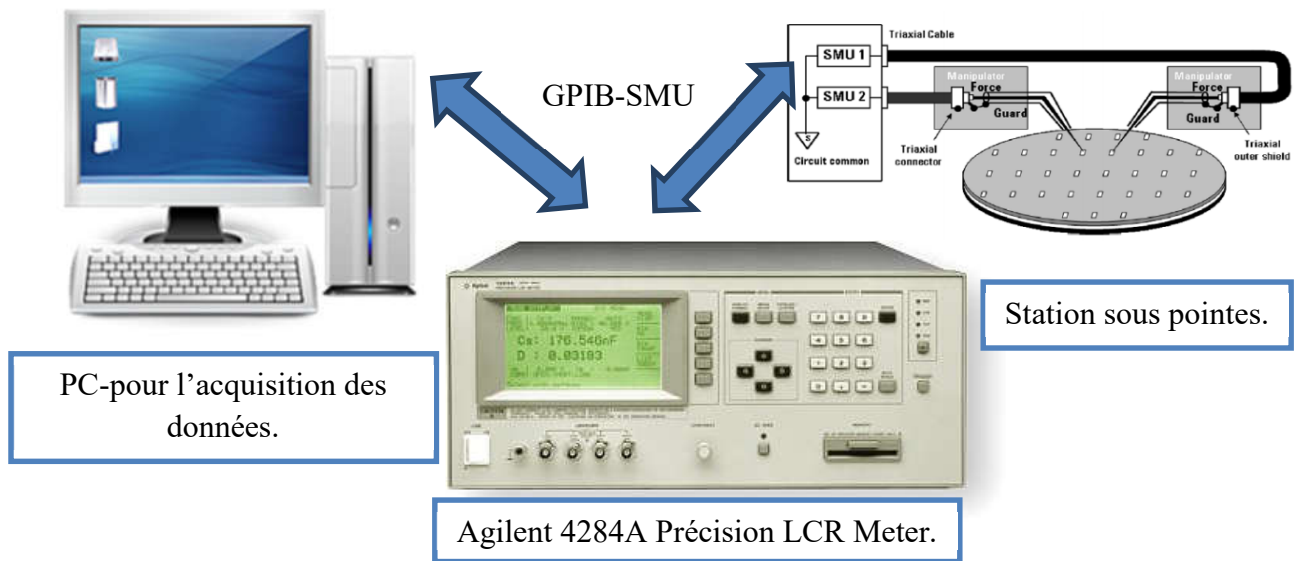


Figure B-10: Banc de mesures capacité-tension et conductance-tension en fonction de la fréquence.

Lors d'une mesure, l'échantillon repose sur un porte substrat métallique, permettant d'assurer un bon contact électrique de face arrière. Le banc de mesure est relié à un ordinateur par le biais d'une carte d'interface. Le logiciel adapté à ce banc nous facilite la manipulation, et les résultats sont directement visualisés sur le moniteur. Les mesures se font à l'obscurité.

4.3. Banc de mesure utilisé pour la caractérisation des MOS-HEMTs

Les mesures électriques sur les MOS-HEMTs ont été effectuées au laboratoire LN2 à l'Université de Sherbrooke au Canada. Le banc de mesure est identique à celui décrit précédemment. Il comprend une station sous pointes manuelle avec 4 manipulateurs, deux analyseurs paramétriques I-V, un analyseur d'impédance gain-phase et un appareil de mesure à sonde à 4 pointes pour mesures de résistivité. La figure B-11 illustre le banc de mesure utilisé pour caractériser les transistors HEMTs.

La station sous pointes manuelle permet d'effectuer les mesures électriques sous pointes avec 4 SMUs (unités de sources et de mesures). Un Analyseur paramétrique Keithley, modèle S4200 est utilisé pour la caractérisation électrique. C'est un analyseur paramétrique de très hautes performances, il permet des mesures synchronisées courant-tension (I-V), capacité-tension (C-V) et les mesures I-V en impulsions ultrarapides. L'appareil dispose d'un logiciel de contrôle de l'instrument, d'acquisition et de traitement des données.

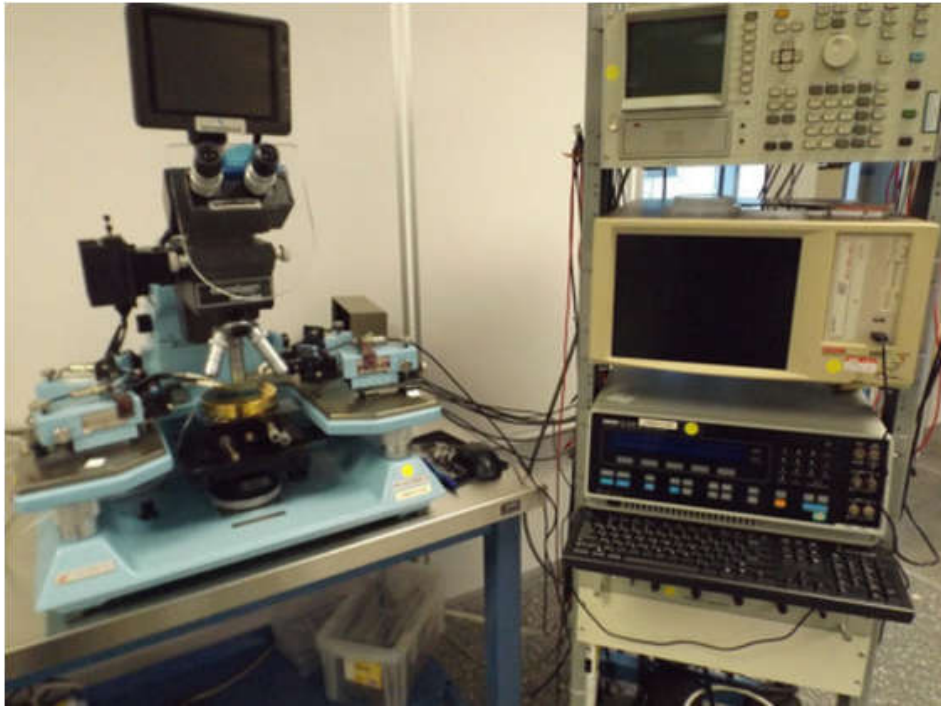


Figure B-11: Illustration Image du banc de mesures électriques [23]

Bibliographie

- [1] Matthieu Petit. Etude par spectroscopies électroniques de la nitruration du phosphore d'indium. Thèse de doctorat de l'Université Blaise Pascal - Clermont-Ferrand II (2004).
- [2] A. Talbi Etude de la nitruration des substrats InP(100) –Analyses spectroscopique et caractérisations électriques associés. Thèse de l'université de Sidi Bel Abbes (2007).
- [3] G. Monier. Nanostructuration de surfaces de GaAs : oxydation et nitruration. Thèse de doctorat de l'Université Blaise Pascal - Clermont-Ferrand II (2011).
- [4] K. M. G Siegbahn. Nobel lectures, Elsevier Publishing Company, Physics (1992-1941)
- [5] Cours en ligne de techniques d'analyse physico-chimique :
https://cours-examens.org/images/Etudes_superieures/ingeniorat_environnement/4_annee/Techniques_analyse_physico_chimique/Caracterisation/Chapitre4_Analyse_de_surf ace.pdf
- [6] Roland Benoit, CNRS Orléans. Cours en line : www.lasurface.com
- [7] Richard P. Gunawardane et Christopher R. Arumainayagam dans Auger Electron Spectroscopy, (2006).
- [8] T. Akane, K. Sugioka, K. Midorikawa, Jan. J. Dubowski, N. Aoki, K. Toyoda, J. Appl. Phys, 90 (12), 5851-5855 (2001).
- [9] Y. Suzuki, H. Kumano, W. Tomota, N. Sanada, Y. Fukuda, Applied Surface Science 162-163, 172-177 (2000).
- [10] J. S. Pan, A.T.S. Wan, C.H.A. Huan, H.S. Tan, K.L. Tan, J. Phys. D : Appl. Phys. 29 2997-3002 (1996).
- [11] B. Gruzza, L. Bideux, P.S. Mangat, P. Soukiassian. Synthetic Metals, 90, 223-227 (1997).
- [12] Y. Chao, K. Svensson, D. Radosavké, V. R. Dhanak, M. C. R. Hunt, L. Siller Phys. Rev. B, 66, 075323, (2002).
- [13] Wei-Hsiu Hung, Jyh-Tsung Hsieh, Huey-Liang Hwang, Hsin-Yen Hwang, Che-Chen Chang. Surf. Sci. 418, 46-54 (1998).
- [14] P. Soukiassian, H.I. Starnberg, T. Kendelewicz, App. Surf. Sci. 56-58, 772-776 (1992).
- [15] L Bideux, Y. Ould-Metidji, B. Gruzza, V. Matolin, Surf. Interface Anal.34, 712-715 (2002).
- [16] T. Ruf, J. Serrano, M. Cardona, P. Pavone, M. Pabst, M. Krisch, M. D'Astuto, T. Suski, I. Grzegory, and M. Leszczynski. Physical Review Letters. Vol. 86, 906 (2011).

- [17] J. M. Zhang, T. Ruf, M. Cardona, O. Ambacher, M. Stutzmann, J.-M. Wagner, and F. Bechstedt, *Physical Review B*, Vol. 56, 14399 (1997).
- [18] V. Yu. Davydov, Yu. E. Kitaev, I. N. Goncharuk, A. N. Smirnov, J. Graul, O. Semchinova, D. Uffmann, M. B. Smirnov, A. P. Mirgorodsky, and R. A. Evarestov, *Physical Review B*, Vol. 58, 12899 (1998).
- [19] Piotr Perlin, Claude Jauberthie-Carillon, Jean Paul Itie, Alfonso San Miguel, Izabella Grzegory, and Alain Polian, *Physical Review B*, Vol. 45, 83 (1992).
- [20] C. Bungaro, K. Rapcewicz, and J. Bernholc, *Physical Review B*, Vol. 61, 6720 (2000).
- [21] Kaczmarczyk, G., et al. Lattice dynamics of hexagonal and cubic InN: Raman-scattering experiments and calculations. *Applied Physics Letters.*, Vol. 76, 2122. (2000).
- [22] Lee, M.-C., et al. Raman and x-ray studies of InN films grown by metalorganic vapor phase epitaxy. *Applied Physics Letters.*, Vol. 73, 2606 (1998).
- [23] S. Rohmfeld, M. Hundhausen, L. Ley, C. A. Zorman, M. Mehregany, *J. Appl. Phys.*, Vol. 91, No. 3 (2002).
- [24] Station de mesures électriques en salle blanche, université de Sherbrooke : <https://www.usherbrooke.ca/3it/fr/ecosysteme-technologique/nanotechnologies/equipements/caracterisation/station-de-mesures-electriques-en-salle-blanche/>

Annexe C

Annexe C : Model de dispersion de l'analyse Micro-Raman

1. Analyse par Micro-Raman

Dans le cadre de l'approximation harmonique, à un mode propre de vibration d'un réseau parfait correspond une onde plane de vecteur d'onde q , de pulsation $\omega(q)$ et un état de polarisation $\epsilon(q, \omega)$. Celui-ci décrit les déplacements corrélés dans l'espace et dans le temps des atomes du cristal. Selon la règle de sélection $k_i - k_d \approx 0$, seuls les modes à $q \neq 0$ interviennent dans la diffusion de la lumière. Ainsi dans un cristal III-V, seuls les phonons de centre de zone LO (Γ) et TO (Γ) sont impliqués au premier ordre [1].

Dans un cristal désordonné, les imperfections altèrent la symétrie du cristal. Les atomes ne vibrent plus tous en phase et leurs déplacements ne sont plus aussi parfaitement corrélés. Puisqu'une onde plane ne suffit plus pour décrire une vibration de réseau d'un tel cristal, il est alors indispensable de faire appel à un ensemble d'ondes planes (paquet d'ondes) choisies parmi celles décrivant les vibrations dans un cristal parfait.

La théorie des perturbations stationnaires, le traitement permettant de décrire les vibrations d'un cristal désordonné nous amène à écrire l'Hamiltonien associé aux déplacements atomiques sous la forme :

$$\vec{H} = \vec{H}_0 + \vec{V} \quad (1)$$

où \vec{H}_0 est l'Hamiltonien dans un cristal parfait et \vec{V} un terme d'anharmonicité qui prend en compte la présence de défauts dans le cristal. Au premier ordre de la perturbation, la fonction propre $|\Psi\rangle$ de \vec{H} qui correspond à la fonction d'onde non-perturbée $|\phi_0\rangle$ se développe sur la base des fonctions propres de \vec{H}_0 comme:

$$|\Psi\rangle = |\phi_0\rangle + \sum_{q \neq 0} \frac{\langle \phi_0 | \vec{V} | \phi_0 \rangle}{E_q^0 - E_0^0} |\phi_0\rangle \quad (2)$$

avec $|\phi_0\rangle$ et E_q^0 correspondant respectivement à la fonction propre et à l'énergie propre de \vec{H}_0 , relatives au mode q . La fonction d'onde d'un phonon dans un cristal idéal, peut être décrite par une fonction de Bloch de périodicité R , avec :

$$\begin{cases} \phi(q_0, r) = u(q_0, r) e^{-iq_0 r} \\ u(q_0, r) = u(q_0, r + R) \end{cases} \quad (3)$$

Richter et al. [2], ont formulé mathématiquement terme \vec{V} de point de vue phénoménologique par la partie spatiale de la fonction d'onde d'un mode de vibration du cristal désordonné sous la forme :

$$\begin{aligned} \Psi(S, q_0, r) &= W(r, S) \phi_0(q_0, r) \\ &= W(r, S) u(q_0, r) e^{-iq_0 r} \\ &= \Psi'(S, q_0, r) u(q_0, r) \end{aligned} \quad (4)$$

où $W(r, S)$ est une fonction poids qui localise le mode à l'intérieur d'une sphère de rayon S (localisation isotropique puisque cubique). Ce paramètre S est identifié à la longueur de corrélation du mode et est par la suite comparé à des paramètres physiques tels que la taille des cristallites dans le matériau polycristallin. En effet, celui-ci décrit le confinement des phonons dans ces régions, car les phonons ne peuvent se propager

librement que dans une structure ordonnée. La taille de ces régions est donc interprétée comme étant le libre parcours moyen des phonons. Les coefficients de Fourier du développement de $W(r)$ sur la base des fonctions ϕ_q du cristal parfait s'écrivent:

$$\Psi'(S, q_0, r) = \int C(q_0, q) d^3 q \quad (5)$$

Avec :

$$C(q_0, q) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3 W(S, r) e^{-i(q-q_0)r} \quad (6)$$

où l'on a adopté une fonction poids du type gaussien tel que :

$$\lim_{n \rightarrow \infty} (S, r) = cte \quad (7)$$

$$W(S, r) = e^{-\alpha \left(\frac{r}{S}\right)^2} \quad (8)$$

Richter et al. [2] ont utilisé pour la première fois la fonction la plus simple avec $\alpha = 2$ (donnant une amplitude de $1/e$ à la sphère) de rayon S ; puis Campbell et Fauchet [3] ont choisit $\alpha = 8\pi^2$ ce qui leur a permis de corroborer leurs résultats expérimentaux. Une troisième possibilité est de prendre $\alpha = 4 \ln 2$ donnant une amplitude à la sphère de $0,5$ et permettant ainsi d'avoir une longueur de corrélation S coïncidant avec le diamètre de la sphère dans l'espace réelle (contrairement à $\alpha=2$ de rayon plus petit et $\alpha = 8\pi^2$ de rayon trop grand). La valeur $\alpha = 8\pi^2$ semble être un bon compromis pour les films de nitrures [1].

L'expression de $\Psi(r)$ pour un mode de grande longueur d'onde ($q_0=0$) conduit à

$$|C(0, q)|^2 = e^{-\left(\frac{qS}{4\pi}\right)^2} \quad (9)$$

Cette méthode d'écrivant Ψ sous la forme d'une somme d'ondes planes de vecteurs d'onde $q \neq 0$, traduit la relaxation au premier ordre de la règle de sélection $q \approx 0$. Tout se passe comme si les modes à $q \neq 0$ du cristal parfait participaient à la diffusion dans un cristal désordonné. Notons que la règle de sélection $k_i - k_d \approx 0$ reste toujours valable, la diffusion de la lumière se faisant toujours par un mode de vibration de grande longueur d'onde du matériau.

2. Calcul de la section efficace de diffusion Raman dans les matériaux désordonnés

La section efficace de diffusion Raman au premier ordre par un mode LO de vecteur d'onde q et de fréquence $\omega_L(q)$ se met sous la forme [3] :

$$I_d(q, \omega) = A \left[\frac{\omega_L^2(q) - \omega_T^2(1+C)}{\omega_L^2(q) - \omega_T^2} \right]^2 \text{Im} \left\{ -1/\varepsilon(q, \omega) \right\} \quad (10)$$

où A est un terme indépendant de ω , et $\varepsilon(q, \omega)$ est donné par :

$$\varepsilon(q, \omega) = \varepsilon_{\infty} \left[1 + \frac{\omega_L^2(q) - \omega_T^2}{\omega_T^2 - \omega^2 + i\gamma\omega} \right] \quad (11)$$

La théorie diélectrique que nous utilisons est par essence macroscopique et ne s'applique donc qu'à des modes de vibration de longueur d'onde grande devant le pas du réseau. Le terme au carré entre accolades $[]^2$ est très peu sensible à la dispersion en q de ω_L qui, de plus, est faible au voisinage du centre de zone. Par conséquent, ce terme est supposé dans la suite indépendante de q . En remplaçant $\varepsilon(q, \omega)$ par son expression dans l'équation, il vient :

$$I_d(q, \omega) = A \frac{\gamma\omega}{[\omega_L^2(q) - \omega^2]^2 + \gamma^2\omega^2} \quad (12)$$

Avec $I_d(q, \omega)$, une lorentzienne de largeur γ centrée en $\omega_L(q)$. Donc, la diffusion Raman par le mode de vibration de grande longueur d'onde du cristal désordonné, est interprétée comme la somme des contributions $I_d(q, \omega)$ pondérée par $|C(q)|^2$ de tous les modes longitudinaux (ou transversaux), soit:

$$I_d(\omega) = A \int d^3 r |C(q)|^2 I_d(q, \omega) \quad (13)$$

Dans cette expression, $|C(q)|^2$ est exprimé grâce au modèle de corrélation spatial. Ce dernier, basé sur la théorie des perturbations, permet de décrire l'effet d'un faible taux de désordre en invoquant des modes à $q \neq 0$ mais voisins du centre de la zone de Brillouin, d'où sa justification.

On obtient donc :

$$I(\omega) \approx \int_0^1 \frac{\exp\left(\frac{qS}{4\pi}\right)^2 4\pi q^2}{[\omega - \omega(q)]^2 + \left(\frac{\Gamma}{2}\right)^2} dq \quad (14)$$

Remarque importante pour les calculs: q est pris en unité de $2\pi/a$ et S en unité de a

L'intensité mesurée relative à la section efficace de la diffusion Raman I_d , est exprimée en introduisant une fonction poids $g(S)$ de type Gaussien grâce au modèle de corrélation spatiale ($g(S) = \exp[-(qS/4\pi)^2]$). Ce dernier, basé sur la théorie des perturbations, permet de décrire l'effet d'un faible taux de désordre en invoquant des modes à $q \neq 0$ mais voisins du centre de la zone de Brillouin, d'où sa justification.

