

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

MEMOIRE

Présentée à

L'Université de Batna
Faculté des Sciences
Département de Physique

En vue de l'obtention

DIPLOME DE MAGISTERE

Spécialité : Physique des matériaux métalliques et semi-conducteurs.

Par

BENAZIEZ NEDJEDIA

*Etude des propriétés électriques en régime
statique d'une structure Schottky*

Soutenue le : 15 / 04 / 2010, devant le jury :

MM

| | | | |
|--------------------|-------------|-----------------------------|-------------------|
| E. Belbacha | Pr. | Université de Batna | Président |
| M. Chahdi | Pr. | Université de Batna | Rapporteur |
| A. Benhaya | M.C. | Université de Batna | Examineur |
| L. Dehimi | M.C. | Université de Biskra | Examineur |

Remerciements

La préparation d'une thèse est à la fois une démarche personnelle et un travail d'équipe. Au terme de cette étude, je tiens à exprimer ma reconnaissance et adresser mes très sincères remerciements à toutes les personnes qui ont contribué d'une manière ou d'une autre, au bon déroulement et à l'aboutissement de ce travail.

Je tiens à remercier tout d'abord mon directeur de thèse, Monsieur Mohamed Chahdi, professeur à l'université de Batna, pour avoir bien voulu diriger ce travail et pour m'avoir constamment orientée et conseillée tout au long de ce dernier. Qu'il trouve ici mes très sincères remerciements et mon profond respect.

Je tiens également à présenter ma profonde gratitude à Monsieur EL-Djemai Belbacha, professeur à l'université de Batna qui me fait l'honneur de s'intéresser à mon travail et de présider le jury.

J'adresse à Monsieur Abdelhamid Benhaya, maître de conférence à l'université de Batna, l'expression de ma profonde reconnaissance pour avoir voulu examiner mon travail et faire partie du jury, ainsi que pour sa contribution à ma formation.

Je tiens également à remercier Monsieur Lakhdar Dehimi, maître de conférence à l'université de Biskra qui a accepté d'examiner mon travail et de faire partie du jury.

Mes remerciements s'adressent aussi à toutes les personnes qui, de près ou de loin m'ont aidée à l'accomplissement de ce travail, en particulier à Monsieur Djamel Haddad, pour sa contribution à l'aboutissement de ce travail.

Je joindrai à ces remerciements tous mes enseignants de département de physique à l'université de Batna

Sommaire :

| | |
|--|----|
| Introduction | 2 |
| Chapitre 1 : Phénoménologie et modèles des barrières Schottky | |
| Introduction | 5 |
| 1.1. Généralités | 5 |
| 1.1.1. Contacts redresseurs | 5 |
| 1.1.2. Contacts ohmiques | 8 |
| 1.2. Théories de formation de barrière Schottky | 9 |
| 1.2.1. Théorie de Schottky | 9 |
| 1.2.2. Théorie de Bardeen | 11 |
| 1.2.3. Théorie de Cowley et Sze | 12 |
| 1.2.4. Modèle d'interface linéaire | 14 |
| 1.2.5. Modèle de MIGS | 15 |
| 1.2.6. Le SBH et les liaisons chimiques d'interface | 16 |
| 1.2.7. Modèle unifié de défaut (UDM) | 17 |
| 1.3. Mécanismes de conduction dans les diodes Schottky | 18 |
| 1.3.1. Introduction | 18 |
| 1.3.2. Théories de transport | 19 |
| 1.3.2.1. Émission au dessus de la barrière | 20 |
| a) Théorie de diffusion | 21 |
| b) Théorie de l'émission thermoïonique | 22 |
| c) Théorie de l'émission-diffusion | 22 |
| 1.3.2.2. Mécanismes de conduction par effet tunnel | 23 |
| 1.3.2.3. Recombinaison dans la zone de charge d'espace | 26 |
| Chapitre 2 : Méthode de résolution numérique | |
| 1. Introduction | 29 |
| 2. Propriétés électriques et phénomène de transport de courant dans une structure Schottky | |
| 2.1. Modèle mathématique..... | 29 |
| 2.1.1. Équation de Poisson | 29 |
| 2.1.2. Les équations du courant..... | 30 |
| 2.1.3. Les équations de continuité..... | 31 |
| 2.1.4. Modèle de recombinaison..... | 31 |

| | |
|--|----|
| 2.1.5. Le modèle unidimensionnel du structure..... | 32 |
| 2.2. La méthode numérique | 32 |
| 2.2.1. Normalisation | 32 |
| 2.2.2 Schéma de discrétisation | 34 |
| 2.2.2.1. Approximation de Gummel pour les densités de courant | 35 |
| 2.2.2.2. Discrétisation de l'équation de Poisson | 36 |
| 2.2.2.3. Discrétisation des équations de continuité | 36 |
| 2.2.3. Itérations Fonctionnelles | 37 |
| 2.2.4. Solutions initiales et conditions aux limites | 38 |
| 3. Propriétés électriques et phénomène de transport de courant dans une structure Schottky MIS | |
| 3.1. Etudes des propriétés électriques des structures MOS | 42 |
| 3.1.1. Diagramme des bandes d'énergie | 42 |
| 3.1.2. Les équations de bases | 43 |
| 3.2. Phénomène de transport du courant | 46 |

Chapitre 3 : calcul des caractéristiques

| | |
|---|----|
| Introduction | 49 |
| 3.1. Résultats | 49 |
| 3.1.1. Structure Schottky idéal | 50 |
| 3.1.1.1. Résolution numérique du système d'équation | 50 |
| 3.1.1.2. Phénomène de transport | 52 |
| 3.1.1.3. Densité du courant | 54 |
| 3.1.1.3.1. Effet de changement de travail de sortie | 56 |
| 3.1.1.3.2. Effet de changement de concentration de dopage | 59 |
| 3.1.2. Structure Schottky réel (structure MOS) | 61 |
| 3.1.2.1. Résolution numérique du système d'équation | 61 |
| 3.1.2.2. Études des propriétés électriques des structures MOS | 61 |
| 3.1.2.3. La densité du courant tunnel | 66 |
| Conclusion | 70 |
| Bibliographie | 72 |

Introduction

Introduction

La structure Métal-Semi-conducteur (MS) est le dispositif unipolaire le plus simple. Il est à la base d'un grand nombre de structures plus complexes. La diode Schottky exploite l'effet redresseur que peut présenter une structure MS. Les premières diodes à l'état solide étaient de ce type et furent découvertes par F.BRAUN en 1874.

La hauteur de la barrière Schottky (SBH) est un paramètre simple qui caractérise les propriétés de transport de ces interfaces. Le SBH mesure la différence entre l'énergie de Fermi du métal et le bord de la bande des porteurs majoritaires de semi-conducteur à la jonction. Malgré l'importance fondamentale du SBH, les mécanismes qui commandent la formation de la barrière Schottky sont toujours loin entièrement de la compréhension

Récemment, la plupart des mesures de SBH des contacts métal/semi-conducteurs covalents a indiqué une dépendance relativement faible entre la hauteur de la barrière et le métal utilisé ou la méthode de fabrication du contact. Ce comportement avait été généralement attribué à l'ancrage du niveau de Fermi par des états d'"interface". Très récemment, il y a eu des rapports des changements considérables de la barrière des jonctions de métal/Si et métal/GaAs obtenues en changeant les propriétés structurales et/ou la composition chimique de l'interface.

Les contacts métal/semi-conducteurs consistent en l'existence d'une barrière de potentiel, des mécanismes de transport de charges. Ils peuvent se comporter comme des contacts redresseurs ou comme des contacts ohmiques.

Les modèles des contacts avaient joué un rôle dans la simulation des dispositifs depuis ses commencements. En conséquence, des modèles pour des contacts de Schottky ont été établis dans beaucoup de programmes de simulation de dispositif. Ces modèles sont présentés comme conditions aux limites pour la solution numérique des équations de transport de semi-conducteur. L'objectif de ce travail est la caractérisation d'une structure Schottky, les caractéristiques J-V sont calculées numériquement et l'effet de quelques paramètres est étudié.

Nous avons organisé la présentation de ce mémoire en trois chapitres. Dans le premier, nous commencerons par donner les supports théoriques nécessaires à la compréhension du fonctionnement des structures étudiées. Dans ce chapitre, nous

donnerons une brève introduction des contacts MS et discuterons les modèles de base de la formation du SBH.

Nous présenterons ensuite, les modèles théoriques utilisés pour rendre compte des processus de transport qui peuvent régir le transport de charges dans nos structures.

Dans le deuxième chapitre, nous étudierons d'abord la structure idéale, nous présenterons la discrétisation et l'algorithme numérique utilisé pour résoudre les équations de transport. Le modèle numérique consiste en une linéarisation des équations de transports en régime stationnaire par la méthode des différences finies. Puis nous étudierons la structure réelle en présence d'une couche d'isolant et présenterons les différentes équations de base, régissant le fonctionnement électrique.

Dans le troisième chapitre, nous présenterons les résultats obtenus pour notre structure, d'abord pour un contact idéal, puis pour un contact réel (avec une couche d'oxyde) où il domine l'effet tunnel.

A la fin, on termine par une conclusion générale où on récapitule tous les résultats obtenus dans ce travail.

Chapitre 1

Phénoménologie et modèles des barrières

Schottky

Introduction

La technologie des dispositifs électroniques à semi-conducteurs repose en grande partie sur des jonctions métal/semi-conducteur.

Depuis que le comportement redresseur des contacts métal / semi-conducteur (M/S) a été découvert, de plus de cent ans, un effort théorique considérable a été consacré à interpréter les mesures électriques dans ces systèmes, tels que les caractéristiques $I - V$ et $C - V$, et prévoir la valeur des paramètres qui entrent dans les modèles semi empiriques développés dans ce chapitre. Le plus important de ces paramètres est la hauteur de la barrière Schottky (SBH).

Les modèles semi empiriques de transport sont largement répandus, et fournissent généralement une bonne description des données expérimentales. Les mécanismes physiques derrière la formation de la barrière Schottky, cependant, demeurent une question de discussion.

Dans ce chapitre, nous donnons d'abord une brève étude du comportement des contacts métal/semi-conducteur et définissons les grandeurs qui caractérisent les interfaces et conditionnent les transferts de charges entre les matériaux.

Puis nous donnons une description de certains des modèles de base qui concernent la formation de la barrière de potentiel et discutons leurs propriétés et implications générales.

Dans la dernière partie de ce chapitre, nous étudions brièvement les mécanismes de conduction dans les diodes Schottky.

1.1. Généralités (contacts métal / semi-conducteur)

1.1.1 Contacts redresseurs

La figure (1.1.a) présente le diagramme énergétique d'un contact redresseur métal/semi-conducteur de type n à l'équilibre thermique, c'est à dire, sans polarisation externe appliquée.

La quantité centrale est la hauteur de la barrière Schottky ϕ_{Bn} , qui est la différence entre le minimum de la bande de conduction E_c et le niveau de Fermi NF à l'interface. Pour un semi-conducteur de type p , la quantité principale est la différence entre le niveau de Fermi NF et le maximum de la bande de valence E_v , et dénoté ϕ_{Bp} .

La hauteur des barrières ϕ_{Bn} et ϕ_{Bp} est une propriété intrinsèque de l'interface M/S, qui ne dépend pas, en principe, de la tension de polarisation appliquée ou de dopage du semi-conducteur. Elle est reliée par la règle de Schottky [tung 36]:

$$\phi_{Bp} + \phi_{Bn} = E_g \quad (1.1)$$

Où E_g est la largeur de la bande interdite du semi-conducteur.

L'abaissement de la hauteur de la barrière SBH indiqué dans la figure (1.1), $\Delta\phi$, est due à la force image près de la surface de métal.

La courbure des bandes dans le semi-conducteur (figure.1.1), est due à une *charge d'espace* positive des ions donneurs qui ne sont plus compensés près de l'interface. Dans le volume du semi-conducteur, la charge uniforme des donneurs ionisés est compensée par la densité des électrons dans la bande de conduction. Au lieu de cela, plus près du métal, la densité des électrons dans la bande de conduction diminue exponentiellement avec la différence $E_c - E_{Fs}$.

La région résultante épuisée des électrons près de l'interface, appelé *la zone de déplétion*, a une largeur [Sze 42]

$$W = \sqrt{\frac{2\varepsilon_s}{qN_D} \left(\phi_{Bn} - V_n - V - \frac{kT}{q} \right)} \quad (1.2)$$

où ε_s est la permittivité du semi-conducteur, V_n est la différence d'énergie entre le niveau des porteurs majoritaires et la bande de conduction du semi-conducteur, N_D la densité des porteurs, V la tension de polarisation, q la valeur absolue de la charge d'électron, et kT l'énergie thermique.

La courbure des bandes dans la zone de déplétion, agit comme une barrière de potentiel pour des électrons. Pour un semi-conducteur de type p , la région d'interface est épuisée des trous. Les bandes se courbent dans la direction opposée, et les quantités ϕ_{Bn} , V_n , et N_D sont remplacés par les quantités ϕ_{Bp} , V_p , et N_A dans l'équation (1.2), où V_p est la différence entre NF et la bande de valence du semi-conducteur et N_A la densité des accepteurs.

La zone de déplétion (dont la largeur typique est 100 –1000 Å) est responsable du comportement de rectification du contact.

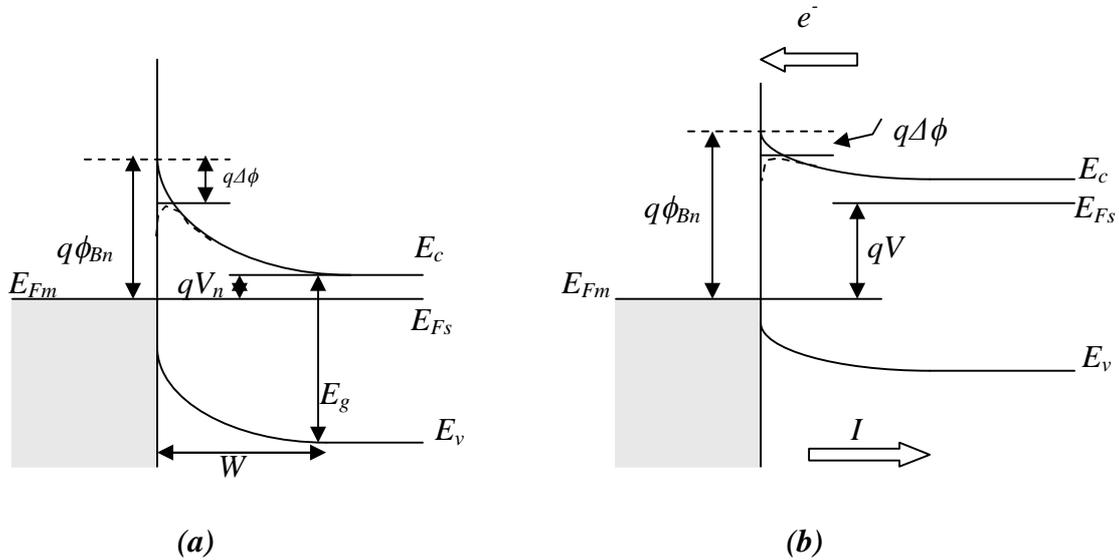


Figure.1.1: Diagramme des bandes d'énergie pour un contact métal / semi-conducteur de type n. À l'équilibre thermodynamique (a), et sous une polarisation directe V (b) ;

Le diagramme des bandes d'énergie sous une polarisation directe est illustré dans figure (1.1.b). Comme d'abord suggéré par Schottky [Berthod 9], la chute de tension se développe entièrement dans la zone de déplétion, et change la forme de la barrière. Dans le volume du semi-conducteur, les électrons acquièrent une énergie additionnelle qV , de sorte que le nombre d'eux qui peuvent surmonter la barrière augmente exponentiellement avec V , et ainsi le courant sera en fonction de la tension. Quand qV devient comparable au SBH, la zone de déplétion disparaît (régime de bande plat), et le contact devient approximativement ohmique.

Si une polarisation inverse est appliquée, la largeur de la zone de déplétion augmente et la barrière de potentiel devient plus haute pour les électrons du semi-conducteur, de sorte que de moins en moins d'eux puisse atteindre le métal. Cependant, les électrons de métal qui ont une énergie thermique suffisante pour surmonter le SBH sont accélérés dans la zone de déplétion et donnent une petite contribution négative au courant.

1.1.2. Contacts ohmiques

Une situation, dans laquelle le contact est idéalement ohmique, indépendamment des propriétés de dopage du semi-conducteur, est quand la hauteur de la barrière disparaît ou est négative (plus précisément, plus petit que V_n). La figure (1.2) montre le diagramme énergétique d'un contact ohmique métal / semi-conducteur de type n avec un petit négatif SBH.

Comme dans le cas d'un contact redresseur, un réarrangement des électrons de conduction se produit à l'interface. Quelques électrons passent du métal dans le semi-conducteur en raison du SBH négatif, et s'accumulent à l'interface [Mathieu 20].

Puisque la densité N_c d'états effective de la bande de conduction est en général 100 à 1000 fois plus grande que la densité des impuretés, la zone d'accumulation est beaucoup plus mince que la zone de déplétion, comme peut être estimé en remplaçant N_D par N_c dans Eq (1.2).

Quand la jonction est polarisée, la tension de polarisation est répartie dans tout le semi-conducteur, et les porteurs peuvent couler librement à travers l'interface due à l'absence de la barrière de potentiel. En technologie de dispositif, "les contacts ohmiques" sont les contacts qui ont une résistance négligeable relativement à la résistance du volume du semi-conducteur.

En général, les contacts redresseurs ou ohmiques peuvent être obtenu selon la différence des travaux de sortie des matériaux et le type du semi-conducteur comme suit :

Avec $\phi_m > \phi_s$ le contact métal-semi-conducteur (n) est redresseur

le contact métal-semi-conducteur (p) est ohmique

Avec $\phi_m < \phi_s$ le contact métal-semi-conducteur (n) est ohmique

le contact métal-semi-conducteur (p) est redresseur

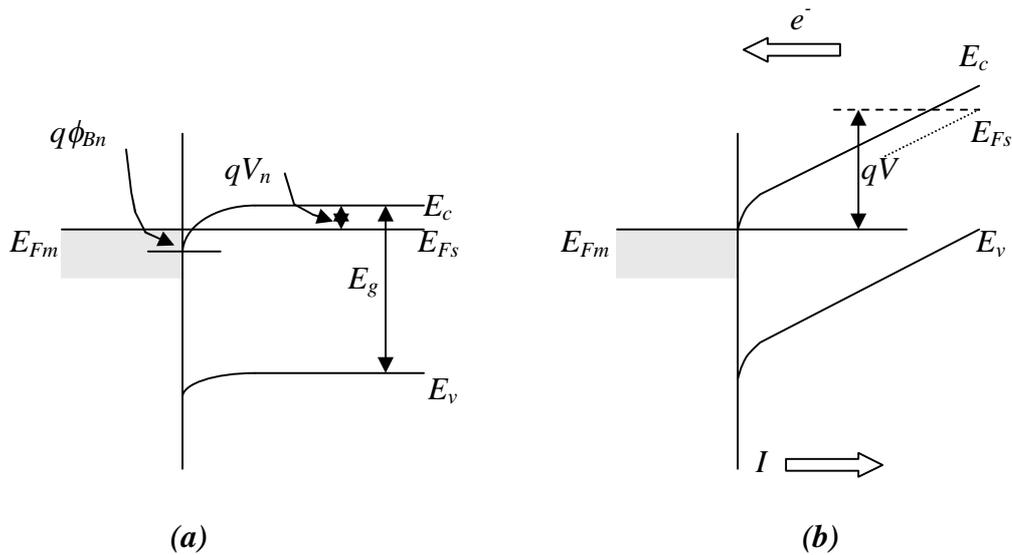


Figure.1.2 : Diagramme énergétique d'un contact ohmique métal / semi-conducteur de type n avec un petit négatif hauteur de barrière, à l'équilibre thermodynamique (a), et sous polarisation (b).

1.2. Théories de formation de barrière Schottky

La hauteur de la barrière Schottky SBH (ϕ_n ou ϕ_p) joue un rôle central : elle commande le profil entier des bandes d'énergie de la jonction, et ainsi les caractéristiques électriques du contact. Cependant, l'issue de ce qui sont les paramètres et les mécanismes physiques qui déterminent la valeur des SBH restent ouverts.

Au cours des années, plusieurs des modèles ont été proposés pour expliquer la formation de la barrière Schottky. Nous n'entreprendrons pas une discussion approfondie de tous les modèles existants, mais décrivons seulement brièvement les modèles les plus importants.

1.2.1. Théorie de Schottky:

Quand un semi-conducteur est mis au contact intime avec un métal, il s'établit une barrière de potentiel électrostatique entre les deux matériaux.

