

République Algérienne Démocratique et Populaire
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche
Scientifique

Université Ferhat Abbas - SETIF



Thèse

Présenté à la Faculté des Sciences
Département de Physique

Pour l'obtention du diplôme de

DOCTORAT EN SCIENCE

Option: Physique des Matériaux Solides

Par

NOUARI ROUAG

THEME

ETUDE ELECTRIQUE ET STRUCTURALE
DES MATERIAUX A LARGES BANDES
INTERDITES (SiC et AlN)

Soutenue publiquement le: 07./07/ 2010

Devant la commission d'examen

Président:	K. BOUAMAMA	Professeur	Université de Sétif
Rapporteur:	Z. OUENNOUGHI	Professeur	Université de Sétif
Co-rapporteur:	M. A. DJOUADI	Professeur	IMN, Univ. Nantes, France
Examineurs:	F. CHEMAM	Professeur	Université de Tébessa
Examineurs:	A. FERHAT HAMIDA	M. Conférences	Université de Sétif
Examineurs:	M. BENKHEDIR	M. Conférences	Université de Tébessa

و ما توفيقى إلا بالله
فألهم لك الحمد
كما ينبغي لعظيم وجهك و جلال سلطانك

اللهم علمنا ما ينفعنا
وانفعنا بما علمتنا و زدنا علما نافعا

A mes parents
A ma femme
A ma famille
Et à tous ceux qui me sont Chers

REMERCIEMENTS

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

Je tiens à exprimer ma gratitude à Monsieur le professeur **Zahir Ouennoughi**, de m'avoir permis de réaliser cette thèse dans son équipe au département de Physique de l'université de Sétif, pour sa disponibilité et la qualité de son encadrement ainsi que pour le soutien et la patience dont elle a fait preuve tout au long de mon travail. Son aide et son soutien m'ont été tout aussi utiles, notamment dans le domaine de la simulation électrique.

Je remercie également Monsieur le professeur **Mohammed Abdou Djouadi** pour m'avoir accueilli au sein de l'institut des matériaux de Nantes (IMN), pour son aide précieuse dans le traitement et l'analyse des caractéristiques électriques, pour sa disponibilité et la qualité de son encadrement ainsi que pour le soutien et la patience dont elle a fait preuve tout au long de mon séjour à Nantes, et mon entière gratitude pour sa large participation à mes travaux, notamment en ce qui concerne le dépôt et l'analyse des films de nitrures d'aluminium (AlN). Qu'il sache combien j'ai apprécié le rôle qu'il a joué, à un moment ou autre, dans cette collaboration. Je le remercie enfin d'avoir accepté d'être Co-rapporteur de ma thèse.

Je dois à Monsieur **Khaled Bouamama**, professeur à l'université de Sétif d'avoir accepté d'être président du jury, qu'il en soit ici remercié.

Mes remerciements s'adressent aussi à Monsieur **Abdelhak Ferhat Hamida**, Maître de conférences à l'université de Sétif, à Monsieur **Fayçal Chemam**, Professeur à l'université de Tébessa et Monsieur **Lotfi Mohamed Benkhedir**, Maître de conférences à l'université de Tébessa et qui m'ont honoré en acceptant d'examiner mon travail

Mes profonds et sincères remerciements vont également à tous les enseignants

REMERCIEMENTS

de l'université de Sétif et de Tébessa.

Je souhaite exprimer également ma gratitude envers toutes les personnes de l'Institut des Matériaux et du Laboratoire des Plasmas et des Couches Minces (LPCM) de Nantes, qui ont facilité et encouragé le bon déroulement d'une grande partie de cette thèse, notamment **Abdallah Bassam**. Je le remercie tout particulièrement car c'est grâce à lui que j'ai pu m'initier à la préparation des échantillons en microscopie et obtenir les mesures FTIR qui font l'objet d'une grande partie de ce travail. Je remercie également **Saad Rahmane** mon collègue et amie, je n'oublierais jamais le temps que nous avons passé ensemble à Nantes.

Mes plus vifs remerciements vont à mon ami le professeur **Zine elabidine Chaoui**, pour sa gentillesse et sa disponibilité, pour ses discussions fructueuses et ses critiques mutuelles ont été d'un grand intérêt pour l'amélioration de ce travail. Je le remercie tout particulièrement

Enfin je ne pourrais terminer sans remercier très chaleureusement tous ceux qui ont largement contribué à l'aboutissement de ce travail et qui me supportent depuis de nombreuses années

INTRODUCTION GENERALE.....	1
CHAPITRE I : LA CARACTERISTIQUE COURANT-TENSION (I-V) DES DIODES SCHOTTKY A BASE DE 4H-SiC.....	5
I-1 Introduction.....	5
I-2 Le carbure de Silicium (SiC).....	5
I-2.1 Polytypisme du SiC.....	6
I-2.1.1 Notion cristallographique.....	6
I-2.1.2 Notation de Ramsdell.....	7
I-3 Propriétés physiques du matériau.	8
I-3.1. Généralités.	8
I-3.2. Propriétés électriques et optiques.....	10
I-3.2.1. Propriétés électriques.....	10
I-3.2.2. Propriétés optiques.....	10
I-4. La diode Schottky à base de 4H-SiC.....	10
I-5 Modèles de base de la diode à barrière Schottky.....	11
I-5.1 Diode idéale (Théorie de Schottky et Mott).....	11
I-5.2 Diode pratique (Théorie de Bardeen).....	12
I-5.3 Diode réelle (Théorie de Cowley et Sze).....	13
I-6 Caractéristique courant-tension (I-V) (Modèle à barrière homogène).....	14
I-6.1 Emission par-dessus la barrière.....	15
I-6.1.1 Théorie de la diffusion.....	15
I-6.1.2 Théorie de l'émission thermoïonique.....	16
I-6.1.3 Combinaison des deux théories.....	17
I-6.2 Courant tunnel.....	18
I-6.3 Rapport d'injection de trous.....	18
I-6.4 Courant de recombinaison dans la zone de charge d'espace (ZCE).....	19
I-6.5 Courant de fuite.....	19
I-6.6 Pertes ohmiques.....	19
I-6.7 Modèle à barrière homogène.....	20
I-7. Modèle à barrière inhomogène.....	20
I_7.1 Modèle à distribution gaussienne de ϕ_B.....	20
I_7.2 Modèle de Werner.....	22

<i>I_7.3 Modèles de Tung et la caractéristique I-V-T</i>	22
<i>I-8 Conclusion</i>	25
CHAPITRE II EXTRACTION DES PARAMETRES ET ANALYSE DES RESULTATS DES DIODES SCHOTTKY A BASE DE 4H-SiC5	
<i>II-1 Introduction</i>	26
<i>II-2 Principe des algorithmes génétiques (AGs)</i>	26
<i>II-2.1. Fonction d'adaptation, fonctions objectif</i>	28
<i>II-2.2. Codage des variables</i>	28
<i>II-2.3. Génération de la population</i>	29
<i>II-2.4. Sélection_ élimination</i>	29
<i>II-2.5. Opérateur de croisement</i>	30
<i>II-2.6. Opérateur de mutation</i>	30
<i>II-3 Application des AGs pour l'extraction des paramètres de la caractéristique I-V des diodes à bases de 4H-SiC</i>	31
<i>II-3.1 Méthode de fabrication des échantillons</i>	31
<i>II-3.2 Effets à étudier des échantillons réalisés</i>	32
<i>II-3.3 Extraction des paramètres par le modèle à barrière homogène</i>	33
<i>II-3.3.1 Diodes au Molybdène et l'effet de la température et du dosage</i>	34
<i>II-3.3.2 Diodes au Nickel et au Tungstène et l'effet de la température</i>	38
<i>II-3.3.2.1 Analyse des résultats des diodes au Tungstène (W/4H-SiC)</i>	39
<i>II-3.3.2.2 Analyse des résultats des diodes au Nickel (Ni/4H-SiC)</i>	40
<i>II-3.4 Extraction des paramètres par le modèle à barrière inhomogène</i>	42
<i>II-3.4 .1 Résultats et discussion des paramètres obtenus à partir du modèle de distribution gaussienne de ϕ_B</i>	44
<i>II-3.4.2 Résultats et discussion des paramètres obtenus à partir du modèle de Werner</i>	45
<i>II-3.4.3 Résultats et discussion des paramètres obtenus à partir du modèle de Tung</i>	47
<i>II-3.4.4 Constante de Richardson modifiée selon le modèle de Tung pour les diodes à bases de 4H-SiC</i>	54
<i>II-4 Conclusion</i>	57
CHAPITRE III NITRURES D'ALUMINIUM (AlN), DISPOSITIFS DE DEPOT ET MOYENS DE CARACTERISATIONS33	
<i>III-1 Introduction</i>	58
<i>III-2 Propriétés générales des nitrures</i>	58
<i>III-2.1 La structure cristallographique</i>	58
<i>III-2.2 Structure des bandes</i>	59

III-2.3	<i>La constante diélectrique et l'indice de réfraction</i>	60
III-2.4	<i>Polarisation spontanée et l'effet piézoélectrique</i>	61
III-3	<i>Technique de dépôt</i>	62
III-3.1	<i>Technique de dépôt par pulvérisation cathodique</i>	64
III-3.2	<i>Enceinte de décharge</i>	64
III-3.3	<i>Cathode magnétron</i>	65
III-3.4	<i>Pulvérisation DC</i>	65
III-3.5	<i>Pulvérisation RF</i>	65
III-4	<i>Techniques de caractérisation</i>	66
III-4.1	<i>La Diffraction des RX</i>	66
III-4.2	<i>La microscopie électronique à transmission</i>	68
III-4.2.1	<i>Principe</i>	68
III-4.2.2	<i>Préparation des échantillons</i>	69
III-4.2.3	<i>Les modes d'observation imagerie</i>	69
III-4.2.3.1	<i>Imagerie conventionnelle</i>	69
III-4.2.3.2	<i>Imagerie haute résolution (HRTEM)</i>	70
III-4.3	<i>Spectroscopie infrarouge</i>	71
III-5	<i>Conclusion</i>	73
CHAPITRE VI: MODELISATION DE LA TRANSMISSION OPTIQUE EN INFRAROUGE (IR) DES FILMS POLYCRISTALLINS D'ALN		33
VI-1	<i>Introduction</i>	74
VI-2	<i>Propagation d'une onde électromagnétique dans un milieu anisotrope uniaxe</i>	74
VI-2.1	<i>Équations de Maxwell</i>	74
VI-2.2	<i>Tenseur diélectrique</i>	76
VI-2.4	<i>Propagation dans un milieu anisotrope uniaxe</i>	77
VI-2.5	<i>Surface des indices dans un matériau anisotrope uniaxe</i>	77
VI-2.6	<i>Expression de la fonction diélectrique effective de films texturés</i>	78
VI-2.7	<i>Coefficients de Fresnel dans matériau anisotrope uniaxe</i>	80
VI-2.7	<i>Indice de réfraction dans un matériau anisotrope uniaxe</i>	82
VI-2.7.1	<i>Axe optique parallèle à la normale de la surface de séparation</i>	82
VI-2.7.2	<i>Axe optique quelconque</i>	82
VI-2.8	<i>Modèle optique multicouche</i>	84
VI-2.9	<i>Étape de calcul de la transmission (Algorithme de calcul)</i>	86
VI-3	<i>Modélisation des spectres FTIR d'un film polycristallin</i>	88
VI-3.1	<i>Dépôt par PVD des films d'ALN de la série 1</i>	88
VI-3.2	<i>Caractérisation optique par la technique FTIR et discussion</i>	88
VI-3.3	<i>Observations expérimentales (bases du modèle)</i>	91
VI-3.4	<i>Distribution de l'orientation des cristallites autour d'un angle donné</i>	97
VI-3.5	<i>Algorithme du modèle proposé</i>	97
VI-3.4	<i>Présentation et Interprétation des résultats des films polycristallins</i>	98
VI-3.4.1	<i>Série1 des films déposés par PVD</i>	98

SOMMAIRE

VI-3.4.2 Série 2 des films déposés par PECVD	100
VI-3.4.3 Série 3 des films déposés par PVD	102
<i>VI-4 Conclusion</i>	103
<i>Conclusion Générale</i>	105
<i>Bibliographique</i>	108
<i>Annexe A: Modèle de Schubert</i>	113
<i>Annexe B: Fonction diélectrique prenant en considération la dispersion des vibrations des modes optique</i>	118
RESUME	122

INTRODUCTION GENERALE

Le monde des semi-conducteurs est dominé, en termes de marché par le silicium (Si). Ce dernier, a **une largeur de bande interdite (gap)** indirecte, de 1,11 eV. Le germanium (Ge), moins utilisé, a également un gap indirect, de 0,66 eV. Ces matériaux définissent une valeur de référence pour le gap, de l'ordre de 1 eV. On distingue alors les semi-conducteurs à petit gap qui ont une bande interdite très inférieure à 1 eV et les semi-conducteurs à large gap qui ont une bande interdite très supérieure. **Le carbure de silicium (SiC)** et **Le nitrure d'aluminium (AlN)** sont deux matériaux appartenant à la classe des semiconducteurs à large gap. Le SiC à un gap indirect de valeur qui varie suivant les polytypes autour de 3,3 eV et l'AlN à un gap direct de valeur de 6,2 eV.

Les propriétés physiques exceptionnelles du SiC laissent prévoir des possibilités plus étendues que le silicium (Si) **pour l'électronique de puissance**. Dans les hautes tensions (>10 kV), plusieurs composants en silicium doivent être mis en série, alors qu'avec le SiC, il sera alors théoriquement possible de réduire considérablement le nombre de composants. De plus ses capacités à fonctionner à haute température permettent d'envisager de nouvelles applications mais également de réduire l'encombrement des systèmes de refroidissement.

Le nitrure d'aluminium présente une bonne tenue mécanique. Il se caractérise par un faible coefficient de frottement, une haute conductivité thermique et une bonne résistance aux chocs thermiques. Il est également inerte vis-à-vis de nombreux composés liquides tels que le cuivre, l'argent, l'étain... Cet ensemble de propriétés, associées aux avantages des couches minces, donne aux films d'AlN un large champ d'application surtout en optoélectronique.

Vu ce large champ d'application de ces deux matériaux (SiC et AlN) dans le domaine de l'électronique de puissance et l'optoélectronique, il est important d'étudier ces matériaux. Notre contribution dans ce travail s'inscrit donc dans le cadre de la modélisation et l'extraction des paramètres. En effet, Un modèle pour un composant donné est un ensemble d'équations mathématiques caractérisé par un ensemble de paramètres. Si ces paramètres sont connus pour un certain composant, le modèle en question serait adéquat pour décrire le comportement du composant. Ainsi, le domaine de l'extraction des paramètres devient de plus en plus indépendant des autres domaines.

En premier, Il s'agit dans ce travail d'utiliser la méthode des algorithmes génétiques pour l'extraction des paramètres des structures métal-semi-conducteurs (MS) à base du SiC, à partir de la caractéristique courant-tension (I-V), à barrière homogène et inhomogène. Ces paramètres permettront de décrire les mécanismes de transport de courant dans ce type de structures.

En second, en se basant sur la façon de croissance des films d'AlN sur des substrats de silicium, un modèle des spectres Infrarouges (IR) de ces films minces est proposé. L'analyse des paramètres déterminés à partir de ce modèle optique permet de corréler certaine d'entre eux avec les paramètres structurales déterminées par la technique de la diffraction des rayons X (DRX) et spécifiquement la largeur à mi-hauteur de la courbe expérimentale déterminé par la technique Rocking curve

Pour ce faire, nous avons organisé le manuscrit en quatre chapitres:

Au premier chapitre, nous avons rappelés les propriétés physiques et électriques du SiC. La caractéristique courant-tension (I-V) est expliqué par différents modèles à barrières homogène et inhomogène; celui de Werner et de Tung

Dans le deuxième chapitre, on commence par rappeler la méthode d'extraction par les algorithmes génétique (GAs), appliquée à des diodes Schottky à base du 4H-SiC. L'inhomogénéité des barrières des diodes à large bande interdite est expliquée par les deux modèles de Werner et de Tung. Ces derniers sont appliqués pour déterminer les paramètres des structures Schottky à base de SiC et comparés avec ceux déterminés à partir des modèles homogènes.

Le troisième chapitre, est consacré à décrire les généralités du nitrure d'aluminium (AlN) d'une part et d'autre part, il sera consacré à la présentation du bâti de dépôt assisté par plasma micro-ondes couplés à une polarisation RF, ainsi qu'à la description de la procédure expérimentale de dépôt, et les techniques de caractérisation utilisés dans ce travail.

Le comportement diélectrique des nitrures nécessite un dopage pour augmenter leur conductivité électrique. Plusieurs difficultés apparaissent lors de son dopage suite à la présence des défauts natifs et d'imputés résiduelles et aussi suite au problème de leurs large bande interdite. Donc, on s'est limité dans le cadre de ce travail à consacrer le quatrième chapitre à l'étude des propriétés structurales des films minces des nitrures. Plus précisément, on s'est limité à la modélisation et l'analyse des spectres IR en transmission (absorption) pour remonter aux paramètres optiques ainsi que l'orientation de l'axe optique du film.

Le dernier chapitre est divisé en plusieurs parties, nous commençons par un bref rappel sur les notions concernant la propagation d'une onde électromagnétique dans un milieu uniaxe anisotrope, puis nous abordons les méthodes de calcul des spectres de transmission entre trois milieux : isotrope(Air)/anisotrope (film AlN)/isotrope absorbant (Substrat Si). Puis Sur la base des observations expérimentales de ces films, nous avons établi un modèle de la fonction diélectrique du spectre d'absorption IR. Ce dernier est utilisé pour extraire les paramètres

optiques des films d'AlN préparés sous différentes conditions au moyen de la méthode des algorithmes génétiques et les résultats obtenus sont corrélés avec ceux déterminés, par la diffraction des rayons X (DRX).

CHAPITRE I :
LA CARACTERISTIQUE COURANT-TENSION (I-V)
DES DIODES SCHOTTKY
A BASE DE 4H-SiC

Chapitre d'équation 1 Section 1

I-1 Introduction

L'utilisation des matériaux semi-conducteurs à large bande interdite (Gap) tels que le carbure de silicium (SiC) dans le domaine des microsystèmes s'avère fort intéressant lorsque l'on atteint les limites physiques du silicium. Rappelons que ce dernier n'est plus fiable du point de vue électrique dès 300 °C. A partir de 500 °C, des défauts mécaniques apparaissent. Aussi, si l'on désire travailler sous environnements sévères, hautes températures, hautes pressions, champs élevés, environnements radiatifs, l'emploi des semi-conducteurs à larges gap semble beaucoup plus approprié.

Au cours de ce chapitre nous présentons l'essentiel des propriétés physiques du carbure de Silicium (SiC) et les modèles utilisés pour l'extraction des paramètres à partir de la caractéristique courant tension (IV) des diodes Schottky à base de SiC

I-2 Le carbure de Silicium (SiC)

Le SiC n'est pas un nouveau venu sur la scène des semi-conducteurs. En effet, le premier compte rendu sur ce matériau date de 1824. Les propriétés de ce matériau étaient alors inconnues. En 1885, Achelson réussit à faire croître une couche de SiC et lui donna le nom de SiC. En 1907, la première diode électroluminescente LED (Light Emitting Diode) sur substrat SiC fut conçue. En 1955, Lely proposa un nouveau concept pour faire croître des couches de SiC de hautes qualités. 1978 fut une année majeure dans le SiC avec la technique de croissance par sublimation qui est en fait une méthode dérivée de celle de Lely. En 1987, la société CREE RESEARCH fut fondée. Elle est devenue récemment le principal fournisseur de substrat en SiC. Les LED en SiC sont déjà commercialisées et les progrès effectués sur cette technologie laissent supposer de nombreuses applications devraient voir le jour dans un avenir proche.

I-2.1 Polytypisme du SiC

I-2.1.1 Notion cristallographique

Le carbure de silicium [1, 2] peut exister en un peu plus de 150 structures cristallographiques différentes, appelés polytypes. Ceux-ci diffèrent seulement par leurs séquences d'empilement à périodes élevées. Il est à noter que les propriétés physiques du matériau sont fortement liées à la structure du cristal considéré.

Tous les polytypes de SiC sont constitués d'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. Elles sont constituées d'un plan compact de silicium superposé à un plan de carbone. La maille élémentaire est constituée d'un tétraèdre de carbone au centre duquel est placé un atome de Si. Il existe 3 arrangements possibles entre les bicouches, notés A, B et C, comme le montre la figure (1.1)

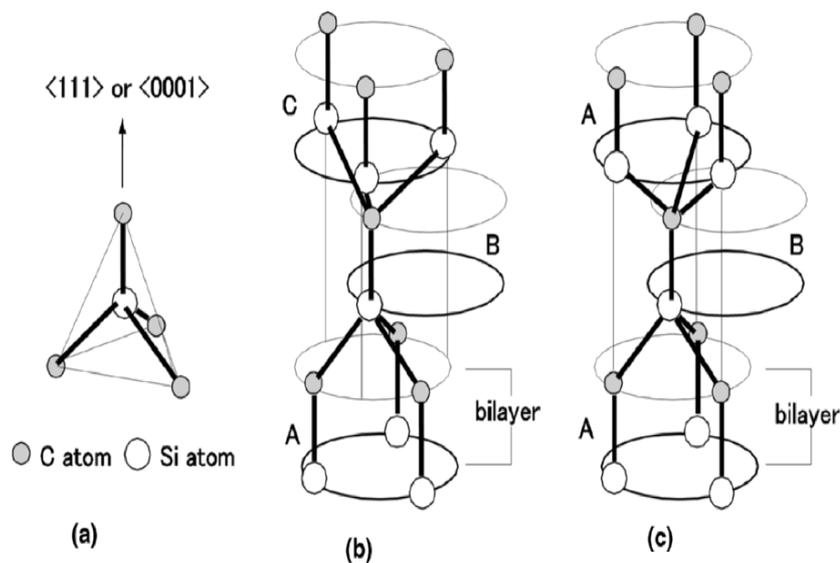


Figure (1.1). (a) Structure tetraédrique, (b) Sites Cubique, (c) Sites Hexagonales

Les 3 symétries les plus rencontrés :

- La cubique C.
- L'hexagonal H.
- La Rhomboédrique R.

La figure (1.2) représente les arrangements spatiaux des mailles cubiques et hexagonales. On montre sur cette figure que l'empilement de bicouches élémentaires Silicium-carbone donne l'apparition à deux types de faces, soit à la face carbone (C-face) ou à la face de silicium (Si-face).

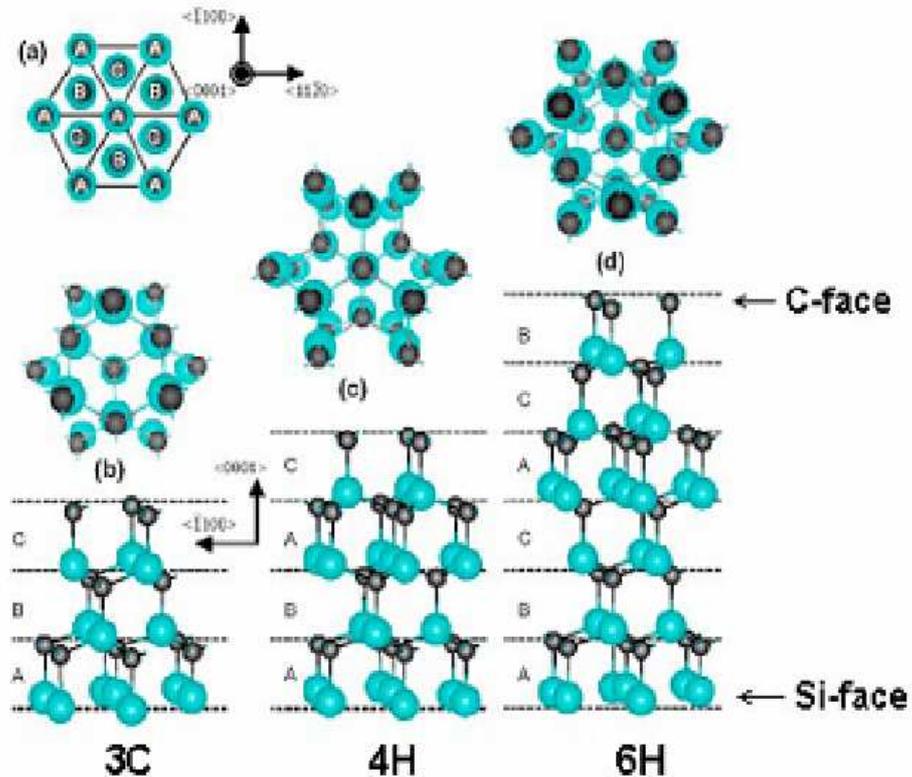


Figure (1.2). Représentation des polytypes 3C, 4H et 6H et l'apparition de la face carbone (C-face) ou de la face du silicium (Si-face)

I-2.1.2 Notation de Ramsdell

Chaque type du Crystal [3] est désigné par la forme NX où N désigne le nombre de couche formant la maille élémentaire et X indique la symétrie du réseau.

