



REPUBLICUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE  
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique  
*UNIVERSITE FARHAT ABAS-SETIF*

## THESE

Présentée à la Faculté des Sciences  
Département de Physique  
POUR L'OBTENTION DU DIPLOME DE  
DOCTORAT EN SCIENCES  
Option : PHYSIQUE DU SOLIDE

Par  
**Latreche abdelhakim**

Thème

# NON-HOMOGENÉITÉS DANS LES STRUCTURES MÉTAL/SEMICONDUCTEURS

Soutenue publiquement le : 04/07/ 2012

Devant la commission d'examen

<b>Président :</b>	Z. Chaoui	Professeur	Université de Sétif
<b>Rapporteur :</b>	Z. Ouennoughi	Professeur	Université de Sétif
<b>Examineurs :</b>	A. Chari	Professeur	Université de Constantine
	F. Bouttout	Professeur	Université de B. B. Arreridj
<b>Invité :</b>	A. SELLAÏ	M. Conférences	Université du S. Q. Oman

---

# REMERCIEMENTS

Mes plus chaleureux remerciements et toute ma reconnaissance vont à Zahir Ouenoughi professeur au département de Physique, Université Ferhat abbas de Sétif, pour m'avoir accueilli, orienté et encadré pendant ces années. Sa rigueur, sa persévérance, ses connaissances scientifiques et son enthousiasme ont largement contribué à la réussite de ce travail.

Je remercie vivement Monsieur Z. Chaoui, professeur au département de Physique Université Ferhat abbas de Sétif, pour l'honneur qu'il m'a fait en acceptant de présider le jury de mémoire.

Je suis très sensible à l'honneur que me feront Mr : A. Chari, professeur à l'Université Mentouri de Constantine et Mr : F. Bouttout, professeur à l' Université El-bachir El-ibrahimi de Bordj Bou Arreridj pour avoir accepté de juger ce travail, je leur exprime ma profonde reconnaissance.

J'adresse également mes sincères remerciement à notre invité Mr : A. Sellai, Maître de conférences à l'Université Sultan Qaboos d' Oman pour ses aides, notamment durant la rédaction de l'article.

Mes remerciements vont également à Mon Cousin Ahcen pour ses aides, notamment la correction des fautes de langue.

Je ne saurais oublier mes collègues : T. Salhi, S. Daoued, N. Belcassam, M. Berrehail, N. Labgaa, A. Benchikh, N. Benchiheb, enseignants à l'Université de Bordj Bou Arreridj.

Enfin je remercie infiniment ma femme, ma famille qui m'a toujours aidée et encouragée pour poursuivre mes travaux.

---

# DÉDICACE

A mes très chers parents.  
A ma femme et mes enfants.  
A mes frères et Soeurs.  
A toute ma famille.  
A tous mes amis et mes collègues.  
Je dédie ce travail.  
A. Latreche

---

# LISTE DES TABLEAUX

I.1	Quelques propriétés physiques des principaux polytypes de SiC, comparaison avec celles du Ge, Si, GaAs, GaN et du Diamant. . . . .	31
I.2	Quelques hauteurs de barrière pour Métal/4H-SiC mesurées à la température 300 K [44, 51]. . . . .	33
I.3	Quelques paramètres extraits à partir des contacts Schottky(Métal/4H-SiC) en utilisant le modèle inhomogène. . . . .	34
II.1	Energies d'activation et valeurs de constante de Richardson extraites des structures Mo/4H-SiC avec différentes doses et différents diamètres. . .	58
II.2	Comparaison entre les hauteurs de barrière extraites par la méthode I-V et la méthode C-V ainsi que la concentration de dopage $N_D$ extraite à température 300 K pour différentes doses et différents diamètres de Mo/4H-SiC (C). . . . .	59
II.3	Quelques hauteurs de barrière de la structure Mo/4H-SiC rapportées dans la littérature. . . . .	60
II.4	Barrières moyennes et déviations standard extraites des structures Mo/4H-SiC avec différentes doses et différents diamètres. . . . .	62
II.5	Barrières moyennes et valeurs de la constante de Richardson extraites des structures Mo/4H-SiC avec différentes doses et différents diamètres. . .	64
II.6	Barrières moyennes, $\bar{\phi}_{b0}(T = 0K)$ et coefficient de température, $\alpha_{\bar{\phi}_{b0}}$ extraits des structures Mo/4H-SiC (C) avec différentes doses et différents diamètres. . . . .	70
II.7	Déviation standard $\sigma_0(T = 0K)$ et coefficient de température ( $\alpha_{\sigma_0}$ ) extraits des structures Mo/4H-SiC (C) avec différentes doses et différents diamètres. . . . .	71

---

III.1	Quelques valeurs de : l'énergie minimale ( $E_{mins}$ ) du profil de potentiel, la pente( $\alpha$ ) et le critère ( $g$ ) à différentes valeurs de tension, $\phi_b = 1 eV$ . . .	95
-------	--	----

---

## TABLE DES FIGURES

I.1	Diagramme énergétique d'un métal et d'un semiconducteur de type (n) tel que $q\phi_M > q\phi_S$ . . . . .	5
I.2	Diagramme des bandes d'énergie à l'équilibre thermodynamique d'une structure métal/semiconducteur (n) dans le cas où $(q\phi_M \succ q\phi_S)$ . . . . .	6
I.3	Variation du carré de l'inverse de la capacité en fonction de la tension. La pente de la courbe permet de déterminer la valeur de la concentration du dopage et l'extrapolation de la droite à $1/C^2 = 0$ donne la hauteur de barrière. . . . .	8
I.4	Diagramme énergétique à l'équilibre thermodynamique d'un métal et d'un semiconducteur de type n tel que $q\phi_M \succ q\phi_S$ : (a) avant contact et avec états de surface, (b) après contact et avec états de surface [10] . . . . .	9
I.5	Diagramme énergétique des bandes dans un contact métal semiconducteur type n dans le cas général. . . . .	10
I.6	L'abaissement de la barrière Schottky par l'effet Schottky. . . . .	12
I.7	Modes de transport des électrons dans un contact métal/semiconducteur (n) polarisé en direct. . . . .	13
I.8	Variation du niveau de Fermi dans le cas d'une conduction mixte ; variation dans la zone de charge d'espace et discontinuité à l'interface. . . . .	15
I.9	Emission thermoïonique assistée par effet de champ (TFE) et émission de champ (FE) sous une polarisation directe [23]. . . . .	17
I.10	Mécanismes de transport des charges à travers une barrière Schottky sous polarisation inverse. . . . .	20
I.11	(a) Modèle de la fluctuation spatiale de la barrière Schottky (b) distribution gaussienne de la fluctuation de la barrière de potentiel suivant le modèle de Werner. . . . .	23

I.12 Les trois schémas (modèles) équivalents de la diode Schottky d'après la référence [43]. . . . .	25
I.13 Cristal de SiC (hexagonal-H) [54]. . . . .	28
I.14 Empilement des couches compactes B ou C sur une couche compacte A. . . . .	29
I.15 Arrangement tétragonal entre un atome de carbone et quatre atomes de silicium [59]. . . . .	30
I.16 Structures cristallines des principaux polytypes de carbure de silicium : 3C, 4H, 6H [52]. . . . .	30
II.1 Caractéristiques I-V-T simulées : (a) par l'équation (II.1), (b) par l'équation modifiée (II.4), $R=20 \Omega$ . . . . .	36
II.2 Variation de courant de saturation en fonction de la température pour différentes déviations standard : (a) suivant l'équation (II.2), (b) suivant l'équation modifiée (II.5). . . . .	36
II.3 Variation de la fonction $f(\phi_b)$ en fonction de la hauteur de barrière pour différentes températures, (a) échelle linéaire, (b) échelle semi-logarithmique. . . . .	38
II.4 Caractéristiques I-V simulées par l'équation (II.8) en différents intervalles d'intégration. . . . .	39
II.5 Variation de la fonction $f(\phi_b)$ en fonction de la barrière de potentiel : (a) pour différentes déviations standard, (b) pour différentes barrière moyennes à la température 100 K. . . . .	39
II.6 Organigramme utilisé pour résoudre l'équation (II.10). . . . .	40
II.7 Caractéristique I-V simulées selon le premier et le deuxième modèle inhomogènes pour différentes températures, $\bar{\phi}_{b0} = 0.8 \text{ eV}$ , $\sigma_0 = 0.07 \text{ eV}$ . . . . .	42
II.8 Caractéristiques I-V simulées selon le troisième modèle inhomogène, $\bar{\phi}_{b0} = 0.8 \text{ eV}$ , $\sigma_0 = 0.07 \text{ eV}$ , $R_p + R_c = 10 \Omega$ , $T=300 \text{ K}$ . . . . .	42
II.9 L'organigramme Utilisé pour l'extraction des trois paramètres ( $\phi_b$ , n et $R_s$ ) d'une diode Schottky homogène. . . . .	44
II.10 (a) Facteur d'idéalité, (b) hauteur de barrière en fonction de la température pour différentes résistances $R_p$ . . . . .	45
II.11 (a) Facteur d'idéalité, (b) hauteur de barrière de potentiel en fonction de la température pour différentes résistances $R_c$ . . . . .	46
II.12 (a)facteur d'idéalité et (b) hauteur de barrière de potentiel en fonction de la température pour différentes déviations standard( $\sigma_0$ ). . . . .	47
II.13 (a) facteur d'idéalité, (b) hauteur de barrière de potentiel en fonction de la température pour différentes barrières moyennes ( $\bar{\phi}_{b0}$ ). . . . .	48

II.14 Résistance apparente en fonction de la température : (a) pour différentes résistances ( $R_p$ ), (b) pour différentes résistances ( $R_c$ ), (c) pour différentes déviations standard ( $\sigma_0$ ), (d) pour différentes barrières moyennes ( $\bar{\phi}_{b0}$ ).	49
II.15 Caractéristiques I-V simulées par le modèle inhomogène ( $R_p = 6 \Omega$ , $R_c = 10 \Omega$ ) pour différentes valeurs de la barrière moyenne et de la déviation standard, et les caractéristiques I-V simulées par le modèle homogène avec les paramètres extraits des caractéristiques I-V inhomogènes, T=200 K.	50
II.16 Structure Molybdène/carbure de silicium (Mo/4H-SiC) avec la technique de guard ring.	51
II.17 Caractéristiques I-V-T pour différents doses et diamètres des structures Mo/4H-SiC(C) (a, b et c) et Mo/4H-SiC(Al) (d) : les points représentent les I-V-T mesurées et les lignes continues représentent les I-V-T simulées par les paramètres extraits à partir des caractéristiques mesurées.	53
II.18 Effet de la dose sur le courant de la structure Mo/4H-SiC (C) pour différentes températures.	54
II.19 Variation de la hauteur de barrière extraite pour différentes structures Mo/4H-SiC (C) et pour différentes doses, (a) D = 150 $\mu\text{m}$ , (b) D = 300 $\mu\text{m}$ .	55
II.20 Variation du facteur d'idéalité extrait de différentes structures Mo/4H-SiC (C) pour différentes doses, (a) D = 150 $\mu\text{m}$ , (b) D = 300 $\mu\text{m}$ .	56
II.21 Plot de Richardson de $\ln\left(\frac{I_s}{T^2}\right)$ en fonction de $1/(k_B T)$ pour différentes structures Mo/4H-SiC(C), (a) D = 150 $\mu\text{m}$ , (b) D = 300 $\mu\text{m}$ .	57
II.22 Caractéristiques expérimentales $C^{-2}(V)$ des structures Mo/4H-SiC (C) pour différentes doses à la température 300 K, (a) D = 150 $\mu\text{m}$ , (b) D = 300 $\mu\text{m}$ .	59
II.23 Hauteur de barrière en fonction de $1/2k_B T$ pour les différentes structures Mo/4H-SiC (C), (a) D = 150 $\mu\text{m}$ , (b) D = 300 $\mu\text{m}$ .	61
II.24 Tracé de $(1/n_{ap} - 1)$ en fonction de $1/2k_B T$ pour Mo/4H-SiC (Al) de dose $9 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-2}$ et diamètre D=150 $\mu\text{m}$ et pour Mo/4H-SiC (C) de dose $1.75 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-2}$ et diamètre D=300 $\mu\text{m}$ .	63
II.25 Plot de Richardson modifié de $\ln\left(\frac{I_s}{T^2}\right) - \left(\frac{q^2 \sigma_0^2}{2k_B^2 T^2}\right)$ en fonction de $(1/k_B T)$ pour les différentes structures Mo/4H-SiC (C), (a) D = 150 $\mu\text{m}$ , (b) D = 300 $\mu\text{m}$ .	64
II.26 L'organigramme utilisé pour l'extraction des quatre paramètres inhomogènes.	66
II.27 Caractéristiques I-V mesurées et simulées suivant le modèle inhomogène pour la Structure Mo/4H-SiC (C), Dose $1.75 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-2}$ , D = 150 $\mu\text{m}$ .	68
II.28 Variation de la barrière moyenne $\bar{\phi}_{b0}$ en fonction de la température pour différentes doses de la structure Mo/4H-SiC (C). (a) D = 150 $\mu\text{m}$ , (b) D = 300 $\mu\text{m}$ .	69

II.29	Variation de la déviation standard $\sigma_0$ en fonction de la température avec différentes doses pour les structures Mo/4H-SiC (C), $D = 150 \mu\text{m}$ . . . . .	71
II.30	Variation des résistances $R_p$ , $R_c$ extraites de différentes structures Mo/4H-SiC (C) en fonction de la température. Comparaison avec la résistance série $R_s$ du modèle homogène. . . . .	73
II.31	Intersection des caractéristique I-V-T de la structure Mo/4H-SiC (C) dans la région non linéaire, dose $1.2 \cdot 10^{12} \text{cm}^{-2}$ , $D = 200 \mu\text{m}$ . . . . .	74
II.32	Effet de la dose sur les résistances : (a) sur $R_s$ , (b) sur $R_c$ et (c) sur $R_p$ de la structure Mo/4H-SiC (C), $D = 150 \mu\text{m}$ . . . . .	75
II.33	(a)Variation de la barrière moyenne des trois modèles inhomogènes en fonction de la température (b) Variation de la déviation standard des trois modèles inhomogènes en fonction de la température de la structure Mo/4H-SiC (C), dose $7 \cdot 10^{12} \text{cm}^{-2}$ $D = 200 \mu\text{m}$ . . . . .	76
III.1	Fonction d'onde d'un porteur d'énergie E, évoluant dans une structure rectangulaire (la fonction d'onde réfléchiée n'est pas représentée). . . . .	78
III.2	Profil d'une barrière d'énergie de potentiel en fonction de la position x avec les deux points de rebroussement $x_1, x_2$ . . . . .	79
III.3	Barrière de potentiel arbitraire où on la divise en deux régions 1 et 2, les conditions de continuité s'appliquent au point $x=0$ . . . . .	81
III.4	Principe de discrétisation d'une barrière de potentiel quelconque en N barrières carrées (méthode des matrices de transfert). (b) Schéma illustrant les réflexions des ondes sur une discontinuité de potentiel. . . . .	84
III.5	profile de la barrière Schottky sous polarisation inverse en tenant compte de l'effet de la force image. . . . .	86
III.6	Méthode de discrétisation de la barrière Schottky. . . . .	87
III.7	Organigramme de calcul du coefficient de transmission et de la densité de courant tunnel dans une diode Schottky. . . . .	88
III.8	Coefficient de transmission en fonction de l'énergie pour différentes méthodes d'approximation $T_{WKB}$ , $T_{WKBJ}$ et $T_{MAF}$ . (a) échelle linéaire, (b) échelle semilogarithmique, $V = -400\text{V}$ , $N_D = 10^{16} \text{cm}^{-3}$ et $\phi_b = 1 \text{eV}$ . . . . .	89
III.9	Densité de courant tunnel simulée en utilisant les approximations WKB, WKBJ et MAF. Comparaison avec celle donnée par Padovani et Stratton équation(I.44), $\phi_b = 1 \text{eV}$ . . . . .	90
III.10	(a) Coefficients de transmission en fonction de l'énergie, calculés par la méthode TMM avec différents pas de discrétisation. (b) comparaison avec la méthode WKB, $V=-400 \text{V}$ , $\phi_b = 1 \text{eV}$ . . . . .	91

III.11(a) évolution de déterminant ( $det_{th}$ et $det_{num}$ ) avec l'énergie de la particule (b) effet de nombre de discrétisation sur le déterminant, $V=-100$ V, $\phi_b = 1$ eV. . . . .	92
III.12Densité de courant tunnel simulé en utilisant l'approximation des matrices de transfert (TMM) avec différents nombre de pas de discrétisation, $V=-400$ V, $\phi_b = 1$ eV. . . . .	93
III.13Evolution de la densité de courant en fonction du choix de l'énergie minimale ( $E_{mins}$ ), pour différentes valeurs de la tension V, $\phi_b = 1$ eV. . . . .	94
III.14(a) profil d'une barrière de potentiel triangulaire, (b) profil de la barrière Schottky au-dessous de l'énergie maximale $U_{max}$ de quelques eV en fonction de la distance x pour différentes tensions V. $\phi_b = 1$ eV. L'approximation triangulaire est acceptable. . . . .	95
III.15Variation de la densité de courant en fonction de la masse effective avec différentes valeurs de polarisation inverse, $\phi_b = 1$ eV. . . . .	96
III.16Variation de la densité de courant J(E), le coefficient de transmission T(E) et la fonction N(E) en fonction de l'énergie pour différentes valeurs de tension V, $\phi_b = 1$ eV, T = 300 K. . . . .	98
III.17Profil de la barrière Schottky montrant l'intervalle d'énergie [ $E_{mins}, E_{max}$ ] contribuant à de 99.99% au courant total et l'intervalle d'énergie [ $E_{mins}, E_{max0}$ ] contribuant à de 99.90% au courant total pour différentes valeurs de tension V, $\phi_b = 1$ eV. . . . .	99
III.18Variation de la densité de courant en fonction de la hauteur de barrière, $V=-400$ V, $\phi_b = 1$ eV. . . . .	100
III.19Variation de la densité de courant en fonction de la déviation standard ( $\sigma_0$ ), $V=-400$ V, $\bar{\phi}_{b0} = 1$ eV. . . . .	101
III.20(a) variation de la densité de courant en fonction de tension inverse pour différentes valeurs de température, $\phi_b = 0.7$ eV (b) effet de la température sur la fonction N(E) et le coefficient de transmission pour différentes valeurs de tensions, $\phi_b = 0.7$ eV, $U_{max} - E = 0.35$ eV. . . . .	101
III.21Comparaison entre les valeurs expérimentales de la densité de courant et celles simulées par le modèle thermoïonique (homogène et inhomogène) et par effet tunnel (homogène et inhomogène) pour différentes structures Mo/4H-SiC (C), T = 300 K. . . . .	103
III.22Modèles proposés pour augmenter le transport par effet tunnel. (a) tunnel assisté par les pièges, (b) aiguisement de la barrière à cause de l'existence d'une charge positive à l'interface de la diode Schottky [124]. . . . .	104

---

# TABLE DES MATIÈRES

Liste des tableaux	III
Table des figures	V
Introduction générale	1
<b>I Généralités sur la structure métal/semiconducteur(SiC)</b>	<b>4</b>
1 Théorie du contact métal/semiconducteur homogène . . . . .	4
1.1 Introduction . . . . .	4
1.2 Modèles de la formation de la barrière Schottky . . . . .	4
1.2.1 Modèle de Mott et Schottky . . . . .	4
1.2.1.1 Travail de sortie et affinité électronique : . . . . .	4
1.2.1.2 Formation de la barrière Schottky : . . . . .	5
1.2.1.3 Zone de charge d'espace . . . . .	6
1.2.2 Modèle de Bardeen . . . . .	8
1.2.3 Modèle de Cowley et Sze . . . . .	9
1.3 Abaissement de la barrière ; effet Schottky . . . . .	11
1.4 Mécanismes de transport du courant dans un contact M/S en polarisation directe . . . . .	12
1.4.1 Emission au-dessus de la barrière . . . . .	13
1.4.1.1 Théorie de l'émission thermoïonique : . . . . .	14
1.4.1.2 Théorie de la diffusion : . . . . .	14
1.4.1.3 Théorie mixte, thermoïonique-diffusion : . . . . .	15
1.4.2 Courant par effet tunnel . . . . .	16
1.4.2.1 Courant d'émission par effet de champ (FE) : . . . . .	17
1.4.2.2 Courant d'émission thermoïonique assistée par effet de champ (TFE) : . . . . .	18

1.4.3	Recombinaison dans la zone de charge d'espace . . . . .	18
1.4.4	Injection des minoritaires . . . . .	19
1.5	Courant de fuite en polarisation inverse . . . . .	19
1.5.1	Courant d'émission thermoïonique (TE) . . . . .	21
1.5.2	Courant tunnel . . . . .	21
1.5.2.1	Formules de Padovani et Stratton : . . . . .	21
1.5.2.2	Formule de Tsu et Esaki : . . . . .	22
2	Modèle de la diode Schottky inhomogène . . . . .	23
2.1	Polarisation directe de la diode Schottky . . . . .	23
2.1.1	Principe . . . . .	23
2.1.2	Influence de la résistance et les trois modèles inhomogènes de la diode Schottky . . . . .	25
2.2	Polarisation inverse de la diode Schottky . . . . .	27
2.2.1	Courant d'émission thermoïonique inhomogène . . . . .	27
2.2.2	Courant tunnel inhomogène . . . . .	27
3	Le semiconducteur : carbure de silicium (SiC) . . . . .	27
3.1	Histoire du SiC . . . . .	28
3.2	Structure cristalline et polytypisme du SiC . . . . .	29
3.3	Propriétés physiques du SiC . . . . .	31
3.4	Avantage du SiC en microélectronique . . . . .	32
4	Diode Schottky à base de SiC . . . . .	33
<b>II Modélisation et inhomogénéité en polarisation directe</b>		<b>35</b>
1	Partie simulation . . . . .	35
1.1	Problème de l'intégrale à basses température . . . . .	35
1.2	Caractéristique I-V d'une diode Schottky inhomogène . . . . .	40
1.3	Méthodes d'extraction des trois paramètres homogènes . . . . .	43
1.3.1	Introduction . . . . .	43
1.3.2	Méthode D'optimisation Verticale . . . . .	43
1.4	Effet de la Résistance $R_p$ sur la hauteur de barrière et sur le facteur d'idéalité . . . . .	45
1.5	Effet de la Résistance $R_c$ sur la hauteur de barrière et sur le facteur d'idéalité . . . . .	46
1.6	Effet de la déviation standard sur la hauteur de barrière et sur le facteur d'idéalité . . . . .	47
1.7	Effet de la barrière moyenne sur la hauteur de barrière de potentiel et sur le facteur d'idéalité . . . . .	48
1.8	Effet des quatre paramètres inhomogènes sur la résistance apparente $R_s$ . . . . .	49

2	Etude expérimentale . . . . .	51
2.1	Fabrication des échantillons . . . . .	51
2.2	Caractéristique I-V-T de la structure Mo/4H-SiC . . . . .	52
2.3	Effet de la dose sur le courant direct . . . . .	54
2.4	Modèle de la barrière homogène . . . . .	55
2.4.1	Etude de la hauteur de barrière : Effet de la dose et de la température . . . . .	55
2.4.2	Etude du facteur d'idéalité $n$ : Effet de la dose et de la température . . . . .	56
2.4.3	Plot de Richardson . . . . .	57
2.4.4	Détermination de la hauteur de barrière à partir des caractéristiques C-V . . . . .	58
2.5	Modèle de la barrière Schottky inhomogène . . . . .	61
2.5.1	Application du modèle standard (premier modèle) . . . . .	61
2.5.1.1	Barrière moyenne et déviation standard : . . . . .	61
2.5.1.2	Plot de Richardson modifié : . . . . .	63
2.5.2	Application du modèle générale (troisième modèle) . . . . .	65
2.5.2.1	Méthode d'extraction des quatre paramètres inhomogènes : . . . . .	65
2.5.2.2	Validité du modèle inhomogène : . . . . .	67
2.5.2.3	Variation de la barrière moyenne en fonction de la température : . . . . .	69
2.5.2.4	Variation de la déviation standard en fonction de la température : . . . . .	70
2.5.2.5	Variation des résistances $R_p$ et $R_c$ en fonction de la température : . . . . .	72
2.5.2.6	Effet de la dose sur les résistance $R_s$ , $R_p$ et $R_c$ : . . . . .	74
2.5.3	Comparaison entre les paramètres des trois modèles inhomogènes . . . . .	76
<b>III Polarisation inverse et Modélisation</b>		<b>77</b>
1	Introduction . . . . .	77
2	Modélisation du courant tunnel . . . . .	77
2.1	Effet tunnel . . . . .	77
2.2	Coefficient de transmission et méthodes d'approximation . . . . .	78
2.2.1	Méthode Wentzel-Kramers-Brillouin (WKB) . . . . .	78
2.2.1.1	Méthode WKBJ : . . . . .	80
2.2.2	Méthode de fonction d'Airy modifiée (MAF) . . . . .	80
2.2.3	Méthode des matrices de transfert (TMM) . . . . .	84

2.3	Modèle de la barrière Schottky . . . . .	86
2.4	Méthode de calcul . . . . .	87
2.4.1	Comparaison entre les coefficients de transmission $T_{WKB}$ , $T_{WKBJ}$ et $T_{MAF}$ . . . . .	89
2.4.2	Comparaison entre les coefficients de transmission $T_{WKB}$ et $T_{TMM}$ . . . . .	91
2.4.3	Choix de l'énergie minimale $E_{min}$ . . . . .	93
2.4.4	Validité de la méthode WKB pour une barrière de la diode Schottky . . . . .	94
2.4.5	Effet de la masse effective . . . . .	96
2.4.6	Contribution au courant tunnel en fonction de l'énergie . . . . .	97
2.4.7	Effet de la hauteur de barrière . . . . .	100
2.4.8	Effet de la déviation standard . . . . .	100
2.4.9	Effet de la température . . . . .	100
3	Application aux structures Mo/4H-SiC . . . . .	102
4	Conclusion . . . . .	104
<b>Conclusion générale</b>		<b>105</b>
<b>Bibliographie</b>		<b>109</b>
<b>Annexe</b>		<b>118</b>
<b>A</b>	<b>Méthode des moindres carrées pour l'extraction des trois paramètres d'une diode homogène</b>	<b>118</b>
<b>B</b>	<b>méthode des moindres carrées pour l'extraction des quatre paramètres d'une diode inhomogène</b>	<b>121</b>

---

# INTRODUCTION GÉNÉRALE

Les contacts redresseurs métal/semiconducteur (diode Schottky) découverts en 1874 par Braun [1] constituent depuis des années, un domaine de recherche intense à cause de leur intérêt technologique dans le domaine des composants à semiconducteurs. Ces jonctions ont des applications dans le domaine de la micro-électronique et aussi sont utilisées pour comprendre les phénomènes de surface. En théorie, depuis les premières lois données par Mott et Schottky en 1938 [2, 3], qui suggèrent une barrière de potentiel égale à la différence entre le travail de sortie du métal et l'affinité électronique du semiconducteur, un nombre important de travaux ont été publiés pour comprendre les mécanismes de transport à travers ces jonctions. Parmi ces mécanismes il y a deux mécanismes importants : le premier est l'effet thermoïonique et le deuxième est l'effet tunnel. Plusieurs travaux ont été consacrés à l'extraction des paramètres du contact notamment la hauteur de barrière de potentiel ( $\phi_b$ ) et le facteur d'idéalité ( $n$ ). Ces paramètres peuvent donner des informations sur les mécanismes de transport électrique interne et sur les imperfections des étapes technologiques lors du processus de fabrication. L'analyse des caractéristiques courant-tension (I-V) des diodes Schottky à température ambiante ne donne pas des informations détaillées sur leur processus de conduction ou de la nature de la formation de la barrière à l'interface M/S. La dépendance en température des caractéristiques I-V nous permet de comprendre les différents aspects des mécanismes de conduction. Cependant l'analyse des caractéristiques I-V des diodes Schottky basées sur la théorie de l'émission thermoïonique révèle généralement une diminution anormale de la hauteur de barrière ( $\phi_b$ ) et une augmentation du facteur d'idéalité ( $n$ ) avec la diminution de la température. Des tentatives ont été présentées afin de déterminer les lois qui donnent la variation des deux paramètres en fonction de la température. Ces travaux, ne se basent pas sur une base théorique très claire. En 1991, Werner et Guttler [4] ont proposé un modèle (inhomogène) théorique, basant sur la fluctuation de la barrière de potentiel avec une distribution gaussienne caractérisée par

une valeur moyenne ( $\overline{\phi_{b0}}$ ) et une déviation standard ( $\sigma_0$ ). d'autres chercheurs ont suivi ce modèle jusqu'à présent pour prouver l'inhomogénéité du contact Schottky, notamment, après la confirmation de l'existence d'une distribution gaussienne de la barrière Schottky par la microscopie à émission d'électrons balistiques (BEEM) [5]. L'inhomogénéité de la hauteur de barrière Schottky est un phénomène qui devrait être responsable de nombreuses discordances observées entre la théorie des contacts métal/semiconducteurs et les résultats expérimentaux.

En pratique les semiconducteurs à large gap tels que SiC et GaN ont été l'objet d'investigations approfondies pendant ces dernières années et a poussé la recherche pour bien comprendre et contrôler les contacts métal/semiconducteur, pour faire à la fois de bons contacts ohmique et de bons contacts Schottky. Les structures métal/carbure de silicium(SiC) jouent du rôle très important dans de nombreux dispositifs de haute performance en opto-électronique, à haute tension, à haute fréquence, et à haute puissance. La compréhension de la formation de la barrière Schottky à ces structures sur une base fondamentale est donc d'un grand intérêt.

Notre attention s'est portée plus particulièrement sur l'étude de l'inhomogénéité de la structure molybdène/ carbure de silicium (Mo/4H-SiC) à des températures moyennement élevés (303-498 K). Excellentes caractéristiques I-V ont été mesurées pour des diodes Schottky à base de SiC, avec une faible chute de tension et de facteurs d'idéalité proches de l'unité. Malheureusement, les courants de fuite anormalement élevées ont été observés dans des conditions de polarisation inverse. Cela n'est pas souhaitable que cet effet peut potentiellement limiter le fonctionnement en mode de blocage inverse. Il devient donc, essentiel d'analyser l'origine de ces courants de fuite en inverse et fondamentalement comprendre la physique sous-jacente. L'amélioration des performances ne peut être possible que si les grandeurs des divers mécanismes contribuant à des courants de fuite sont bien compris. En polarisation inverse Nous nous intéressons beaucoup plus à l'effet tunnel qui est l'origine de courant de fuite en particulier dans les hautes tensions. Notre travail est organisé comme suit :

Dans le premier chapitre, nous présentons des généralités sur la structure M/S; d'abord nous présentons les trois principaux modèles qui déterminent l'existence de la barrière de potentiel dans les contacts métal/semiconducteur tels que le modèle de Mott et Schottky [2, 3], le modèle de Bardeen [6] et le modèle unifié de Cowley et Sze [7]. Ces trois modèles sont regroupés dans un modèle dit homogène où il existe une seule barrière de potentiel. Dans un second temps, nous étudions les différents mécanismes de transport à travers la structure M/S en polarisation directe et inverse. Ensuite, nous présentons le modèle inhomogène de Werner où la barrière de potentiel est supposée fluctuée selon une distribution gaussienne. Dans ce cadre, nous présentons les trois modèles inhomogènes selon l'influence de la résistance série de la diode. Nous donnons aussi un bref historique du carbure de silicium puis nous exposons quelques unes de ses

propriétés physiques lui conférant des qualités remarquables pour des applications en milieu hostile puis nous terminons le chapitre par quelques paramètres (homogènes et inhomogènes) extraites de la bibliographie de la structure Métal/4H-SiC.

Le deuxième chapitre sera consacré au comportement de la structure Mo/4H-SiC en polarisation directe. Ce chapitre, est divisé en deux parties : la première, est une étude de simulation où nous discutons d'abord, le problème de l'intégrale aux basses températures. Puis, nous présentons l'effet des paramètres inhomogènes ( $\bar{\phi}_{b0}, \sigma_0, R_p, R_c$ ) sur les paramètres homogènes ( $\phi_b, n, R_s$ ). Dans la deuxième partie, on traite les caractéristiques courant-tension mesurées en fonction de la température et en fonction de la dose de l'implantation ionique de la surface des anneaux de garde (guard ring). Cette étude est faite par deux méthodes : la première est celle suivie par la plupart des chercheurs, basée sur l'extraction des paramètres homogènes qui sont la barrière de potentiel ( $\phi_b$ ), le facteur d'idéalité ( $n$ ) et la résistance série ( $R_s$ ). Puis on utilise ces paramètres pour prouver l'inhomogénéité de la barrière selon le modèle de Werner [4], c'est-à-dire la détermination de la barrière moyenne ( $\bar{\phi}_{b0}$ ) et la déviation standard ( $\sigma_0$ ). La deuxième méthode est basée sur l'extraction directe des paramètres inhomogènes à partir de la caractéristique I-V mesurée suivant un modèle inhomogène général, basé sur un schéma électrique équivalent de la diode Schottky réelle. La première méthode présente un cas limite de la deuxième méthode.

Le troisième chapitre étudie le comportement de la structure Mo/4H-SiC en polarisation inverse. D'abord, nous effectuons une modélisation du courant tunnel selon la formule de Tsu et Esaki [8]. Ce courant est basé sur la détermination du coefficient de transmission (la transparence). Pour la détermination de la transparence, nous avons présenté trois approximations : la première est celle de Wentzel-Kramers-Brillouin (WKB), la deuxième est l'approximation de fonction d'Airy modifiée (MAF) et la troisième méthode est l'approximation des matrices de transfert (TMM). Dans la modélisation on introduit l'effet d'abaissement de la force image en variant la masse effective, la hauteur de barrière, la déviation standard et la température. Enfin, nous faisons une comparaison entre le courant simulé et celui mesuré de la structure Mo/4H-SiC. Nous concluons ce travail en rappelant les principaux résultats obtenus.

---

---

# CHAPITRE I

---

## GÉNÉRALITÉS SUR LA STRUCTURE MÉTAL/SEMICONDUCTEUR(SIC)

### 1 Théorie du contact métal/semiconducteur homogène

#### 1.1 Introduction

Dans le cadre de l'étude d'une hétéro-structure, il est nécessaire de déterminer la valeur de la hauteur de barrière existant à l'interface entre les différents matériaux. C'est cette barrière qui va conditionner le passage des porteurs de charge d'un matériau vers l'autre. Pour obtenir un bon contact Schottky (ohmique), cette barrière doit être la plus grande (faible) possible. Pour déterminer la valeur de cette barrière, il faut comprendre la théorie du contact métal/semiconducteur et le processus de mise en équilibre thermodynamique dû à l'association des deux matériaux.

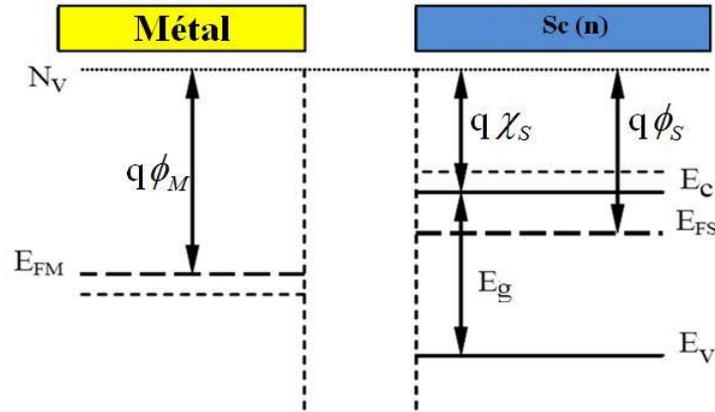
#### 1.2 Modèles de la formation de la barrière Schottky

Il existe plusieurs modèles qui décrivent l'existence de la barrière de potentiel dans les contacts métal/semiconducteur. nous allons étudier les trois principaux modèles, qui sont le modèle de Mott-Schottky [2, 3], le modèle de Bardeen [6] et le modèle de Crewll et Sze [7] .

##### 1.2.1 Modèle de Mott et Schottky

**1.2.1.1 Travail de sortie et affinité électronique :** La représentation de la structure de bandes d'énergie d'un métal est caractérisée par son travail de sortie  $q\phi_M$  qui est l'énergie nécessaire pour arracher un électron depuis le niveau de Fermi du métal. Le

semiconducteur est défini par son affinité électronique  $q\chi_S$  qui est le niveau d'énergie entre le vide et la bande de conduction et également par son travail de sortie  $q\phi_S$  dont la valeur est le niveau d'énergie entre le vide et son niveau de Fermi (Fig I.1)



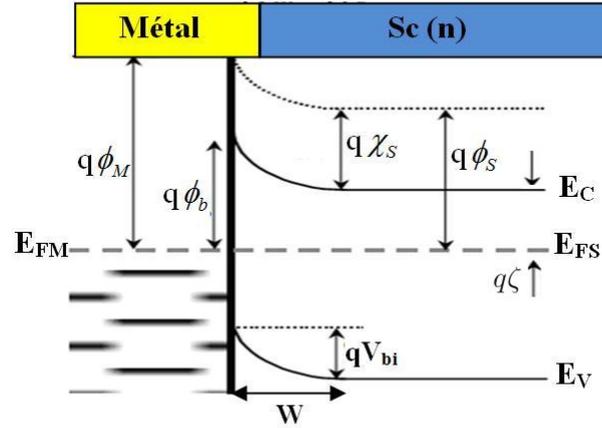
**Figure I.1** – Diagramme énergétique d'un métal et d'un semiconducteur de type (n) tel que  $q\phi_M > q\phi_S$

**1.2.1.2 Formation de la barrière Schottky :** Lorsque les deux matériaux sont mis en contact, et quand le travail de sortie du semiconducteur est inférieur à celui du métal ( $q\phi_M > q\phi_S$ ), les électrons passent du semiconducteur vers le métal. Il apparaît dans le semiconducteur une charge d'espace positive et le niveau de Fermi s'éloigne de  $E_C$  et se rapproche donc de  $E_V$  au voisinage de la jonction. Cette charge positive est compensée à la surface du métal par une charge négative. Du fait de la très forte concentration électronique dans le métal, l'extension de la zone de charge d'espace coté métal s'effectue sur une fraction de mono-couche atomique [9]. Le régime d'équilibre est alors défini par l'alignement des niveaux de Fermi des deux matériaux. Le diagramme énergétique du contact métal/semiconducteur (type n) à l'équilibre thermodynamique est représenté à la figure I.2

Dans le cas idéal d'absence d'états d'interfaces, ce contact crée une discontinuité de potentiel en surface appelée barrière de potentiel  $q\phi_b$ , qui est donnée en règle générale par la différence du travail de sortie du métal et de l'affinité électronique du semiconducteur :

$$q\phi_b = q(\phi_M - \chi_S) \quad (\text{I.1})$$

Il est clair que la création d'une barrière d'énergie va limiter la conduction à travers la structure métal/semiconducteur. Un effet diode peut être attendu.



**Figure I.2** – Diagramme des bandes d'énergie à l'équilibre thermodynamique d'une structure métal/semiconducteur (n) dans le cas où  $(q\phi_M > q\phi_S)$ .

La hauteur de barrière Schottky est le paramètre le plus important dans le contact métal/semiconducteur, il détermine le comportement électrique de deux contacts (ohmique et Schottky). La barrière de potentiel est l'énergie nécessaire pour qu'un électron dans le métal puisse pénétrer dans le semiconducteur.

**1.2.1.3 Zone de charge d'espace** La courbure des bandes d'énergie se produit dans une zone d'énergie variant de  $qV_{bi}$  tel que représentée à la figure I.2 correspond au potentiel interne à l'équilibre thermodynamique. C'est cette barrière que doivent vaincre les électrons de la bande de conduction du semiconducteur pour passer dans le métal. Pour déterminer la zone de charge d'espace, nous repartons de l'équation de Poisson.

$$\frac{\partial^2 V}{\partial x^2} = -\frac{\rho}{\varepsilon_s} \quad (I.2)$$

Où  $\rho$  est la densité de charge dans la zone de charge d'espace et  $\varepsilon_s$  la permittivité absolue du semiconducteur. Pour des contacts où le semiconducteur est de type (n), sous l'approximation du contact abrupt ( $\rho \approx qN_D$  pour  $x < W$  et  $\rho \approx 0$ , le champ  $\xi \approx 0$  pour  $x > W$ ) on obtient [1] :

- la largeur de la zone de charge d'espace  $W$ , sans polarisation :

$$W = \sqrt{\frac{2\varepsilon_s}{qN_D} \left( V_{bi} - \frac{kT}{q} \right)} \quad (I.3)$$

- le champ électrique dans la zone de déplétion :

$$|\xi(x)| = \frac{qN_D}{\varepsilon_s} (W - x) = \xi_m - \frac{qN_D x}{\varepsilon_s} \quad (\text{I.4})$$

- le potentiel dans la zone de déplétion :

$$E_C(x) = q\phi_b - \frac{q^2 N_D}{\varepsilon_s} \left( Wx - \frac{x^2}{2} \right) \quad (\text{I.5})$$

Lorsque la diode est polarisée par une tension V la formule (I.3) devient simplement :

$$W = \sqrt{\frac{2\varepsilon_s}{qN_D} \left( V_{bi} - V - \frac{k_B T}{q} \right)} \quad (\text{I.6})$$

- la densité de charge par unité de surface à l'équilibre thermodynamique s'exprime selon :

$$Q_{sc} = qN_D W = qN_D \sqrt{\frac{2\varepsilon_s}{qN_D} (V_{bi} - V - k_B T/q)} \quad (\text{I.7})$$

- la capacité par unité de surface C, est donnée par la relation :

$$C = \left| \frac{\partial Q_{sc}}{\partial V} \right| = \sqrt{\frac{q\varepsilon_s N_D}{2(V_{bi} - V - k_B T/q)}} \quad (\text{I.8})$$

A partir de cette expression, nous pouvons extraire la variation de l'inverse du carré de la capacité en fonction de la tension appliquée, V :

$$\frac{1}{C^2} = \frac{2(V_{bi} - V - k_B T/q)}{q\varepsilon_s N_D} \quad (\text{I.9})$$

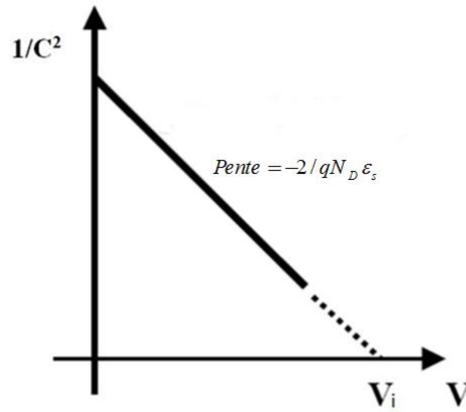
Cette formule est importante car elle montre qu'en traçant l'inverse du carré de la capacité en fonction de la tension, la pente de la courbe est directement proportionnelle au dopage ( $N_D$ ) (Fig I.3). En déterminant  $V_i$  par l'extrapolation de la droite à  $1/C^2 = 0$ , donc, on peut déterminer la hauteur de barrière par l'équation [4] :

$$\phi_b^{CV} = V_i + \zeta + k_B T/q \quad (\text{I.10})$$

Où  $q\zeta$  est la différence en énergie entre le niveau de Fermi du semiconducteur et le niveau bas de la bande de conduction loin dans le substrat, sa valeur est donnée par :

$$q\zeta = k_B T \ln \frac{N_C}{N_D} \quad (\text{I.11})$$

Avec  $N_C$  est la densité d'états électroniques dans la bande de conduction.



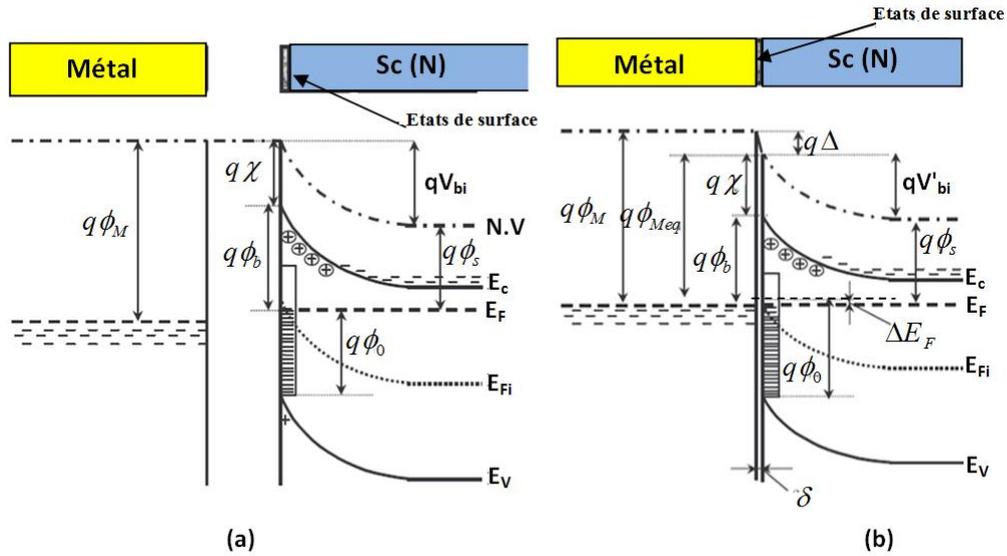
**Figure I.3** – Variation du carré de l'inverse de la capacité en fonction de la tension. La pente de la courbe permet de déterminer la valeur de la concentration du dopage et l'extrapolation de la droite à  $1/C^2 = 0$  donne la hauteur de barrière.

### 1.2.2 Modèle de Bardeen

La plupart des expériences menées sur différentes structures M/S ont établi que la hauteur de barrière de la jonction n'était pas déterminée systématiquement par les valeurs des travaux de sortie. Bardeen [6] suggéra alors, en 1947, l'hypothèse suivante : si un nombre d'états de surface intrinsèques (associés à des niveaux énergétiques situés dans la bande interdite du semiconducteur), causés par la fin de périodicité du cristal, était assez élevé ( $D_{it} > 10^{13} \text{ cm}^{-3}$ ), la hauteur de la barrière serait alors indépendante du travail de sortie du métal. La hauteur de barrière serait ainsi déterminée entièrement par ces états de surface, alors il se produit un ancrage du niveau de Fermi par ces états de surfaces et par conséquent l'ancrage de la hauteur de barrière. La figure I.4 représente les diagrammes énergétiques d'un métal et d'un semiconducteur de type n avant et après le contact tel que  $q\phi_M \succ q\phi_S$ . On définit le niveau neutre  $\phi_0$ , comme étant la valeur mesurée à partir du niveau supérieur de la bande de valence pour lequel les états de surface doivent être remplis pour avoir une neutralité de charge à la surface du semiconducteur.  $\phi_0$ , est donc un paramètre énergétique qui caractérise les états de surface.

Lors de la formation du contact métal/semiconducteur, la densité d'états de surface est suffisamment grande pour accueillir la charge résultant de l'établissement de l'équilibre, si bien que la barrière reste inchangée (Fig I.4b).

$$q\phi_b = E_g - q\phi_0 \quad (\text{I.12})$$



**Figure I.4** – Diagramme énergétique à l’équilibre thermodynamique d’un métal et d’un semiconducteur de type n tel que  $q\phi_M > q\phi_S$  : (a) avant contact et avec états de surface, (b) après contact et avec états de surface [10]

### 1.2.3 Modèle de Cowley et Sze

Cowley et Sze [7] ont établi en 1965 un modèle plus général ayant pour but de concilier les modèles de Schottky et Bardeen dont les expressions constituent les cas limites opposés. Ils ont posé les hypothèses de départ suivantes :

1. il y a présence d’une couche interfaciale de dimension atomique (5-10 Å) entre le métal et le semiconducteur. Cette couche est transparente aux électrons. Mais Elle peut aussi supporter une différence de potentiel.
2. la densité d’états de surface est une propriété intrinsèque du semiconducteur et indépendante du métal.