La figure (1.3) représente la structure de bande d'un couple M/S de type N (**a**. matériaux séparés, **b**. matériaux en contact intime) dans ce dernier cas, le semi-conducteur

perd des électrons qui s'accumulent à la surface du métal et une charge d'espace positive provenant des donneurs ionisés apparaît dans le volume du semi-conducteur. La neutralité électrique est obtenue par une charge négative créée par l'accumulation des électrons à la surface du métal. Un équilibre s'établit dès que les niveaux de Fermi des deux matériaux sont alignés. Lorsque, à température constante, la redistribution des charges est terminée, la barrière de potentiel est fixée. La barrière de potentiel ($q\phi_B$), vue du côté du métal, est alors égale à la différence entre le travail de sortie du métal et l'affinité électronique χ_B du semi-conducteur [Tung 36].

$$\phi_B = \phi_m - \chi_s \quad (1.3)$$

Vue du côté semi-conducteur, elle est égale à la différence entre le travail de sortie du métal et celui du semi-conducteur.

$$V_{bi} = \phi_m - \phi_s \quad (1.4)$$

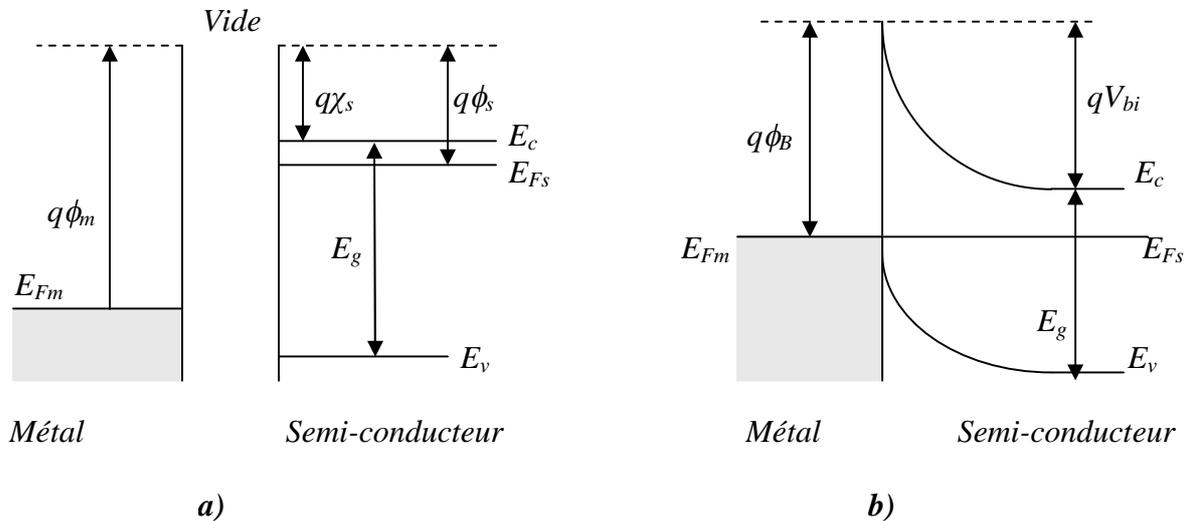


figure.1.3 : Structure de bande d'un couple métal-semi-conducteur de type n

a) matériaux séparés

b) matériaux en contact intime.

1.2.2. Théorie de Bardeen

D'après la théorie de Schottky, la barrière de potentiel dépend de la nature du métal. Cependant, des résultats obtenus sur des jonctions réalisées à l'air ont montré que la barrière était indépendante de la nature du métal. J.Bardeen en 1947 [Turner 31], a montré que ceci était dû à la présence des états de surface existant sur le semi-conducteur. Ils proviennent de la rupture du réseau cristallin à la surface du cristal. Ils sont en densité très élevée, environ un état par atome de surface. De même, ces états peuvent provenir des impuretés adsorbées à la surface du semi-conducteur.

L'échange de charges par le semi-conducteur va donc se faire avec ces états et la hauteur de barrière est alors indépendante de la nature de métal déposé.

La figure (1.4) représente le diagramme d'énergie d'une jonction (M/S) de type N en présence des états de surface. D'abord la charge globale en surface du semi-conducteur est nulle, mais l'équilibre thermodynamique n'est pas réalisé ceci dû à la présence des états vides entre $q\phi_0$ et le niveau de Fermi. ϕ_0 étant le niveau de neutralité des états de surface. Au fur et à mesure que les états vides se remplissent entre $q\phi_0$ et E_F , l'équilibre thermodynamique se réalise entraînant la formation d'une charge positive dans le volume du semi-conducteur qui compense la charge négative à la surface. On assiste donc à une courbure des bandes avant la présence du métal. Après contact, une faible fraction des électrons quitte ces états vers le métal. Mais comme leur densité est importante, il n'en résulte qu'un très faible déplacement du niveau du semi-conducteur en surface et la courbure des bandes n'est pratiquement pas modifiée. Dans le cas où la densité d'états de surface est très grande (10^{12} à 10^{13} états $\text{cm}^{-2} \text{eV}^{-1}$), Bardeen a montré que la hauteur de barrière est indépendante du métal. Elle a pour valeur :

$$\phi_B = \frac{E_g}{q} - \phi_0 \quad (1.5)$$

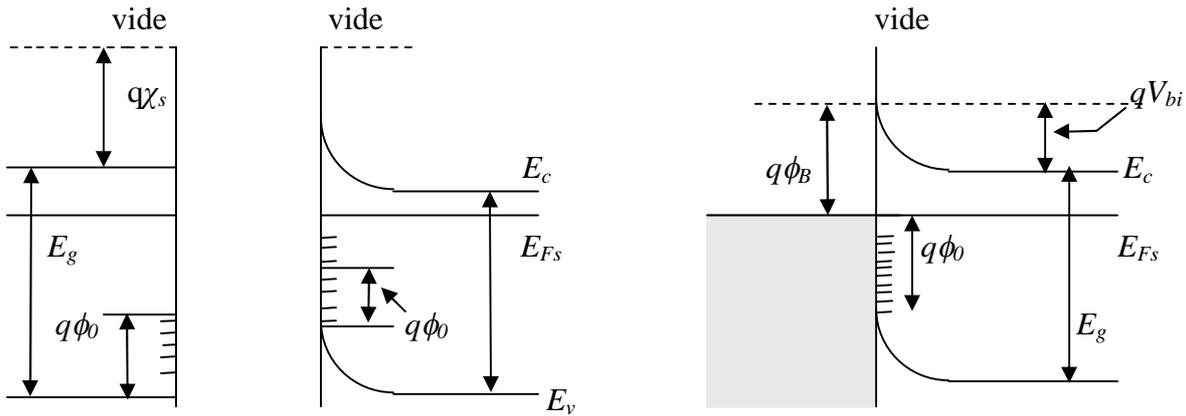


Figure.1.4 : diagramme d'énergie d'une jonction métal / semi-conducteur de type n en présence d'états de surface

Dans les semi-conducteurs, les états de surface se répartissent en deux groupes. Dans un premier, les états remplis se trouvent au voisinage de la bande de valence et les états vides au voisinage de la bande de conduction. Cela correspond à des matériaux dits ioniques. Dans le deuxième groupe, les états de surface se trouvent au milieu de la bande interdite.

1.2.3. Théorie de Cowley et Sze :

Les deux théories citées précédemment représentent chacune un cas limite. Dans un premier, la hauteur de la barrière ne dépend que du métal et dans un deuxième, elle dépend des états de surface. Cependant le cas intermédiaire qui est d'ailleurs le plus fréquent, est celui où la barrière est gouvernée à la fois par les états de surface et par les travaux de sortie des matériaux.

A.M.Cowley et S.M.Sze [cowley 5] , ont proposé une théorie unifiant celle de Schottky et celle de Bardeen. Ils supposent l'existence entre les deux corps d'une couche interfaciale mince d'épaisseur D_i .

La figure (1.5) représente le diagramme de bande d'un contact métal/semi-conducteur en présence d'une couche interfaciale. L'expression de la hauteur de barrière est alors [Turner 31]:

$$\phi_B = \gamma(\phi_m - \chi_s) + (1 - \gamma) \left(\frac{E_g}{q} - \phi_0 \right) - \Delta\phi \quad (1.6)$$

où $\Delta\phi$ représente l'abaissement de la barrière par effet de la force image ou effet Schottky.

$$\Delta\phi = \left(\frac{qE}{4\pi\epsilon_s} \right)^{1/2} \quad \text{et} \quad \gamma = \frac{\epsilon_i}{\epsilon_i + q^2 D_i N_s} \quad (1.7)$$

E étant le champ électrique.

ϵ_s et ϵ_i représentent respectivement la permittivité du semi-conducteur et de la couche interfaciale.

D'après l'expression (1.6), on retrouve les deux cas limites de Schottky et de Bardeen suivant que N_s tend vers zéro ou vers l'infini.

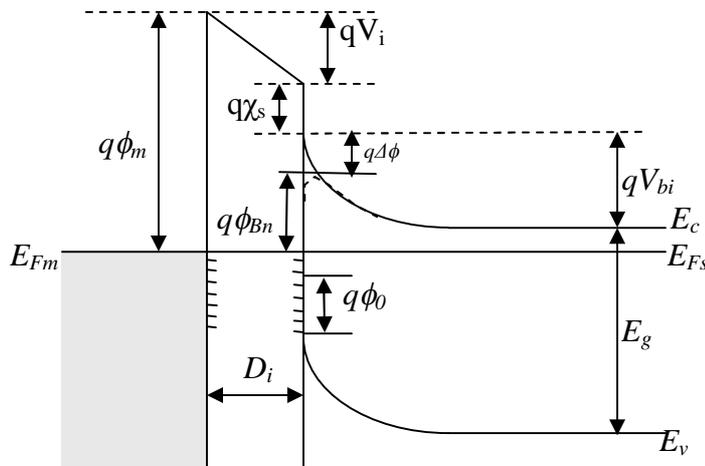


Figure.1.5 : contact métal / semi-conducteur avec états de surface et couche interfaciale.

1.2.4. Modèle d'interface linéaire

Kurtin, McGill, et Mead [Mathieu 20] ont proposés un modèle d'interface linéaire où ils ont assumés que la hauteur de la barrière ϕ_B dépend linéairement du travail de sortie du métal.

$$\phi_B = S\phi_m + C \quad (1.8)$$

Où S est un paramètre de pente qui reflète la sensibilité de ϕ_B au métal et C est un constant.

A partir d'une compilation des données expérimentales pour plusieurs semi-conducteurs, ils ont corrélié S avec l'ionicité de liaisons des semi-conducteurs,

La figure (1.6) représente la variation de S avec l'ionicité du semi-conducteur. Cette ionicité est mesurée ici par la différence d'électronégativité des constituants du matériau.

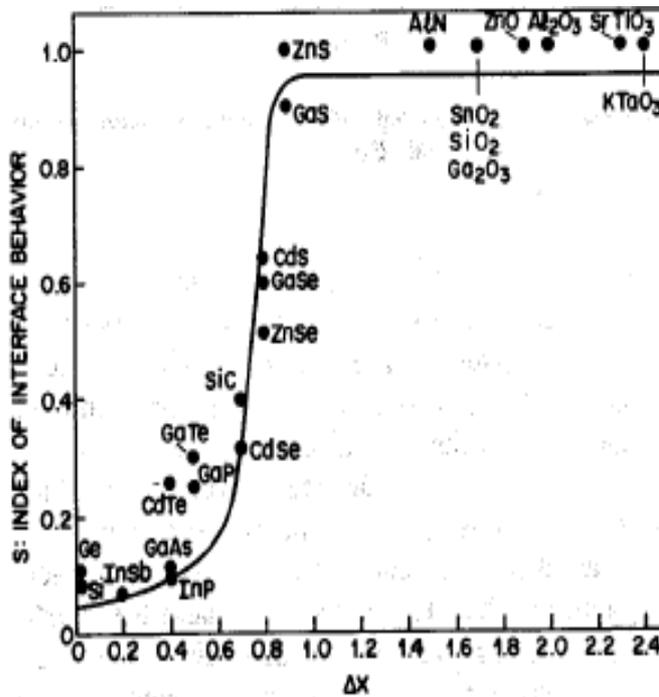


Figure.1.6 : variation du paramètre de pente avec la différence d'électronégativité des constituants du semi-conducteur [Mathieu 20].

Pour les semi-conducteurs covalents ou pseudo-covalents, tels que Ge, Si, GaAs et InP, S est très faible (environ 0.1), la barrière de potentiel est alors peu sensible au travail de sortie du métal car le niveau de Fermi est ancré par les états de surface. Par contre pour les matériaux plus ioniques, dans lesquels la différence d'électronégativité des constituants est supérieure à 1eV, le travail de sortie du métal joue un rôle majeur. C'est le cas de la plupart des composés II-VI, et des composés III-V du haut du tableau de Mendéléev.

1.2.5. Modèle de MIGS (Metal Induced Gap States)

Le travail de Heine [Berthod 9] a été motivé par l'observation que les valeurs du paramètre γ sont fondamentalement les mêmes pour des interfaces avec et sans une couche interfaciale. Au lieu des états de surface, Heine souligne le rôle des (MIGS).

À n'importe quelle interface de solide/solide, il y a trois genres d'états électroniques : ceux qui se propagent des deux côtés de la jonction, ceux qui se propagent dans un matériel et s'affaiblissent dans l'autre matériel, et ceux qui s'affaiblissent entre les deux matériaux et sont localisé à l'interface.

Les MIGS appartiennent au deuxième groupe; ils ont des énergies dans le gap fondamental de semi-conducteur, et ils affaiblissent exponentiellement du côté semi-conducteur de la jonction.

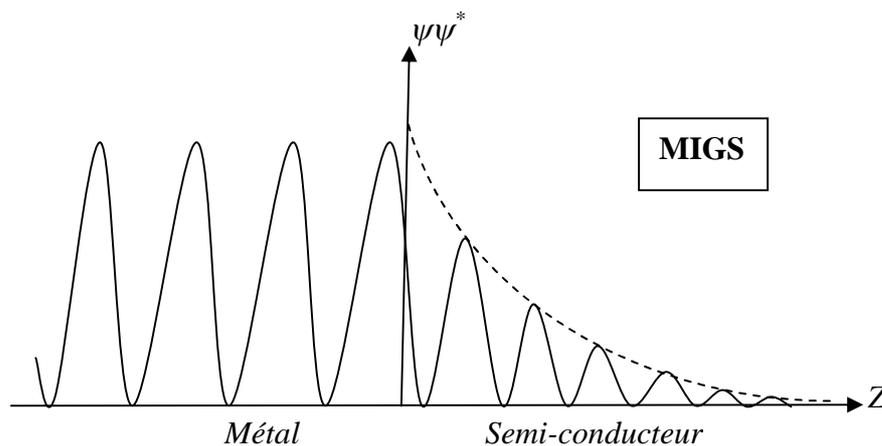


Figure.1.7 : Fonction d'onde aux interfaces métal / semi-conducteur

Les queues de MIGS peuvent stocker une charge dans le semi-conducteur, à une certaine distance de la surface du métal, comme dans le cas des états de surface.

L'expression correspondante pour la pente γ a la même forme que dans le modèle de Cowley et Sze, mais N_s est remplacé par la densité extérieure de MIGS, D_s , et l'épaisseur D_i de couche interfaciale est remplacée par une distance efficace, connexe à la longueur d'affaiblissement δ_s de queues de MIGS.

1.2.6. Le SBH et les liaisons chimiques d'interface.

Quand un contact intime M/S est formée à l'équilibre thermodynamique, des liaisons chimiques sont établies à l'interface. Toutes les propriétés électroniques de l'interface de ce contact sont naturellement influencées par ces liaisons d'interface.

La pertinence des liaisons et de la structure de l'interface de M/S avec la détermination de la hauteur de la barrière Schottky SBH a été proposée par Andrews et Phillips [Tung 36] dans leur étude de la chaleur de formation des siliciures $-\Delta H_f$. Ces résultats sont représentés dans la figure (1.8).

La hauteur de la barrière du siliciure a été montrée pour se corrélérer linéairement avec la chaleur de la formation du siliciure. Ainsi la dépendance linéaire entre la hauteur de la barrière de siliciure avec $-\Delta H_f$ a été rationalisée en raison de la longueur de liaison métal/Si et faiblesse d'interaction.

Dans le même esprit, Brillson a proposé d'analyser le paramètre de pente en termes de chaleur de la formation du semi-conducteur, puisque c'est une mesure de la réactivité chimique à l'interface.

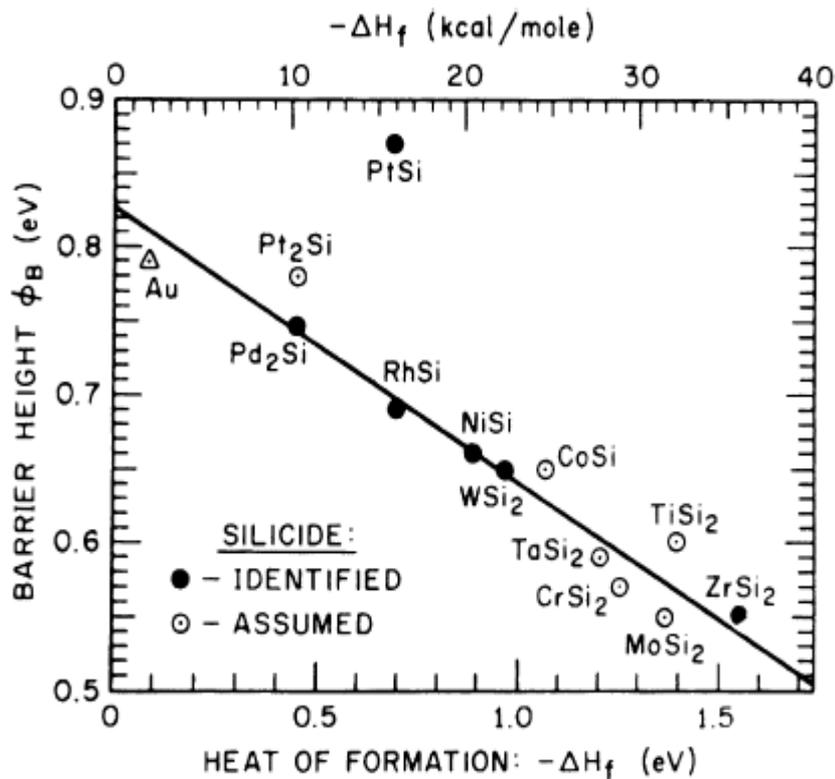


Figure.1.8. : Les hauteurs de la barrière des interfaces de siliciure des métaux de transition-Si sont tracé en fonction de la chaleur de formation de siliciure $\phi_{Bn} = 0.83 + 0.18\Delta H_f$ [Tang 36].

1.2.7. Modèle unifié de défaut (UDM)

Après le travail de Bardeen, il a été bientôt identifié que les états de surface intrinsèques du semi-conducteur ne pourraient pas d'une manière satisfaisante expliquer l'ancrage observé du niveau de Fermi aux contacts métal / semi-conducteur covalent.

En particulier, on le sait qu'il n'y a aucun tel état dans la bande interdite sur les surfaces (110) de GaAs [Pang 49], mais les contacts métal/GaAs (110) montrent toujours un ancrage du niveau de Fermi. Par conséquent, des états localisés extrinsèques ont été suggérés.

Pour des composés III-V, Spicer et Co-Workers, ont supposé que des défauts soient produits près de la surface de semi-conducteur quand le métal du contact est déposé sur cette surface. Ces défauts mènent à ancrer le niveau de Fermi. Ceci s'appelle le modèle unifié de défaut (UDM).

Hughes en 1986 a proposé que l'ancrage de NF soit provoqué par des défauts extrinsèques dans le semi-conducteur résultants de l'incorporation des impuretés ou des atomes de métal déposés dans le réseau du semi-conducteur.

1.3. Mécanismes de conduction dans les diodes Schottky

1.3.1. Introduction

Les caractéristiques courant-tension d'une diode Schottky sont généralement décrites par l'émission thermoionique [Sze 42]:

$$J = J_0 \cdot \left(e^{qV/nkT} - 1 \right) \quad (1.9)$$

Où V la tension appliquée, k la constante de Boltzmann, T la température, n le facteur d'idéalité, et J_0 la densité de courant de saturation :

$$J_0 = A^* T^2 \cdot \exp\left(-\frac{q\phi_B}{kT}\right) \quad (1.10)$$

A^* est la constante de Richardson.

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

La densité de courant de saturation J_0 , et le facteur d'idéalité n peuvent être obtenus à partir de l'interception et de la pente des courbes $\ln(J) = f(V)$, respectivement, sous la forme :

$$\ln J = \ln J_0 + qV/nkT \quad (1.11)$$

Si A^* est connu, la hauteur de la barrière Schottky peut être calculé après que J_0 soit déterminé à partir de l'équation (1.11),

$$\phi_B = \frac{kT}{q} \ln\left(\frac{A^* T^2}{J_0}\right) \quad (1.12)$$

Dans la pratique, A^* est inconnu et les mesures $I - V$ dépendants de la température sont utilisés pour déterminer la hauteur de la barrière et la constante de Richardson.