Les cinq types les plus courants sont évoqués dans le tableau de la figure (1.3). Le nombre d'atomes par maille élémentaire varie pour chaque polytype, ce qui, naturellement, influe sur la largeur du gap, et par conséquent sur les propriétés optiques et électriques de chacun d'eux [3, 4].

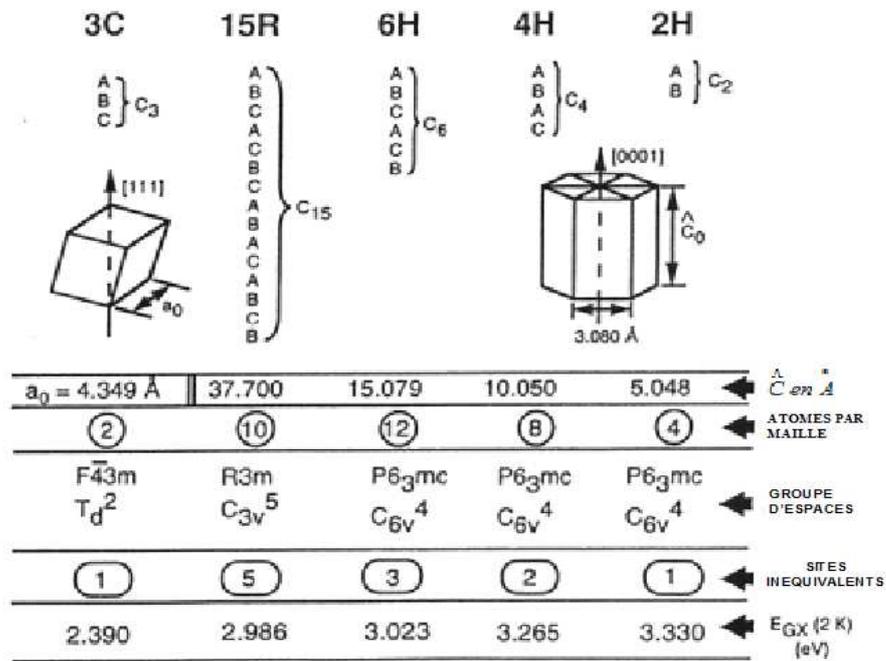


Figure (1.3) : Séquences d'empilements des 5 principaux polytypes.

I-3 Propriétés physiques du matériau.

I-3.1. Généralités.

Le SiC fait partie des matériaux réfractaires à large gap Tableau (1.1) [5]. De ce fait, il est très peu influencé par la température et peu travailler au-delà de 500 C, alors que le silicium reste limité à 300 C.

Un autre avantage du SiC sur le Silicium, est son excellente conductivité thermique ($5 \text{ W cm}^{-1} \text{ K}^{-1}$) Proche de celle du cuivre, elle vaut quatre fois celle du silicium. Elle permet en outre, une évacuation rapide de la chaleur produite dans un dispositif employé dans des microstructures, il devrait donc rapidement occuper une place prépondérante dans l'aéronautique, l'aérospatiale, les industries nucléaires et les automobiles. De plus, il est chimiquement inerte, seules quelques bases concentrées, portées à haute température (KOH en fusion...), peuvent l'attaquer. Il est insensible aux radiations, et possède une dureté trois fois supérieure à celle du silicium. La mobilité relativement restreinte des porteurs de charges présente un inconvénient évident pour les applications à la microélectronique. En revanche, les valeurs assez élevées du champ

de claquage et de la vitesse de dérive limite des électrons sont à l'avantage du carbure de silicium. Aux vues de ces arguments, la miniaturisation des composants à base de SiC devrait se dérouler correctement.

Les propriétés des trois principaux polytypes, comparées à celles du silicium ou du Diamant, sont résumées dans le tableau (1.1) suivant. Le fait que le SiC dépasse largement le Si pour les applications en environnement sévère, apparaît évident à presque tous les stades.

	Si	3C-SiC	4H-SiC	6H-SiC	Diamant
Bande interdite A 300°K (eV)	1.12	2.4	3.2	2.9	5.5
Température de fusion (K)	1690	Sublimation 2850	Sublimation T > 2450		Change de phase
Paramètre de maille (C)	5.43	4.34		a = 3.1 c = 15.1	
Conduct. Therm. (W. cm⁻¹. K⁻¹)	1.5	5	4.9	4.9	20
Stabilité physique	Bonne	Excellente			
Température Max. d'utilisation (K)	600	1200	1720	1580	2800
Coefficient dilatation thermique (10⁻⁶ K⁻¹)	2.56 (300K) 4.4 (1350K)	3.3 5.1		2.78 5.25	
Champ de claquage A 300°K (10⁶ V. cm⁻¹)	0.37	4	4	4	7
Constante diélectrique.	11.8	9.7	9.7	9.7	5.5
Durée de vie des minoritaires (s)	2.5 10 ⁻³	10 ⁻⁹			
Mobilité des électrons A 300°K (cm².V⁻¹.s⁻¹)	1400	750	800	370	2200
Mobilité des trous A 300°K (cm².V⁻¹.s⁻¹)	600	40	115	90	1600
Vitesse dérive de saturation des électrons (10⁷ cm.s⁻¹)	1	2.5	2.5	2.5	2.7
Dureté (kg.mm⁻²)	1150	3300	2930	2930	7000

Tableau (1.1) : Propriétés physiques du SiC, du Si et du Diamant [5].

I-3.2. Propriétés électriques et optiques.

I-3.2.1. Propriétés électriques.

Le SiC est un semi-conducteur à gap indirect. Sa valeur, dépend du polytype considéré, de 2.4 eV pour le 3C-SiC (cubique), à 3.2 eV pour le 4H-SiC. On notera la corrélation entre la structure et la largeur de la bande interdite. Plus on évolue vers la structure hexagonale, plus il s'élargit. Le gap étant indirect, les transitions inter-bandes font appel à des phonons.

Comparé au silicium, il possède un champ de claquage environ dix fois plus élevé, pour une mobilité trois fois moindre.

I-3.2.2. Propriétés optiques.

Les différents polytypes du SiC étant tous à gap indirect, ce matériau n'est donc pas indiqué pour les applications de l'optoélectronique. Il trouve un terrain plus favorable dans le domaine des capteurs (environnement sévères) ou dans l'électronique de puissance.

On notera cependant qu'il est biréfringent, c'est à dire qu'il décompose un rayon lumineux incident en deux rayons réfractés distincts correspondant à deux indices différents n et n' , très proches.

I-4. La diode Schottky à base de 4H-SiC

En SiC, les diodes Schottky sont essentiellement réalisés avec le polytype 4H-SiC avec du nickel comme métal. Le premier démonstrateur de diode Schottky a été réalisé par Bhatnagar [5, 6]. La tenue en tension était de 400 V pour une épaisseur de couche égale à 10 μm dopée à $3,6 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$

La diode Schottky possédant un courant en direct le plus élevé a été développée par Singh [6, 7]. En direct, la résistance spécifique est seulement de 7,4 mW.cm², le courant maximal atteint est de 130 A pour une surface active de 0,64 cm². La tension de

claquage est égale à 300 V. La couche épitaxiale de type N est dopée à $5 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ avec une épaisseur de 15 μm .

I-5 Modèles de base de la diode à barrière Schottky

I-5.1 Diode idéale (Théorie de Schottky et Mott)

Les premiers éléments de corrélation ont été établie par Schottky [8], Mott [9], qui ont cherché à établir une relation ente la hauteur de la barrière de potentiel et la différence entre le travail de sortie du métal $q\phi_m$ et celui du semiconducteur $q\phi_{sc}$. Effectivement, dans le cas de certains contacts, il se forme une barrière de diffusion qV_d dans le semiconducteur qui s'ajuste de façon à rendre son travail de sortie après contact $q\phi_{sc}$ égal à celui du métal. On a alors avec les notations de la figure (1.8)

$$qV_d = q\phi_m - q\phi_s \tag{1.1}$$

Vue du coté du métal, la barrière de potentiel $q\phi_{Bn}$ est égale à la différence entre le travail de sortie du métal et l'affinité électronique $q\chi_{sc}$ du semiconducteur

$$q\phi_{Bn} = q(\phi_m - \chi_{sc}) \tag{1.2}$$

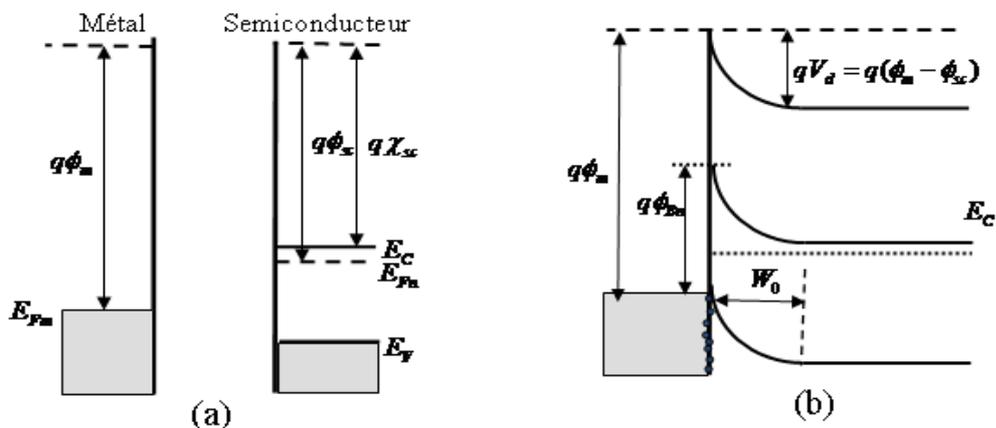


Figure (1.8) Diagramme des bandes d'énergies pour un semiconducteur de type n dans le cas où $\phi_m > \phi_{sc}$: (a) Les deux matériaux sont séparés l'un de l'autre. (b) Après contact et à l'équilibre thermique

Cette dernière relation est dite approximation de Schottky bien qu'elle soit établie indépendamment par Schottky et Mott.

Le type de contact métal/semiconducteur (MS) dépend des travaux de sortie, $q\phi_m$ et $q\phi_{sc}$ [10], des deux matériaux et du type du semiconducteur. Le contact MS est redresseur ou ohmique selon les travaux de sortie des matériaux et le type du semiconducteur:

- Si $q\phi_m > q\phi_{sc}$: Redresseur pour semi-conducteur *type-n*.
Ohmique pour semi-conducteur *type-p*.
- Si $q\phi_m < q\phi_{sc}$: Redresseur pour semi-conducteur *type-p*.
Ohmique pour semi-conducteur *type-n*.

I-5.2 Diode pratique (Théorie de Bardeen)

A partir de la théorie de Schottky et Mott, établie pour le cas d'un contact idéal, cette théorie est élargie pour tenir compte de l'existence de plusieurs effets à l'interface, ce qui conduit au développement de cette théorie et son adaptation au cas d'un contact réel.

En 1947, J. Bardeen [11] a expliqué que la présence des états de surfaces localisés dans les semiconducteurs à liaisons covalentes influencent beaucoup la hauteur de la barrière de potentiel. Ces états sont des états de Tamm[12], ils proviennent de la rupture de la périodicité du réseau cristallin à la surface. Ils sont en densités très élevés, environ un état par atome de surface. Ils peuvent provenir aussi des impuretés absorbées à la surface du semiconducteur.

La figure (1.9) suivante représente le diagramme d'énergie d'un contact MS de type n en présence des états de surface. D'abord la charge globale en surface est nulle, mais l'équilibre thermodynamique n'est pas réalisé, ceci est dû à la présence des états vide, $q\phi_0$ étant le niveau de neutralité des états de surface.

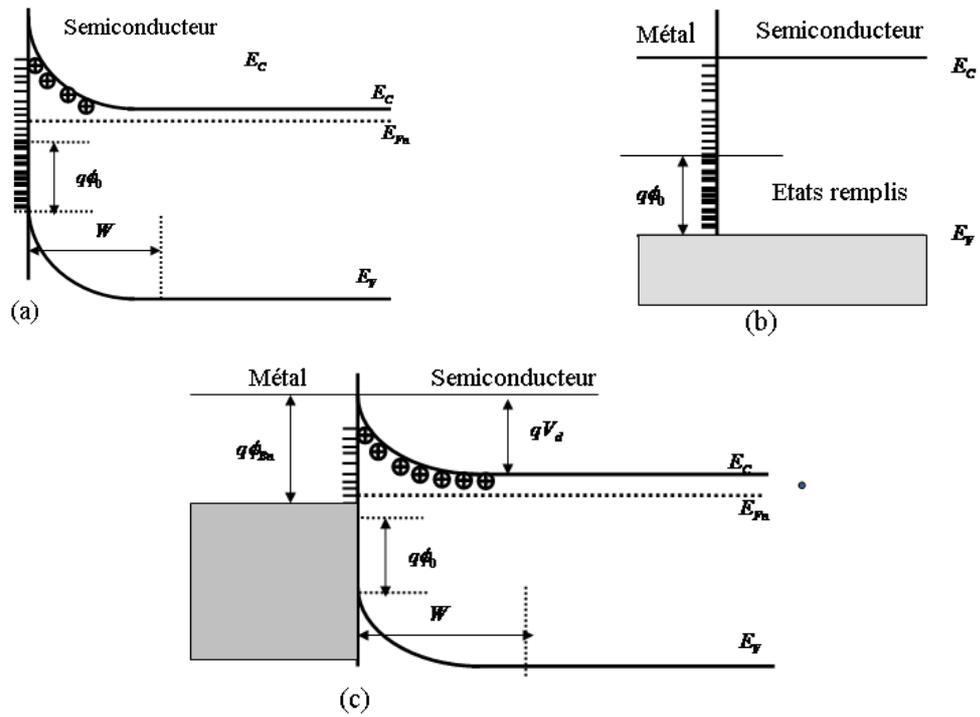


Figure (1.9) Diagramme des bandes d'énergies pour un semiconducteur de type n en présence des états de surface : (a) surface du semiconducteur en équilibre avec le volume. (b) condition de bandes plates. (c) Quand le semiconducteur est en contact avec le métal.

Quand ces états se remplissent, $q\phi_0$ s'approche de E_{Fn} , l'équilibre thermodynamique est réalisé entraînant ensuite une charge positive dans le volume qui compense la charge négative apparaissant à la surface. On assiste donc à une courbure des bandes avant la présence du métal (figure (1.9a)). Après contact, une faible fraction des électrons quitte ces états vers le métal. Mais comme la densité est importante, il en résulte un faible changement des niveaux de valences et de conduction du semiconducteur en surface et la courbure n'est pratiquement pas modifiée. Dans le cas où la densité des états de surface est très grande ($D_{it} \cong 10^{13} \text{ eV.cm}^{-2}$), Bardeen a montré que la hauteur de la barrière de potentiel est indépendante du métal. Elle a pour valeur :

$$q\phi_{Bn} = E_g - q\phi_0 \quad (1.3)$$

1-5.3 Diode réelle (Théorie de Cowley et Sze)

Les deux théories citées précédemment représentent chacune un cas limite. Dans le premier cas, la hauteur de la barrière ne dépend que des travaux de sorties des deux matériaux et dans le deuxième cas, elle dépend de la surface. Cependant,

le cas intermédiaire qui est d'ailleurs le plus fréquent, est celui où la barrière est gouvernée à la fois par les états de surface et par les travaux de sorties des deux matériaux.

A.M Cowely et S.M. Sze [13] ont proposé une théorie unifiant celle de Schottky et celle de Bardeen. Ils supposent l'existence d'une couche interrassiale mince d'épaisseur d_i entre le substrat et le métal. L'expression de la hauteur de la barrière de potentiel est alors :

$$\phi_{Bn}(V) = \gamma(\phi_m - \phi_{sc}) + (1 - \gamma) \left(\frac{E_g}{q} - \phi_0 \right) - \Delta\phi_{Bn} \quad (1.4)$$

Où $\Delta\phi_{Bn}$ représente l'abaissement de la barrière par effet de la force image (effet Schottky) avec :

$$\Delta\phi_{Bn} = \sqrt{\frac{q\zeta}{4\pi\epsilon_s}} \quad (1.5)$$

Et

$$\gamma = \frac{\epsilon_i}{\epsilon_i + q^2 d_i D_{it}} \quad (1.6)$$

ζ étant le champ électrique.

ϵ_i et ϵ_s représentent respectivement les permittivités de la couche interrassiale et du semiconducteur.

I-6 Caractéristique courant-tension (I-V) (Modèle à barrière homogène)

Les différentes façons selon lesquelles un électron est transporté à travers la jonction MS lors d'une polarisation directe sont, pour un semiconducteur de type n, représentés dans la *figure (1.10)* et les mécanismes induits sont:

- 1) Emission des électrons vers le métal par-dessus de la barrière.
- 2) Courant dû au passage des électrons par effet tunnel.
- 3) Recombinaison dans la zone de charge d'espace.
- 4) Recombinaison dans la région neutre.

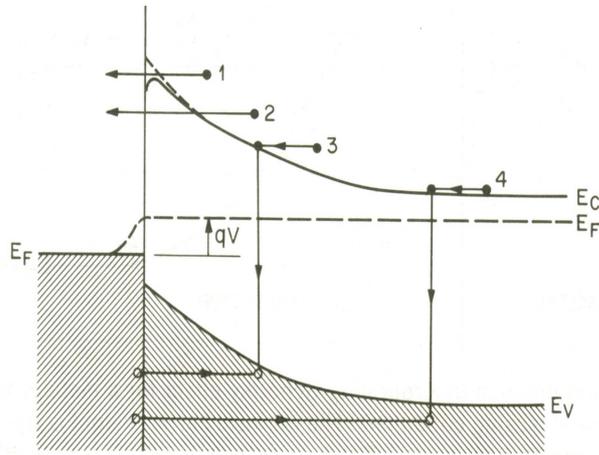


Figure (1.10): Mécanismes de transport dans la diode Schottky.

I-6.1 Emission par-dessus la barrière

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

I-6.1.1 Théorie de la diffusion

Proposé par Schottky et Spenke en 1939 [14], cette théorie suppose que les électrons migrent du semiconducteur vers le métal par dessus la barrière en traversant la zone appauvrie du semiconducteur, ce qui restreint le courant direct. En effet ce dernier est limité par la diffusion des porteurs à travers le champ électrique de la zone de charge d'espace à cause du libre parcours moyen des électrons qui est faible devant la largeur de la région de déplétion.

L'hypothèse considérée est qu'aux extrémités de la zone de charge d'espace, la concentration des électrons est celle de l'équilibre et le quasi niveau de Fermi dans le semiconducteur coïncide avec le niveau de Fermi du métal (figure (1.11b)). L'expression de la densité de courant calculé suivant cette hypothèse s'écrit :

$$J = qN_c \mu_n \zeta_{\max} \exp\left(-\frac{q\phi_B}{kT}\right) \left(\exp\left(\frac{qV}{kT}\right)\right) \quad (1.7)$$

Où J est la densité de courant, N_c est la densité effective des états, μ_n est la mobilité des électrons, ζ_{\max} est le champ électrique maximum dans la jonction, ϕ_{Bn} est la barrière de potentiel et V la tension appliqué.

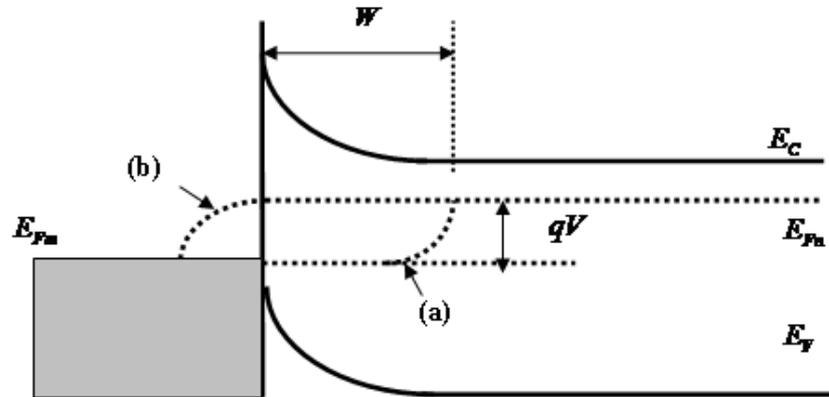


Figure (1-11): Position des quasi niveaux de Fermi selon (a) théorie de diffusion et (b) théorie de l'émission thermoïonique.

Cette dernière expression peut être réécrite sous la forme suivante :

$$J = J_s(V) \left(\exp\left(\frac{qV}{kT}\right) \right) \quad (1.8)$$

Cette expression montre que le courant de saturation dépend de la tension appliqué, alors que l'expérience montre l'effet contraire, ce qui amené les auteurs à proposer d'autres modèles tel que l'émission thermoïonique de Bethe [15, 16]

1-6.1.2 Théorie de l'émission thermoïonique

Les électrons du semiconducteur qui traversent la barrière de potentiel pour pénétrer dans le métal ne sont pas en équilibre avec les électrons de ce dernier, Ce sont des électrons " *chauds*", mobiles dans le métal qui perdent leurs énergies à la suite des collisions. Le quasi niveau de Fermi des électrons du semiconducteur s'abaisse pour rejoindre le niveau E_{Fm} à l'intérieur du métal comme le montre la dernière figure (1.11b). Le quasi-niveau de Fermi est plat dans la zone de charge d'espace et l'expression de la densité du courant calculé suivant cette hypothèse est :

$$J = A_n^* T^2 \exp\left(-\frac{q\phi_{Bn}}{kT}\right) \exp\left(\left(\frac{qV}{kT}\right) - 1\right) \quad (1.9)$$

Où A_n^* est appelée constante de Richardson. Elle a pour expression

$$A^* = \frac{4\pi q m_0 k^2}{h^3} \quad (1.10)$$

m_0 est la masse au repos de l'électron, h est la constante de Planck et k est la constante de Boltzmann. On peut réécrire la dernière expression comme suit :

$$J = J_s \left(\exp\left(\frac{qV}{kT}\right) - 1 \right) \quad (1.11)$$

Où J_s est le courant de saturation indépendant de la tension appliqué

I-6.1.3 Combinaison des deux théories

C'est la théorie unifié de Cowley et Sze établie en 1966 [13]. Elle tient compte des interactions électron-phonon, de l'effet de la force image et de la vitesse de recombinaison au sommet de la barrière. L'expression du courant est la même précédemment, la différence réside au niveau du courant de saturation comme le montre la relation suivante :

$$J = A_n^{**} T^2 \exp\left(-\frac{q\phi_{Bn}}{kT}\right) \exp\left(\left(\frac{qV}{kT}\right) - 1\right) \quad (1.12)$$

Avec

$$A_n^{**} = \frac{\theta_n A_n^*}{1 + \theta_n \frac{v_{Rn}}{v_{Dn}}} \quad (1.13)$$

θ_n : étant le coefficient de transmission tunnel des porteurs majoritaires (électrons).

v_{Rn} est la vitesse de recombinaison effective des électrons au sommet de la barrière.

v_{Dn} est la vitesse de diffusion effective.

Si $v_{Dn} \ll v_{Rn}$, le processus de diffusion est dominant

Si $v_{Dn} \gg v_{Rn}$, celui de l'émission thermoïnique est dominant.

I-6.2 Courant tunnel

Lorsque le semi-conducteur est fortement dopé ou la diode opère à basses températures, le courant tunnel peut devenir le phénomène de transport dominant. Si tel est le cas, il s'écrit sous la forme

$$J_t = J_s \exp\left(\frac{V}{E_0}\right) \quad (1.14)$$

Avec

$$E_0 = E_{00} \coth\left(\frac{qE_{00}}{kT}\right) \quad (1.15)$$

Et

$$E_{00} = \frac{q\hbar}{2} \sqrt{\frac{N_D}{\epsilon_s m_e}} \quad (1.16)$$

Si on pose $n = qE_0/kT$, (n , qu'on verra plus loin, est appelé facteur d'idéalité)

$$n = \frac{qE_0}{kT} = \frac{qE_{00}}{kT} \coth\left(\frac{qE_{00}}{kT}\right) \quad (1.17)$$

Le courant peut s'écrire sous la forme générale

$$J = J_s \exp\left(\frac{qV}{n kT}\right) \quad (1.18)$$

Le facteur d'idéalité n est généralement supérieur à deux dans le cas du courant tunnel.

I-6.3 Rapport d'injection de trous

La diode Schottky est un composant unipolaire, c'est à dire qu'un seul type de porteur assure la conduction, l'apport de l'autre type est négligeable. Cependant, le diagramme d'énergie montre qu'à l'interface le semi-conducteur peut changer de type et on peut y avoir une accumulation de porteurs minoritaires. On introduit un paramètre γ qui mesure le rapport du courant minoritaire au courant total. Il donne une information sur l'effet de négliger le courant minoritaire.