A ces états intrinsèques, peuvent s’ajouter des états d’interface extrinsèques créés par des défauts de structure ou impuretés. De ce fait les valeurs de  $\phi_b$ , pour ces types de contacts sont différentes de celles qui ont été calculées par le modèle de Mott-Schottky. Ce modèle décrit le transfert de charge à travers l’interface, et le résultat sur le schéma de diagramme de bande est représenté en figure I.5. Pour une distribution continue de densité d’état constante  $D_{it}$  (états/cm<sup>2</sup>.eV), caractérisée par un niveau neutre  $\phi_0$ , la hauteur de barrière pour ce modèle dans le cas où le niveau de Fermi  $E_F$  est au-dessus de  $\phi_0$  est de la forme :

$$\phi_b = S(\phi_M - \chi) + (1 - S)\left(\frac{E_g}{q} - \phi_0\right) \tag{I.13}$$



**2<sup>e</sup> cas :** Si  $D_{it}$  tend vers Zéro, c'est-à dire qu'il n'y'a pas d'états d'interface, alors  $S$  tend vers l'unité. Donc, la hauteur de barrière est donnée par la relation de Mott-Schottky. Des chercheurs ont trouvé des valeurs différentes de  $S$  pour le Mo/4H-SiC :  $S=0.76$  par Defives [11],  $S=0.7-0.8$  par Itoh [12], et  $S=0.23$  par Han [13]. Sans se soucier de la valeur exacte de  $S$ , on constate que la diode Schottky à base de SiC ne suit pas les deux cas limites décrits précédemment. Alors la valeur de la barrière de potentiel est affectée par les différentes techniques de préparation de la surface du semiconducteur [14]-[16].

### 1.3 Abaissement de la barrière ; effet Schottky

Un électron face à un plan conducteur, à la distance  $x$  de celui-ci, est soumis à une force attractive coulombienne :

$$F = -\frac{q^2}{16\pi\epsilon_0} \frac{1}{x^2} \quad (\text{I.15})$$

Le travail (l'énergie) fourni par cet électron pour arriver de l'infini jusqu'à la position  $x$ , est :

$$E(x) = -\frac{q^2}{16\pi\epsilon_0} \frac{1}{x} \quad (\text{I.16})$$

Sous l'action d'un champ électrique appliqué,  $\xi(x)$ , l'énergie potentielle totale est :

$$E_p(x) = -\frac{q^2}{16\pi\epsilon_0} \frac{1}{x} - q\xi x \quad (\text{I.17})$$

Cette équation a une maximale ; la distance maximale  $x_m$  et l'abaissement de barrière  $\Delta\phi$  sont déterminés par la condition  $\frac{dE_p}{dx} = 0$ , donc :

$$x_m = \sqrt{\frac{q}{16\pi\epsilon_0\xi}} \quad (\text{I.18})$$

$$\Delta\phi = \sqrt{\frac{q\xi}{4\pi\epsilon_0}} = 2\xi x_m \quad (\text{I.19})$$

Dans le cas d'un contact métal/semiconducteur, dans le cas d'un dopage constant dans le semiconducteur, le champ électrique dans la zone de charge d'espace généré par la charge liée aux dopants ionisés a été exprimé par l'équation (I-4). Le champ électrique varie linéairement en fonction de  $x$ . Dans ce cas, le calcul de l'abaissement de barrière se complique beaucoup. Il suffit par contre de faire l'hypothèse que la valeur de  $x_m$  est suffisamment faible devant  $W$  pour que le champ électrique puisse être considéré

constant et pratiquement égal à sa valeur maximale, à l'interface métal semiconducteur,  $\xi_m$  est donné par [9] :

$$\xi_m = \sqrt{2qN_D(\phi_b - \zeta + V_R)/\varepsilon_s} \quad (\text{I.20})$$

En substituant  $\xi_m$  dans l'équation (I.19) on obtient :

$$\Delta\phi = \sqrt{\frac{q\xi_m}{4\pi\varepsilon_s}} = \left[ \frac{q^3 N_D}{8\pi^2 \varepsilon_s^3} (\phi_b - \zeta + V_R) \right]^{1/4} \quad (\text{I.21})$$

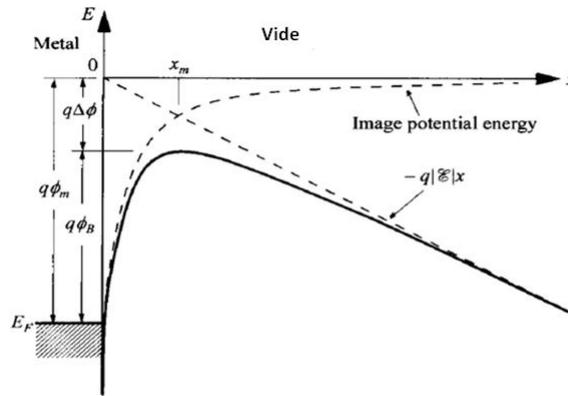
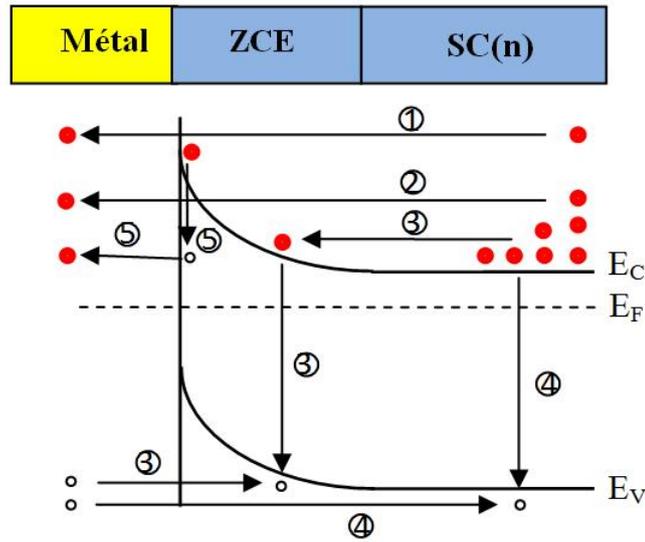


Figure I.6 – L'abaissement de la barrière Schottky par l'effet Schottky.

## 1.4 Mécanismes de transport du courant dans un contact M/S en polarisation directe

Dans une jonction métal/semiconducteur, le transport du courant peut se faire selon les cinq mécanismes représentés à la figure I.7 [17].

1. Passage d'électrons qui possèdent une grande énergie (dits électrons chauds) du semiconducteur dans le métal, par-dessus la barrière. Deux modèles rendent compte du phénomène : le modèle thermoïonique et le modèle de diffusion, le premier étant prépondérant dans les semiconducteurs à grande mobilité et le second dans les semiconducteurs à faible mobilité.
2. Passage des électrons à travers la barrière par effet tunnel.
3. Génération-recombinaison dans la ZCE. En polarisation direct, ce mécanisme correspond à la recombinaison dans la ZCE d'un électron venant du semiconducteur avec un trou du venant du métal.
4. Injection de porteurs minoritaires. Un trou du métal se recombine avec un électron du semiconducteur dans la zone quasi neutre du semiconducteur.



**Figure I.7** – Modes de transport des électrons dans un contact métal/semiconducteur (n) polarisé en direct.

5. Courant de recombinaison sur les états d'interfaces. Les électrons du semiconducteurs sont piégés au niveau d'un centre d'interface vide puis ils passent par effet tunnel dans le métal.

Pour des dopages faibles ( $< 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ ) et lorsque le contact est redresseur, le processus (1) est le plus important, il définit le fonctionnement normal du contact M/S par contre les mécanismes (2), (3), (4), et (5) provoquent des déviations par rapport au comportement idéal [18].

Pour les forts dopages ( $> 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ ), le courant passe essentiellement à travers de la barrière par effet tunnel. Le contact réalisé est alors ohmique.

#### 1.4.1 Emission au-dessus de la barrière

En présence du champ électrique, un flux d'électrons est émis au dessus de la barrière et provient de l'intérieur du semiconducteur pour se diriger vers l'interface par phénomène de déplacement et de diffusion. Leurs injections dans le métal à travers la barrière sont assimilées à celles des électrons émis dans le vide par une cathode chaude (cathode d'un tube) ; ceci est connu sous le nom de phénomène d'émission thermoïonique. Ces deux phénomènes se superposent et permettent la création du courant normal de conduction.

**1.4.1.1 Théorie de l'émission thermoïonique :** La théorie de l'émission thermoïonique a été établie par Bethe [19]. Le courant dû à cet effet provient des électrons ayant une énergie supérieure à celle de la barrière de potentiel. Sa validité repose sur le respect des hypothèses suivantes [1] :

- la hauteur de barrière d'énergie est grande devant  $k_B T$ .
- les électrons à l'interface du semiconducteur sont en équilibre thermique avec ceux du volume.
- le flux du courant n'affecte pas l'équilibre.

La considération de ces hypothèses implique que le pseudo niveau de Fermi reste constant dans la région de charge d'espace. Dans ces conditions, la densité du courant due à l'émission thermoïonique s'écrit :

$$J = J_s \left( \exp \left( \frac{qV}{k_B T} \right) - 1 \right) \quad (\text{I.22})$$

Où  $V$  est la tension appliquée,  $J_s$  la densité de courant de saturation donnée par l'expression suivante :

$$J_s = A^* T^2 \exp \left( - \frac{q\phi_b}{k_B T} \right) \quad (\text{I.23})$$

Où  $T$  est la température,  $\phi_b$  la hauteur de barrière, et  $A^*$  la constante de Richardson donnée par l'expression suivante :

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

$m_e^*$  : La masse effective de l'électron dans le semiconducteur.

$h$  : La constante de Planck.

La relation théorique (I.22) est souvent remplacée par une relation semi-empirique de la forme suivante :

$$J = J_s \left( \exp \left( \frac{qV - R_s I}{n k_B T} \right) - 1 \right) \quad (\text{I.25})$$

Où  $R_s$  la résistance série du contact, et  $n$  est le facteur d'idéalité qui représente la conformité de la diode à une pure conduction thermoïonique. Le facteur  $n$  est généralement déterminé à partir de la pente de la partie linéaire du courant direct de la courbe  $\ln(I)=f(V)$ .

**1.4.1.2 Théorie de la diffusion :** Historiquement, la première théorie de la conduction dans la diode Schottky était "théorie de la diffusion" de Wagner [20] et Schottky et Spenke [21]. La densité de courant d'électrons à travers la zone dépeuplée est donnée

par la somme de la composante de courant de déplacement (ou conduction) et celle du courant de diffusion moyennant les hypothèses suivantes [1] :

- la hauteur de barrière d'énergie est supérieure au terme  $k_B T$ .
- l'effet des collisions d'électron dans la zone de déplétion est inclus.
- la concentration des porteurs est indépendante du flux du courant et est identique à celle de l'équilibre.
- la concentration des impuretés de semiconducteur est non dégénérée.

L'expression de la densité de courant peut s'écrire sous la forme :

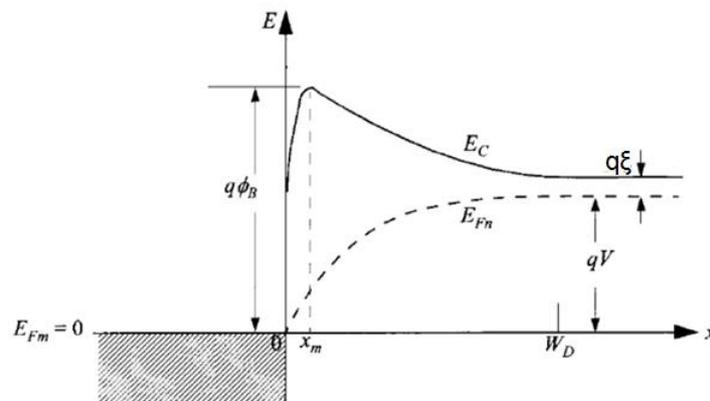
$$J = J_D \left( \exp \left( \frac{qV}{k_B T} \right) - 1 \right) \quad (\text{I.26})$$

Où  $J_D$  la densité de courant de saturation donnée par :

$$J_D = q N_C \mu_n \left( \frac{2q N_D (V_{bi} - V)}{\varepsilon_s} \right)^{\frac{1}{2}} \exp \left( \frac{-q\phi_b}{k_B T} \right) \quad (\text{I.27})$$

Où  $\mu_n$  est la mobilité des électrons.  $V_{bi}$  est le potentiel de diffusion.  $N_C$  est la densité d'état des électrons dans la bande de conduction.  $N_D$  est la concentration des atomes donneurs.

**1.4.1.3 Théorie mixte, thermoïonique-diffusion :** La synthèse de l'émission thermoïonique et le phénomène de diffusion a été présentée d'abord par Crowell et Sze en 1966 [22]. Dans ce cas, la conduction est contrôlée à la fois par l'interface et le volume ; la variation du niveau de Fermi est mixte, c'est à dire varie dans la zone de charge d'espace et présente une discontinuité à l'interface comme représenté la figure I.8.



**Figure I.8** – Variation du niveau de Fermi dans le cas d'une conduction mixte ; variation dans la zone de charge d'espace et discontinuité à l'interface.

La densité de courant thermoïnique-diffusion est donnée par :

$$J_{TED} = \frac{qN_C v_R}{1 + v_R/v_d} \exp\left(-\frac{q\phi_b}{kT}\right) \left[\exp\left(\frac{qV}{kT}\right) - 1\right] \quad (I.28)$$

Avec  $v_R$  : vitesse de recombinaison près de l'interface métal/semiconducteur où le potentiel est maximum. Elle est donnée par :

$$v_R = \frac{A^* T^2}{qN_C} \quad (I.29)$$

$v_d$  : vitesse effective de diffusion des électrons et donnée par :

$$v_d \approx \mu_n \xi_m \quad (I.30)$$

De l'équation (I.25) on distingue deux cas :

1. si  $v_D \gg v_R$ , le courant thermoïnique-diffusion est un courant d'émission thermoïnique ( $J_{TED} = J_{TE}$ ).
2. si  $v_D \ll v_R$ , le courant thermoïnique-diffusion est un courant de diffusion ( $J_{TED} = J_D$ ).

Considérant en outre les réflexions quantiques à la barrière, les interactions électron phonon, l'effet de force image et la probabilité de transition à travers la barrière, la densité de courant peut se mettre sous la forme [1] :

$$J = A^{**} \exp\left(-\frac{q\phi_b}{kT}\right) \left[\exp\left(\frac{qV}{kT}\right) - 1\right] \quad (I.31)$$

Et  $A^{**}$  est la constante de Richardson modifiée dont la valeur tient compte de ces différents phénomènes :

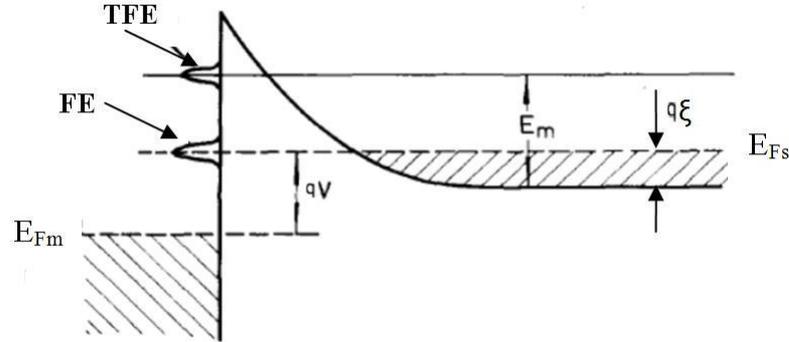
$$A^{**} = \frac{A^* f_P f_Q}{1 + f_P f_Q v_R/v_D} \quad (I.32)$$

Où  $f_P$  : la probabilité d'émission d'électrons à travers le potentiel maximum.  $f_Q$  : tient compte de la réflexion quantique à la barrière.

#### 1.4.2 Courant par effet tunnel

Il y a deux modes de transport par effet tunnel à travers une barrière Schottky, les deux types sont illustrés sur la figure I.9.

1. émission thermoïonique assistée par effet de champ (TFE) qui dépend de la température.
2. émission par effet de champ (FE) qui dépend du dopage et prédomine dans le comportement électrique des contacts ohmiques sur substrats fortement dopés. Ce type de courant a lieu seulement dans les semiconducteurs dégénérés [18].



**Figure I.9** – Emission thermoïonique assistée par effet de champ (TFE) et émission de champ (FE) sous une polarisation directe [23].

La différence fondamentale entre les mécanismes d'émission par effet de champ (TFE) et par effet thermoïonique assisté par effet de champ (FE) réside dans l'influence de la température sur leur probabilité respective. Dans le cas d'un semiconducteur dégénéré, à basses températures, où la densité des donneurs est très grande et la barrière est fine, le transit des charges s'effectue par transmission tunnel au niveau du bas de la barrière, pour des énergies de porteurs proches du niveau Fermi. C'est l'émission par effet de champ. Quand la température augmente, les électrons de la bande de conduction sont excités à des énergies supérieures ( $k_B T/q$ ) et voient alors une barrière plus fine : leur probabilité de transit est alors plus importante. Néanmoins, comme la concentration en électrons excités décroît exponentiellement avec l'énergie, il apparaît donc, une valeur de l'énergie  $E_m$  pour laquelle la transmission est maximale. C'est l'effet d'émission thermoïonique assisté par effet de champ.

**1.4.2.1 Courant d'émission par effet de champ (FE) :** Lorsque la température d'utilisation est suffisamment basse et le semiconducteur est fortement dopé (semiconducteur dégénéré) la zone de déplétion devient étroite et les électrons la traversent avec un minimum d'énergie. La densité de courant direct transitant par effet de champ à travers la barrière s'écrit [1], [23] :

$$J = J_s \exp\left(\frac{qV}{E_{00}}\right) \quad (\text{I.33})$$

Avec  $E_{00}$  représente l'énergie caractéristique du semiconducteur relative à la probabilité de transmission par effet tunnel :

$$E_{00} = \frac{q\hbar}{2} \sqrt{\frac{N_D}{m_e^* \varepsilon_s}} \quad (\text{I.34})$$

#### 1.4.2.2 Courant d'émission thermoïonique assistée par effet de champ (TFE) :

L'émission thermoïonique d'électrons assistée par effet de champ est fonction de la température. Son expression est de la forme :

$$J_{TFE} = J'_s \exp\left(\frac{-q\zeta}{k_B T} - \frac{q(\phi_b - \zeta)}{E_0}\right) \exp\left(\frac{qV_R}{E_0}\right) \quad (\text{I.35})$$

où

$$E_0 = E_{00} \coth\left(\frac{E_{00}}{k_B T}\right) \quad (\text{I.36})$$

Le rapport  $E_{00}/k_B T$  à température donnée permet de déterminer le mécanisme majoritaire d'injection du courant [24]. En effet, pour  $E_{00}/k_B T \ll 1$ , l'émission thermoïonique (TE) est prépondérante alors que pour  $E_{00}/k_B T \gg 1$  c'est l'émission par effet de champs (FE) qui domine, et lorsque  $E_{00} \approx k_B T$  c'est l'émission thermoïonique assistée par effet de champ (TFE) qui domine et se combine avec (TE) et (FE).

#### 1.4.3 Recombinaison dans la zone de charge d'espace

L'importance de processus de recombinaison dans la région de déplétion dans une diode Schottky a été démontrée par Yu et Snow [25]. Les densités de courant dues à la recombinaison de type Shockley-Read sont généralement simulées via un niveau situé au milieu de gap est approximativement donnée par :

$$J_{rec} = J_r e^{\frac{qV}{2k_B T}} \quad (\text{I.37})$$

Où  $J_r = qn_i W/\tau$ , ici,  $n_i$  est la concentration intrinsèque,  $W$  est la largeur de la zone de déplétion et  $\tau$  la durée de vie des électrons dans la zone de déplétion. La composante de recombinaison est probablement relativement plus importante dans les grandes hauteurs de barrière, les matériaux qui ont une faible durée de vie, et dans les basses tensions et températures [18].

En fait, bien souvent le courant de recombinaison non identifiable se superpose au courant thermoïonique ( $J = J_{th} + J_{rec}$ ), est responsable de la valeur élevée de facteur d'idéalité  $n$  [26].

Le processus de recombinaison dans le volume neutre est similaire au précédent, mais dans ce cas, la recombinaison se produit hors de la zone de charge d'espace. Ce processus

étant principalement lié aux trous qui transitent dans toute la zone de charge d'espace, la contribution à la conduction sera faible dans ce cas.

#### 1.4.4 Injection des minoritaires

La conduction des minoritaires est due dans le cas d'un semiconducteur de type n aux trous. Dans la zone de charge d'espace, les trous sont un peu plus nombreux que dans le volume neutre ; ainsi, le pseudo-niveau de Fermi des trous est à peu près constant dans cette zone. L'injection des trous sous polarisation directe dans la diode Schottky formée par les semiconducteurs de type n a été considérée théoriquement par Scharfetter [27]. L'expression de la densité de courant des trous est donnée par [1] :

$$J_p = \frac{\mu_p n_i^2 J_n^2}{\mu_n N_D^2 J_{n0}} + \frac{q D_p n_i^2}{N_D L} \exp \left[ \left( \frac{qV}{k_B T} \right) - 1 \right] \quad (\text{I.38})$$

Le rapport de l'injection est alors :

$$\gamma = \frac{J_p}{J_p + J_n} \approx \frac{J_p}{J_n} \approx \frac{\mu_p n_i^2 J_n}{\mu_n N_D^2 J_{n0}} + \frac{q D_p n_i^2}{N_D L J_{n0}} \quad (\text{I.39})$$

Où  $\mu_n, \mu_p$  sont les mobilités des électrons et des trous respectivement.  $D_p, L_p$  sont respectivement la constante et la longueur de diffusion des trous.  $J_{n0}, J_n$  sont la densité de courant de saturation et la densité de courant des électrons données par la théorie thermoïonique.

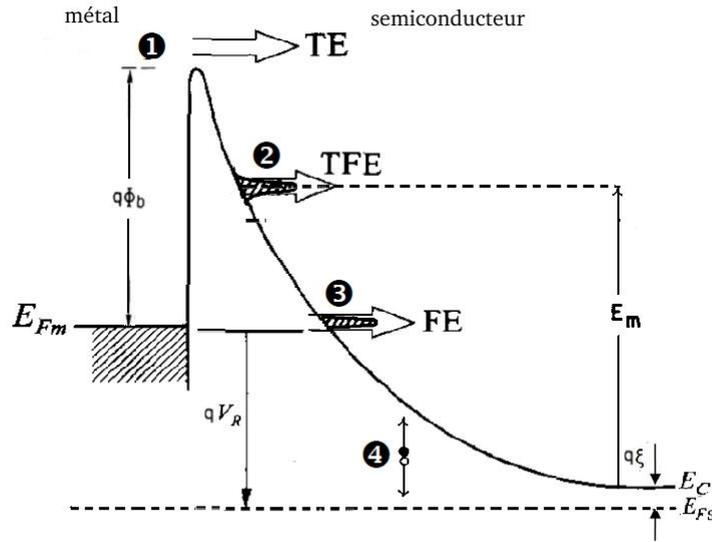
Le premier terme est dû au processus de conduction et dépend de la tension, tandis que le deuxième terme est dû à la diffusion, il est indépendant de la tension.

## 1.5 Courant de fuite en polarisation inverse

Comme dans la polarisation directe de la diode Schottky, la polarisation inverse de celle-ci possède aussi quatre mécanismes de transport qui donnent le courant de fuite. Ces quatre mécanismes qui sont schématisés dans la figure I.10 sont [28] :

1. Emission Thermoïonique.
2. Emission thermoïonique assistée par effet de champ (TFE).
3. Emission par effet de champ ou effet tunnel pur (FE).
4. Génération dans la zone de déplétion.

Parmi ces quatre mécanismes de transport, l'émission thermoïonique et l'émission thermoïonique assistée par effet de champ sont prépondérants dans le cas de la diode Schottky [29]. L'effet de surface et les défauts peuvent produire un courant de fuite qui s'ajoute à ces quatre mécanismes de transports [30].



**Figure I.10** – Mécanismes de transport des charges à travers une barrière Schottky sous polarisation inverse.

La densité de courant total  $J$  qui traverse la diode Schottky en polarisation inverse est donnée par la différence entre le courant qui passe du semiconducteur vers le métal  $J_{SM}$  et le courant passant du métal vers le semiconducteur  $J_{MS}$  [31] :

$$J = J_{SM} - J_{MS} = \frac{qm^*}{2\pi^2\hbar^3} \int_{E_{\min}}^{\infty} T(E_x) \left[ \int_0^{\infty} (f_m(E) - f_s(E)) dE_{II} \right] dE_x \quad (\text{I.40})$$

Avec  $T(E_x)$  est le coefficient de transmission,  $f_s(E)$  et  $f_m(E)$  les fonctions de probabilité d'occupation dans le semiconducteur et dans le métal respectivement [32] :

$$f_s(E) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{qV_{bi} - E + q\zeta - qV}{k_B T}\right)} \quad (\text{I.41})$$

$$f_m(E) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{qV_{bi} - E + q\zeta}{k_B T}\right)} \quad (\text{I.42})$$

$q\zeta$  est la différence en énergie entre le niveau de Fermi du semiconducteur et le niveau bas de la bande de conduction et  $V_{bi}$  est le potentiel de diffusion.

L'énergie cinétique totale  $E$  est décomposée en deux :  $E_x$  est l'énergie perpendiculaire au plan de la barrière Schottky et  $E_{II}$  est l'énergie parallèle. L'équation (I.40) contient deux mécanismes de transport selon les bornes de l'intégrale. En effet, lorsque l'énergie de la particule est supérieure à la barrière Schottky, on est dans le cas de l'émission thermoionique, et quand l'énergie est inférieure à la barrière on est dans le cas de l'effet tunnel.

### 1.5.1 Courant d'émission thermoïonique (TE)

Le processus de transport d'émission thermoïonique est prépondérant aux faibles tensions. L'émission des charges est fortement dépendante de la température, et la densité de courant peut se déduire à partir de l'équation (I.40) en intégrant sur des énergies supérieures à la barrière Schottky et en mettant  $T(E_x) = 1$  [31] :

$$J_s = A^* T^2 e^{\left(\frac{-q\phi_b}{k_B T}\right)} \quad (\text{I.43})$$

avec  $A^*$  la constante de Richardson,  $k_B$  la constante de Boltzmann et  $T$  la température absolue.

L'équation (I.43) ne prend pas en compte l'effet Schottky, à savoir la diminution de la hauteur de la barrière causée par l'effet de force image en présence d'un champ électrique. Tenant compte de cet effet, l'équation devient :

$$J_s = A^* T^2 e^{\left(\frac{-q(\phi_b - \Delta\phi)}{k_B T}\right)} \quad (\text{I.44})$$

Avec  $\Delta\phi$  est l'abaissement de barrière de potentiel donné par la formule [33] :

$$\Delta\phi = \left[ \frac{q^3 N_D}{8\pi^2 \varepsilon_s^3} (\phi_b - \zeta + V_R) \right]^{1/4} \quad (\text{I.45})$$

### 1.5.2 Courant tunnel

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

**1.5.2.1 Formules de Padovani et Stratton :** Padovani et Stratton [23] ont donné une solution analytique approchée de l'équation (I.40) sans prendre en considération l'effet de la force image ; deux modes de transport peuvent exister :

**a)- l'émission par effet de champ ou effet tunnel pur (FE) :** n'est observée que dans les semiconducteurs fortement dopés ou dégénérés et à basses températures et le passage est proche de l'énergie de Fermi du métal comme l'illustre la figure I.10.

La densité de courant d'émission par effet de champ (FE) est donnée par [23], [1] :

$$J_{FE} = A^* \left( \frac{E_{00}}{k_B} \right)^2 \left( \frac{\phi_b + V_R}{\phi_b} \right) \exp \left( -\frac{2q\phi_b^{3/2}}{3E_{00}\sqrt{\phi_b + V_R}} \right) \quad (I.46)$$

**b)- l'émission thermoïonique assistée par effet de champ (TFE) :** qui concerne les porteurs chauds franchissant le sommet de la barrière par effet tunnel.

La densité de courant d'émission thermoïonique assistée par effet de champ (TFE) est donnée par [23], [1] :

$$J_{TFE} = \frac{A^*T}{k_B} \sqrt{\pi E_{00}q \left( V_R + \frac{\phi_b}{\cosh^2(E_{00}/k_B T)} \right)} \exp \left( \frac{-q\phi_b}{E_0} \right) \exp \left( \frac{qV_R}{\varepsilon'} \right) \quad (I.47)$$

Avec

$$\varepsilon' = \frac{E_{00}}{(E_{00}/k_B T) - \tanh(E_{00}/k_B T)} \quad (I.48)$$

Par ailleurs, nous signalons que le domaine de validité de l'expression de la densité de courant est restreint à des tensions de polarisation et des températures vérifiant les conditions :

$$V_R \succ \phi_b + \frac{3E_{00} \cosh^2(E_{00}/k_B T)}{2q \sinh^3(E_{00}/k_B T)} \quad (I.49)$$

$$k_B T \succ \frac{E_{00}\sqrt{\phi_b + V_R}}{\sqrt{\phi_b}} \quad (I.50)$$

**1.5.2.2 Formule de Tsu et Esaki :** Tsu et Esaki [8] ont pu développer l'équation du courant (I.40) qui devient simple, très proéminente et presque la plus utilisée pour la description du courant tunnel, elle est connu sous le nom de l'expression de Tsu et Esaki. En effet , En supposant que  $T(E)$  ne dépend que de  $E_x$  et en intégrant  $f_m$  et  $f_s$ , le courant tunnel total est donné par l'équation [8], [34, 35] :

$$J_{tu} = \frac{A^*T}{k_B} \int_{E_{\min}}^{U_{\max}} T(E_x) N(E_x) dE_x \quad (I.51)$$

$N(E_x)$  est la fonction d'offre (supply function) qui reflète la différence dans les nombres d'occupation sur les deux côtés des barrières tunnel [36] définie par :

$$N(E_x) = \int_0^{\infty} (f_m(E) - f_s(E)) dE_{II} = \ln \left( \frac{1 + \exp(-q\zeta - E_x)/k_B T}{1 + \exp(-q\zeta - qV - E_x)/k_B T} \right) \quad (I.52)$$

$E_{min}$  dans l'équation (I.51) désigne l'énergie minimale pour laquelle l'effet tunnel se produit,  $E_{max}$  l'énergie maximale du profil de la barrière de potentiel considéré,  $V$  la tension appliquée aux bornes de la jonction et  $T$  la température.

l'équation (I-51) néglige les processus de phonon, c'est à dire, le vecteur d'onde transversal  $k$  est supposé être conservée pour des particules à effet tunnel. Dans la dérivation de l'équation (I-51), un certain nombre d'approximations ont été faites. Les approximations sont très souvent faites dans le traitement de la barrière Schottky et ne sont pas susceptibles de causer des erreurs importantes [37].

## 2 Modèle de la diode Schottky inhomogène

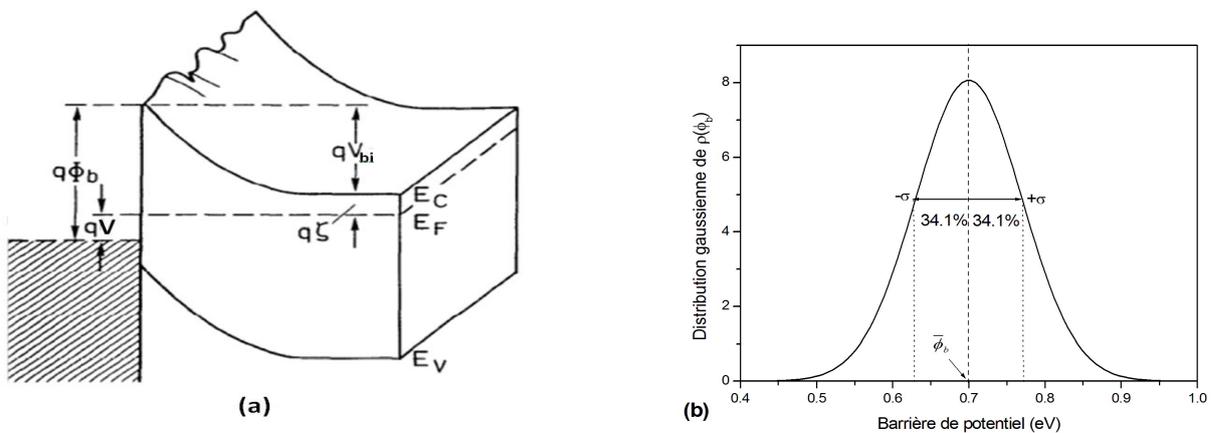
### 2.1 Polarisation directe de la diode Schottky

#### 2.1.1 Principe

Le contact Schottky réel contient probablement des inhomogénéités qui causent une variation spatiale de la hauteur de barrière (Fig I.11a). Ces fluctuations peuvent être dus aux :

- défauts structuraux (dislocations, joints de grains,...) à la surface du semiconducteur.
- contamination de la surface (adsorption des atomes étrangers).
- défauts intrinsèques de la surface (inter-diffusion des atomes du métal, inhomogénéité du dopage...).

Ces défauts ramènent l'interface entre le métal et le semiconducteur rugueuse (n'est pas plane). Werner et Guttler [4] ont développé un modèle basé sur une distribution continue de forme gaussienne de la barrière avec une valeur moyenne et une déviation standard qui décrit la largeur de distribution (Fig I.11b).



**Figure I.11** – (a) Modèle de la fluctuation spatiale de la barrière Schottky (b) distribution gaussienne de la fluctuation de la barrière de potentiel suivant le modèle de Werner.

En utilisant la microscopie à émission d'électrons balistiques (BEEM), plusieurs auteurs [5], [38]-[42] ont confirmé l'existence d'une distribution gaussienne de la barrière Schottky. A partir de ce modèle Werner a montré que le facteur d'idéalité est toujours supérieur à 1 et établi aussi des relations qui donnent les variations de la hauteur de barrière et le facteur d'idéalité en fonction de la température.

Le courant total qui traverse un contact Schottky est donné alors par la relation :

$$I = \int i(V, \phi_b) \rho(\phi_b) d\phi_b \quad (I.53)$$

Où  $i(V, \phi_b)$  est le courant élémentaire thermoïnique émis dans la diode Schottky de barrière  $\phi_b$  et  $\rho(\phi_b)$  est la distribution gaussienne donnés par :

$$i(V, \phi_b) = AA^*T^2 e^{-\frac{q\phi_b}{k_B T}} \left( e^{\frac{qV}{k_B T}} - 1 \right) \quad (I.54)$$

$$\rho(\phi) = \frac{1}{\sigma_0 \sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(\phi_b - \bar{\phi}_{b0})^2}{2\sigma_0^2}} \quad (I.55)$$

Avec  $\bar{\phi}_{b0}$  et  $\sigma_0$  sont la valeur moyenne et la déviation standard de la distribution respectivement à la tension nulle. Sans tenir compte de l'effet de la résistance série de la diode, Werner a pris les limites de l'intégrale de l'équation du courant (I.53) de  $-\infty$  à  $+\infty$ , et a trouvé l'expression analytique de courant :

$$I = I_s (e^{\frac{qV}{k_B T}} - 1) \quad (I.56)$$

$$I_s = AA^*T^2 e^{-\frac{q\phi_{b \text{ app}}}{k_B T}} \quad (I.57)$$

Avec  $\phi_{b \text{ app}}$  est la barrière de potentiel apparente donnée par la relation :

$$\phi_{b \text{ app}} = \bar{\phi}_{b0} - \frac{q\sigma_0^2}{2k_B T} \quad (I.58)$$

De la relation (I.58) et en traçant  $\phi_{b \text{ app}}$  en fonction de  $(q/2k_B T)$  on peut déterminer la valeur moyenne ( $\bar{\phi}_{b0}$ ) et la déviation standard ( $\sigma_0$ ) .

Supposant que  $\bar{\phi}_b$  et  $\sigma^2$  varient linéairement avec le potentiel V, Werner a établi une relation analytique du facteur d'idéalité (n) en fonction de la température.

$$\frac{1}{n} - 1 = -\rho_2 + \frac{q\rho_3}{2k_B T} \quad (I.59)$$

Avec  $\rho_2, \rho_3$  sont des coefficient qui quantifient le changement de la distribution de la barrière de potentiel avec le potentiel V donnés par :

$$\bar{\phi}_b - \bar{\phi}_{b0} = \rho_2 V \tag{I.60}$$

$$\sigma^2 - \sigma_0^2 = \rho_3 V \tag{I.61}$$

Où  $\bar{\phi}_b$  et  $\sigma$  la barrière moyenne et la déviation standard à la tension V respectivement. Alors, le tracé de  $(n^{-1} - 1)$  en fonction de  $(q/2k_B T)$  nous permet de déterminer les deux coefficients  $\rho_2$  et  $\rho_3$ .

### 2.1.2 Influence de la résistance et les trois modèles inhomogènes de la diode Schottky

En utilisant l'expression du courant thermoïonique, l'influence de la résistance série peut être modélisée par trois façons [43]. Dans la première, on suppose que le courant est répandu totalement dans la plus grande partie de semiconducteur (full spreading). Par conséquent les diodes élémentaires sont en parallèles, et sont connectées en série avec la résistance série (Fig I.12a). Deuxièmement, il est possible de supposer que chaque diode élémentaire possède sa propre résistance série (Fig I.12b). Dans ce cas, le courant ne s'étale pas dans le substrat du semiconducteur, il est négligeable (No spreading). Du point de vue expérimental, l'approximation générale proche aux structures réelles, est le troisième cas . Les diodes élémentaires sont en parallèles et leur résistance équivalente ( $R_p$ ) est connectée en série avec une autre résistance ( $R_c$ ) (Fig I.12c). La résistance série  $R_p$  est formée de la résistance de la couche épitaxie et la résistance du contact ohmique. La résistance  $R_c$  est formée de la résistance du substrat.

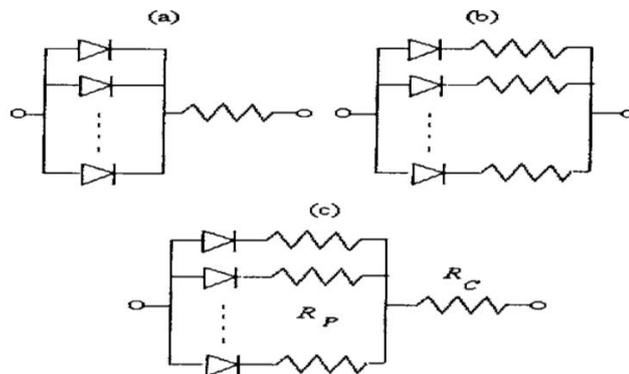


Figure I.12 – Les trois schémas (modèles) équivalents de la diode Schottky d'après la référence [43].

L'expression du courant qui passe à travers une diode inhomogène dans le premier cas est donnée par la relation suivante :

$$I = \int AA^*T^2\rho(\phi_b) \exp(-q\phi_b/k_B T) \{ \exp [q(V - RI)/k_B T] - 1 \} d\phi_b \quad (I.62)$$

Où A est la surface de la diode,  $A^*$  la constante de Richardson, R la résistance série de la diode.  $\rho(\phi_b)$  est la fonction de distribution gaussienne.

L'intégrale de l'équation (I.62) de  $-\infty$  à  $+\infty$  donne la relation analytique suivante :

$$I = AA^*T^2 \exp\left(-\frac{q\phi_{b \text{ app}}}{k_B T}\right) \left( \exp\left(\frac{qV - RI}{k_B T}\right) - 1 \right) \quad (I.63)$$

$$\phi_{b \text{ app}} = \bar{\phi}_{b0} - \frac{q\sigma_0^2}{2k_B T} \quad (I.64)$$

L'équation (I.64) est la même que (I.58), donc le premier modèle est le même modèle de Werner étudié précédemment plus l'effet de la résistance série R.

De même, le courant qui passe à travers la diode approximée par le deuxième modèle est donné par :

$$I = \int A\rho(\phi_b)j(\phi_b)d\phi_b \quad (I.65)$$

Avec

$$j(\phi_b) = A^*T^2 \exp(-q\phi_b/k_B T) \{ \exp [q(V - rj(\phi_b))/k_B T] - 1 \} \quad (I.66)$$

Où  $r = RA$  est la résistance surfacique ( $\Omega m^2$ ), et  $j = j(\phi_b)$  est la densité de courant élémentaire en fonction de la hauteur de barrière ( $\phi_b$ ).

Dans le troisième modèle où la résistance série totale est divisée en deux résistances : l'une est la résistance équivalente ( $R_p$ ) des résistances élémentaires  $r = R_p A$ , et la deuxième partie de la résistance ( $R_c$ ) représente la région où le courant est homogène, et commun pour toutes les diodes élémentaires.

la densité de courant élémentaire en fonction de la barrière de potentiel est donnée par :

$$j(\phi_b) = A^*T^2 \exp(-q\phi_b/k_B T) \{ \exp [q(V - AR_p j(\phi_b) - R_c I)/k_B T] - 1 \} \quad (I.67)$$

Et l'expression de la densité de courant totale à travers la diode est :

$$\begin{aligned} I &= \int A\rho(\phi_b)j(\phi_b)d\phi_b \\ &= \int AA^*T^2\rho(\phi_b) \exp(-q\phi_b/k_B T) \{ \exp [q(V - rj(\phi_b) - R_c I)/k_B T] - 1 \} d\phi_b \end{aligned} \quad (I.68)$$

## 2.2 Polarisation inverse de la diode Schottky

### 2.2.1 Courant d'émission thermoïonique inhomogène

La présence des fluctuations spatiales de la barrière de potentiel va changer la densité totale du courant de l'émission thermoïonique suivant la relation :

$$J_{TEinh} = \int J_s(V, \phi_b) \rho(\phi_b) d\phi_b \quad (I.69)$$

Avec  $J_s(V, \phi_b)$  est le courant thermoionique élémentaire donné par la relation (I.44)

### 2.2.2 Courant tunnel inhomogène

De façon analogue au Courant d'émission thermoïonique inhomogène le courant tunnel inhomogène s'exprime par la relation :

$$J_{tinh} = \int J_{tu}(\phi_b, V) \rho(\phi) d\phi_b \quad (I.70)$$

Où  $J_{tu}(\phi_b, V)$  est le courant thermoïonique émis dans une diode Schottky élémentaire de barrière  $\phi_b$  défini par la relation de Tsu-Esaki (équation I.51).

## 3 Le semiconducteur : carbure de silicium (SiC)

Tous les composants à base de carbure de silicium ont une propriété commune qui les rend extrêmement intéressants du point de vue de l'électronique de puissance : c'est leur capacité à pouvoir opérer à haute température et sous forte tension inverse. Les technologies "SiC" sont donc appelées à jouer un rôle majeur au cours des années à venir. Il existe également d'autres types d'applications pour SiC, plus directement liées à la technologie hyperfréquence utilisée dans la téléphonie mobile, les satellites, les radars...et qui nécessitent des composants spécifiques comme le MESFET de puissance par exemple. Des progrès remarquables ont été accomplis dans les dispositifs à semiconducteurs de puissance à base de SiC dans les années récentes [44, 45] avec deux aspects essentiels : Le premier concerne les propriétés des contacts métal-SiC, de la nature soit ohmique ou de rectification, qui sont une partie essentielle de tout dispositif et sont, comme tels, d'une importance fondamentale et technologique primordiale [46]-[50]. Le deuxième aspect est lié à l'amélioration de la tension de claquage inverse et les propriétés de blocage des dispositifs de puissance de SiC où il est nécessaire de réduire le champ au niveau du bord du composant.

### 3.1 Histoire du SiC

Sur Terre, le carbure de silicium (SiC) (Fig I.13) n'a quasiment pas d'existence naturelle. C'est un matériau artificiel essentiellement synthétisé pour les besoins de la technologie. Les premières mentions du carbure de silicium (SiC) remontent à 1824, cette découverte est attribuée à Berzelius [51, 52]. Il est néanmoins connu en gemmologie sous le nom de moissanite. Il a été découvert à l'état naturel en 1905 en Arizona dans les fragments d'une météorite trouvée au fond d'un cratère à Diablo Canyon. Il fut appelé ainsi en l'honneur de Ferdinand Henri Moissan (prix Nobel de chimie en 1906) qui l'avait identifié [53, 54]. Ce n'est cependant qu'à partir de 1891, qu'un procédé de fabrication

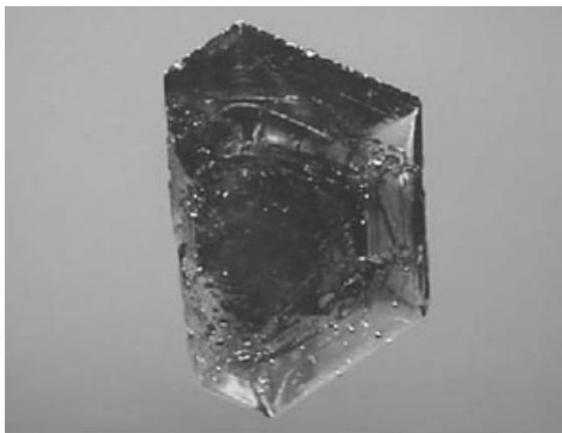


Figure I.13 – Cristal de SiC (hexagonal-H) [54].

industrielle de SiC a pu être mis au point par Eugène G. Acheson en Pennsylvanie [55]. Le besoin de réaliser des composants à base de SiC conduit, très rapidement, de nombreux utilisateurs potentiels à intensifier leurs efforts pour essayer de produire des substrats de qualité satisfaisante. C'est Joseph A. Lely [56] qui propose, en 1955, la première méthode de croissance de monocristaux de SiC de pureté électronique. Néanmoins, le manque de reproductibilité du procédé, la taille réduite des cristaux obtenus et l'impossibilité de contrôler efficacement le dopage résiduel limitent fortement les possibilités d'applications. Des progrès réellement significatifs ne sont réalisés qu'à partir de 1978. L'idée initiale est simple et le mérite de sa mise en oeuvre en revient à Tairov et Tsvetkov [57]. Ces auteurs introduisent un germe dans le procédé Lely permettant ainsi l'obtention de substrats de bonne qualité et de taille plus importante. En utilisant cette méthode, dite méthode de Lely modifiée (LML), il devient alors possible de faire croître de véritables monocristaux, de façon contrôlée. L'intérêt économique de la filière SiC se révèle alors possible et conduit à de rapides améliorations techniques dont celle proposée par Kuroda et Matsunami en 1987 [58] et à la création, la même année, de

CREE Inc, premier fabricant à vocation industrielle de substrats SiC mono-cristallins. Actuellement, beaucoup d'équipes étudient l'optimisation de la méthode de Lely modifiée. Les plus actives sont localisées à Kyoto (Japon), Linköping (Suède), Erlangen (Allemagne) ou encore à Grenoble (France)[59].

En ce qui concerne les couches épitaxiées, plusieurs méthodes et plusieurs types de substrat sont utilisés. Les méthodes les plus communes sont les dépôts en phase vapeur (CVD) sous pression atmosphérique ou sous basse pression. Les températures d'épitaxie sont le plus souvent de l'ordre de 1400 à 1600 °C. Néanmoins, la migration des défauts, microtubes et dislocations, depuis le substrat vers la couche épitaxiée, reste un problème majeur. La minimisation de ces défauts est une condition nécessaire au développement des composants de puissance et des circuits intégrés à base de SiC [60].

Parmi les semiconducteurs à large bande interdite le carbure de silicium (SiC) occupe une place particulière car il est actuellement le seul disponible à la fois sous forme de monocristaux massifs et sous forme de couches épitaxiées de bonnes qualités. En outre il peut facilement être dopé n ou p .

### 3.2 Structure cristalline et polytypisme du SiC

Le carbure de silicium présente une structure cristalline compacte, résultant d'un empilement de bicouches élémentaires silicium-carbone. Celles-ci sont identiques quelle que soit la structure considérée. La différence se fait au niveau de la manière de les empiler [61].

Dans la figure I.14, on peut voir qu'à partir d'une couche compacte A, il existe deux possibilités d'empilement par des couches positionnées soit en B, soit en C. La juxtaposition des couches peut se faire dans un ordre aléatoire (mais néanmoins périodique). On parle alors de polytype.

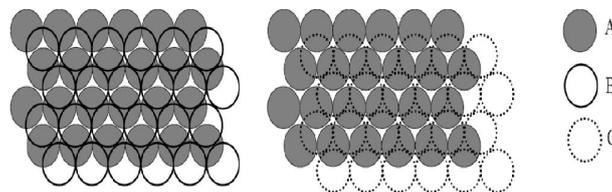


Figure I.14 – Empilement des couches compactes B ou C sur une couche compacte A.

La structure de base du SiC est un tétraèdre constitué de quatre atomes de silicium et d'un atome de carbone en son centre (Fig. I.15), la distance entre deux atomes de silicium est de  $3,08 \text{ \AA}$ , et alors qu'elle est de  $1,89 \text{ \AA}$  entre un atome de silicium et un autre de carbone [52]. Les liaisons Si-C ont un caractère essentiellement covalent (88 % de covalence et 12 % d'ionicté, C étant plus électronégatif que Si) qui leur confère une énergie élevée d'environ 5 eV [62].

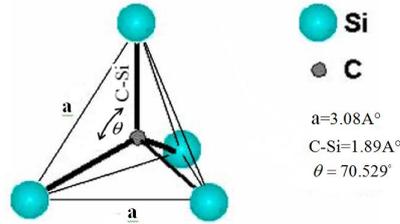


Figure I.15 – Arrangement tétraogonal entre un atome de carbone et quatre atomes de silicium [59].