La hauteur de la barrière et la constante de Richardson peuvent être extrait par la méthode de Richardson :

$$\ln\left(\frac{J_0}{T^2}\right) = \ln A^* - \frac{q}{kT}\phi_B \quad (1.13)$$

Pour la plupart des (Si et les semi-conducteurs III-V) diodes Schottky, cependant, on a observé une déviation de l'émission thermoïonique idéale. On observe aussi que le facteur n d'idéalité augmente considérablement quand la température est abaissée (et est beaucoup plus grand que l'unité à des températures basses). D'ailleurs, les courbes conventionnelle de Richardson $\ln(J_0/T^2) = f(1/T)$ ne sont pas linéaires. Au lieu de cela, les courbes modifiés $\ln(J_0/T^2) = f(1/nT)$, qui sont linéaires, sont employés pour extraire la hauteur de la barrière Schottky. Pour les semiconducteurs non dopés ou faiblement dopés, on constate que cette déviation ne peut pas être expliqué par l'effet Schottky, les effets tunnel, ou le courant de recombinaison dans la région de déplétion. Pour expliquer ces anomalies de la barrière Schottky, beaucoup de modèles ont été établis comme les états d'interface et la couche interfaciale.

Dans la section suivante, une théorie générale des mécanismes de conduction est brièvement décrite.

1.3.2. Théories de transport

Dans une barrière Schottky, différents mécanismes de transport de charges peuvent exister simultanément ou séparément et être responsables du passage du courant.

- Emission d'électrons du semi-conducteur vers le métal au dessus de la barrière.
- Courant dû au passage des électrons à travers la barrière par effet tunnel.
- Recombinaison dans la zone de charge d'espace.
- Recombinaison dans la région neutre.

1.3.2.1. Émission au dessus de la barrière

Dans ce cas, le courant est dû au passage des porteurs au dessus de la barrière. Ce courant a été décrit par plusieurs théories à savoir celle de la diffusion, celle de l'émission thermoïonique ou par une théorie regroupant les deux premières.

La différence entre les théories de diffusion et de l'émission thermoïonique est le comportement de quasi-niveau de Fermi des électrons dans le semi-conducteur. Elle peut être récapitulée comme suit [Pang 49].

1) Dans le cas de l'émission thermoïonique, les électrons du semi-conducteur qui traversent la barrière pour pénétrer dans le métal ne sont pas en équilibre avec ceux de ce dernier. Ce sont des électrons chaud, mobiles dans le métal qui perdent leurs énergies à la suite de collisions. Le quasi-niveau de Fermi est plat dans tout le semi-conducteur et s'abaisse pour rejoindre le niveau de Fermi de métal à l'intérieur du métal.

2) Dans le cas de la théorie de diffusion, le quasi-niveau de Fermi coïncide avec le niveau de Fermi du métal à l'interface.

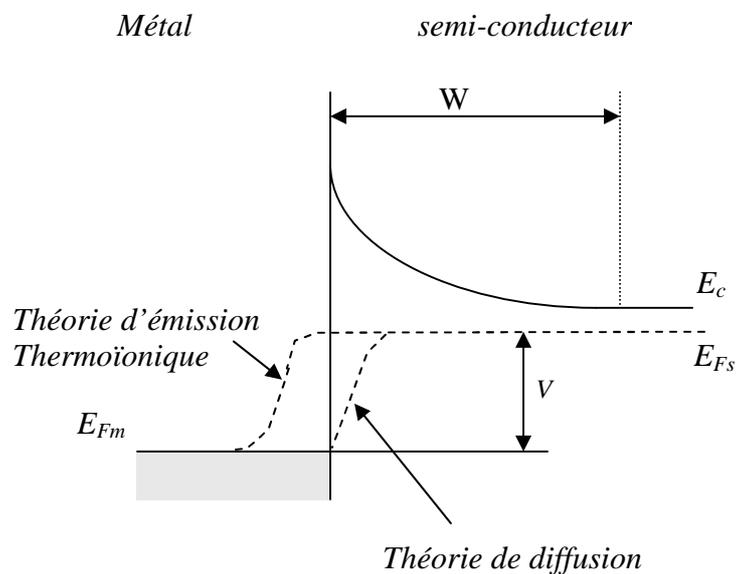


Figure.1.9. : Position du quasi-niveau de Fermi des électrons en polarisation directe

Cette différence dans la position des quasis niveaux de Fermi est représentée dans la figure (1.9).

De façon pratique, la théorie de l'émission thermoïonique s'applique plus au cas où les électrons ont une forte mobilité dans le semi-conducteur, la théorie de diffusion au cas où les électrons ont une faible mobilité dans le semi-conducteur.

a) Théorie de diffusion

Proposée par Schottky et Spence en 1939 [Schottky 48], cette théorie suppose que les électrons migrent du semi-conducteur au métal par dessus la barrière en traversant la zone appauvrie du semi-conducteur, ce qui restreint le courant direct. En effet ce dernier est limité par la diffusion des porteurs à travers le champ électrique dans la zone de charge d'espace.

La concentration des électrons dans le côté semi-conducteur de l'interface de M/S est donnée par :

$$n = N_c \exp[-q(E_c - E_F)/kT] \quad (1.14)$$

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

$$J = qn\mu E + qD_n \frac{dn}{dx} \quad (1.15)$$

Où E est le champ électrique de la barrière, D_n le coefficient de diffusion et μ la mobilité d'électron.

L'équation finale de la caractéristique densité du courant-tension est la suivante :

$$J = J_0 \cdot (e^{qV/kT} - 1) \quad (1.16)$$

Où la densité du courant de saturation J_0 est:

$$J_0 = q \cdot N_c \cdot \mu \cdot E_{\max} \cdot \exp\left(-\frac{q\phi_B}{kT}\right) \quad (1.17)$$

Le champ électrique maximum dans la jonction est donné par

$$E_{\max} = qN_D W / \varepsilon_s \quad (1.18)$$

W est largeur de la zone de déplétion du semi-conducteur.

b) Théorie de l'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 semi-conducteur est plat. La concentration des électrons du côté semi-conducteur de l'interface M/S est augmentée par un facteur $\exp(qV/kT)$ quand une tension de polarisation est appliquée.

$$n = N_c \exp[-q(\phi_B - V)/kT] \quad (1.19)$$

Où N_c est la densité d'états effectifs des électrons dans la bande de conduction du semi-conducteur, ϕ_B la hauteur de la barrière Schottky (en eV) et V la tension appliquée.

La densité du courant dû à l'émission thermoïonique des électrons au dessus de la barrière est donnée par l'expression [Sze 42]:

$$J = J_0 \cdot (e^{qV/kT} - 1) \quad (1.20)$$

où

$$J_0 = A^* T^2 \cdot \exp\left(-\frac{q\phi_B}{kT}\right) \quad (1.21)$$

avec : $A^* = 4\pi m^* qk^2 / h^3$

m^* la masse effective des électrons dans le semi-conducteur, h la constante de Planck.

c) Théorie de l'émission-diffusion

La théorie combinée de l'émission thermoïonique-diffusion était présentée d'abord par Crowell et Sze en 1966 [Crowell 12]. Dans cette théorie on définit une vitesse de recombinaison v_r au maximum potentiel. La densité de courant au sommet de la barrière est :

$$J = q(n_m - n_0)v_r \quad (1.22)$$

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

$$n_m = N_c \exp[-q(\phi_B - \phi(x_m))/kT] \quad (1.23)$$

où $\phi(x_m)$ est le quasi-niveau de Fermi (en eV) à x_m sous un tension de polarisation V . n_0 est la densité des électrons à x_m sous la condition de quasi-équilibre :

$$n_0 = N_c \exp(-q\phi_B/kT) \quad (1.24)$$

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

$$J = \frac{qN_c v_r}{1 + v_r/v_d} \cdot e^{-q\phi_B/kT} \cdot (e^{qV/kT} - 1) \quad (1.25)$$

où

$$v_d = \left\{ \int_{x_m}^W \frac{q}{\mu kT} \cdot e^{-q(\phi_B - E_c)/kT} \cdot dx \right\}^{-1} \quad (1.26)$$

La vitesse de recombinaison est donnée par :

$$v_r = \frac{A^* T^2}{qN_C} \quad (1.27)$$

1.3.2.2. Mécanismes de conduction par effet tunnel

La conduction par effet tunnel est caractérisée par le passage à travers la barrière, des porteurs par effets quanto-mécaniques lorsque leur énergie n'est pas suffisante pour pouvoir la sauter et lorsqu'elle est suffisamment mince pour se laisser traverser. En effet, lorsque le dopage du semi-conducteur augmente, la courbure de la bande à l'interface s'accroît et la largeur de la zone appauvrie diminue, ce qui facilite le passage des électrons à travers la

barrière. Plusieurs types de transport par effet tunnel existent parmi les plus intéressants on peut citer :

- l'émission par effet de champ ou effet tunnel pur (E.C).
- l'émission thermoïonique assistée par effet de champ (E.T.A).

a) courant E.C

L'émission par effet de champ n'est observée que dans les semi-conducteurs fortement dopés ou dégénérés et à basses températures. Le courant est formé d'électrons ayant des énergies proches de l'énergie de Fermi du semi-conducteur.

Pour une polarisation directe, le passage se fait au bas de la bande de conduction tandis que pour une polarisation inverse, le passage est proche de l'énergie de Fermi du métal comme l'illustrent les figures (1.10) et (1.11).

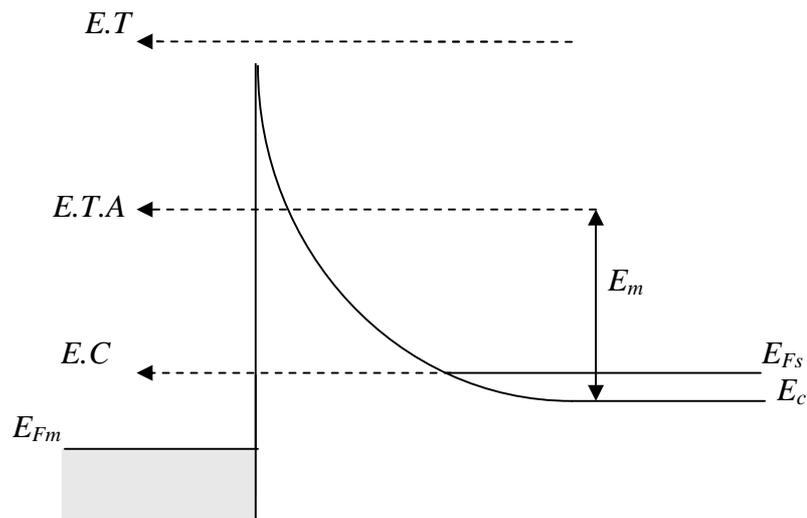


Figure.1.10. : Mécanisme de transport du courant direct dans une barrière Schottky formée sur un semi-conducteur fortement dopé.

Selon C.R.Crowell et V.L.Rideout [Crowell13], pour des tensions directes assez grandes, l'expression de la densité du courant en fonction de la tension peut se mettre sous la forme :

$$J = J_0 \cdot \exp\left(\frac{qV}{E_0}\right) \quad (1.28)$$

avec $E_0 = E_\infty \coth\left(\frac{E_\infty}{kT}\right)$ (1.29)

Le paramètre E_∞ est défini par :

$$E_\infty = \frac{qh}{4\pi} \left(\frac{N_D}{m^* \varepsilon_s} \right)^{1/2}$$

À très basses températures, le terme kT/E_∞ est négligeable devant l'unité, on a alors : $E_0 \approx E_\infty$.

La densité du courant s'écrit :

$$J = J_0 \cdot \exp\left(\frac{qV}{E_\infty}\right) \quad (1.30)$$

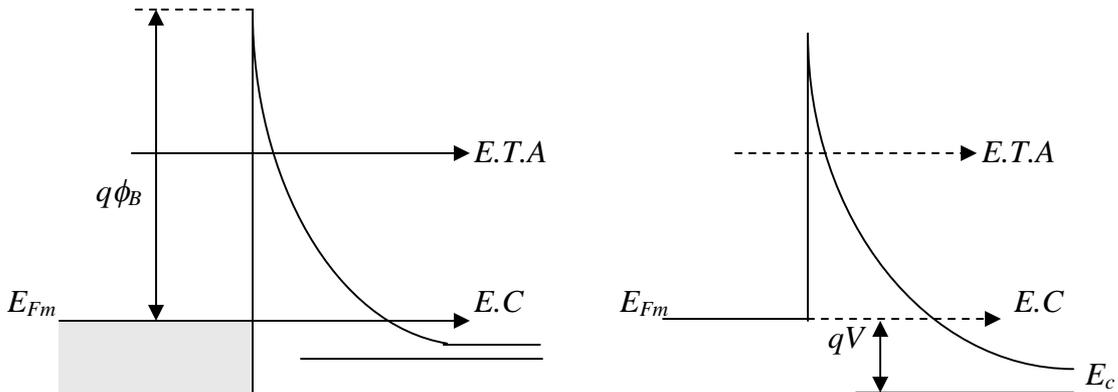


Figure.1.11. : Mécanismes d'effet tunnel dans une diode Schottky polarisée en inverse.

- a) faible polarisation
- b) forte polarisation.

b) courant E.T.A

Dès que la température augmente, et pour une polarisation directe, les électrons ont une énergie supérieure à l'énergie de Fermi du semi-conducteur et inférieure à celle nécessaire pour passer au dessus de la barrière. A ce niveau, la largeur de la zone d'appauvrissement est faible et les électrons la traversent avec une énergie E_m qui représente le maximum de la distribution énergétiques des électrons émis comme le montre la figure (1.10) , ceci correspond à $kT / E_\infty \gg 1$ et la caractéristique I – V a l'expression empirique suivante :

$$J = J_0 \cdot \exp\left(\frac{qV}{nkT}\right) \tag{1.31}$$

avec
$$n = \frac{E_o}{kT} = \frac{E_\infty}{kT} \coth\left(\frac{E_\infty}{kT}\right) \tag{1.32}$$

n étant appelé le facteur d'idéalité de la diode.

1.3.2.3. Recombinaison dans la zone de charge d'espace

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 Schockley, Read et Hall (SRH) en 1952 [Shockley 47], le taux de recombinaison dans la région de déplétion est donné par l'expression suivante :

$$U = \frac{n \cdot p - n_i^2}{\tau_n(n + n_i) + \tau_p(p + n_i)} \tag{1.33}$$

Où τ_n et τ_p sont la durée de vie des électrons et des trous respectivement dans le semi-conducteur. Un seul niveau de piège situé au milieu de la bande interdite et coïncide avec le niveau intrinsèque est supposé. La densité du courant de recombinaison est donnée par :

$$J = q \cdot \int_0^W U(x) dx \tag{1.34}$$

Avec les simplifications suivantes $n, p \gg n_i$, et $\tau_n = \tau_p = \tau$, l'expression de la densité du courant pour des basses tensions positives est donné par :

$$J = J_0 \exp(qV / 2kT) [1 - \exp(-qV / kT)] \quad (1.35)$$

où

$$J_0 = qn_i W / 2\tau \quad (1.36)$$

n_i : est la concentration intrinsèque des électrons.

W : la largeur de la zone de déplétion.

Chapitre 2

Méthode de résolution numérique

1. Introduction

L'objet de ce chapitre est d'étudier la modélisation mathématique et la simulation numérique du comportement électrique de notre dispositif à semi-conducteur.

Pour réaliser ce but, il est donc nécessaire de concevoir une description physique, simple, précise de tous les mécanismes appropriés qui régissent le transport des charges d'électrons dans les dispositifs modernes, et en même temps, pour développer des procédures numériques stables et efficaces qui permettent de calculer des estimations quantitativement précises des paramètres et des caractéristiques électroniques principales.

Dans ce chapitre, nous présentons la méthode numérique pour étudier les propriétés électriques des structures Schottky, en absence et en présence d'une couche d'oxyde :

- dans la première partie, pour une structure Schottky idéale, Nous écrivons le modèle de dérive-diffusion, Nous normalisons les variables. Nous définissons les conditions aux limites pour chaque inconnue. Puis, nous introduisons une méthode itérative pour calculer numériquement les solutions. L'algorithme de résolution du système des équations différentielles est basé sur celle de Gummel [Gummel 22]. La discrétisation du domaine d'étude des équations différentielles est basée sur la méthode de différences finies.

- dans la deuxième partie, pour une structure Schottky en présence d'une couche d'isolant, nous présentons les différentes équations de base, régissant le fonctionnement électrique. A partir de ces équations, nous définissons les grandeurs électriques de la structure.

2. Propriétés électriques et phénomène de transport de courant dans une structure Schottky

2.1. Modèle mathématique

Dans ce chapitre, nous présentons le modèle classique de dérive-diffusion (DD) de transport, qui exprime en plus de l'équation de Poisson pour le potentiel, la conservation des densités des électrons et des trous. Ce modèle peut être obtenu à partir des équations de Maxwell.

2.1.1 Équation de Poisson

L'équation de Poisson décrit des phénomènes de nature électrostatique, elle permet de relier le potentiel électrique Ψ avec la densité de charge ρ . Elle peut être déduite de l'une

des équations du Maxwell, $\nabla \cdot D = \rho$, à partir d'une équation caractérisant le comportement électrique du matériel, $D = \varepsilon E$, et de fait que $E = -\nabla \psi$, L'équation de poisson s'écrit:

$$\nabla \cdot (\nabla \psi) = -\rho / \varepsilon \quad (2.1)$$

L'intégration de cette équation permet de calculer la variation du potentiel dans un semi-conducteur à partir de la charge d'espace.

La charge d'espace est calculée en tenant compte de toutes les charges qui existent en un point du semi-conducteur, c'est-à-dire d'une part des charges mobiles que sont les électrons et les trous avec des concentrations n et p , respectivement, et d'autre part des charges fixes qui peuvent être localisées sur des accepteurs ou donneurs ionisés, avec des concentrations N_a^- ou N_d^+ , ou sur des centres profonds. En l'absence de centres profonds ionisés et à une température ambiante, l'équation de Poisson s'écrit simplement :

$$\nabla^2 \psi = q(n - p + N_a - N_d) / \varepsilon \quad (2.2)$$

2.1.2. Les équations du courant

Les courants dans le semi-conducteur résultent de déplacement des porteurs de charge, électrons et trous, sous l'action d'une force. L'origine de la force peut être un champs électrique ou un gradient de concentration. Dans le premier cas, le courant est dit de *conduction*, dans le second il est dit de *diffusion*.

La forme simple de ces équations, connue sous le nom 'modèle de dérive-diffusion', est :

$$J_n = q \cdot \mu_n \cdot n \cdot E + q \cdot D_n \cdot \nabla n \quad (2.3.a)$$

$$J_p = q \cdot \mu_p \cdot p \cdot E - q \cdot D_p \cdot \nabla p \quad (2.3.b)$$

D_n et D_p sont les constantes de diffusion des électrons et des trous respectivement.

Le coefficient de diffusion des porteurs peut être liée à la mobilité selon les équations d'Einstein:

$$D_p = \mu_p \frac{kT}{q}, \quad D_n = \mu_n \frac{kT}{q} \quad (2.5)$$

Compte tenu de ces relations et en appliquant $E = -\nabla \psi$, les courants d'électrons et de trous peuvent s'écrire sous l'une ou l'autre des formes suivantes :

$$J_n = q \cdot \mu_n \left(-n \cdot \nabla \psi + \frac{kT}{q} \cdot \nabla n \right), \quad (2.6.a)$$

$$J_p = q \cdot \mu_p \left(-p \cdot \nabla \psi - \frac{kT}{q} \cdot \nabla p \right), \quad (2.6.b)$$

2.1.3. Les équations de continuité

Les équations de continuités régissent la condition d'équilibre dynamique des porteurs dans le semi-conducteur. Dans un barreau semi-conducteur parcouru par un courant, considérons un élément infinitésimal de volume. La diminution de la quantité de porteurs par unité de temps dans le volume est due à : (i) la différence locale entre le flux des porteurs qui entrent le volume et de ceux qui en sortent, et (ii) la différence entre les porteurs qui se recombinent et qui génèrent.