Ainsi, compte tenu de la relation de dispersion des phonons décrite précédemment $\omega_L(q)$, les pics Raman obtenus, sont élargis, asymétriques et décalés vers les basses fréquences (figure C-1). Ce modèle relie entre eux les divers paramètres Raman (décalage,

élargissement, asymétrie), ce qui permet de le confronter efficacement à l'expérience et d'en déduire une longueur de corrélation L des modes de vibrations. Ce modèle n'est pas spécifique à un type de désordre puisqu'il traite de la même manière aussi bien les défauts étendus (joints de grains), que ponctuels (impuretés). Pour ce qui est de nos préoccupations, cela ne change rien puisque le seul paramètre qui est étudié dans cette partie est la taille des cristallites.

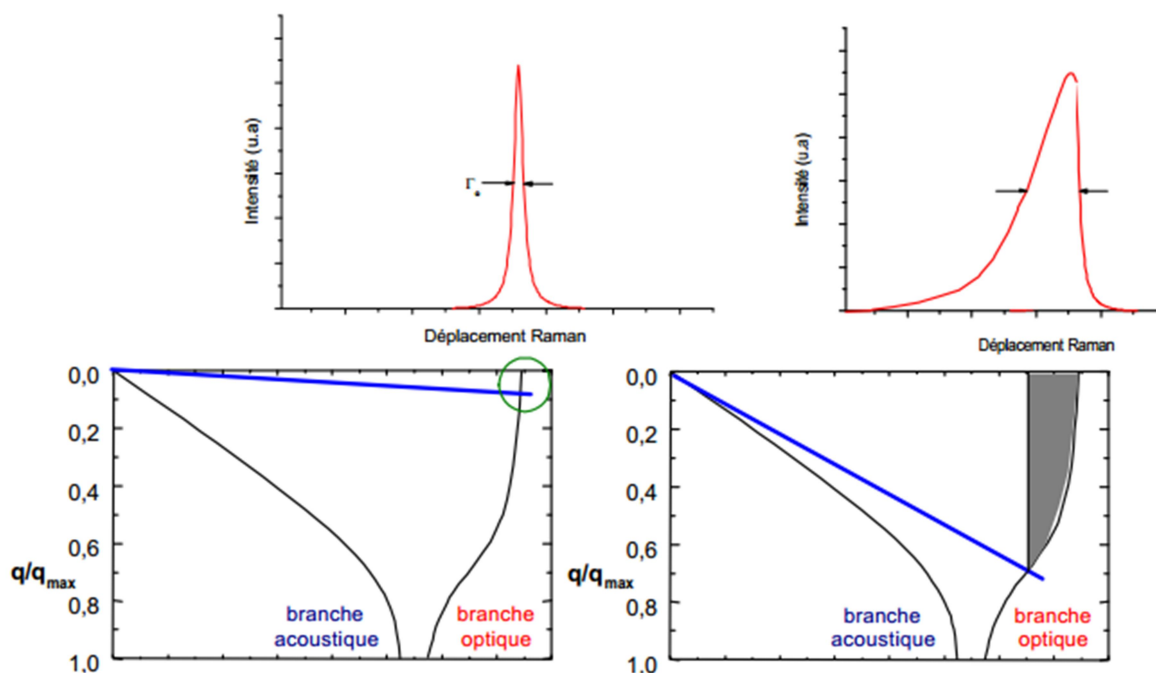


Figure C-1 : Représentation schématique de l'influence des phonons de la branche optique participant à la dispersion fréquentielle sur l'allure de la section efficace de diffusion Raman [1].

3. Application au 3C-SiC

Courbes de dispersion des phonons pour 3C-SiC calculés en utilisant la branche optique $\omega_1(q)$ tirée de la littérature [4], ajustée au mieux avec un polynôme et de degrés 5 pour les phonons TO et 6 pour les phonons LO.

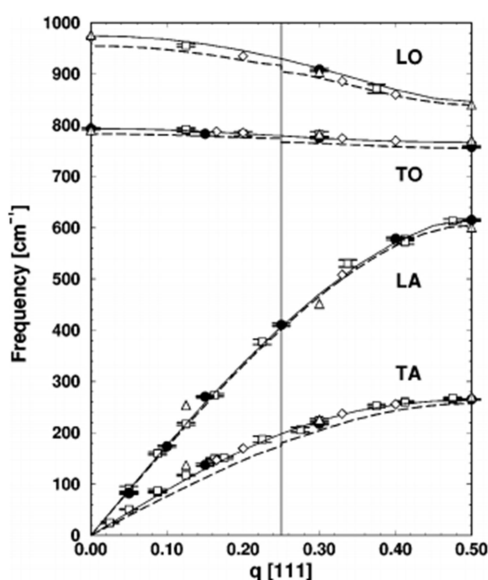


Figure C-2 : Branches optiques et acoustiques selon [4]

Dans un premier temps, nous avons établi l'influence de la taille des cristallites et retracé l'allure de la fonction poids dans la première zone de Brillouin (figure C-3).

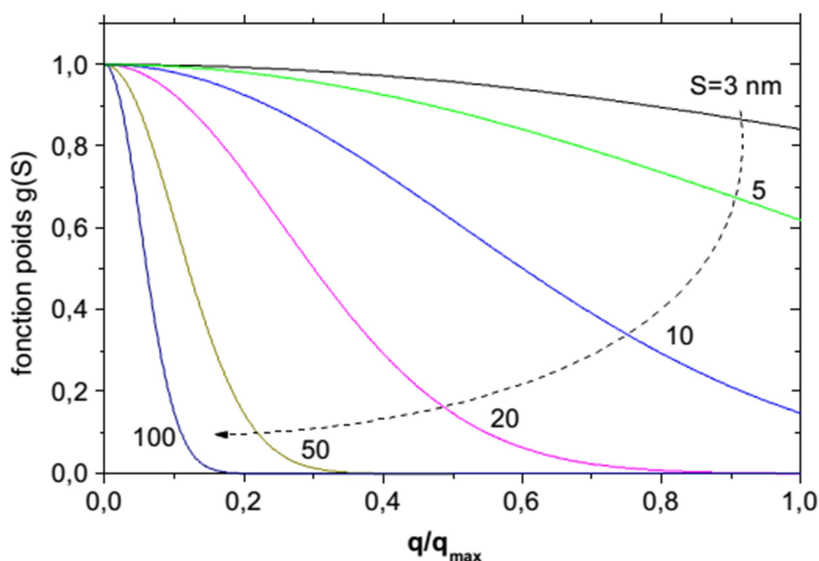


Figure C-3 : Représentation de la fonction poids $g(S)$ utilisées pour différents facteurs S (tailles de cristallites)

On remarque que plus la taille des cristallites est petite, plus elle fera intervenir de phonons.

Pour les phonons optiques longitudinaux, l'élargissement de la Lorentzienne vers les basses fréquences ne permet pas de faire l'ajustement, même si on prend un paramètre Γ très différent à celui mesuré (spectre mesuré $\Gamma=3.4 \text{ cm}^{-1}$) et l'épaule se manifeste autour de 830 cm^{-1} pour des nano cristallite inférieurs à 5nm. Pour $\Gamma < 2$ on retrouve résultats similaires à celles reporté par M. Havel et al. [5].

Pour $\Gamma=3.4 \text{ cm}^{-1}$ l'épaulement se manifeste autour de 847 cm^{-1} pour des nano cristallite inférieurs à 27 nm . Le résultat est représenté sur la **figure C-4** :

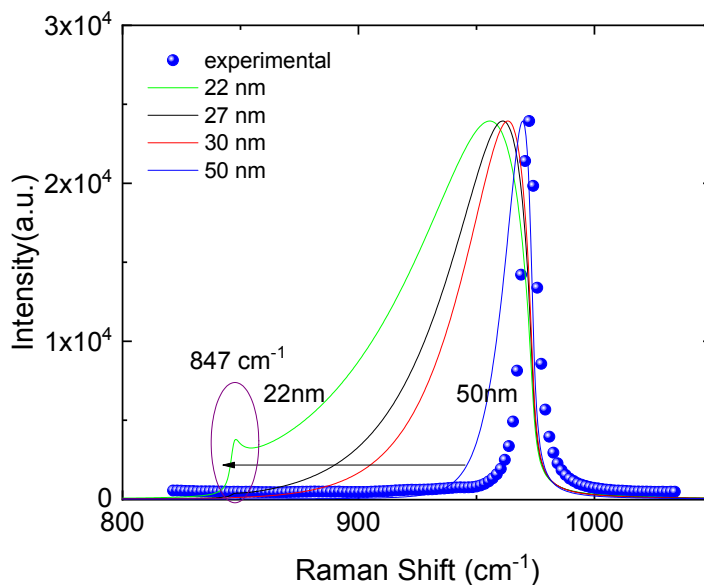


Figure C-4 : Simulation du mode LO pour différentes tailles de cristallites et $\Gamma=5 \text{ cm}^{-1}$

De même pour les TO l'épaulement se manifeste autour entre 730 et 733 cm^{-1} ; très comparable aux résultats reporté par S. Rohmfeld et al. [6] (autour de 760 à 770 cm^{-1}) malgré qu'ils aient utilisé une autres méthode de calcul en se basant sur la théorie des défauts aléatoires empilés (pour random staking faults).

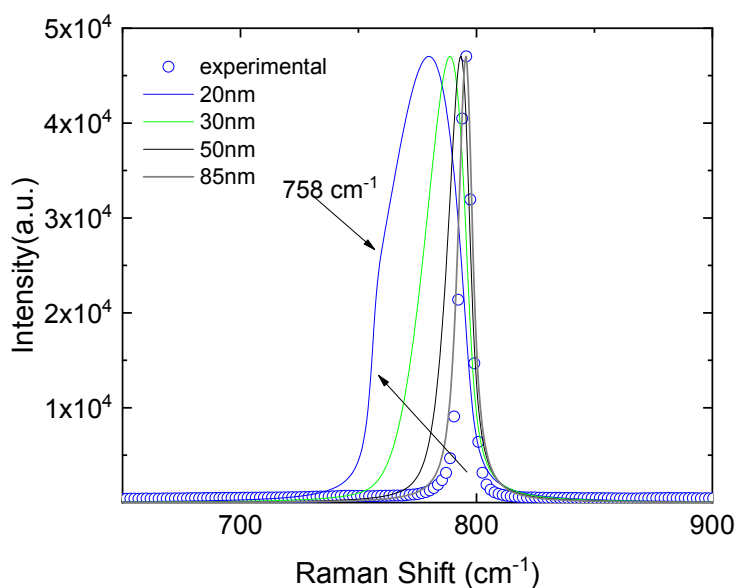


Figure C-5 : simulation du même mode LO pour différentes tailles de cristallites et $\Gamma=2,1 \text{ cm}^{-1}$

Bibliographie

- [1] A. Soltani. Croissance de films minces de nitrure de bore hexagonal et cubique par dépôt chimique en phase vapeur assisté par plasma : caractérisations optiques et électriques, thèse de l'université de Metz (2001).
- [2] H. Richter, Z.P. Wang, L. Ley, Solid State Communications, 39, 625-629 (1981).
- [3] H. Campbell, P.M. Fauchet, Solid State Communications, 5, 739 (1986).
- [4] Thomas Werninghaus, Micro-Raman Spectroscopy Investigation of Hard Coatings, Thèse de doctotat d'University of Technology Chemnitz-Zwickau (1997).
- [5] M. Havel , D. Baron, Ph. Colomban, Journal of Materials Science, 39, 6183-6190 (2004).
- [6] Stefan Rohmfeld, Martin Hundhausen, and Lothar Ley, Physical Review B Vol. 58, N. 15 (1998).

Annexe D

Annexe D : Rappels théoriques sur les MOS HEMT

1. Introduction

Grâce à sa large bande interdite et sa forte vitesse de saturation électronique, le GaN possède un potentiel très intéressant pour la réalisation de composants de puissance. Les transistors à haute mobilité électronique (HEMTs) à base d'hétérostructure AlGaN/GaN présentent des performances inégalées grâce à la formation d'un gaz d'électrons bidimensionnel (2DEG) à l'interface AlGaN/GaN. La structure d'un HEMT AlGaN/GaN est basée sur la fabrication d'une hétérojonction à partir de deux matériaux à large bande interdite à savoir, un alliage ternaire $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ et l'alliage binaire de nitrure de gallium (GaN). La large bande interdite permet aux dispositifs de fonctionner à valeurs de champs électriques élevés. D'où l'intérêt de ce type de transistors pour les applications de puissance.

Le deuxième axe de recherche de cette thèse s'articule sur l'étude des transistors MOS HEMT AlGaN/GaN sur substrats Si et l'intérêt du pré-conditionnement du substrat Si pour la synthèse de GaN nécessaire à la microfabrication de ce type de dispositifs. Donc l'annexe a pour but la présentation de rappels théoriques sur leurs technologies de fabrication et leurs caractéristiques physiques et électriques afin de mieux comprendre leurs comportements.

2. Etat de l'Art de l'interface substrat III-N/Si

Plusieurs études ont identifié la diffusion des espèces Ga et Al dans le substrat Si comme étant la cause d'une couche conductrice de type p [2, 4], tandis que d'autres ont attribué cela à une couche d'inversion de type d'électrons à l'interface [5,6]. Nous présentons dans ce qui suit les facteurs qui entrent en jeu dans la formation de l'interface Si/III-N.

Il a été démontré que la diffusion d'espèces contenant de l'Al et du Ga dans le substrat de Silicium forme une couche conductrice de trous de type p, par spectrométrie de masse des ions secondaires SIMS (Secondary-Ion Mass Spectrometry) et mesures de résistivité, avec des densités allant de 10^{15} à 10^{18} cm^{-3} à l'interface et une extension allant de 100 nm à 3 μm de l'interface [2]. Le Ga et l'Al, tous deux dopants de type p dans le Si, pourraient diffuser dans le substrat probablement à partir de la phase vapeur directement, notamment dans le cas d'une couche de nucléation d'AlN, à partir de résidus de réacteur contenant des espèces Al et /ou Ga. La deuxième hypothèse est la diffusion externe à partir des films déposés car les températures de croissance utilisées sont typiquement très élevées (900-1200°C pour le MOCVD). Les dislocations sont des voies de diffusion locales pour ces espèces vers le substrat, et les grandes contraintes de film aident davantage cette diffusion. Seules les espèces Al et Ga qui atterrissent dans les sites substitutionnels de Si agissent comme dopants. Alors qu'un tel dopage de substitution serait favorisé par les températures élevées, utilisées pendant de croissance. La densité totale de ces espèces, tel qu'il est rapporté par la mesure SIMS inclurait également l'Al ou le Ga interstitiel. De plus, le canal parasite devrait être composé de trous (type p) dans ce cas.

Simoen et al. [1] ont entrepris des mesures transitoires de capacité DLTS (Deep Level Transient Spectroscopy) et des études détaillées de résonance de spin électronique ESR (Electron Spin Resonance) de l'interface AlN/p⁺⁺-Si et n'ont pas trouvé une couche d'inversion dans leurs dispositifs. Au lieu de cela, une grande concentration de pièges à trous à l'interface à 0,3-0,4eV au-dessus de la bande de valence du Si ainsi que des défauts associés au Si amorphe ou des défauts étendus dans le Si avec une densité d'état d'interface totale supérieure à 10^{12} (eV⁻¹.cm⁻²) ont été observés [1, 3].

Il est important de noter que les films de nitrure d'éléments III sur Si contiennent non seulement une quantité importante de défauts, mais ont également des contraintes importantes (dans la gamme du GPa) [7]. Les couches initiales telles que la couche de nucléation AlN et une partie des couches de transition AlGa_xN_{1-x} suivantes, sont généralement épitaxiées sous contrainte de traction et ont des densités de dislocations allant de 10^{13} cm⁻² dans la couche d'AlN à 10^{11} cm⁻² dans les couches d'AlGa_xN. Pour l'ingénierie de contraintes, les couches tampons de GaN sont généralement réalisées de façon à avoir une contrainte de compression dans le but d'obtenir des films sans fissures lors du refroidissement. Les densités de dislocations sont généralement de l'ordre de 10^9 à 10^{10} cm⁻² au niveau des régions actives des dispositifs [8].

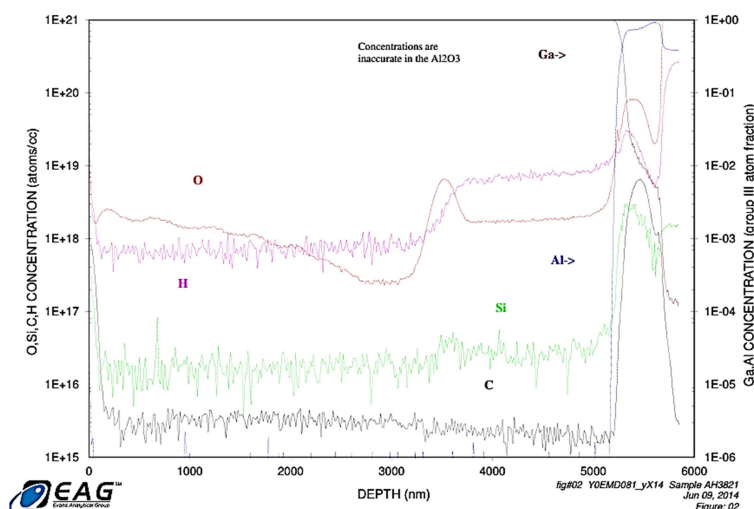
Une autre explication couramment proposée du canal parasite est la formation d'une couche d'inversion d'électrons à l'interface Si/AlN [2, 9]. L'AlN est un matériau polaire avec une forte polarisation spontanée (P_{sp}) et piézoélectrique (P_{pz}) tandis que le Si est un matériau non polaire. Ceci donne lieu à un saut de polarisation au niveau de cette hétéro-interface polaire/non polaire. Puisque AlN sur Si est presque toujours en polarisation Al (Al-polar), une charge de polarisation positive se manifesterait à cette interface. Compte tenu de la forte polarisation spontanée de l'AlN (0,081 μC/cm²), cela devrait correspondre à une densité de charge bidimensionnelle de l'ordre de 5×10^{13} cm⁻² à l'interface. En outre, les films d'AlN sont typiquement contraints en tension (contrainte supérieure à 1GPa) et par conséquent la polarisation piézoélectrique devrait s'ajouter à la polarisation spontanée pour augmenter la charge totale à l'interface et la densité électronique attendue à cette interface. Le canal parasite dans le cas d'AlN sur Si est composé d'une couche d'inversion d'électrons (type n), dont l'origine serait très probablement la génération thermique dans le substrat de silicium ou bien les donneurs en surface de la couche d'AlN [9].

Si on tient compte de l'inadaptation des constantes thermiques entre ces matériaux, la différence de la structure cristalline et le paramètre de maille, l'interface entre le Si et l'AlN est pleine de défaut. Cela conduit à des densités de dislocations de l'ordre de 10^{13} à 10^{12} cm⁻² comparables voir plus grandes que la densité électronique attendue en volume de ces couches. On s'attend également à ce que tous les facteurs ci-dessus donnent lieu à une grande densité de pièges à cette interface hautement désordonnée. Cela devrait à son tour conduire à une forte réduction de la mobilité effective des porteurs et donc de la conductivité interfaciale. En effet, les couches d'AlN ont été étudiées en tant que diélectrique pour les structures MIS sur Si. Des décalages négatifs et positifs des tensions de bande plate ont été observés, correspondant à des charges interfaciales négatives et positives [6, 10, 11, 12]. Les densités de défauts d'interface signalées varient largement de 10^{11} à 10^{13} eV⁻¹.cm⁻² selon les conditions de

dépôt [4, 13]. Des états de pièges lents et rapides ont été observés avec une densité comprise entre 10^{13} et 10^9 eV⁻¹.cm⁻² lors du passage de la capacité de la déplétion à une faible inversion.