Il existe environ 200 polytypes (structures cristallographiques) répertoriés du SiC [63]-[65]. Les plus utilisés en électronique de puissance sont le 6H, 4H (H pour hexagonal), le 3C (C pour cubique) et le 15R (R pour rhomboédrique). Le polytype est identifié par le nombre de plans cristallins compacts d'une séquence et le type cristallographique. Les trois polytypes les plus utilisés dans la recherche (3C, 4H, 6H) sont représentés sur la figure I.16, en présentant l'empilement des bicouches suivant l'axe principal c [0001].

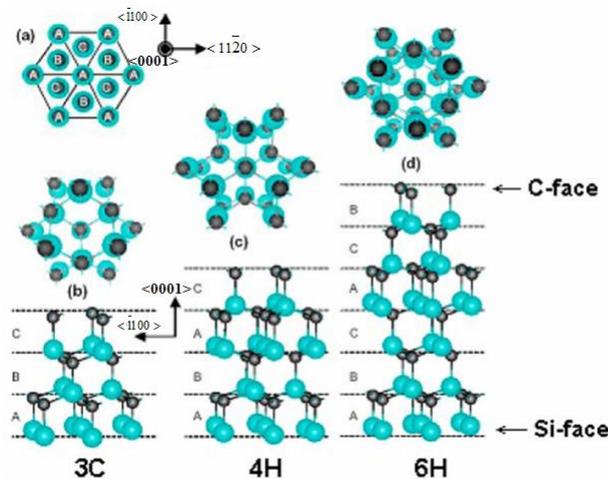


Figure I.16 – Structures cristallines des principaux polytypes de carbure de silicium : 3C, 4H, 6H [52].

### 3.3 Propriétés physiques du SiC

Le nombre d'atomes par maille élémentaire varie pour chaque polytype, ce qui influe naturellement, sur la largeur du gap, et par conséquent sur les propriétés optiques et électriques de chacun d'eux [61]. Mais la structures de maille n'est pas la seule cause de disparité des paramètres physiques. En effet, certain d'entre elles possèdent des sites non-équivalents. Ainsi le 4H-SiC présente un site atomique cubique et un site hexagonal, tandis que le 6H-SiC a deux sites cubiques et un site hexagonale. Cela a des conséquences importantes pour les propriétés électriques des différents polytypes de SiC [66].

Les principales propriétés physiques du carbure de silicium à 300 K sont présentées dans le tableau I.1 en les comparant aux autres semiconducteurs [67, 68, 51].

	Ge	Si	GaAs	3C-SiC	4H-SiC	6H-SiC	GaN	Diamant
Bande interdite $E_g$ (eV)	0.66	1.1	1.4	2.2	3.26	3	3.39	5.45
Champ. Claqu. $E_c$ (MV/cm)	0.1	0.3	0.4	1.2	2	2.4	3.3	5.6
Constant. diélectrique $\epsilon_r$	16	11.8	12.8	9.6	10	9.7	9	5.5
Mobil. élec $\mu_n$ ( $\text{cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$ )	3900	1350	8500	900	720	370	900	1900
Mobil. trou $\mu_p$ ( $\text{cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$ )	1900	420	320	40	115	90	30	1600
Vites. sat. éle $V_{\text{sat}}$ ( $10^7 \text{cm} \cdot \text{s}^{-1}$ )	0.5	1	2	2	2	2	2.5	2.7
Cond. therm $\lambda$ ( $\text{W} \cdot \text{K}^{-1} \cdot \text{cm}^{-1}$ )	0.6	1.5	0.5	4.5	4.5	4.5	1.3	20

**Tableau I.1** – Quelques propriétés physiques des principaux polytypes de SiC, comparaison avec celles du Ge, Si, GaAs, GaN et du Diamant.

Pour des applications de puissance, les propriétés demandées sont liées à des aspects tels que la température, la tenue en tension et faible résistivité et requièrent ainsi des matériaux à large bande interdite (>3 eV, donc faible densité de porteurs intrinsèques à haute température), à bonne conductivité thermique, à fort champ électrique de claquage et bonne mobilité des porteurs [69].

### 3.4 Avantage du SiC en microélectronique

1. **Un grand gap  $E_g$**  : Grâce à leur large bande d'énergie interdite impliquant une faible densité de porteurs intrinsèques  $n_i$ , les composants SiC peuvent fonctionner à des températures de jonction élevées (jusqu'à 600 °C), sans emballement thermique dû aux courants de fuite en polarisation inverse. Ceci peut permettre une réduction de taille.
2. **Un fort champ de claquage  $E_C$**  : En effet, le champ de claquage du SiC étant environ 10 fois plus élevé que du silicium, permet de tenir la tension inverse sur une couche environ 10 fois moins épaisse et 50 fois plus dopée qu'avec le silicium. Cela permet d'avoir des tensions de blocage plus élevées. Un champ de claquage élevé permet une réduction des pertes, donc, encore une fois, la réduction de la taille du système de refroidissement ou l'augmentation de la puissance, ou l'augmentation de la fréquence de commutation.
3. **Une vitesse de saturation des porteurs  $V_{sat}$  élevée** : Deux fois plus élevée que celle du silicium, ce qui permet la réalisation d'interrupteurs de puissance commutant à haute fréquence. Ceci permet aussi d'augmenter les niveaux de puissance des systèmes hyperfréquences.
4. **Une très bonne conductivité thermique  $\lambda_{th}$**  : Avec une valeur comparable à celle du cuivre, qui permet une meilleure évacuation de la chaleur au sein des composants, favorisant la montée en puissance ou en fréquence.
5. **Une forte cohésion** : Grâce à une énergie de liaison élevée Si-C (5 eV) permettant d'obtenir une grande stabilité chimique et physique à haute température (jusqu'à 1300 °C), ainsi qu'une grande résistance aux radiations. Cela permet l'utilisation des composants à base de SiC dans des environnements hostiles tels que les installations nucléaires ou spatiales. De plus il est chimiquement inerte, seules quelques bases concentrées, portées à haute température (KOH en fusion...), peuvent l'attaquer.

L'inconvénient du SiC est la mobilité des porteurs qui est relativement faible, tout en restant du même ordre de grandeur que celle du silicium. Cela est compensé par des dimensions réduites pour les composants SiC. On note ici que le diamant présente des caractéristiques très attractives qui en font potentiellement le semiconducteur idéal dans différentes domaines des composants électroniques. Plusieurs problèmes technologiques restent toutefois à résoudre. Le principal d'entre eux est le dopage n, ainsi, la réalisation de substrats opérationnels est peu coûteux [60].

## 4 Diode Schottky à base de SiC

De nombreux métaux ont été essayés pour obtenir de bons contacts ohmiques sur SiC (nickel, aluminium, titane, tungstène, platine, rhénium, or, cuivre, palladium, molybdène, tantale). Les plus utilisés sont le nickel et le tungstène sur du SiC de type n. l'aluminium et le titane sur type p [69].

La réalisation de contacts Schottky sur SiC requiert les mêmes métaux que pour le contact ohmique, la seule différence est le niveau de dopage requis, beaucoup plus bas ( $< 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ ). Le nickel et le titane semblent adaptés à la réalisation de contact Schottky sur type n [69].

Dans le tableau I.2 on résume quelques valeurs de la hauteur de barrière ainsi que le facteur d'idéalité pour les structures métal/4H-SiC à température ambiante.

Face	Métal	Hauteur de barrière (eV)		Facteur d'idéalité (n)
		I-V	C-V	
C-	Ti	1.16	1.3	1.02-1.2
Si-	Ti	0.8		1.15
	Ti/Au/Pt/Ti	1.17		1.09
	Ti	1.17		1.06
Si-	TiW	1.22	1.23	1.05
	TiW	1.18	1.19	1.1
	Cu	1.6		<1.1
Si-	Au	1.73	1.85	1.02-1.2
C-	Au	1.8	2.1	1.02-1.2
Si-	Ni	1.62	1.75	1.02-1.2
C-	Ni	1.6	1.9	
Si-	Ni	1.3		1.21
Si-	Ni	1.59		1.05
Si-	Pt	1.39		1.01
	Al	0.65		2.28
	W	1.19		1.02
Si-	Mo	1.03		1.02

**Tableau I.2** – Quelques hauteurs de barrière pour Métal/4H-SiC mesurées à la température 300 K [44, 51].

Comme le montre le tableau I.2, la hauteur de barrière de la diode Schottky est variée selon la nature de métal utilisé, la face de semiconducteur (Si ou C), et la méthode de fabrication des contacts, c'est-à-dire les conditions de préparation qui ne sont pas les mêmes pour chaque contact. C'est la même chose quand on utilise le modèle inhomogène pour décrire le contact Schottky (Tableau I.3), il y a une différence entre

Métal	valeur moyenne $\bar{\phi}_{b0}$ (eV)	Déviatiion standard $\sigma_0$ (eV)	$\rho_2$	$\rho_3$ (mV)	Constante de Richardson $A^*$ ( $A/K^2cm^2$ )	Référence
Ni	1.71	0.114	-0.1004	-0.0128	156.3	[70]
Ni	0.968	0.084	-0.034	-9.4		[71]
Ni	1.034	0.092	0.002	-10.6		[71]
Ni	0.997	0.082	-0.030	-9.4		[71]
W	1.277	0.092	-0.010	-3.7	145	[72]

**Tableau I.3** – Quelques paramètres extraits à partir des contacts Schottky(Métal/4H-SiC) en utilisant le modèle inhomogène.

les paramètres extraits ( $\bar{\phi}_{b0}$ ,  $\sigma_0$ ,  $\rho_2$ ,  $\rho_3$ ) selon le métal utilisé et la méthode de préparation.

---

---

# CHAPITRE II

---

## MODÉLISATION ET INHOMOGENÉITÉ EN POLARISATION DIRECTE

Dans ce chapitre nous allons faire une modélisation de la caractéristique courant-tension (I-V) en polarisation directe. Ce chapitre est divisé en deux parties : la première est une étude de simulation, tandis que la deuxième partie est une étude expérimentale de la structure Schottky Molybdène/carbure de silicium (Mo/4H-SiC).

### 1 Partie simulation

Pour l'étude de la simulation, nous utiliserons les paramètres suivants ( $\bar{\phi}_{b0} = 0.8 \text{ eV}$ ,  $\sigma_0 = 0.07 \text{ eV}$ ,  $0.08 \text{ eV}$ ,  $R = 10 \Omega$ ,  $20 \Omega$ ), la surface de la diode est  $7.87 \cdot 10^{-3} \text{ cm}^2$  (1mm de diamètre). Ces trois paramètres sont souvent utilisés par Chand [73]-[78] et Osvald [43] dans le domaine de simulation.

#### 1.1 Problème de l'intégrale à basses température

Comme nous avons vu au premier chapitre la relation de courant dans le modèle inhomogène (1<sup>er</sup> modèle) est donnée par l'expression :

$$I = I_S \left( e^{\frac{q(V-RI)}{k_B T}} - 1 \right) \quad (\text{II.1})$$

avec

$$I_s = AA^* T^2 e^{-\frac{q\phi_{baP}}{k_B T}} \quad (\text{II.2})$$

$$\phi_{b\ app} = \bar{\phi}_{b0} - \frac{q\sigma_0^2}{2k_B T} \quad (II.3)$$

En partant des équations (II.1), (II.2) et (II.3) Chand [73] a fait une simulation du courant et a trouvé que les caractéristiques I-V-T se croisent et que les courants à basses températures sont plus élevés que les courants à hautes températures comme le montre la figure II.1a. Chand a conclu que l'origine de ces anomalies est le courant de saturation  $I_s$  qui contient lui-même des anomalies ; le courant de saturation est augmenté à basses températures comme le montre la figure II.2a.

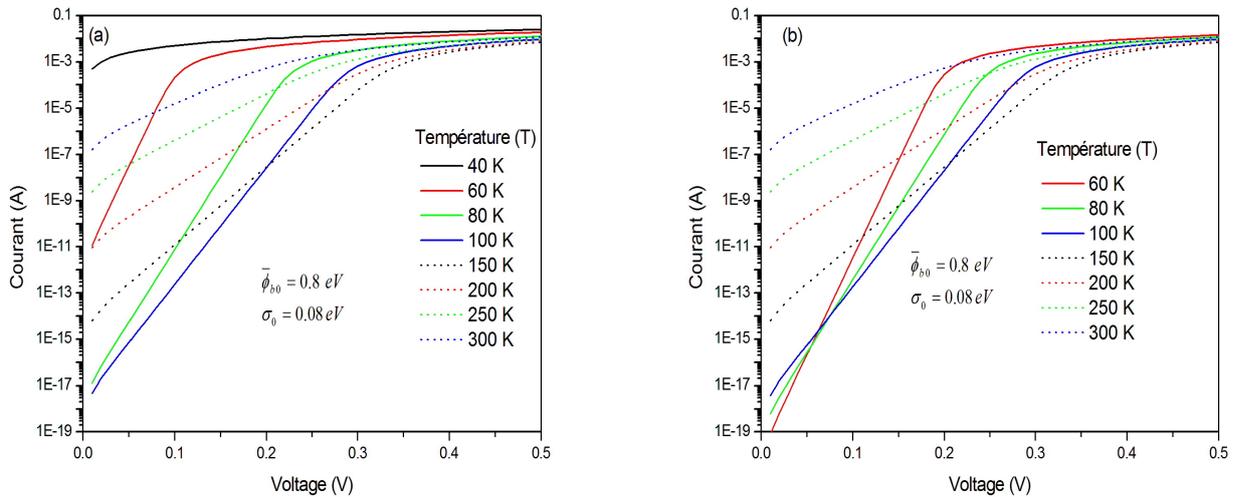


Figure II.1 – Caractéristiques I-V-T simulées : (a) par l'équation (II.1), (b) par l'équation modifiée (II.4),  $R=20\ \Omega$ .

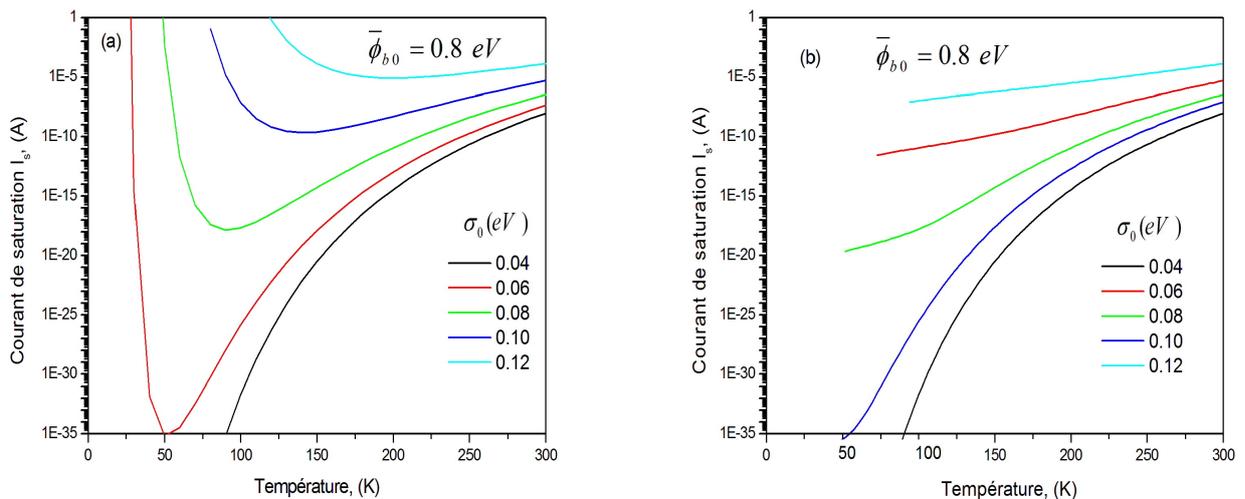


Figure II.2 – Variation de courant de saturation en fonction de la température pour différentes déviations standard : (a) suivant l'équation (II.2), (b) suivant l'équation modifiée (II.5).

Pour enlever ces anomalies de courant de saturation Chand a pensé que les limites de l'intégrale ( $-\infty$  à  $+\infty$ ) prises par Warner n'ont pas de sens physique (la hauteur de barrière ne peut ni dépasser  $E_g$  ni être négative), suite à quoi Chand propose de limiter l'intégrale entre zéro (0) et  $2\bar{\phi}_{b0}$ . En faisant ceci, il obtient pour le courant l'expression suivante :

$$I = I'_S \left( e^{\frac{q(V-RI)}{k_B T}} - 1 \right) \quad (\text{II.4})$$

avec

$$I'_s = I_s \left( \frac{\text{erf}(f_1) - \text{erf}(f_2)}{2} \right) \quad (\text{II.5})$$

Où les deux fonctions  $f_1$  et  $f_2$  sont données par :

$$f_1 = \left( \frac{\sigma_0^2 q}{k_B T} + \bar{\phi}_{b0} \right) \frac{1}{\sigma_0 \sqrt{2}} \quad (\text{II.6})$$

$$f_2 = \left( \frac{\sigma_0^2 q}{k_B T} - \bar{\phi}_{b0} \right) \frac{1}{\sigma_0 \sqrt{2}} \quad (\text{II.7})$$

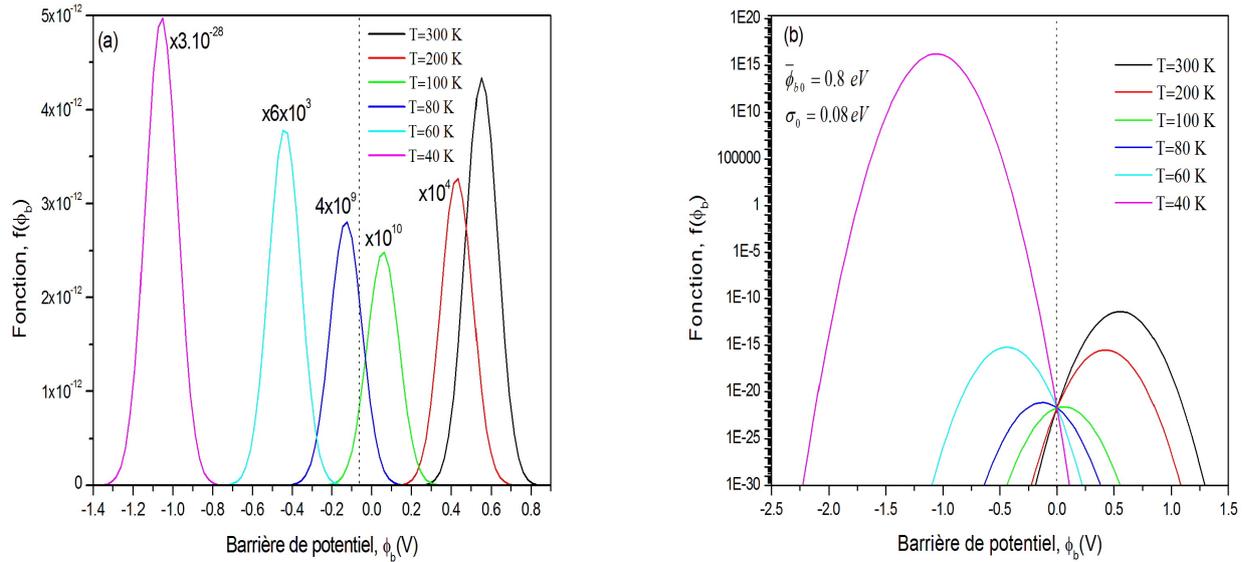
En prenant l'équation (II.5), on obtient des courants de saturation qui diminuent lorsque la température diminue comme la montre la figure II.2b. De cette façon Chand a pu enlever les anomalies de l'augmentation de courant à basses températures (Fig II.1b) et a limité l'intégrale entre zéro (0) et  $2\bar{\phi}_{b0}$ . De notre part nous allons suivre une autre technique et on montre que le raisonnement de Chand est erroné et que les équations (II.4) et (II.5) ne sont pas valables.

D'abord on considère l'équation du courant suivante :

$$\begin{aligned} I &= \int_{-\infty}^{+\infty} AA^* T^2 \rho(\phi_b) \exp(-q\phi_b/k_B T) \{ \exp [q(V - RI)/k_B T] - 1 \} d\phi_b \\ &= AA^* T^2 \{ \exp [q(V - RI)/k_B T] - 1 \} \frac{1}{\sigma_0 \sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{(\phi_b - \bar{\phi}_{b0})^2}{2\sigma_0^2} - q\phi_b/k_B T} d\phi_b \quad (\text{II.8}) \\ &= AA^* T^2 \{ \exp [q(V - RI)/k_B T] - 1 \} \frac{1}{\sigma_0 \sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} f(\phi_b) d\phi_b \end{aligned}$$

Avec

$$f(\phi_b) = e^{-\frac{(\phi_b - \bar{\phi}_{b0})^2}{2\sigma_0^2} - q\phi_b/k_B T} \quad (\text{II.9})$$



**Figure II.3** – Variation de la fonction  $f(\phi_b)$  en fonction de la hauteur de barrière pour différentes températures, (a) échelle linéaire, (b) échelle semi-logarithmique.

La valeur de l'intégrale  $\int_{-\infty}^{+\infty} f(\phi_b) d\phi_b$  est égale à l'aire de la surface comprise entre la courbe de la fonction  $f(\phi_b)$  et l'axe des abscisses. La figure II.3 représente les courbes de la fonction  $f(\phi_b)$  en fonction de la hauteur de barrière pour différentes températures.

De la figure II.3 on voit clairement que lorsque la température diminue la courbe de la fonction  $f(\phi_b)$  est déplacée vers les potentiels négatifs et que l'aire de la surface délimitée par la courbe diminue puis elle augmente à basses températures. C'est pour cette raison que le courant de saturation suit le même comportement que l'aire de la surface (voir Fig II.2a). Si on prend les bornes de l'intégrale de 0 à  $2\bar{\phi}_{b0}$  comme l'a fait Chand on ne prend que l'aire délimitée par les queues des courbes, cette aire diminue lorsque la température diminue comme le montre la figure II.3b. Cette diminution de l'aire conduit à la diminution de courant de saturation (Fig II.2b). Donc, on conclut que le raisonnement de Chand est non correct et les équations (II.4) et (II.5) ne sont pas valables, parce que l'intégrale (ou l'aire) de l'équation (II.8) est fautive.

Pour la température 300 K par exemple on voit que la totalité de l'aire de la surface comprise entre la courbe de la fonction  $f(\phi_b)$  et l'axe des abscisses est située entre 0.3 eV et 0.8 eV (Fig. II.3a). Alors, on peut réduire l'intégrale de  $(-\infty$  à  $+\infty)$  à (0.3 eV à 0.8 eV). La figure II.4 montre la caractéristique I-V simulée par l'équation (II.8) à différents intervalles d'intégration.

On note aussi que lorsque la barrière moyenne diminue ou la déviation standard augmente la courbe de la fonction  $f(\phi_b)$  se déplace aussi vers les potentiels négatifs à basses températures comme la montre la figure II.5.

Pour que la courbe de  $f(\phi_b)$  ne se déplace pas vers les potentiels négatifs à basses températures il faut que la déviation standard prenne des valeurs faibles.

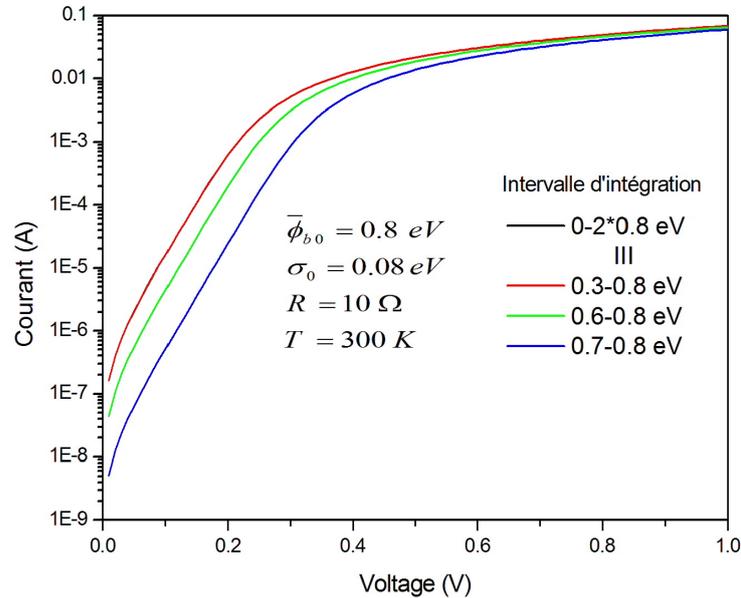


Figure II.4 – Caractéristiques I-V simulées par l'équation (II.8) en différents intervalles d'intégration.

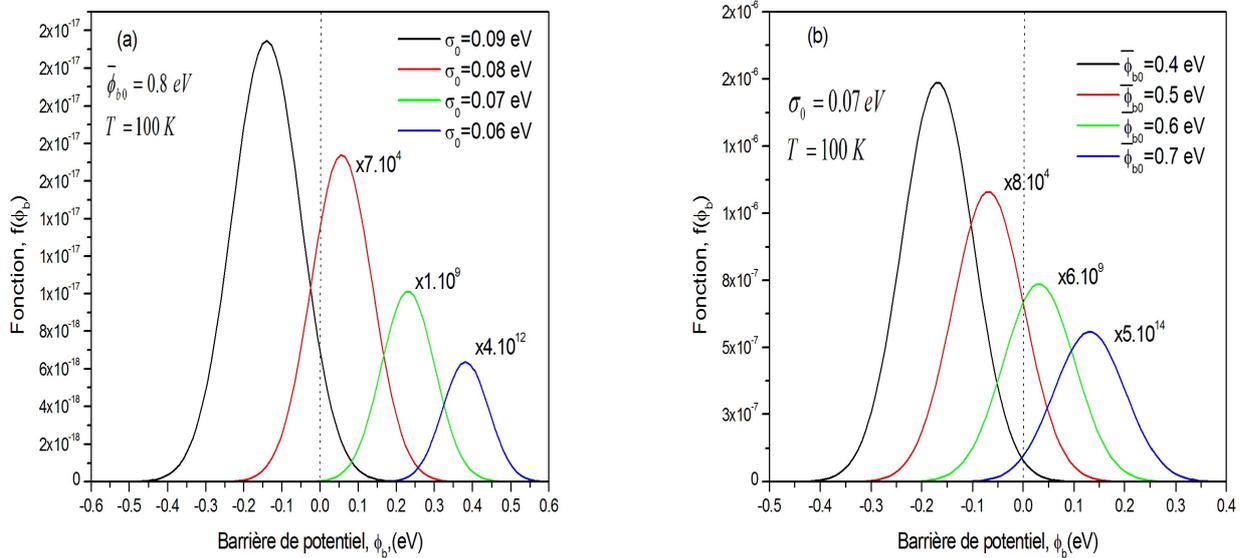


Figure II.5 – Variation de la fonction  $f(\phi_b)$  en fonction de la barrière de potentiel : (a) pour différentes déviations standard, (b) pour différentes barrière moyennes à la température 100 K.

## 1.2 Caractéristique I-V d'une diode Schottky inhomogène

Dans ce paragraphe nous nous intéressons au modèle réel (le troisième modèle), qui est le cas général. Pour trouver le premier et le deuxième modèles il suffit de remplacer  $R_p = 0 \Omega$  ou  $R_c = 0 \Omega$  respectivement.

Pour trouver la caractéristique I-V de la diode Schottky inhomogène il est nécessaire de résoudre numériquement l'équation suivante :

$$I = \int AA^*T^2\rho(\phi_b) \exp(-q\phi_b/k_B T) \{ \exp [q(V - R_p A j(\phi_b) - R_c I)/k_B T] - 1 \} d\phi_b \quad (\text{II.10})$$

avec

$$j(\phi_b) = A^*T^2 \exp(-q\phi_b/k_B T) \{ \exp [q(V - R_p A j(\phi_b) - R_c I)/k_B T] - 1 \} \quad (\text{II.11})$$

La méthode que nous avons utilisée est la méthode de Newton : Pour chaque valeur de courant (I) l'équation (II.11) se résout numériquement par la méthode de Newton pour trouver les densités de courant élémentaires  $J(\phi_b)$  afin de les insérer dans l'équation (II.10). Nous avons limité l'intégrale de l'équation (II.10) entre 0 et  $2\bar{\phi}_{b0}$ .

L'organigramme de la figure II.6 résume les différentes étapes pour résoudre l'équation (II.10) pour chaque valeur de tension V.

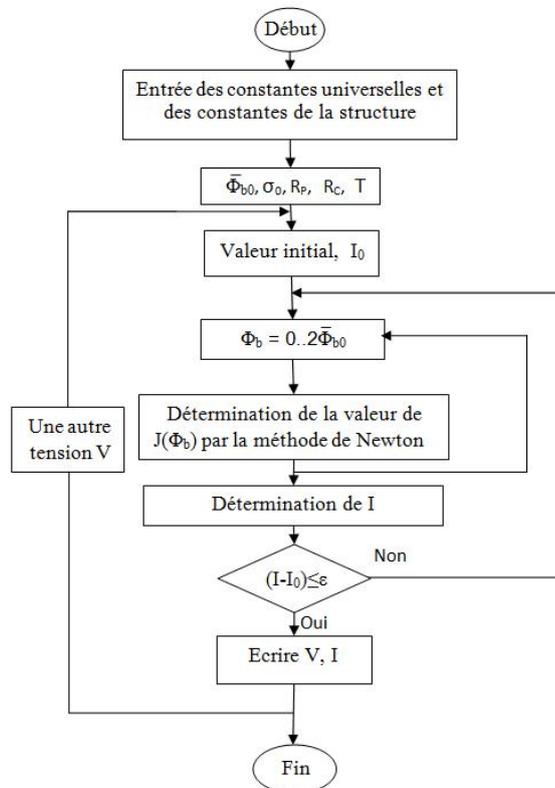
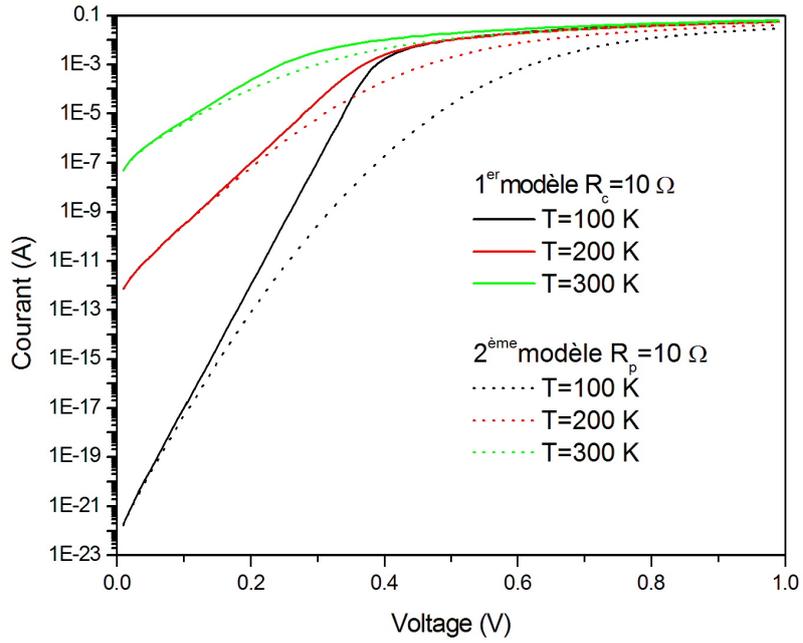


Figure II.6 – Organigramme utilisé pour résoudre l'équation (II.10).

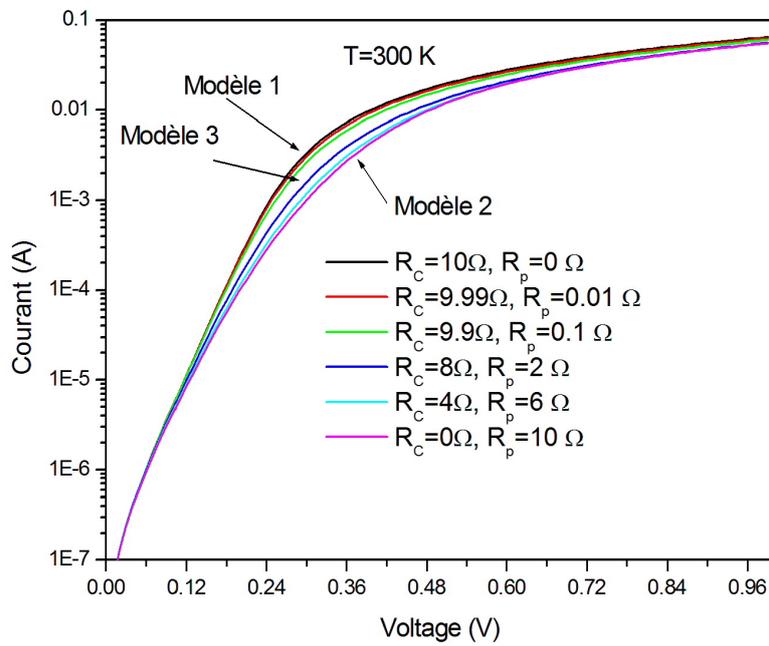
La figure II.7 représente les caractéristiques I-V pour différentes températures simulées par les deux modèles 1 et 2. Pour chaque température les caractéristiques de deux modèles ne coïncident pas dans tout le domaine de voltage (elles divergent dans la région où il y a la courbure de la caractéristique, cette divergence est plus importante quand la température diminue). Les caractéristiques I-V du premier modèle se croisent (100 K et 200 K), par contre celles du deuxième modèle ne se croisent pas. Une autre différence entre les deux caractéristiques I-V est que celles-ci restent courbées dans tout l'intervalle du voltage, par contre les caractéristiques du premier modèle montrent deux parties l'une linéaire et l'autre courbée. La figure II.8 représente la caractéristique I-V à la température 300 K avec la barrière moyenne 0.8 eV et la déviation standard 0.07 eV pour différentes valeurs de  $R_p$  et  $R_c$  sachant que la somme de ces deux résistances doit être constante et égale à  $10 \Omega$ . La figure II.8 montre que les caractéristiques I-V du troisième modèle ( $R_p$  et  $R_c$  différentes de zéro) sont comprises entre les deux cas limites :  $R_p = 0\Omega$  (1<sup>er</sup> modèle) et  $R_c = 0\Omega$  (2<sup>ème</sup> modèle). Donc, si on parle des paramètres d'un contact homogène ( $\phi_b, n, R_s$ ) on peut prévoir que les paramètres du troisième modèle sont compris aussi entre les paramètres des deux autres modèles.

Avant l'application du troisième modèle sur des structures réelles de Mo/4H-SiC, c'est-à-dire l'extraction des quatre paramètres inhomogènes ( $\bar{\phi}_{b0}, \sigma_0, R_c, R_p$ ) à partir des caractéristiques I-V mesurées, nous allons faire une étude de simulation afin que nous pouvons voir comment influent ces quatre paramètres inhomogènes sur les trois paramètres homogène ( $\phi, n, R_s$ ).

Pour étudier l'influence de chaque paramètre en fonction de la température on fixe les trois autres paramètres, et on fait varier le paramètre considéré. Les caractéristiques I-V-T générées par ces quatre paramètres seront considérés comme des données expérimentales puis on applique sur elles le modèle homogène pour extraire les trois paramètres ( $\phi, n, R_s$ ).



**Figure II.7** – Caractéristique I-V simulées selon le premier et le deuxième modèle inhomogènes pour différentes températures,  $\bar{\phi}_{b0} = 0.8 \text{ eV}$ ,  $\sigma_0 = 0.07 \text{ eV}$ .



**Figure II.8** – Caractéristiques I-V simulées selon le troisième modèle inhomogène,  $\bar{\phi}_{b0} = 0.8 \text{ eV}$ ,  $\sigma_0 = 0.07 \text{ eV}$ ,  $R_p + R_c = 10 \text{ } \Omega$ ,  $T = 300 \text{ K}$ .

## 1.3 Méthodes d'extraction des trois paramètres homogènes

### 1.3.1 Introduction

Le fonctionnement de la diode Schottky est décrit généralement par la caractéristique I-V qui permet de donner les informations sur les mécanismes du transport électrique interne et sur les imperfections des étapes technologiques de sa fabrication. Cette caractéristique dépend de plusieurs paramètres électriques, tels que la résistance série ( $R_s$ ), la hauteur de barrière ( $\phi_b$ ), et le facteur d'idéalité ( $n$ ). La connaissance, avec précision, de ces paramètres, permet de comprendre et d'expliquer certains phénomènes électriques dans ces jonctions [79]. La détermination avec une grande précision, de ces paramètres doit être effectuée. Plusieurs méthodes graphiques, analytiques et numériques ont été utilisées pour extraire et optimiser ces derniers. Ces méthodes sont réparties en cinq classes principales [80] :

1. Méthode standard : Analyse de la partie linéaire de  $\log(I)$  en fonction de  $V$ .
2. Construction d'une fonction auxiliaire : Faire des manipulations algébriques des données I-V pour construire des fonctions auxiliaire simples. On cherche souvent des fonctions à maximum ou à minimum, ou des droites.
3. Méthodes utilisant la conductance à faibles signaux : Ce sont des méthodes basées sur les dérivées du courant par rapport à la tension.
4. Méthodes basées sur les intégrales du courant par rapport à la tension.
5. Méthodes basées sur des algorithmes d'optimisation.

Farhat-Hamida dans son travail [80] a testé ces différentes méthodes et a conclu que la méthode d'optimisation verticale (VOM) qui est développée par Osvald et Dobrocka [81] est efficace et donne de meilleurs résultats par rapport aux autres méthodes qui peuvent conduire à des valeurs très éloignées les unes des autres.

### 1.3.2 Méthode D'optimisation Verticale

La méthode des moindres carrés est l'une des méthodes la plus utilisée pour modéliser des mesures expérimentales par une fonction analytique prédéterminée. Cette méthode consiste à minimiser l'écart moyen relatif entre l'ensemble de  $N$  mesures  $I_i^{ex}$  et l'ensemble des résultats  $I_i^{th}$  calculés par le modèle de l'équation (I.25). En d'autre terme, il s'agit de minimiser la fonction suivante :

$$S = \sum_{i=1}^N \left( \frac{I_i^{ex} - I_i^{th}}{I_i^{th}} \right)^2 \quad (\text{II.12})$$

Pour minimiser la fonction S, il est nécessaire de résoudre le système d'équations non linéaire suivant :

$$F_k = \frac{\partial S}{\partial x_k} = \sum_{i=1}^N \left( \frac{I_i^{ex} - I_i^{th}}{I_i^{th}} \right) \frac{I_i^{ex}}{(I_i^{th})^2} \frac{\partial I_i^{th}}{\partial x_k} = 0 \tag{II.13}$$

$$(k = 1, 2, 3), (x_1 = n, x_2 = \phi_b, x_3 = R_s)$$

$x_k$  sont les trois paramètres d'une diode homogène qui sont : le facteur d'idéalité ( $n$ ), la hauteur de barrière de potentiel ( $\phi_b$ ) et la résistance série ( $R_s$ ).

La méthode adaptée pour la résolution de ce système non linéaire est la méthode de Newton-Raphson. Cette méthode est détaillée dans l'annexe 1.

L'organigramme illustré sur la figure II.9 résume les différentes étapes pour la détermination des trois paramètres d'une diode Schottky homogène. Pour valider notre programme, basé sur cet organigramme nous l'avons testé sur plusieurs structures théoriques.

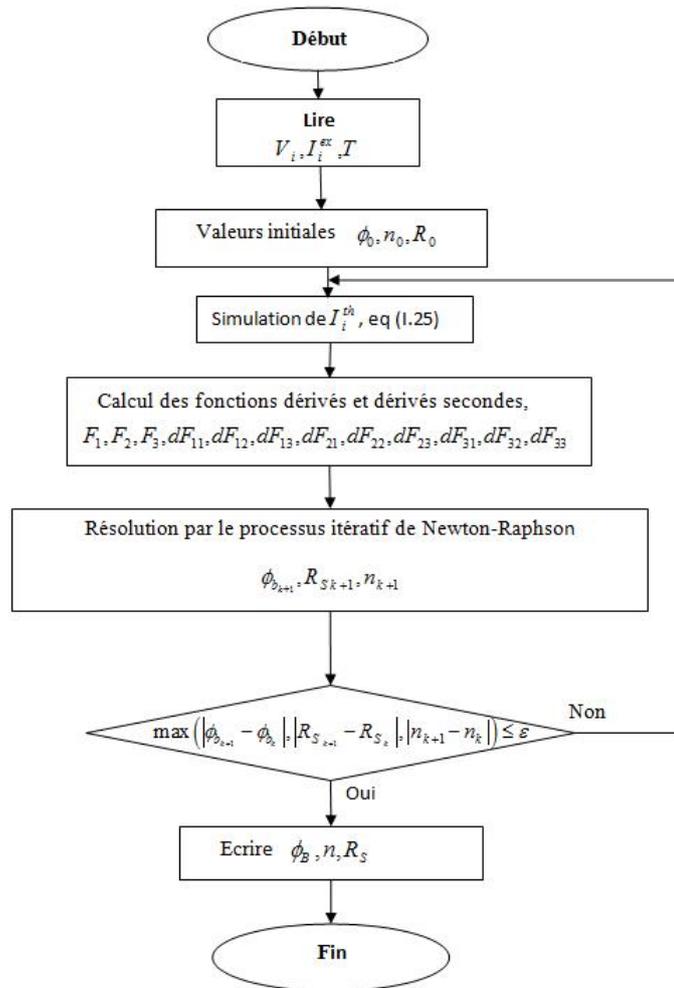
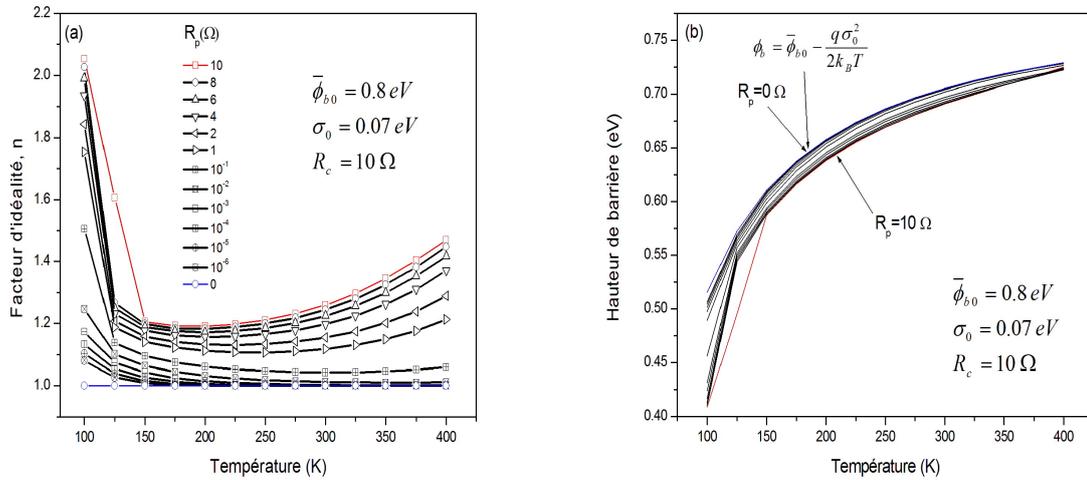


Figure II.9 – L'organigramme Utilisé pour l'extraction des trois paramètres ( $\phi_b$ ,  $n$  et  $R_s$ ) d'une diode Schottky homogène.

### 1.4 Effet de la Résistance $R_p$ sur la hauteur de barrière et sur le facteur d'idéalité



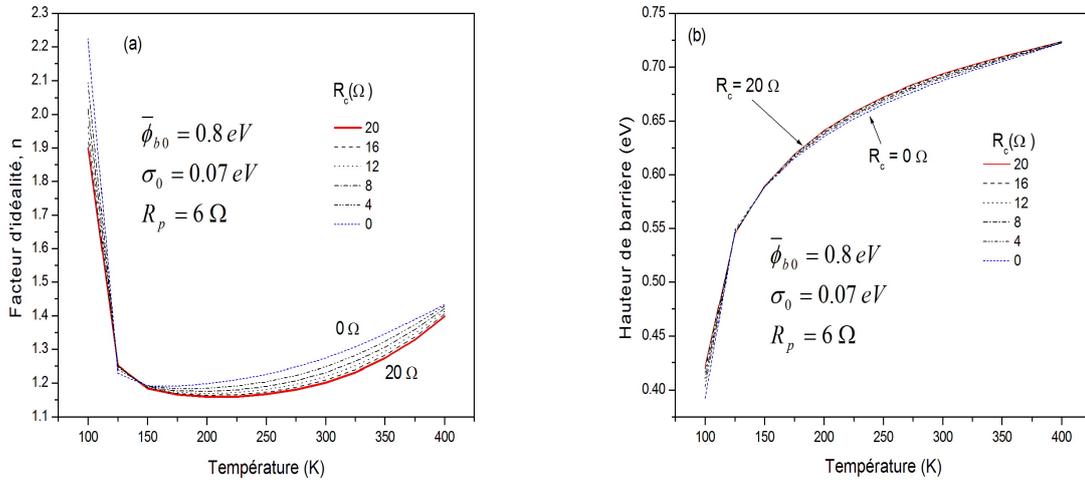
**Figure II.10** – (a) Facteur d'idéalité, (b) hauteur de barrière en fonction de la température pour différentes résistances  $R_p$ .

La figure II.10 représente l'effet de la résistance  $R_p$  sur la hauteur de barrière ( $\phi_b$ ) et sur le facteur d'idéalité ( $n$ ) en fonction de la température. De la figure II.10a on observe que lorsque la température augmente, le facteur d'idéalité diminue à basses températures puis il s'augmente à hautes températures. Ce comportement de  $n$  est observé dans nos mesures expérimentales (voir Fig.II.20).

Lorsque la résistance  $R_p$  diminue, le facteur d'idéalité ( $n$ ) diminue et quand  $R_p$  prend une valeur nulle le facteur d'idéalité atteint la valeur minimale 1. Ce résultat implique que la résistance  $R_p$  est responsable de l'existence du facteur d'idéalité,  $n$  et celui-ci toujours plus grand que l'unité (1).

De la figure (II.10b) on observe aussi que lorsque la température augmente la hauteur de barrière de potentiel augmente aussi. Ce résultat est observé aussi dans nos mesures expérimentales (voir la Fig. II.18). La hauteur de barrière est augmentée quand la résistance  $R_p$  diminue. Cette variation de la hauteur de barrière en variant la résistance  $R_p$  n'a pas un grand effet sur l'évolution de  $\phi_b$  (les courbes sont presque parallèles et non divergentes) et la variation de la hauteur de barrière en fonction de la température coïncide avec celle donnée par Werner (équation II.3) quand  $R_p$  atteint la valeur zéro.

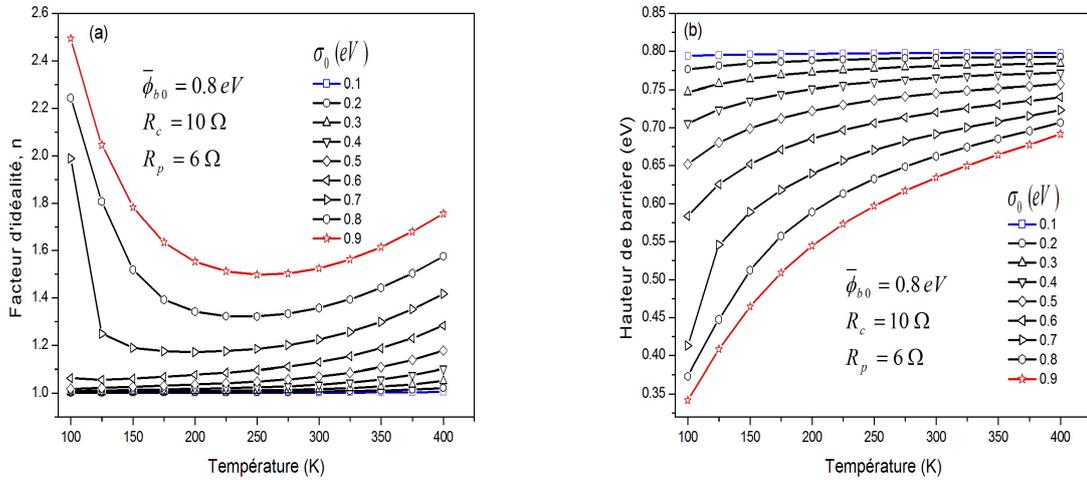
## 1.5 Effet de la Résistance $R_c$ sur la hauteur de barrière et sur le facteur d'idéalité



**Figure II.11** – (a) Facteur d'idéalité, (b) hauteur de barrière de potentiel en fonction de la température pour différentes résistances  $R_c$ .