Le courant minoritaire est donné par la relation

$$J_p = \frac{qn_i^2 D_p}{N_D L_p} \left(\exp\left(\frac{qV}{kT}\right) - 1 \right) \quad (1.19)$$

Le rapport γ sera

$$\gamma = \frac{J_n}{J_n + J_p} \approx \frac{J_n}{J_p} = \frac{qD_p n_i^2}{N_D L_p A^* T_2 \exp\left(\frac{-q\phi_{Bn}}{kT}\right)} \quad (1.20)$$

Ce résultat indique que le rapport augmente avec la hauteur de la barrière de potentiel ϕ_{Bn} et diminue avec la densité des donneurs N_D .

I-6.4 Courant de recombinaison dans la zone de charge d'espace (ZCE)

En réalité, la ZCE est le siège de mécanismes de recombinaison qui génèrent un courant J_{rec} qui va s'ajouter aux expressions précédentes. En polarisation directe, l'expression de ce courant est comme suit

$$J_{rec} = J_r \exp\left(\frac{qV}{2kT}\right) \quad (1.21)$$

I-6.5 Courant de fuite

Les effets de surface sont dus principalement aux charges ioniques qui se trouvent à la surface du semi-conducteur. Ces charges introduisent un canal de surface qui sera le siège d'un courant de fuite dont la valeur est très faible par rapport aux autres composantes et qui se manifeste principalement en polarisation inverse et aux basses tensions. On modélise ce courant par une résistance parallèle à la diode R_p ou une conductance G_p .

I-6.6 Pertes ohmiques

On a supposé que la tension, V , appliquée à la jonction apparaît en totalité dans la SCR. Mais en réalité, il existe des chutes de tension aux niveaux des régions neutres. Ces chutes de tension affaiblissent considérablement l'injection

des charges et par conséquent le courant surtout pour les tensions positives assez grandes. Ils sont modélisés par une résistance série (R_s). La tension appliquée à la jonction sera donc $V = V_a - R_s I$

I-6.7 Modèle à barrière homogène

Tenant en compte de toutes ces considérations : de la résistance série et parallèle, des pertes ohmique, du courant de fuite et du courant de recombinaison on peut modeler la caractéristique $I-V$, d'une diode Schottky à barrière homogène de surface (S) par la relation suivante :

$$I = I_s \left[\exp\left(\frac{q(V - IR_s)}{n kT}\right) - 1 \right] + G_p (V - IR_s) \quad (1.22)$$

I-7. Modèle à barrière inhomogène

Au lieu que le courant passe à travers une distribution spatiale homogène, plusieurs formes de distributions ont été choisi [17-22]. On note que la distribution la plus utilisé est celle de forme gaussienne.

I_7.1 Modèle à distribution gaussienne de ϕ_B

Le courant total à travers une diode à barrière Schottky avec une distribution spatiale à barrière inhomogène [23]:

$$I(V) = \int i(V, \phi) \rho(\phi) d\phi \quad (1.23)$$

Avec $i(V, \phi)$ est le courant élémentaire d'émission thermoïonique (TED) à la tension V et pour une hauteur de barrière ϕ est donné par :

$$i(V, \phi) = SA^{**} T^2 \exp(-\beta\phi) \left[\exp\{\beta(V - iR_s)\} - 1 \right] \quad (1.24)$$

Ici $\beta = q/kT$ est la tension thermique inverse, A^{**} est la constante de Richardson, S est la surface de la diode, k est la constante de Boltzmann et T est température.

$\rho(\phi)$ est la fonction de distribution normalisé décrivant la variation spatiale des hauteurs de barrières (BHs). Dans le cas d'une distribution gaussienne des BHs avec une valeur moyenne ϕ_B et une déviation standard σ_s , $\rho(\phi)$ est donné par [24, 25] :

$$\rho(\phi) = \frac{1}{\sigma_s \sqrt{2\pi}} \exp \left[-\frac{(\phi - \phi_B)^2}{2\sigma_s^2} \right] \quad (1.25)$$

Par substitution les deux dernières équations (1.25) et (1.24) dans l'équation (1.23) et faisant l'intégration de $-\infty$ à $+\infty$, on obtient [26-28]:

$$I = I_s \times \left\{ \exp \left[\beta (V - IR_s) \right] - 1 \right\} \quad (1.26)$$

Où $\beta = \frac{q}{kT}$ et I_s est le courant de saturation exprimé par :

$$I_s = A_d A^{**} T^2 \exp(-\beta \phi_{ap}) \quad (1.27)$$

ϕ_{ap} est la hauteur de la barrière apparente exprimé par [28, 29] :

$$\phi_{ap} = \phi_B(T=0) - \frac{\beta \sigma_s^2}{2} \quad (1.28)$$

Cette dernière expression de la hauteur de barrière apparente a une limite d'application surtout aux basses températures [26] et que l'expression suivante est valable pour toute la gamme de température :

$$\phi_{ap} = \left(-\frac{1}{\beta} \right) \ln \left(\int_0^{2\phi_m} \exp(-\beta \phi) \rho(\phi) d\phi \right) \quad (1.29)$$

Tenant en compte du courant de recombinaison, l'équation (1.26) devient :

$$I = I_s \times \left\{ \exp \left[\frac{\beta}{n} (V - IR_s) \right] - 1 \right\} \quad (1.30)$$

I_7.2 Modèle de Werner

En outre de la variation gaussienne de la hauteur de la barrière équation (2.9) Werner et Güttler [23] ont supposé une dépendance linéaire avec la tension de polarisation V des deux paramètres de la gaussienne $\phi_B(T=0)$ et σ_s , tel que $\phi_B(T) = \phi_B(T=0) + \rho_2 V + \alpha T$ et $\sigma_s = \sigma_{s0} + \rho_3 V$ [30], où ρ_2 et ρ_3 sont les coefficients de tension et α est le coefficient de température. Ces coefficients qualifient la distribution de la hauteur de la barrière. L'équation (1.28) de la hauteur de la barrière apparente s'écrit ainsi comme : [23, 31]:

$$\varphi_{ap} = \varphi_B(T=0) - \frac{\beta \sigma_{s0}^2}{2} + \alpha T \quad (1.31)$$

Cependant, le facteur d'idéalité est donné par l'expression [23, 31] :

$$\left(\frac{1}{n_{ap}} - 1 \right) = \rho_2 - \beta \sigma_{s0} \rho_3 \quad (1.32)$$

I_7.3 Modèles de Tung et la caractéristique I-V-T

Le modèle de Tung [30, 32-34] suppose l'existence à la surface d'une densité $\rho_p = C_1 / S$ de "patches" de forme circulaire ayant différentes interfaces intégrées dans la hauteur de barrière $\phi_{BH} = \phi_B^0$ figure (1.12).

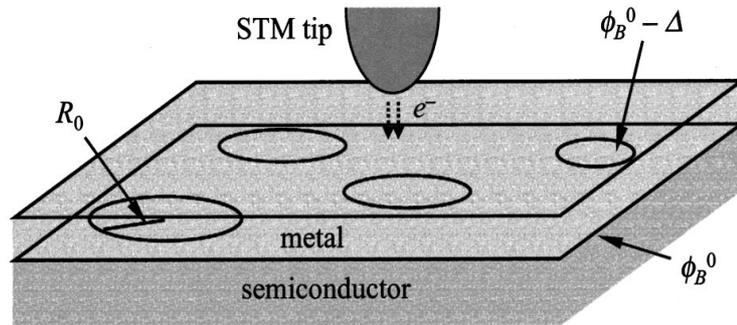


Figure (1.12) : Modèle schématique de Tung représentant une distribution aléatoire des patches de forme circulaire de taille R_0 et de hauteur de barrière $\phi_{BL} = \phi_B^0 - \Delta$ sur le contact originale de BHs $\phi_{BH} = \phi_B^0$.

Chaque **patch** est caractérisé par deux paramètres ; le rayon R_0 et le potentiel Δ par rapport à la barrière de la surface de la diode ϕ_B^0 . Cependant, lors de l'établissement de l'expression du courant (I-V) Tung a défini un nouveau paramètre γ appelé paramètre du "patch" donné par l'expression suivante :

$$\gamma = 3(R_0^2 \Delta)^{1/3} \quad (1.33)$$

Il semble que le modèle de distribution gaussienne de γ présente un system physique réel [35-38] donc le plus utilisé. La fonction de densité de probabilité est donnée par :

$$P(\gamma) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_\gamma^2}} \times \exp\left(-\frac{\gamma^2}{2\sigma_\gamma^2}\right) \quad (1.34)$$

Tung suppose que les deux barrières $\phi_{BH} = \phi_B^0$ (High Barrier) et $\phi_{BL} = \phi_B^0 - \Delta$ (Lower Barrier) simulent un système réel. La variation de la hauteur de barrière ϕ_{BH} correspondant à la variation de hauteur de barrière au point selle (point *S* in figure (1.13a)).

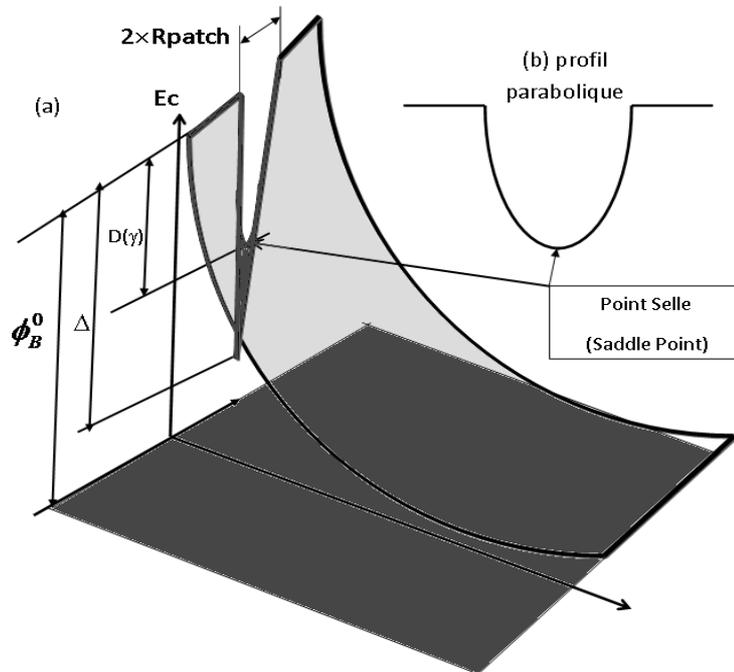


Figure (1.13) : (a) Simulation de la bande de conduction montrant le point selle (Saddle point) $\phi_{BL} = \phi_B^0 - \Delta$. (b) profil parabolique

Le courant de la diode d'un patch à travers le profile parabolique figure (1,13b) est :

$$I_{patch}(\gamma) = A^*T^2 \frac{4\pi\gamma}{9} \alpha(V)^2 \times \exp(-\beta(\phi_B^0 - D(\gamma))) \times [\exp(V - IR_s) - 1] \quad (1.35)$$

Où $\beta = q / k_B T$. L'expression du courant total pour une distribution gaussienne, pour une surface A_d de la diode et pour un nombre C_1 de patches est exprimé par :

$$I = I_H + I_L = I_{background} + C_1 A_d \int_0^\infty P(\gamma) \times I_{patch}(\gamma) d\gamma \quad (1.36)$$

L'expression du courant totale suivant le modèle de Tung est :

$$I = A_d A^* T^2 \exp(-\beta\phi_B^0) [\exp(\beta(V - IR_s)) - 1] \times \left\{ (1 - Cp) + (2\pi\rho_p \sigma_\gamma^2 / 9\alpha(V)) \times \exp(0.5\beta^2 \sigma_\gamma^2 \alpha(V)^2) \left[1 + \operatorname{erf} \left(\beta\sigma_\gamma \alpha(V) / \sqrt{2} \right) \right] \right\} \quad (1.37)$$

Dans cette dernière expression, Cp représente et le taux de recouvrement de tous les patches, donné par

$$Cp = \sum_\gamma S_{patch}(\gamma) / A_d = \sum_\gamma \pi [R_{patch}(\gamma)]^2 / A_d \quad (1.38)$$

avec $R_{patch}(\gamma) = \frac{1}{3} \left(2W / V_{bb} \right)^{2/3} \sqrt{\gamma D(\gamma)}$

Le courant à travers les petites régions patches est influencé par la région environnante ayant une la plus grande hauteur de barrière. Ceci donne une hauteur de barrière Schottky effective ayant une surface effective qui dépende des paramètres des patches et de tension de polarisation [34], La valeur maximale du potentiel $D(\gamma)$ par rapport à celui du background ϕ_B^0 est donnée par $D(\gamma) = \gamma \alpha(V)$, où $\alpha(V) = (V_{bb} / \eta)^{1/3}$ et où $V_{bb} = \phi_B^0 - (E_c - E_F)_{neutral} - V$; est la différence des niveaux de Fermi rapport au minimum de la bande de conduction. et $\eta = \eta = \epsilon_0 \epsilon_{SiC} / qN_d$.

En considérant que les patches couvrent relativement une faible fraction de la surface de la diode et en négligeant la contribution de la fonction erreur (erf)

devant 1 en dernier terme de l'équation (1.37). L'expression du courant se simplifie comme [39]:

$$\begin{cases} I = A_d A^{**} T^2 \exp(-\beta \phi_B^0) \times (\exp(-\beta(V - IR_s)) - 1.0) \times (1 + P_o) \\ \text{avec } : P_o = \frac{8\pi\rho_p \sigma^2}{9} \alpha(V) \times \exp(0.5 \times \beta^2 \sigma^2 \alpha(V)^2) \end{cases} \quad (1.39)$$

Notons que Le modèle de distribution gaussienne de γ est le plus utilisé car il semble qu'il présente le cas d'un system physique réel. Néanmoins, on trouve dans la littérature l'utilisation de la fonction de densité de probabilité uniforme des patches.

$$P(\gamma) = 1 \quad (1.40)$$

Le courant totale de la diode est donc dû en partie au courant d'émission thermoïonique et dans l'autre partie au courant des patches [40]

$$\begin{aligned} I &= I_H + I_L \\ \text{avec} & \quad (1.41) \\ \begin{cases} I_H = (1 - Cp) \cdot SA^* T^2 \exp(-\beta \phi_B^0) [\exp(\beta(V - I_H R_s)) - 1] \text{ et} \\ I_L = \frac{4\pi C_1 \gamma}{9} \alpha(V)^2 A^* T^2 \exp[-\beta(\phi_B^0 - D(\gamma))] \times [\exp(\beta(V - I_L R_{sp})) - 1] \end{cases} \end{aligned}$$

I-8 Conclusion

La caractéristique $I-V$, d'une diode Schottky à barrière Schottky est décrite par différents modèles à savoir le modèle à barrière homogène équation (1.22) et les modèles à barrière inhomogène tels que : le modèle à barrière inhomogène de forme gaussienne (équations (1.29) et (1.30)), le modèle à barrière inhomogène de Werner (équations (1.31) et (1.32)) et le modèle à barrière inhomogène de Tung (équations (1.37), (1.39) et (1.41)).

Ces différents modèles seront utilisées pour l'extraction des différents paramètres des diodes Schottky à base de SiC et qui sera l'objet du prochain chapitre.

CHAPITRE II

EXTRACTION DES PARAMETRES

ET ANALYSE DES RESULTATS

DES DIODES SCHOTTKY

A BASE DE 4H-SiC

Chapitre d'équation (Suivant) Section 2

II-1 Introduction

Dans ce chapitre, la méthode des algorithmes génétique (AGs) est appliquée pour l'extraction des paramètres de la caractéristique courant-tension (I-V) des diodes Schottky à base du 4H-SiC. En commençant par supposer que la barrière de potentiel est homogène, nous procédons à décrire les caractéristiques $I-V$ de ces diodes par le modèle thermoionique successivement avec quatre puis trois paramètres (en négligeant la conductance parallèle). Ensuite nous ferons une étude en température de quelques diodes où le cas de la barrière inhomogène sera traité.

II-2 Principe des algorithmes génétiques (AGs)

Les algorithmes génétiques tentent de simuler le processus d'évolution naturelle suivant le modèle darwinien dans un environnement donné. Ils utilisent un vocabulaire similaire à celui de la génétique naturelle. Cependant, les processus naturels auxquels ils font référence sont beaucoup plus complexes. On parlera ainsi d'individu dans une population. L'individu est représenté par un chromosome constitué de gènes qui contiennent les caractères héréditaires de l'individu. Les principes de *sélection*, de *croisement*, de *mutation* s'inspirent des processus naturels de même nom [41].

Pour un problème d'optimisation donné, un individu représente un point de l'espace d'états, une solution potentielle. On lui associe la valeur du critère à optimiser, son *adaptation*. On génère ensuite de façon itérative figure (2.1) des populations d'individus sur lesquelles on applique des processus de sélection, de croisement et de mutation. La sélection a pour but de favoriser les meilleurs éléments de la population pour le critère considéré (les mieux *adaptés*), le croisement et la mutation assurent l'exploration de l'espace d'états. On commence par générer une population aléatoire d'individus. Pour passer d'une génération k à la

génération $k+1$, les opérations suivantes sont effectuées. Dans un premier temps, la population est reproduite par *sélection* où les bons individus se reproduisent mieux que les mauvais. Ensuite, on applique un *croisement* aux paires d'individus (les parents) d'une certaine proportion de la population (probabilité P_c , généralement autour de P_c) pour en produire des nouveaux (les enfants). Un opérateur de *mutation* est également appliqué à une certaine proportion de la population (probabilité P_m , généralement très inférieure à P_c). Enfin, les nouveaux individus sont évalués et intégrés à la population de la génération suivante². Plusieurs critères d'arrêt de l'algorithme sont possibles : le nombre de générations peut être fixé a priori (temps constant) ou l'algorithme peut être arrêté lorsque la population n'évolue plus suffisamment rapidement.

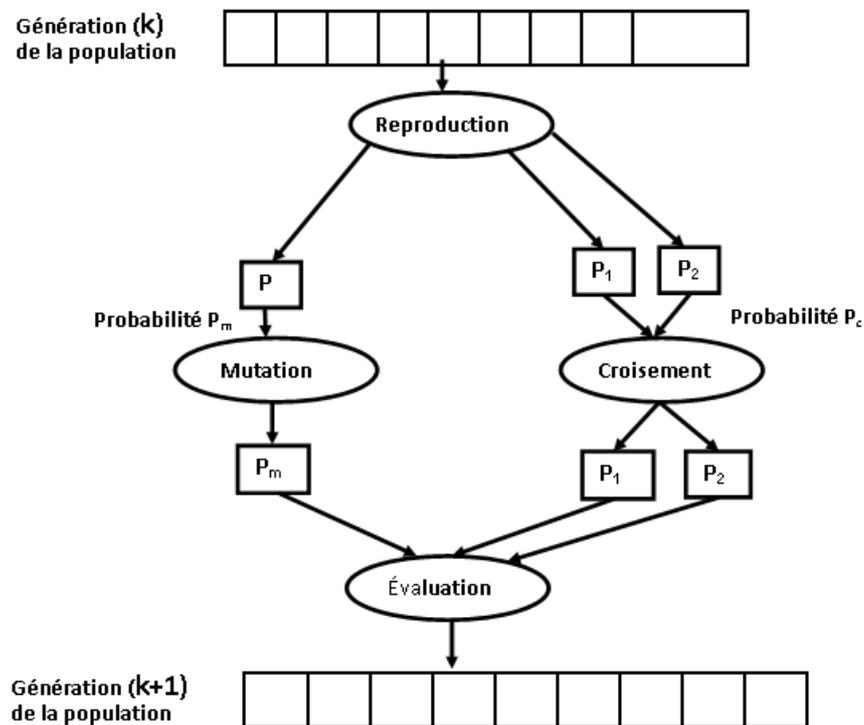


Figure 2.1 : Principe général des algorithmes génétiques

Pour utiliser un algorithme génétique sur un problème d'optimisation on doit donc disposer de la fonction d'adaptation, d'un principe de codage des individus, d'un mécanisme de génération de la population initiale et d'opérateurs permettant de diversifier la population au cours des générations et d'explorer l'espace de recherche.

II-2.1. Fonction d'adaptation, fonctions objectif

Un algorithme d'optimisation nécessite généralement la définition d'une fonction rendant compte de la convenance des solutions potentielles, à partir des grandeurs à optimiser. Il s'agit de la *fonction d'adaptation f* (ou *fitness function* en terminologie anglo-saxonne). La fonction *f* doit donc traduire en langage mathématique le désir de l'utilisateur.

II-2.2. Codage des variables

Nous utilisons dans notre algorithme un codage binaire. C'est-à-dire qu'un gène est un entier long (32 bits). Un chromosome est un tableau de gènes figure (2.2b). Un individu est un tableau de chromosomes. La population est un tableau d'individus. On aboutit à une structure présentant cinq niveaux d'organisation figure (3.2a), d'où résulte le comportement complexe des AGs.

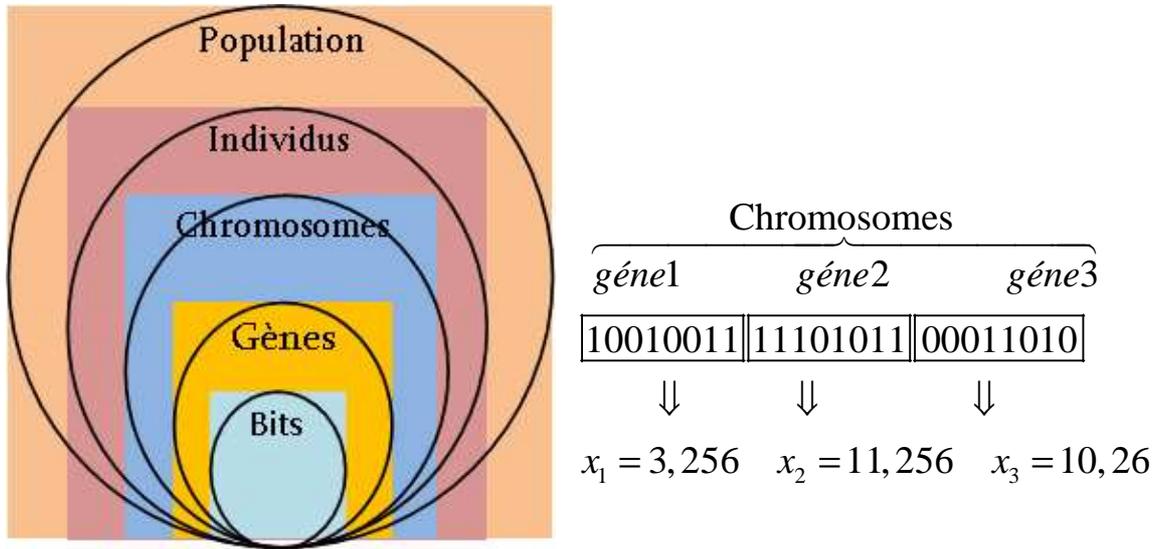


Figure (2.2) : (a) les cinq niveaux d'organisation de notre Algorithme Génétique. (b) illustration schématique du codage des variables d'optimisation x_i .

Rappelons que dans cette étude les n variables (paramètres à calculés) sont supposées réels. Nous considérons un espace de recherche fini :

$$x_{i \min} \leq x_i \leq x_{i \max} \quad \forall i \in [1, n]$$

Afin de coder nos variables réelles en binaire, nous discrétisons l'espace de recherche. Ainsi un codage sur 32 bits implique une discrétisation des intervalles en $g_{max}=2^{32}-1= 4\ 294\ 967\ 295$ valeurs discrètes. A chaque variable réelle x_i on associe donc un entier long g_i

$$g_i = \sum_{j=1}^{31} b_j 2^j \quad \text{où } 0 \leq g_i \leq g_{max} \quad \forall i \in [1, n]$$

Les formules de codage et décodage sont alors les suivantes :

$$g_i = \frac{x_i - x_{i\min}}{x_{i\max} - x_{i\min}} \cdot g_{max} \quad (2.1)$$

$$x_i = x_{i\min} + (x_{i\max} - x_{i\min}) \cdot \frac{g_i}{g_{max}}$$

II-2.3. Génération de la population

La première étape de l'algorithme est la génération de la population, c'est-à-dire le choix des composants de départ que nous allons faire évoluer. On pourrait prendre des individus (des paramètres) régulièrement répartis dans l'espace. Néanmoins, une initialisation aléatoire est plus simple à réaliser : les valeurs g_i des gènes sont tirées au hasard selon une distribution uniforme.

II-2.4. Sélection_ élimination

Nous appelons *génération* la population à un instant t donné. Une fois réalisée l'évaluation de la génération, on opère une sélection à partir de la fonction d'adaptation. Seuls les individus passant l'épreuve de sélection peuvent accéder à la *génération intermédiaire* et s'y reproduire. En fait, cette génération intermédiaire est deux fois plus petite ($N/2$ valeurs) que la génération dont elle est issue. Notre algorithme étant conçu de façon à ce que chaque couple d'individus parents donne naissance à deux enfants, nous aboutissons à nouveau à une génération entière à l'instant $t+1$.