De plus, l'interface Si / III-nitride elle-même est généralement composée de couches de SiN_x en raison de la nitruration de la surface de Si par les espèces contenant de l'azote (par exemple le NH₃ utilisé dans le cas du MOCVD) pendant la croissance ou la diffusion de l'azote à partir des films [14]. Cette diffusion, conduit à création de lacunes d'azote dans les films III-N. Dans certains cas, une telle nitruration est également intentionnelle afin de réduire la densité de dislocations en utilisant des inclusions de SiN_x comme couches de masquage in-situ [2]. Ces couches de SiN_x peuvent servir de barrières de diffusion d'autres espèces vers la surface de Si. Mais, les images de microscopie électronique à transmission TEM (Transmission Electron Microscopy) montrent un éventail de configurations interfaciales allant des hétéro-interfaces oAlN/Si propres et abruptes aux inclusions SiN_x amorphes en passant par les régions intermédiaires en AlSiN_x et riches en aluminium [3, 15, 16].

En outre, d'autres espèces chimiques telles que l'oxygène, l'hydrogène et le carbone sont présentes dans les films de nitride d'éléments III. Des concentrations d'oxygène proches de l'interface supérieures à 10^{19} cm⁻³ ont été rapportées pour la croissance d'AlN et de GaN sur Si (111) en utilisant la technique MOCVD [9, 17]. L'oxygène résiduel est généralement considéré comme un contaminant dans les matériaux et gaz précurseurs utilisés et peut également provenir de chambres de croissance avec des composants en quartz [17]. Une certaine quantité d'oxygène observée aux interfaces couche épitaxiée-substrat peut également être due à la présence d'oxygène dans les plaquettes de silicium elles-mêmes avec des concentrations supérieures à 10^{17} cm⁻³ dans le Si par croissance Czochralski (CZ) et inférieures à 10^{16} cm⁻³ dans les plaquettes de silicium par zone fondue (FZ) [18] qui se redistribue à des températures de croissance élevées. La diffusion de l'hydrogène vers l'interface sert également à passiver les liaisons pendantes à la surface du Si et ainsi réduire la densité de pièges, mais pourrait également conduire à la formation de complexes avec d'autres atomes telles que C, N et O à l'interface. La figure suivante représente une analyse SIMS sur un échantillon réalisé par épitaxie en phase vapeur aux hydrures (HVPE) [19] elle montre les différentes espèces existantes dans un empilement de couches de GaN/AlN/Al₂O₃ :



FigureD-1: Spectre d'analyse SIMS d'une couche GaN déposée par la technique HVPE sur saphir avec une couche de nucléation AlN [20].

3. Rappels théoriques sur le transistor HEMT

Le transistor à haute mobilité électronique HEMT (High Electron Mobility Transistors) appartient à la famille des transistors à effet de champ. Il repose sur la présence du gaz bidimensionnel à l'interface de l'hétérostructure AlGa_xN/GaN. La structure d'un HEMT AlGa_xN/GaN est basée sur la fabrication d'une hétérojonction à partir de deux matériaux à large bande interdite à savoir, un alliage ternaire Al_xGa_{1-x}N et l'alliage binaire de nitrure de gallium (GaN). L'Al_xGa_{1-x}N, appelé couche barrière, est épitaxié sur une couche tampon de GaN (bande interdite plus petite que Al_xGa_{1-x}N), non-intentionnellement dopée (nid). La large bande interdite permet aux dispositifs de fonctionner à valeurs de champs électriques élevés. D'où l'intérêt de ce type de transistor pour les applications de puissance.

4. Hétérostructure Al_xGa_{1-x}N/GaN

Pour mieux comprendre le fonctionnement d'un HEMT AlGa_xN/GaN, nous présenterons les structures de bande d'énergie à base d'hétérojonction AlGa_xN/GaN. La figure D-2 présente le diagramme des bandes d'énergie à l'hétérojonction, avant et après la mise en contact des matériaux.

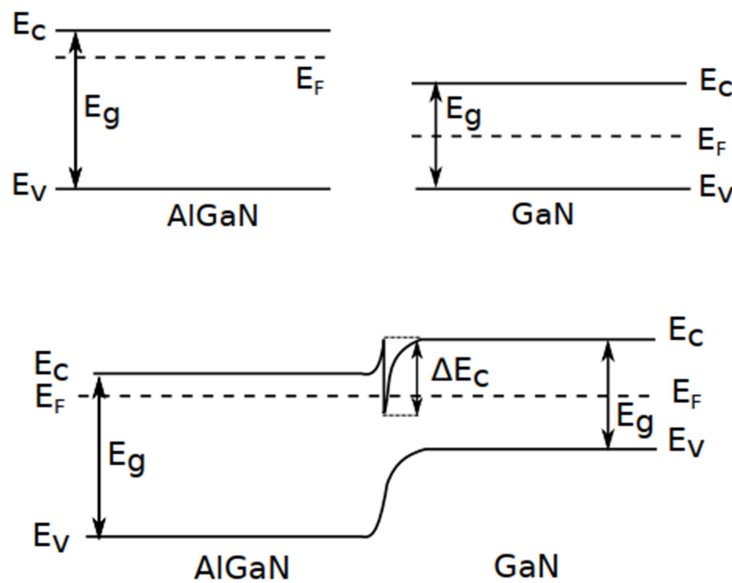


Figure D-2 : Diagramme de bandes de l'hétérostructure AlGa_xN/GaN avant et après la mise en contact des deux matériaux.

Les énergies E_c , E_v et E_f sont respectivement, le bas de la bande de conduction, la bande de valence maximale et le niveau de Fermi. L'hétérojonction est réalisée par la mise en contact des deux semiconducteurs AlGa_xN et GaN de largeur de bande interdite différente, ce qui entraîne la discontinuité de la bande de conduction (ΔE_c) et de la bande de valence (ΔE_v). La discontinuité ΔE_c , peut être extraite de la différence d'affinité électronique des deux couches :

$$\Delta E_c = \chi_{\text{GaN}} - \chi_{\text{AlGaN}} \quad (1)$$

La compensation de la bande de conduction passe de 74% à 72% de ΔE_g avec une teneur en Al croissante dans un système AlGaIn/GaN [20]. Les deux matériaux (AlGaIn et GaN) sont choisis dans le but de créer une chute de potentiel localisée de la bande de conduction en-dessous du niveau de Fermi, pour rassembler les électrons dans un puits quantique.

Lorsque des charges fixes positives sont ajoutées à l'interface AlGaIn/GaN, la condition de neutralité des charges conduit à la compensation de ces charges par des électrons, et par conséquent, la bande de conduction à l'interface se courbe (figure D-3). Lorsque la concentration de charge augmente, la courbure de bande augmente. Cette courbure si elle est suffisamment élevée, une partie de la bande de conduction au voisinage de l'interface passera en dessous du niveau de Fermi. Dans cette région où le niveau de Fermi est au-dessus de la bande de conduction, les électrons occupent les niveaux énergétiques du puits quantique triangulaire formé à l'interface AlGaIn/GaN. Ces électrons forment le canal de l'HEMT et sont connus sous le nom de gaz d'électrons à deux dimensions (2DEG).

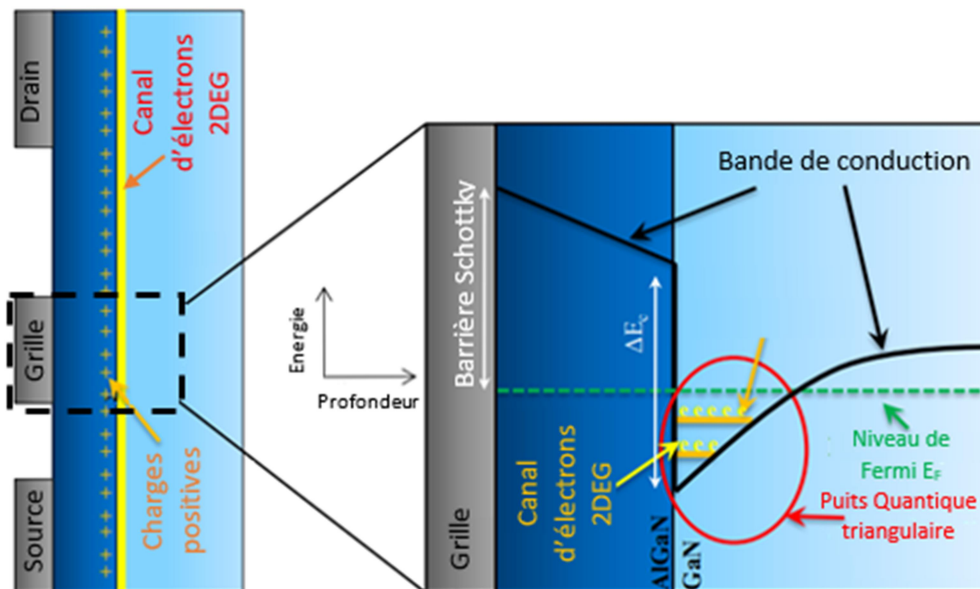


Figure D-3 : Schéma et Diagramme de bandes d'un HEMT AlGaIn/GaN conventionnel.

Pour un transistor HEMT une grille type Schottky ou une capacité type Métal-Oxyde-Semiconducteur (MOS pour un transistor MOS-HEMT) est formée pour contrôler la densité d'électrons dans le canal, et donc rendre le transistor HEMT passant ou bloqué, suivant la tension appliquée à la grille. La figure D-4 montre le puits quantique triangulaire dans trois conditions de polarisation différentes pour un transistor HEMT conventionnel, normalement ouvert.

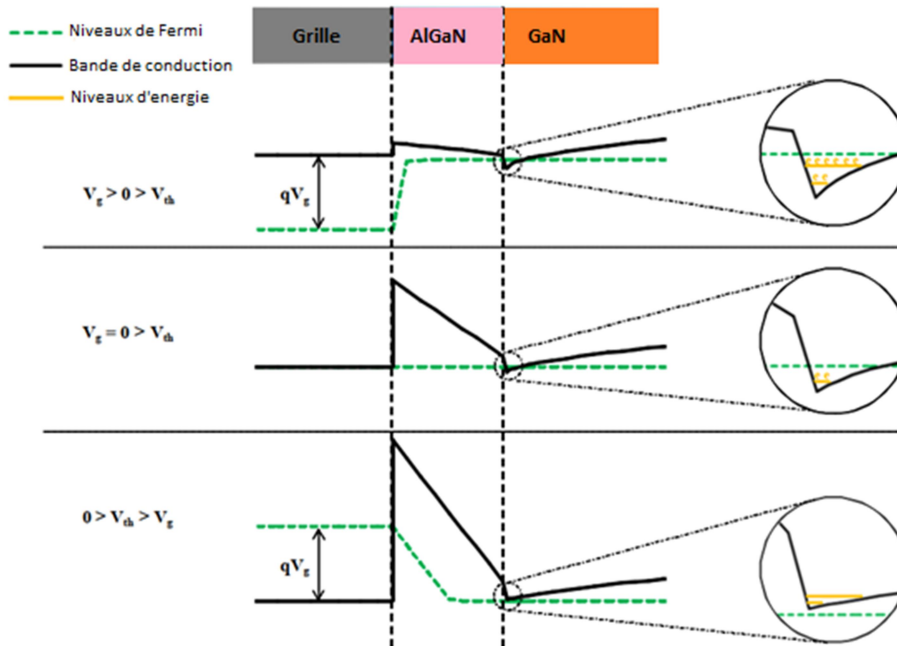


Figure D-4: Position du niveau de Fermi par rapport à la bande de conduction dans diverses conditions de polarisation d'un HEMT AlGaN/GaN.

5. Formation du gaz d'électrons bidimensionnel dans l'hétérostructure

Le désaccord en paramètre de maille dans une hétérostructure engendre des contraintes internes. Une polarisation piézoélectrique est alors créée dans la couche d'AlGaN, et est ajoutée à la polarisation spontanée déjà existante à l'état relaxé. En effet, le gallium (1,6 eV) est moins électronégatif que l'azote (3 eV). Ainsi une charge négative $-q$ apparaît autour des atomes d'azote et une charge positive $+q$ apparaît autour des atomes de gallium. Le matériau est donc le siège d'une polarisation macroscopique, sans qu'une contrainte externe ne soit appliquée [21]. La charge liée à la polarisation spontanée dans un cristal AlGaN peut-être calculée en fonction de la fraction molaire d'aluminium, notée x , par une relation linéaire utilisée par Ambacher [21].

L'existence de polarisation, dans ces deux matériaux conduit à l'apparition de charges fixes en surface et à l'interface de l'hétérostructure AlGaN/GaN comme le montre la figure D-5.

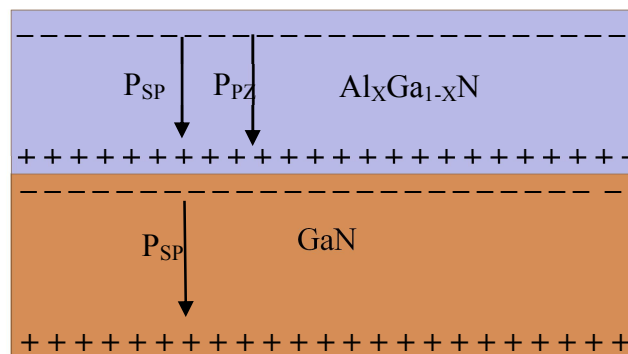


Figure D-5: Répartition des charges et des différentes polarisations spontanée et piézoélectrique dans l'hétérostructure AlGaN/GaN face-Ga.

En considérant son épaisseur, le buffer peut être considéré comme relaxé et ne présente donc pas de polarisation piézoélectrique. Précisément, la densité de charges résultantes à l'interface AlGa_xN/GaN $\sigma_{interface}$ peut être calculée avec l'équation :

$$\sigma_{interface} = P_{Ps/GaN} - (P_{Ps/AlGaN} + P_{PZ/AlGaN}) \quad (2)$$

Le principe de formation du 2DEG repose alors sur cette polarisation à l'interface et le fait que l'énergie de bande interdite de la barrière est plus élevée que celle du buffer. À l'équilibre thermodynamique, les niveaux de Fermi des deux semiconducteurs s'alignent. Une courbure de bande apparaît au voisinage de l'hétérojonction AlGa_xN/GaN donnant naissance à un puits quantique triangulaire peuplé par un gaz d'électron bidimensionnel issus des donneurs de surface [22]. A noter que la largeur de bande interdite et le paramètre du réseau de l'Al_xGa_{1-x}N varie selon la teneur en Al.

En effet, grâce aux phénomènes de polarisation qui proviennent de la nature intrinsèque de ces deux matériaux utilisés, il n'est pas nécessaire de doper le matériau pour obtenir un gaz bidimensionnel d'électrons (contrairement aux cas des dispositifs en GaAs), vu la présence d'un champ de polarisation interne dans ce type de matériau. Les porteurs (électrons) sont alors suffisamment concentrés à l'interface pour former un gaz électronique à deux dimensions. Depuis une analyse électrostatique [22] la densité surfacique de porteurs n_s s'exprime alors :

$$n_s = \frac{P_{\frac{AlxGa1-xN}{GaN}}}{q} \left(1 - \frac{t_{ct}}{t_{bar}} \right) \quad (3)$$

Avec :

$P_{\frac{AlxGa1-xN}{GaN}}$: densité de charges de polarisation à l'interface barrière/canal

t_{ct} : épaisseur de couche barrière

t_{ct} : épaisseur critique de la barrière AlGa_xN

q : la charge d'électron

En notant aussi que l'épaisseur critique de barrière nécessaire à l'apparition du gaz 2DEG répondant à

$$t_{cr} = \frac{(E_D - \Delta E_C) \varepsilon_r^{AlxGa1-xN}}{q P_{\frac{AlxGa1-xN}{GaN}}} \quad (4)$$

Avec :

E_D : niveau des états de surface

ΔE_C : discontinuité de la bande de conduction à l'interface barrière/canal

$\varepsilon_r^{AlxGa1-xN}$: constante diélectrique de la barrière AlGa_xN

$P_{\frac{AlxGa1-xN}{GaN}}$: densité de charges de polarisation à l'interface barrière/canal

q : la charge d'électron

Dans le cas où la couche barrière AlGa_xN est trop fine (sous l'épaisseur critique), les états de surfaces sont situés sous le niveau de Fermi. Ils sont donc considérés comme des états neutres et la formation du puits quantique n'a pas lieu [23]. La densité surfacique d'électrons est dans ce cas inférieure à 10^{12} cm^{-2} . En revanche, dans le cas où la couche barrière AlGa_xN est assez épaisse (supérieur ou égale à l'épaisseur critique), le potentiel de surface augmente et le niveau des états de surface se déplace au-dessus du niveau de Fermi. Les électrons vont

donc se déplacer via le champ de polarisation totale et alimentent le puits 2D comme illustrer dans la figure D-6.

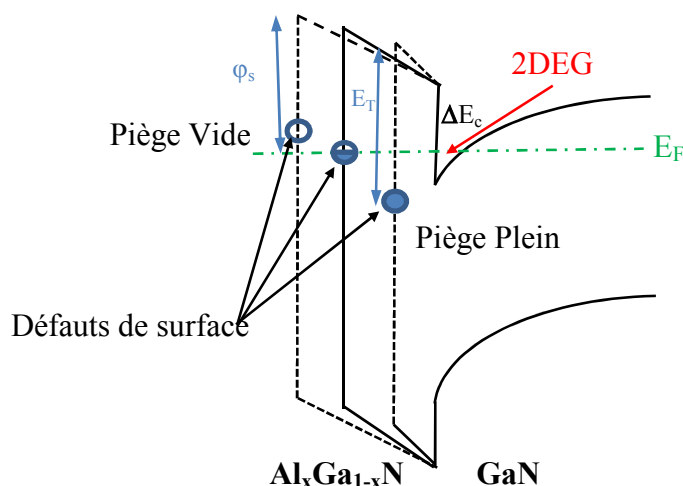


Figure D-6: Schéma du modèle d'Ibbetson montrant la distance à laquelle les électrons, venant de la surface du donneur, sont attirés vers le canal de l'HEMT.

6. Composition de l'hétérostructure d'un HEMT AlGa_xN/GaN

L'hétérostructure d'un HEMT AlGa_xN/GaN se compose usuellement de couches additionnelles pour la réalisation de l'hétérojonction et l'amélioration des performances du transistor à réaliser (La structure typique d'un transistor HEMT AlGa_xN/GaN est représentée sur la figure D-7).

Un substrat sert de support mécanique pour la croissance de la couche tampon (ou buffer) GaN. Cette couche joue un rôle important pour l'évacuation de la chaleur générée par le dispositif au niveau du canal GaN. La qualité cristallographique de cette couche est très importante pour pouvoir limiter les diffusions possibles (dislocations, dopage résiduel, rugosité de surface) qui nuisent au bon fonctionnement du transistor et à sa fiabilité. Selon le matériau utilisé, une différence de paramètre de maille et parfois de structure cristalline entraîne un désaccord de maille avec le buffer GaN, donc la réalisation des couches de nucléations est nécessaire afin de limiter les densités de défauts au sein du buffer. Cette couche tampon permet, donc, de réduire la tension générée par la différence de CTE (coefficient d'expansion thermique), de réduire la densité de dislocations traversantes, de fournir de l'isolation électrique [24], et de croître une couche de GaN de meilleure qualité [25]. L'épaisseur de cette couche dépend entre autres du matériau du substrat (à cause du désaccord de maille par rapport au GaN) et de l'application finale du dispositif. Ainsi, pour les HEMTs de commutation à fort voltage, des couches tampons (buffer) de plusieurs microns sont souhaitées pour obtenir un niveau d'isolation électrique adéquat. Dans ce cas précis où une couche tampon épaisse est requise, on utilise souvent des couches intermédiaires d'AlN d'une épaisseur qui varie entre 10-40 nm. Ces couches permettent d'éviter l'accumulation de stress et permettent par conséquent de fabriquer des couches tampons plus épaisses [24].