Le taux de diminution avec du temps est $\frac{\partial c}{\partial t} dV$, où c est la concentration (n ou p). À la première contribution correspond $\text{div } f dV$ (f est le flux d'un des porteurs), et à la seconde correspond $(U-G) dV$. Donc :

$$\frac{\partial c}{\partial t} dV = \text{div } f dV - (U - G) dV$$

$$\text{Ou : } \text{div } f = (U - G) + \frac{\partial c}{\partial t} \quad (2.7)$$

L'équation (2.3) sera réécrite en termes de densité de courant J . pour les électrons, $J_n = qf$, et (2.3) doit être multiplié par q , tandis que pour les trous $J_p = -qf$, par conséquent :

$$\text{div } J_n = q \cdot (U - G) + q \frac{\partial c}{\partial t} \quad (2.8.a)$$

$$\text{div } J_p = -q \cdot (U - G) - q \frac{\partial c}{\partial t} \quad (2.8.b)$$

2.1.4. Modèle de recombinaison

Les différents processus qui seront à l'origine de la génération ou de la recombinaison des porteurs de charge sont nombreux, un des mécanisme prédominant a été analysé par Shockley-Read-Hall [47]. Il prend en compte l'ensemble des processus de génération- recombinaison d'origine thermique.

$$U = (n.p - n_i^2) \left[\frac{1}{\tau_n(n + n_i) + \tau_p(p + n_i)} \right] \quad (2.9)$$

τ_n et τ_p sont les durée de vie des électrons et des trous respectivement.

Pour qu'un modèle de recombinaison soit qualitativement correct, les conditions suivantes doivent être réunies :

Injection : $(n_i^2 \succ n.p \Rightarrow U \prec 0)$

Extraction : $(n_i^2 \prec n.p \Rightarrow U \succ 0)$

2.1.5. Le modèle unidimensionnel de la structure

Dans l'état statique tous les dérivés en ce qui concerne le temps sont nuls. Et parce que c'est un modèle unidimensionnel, les opérateurs différentiels réduisent aux dérivés totaux en x :

L'équation de Poisson:
$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = \frac{q}{\epsilon_0 \epsilon_r} [n - p - N_D^+ + N_A^-] \quad (2.10)$$

Les équations de continuité:
$$\frac{1}{q} \frac{\partial J_n}{\partial x} = U \quad (2.11.a)$$

$$\frac{1}{q} \frac{\partial J_p}{\partial x} = -U \quad (2.11.b)$$

Les équations du courant :
$$J_n = -q \cdot \mu_n \left(-n \cdot \frac{\partial \psi}{\partial x} + \frac{kT}{q} \cdot \frac{\partial n}{\partial x} \right), \quad (2.12.a)$$

$$J_p = -q \cdot \mu_p \left(-p \cdot \frac{\partial \psi}{\partial x} - \frac{kT}{q} \cdot \frac{\partial p}{\partial x} \right), \quad (2.12.b)$$

2.2. La méthode numérique

2.2.1. Normalisation

Si on regarde les valeurs que peut prendre les inconnue et les paramètres du système, on remarque que les densités de porteurs libres p et n , prennent des valeurs entre 0 et 10^{18} , ce qui montre que ces variables ont une forte variation et qu'elles évoluent dans des plages de nombres très différentes.

Ceci peut être une source d'erreurs d'arrondis et par suite de résultats erronés dans la simulation numérique. La normalisation des variables est nécessaire pour les ramener à une

plage de valeurs convenables pour le traitement numérique. Dans la littérature, on trouve plusieurs choix. Dans notre cas, on va choisir la normalisation suivante:

- Les potentiels sont divisés par kT/q :

$$\Psi = q\psi / kT$$

- Les concentrations sont divisées par n_i
- Les longueurs sont normalisées selon :

$$X = x / L$$

Où L , la longueur intrinsèque de Debye.

Le soin supplémentaire doit être employé en normalisant les dérivés...

$$\Psi' = \frac{q}{kT} \frac{d}{dx} \psi(x) \frac{d}{dX} x(X)$$

$$\Psi' = \frac{L \cdot q}{kT} \psi' \tag{2.13}$$

Et donc:

$$\Psi'' = \frac{L^2 \cdot q}{kT} \psi'' \tag{2.14}$$

Le tableau suivant donne les différents paramètres de normalisation utilisés :

| <i>Symbole</i> | <i>signification</i> | <i>paramètres de normalisation</i> |
|------------------|--|---|
| x | longueur | $L = \sqrt{\epsilon_0 \cdot \epsilon_r \cdot kT / n_i q^2}$ |
| ψ | potentiel | kT/q |
| ϕ_n, ϕ_p | pseudos potentiels de Fermi des électrons et des trous | kT/q |
| n, p | concentrations des électrons et des trous | n_i |
| J_n, J_p | densités du courant des électrons et des trous | $n_i \cdot \mu_n \cdot kT / L$ |
| μ_n, μ_p | mobilités des électrons et des trous | μ_n |
| U | le taux net de recombinaison | $n_i \cdot \mu_n \cdot kT / L^2 \cdot q$ |
| τ_n, τ_p | durée de vie des électrons et des trous | $\epsilon_0 \cdot \epsilon_r / q \cdot n_i \cdot \mu_n$ |
| N_{dop} | la concentration des centres donneurs et accepteurs | n_i |

Tableau 2.1 Les paramètres de normalisation

Après la normalisation le système d'équations précédent s'écrit :

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial X^2} = N(x) - P(x) - N_D + N_A \quad (2.15)$$

$$\frac{\partial J_n}{\partial X} = U \quad (2.16.a)$$

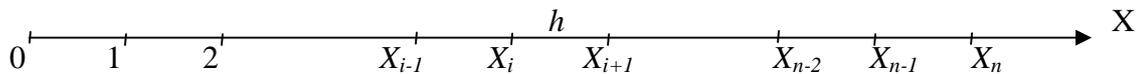
$$\frac{\partial J_p}{\partial X} = -U \quad (2.16.b)$$

$$J_n = -\mu_n \left(N \cdot \frac{\partial \Psi}{\partial X} + \frac{\partial N}{\partial X} \right) \quad (2.17.a)$$

$$J_p = -\mu_p \left(P \cdot \frac{\partial \Psi}{\partial X} - \frac{\partial P}{\partial X} \right) \quad (2.17.b)$$

2.2.2 Schéma de discrétisation

La discrétisation du domaine à étudier des équations aux dérivées partielle est basée sur la méthode de différences finies, cette méthode est très classique, simple à mettre en œuvre et convient pour beaucoup de problèmes rencontrés en physique mathématique. Le principe de cette méthode consiste à remplacer les dérivées par des quotients de différences. Les calculs sont effectués suivant un maillage. Dans le cas unidimensionnel, le domaine de simulation est un segment de droite de longueur L_s , le maillage est constitué d'un ensemble de point X_i pour i variant de 0 à n , tel que :



A partir de la formule de Taylor, on peut approcher les dérivées par les schémas suivantes :

$$F'(x) \approx \frac{F(x+h) - F(x)}{h} \quad \text{Différence avant;}$$

$$F'(x) \approx \frac{F(x) - F(x-h)}{h} \quad \text{Différence arrière;}$$

$$F'(x) \approx \frac{F(x+h) - F(x-h)}{2h} \quad \text{Différence centrée}$$

et

$$F''(x) \approx \frac{F(x-h) - 2F(x) + F(x+h)}{h^2}$$

h est l'intervalle de grille:

L'intervalle h de grille doit être rendu assez petit pour résoudre la variation de charge de l'espace, donc il devrait être sensiblement plus petit que la longueur de Debye.

En changeant de notation (notation indicielle), on obtient :

$$F'(x) = F_i' \approx \frac{F_{i+1} - F_i}{h} \quad \text{ou} \quad F_i' \approx \frac{F_i - F_{i-1}}{h}$$

et

$$F''(x) = F_i'' \approx \frac{F_{i+1} - 2F_i + F_{i-1}}{h^2} \quad (2.18)$$

2.2.2.1. Approximation de Gummel pour les densités de courant

Le développement entre deux points de concentration de porteurs de charge n'est pas linéaire, mais il est approximé par des fonctions exponentielles qui améliorent la non linéarité de l'équation de continuité. Pour déterminer la forme intégrale de l'équation de courant selon Gummel et Scarfetter on impose la condition qui fait qu'entre deux nœuds successifs, l'intensité du champ électrique, la mobilité et la densité du courant soient constants. Sous ces conditions, les équations de courant J_n et J_p peut s'écrire sous la forme différentielle dans l'intervalle élémentaire $x_{i+1} - x_i$:

$$J_{ni+1/2} = e \cdot \mu_n = \frac{n_{i+1} \exp\left(-\frac{e\psi_{i+1}}{k.T}\right) - n_i}{\exp\left(\frac{e(\psi_i - \psi_{i+1})}{k.T}\right) - 1} \frac{\psi_i - \psi_{i+1}}{x_{i+1} - x_i} \quad (2.19.a)$$

$$J_{pi+1/2} = e \cdot \mu_p = \frac{p_i \exp\left(-\frac{e(\psi_i - \psi_{i+1})}{k.T}\right) - p_{i+1}}{\exp\left(\frac{e(\psi_i - \psi_{i+1})}{k.T}\right) - 1} \frac{\psi_i - \psi_{i+1}}{x_{i+1} - x_i} \quad (2.19.b)$$

L'application de cette approximation dans l'algorithme de résolution, permet une meilleure convergence et évite d'aboutir à des impossibilités physiques du type concentrations négatives.

2.2.2.2 Discrétisation de l'équation de Poisson

Soit l'équation de Poisson à discrétiser, au point i :

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial^2 X} = N - P - N_D + N_A \quad (2.20)$$

La variable Ψ est supposée linéaire entre deux points successifs. En utilisant les schémas précédentes de discrétisation, on obtient, l'équation de Poisson linéarisée en Ψ , sous la forme discrétisée :

$$F_{\Psi}^i = \frac{1}{h^2} \cdot (\Psi_{i-1} - 2\Psi_i + \Psi_{i+1}) + \rho_i = 0 \quad (2.21)$$

La densité de charge d'espace ρ est s'exprimé aussi en fonction des valeurs des inconnues au point i :

$$\rho_i = -N_i + P_i + N_D - N_A \quad (2.22)$$

2.2.2.3 Discrétisation des équations de continuité

Soit l'équation de continuité d'électron à discrétisé:

$$\frac{\partial J_n}{\partial x} = -U \quad (2.23)$$

La forme normalisée du modèle de recombinaison proposé par Shockley-Read-Hall est donnée par :

$$U = (N \cdot P - 1) \left[\frac{1}{\tau_n(N+1) + \tau_p(P+1)} \right] \quad (2.24)$$

L'équation de continuité (2.23) permet d'écrire en appliquant un schéma centré aux différences :

$$F_n^i = J_{n_{i+1/2}} - J_{n_{i-1/2}} - U_i \cdot h = 0 \quad (2.25)$$

En utilisant l'expression de Gummel pour le courant J_n (2.19.a) et la valeur de U_i au point i , on obtient l'équation de continuité des électrons sous la forme discrétisée ci-dessous :

$$F_n^i = \mu_n.C_{i-1}.N_{i-1} - \mu_n.[C_i + C_{i-1}.\exp(\Psi_{i-1} - \Psi_i)].N_i + \mu_n.C_i.\exp(\Psi_i - \Psi_{i+1}).N_{i+1} \quad (2.26)$$

$$+ \left[-(N_i.P_i - 1) \left(\frac{1}{\tau_n(N_i + 1) + \tau_p(P_i + 1)} \right) \right] h = 0$$

avec :

$$C_i = \frac{\Psi_i - \Psi_{i+1}}{h.[\exp(\Psi_i - \Psi_{i+1}) - 1]} \quad (2.27)$$

De la même façon, on peut obtenir l'équation de continuité des trous en remplaçant, dans l'équation de continuité des électrons N par P , Ψ par $-\Psi$ et μ_n par μ_p :

$$F_p^i = J_{p_{i+1/2}} - J_{p_{i-1/2}} + U_i.h = 0 \quad (2.28)$$

Soit

$$F_p^i = -\mu_p.C_{i-1}.P_{i-1}.\exp(\Psi_{i-1} - \Psi_i) + \mu_p.[C_{i-1} + C_i.\exp(\Psi_i - \Psi_{i+1})].P_i \quad (2.29)$$

$$- \mu_p.C_i.P_{i+1} + \left[(N_i.P_i - 1) \left(\frac{1}{\tau_n(N_i + 1) + \tau_p(P_i + 1)} \right) \right] h = 0$$

Avec la forme (2.27) pour C_i

L'ensemble des équations à résoudre est formé de trois systèmes d'équations à $3n$ inconnues F_ψ , F_n , F_p . La résolution de ces systèmes d'équation est fait par des méthodes itératives.

2.2.3. Itérations Fonctionnelles

Dans cette section, nous discutons l'itération fonctionnelle découplée qui sera employée pour résoudre le model de dérive- diffusion (2.10)-(2.11). Ce modèle constitue un système non-linéaire des problèmes. Pour surmonter ces limitations, un algorithme découplé, bien connu comme méthode *de Gummel* [Gummel 22], est habituellement utilisé dans l'approximation numérique du modèle de Dérive-Diffusion.

La méthode de Gummel consiste la solution successive de l'équation non-linéaire du Poisson (2.10), et des deux équations linéarisées de continuité (2.11.a) et (2.11.b).

Le système d'équations obtenu après la linéarisation et discrétisation est résolu par la méthode de Gauss. Les inconnues Ψ , N et P seront réévaluées à chaque itération et le processus sera poursuivi jusqu'à la convergence.

La méthode de Gummel montre typiquement une convergence rapide et une bonne robustesse avec le choix de la solution initiale.

L'algorithme de Gummel consiste trois étapes principales:

(Étape 1) calcul:

$$(\Psi) = \Phi(n, p) \quad (2.30)$$

Pour n et p donné, en résolvant l'équation de Poisson par la méthode de Gauss ;

(Étape 2) calcul:

$$n = \Phi_n(\Psi, p) \quad (2.31)$$

En résolvant l'équation linéarisée de continuité d'électron

(Étape 3) calcul:

$$p = \Phi_p(\Psi, n) \quad (2.32)$$

En résolvant l'équation linéarisée de continuité de trou

La résolution numérique sera arrêtée lorsqu'un critère de convergence est atteint. Pour cela on a utilisé un test d'arrêt donné par :

$$\left| \Psi^{k+1} - \Psi^k \right| \leq \varepsilon, \quad \left| N^{k+1} - N^k \right| \leq \varepsilon, \quad \left| p^{k+1} - p^k \right| \leq \varepsilon, \quad (2.33)$$

Où k présente le nombre d'itération.

ε est une valeur prédéfinie à tous les points du maillage. Elle donne une indication sur la convergence de la méthode de résolution.

2.2.4. Solutions initiales et conditions aux limites

Les conditions aux limites jouent un rôle très important dans le problème de convergence et le temps d'exécution. Pour cette raison, les conditions aux limites doivent être raisonnable pour obtenir des résultats acceptables.

Dans cette section nous définissons les conditions aux limites appropriées pour le modèle DD présentés dans la section.2. Dans ce modèle, nous supposons Ω le domaine de dispositif. les conditions aux limites de Dirichlet sont données et appliquées pour les densités du porteur et les potentiels (figure.2.1) :

$$\begin{cases} n|_{L_s} = N_D, & p|_{L_s} = N_A \\ \psi|_{L_s} = \psi_{L_s}, \end{cases} \quad (2.34)$$

En outre, nous supposons que les conditions d'équilibre thermique et de neutralité sont satisfaites à cette limite.

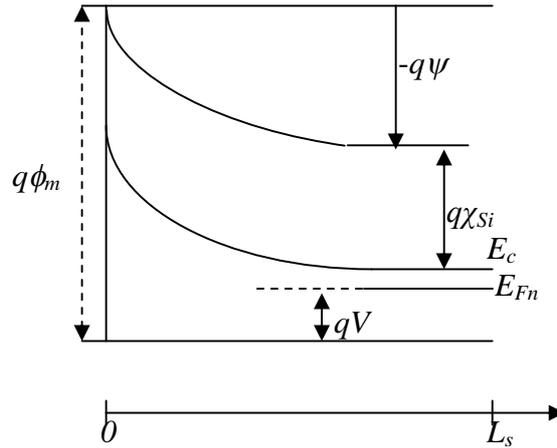


Fig.2.1 : diagramme énergétique d'une structure M/n-Si

$$\begin{cases} n.p = n_i^2 \\ n - p - N_D + N_A|_{L_s} = 0 \\ \psi|_{L_s} = \phi_m - \chi_{Si} + \frac{1}{\beta} \ln\left(\frac{n}{N_c}\right) - V \end{cases} \quad (2.35)$$

où V est le potentiel appliquée.

Et :

$$n|_0 = N_c \exp\left(-\frac{q\phi_{Bn}}{kT}\right)$$

La résolution de système d'équations, nécessite trois solutions initiales de ψ , n et p . L'utilisation d'une bonne solution initiale permet d'atteindre plus rapidement la solution exacte recherchée.

La solution initiale est généralement la solution correspondant à l'équilibre thermique. A l'équilibre thermique, la connaissance de l'un des contours : de potentiel ou de concentration de porteurs de charge permet à l'aide d'une formulation analytique, de déterminer les deux autres et donc connaître les trois solutions initiales.

Selon l'approximation de Gummel, On suppose que le potentiel est linéaire entre deux points consécutifs :

$$\Psi = a.X + b \quad (2.36)$$

A partir de cette distribution linéaire de potentiel, on calcule les valeurs n_i et p_i des concentrations en chaque point de maillage selon les relations suivantes :

$$n(x) = n_0 \exp(\beta\psi) \quad (2.37.a)$$

$$p(x) = p_0 \exp(-\beta\psi) \quad (2.37.b)$$

Où $\beta = q/kT$

Toutes les étapes de l'exécution du programme sont représentées sur la figure (2.2).

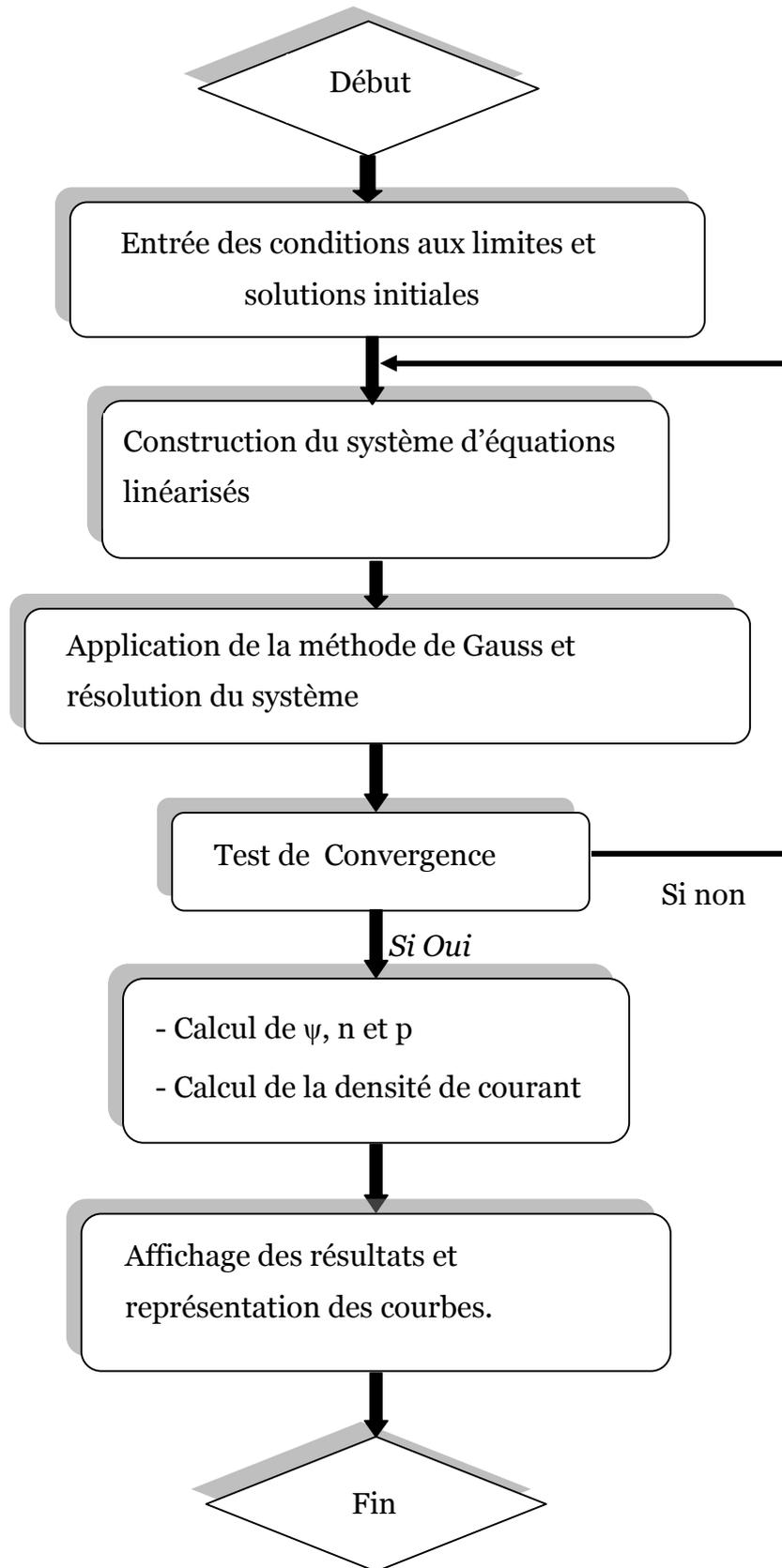


Fig. 2.2. Organigramme de la résolution du système d'équations

3. Propriétés électriques et phénomène de transport de courant dans une structure Schottky MIS

3.1. Etudes des propriétés électriques des structures MOS

3.1.1. Diagramme des bandes d'énergie

L'étude physique des structures MOS est basée sur l'utilisation de leur diagramme de bandes d'énergie qui est représenté sur la figure (2.3), dont le substrat est de type P. Il apparaît, pour une tension V appliquée à la structure, des déformations de ce diagramme dans la couche d'oxyde et dans le semi-conducteur.