N/2-élitisme : les individus sont triés selon leur fonction d'adaptation. Seule la moitié supérieure de la population, correspondant aux meilleures valeurs, est

sélectionnée. Nous avons pu constater que cette méthode induisait une convergence prématurée de l'algorithme : la pression de sélection est trop forte. Il est en effet nécessaire de maintenir une diversité génétique suffisante dans la population, celle-ci constituant un réservoir de gènes pouvant être utiles par la suite. En effet, tout individu peut transmettre à sa descendance des gènes (paramètres de composant) qui, une fois combinés avec d'autres, peuvent se révéler intéressants. Nous avons donc essayé la méthode suivante.

Sélection par tournoi : deux individus sont choisis au hasard et combattent (on compare leurs fonctions d'adaptation) pour accéder à la génération intermédiaire. Le plus adapté l'emporte avec une probabilité $0,5 < p \leq 1$, que nous avons généralement prise égale à 1 (une valeur inférieure permet de réduire la pression de sélection si nécessaire). Cette étape est répétée jusqu'à ce que la génération intermédiaire soit remplie ($N/2$ composants). Il est tout à fait possible que certains individus participent à plusieurs tournois : s'ils gagnent plusieurs fois, ils auront donc droit d'être copiés plusieurs fois dans la génération intermédiaire, ce qui favorisera la pérennité de leurs gènes. Les résultats de ce chapitre ont été obtenus avec cette dernière méthode, à laquelle nous avons associé une procédure d'élitisme : si par hasard l'individu le plus adapté (le meilleur paramètre) n'a pas été sélectionné, il est copié d'office dans la génération intermédiaire à la place d'un individu choisi aléatoirement.

II-2.5. Opérateur de croisement

Une fois la génération intermédiaire à moitié remplie, les individus sont aléatoirement répartis en couples. Les chromosomes (ensembles de paramètres) des parents sont alors copiés et recombinaison de façon à former deux descendants possédant des caractéristiques issues des deux parents. La probabilité d'un croisement est alors comprise entre 0 et 1 strictement.

II-2.6. Opérateur de mutation

De façon aléatoire, un gène peut, au sein d'un chromosome être substitué à un autre. De la même manière que pour les croisements, on définit ici un taux de mutation lors des changements de population qui est généralement compris entre

0,001 et 0,01. Il est nécessaire de choisir pour ce taux une valeur relativement faible de manière à ne pas tomber dans une recherche aléatoire et conserver le principe de sélection et d'évolution. La mutation sert à éviter la convergence vers un extremum local

II-3 Application des AGs pour l'extraction des paramètres de la caractéristique I-V des diodes à bases de 4H-SiC

II-3.1 Méthode de fabrication des échantillons

Les échantillons que nous allons étudier sont des diodes Schottky fournies par Cree Research Inc, réalisées sur un substrat en 4H-SiC *type-n*: (0001) figure (2.3), la face Si orientée de 8° suivant la direction $[11\bar{2}0]$ avec une résistivité spécifique dans la gamme de 17 jusqu'à 24 m Ω cm. Les matrices ont une couche épitaxiale de *type-n* avec une épaisseur approximative de 10 μ m et une concentration en donneurs dans la gamme 8×10^{15} cm $^{-3}$ à 13×10^{15} cm $^{-3}$.

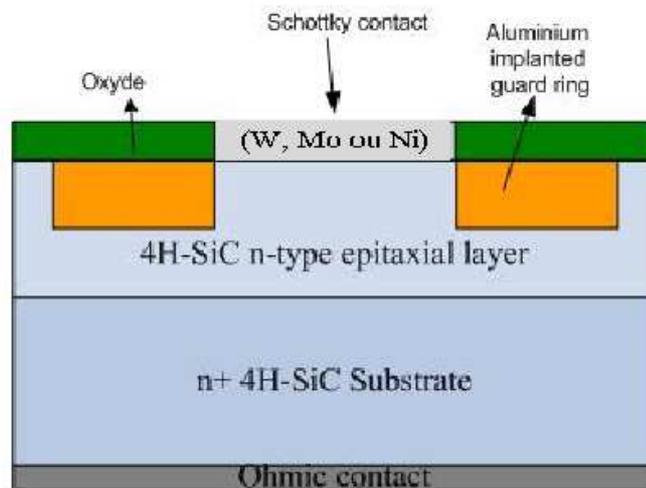


Figure 2.3 : Le diagramme de la section des diodes à base de carbure de silicium (SiC)

Un oxyde de 42 nm thermiquement développé sur la couche épitaxiale a servi comme couche de passivation pour les régions autour du contact Schottky, l'oxydation a été faite en milieu ambiant humide à 1150°C pendant 4 heures et a été suivie d'un recuit dans l'azote (N₂) ambiant pendant 30 minutes. Avant oxydation, la matrice a été nettoyée dans une solution de H₂SO₄, (96%), et H₂O₂, (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 SiO₂ 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. L'implantation ionique de l'aluminium et du carbone à différentes énergies et différentes doses pour la formation des anneaux de gardes a été faite à température ambiante en utilisant l'implanteur d'ion Varian 350D. Pour quelques échantillons, l'implantation a été suivie d'un recuit à la température de 1300°C pendant 30 minutes. Un contact métallique de 2500 Å a été formé en molybdène, en tungstène et en nickel par "e-beam déposition", 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 la solution tampon HF. Les contacts Schottky ont géométrie circulaire variant de 100µm à 300µm.

Les mesures ont été faite avec une source et une source de mesure Keithley 237 qui est capable de manipuler des tensions allant jusqu'à 1100V. Toutes ces mesures ont été faites pour chaque métal et en fonction

- de la température.
- Densité de l'implantation du carbone dans l'anneau de garde.

II-3.2 Effets à étudier des échantillons réalisés

Les échantillons dont nous voulons extraire les paramètres et étudier les effets de dopage et de géométries et de température pour ces diodes

- **Diodes au molybdène (Mo/4H-SiC)** : Les caractéristiques I-V sont relevés à des températures (30°C, 50°C, 75°C; 100°C; 125°C; 150°C, 175°C ; 200°C et 225°C). L'étude porte sur l'étude de l'effet de la température et du dosage des anneaux de gardes, de géométrie D/r: 150/50 µm. A cette géométrie correspond quatre échantillons de densité d'implantation du carbone dans les anneaux de

gardes, ayant pour valeurs respectivement: (a) $12 \times 10^{11} \text{ cm}^3$, (b) $7 \times 10^{12} \text{ cm}^3$, (c) $35 \times 10^{12} \text{ cm}^3$ et (d) $175 \times 10^{12} \text{ cm}^3$

- **Diodes au Tungstène (W/4H-SiC) et au Nickel (Ni/4H-SiC)** : L'étude porte sur l'étude de l'effet de la température des diodes ayant pour géométries D/r: 200/50 μm correspondant à un dosage $35 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-3}$. Les caractéristiques I-V sont relevés à des températures (30°C, 50°C, 75°C; 100°C; 125°C; 150°C et 175°C)

II-3.3 Extraction des paramètres par le modèle à barrière homogène

Les méthodes déterministes standards d'extraction des paramètres des diodes à barrières Schottky sont plusieurs [42-47]. Dans ce travail, l'extraction par les algorithmes génétiques est la méthode indéterministes utilisée, nous avons extrait pour chaque échantillon les quatre paramètres (I_s , n , R_s et G_p) en utilisant l'équation (1.22) du chapitre précédant, dont on rappelle ici son expression:

$$I = I_s \left[\exp\left(\frac{\beta(V - IR_s)}{n}\right) - 1 \right] + G_p (V - IR_s) \quad (2.2)$$

Avec I_s est le courant de saturation donné par :

$$I_s = SA^{**} T^2 \exp(-\beta\phi_b) \quad (2.3)$$

Ici $\beta = q/kT$ est la tension thermique inverse, A^{**} qui a pour valeur pour le SiC $A^{**} = 146 \text{ Acm}^{-2} \text{ K}^{-1}$ [48] est la constante de Richardson, S est la surface de la diode, k est la constante de Boltzmann et T est température.

Notre méthode consiste à trouver les valeurs des paramètres (I_s , n , R_s et G_p) qui minimisent la somme des erreurs relatives quadratiques entre les courants expérimentaux I_i^{ex} et théoriques I_i^{th} générés par l'équation

$$z = \sum_{i=0}^{N-1} \left(\frac{I_i^{ex} - I_i^{th}}{I_i^{th}} \right)^2 \quad (2.4)$$

Le courant I_i^{th} joue le rôle de poids de pondération. Dans le but de tester la qualité des courbes calculées avec les paramètres extraits (Optimisation), on calculera la déviation standard

$$\sigma_{er} = \left[\frac{1}{N} \sum_{i=0}^{N-1} \left(\frac{I_i^{ex}}{I_i^{th}} - 1 \right)^2 \right]^{1/2} \quad (2.5)$$

N est le nombre de données expérimentales.

II-3.3.1 Diodes au Molybdène et l'effet de la température et du dosage

Les figures (2.4 a-d) présentent les courbes expérimentales (I-V-T) mesurées pour différentes valeurs de température sur l'intervalle 30°C à 175 °C, des diodes aux Molybdène (Mo/4H SiC) pour différentes valeurs de doses d'implantation du carbone pour les anneaux de gardes : (a) $12 \times 10^{11} \text{ cm}^3$, (b) $7 \times 10^{12} \text{ cm}^3$, (c) $35 \times 10^{12} \text{ cm}^3$ et (d) $175 \times 10^{12} \text{ cm}^3$.

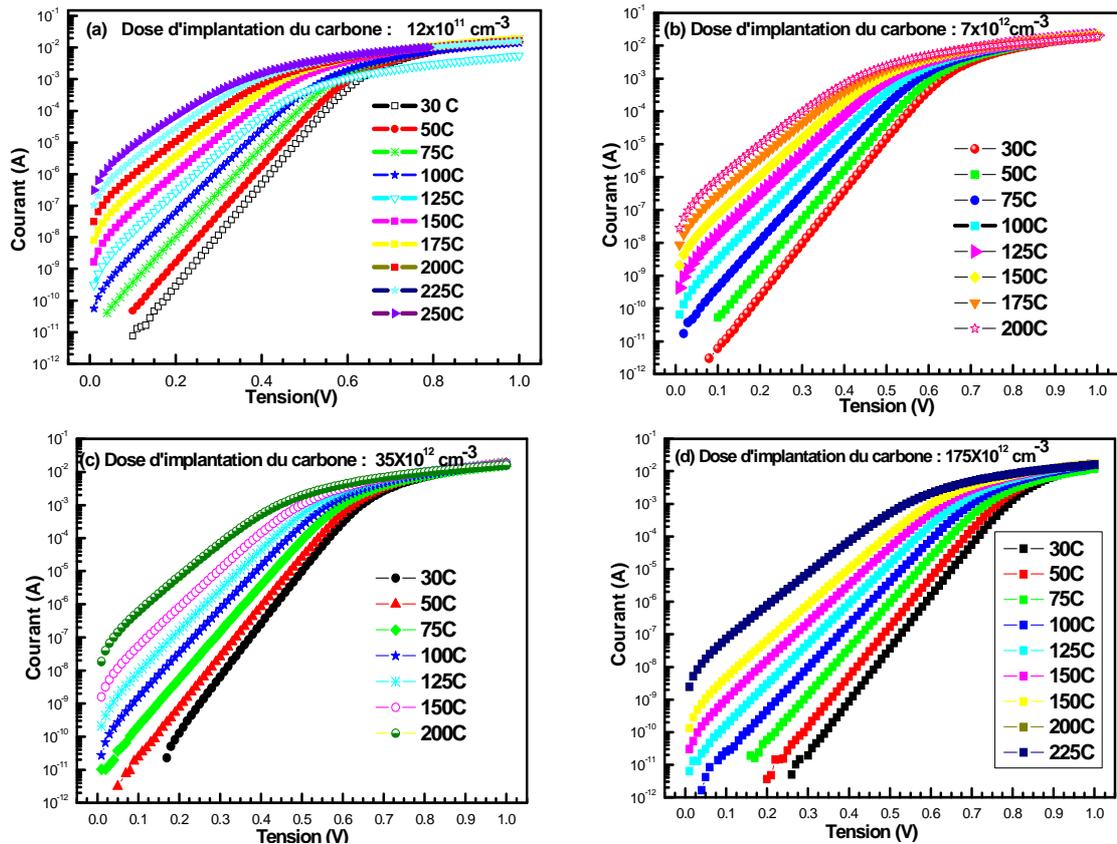


Figure (2.4) : Caractéristiques I-V des diodes Schottky au Mo/4H SiC ayant pour valeurs de densité d'implantation du carbone des anneaux de gardes respectivement: (a) $12 \times 10^{11} \text{ cm}^3$, (b) $7 \times 10^{12} \text{ cm}^3$, (c) $35 \times 10^{12} \text{ cm}^3$ et (d) $175 \times 10^{12} \text{ cm}^3$.

Le tableau (2.1) donne les valeurs des paramètres extraits de certains de ces échantillons relative aux diodes Mo/4H-SiC, ayant pour géométrie. $D \times r = 150 \times 050 \mu\text{m}$ et à partir des courbes I-V-T pour chaque échantillon.

Métal	$N_d \times 10^{12}$ (cm^{-3})	T (°C)	I_s (A)	ϕ_B (V)	n	R_s (Ω)	$G_p \times 10^{-13}$ (s)	σ_{er} (%)
Mo	1.20	30.0	1.774 E-15	0.9729	1.032	18.36	2.803	3.747
		50.0	1.447 E-14	0.9818	1.023	21.42	6.228	3.44
		75.0	1.544 E-13	0.9908	1.022	20.21	6.852	3.915
		100.0	1.463 E-12	0.9938	1.025	28.37	7.726	3.582
		125	9.385 E-11	1.001	1.029	89.54	81.59	5.363
		150	5.107 E-10	1.006	1.026	24.62	4.562	3.556
		175	9.964 E-9	1.012	1.042	29.88	4.164	4.465
		200	3.476 E-8	1.017	1.049	31.95	3.302	4.912
		225	1.083 E-7	1.021	1.042	36.47	4.228	5.441
		250	1.774E-6	0.9729	1.032	18.36	2.803	3.747
	7.00	30	1.516 E-13	0.977	1.037	15.71	3.718	3.797
		50	1.599 E-12	0.979	1.039	16.23	5.971	3.948
		75	1.883 E-11	0.9849	1.037	17.46	4.81	4.149
		100	1.618 E-10	0.9906	1.039	18.58	5.193	4.012
		125	1.162 E-9	0.9934	1.043	19.19	4.74	4.015
		150	5.818 E-8	1.001	1.041	20.53	4.317	3.896
		175	2.602 E-7	1.007	1.043	22.53	3.594	4.263
	35.00	30	8.767E-14	0.9913	1.029	17.1	2.592	8.357
		50	7.333 E-13	1.001	1.027	17.99	4.335	4.205
		75	8.528 E-12	1.009	1.023	21.24	8.616	5.096
		100	7.941 E-11	1.014	1.026	22.15	5.425	3.672
		125	5.603 E-10	1.019	1.026	21.94	4.528	3.691
		150	4.324 E-9	1.012	1.044	24.46	8.781	4.787
		200	6.382 E-8	1.031	1.043	29.77	1.463	4.155
	175.0	30	3.781E-16	1.134	1.037	9.702	4.304	7.161
		50	4.456 E-15	1.143	1.027	10.71	3.887	7.026
		75	8.265 E-14	1.148	1.023	17.71	1.39	5.145
		100	1.21 E-12	1.148	1.032	14.02	6.815	8.148
		125	1.029 E-11	1.156	1.025	14.66	5.387	3.811
		150	7.484 E-11	1.16	1.022	16.64	7.818	5.086
		175	4.04 E-10	1.168	1.019	18.26	5.973	4.156
		200	8.424 E-9	1.113	1.081	22.28	7.145	4.362
225	8.42 E-9	1.176	1.026	22.29	6.169	4.362		

Tableau (2.1): Paramètres extraits du modèle thermoionique homogène de quelques échantillons de diodes Schottky au Mo avec prise en compte de G_p .

L'interpolation est excellente comme en témoigne la figure (2.5), un exemple choisi (dosage de $12 \times 10^{11} \text{ cm}^{-3}$ et une température $T=30 \text{ }^\circ\text{C}$). Cette simulation se trouve renforcé par les bonnes déviations standards σ_{er} qui ne dépassent pas 5.0 % (voir *tableau 2.1*). Nos résultats sont en accord avec ceux obtenus dans la thèse de A. Ferhat-hamida [49], en utilisant les fonctions approximatives où une déviation standard de 4.0 % est obtenue.

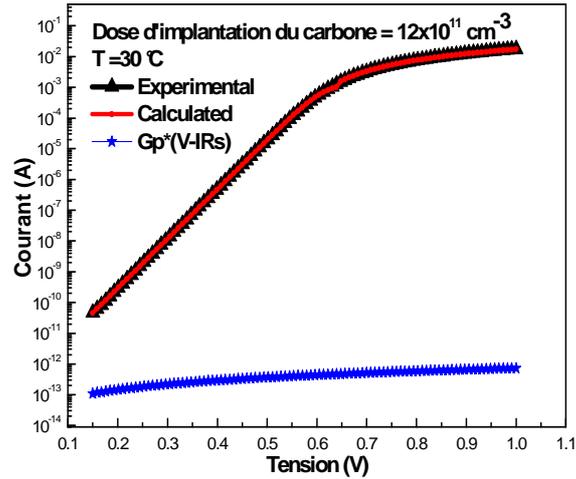


Figure 2-5 : Exemple choisi d'une courbe I-V à $T=30 \text{ }^\circ\text{C}$ expérimentale et simulée par le modèle thermoionique homogène à quatre paramètres, montrant l'effet de la conductance dans le calcul du courant total.

Les structures présentent une très faible conductance parallèle G_p de l'ordre 10^{-13} s . G_p peut être donc négligée. Les valeurs sont si faibles que le courant $G_p (V-RsI)$ est de plusieurs ordres de grandeurs plus petit que le courant total. Ceci est illustré par la figure (2.5) où nous avons représenté les deux courants pour la structure au Mo/4H-SiC. Il est évident que le rapport entre les deux augmente avec la tension de un à dix ordres de grandeurs. De ce fait, on peut négliger sans faute l'effet du paramètre de la conductance et les valeurs des paramètres calculés à partir du modèle de trois paramètres sont du même ordre de grandeur. On remarque par ces valeurs que l'utilisation des anneaux de gardes réduit considérablement le courant de fuite [50].

Les figures (2.6a) et (2.6b) montrent que la hauteur de la barrière de potentiel ϕ_B augmente linéairement et la résistance série augmente

exponentiellement avec la température. Cependant, la hauteur de la barrière de potentiel ϕ_B augmente et la résistance série R_s diminue avec la dose d'implantation du carbone aux anneaux de gardes.

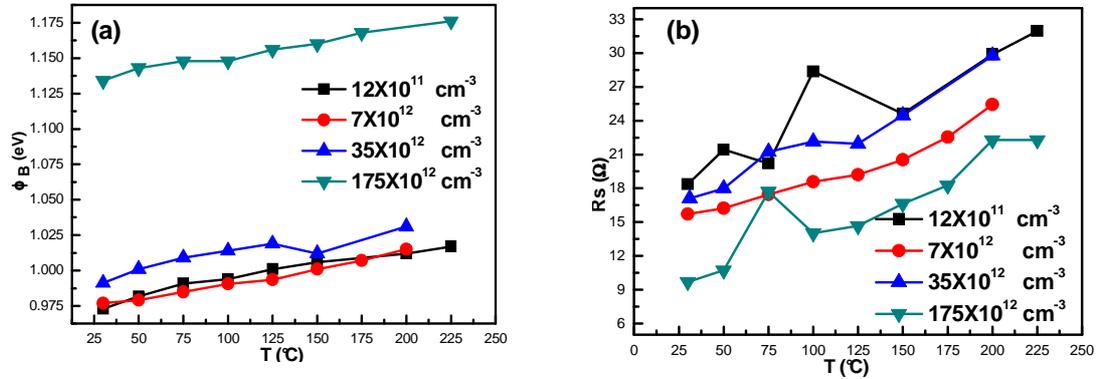


Figure (2.6) : Analyse des paramètres déterminés à partir des courbes I-V-T des diodes Mo/4H SiC pour différents dosages: (a) Variation de la hauteur de la barrière en fonction de la température. (b) Variation de la résistance série en fonction de la température.

La série de mesure (I-V-T) ayant pour dose d'implantation du carbone $7 \times 10^{12} \text{ cm}^{-3}$ a été choisi pour déterminer la hauteur de barrière de potentiel $\phi_B(T = 0^\circ K)$ et la constante de Richardson A^* à partir du graphe de $\ln(I_s/T^2) = f(q/nkT)$ de la figure (2.7a). La valeur de ϕ_{B0} d'une diode idéal est déduit à partir du graphe du graphe de $\phi_B = f(n)$ que montre la figure (2.7b).

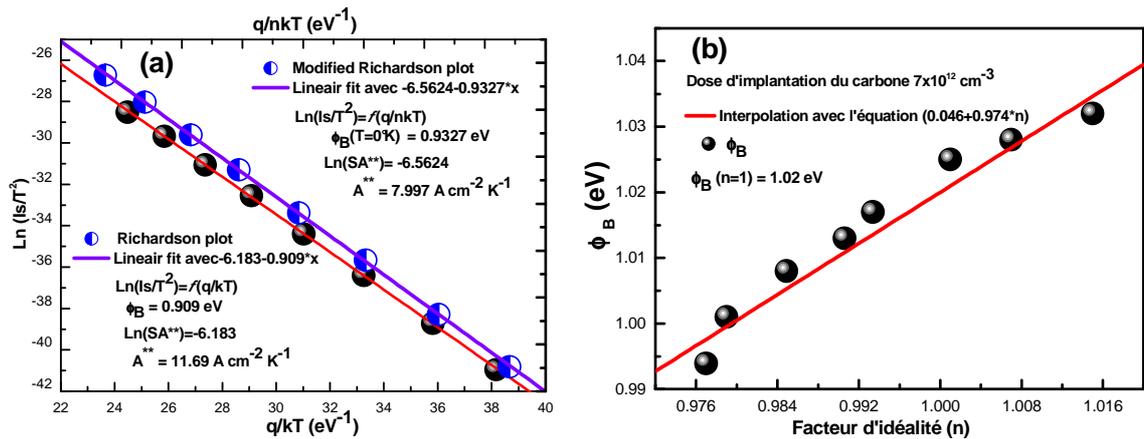


Figure (2.7) : (a) Plot de Richardson ($\ln(I_s/T^2) = f(q/kT)$) et plot modifié de Richardson ($\ln(I_s/T^2) = f(q/nkT)$). (b) Hauteur de la barrière en fonction du facteur d'idéalité ($\phi_B(n=1) = 1.02 \text{ eV}$)

Ces valeurs sont résumées dans le tableau (2.2). On constate que la valeur de la constante de Richardson déterminé est très inférieur à celui da la valeur théorique $A^{**} = 146 Acm^{-2}K^{-1}$ [48, 51]. Ce désaccord est observe dans les études des contacts Schottky a base de SiC [51-53]. Ce désaccord est attribué à la déviation des contacts Schottky réelles des contacts idéals. On recourt donc à penser à l'utilisation d'autres modèles pour expliquer cette différence [54] car le modèle à barrière homogène ne permet pas d'expliquer cette différence.

	ϕ_B ($T = 0^\circ K$)	Constante de Richardson A^{**}
Graphe $\ln(I_s / T^2) = f(\beta)$ (figure (2. 7a)).	0.909 eV	$11.69 A. cm^{-2} K^{-1}$
Graphe $\ln(I_s / T^2) = f(\beta / n)$ (figure (2. 7a)).	0.932 eV	$7.997 A. cm^{-2} K^{-1}$
Graphe de $\phi_B = f(n)$ (figure (2. 7b)).	$\phi_B (n = 1) = 1.02 eV$	

Tableau (2.2): Paramètres de la hauteur de la barrière de potentiel et de la constante de Richardson détermines a partir de l'analyse des courbes I-V-T des diodes Mo/4H SiC

II-3.3.2 Diodes au Nickel et au Tungstène et l'effet de la température

Les figures (2.8) présente les courbes expérimentales (I-V-T) mesurées pour différentes valeurs de température sur l'intervalle 30 °C-175 °C, des diodes (a) : au Tungstène (W/4H SiC) et (b) au Nickel (Ni/4H SiC).