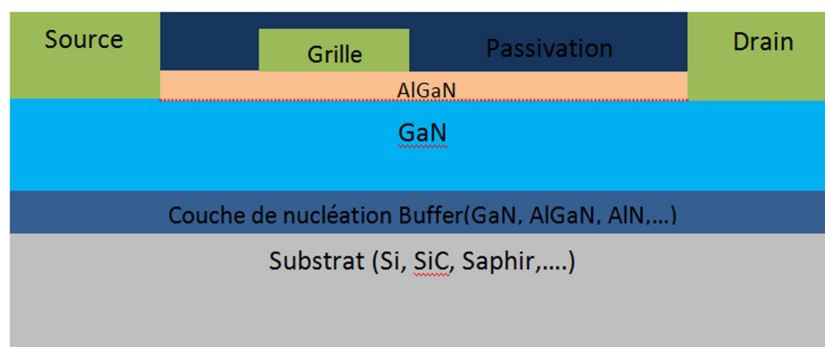


Figure D- 7: Structure typique d'un HEMT AlGaN/GaN (rapport d'échelle non respectée).

La couche barrière d'AlGaN est la couche qui a une bande interdite élevée, elle permet la formation du gaz bidimensionnel à l'interface avec le GaN grâce à l'effet des différentes polarisations (piézoélectrique et spontanée), et la différence de la bande interdite. À partir d'une certaine épaisseur de couche barrière, la densité d'électron augmente puis elle se sature. Lorsque la couche barrière devient trop épaisse, la surface de l'hétérostructure est écrantée par rapport au puits 2D et l'alimentation en électrons devient presque saturée comme le montre la figure D-8 :

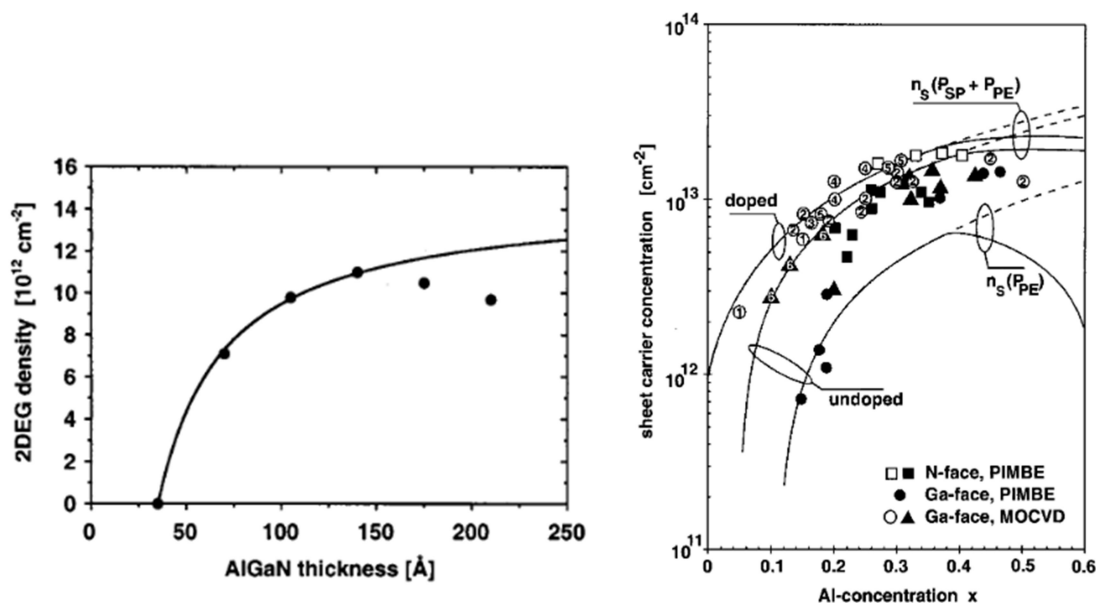


Figure D-8: Concentrations électroniques maximales dans le puits 2D calculées pour les lignes pointillées et des structures pleines partiellement relaxé face - Ga, de HEMT AlGaN/GaN avec une épaisseur de barrière de 200 Å [23, 26].

La fraction molaire d'aluminium est aussi un paramètre important à contrôler. Plus le taux d'Al augmente, plus la densité d'électrons dans le puits augmente, jusqu'à ce qu'elle finisse par se saturer. Cela est dû à l'augmentation de la contrainte et donc l'augmentation de la polarisation piézoélectrique car le paramètre de maille de l'AlGaN diminue avec l'augmentation du taux d'Al, mais au-dessus de 38%, la couche d'AlGaN devient relaxée [23].

Une couche d'exclusion peut être utilisée à l'interface barrière/buffer (figure D-9) permettant d'améliorer les caractéristiques du 2DEG selon plusieurs facteurs. Il s'agit en effet d'une couche d'épaisseur inférieure à 2 nm permettant à la fois d'augmenter la discontinuité de bandes de conduction (typiquement d'AlN largeur de bande interdite de l'AlN : 6.2 eV) et de

limiter la rugosité d'interface et conduit à un meilleur confinement des porteurs dans le 2DEG [27]. La diminution de rugosité réduit les interactions coulombiennes entre les électrons du gaz 2DEG avec les atomes d'aluminium présents dans la couche barrière et augmente ainsi la mobilité électronique.

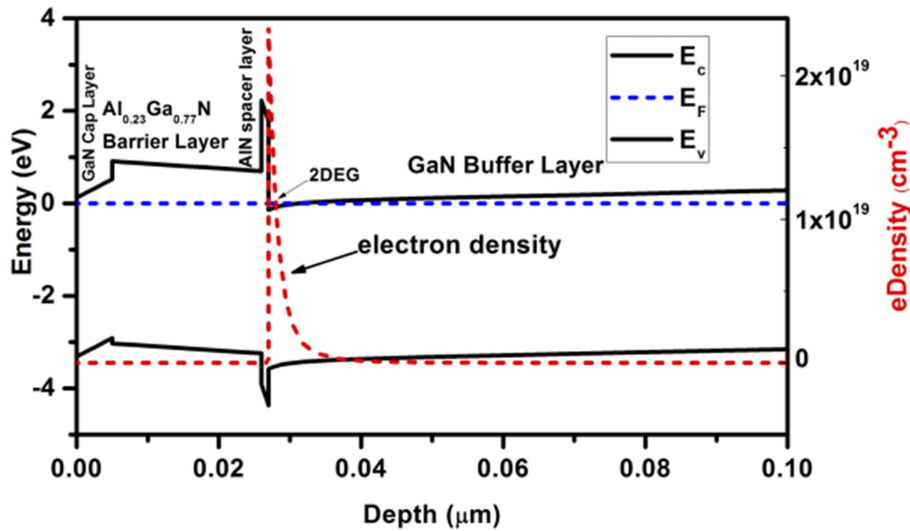


Figure D-9: Diagramme de bande et de la densité d'électrons d'une hétérostructure GaN/AlGaIn/GaN avec une couche d'exclusion AlN d'une épaisseur de 1 nm [28].

Une couche de cap (GaN ou SiN_x) peut être déposée sur la barrière afin d'assurer une stabilisation des états de surface et de prévenir une oxydation d'aluminium présent dans la couche barrière. La présence de cette couche cap entraîne une hausse de la bande de conduction au niveau de la barrière et du canal limite les courants de fuites par la grille [29], mais aussi entraîne diminution de la densité de porteurs en fonction de l'épaisseur de cap (figure D-10). Un compromis est à faire pour l'épaisseur de ce cap, lequel varie entre 0.5 nm et 5 nm [29]. Cependant, la couche de GaN ainsi constituée ne joue toujours pas son rôle surtout lorsqu'elle est mal-structurée, elle aurait plutôt tendance à réduire la hauteur de barrière vu de la surface de l'hétérostructure et augmenter les courants de fuites.

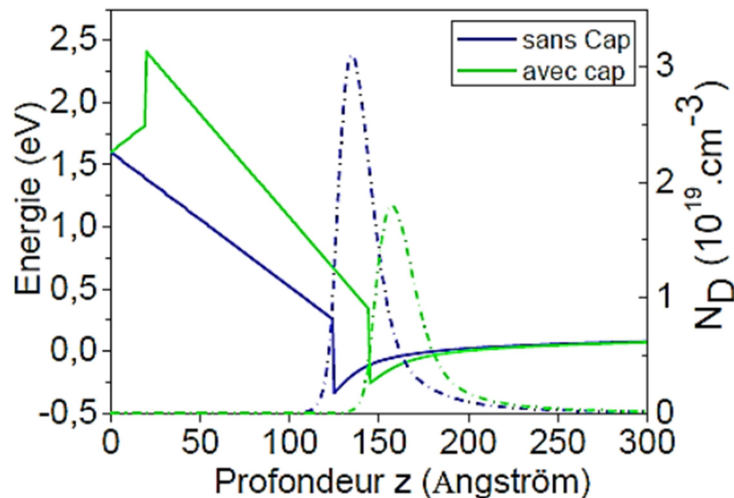


Figure D-10: Diagramme de bande d'une hétérostructure Al_{0.29}Ga_{0.71}N/GaN avec et sans cap GaN [29].

Enfin, l'isolation des contacts, c'est-à-dire la suppression du 2DEG pour certaines régions, est réalisée soit par gravure de la barrière (mesa) soit par implantation ionique.

Bibliographie

- [1] E. Simoen, D. Visalli, M. Van Hove, M. Leys, and G. Borghs, *J. Phys. D: Appl. Phys.*, **44**, 475104 (2011).
- [2] Calleja, E., Sanchez-Garcia, M. A., Basak, D., Sanchez, F. J., Calle, F., Youinou, P., Munoz, E., Serrano, J. J., Blanco, J. M., Villar, C., Laine, T., Oila, J., Saarinen, K., Hautojärvi, P., Molloy, C. H., & Somerford, D. J., *Phys. Rev. B*, **58**, 1550 (1998).
- [3] A. Dadgar, M. Poschenrieder, A. Reiher, J. Bläsing, J. Christen, A. Krtschil, T. Finger, T. Hempel, A. Diez and A. Krost, *Applied physics letters* **82** (1), 28-30, (2003).
- [4] H. Chandrasekar, K. Bhat, M. Rangarajan, S. Raghavan and N. Bhat, *nature Scientific reports* **7** (1), 15749 (2017).
- [5] T. T. Luong, F. Lumbantoruan, Y. Y. Chen, Y. T. Ho, Y. C. Weng, Y. C. Lin, S. Chang and E. Y. Chang, *Physica status solidi (a)* **214** (7), 1600944 (2017).
- [6] X. Zhang, D. Walker, A. Saxler, P. Kung, J. Xu and M. Razeghi, *Electronics Letters* **32** (17), 1622-1623 (1996).
- [7] I. Ahmad, M. Holtz, N. N. Faleev, H. Temkin. *Journal of Applied Physics* **95**, 1692 (2004).
- [8] S. Raghavan and J. M. Redwing, *Journal of applied physics* **98** (2), 023514 (2005).
- [9] H. Yacoub, D. Fahle, M. Finken, H. Hahn, C. Blumberg, W. Prost, H. Kalisch, M. Heuken and A. Vescan, *Semiconductor Science and Technology* **29** (11), 115012 (2014).
- [10] K. S. Stevens, M. Kinniburgh, A. F. Schwartzman, A. Ohtani and R. Beresford, *Applied Physics Letters* **66** (23), 3179-3181 (1995).
- [11] F. Engelmark, J. Westlinder, G. F. Iriarte, I. V. Katardjiev and J. Olsson, *IEEE Transactions on Electron Devices* **50** (5), 1214-1219 (2003).
- [12] D. Xi, Y. Zheng, P. Chen, R. Chu, S. Gu, B. Shen and R. Zhang, *Optical Materials* **23** (1-2), 143-146 (2003).
- [13] M. Morita, S. Isogai, K. Tsubouchi and N. Mikoshiba, *Applied Physics Letters* **38** (1), 50 52 (1981).
- [14] A. Krost and A. Dadgar, *physica status solidi (a)* **194** (2), 361-375 (2002).
- [15] R. Liu, F. Ponce, A. Dadgar and A. Krost, *Applied Physics Letters* **83** (5), 860-862 (2003).
- [16] D. Xi, Y. Zheng, P. Chen, Z. Zhao, P. Chen, S. Xie, B. Shen, S. Gu and R. Zhang, *physica status solidi (a)* **191** (1), 137-142 (2002).

- [17] J. Freedsman, A. Watanabe, Y. Yamaoka, T. Kubo and T. Egawa, *physica status solidi (a)* 213 (2), 424-428 (2016).
- [18] F. Shimura, H. Tsuya and T. Kawamura, *Applied Physics Letters* 37 (5), 483-486 (1980).
- [19] Kyma technologies, site web : <https://www.kymatech.com/>
- [20] J. Wu, *J. Vac. Sci. Technol. A*, vol. 37, no. 6, 0734-2101, (2019).
- [21] O. Ambacher, B. Foutz, J. Smart, J. R. Shealy, N. G. Weimann, K. Chu, M. Murphy, a. J. Sierakowski, W. J. Schaff, L. F. Eastman, R. Dimitrov, a. Mitchell, and M. Stutzmann, *J. Appl. Phys.*, vol. 87, no. 1, pp. 334–344, (2000).
- [22] W. Kruppa and J. B. Boos, *IEEE Trans. Electron Devices*. 42, 1717, (1995).
- [23] J. P. Ibbetson, P. T. Fini, K. D. Ness, S. P. DenBaars, J. S. Speck, and U. K. Mishra, *Appl. Phys. Lett.*, vol. 77, no. 2, 250–252, (2000).
- [24] Johnson, W., Piner, E. GaN HEMT Technology. Dans Pearton, S., *GaN and ZnO based Materials and Devices*, 1rst. édition. Springer, Heidelberg, 209 (2012).
- [25] Z. Bougrioua, I. Moerman, L. Nistor, B. Van Daele, E. Monroy, T. Palacios, F. Calle, and M. Leroux, *Phys. Status Solidi Appl. Res.*, vol. 195, no. 1 SPEC, pp. 93–100, (2003).
- [26] G. N. Gan, a Kranti, S. Haldar, and R. S. Gupta, *Microelectronics J.* , vol. 33, pp. 205–212, (2002).
- [27] P. Smorchkova, L. Chen, T. Mates, L. Shen, S. Heikman, B. Moran, S. Keller, S. P. DenBaars, J. S. Speck, and U. K. Mishra, *J. Appl. Phys.*, vol. 90, no. 10, pp. 5196–5201, (2001).
- [28] Adarsh Nigam, *AIP ADVANCES* 7, 085015 (2017).
- [29] E. T. Yu, X. Z. Dang, L. S. Yu, D. Qiao, P. M. Asbeck, S. S. Lau, G. J. Sullivan, K. S. Boutros, and J. M. Redwing, *Appl. Phys. Lett.*, vol. 73, no. 13, pp. 1880–1882, (1998).

Contributions scientifiques

Electrical Characterization and Interface State Density in Au/n-InN/InP Schottky Diode

A.H. Khediri^{1,2,*}, A. Talbi^{1,†}, M.A. Benamara¹, Z. Benamara¹

¹ Laboratoire de Microélectronique Appliquée, Université Djillali Liabès de Sidi Bel Abbès, 22000, Algeria

² Plateforme Technologique de Micro-fabrication, Centre de Développement des Technologies Avancées, Cité 20 août 1956, Baba Hassen, 16303 Algiers, Algeria

(Received 21 March 2021; revised manuscript received 04 August 2021; published online 20 August 2021)

In this paper, we present an electrical study of InN thin films elaborated by nitridation of InP (100) substrates. The samples have been obtained using a glow discharge source (GDS) in ultra-high vacuum. The gold (Au) Schottky contact was deposited on the top of the surface. The electrical characteristics of Au/InN/n-InP structure have been investigated using current-voltage and capacitance-voltage methods. We show from the current-voltage characterization at room temperature that the main conduction mechanism is thermionic emission current. A value of 1.57 for the ideality factor of the diode is extracted using analytical methods. Furthermore, the barrier height of the device is evaluated to 0.64 eV. This value is substantially larger than previously reported in the literature. The low saturation current and series resistance (R_s) of 12.3 μA and 38 Ω , respectively, indicate the presence of the InN layer. From the capacitance-voltage technique under reverse bias, the built-in potential and the ionized donor concentration are 0.83 V and $1.16 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$, respectively. A frequency dependent capacitance is measured and attributed to the presence of interface states. Based on the high-low frequency method, we determined the average density of interface states (N_{ss}) with a value of $5.6 \times 10^{11} \text{ eV}^{-1} \text{ cm}^{-2}$. These findings reveal good passivation of the InP surface with the use of a thin InN film.

Keywords: Barrier height, Current-voltage measurements, Indium phosphide, Indium nitride, Interface state density, Schottky diodes.

DOI: [10.21272/jnep.13\(4\).04002](https://doi.org/10.21272/jnep.13(4).04002)

PACS numbers: 85.30.Kk, 85.30.Hi

1. INTRODUCTION

Indium nitride (InN) semiconductor is a very interesting and highly promising material for future high-performance devices. Besides its application based on group III nitride alloys which allows tuning of the band gap and emission wavelength ranging from the near infrared (IR) to ultraviolet (UV) region, InN is expected to be a suitable material for electronic devices, such as high-efficiency solar cells, high-speed and high-frequency electronic devices, high electron mobility transistors etc., because of its superior electron transport properties [1]. The most remarkable properties of InN are its direct narrow band gap (0.7-0.9 eV) and low electron effective mass in comparison with other nitrides, which results in high mobility and high saturation velocity.

Good quality InN layers are difficult to grow because of the low dissociation temperature of InN and the lack of an appropriate substrate [2]. Sapphire substrate has been widely used for the epitaxial growth of III-V nitrides. However, InP is a suitable III-V semiconductor substrate, having smaller lattice mismatch and a closer thermal expansion coefficient with nitride than that of sapphire.

Various growth techniques have been explored, such as reactive radio frequency (RF) sputtering, reactive evaporation, dual ion beam sputtering, ion plating, and chemical vapor deposition (CVD), in an attempt to maintain InN film growth at a sufficiently low temperature. InP substrate surface nitridation at a lower temperature is found to be one of solutions to obtain

InN buffer layers before the InN films growth. Different methods have been investigated for the nitridation of InP (100) surfaces [3], in our study we have used the plasma nitridation method. To understand properties of the InN/InP interface obtained by nitridation, electrical characterization of Schottky diodes based on the InP and InN components has been the subject of several recent studies [3, 4]. Talbi et al. realized Schottky diodes based on InN/InP with mercury (Hg) contact. This paper deals with the study of interface/surface defect states in the fabricated Au/InN/InP Schottky diode. Electrical characterization (current-voltage, capacitance-voltage) and analytical methods are used in order to study the Au/InN/InP diode parameters. The distribution of the interface state density (N_{ss}) within the band gap obtained from both I - V and C - V characteristics is investigated.