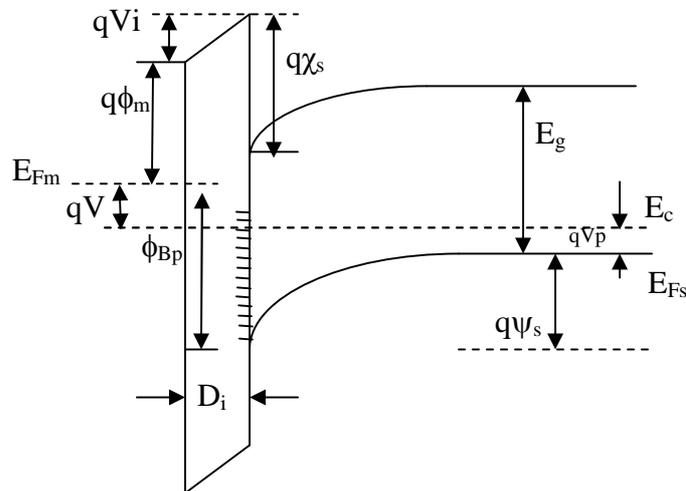


Fig.2.3 : diagramme des bandes d'énergie d'une structure MOS polarisée

Où

q : charge élémentaire,

E_c : énergie du niveau le plus bas de la bande de conduction dans le volume du semi-conducteur,

E_v : énergie du niveau le plus haut de la bande de valence dans le volume du semi-conducteur,

E_{Fs} : niveau de Fermi du semi-conducteur,

E_{Fm} : niveau de Fermi du métal,

$q\chi_s$: affinité électronique du semi-conducteur,

D_i : épaisseur de la couche d'oxyde,

V_i : chute de potentiel dans l'isolant,

ψ_s : potentiel de surface.

ϕ_m : travail de sortie de métal,

ϕ_F : différence énergétique entre les niveaux E_{Fi} et E_{Fs} dans le volume du semi-conducteur.

3.1.2. Les équations de bases

A partir de la figure (2.3), nous pouvons déduire l'expression de la tension V en fonction des paramètres électriques de la structure MOS comme ceci :

$$V = (\phi_m - \chi_s) - \frac{E_g}{2q} - \phi_F + \psi_s + V_i \quad (2.38)$$

L'expression du potentiel ϕ_F est donnée par :

$$\phi_F = \frac{kT}{q} \log\left(\frac{N_c N_A}{n_i^2}\right) - \frac{E_g}{2} \quad (2.39)$$

Où :

N_c : la densité d'états effectifs des électrons dans la bande de conduction du semi-conducteur.

n_i : concentration intrinsèque du semi-conducteur ($n_i \approx 1.4 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-3}$ dans le cas du silicium).

En utilisant la loi de Gauss, l'expression du potentiel électrique V_i dans la couche d'oxyde peut se mettre sous la forme :

$$V_i = \frac{D_i}{\epsilon_i} (\epsilon_s E_s - Q_s) \quad (2.40)$$

Q_s : La charge des états de surface résultante à l'interface.

ϵ_i : Constante diélectrique de l'oxyde.

E_s : le champ électrique à l'interface oxyde/semi-conducteur.

L'expression du champ électrique $E(x)$ dans le semi-conducteur est déterminée, à partir de la résolution de l'équation de Poisson, cette équation de Poisson relie la courbure des bandes du semi-conducteur, $\psi(x)$, à la densité de charge, $\rho(x)$:

$$\frac{d^2\psi(x)}{d^2x} = -\frac{\rho(x)}{\varepsilon_{sc}} \quad (2.41)$$

où ε_{sc} représente la permittivité du semi-conducteur.

la densité de charge dépend à la fois de la densité en porteurs libres et de la charge fixe due aux impuretés dopantes ionisées du substrat, En un point d'abscisse x , la densité de charge est donnée par :

$$\rho(x) = q[N_D - N_A + p(x) - n(x)] \quad (2.42)$$

où

N_D et N_A : respectivement, les densités des donneurs et accepteurs ionisés,

$p(x)$ et $n(x)$: sont respectivement les densités de trous et d'électrons dans le semi-conducteur.

$$\begin{cases} n(x) = n_0 \exp(\psi / kT) \\ p(x) = p_0 \exp(-\psi / kT) \end{cases} \quad (2.43)$$

Où p_0 et n_0 sont les densités de trous et d'électrons dans le semi-conducteur loin de l'interface.

Dans le volume du semi-conducteur, la condition de neutralité doit être satisfaite, c'est-à-dire :

$$\rho(x \rightarrow \infty) = p_0 - n_0 + N_D - N_A = 0, \text{ ce qui implique que } p_0 - n_0 = N_A - N_D.$$

L'équation (2.42) devient alors :

$$\rho(x) = -qN_A \left\{ \left(\frac{n_i}{N_A} \right)^2 [\exp(\beta\psi(x)) - 1] - [\exp(-\beta\psi(x)) - 1] \right\} \quad (2.44)$$

Où pour un substrat de type P , $p_0 = N_A$ et $n_0 = (n_i)^2 / N_A$.

À partir de l'expression (2.44) et de l'équation de Poisson (2.41), on obtient le champ électrique :

$$E(x) = -\frac{\partial\psi}{\partial x} = \pm \frac{\sqrt{2}kT}{qL} \left[(\exp(-\beta\psi(x)) + \beta\psi(x) - 1) + \frac{n_i^2}{N_A^2} (\exp(\beta\psi(x)) - \beta\psi(x) - 1) \right]^{1/2} \quad (2.45)$$

Avec un signe + si $\psi < 0$ et signe - si $\psi > 0$.

Où β représente le potentiel thermique ($\beta = q/kT$), L étant la longueur de Debye du semi-conducteur,

$$L_D = \sqrt{\frac{kT\epsilon_{sc}}{p_0q^2}}$$

Pour déterminer le champ électrique à l'interface, on remplace dans l'équation (2.45) ψ par ψ_s :

$$E_s = \pm \frac{\sqrt{2}kT}{qL} \left[(\exp(-\beta\psi_s) + \beta\psi_s - 1) + \frac{n_i^2}{N_A^2} (\exp(\beta\psi_s) - \beta\psi_s - 1) \right]^{1/2} \quad (2.46)$$

En appliquant le théorème de Gauss au champ électrique à l'interface, la densité totale de charge est obtenue :

$$Q_{sc} = -\epsilon_{sc}E_s = \mp \frac{\sqrt{2}kT}{qL} \left[(\exp(-\beta\psi_s) + \beta\psi_s - 1) + \frac{n_i^2}{N_A^2} (\exp(\beta\psi_s) - \beta\psi_s - 1) \right]^{1/2} \quad (2.47)$$

La relation qui existe entre la tension V appliquée à la structure MOS, le champ électrique E_s et le potentiel de surface ψ_s à l'interface du semi-conducteur, s'écrit en tenant compte des relations (2.38) et (2.40) :

$$V = (\phi_m - \chi_s) - \frac{E_g}{2q} - \phi_F + \psi_s + \frac{D_i}{\epsilon_i} (\epsilon_s E_s - Q_s) \quad (2.48)$$

À partir de cette dernière expression, nous pouvons déduire l'expression de la tension V_{FB} qui correspond à la situation de bandes plates :

$$V_{FB} = (\phi_m - \chi_s) - \frac{E_g}{2q} - \phi_F - \frac{D_i}{\epsilon_i} Q_s. \quad (2.49)$$

Le champ électrique E_i dans la couche d'oxyde est calculé à partir de la chute de potentiel V_i et l'épaisseur de la couche d'oxyde D_i :

$$V_i = D_i E_i \quad (2.50)$$

Les équations précédentes montrent que les propriétés électriques du semi-conducteur tel que le potentiel de surface ψ_s et la chute de potentiel ne peuvent être déterminés de façon analytique, nous nous sommes basés sur une méthode numérique de Newton-Raphson. Toutes les étapes suivies sont représentées sur la figure (2.3).

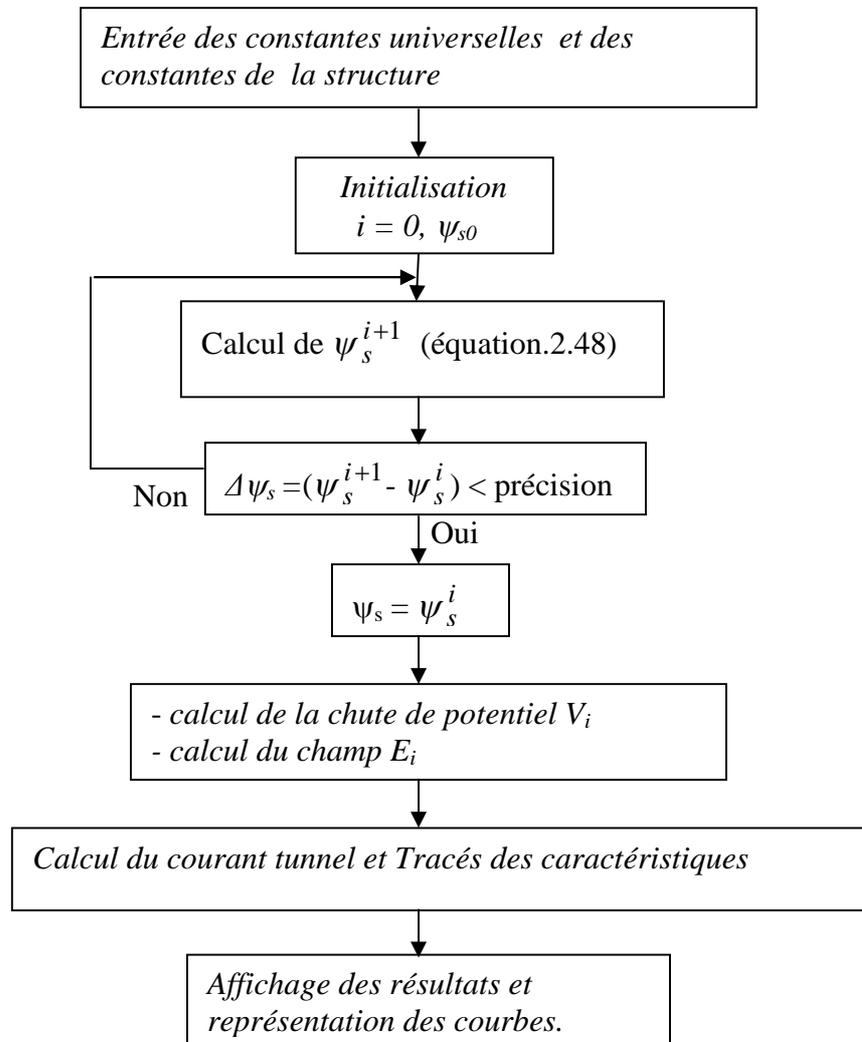


Fig.2.3 : Organigramme de simulation des propriétés électriques des structures MOS.

3.2. Phénomène de transport du courant

Aux interfaces métal/oxyde et oxyde/semi-conducteur, en théorie classique, les porteurs ne peuvent franchir les barrières de potentiel pour migrer à travers la couche d'oxyde. Les porteurs arrivent jusqu'aux interfaces et rebroussement chemin. Cependant, l'analyse quantique qui est basée sur le calcul probabiliste, montre que certains porteurs d'énergie E_x peuvent pénétrer, à l'une des interfaces, dans la couche d'oxyde et atteignent l'autre interface du composant. Ce phénomène appelé effet tunnel.

L'expérience montre que ces transitions isoénergétiques peuvent avoir lieu sous l'application d'un champ électrique élevé [Aziz1]. Ceci n'existe pratiquement jamais dans les dispositifs classiques dont l'épaisseur de la couche d'oxyde excède 500\AA . Par contre, le principe de fonctionnement des nouveaux dispositifs électroniques dits dispositifs tunnel dont l'épaisseur de l'oxyde est inférieure à 100\AA est basé sur l'injection des porteurs par effet tunnel.

Dans le cas d'une structure MOS, la densité du courant tunnel s'exprime de la manière suivante [Lue26] :

$$J_t = \frac{4\pi q m_0}{h^3} \int_E \log \left[1 + \exp\left(\frac{-E}{kT}\right) \right] T(E) dE \quad (2.51)$$

$T(E)$: la probabilité de transmission, l'expression de $T(E)$ est donnée par :

$$T(E) = \exp(-\alpha \cdot \phi_p^{1/2} D_i) \quad (2.52)$$

$$\text{avec } \alpha = \left(\frac{4\pi}{h} \right) (2m_h^*) \quad (2.53)$$

ϕ_p : l'hauteur de la barrière tunnel.

La densité du courant tunnel a alors pour expression [Card18] :

$$J_t = A_p^* T^2 \exp(-\alpha \cdot \phi_p^{1/2} D_i) \cdot \exp(-\beta(\psi_s + V_p)) \cdot [1 - \exp(-\beta V)] \quad (2.54)$$

$$A_p^* = 32 \text{ A / cm}^2 / \text{K}^2 .$$

Chapitre 3

Calcul des caractéristiques statiques

Introduction

Dans ce chapitre, on va présenter d’abord les résultats de simulation numérique obtenue par résolution des équations phénoménologiques de transport pour une structure Schottky idéal (profil de potentiel électrique, concentration des porteurs, caractéristiques courant-tension). On va aussi présenter l’influence du travail de sortie et de concentration de dopage sur les caractéristiques électriques $J - V$.

Concernant l’étude d’une structure Schottky réel avec une couche native d’oxyde et des états de surface, on va simuler d’abord les propriétés électriques d’une structure MOS (potentiel de surface ψ_s , champ E_i et potentiel V_i dans la couche d’oxyde). Ensuite, on va étudier la conduction tunnel et l’influence de la densité des états de surface et de l’épaisseur d’oxyde sur les caractéristiques $J - V$.

3.1. Résultats

Nous tenons compte d’un substrat Si avec une épaisseur égale à $1\mu m$ [turner 31].

On a supposé que la concentration du dopage N_{Dopage} est uniforme et entièrement ionisée à la température ambiante.

Le tableau 3.1 donne des paramètres physiques, électriques et technologiques utilisé dans la simulation.

| Paramètre | valeur |
|-----------------------------------|-------------------|
| $\mu_{nSi} (cm^{-2}V^{-1}s^{-1})$ | 1500 |
| $\mu_{pSi} (cm^{-2}V^{-1}s^{-1})$ | 450 |
| $\tau (\mu s)$ | 1 |
| $\epsilon_{Si} (Farad.cm^{-1})$ | $11.9.\epsilon_0$ |
| $E_g (eV)$ | 1.12 |
| $\chi_{Si} (eV)$ | 4.01 |

Tableau.3.1. paramètres électrique et physiques utilisés dans la simulation

Une étude de la simulation d'une structure Schottky idéale (M/Si) est réalisée dans la première fois.

3.1.1. Structure Schottky idéal

3.1.1.1. Résolution numérique du système d'équation:

Pour pouvoir étudier les caractéristiques J – V d'un semi-conducteur il faut calculer tout d'abord les variables élémentaire $\psi(x)$, $n(x)$ et $p(x)$ du système d'équation. Le profil du potentiel et des densités des porteurs de charges sont représentés dans les figures (3.1) et (3.2), respectivement.

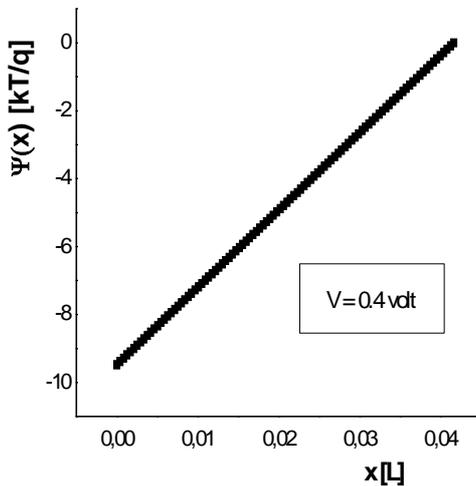


fig.3.1.a : profil du potentiel $\psi(x)$ pour un semi-conducteur de type N.

$$\phi_m = 4.8 \text{ eV}, N_D = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$$

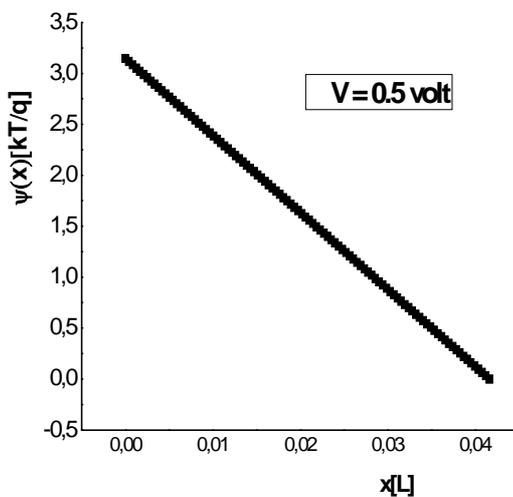


fig.3.1.b : profil du potentiel $\psi(x)$ pour un substrat de type P.

$$\phi_m = 4.3 \text{ eV}, N_A = 2 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-3}$$

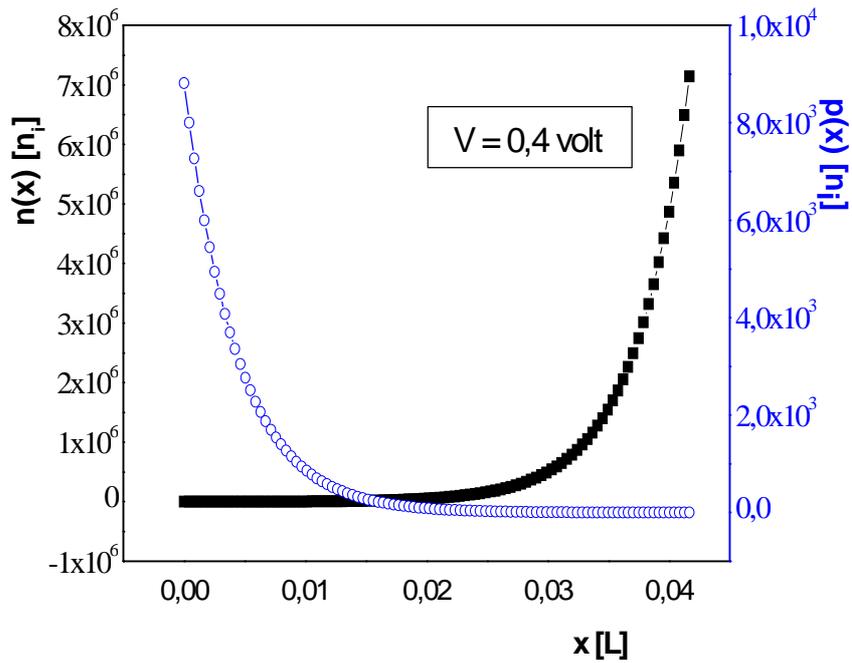


Fig.3.2.a: concentration des porteurs du charge $n(x)$ et $p(x)$ pour un semi-conducteur de type N, $\phi_m = 4,8$ eV, $N_D = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$

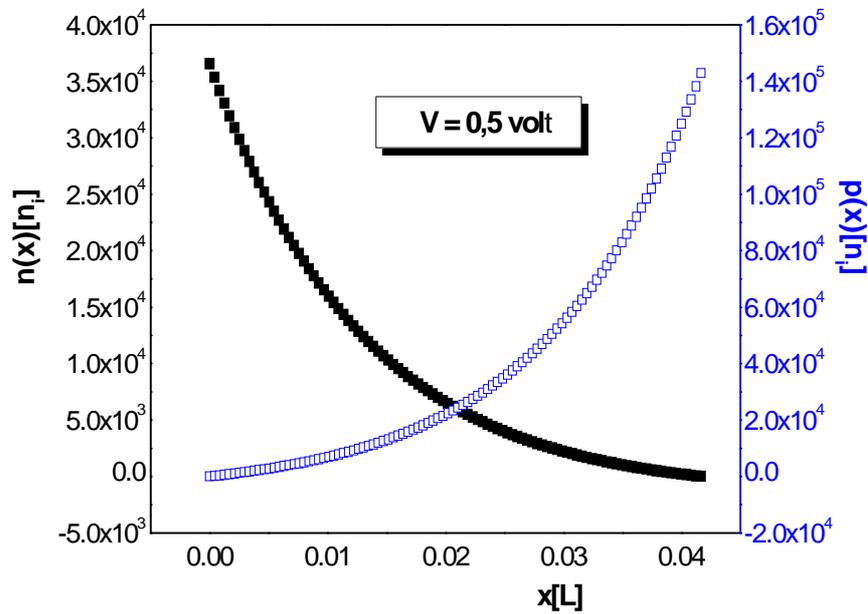


Fig.3.2.b: concentration des porteurs du charge $n(x)$ et $p(x)$ pour un semi-conducteur de type P. $\phi_m = 4,3$ eV, $N_A = 2 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-3}$

3.1.1.2. Phénomène de transport

A l'équilibre thermodynamique, pour un semi-conducteur de type N , les électrons passent du semi-conducteur vers le métal créant une zone de déplétion dans le semi-conducteur, les ions donneurs ne sont plus compensés par les électrons, il apparaît une zone de charge d'espace positive, d'autre part, la distance entre le niveau de Fermi et la bande de conduction est plus grande au voisinage de l'interface que dans la région neutre du semi-conducteur.