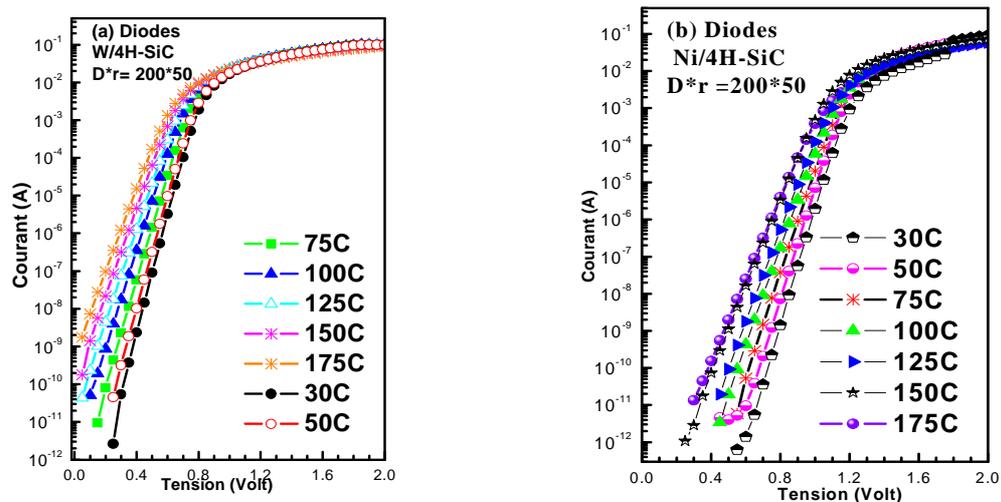


Figure (2.8) Caractéristiques expérimentale I-V-T des diodes Schottky au (a) W/4H SiC et (b) Ni/4H SiC en fonction de la température.

II-3.3.2.1 Analyse des résultats des diodes au Tungstène (W/4H-SiC)

Le tableau (2.3) donne les valeurs des paramètres (I_s , n , R_s et G_p) déterminés en utilisant le modèle à barrière homogène (équation (2.4)). On note qu'une bonne optimisation par ce modèle se trouve renforcé par les bonnes déviations standards σ_{er} qui ne dépassent pas **12.0 %**. Ce tableau montre que la hauteur de la barrière de potentiel (SBD) est presque idéal sur la totalité de la gamme de températures considérée ($n=1.06$ à $T=30$ °C et $n=1.034$ à $T=175$ °C).

Métal	T (°C)	I_s (A)	ϕ_B (eV)	n	R_s (Ω)	$G_p \times 10^{-14}$ (s)	Déviati on σ_{er} (%)
W	30	1.662E-15	1.11	1.06	9.806	5.74	11.24
	50	1.591E-14	1.124	1.053	10.15	4.135	7.746
	75	1.769E-13	1.143	1.034	10.16	5.145	8.794
	100	2.815E-12	1.14	1.042	10.71	1.789	5.435
	125	1.83E-11	1.156	1.031	11.57	3.738	5.349
	150	1.235E-10	1.163	1.028	12.42	3.221	6.382
	175	7.709E-10	1.165	1.034	13.83	3.347	4.377

Tableau (2.3) : Paramètres extraits du modèle thermoïonique homogène de quelques échantillons des diodes au tungstène (W/4H-SiC)

La figure (2.9a) montre que la valeur expérimentale n (indiqué par les étoiles) augmente avec une baisse de la température, et la valeur de la hauteur de la barrière de potentiel (indiqué par les cercles fermés) diminue avec la température, on trouve ($\phi_B= 1.111$ eV à $T=30$ °C) et ($\phi_B=1.165$ eV à $T=175$ °C).

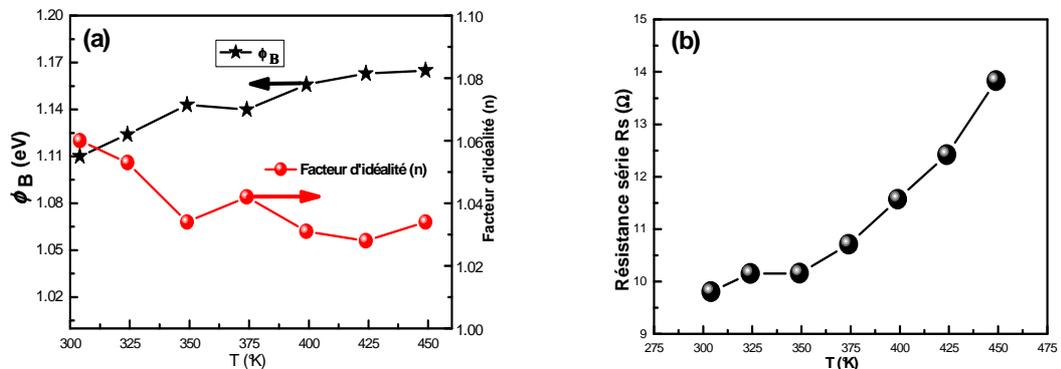


Figure (2.9) : Analyse des paramètres déterminés à partir des courbes I-V-T des diodes W/4H SiC : (a) Variati on du facteur d'idéalité et la hauteur de la barrière en fonction de la température. (b) Variati on de la résistance série en fonction de la température.

La résistance série prend des valeurs entre 9.806Ω et 13.82Ω avec une variation exponentielle en fonction de la température figure (2.9b) principalement dû au substrat légèrement conducteur pour les hautes températures.

Les valeurs déterminés de la hauteur de barrière de potentiel ϕ_B à température nulle et pour une diode idéale ainsi que la constante de Richardson A^{**} pour les diodes W/4H-SiC sont résumées dans le tableau (2.4). Une valeur de la constante de Richardson déterminé très inférieur à la valeur théorique [48, 51].

	ϕ_B ($T = 0^\circ K$)	Constante de Richardson A^{**}
Graphe $\ln(I_s / T^2) = f(\beta)$ (figure (2. 10b)).	0.997 eV	1.61 $A \cdot cm^{-2} K^{-1}$
Graphe $\ln(I_s / T^2) = f(\beta / n)$ (figure (2. 10b)).	1.13 eV	19.3 $A \cdot cm^{-2} K^{-1}$
Graphe de $\phi_B = f(n)$ (figure (2. 10a)).	$\phi_B(n=1) = 1.208 \text{ eV}$	

Tableau (2.4): Paramètres de la hauteur de la barrière de potentiel et de la constante de Richardson déterminés à partir de l'analyse des courbes I-V-T des diodes W/4H SiC

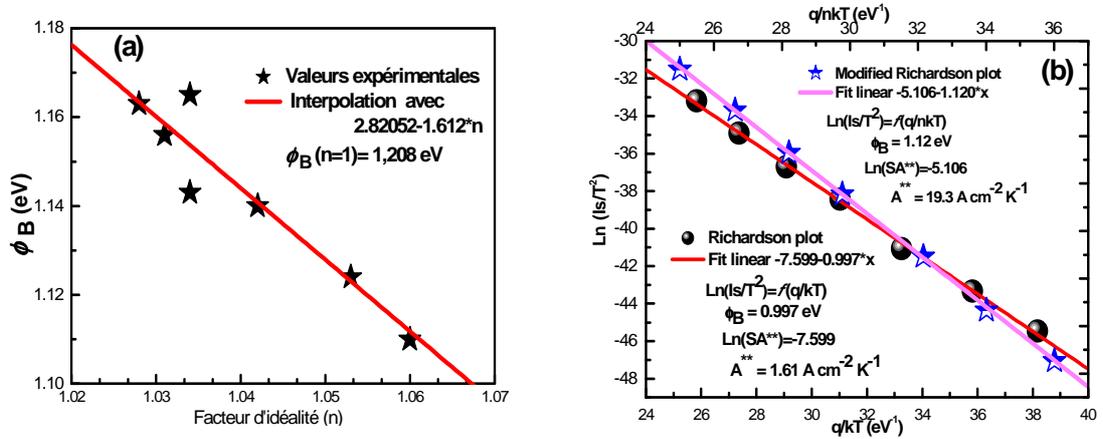


Figure (2.10) : Analyse des paramètres déterminés à partir des courbes I-V-T des diodes W/4H-SiC : (a) Hauteur de la barrière en fonction du facteur d'idéalité ($\phi_B(n=1) = 1.217 \text{ eV}$) (b) Plot de Richardson ($\ln(I_s / T^2) = f(q / kT)$) et plot modifié de Richardson ($\ln(I_s / T^2) = f(q / nkT)$)

II-3.3.2.2 Analyse des résultats des diodes au Nickel (Ni/4H-SiC)

Le tableau (2.5) montre que la hauteur de la barrière de potentiel est aussi presque idéale sur la totalité de la gamme de températures considérée ($n=1.031$ à

T= 50 °C et n=1.048 à T=175 °C). On peut remarquer aussi que pour les diodes au Nickel, une décroissance du facteur d'idéalité n et une augmentation de ϕ_B en fonction de la croissance de la température. Cependant, l'allure de la pente est plus grande comparé aux diodes aux Tungstène (figures (2.9a) et (2.11a)).

Métal	T (°C)	I_s (A)	ϕ_B (eV)	n	R_s (Ω)	$G_p \times 10^{-14}$ (s)	Déviati on σ_{err} (%)
Ni	30	6.828E-22	1.496	1.066	23.05	0.482	11.37
	50	1.163E-20	1.518	1.046	10.35	0.6214	9.556
	75	4.313E-19	1.531	1.051	12.58	3.856	12.58
	100	1.011E-17	1.544	1.048	13.91	6.116	12.1
	125	1.004E-16	1.572	1.035	16.41	6.184	10.78
	150	1.885E-15	1.568	1.024	12.93	4.119	11.81
	175	8.993E-15	1.605	1.037	20.37	2.755	13.73

Tableau (2.5) : Paramètres extraits du modèle thermoionique homogène de quelques échantillons diodes Schottky au Nickel (Ni/4H-SiC)

Cette différence peut être liés aux valeurs de résistances séries calculé pour les diodes au Nickel figure (2.11b), qui ne donnent pas la même allure exponentielle que celui déterminées pour les diodes au Tungstène.

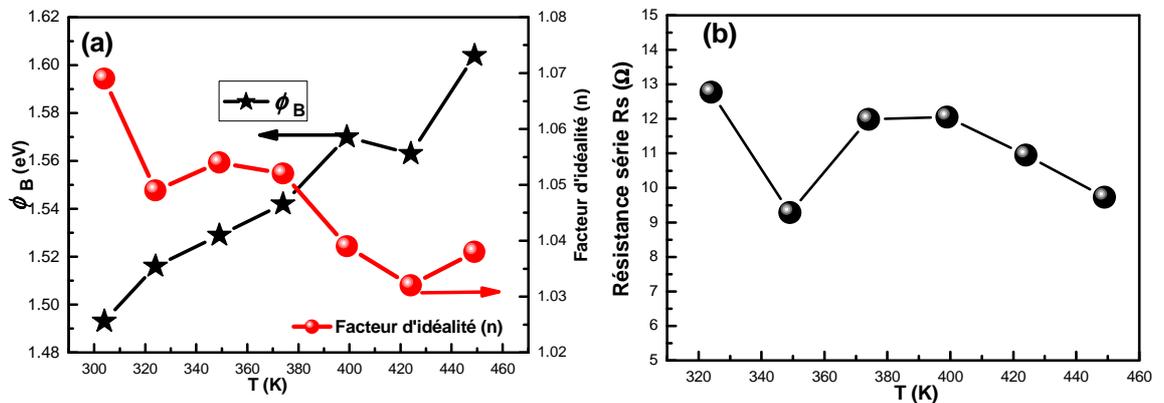


Figure (2.11) : Analyse des paramètres déterminés à partir des courbes I-V-T des diodes Ni/4H SiC : (a) Variation du facteur d'idéalité et la hauteur de la barrière en fonction de la température. (b) Variation de la résistance série en fonction de la température

Les valeurs déterminés de la hauteur de barrière de potentiel ϕ_B à température nul et pour une diode idéale ainsi que la constante de Richardson A^{**} pour les diodes

Ni/4H-SiC sont résumées dans le tableau (2.6). Une valeur de la constante de Richardson déterminé très inférieur à la valeur théorique [48, 51].

	ϕ_B ($T = 0^\circ K$)	Constante de Richardson A^{**}
Graphe $\ln(I_s/T^2) = f(\beta)$ (figure (2. 12b)).	1.29 eV	$5.89 A. cm^{-2} K^{-1}$
Graphe $\ln(I_s/T^2) = f(\beta/n)$ (figure (2. 12b)).	1.46 eV	$13.49 A. cm^{-2} K^{-1}$
Graphe de $\phi_B = f(n)$ (figure (2. 12a)).	$\phi_B (n=1) = 1.664 \text{ eV}$	

Tableau (2.6): Paramètres de la hauteur de la barrière de potentiel et de la constante de Richardson déterminés à partir de l'analyse des courbes I-V-T des diodes Ni/4H SiC

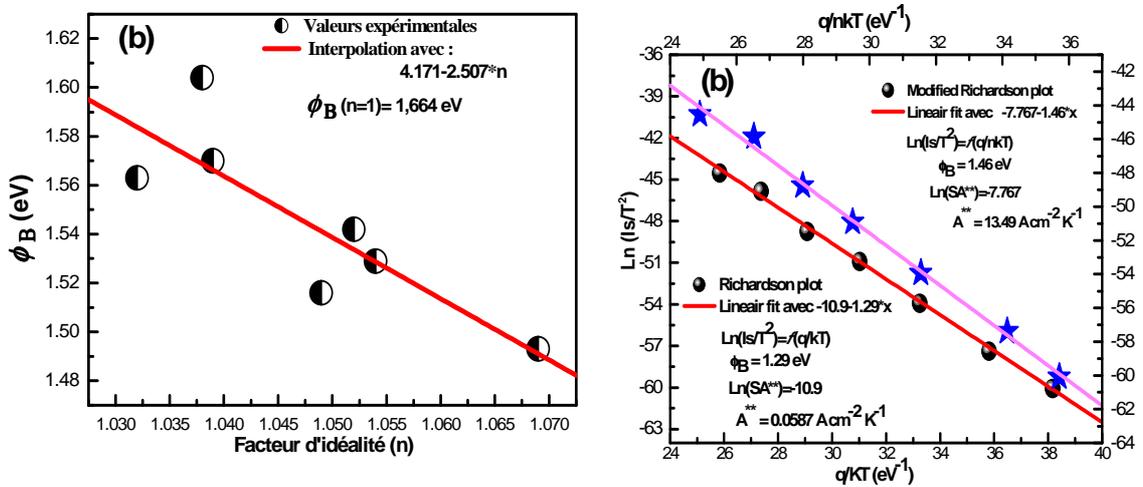


Figure (2.12) : Analyse des paramètres déterminés à partir des courbes I-V-T des diodes Ni/4H SiC (a). Hauteur de la barrière en fonction du facteur d'idéalité. (b) Plot de Richardson constante et plot modifié de la constante de Richardson

Néanmoins, on peut conclure que l'analyse des caractéristiques I-V-T des diodes à barrières Schottky basé sur TED la théorie révèle habituellement une augmentation anormale de la hauteur de la barrière et une diminution dans le facteur d'idéalité avec la croissance de température.

II-3.4 Extraction des paramètres par le modèle à barrière inhomogène

Plusieurs recherches [30, 55-59] ont essayés d'expliquer la nature et l'origine de ces anomalies selon le mécanisme TED qui prend en considération la distribution de barrière spatiale du BHs, dû à l'inhomogénéité qui prédomine à l'interface du métal/SiC. Afin d'examiner la possibilité d'appliquer les

différents modèles décrivant l'inhomogénéité spatiale de la hauteur de la barrière de potentiel celui de Werner [23], de Tung [32] à nos données, nous rapportons la courbe de (nkT) en fonction de (kT) figure (2.13) où la ligne droite décrit le comportement idéal ($n=1$).

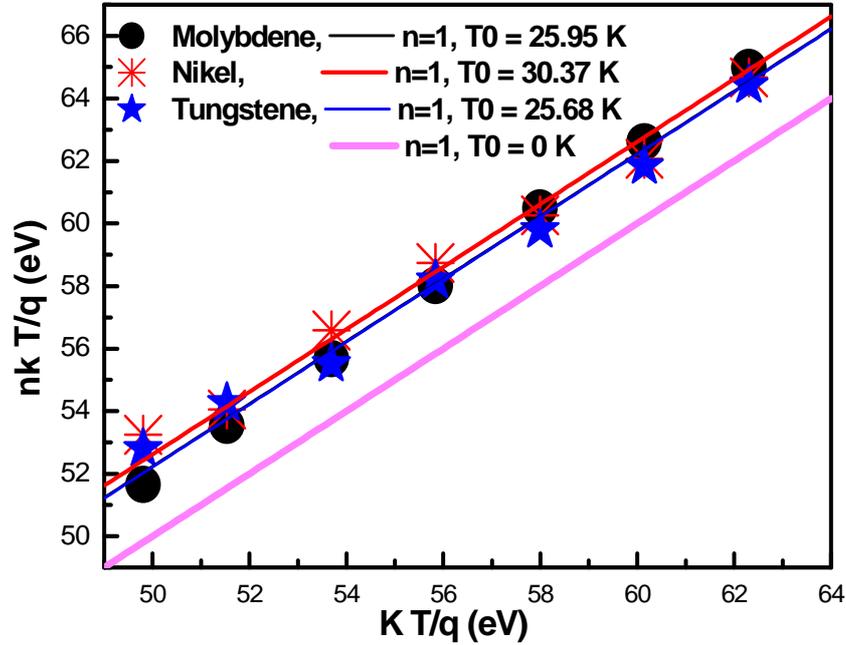


Figure (2.13) : Variation de $(nkT/q) = f(kT/q)$, La ligne droite représente le cas idéal ($n=1$), la ligne en trait interrompu fit des valeurs expérimentales donnant les valeurs de $T_0 = 25.95 K$, $30.37 K$ et $25.68 K$ respectivement pour les diodes Mo/4H-SiC, Ni/4H-SiC et W/4H-SiC.

Les valeurs expérimentales de $(nkT/q) = f(kT/q)$ que montre cette dernière figure pourraient être interpolée par une ligne droite parallèle à la ligne représentant le cas idéal. D'après Saxena [60], une tel comportement est spécifique aux cas des diodes à barrière Schottky possédant ce qu'on appelle "l'effet T_0 " conduisant le facteur de l'idéalité à s'exprimer par cette forme :

$$n = 1 + \frac{T_0}{T} \quad (2.6)$$

Un bonne optimisation des paramètres de la caractéristiques I-V-T des diodes Mo/4H-SiC, Ni/4H-SiC et W/4H-SiC est obtenu en utilisant l'équation (2.6) avec respectivement les valeurs de : $T_0 = 25.94 K$, $T_0 = 30.37 K$ et

$T_0 = 25.68 K$. Tung [34] et Sullivan [58] ont montré que "l'effet T_0 " est un indice d'une distribution inhomogène des hauteurs de barrière de potentiel des diodes à barrières Schottky.

II-3.4.1 Résultats et discussion des paramètres obtenus à partir du modèle de distribution gaussienne de ϕ_B

Le tableau (2.7) suivant donne les paramètres extraits utilisant le modèle de distribution gaussienne (équation (1.26)) du chapitre précédent. On remarque que le fit par une distribution gaussienne de la hauteur de barrière pour les deux types de diodes Mo/4H-SiC et W/4H-SiC toute la gamme de température, est excellent en comparaison aux diodes Ni/4H-SiC où les valeurs de fitness sont dans l'intervalle de 9% à 13% sont obtenues.

Diodes	T (°C)	ϕ_{ap} (eV)	$\phi_B(T=0 K)$ (eV)	σ_s (meV)	n	Rs (Ω)	σ_{er} (%)
Mo/4H-SiC	30	0.9728	1.086	76.4	1.032	18.36	3.747
	50	0.9818			1.023	21.4	3.442
	75	0.9921			1.016	21.08	3.789
	100	0.9938			1.025	28.37	3.582
	125	1.001			1.029	89.53	5.363
	150	1.006			1.026	24.62	3.556
	175	1.01			1.026	25.41	4.131
W/4H-SiC	30	1.11	1.286	95.28	1.06	9.805	11.24
	50	1.124			1.053	10.15	7.746
	75	1.143			1.034	10.16	8.793
	100	1.14			1.042	10.71	5.434
	125	1.156			1.031	11.56	5.349
	150	1.163			1.028	12.42	6.382
	175	1.167			1.025	14.1	4.304
Ni/4H-SiC	30	1.493	1.796	126.01	1.07	20.87	12.77
	50	1.516			1.05	9.515	9.271
	75	1.531			1.051	12.58	12.58
	100	1.542			1.052	12.4	12.04
	125	1.57			1.039	14.84	10.92
	150	1.563			1.032	12.01	9.726
	175	1.604			1.038	20.5	13.96

Tableau (2.7) : Paramètres extraits du modèle thermoionique inhomogène Gaussienne des diodes Schottky Mo/4H-SiC, W/4H-SiC et Ni/4H-SiC pour différente valeurs de températures

II-3.4.2 Résultats et discussion des paramètres obtenus à partir du modèle de Werner

On montre sur figure (2.14 a et b) que l'interpolation des données expérimentaux montré par le tableau (2.7) permet de déterminer les différents coefficients (ϕ_B ($T = 0$ K), σ_{s0} , ρ_2 et ρ_3 pour les différentes diodes.

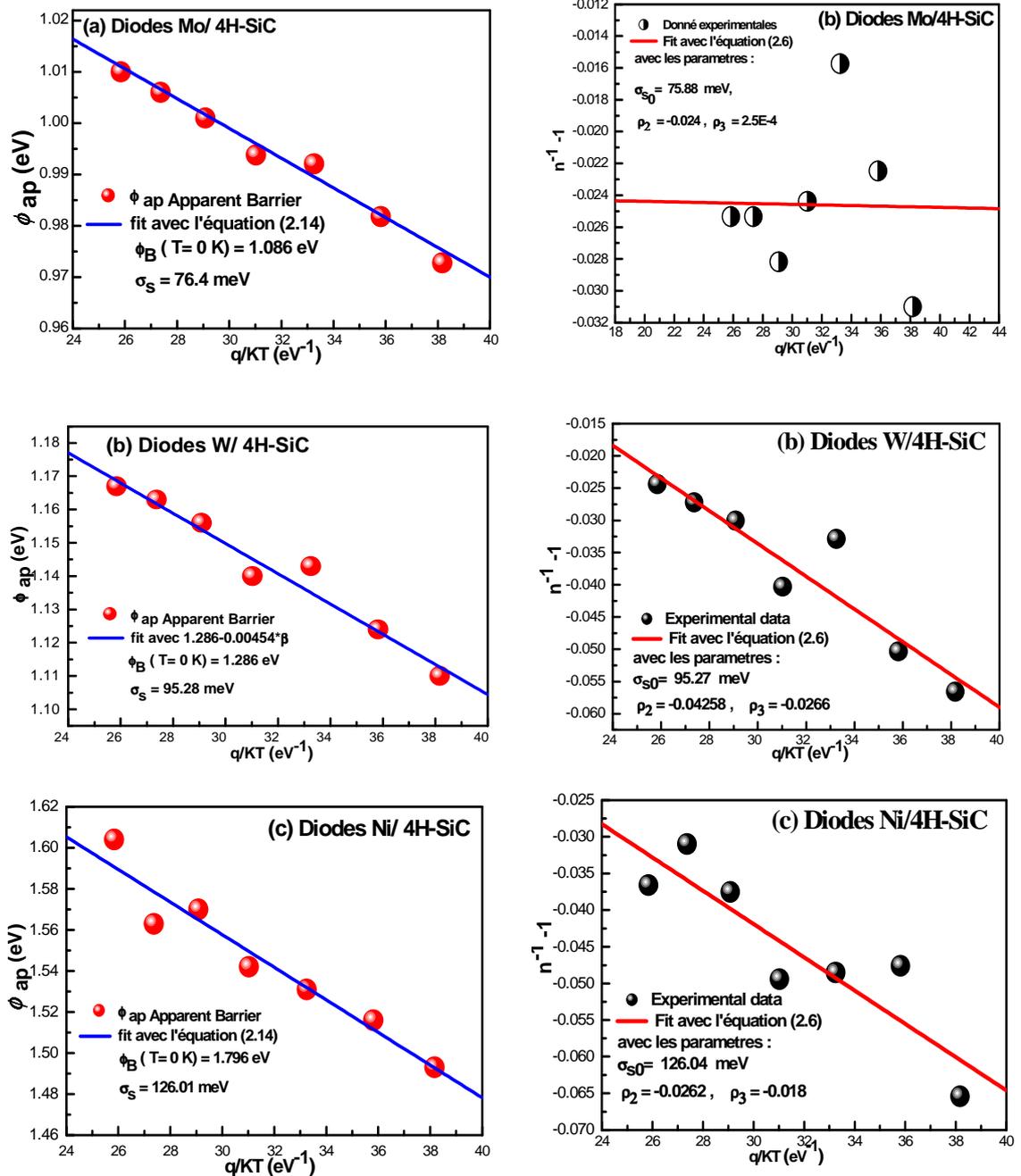


Figure (2.14) : Interpolation des données expérimentale des différentes diodes de la barrière apparente ϕ_{ap} courbe (a) et du facteur d'idéalité apparente n_{ap} courbe (b) avec respectivement des équations (1.31) et (1.32) du chapitre précédent

La figure (2.15) suivante montre les valeurs de la constante de Richardson pour le SiC déterminé selon le plot de Richardson modifié selon le modèle de Werner pour les trois types de diodes. Les valeurs déterminées pour les trois diodes sont en accord avec la valeur utilisé qui vaut $146 \text{ A cm}^{-2} \text{ K}^{-1}$

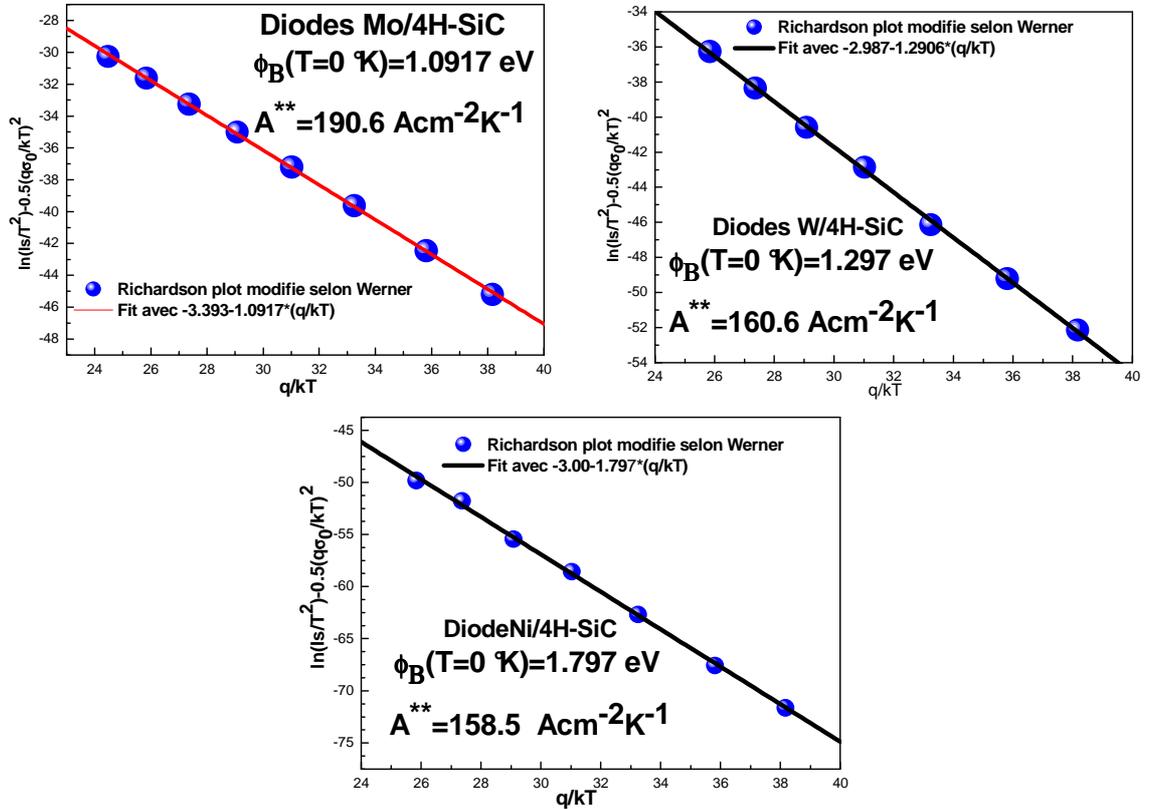


Figure (2-15) : Calcul de la constante de Richardson à partir du modèle de Werner pour les diodes (a) Mo/4H-SiC, (b) W/4H-SiC et (c) Ni/4H-SiC

Le tableau (2.8) montre les valeurs des différentes paramètres ($\phi_B (T = 0^\circ\text{K})$, σ_{s0} , ρ_2 et ρ_3) déterminés pour les trois types de diodes selon le modèle de Werner.