La figure II.11 représente l'effet de la résistance  $R_c$  sur le facteur d'idéalité ( $n$ ) et sur la hauteur de barrière de potentiel ( $\phi_b$ ) en fonction de la température. De la figure II.11a on voit que lorsque la résistance  $R_c$  augmente le facteur d'idéalité ( $n$ ) diminue, cette variation de  $n$  en fonction de  $R_c$  reste faible par rapport à la variation de  $n$  en fonction de  $R_p$  et le comportement est inversé en fonction de l'augmentation de la résistance  $R_p$ . La figure II.11b montre que l'effet de la résistance  $R_c$  sur la variation de la hauteur de barrière de potentiel ( $\phi_b$ ) est négligeable.

### 1.6 Effet de la déviation standard sur la hauteur de barrière et sur le facteur d'idéalité

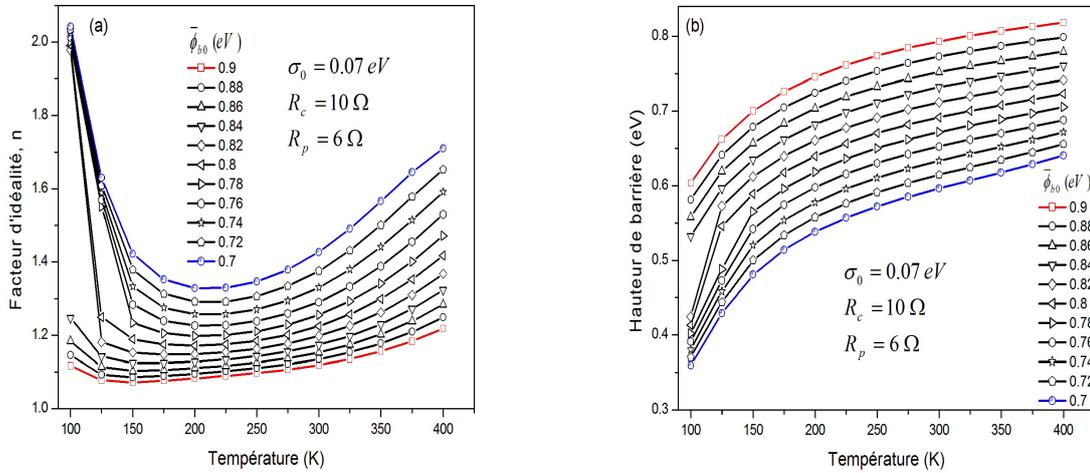


**Figure II.12** – (a)facteur d'idéalité et (b) hauteur de barrière de potentiel en fonction de la température pour différentes déviations standard( $\sigma_0$ ).

La figure II.12 montre l'effet de déviation standard sur le facteur d'idéalité et sur la hauteur de barrière de potentiel en fonction de la température. Quand la déviation standard diminue, le facteur d'idéalité ( $n$ ) diminue jusqu'à atteindre la valeur minimale 1 à basses valeurs de la déviation standard dans toute la gamme de la température (Fig II.12 a). Donc, l'inhomogénéité est responsable de la déviation du facteur d'idéalité de la valeur idéale 1.

La hauteur de barrière augmente lorsque la déviation standard diminue jusqu'à ce qu'elle atteigne la valeur maximale de la barrière moyenne ( $\bar{\phi}_{b0}$ ) dans toute la gamme de la température (Fig II.12b). Cette diminution de la hauteur de barrière en fonction de la déviation standard est attribuée à l'augmentation du courant quand la déviation standard augmente, parce que dans ce cas les électrons préfèrent de passer à travers les basses hauteurs de barrière élémentaires [44].

### 1.7 Effet de la barrière moyenne sur la hauteur de barrière de potentiel et sur le facteur d'idéalité



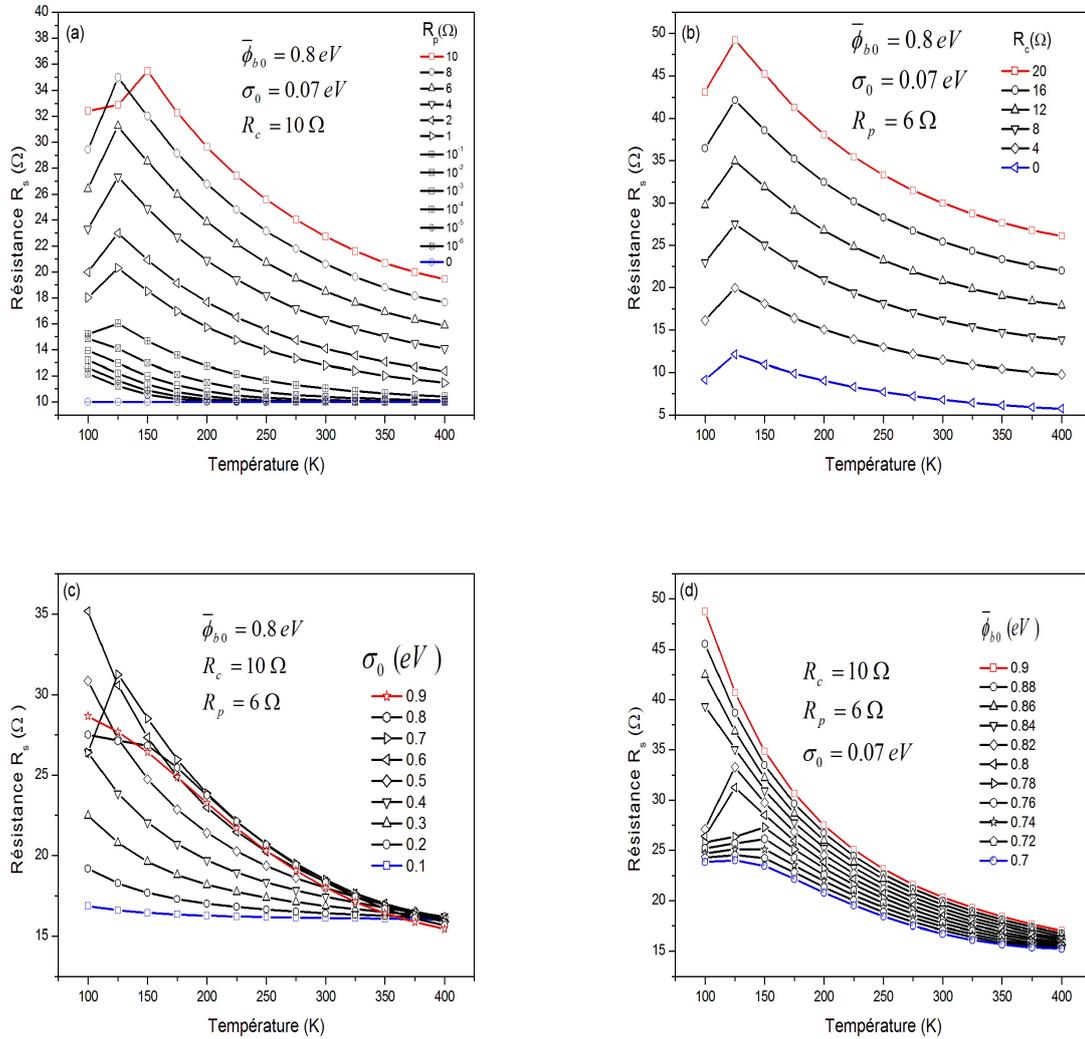
**Figure II.13** – (a) facteur d'idéalité, (b) hauteur de barrière de potentiel en fonction de la température pour différentes barrières moyennes ( $\bar{\phi}_{b0}$ ).

La figure II.13 représente l'effet de la barrière moyenne sur le facteur d'idéalité ( $n$ ) et sur la hauteur de barrière ( $\phi_b$ ) en fonction de la température. Lorsque la barrière moyenne ( $\bar{\phi}_{b0}$ ) augmente le facteur d'idéalité diminue et la hauteur de barrière de potentiel augmente. Cette augmentation de la barrière est due à la diminution du courant quand la barrière moyenne augmente.

D'une façon générale, l'augmentation de la hauteur de barrière ( $\phi_b$ ) est attribuée à la diminution du courant quand la résistance ( $R_p$ ) augmente, la résistance ( $R_c$ ) augmente, la déviation standard ( $\sigma_0$ ) diminue et quand la barrière moyenne ( $\bar{\phi}_{b0}$ ) augmente. Cette diminution du courant est suivie toujours par une augmentation de la pente de la courbe I-V, donc, une diminution du facteur d'idéalité ( $n$ ).

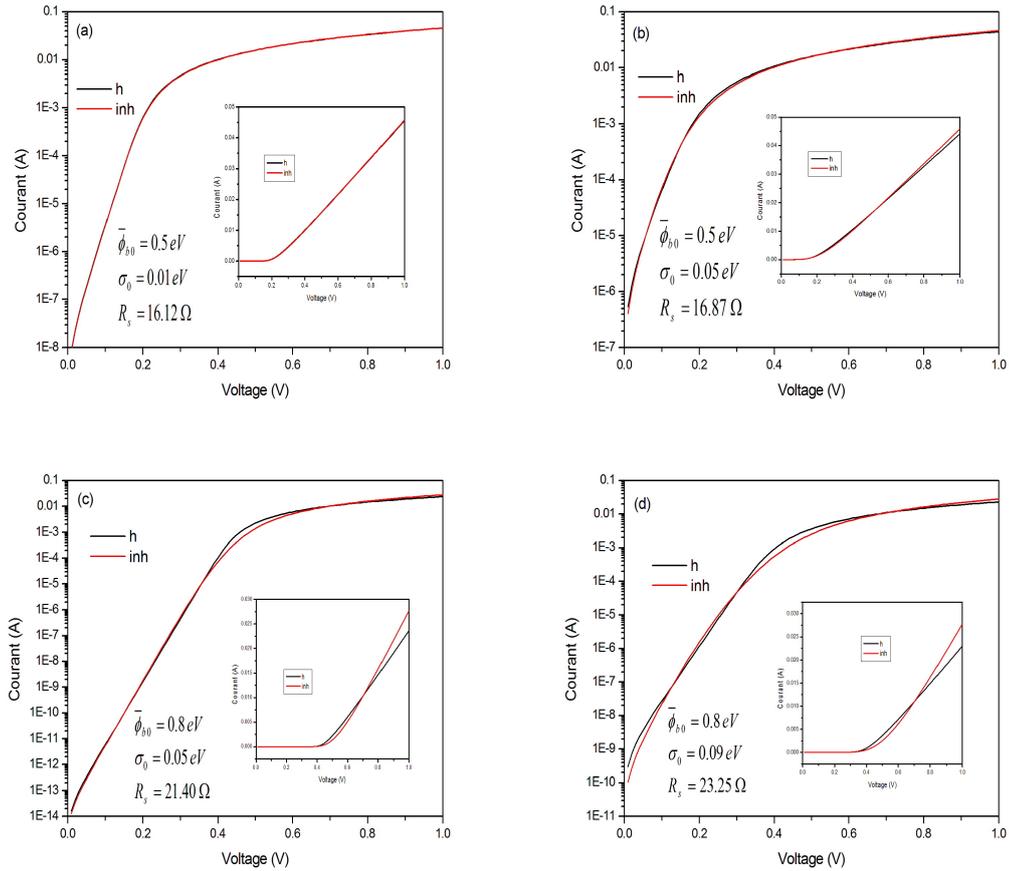
En conclusion, l'inhomogénéité présentée par la résistance ( $R_p$ ) et par la déviation standard est responsable de la déviation du facteur d'idéalité de la valeur idéale 1. Le facteur d'idéalité ( $n$ ) et la hauteur de barrière sont affectés par les quatre paramètres inhomogènes.

## 1.8 Effet des quatre paramètres inhomogènes sur la résistance apparente $R_s$



**Figure II.14** – Résistance apparente en fonction de la température : (a) pour différentes résistances ( $R_p$ ), (b) pour différentes résistances ( $R_c$ ), (c) pour différentes déviations standard ( $\sigma_0$ ), (d) pour différentes barrières moyennes ( $\bar{\phi}_{b0}$ ).

La figure II.14 représente l'effet de quatre paramètres inhomogènes sur la résistance apparente homogène ( $R_s$ ). La résistance apparente égale normalement, la somme de la résistance  $R_p$  et  $R_c$  ce qui n'est pas notre cas. On remarque que la résistance apparente ( $R_s$ ) diverge de la somme des deux résistances ( $R_p$  et  $R_c$ ), notamment à basses températures et à grandes déviations standard et à grande barrière moyenne. Dans ces conditions le modèle inhomogène et le modèle homogène sont divergents en particulier dans la partie non linéaire de la caractéristique I-V comme la montre la figure II.15. Pour que la courbe de la caractéristique I-V inhomogène coïncide avec celle de la courbe de la caractéristique homogène il faut que la barrière moyenne et la déviation standard aient



**Figure II.15** – Caractéristiques I-V simulées par le modèle inhomogène ( $R_p = 6 \Omega$ ,  $R_c = 10 \Omega$ ) pour différentes valeurs de la barrière moyenne et de la déviation standard, et les caractéristiques I-V simulées par le modèle homogène avec les paramètres extraits des caractéristiques I-V inhomogènes,  $T=200$  K.

des valeurs minimales à basses températures.

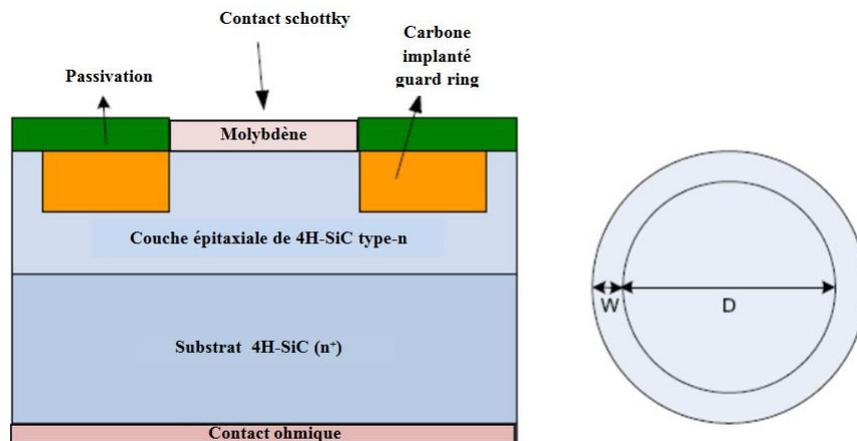
Remarque :

1. Dans l'étude de simulation discutée précédemment on a considéré que les quatre paramètres inhomogènes ( $\bar{\phi}_{b0}$ ,  $\sigma_0$ ,  $R_p$ ,  $R_c$ ) sont constants en fonction de la température, ce qui n'est pas vraie, parce que ces paramètres peuvent varier avec la variation de la température.
2. Les déviations observées dans les figures de variation des trois paramètres homogènes ( $n$ ,  $\phi_b$  et  $R_s$ ) à basses températures ( $<150$  K), (diminution de la résistance, diminution plus grande de barrière de potentiel et augmentation plus grande du facteur d'idéalité) sont dues au problème d'intégration discuté au début de ce chapitre.

## 2 Etude expérimentale

### 2.1 Fabrication des échantillons

Les échantillons<sup>1</sup> que nous allons étudier sont des diodes Schottky fournies par Cree Research Inc, réalisées sur un substrat en 4H-SiC type-n : (000 $\bar{1}$ ), la face Si orientée de 8° suivant la direction  $\langle 11\bar{2}0 \rangle$  avec une résistivité spécifique dans la gamme de 17 jusqu'à 24 m $\Omega$ .cm. Les matrices ont une couche épitaxiale de type-n avec une épaisseur approximative de 10  $\mu$ m et une concentration en donneurs dans la gamme 8  $10^{15}$   $cm^{-3}$  à 13  $10^{15}$   $cm^{-3}$ . Un oxyde de 42 nm thermiquement développé sur la couche épitaxiale a servi pour deux choses : comme couche de passivation pour les régions autour du contact Schottky d'une part et comme couche sacrificatoire pour des régions où les contacts ont été formés d'autre part. L'oxydation a été faite en milieu ambiant humide à 1150 °C pendant 4 heures et a été suivie d'un recuit dans  $N_2$  ambiant pendant 30 minutes. Avant oxydation, la matrice a été nettoyée dans une solution de  $H_2SO_4$ , (96%), et  $H_2O_2$ , (31%) avec un rapport 4 :1 à 140 °C pendant 15 minutes, suivie d'un court traitement par décapage. Une couche additionnelle d'épaisseur 240 nm de  $SiO_2$  a été déposée par LPCVD. Le traitement LPCVD utilisant TEOS a été maintenu à près de 712 °C et à une pression de 200 mTorr. Elle a été suivie d'un recuit à 1200 °C pendant 15 minutes. La couche d'oxyde a été structurée par photolithographie.



**Figure II.16** – Structure Molybdène/carbure de silicium (Mo/4H-SiC) avec la technique de guard ring.

L'implantation ionique de l'aluminium et du carbone à différentes énergies et doses pour la formation des "guard rings" a été faite à la température ambiante en utilisant l'implanteur d'ion Varian 350D. Pour quelques échantillons, l'implantation a été suivie

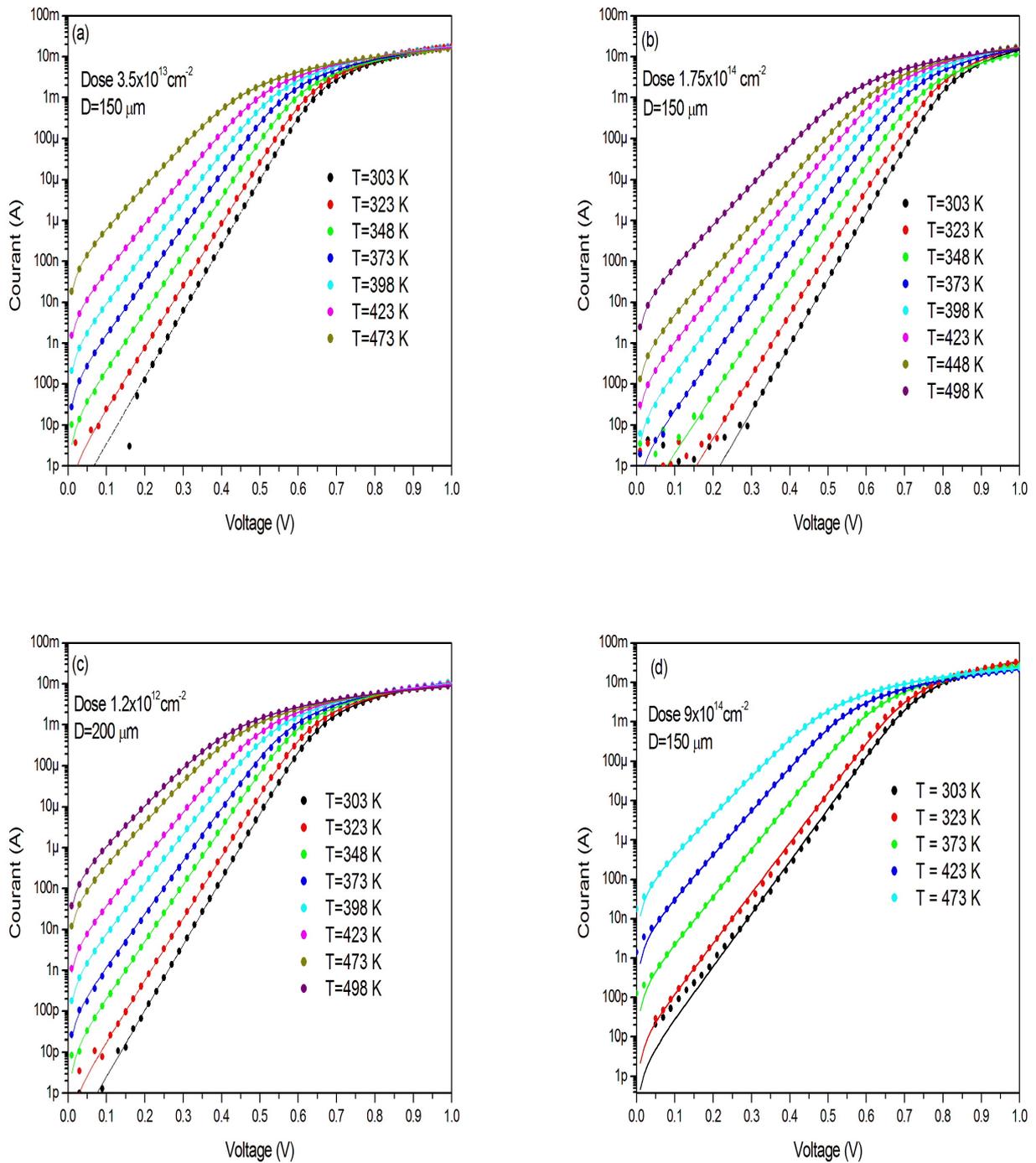
1. Les échantillons ont été fabriqués à l'Université d'Erlangen Allemagne

d'un recuit à une température de 1300 °C pendant 30 minutes. La dose de l'implantation ionique du carbone varie de  $1.2 \cdot 10^{12}$  à  $1.75 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-2}$  et la dose de l'implantation ionique de l'aluminium est  $9 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-2}$ . Un contact métallique de 2500 Å a été formé en molybdène, par "e-beam deposition", suivi d'un recuit à environ 1070 °C dans un four à vide. Avant le dépôt du métal, la couche d'oxyde dans la région du contact a été modelée et enlevée par gravure à l'eau-forte dans une solution tampon HF. Les contacts Schottky Mo/4H-SiC (C) ont une géométrie circulaire variant de 150 μm à 300 μm pour les échantillons implantés par le carbone et 150 μm pour le contact Mo/4H-SiC (Al) implanté par l'aluminium. Les mesures I-V ont été faites avec une source et une unité de mesure Keithley 237 qui est capable de manipuler des tensions allant jusqu'à 1100V. la température de mesure varie de 303 K à 498 K avec un pas de 25 K. Les mesures C-V ont été mesurées en utilisant un HP 4284A LCR mètre à température ambiante avec une fréquence de 1MHZ.

## 2.2 Caractéristique I-V-T de la structure Mo/4H-SiC

Avant la modélisation de la diode Schottky suivant un modèle bien déterminé, nous avons calculé le rapport  $E_{00}/k_B T$  pour chaque température donnée et nous avons trouvé que ce rapport varie de  $5.079 \cdot 10^{-2}$  à température 300 K jusqu'à  $3.059 \cdot 10^{-2}$  à température 498 K. Ces valeurs sont très inférieures à 1. Alors le mécanisme prépondérant est l'effet thermoïonique, donc nous allons suivre ce modèle qui est décrit par l'équation (I.25). La figure II.17 montre les caractéristiques I-V-T mesurées avec différents doses et diamètres de la diode Mo/4H-SiC et aussi les caractéristiques I-V-T simulées par les trois paramètres extraits à partir de celles mesurées selon le modèle thermoïonique homogène. De ces tracés on observe plusieurs remarques :

1. En polarisation directe les courbes I(V) présentent deux parties, la première semble linéaire où le mécanisme de transport est contrôlé par l'interface du contact et une deuxième qui présente une courbure où le courant est contrôlé par la résistance du contact.
2. Les caractéristiques I-V simulées suivant le modèle thermoïonique sont bien confondues avec celles mesurées. Donc la méthode (VOM) a donné de bons résultats pour les paramètres extraits.
3. Le courant est augmenté lorsque la température augmente.
4. A basses températures (303 et 323 K) et à basses tensions, on observe une divergence entre les courants mesurés et celles simulés, cela est dû à la sensibilité de l'appareil de mesure, celui-ci ne peut pas détecter des faibles courants (<10 pA).

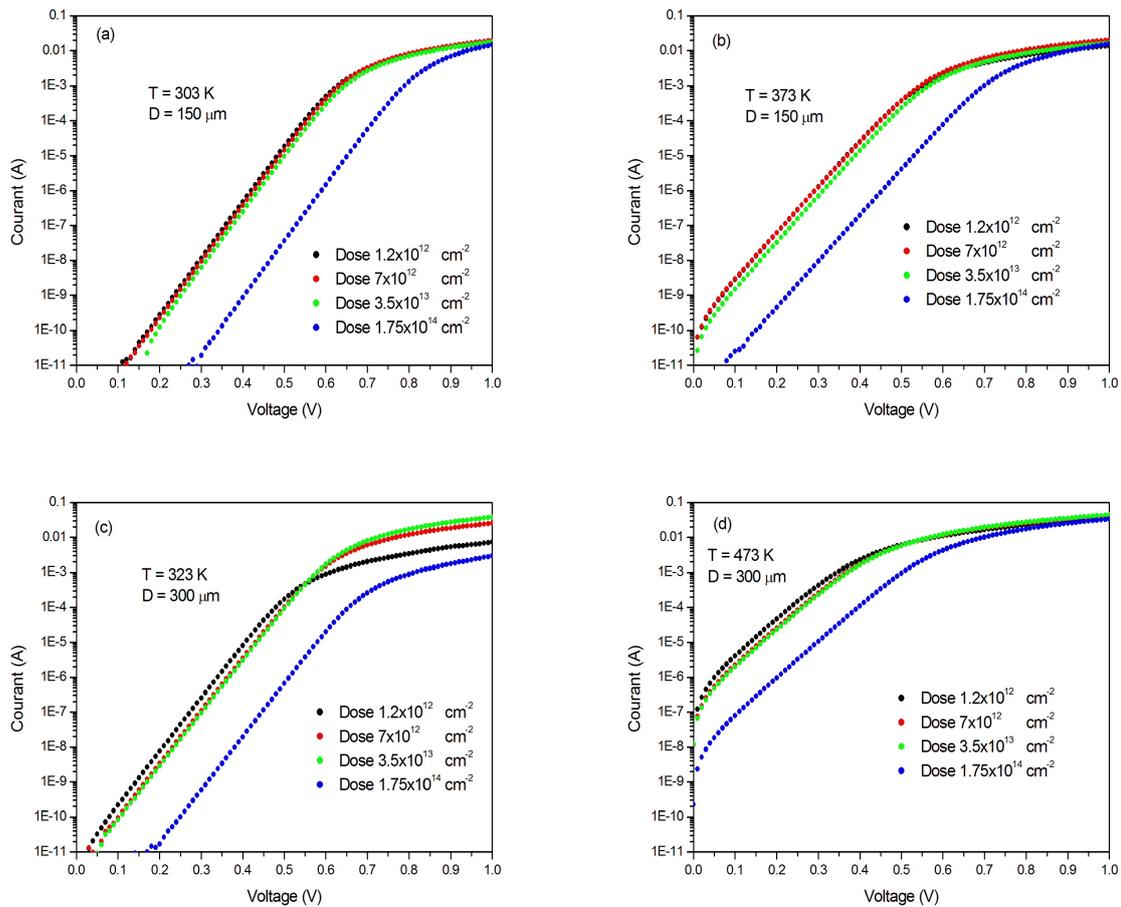


**Figure II.17** – Caractéristiques I-V-T pour différents doses et diamètres des structures Mo/4H-SiC(C)(a, b et c) et Mo/4H-SiC(Al)(d) : les points représentent les I-V-T mesurées et les lignes continues représentent les I-V-T simulées par les paramètres extraits à partir des caractéristiques mesurées.

### 2.3 Effet de la dose sur le courant direct

La technique des "guard rings" est parmi plusieurs techniques adaptées pour la protection de périphérie de la diode Schottky (réduction de l'effet de bords) à haute tension de polarisation, ce qui conduit à minimiser les fuites de courants de surface et de réduire le champ électrique au niveau des bords de la diode [82], donc, une tension de claquage plus élevée. Cette technique est basée sur l'implantation ionique des ions autour du contact sous forme d'anneaux qui modifie localement les propriétés électriques des diodes à base de SiC [83]. La terminaison de bord pour les diodes Schottky à base de SiC à haute tension rapportée dans la littérature a été réalisée essentiellement par l'implantation de l'argon (Ar), le bore (B) et l'aluminium (Al) [84]-[88]. Dans la plupart de ces études, l'implantation ionique conduit à la création d'une couche résistive et amorphe.

La figure II.18 montre l'effet de la dose d'implantation ionique du carbone sur le courant direct de la diode Schottky Mo/4H-SiC (C). Il est clair que lorsqu'on augmente la dose d'implantation, le courant est réduit d'une façon importante.



**Figure II.18** – Effet de la dose sur le courant de la structure Mo/4H-SiC (C) pour différentes températures.

## 2.4 Modèle de la barrière homogène

### 2.4.1 Etude de la hauteur de barrière : Effet de la dose et de la température

La figure II.19 représente la variation de la hauteur de barrière mesurée en fonction de la température avec différentes doses et différents diamètres de la structure Mo/4H-SiC(C). L'augmentation de la température augmente la hauteur de barrière, cette augmentation n'a pas une explication dans le cadre du modèle homogène, c'est-à-dire ce modèle ne donne pas la relation qui relie la hauteur de barrière avec la température. La hauteur de barrière ( $\phi_b$ ) varie de 0.969 eV à 1.173 eV.

L'augmentation de la dose de l'implantation ionique va augmenter la hauteur de barrière. Cette augmentation est attribuée à la réduction du courant lorsque la dose de l'implantation est augmentée (Fig II.18).

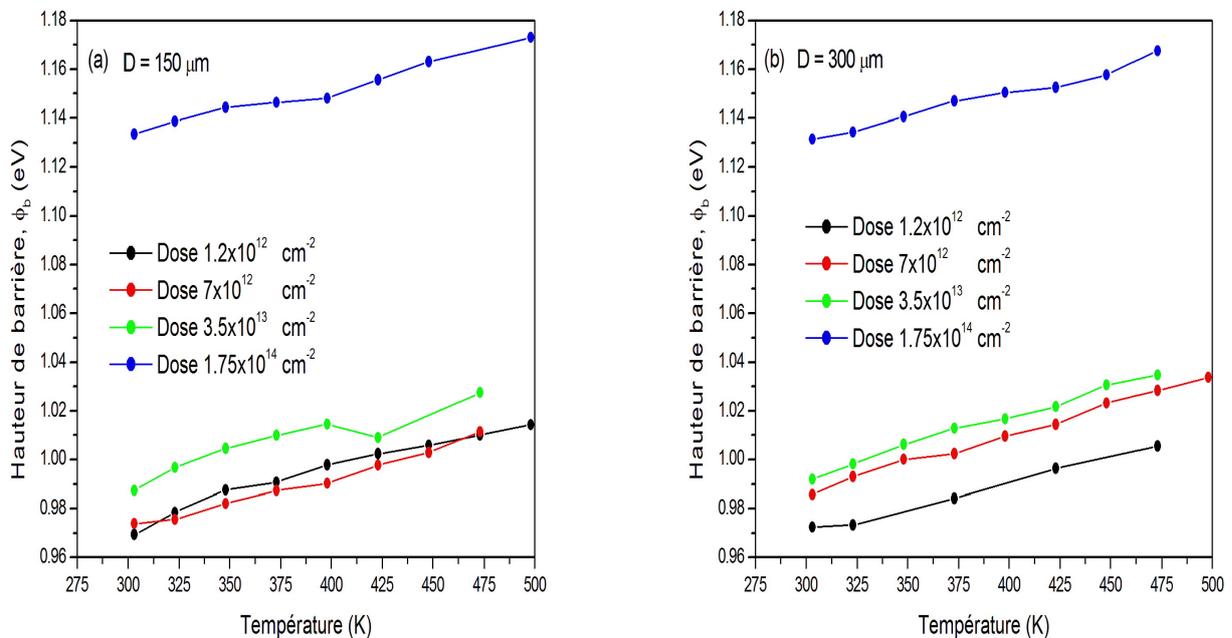
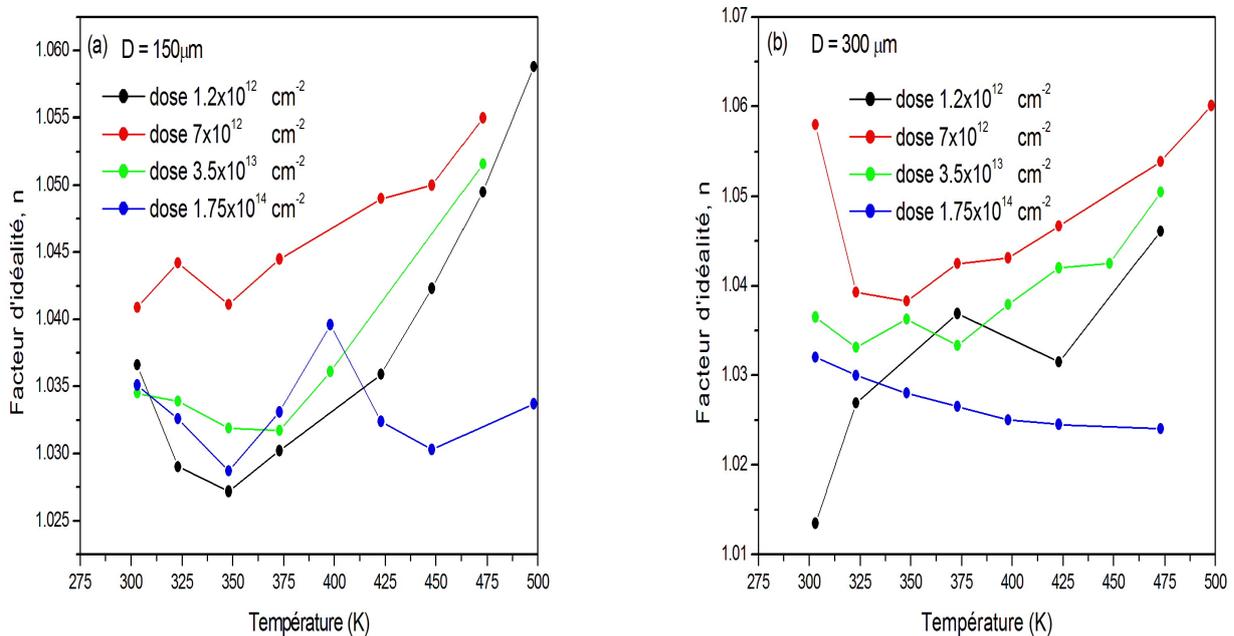


Figure II.19 – Variation de la hauteur de barrière extraite pour différentes structures Mo/4H-SiC (C) et pour différentes doses, (a)  $D = 150 \mu\text{m}$ , (b)  $D = 300 \mu\text{m}$ .

### 2.4.2 Etude du facteur d'idéalité $n$ : Effet de la dose et de la température

La figure II.20 montre que le facteur d'idéalité ( $n$ ) pour la plupart des structures Mo/4H-SiC (C) décroît à basses températures (environ 303-348 K) puis augmente avec l'augmentation de la température. Ces valeurs de  $n$ , restent très faibles, c'est-à-dire proche de la valeur idéale 1 (1.024 à 1.06). Ce qui signifie que le mécanisme de transport prépondérant est l'effet thermoionique. L'augmentation de la dose diminue les valeurs du facteur d'idéalité  $n$  et les ramènent plus proche à la valeur idéale 1, ce qui signifie la réduction des effets de bords qui peut être l'un des paramètres influant sur  $n$ . La fluctuation de  $n$  en fonction de la température n'a pas une explication dans le cadre de la barrière homogène. Les chercheurs ont l'habitude de prouver l'inhomogénéité à basses températures (80-300 K), ils ont trouvé que le facteur d'idéalité  $n$  diminue lorsque la température augmente. Cependant, on peut remarquer une augmentation du facteur d'idéalité à température ambiante (300 K) et au-delà, dans certain travaux [42], [89]-[92].

l'allure de la fluctuation de  $n$ , en fonction de la température est semblable à celle simulée par le modèle inhomogène (voir les paragraphes 2.1.4-2.1.7). Alors, l'inhomogénéité est peut-être responsable de la déviation du facteur d'idéalité à la valeur idéale 1.



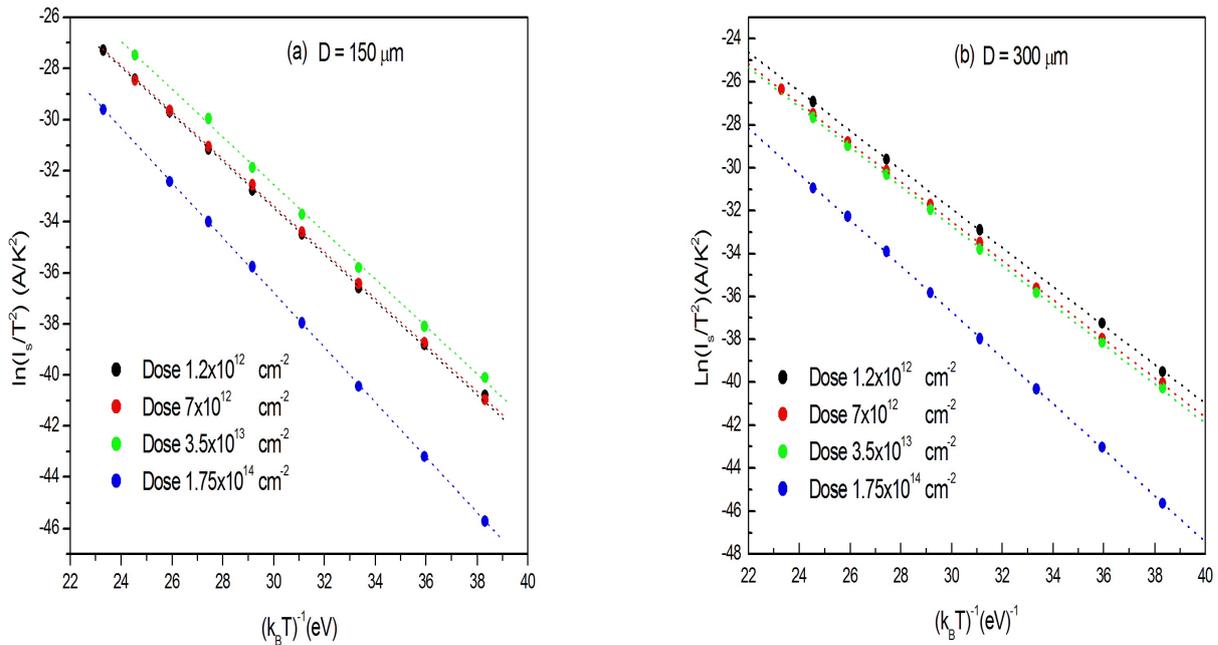
**Figure II.20** – Variation du facteur d'idéalité extrait de différentes structures Mo/4H-SiC (C) pour différentes doses, (a)  $D = 150 \mu\text{m}$ , (b)  $D = 300 \mu\text{m}$ .

### 2.4.3 Plot de Richardson

La variation de  $\ln\left(\frac{I_s}{T^2}\right)$  en fonction de  $q/k_B T$  est connue sous le nom de plot de Richardson (Fig II.21). De cette courbe on peut déterminer l'énergie d'activation ( $\phi_b$ ) et la constante de Richardson  $A^*$ , selon la relation suivante qui est déduite de l'équation (I.23) :

$$\ln\left(\frac{I_s}{T^2}\right) = \ln(AA^*) - \left(\frac{q}{k_B T}\right) \phi_b \quad (\text{II.14})$$

Le tracé est une droite qui permettrait de déterminer  $A^*$  et  $\phi_b$  à partir de l'intersection avec l'axe des potentiels et la pente de cette droite respectivement. Le tableau II.1 résume toutes ces deux quantités extraites des structures Mo/4H-SiC à différentes doses et à différents diamètres.



**Figure II.21** – Plot de Richardson de  $\ln\left(\frac{I_s}{T^2}\right)$  en fonction de  $1/(k_B T)$  pour différentes structures Mo/4H-SiC(C), (a)  $D = 150 \mu\text{m}$ , (b)  $D = 300 \mu\text{m}$ .

Les valeurs de  $\phi_b$  et  $A^*$  sont faibles, en particulier les valeurs de la constante de Richardson ( $A^*$ ) sont très faibles par rapport à la valeur théorique  $146 \text{ A/K}^2 \text{ cm}^2$ . Cette déviation de la valeur de la constante de Richardson peut être due à l'inhomogénéité de la barrière de potentiel du contact Schottky [93].

Diamètre (μm)	Dose (cm <sup>-2</sup> )	Energie d'activation $\phi_b$ (eV)	Constante de Richardson A* (A/K <sup>2</sup> cm <sup>2</sup> )
300 (C)	1.2x10 <sup>12</sup>	0.909	13.71
	7x10 <sup>12</sup>	0.914	8.92
	3.5x10 <sup>13</sup>	0.921	8.95
	1.75x10 <sup>14</sup>	1.071	17.96
200 (C)	1.2x10 <sup>12</sup>	0.930	6.17
	7x10 <sup>12</sup>	0.924	10.80
	3.5x10 <sup>13</sup>	0.937	14.66
150 (C)	1.2x10 <sup>12</sup>	0.904	10.43
	7x10 <sup>12</sup>	0.907	12.30
	3.5x10 <sup>13</sup>	0.927	49.65
	1.75x10 <sup>14</sup>	1.076	63.79
150 (Al)	9x10 <sup>14</sup>	0.77	0.16

**Tableau II.1** – Energies d'activation et valeurs de constante de Richardson extraites des structures Mo/4H-SiC avec différentes doses et différents diamètres.

#### 2.4.4 Détermination de la hauteur de barrière à partir des caractéristiques C-V

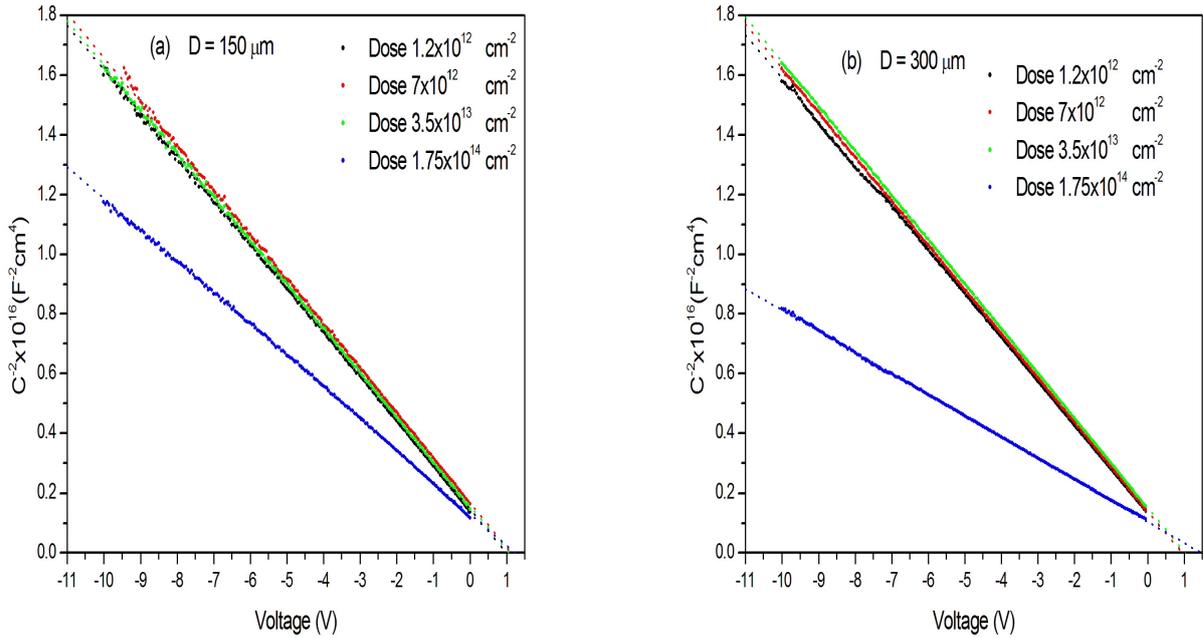
La hauteur de barrière Schottky peut-être obtenue par une mesure capacitive. Comme nous avons vu au premier chapitre, La capacité de la zone de déplétion est en fonction de la polarisation inverse suivant la relation suivante :

$$C^{-2} = \frac{2}{A^2 q N_D \epsilon_s} (V_i - V) \quad (\text{II.15})$$

Le tracé de  $C^{-2}$  en fonction de  $V$  doit être une droite, la pente de cette droite permet de déterminer la concentration du dopage  $N_D$  et l'extrapolation à  $C^{-2}(V)=0$  permet de déterminer la valeur de l'intersection  $V_i$  de cette droite avec l'axe du voltage. La hauteur de barrière Schottky se déduit de la relation suivante [4] :

$$\phi_b^{CV} = V_i + \zeta + k_B T / q \quad (\text{II.16})$$

La figure II.22 représente le tracé de  $C^{-2}$  en fonction de  $V$  pour différentes structures de Mo/4H-SiC (C) à température ambiante. Ces tracés sont des lignes droites en accord avec l'équation (II.15). Les valeurs obtenues de la hauteur de barrière de potentiel et le taux de dopage  $N_D$  extraits de nos mesures sont résumés dans le tableau II.2.



**Figure II.22** – Caractéristiques expérimentales  $C^{-2}(V)$  des structures Mo/4H-SiC (C) pour différentes doses à la température 300 K, (a)  $D = 150 \mu\text{m}$ , (b)  $D = 300 \mu\text{m}$ .

Diamètre ( $\mu\text{m}$ )	Dose ( $\text{cm}^{-2}$ )	$V_i$ (V)	$\phi_b^{CV}$ (eV)	$\phi_b^{IV}$ (eV)	$N_D$ ( $\text{cm}^{-3}$ )
300 (C)	$1.2 \times 10^{12}$	0.957	1.124	0.971	$9.57 \times 10^{15}$
	$7 \times 10^{12}$	0.945	1.112	0.985	$9.51 \times 10^{15}$
	$3.5 \times 10^{13}$	1.024	1.191	0.992	$9.44 \times 10^{15}$
	$1.75 \times 10^{14}$	1.481	1.629	1.132	$1.99 \times 10^{16}$
200 (C)	$1.2 \times 10^{12}$	0.958	1.125	1.011	$9.63 \times 10^{15}$
	$7 \times 10^{12}$	1.022	1.189	0.989	$9.58 \times 10^{15}$
	$3.5 \times 10^{13}$	1.023	1.189	1.011	$9.68 \times 10^{15}$
150 (C)	$1.2 \times 10^{12}$	1.002	1.169	0.969	$9.59 \times 10^{15}$
	$7 \times 10^{12}$	1.140	1.307	0.974	$9.44 \times 10^{15}$
	$3.5 \times 10^{13}$	1.074	1.241	0.987	$9.55 \times 10^{15}$
	$1.75 \times 10^{14}$	1.238	1.396	1.133	$1.33 \times 10^{16}$

**Tableau II.2** – Comparaison entre les hauteurs de barrière extraites par la méthode I-V et la méthode C-V ainsi que la concentration de dopage  $N_D$  extraite à température 300 K pour différentes doses et différents diamètres de Mo/4H-SiC (C).

Le tableau II.2 révèle une importante différence entre les hauteurs de barrière de potentiel mesurées par la méthode I-V et la méthode C-V. On note que la détermination de la hauteur de barrière par la méthode C-V est affectée par la présence d'une couche interfaciale entre le métal et le semiconducteur [1]. Cette couche peut avoir une autre

capacité due aux dipôles existants à l'interface et peut aussi supporter une différence de potentiel déviant la valeur réelle de la tension appliquée aux bornes de la zone de déplétion, donc un potentiel  $V_i$  différent de la valeur réelle. Les valeurs obtenues de la concentration du dopage  $N_D$  à partir de nos mesures sont en accord avec celle donnée par le fournisseur ( $8 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-3}$  à  $1.3 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ ).

Le tableau II.3 résume quelques barrières de potentiel de la structure Mo/4H-SiC rapportées dans la littérature.