2. EXPERIMENTAL PROCEDURE

The substrate n -type InP (100) with a carrier concentration of $1 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ is used in the present work. Prior to the surface nitridation, the InP wafer is chemically cleaned by H_2SO_4 , 3% bromine methanol and deionized water. The InN thin film is prepared by nitridation of the InP substrates using a glow discharge source (GDS) in ultra-high vacuum (10^{-6} to 10^{-7} Pa). After introduction into the chamber reactor, in situ ion bombardment cleaning with low-energy Ar^+ ions is performed (300 eV, sample current density $2 \text{ A}\cdot\text{cm}^{-2}$). This step removes all amount of carbon and oxygen contaminant and creates metallic indium droplets at the sub-

* abdelkrim.khediri@gmail.com

† talbi_a02@yahoo.fr

strate surface [5]. Through the consumption of indium droplets by nitrogen atoms in the plasma discharge cell, a thin film of about 25 Å was created on the top of the substrate [6]. Continuous plasma is used as a nitrogen source and the substrate is heated to 250 °C. We have used the nitrogen flow at 45° versus the normal of the surface during 40 min.

To realize the metal contact, a gold (Au) gate with 2 mm diameter is used. The structure is described in Fig. 1. The current-voltage (*I-V*) and capacitance-voltage (*C-V*) measurements are carried out by Agilent 4284A, Semiconductor Parameter Analyzer and Agilent 4156C measuring instrument at room temperature.

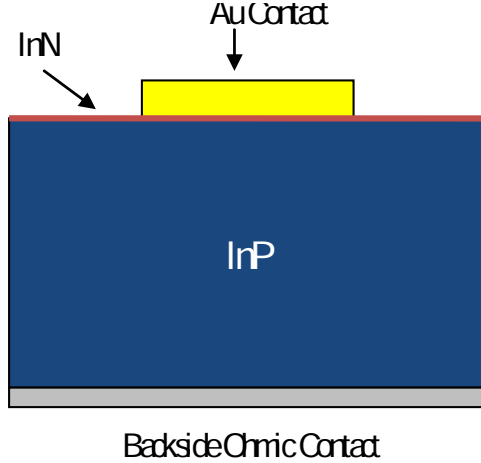


Fig. 1 – Schematic of fabricated Au/InN/*n*-InP Schottky diode

3. RESULTS AND DISCUSSION

3.1 Current-Voltage Characteristics

The current-voltage characteristic measured at 300 K is reported in Fig. 2. The forward-bias current due to thermionic emission (T.E.) across Schottky contacts with series resistance (R_s) is given as [7]:

$$I = I_0 \left(\exp \left(\frac{qV - IR_s}{nkT} \right) - 1 \right), \quad (1)$$

where I_0 is the saturation current, n is the ideality factor, k is the Boltzmann constant, and T is the measurement temperature in Kelvin. The saturation current I_0 is expressed by:

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

where A is the contact area, A^* is the effective Richardson constant, q is the electron charge, Φ_{bn} is the barrier height. By using an effective mass of $0.073m_e$ for the InP substrate [8], the value of A^* is calculated to be $9.4 \text{ A}\cdot\text{cm}^{-2}\cdot\text{K}^{-2}$.

Using a linear curve fit to the forward characteristics of $\log(I) - V$ versus V in the first region, as shown in Fig. 2, the ideality factor n and the barrier height Φ_{bn} can be calculated. The ideality factor is a measure of the conformity of the diode to pure thermionic emission and is determined from the slope of the forward bias *I-V* characteristics through the relation:

$$n = \frac{q}{kT} \frac{d(V - IR_s)}{d(\ln I)}. \quad (3)$$

The saturation current I_0 is obtained using the intercept on the current axis of the characteristic given in Fig. 2 for the first region. Then, the saturation current is estimated to be $12.3 \times 10^{-6} \text{ A}$.

The ideality factor of Au-InN/InP diode is found to be equal to 1.57 which indicates dominant thermionic conduction current. The barrier height Φ_{bn} is given by:

$$\Phi_{bn} = \frac{q}{kT} \ln \left(\frac{AA^*T^2}{I_0} \right). \quad (4)$$

From Eq. (4), the calculated value of the barrier height is 0.64 eV which is higher than the barrier value (0.40-0.55 eV) of the conventional Au/InP diode [9, 10].

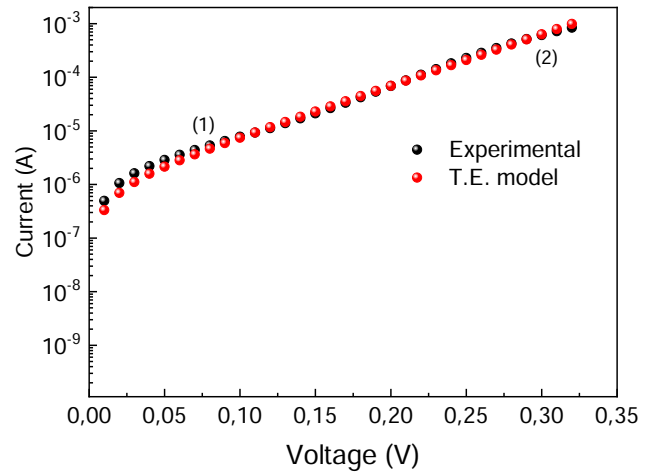


Fig. 2 – Current as a function of applied voltage of Au/InN/*n*-InP diode at room temperature (measured data and T.E. model)

The barrier height measured from the *I-V* method is an effective value and can include barrier lowering effect due to the interfacial insulator layer or interface states. Furthermore, the determination of Schottky barrier height from *I-V* characteristics is only reliable if the forward current is a good straight line with a low value of the ideality factor. The analytical curve is compared with the experimental one. The results confirm that the conduction phenomenon can be described as thermionic emission. The series resistance (R_s) is an important parameter for the electrical characteristics of Schottky diodes. Various methods were suggested to determine the effect of series resistance on electrical parameters of devices caused by the series resistance R_s . The value of the series resistance R_s of 38 Ω was estimated for higher polarization voltages from the slope of the $\ln[I/\exp(-qV/kT)]$ characteristic. These results are very comparable to the value of series resistance obtained by Akkal et al. on Au/InSb/InP (100) Schottky diode, where the series resistance was equal to 85 Ω [11].

3.2 Capacitance-Voltage Characteristics

The capacitance of a Schottky diode varies with bias voltage as

$$\frac{1}{C^2} = \frac{2(V_R + V_d)}{q\epsilon_s N_D A^2}, \quad (5)$$

where V_R is the voltage in the reverse bias, V_d is the diffusion potential, $\epsilon_s = 12.1\epsilon_0$ is the permittivity of the semiconductor, $\epsilon_0 = 8.85 \times 10^{-14} \text{ F}\cdot\text{cm}^{-1}$ is the vacuum dielectric constant, and N_D is the doping concentration. Fig. 3 shows the capacitance measurements of the sample at 1 MHz.

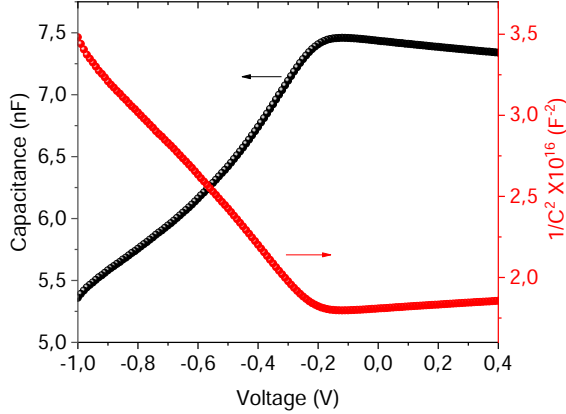


Fig. 3 – Capacitance-voltage characteristics of Au/InN/InP diode at 1 MHz

The capacitance reaches a maximum when electrons are accumulated at the interface because of the barrier high, and then decreases when it is under reverse bias. An increase in reverse bias shifts the Fermi-level downward for the InP side, which increases the depletion width and consequently increases the total positive charge of ionized donor atoms. As a result, the inverse of capacitance increases with increasing reverse bias. The barrier height from C - V measurement is defined by [12]:

$$\Phi_{bn} = V_d + \frac{kT}{q} + V_n, \quad (6)$$

where V_n is the Fermi energy determined from the conduction band.

The diffusion potential or built-in potential is measured by extrapolating $1/C^2$ versus V plot to the x -axis (Fig. 3). For Au/InN/InP Schottky diode, the calculated doping concentration N_D and the diffusion potential are $1.16 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ and 0.72 eV, respectively. The barrier height Φ_{bn} is evaluated to 0.83 eV; this value is lower than that obtained by the I - V data. The discrepancy between I - V and C - V measurements cannot be seen if the barriers are uniform and ideal, and the two measurements yield the same value. These different values obtained from the two techniques can be explained by a distribution of the Schottky barrier height due to inhomogeneities (combination of the interfacial InN layer composition, non-uniformity of the interfacial thickness, and distribution of interfacial charges) that occur at the interface [12, 13]. The Schottky barrier calculated from $1/C^2$ versus V gives an idea of the mean value of nonhomogeneous Schottky barrier. Thus, any spatial variation on a barrier causes current preferentially through the minimum barrier which can explain

this difference between the two extracted values.

The experimental parameters determined from I - V and 1 MHz C - V characteristics of Schottky diodes are given in Table 1.

The capacitance versus bias voltage characteristics were measured at room temperature and for different AC signal frequencies in the range of 1 kHz to 1 MHz.

Table 1 – Experimental parameters obtained for Au/InN/InP Schottky diode

Symbol	Parameter	Value
I_s	Saturation current	12.3 μA
n	Ideality factor	1.57
R_s	Series resistance	38 Ω
Φ_{bn}	Barrier height from I - V	0.64 eV
N_D	Doping concentration	$1.16 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$
V_D	Diffusion potential	0.72 V
Φ_{bn}	Barrier height from C - V	0.83 eV

In the ideal case, C - V measurements are frequency independent, however, the presence of interface states leads to a strongly frequency-dependent capacitance [14] as shown in Fig. 4. The value of the capacitance decreases with increasing frequency.

This occurs because at lower frequencies the interface states can follow the AC signal and yield an excess capacitance which depends on the frequency. At average frequencies, less interface states are bounded by the AC signal (there are different types of interface states with different lifetimes) which reduces the measured capacitance. At the high-frequency limit, the interface states cannot follow the AC signal. This makes the contribution of the interface state capacitance to the total capacitance negligibly small.

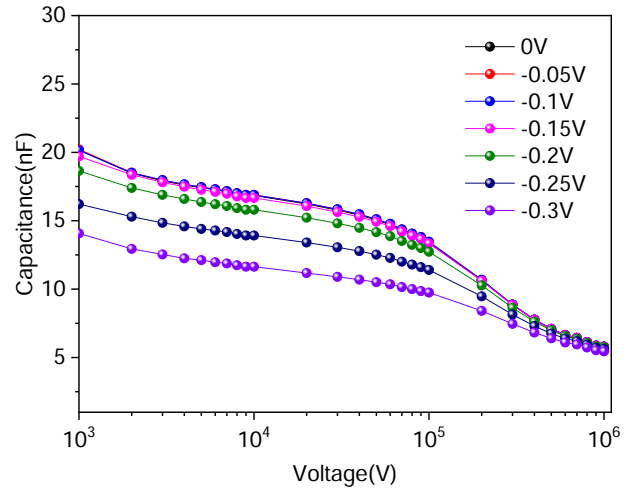


Fig. 4 – Capacitance-frequency for 0 to -0.3 V bias showing the dispersion that occurs over the measured frequency range

3.3 Determination of Interface States Density (N_{ss})

In order to determine the density of the interface state distribution, the surface potential ψ_s values have been extracted from measured I - V characteristics. The electrical current of a Schottky diode as a function of the surface potential can be expressed as:

$$I = AA^*T^2 \exp\left(\frac{-qV_n}{kT}\right) \exp\left(\frac{-q\psi_s}{kT}\right). \quad (7)$$

Fig. 5 represents the surface potential which we had extracted using Eq. (7) and the electrical current measurements by replacing experimental data in the following analytical expression:

$$\psi_s = \frac{kT}{q} \ln\left(\frac{AA^*T^2}{I}\right) - V_n. \quad (8)$$

The density of states in the conduction band edge is equal to $N_C = 5.7 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ for InP substrate [15]. N_D doping concentration was extracted from the slope of 1 MHz frequency $1/C^2$ versus V characteristics measurement at room temperature.

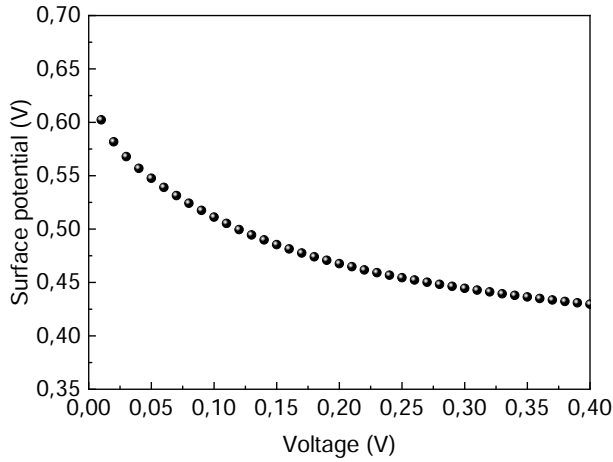


Fig. 5 – Surface potential-voltage characteristics of Au/InN/InP diode

The interface states have different lifetimes. At low frequencies, all interface states follow the AC signal, and the low-frequency capacitance is given by [16]:

$$C_{LF} = \frac{\sqrt{q\epsilon_s N_D / 2\psi_s} + qN_{ss}}{1 + qJR_s / kT + \delta / \epsilon_i \left(\sqrt{q\epsilon_s N_D / 2\psi_s} + qN_{ss} \right)}, \quad (9)$$

where N_{SS} is the interface state density, δ is the thickness of the interfacial layer, ϵ_i and ϵ_s represent the permittivity of the interfacial layer and that of the semiconductor, respectively.

At high frequencies, theoretically none of the interface states follows the AC signal, therefore the interface states have no effect on the capacitance, and the capacitance can be expressed [16]:

$$C_{HF} = \frac{\sqrt{q\epsilon_s N_D / 2\psi_s}}{1 + qJR_s / kT + \delta / \epsilon_i \sqrt{q\epsilon_s N_D / 2\psi_s}}. \quad (10)$$

The interface state density N_{SS} can be determined using Eqs. (9) and (10) such as:

$$N_{ss} \approx \sqrt{q\epsilon_s N_D / 2\psi_s} \frac{C_{LF} - C_{HF}}{qC_{HF}}. \quad (11)$$

The interface state density N_{SS} was calculated using the experimental $C-V$ at a low frequency (1 kHz) and $C-V$ at a high frequency (1 MHz) by using Eq. (11). Furthermore, in n -type semiconductors, the energy of interface states with respect to the top of the conduction band ($E_C - E_{SS}$) at the surface of the semiconductor is given by [17]:

$$E_C - E_{ss} = q(\Phi_{bn} - V). \quad (12)$$

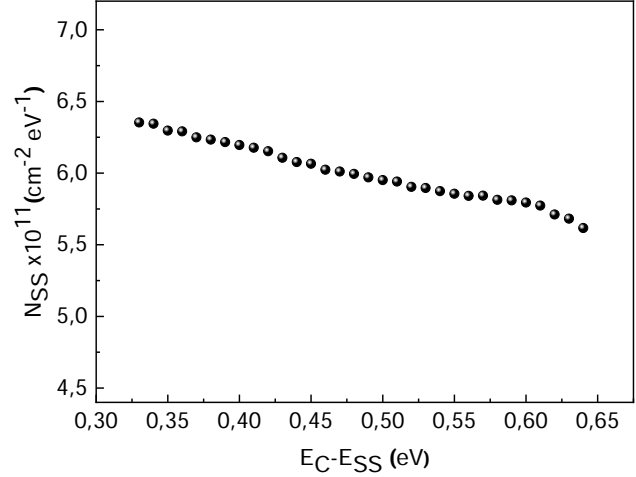


Fig. 6 – Interface state density energy distribution of Au/InN/InP diode by L-H frequency $C-V$

Fig. 6 represents the interface state density as a function of energy. The value of the interface state density N_{SS} decreases with energy increasing from the edge of the conduction band. As can be seen, the near mid gap interfacial state density N_{SS} is estimated equal to $5.6 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2} \text{ eV}^{-1}$. Due to the elimination of surface contaminants such as oxygen and carbon impurities by the ionic bombardment cleaning of the InP substrate surface, a lower interface state density was found. Additionally, after the nitridation process, the interfacial crystallographic defects were improved by the formation of the InN layer. This result is reasonable considering the high concentration of defects in nitride materials [17] and in good agreement with those obtained by A. Rabehi et al. [18] and A.H. Kacha et al. [4] on GaAs substrates. The results yield that the interface states play a very important role in the current flow mechanism in electronic devices, and they must be kept as low as possible in order to reduce the surface recombination and tunneling.

4. CONCLUSIONS

We reported in this paper the electrical characterization of the Au/InN/ n -InP structure. We demonstrated that the $I-V$ and $C-V$ curves of this diode are influenced by the presence of the InN layer. A low saturation current and series resistance were obtained. The effective barrier heights were 0.65 eV and 0.83 eV from $I-V$ and $C-V$ measurements, respectively. The interface state density N_{SS} was significantly low ($5.6 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2} \text{ eV}^{-1}$

at mid gap) compared to that of conventional Au/*n*-InP Schottky diodes. We concluded that the prepared Au/InN/*n*-InP Schottky diode by passivating the InP

surface with the formation of the interfacial InN layer improves the diode characteristics by reducing the interface states density.

REFERENCES

1. G. Koblmuller, C.S. Gallinat, S. Bernardis, J.S. Speck, G.D. Chern, E.D. Readinger, H. Shen, M. Wraback, *Appl. Phys. Lett.* **89** No 7, 071902 (2006).
2. K. Wang, R.R. Reeber, *Appl. Phys. Lett.* **79** No 11, 1602 (2001).
3. M. Petit, Ch. Robert-Goumet, L. Bideux, B. Gruzza, Z. Benamara, N. Bachir Bouiadjra, V. Matolin, *Appl. Surf. Sci.* **234**, 451 (2004).
4. A.H. Kacha, B. Akkal, Z. Benamara, M. Amrani, A. Rabhi, G. Monier, R. Goumet, L. Bideux, B. Gruzza, *Superlattice. Microstruct.* **83**, 827 (2015).
5. M. Petit, Y. Ould-Metidji, C. Robert, L. Bideux, B. Gruzza, V. Matolin, *Appl. Surf. Sci.* **212/213**, 601 (2003).
6. A. Talbi, Z. Benamara, B. Akkal, B. Gruzza, L. Bideux, C. Robert, C. Varenne, N. Chami, *Mater. Sci. Eng. A* **437**, 254 (2006).
7. S.M. Sze, *Physics of Semiconductor Devices. 3rd Ed.* (New York: John Wiley and Sons: 2006).
8. H. Mathieu, H. Fanet, *Physique des Semiconducteurs et des Composants Électroniques* (Dunod, Paris, 6e ed., 2009).
9. H. Çetin, E. Ayyildiz, *Semicond. Sci. Technol.* **20**, 625 (2005).
10. H. Çetin, E. Ayyildiz, *J. Vac. Sci. Technol. B* **23**, 2436 (2005).
11. B. Akkal, Z. Benamara, N. Bachir Bouiadjra, S. Tizi, B. Gruzza, *Appl. Surf. Sci.* **253**, 1065 (2006).
12. M.K. Hudait, S.B. Krupanidhi, *Mater. Sci. Eng. B* **87** No 2, 141 (2001).
13. E.H. Nicollian, A. Goetzberger, *Appl. Phys. Lett.* **7**, 216 (1965).
14. E.H. Rhoderick, *Metal-Semiconductor Contacts* (Oxford University Press) **121**, 136 (1978).
15. M. Levinstein, S. Rumyantsev, M. Shur, *Handbook Series on Semiconductor Parameters* (World Scientific: London: 1996).
16. S. Chattopadhyay, L.K. Bera, S.K. Ray, P.K. Bose, C.K. Maiti, *Thin Solid Films* **335** No 1-2, 142 (1998).
17. Christopher F. McConville, William J. Schaff, *Indium Nitride and Related Alloys* (CRC Press: 2011).
18. A. Rabehi, M. Amrani, Z. Benamara, B. Akkal, A.H. Kacha, *Optik* **127** No 16, 6412 (2016).