Diodes	A^{**} ($\text{A.cm}^{-2}.\text{K}^{-1}$)	$\phi_B(T=0^\circ\text{K})$ (eV)	σ_{s0} (meV)	ρ_2	ρ_3
Mo/4H-SiC	190.6	1.086	76.4	-0.0240	-2.5×10^{-4}
W/4H-SiC	160.6	1.286	95.28	-0.0426	-0.0266
Ni/4H-SiC	158.5	1.796	126.01	-0.0262	-0.018

Tableau (2.8) : Paramètres extraits du modèle thermoionique inhomogène de Werner des diodes Schottky Mo/4H-SiC, W/4H-SiC et Ni/4H-SiC pour différente valeurs de températures

II-3.4.3 Résultats et discussion des paramètres obtenus à partir du modèle de Tung

Il est important de rappeler les différentes expressions du courant d'une diode à barrière Schottky établit dans le chapitre précédent suivant le modèle de Tung. Pour le cas d'une distribution gaussienne des patches le courant est donné par :

$$I = A_d A^* T^2 \exp(-\beta \phi_B^0) \left[\exp(\beta(V - IR_s)) - 1 \right] \times \left\{ (1 - Cp) + (2\pi\rho_p \sigma_\gamma^2 / 9\alpha(V)) \times \exp(0.5\beta^2 \sigma_\gamma^2 \alpha(V)^2) \left[1 + \operatorname{erf}(\beta\sigma_\gamma \alpha(V) / \sqrt{2}) \right] \right\} \quad (2.7)$$

En négligeant la fonction (erf) devant la valeur 1 dans cette dernière équation, l'expression du courant se simplifie comme :

$$\begin{cases} I = SA^{**} T^2 \exp(-\beta \phi_B^0) \times (\exp(-\beta(V - IR_s)) - 1.0) \times (1 + Po) \\ \text{avec } : Po = \frac{8\pi\rho_p \sigma^2}{9} \alpha(V) \times \exp(0.5 \times \beta^2 \sigma^2 \alpha(V)^2) \end{cases} \quad (2.8)$$

Si on considère que la densité surfacique des patches ρ_p est constante le courant dans une diode est donnée par :

$$I = I_H + I_L \quad (2.9)$$

avec

$$\begin{cases} I_H = (1 - Cp) \cdot SA^* T^2 \exp(-\beta \phi_B^0) \left[\exp(\beta(V - I_H R_s)) - 1 \right] \text{ et} \\ I_L = \frac{4\pi C_1 \gamma}{9} \alpha(V)^2 A^* T^2 \exp[-\beta(\phi_B^0 - D(\gamma))] \times \left[\exp(\beta(V - I_L R_{sp})) - 1 \right] \end{cases}$$

Dans les trois expressions du courant :

A_d : Surface de la diode.

ρ_p : Densité des patches où $\rho_p = C_1 / A_d$. C_1 est le nombre de patches.

ϕ_B^0 : Hauteur de la barrière de potentiel du background.

Cp : représente le taux de recouvrement des patches de la totalité de la surface de la diode.

Les tableaux suivants (2.9), (2.10) et (2.11) montrent les paramètres extraits du modèle thermoïonique inhomogène suivant le modèle de Tung pour le cas d'une distribution gaussienne (équations (2.7) et (2.8)) et le cas d'une distribution normale équation (2.9), respectivement des échantillons des diodes Schottky de Mo/4H-SiC, de W/4H-SiC et Ni/4H-SiC et pour différentes valeurs de températures

	T (°C)	ϕ_B^0 (eV)	R _s (Ω)	C ₁ ×10 ⁵	$\rho_p \times 10^9$ (cm ⁻²)	C _p (%)	$\sigma_\gamma \times 10^{-5}$ (V ^{1/3} cm ^{2/3})	σ_{err} (%)	
Eq. (2.7)	30	0.993	15.58	7.7	4.36	40.52	6.19	6.579	
	50	0.9947	16.14	6.22	3.52	43.06	6.67	6.782	
	75	0.992	17.37	5.7	3.23	52.36	6.83	6.595	
	100	1.01	18.58	7.51	4.25	28.65	7.26	5.418	
	125	0.9966	19.18	6.15	3.48	60.95	7.46	4.51	
	150	1.015	20.32	8.83	5	47.43	7.74	3.899	
	175	0.9926	22.21	4.19	2.37	74.68	8.19	3.443	
Eq. (2.8)	30	1.007	15.58	6.54	3.7		6.17	6.558	
	50	1.012	16.14	6.63	3.75		6.54	6.587	
	75	1.012	17.41	2.84	1.61		7.23	7.146	
	100	1.023	18.57	6.99	3.96		7.08	5.233	
	125	1.025	19.23	3.21	1.82		7.99	5.03	
	150	1.036	20.34	4.77	2.7		8.1	4.171	
	175	1.045	22.23	5.84	3.31		8.37	3.538	
Eq. (2.9)	T (°C)	ϕ_B^0 (eV)	R _s (Ω)	C ₁ ×10 ³	$\rho_p \times 10^7$ (cm ⁻²)	C _p (%)	$\gamma \times 10^{-4}$ (V ^{1/3} cm ^{2/3})	R _{sp} ×10 ⁶ (Ω)	σ_{err} (%)
	30	0.9962	19.35	3.13	1.77	13.87	2.49	19.3	6.577
	50	0.9922	26.33	5.93	3.36	34.09	2.45	18	6.332
	75	0.9975	25.89	8.89	5.03	33.04	2.48	53.5	7.186
	100	1.005	25.3	3.51	1.99	21.18	2.82	18.7	5.176
	125	1.011	24.65	3.21	1.82	16.42	3.02	23.6	4.371
	150	1.015	28.91	5.94	3.36	25.24	2.99	34.3	3.575
175	1.021	31.21	4.25	2.41	24.32	3.23	27.9	3.108	

Tableau (2.9) : Paramètres extraits du modèle thermoïonique inhomogène Modèle Tung cas d'une distribution gaussienne Eq. (2.7) et (2.8) et cas d'une distribution homogène Eq. (2.9), des échantillons de diodes Schottky de Mo/4H-SiC, pour différentes valeurs de températures

	T (°C)	ϕ_B^0 (eV)	R _s (Ω)	C _i ×10 ⁸	$\rho_p \times 10^{12}$ (cm ⁻²)	C _p (%)	$\sigma_\gamma \times 10^{-5}$ (V ^{1/3} cm ^{2/3})	σ_{err} (%)	
Eq. (2.7)	30	1.266	9.502	4.72	1.5	50.5	5.74	11.45	
	50	1.278	9.767	4.27	1.36	63.12	5.9	9.474	
	75	1.243	9.768	2.08	0.663	69.09	5.3	8.769	
	100	1.298	10.26	4.26	1.36	47.03	6.23	5.808	
	125	1.278	11.35	4.32	1.38	56.75	5.33	7.871	
	150	1.27	12.29	2.47	0.786	38.77	5.52	8.355	
	175	1.237	13.66	0.433	0.138	24.86	6.32	5.592	
Eq. (2.8)	30	1.298	9.508	6.61	2.11		5.8	11.55	
	50	1.289	9.762	2.66	0.847		6.02	9.609	
	75	1.311	9.704	4.69	1.49		5.88	7.389	
	100	1.287	10.29	1.69	0.537		6.13	6.18	
	125	1.302	11.35	3.41	1.08		5.51	8.028	
	150	1.312	12.34	3.84	1.22		5.48	8.544	
	175	1.346	13.74	6.93	2.21		5.6	6.955	
	T (°C)	ϕ_B^0 (eV)	R _s (Ω)	C _i ×10 ⁶	$\rho_p \times 10^{10}$ (cm ⁻²)	C _p (%)	$\gamma \times 10^{-4}$ (V ^{1/3} cm ^{2/3})	R _{sp} ×10 ⁶ (Ω)	σ_{err} (%)
Eq. (2.9)	30	1.152	16.62	5.99	1.91	42.91	1.71	4.19	10.29
	50	1.157	19.6	6.19	1.97	50.13	1.73	2.19	7.702
	75	1.17	13.49	5.77	1.84	27.93	1.81	4.06	6.01
	100	1.156	21.81	3.91	1.25	52.71	1.88	2.01	4.936
	125	1.176	16.74	4.41	1.4	32.64	1.92	2.14	6.922
	150	1.164	23.98	2.52	0.801	48.65	1.93	1.16	10.67
	175	1.193	17.45	6.25	1.99	22.52	2.05	4.38	4.856

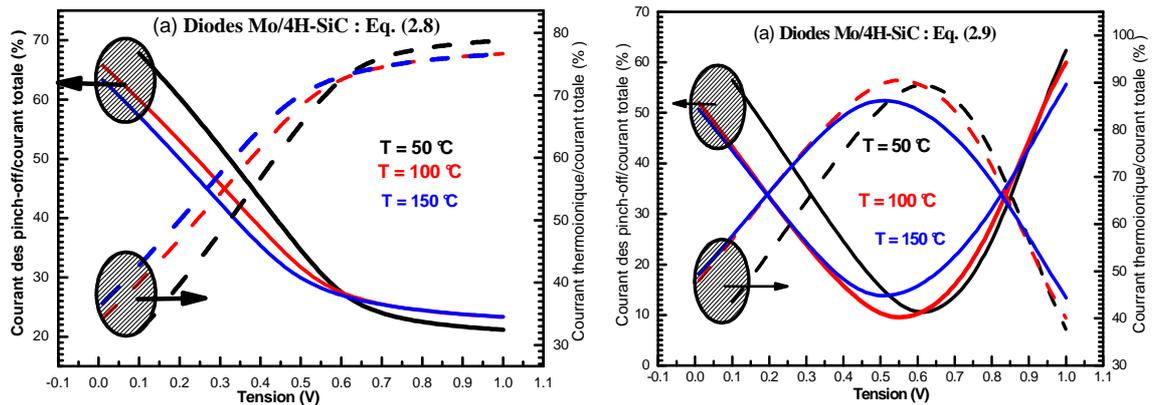
Tableau (2.10) : Paramètres extraits du modèle thermoionique inhomogène Modèle Tung cas d'une distribution gaussienne Eq. (2.7) et (2.8) et cas d'une distribution homogène Eq. (2.9), des échantillons de diodes Schottky de W/4H-SiC, pour différente valeurs de températures

	T (°C)	ϕ_B^0 (eV)	R _s (Ω)	C _i ×10 ⁸	$\rho_p \times 10^{12}$ (cm ⁻²)	C _p (%)	$\sigma_\gamma \times 10^{-5}$ (V ^{1/3} cm ^{2/3})	σ_{err} (%)
Eq. (2.7)	30	1.657	29.85	4.03	1.28	55.4	5.26	12.63
	50	1.658	13.05	6.01	1.92	23.16	4.82	10.8
	75	1.699	15.89	7.63	2.43	46.4	5.3	14.37
	100	1.693	17.3	3.47	1.1	22.18	5.57	13.96
	125	1.717	19.3	5.48	1.75	51.37	5.3	13.27
	150	1.693	13.95	5.43	1.73	40.56	4.97	14.95
	175	1.781	28.41	7.93	2.52	6.903	5.7	13.86
Eq. (2.8)	30	1.694	29.98	7.01	2.23		5.31	12.7
	50	1.684	13.1	6.71	2.14		4.89	10.86
	75	1.704	15.96	3.95	1.26		5.39	14.5
	100	1.744	17.33	7.22	2.3		5.63	14.06
	125	1.749	19.36	5.7	1.82		5.41	13.42

	150	1.723	13.99	5.03	1.6		5.12	15.14	
	175	1.799	28.46	5.41	1.72		5.81	14.01	
Eq. (2.9)	T (°C)	ϕ_B^0 (eV)	R_s (Ω)	$C_i \times 10^3$	$\rho_p \times 10^8$ (cm ⁻²)	C_p (%)	$\gamma \times 10^{-4}$ (V ^{1/3} cm ^{2/3})	$R_{sp} \times 10^6$ (Ω)	σ_{err} (%)
	30	1.604	37.83	6.89	2.20	53.59	1.54	34	12.22
	50	1.567	20.41	4.83	1.54	53.86	1.28	30.9	10.59
	75	1.59	20.96	2.70	0.861	47.14	1.51	17.1	17.04
	100	1.598	29.24	3.19	0.102	22.44	2.01	1.41	14.96
	125	1.606	31.87	5.89	0.187	54.49	1.89	4.34	14.69
	150	1.591	20.13	3.94	0.126	23.25	1.84	1.51	17.41
	175	1.638	48.47	2.03	0.0646	27.98	2.21	1.82	11.03

Tableau (2.11) : Paramètres extraits du modèle thermoionique inhomogène Modèle Tung cas d'une distribution gaussienne Eq. (2.7) et (2.8) et cas d'une distribution homogène Eq. (2.9), des échantillons de diodes Schottky de Ni/4H-SiC, pour différentes valeurs de températures

❖ Plusieurs auteurs [61-63] négligent le courant dû à l'émission thermoionique I_H devant le courant des patches I_L dans les équations précédentes (2.6) (2.7) et (2.8). Néanmoins, on peut remarquer sur la figure (2.17a-c) que la participation du courant dû aux patches est la plus importante. Les figures (2.17a-c) montrent que l'effet du courant des patches dépend de la nature de la diode, de la température, de la tension de polarisation et de la forme choisie de la distribution des patches.



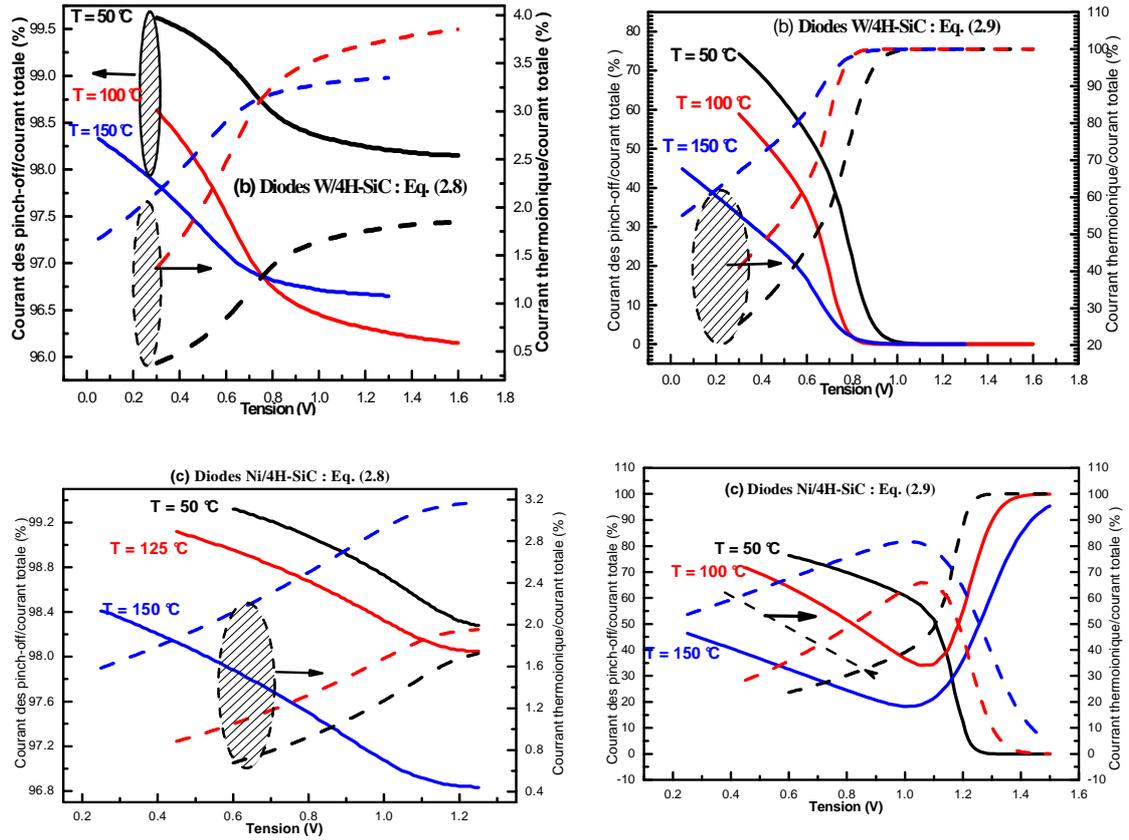


Figure (2-16) : Effet des courants dû aux patches et d'émission thermoionique sur le courant total pour les différents modèles de Tung: équations (2.8) et (2.9) et pour les différents diodes (a) (a) *Mo/4H-SiC*, (b) *W/4H-SiC* et (c) *Ni/4H-SiC*

❖ La hauteur de la barrière de potentiel (SBD) pour les trois types de diodes étudiés dans ce travail à base de 4H-SiC (*Mo/4H-SiC*, *W/4H-SiC* et *Ni/4H-SiC*) varie linéairement avec la température (voir figures (2.17 a-c)) comme:

$$\phi_{B0}(T) = \phi_{B0}(T=0 \text{ °K}) + \beta_T \times T \quad (2.10)$$

Ici β_T représente le coefficient de température.

L'effet remarquable sur les figures (2.17 a-c) est les valeurs élevés obtenus de $\phi_B^0(T=0 \text{ °K})$ et de β_T lorsque on fait l'extraction à partir de l'équation (2.8) en comparaison avec l'extraction de ces deux paramètres à partir de l'équation (2.7). On peut relier ceci à la négligence dans l'équation (2.8), de la contribution de la fonction erf d'une part et le taux de recouvrement des

patches d'autre part. En effet, dans l'équation (2.7) nous ne tenons pas compte de la surface des patches.

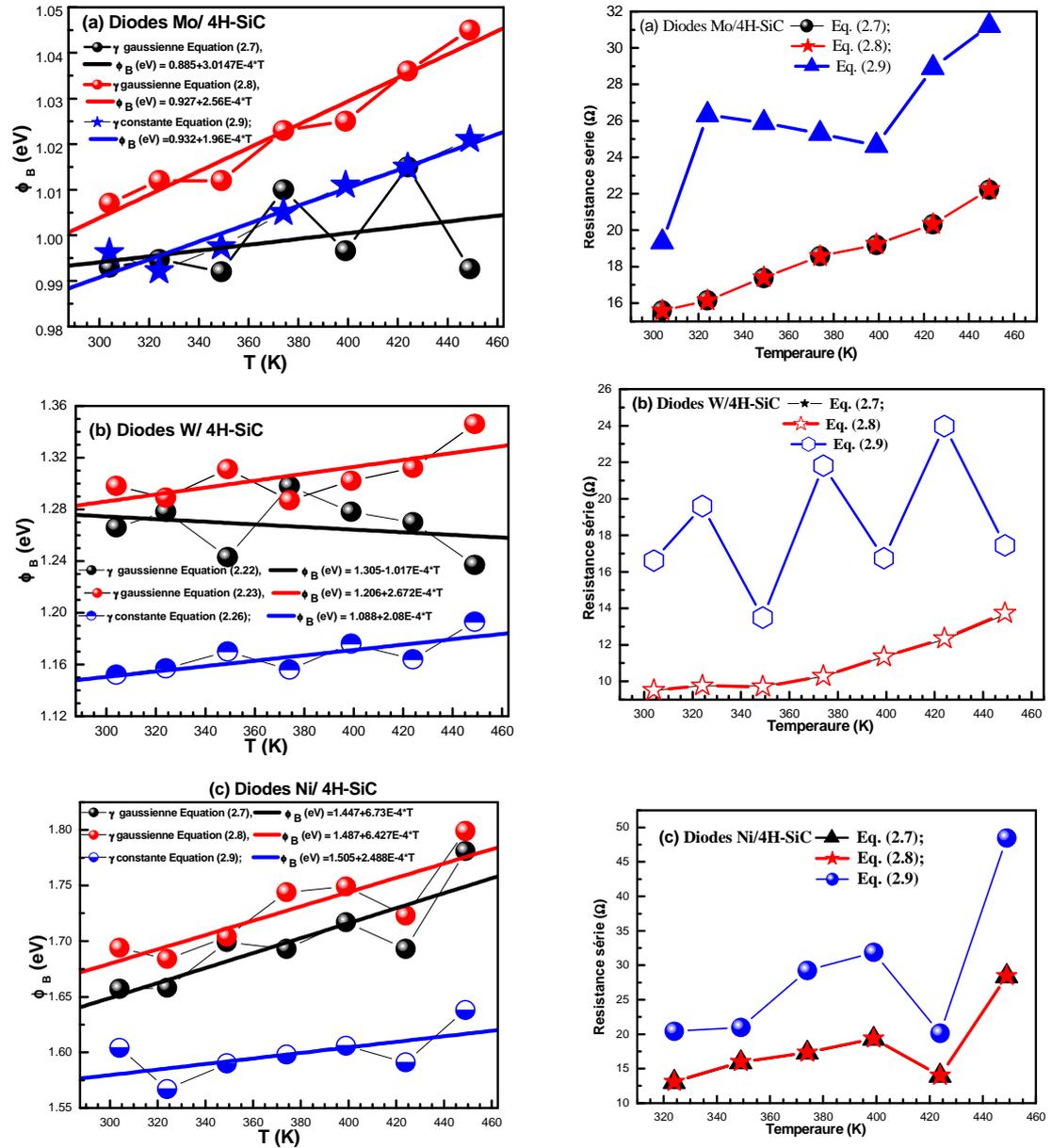


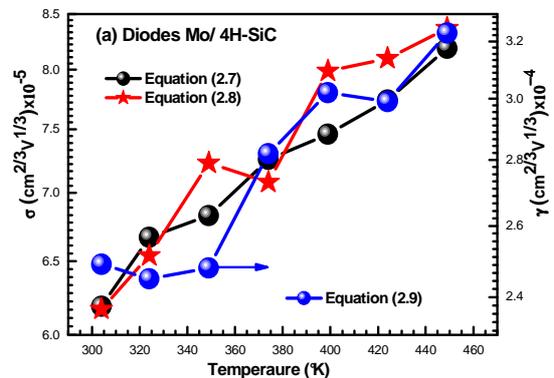
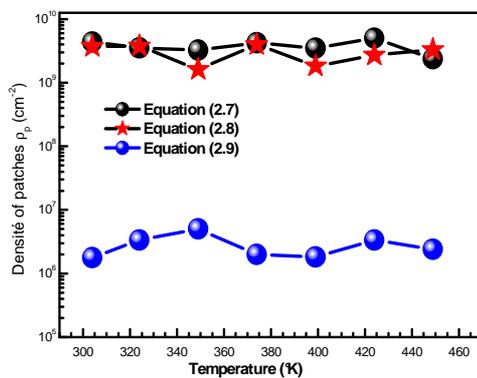
Figure (2-17) : Hauteur de la barrière et la résistance série en fonction de la température extrait à partir du modèles de Tung équations (2.7), (2.8) et (2.9) pour les diodes (a) Mo/4H-SiC, (b) W/4H-SiC et (c) Ni/4H-SiC

On remarque aussi sur ces mêmes figures qu'une forme homogène de distribution des patches donne des faibles valeurs de $\phi_{B0}(T=0\text{ K})$ et de β_T par rapport à une forme gaussienne. En revanche, ce faible courant de saturation

obtenus pour une distribution constante, est compensé par des grandes valeurs de la résistance série obtenus pour ce type distribution vis-à-vis la distribution gaussienne.