Conditions	$\phi_b^{IV}$ (eV)	$\phi_b^{CV}$ (eV)	Référence
Température ambiante	-	1.03-1.83	[16]
Température 400 °C	1.3	-	[84]
Température 20-600 °C	1.11-1.21	-	[94]
Face Si-	1.3	1.66	[95]
Température ambiante	1.04-1.08	-	[96]

**Tableau II.3** – Quelques hauteurs de barrière de la structure Mo/4H-SiC rapportées dans la littérature.

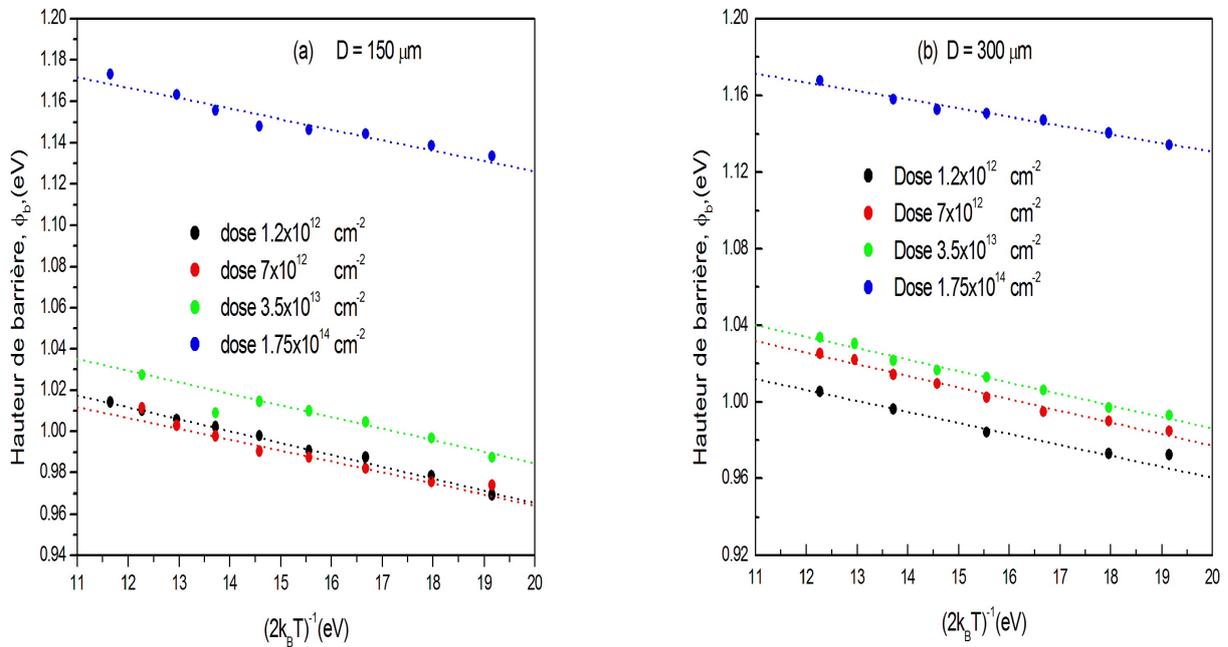
De notre travail et les travaux des autres chercheurs [16, 84], [94]-[96], on constate que la hauteur de barrière de la structure Mo/4H-SiC dépend de plusieurs paramètres : les conditions de préparations de l'échantillon, la qualité de semiconducteur, la préparation de la surface, la température de recuit et la technique de terminaison utilisée (guard ring, extension de jonction, les plaques de champs, les gravures MESA...).

## 2.5 Modèle de la barrière Schottky inhomogène

### 2.5.1 Application du modèle standard (premier modèle)

**2.5.1.1 Barrière moyenne et déviation standard :** La figure II.23 représente la variation de la barrière de potentiel en fonction de  $1/2k_B T$  pour différentes structures (différents doses et diamètres) de Mo/4H-SiC (C). Ces tracés sont des lignes droites qui sont en bon accord avec l'équation théorique du premier modèle inhomogène proposé par Werner et Guttler [4].

$$\phi_b = \bar{\phi}_{b0} - \frac{q\sigma_0^2}{2k_B T} \quad (\text{II.17})$$



**Figure II.23** – Hauteur de barrière en fonction de  $1/2k_B T$  pour les différentes structures Mo/4H-SiC (C), (a)  $D = 150 \mu\text{m}$ , (b)  $D = 300 \mu\text{m}$ .

L'intersection avec l'axe des y et la pente de ces droites nous permettent de déterminer la barrière de potentiel moyenne ( $\bar{\phi}_{b0}$ ) et la déviation standard ( $\sigma_0$ ) au tension nul. Le tableau II.4 résume les différentes valeurs de la barrière moyenne et de la déviation standard pour les différents diodes Mo/4H-SiC.

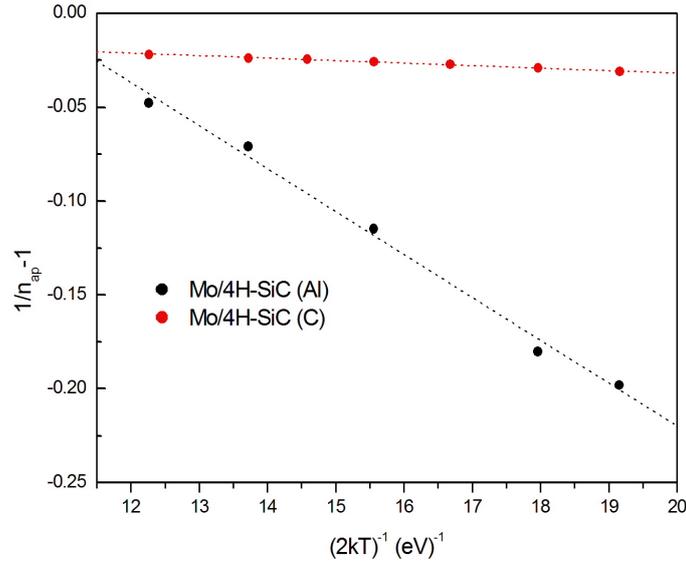
Diamètre ( $\mu\text{m}$ )	Dose ( $\text{cm}^{-2}$ )	Barrière moyenne $\bar{\phi}_{b0}$ (eV)	Déviati on standard $\sigma_0$ (eV)
300 (C)	$1.2 \times 10^{12}$	1.075	0.078
	$7 \times 10^{12}$	1.098	0.079
	$3.5 \times 10^{13}$	1.106	0.080
	$1.75 \times 10^{14}$	1.220	0.067
200 (C)	$1.2 \times 10^{12}$	1.125	0.077
	$7 \times 10^{12}$	1.094	0.074
	$3.5 \times 10^{13}$	1.085	0.069
150 (C)	$1.2 \times 10^{12}$	1.081	0.076
	$7 \times 10^{12}$	1.069	0.073
	$3.5 \times 10^{13}$	1.097	0.075
	$1.75 \times 10^{14}$	1.227	0.071
150 (Al)	$9 \times 10^{14}$	1.294	0.140

**Tableau II.4** – Barrières moyennes et déviati ons standard extraites des structures Mo/4H-SiC avec différentes doses et différents diamètres.

Le tracé de  $1/n_{ap}$  en fonction de  $1/2k_B T$  pour la structure Mo/4H-SiC (C) ( $D = 300 \mu\text{m}$ , dose  $1.75 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-2}$ ) et pour la structure M/4H-SiC (Al) ( $D = 150 \mu\text{m}$ , dose  $9 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-2}$ ) est représenté à la figure II.24. Les deux tracés représentent une ligne droite, qui est en accord avec celle proposé par Werner [4] :

$$\frac{1}{n_{ap}} - 1 = -\rho_2 + \frac{q\rho_3}{2k_B T} \quad (\text{II.18})$$

L'analyse de ces tracés donne les valeurs des coefficients de voltage suivantes :  $\rho_2 = 0.0051$  et  $\rho_3 = -1.34 \text{ mV}$  pour Mo/4H-SiC (C), et  $\rho_2 = -0.238$  et  $\rho_3 = -22.9 \text{ mV}$  pour Mo/4H-SiC (Al). Ces valeurs ont le même ordre de grandeur que des travaux publiés sur la structure Métal/4H-SiC (voir le tableau I.3).



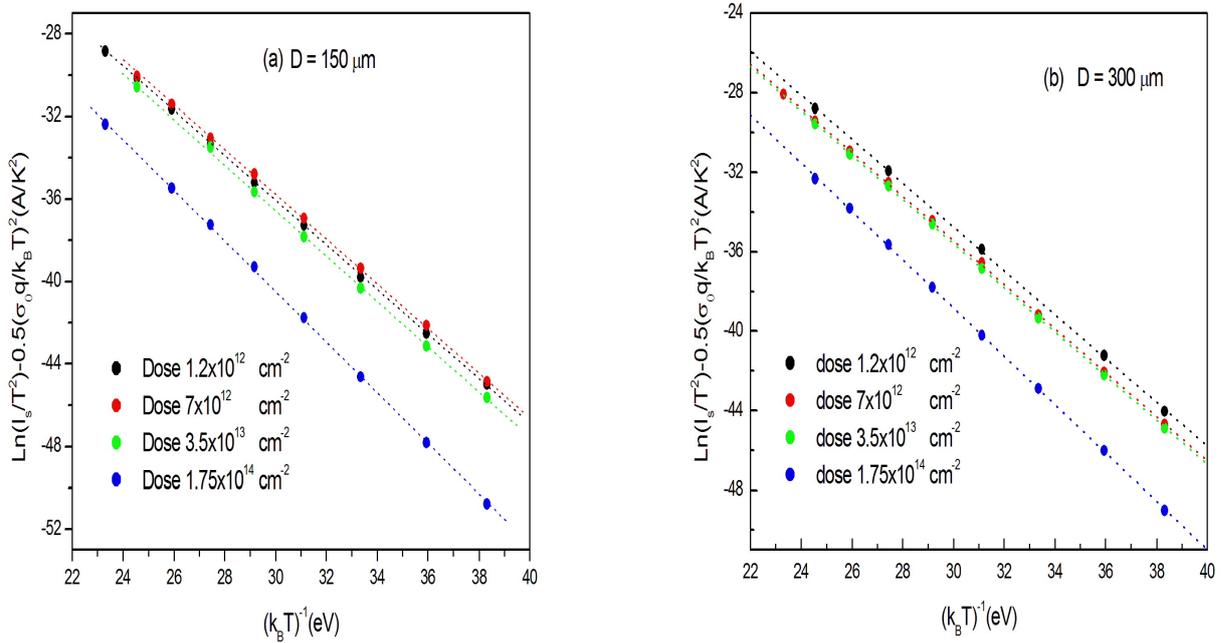
**Figure II.24** – Tracé de  $(1/n_{ap} - 1)$  en fonction de  $1/2k_B T$  pour Mo/4H-SiC (Al) de dose  $9 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-2}$  et diamètre  $D=150 \text{ }\mu\text{m}$  et pour Mo/4H-SiC (C) de dose  $1.75 \cdot 10^{14} \text{ cm}^{-2}$  et diamètre  $D=300 \text{ }\mu\text{m}$ .

**2.5.1.2 Plot de Richardson modifié :** En substituant l'équation (II.17) dans l'équation (II.14) on obtient la relation suivante :

$$\ln\left(\frac{I_s}{T^2}\right) - \left(\frac{q^2 \sigma_0^2}{2k_B^2 T^2}\right) = \ln(AA^*) - \left(\frac{q\bar{\phi}_{b0}}{k_B T}\right) \quad (\text{II.19})$$

Le tracé de  $\ln\left(\frac{I_s}{T^2}\right) - \left(\frac{q^2 \sigma_0^2}{2k_B^2 T^2}\right)$  en fonction de  $(1/k_B T)$  est le tracé de Richardson modifié, qui devrait être aussi une ligne droite. L'extrapolation et la pente de cette droite nous donne aussi les valeurs de  $A^*$  et  $\bar{\phi}_{b0}$  respectivement. La figure II.25 qui présente notre mesure montre clairement une excellente linéarité dans tout le domaine de température. Le tableau II.5 résume les valeurs de  $\bar{\phi}_{b0}$  et  $A^*$  obtenues de nos structures Mo/4H-SiC.

Du tableau II.5 on remarque que les valeurs de la barrière moyenne ( $\bar{\phi}_{b0}$ ) obtenues à partir de tracé de Richardson modifié sont confondues avec celles obtenues précédemment par le tracé de  $\phi_b = f\left(\frac{q}{2kT}\right)$  de la figure II.23. De plus les nouvelles valeurs de la constante de Richardson sont pratiquement proches à la valeur théorique du SiC ( $A^* = 146 \text{ A/K}^2 \text{ cm}^2$ ).



**Figure II.25** – Plot de Richardson modifié de  $\ln\left(\frac{I_s}{T^2}\right) - \left(\frac{q^2 \sigma_0^2}{2k_B^2 T^2}\right)$  en fonction de  $(1/k_B T)$  pour les différentes structures Mo/4H-SiC (C), (a)  $D = 150 \mu\text{m}$ , (b)  $D = 300 \mu\text{m}$ .

Diamètre ( $\mu\text{m}$ )	Dose ( $\text{cm}^{-2}$ )	Barrière moyenne $\bar{\phi}_{b0}$ (eV)	Constante de Richardson $A^*$ ( $\text{A/K}^2\text{cm}^2$ )
300 (C)	$1.2 \times 10^{12}$	1.104	275.76
	$7 \times 10^{12}$	1.109	165.54
	$3.5 \times 10^{13}$	1.112	151.02
	$1.75 \times 10^{14}$	1.216	148.00
200 (C)	$1.2 \times 10^{12}$	1.125	145.64
	$7 \times 10^{12}$	1.094	169.87
	$3.5 \times 10^{13}$	1.085	157.10
150 (C)	$1.2 \times 10^{12}$	1.080	144.30
	$7 \times 10^{12}$	1.074	156.36
	$3.5 \times 10^{13}$	1.105	195.15
	$1.75 \times 10^{14}$	1.231	164.81
150 (Al)	$9 \times 10^{14}$	1.280	128.00

**Tableau II.5** – Barrières moyennes et valeurs de la constante de Richardson extraites des structures Mo/4H-SiC avec différentes doses et différents diamètres.

## 2.5.2 Application du modèle générale (troisième modèle)

**2.5.2.1 Méthode d'extraction des quatre paramètres inhomogènes :** Dans ce paragraphe nous allons proposer une généralisation de la méthode d'extraction des paramètres inhomogènes d'une diode inhomogène réelle (3<sup>e</sup> modèle). Cette méthode est basée toujours sur la méthode des moindres carrés qui consiste à minimiser l'écart moyen relatif entre l'ensemble de N mesures du courant expérimental  $I^{ex}$  et l'ensemble des courants théoriques  $I^{th}$  calculés par le modèle de l'équation (II.10) :

$$S = \sum_{i=1}^N \left( \frac{I_i^{ex} - I_i^{th}}{I_i^{th}} \right)^2 \quad (II.20)$$

Pour minimiser la fonction S, il est nécessaire de résoudre le système d'équations non linéaire suivant :

$$F_k = \frac{\partial S}{\partial x_k} = \sum_{i=1}^N \left( \frac{I_i^{ex} - I_i^{th}}{I_i^{th}} \right) \frac{I_i^{ex}}{(I_i^{th})^2} \frac{\partial I_i^{th}}{\partial x_k} = 0 \quad (II.21)$$

$(k = 1, 2, 3, 4), (x_1 = \bar{\phi}_{b0}, x_2 = \sigma_0, x_3 = R_p, x_4 = R_c)$

$x_k$  sont les quatre paramètres d'une diode inhomogène qui sont :  $\bar{\phi}_{b0}, x_2 = \sigma_0, x_3 = R_p, x_4 = R_c$ . A partir de l'équation (II.11) on obtient les dérivés de la densité de courant élémentaire par rapport aux quatre paramètres :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial j}{\partial \bar{\phi}_{b0}} = \frac{-\beta R_c(j + j_s)}{1 + A\beta R_p(j + j_s)} \frac{\partial I}{\partial \bar{\phi}_{b0}} \\ \frac{\partial j}{\partial j} = \frac{-\beta R_c(j + j_s)}{-\beta R_c(j + j_s)} \frac{\partial I}{\partial I} \\ \frac{\partial \sigma_0}{\partial j} = \frac{1 + A\beta R_p(j + j_s)}{(-\beta A j - \beta R_c \frac{\partial I}{\partial R_p})(j + j_s)} \\ \frac{\partial R_p}{\partial j} = \frac{1 + A\beta R_p(j + j_s)}{(-\beta I - \beta R_c \frac{\partial I}{\partial R_c})(j + j_s)} \\ \frac{\partial R_c}{\partial j} = \frac{1 + A\beta R_p(j + j_s)}{1 + A\beta R_p(j + j_s)} \end{array} \right. \quad (II.22)$$

En utilisant ces équations et à partir de l'équation (II.10) on obtient les quatre dérivés de la densité de courant total par rapport aux quatre paramètres :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial I}{\partial \bar{\phi}_{b0}} = \frac{A}{g} \int \frac{(\phi_b - \bar{\phi}_{b0})}{\sigma_0^2} \rho j d\phi_b \\ \frac{\partial I}{\partial \sigma_0} = \frac{A}{g} \int \frac{(\phi_b - \bar{\phi}_{b0})^2 - \sigma_0^2}{\sigma_0^2} \rho j d\phi_b \\ \frac{\partial I}{\partial R_p} = \frac{-\beta A^2}{g} \int \frac{(j + j_s)}{1 + A\beta R_p(j + j_s)} \rho j d\phi_b \\ \frac{\partial I}{\partial R_c} = \frac{-\beta A I}{g} \int \frac{(j + j_s)}{1 + A\beta R_p(j + j_s)} \rho d\phi_b \end{array} \right. \quad (II.23)$$

Avec

$$g = 1 + A\beta R_c \int \frac{(j + j_s)}{1 + A\beta R_p(j + j_s)} \rho d\phi \quad (\text{II.24})$$

La résolution de système d'équation non linéaire (II.21) se fait par la méthode de Newton Raphson (voir l'annexe B). Notons ici lorsque  $R_c = 0 \Omega$  on obtient les équations concernant les trois paramètres qui correspondent au deuxième modèle proposé par Osvald [81]. La figure II.26 représente l'organigramme qui résume les étapes essentielles pour l'extraction des quatre paramètres d'une diode inhomogène réelle. Pour valider notre programme, basé sur cet organigramme nous l'avons testé sur plusieurs structures théoriques.

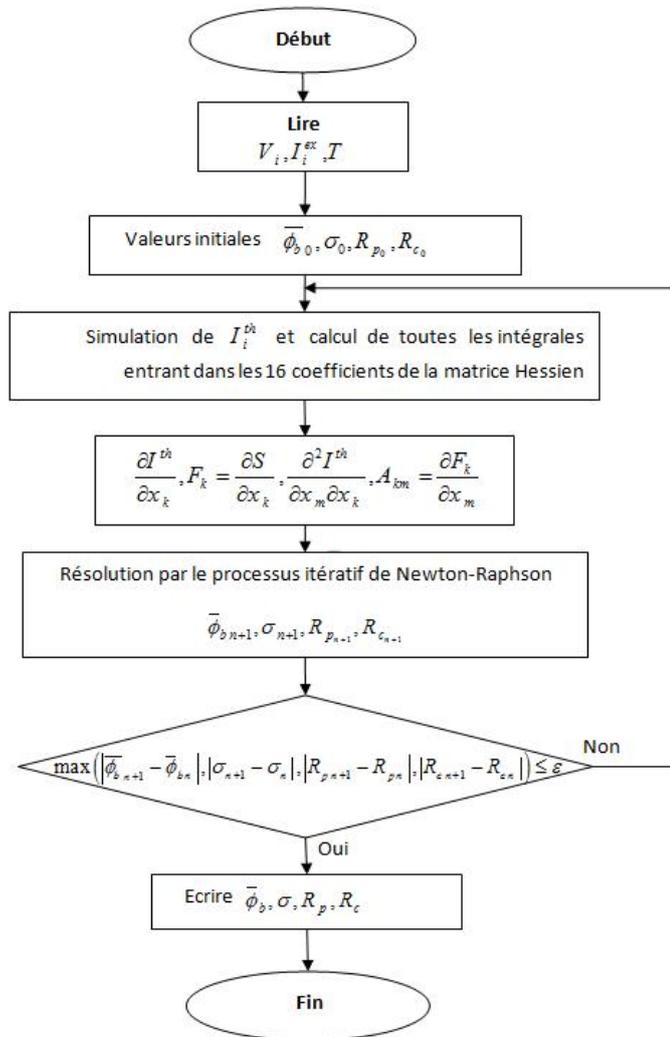


Figure II.26 – L'organigramme utilisé pour l'extraction des quatre paramètres inhomogènes.

**2.5.2.2 Validité du modèle inhomogène :** Comme le montre la figure II.27, les caractéristiques I-V simulées par le modèle inhomogène coïncident avec celles de l'expérience. Cette coïncidence n'est pas parfaite, notamment dans la région de la courbure et la région contrôlée par la résistance. Donc, la résistance totale ( $R_p + R_c$ ) doit être différente (inférieure) de la résistance réelle ( $R_s$ ). Cette petite déviation peut être expliquée par l'existence de l'inhomogénéité de la résistance ( $R_p$ ) que nous n'avons pas pris en considération (nous avons considéré les résistances élémentaires ( $r = AR_p$ ) homogènes pour toutes les diodes). Tenir compte de l'effet de l'inhomogénéité de la résistance élémentaire ( $r$ ), le problème sera plus complexe. D'une façon générale le modèle inhomogène est applicable sur les structures Mo/4H-SiC.

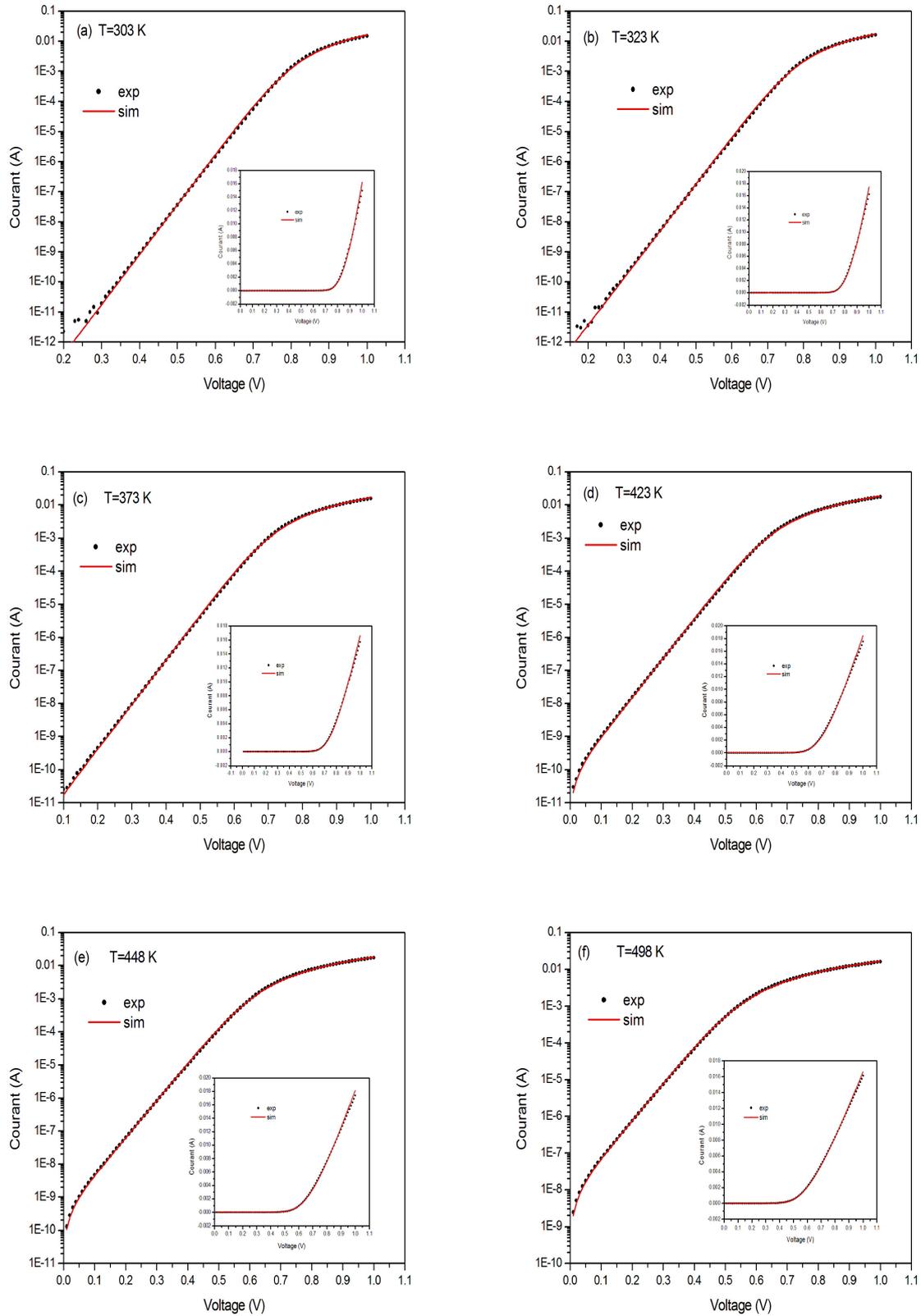
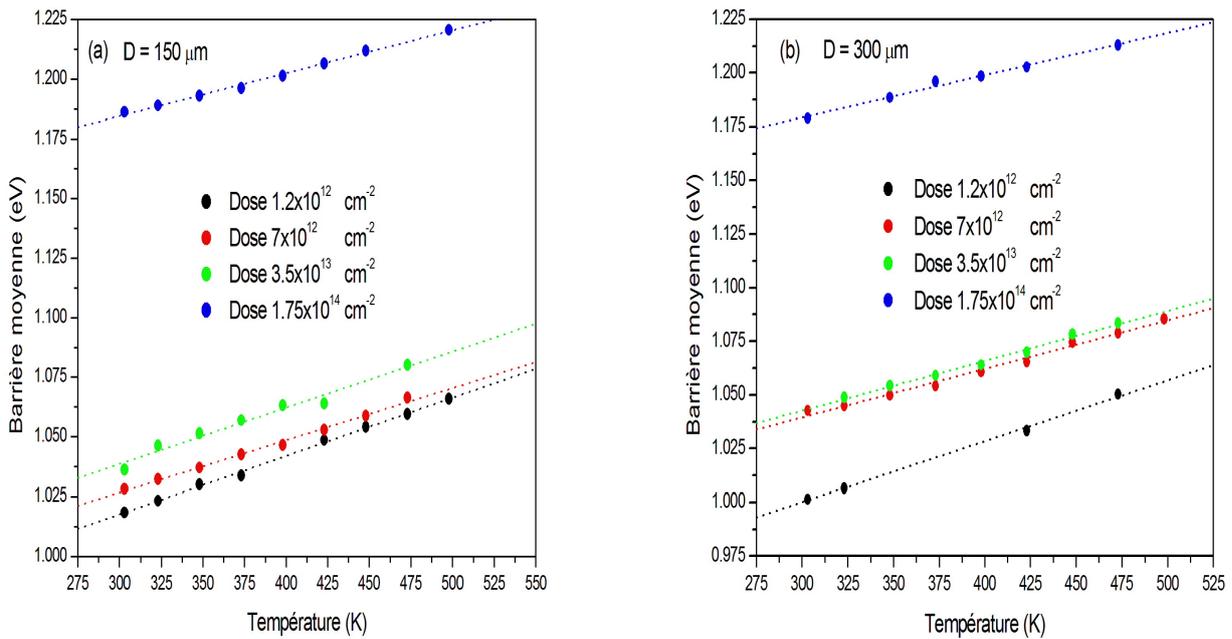


Figure II.27 – Caractéristiques I-V mesurées et simulées suivant le modèle inhomogène pour la Structure Mo/4H-SiC (C), Dose  $1.75 \times 10^{14} \text{ cm}^{-2}$ ,  $D = 150 \mu\text{m}$ .

**2.5.2.3 Variation de la barrière moyenne en fonction de la température :** De la figure II.28 on voit que les valeurs de la barrière moyennes augmentent lorsque la dose augmente et quand la température augmente aussi. La barrière moyenne extraite varie linéairement et proportionnelle à la température T selon la loi suivante :

$$\bar{\phi}_{b0} = \bar{\phi}_{b0}(T = 0K) + \alpha_{\bar{\phi}_{b0}} T \quad (II.25)$$

Avec  $\bar{\phi}_{b0}(T = 0K)$  est la barrière moyenne à la température 0 K déterminée par l'intersection avec l'axe des y et  $\alpha_{\bar{\phi}_{b0}}$  est le coefficient de température de  $\bar{\phi}_{b0}$  déterminé par la pente des lignes droites. La linéarité de la barrière moyenne a été observée par la technique de la microscopie à émission d'électrons balistiques (BEEM) [42] avec un coefficient de température ( $\alpha_{\bar{\phi}_{b0}}$ ) égale à  $-1.3 \times 10^{-4}$  V/K et  $-2.3 \times 10^{-4}$  eV/K pour des diodes Schottky de silicium. Le tableau II.6 résume les différentes valeurs extraites de la barrière moyenne  $\bar{\phi}_{b0}(T = 0K)$  et le coefficient de température  $\alpha_{\bar{\phi}_{b0}}$  pour les différentes structures Mo/4H-SiC (C).



**Figure II.28** – Variation de la barrière moyenne  $\bar{\phi}_{b0}$  en fonction de la température pour différentes doses de la structure Mo/4H-SiC (C). (a) D = 150 μm, (b) D = 300 μm.

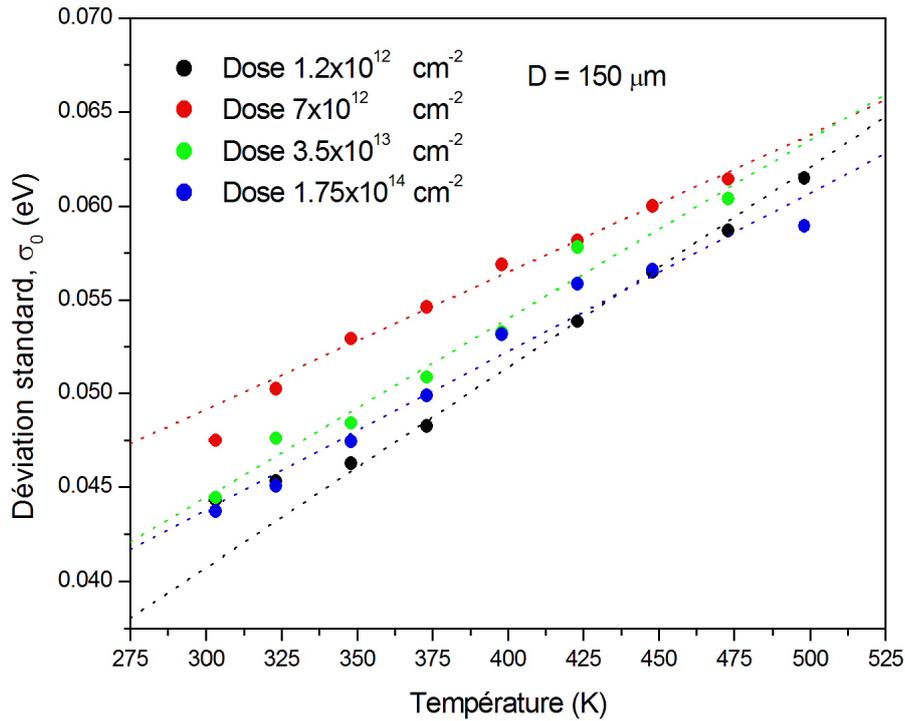
Diamètre ( $\mu\text{m}$ ) de Mo/4H-SiC (C)	Dose ( $\text{cm}^{-2}$ )	Barrière moyenne $\bar{\phi}_{b0}(T = 0K)$ (eV)	Coefficient $\alpha_{\bar{\phi}_{b0}}$ $\times 10^{-4}$ (eV/K)
300 (C)	$1.2 \times 10^{12}$	0.915	2.835
	$7 \times 10^{12}$	0.971	2.263
	$3.5 \times 10^{13}$	0.973	2.325
	$1.75 \times 10^{14}$	1.120	1.969
200 (C)	$1.2 \times 10^{12}$	0.953	3.627
	$7 \times 10^{12}$	0.964	2.502
	$3.5 \times 10^{13}$	0.966	2.487
	$1.75 \times 10^{14}$	1.130	1.797
150 (C)	$1.2 \times 10^{12}$	0.944	2.438
	$7 \times 10^{12}$	0.961	2.187
	$3.5 \times 10^{13}$	0.968	2.357
	$1.75 \times 10^{14}$	1.130	1.797

**Tableau II.6** – Barrières moyennes,  $\bar{\phi}_{b0}(T = 0K)$  et coefficient de température,  $\alpha_{\bar{\phi}_{b0}}$  extraits des structures Mo/4H-SiC (C) avec différentes doses et différents diamètres.

**2.5.2.4 Variation de la déviation standard en fonction de la température :** La figure II.29 montre aussi une linéarité entre la déviation standard et la température suivant la loi :

$$\sigma_0 = \sigma_0(T = 0K) + \alpha_{\sigma_0} T \quad (\text{II.26})$$

Avec  $\sigma_0(T = 0K)$  est la déviation standard à la température 0 K, déterminée par l'intersection avec l'axe des y et  $\alpha_{\sigma_0}$  est un coefficient de température de  $\sigma_0$ , déterminé par la pente de la ligne droite. Les valeurs de la déviation standard à la température 0 K et du coefficient de température pour différentes structures Mo/4H-SiC (C) sont résumées dans le tableau II.7.



**Figure II.29** – Variation de la déviation standard  $\sigma_0$  en fonction de la température avec différentes doses pour les structures Mo/4H-SiC (C),  $D = 150 \mu\text{m}$ .

Diamètre ( $\mu\text{m}$ ) de Mo/4H-SiC (C)	Dose ( $\text{cm}^{-2}$ )	Déviati on standard $\sigma_0(T = 0K)$ (eV)	Coefficient $\alpha_{\sigma_0}$ $\times 10^{-5}$ (eV/K)
300 (C)	$1.2 \times 10^{12}$	0.0114	9.159
	$7 \times 10^{12}$	0.0262	6.815
	$3.5 \times 10^{13}$	0.0197	8.013
	$1.75 \times 10^{14}$	0.0129	9.219
200 (C)	$1.2 \times 10^{12}$	0.0215	8.601
	$7 \times 10^{12}$	0.0168	9.312
	$3.5 \times 10^{13}$	0.0277	6.263
150 (C)	$1.2 \times 10^{12}$	0.0087	10.682
	$7 \times 10^{12}$	0.0271	7.330
	$3.5 \times 10^{13}$	0.0158	9.547
	$1.75 \times 10^{14}$	0.0184	8.458

**Tableau II.7** – Déviati on standard  $\sigma_0(T = 0K)$  et coefficient de température ( $\alpha_{\sigma_0}$ ) extraits des structures Mo/4H-SiC (C) avec différentes doses et différents diamètres.

**2.5.2.5 Variation des résistances  $R_p$  et  $R_c$  en fonction de la température :** La figure II.30 représente la variation des résistances  $R_p$  et  $R_c$  extraites de différentes structures Mo/4H-SiC (C) en fonction de la température selon le troisième modèle inhomogène et  $R_s$  la résistance série extraite à partir du modèle homogène. De cette figure on peut observer plusieurs remarques :

1. La résistance  $R_c$  augmente lorsque la température augmente, tandis que la résistance  $R_p$  diminue légèrement.
2. La résistance  $R_c$  est grande par rapport à  $R_p$  à hautes températures, tandis qu'elles ont le même ordre de grandeur à basses températures (303 K).
3. La somme de  $R_p$  et  $R_c$  a la même allure que la résistance série  $R_s$  (modèle homogène) et cette somme reste inférieure à  $R_s$ . Cette petite différence peut être résiduelle dans le modèle inhomogène qui considère la même résistance élémentaire(r) de chaque diode, mais réellement cette résistance peut être différente à l'interface de la diode parce que la rugosité est non uniforme. Tenir compte de cette fluctuation de la résistance dans le modèle inhomogène, les équations seront plus compliquées. L'augmentation de la résistance série avec la température des diodes Schottky à base de 4H-SiC a été observée par plusieurs chercheurs [82, 90], [97]-[100],.

D'après la signification donnée précédemment par Osvald, la résistance  $R_p$  est la somme de la résistance de la couche épitaxie et la résistance du contact ohmique ( $R_p = R_{épi} + R_{C-O}$ ,  $R_{C-O}$  est négligeable devant  $R_{épi}$ ), et  $R_c$  est la résistance du substrat. La résistance de la couche d'épitaxie et la résistance du substrat sont données par [98, 101] :

$$R_{épi} = \frac{4.t}{\pi D^2} \frac{1}{q\mu_{épi}N_{épi}} \quad (\text{II.27})$$

$$R_{sub} = \frac{1}{2\pi b q \mu_{sub} N_{sub}} \arctan\left(\frac{2D}{b}\right) \quad (\text{II.28})$$

Avec  $\mu_{épi}$ ,  $\mu_{sub}$  sont les mobilités des électrons dans la couche épitaxie et dans le substrat respectivement, et  $N_{épi}$ ,  $N_{sub}$  sont les densités des électrons libres dans la couche épitaxie et dans le substrat respectivement à une température donnée. D est le diamètre du contact et b l'épaisseur de la couche d'épitaxie. Ces deux résistances normalement augmentent avec la température puisque la mobilité des électrons diminue en fonction de la température (300-500K) [102]-[106].

La variation de  $R_p$  en fonction de la température présente, donc une contradiction avec celle donnée par la théorie. Pour enlever cette contradiction on propose une autre signification de  $R_p$  et  $R_c$  comme suit : la résistance  $R_c$  est la somme de la résistance de la couche épitaxie (zone de déplétion et la zone neutre), la résistance du substrat et la résistance du contact ohmique, par contre  $R_p$  présente la résistance de l'interface

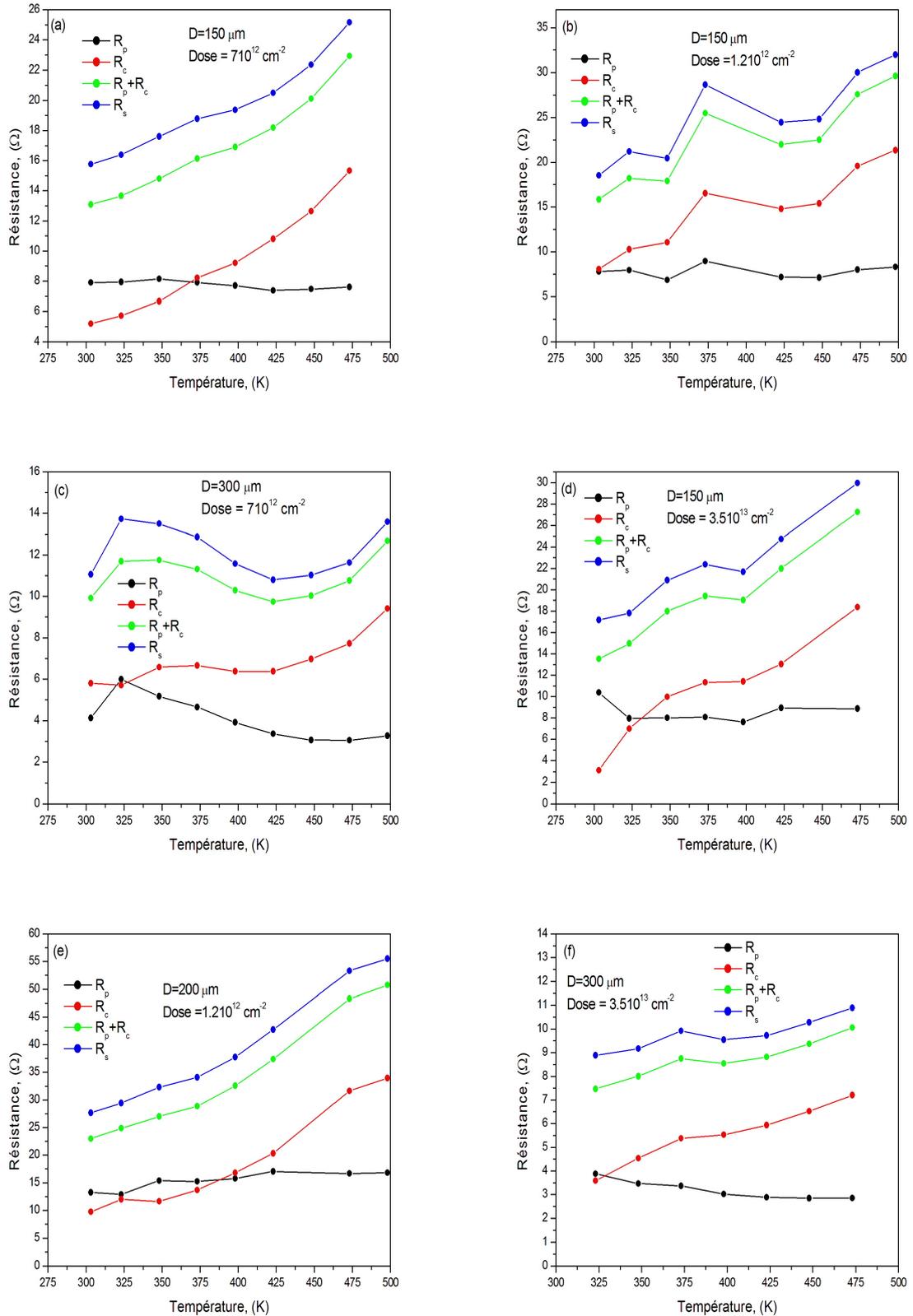
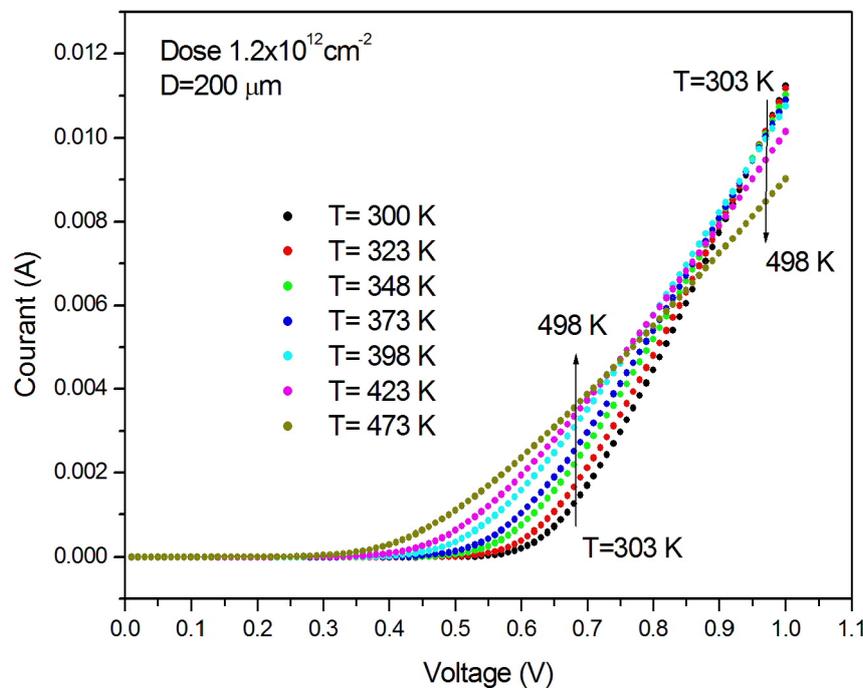


Figure II.30 – Variation des résistances  $R_p$ ,  $R_c$  extraites de différentes structures Mo/4H-SiC (C) en fonction de la température. Comparaison avec la résistance série  $R_s$  du modèle homogène.

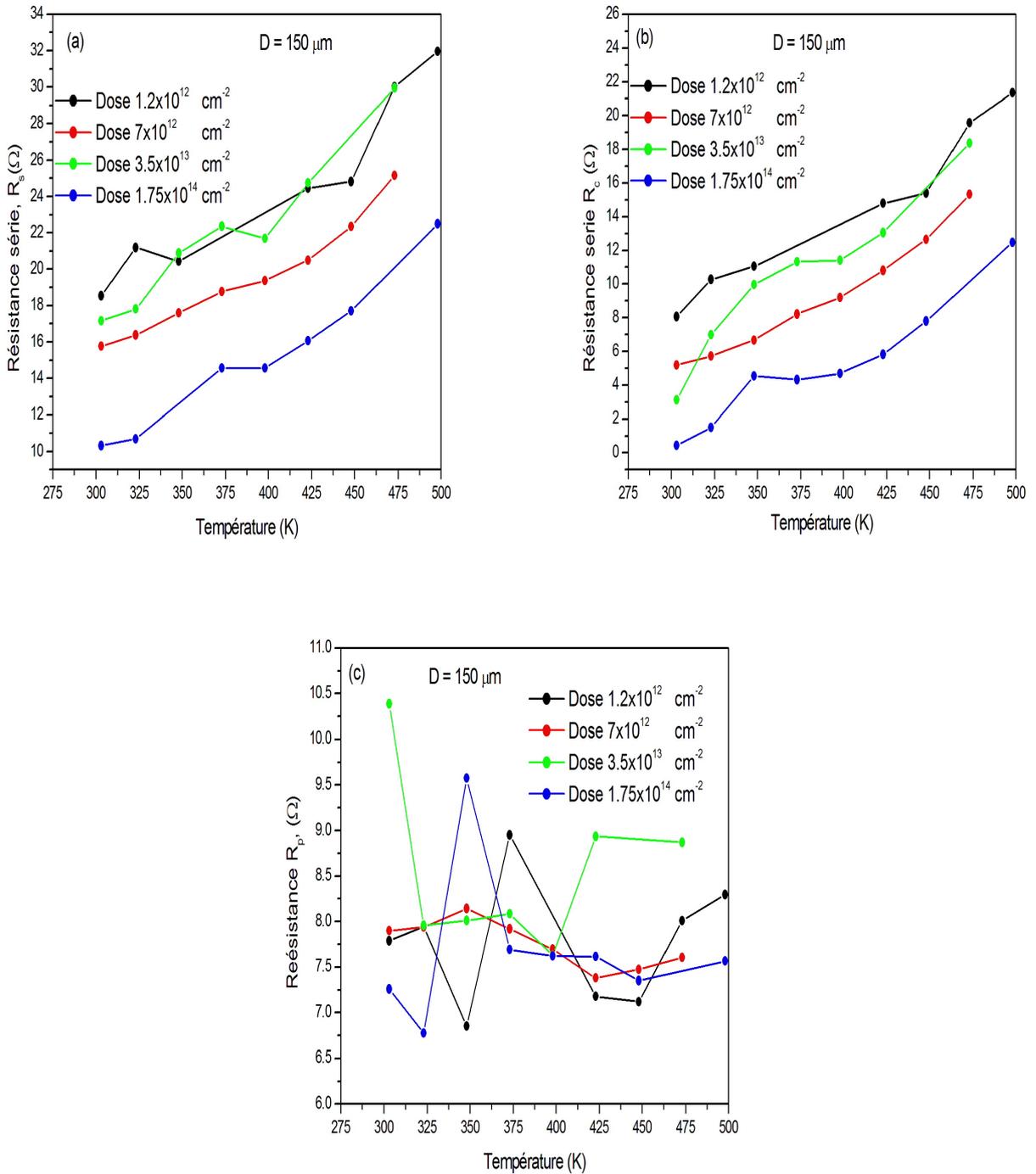
rugueuse entre le métal et le semiconducteur. Cette couche appartient à la zone de déplétion qui possède une résistance considérable puisqu'elle est dépourvue de porteurs libres. Cette résistance est responsable de la déviation du facteur d'idéalité de la valeur idéale 1 (voir Fig II.10a). En plus,  $R_p$  est due aux défauts existants à l'interface du contact, ces défauts peuvent améliorer le déplacement des électrons quand la température augmente (la rugosité diminue).

L'augmentation de la résistance série avec la température conduit au croisement des caractéristiques I-V-T dans la région non linéaire (Fig II.31), où la conduction est contrôlée par la résistance du contact (relation d'Ohm  $V=RI$ ). On note ici que des travaux de simulation [75]-[77] prévoient des intersections des caractéristiques I-V-T à basses résistances ( $<1 \mu\Omega$ ) en utilisant le premier modèle inhomogène.



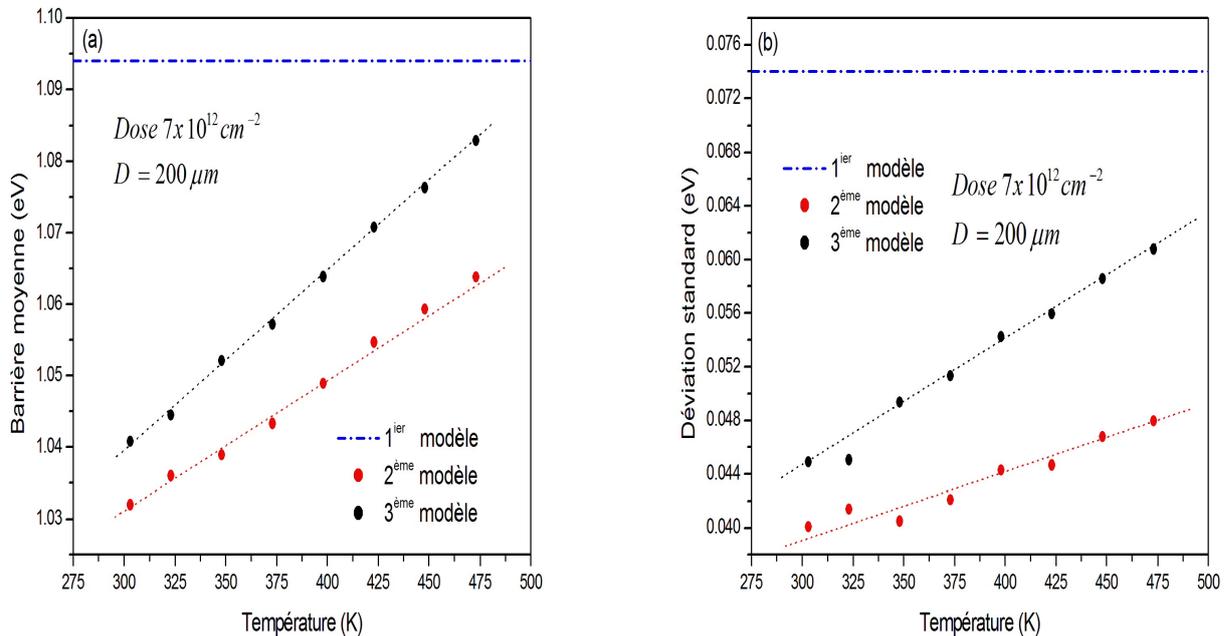
**Figure II.31** – Intersection des caractéristique I-V-T de la structure Mo/4H-SiC (C) dans la région non linéaire, dose  $1.2 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ ,  $D = 200 \mu\text{m}$ .