Електричні характеристики та густина інтерфейсних станів в діоді Шотткі Au/*n*-InN/InP

A.H. Khediri^{1,2}, A. Talbi¹, M.A. Benamara¹, Z. Benamara¹

¹ Laboratoire de Microélectronique Appliquée, Université Djillali Liabès de Sidi Bel Abbès, 22000, Algeria

² Plateforme Technologique de Micro-fabrication, Centre de Développement des Technologies Avancées, Cité 20 août 1956, Baba Hassen, 16303 Algiers, Algeria

У роботі представлено електричне дослідження тонких плівок InN, розроблених шляхом нітрування підкладки InP (100). Зразки були отримані з використанням джерела тліючого розряду (GDS) в надвисокому вакуумі. Золотий (Au) контакт Шотткі був нанесений на верхню частину поверхні. Електричні характеристики структури Au/InN/*n*-InP були досліджені з використанням ВАХ та кривих смність-напруга. З ВАХ при кімнатній температурі показано, що основним механізмом провідності є струм термоелектронної емісії. Значення коефіцієнта ідеальності діода 1,57 знаходять за допомогою аналітичних методів. Крім того, висота бар'єру пристрою оцінюється в 0,64 еВ. Це значення значно більше, ніж раніше повідомлене в літературі. Низький струм насичення та послідовний опір (R_s), рівні відповідно 12,3 мкА та 38 Ом, вказують на наявність шару InN. З кривих смність-напруга при напрузі зворотного зміщення отримують вбудований потенціал та концентрацію іонізованого донора 0,83 В та $1,16 \times 10^{17} \text{ см}^{-3}$ відповідно. Частотно-залежну смність пояснюють наявністю інтерфейсних станів. На основі методу високих і низьких частот визначено середню густина інтерфейсних станів (N_{ss}) рівну $5,6 \times 10^{11} \text{ eV}^{-1} \text{ см}^{-2}$. Ці висновки свідчать про гарну пасивацію поверхні InP із використанням тонкої плівки InN.

Ключові слова: Висота бар'єру, Вимірювання ВАХ, Фосфід індію, Нітрид індію, Густина інтерфейсних станів, Діоди Шотткі.

Article

Impact of III-Nitride/Si Interface Preconditioning on Breakdown Voltage in GaN-on-Silicon HEMT

Abdelkrim Khediri ^{1,2,*}, Abbasia Talbi ¹, Abdelatif Jaouad ³, Hassan Maher ³  and Ali Soltani ^{3,4}

¹ Laboratoire de Microélectronique Appliquée, Université Djillali Liabès de Sidi Bel Abbès, Sidi Bel Abbès 22000, Algeria; talbi_a02@yahoo.fr

² Plateforme Technologique de Micro-Fabrication, Centre de Développement des Technologies Avancées, Algiers 16081, Algeria

³ Laboratoire Nanotechnologies Nanosystèmes (LN2)—CNRS, Université de Sherbrooke, 3000 Boulevard de l'Université, Sherbrooke, QC J1K 0A5, Canada; abdelatif.jaouad@usherbrooke.ca (A.J.); hassan.maher@usherbrooke.ca (H.M.); ali.soltani@usherbrooke.ca (A.S.)

⁴ IEMN (Institut d'Électronique de Microélectronique et Nanotechnologie), CNRS-UMR-8520, University of Lille, 59655 Villeneuve d'Ascq, France

* Correspondence: Abdelkrim.El.Hadi.Khediri@USherbrooke.ca

Abstract: In this paper, an AlGaIn/GaN metal-oxide-semiconductor high-electron-mobility transistor (MOS-HEMT) device is realized. The device shows normal ON characteristics with a maximum current of 570 mA/mm at a gate-to-source voltage of 3 V, an on-state resistance of 7.3 Ω -mm and breakdown voltage of 500 V. The device has been modeled using numerical simulations to reproduce output and transfer characteristics. We identify, via experimental results and TCAD simulations, the main physical mechanisms responsible for the premature breakdown. The contribution of the AlN/Silicon substrate interface to the premature off-state breakdown is pointed out. Vertical leakage in lateral GaN devices significantly contributes to the off-state breakdown at high blocking voltages. The parasitic current path leads to premature breakdown before the appearance of avalanche or dielectric breakdown. A comparative study between a MOS-HEMT GaN on a silicon substrate with and without a SiNx interlayer at the AlN/Silicon substrate interface is presented here. We show that it is possible to increase the breakdown voltages of the fabricated transistors on a silicon substrate using SiNx interlayer.

Keywords: GaN; HEMT; parasitic current path; high voltage breakdown



Citation: Khediri, A.; Talbi, A.; Jaouad, A.; Maher, H.; Soltani, A. Impact of III-Nitride/Si Interface Preconditioning on Breakdown Voltage in GaN-on-Silicon HEMT. *Micromachines* **2021**, *12*, 1284. <https://doi.org/10.3390/mi12111284>

Academic Editor: Giovanni Verzellesi

Received: 14 July 2021

Accepted: 18 October 2021

Published: 21 October 2021

Publisher's Note: MDPI stays neutral with regard to jurisdictional claims in published maps and institutional affiliations.



Copyright: © 2021 by the authors. Licensee MDPI, Basel, Switzerland. This article is an open access article distributed under the terms and conditions of the Creative Commons Attribution (CC BY) license (<https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>).

1. Introduction

AlGaIn/GaN high electron mobility transistors (HEMT) have attracted an increasing interest for their high efficiency power electronics benefit from the electron transport properties and the high critical electrical field of this wide band gap material [1]. GaN-on-Si is highly attractive as a high performance technology with low cost. However, the high reactivity of silicon with the different compounds frequently used for the growth of nitrides (Ga, Al, and N precursors) makes the substrate preparation and the nucleation more delicate than on a substrate like SiC [2]. Furthermore, GaN-on-Si suffers from a risk of high dislocation density or crack generation due to the tensile stress induced by the large lattice mismatch (17%) and thermal expansion coefficient difference between GaN and Si. The parasitic diffusion of dopant species into the silicon substrate [3–5], as well as degraded crystal quality at the AlN/Si interface, have been reported as possible origins of leakage paths limiting the reliability of such structures at high voltages, which leads to premature breakdown of the transistor.

The control of the electrical behavior of HEMT structures is still challenging. Both sufficient crystal quality and electrical resistivity regarding the AlN/Silicon interface are required for achievement of high breakdown voltage. The use of an interlayer between the

AlN nucleation layer and silicon substrate is a promising alternative to reduce the interface states and eliminate a conductive path. Cubic Silicon Carbide (3C-SiC) was proposed as a template with a reduced lattice mismatch with GaN as well as a reduced thermo-elastic strain after GaN based structure regrowth [6].

Previous approaches for boosting the breakdown have focused on improving the growth conditions of the buffer layer (particularly strain relief) in order to reduce the oxygen impurities and threading dislocations identified as responsible for the leakage paths [7]. Other groups worked on increasing the buffer thickness for boosting the breakdown [8].

In the literature, there are plenty of articles concerning the simulation of GaN HEMTs by exploiting TCAD simulators [9–12]. Most of these studies have been focused on the most active area of the transistor. Few studies investigate the influence of the substrate and nucleation layers on breakdown. G. Longobardi et al. [13] proposes a TCAD approach for simulating the non-ideality of the AlN nucleation layer and AlN/Si interface. Li, X. et al. [14] investigate carrier transport through AlN from a different doping nature of Si(111) substrates. In this work, we elaborate on a normal ON AlGaIn/GaN metal-oxide-semiconductor high-electron-mobility transistor (MOS-HEMT) device on-Si for switching electronics and we investigate, using ATLAS-SILVACO software, simulations of the premature breakdown in the device. We show that eliminating leakage at AlN/Si interface makes it possible to increase the breakdown voltages of the fabricated transistors based on a GaN-on-Silicon substrate. Our approach is to use a SiNx layer for cost effective leakage reduction.

2. Materials and Methods

2.1. Current-Voltage Characteristics

Normal ON AlGaIn/GaN MOS-HEMT devices were realized on commercial HEMT substrate. The composition of the transistor includes: a highly resistive Si substrate, an AlGaIn buffer with a back barrier grown on 40 nm of an AlN nucleation layer, a 150 nm GaN non-intentionally doped channel, a 4 nm $\text{Al}_{0.45}\text{Ga}_{0.55}\text{N}$ barrier and 5 nm SiO_2 gate oxide. The transistors have the following dimensions: a gate length of 1.5 μm , 1 μm gamma field plate, a source-drain distance (L_{GS}) of 2 μm , and 15 μm gate-drain (L_{GD}) distance. The epitaxial structure used for this study is illustrated in Figure 1.

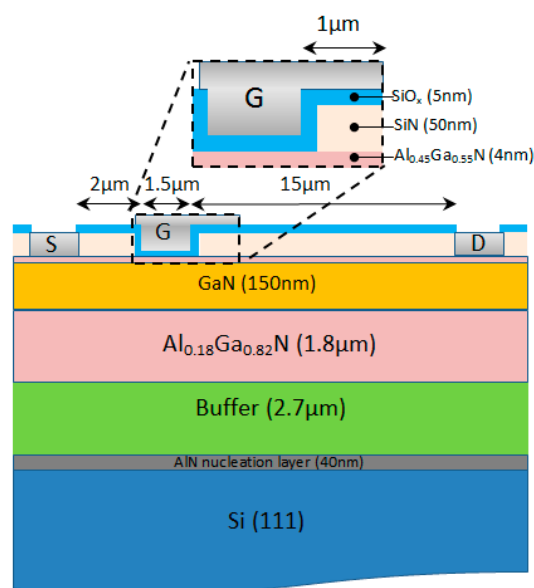


Figure 1. Metal-oxide-semiconductor high-electron-mobility transistor (MOS-HEMT) cross section.

The device was simulated by using ATLAS-SILVACO software. Poisson’s and continuity equations, including ionized deep-level terms for electrons and holes and a drift-diffusion model, are used to solve transport equations. The simulations include Schockley–Read–Hall, Auger recombination and carrier-dependent lifetimes. The electron saturation velocity and mobility model are taken according to Farahmand’s theory [15]. The composition and temperature-dependent low field model defined by:

$$\mu_n(T,N) = m1 \cdot (T/300)^b + [(m1 - m2) \cdot (T/300)^d] / (1 + [N / (Ncr \cdot (T/300)^g])^{(a \cdot (T/300))^E}) \quad (1)$$

For the high field mobility, nitride specific field dependent mobility model was used [15] as described by the following equation:

$$\mu_n = (\mu_n(T,N) + Vsat \cdot (E^{(N1-1)} / Ecn^{N1})) / (1 + an \cdot (E/Ecn)^{N2} + (E/Ecn)^{N1}) \quad (2)$$

The coefficients were set in agreement with Monte Carlo calculations.

Polarization charges of 10^{13} cm^2 are set at the barrier/channel interface, and surface states are included through a $2.3 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ fixed donor trap density, uniformly distributed on the AlGaN/Oxide interface.

In GaN power devices, carbon (C) is widely adopted as compensation doping to suppress the unintentional conductivity in the GaN buffer and transition layers underlying the MOS-HEMT channel. Additionally, it is used to avoid premature breakdown related to source-to-drain punch-through. The C doping is modeled by means of acceptor and donor type traps associated, respectively, with the C_N and C_{Ga} states [16]. For high-resistivity silicon, we use a p-type doping substrate with a uniformly distributed concentration of $1.47 \times 10^{12} \text{ cm}^{-3}$. Table 1 lists the main physical parameters included in the simulations.

Table 1. Geometrical and model parameters of the device used in the simulations.

Physical Mechanism	Model	GaN	AlGaN(Back Barrier + Buffer)	AlN
Dimensions	-	150 nm	1.8 + 2.7 μm	40 nm
Low field mobility	Farahmand’s Law	$m1 = 295 \text{ (cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}\text{)}$	$m1 = 132 \text{ (cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}\text{)}$	$m1 = 297 \text{ (cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}\text{)}$
		$m2 = 1460 \text{ (cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}\text{)}$	$m2 = 306 \text{ (cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}\text{)}$	$m2 = 683 \text{ (cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}\text{)}$
		$a = 0.66$	$a = 0.29$	$a = 1.16$
		$b = -1.02$	$b = -1.33$	$b = -1.82$
		$d = -3.43$	$d = -1.75$	$d = -3.43$
		$g = 3.78$	$g = 3.78$	$g = 3.78$
		$E = 0.86$	$E = 0.41$	$E = 0.86$
		$Ncr = 10^{17}$	$Ncr = 10^{17}$	$Ncr = 10^{17}$
		$Vsat = 1.9 \times 10^7 \text{ (cm/S)}$	$Vsat = 1.27 \times 10^7 \text{ (cm/S)}$	$Vsat = 2.167 \times 10^7 \text{ (cm/S)}$
		$Ecn = 220 \text{ (kV/cm)}$	$Ecn = 365 \text{ (kV/cm)}$	$Ecn = 447 \text{ (kV/cm)}$
High field mobility	Farahmand’s Law	$N1 = 7.2044$	$N1 = 5.3193$	$N1 = 17.368$
		$N2 = 0.7857$	$N2 = 1.0396$	$N2 = 0.8554$
		$an = 6.1673$	$an = 3.2332$	$an = 8.7253$
		$E2 (Ec - 0.4) / 1 \times 10^{15}$	$E2 (Ec - 0.4) / 1 \times 10^{15}$	
Unintentional Doping	Trap Energy level (eV)/Density (cm ⁻³)	$E4 (Ec - 0.74) / 3.37 \times 10^{15}$	$E4 (Ec - 0.74) / 3.37 \times 10^{15}$	$E1 (Ec - 0.6) / 5 \times 10^{16}$
		$H1 (Ev + 0.86) / 7.5 \times 10^{15}$	$H1 (Ev + 0.86) / 7.5 \times 10^{15}$	

2.2. Breakdown Characteristics

We considered bulk traps uniformly distributed in all GaN-buffer layers, with a concentration of $3.37 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ and $7.5 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ for the donor and acceptor traps, respectively, corresponding to E2 and H1 carbon-related defects [16]. In addition, the trap level E4 is used in the simulation, consistent with a deep double donor located around at 0.74 eV below the conduction band as described by Ghazi et al. [16,17], which is attributed to native point defects in the GaN films. Electron and hole capture cross sections of $1 \times 10^{-15} \text{ cm}^2$ are used for all trap levels, which are consistent with other reported measurements [18]. A positive polarization charge, equal to $5 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$, is used at the AlN/Si interface and the consequent electron accumulation is generated at the same interface. To model the transport mechanism, trap assisted tunneling (TAT) [19] through AlN and discreet traps were located within the AlN layer. The TAT model is used with the acceptor traps, uniformly distributed in the AlN layers, with a density of $5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ and being defined at level 0.6 eV below the conduction band based on the works of G.

Longobardi et al. [13]. We used the impact ionization as high field carrier generation to reproduce the experimental breakdown voltage [20].

In order to simulate the off-state breakdown voltage (V_{BD}), the device was first biased under pinch-off. Here, gate-to-source voltage (V_{GS}) equals -8 V, which is lower than the threshold voltage V_T . Then, the drain voltage was increased until V_{BD} was reached. We define V_{BD} as the voltage value when the compliance current fixed in experimental measurements (1 mA/mm) is reached.

3. Results

First of all, DC measurements were performed on the devices before measuring the breakdown voltage. Simulations were then calibrated against experimental transfer and output IV curves. The maximum I_{DS} was more than 570 mA/mm at V_{GS} value of 3 V. The devices exhibited a pinch-off voltage of -0.25 V with a leakage current below 10^{10} A/mm. Drain current density (I_{DS}) versus drain-to-source voltage (V_{DS}) characteristics at a gate-to-source voltage (V_{GS}) from 0 to $+3$ V of “fresh” device are shown in Figure 2. As shown in Figure 2, the device demonstrates an on-state resistance (R_{ON}) of 7.3 Ω ·mm. We notice that we did not observe the kink effect in the elaborated device in the measured range (V_{DS} 0 – 10 V), meaning that the electronic surface states near the top active areas are not predominant in our MOS-HEMT. The outcomes of the experimental and simulated transfer curves are shown in Figure 3. Applying the parameters specified above, a good fit is obtained.

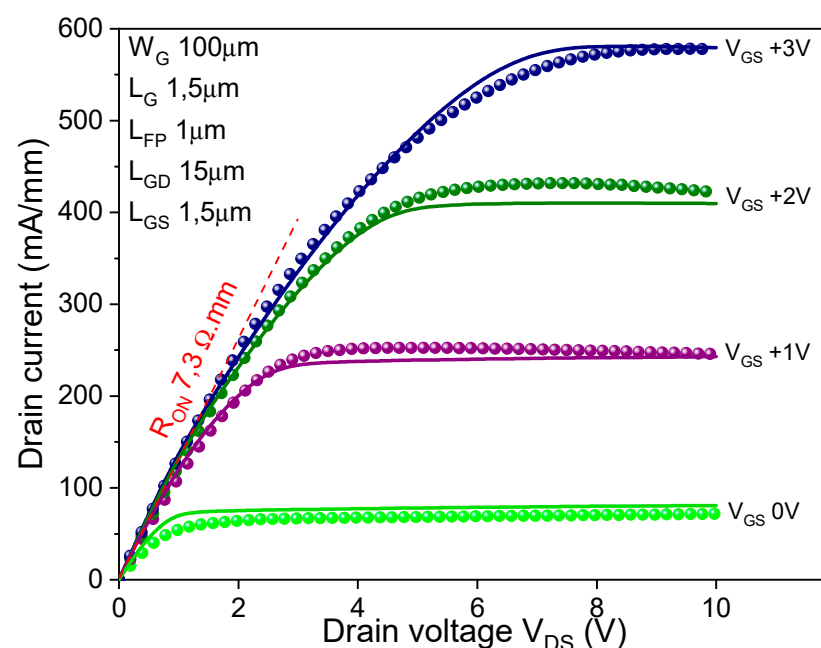


Figure 2. Experimental (dotted) and simulated (line) output characteristics of the device for V_{GS} from 0 to $+3$ V.