Lorsqu'on polarise la structure, la tension de polarisation se localise au niveau de la zone de déplétion. Si la structure est polarisée par une tension V , supposée positive (dans le sens direct), la barrière de potentiel que doivent franchir les électrons pour passer dans le métal est réduite. Les électrons qui diffusent vers le métal créent un courant du métal vers le semi-conducteur. En polarisation inverse, la hauteur de la barrière de potentiel qui s'opposait à la diffusion des électrons augmente. La figure (3.3.a) présente le profil du potentiel et de densité des porteurs de charges à l'équilibre thermodynamique et sous une polarisation directe.

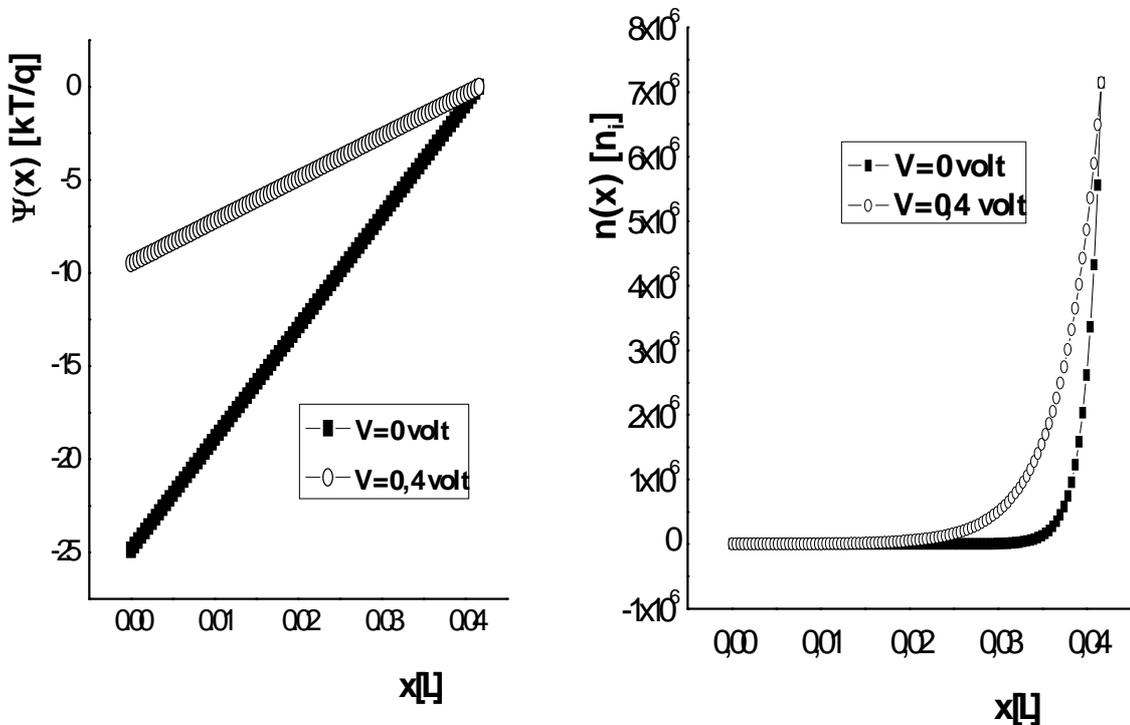


Fig.3.3.a: profil du potentiel et de densité des porteurs de charges à l'équilibre thermodynamique et sous polarisation directe (semi-conducteur de type N).

Pour un semi-conducteur de type P, les électrons passent du métal dans le semi-conducteur. Les électrons qui viennent du métal se recombinent avec les trous créant une zone de déplétion due à la présence des ions accepteurs qui ne sont plus compensés par les trous.

Polarisons la structure, la tension de polarisation se localise au niveau de la zone de déplétion. Si la tension de polarisation est négative, la courbure des bandes augmente, la barrière de potentiel est augmentée. En polarisation directe, les bandes sont abaissées et la barrière de potentiel est réduite.

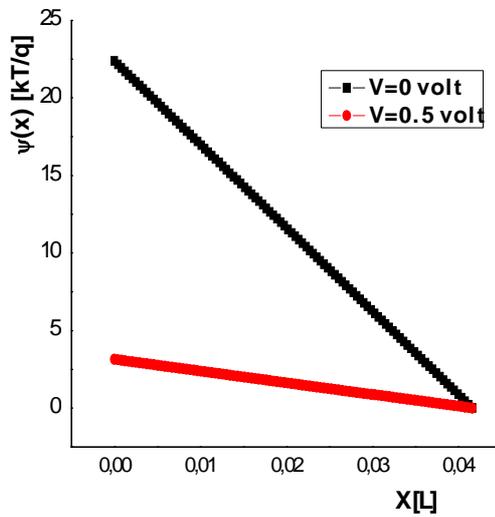


Fig.3.3.b: profil du potentiel à l'équilibre thermodynamique et sous polarisation directe, (semi-conducteur de type P).

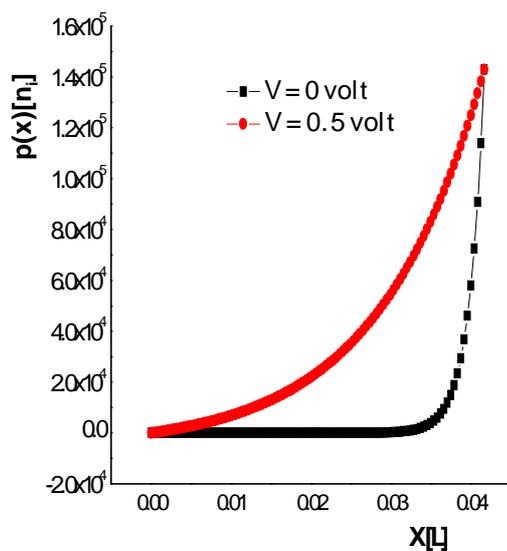


Fig.3.3.c: densité des porteurs de charges $n(x)$ à l'équilibre thermodynamique et sous polarisation directe, (semi-conducteur de type P).

3.1.1.3. Densité du courant

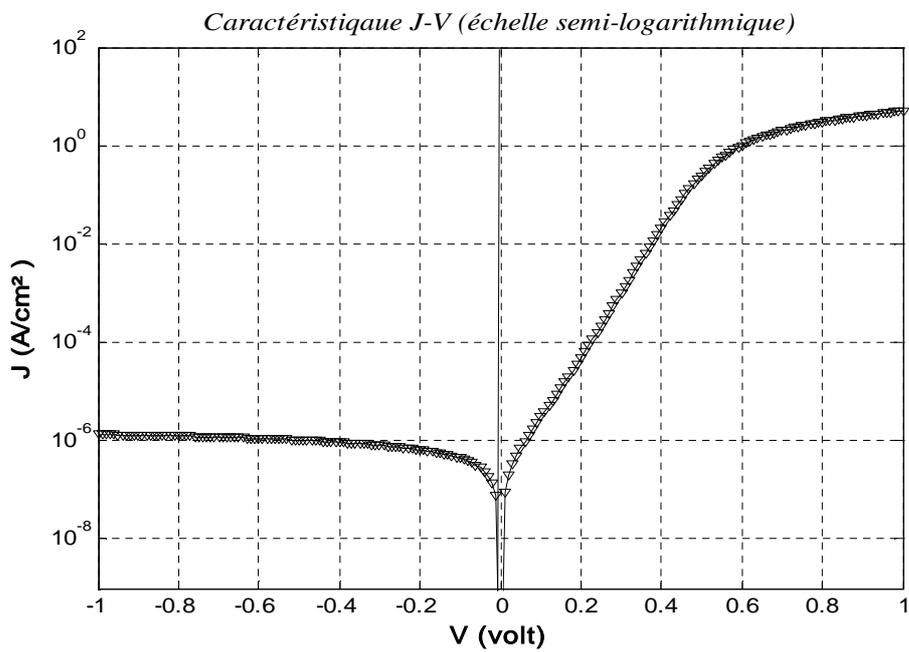
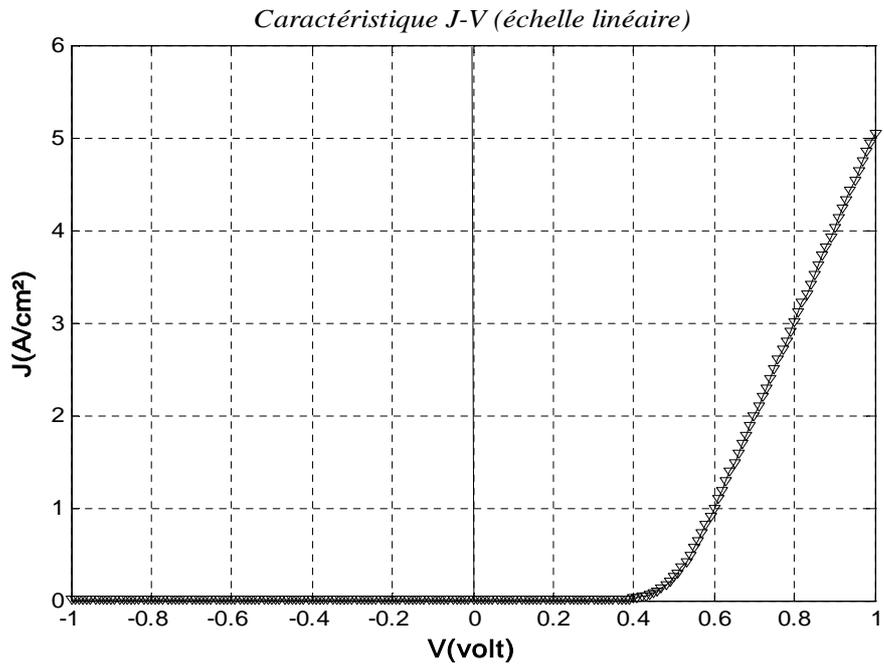


Fig.3.4.a : Caractéristique $J-V$ pour un structure Schottky idéal Al/p-Si (résultat numérique), (a). échelle linéaire, (b). Échelle semi-logarithmique.

Après avoir trouvé les variables $n(x)$, $p(x)$ et $\psi(x)$, on peut calculer la caractéristique $J - V$. L'allure de la densité du courant est représentée dans la figure (3.4).

Le courant dans les structure Schottky est essentiellement dû à aux porteurs majoritaires, il est alors transporté par les électrons dans le cas d'une structure de type N et par les trous dans le cas d'une structure de type P.

En polarisation directe, la densité de courant augmente exponentiellement avec la tension appliquée à l'échelle linéaire comme le montre la figure.3.4.a. à l'échelle semi-logarithmique, cette caractéristique a une allure linéaire pour les basses tensions (fig.3.4.b) mais dévie considérablement de la linéarité due à l'effet de la résistance série, quand la tension appliquée est suffisamment grande. Ceci est expliqué par le fait qu'aucune couche vide de porteurs n'existe à l'interface et quand l'on polarise cette structure, la tension appliquée n'est pas localisée dans la zone de charge d'espace, mais distribuée dans tout le semi-conducteur. A l'interface, l'arrivée, ou le départ, d'un trou dans le semi-conducteur est immédiatement compensée par l'arrivée, ou le départ, d'un électron dans le métal. Il en résulte que le courant circule librement dans les deux sens au niveau du contact. Donc le contact est résistive.

Par ailleurs, la densité du courant se sature en polarisation inverse comme le montre la figure.3.4.b.

La figure.3.4.c présente les caractéristiques expérimentales $J - V$ en polarisation directe et inverse avec un facteur d'idéalité $n = 1.88$.

Pour une structure Schottky idéal, $n = 1$, mais en réalité n est toujours supérieur à 1. Cette déviation du cas idéal est dû en fait à :

- l'effet de la présence d'une couche interfaciale d'isolant.
- L'effet des états de surface.
- L'effet de passage des porteurs par effet tunnel.

Les résultats numériques s'approche des résultats expérimentaux comme le montre les figures.3.4.b et 3.4.c.

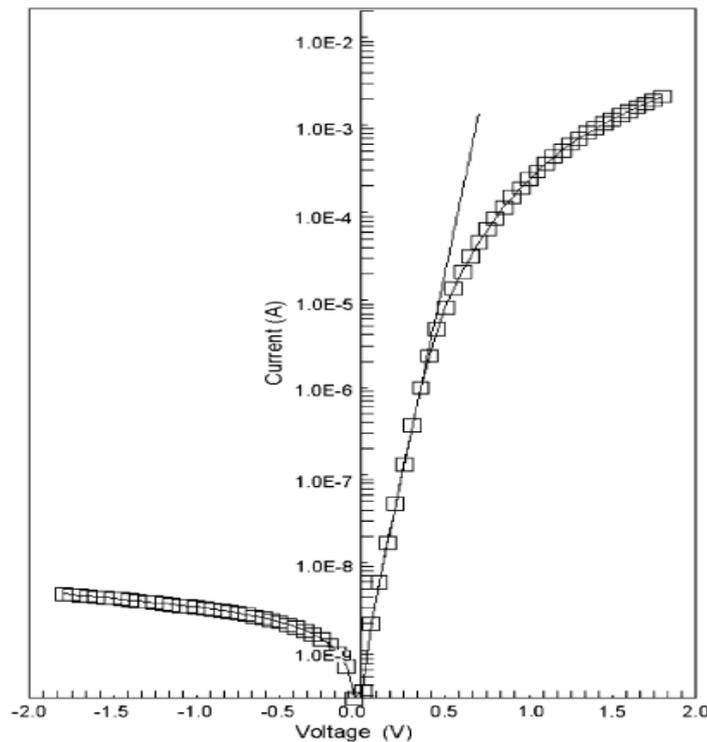


Fig.3.4.c : Caractéristique J-V expérimental pour un structure Schottky Al / p-Si avec une couche interfaciale d'isolant [Aydin 30].

Pour étudier les caractéristiques J – V on va considérer les effets suivants :

- L'effet de changement de travail de sortie
- L'effet de changement de la concentration de dopage.

3.1.1.3.1. Effet de changement de travail de sortie :

La configuration d'un contact Schottky, son exécution et fiabilité est rigoureusement déterminée par la qualité d'interface entre le métal déposé et la surface de semi-conducteur.

Une variation de la caractéristique courant-tension avec le travail de sortie du métal pour un semi-conducteur de type N est représentée dans la figure (3.5), on peut observer que les courbes représentant les variations de J – V avec les différentes valeurs de ϕ_m se répartissent en deux régions :

- Pour $\phi_m > 4.3$ eV, le contact est redresseur pour les basses tensions positives et les tensions de polarisation inverse, le semi-conducteur est en régime de déplétion ou d'inversion ($\phi_m > 4.8$). le courant a une allure caractéristique des diodes conventionnelle. Pour les grandes valeurs de tension de polarisation directe, le contact est ohmique.
- Pour $\phi_m < 4.3$ eV, on voit que le courant change complètement d'allure, il devient ohmique. Le potentiel diminue avec la diminution de ϕ_m et la concentration des électrons augmente à la surface.

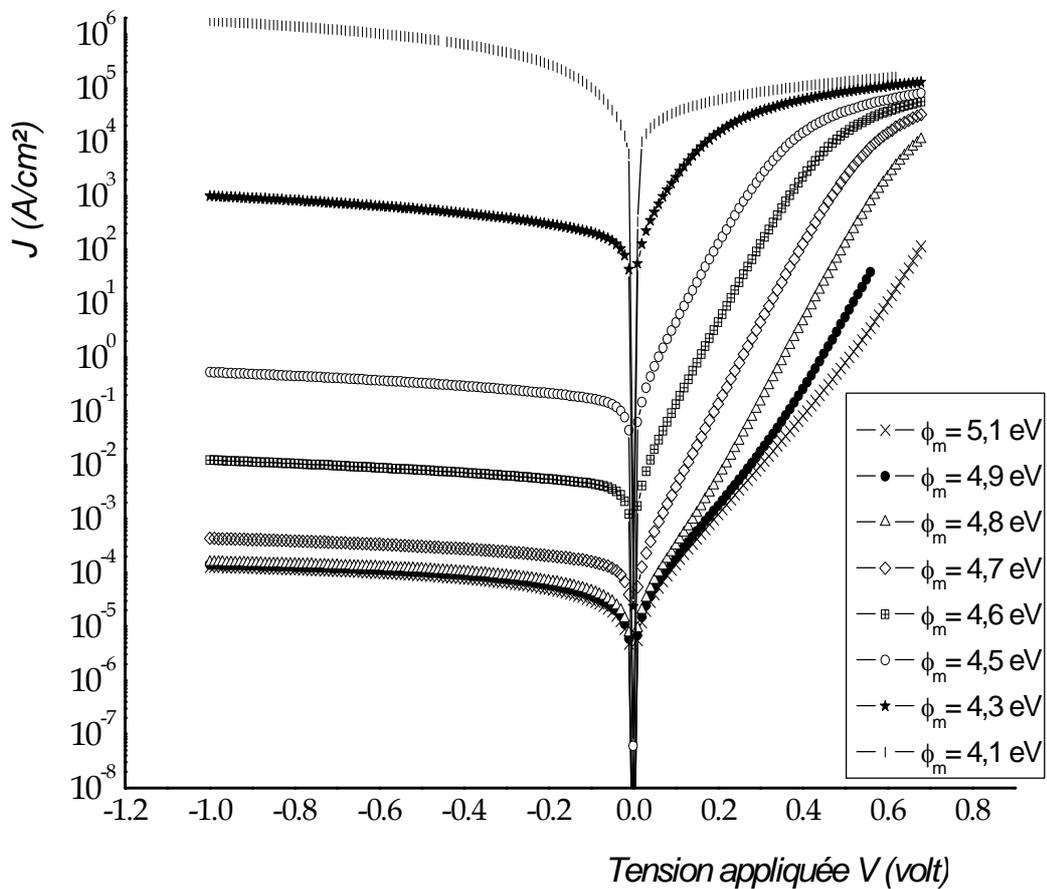


fig.3.5: caractéristique $J - V$ pour différents travaux de sortie du métal (semi-conducteur de type N). $N_D = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$

On constate aussi que pour les grandes valeurs de ϕ_m , le courant est faible car dans cette intervalle, la surface du semi-conducteur est en régime d'inversion.

Dans le cas d'un semi-conducteur de type P, on peut remarquer que le contact est redresseur dans la région où $\phi_m < 4.8 \text{ eV}$ pour les basses tensions positives et les tensions de polarisation inverse, et ohmique dans la région où $\phi_m > 4.8 \text{ eV}$ comme le montre la figure.3.6.

Les barrières de potentiel pour des structures Schottky de type P est généralement moins élevées que pour des structures de type N. la variation de la caractéristique $J - V$ par rapport à celle du travail de sortie du métal pour un semi-conducteur de type P ressemble à celle de type N. Ceci se trouve confirmé par le fait que, pour un métal donné, la somme des hauteurs des barrières sur du silicium du type N et du type P égale approximativement la largeur de la bande interdite.