**2.5.2.6 Effet de la dose sur les résistance  $R_s$ ,  $R_p$  et  $R_c$  :** Comme le montre la figure II.32, la dose d'implantation ionique de "guard ring" de la diode diminue la résistance série du contact (l'effet de la dose sur la résistance  $R_p$  est négligeable). Cette diminution de la résistance peut être attribuée à la diffusion des ions implantés de la surface implantée vers la région où il y a le contact Schottky. Cette diffusion va augmenter la concentration des porteurs libres, donc diminue la résistance.



**Figure II.32** – Effet de la dose sur les résistances : (a) sur  $R_s$ , (b) sur  $R_c$  et (c) sur  $R_p$  de la structure Mo/4H-SiC (C),  $D = 150 \mu\text{m}$ .

## 2.5.3 Comparaison entre les paramètres des trois modèles inhomogènes



**Figure II.33** – (a) Variation de la barrière moyenne des trois modèles inhomogènes en fonction de la température (b) Variation de la déviation standard des trois modèles inhomogènes en fonction de la température de la structure Mo/4H-SiC (C), dose  $7.10^{12} \text{ cm}^{-2}$   $D = 200 \mu\text{m}$ .

Dans le paragraphe (I.2) nous avons montré que les caractéristiques I-V du troisième modèle sont comprises entre les caractéristiques du premier et du deuxième modèles. Par conséquent, les paramètres inhomogènes (barrière moyenne et déviation standard) vont suivre le même comportement que les caractéristiques I-V. La figure II.33 représente les paramètres inhomogènes extraites suivant les trois modèles de la structure Mo/4H-SiC(C). Il est clair que la barrière moyenne ( $\bar{\phi}_{b0}$ ) et la déviation standard ( $\sigma_0$ ) sont comprises entre celles du premier et du deuxième modèle. Elles sont supérieures aux paramètres du deuxième modèle et inférieures aux paramètres du premier modèle. La bonne linéarité de la barrière moyenne et de la déviation standard est observée dans le cas du troisième modèle.

---

---

# CHAPITRE III

---

## POLARISATION INVERSE ET MODÉLISATION

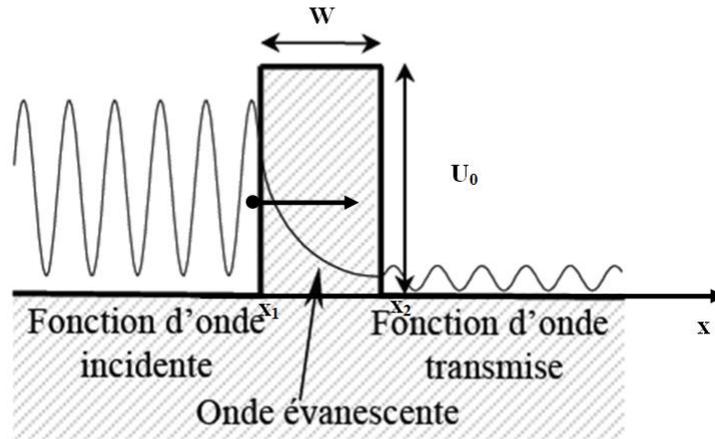
### 1 Introduction

Dans le chapitre précédent, nous avons modélisé la caractéristique courant-tension de la structure Mo/4H-SiC suivant le modèle de conduction par effet thermoïonique prépondérant en polarisation directe. Dans ce chapitre nous allons modéliser la caractéristique courant-tension en polarisation inverse suivant le modèle de conduction par effet tunnel. Dans ce cadre nous nous intéressons beaucoup plus à la formule de Tsu-Esaki [8] qui est basée sur le calcul du coefficient de transmission quantique.

### 2 Modélisation du courant tunnel

#### 2.1 Effet tunnel

Considérons un potentiel rectangulaire  $U(x)$  s'annulant pour  $x \rightarrow \pm\infty$ , possédant un maximum unique  $U_0$  (Fig III.1), et une particule d'énergie  $0 < E < U_0$ . La trajectoire classique possède deux points de rebroussement "turning points"  $x_1$  et  $x_2$ . Supposons que la particule arrive de la région  $x \rightarrow -\infty$  en se propageant vers la droite. Une particule classique serait renvoyée en  $x = x_1$  par la barrière de potentiel, mais une particule quantique possède une probabilité non nulle de franchir la barrière. En effet, la fonction d'onde ne s'annule pas dans la région  $x_1 \leq x \leq x_2$ , et il est possible de la raccorder à une onde plane dans la région  $x \succ x_2$ . Le phénomène est analogue à celui d'une onde évanescence en optique. Le problème est donc de calculer le coefficient de transmission (transparence)  $T(E)$  qui est la probabilité que la particule réussit à traverser ce potentiel.



**Figure III.1** – Fonction d’onde d’un porteur d’énergie  $E$ , évoluant dans une structure rectangulaire (la fonction d’onde réfléchiée n’est pas représentée).

## 2.2 Coefficient de transmission et méthodes d’approximation

Dans cette section nous allons discuter les trois méthodes d’approximation connues pour calculer le coefficient de transmission telles que l’approximation Wentzel-Kramers-Brillouin (WKB), les matrices de transfert (TMM) et la méthode de fonction d’Airy modifiée (MAF).

### 2.2.1 Méthode Wentzel-Kramers-Brillouin (WKB)

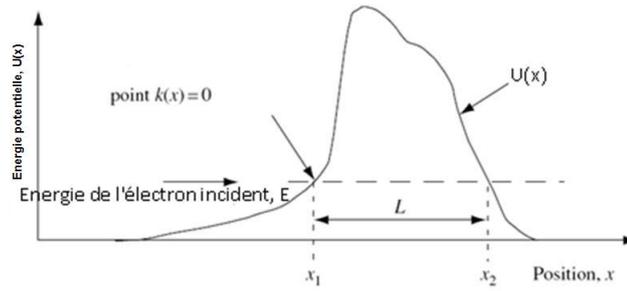
La méthode Wentzel-Kramers-Brillouin permet le calcul quasi-classique de la transparence d’une barrière de potentiel quelconque. Ce formalisme développé en 1926 [107] repose sur l’idée que la mécanique quantique tend vers la mécanique classique quand  $\hbar$  tend vers zéro. L’approche WKB a pour principal avantage le fait d’être analytique quel que soit le profil de potentiel. La condition nécessaire pour que cette approche soit applicable au calcul de la transparence est que l’énergie potentielle doit varier lentement à l’échelle de la longueur d’onde des porteurs incidents.

#### Principe [60]

Considérons un électron d’énergie  $E$ , se présentant devant une barrière d’énergie  $U(x)$  (Fig III.2).

L’équation de Schrödinger de cet électron s’écrit :

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} - k^2(x)\psi = 0 \quad (\text{III.1})$$



**Figure III.2** – Profil d'une barrière d'énergie de potentiel en fonction de la position  $x$  avec les deux points de rebroussement  $x_1, x_2$ .

Où

$$k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(U(x) - E)} \quad (\text{III.2})$$

La solution de cette équation différentielle est de la forme  $\psi = e^{\alpha(x)}$ , où  $\alpha(x)$  est négatif car si l'électron se déplace de la gauche vers la droite sa fonction d'onde diminue nécessairement suivant  $x$ . Les dérivées successives de  $\psi$  s'écrivent donc :

$$\frac{d\psi}{dx} = e^{\alpha(x)} \frac{d\alpha(x)}{dx} \quad (\text{III.3})$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = e^{\alpha(x)} \frac{d^2\alpha(x)}{dx^2} + e^{\alpha(x)} \left( \frac{d\alpha(x)}{dx} \right)^2 \quad (\text{III.4})$$

L'équation (III.1) s'écrit donc :

$$\frac{d^2\alpha(x)}{dx^2} + \left( \frac{d\alpha(x)}{dx} \right)^2 - k^2(x) = 0 \quad (\text{III.5})$$

En supposant que  $\alpha(x)$  varie lentement avec  $x$ , on peut faire l'approximation

$$\frac{d^2\alpha(x)}{dx^2} \ll \left( \frac{d\alpha(x)}{dx} \right)^2 \quad (\text{III.6})$$

De sorte que l'équation (III.5) s'écrit :

$$\left( \frac{d\alpha(x)}{dx} \right)^2 = k^2(x) \quad (\text{III.7})$$

Ainsi lorsque l'électron atteint la barrière, c'est-à-dire pour  $x \succ x_1$ ,  $\alpha(x)$ , qui doit être

négatif, est donné par :

$$\alpha(x) = - \int_{x_1}^x k(x) dx \quad (\text{III.8})$$

La fonction d'onde s'écrit donc :

$$\psi = \exp \left( - \int_{x_1}^x k(x) dx \right) \quad (\text{III.9})$$

Le coefficient de transmission de la barrière, qui est donné par la probabilité de présence de l'électron en  $x = x_2$ , s'écrit donc :

$$T_{WKB} = \psi^* \psi|_{x=x_2} = \theta^2 = \left( \exp \left( - \int_{x_1}^{x_2} k(x) dx \right) \right)^2 \quad (\text{III.10})$$

Soit :

$$T_{WKB} = \exp \left( -2 \left( \frac{2m}{\hbar^2} \right)^{1/2} \int_{x_1}^{x_2} (U(x) - E)^{1/2} dx \right) \quad (\text{III.11})$$

**2.2.1.1 Méthode WKBJ :** Cette méthode est proposée par Ghatak [108], elle est plus précise que l'expression (III.10). La formule de cette méthode est donnée par :

$$T_{WKBJ} = \frac{1}{\left[ \frac{1}{\theta} + \frac{\theta}{4} \right]^2} \quad (\text{III.12})$$

### 2.2.2 Méthode de fonction d'Airy modifiée (MAF)

La méthode de fonction d'Airy modifiée a été proposée par Langer en 1931 [109]. Elle présente une solution analytique approchée de l'équation de Schrödinger. Cette méthode est utilisable dans les problèmes à effet tunnel et donne une solution presque exacte dans les cas des profils linéaires [110, 111].

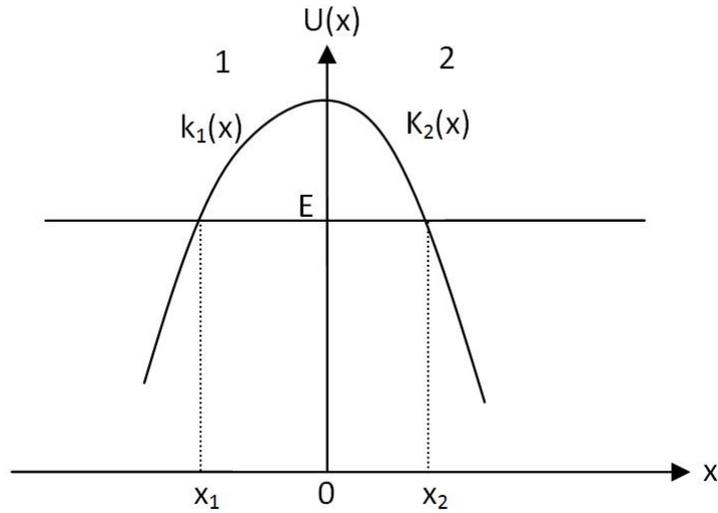
#### Principe [110]

On considère un profil de potentiel arbitraire comme le montre la figure III.3. Tous les symboles mathématique avec l'indice "1" concernant à la région 1, tandis que les autres avec l'indice "2" concernant à la région 2.

L'équation de Schrödinger de la particule s'écrit :

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + k^2(x)\psi = 0 \quad (\text{III.13})$$

avec



**Figure III.3** – Barrière de potentiel arbitraire où on la divise en deux régions 1 et 2, les conditions de continuité s’appliquent au point  $x=0$ .

$$k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E - U(x))} \tag{III.14}$$

Les solutions MAF de l’équation de Schrödinger (III.13) sont :

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{\xi'(x)}} [const A_i(\xi) + const B_i(\xi)] \tag{III.15}$$

Où  $A_i$  et  $B_i$  sont les fonctions d’Airy données par [112]-[114] :

$$A_i(x) \cong (4\pi)^{-1/2} x^{-1/4} \exp\left(-\frac{2}{3}x^{3/2}\right) \tag{III.16}$$

$$B_i(x) \cong \pi^{-1/2} x^{-1/4} \exp\left(\frac{2}{3}x^{3/2}\right) \tag{III.17}$$

Les relations (III.16) et (III.17) sont valables pour  $x \gg 0$ .

La fonction  $\xi(x)$  est donnée par la formule suivante :

$$\xi(x) = \left[ \frac{3}{2} \int_{x_0}^x \sqrt{-k^2(x)} dx \right]^{2/3} \tag{III.18}$$

Où  $x_0$  représente le point où  $k^2(x)$  change le signe.

$\xi(x)$  est la solution de l'équation différentielle [115] :

$$\xi(x) \xi'^2(x) + k^2(x) = 0 \quad (\text{III.19})$$

avec l'approximation suivante :

$$p(x) = \frac{3}{4} \left( \frac{\xi''}{\xi'} \right)^2 - \frac{\xi'''}{2\xi'} \approx 0 \quad (\text{III.20})$$

Par des simples manipulations on obtient :

$$\frac{1}{|\sqrt{\xi'(x)}|} = \frac{1}{|k^2(x)|^{\frac{1}{4}}} |\xi|^{\frac{1}{4}} \quad (\text{III.21})$$

Dans la région 1 :  $k^2(x) = k_1^2(x)$ ,  $\xi_1(x)$  et  $\psi_1(x)$  sont définies par :

$$\xi_1(x) = \left[ \frac{3}{2} \int_{x_1}^x \sqrt{-k^2(x)} dx \right]^{2/3}, \quad x_1 \prec x \prec 0 \quad (\text{III.22})$$

$$\psi_1(x) = \frac{1}{\sqrt{\xi_1'(x)}} [C_1 Ai(\xi_1) + D_1 Bi(\xi_1)] \quad (\text{III.23})$$

En utilisant les équations (III.16), (III.17) et (III.21) on obtient :

$$\psi_1(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi k_1(x)}} \left[ \left( \frac{D_1 - iC_1}{2} \right) e^{i\alpha} + \left( \frac{D_1 + iC_1}{2} \right) e^{-i\alpha} \right] \quad (\text{III.24})$$

avec

$$\alpha = \frac{2}{3} |\xi_1|^{\frac{3}{2}} + \frac{\pi}{4} \quad (\text{III.25})$$

Dans la région 2 :  $k^2(x) = k_2^2(x)$ ,  $\xi_2(x)$  et  $\psi_2(x)$  sont définies par :

$$\xi_2(x) = \left[ \frac{3}{2} \int_x^{x_2} \sqrt{-k^2(x)} dx \right]^{2/3}, \quad 0 \prec x \prec x_2 \quad (\text{III.26})$$

$$\psi_2(x) = \frac{1}{\sqrt{-\xi_2'}} [C_2 Ai(\xi_2) + D_2 Bi(\xi_2)] \quad (\text{III.27})$$

En utilisant les équations (III.16), (III.17) et (III.21) on obtient :

$$\psi_2(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi k_2(x)}} \left[ \left( \frac{D_2 - iC_2}{2} \right) e^{i\beta} + \left( \frac{D_2 + iC_2}{2} \right) e^{-i\beta} \right] \quad (\text{III.28})$$

avec

$$\beta = \frac{2}{3} |\xi_2|^{\frac{3}{2}} + \frac{\pi}{4} \quad (\text{III.29})$$

Puisqu'il n'y a pas de réflexion d'onde à  $x = x_2$ , on a  $C_2 = iD_2$  avec  $D_2 = 1$ .

$$\psi_2(x) = \frac{1}{\sqrt{-\xi_2'}} [-Ai(\xi_2) + iBi(\xi_2)] \quad (\text{III.30})$$

Appliquant la continuité de  $\psi(x)$  et  $\psi'(x)$  au point  $x = 0$ , on obtient :

$$C_1 = \pi K_2 [Bi'(\xi_{10}) - K_1 Bi(\xi_{10})] \quad (\text{III.31})$$

$$D_1 = -\pi K_2 [Ai'(\xi_{10}) - K_1 Ai(\xi_{10})] \quad (\text{III.32})$$

Où

$$K_1 = \frac{\xi_{20}' - Ai'(\xi_{20}) + iBi'(\xi_{20})}{\xi_{10}' - Ai(\xi_{20}) + iBi(\xi_{20})} - \frac{\xi_{20}''}{2\xi_{10}'\xi_{20}'} + \frac{\xi_{10}''}{2\xi_{10}'\xi_{10}'} \quad (\text{III.33})$$

$$K_2 = \sqrt{\frac{\xi_{10}'}{-\xi_{20}'}} [-Ai(\xi_{20}) + iBi(\xi_{20})] \quad (\text{III.34})$$

Le coefficient de transmission  $T(E)$  est le rapport du courant de probabilité transmis  $J_t$  au courant incident  $J_i$  :

$$T(E) = \frac{J_t}{J_i} \quad (\text{III.35})$$

Sachant que le courant de probabilité est donné par la relation :

$$J = \left( \frac{\hbar}{2im} \right) \left[ \psi^* \frac{d\psi}{dx} - \frac{d\psi^*}{dx} \psi \right] = \text{Re} \left[ \frac{\hbar}{im} \psi^* \frac{d\psi}{dx} \right] \quad (\text{III.36})$$

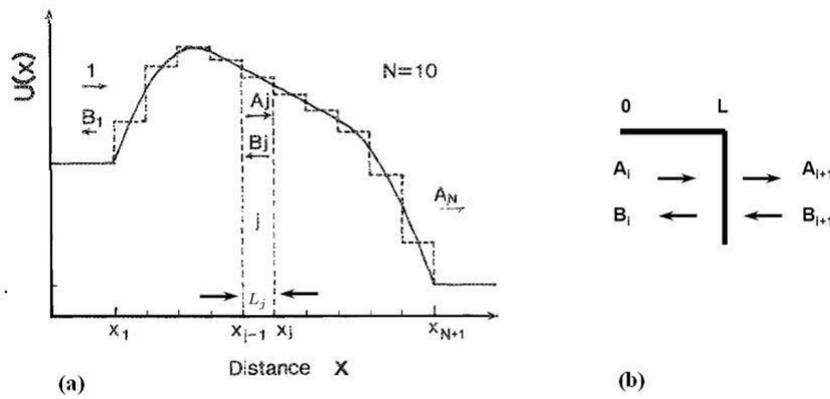
Le coefficient de transmission  $T_{MAF}$  est donné par :

$$T_{MAF} = \frac{4}{|D_1 + iC_1|^2} \quad (\text{III.37})$$

### 2.2.3 Méthode des matrices de transfert (TMM)

La méthode des matrices de transfert appliquée au calcul de la transparence tunnel a été proposée par Ando et al en 1987 [116]. Il s'agit d'une approche numérique consistant à discrétiser la barrière de potentiel en un nombre  $N$  de barrières carrées d'épaisseurs infinitésimales comme schématisée à la Figure III.4. Cette approche présente l'avantage de s'appliquer à n'importe quel profil de barrière de potentiel. Néanmoins, elle peut présenter un coût numérique non négligeable quand  $N$  est important.

#### Principe [117]



**Figure III.4** – Principe de discrétisation d'une barrière de potentiel quelconque en  $N$  barrières carrées (méthode des matrices de transfert). (b) Schéma illustrant les réflexions des ondes sur une discontinuité de potentiel.

Dans la région  $x_{j-1} < x < x_j$ , le potentiel est constant et égal à  $U_j$ . La forme la plus générale de la fonction d'onde associée à un état propre d'énergie  $E$  dans cette région est :

$$\psi_j = A_j e^{ik_j x} + B_j e^{-ik_j x} \tag{III.38}$$

Avec

$$k_j = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E - U_j)} \tag{III.39}$$

Si  $E < U_j$ , alors  $k_j$  est imaginaire et la fonction d'onde est alors une combinaison d'exponentielles croissantes et décroissantes. Dans le cas contraire ( $E > U_j$ ) il s'agit simplement d'une superposition d'ondes progressives se dirigeant dans les deux sens. A chaque interface (située à  $x_j$ ) la fonction d'onde doit satisfaire deux conditions de continuité :  $\psi$  et  $d\psi/dx$  doivent être continus, afin que le courant de probabilité soit continu et qu'aucune probabilité ne soit perdue aux interfaces.

Sous forme matricielle, la condition de continuité à l'interface  $x_j$  prend la forme suivante :

$$\begin{bmatrix} A_j \\ B_j \end{bmatrix} = M_j \begin{bmatrix} A_{j+1} \\ B_{j+1} \end{bmatrix} \quad (\text{III.40})$$

Où  $M_j$  est la matrice de transfert de la  $J^{\text{ème}}$  région de potentiel  $U_j$

$$M_j = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} \left(1 + \frac{k_{j+1}}{k_j}\right) e^{-ik_j L_j} & \left(1 - \frac{k_{j+1}}{k_j}\right) e^{-ik_j L_j} \\ \left(1 - \frac{k_{j+1}}{k_j}\right) e^{ik_j L_j} & \left(1 + \frac{k_{j+1}}{k_j}\right) e^{ik_j L_j} \end{bmatrix} \quad (\text{III.41})$$

La multiplication de toutes les matrices  $M_j$  conduit à la matrice de transfert pour toute la barrière de potentiel.

$$\begin{bmatrix} A_1 \\ B_1 \end{bmatrix} = M \begin{bmatrix} A_N \\ B_N \end{bmatrix} = \prod_{j=1}^{j=N} M_j \begin{bmatrix} A_N \\ B_N \end{bmatrix} \quad (\text{III.42})$$

$$M = \prod_{j=1}^{j=N} M_j = \begin{bmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{bmatrix} \quad (\text{III.43})$$

Le déterminant de la matrice finale  $M$  est calculé par deux méthodes différentes :

1<sup>ère</sup> méthode :

$$\det(M) = \det \left( \prod_{i=1}^{i=N} M_i \right) = \frac{k_N}{k_1} \quad (\text{III.44})$$

2<sup>ème</sup> méthode :

$$\det(M) = M_{11}M_{22} - M_{12}M_{21} \quad (\text{III.45})$$

Si on suppose qu'aucune onde ne vient de la droite ( $B_N = 0$ ) et que l'onde incidente est normalisée de la façon habituelle ( $A_1 = 1$ ) l'équation (III.42) s'écrit :

$$\begin{bmatrix} 1 \\ B_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_N \\ 0 \end{bmatrix} \quad (\text{III.46})$$

Le coefficient de transmission est donné par la relation :

$$T_{TMM} = \frac{1}{|M_{11}|^2} \quad (\text{III.47})$$

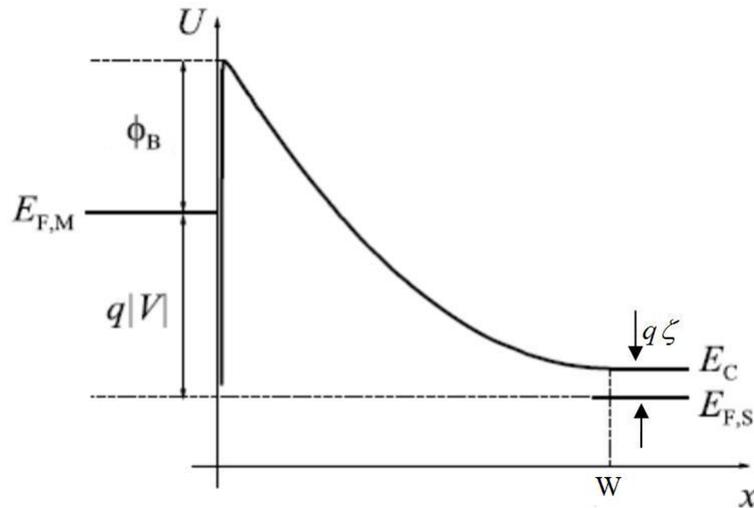
### 2.3 Modèle de la barrière Schottky

Le profil de la barrière du contact métal/semiconducteur est représenté à la figure III.5. La barrière d'énergie  $U(x)$  est en fonction de la distance  $x$  (l'origine  $x=0$  est localisé à l'interface du contact). Cette barrière est mesurée en respectant l'énergie basse de la bande de conduction dans la région neutre du semiconducteur et elle a l'expression [31, 34] :

$$U(x) = \frac{q^2 N_D}{2\epsilon_s} (W - x)^2 - \frac{q^2}{16\pi\epsilon_s x} \quad (\text{III.48})$$

Où  $N_D$  est la concentration de dopage (type n),  $\epsilon_s$  est la permittivité du semiconducteur,  $W$  est la largeur de la zone de déplétion qui dépend de la tension appliquée ( $V$ ) au contact Schottky et de la hauteur de barrière ( $\phi_b$ ) donnée par :

$$W = \sqrt{\frac{2\epsilon_s}{qN_D} (\phi_b - \zeta - V)} \quad (\text{III.49})$$



**Figure III.5** – profil de la barrière Schottky sous polarisation inverse en tenant compte de l'effet de la force image.

Le premier terme de l'équation (III.48) est la forme parabolique conventionnelle de la barrière Schottky à l'interface.

Le deuxième terme est le potentiel de la force image additionné à la composante de la zone de déplétion.

La position  $x_{max}$  qui correspond à la valeur maximale du profil de l'énergie de potentiel est donnée par la résolution de cette équation :

$$\frac{dU(x)}{dx} = \frac{q^2}{16\pi\epsilon_s x_{max}^2} - \frac{q^2 N_D}{\epsilon_s} (W - x_{max}) = 0 \quad (\text{III.50})$$

## 2.4 Méthode de calcul

Pour calculer la densité de courant tunnel nous avons suivi les étapes suivantes :

1. Calcul de la valeur maximale  $U_{max}$  du profil de potentiel exprimé par la relation (III.48) ainsi l'abscisse correspondante  $x_{max}$ , par la dérivation par rapport à la distance  $x$  puis le résultat de la dérivation est résout par la méthode itérative de Newton.
2. A chaque valeur donnée de l'énergie  $E$  de la particule, on résout l'équation suivante :

$$\frac{q^2 N_D}{2\epsilon_s} (W - x)^2 - \frac{q^2}{16\pi\epsilon_s x} = E \quad (\text{III.51})$$

On fait la résolution de cette équation de troisième degré par la méthode de Newton qui nous donne une seule solution  $x_1$  puis nous utilisons la division euclidienne pour trouver une autre équation de deuxième degré où les solutions sont  $x_2$  et  $x_3$ , l'une des trois solutions est exclue (soit  $x_3 > W$ ).

3. Calcul de coefficient de transmission  $T(E)$  en calculant l'intégrale par la méthode de trapèzes (ou Simpson) pour la WKB ou par l'implantation des formules analytiques de la méthode MAF ou bien la multiplication des matrices pour la méthode TMM. Dans la méthode TMM on divise la largeur de barrière en trois régions : la première est  $0 < x < x_1$ , la deuxième région est  $x_1 < x < x_2$  et la troisième région est  $x_2 < x < W$  (Fig III.6). Dans les régions 1 et 3,  $E > U_j$ ,  $k_j$  est réel alors dans la deuxième région où ( $E < U_j$ )  $k_j$  est imaginaire.
4. Calcul de la densité de courant en intégrant la relation suivante par la méthode de trapèzes (ou Simpson).

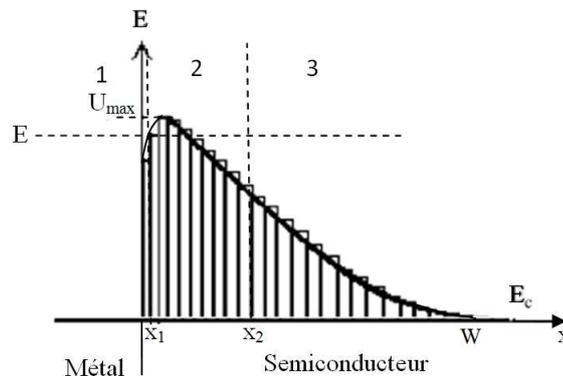


Figure III.6 – Méthode de discrétisation de la barrière Schottky.

$$J_{tu} = \frac{A^*T}{k_B} \int_{E_{min}}^{E_{max}} T(E_x) N(E_x) dE_x = \frac{A^*T}{k_B} \int_{E_{min}}^{U_{max}} T(E_x) \ln \frac{1 + \exp\left(\frac{-q\zeta - E_x}{k_B T}\right)}{1 + \exp\left(\frac{-q\zeta - qV - E_x}{k_B T}\right)} dE_x \quad (III.52)$$

On note ici que l'énergie  $E_{min}$  est choisie de telle manière que la densité de courant totale soit pratiquement constante pour chaque valeur de la tension V.

Pour résumer les quatre étapes précédentes nous construisons l'organigramme suivant :

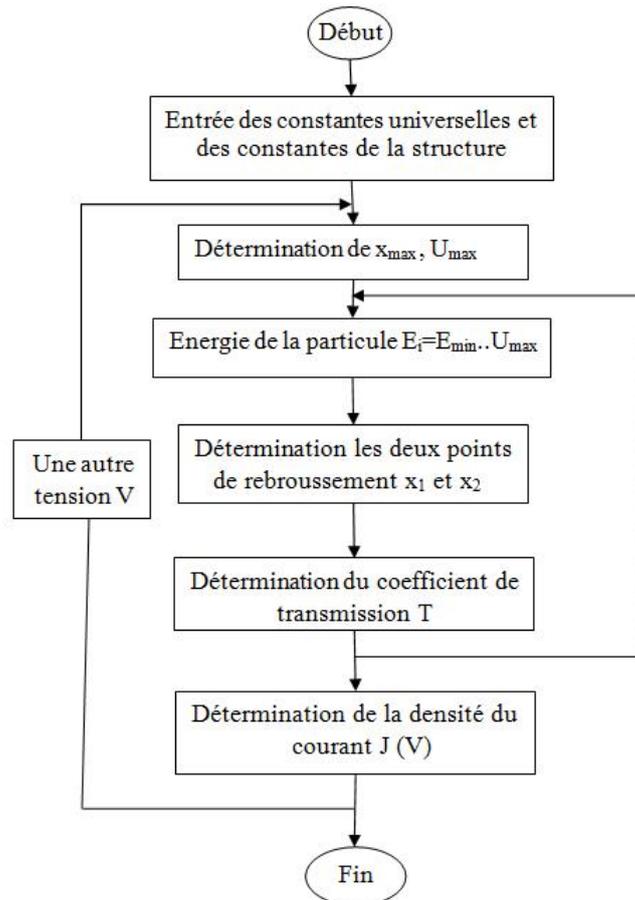
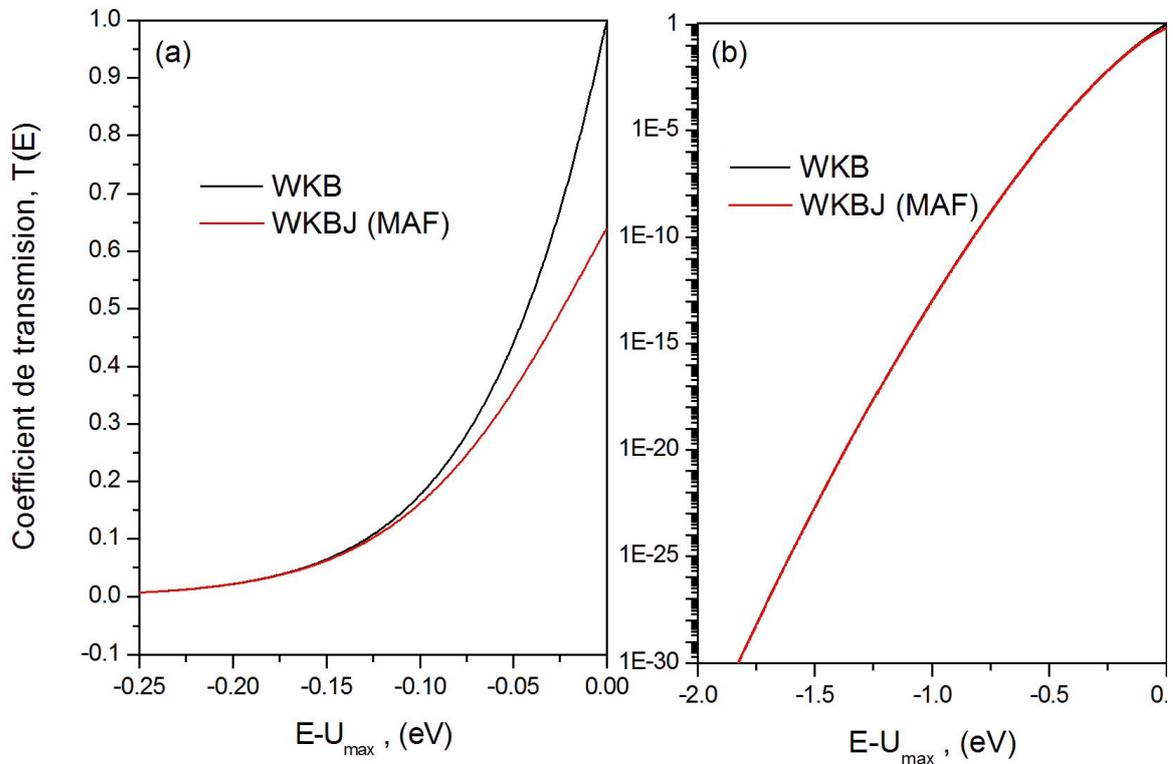


Figure III.7 – Organigramme de calcul du coefficient de transmission et de la densité de courant tunnel dans une diode Schottky.

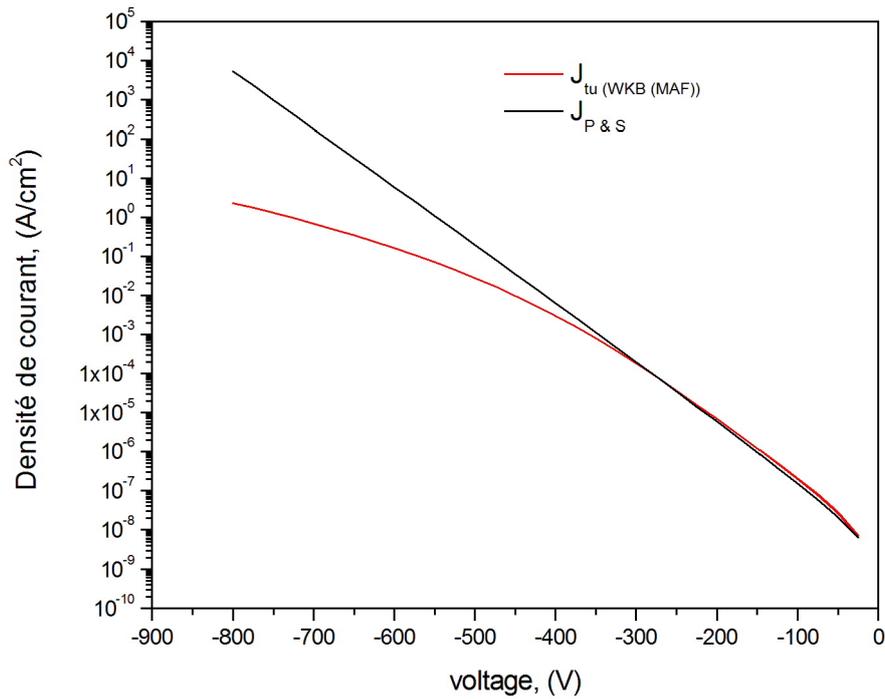
### 2.4.1 Comparaison entre les coefficients de transmission $T_{WKB}$ , $T_{WKBJ}$ et $T_{MAF}$



**Figure III.8** – Coefficient de transmission en fonction de l'énergie pour différentes méthodes d'approximation  $T_{WKB}$ ,  $T_{WKBJ}$  et  $T_{MAF}$ . (a) échelle linéaire, (b) échelle semilogarithmique,  $V = -400V$ ,  $N_D = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$  et  $\phi_b = 1 \text{ eV}$ .

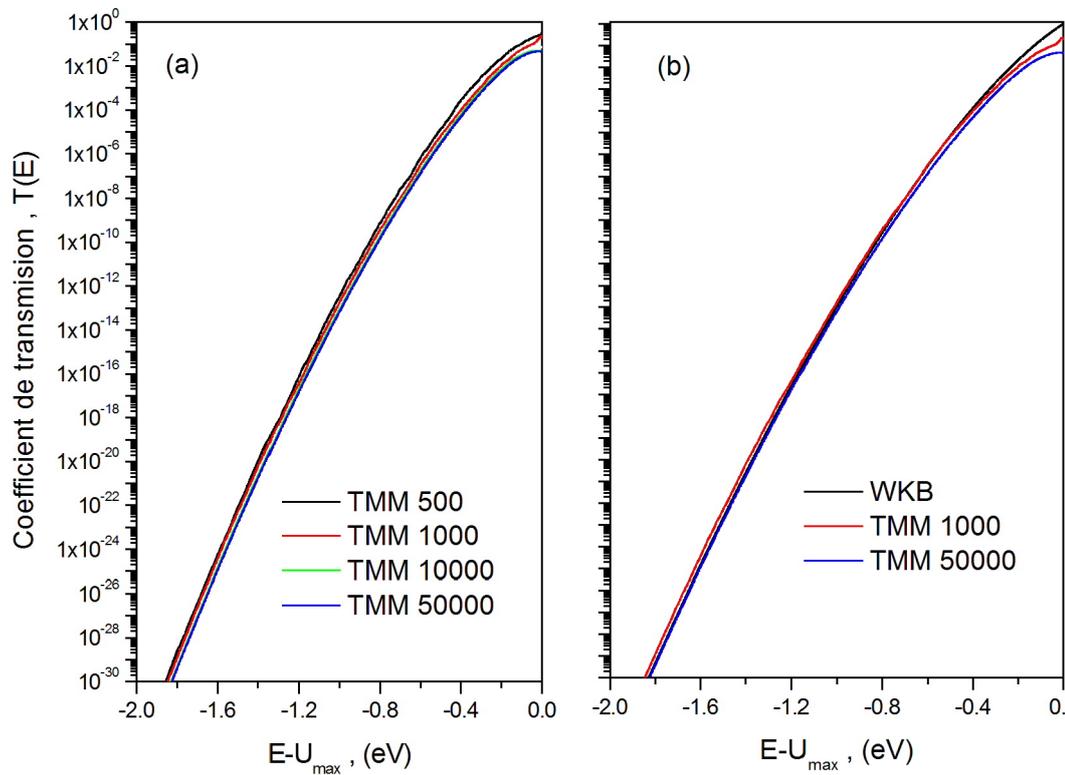
La Figure III.8 permet une comparaison entre les coefficients de transmission calculés par les trois méthodes WKB, WKBJ et MAF. De cette figure on constate que le coefficient de transmission augmente lorsque l'énergie de la particule augmente et quand elle s'approche de l'énergie maximale de la barrière de potentiel de la diode Schottky ( $U_{max}$ ) elle atteint l'unité (1). Les coefficients de transmission calculés par les deux méthodes WKBJ et MAF coïncident d'une façon parfaite dans tout le domaine de calcul, par contre le coefficient de transmission calculé par la méthode WKB diverge un peu dans les valeurs d'énergie plus proches de l'énergie maximale ( $U_{max}$ ). Cette coïncidence presque totale du coefficient de transmission dans tout le domaine d'énergie conduit à l'obtention de même valeur de la densité de courant calculée par les différentes méthodes (WKB, WKBJ et MAF) (Fig III.9).

La figure III.9 compare aussi entre la densité de courant simulée numériquement par les méthodes (WKB, WKBJ et MAF) et la densité de courant donnée par la relation analytique approchée par Padovani et Stratton [23] (équation I.47). On voit que les deux



**Figure III.9** – Densité de courant tunnel simulée en utilisant les approximations WKB, WKBJ et MAF. Comparaison avec celle donnée par Padovani et Stratton équation(I.44),  $\phi_b = 1 \text{ eV}$ .

méthodes s'approchent pour certaines valeurs du voltage appliqué puis elles divergent. On note ici que l'approximation de Padovani et Stratton est basée sur le développement de Taylor de la transparence autour d'une énergie maximale ( $E_m$ ) au-dessous de l'énergie maximale du profil de potentiel ( $U_{max}$ ). Cette approximation est valable seulement à des tensions et de températures données (équations I.49 et I.50).

2.4.2 Comparaison entre les coefficients de transmission  $T_{WKB}$  et  $T_{TMM}$ 

**Figure III.10** – (a) Coefficients de transmission en fonction de l'énergie, calculés par la méthode TMM avec différents pas de discrétisation. (b) comparaison avec la méthode WKB,  $V = -400$  V,  $\phi_b = 1$  eV.

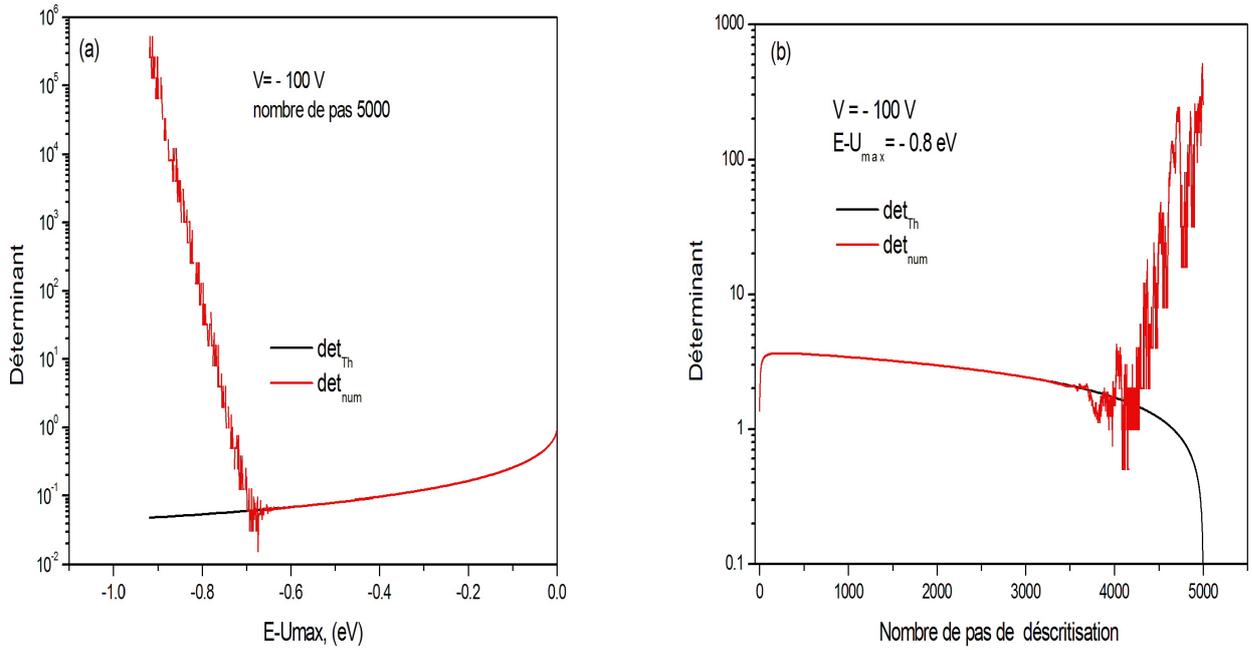
La figure III.10 représente le coefficient de transmission en fonction de l'énergie calculé par la méthode des matrices de transfert (TMM). Il est clair que la transparence est affectée par le nombre de pas de discrétisation. En effet Dimitriu [118] a remarqué que le coefficient de transmission d'une barrière rectangulaire calculé par la méthode des matrices de transfert atteint la valeur analytique presque à 2000 pas de discrétisation. Cependant, plusieurs auteurs [119] ont noté des problèmes numériques dans l'application de cette méthode pour le calcul de fonctions d'onde. Ces problèmes sont dus à la multiplication des matrices d'exponentielle croissantes et décroissantes. Pour les barrières épaisses, cela conduit à des erreurs d'arrondi qui finalement dépassent l'amplitude de la fonction d'onde elle-même.

De notre part nous avons suivi l'évolution de la multiplication des matrices en calculant le déterminant de la matrice finale par deux méthodes différentes :

1<sup>ère</sup> méthode que nous l'appelons méthode théorique en utilisant l'équation (III.44)

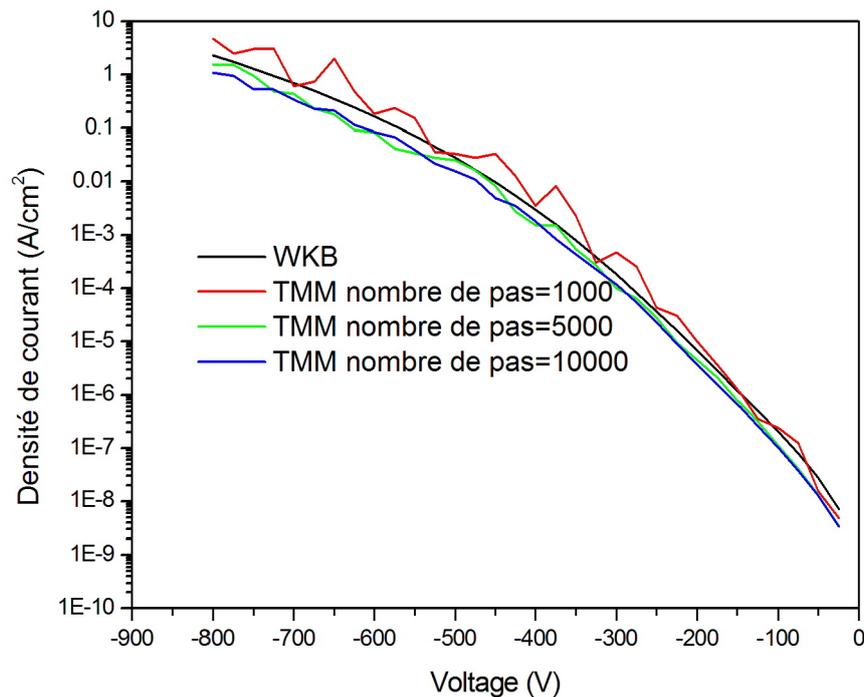
2<sup>ème</sup> méthode que nous l'appelons méthode numérique en utilisant l'équation (III.45)

De la figure III.11a on remarque que la valeur du déterminant numérique ( $det_{num}$ ) calculée par l'équation (III.45) et celle calculée théoriquement ( $det_{th}$ ) à partir de l'équation (III.44) divergent complètement dans le domaine d'énergies éloignées de l'énergie maxi-



**Figure III.11** – (a) évolution de déterminant ( $det_{th}$  et  $det_{num}$ ) avec l'énergie de la particule (b) effet de nombre de discrétisation sur le déterminant,  $V = -100$  V,  $\phi_b = 1$  eV.