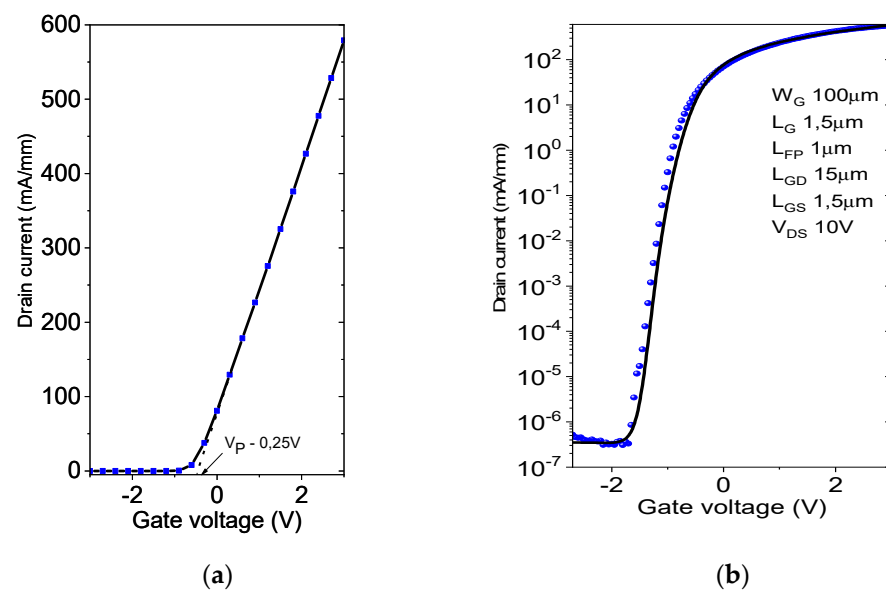


Figure 3. Experimental (dotted) and simulated (line) transfer characteristic (I_{DS} - V_{GS}) of AlGaIn/GaN MOS-HEMT device (a) in linear and (b) logarithm scale.

Three terminals measurements under pinch off conditions ($V_{GS} = -8$ V, $V_{substrate} = 0$ V) were carryout. The breakdown voltage was about 500 V, as shown in Figure 4. At a low drain voltage below 330 V, the substrate current dominated the drain current. It is verified that the gate current was not the trigger of the device breakdown. The rapid increase of the gate current was not observed at the breakdown. On the other hand, at high drain voltage over 330 V, the drain current increases rapidly and simultaneously with the source current. The substrate current remains at same level. The first stage of breakdown occurred with the increase of the drain and source currents at 400 V. Therefore, the source-to-drain leakage current (I_{DS}) is considered to be the breakdown trigger.

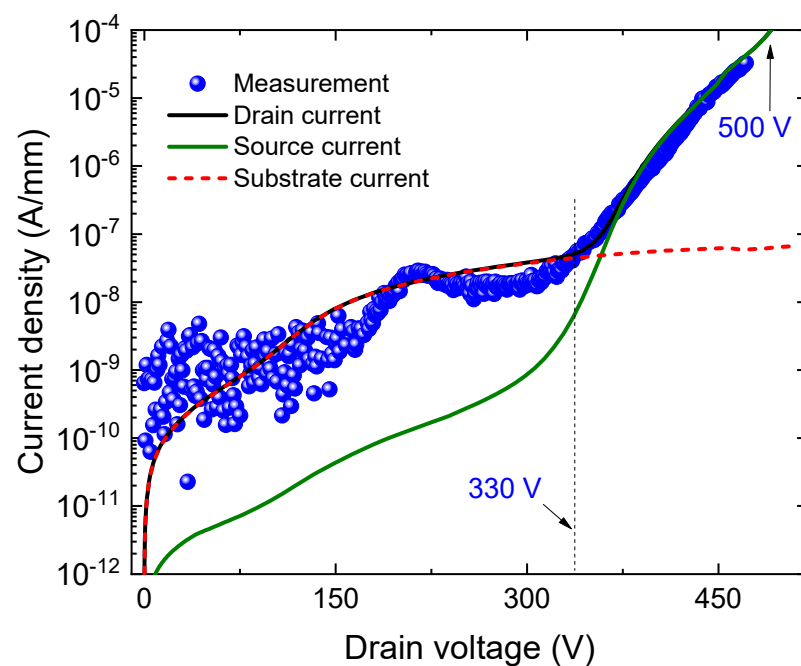


Figure 4. Experimental (dotted) and simulated (line) AlGaIn/GaN MOS-HEMT breakdown.

4. Discussion

As the carbon was not intentionally introduced in these samples, the concentration of the acceptor trap along with a compensating donor trap was chosen at a low level according to U. Honda et al. [16]. The concentration values were varied to fit the experimental results with a dominating C-related acceptor. An agreement with the experimental data, as shown in Figure 4, was found for concentrations indicated in Table 1. With an even lower carbon traps concentration, more leakage across the buffer is observed and the breakdown takes place earlier, at 100 V, through the buffer, as shown in Figure 5. In our MOS-HEMT sample, the leakage path determining breakdown happens between the source and the drain contacts, with electrons injection from the source to the AlN/Si interface and then back towards the drain, as will be discussed in next section.

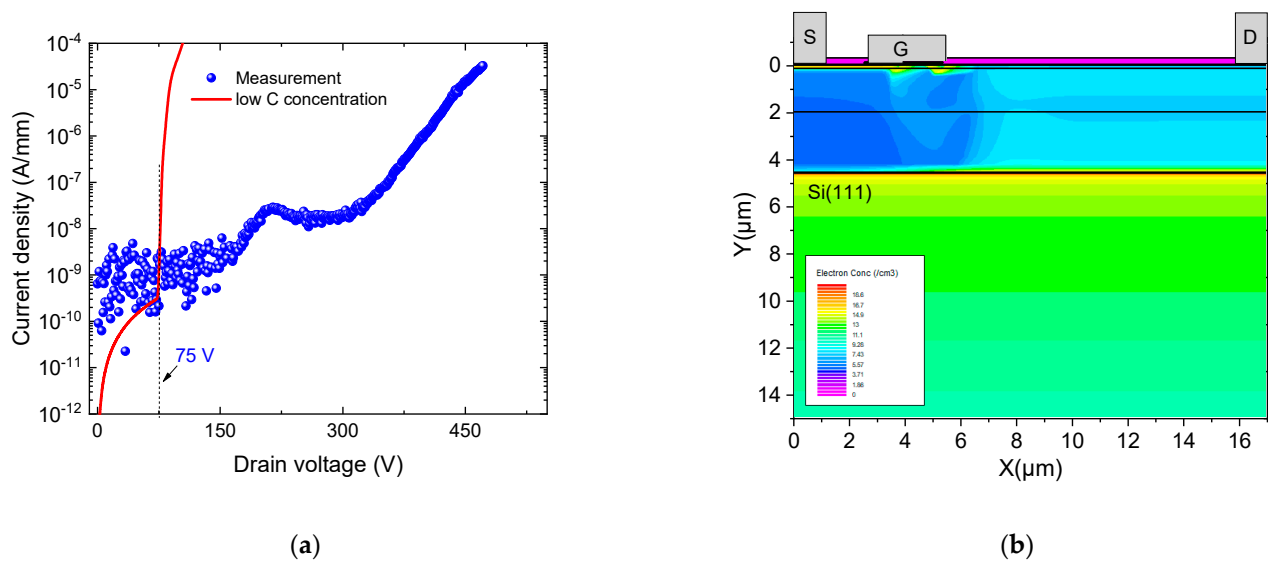


Figure 5. MOS-HEMT breakdown characteristics (a) Experimental (dotted) and simulated (line) with low carbon concentration. Acceptor trap concentration of $7.5 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ and donor trap concentration of $3.37 \times 10^{14} \text{ cm}^{-3}$ were considered. (b) MOS-HEMT structure cross section of electrons concentration at 100V showing more leakage across the buffer.

4.1. Breakdown Origin

Dislocations threading through the pinched two dimensional electron gas (2DEG) channel can trap charges and act as vertical charge transport sites that can result in device leakage (for drain voltage below 330 V). At drain voltages close to the breakdown value, electrons become highly energetic carriers (hot electrons) and are injected from the source into the substrate. Due to the large voltage difference between the drain contact and the substrate, significant electron injection can take place from the substrate into the buffer (via thermionic emission, tunneling and hopping). The final collection to the drain terminal is illustrated in Figure 6. It is worth noticing that the impact ionization in silicon is not the main source of electrons. Without the source of electron-holes created by impact ionization, the substrate current does not increase rapidly at high voltages and remains at very low levels. So, the limiting factor to breakdown still the lateral existing electronic channel at the AlN/Si interface. The transport and physical mechanisms responsible of high vertical leakage are treated in details by Longobardi et al. [13] and Meneghesso et al. [21]. Here, the leakage current path limiting breakdown is the lateral AlN/Si conductive interface. From Figure 7 we can see the current path and the electrons' concentration along the MOS-HEMT structure at the breakdown voltage (V_{BD}). It is obvious that the current path through the existing electronic channel at the AlN/Si interface promotes premature breakdown. Indeed, the interface between Si and AlN is expected to be highly defective due to the large lattice and thermal mismatch between these materials. Furthermore, the AlN films are typically strained in tension (>1 GPa). Hence, the piezoelectric polarization is added

to the spontaneous polarization. Since AlN on Si is almost always Al-polar, a positive polarization charge would be manifest at this interface. This will increase the interfacial sheet charge and consequently the inversion layer of electrons is formed at this interface for p-type substrate. A potential well that confines carriers closer to the interface forms a 2DEG, as can be depicted in Figures 6 and 7. So, a parasitic current path occurs at the AlN/Si interface that limits the breakdown voltage.

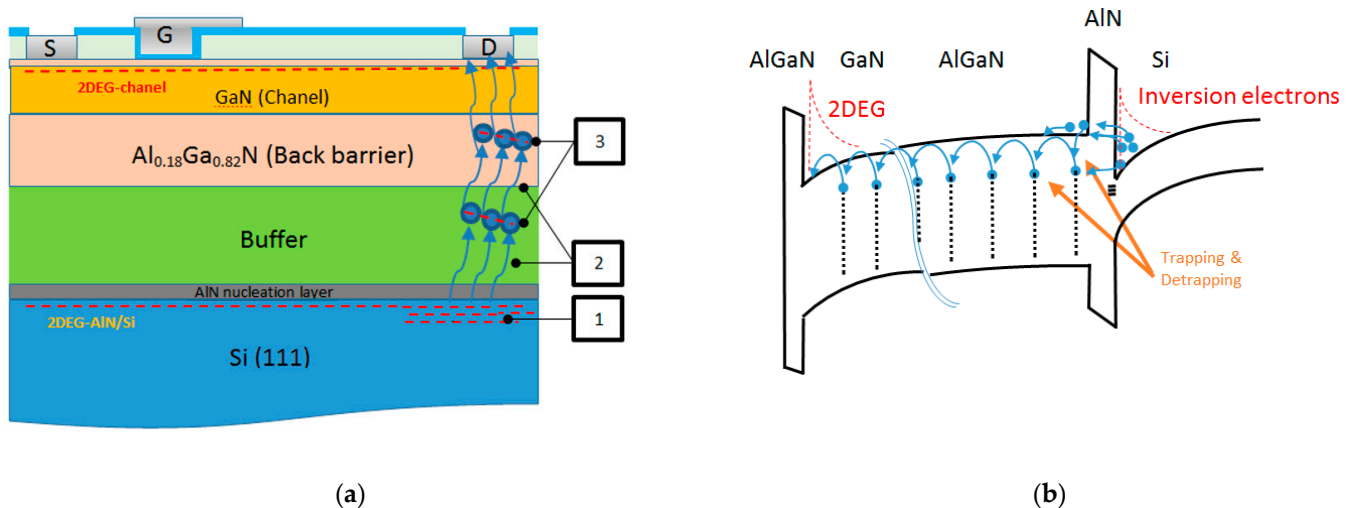


Figure 6. Physical mechanisms responsible for the vertical leakage: (a) Leakage current from AlN/Si interface through the AlN and buffer layer to the drain electrode (1) 2DEG at the AlN/Si interface constitutes the main source of electrons at high leakage currents. (2) Electrons are injected into the transition layers. (3) The current is limited by trapping of electron into acceptor states (SCLC). (b) The mechanisms of electron injection across the AlN barrier.

4.2. Breakdown Improvement

Silicon substrate-removal and a layer-transfer process were proposed to enhance the breakdown voltage (V_{BD}) for HEMT GaN-on-Si [22]. After Si removal, we measured a V_{BD} enhancement of devices with a gate-drain (L_{GD}) distance of 15 μm and a $V_{BD} > 1100$ V compared with ~ 300 V for devices with a Si substrate. Improvement in V_{BD} is also observed experimentally when C-doping concentration was increased [23]. Furthermore, increasing the acceptor trap concentration while having a constant donor trap concentration also results in an improved V_{BD} (not shown here). The relative concentration of acceptor and donor traps controls the breakdown voltage in these devices. Another approach to enhance the breakdown voltage is to insert interlayer with the objective of elimination, 2DEG at the AlN/Si and/or interface state improvement.

Practically, the Si/III-nitride interface alone can typically be composed of SiN_x layers due to the diffusion of nitrogen from the III-N films or the intentional nitridation of the Si surface [24]. However, the formation of SiN_x layers is very much dependent of growth conditions. These SiN_x layers are typically amorphous, thin (from few mono-atomic layers to few nanometers), and/or discontinuous and may act as diffusion barriers for the movement of other species to the Si surface. The effect of the SiN_x layer on the III-N films in the literature is controversial. It has been reported that amorphous SiN_x is not desirable because of the formation of deep-level generation centers in the AlN layer [25]. However, it has been demonstrated that such nitridation also reduces the dislocation density by using SiN_x inclusions as in situ masking layers [24]. Here, we do not discuss the effect of nitridation on the above AlN layer. This will be discussed in future work. In the following paragraph, we try to simulate the effect of Silicon nitridation on V_{BD} .

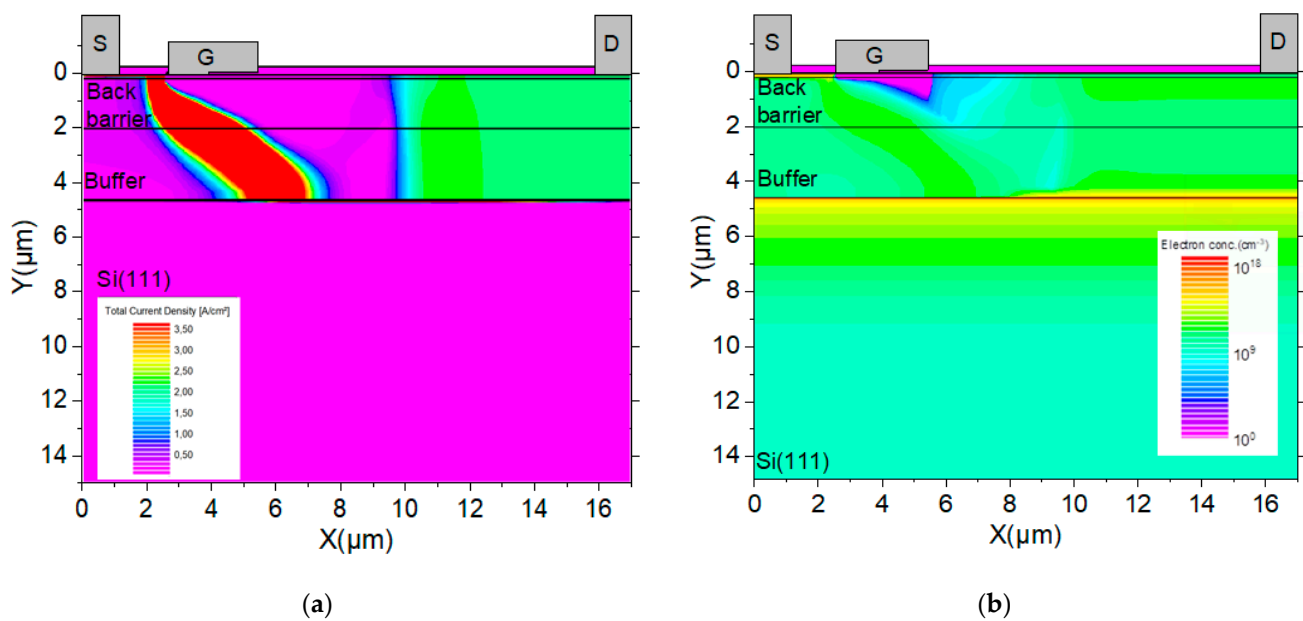


Figure 7. MOS-HEMT structure cross section of (a) current density and (b) electrons concentration at V_{BD} showing the current path from the drain to the source electrode and the 2DEG at AlN/Si interface. The bias voltage at the drain contributes to the accumulation of electrons drain side.

Taking the same structure and parameters described above, the MOS-HEMT is simulated by introducing 3 nm of SiNx. This SiNx layer is supposed to not affect the trap concentration and/or dynamic effects in the upper layers of the device. An easy-to-implement TCAD approach for simulating the non-ideality of the SiNx layer leakage current and tunneling is introduced through the layer.

As we can see from Figure 8, at 500 V drain bias voltage, electrons are accumulated at the SiNx/Si interface and no breakdown is observed. However, we note a small current leakage about 10–14 A/mm through the buffer. As the voltage on the drain side becomes larger, an electron tunnel emerges at a strengthened vertical electric field. These tunneling effects intensify with the increase of the electric field amplitude. The tunnel effect is largely related to the band difference as well as the thickness of the SiNx.

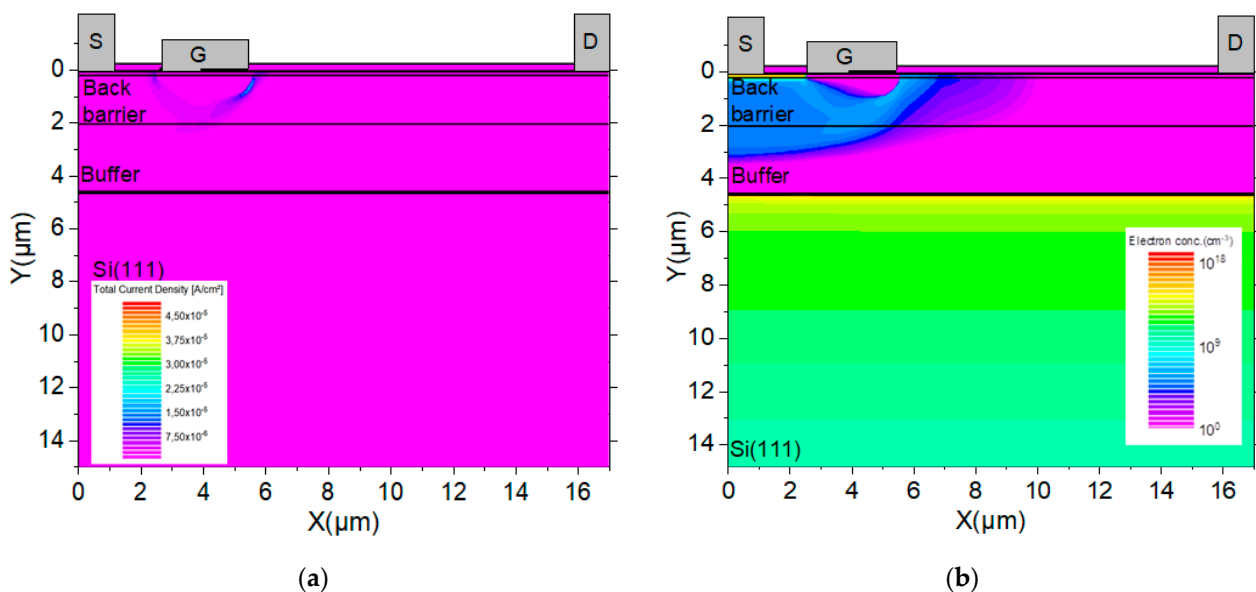


Figure 8. MOS-HEMT structure cross section of (a) current density and (b) electrons concentration at 500 V showing no current path through the 2DEG at AlN/Si interface. A small leakage current 10^{-14} A/mm through the buffer is denoted.