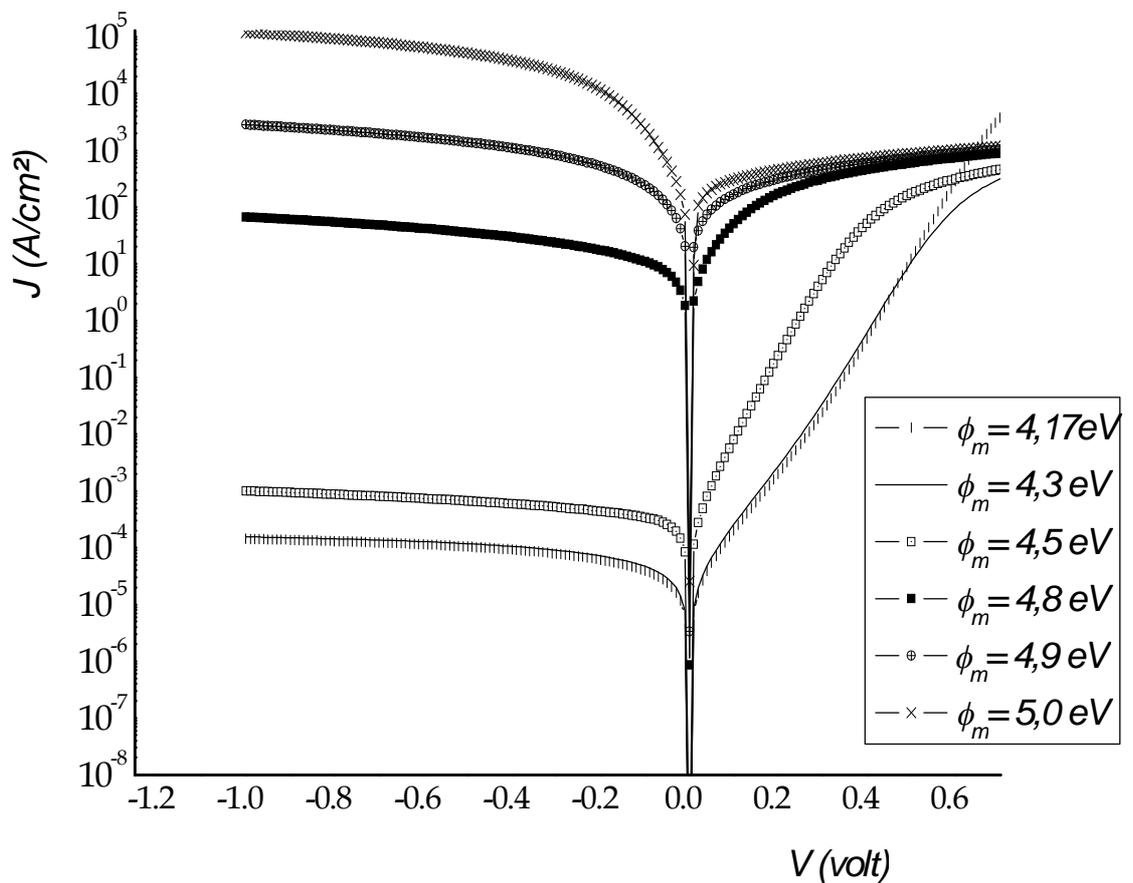


fig.3.6: caractéristique $J - V$ pour différents travaux de sortie du métal (semi-conducteur de type P), $N_A = 2.10^{15} \text{ cm}^{-3}$

3.1.1.3.1. Effet de changement de concentration de dopage :

Pour observer l'effet de la concentration du dopage sur le comportement électrique de la structure Schottky, nous avons tracé les caractéristiques $J-V$ en fonction des concentrations du dopage dans la gamme de 10^{13} - 10^{18} cm^{-3} . La figure.3.7 représente la variation de cette caractéristique $J - V$ par rapport à celle de la concentration de dopage pour des semi-conducteurs de type P et de type N.

Nous avons défini le potentiel de diffusion V_D de la diode Schottky, la tension sous laquelle la densité du courant augmente exponentiellement. Selon la figure.3.7, on peut voir que le potentiel de diffusion augmente quand la concentration des impuretés augmente.

La densité du courant à l'échelle semi logarithmique montre un contact ohmique pour des grandes valeurs de tensions positives pour des concentrations du dopage inférieure ou égale à 10^{18} cm^{-3} .

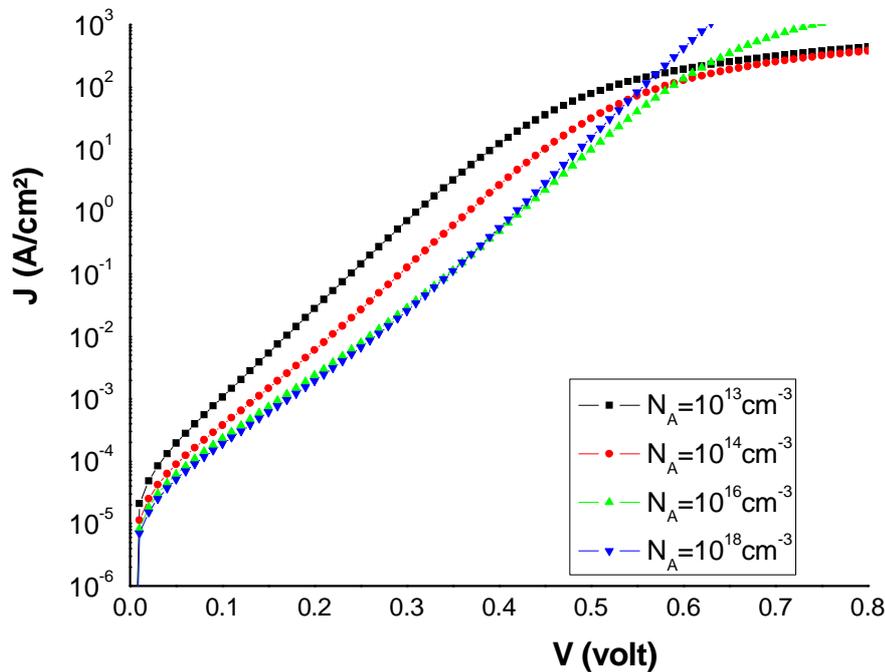


fig.3.7.a: caractéristique $J-V$ pour différents concentrations de dopage (semi-conducteur de type P). $\phi_m=4.3$ eV

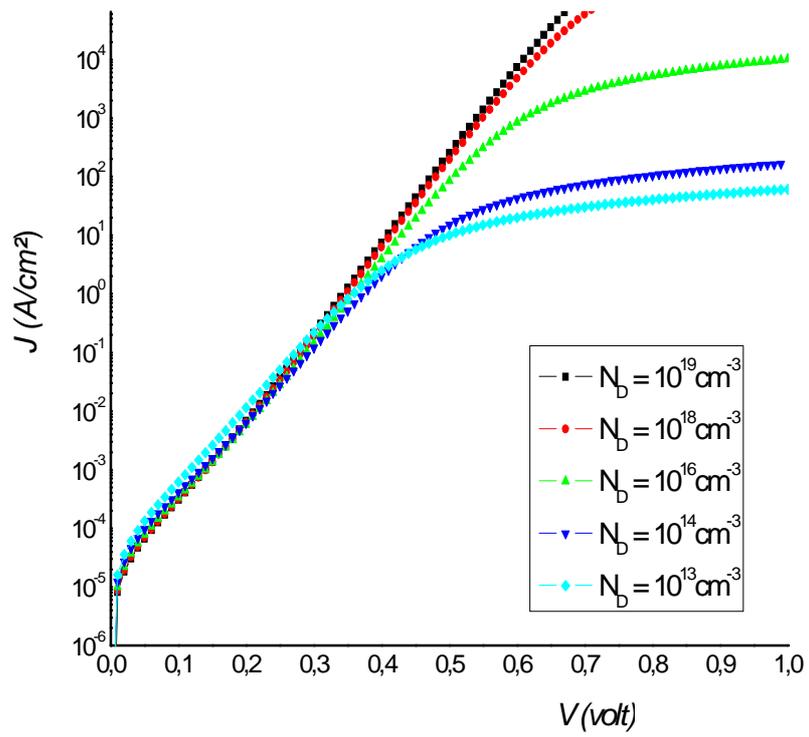


fig.3.7.b: caractéristique J - V pour différents concentrations de dopage (semi-conducteur de type P). $\phi_m = 4.3 eV$

3.1.2. Structure Schottky réel (structure MOS):

3.1.2.1. Résolution numérique du système d'équation :

Les figures (3.8) et (3.9) présente respectivement la densité des électrons $n(x)$ et le profil du potentiel $\psi(x)$ dans une structure métal/oxyde/semi-conducteur de type P dans le cas de silicium avec $N_A = 2.10^{15} \text{ cm}^{-3}$, $D_i = 2.10^{-7} \text{ cm}$ et une tension de polarisation $V = 0.5 \text{ volt}$.

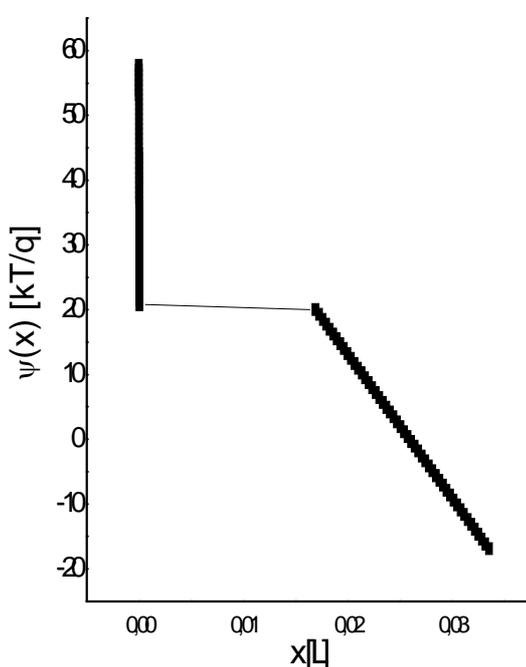


fig.3.8 : profil du potentiel $\psi(x)$ pour un semi-conducteur de type P. $N_A = 2.10^{15} \text{ cm}^{-3}$, $D_i = 2.10^{-7} \text{ cm}$

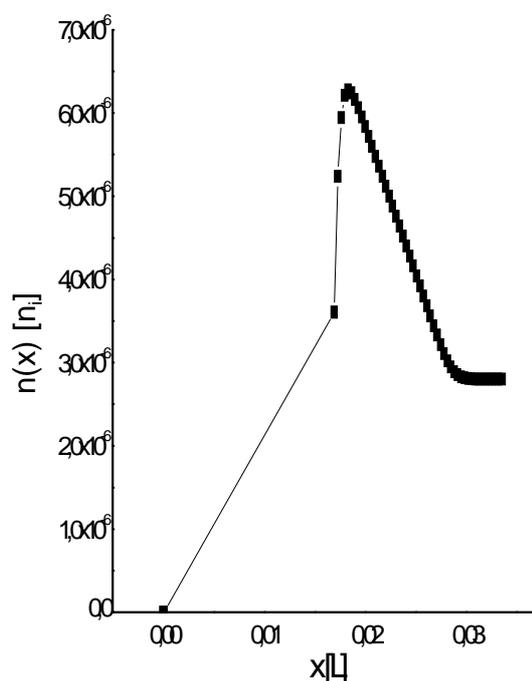


fig.3.9 : concentration des électrons $n(x)$ pour un semi-conducteur de type P. $N_A = 2.10^{15} \text{ cm}^{-3}$, $D_i = 2.10^{-7} \text{ cm}$.

3.1.2.2. Etudes des propriétés électriques des structures MOS

À l'aide de l'algorithme décrit au chapitre précédemment, les valeurs des potentiels de surface peuvent être déterminées pour différentes valeurs de V .

La figure (3.11) présente l'évolution des potentiels de surface ψ_s du semi-conducteur en fonction de la tension appliquée. Il apparaît un comportement dépendant du régime de fonctionnement :

- en régime de déplétion, le potentiel de surface augmente d'une manière importante avec la tension appliquée.
- En d'autres régimes, le potentiel de surface varie légèrement avec la tension appliquée.

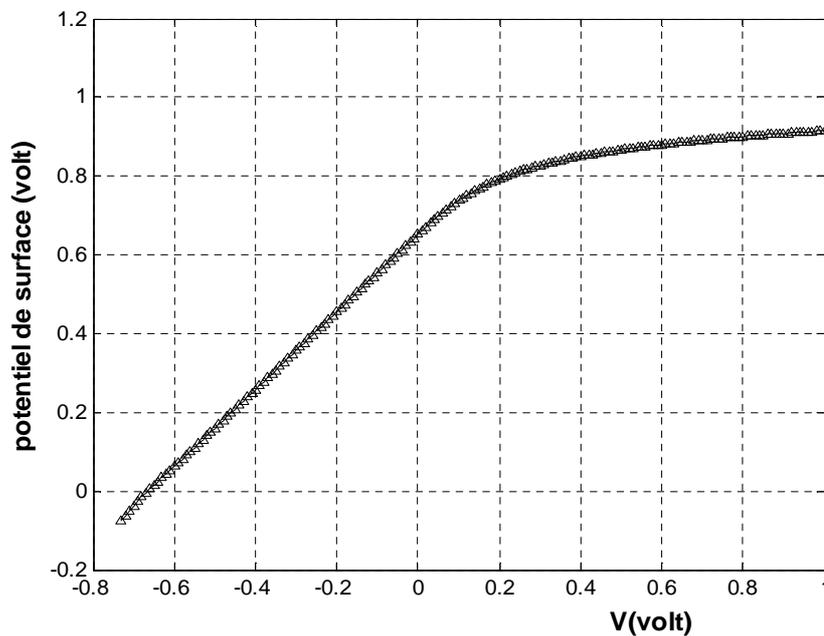


Fig.3.11 : potentiel de surface en fonction de tension de polarisation pour semi-conducteur de type P (Si), $\phi_m = 4.17 \text{ eV}$, $D_i = 2 \text{ nm}$, $N_A = 2.10^{15} \text{ cm}^{-3}$, $N_s = 5.10^{11} \text{ eV}^{-1} \text{ cm}^{-2}$.

La courbe représentant la variation de $|Q_{sc}|$ en fonction du potentiel de surface ψ_s est représentée sur la figure (3.12) dans le cas de silicium de type P avec $N_A = 2.10^{15} \text{ cm}^{-3}$ à une température ambiante. On observe les différents régime de fonctionnement, pour une valeur négative de ψ_s , la charge d'espace présente une variation exponentielle correspondante à une régime d'accumulation ($Q_s \approx \exp(q|\psi_s|/2kT)$), en régime de

déplétion et de faible inversion Q_s varie en $\sqrt{\psi_s}$, et à nouveau varie exponentiellement en régime de forte inversion ($Q_s \approx \exp(q\psi_s / 2kT)$).

En régime de faible inversion, la charge d'espace est conditionnée par les charges de déplétion car les charges d'inversion sont en quantité négligeable devant la densité d'ions accepteurs. En régime de forte inversion au contraire, la charge d'espace est conditionnée par les électrons dont la densité en surface est plus grande que celle des accepteurs.

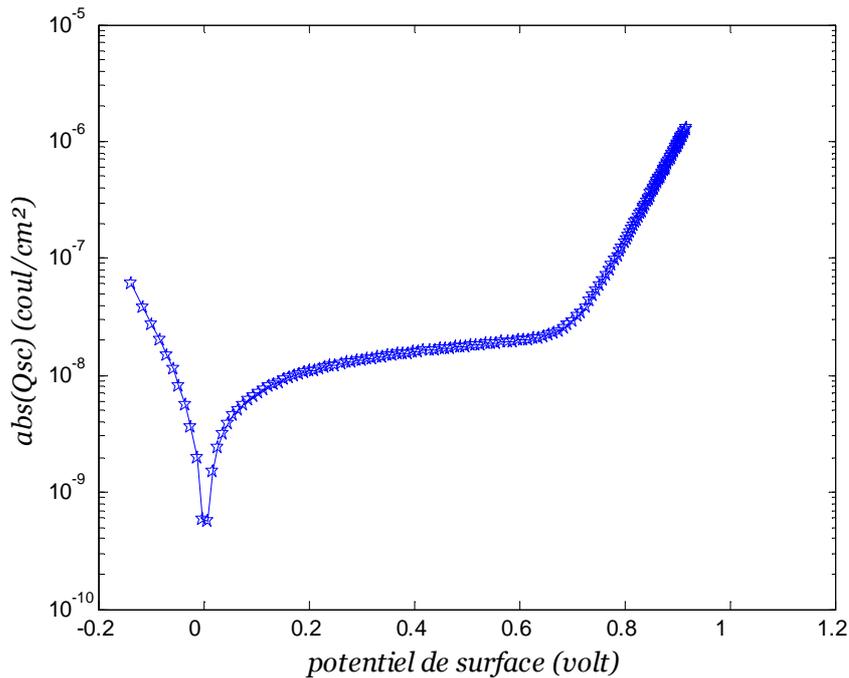


Fig.3.12 : Charge d'espace dans le semi-conducteur en fonction du potentiel de surface ψ_s pour silicium de type P, $\phi_m = 4.17$ eV, $D_i = 2$ nm, $N_A = 2 \cdot 10^{15}$ cm⁻³, $N_s = 5 \cdot 10^{11}$ eV⁻¹cm⁻².

Nous avons tracé suivant le même organigramme présenté dans la section précédente, la chute de potentiel V_i et le champ E_i dans la couche d'oxyde en fonction de la tension de polarisation V (figure.3.13). Il apparaît un comportement dépendant du régime de fonctionnement :

- en régime de déplétion, la chute du potentiel V_i et le champ dans la couche d'oxyde ne varie pratiquement pas avec la tension de polarisation V .

- en autres régimes, la chute du potentiel et le champ dans la couche d'oxyde varie linéairement avec la tension appliquée V .

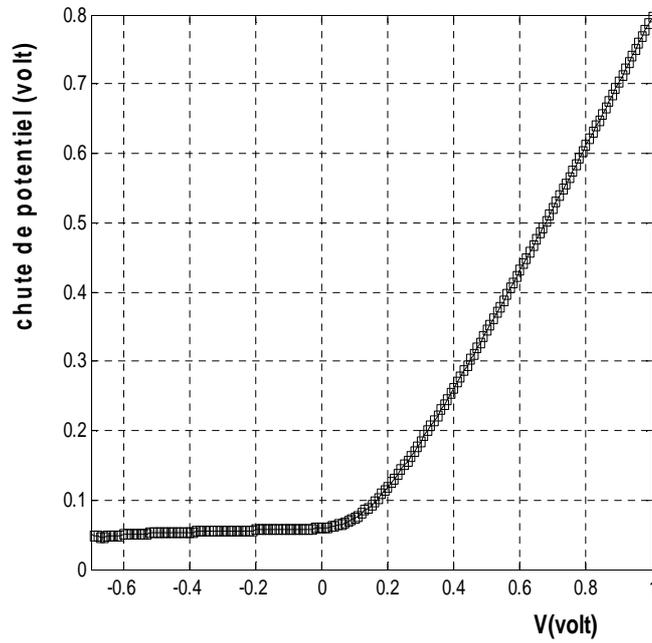


Fig.3.13 : Potentiel supporté par la couche d'oxyde en fonction de tension de polarisation, $\phi_m = 4.17\text{eV}$, $D_i = 2\text{nm}$, $N_A = 2 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-3}$, $N_s = 5 \cdot 10^{11} \text{ eV}^{-1} \text{ cm}^{-2}$

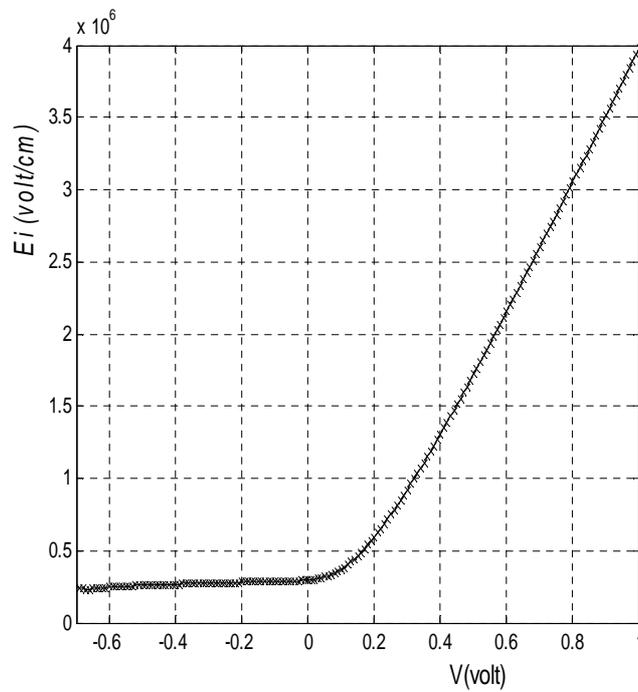


Fig.3.14 : champ dans la couche d'oxyde en fonction de tension de polarisation, $\phi_m = 4.17\text{eV}$, $D_i = 2\text{nm}$, $N_A = 2 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-3}$, $N_s = 5 \cdot 10^{11} \text{ eV}^{-1} \text{ cm}^{-2}$

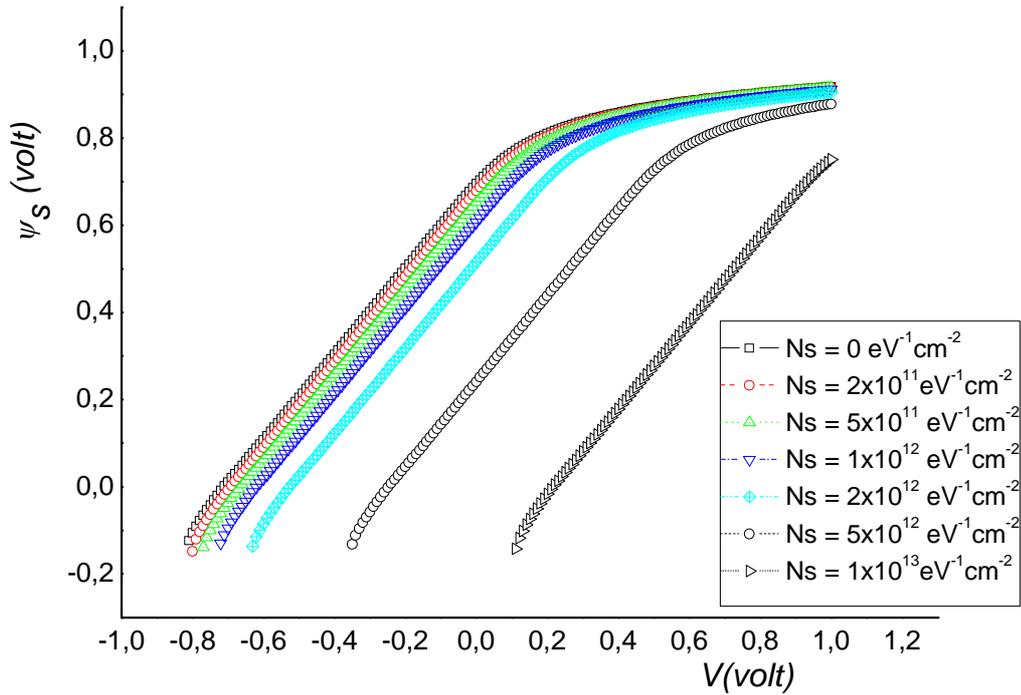


Fig.3.15 : variation de potentiel de surface en fonction des états de surface.

$$\phi_m = 4.17 \text{ eV}, D_i = 2 \text{ nm}, N_A = 2 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-3}.$$

La figure (3.15) montre la variation du potentiel de surface en fonction de la tension appliquée pour différentes valeurs de densité d'états de surface N_s . On peut observer l'existence de deux régions ($N_s < 10^{12} \text{ eV}^{-1} \text{ cm}^{-2}$ et $N_s > 10^{12} \text{ eV}^{-1} \text{ cm}^{-2}$).