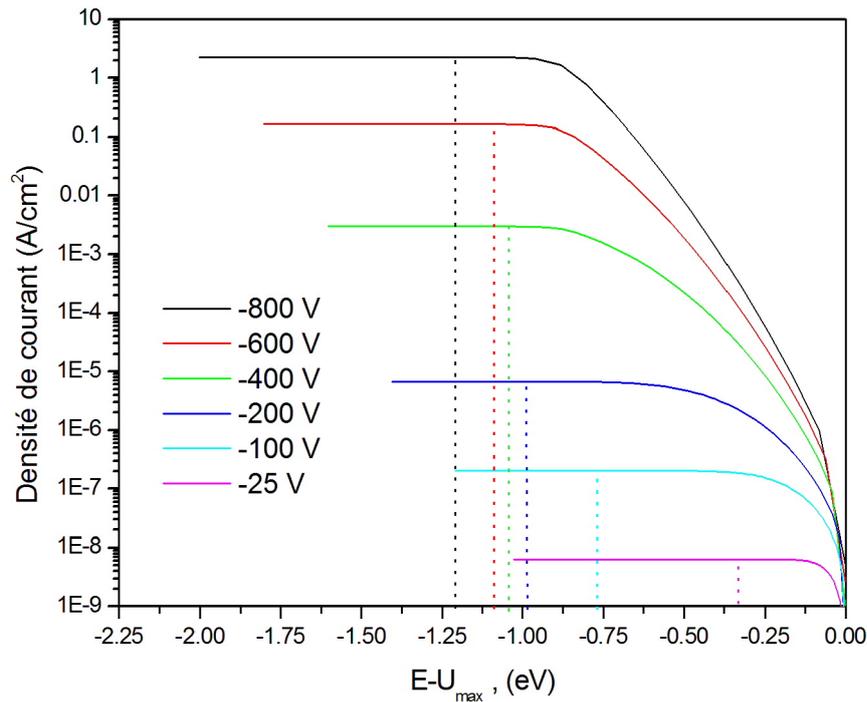
male  $U_{max}$ . Cette divergence est due à la multiplication des matrices comme le montre la figure III.11b. La multiplication des matrices dans les deux régions où  $(0 < x < x_1$  et  $x_2 < x)$  ne contribue pas à cette divergence. Seule la multiplication des matrices entre les deux points de rebroussement ( $x_1$  et  $x_2$ ) influe sur la valeur du déterminant. Malgré cette divergence, les transparences calculées par la méthode des matrices de transfert ( $T_{TMM}$ ) restent proches aux valeurs calculées par la méthode WKB comme le montre la figure III.10b qui conduit aussi à une densité de courant proche à celle calculée par la méthode WKB (Fig III.12). L'interprétation de cette approche est que la contribution d'énergies éloignées de  $U_{max}$  au courant total est négligeable (on le démontre ultérieurement).



**Figure III.12** – Densité de courant tunnel simulé en utilisant l'approximation des matrices de transfert (TMM) avec différents nombre de pas de discrétisation,  $V = -400$  V,  $\phi_b = 1$  eV.

### 2.4.3 Choix de l'énergie minimale $E_{min}$

L'intégrale de l'équation (III.52) se fait théoriquement à partir de l'énergie zéro ( $E = E_c$ ), mais à cause de dépassement des valeurs du coefficient de transmission de la valeur maximale limitée par le langage de Fortran (environ  $10^{-308}$ ) dans la majorité d'énergies éloignées de l'énergie maximale  $U_{max}$ , on effectue l'intégrale à partir d'une énergie minimale supérieure à zéro. L'énergie  $E_{min}$  est non déterminable par une valeur fixe, c'est pour cette raison que nous avons fait l'intégrale à partir des énergies inférieurs à l'énergie maximale  $E_{max}$  de telle manière que la densité de courant total reste invariable à partir d'une énergie de saturation  $E_{mins}$  (la contribution de l'intervalle  $[E_{mins}, E_{max}]$  présente 99.99% du courant total) (Fig III.13), cette énergie minimale ( $E_{mins}$ ) augmente en augmentant la tension V, elle est de l'ordre de quelques eV au-dessous de  $U_{max}$  (0.33 eV à la tension -25 V et 1.2 eV à la tension -800 V). La valeur de  $E_{mins}$  peut dépasser la hauteur de barrière Schottky ( $\phi_b = 1$  eV).



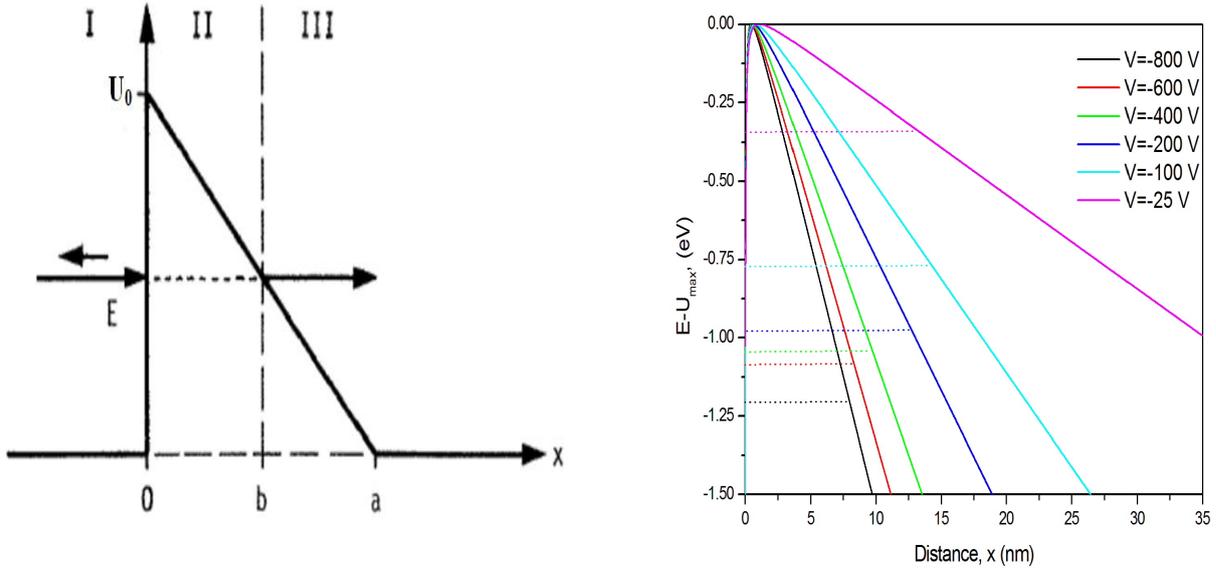
**Figure III.13** – Evolution de la densité de courant en fonction du choix de l'énergie minimale ( $E_{mins}$ ), pour différentes valeurs de la tension  $V$ ,  $\phi_b = 1$  eV.

#### 2.4.4 Validité de la méthode WKB pour une barrière de la diode Schottky

La solution de l'équation de Schrödinger concernant le profil de la barrière Schottky est inconnue jusqu'à présent. Des méthodes d'approximation ont été utilisées pour la détermination du coefficient de transmission telles que TMM, MAF et WKB, cette dernière est beaucoup plus utilisée à cause de sa simple formulation. D'autre part, cette méthode est applicable si le profil de la barrière varie lentement avec la distance  $x$ . Ghatak [120] a testé cette méthode ainsi que la méthode MAF sur un profil triangulaire (Fig III.14a) et a comparé les coefficients de transmission calculés par ces méthodes ( $T_{WKB}$ ,  $T_{MAF}$ ) et celui du coefficient de transmission exacte ( $T_e$ ). Il a conclu que les deux approches WKB et MAF sont applicables pour le calcul de coefficient de transmission si le critère  $g \geq 10$ , sachant que  $g$  est donné par :

$$g = \left( \frac{2m}{\hbar^2 \alpha^2} \right)^{\frac{1}{3}} U_0 \quad (\text{III.53})$$

Où  $m$  : la masse de la particule,  $\alpha$  et  $U_0$  sont la pente et la valeur maximale du profil de potentiel respectivement.



**Figure III.14** – (a) profil d'une barrière de potentiel triangulaire, (b) profil de la barrière Schottky au-dessous de l'énergie maximale  $U_{max}$  de quelques eV en fonction de la distance  $x$  pour différentes tensions  $V$ .  $\phi_b = 1$  eV. L'approximation triangulaire est acceptable.

La variation de l'énergie potentiel du profil triangulaire est définie par :

$$U(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ U_0 - \alpha x & 0 < x < a \\ 0 & x > a \end{cases} \quad (\text{III.54})$$

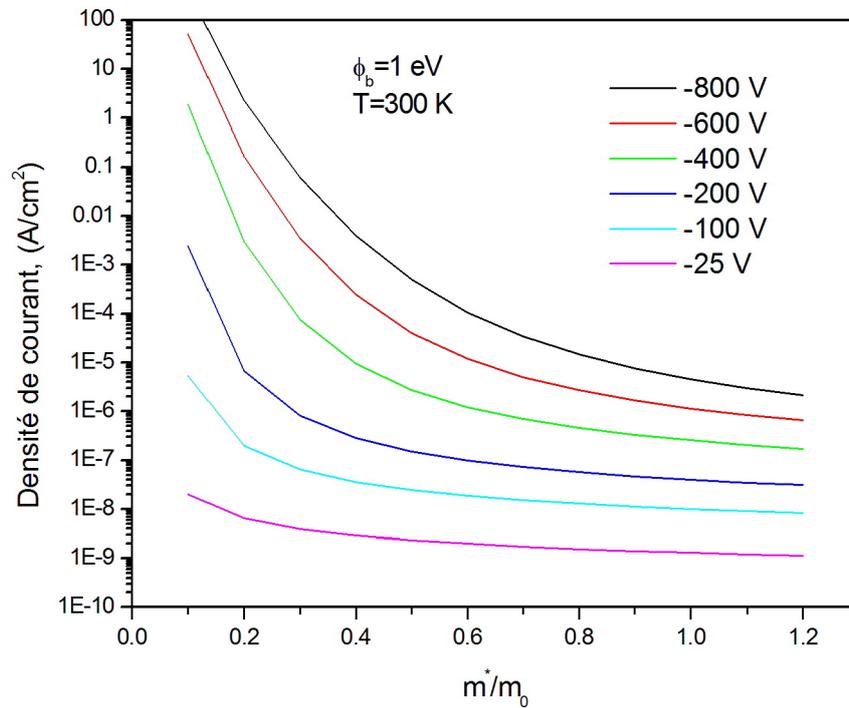
Dans le cas du profil de la barrière de la diode Schottky on peut le considérer comme un profil triangulaire notamment dans la région où l'effet tunnel se produit (Fig III.14b).

tension (V)	-25	-100	-200	-400	-600	-800
$U_0 \equiv U_{min s}$ (eV)	0.330	0.766	0.984	1.042	1.081	1.201
$\alpha$ (eV/nm)	0.0300	0.0597	0.0843	0.1194	0.1465	0.1694
$g$	10.157	14.902	15.210	12.771	11.560	11.658

**Tableau III.1** – Quelques valeurs de : l'énergie minimale ( $E_{mins}$ ) du profil de potentiel, la pente( $\alpha$ ) et le critère ( $g$ ) à différentes valeurs de tension,  $\phi_b = 1$  eV.

Du tableau III.1 on remarque que le critère ( $g$ ) varie de 10.157 à  $V=-25$  V à 11.658 à  $V= -800$  V qui sont grands que 10. Comme conclusion et en basant sur nos calculs et le travail de Ghatak, on peut conclure que les méthodes WKB, WKBJ, et la méthode MAF sont des méthodes applicables dans le cas de la barrière Schottky. Puisque les deux méthodes WKBJ et MAF donnent des valeurs confondues pour le coefficient de transmission. On adopte l'une des deux pour le calcul des coefficients de transmission dans le reste de nos calculs.

## 2.4.5 Effet de la masse effective



**Figure III.15** – Variation de la densité de courant en fonction de la masse effective avec différentes valeurs de polarisation inverse,  $\phi_b = 1 \text{ eV}$ .

La figure III.15 montre que la densité de courant est très sensible à la variation de la masse effective et en particulier à basses valeurs de la masse effective et à hautes tensions de polarisation inverse. Lorsque, la masse effective augmente la densité de courant diminue à cause de la diminution du coefficient de transmission. Ce résultat est en contradiction avec celui de Furno [31], qui a trouvé le contraire (la densité de courant augmente lorsque la masse effective augmente). On explique ça par la méthode utilisée par Furno (Matrices de transfert). On note ici que Crowell et Sze [121] ont trouvé la même évolution que nous dans le cas de polarisation directe de la diode Schottky. Dans nos calculs nous avons utilisé la valeur de la masse effective  $m^* = 0.2 m_0$  [12, 102, 122].

### 2.4.6 Contribution au courant tunnel en fonction de l'énergie

Dans ce paragraphe nous allons voir comment l'énergie des particules traversant la barrière Shottky contribuent à la valeur du courant total. La densité de courant  $J$  est égale à la somme des courants élémentaire  $J_i(E_i)$ . Selon la méthode des Trapèzes l'intégrale de l'équation (III.52) peut se mettre selon la formule suivante :

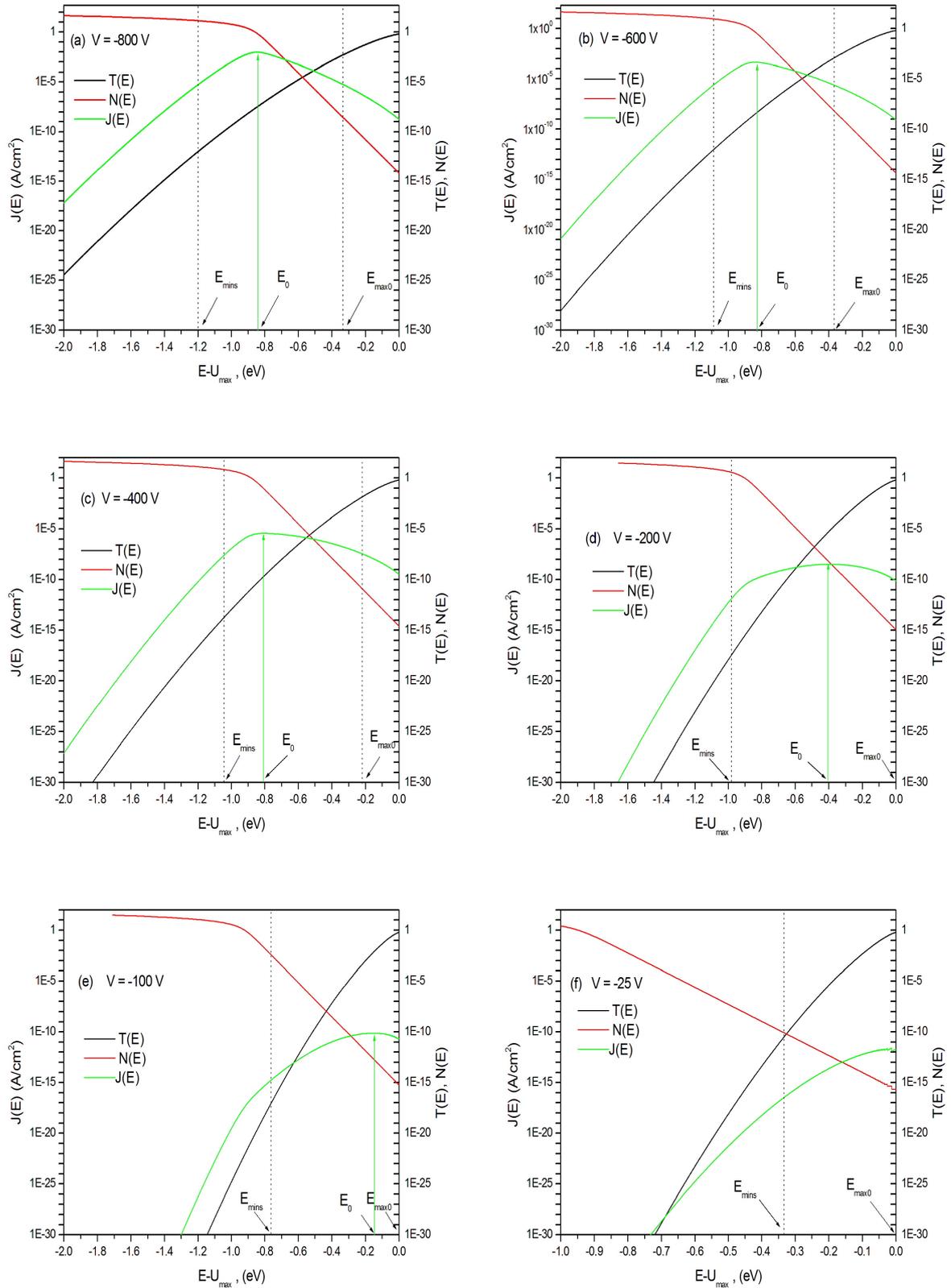
$$J \approx \left( \frac{U_{\max} - E_{\min}}{Nb} \right) \left( (J(E_{\min}) + J(E_{\max}))/2 + \sum_{i=1}^{Nb-1} J_i(E_i) \right) \quad (\text{III.55})$$

Avec

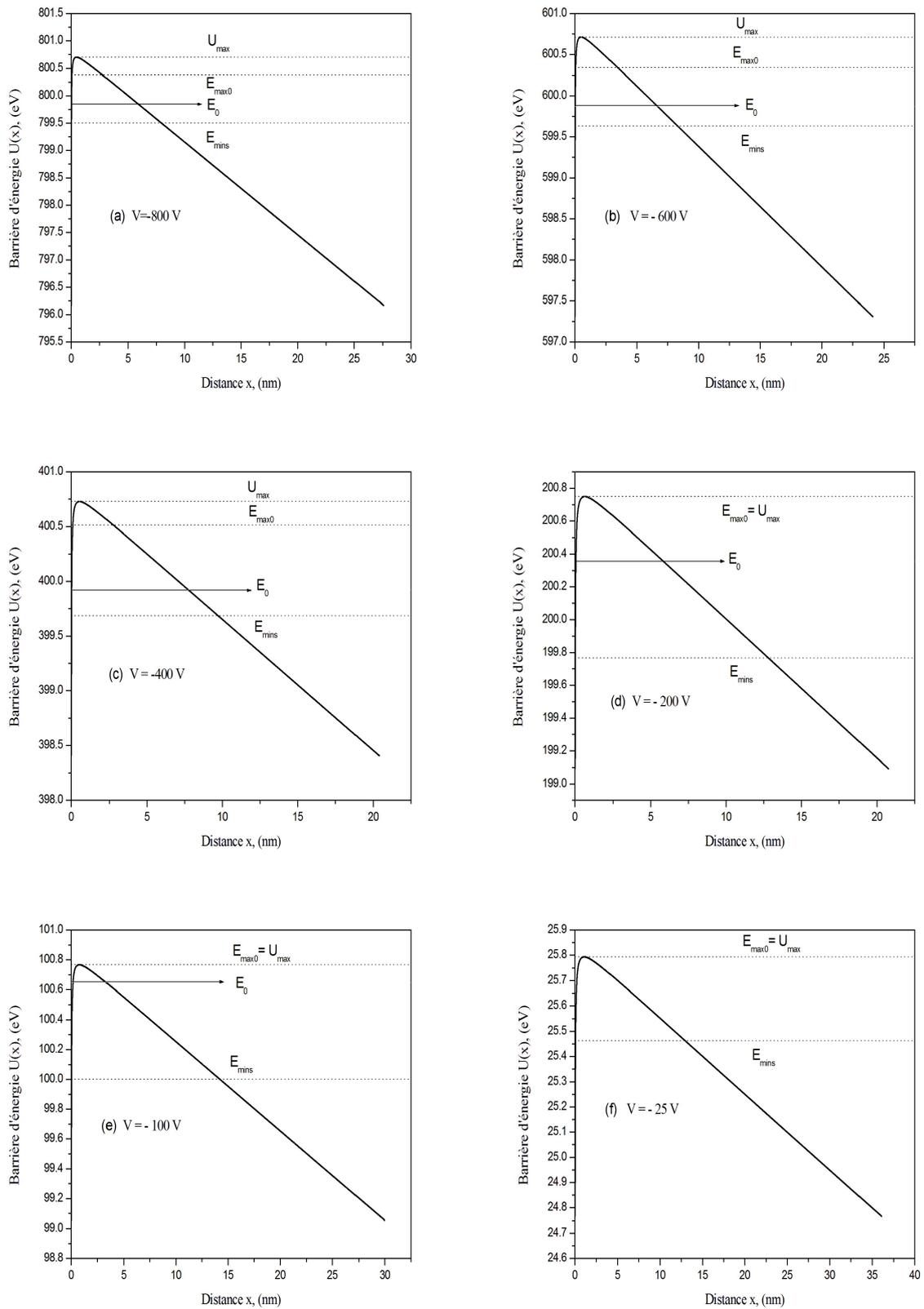
$$J_i(E_i) = \frac{A^*T}{k_B} T(E_i)N(E_i) \quad (\text{III.56})$$

$Nb$  est le nombre des intervalles élémentaires.

La figure III.16 représente la variation de coefficient de transmission  $T(E)$ , la fonction de distribution  $N(E)$  et la densité de courant  $J(E)$  en fonction de l'énergie pour différentes valeurs de tension  $V$ . De ces tracés on constate que la densité de courant  $J_i(E_i)$  augmente jusqu'à atteindre une valeur maximale  $J_{\max}(E_0)$  puis elle diminue en se rapprochant de la valeur maximale de la barrière Schottky  $U_{\max}$ . L'apparition d'une valeur maximale de la densité de courant en fonction de l'énergie est due à la multiplication de deux fonctions l'une augmente  $T(E)$  et l'autre diminue  $N(E)$  en fonction de l'énergie. La valeur  $E_0$  qui correspond à la contribution maximale varie avec la tension  $V$ ; elle s'approche de l'énergie  $U_{\max}$  à basses tensions de polarisation. Cette contribution maximale disparaît dans le domaine d'énergies qui correspond à l'effet tunnel ( $E < U_{\max}$ ), aux basses tensions, mais elle apparaît dans le domaine de l'effet thermoïonique ( $E > U_{\max}$ ) qui sera l'effet prépondérant dans le mécanisme de transport. On remarque aussi que la contribution des énergies n'est pas symétrique par rapport à  $E_0$ . Comme nous avons vu précédemment qu'au dessous de certaines énergies  $E_{\min}$  les densités de courant élémentaires qui correspondent aux énergies inférieures à  $E_{\min}$  ne seront pas prises en considération. Ce raisonnement nous conduit à négliger aussi les densités de courant qui ont les mêmes ordres de grandeur existante dans l'autre coté (au voisinage de  $U_{\max}$ ). Donc l'intervalle  $[E_{\min}, E_{\max}]$  délimité par les deux traits pointillés verticaux dans les figures représente environ 99.90 % de la contribution de la densité de courant total (pour les grandes tensions de polarisation). On note également que la fonction de distribution  $N(E)$  diminue en fonction de l'énergie  $E$  et augmente légèrement en fonction de la tension  $V$ . Comme conclusion, on peut conclure que l'hypothèse de Padovani d'existence d'une énergie maximale ( $E_m$ ) au-dessous de  $U_{\max}$  pour laquelle la transmission est maximale est non valable à basses tensions de polarisation et la contribution des énergies autour de  $E_m$  n'est pas symétrique.

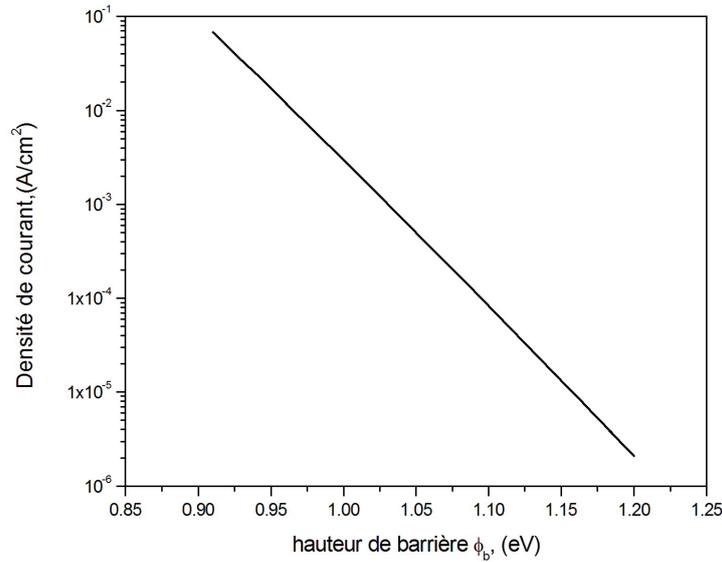


**Figure III.16** – Variation de la densité de courant  $J(E)$ , le coefficient de transmission  $T(E)$  et la fonction  $N(E)$  en fonction de l'énergie pour différentes valeurs de tension  $V$ ,  $\phi_b = 1$  eV,  $T = 300$  K.



**Figure III.17** – Profil de la barrière Schottky montrant l'intervalle d'énergie  $[E_{mins}, E_{max}]$  contribuant à de 99.99% au courant total et l'intervalle d'énergie  $[E_{mins}, E_{max0}]$  contribuant à de 99.90% au courant total pour différentes valeurs de tension  $V$ ,  $\phi_b = 1$  eV.

### 2.4.7 Effet de la hauteur de barrière



**Figure III.18** – Variation de la densité de courant en fonction de la hauteur de barrière,  $V = -400$  V,  $\phi_b = 1eV$ .

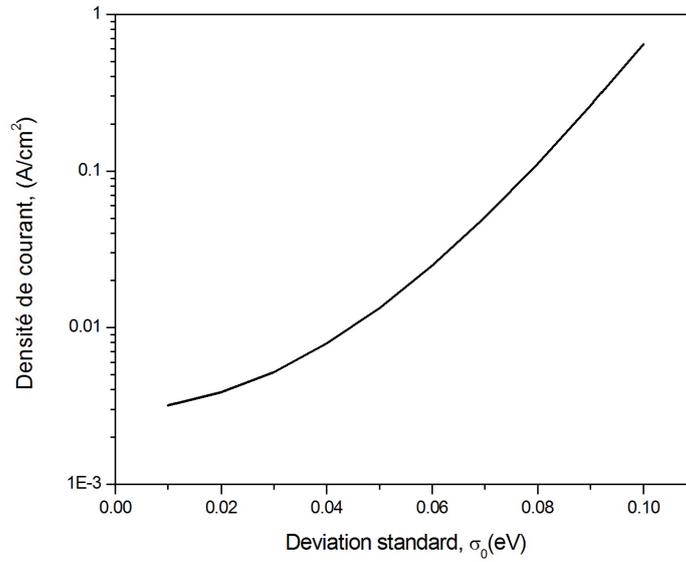
La figure III.18 représente la variation de la densité de courant en fonction de la hauteur de barrière Schottky. De cette courbe on remarque une diminution de la densité de courant lorsque la barrière de potentiel augmente, parce que le coefficient de transmission diminue à cause de l'élargissement du profil de potentiel quand la barrière de potentiel augmente.

### 2.4.8 Effet de la déviation standard

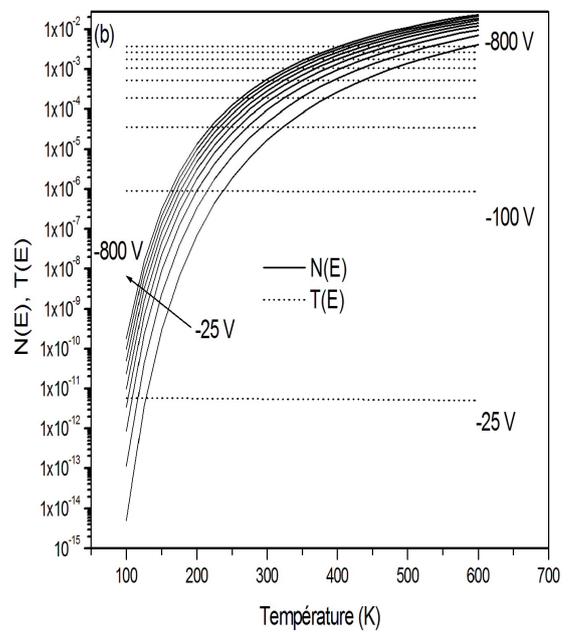
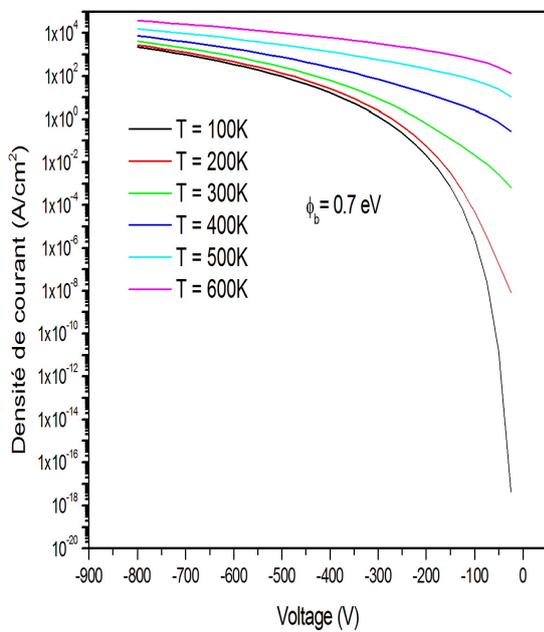
De la figure III.19 on remarque que lorsque la déviation standard augmente, la densité de courant augmente. Quand la déviation standard est plus importante cela signifie que la densité des barrières faibles est prépondérante par rapport à la densité des hautes barrières de potentiel (proche de la barrière moyenne). Donc le courant tunnel préfère de pénétrer à travers les barrières faibles [34].

### 2.4.9 Effet de la température

La figure III.20a montre que lorsque la température augmente la densité de courant augmente aussi, cette augmentation est due à l'augmentation du nombre des électrons excités. La fonction  $N(E)$  détermine l'augmentation des électrons en fonction de l'augmentation de la température (Fig III.20b). Cependant le coefficient de transmission reste pratiquement inchangé en variant la température.



**Figure III.19** – Variation de la densité de courant en fonction de la déviation standard ( $\sigma_0$ ),  $V = -400$  V,  $\phi_{b0} = 1$  eV.

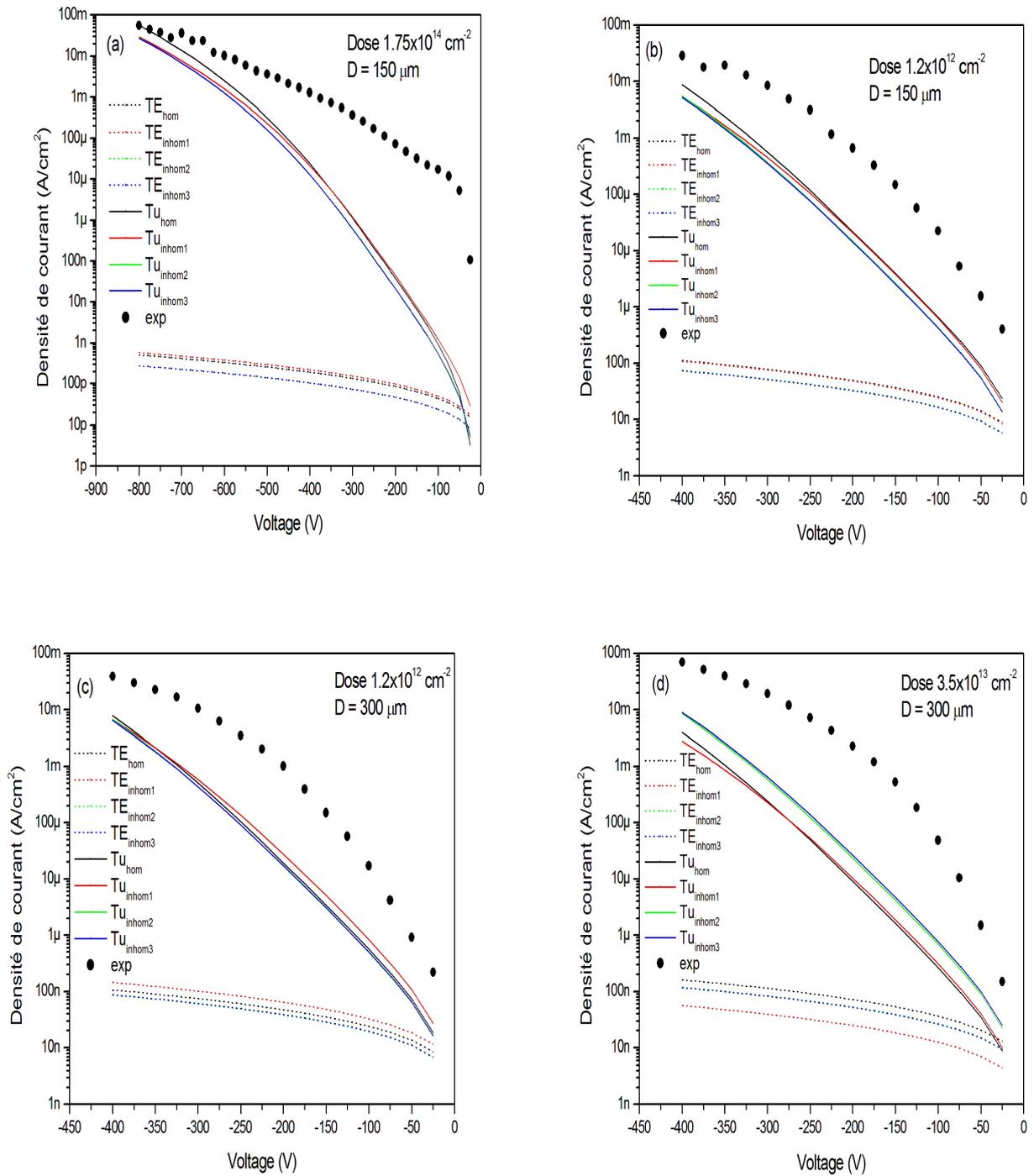


**Figure III.20** – (a) variation de la densité de courant en fonction de tension inverse pour différentes valeurs de température,  $\phi_b = 0.7$  eV (b) effet de la température sur la fonction  $N(E)$  et le coefficient de transmission pour différentes valeurs de tensions,  $\phi_b = 0.7$  eV,  $U_{max} - E = 0.35$  eV.

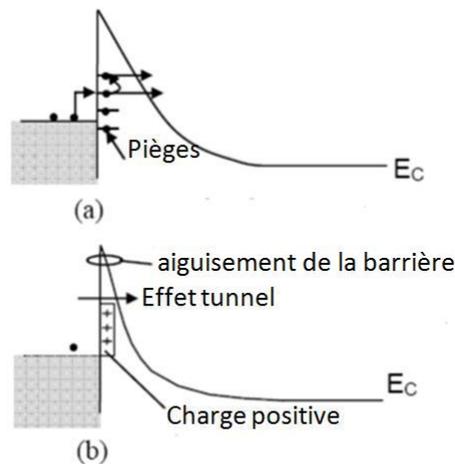
### 3 Application aux structures Mo/4H-SiC

Dans ce paragraphe on va comparer entre les densités de courant expérimentales mesurées à température ambiante pour différentes structures Mo/4H-SiC (C) (différentes doses et différents diamètres) et les densités de courant simulées soit par le courant thermoïonique (homogène et inhomogène) soit par le courant tunnel (homogène et inhomogène). Les paramètres utilisés dans les densités de courant simulées sont les paramètres que nous avons déjà extraits à partir des caractéristiques I-V en polarisation directe. Les courants simulés par les trois modèles inhomogènes (voir chapitre 1) ont des indices 1, 2 et 3 respectivement. De la figure III.21 on peut constater plusieurs remarques :

1. Les densités de courant simulées par le modèle thermoïonique sont très faibles, ce qui signifie que l'émission thermoïonique est négligeable devant l'effet tunnel pour les grandes tensions ( $> 25$  V).
2. Les densités de courant simulées par les trois modèles de l'inhomogénéité (émission thermoïonique ou tunnel) restent dans le même ordre de grandeur en comparaison avec celles obtenues par le modèle homogène (émission thermoïonique ou tunnel).
3. Les densités de courant (émission thermoïonique ou tunnel) simulées par les deux modèles inhomogènes 2 et 3 sont confondues.
4. Les densités de courant simulées par l'effet tunnel s'approchent légèrement des densités de courant mesurées notamment dans les grandes tensions. La divergence entre les valeurs expérimentales et les valeurs théoriques (tunnel) en polarisation inverse a été remarquée par plusieurs auteurs [123]-[125]. L'explication de cette divergence est inexplicable jusqu'à présent. Crofton [123] l'attribue à l'existence d'un grand champ électrique aux bords du contact. Oyama [124] dans son travail a proposé un modèle qui est basé sur l'existence d'une charge positive à l'interface (Fig III.22b). Cette charge positive diminue la largeur du profil de potentiel, donc la facilité de transition des charges. D'autres auteurs ; Miller [125], Caranno [126], ont proposé un autre modèle qui est basé sur l'effet tunnel assisté par des pièges comme la montre la figure III.22a.



**Figure III.21** – Comparaison entre les valeurs expérimentales de la densité de courant et celles simulées par le modèle thermoionique (homogène et inhomogène) et par effet tunnel (homogène et inhomogène) pour différentes structures Mo/4H-SiC (C),  $T = 300 \text{ K}$ .



**Figure III.22** – Modèles proposés pour augmenter le transport par effet tunnel. (a) tunnel assisté par les pièges, (b) aiguisement de la barrière à cause de l'existence d'une charge positive à l'interface de la diode Schottky [124].

## 4 Conclusion

On a fait une étude théorique et expérimentale du transport de courant à travers les barrières métal-semiconducteur (Mo/4H-SiC) pour donner une présentation quantitative généralisée. Le courant tunnel a été analysé en termes de coefficient de transmission quantique approchée par plusieurs méthodes telles que la méthode WKB, MAF et TMM. On a aussi incorporé dans la théorie les effets d'abaissement de la force image, la masse effective, la hauteur de barrière, la déviation standard et la température.

Une comparaison avec les résultats expérimentaux sur les diodes Mo/4H-SiC montre une divergence entre la théorie et l'expérience. L'inhomogénéité n'a pas un effet important sur le mécanisme de transport en polarisation inverse. L'émission thermoionique reste plus faible devant l'effet tunnel à hautes tensions de polarisation.

---

## CONCLUSION GÉNÉRALE

Dans le cadre de ce travail, nous avons apporté une contribution à l'étude de l'inhomogénéité dans la structure métal/semiconducteur suivant le modèle de Werner, et nous avons étudié comme application la structure Schottky Mo/4H-SiC. L'étude est faite par deux méthodes : en premier temps, nous avons utilisé la méthode standard suivie par la plupart des chercheurs qui est basée sur l'extraction des paramètres homogènes ( $\phi_{b0}$ ,  $n$ ,  $R_s$ ), en particulier la barrière de potentiel à partir des mesures I-V puis on la modélise suivant le modèle inhomogène proposé par Werner, c'est-à-dire extraire la barrière moyenne ( $\bar{\phi}_{b0}$ ) et la déviation standard ( $\sigma_0$ ). Cette méthode nous permet de déduire la valeur de la constante de Richardson qui est en accord avec celle donnée par la théorie ( $146 \text{ A/K}^2 \text{ cm}^2$ ). Cependant, cette méthode suppose que la barrière moyenne ( $\bar{\phi}_{b0}$ ) et la déviation standard ( $\sigma_0$ ) sont constantes en fonction de la température, ce qui n'est pas vraie. Prenons les valeurs de ( $\bar{\phi}_{b0}$ ) et ( $\sigma_0$ ) on trouve des anomalies, tels que le croisement des caractéristiques I-V dans la partie linéaire, et l'augmentation de courant à basses températures. Chand explique ces anomalies par les bornes de l'intégrale, comme nous avons présenté au deuxième chapitre, cette explication présente des limites, parce que l'origine de ces anomalies réside dans la fonction de l'intégrale qui est à la fois déplacée vers les barrières de potentiel négatives et plus prononcé aux valeurs élevées de la déviation standard. En second temps, nous avons extrait directement la barrière moyenne ( $\bar{\phi}_{b0}$ ) et la déviation standard ( $\sigma_0$ ) à partir d'un modèle inhomogène général proposé par Osvald, où on introduit l'effet de la résistance série qui est composé par deux résistances (l'une associée à chaque diode élémentaire,  $r = R_p A$ , et l'autre commune,  $R_c$ ). Dans ce cadre nous avons développé une méthode d'extraction des quatre paramètres inhomogènes ( $\bar{\phi}_{b0}$ ,  $\sigma_0$ ,  $R_p$ ,  $R_c$ ) basée sur la méthode des moindres carrés. Comme nous l'avons vu, les courbes expérimentales de I-V coïncident avec celles simulées, néanmoins, cette coïncidence n'est pas parfaite, elle est peut-être due à la supposition de l'homogénéité de la résistance série associée à chaque diode élémentaire. L'étude de simulation

basée sur cette méthode montre que la déviation du facteur d'idéalité de la valeur 1 est due principalement à la résistance ( $R_p$ ) et à la déviation standard ( $\sigma_0$ ) qui présentent l'inhomogénéité réellement existante dans les diodes réelles. Notre application est faite sur la structure Mo/4H-SiC dans la gamme de température (303 K-498 K) pour différents diamètres de contact Schottky et différentes doses de l'implantation ionique du carbone et de l'aluminium incorporés dans l'anneau de garde. L'étude a donné les principaux résultats suivants :

1. Le facteur d'idéalité ( $n$ ) décroît puis augmente en augmentant la température, les valeurs de ( $n$ ) restent plus faibles ; varient de 1.025 à 1.06 pour les structures implantées par le carbone et de 1.05 à 1.25 pour la structure implantée par l'aluminium, ce qui signifie que le mécanisme prépondérant en polarisation directe dans nos structures est l'effet thermoionique. Le facteur d'idéalité diminue lorsque la dose de l'implantation est plus élevée ce qui signifie que l'effet de bord est l'un des paramètres influant sur le facteur d'idéalité.
2. La hauteur de barrière de potentiel ( $\phi_b$ ) augmente avec l'augmentation de la température et augmente aussi lorsque la dose de l'implantation ionique augmente. Cette augmentation de la hauteur de barrière est la traduction de la diminution du courant direct.
3. La variation du facteur d'idéalité et la hauteur de barrière de potentiel avec la température n'ont pas une explication dans le cadre du modèle homogène (le modèle homogène ne donne pas l'évolution des deux paramètres en fonction de la température).
4. L'application de la méthode standard du modèle inhomogène de Werner donne des valeurs constantes en fonction de la température de la barrière moyenne ( $\bar{\phi}_{b0}$ ) et la déviation standard ( $\sigma_0$ ). Concernant la barrière moyenne, elle augmente avec l'augmentation de la dose de l'implantation ionique dans la plupart des échantillons. Elle varie de 1.07 eV à 1.23 eV pour les échantillons implantés par le carbone. En ce qui concerne la déviation standard, elle présente une diminution dans la plupart des échantillons elle varie de 0.067 eV à 0.08 eV. Cette méthode nous permet de déduire une valeur expérimentale de la constante de Richardson proche de celle donnée par la théorie ( $146 A/K^2 cm^2$ ).
5. L'application de la deuxième méthode montre que la barrière moyenne et la déviation standard évoluent avec la variation de la température. Les deux paramètres augmentent linéairement avec l'augmentation de la température.
6. La résistance série  $R_s$  extraite du contact homogène augmente en augmentant la température. Cette résistance est équivalente à la somme de deux résistances séries dans le modèle inhomogène ;  $R_p$  et  $R_c$ . Nos résultats montrent que la résistance  $R_c$  augmente en fonction de la température et  $R_p$  diminue légèrement en augmentant

la température. Cependant, la somme de ces résistance reste inférieure à la résistance  $R_s$ . l'augmentation de la résistance  $R_c$  est expliquée par la diminution de la mobilité des électrons dans la coche épitaxiale et dans le substrat.

7. Les paramètres (homogènes où inhomogènes) que nous avons extraits varient légèrement avec le diamètre de la diode Schottky, cette variation peut confirmer l'inhomogénéité de la barrière Schottky Mo/4H-SiC.

Notre deuxième objectif est l'étude du courant inverse (courant de fuite), le mécanisme prépondérant dans ce cas est l'effet tunnel, notamment à hautes tensions de polarisation. Ce courant est calculé selon la formule de Tsu et Esaki qui est basée sur la détermination du coefficient de transmission. La solution exacte de l'équation de Schrödinger à travers la barrière Schottky est inconnue jusqu'à présent ; dans notre travail nous avons utilisé trois approximations pour déterminer la transparence,  $T(E)$ , telles que WKB(WKBJ), MAF et TMM. Dans le cas de la barrière Schottky et en nous basant sur le travail de Ghatak nous avons montré que les méthodes WKB et MAF sont valables pour le calcul de la transparence des particules à travers la barrière Schottky. Introduisant l'effet de la force image l'étude de simulation a donné les résultats suivants :

1. Les coefficients de transmission calculés par les méthodes WKB, WKBJ et MAF sont confondues, en particulier les transparences calculées par les deux méthodes WKBJ et MAF.
2. Le courant tunnel augmente en fonction de la polarisation inverse, cette augmentation est attribuée à la diminution de la largeur du profil de potentiel, qui conduit à l'augmentation du coefficient de transmission.
3. Le courant tunnel augmente lorsque la masse effective diminue.
4. La contribution au courant tunnel en fonction de l'énergie montre qu'on peut atteindre la totalité du courant par la contribution de quelques électrons volts d'énergies situées au-dessous de la valeur maximale ( $U_{max}$ ) du profil de la barrière. En augmentant la tension de polarisation cet intervalle d'énergie s'éloigne plus de la valeur maximale  $U_{max}$  jusqu'à dépasser la hauteur de la barrière Schottky.
5. l'apparition d'une contribution maximale au courant à une énergie ( $E_0$ ) située au-dessous de l'énergie maximale ( $U_{max}$ ) pour les hautes tensions de polarisation, cette contribution est non symétrique par rapport à cette énergie ( $E_0$ ).
6. Le courant tunnel diminue lorsque la barrière de potentiel est augmentée parce que le coefficient de transmission diminue à cause de l'élargissement du profil de potentiel.
7. Le courant tunnel augmente quand la déviation standard augmente, cette augmentation est expliquée par le fait que le courant tunnel préfère de pénétrer à travers les barrières faibles.

8. Le courant tunnel augmente en fonction de la température parce que la densité des électrons augmente en augmentant la température.

La comparaison des courants inverses mesurés avec ceux simulés par les paramètres extraits des caractéristiques I-V en polarisation directe montre que l'effet tunnel est prépondérant en polarisation inverse et en particulier à hautes tensions de polarisation. Ce courant reste faible en le comparant avec le courant mesuré. L'explication de cette divergence est inconnue jusqu'à présent et l'inhomogénéité de la barrière n'a pas vraiment un rôle important sur le courant inverse observé dans les structures Mo/4H-SiC.

---

## BIBLIOGRAPHIE

- [1] Sze S. M and Kwok K. Ng, *Physics of Semiconductor Devices*, 3ème édition, Wiley, New Jersey, 2006.
- [2] Mott N. F, *Note on the Contact between a Metal and an Insulator or Semiconductor*, Proc. Cambr. Philos. Soc., vol. 34, p. 568, 1938.
- [3] Schottky W, *Halbleitertheorie der Sperrschicht*, Naturwissenschaften, vol. 26, p. 843, 1938.
- [4] Werner J.H et Guttler H.H, *Barrier inhomogeneities at Schottky contacts*, J. Appl. Phys., vol. 69, no. 3, pp. 1522-1533, 1991.
- [5] Palm H, Arbes M et Schultz M, *Fluctuations of the Au-Si(100) Schottky height*, Phys. Rev.lett., vol. 71, no. 14, pp. 2224-2228, 1993.
- [6] Bardeen J, *Surface States and Rectification at a Metal Semiconductor Contact*, Phys. Rev., vol. 71, no. 10, pp. 717-727, 1947.
- [7] Cowley A.M et Sze S.M, *Surface States and Barrier Height of Metal- Semiconductor Systems*, J. Appl. Phys., vol. 36, no. 10, p. 3212-3220, 1965.
- [8] Tsu R et Esaki L, *Tunneling in a finite superlattice*, Appl.phys.lett., vol. 22, no. 11, pp. 562-564, 1973.
- [9] Bonnaud O, *Physique des Solides, des Semiconducteurs et Dispositifs*, Université de Rennes, 2003.
- [10] Vellas N, *Etudes expérimentales de transistors de la filière nitrure de gallium pour des applications de puissance hyperfréquences*, thèse doctorat, Uni.Scién.Tech de Lille, 2003.
- [11] Defives D, Durand O et al, *Electrical behaviour and microstructural analysis of metal Schottky contacts on 4H-SiC*, Microelectronic Engineering, vol. 55, pp. 369-374, 2001.