The breakdown voltage in the off state accrues around 1500 V, which is three times greater than the device without 3 nm SiN_x layer. Drain current versus drain voltage for the MOS-HEMT structure with and without the SiN_x interlayer is represented in Figure 9.

From the simulations, it is clear that if the crystalline quality of deposited interlayers (SiN_x) and leakage current to the interface with the Si(111) substrate are improved, the breakdown voltage can be significantly enhanced and the GaN theoretical breakdown value can be reached. Here, the current path at the AlN/Si interface was not eliminated with the interlayer, and a leaking SiN_x layer is used in the simulation.

As the voltage on the drain side becomes larger, an electron tunnel emerges at a strengthened vertical electric field; these tunneling effects intensify with the increase of the electric field amplitude. The tunnel effect is largely related to the band difference as well as the thickness of the SiN_x. The breakdown voltage in the off state accrues around 1500 V, which is three times greater than the device without a 3 nm SiN_x layer. Drain current versus drain voltage for the MOS-HEMT structure with and without the SiN_x interlayer is represented in Figure 9.

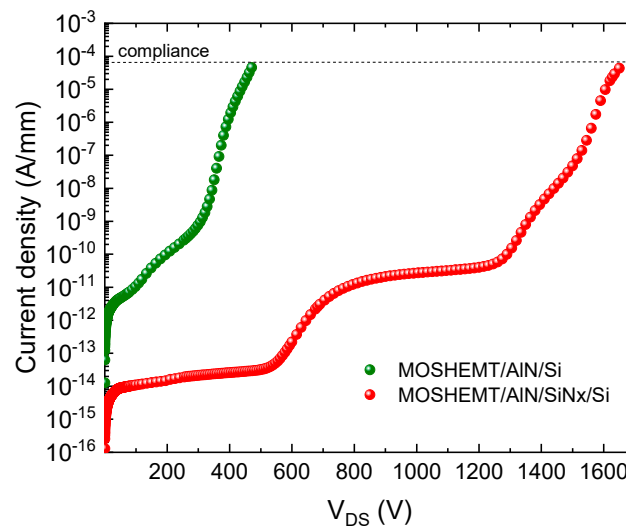


Figure 9. Drain current Vs drain voltage of MOS-HEMT with ($V_{BD} = 1500$ V) and without SiN_x interlayer ($V_{BD} = 500$ V).

Finally, it is notable that for high voltage in switched-mode operation, the thermal conduction and heat dissipation is an important parameter. The use of a good thermal conductive layer such as SiC potentially offers the excellent device characteristics required for high-power device applications. For high frequency applications, it is essential to use ultra-high resistivity wafers to eliminate the substrate loss. It was widely believed that the RF parasitic loss was due to the low resistivity of the Si substrate. Therefore, to minimize the substrate-dependent attenuation of GaN-HEMT on Si, it is required to suppress or at least isolate the sheet mobile electrons underneath the AlN buffer. In this work, we simulate the introduction of thin SiN_x at the AlN/Si interface which can act as a loss suppression layer but we focused our study on the effect of the substrate on the breakdown voltage of HEMT transistors.

5. Conclusions

In this study, we have analyzed the off-state, three-terminal, breakdown of fabricated AlGa_{0.3}N/GaN HEMTs for power switching applications. The fabricated MOS-HEMT on Si exhibited a breakdown voltage of 500 V, an on-resistance of 7.3 Ω ·mm, and a maximum drain current of more than 570 mA/mm at a gate-to-source voltage of 3 V. The electrical behaviors in normal and off-state breakdown conditions were successfully captured by our simulations and the 2DEG channel at AlN/Si has been taken into account for breakdown mechanism simulation. The premature V_{BD} of the sample was explained by the simulations

as a result of the electron's injection from the source to the AlN/Si interface and then to the drain through a parasitic current path at the AlN/Si interface. Indeed, as the AlN/Si interface is more conductive than the III-nitride layers with the presence of 2DEG, the breakdown at this interface is the most likely mechanism. By introducing the SiN interlayer, we found that the breakdown voltage values can significantly be improved to 1500 V. From these results, it is prominent that the structural and electrical characteristics of the AlN/Si interface greatly influence the breakdown characteristics for GaN-on-Si HEMT.

Author Contributions: Conceptualization: A.K. and A.S.; Methodology: A.K. and H.M.; Writing—Original draft preparation: A.K.; Validation: A.T. and A.S.; Investigation: A.J.; Resources: H.M.; Supervision: A.S. and A.T.; Data curation: A.S. and A.J.; Writing—Reviewing and Editing: A.K. and A.S. All authors have read and agreed to the published version of the manuscript.

Funding: This research received no external funding.

Acknowledgments: Authors would like to acknowledge Ahmed Chakroun and all LN2 staff for their contributions in microfabrication process. LN2 is an International Research Laboratory (IRL) funded and co-operated by Université de Sherbrooke (UdeS), Centre National de la Recherche Scientifique (CNRS), Ecole Centrale Lyon (ECL), Institut National des Sciences Appliquées de Lyon (INSA Lyon), and Université Grenoble Alpes (UGA). It is also financially supported by the Fond de Recherche du Québec Nature et Technologies FRQNT.

Conflicts of Interest: The authors declare no conflict of interest.

References

- Rongming, C. GaN power switches on the rise: Demonstrated benefits and unrealized potentials. *Appl. Phys. Lett.* **2020**, *116*, 090502.
- Cordier, Y.; Semond, F.; Massies, J.; Leroux, M.; Lorenzini, P.; Chaix, C. Developments for the production of high-quality and high-uniformity AlGaIn/GaN heterostructures by ammonia MBE. *J. Cryst. Growth* **2007**, *301*, 434–436. [[CrossRef](#)]
- Marchand, H.; Zhao, L.; Zhang, N.; Moran, B.; Coffie, R.; Mishra, U.K.; Speck, J.S.; DenBaars, S.P.; Freitas, J.A. Metalorganic chemical vapor deposition of GaN on Si(111): Stress control and application to field-effect transistors. *J. Appl. Phys.* **2001**, *89*, 7846. [[CrossRef](#)]
- Simoen, E.; Visalli, D.; van Hove, M.; Leys, M.; Borghs, G. A deep-level analysis of Ni–Au/AlN/(1 1 1) p⁺-Si metal–insulator–semiconductor capacitors. *J. Phys. D Appl. Phys.* **2011**, *44*, 475104. [[CrossRef](#)]
- Calleja, E.; Sanchez-Garcia, M.A.; Basak, D.; Sanchez, F.J.; Calle, F.; Youinou, P.; Munoz, E.; Serrano, J.J.; Blanco, J.M.; Villar, C.; et al. Effect of Ga/Si interdiffusion on optical and transport properties of GaN layers grown on Si(111) by molecular beam epitaxy. *Phys. Rev. B* **1998**, *58*, 1550. [[CrossRef](#)]
- As, D.J.; Potthast, S.; Fernandez, J.; Lischka, K.; Nagasawa, H.; Abe, M. Cubic GaN/AlGaIn Schottky-barrier devices on 3C-SiC substrates. *Microelectron. Eng.* **2006**, *83*, 34–36. [[CrossRef](#)]
- Choi, F.S.; Griffiths, J.; Ren, C.; Lee, K.; Zaidi, Z.; Houston, P.; Guiney, I.; Humphreys, C.J.; Oliver, R.A.; Wallis, D.J. Vertical leakage mechanism in GaN on Si high electron mobility transistor buffer layers. *J. Appl. Phys.* **2018**, *124*, 055702. [[CrossRef](#)]
- Rowena, I.B.; Selvaraj, S.L.; Egawa, T. Buffer thickness contribution to suppress vertical leakage current with high breakdown field (2.3 MV/cm) for GaN on Si. *IEEE Electron Device Lett.* **2011**, *32*, 1534. [[CrossRef](#)]
- Akiyama, S.; Kondo, M.; Wada, L.; Horio, K. Analysis of breakdown voltage of field-plate AlGaIn/GaN HEMTs as affected by buffer layer's acceptor density. *Jpn. J. Appl. Phys.* **2019**, *58*, 068003. [[CrossRef](#)]
- Hideyuki, H.; Horio, K. Increase in breakdown voltage of AlGaIn/GaN HEMTs with a high-k dielectric layer. *Phys. Status Solidi* **2014**, *211*, 784–787.
- Zagni, N.; Chini, A.; Puglisi, F.M.; Pavan, P.; Meneghini, M.; Meneghesso, G.; Zanoni, E.; Verzellesi, G. Trap dynamics model explaining the RON stress/recovery behavior in carbon-doped power AlGaIn/GaN MOS-HEMTs. In Proceedings of the IEEE International Reliability Physics Symposium (IRPS), Dallas, TX, USA, 28 April–30 May 2020.
- Saito, W. Breakdown behaviour of high-voltage GaN-HEMTs. *Microelectron. Reliab.* **2015**, *55*, 1682–1686. [[CrossRef](#)]
- Longobardi, G.; Pagnano, D.; Udrea, F.; Sun, J.; Garg, R.; Imam, M.; Charles, A. Suppression technique of vertical leakage current in GaN-on-Si power transistors. *Jpn. J. Appl. Phys.* **2019**, *58*, SCCD12. [[CrossRef](#)]
- Li, X.; van Hove, M.; Zhao, M.; Bakeroot, B.; You, S.; Groeseneken, G.; Decoutere, S. Investigation on carrier transport through AlN nucleation layer from differently doped Si(111) substrates. *IEEE Trans. Electron Devices.* **2018**, *65*, 1721–1727. [[CrossRef](#)]
- Farahmand, M.; Garetto, C.; Bellotti, E.; Brennan, K.F.; Goano, M.; Ghillino, E.; Ghione, G.; Albrecht, J.D.; Ruden, P.P. Monte carlo simulation of electron transport in the III-nitride wurtzite phase materials system: Binaries and ternaries. *IEEE Trans. Electron Devices* **2001**, *48*, 535–542. [[CrossRef](#)]
- Honda, U.; Yamada, Y.; Tokuda, Y.; Shiojima, K. Deep levels in n-GaN doped with carbon studied by deep level and minority carrier transient spectroscopies. *Jpn. J. Appl. Phys.* **2012**, *51*, 04DF04. [[CrossRef](#)]

17. Zanoni, E.; Meneghini, M.; Meneghesso, G.; Bisi, D.; Rossetto, I.; Stocco, A. Reliability and failure physics of GaN HEMT, MIS-HEMT and p-gate HEMTs for power switching applications: Parasitic effects and degradation due to deep level effects and time-dependent breakdown phenomena. In Proceedings of the IEEE 3rd Workshop on Wide Bandgap Power Devices and Applications (WiPDA), Blacksburg, VA, USA, 2–4 November 2015.
18. Ghazi, H.E.L.; Jorio, A.; Zorkani, I.; Ouazzani-Jamil, M. Optical characterization of InGaN/AlGaIn/GaN diode grown on silicon carbide. *Opt. Commun.* **2008**, *281*, 3314–3319. [[CrossRef](#)]
19. Bulutay, C. Electron initiated impact ionization in AlGaIn alloys. *Semicond. Sci. Technol.* **2002**, *17*, L59–L62. [[CrossRef](#)]
20. Chakrabarti, P.; Gawarika, A.; Mehta, V.; Garg, D. Effect of TAT on the performance of homojunction Mid-Infrared photodetectors based on InAsSb. *J. Microw. Optoelectron. Electromagn. Appl.* **2006**, *5*, 1–14.
21. Meneghesso, G.; Meneghini, M.; Rossetto, I.; Bisi, D.; Stoffels, S.; van Hove, M.; Decoutere, S.; Zanoni, E. Reliability and parasitic issues in GaN-based power HEMTs: A review. *Semicond. Sci. Technol.* **2016**, *31*, 093004. [[CrossRef](#)]
22. Srivastava, P.; Das, J.; Visalli, D.; Derluyn, J.; Van Hove, M.; Malinowski, P.E.; Marcon, D.; Geens, K.; Cheng, K.; Degroote, S.; et al. Silicon substrate removal of GaN DHFETs for enhanced (<1100 V) breakdown voltage. *IEEE Electron Device Lett.* **2010**, *31*, 851–853. [[CrossRef](#)]
23. Gamarra, P.; Lacam, C.; Tordjman, M.; Splettstösser, J.; Schauwecker, B.; di Forte-Poisson, M.A. Optimisation of a carbon doped buffer layer for AlGaIn/GaN HEMT devices. *J. Cryst. Growth* **2015**, *414*, 232–236. [[CrossRef](#)]
24. Dadgar, A.; Poschenrieder, M.; Reiher, A.; Blasing, J.; Christen, J.; Krtschil, A.; Finger, T.; Hempel, T.; Diez, A.; Krost, A. Reduction of stress at the initial stages of GaN growth on Si(111). *Appl. Phys. Lett.* **2003**, *82*, 28–30. [[CrossRef](#)]
25. Simoen, E.; Visalli, D.; van Hove, M.; Leys, M.; Favia, P.; Bender, H.; Borghs, G.; Nguyen, A.P.D.; Stesmans, A. Electrically active defects at AlN/Si interface studied by DLTS and ESR. *Phys. Status Solidi* **2012**, *209*, 1851–1856. [[CrossRef](#)]

تركز هذه الأطروحة على جانبين من التكييف المسبق للركيزة لنمو طبقات النيتريد. الأول يخص المعالجة السطحية بالنيتريد لنمو الهياكل غير المتجانسة لنيتريد الإنديوم (InN) على ركيزة فوسفور الإنديوم (InP). يخص الجانب الثاني التهيئة المسبقة للركيزة السيليكون (Si) قصد نمو عناصر مبنية على نيتريد الغاليوم (GaN).

يتناول عمل هذه الأطروحة أولاً دراسة الهياكل النانوية التي تنتجها نتردة ركائز (100) InP من خلال استغلال التوصيفات الكهربائية وتحليل السطح. تتم عملية النتردة تحت فراغ فائق باستخدام مصدر للبلازما للأزوت. تم إجراء مراقبة عملية النتردة باستخدام طرق تحليل السطح باستغلال التحليل الطيفي الإشعاعي السيني (XPS). تم إجراء قياسات الجهد الحالي والسعة والجهد والتوصيل والجهد للتردد على هذه الهياكل لفهم سلوك طبقات النيتريد (InN) بشكل أفضل وكذلك جودة سطح التماس التي تم الحصول عليها بين الركيزة وطبقات النيتريد. ولهذه الغاية، تمت دراسة سلسلتين من العينات، تم إنجازهما في ظل ظروف تكنولوجية مختلفة. أوضحت النتائج أن ظروف (40 دقيقة من وقت التنظيف الأيوني، و 50 دقيقة من زمن النتردة مع زاوية تدفق الأزوت بمقدار 45 درجة) تجعل من الممكن الحصول على طبقات ذرية أكثر سمكاً من نيتريد الإنديوم وبالتالي هياكل نانوية ذات خصائص كهربائية و سطحية أفضل.

الدراسة الثانية التي تم إجراؤها في هذا العمل، والتي تقدم التهيئة المسبقة لسطح الركيزة (Si) باستخدام طبقة بينية من C-SiC على Si، أبرزت أهمية هذا التكييف المسبق. من خلال الدراسة تم تأكيد تحسين جهد انهيار الاجهزة القائمة على GaN، وخاصة مقحل MOS-HEMTs لتطبيقات الطاقة المترددة. تم إجراء دراسة محاكاة كهربائية باستخدام برنامج الحاسوب Silvaco Atlas من أجل نمذجة وفهم سلوك هياكل MOS-HEMT GaN التي تحتوي على مصائد نشطة كهربائياً في سطح التماس مع الركيزة.

الكلمات المفتاحية: نيتريد الإنديوم، نيتريد الغاليوم، الهياكل النانوية، التحليل الطيفي (XPS)، القياسات الكهربائية، I(V), C(V)، مقحل MOS-HEMTs

Résumé (en Français)

Ce travail de thèse porte sur deux aspects du pré-conditionnement des substrats pour la croissance des films de nitrures III-V. Le premier volet concerne le traitement de surface, par la nitruration d'un substrat de phosphore d'indium InP(100) pour la l'obtention d'hétérostructures de de type InN/InP(100). Le deuxième volet concerne le pré-conditionnement du substrat de silicium (Si) pour la croissance de nitrures de gallium GaN.

L'étude des nanostructures réalisées par la nitruration des substrats InP(100) en exploitant les caractérisations électriques et l'analyse des surfaces est présentée, dans un premier temps, dans cette thèse. Le processus de nitruration s'effectue sous ultravide en utilisant une source d'azote de type plasma à décharge. Le suivi du processus de nitruration a été mené en employant des méthodes d'analyse de surface éventuellement la spectroscopie de photoélectrons X (XPS). Des mesures de courant-tension, capacités-tension et de conductances-tension en fonction de la fréquence ont été effectuées sur ces structures pour mieux comprendre le comportement des films de nitrures d'indium obtenus ainsi que la qualité de l'interface créée entre le substrat et les couches de nitrures. Dans ce but deux séries d'échantillons, réalisées sous différentes conditions technologiques ont été étudiées. Les résultats ont révélé que les conditions de (50min de temps de nitruration avec une incidence du flux de N₂ de 45°) permettent d'obtenir des monocouches d'InN plus épaisses et par conséquent de nanostructures avec de bonnes interfaces et meilleures qualités électriques et surfaciques.

La seconde étude réalisée dans ce travail, qui présente le pré-conditionnement de la surface du substrat Si faisant appel à l'utilisation d'une couche intercalaire de 3C-SiC sur Si, a mis en évidence l'importance de ce pré-conditionnement. L'amélioration de la tension de claquage des composants à base de GaN, en particulier les transistors MOS-HEMTs pour les applications de puissance et en commutation a été démontrée. Une étude par simulations électriques sous Silvaco Atlas a été menée afin de modéliser et comprendre le comportement de structures MOS-HEMT GaN contenant des pièges électriquement actifs à l'interface avec le substrat.

Les mots clés : InN, GaN, nanostructures, Spectroscopies (XPS), Mesures électriques I(V), C(V), MOS-HEMTs.

Abstract (en Anglais)

This thesis focuses on two aspects of substrate preconditioning for III-V nitride films growth. The first part consist on the surface treatment by the nitridation of InP(100) substrates to obtain InN/InP(100) nanostructures. The second part consist on silicon substrate (Si) preconditioning to elaborate gallium nitrides GaN based-devices.

The nanostructures obtained by InP(100) nitridation process are studied using electrical characterizations and surface analysis. The nitridation of InP(100) surface is realized in ultra-high vacuum chamber using a Glow discharge nitrogen plasma source. The nitridation process is carried using X-ray photoelectron spectroscopy (XPS) method for surface analysis. Current-voltage, capacitance-voltage and conductance-voltage measurements as a function of frequency are realized on Au/InN/InP(100) diodes in order to understand the nitride (InN) films behavior as well as the quality of the interface between the substrate and the nitride layers.

In our case, two series of structures, realized with different technological conditions, are studied. The results revealed that the conditions of (50 min of nitridation time with 45° of incidence angle flow) allows to obtain thicker InN monolayers and consequently nanostructures with good interface states and better electrical and surface qualities.

The second part of this thesis, presents the preconditioning of the surface of Si substrate using an interlayer of 3C-SiC. This one show the importance of substrate pre-conditioning to improve breakdown voltage of GaN-based components, in particularly, MOS-HEMTs for power applications. A study by electrical simulations with Silvaco Atlas software is carried in order to understand the behavior of MOS-HEMT/GaN structures including active traps at the GaN/Si interface.

Keywords: InN, GaN, nanostructures, XPS photoelectron spectroscopy, electrical measurements I(V), C(V), MOS-HEMTs.