La sensibilité à la densité de ces états se manifeste qu'à partir de l'état critique qui est de l'ordre de $10^{12} \text{ eV}^{-1} \text{ cm}^{-2}$.

Il est évident que la courbure des bandes diminue avec l'augmentation de la densité des états de surface, ceci conduit à une augmentation de la chute de tension à travers la couche d'oxyde.

La diminution de potentiel de surface est dû au fait que les états de surface piègent des porteurs libres et par conséquent modifient les populations des bandes permises. Il en résulte qu'au voisinage de la surface, les bandes se courbent vers le bas ou le haut suivant que la population électronique augmente ou diminue.

Pour des densités faibles des états de surface, il en résulte que ces états, sont saturés sans trop affecter la densité de porteurs majoritaires et le semi-conducteur présente une légère courbure de bandes.

La figure.3.16 présente l'influence de l'épaisseur d'oxyde D_i sur le potentiel de surface ψ_s , il apparaît que le potentiel de surface varie légèrement avec la variation de l'épaisseur d'oxyde.

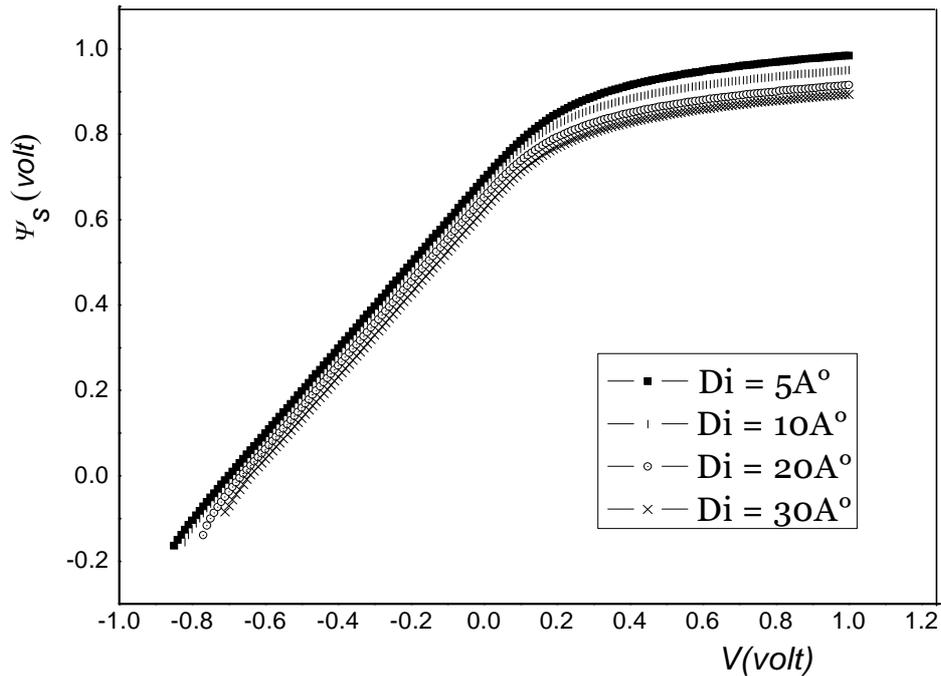


Fig.3.16 : variation de potentiel de surface en fonction de différentes valeurs d'épaisseur d'oxyde. $\phi_m=4.17\text{eV}$, $N_A=2. 10^{15} \text{ cm}^{-3}$, $N_s = 5.10^{11} \text{ eV}^{-1}\text{cm}^{-2}$

3.1.2.3. La densité du courant tunnel :

La figure (3.17) montre la caractéristique $J-V$ pour différentes valeurs d'épaisseur d'oxyde D_i . Il apparaît que la densité du courant augmente avec la tension appliquée et avec la diminution de l'épaisseur de l'oxyde.

L'épaisseur de la couche d'isolant est un paramètre très important qui peut affecté la caractéristique électrique $J-V$ des contacts M/S, c'est parce que le courant est limité par

la probabilité de transmission, Eq.2.52, qui varie exponentiellement avec l'épaisseur d'isolant.

Pour des grandes valeurs de D_i , la probabilité de transmission est très faible, le courant est en effet négligeable, si l'isolant est très mince, peu d'empêchement est fourni au transport de porteurs entre le métal et le semi-conducteur, et la structure représente la diode à barrière Schottky. Pour un dispositif avec d'épaisseur intermédiaire de la couche isolante, la structure représente la diode tunnel MIS.

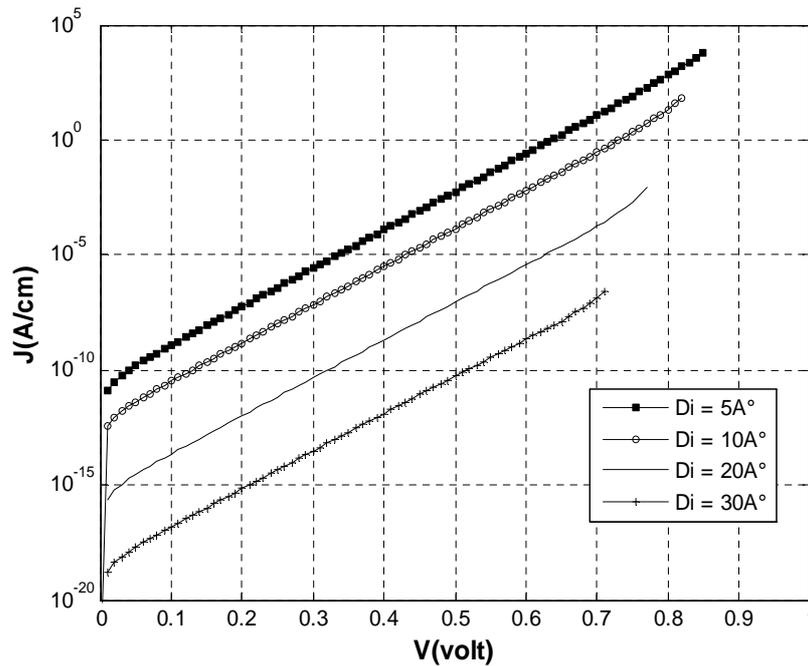


fig.3.17 : l'influence de l'épaisseur d'oxyde sur les caractéristiques J-V, $\phi_m = 4.17 eV$, $N_A = 2 \cdot 10^{15} cm^{-3}$, $N_s = 5 \cdot 10^{11} eV^{-1} cm^{-2}$

Sur la figure 3.18 est représenté l'influence de la densité des états de surface sur les caractéristiques courant-tension. Il apparaît que l'influence de ces états n'est significative qu'à partir d'une densité critique qui est de l'ordre de $10^{12} eV^{-1} cm^{-2}$.

En augmentant la densité d'états de surface, la concentration des porteurs majoritaires augmente et le potentiel de surface diminue (fig 3.15), il en résulte que le courant augmente

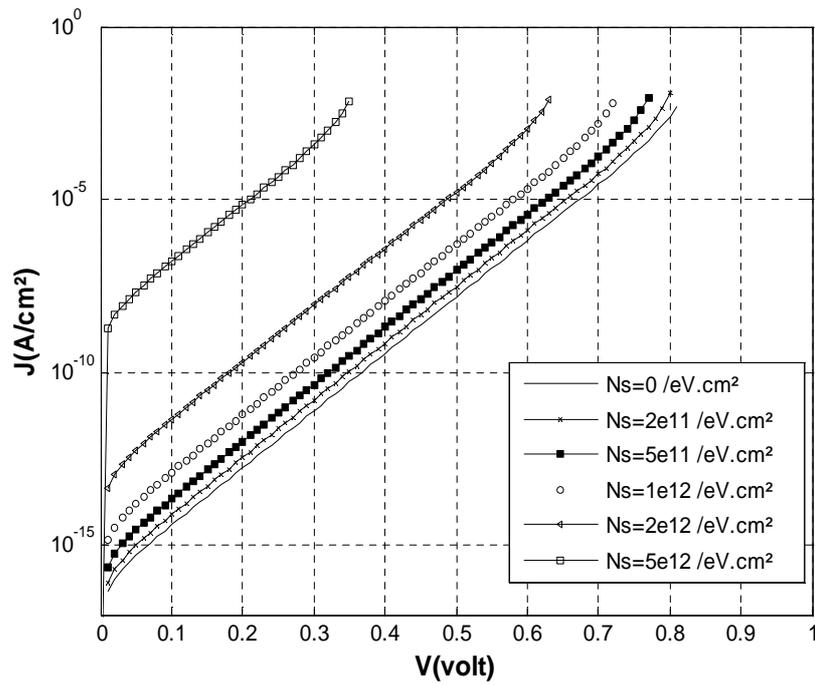


fig.3.18 : l'influence de la densité des états de surface sur la caractéristique $J - V$,
 $\phi_m = 4.17 \text{ eV}$, $N_A = 2 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-3}$, $N_s = 5 \cdot 10^{11} \text{ eV}^{-1} \text{ cm}^{-2}$.

Conclusion

Conclusion

Les caractéristiques densité de courant – tension d’une structure Schottky, ont été étudiées. Cette étude qui est constituée l’essentiel de notre travail s’est appuyée sur la résolution numérique simultanée des équations régissant les phénomènes de transport dans les semi-conducteurs (équations de continuité et équation de Poisson). En particulier, une normalisation de ces équations a été mise en œuvre pour garantir la stabilité numérique de l’algorithme de résolution.

La résolution du problème permet de connaître la concentration des porteurs de charge libre et le potentiel électrique pour la structure Schottky considérée. Ceci permet par la suite, de remonter aux caractéristiques courant – tension.

Pour un contact Schottky idéal, on a vu comment varient le potentiel et les concentrations des porteurs pour différents types de polarisation. En polarisation directe, la courbure des bandes diminue et la hauteur de la barrière de potentiel que doivent franchir les porteurs est réduite, tandis que en polarisation inverse la hauteur de la barrière de potentiel est augmentée.

On a vu encore l’allure de la densité de courant, elle a une allure linéaire à l’échelle semi-logarithmique en polarisation directe et elle se sature en polarisation inverse.

La caractéristique densité de courant – tension ($J-V$) est étudiée en fonction du travail de sortie et en fonction de la concentration du dopage. L’augmentation de ϕ_m , pour un semi-conducteur de type P fait éloigner la densité du courant de son allure linéaire caractéristique des contacts redresseurs vers une allure conventionnelle caractéristique des contacts ohmiques.

Pour un contact Schottky réel, on a établi les équations de base régissant le fonctionnement électrique des structures MOS. On a analysé en fonction de la tension V appliquée les résultats de simulation numériques des grandeurs électriques à l’interface oxyde/semi-conducteur (potentiel de surface ψ_s , champ E_i et potentiel V_i). A partir des résultats obtenus on a défini le régime de fonctionnement de la structure dans le cas d’un semi-conducteur de type P.

Concernant l'étude de l'effet tunnel, on a étudié l'influence de la densité des états de surface et de l'épaisseur sur les caractéristiques courant – tension. On a montré que la densité des états de surface n'est significative qu'à partir d'une charge critique.

Bibliographie

- [1] A. Aziz, thèse de doctorat, Université Toulouse III- Paul Sabatier, 2006.
- [2] A. Bouazra, S. Abdi-Ben Nasrallah, A. Poncet, M. Said, *Materials Science in Semiconductor Processing* 9 (2006) 989–994.
- [3] A. Boudissa, Z. Benamara, M. Amrani, B. Gruzza, *Materials Science and Engineering B86* (2001) 219–224
- [4] Anand L. Pardhanani, Graham F. Carey, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* 181 (2000) 365-379.
- [5] A.M.Cowley and S.M.Sze, *J. App. Phys.*, Vol. 36, p. 3212, (1965).
- [6] A. Y. C. Yu and C. A. Mead, *Solid-State Electronics Pergamon Press* 1970. Vol. 13, pp. 97-104.
- [7] B. Akkal , Z. Benamara , B. Gruzza, L. Bideux, N. Bachir Bouiadjra, *Materials Science and Engineering C 21* (2002) 291–296.
- [8] B. L. Smith and E. H. Rhoderick, *Solid-State Electronics Pergamon Press* 197 I. Vol. 14, pp. 71-75.
- [9] C. Berthod, Thèse de doctorat, Ecole polytechnique fédérale de Lausanne, 1998.
- [10] C.de Falco, Thèse de doctorat, Université Degli Studi di Milano, 2006.
- [11] C.K. Tan , A. Abdul Aziz, F.K. Yam, *Applied Surface Science* 252 (2006) 5930–5935
- [12] C. R. Crowell and V. L. Rideout, *Solid-State Electronics Pergamon Press* 1969. Vol. 12, pp. 89-105.
- [13] C. R. Crowell, *Solid-State Electronics Pergamon Press* 1969. Vol. 12, pp. 55-59.
- [14] C. R. Crowell, *Solid-State Electronics Pergamon Press* 1965. Vol. 8, pp. 395-399.
- [15] D.Donaval, V.Drobny and M.Luza, *Solid-State Electronics*, Vol. 42, No. 2, pp. 235-241, 1998.
- [16] D.V.Morgan and J.Frey, *Solid-State Electronics*.Vol. 16, pp. 865-373 (1980).
- [17] F. A. Padovani and R. Stratton, *Solid-State Electronics Pergamon Press* 1966. Vol. 9, pp. 695-707.

- [18] Hl. C. Card and E. H. Rhoderick, *Solid-State Electronics*, 1973, Vol. 16, pp. 365-374.
- [19] Helmut H. Heimeier, *IEEE Transactions on Electron Devices*, Vol. ED-20, NO.8, 1973.
- [20] Henry Mathieu, *Physique des semiconducteurs et des composants électroniques*, 5^e édition, Dunod, 2004
- [21] H. Kanbur, Ş. Altındal , A. Tataroğlu, *Applied Surface Science* 252 (2005) 1732–1738.
- [22] H. K. Gummel, *IEEE Trans. Electron Device*, Vol. ED-11, pp. 455-465,1964.
- [23] J. M. Andrews and M. P. Lepselter, *Solid-State Electronics Pergamon Press* 1970. Vol. 13, pp. 1011-1023.
- [24] J. M. Palau and M. Dumas, *Thin Solid Films*, 191 (1990) 21-30
- [25] J. Osvald, *Solid State Communications* 138 (2006) 39–42.
- [26] J.T. LUE, *Solid-State Electronics*, 1980. Vol.23. pp. 263-268.
- [27] L. B. Freeman and W. E. Dahlke, *Solid-State Electronics Pergamon Press* 1970. Vol. 13, pp. 1483-1503.
- [28] M. A. Green and J. Siibwciun, *Solid-State Electronics*, 1973. Vol.16. pp. 1141-1150.
- [29] M.Depas, B.Vermeire, P.W.Mertens, R. L. Van Meirhaeghe and M.M.Heyns, *Solid-State Electronics*. Vol. 38, No. 8, pp. 1465-1471,1995.
- [30] M.E. Aydin, F. Yakuphanoglu, J-H. Eom, D.H.Hwang, *Physica B* 387 (2007) 239–244.
- [31] M. J. Turner and E. H. Rhodbrick, *Solid-State Electronics Pergamon Press* 1968. Vol. 11, pp. 291-300.
- [32] N.Benarab, Thèse de magistère, Université Houari Boumediene (U.S.T.H.B), 19
- [33] O. Bonnaud , *Composants à semiconducteur*, Ellipses, 2006
- [34] R. ASSILA, Thèse de doctorat, Université de Laval, 1997.
- [35] R. G. DeCorby, Thèse de doctorat, Université Alberta, Canada, 1998.
- [36] R.T.Tung, *Mater. Sci. Eng.*235 (2001) 1.

- [37] S. Bernardini, Thèse de doctorat, Université D'aix-Marseille I, 2004.
- [38] S. Bernardini, P. Masson, M. Houssa, *Microelectronic Engineering* 72 (2004) 90–95
- [39] S. J. Woods, S. P. Wilson and Alison B. Walker, *Int. J. Numer. Model.*13, 37-57 (2000).
- [40] Ş. Karatas, A. Türüt, *Physica B* 381 (2006) 199–203.
- [41] Ş. Karatas , *Solid State Communications* 135 (2005) 500–504.
- [42] S.M.Sze , *Physique of semiconductor devices*, 2nd ed., John Wiley & Sons , New York, 1981.
- [43] V. L. Rideout and C. R. Crowell, *Solid-State Electronics Pergamon Press* 1970. Vol. 13, pp. 993-1009.
- [44] V. Romano, *Journal of Computational Physics* 221 (2007) 439–468.
- [45] W.I.Khan , A..Y.M.AL-Qenaie and M.Ishaque, *Solid-State Electronics*.Vol. 42, No. 3, pp. 385-388, 1998.
- [46] W. Mönch, *Electronic Properties of Semiconductor Interfaces*, Edition Springer, Berlin, 2001.
- [47] W.Shockley and W.T.Read, JR, *Phys. Rev.* Vol. 87, N°.5 (1952).
- [48] W. Schottky and E. Spenke, *Wiss, Verrof, Simmens Werke*, Vol. 18, Ed. 67, (1932).
- [49] Z. pang, Thèse de doctorat, Université McMaster, 1997.
- [50] S. O. Kasap, *principle of electronic engineering materials and devices*, McGraw-Hill, 1997.

Résumé :

La technologie des dispositifs électroniques à semi-conducteurs repose en grande partie sur des jonctions métal/semi-conducteur. Ce travail consiste alors à caractériser la jonction Schottky et étudier les différentes propriétés électroniques de la structure.

Une bonne caractérisation d'une structure Schottky passe nécessairement par la modélisation de ses propriétés électriques. Cette modélisation nécessite alors la résolution des équations qui décrivent le comportement électrique des semi-conducteurs. La résolution permet de déterminer les distributions des porteurs de charges et du potentiel électrique au sein du matériau, pour remonter par la suite à la caractéristique électrique $J-V$, et d'étudier les effets de quelques paramètres sur cette caractéristique, à savoir le travail de sortie du métal, la concentration de dopage du substrat semi-conducteur, la densité des états d'interface et l'épaisseur de l'interface.