- [12] Itoh A et Matsunami H, *Analysis of Schottky Barrier Heights of Metal/SiC Contacts and Its Possible Application to High-Voltage Rectifying Devices*, phys. stat. sol. (a), vol. 162, pp. 389-408, 1997.
- [13] Han S.Y and Lee J.L, *Interpretation of Fermi level pinning on 4H-SiC using synchrotron photoemission spectroscopy*, Appl. Phys. Lett., Vol. 84, No. 4, pp. 538-540, 2004.
- [14] Morrison D.J, Pidduck A.J, et al, *Surface preparation for Schottky metal 4H- SiC contacts formed on plasma-etched SiC*, Semicond. Sci. Technol, vol. 15, pp. 1107-1114, 2000.
- [15] Khemka V, Chow T.P, et Gutmann R.J, *Effect of Reactive Ion Etch- Induced Damage on the Performance of 4H-SiC Schottky Barrier Diodes*, Journal of Electronic Materials, vol. 27, no. 10, pp. 1128-1135, 1998.
- [16] Yakimova R, Hemmingsson C et al, *Barrier Height Determination for n-Type 4H-SiC Schottky Contacts Made Using Various Metals*, journal of electronique materials, vol. 27, no. 7, pp. 871-875,1998.
- [17] Bazin A. E, *Conception de diodes schottky sur 3C-SiC épitaxie sur silicium*, thèse de doctorat, Université François-Rabolais, 2009.
- [18] Rhoderick E. H, *Metal-semiconductor contacts*, IEE PROC, vol. 129, Pt. I, no. 1, pp. 1-14, 1982.
- [19] Bethe H.A, *Theory of the Boundary Layer of Crystal Rectifiers*, MIT Radiation. Laboratory. Report 43-12, 1942.
- [20] Wagner C, *Theory of current rectifiers*, Phys. Z, Vol. 32, pp. 641-645, 1931.
- [21] Schottky W and SPENKE E, *Quantitative treatment of the space-charge and boundary-layer theory of the crystal rectifier*, Wiss. Veroff. a.d.Siemens-Werken, vol. 18, pp. 225-229, 1939.
- [22] Crowell C.R et Sze S.M, *Current Transport in Metal-Semiconductor Barriers*, *Solid-State Electronics*, vol. 9, pp. 1035-1048, 1966.
- [23] Padovani F.A et Stratton R, *Field and Thermionic-Field Emission in Schottky Barriers*, *Solid-State Electronics*, vol. 9, pp. 695-707, 1966.
- [24] Crofton J, Porter L. M , et Williams J. R, *The Physics of Ohmic Contacts to SiC*, phys. stat. sol. (b), vol. 202 , pp. 581-603, 1997.
- [25] Yu, A.Y.C, et Snow, E.H, *Minority carrier injection of metalsilicon contacts*, *Solid-State Electron.*, vol.12, no. 3, pp. 155-160, 1969.
- [26] Bhuiyan A.S, *Contribution à l'étude des contacts metal-arséniure de gallium*, thèse de 3<sup>ème</sup> cycle, Université Paul Sabatier de Toulouse, 1979.

- [27] Sharfetter , D.L, *Minority Carrier Injection and Charge Storage in epitaxial Schottky Barrier diodes*, Solid-State Electronics, vol. 8, no. 3, pp. 299-311, 1965.
- [28] Schoen K.J, Jerry M. Woodall J.M, *Design Considerations and Experimental Analysis of High-Voltage SiC Schottky Barrier Rectifiers*, IEEE Transactions on electron devices, vol. 45, no. 7, pp. 1595-1604, 1998.
- [29] Jang M, and Lee J, *Analysis of Schottky Barrier Height in Small Contacts Using a Thermionic-Field Emission Model*, ETRI Journal, vol. 24, no. 6, pp. 455-461, 2002.
- [30] Wen S.Q, Ming Z.Y et al, *Analytical model for reverse characteristics of 4H SiC merged PN Schottky (MPS) diodes*, Chinese Physics B, vol. 18, no. 12, pp. 5474-5478, 2009.
- [31] Furno M, Bonani F, Ghione G, *Transfer matrix method modelling of inhomogeneous Schottky barrier diodes on silicon carbide*, Solid-State Electronics, vol. 51, pp. 466-474, 2007.
- [32] Chang C. Y, SZE S. M, *Carrier transport across metal semiconductor barriers. Solid-State Electronics*, Pergamon Press., vol. 13, pp. 727-740, 1970.
- [33] Rhoderick E.H, Williams R.H, *Metal-semiconductor contacts*, Oxford University Press, Oxford, 1988.
- [34] Zheng L, Joshi RP, Fazi C, *Effects of barrier height fluctuations and electron tunneling on the reverse characteristics of 6H-SiC Schottky contacts*, J. Appl. Phys., vol. 85, no. 7, pp. 3701-3707, 1999.
- [35] Eriksson J, Rorsman N, Zirath H, *4H-Silicon Carbide Schottky Barrier Diodes for Microwave Applications*, IEEE Transactions on microwave theory and Techniques, vol. 51, no. 3, pp. 797-804, 2003.
- [36] Gildenblat G , *Compact Modeling : Principles, Techniques and applications*, Dordrecht : Springer, 2010.
- [37] Boudville W. J, et McGill, *Ohmic contacts to n-type GaAs*, J. Vac. Sci. Technol. B, vol. 3, no. 4, pp. 1192-1196, 1985.
- [38] Vanalme G.M, Van Meirhaeghe R.L et al, *A ballistic electron emission microscopy (BEEM) study of the barrier height change of Au/n-GaAs Schottky barriers due to reactive ion etching*, Semicond. Sci. Technol., vol.12, pp. 907- 912. 1997.
- [39] Detavernier C, Van Meirhaeghe R.L et al, *Ballistic electron emission microscopy study of barrier height inhomogeneities introduced in Au/n-Si Schottky contacts by a HF pretreatment*, J. Appl. Phys., vol. 84, no. 6, pp. 3226- 3231, 1998.
- [40] Im H.J, Kaczer B, *Ballistic electron emission microscopy study of Schottky contacts on 6H- and 4H-SiC*, Appl. Phys. Lett., vol. 72, no. 7, pp. 839-841, 1998.

- [41] Vanalme G.M, Goubert L et al, *A ballistic electron emission microscopy study of barrier height inhomogeneities introduced in Au/III-V semiconductor Schottky barrier contacts by chemical pretreatments*, *Semicond. Sci. Technol.*, vol.14, pp. 871-877, 1999.
- [42] Zhu S, Van Meirhaeghe R.L et al, *Barrier height inhomogeneities of epitaxial CoSi<sub>2</sub> Schottky contacts on n-Si (100) and (111)*, *Solid-State Electronics*, vol. 44, pp. 663-671, 2000.
- [43] Osvald J, *Influence of lateral current spreading on the apparent barrier parameters of inhomogeneous Schottky diodes*, *J. Appl. Phys.*, vol. 99, no. 3, pp. 033708.1-5, 2006.
- [44] Shur M, Rumyantsev S, Levinshstein M, *SiC Materials and Devices* , volume 1, Singapore : WorldScientific, 2006.
- [45] Baliga J, *Silicon Carbide Power Devices*, Singapore : World Scientific, 2005.
- [46] Skromme B J, Luckowski E, et al, *Electrical Characteristics of Schottky Barriers on 4H-SiC : The Effects of Barrier Height Nonuniformity*, *J. Electron.Mater.*, vol. 29, no. 3, pp. 376-383, 2000.
- [47] Weiss R, Frey L et Ryssel H, *Tungsten, nickel, and molybdenum Schottky diodes with different edge termination*, *Appl. Surf. Sci.*, vol. 184, pp. 413-418, 2001.
- [48] Roccaforte F, La Via F, et al, *Richardson's constant in inhomogeneous silicon carbide Schottky contacts*, *J. Appl. Phys.* 93 9137-9144, 2003.
- [49] Pérez R, Mestres N, et al, *Barrier inhomogeneities and electrical characteristics of Ni/Ti bilayer Schottky contacts on 4H-SiC after high temperature treatments*, *Phys. Status Solidi a*, vol. 202, no. 4, pp. 692-697, 2005.
- [50] Pirri C. F, Ferrero S, et al, *Intrinsic 4H-SiC parameters study by temperature behaviour analysis of Schottky diodes*, *Microelectron.Eng.*, vol. 83, pp. 86-88, 2006.
- [51] Rodriguez R. P, *Planar edge terminations and related manufacturing process technology for high power 4H-SiC diodes*, thèse doctorat, Univ. Autonoma.Barcelona, 2005.
- [52] Vang H, *Optimisation des étapes technologiques pour la fabrication de composants de puissance en carbure de silicium*, Thèse doctorat , Lyon, 2006.
- [53] Blnaqué S, *Optimisation de l'implantation ionique et du recuit thermique pour SiC*, thèse doctorat, Univ. Autonoma.Barcelona, 2004.
- [54] Baffou G, *Luminescence induite par microscopie à effet tunnel et étude des propriétés électroniques, chimiques et optiques de la surface de carbure de silicium 6H-SiC(0001)3x3*, Thèse doctorat , Université Paris XI, 2007.

- [55] Camassel J, Contreras S et Robert J.L, *Matériaux semi-conducteurs à grand gap : SiC*, Techniques de l'Ingénieur, traité Electronique, E1990, France, pp.1-15, 1998.
- [56] Lely J. A, *Darstellung Von Einkristallen Von Siliciumcarbid und Beherrschung Von Art und Menge der Eingebauten Verunreinigungen*, Bericht. Detuschen Keram. Ges, vol. 32, p. 229-236, 1955.
- [57] Tairov Y.M et Tsvetkov V.F, *Investigations of growth processes of ingots of silicon carbide single crystal* J. Crystal Growth, vol. 43, no. 2, pp. 209-212, 1978.
- [58] Kuroda N, Shibahara K et al, *Step-controlled VPE growth of SiC single crystals at low temperature*, 19<sup>th</sup> Conference on Solid State Devices and Materials, Bus. Center Acad. Soc. Tokyo, pp. 227-230, 1987.
- [59] Lefevre J, *Etude des effets d'irradiation dans le polytype cubique du carbure de silicium par les techniques spectroscopiques de photoluminescence et de resonance paramagnétique électronique*, thèse doctorat, Ecole Polytechnique, Palaiseau, 2008.
- [60] Mathieu H et Fanet H, *physique des semiconducteurs et des composants électroniques*, 6<sup>e</sup> édition, Dunod, Paris, 2009
- [61] Gourbeyre C, *Caractérisation et modélisation de couche minces de 3C-SiC pour applications aux microsystemes en environnements sévères*, thèse de doctorat, Inst.nation.scien.appli.lyon, 2000.
- [62] Colder H, *Croissance basse température de films minces de carbure de silicium nanocristallisé : propriétés et performances d'hétérojonctions SiC/Si*, Thèse doctorat, Université de Caen, 2002.
- [63] Lambrecht W. R. L, *Limpijumngong S et al , Electronic Band Structure of SiC Polytypes : A discussion of Theory and Experiment*, Phys. Stat. Sol.(B), vol. 202 , pp. 5-33, 1997.
- [64] Takahashi K, Yoshikawa A and Sandhu A (Eds.), *Wide Bandgap Semiconductors "Fundamental Properties and Modern Photonic and Electronic Devices"*, Japan Society for the Promotion of Science, 2007.
- [65] Agarwal A.K, Seshadri S et al, *Status of SiC power devices at Northrop Grumman, Diamond and Related Materials*, vol. 8, pp. 295-301, 1999.
- [66] Lazar M.B, *Etude du dopage par implantation ionique d'aluminium dans le carbure de silicium pour réalisation de composants de puissance*, thèse de doctorat, Inst.nation.scien.appli.lyon, 2002.
- [67] Chow T.P et al, *SiC and GaN bipolar power devices*, Solid-State Electronics, vol. 44, pp. 277-301, 2000.
- [68] Elford A, Mawby P.A. *The numerical modelling of silicon carbide high power semiconductor devices*, Microelectronics Journal, vol. 30, pp. 527-534, 1999.

- [69] Nallet F, *Conception, Réalisation et caractérisation d'un composant limiteur de courant en carbure de silicium*, Thèse doctorat, Inst.Natio.Scie.appli.lyon, 2001.
- [70] Aydin M.E, Nezir Yildirim N et Turu A, *Temperature-dependent behavior of Ni/4H-nSiC Schottky contacts*, J. Appl. Phys., vol. 102, 043701, pp. 1-7, 2007.
- [71] Bluet J. M, Ziane D, et al, *Barrier height homogeneity for 4.5 kV 4H-SiC Schottky diodes*, Superlatt. Microstruct, vol. 40, pp. 399-404, 2006.
- [72] Toumi S, Ferhat-Hamida et al, *Gaussian distribution of inhomogeneous barrier height in tungsten/4H-SiC (000-1) Schottky diodes*, Microelectronic Engineering, vol.86, pp.303-309, 2009.
- [73] Chand S, *An accurate approach for analysing an inhomogeneous Schottky diode with a Gaussian distribution of barrier heights*, Semicond. Sci. Technol., vol. 17, pp. L36-L40, 2002.
- [74] Chand S et Kumar J, *Effects of barrier height distribution on the behavior of a Schottky diode*, J. Appl. Phys., vol. 82 , no. 10, pp. 5005-5010, 1997.
- [75] Chand S et Bala S, *A comparative study of numerical and analytical methods of simulating inhomogeneous Schottky diode characteristics*, Semicond. Sci. Technol., vol. 20, pp. 1143-1148, 2005.
- [76] ] Chand S et Bala S, *Analysis of current-voltage characteristics of inhomogeneous Schottky diodes at low temperatures*, Applied Surface Science, vol. 252 , pp. 358-363, 2005.
- [77] Chand S, *On the intersecting behaviour of current-voltage characteristics of inhomogeneous Schottky diodes at low temperatures*, Semicond. Sci. Technol., vol. 19, pp. 28-86, 2004.
- [78] Chand S, *Theoretical evidence for random variation of series resistance of elementary diodes in inhomogeneous Schottky contacts*, Physica B, vol. 373, pp. 284-290, 2006.
- [79] Malaoui A et Elmansouri A, *Deux nouvelles méthodes complémentaires pour l'extraction optimale des paramètres électriques des jonctions*, Revue des Energies Renouvelables, vol. 13, no. 2, pp. 199-212, 2010.
- [80] Ferhat-Hamida A, *Modélisation des phénomènes de transport et étude du rendement dans les structures Métal/Isolant/Semiconducteur*, thèse de doctorat, université de Sétif, 2006.
- [81] Osvald J et Dobrock E, *Generalized approach to the parameter extraction from I-V characteristics of Schottky diodes*, Semicond. Sci. Technol., vol. 11, pp. 1198-1202, 1996.
- [82] Saxena V, Su J. N et Steckl A. J, *High-Voltage Ni- and Pt-SiC Schottky Diodes Utilizing Metal Field Plate Termination*, IEEE Trans. Electron Devices, vol. 46, no. 3, pp. 456-463, 1999.

- [83] Giannazzo F, Roccaforte F et Raineri V, *Acceptor, compensation, and mobility profiles in multiple Al implanted 4H-SiC*, Appl. Phys.Lett. 91, 202104, pp.1-3, 2007.
- [84] Vassilevski K, Nikitina I et al, *High temperature operation of silicon carbide Schottky diodes with recoverable avalanche breakdown*, Mater. Scie. Forum Vols. 527-529, pp. 931-934, 2006.
- [85] Vassilevski K, Nikitina I et al, *High Voltage Silicon Carbide Schottky Diodes with Single Zone Junction Termination Extension*, Mater. Scie. Forum Vols. 556-557, pp. 873-876, 2007.
- [86] Alok D et Jayant Baliga B. J, *SiC Device Edge Termination Using Finite Area Argon Implantation*, IEEE Trans. Electron Devices, vol. 44, pp. 1013-1017, 1997.
- [87] Ivanov P. A, Grekhov I. V, et al, *Pulsed Breakdown of 4H-SiC Schottky Diodes Terminated with a Boron-Implanted p-n Junction*, SEMICONDUCTORS, vol. 42, No. 7, pp. 858-861, 2008.
- [88] Roccaforte F, Giannazzo F, et al, *Surface and interface issues in wide band gap semiconductor electronics*, Applied Surface Science, vol. 256, pp. 5727-5735, 2010.
- [89] Singh A, Reinhardt K.C et Anderson W.A, *Temperature dependence of the electrical characteristics of Yb/pInP tunnel metal insulator semiconductor junctions*, J. Appl. Phys., vol. 58, no. 7, pp. 3475-3483, 1990.
- [90] Raynaud C, Isoird K et al, *Barrier height determination of SiC Schottky diodes by capacitance and current-voltage measurements*, J. Appl. Phys., vol. 91, no. 12, pp. 9841-9847, 2002.
- [91] Vassilevski K.V, Nikitina I.P et al, *Device processing and characterisation of high temperature silicon carbide Schottky diodes*, Microelectronic Engineering, vol. 83, pp. 150-154, 2006.
- [92] Hudait M.K et Krupanidhi S.B, *Doping dependence of the barrier height and ideality factor of Au/n-GaAs Schottky diodes at low temperatures*, Physica B, vol. 307, pp.125-137, 2001.
- [93] Acar S, Karadeniz S et al, *Gaussian distribution of inhomogeneous barrier height in Ag/p-Si (1 0 0) Schottky barrier diodes*, Appl. Sur. Sci., vol. 233, pp. 373-381, 2004.
- [94] Nakamura T, Miyanagi T, et al, *A 4.15 kV 9.07-mΩcm<sup>2</sup> 4H-SiC Schottky-Barrier Diode Using Mo Contact Annealed at High Temperature*, IEEE Electron Device Lett., vol. 26, no. 2, pp. 99-101, 2005.
- [95] Shigiltchoff O, Bai S, et al, *Schottky Barriers for Pt, Mo and Ti on 6H and 4H SiC (0001), (000 $\bar{1}$ ), (1 $\bar{1}$ 00) and (1 $\bar{2}$ 10) Faces Measured by I-V, C-V and Internal Photoemission*, Mater. Scie. Forum Vols.433-436, pp. 705-708, 2003.

- [96] Perrone D, Naretto M, et al, *4H-SiC Schottky Barrier Diodes Using Mo-, Ti- and Ni-Based Contacts*, Mater. Sci. Forum Vols.615-617, pp. 647-650, 2009.
- [97] Khemka V, Chow T.P, Gutmann R.J, *Effect of Reactive Ion Etch- Induced Damage on the Performance of 4H-SiC Schottky Barrier Diodes*, 1128 Journal of Electronic Materials, vol. 27, no. 10, pp. 1128-1135, 1998.
- [98] Izzo G, Litrico G et al, *Electrical properties of high energy ion irradiated 4H-SiC Schottky diodes*, J. Appl. Phys., vol. 104, pp. 093711.1-5, 2008.
- [99] La Via F, Galvagno G, et al, *Drift mobility in 4H-SiC Schottky diodes*, Appl. Phys. Lett., vol. 87, no. 14, 142105.1-3, 2005.
- [100] Qing-Wen S, Zhang Yu-Ming Z et al, *Investigation of current transport parameters of Ti/4H SiC MPS diode with inhomogeneous barrier*, Chin. Phys. B vol. 20, no. 5 , pp. 057301.1-6, 2011.
- [101] Tarplee M, Madangarli V, et Sudarshan T.S, *Current-voltage characteristics of an integrated Schottky diode*, Solid-State Electronics, vol. 46, pp. 753-757, 2002.
- [102] Götz W, Schuner A et al, *Nitrogen donors in 4Hsilicon carbide*, J. Appl. Phys., vol. 73, no. 7, pp. 3332-3338, 1993.
- [103] Mickevicius R et Zhao J.H, *Monte Carlo study of electron transport in SiC*, J. Appl. Phys, vol. 83, no. 6, pp. 3136-3167, 1998.
- [104] Capano M.A, Cooper J.A, et al, *Ionization energies and electron mobilities in phosphorus-and nitrogenimplanted 4H-silicon carbide*, J. Appl. Phys., vol. 87, no. 12, pp. 8773-8777, 2000.
- [105] Mnatsakanov T.T, Levinshtein M.E, et al , *Carrier mobility model for simulation of SiC-based electronic devices*, Semicond. Sci. Technol., vol. 17, pp. 974-977, 2002.
- [106] Galvagno G, Roccaforte F, et al, *Temperature dependence of the c-axis drift mobility in 4H-SiC*, *Microelectronic Engineering*, vol. 83, pp.45-47, 2006.
- [107] Wentzel G, Z. Physik. 38, 518 (1926), Kramers H A, Z. Physik. 39, 828 (1926), and L. Brillouin L, Compt.Rend. 183, 24 (1926).
- [108] Ghatak A. K, Lokanathan S, *Quantum Mechanics : Theory and Applications*, 3<sup>rd</sup> ed. New Delhi, India : Macmillan India Ltd., 1984.
- [109] Langer R.E, *On the Asymptotic Solutions of Ordinary Differential Equations, with an application to the Bessel Functions of large order*, Trans. Am. Math. Soc., vol. 33, pp. 23-64, 1931.
- [110] Roy S, Ghatak I.C, et al, *Modified Airy Function Method for the Analysis of Tunnelling Problems in Optical Waveguides and Quantum-well Structures*, IEE Jour. of Quantum Electronics, vol. 29, no. 2, pp. 340-345,1993.

- [111] Zhang A, et al, *Tunnelling coefficients across an arbitrary potential barrier*, J. Phys. A : Math. Gen., vol. 33, pp. 5449-5456, 2000.
- [112] Abramowitz M and Stegun I. A, *Handbook of Matheniatica1 Functions*, New York : Dover, pp. 446-455, 1965.
- [113] Griffiths D.J , *Introduction to Quantum Mechanics*, Prentice Hall, Inc Upper Saddle River. NewJersey 07458, 1995.
- [114] Vatannia S, Gildenblat G, *Airy's function implementation of the transfer- matrix method for resonant tunneling in variably spaced finite superlattices*, IEEE J. Quantum Electron, vol. 32, no. 6, pp. 1093-1105, 1996.
- [115] Deniz C, Gerçeklioglu M, *A New Class of Exactly Solvable Potential for the MAF Method and its Solutions*, BPL, vol. 18, 181044, pp. 330-337, 2010.
- [116] Ando Y, Itoh T, *Calculation of transmission tunneling current across arbitrary potential barriers*, J. Appl. Phys., vol. 61, no. 4, pp. 1497-1502,1987.
- [117] Levi A. F. J, *Applied Quantum Mechanics*, Second Edition. Cambridge University Press. 2006.
- [118] Dimitriu C.B, Horsfall A.B et al, *Quantum modelling of I-V characteristics for 4H-SiC Schottky barrier diodes*, Semicond. Sci. Technol., vol. 20, pp. 10-15, 2005.
- [119] Gehring A, Selberherr S, *Modeling of tunneling current and gate dielectric reliability for nonvolatile memory devices*, IEEE Trans.Device and Mater. Reliab, vol. 4, no. 3, pp. 306-319, 2004.
- [120] Ghatak A.K, Sautery E.G, Goyalz I.C, *Validity of the JWKB formula for a triangular potential barrier*, Eur. J .Phys. vol. 18, pp. 199-204, 1997.
- [121] Crowell C.R, Sze S.M, *Quantum-Mechanical Reflection of Electrons at Metal- Semiconductor Barriers : Electron Transport in Semiconductor-Metal-Semiconductor Structures*, J.Appl.phys., vol.37, no.7, pp.2683-2689, 1966.
- [122] Roccaforte F, *Richardson's constant in inhomogeneous silicon carbide Schottky contacts*, J. Appl. Phys., vol. 93, no. 11, pp. 9137-9144, 2003.
- [123] Crofton J , Sriram S, *Reverse Leakage Current Calculations for SIC Schottky Contacts*, IEEE Transactions on Electron Devices, vol. 43, no. 12, pp. 2305-2307, 1996.
- [124] Oyama S, Hashizume T et Hasegawa H, *Mechanism of Current Leakage through Metal/n-GaN Interfaces*, Appl.Surf. Scie., vol. 190, pp. 322-325, 2002.
- [125] Miller E.J, Yu E.T et al, *Analysis of reverse-bias leakage current mechanisms in GaN grown by molecular-beam epitaxy*, Appl. Phys. Lett., vol. 84, no. 4, pp. 535-537, 2004.
- [126] Carrano J.C, Li T et al, *Current transport mechanisms in GaN-based metal-semiconductor-metal photodetectors*, Appl. Phys. Lett., vol. 72, no. 5, pp. 542-544, 1998.

---

---

## ANNEXE A

---

# MÉTHODE DES MOINDRES CARRÉES POUR L'EXTRACTION DES TROIS PARAMÈTRES D'UNE DIODE HOMOGENÈ

### Modèle du courant

$$I_s = AA^*T^2 \exp(-\beta\phi_b) \quad (\text{A.1})$$

$$I_s = AA^*T^2 \exp(-\beta\phi_b) \quad (\text{A.2})$$

Avec  $\beta = \frac{q}{k_B T}$

### Critère de Performance

$$S = \sum_{i=1}^N \left( \frac{I_i^{ex} - I_i^{th}}{I_i^{th}} \right)^2 \quad (\text{A.3})$$

### Gradient de S

$$F_k = \frac{\partial S}{\partial x_k} = \sum_{i=1}^N \left( \frac{I_i^{ex} - I_i^{th}}{I_i^{th}} \right) \frac{I_i^{ex}}{(I_i^{th})^2} \frac{\partial I_i^{th}}{\partial x_k} = 0 \quad (\text{A.4})$$

$$\left\{ \begin{array}{l} F_1 = \sum_{i=1}^N \left( \frac{I_i^{ex}}{I_i^{th}} - 1 \right) \frac{I_i^{ex}}{I_i^{th}} \left( \frac{1}{n + \beta R_S (I_i^{th} + I_s)} \right) = \sum_{i=1}^N g_{1i} = 0 \\ F_2 = \sum_{i=1}^N \left( \frac{I_i^{ex}}{I_i^{th}} - 1 \right) \frac{I_i^{ex}}{I_i^{th}} \left( \frac{(I_i^{th} + I_s)}{n + \beta R_S (I_i^{th} + I_s)} \left( \frac{V_i}{I_i^{th}} - R_S \right) \right) = \sum_{i=1}^N g_{2i} = 0 \\ F_3 = \sum_{i=1}^N \left( \frac{I_i^{ex}}{I_i^{th}} - 1 \right) \frac{I_i^{ex}}{I_i^{th}} \left( \frac{(I_i^{th} + I_s)}{n + \beta R_S (I_i^{th} + I_s)} \right) = \sum_{i=1}^N g_{3i} = 0 \end{array} \right. \quad (\text{A.5})$$

$$\left\{ \begin{array}{l} g_{1i} = \left( \frac{I_i^{ex}}{I_i^{th}} - 1 \right) \frac{I_i^{ex}}{I_i^{th}} \frac{1}{n + \beta R_S (I_i^{th} + I_s)} \\ g_{2i} (I_i^{th}, I_i^{ex}, V_i) = g_{3i} \left( \frac{V_i}{I_i^{th}} - R_S \right) \\ g_{3i} (I_i^{th}, I_i^{ex}, V_i) = g_{1i} (I_i^{th} + I_s) \end{array} \right. \quad (\text{A.6})$$

$$(\text{A.7})$$

### Hessien de S

$$A_{km} = \frac{\partial F_k}{\partial x_m} = A_{mk} = \frac{\partial F_m}{\partial x_k} \quad (\text{A.8})$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial F_1}{\partial \phi} = \sum_{i=1}^N \frac{\partial g_{1i}}{\partial \phi} = \sum_{i=1}^N \left[ a \frac{\partial I_i^{th}}{\partial \phi} - g_{1i} \frac{(\beta R \frac{\partial I_i^{th}}{\partial \phi} - \beta^2 R I_s)}{n + \beta R_S (I_i^{th} + I_s)} \right] \\ \frac{\partial F_1}{\partial n} = \sum_{i=1}^N \frac{\partial g_{1i}}{\partial n} = \sum_{i=1}^N \left[ a \frac{\partial I_i^{th}}{\partial n} - g_{1i} \frac{(1 + \beta R_S \frac{\partial I_i^{th}}{\partial n})}{n + \beta R_S (I_i^{th} + I_s)} \right] \\ \frac{\partial F_1}{\partial R_s} = \sum_{i=1}^N \frac{\partial g_{1i}}{\partial R_s} = \sum_{i=1}^N \left[ a \frac{\partial I_i^{th}}{\partial R_s} - g_{1i} \frac{\beta (I_i^{th} + I_s) + \beta R_S \frac{\partial I_i^{th}}{\partial R_s}}{n + \beta R_S (I_i^{th} + I_s)} \right] \end{array} \right. \quad (\text{A.9})$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial F_3}{\partial \phi} = \sum_{i=1}^N \left[ \frac{\partial g_{1i}}{\partial \phi} (I_i^{th} + I_s) + g_{1i} \left( \frac{\partial I_i^{th}}{\partial \phi} - \beta I_s \right) \right] = \sum_{i=1}^N g_{4i} \\ \frac{\partial F_3}{\partial n} = \sum_{i=1}^N \left[ \frac{\partial g_{1i}}{\partial n} (I_i^{th} + I_s) + g_{1i} \left( \frac{\partial I_i^{th}}{\partial n} \right) \right] = \sum_{i=1}^N g_{5i} \\ \frac{\partial F_3}{\partial R_s} = \sum_{i=1}^N \left[ \frac{\partial g_{1i}}{\partial R_s} (I_i^{th} + I_s) + g_{1i} \left( \frac{\partial I_i^{th}}{\partial R_s} \right) \right] = \sum_{i=1}^N g_{6i} \end{array} \right. \quad (\text{A.10})$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial F_2}{\partial \phi} = \sum_{i=1}^N \left[ g_{4i} \left( \frac{V}{I_i^{th}} - R_s \right) - g_{3i} \left( \frac{V}{(I_i^{th})^2} \frac{\partial I_i^{th}}{\partial \phi} \right) \right] \\ \frac{\partial F_2}{\partial n} = \sum_{i=1}^N \left[ g_{5i} \left( \frac{V}{I_i^{th}} - R_s \right) - g_{3i} \left( \frac{V}{(I_i^{th})^2} \frac{\partial I_i^{th}}{\partial \phi} \right) \right] \\ \frac{\partial F_2}{\partial R_s} = \sum_{i=1}^N \left[ g_{6i} \left( \frac{V}{I_i^{th}} - R_s \right) - g_{3i} \left( \frac{V}{(I_i^{th})^2} \frac{\partial I_i^{th}}{\partial R_s} + 1 \right) \right] \end{array} \right. \quad (\text{A.11})$$

$$a = - \left( \frac{(I_i^{ex})^2}{(I_i^{th})^3} + \frac{I_i^{ex}}{(I_i^{th})^2} \left( \frac{I_i^{ex}}{I_i^{th}} - 1 \right) \right) \frac{1}{n + \beta R (I_i^{th} + I_s)} \quad (\text{A.12})$$

### Dérivées du courant I

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial I_i^{th}}{\partial \phi} = - \frac{n \beta I_i^{th}}{n + \beta R_s (I_i^{th} + I_s)} \\ \frac{\partial I_i^{th}}{\partial R_s} = - \frac{\beta I_i^{th} (I_i^{th} + I_s)}{n + \beta R_s (I_i^{th} + I_s)} \\ \frac{\partial I_i^{th}}{\partial n} = - \frac{\frac{\beta}{n} I_i^{th} (I_i^{th} + I_s) \left( \frac{V}{I_i^{th}} - R_s \right)}{n + \beta R_s (I_i^{th} + I_s)} \end{array} \right. \quad (\text{A.13})$$

---

---

## ANNEXE B

---

# MÉTHODE DES MOINDRES CARRÉES POUR L'EXTRACTION DES QUATRE PARAMÈTRES D'UNE DIODE INHOMOGENÈNE

### Modèle du courant

$$I = \int A\rho(\phi_b)j(\phi_b)d\phi \quad (\text{B.1})$$

$$\rho(\phi_b) = \frac{1}{\sigma_0\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{(\phi_b - \bar{\phi}_{b0})^2}{2\sigma_0^2}} \quad (\text{B.2})$$

$$j(\phi_b) = A^*T^2 \exp(-q\phi_b/k_B T) \{ \exp [q(V - R_p A j(\phi_b) - R_c I)/k_B T] - 1 \} \quad (\text{B.3})$$

$$I = \int AA^*T^2 \rho(\phi_b) \exp(-q\phi_b/k_B T) \{ \exp [q(V - R_p A j(\phi_b) - R_c I)/k_B T] - 1 \} d\phi_b \quad (\text{B.4})$$

### Critère de performance

$$S = \sum_{i=1}^N \left( \frac{I_i^{ex} - I_i^{th}}{I_i^{th}} \right)^2 \quad (\text{B.5})$$

Dérivées de la densité de courant  $j$ 

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial j}{\partial \bar{\phi}_{b0}} = \frac{-\beta R_c(j + j_s)}{1 + A\beta R_p(j + j_s)} \frac{\partial I}{\partial \bar{\phi}_{b0}} \\ \frac{\partial j}{\partial \sigma_0} = \frac{-\beta R_c(j + j_s)}{1 + A\beta R_p(j + j_s)} \frac{\partial I}{\partial \sigma_0} \\ \frac{\partial j}{\partial R_p} = \frac{(-\beta A j - \beta R_c \frac{\partial I}{\partial R_p})(j + j_s)}{1 + A\beta R_p(j + j_s)} \\ \frac{\partial j}{\partial R_c} = \frac{(-\beta I - \beta R_c \frac{\partial I}{\partial R_c})(j + j_s)}{1 + A\beta R_p(j + j_s)} \end{array} \right. \quad (\text{B.6})$$

Dérivées du courant  $I$ 

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial I}{\partial \bar{\phi}_{b0}} = \frac{A}{g} \int \frac{(\phi_b - \bar{\phi}_{b0})}{\sigma_0^2} \rho j d\phi_b \\ \frac{\partial I}{\partial \sigma_0} = \frac{A}{g} \int \frac{(\phi_b - \bar{\phi}_{b0})^2 - \sigma_0^2}{\sigma_0^2} \rho j d\phi_b \\ \frac{\partial I}{\partial R_p} = \frac{-\beta A^2}{g} \int \frac{(j + j_s)}{1 + A\beta R_p(j + j_s)} \rho j d\phi_b \\ \frac{\partial I}{\partial R_c} = \frac{-\beta A I}{g} \int \frac{(j + j_s)}{1 + A\beta R_p(j + j_s)} \rho d\phi_b \end{array} \right. \quad (\text{B.7})$$

$$g = 1 + A\beta R_c \int \frac{(j + j_s)}{1 + A\beta R_p(j + j_s)} \rho d\phi_b \quad (\text{B.8})$$

Gradient de  $S$ 

$$f_k = \frac{\partial S}{\partial x_k} = \sum_{i=1}^N \left( \frac{I_i^{ex}}{I_i^{th}} - 1 \right) \frac{I_i^{ex}}{(I_i^{th})^2} \frac{\partial I_i^{th}}{\partial x_k}, \quad (\text{B.9})$$

$(k = 1, 2, 3, 4), (x_1 = \bar{\phi}_{b0}, x_2 = \sigma_0, x_3 = R_p, x_4 = R_c)$

Hessien de  $S$ 

$$A_{km} = \frac{\partial f_k}{\partial x_m} \quad (\text{B.10})$$

$$= \sum_{i=1}^N \left[ \left( -\frac{(I_i^{ex})^2}{(I_i^{th})^4} - 2 \frac{I_i^{ex}}{(I_i^{th})^2} \left( \frac{I_i^{ex}}{(I_i^{th})^3} - 1 \right) \right) \frac{\partial I_i^{th}}{\partial x_m} \left( \frac{\partial I_i^{th}}{\partial x_k} \right) + \left( \frac{I_i^{ex}}{I_i^{th}} - 1 \right) \frac{I_i^{ex}}{I_i^{th}} \frac{\partial}{\partial x_m} \left( \frac{\partial I_i^{th}}{\partial x_k} \right) \right] \quad (\text{B.11})$$

$$A_{km} = A_{mk} \quad (\text{B.12})$$

$$\frac{\partial}{\partial x_m} \left( \frac{\partial I_i^{th}}{\partial x_k} \right) = \frac{\partial}{\partial x_k} \left( \frac{\partial I_i^{th}}{\partial x_m} \right) \quad (\text{B.13})$$

## Dérivées seconds du courant I

$$\frac{\partial^2 I_i^{th}}{\partial \bar{\phi}_{b0}^2} = \frac{A}{g^2} \left[ (A_1 + A_2 + A_3)g - (A\beta R_c \int \frac{(A_4 + A_5)A_6 - A_7A_8}{A_6^2} d\phi_b)A_9 \right] \quad (\text{B.14})$$

$$A_1 = \int -\frac{1}{\sigma_0^2} j \rho d\phi_b \quad (\text{B.15})$$

$$A_2 = \int \left( \frac{(\phi - \bar{\phi}_{b0})}{\sigma_0^2} \right)^2 j \rho d\phi_b \quad (\text{B.16})$$

$$A_3 = \int \frac{(\phi_b - \bar{\phi}_{b0})}{\sigma_0^2} \rho \frac{\partial j}{\partial \bar{\phi}_{b0}} d\phi_b \quad (\text{B.17})$$

$$A_4 = \frac{(\phi_b - \bar{\phi}_{b0})}{\sigma_0^2} (j + j_s) \rho \quad (\text{B.18})$$

$$A_5 = \rho \frac{\partial j}{\partial \bar{\phi}_{b0}} \quad (\text{B.19})$$

$$A_6 = 1 + A\beta R_p (j + j_s) \quad (\text{B.20})$$

$$A_7 = \beta R_p A \frac{\partial j}{\partial \bar{\phi}_{b0}} \quad (\text{B.21})$$

$$A_8 = (j + j_s) \rho \quad (\text{B.22})$$

$$A_9 = \int \frac{(\phi - \bar{\phi}_{b0})}{\sigma_0^2} j \rho d\phi_b \quad (\text{B.23})$$

$$\frac{\partial}{\partial \sigma_0} \left( \frac{\partial I_i^{th}}{\partial \bar{\phi}_{b0}} \right) = \frac{A}{g^2} \left[ (B_1 + B_2 + B_3)g - (A\beta R_c \int \frac{(B_4 + B_5)A_6 - B_6A_8}{A_6^2} d\phi_b)A_9 \right] \quad (\text{B.24})$$

$$B_1 = -2 \int \frac{(\phi_b - \bar{\phi}_{b0})}{\sigma_0^3} j \rho d\phi_b \quad (\text{B.25})$$

$$B_2 = \int \frac{(\phi_b - \bar{\phi}_{b0})}{\sigma_0^2} \frac{(\phi_b - \bar{\phi}_{b0})^2 - \sigma_0^2}{\sigma_0^3} j \rho d\phi_b \quad (\text{B.26})$$

$$B_3 = \int \frac{(\phi_b - \bar{\phi}_{b0})}{\sigma_0^2} \rho \frac{\partial j}{\partial \sigma_0} d\phi_b \quad (\text{B.27})$$

$$B_4 = \frac{(\phi_b - \bar{\phi}_{b0})^2 - \sigma_0^2}{\sigma_0^3} (j + j_s) \rho \quad (\text{B.28})$$

$$B_5 = \rho \frac{\partial j}{\partial \sigma_0} \quad (\text{B.29})$$

$$B_6 = \beta R_p A \frac{\partial j}{\partial \sigma_0} \quad (\text{B.30})$$

$$\frac{\partial}{\partial R_p} \left( \frac{\partial I}{\partial \bar{\phi}_b} \right) = \frac{A}{g^2} \left[ C_1 A_5 - \left( A \beta R_c \int \frac{C_2 A_6 - (C_3 + C_4) A_8}{A_6^2} d\phi_b \right) A_9 \right] \quad (\text{B.31})$$

$$C_1 = \int \frac{(\phi_b - \bar{\phi}_{b0})}{\sigma_0^2} \rho \frac{\partial j}{\partial R_p} d\phi_b \quad (\text{B.32})$$

$$C_2 = \rho \frac{\partial j}{\partial R_p} \quad (\text{B.33})$$

$$C_3 = \beta A (j + j_s) \quad (\text{B.34})$$

$$C_4 = \beta A R_p \frac{\partial j}{\partial R_p} \quad (\text{B.35})$$

$$\frac{\partial}{\partial R_c} \left( \frac{\partial I^{th}}{\partial \bar{\phi}_{b0}} \right) = \frac{A}{g^2} \left[ D_1 g - \left( D_2 + A \beta R_c \int \frac{D_3 A_6 - D_4 A_8}{A_6^2} d\phi_b \right) A_9 \right] \quad (\text{B.36})$$

$$D_1 = \int \frac{(\phi_b - \bar{\phi}_{b0})}{\sigma_0^2} \rho \frac{\partial j}{\partial R_c} d\phi_b \quad (\text{B.37})$$

$$D_2 = \beta A \int \frac{\rho(j + j_s)}{1 + A\beta R_p(j + j_s)} d\phi_b \quad (\text{B.38})$$

$$D_3 = \rho \frac{\partial j}{\partial R_c} \quad (\text{B.39})$$

$$D_4 = \beta R_p A \frac{\partial j}{\partial R_c} \quad (\text{B.40})$$

$$\frac{\partial^2 I^{th}}{\partial \sigma_0^2} = \frac{A}{g^2} \left[ (E_1 + E_2 + E_3) g - \left( A\beta R_c \int \frac{(B_4 + B_5)A_6 - B_6A_8}{A_6^2} d\phi_b \right) E_4 \right] \quad (\text{B.41})$$

$$E_1 = \int \frac{-2\sigma_0^2 - 3 \left[ (\phi_b - \bar{\phi}_{b0})^2 - \sigma_0^2 \right]}{\sigma_0^4} j \rho d\phi_b \quad (\text{B.42})$$

$$E_2 = \int \left( \frac{(\phi_b - \bar{\phi}_{b0})^2 - \sigma_0^2}{\sigma_0^3} \right)^2 j \rho d\phi_b \quad (\text{B.43})$$

$$E_3 = \int \frac{(\phi_b - \bar{\phi}_{b0})^2 - \sigma_0^2}{\sigma_0^3} \rho \frac{\partial j}{\partial \sigma_0} d\phi_b \quad (\text{B.44})$$

$$E_4 = \int \frac{(\phi_b - \bar{\phi}_{b0})^2 - \sigma_0^2}{\sigma_0^3} \rho j d\phi_b \quad (\text{B.45})$$

$$\frac{\partial}{\partial R_p} \left( \frac{\partial I^{th}}{\partial \sigma_0} \right) = \frac{A}{g^2} \left[ F_1 g - \left( A\beta R_c \int \frac{C_2 A_6 - (C_3 + C_4) A_8}{A_6^2} d\phi_b \right) E_4 \right] \quad (\text{B.46})$$

$$F_1 = \int \frac{(\phi_b - \bar{\phi}_{b0})^2 - \sigma_0^2}{\sigma_0^3} \rho \frac{\partial j}{\partial R_p} d\phi_b \quad (\text{B.47})$$

$$\frac{\partial}{\partial R_c} \left( \frac{\partial I^{th}}{\partial \sigma_0} \right) = \frac{A}{g^2} \left[ G_1 g - \left( D_2 + A\beta R_c \int \frac{D_3 A_6 - D_4 A_8}{A_6^2} d\phi_b \right) E_4 \right] \quad (\text{B.48})$$

$$G_1 = \int \frac{(\phi_b - \bar{\phi}_{b0})^2 - \sigma_0^2}{\sigma_0^3} \rho \frac{\partial j}{\partial R_c} d\phi_b \quad (\text{B.49})$$

$$\frac{\partial^2 I^{th}}{\partial R_p^2} = \frac{A}{g^2} \left[ \left( -\beta A \int \frac{(K_1+K_2)A_6 - (C_3+C_4)jA_4}{A_6^2} d\phi_b \right) g - (A\beta R_c \int \frac{C_2A_6 - (C_3+C_4)A_8}{A_6^2} d\phi_b) K_3 \right] \quad (\text{B.50})$$

$$K_1 = \rho(j + j_s) \frac{\partial j}{\partial R_p} \quad (\text{B.51})$$

$$K_2 = \rho j \frac{\partial j}{\partial R_p} \quad (\text{B.52})$$

$$K_3 = -\beta A \int \frac{j(j + j_s)}{1 + A\beta R_p(j + j_s)} \rho d\phi_b \quad (\text{B.53})$$

$$\frac{\partial}{\partial R_c} \left( \frac{\partial I^{th}}{\partial R_p} \right) = \frac{A}{g^2} \left[ \left( -\beta A \int \frac{(L_1+L_2)A_6 - D_4jA_4}{A_6^2} d\phi_b \right) g - (D_2 + A\beta R_c \int \frac{D_3A_6 - D_4A_8}{A_6^2} d\phi_b) K_3 \right] \quad (\text{B.54})$$

$$L_1 = \rho(j + j_s) \frac{\partial j}{\partial R_c} \quad (\text{B.55})$$

$$L_2 = \rho j \frac{\partial j}{\partial R_c} \quad (\text{B.56})$$

$$\frac{\partial^2 I^{th}}{\partial R_c^2} = \frac{A}{g^2} \left[ (M_1 - \beta I^{th} \int \frac{D_3A_6 - D_4A_8}{A_6^2} d\phi_b) g - (D_2 + A\beta R_c \int \frac{D_3A_6 - D_4A_8}{A_6^2} d\phi_b) M_2 \right] \quad (\text{B.57})$$

$$M_1 = -\beta \frac{\partial I^{th}}{\partial R_c} \int \frac{(j + j_s)}{1 + A\beta R_p(j + j_s)} \rho d\phi_b \quad (\text{B.58})$$

$$M_2 = -\beta I^{th} \int \frac{(j + j_s)}{1 + A\beta R_p(j + j_s)} \rho d\phi_b \quad (\text{B.59})$$

---

## Résumé

L'objectif de cette thèse est l'étude de l'inhomogénéité dans les structures Mo/4H-SiC selon le modèle de Werner. En effet, l'application de la méthode standard d'extraction des paramètres caractéristiques des structures montre que la barrière moyenne augmente avec l'augmentation de la dose de l'implantation ionique de la surface des anneaux de garde (guard ring). Cette méthode nous a permis d'extraire une constante de Richardson proche de la valeur théorique.

L'application d'une méthode plus générale a montré que la barrière moyenne et la déviation standard augmentent linéairement avec l'augmentation de la température. Cette méthode nous a permis aussi de diviser la résistance série de la diode en deux,  $R_p$  et  $R_c$ . La résistance  $R_p$  peut-être l'origine de la déviation du facteur d'idéalité de la valeur idéale 1.

La modélisation du courant inverse des structures Mo/4H-SiC selon l'effet tunnel est réalisée par le modèle de Tsu-Esaki qui est basé sur le calcul du coefficient de transmission quantique  $T(E)$ . Pour le calcul de  $T(E)$  nous avons utilisé trois approximations WKB, MAF et TMM. La densité de courant augmente selon l'augmentation de la tension de polarisation et selon l'augmentation de la température. La comparaison entre la densité de courant simulée et celle mesurée montre une différence sensible. Notre étude montre que l'inhomogénéité n'est pas l'origine de cette différence.

## Abstract

The aim of this thesis is the study is the inhomogeneity in the Mo/4H-SiC structures according to Werner's model: Applying the standard method for the extraction of the diode parameters shows that the mean barrier height increases with increasing dose of ion implantation of the guard ring surface. This method allows us to extract a Richardson constant close to the theoretical value. Applying a more general method shows that, the mean barrier height and the standard deviation increases linearly with increasing temperature. This method also allows us to divide the series resistance of the diode into two,  $R_p$  and  $R_c$ . The  $R_p$  resistance may be the cause of the deviation of the ideality factor from the ideal value 1.

Modeling of the reverse current of the Mo/4H-SiC structures according to tunneling is made by the Tsu-Esaki model that is based on calculating the quantum transmission coefficient  $T(E)$ . To calculate  $T(E)$  we have used three approximations: WKB, MAF and TMM. The current density increases with increasing bias voltage and of temperature. The comparison between the simulated current density and that measured shows a divergence between them. Our study shows that inhomogeneity is not the main cause of this discrepancy.

## ملخص

الهدف من هذه الدراسة هو لا تجانس التركيبة Mo/4H-SiC وفقا لنموذج فارنار: تطبيق الطريقة العادية توضح أن حاجز الكمون المتوسط يتزايد مع زيادة جرعة الأيونات المدخلة داخل سطح حزمة الحرس. هذه الطريقة سمحت لنا باستخراج ثابت ريشاردسون متطابق مع القيمة النظرية. تطبيق الطريقة العامة (النموذج الثالث) يوضح أن حاجز الكمون المتوسط والانحراف المعياري يتزايدان خطيا مع تزايد درجة الحرارة. هذه الطريقة تسمح لنا أيضا بتقسيم مقاومة الصمام الثنائي إلى مقاومتين،  $R_p$  و  $R_c$ . المقاومة  $R_p$  يمكن أن تكون السبب في انحراف عامل المثالية عن القيمة المثالية 1. نمذجة التيار العكسي للتركيبة Mo/4H-SiC وفقا للتيار النفقي أعتمد على نموذج تسي-إيزاكي الذي يعتمد على حساب معامل النقل الكمي  $T(E)$ . لحساب هذا المعامل قمنا باستعمال ثلاثة طرق تقريبية هي: طريقة WKB، طريقة دالة ايري المعدلة (MAF) وطريقة مصفوفة الترحيل (TMM). كثافة التيار تتزايد بزيادة التوتر وحسب زيادة درجة الحرارة. المقارنة بين كثافة تيار المحاكاة و التيار المقاس تجريبيا وضحت وجود تباعد بينهما، دراستنا هذه أثبتت أن لا تجانس التركيبة ليس منشأ هذا التباعد.