Pour les diodes aux molybdènes et les diodes aux tungstènes et pour le cas d'une distribution gaussienne des patches, La résistance varie exponentiellement en fonction de la température. Dans le cas d'une distribution homogène des patches l'allure de la résistance série en fonction la température est proche d'être linéaire. Cette allure proche de linéaire est fort possible dû aux valeurs élevés de spreading résistance dans la gamme des $K\Omega$ pour les diodes Mo/4H-SiC et W/4H-SiC et atteint la gamme des $M\Omega$ pour les diodes Ni/4H-SiC.

❖ La densité de patches ρ_p est presque constante seulement on obtient des valeurs de densité de patches pour la distribution gaussienne supérieur au cas de la distribution homogène figure (2.18) avec des valeurs variant selon le type de la diode. Pour le paramètre nommé σ de la distribution gaussienne à une variation linéaire croissante avec la température surtout pour la diode au molybdène et on peut dire qu'elle est constante pour les deux autres types de diodes. Cependant, le paramètre appelé γ pour la distribution homogène croît d'une façon linéaire pour les trois types de diode étudiés dans ce travail.



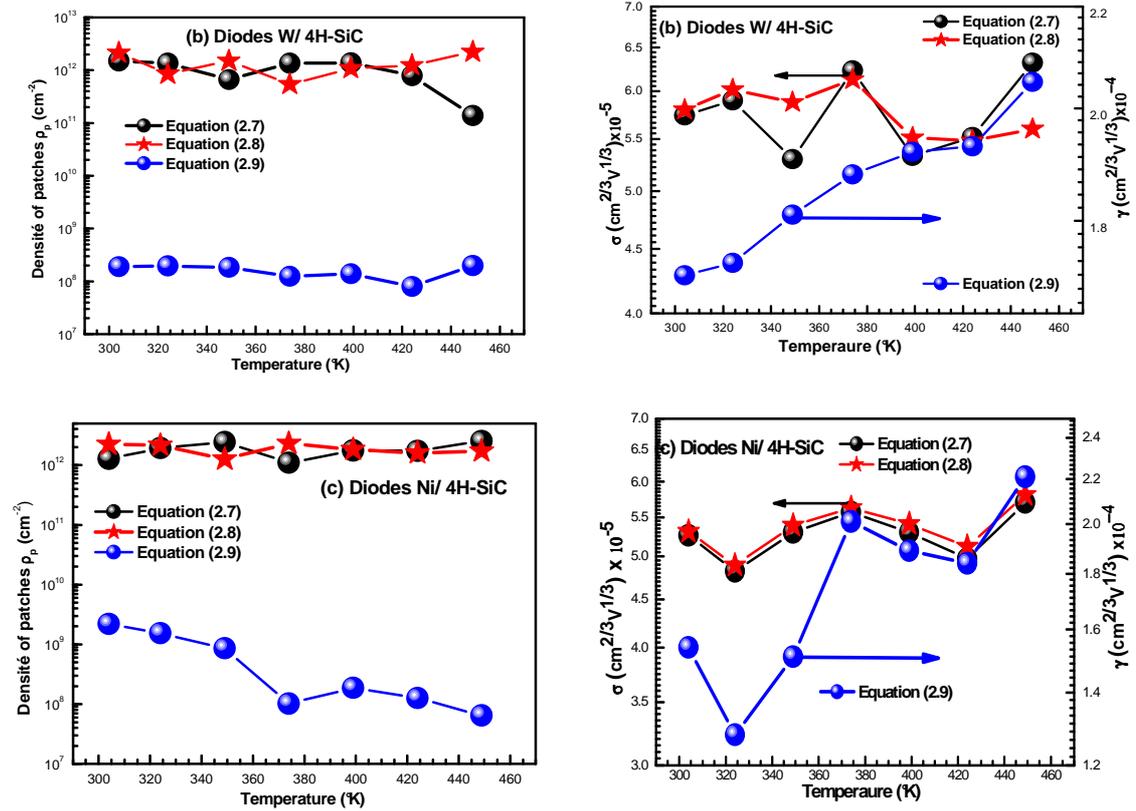


Figure (2-18) : Variation de la densité des patches les paramètres σ_p et γ_p en fonction de la température extrait à partir du modèle de Tung équations (2.7), (2.8) et (2.9) pour les diodes (a) *Mo/4H-SiC*, (b) *W/4H-SiC* et (c) *Ni/4H-SiC*

II-3.4.4 Constante de Richardson modifiée selon le modèle de Tung pour les diodes à bases de 4H-SiC

Pour les trois types de diodes étudiés dans ce travail, Nous avons obtenus à partir du modèle à barrière homogène, des valeurs de la constante de Richardson A^* ainsi que de la constante de Richardson modifiée très inférieure à la valeur théorique $A^{**} = 146 \text{ Acm}^{-2} \text{ K}^{-1}$ [48, 51] (Voir les tableaux (2.4, 2.6 et 2.8)).

Ce désaccord est observé dans les études des contacts Schottky à base de SiC [53, 54] et qui revient à la déviation du comportement idéal pour ce type de contacts Schottky. Roccaforte [54] a montré que le modèle à barrière inhomogène de Tung décrit le comportement électrique des contacts Schottky à base de SiC. Etant donné que l'expression du courant de la diode d'un patch de forme circulaire établi dans le chapitre précédent est donné par l'expression de l'équation (1.35):

$$I_{path}(\gamma) = A_{eff} A^{**} T^2 \times \exp(-\beta \phi_{eff}) \times [\exp(V - IR_s) - 1] \quad (2.11)$$

Ici $\beta = q / k_B T$. A_{eff} et ϕ_{eff} représentent respectivement la surface et la barrière de potentiel du patch effective.

Pour Un nombre C_1 de patches le courant à travers la surface de la diode à barrière inhomogène s'écrira:

$$I_{path}(\gamma) = C_1 A_{eff} A^{**} T^2 \times \exp(-\beta \phi_{eff}) \times [\exp(V - IR_s) - 1] \quad (2.12)$$

Avec A_{eff} et ϕ_{eff} sont respectivement la surface la barrière de potentiel effectives exprimé par :

$$\begin{aligned} \phi_{eff} &= \phi_{B0} - \gamma \alpha(V) & (a) \\ A_{eff} &= \frac{4\pi\gamma}{9\beta} \alpha(V)^{-2} & (b) \end{aligned} \quad (2.13)$$

Les différents paramètres γ , $\alpha(V) = (V_{bb} / \eta)^{1/3}$ ont été discutés dans le chapitre précédent. $\beta = q / kT$ et ϕ_{B0} représente la barrière de potentiel pour une diode idéale (n=1). Nous avons utilisé ces dernières équations (2.12) et (2.13a et b) pour calculer la constante de Richardson A^{**} à partir des mesures I-V-T pour les trois types de diodes que porte notre étude.

On détermine pour chaque type de diode le paramètre $\alpha(V)$ qui représente la pente de courbe $\phi_{eff} = f(\gamma)$ (Figures (2.19a, b et c)). Les valeurs de la barrière de potentiel effectives ϕ_{eff} sont ceux extrait à partir l'équation (2.12) et les valeurs de γ sont ceux calculées dans les tableaux (2.9-11). Ensuite, le paramètre de la constante de Richardson modifié est obtenu de la courbe $\ln(I_s / (C_1 A_{eff} T^2)) = f(q / kT)$. Les valeurs calculées de la constante de Richardson A^{**} pour les trois types de diodes que porte notre étude sont comparable à la valeur théorique $A^{**} = 146 \text{ Acm}^{-2} \text{ K}^{-1}$ [48, 51, 64]. On conclut le modèle à

barrière inhomogène de Tung décrit mieux le comportement électrique des contacts Schottky à base de SiC.

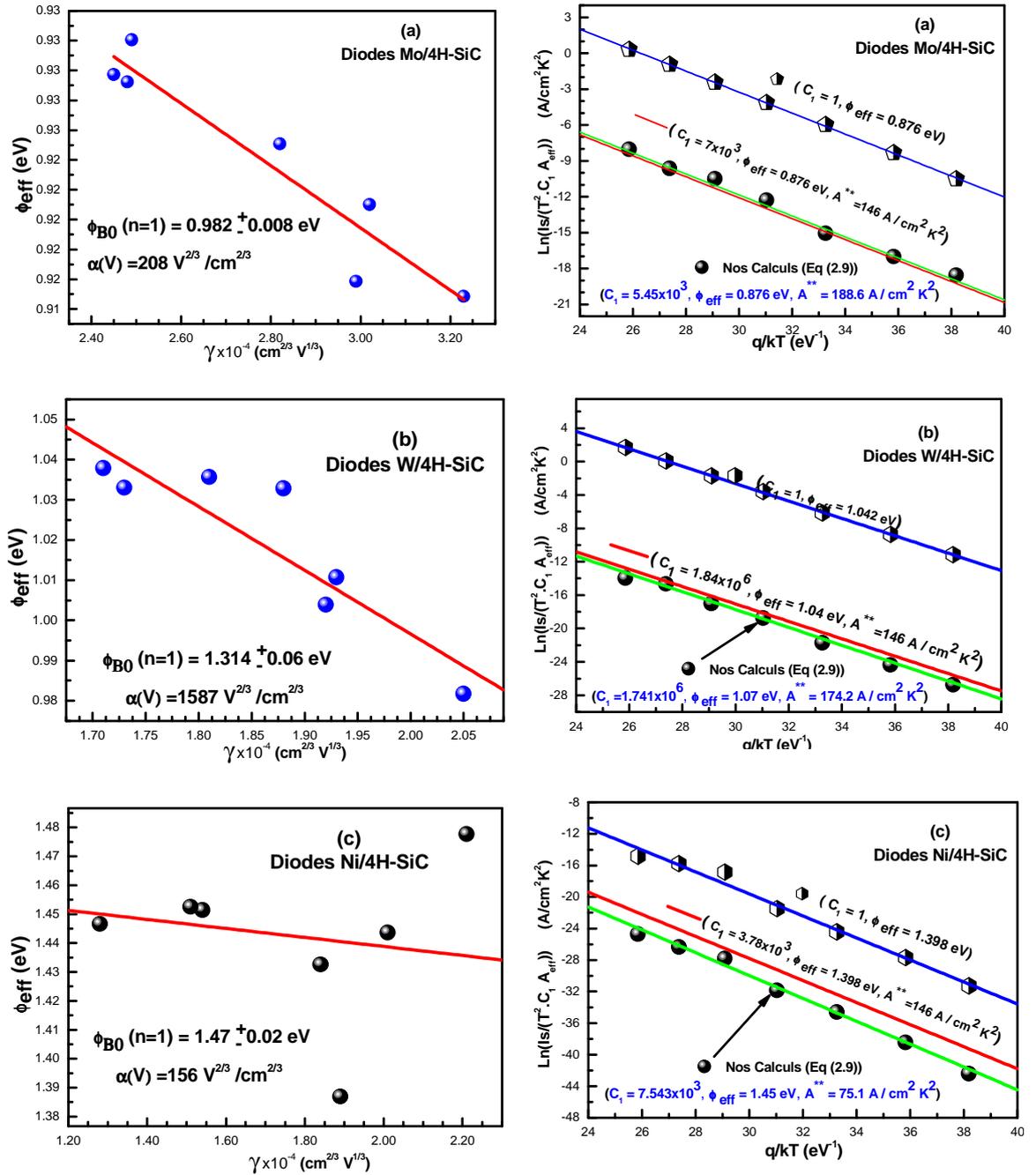


Figure (2-19) : Calcul de la constante de Richardson et du nombre de patches à partir du modèle de Tung équations (2.12) et (2.13) pour les diodes (a) Mo/4H-SiC, (b) W/4H-SiC et (c) Ni/4H-SiC

II-4 Conclusion

Nous avons étudié les propriétés électriques des diodes Schottky à base SiC par la modélisation des phénomènes de transport dans ces composants. L'extraction des paramètres est un domaine décrivant le comportement électrique des diodes Schottky à base 4H-SiC car ces paramètres permettront de décrire les mécanismes de transport de courant dans ces structures.

Pour l'extraction des paramètres des diodes Schottky à partir de la caractéristique I-V, nous avons utilisé la méthode des algorithmes génétiques. Nous avons obtenus des valeurs de déviations standards σ_{err} comparables avec ceux obtenues avec les méthodes standards.

L'inhomogénéité des barrières des diodes à large bande interdite est expliquée par les deux modèles de Werner et Tung. On remarque que le modèle à barrière inhomogène de Tung décrit mieux le comportement électrique des contacts Schottky à base de SiC.

CHAPITRE III

NITRURES D'ALUMINIUM (ALN),

DISPOSITIFS DE DEPOT ET

MOYENS DE CARACTERISATIONS.

Chapitre d'équation 3 Section 3

III-1 Introduction

Le nitrure d'aluminium (AlN) un élément (III-V) se trouve sous la forme de deux structures cristallines (polytypes) différentes : structure hexagonale encore appelée Wurtzite et la structure cubique (Zinc-blende). Nous présentons dans ce chapitre les propriétés générales que présente l'AlN en comparaison avec les autres nitrures à savoir leurs différentes structures cristallines ainsi que leurs propriétés électroniques et optiques.

L'objectif essentiel de ce chapitre se focalise sur la présentation de la technique utilisé de dépôt des films d'AlN ainsi que les techniques de caractérisation de ces films.

III-2 Propriétés générales des nitrures

III-2.1 La structure cristallographique

La structure stable pour les nitrures des éléments III-V est la phase wurtzite avec une symétrie hexagonale appartenant au groupe d'espace C_{6v}^4 ($P63mc$). Les atomes d'azote forment un réseau hexagonal compact. Les atomes de gallium (indium ou aluminium) occupent la moitié des sites tétraédriques disponibles. On obtient ainsi deux sous-réseaux hexagonaux compacts, un pour les atomes de Ga et l'autre pour l'azote, décalés selon l'axe de la maille c.

Paramètre	AlN	GaN	InN
a	3.112 Å	3.189 Å	3.545 Å
c	4.982 Å	5.185 Å	5.703 Å
$c/a(1.663)$	1.601	1.626	1.608
$u/c(0.375)$	0.382	0.377	0.375

Tableau (3.1). Paramètres cristallographiques des nitrures des éléments III-V [65].

Les paramètres utilisés pour décrire la structure sont le côté a de l'hexagone dans le plan (0001), et le paramètre c correspondant à la hauteur de la maille selon l'axe (0001). Le paramètre c correspond à deux monocouches (MC) atomiques. Le paramètre u est la distance de liaison entre les atomes d'azote et l'élément III (Al, Ga, In) selon l'axe c . Sa valeur pour la structure wurtzite idéale est $3/8c$. Dans les structures réelles, sa valeur donne une indication de l'écart par rapport à la structure wurtzite idéale.

L'axe c de la structure est un axe polaire ce qui implique deux orientations possibles de la maille. L'orientation face gallium, ou [51] est la plus commune et les échantillons étudiés dans ce travail ont tous cette orientation [66].

III-2.2 Structure des bandes

Les nitrures d'éléments III possèdent en général un gap direct c'est à dire que le minimum de la bande de conduction et le maximum de la bande de valence se trouve alignés dans "l'espace des k" au centre de la zone de Brillouin.

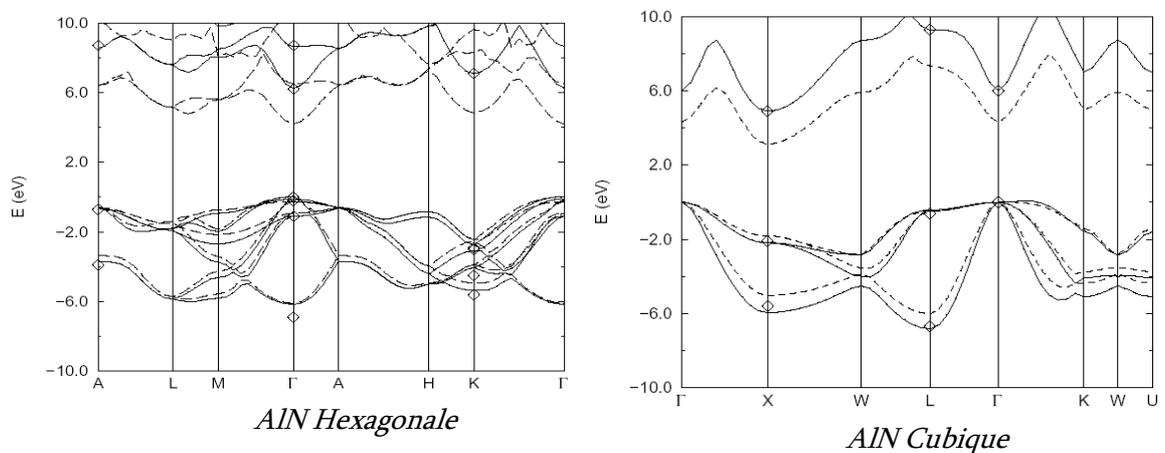


Figure (3 1): Structures de bandes d'AlN calculées dans la phase hexagonale et cubique [67]

Les nitrures d'éléments III sont communément désignés comme "matériaux à large bande interdite". Ceci est justifié par exemple pour l'AlN et le GaN dont le gap correspond aux longueurs d'onde dans l'ultraviolet profond (6.2 eV ou 200 nm) et ultraviolet proche (3.5 eV ou 354 nm), respectivement. La dépendance en température de l'énergie de la bande interdite est décrite par la loi de Varshni :

$$E_g(T) = E_g(T_0) - \frac{\alpha T^2}{T + \beta} \quad (3.1)$$

Où α et β sont des paramètres expérimentaux.

Les masses effectives ont été mesurées expérimentalement [65] et calculées théoriquement [68, 69]. Les valeurs de la masse effective électronique de GaN convergent vers la valeur $0.2(\pm 0.01) \times m_0$. Plusieurs auteurs rapportent une masse anisotrope mais cet effet reste inférieur à l'incertitude de l'ordre 5-10 % [70]. La masse effective d'AlN semble montrer une anisotropie plus forte comme le prévoient les prédictions théoriques [71].

III-2.3 La constante diélectrique et l'indice de réfraction

Pour le GaN, la fonction diélectrique, ϵ et l'indice de réfraction $n(E)$, ont été déterminés à l'aide de plusieurs techniques spectroscopiques (ellipsométrie, réflectivité, transmission et photoluminescence) mais aussi calculés théoriquement [72]. Les valeurs rapportées pour InN et AlN (**tableau (3-3)**) sont pour la plupart des estimations théoriques.

	$\epsilon_{\infty}^{//}$	$\epsilon_{\infty}^{\perp}$	$\epsilon_0^{//}$	ϵ_0^{\perp}	$n(0.8 \text{ eV})$
<i>AlN</i>	4.61 [73, 74]	4.38 [73, 74]	4.19 [75]	4.05 [75]	2.03 ^[76]
	5.31±0.06 [77]	5.18±0.02 [77]	10.4 [78]	9.5 [78]	
<i>GaN</i>	5.31±0.06 [77]	5.18±0.02 [77]	10.4 [78]	9.5 [78]	2.33 ^[76]
	5.41 [73, 74]	5.21 [73, 74]	5.89 [75]	5.87 [75]	
<i>InN</i>	8.4 [10, 11, 16]	8.4 [73, 74, 79]	15.3 [72, 80]	15.3 [72, 80]	
	7.9^[76]	7.61^[76]	7.25 [75]	7.37 [75]	

Tableau (3-3). Constantes diélectriques à haute fréquence (ϵ_{∞}) et statique (ϵ_0) dans les directions parallèle (//) et perpendiculaire (\perp) à l'axe c . La première ligne correspond aux valeurs expérimentales, la deuxième en gras correspond aux calculs. Théorique. La dernière colonne montre la valeur de l'indice de réfraction à 0.8 eV (1.55 μ m).

Pour la structure wurtzite on fait la distinction entre la constante diélectrique (ou l'indice de réfraction) ordinaire dans la direction perpendiculaire à l'axe c , et

extraordinaire parallèle à c . La différence entre les indices ordinaire et extraordinaire (ou biréfringence) à $1.55 \mu\text{m}$ est de l'ordre de 0.042 dans GaN [81].

III-2.4 Polarisation spontanée et l'effet piézoélectrique

L'absence de centre d'inversion et l'iconicité de la liaison métal-azote dans la phase Wurtzite ont des conséquences majeures sur les propriétés physiques. Dans leur état d'équilibre, ces matériaux possèdent une *polarisation spontanée* qui a été calculée par *Bernardini et al.* [82]. Elle provient du fait que les barycentres des charges positives (les atomes de Ga, In, Al) et des charges négatives (les atomes d'azote) ne coïncident pas dans l'espace. On a ainsi la création d'un dipôle dans chaque maille. Ces dipôles s'ajoutent alors à travers la structure pour donner lieu à une polarisation macroscopique. On pourrait, en théorie, observer cette polarisation dans un cristal massif idéal. Dans la réalité, les charges en surface sont écrantées et on ne peut pas observer directement les effets de polarisation. En revanche, dans les hétérostructures composées des couches de matériaux différents, on a une discontinuité de polarisation à chaque interface.

D'autre part, la croissance épitaxiale de couches de matériaux avec des paramètres de maille différents implique une contrainte biaxiale dans le plan. Dans le cas de la wurtzite les éléments non-nuls du tenseur de contrainte sont:

$$\begin{aligned}\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} &= \frac{a_s - a_e}{a_s} \\ \varepsilon_{zz} &= \frac{2C_{13}}{C_{33}} \varepsilon_{xx}\end{aligned}\tag{3.2}$$

Où a_s est le paramètre de maille dans le plan du substrat, a_e celui du matériau de la couche épitaxie à l'équilibre et C_{13} , C_{33} les coefficients élastiques. La polarisation \mathbf{P} induite par la contrainte est alors calculée à partir du produit tensoriel:

$$\begin{pmatrix} P_x \\ P_y \\ P_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & e_{15} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & e_{15} & 0 & 0 \\ e_{31} & e_{31} & e_{33} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \epsilon_{xx} \\ \epsilon_{yy} \\ \epsilon_{zz} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (3.3)$$

Où e_{ij} sont les coefficients piézoélectriques en C/m². On voit immédiatement que seule la composante P_z selon l'axe c est non nulle. Les valeurs des coefficients élastiques et piézoélectriques sont récapitulées dans le tableau III-2

	AlN	GaN	InN
P_{sp} (C/m ²)	-0.081	-0.029	-0.032
P_{sp} (C/m ²)	108	106	92
C_{33} (GPa)	373	398	224
e_{31} (C/m ²)	-0.50	-0.35	-0.57
e_{33} (C/m ²)	1.79	1.27	1.97

Tableau (3.4). Constantes élastiques, coefficients piézo-électriques et polarisation spontanée d'après [65]

III-3 Technique de dépôt

Parmi les techniques de dépôt physique en phase vapeur (PVD), la pulvérisation cathodique en courant continu DC ou radiofréquence RF d'une cible métallique ou semi-conductrice en présence d'un gaz réactif (N₂, O₂, CH₄...), est une technique appliquée aux dépôts de couches minces des composés (oxydes, nitrures, carbures, borures...). Les systèmes de pulvérisation cathodique bénéficient d'une très grande popularité en milieu industriel. Incontestablement, ils sont simples à mettre en œuvre. Ils permettent de déposer des couches denses et d'obtenir une meilleure adhérence de la couche sur le support à température ordinaire.

Le dispositif de dépôt des couches minces de nitrure d'aluminium (AlN) que nous avons utilisé est représenté sur la figure (3.2), comprend principalement une enceinte à décharge, un générateur, une alimentation en gaz, des jauges de pression et une cathode magnétron

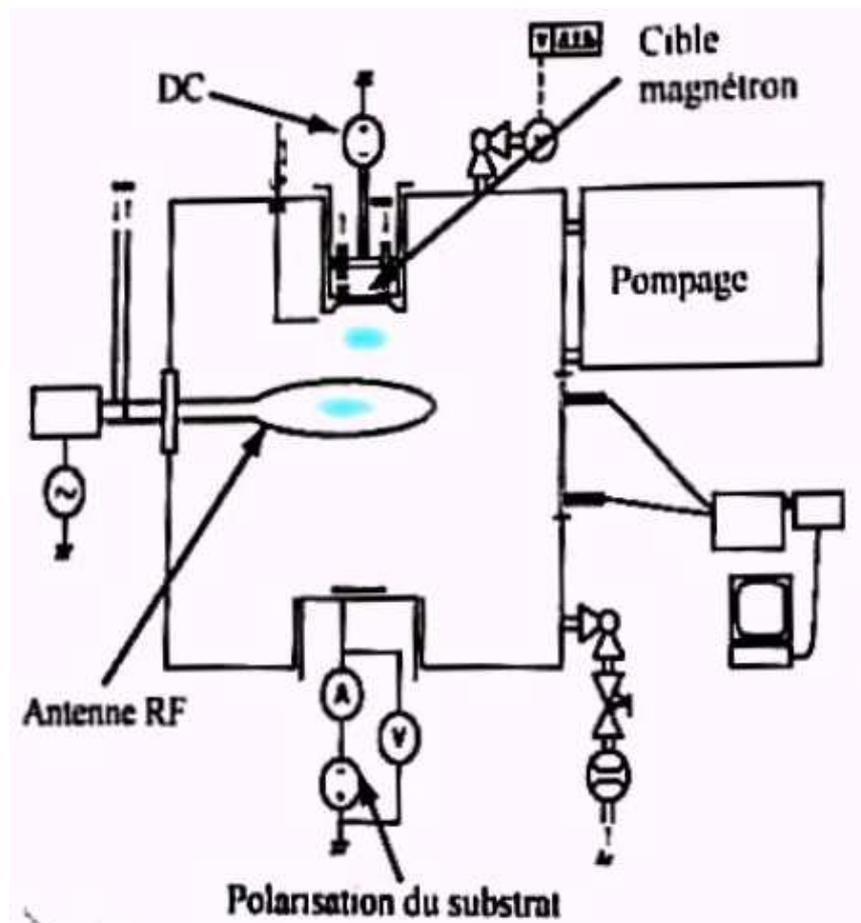
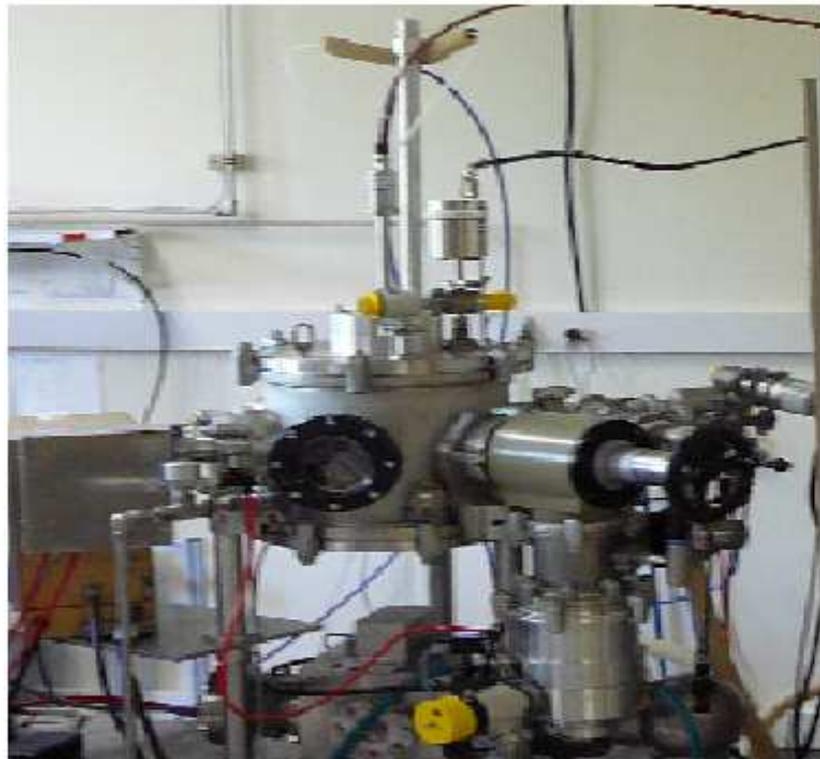


Figure (3 2): Réacteur de pulvérisation magnétron réactive

III-3.1 Technique de dépôt par pulvérisation cathodique

Cette technique consiste à éjecter des particules de la surface d'un solide par le bombardement de cette surface avec des particules énergétiques, en général des ions d'argon. En première approximation ce processus mécanique ne dépend donc que de la quantité de mouvement cédée au moment du choc de l'ion incident de l'atome du solide bombardé. L'effet de pulvérisation est dû essentiellement au transfert de quantité de mouvement des ions incidents aux atomes de la surface du matériau bombardé. L'arrachage d'atomes superficiels se produit lorsque l'énergie effectivement transférée dépasse l'énergie de liaison des atomes. Les ions peuvent provenir d'un plasma, soit directement d'une source d'ions. La caractéristique la plus intéressante du procédé de dépôt par pulvérisation est son universalité la caractéristique la plus intéressante du procédé de dépôt par pulvérisation est son universalité. Il utilise l'érosion des cathodes dans les décharges comme mécanisme d'évaporation de la matière, on peut déposer pratiquement tous les matériaux [83, 84]. Dans ce travail, la technique de dépôt par pulvérisation magnétron sera utilisée.

III-3.2 Enceinte de décharge

Le dispositif est constitué d'une enceinte cylindrique en acier inoxydable et d'un sas. Le dispositif de pompage de l'enceinte permet d'obtenir un vide résiduel de 10^{-6} Pa mesuré par une jauge compacte. L'enceinte comprend un groupe de pompage : pompe palette et une pompe turbo moléculaire. Lors de la décharge la pression est mesurée par une jauge à filament chaud. On ajuste la vitesse de pompage à l'aide d'une électrovanne.

Le porte substrat est équipé d'un élément chauffé par rayonnement permettant d'atteindre des températures élevées et un thermocouple pour la mesure de cette température. L'enceinte peut être alimentée en argons (99.999 %) et en azote (99.999 %).

Les débits des gaz sont contrôlés par des débitmètres. Des régulateurs des gaz (0 à 10 dccm) ont été choisis pour étudier les plus faibles pressions partielles d'azotes dans le plasma.

III-3.3 Cathode magnétron

Une cathode de type planar magnétron peut être utilisé en magnétron RF ou en magnétron continu DC, et refroidie par une circulation d'eau. Le matériau pulvérisé peut être donc conducteur ou isolant. La cible est fixée par l'intermédiaire d'une bague pour permettre un bon contact électrique ainsi qu'une bonne conduction thermique pour obtenir un refroidissement optimum. Nous avons utilisés des cibles d'aluminium de pureté (99.7 %) pour déposer des couches (AlN). Un cache mobile commandé manuellement permet de recouvrir les cibles afin de contrôler le nettoyage des cibles et le temps de dépôt des couches.

III-3.4 Pulvérisation DC

La pulvérisation DC (**Leybold Z-550**) ne peut être utilisée que pour les matériaux conducteurs ou semi-conducteurs car l'utilisation des matériaux isolants provoquerait l'arrêt de la pulvérisation par accumulation des charges à la surface de la cible. Une tension négative est appliquée aux bornes de la cathode, les ions du plasma d'argon sont attirés et accélérés sur le matériau à déposer, arrachant ainsi par un phénomène de transfert de quantité de mouvement, les atomes de la cible. Les électrons secondaires, formés lors de la collision des ions sur la cible, sont accélérés et pénètrent dans le plasma. Ce phénomène est essentiel dans la pulvérisation DC pour entretenir la décharge.

III-3.5 Pulvérisation RF

La pulvérisation RF est utilisée pour déposer des couches conductrices, semi-conductrices et isolantes. La fréquence radiofréquence est de 13.56 MHz du générateur. L'application d'une tension RF provoque, durant l'alternative positive, un flux d'électrons vers l'électrode excitatrice alors que pendant l'alternative négative un faible courant atteint cette électrode. Comme aucune charge électrique

ne peut s'écouler par l'électrode en raison du couplage capacitif, la surface de celle-ci accumule les charges négatives dues au courant électronique. Elle va progressivement s'autopolariser négativement jusqu'à ce que le courant total qui atteint l'électrode au cours du cycle soit nul.

Protocole de dépôt des films de Nitrure d'aluminium (AlN).

Le protocole que nous avons utilisé pour déposer des couches minces d'AlN est le suivant :

- Nettoyage des échantillons par éthanol dans un bain ultrason pendant 10 mn puis un séchage par l'azote.
- Introduire les échantillons dans la chambre du plasma et attendre un vide résiduel qu'il soit inférieur à 2.10^{-5} torr.
- Nettoyage de la cible par un plasma d'argon pendant 10 mn.
- Nituration de la cible pendant 10 min tout en observant le courant de la décharge qu'il devient stable et on commence le dépôt avec pourcentage 30% d'azote $P_N/(P_{Ar}+P_N)$ on règle la quantité du gaze par vanne réglable.
- On enlève la cache et on commence le dépôt.
- Enfin, on remet la cache puis on arrête l'alimentation de notre générateur DC.
- Attendre presque une heure pour refroidir le fil.

III-4 Techniques de caractérisation

Dans ce paragraphe nous allons rappeler brièvement le fonctionnement des différents moyens de caractérisation mis en œuvre, à savoir, la diffraction des rayons X, la microscopie électronique à balayage pour les caractérisations physico-chimiques et la spectroscopie infrarouge.

III-4.1 La Diffraction des RX

Un faisceau incident de rayons X dichromatique correspondant aux raies $K\alpha_1$ et $K\alpha_2$ du Cuivre ($\lambda_1 = 0.15406$ nm et $\lambda_2 = 0.15444$ nm), est dirigé sur la surface de l'échantillon à mesurer (Figure (3.3)).

Les rayons X interagissent avec les nuages électroniques des atomes, et sont diffusés. L'intensité de l'onde diffractée est alors mesurée par un compteur Geiger disposé de façon symétrique à la source par rapport à la normale de l'échantillon.

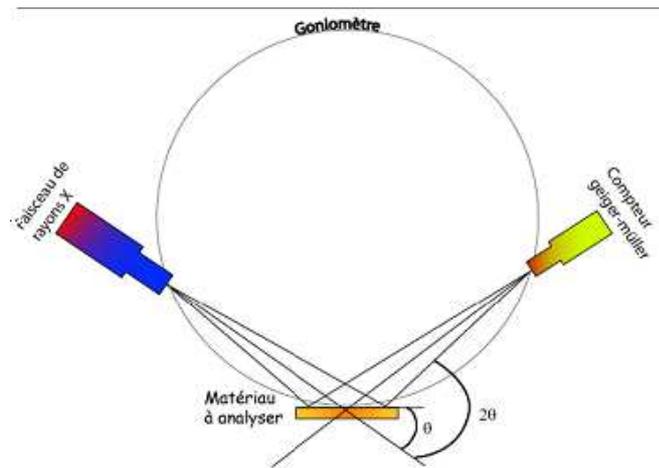


Figure (3.3) Schéma de fonctionnement en mode $\theta-2\theta$

La particularité d'un diffractomètre $\theta-2\theta$, réside dans le fait de faire tourner le compteur d'un angle 2θ lorsque le porte échantillon tourne d'un angle θ , la source X restant fixe. Ceci permet d'effectuer un balayage angulaire de la couche 0 à $\pi/2$.

Lorsque les conditions de Bragg sont remplies, le compteur enregistre un pic d'intensité réfléchi. Ainsi, sur un diagramme $I = f(\theta)$ la position des pics caractérise le réseau cristallin.

La cristallinité des films de nitrure d'aluminium (AlN) a été mesurée par la diffraction des RX de la raie $\text{CuK}\alpha$ d'un diffractomètre de type (D500 MOXTEK).

Condition de BRAGG et loi de SCHERRER.

Dans le cas où le faisceau rencontre une structure cristalline, une diffraction peut avoir lieu lorsque les ondes associées aux rayons X sont en phase. Ce phénomène est régi par la condition de Bragg :

$$2d_{hkl} \sin \theta = n\lambda \quad (3.4)$$

d_{hkl} : distance interréticulaire entre les plans (hkl) du réseau cristallin.

θ : angle d'incidence des RX par rapport à la surface de l'échantillon.

λ : longueur d'onde des rayons incidents.

n : entier caractérisant l'ordre du mode de diffraction.

Aussi, chaque famille de plans cristallins ayant des distances interréticulaire différentes, est à l'origine d'un faisceau diffracté provenant d'une incidence θ_0 unique, tout du moins en théorie. En pratique, on aura une légère dispersion des valeurs autour de θ_0 lié aux imperfections du réseau.

La largeur des raies nous renseigne sur la taille des cristallites diffractantes, en effet, suivant la loi de Scherrer (Équation (3.4)) cette largeur est inversement proportionnelle à la taille t (en Å) des cristallites.

Dans le cadre de cette étude sur les films AlN, nous nous intéresserons à la raie (002), orientation qui prolonge le substrat de Si(100), dont l'angle associé 2θ est de 41.38° . L'apparition d'autres raies serait significative d'une nature polycristalline.

III-4.2 La microscopie électronique à transmission

III-4.2.1 Principe

Par opposition à la diffraction X exposée précédemment, qui fournit des informations moyennées sur un volume macroscopique, la microscopie électronique à transmission (MET) figure (3.4), permet l'étude locale d'une structure, allant de l'échelle nanométrique pour la basse résolution, jusqu'à quelques Angströms en haute résolution.

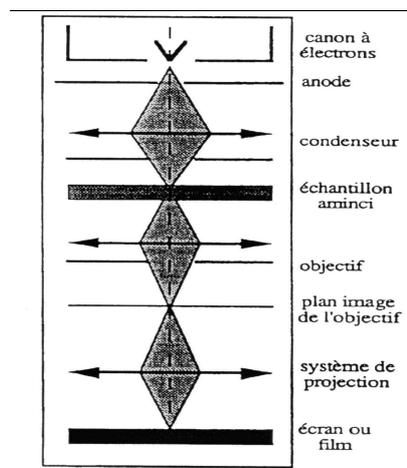


Figure (3.4) : Schéma de principe d'un microscope électronique à transmission.

III-4.2.2 Préparation des échantillons

Pour pouvoir être étudié par TEM, l'objet doit se présenter sous forme de lames minces de quelques dizaines de nanomètres d'épaisseur. Cette étape a pour but de rendre l'échantillon transparent au faisceau d'électron accéléré sous haute tension.

La Figure (3.5) résume les différentes étapes de la préparation. Après avoir collé deux morceaux de l'échantillon face à face (a), fixés sur un plot adapté (b), puis découpés transversalement (c), on procède à l'étape d'amincissement.

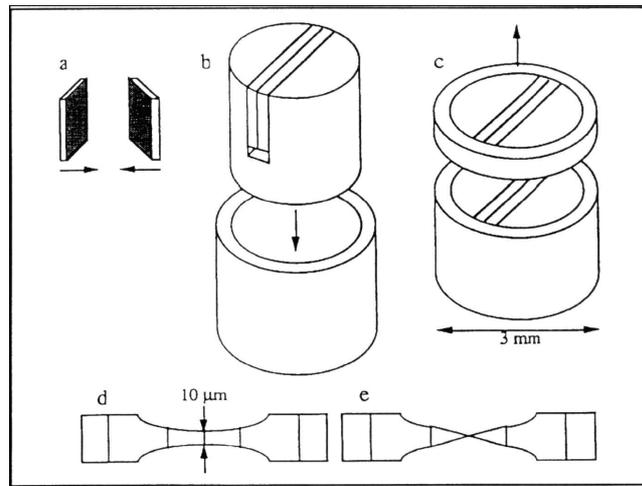


Figure (3.5) : Étapes successives de la préparation d'une lame mince.

Cette étape se déroule en deux phases. Elle débute par un amincissement préliminaire, effectué par abrasion mécanique (d) afin d'arriver à une épaisseur de quelques dizaines de microns. Par la suite, l'amincissement final est obtenu par abrasion ionique (e), l'échantillon étant placé dans le vide et exposé à un jet d'ions. Afin d'obtenir une lame en biseau avec une zone observable suffisamment grande, l'angle d'incidence du faisceau d'ions est de 8° .

III-4.2.3 Les modes d'observation imagerie

III-4.2.3.1 Imagerie conventionnelle

L'image est réalisée en sélectionnant une onde par l'intermédiaire du diaphragme objectif et en orientant le cristal de telle sorte qu'il n'existe qu'une onde

diffraquée intense en plus de l'onde incidente. Les autres ondes de faible intensité sont négligées.

Si l'onde transmise est sélectionnée, (Figure. (3.6a)) l'image formée est dite en *champ clair* où les parties sombres correspondent à des zones de l'échantillon qui ont diffracté une importante partie des électrons incidents.

Si le faisceau diffracté est sélectionné (Figure. (3.6b)) (le faisceau est ramené sur l'axe optique en inclinant le faisceau incident) on obtient une image dite en *champ sombre* où seules les régions de l'échantillon possédant des plans cristallographiques en condition de diffraction, sont claires.

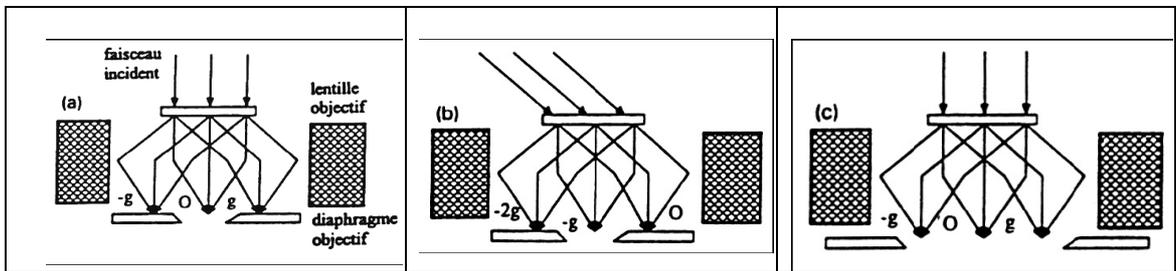


Figure (3.7) Les différents modes d'imagerie: a) Champ clair, b) Champ sombre, c) Haute résolution.

III-4.2.3.2 Imagerie haute résolution (HRTEM)

La microscopie haute résolution est une technique remarquable pour 'voir' directement des atomes ou des groupes d'atomes. Elle est basée sur le principe d'interférence entre le faisceau transmis et un ou plusieurs faisceaux diffractés par les différents plans réticulaires participant à la formation de l'image (figure (3.6c)). Cependant le microscope n'est pas un système optique parfait et induit des aberrations dans la formation de l'image d'interférences, en particulier l'aberration de sphéricité C_s plus gênante que l'aberration chromatique C_c . Par ailleurs une légère modification de la distance focale de l'objectif déplace le plan objet de cette lentille d'une quantité Dz appelée défocalisation à la face de sortie de l'objet.

Nous avons utilisé la diffraction électronique, l'imagerie conventionnelle et l'imagerie à haute résolution (HRTEM).

III-4.3 Spectroscopie infrarouge

La spectroscopie infrarouge (IR) est un outil couramment utilisé dans le domaine de caractérisation des couches minces ayant les (ou des) constituants ou une éventuelle contamination, actifs dans le domaine IR. Ce dernier s'étale entre 5 et 12500 cm^{-1} , et se compose de trois régions, l'infrarouge proche (PIR) (12500 à 4000 cm^{-1}), l'infrarouge moyen (MIR) (400 - 4000 cm^{-1}), et l'infrarouge lointain (IRL) (200 à 2 cm^{-1}).

Dans un échantillon soumis à une irradiation par des rayons IR, un transfert d'énergie s'effectue avec les modes de vibration et de rotation des liaisons atomiques. Cet échange ne peut avoir lieu qu'à la résonance entre la fréquence du rayon incident et les fréquences de vibration de la molécule. A cette condition, la mise en vibration du moment dipolaire de la molécule prélèvera de l'énergie sur l'onde, ce qui se traduira par l'apparition d'une bande d'absorption dans le spectre IR.

Le spectromètre utilisé est un appareil du type FTIR Nicollet 5-PC spectrophotomètre. Il s'agit d'un dispositif à transformée de Fourier, et il couvre le domaine spectral de l'infrarouge moyen de 4000 à 400 cm^{-1} ($2,5$ à $25\text{ }\mu\text{m}$), avec une résolution maximale de 2 cm^{-1} . La plupart des mesures expérimentales ont été réalisées en adoptant une résolution de 4 cm^{-1} .

Il est constitué par trois éléments essentiels, une séparatrice, un miroir fixe et un miroir mobile (figure (3.8)). La radiation provenant de la source est divisée en

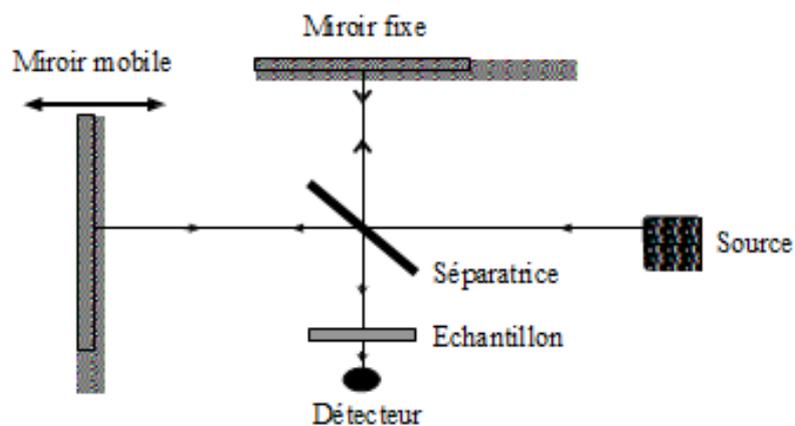


Figure (3.8) Schéma d'un spectromètre à transformée de Fourier FTIR (FTIR)

deux au niveau de la séparatrice, placée à un angle de 45° par rapport au faisceau incident. Une moitié du rayonnement illumine un miroir fixe et l'autre un miroir mobile, et après réflexion, la recombinaison des deux rayons au delà de la séparatrice donne naissance à des interférences destructives ou constructives.

Le faisceau résultant traversant ensuite l'échantillon donnera lieu à des absorptions aux longueurs d'ondes caractéristiques du matériau traversé. Le détecteur reçoit simultanément toutes les fréquences, et permet de faire l'acquisition de l'interférogramme en fonction de la position du miroir mobile. La transformée de Fourier permet ensuite de transformer cet interférogramme en un spectre de transmission en fonction du nombre d'ondes, respectivement de la fréquence.

Avant d'effectuer des mesures sur un échantillon, on procède à la mesure d'une référence sur un substrat découpé dans la même rondelle que celle utilisée comme substrat pour le dépôt. Ceci permet de soustraire la réponse spectrale du substrat, et de garder uniquement celle du film déposé. Pour réduire le bruit lors des mesures, fréquemment rencontré lorsque l'épaisseur du film est très faible, on augmente le nombre de balayages. L'analyse des spectres IR porte essentiellement sur trois aspects : la position, l'intensité et la forme des bandes absorbées.

Grâce aux données de la littérature tableau (3.5), le premier permet d'identifier les espèces chimiques présentes dans le film. La maille de nitrure d'aluminium contient quatre atomes qui donne neuf modes optique et trois modes acoustiques lorsque ($k=0$). La représentation réductible s'écrit $\Gamma = 1A_1 + 1E_1 + 2E_2 + 2B_1$. Où (A_1 et E_1) sont des branches actives en infrarouge, (A_1 , E_1 et E_2) sont actives en Raman et B_1 est inactive dans les deux spectres.

	E_2^l	B_1^l	$A_1(TO)$	$E_1(TO)$	E_2^h	B_1^h	$A_1(LO)$	$E_1(LO)$
<i>Exper. [85, 86]</i>	252		614	673	660		893	916
<i>Exper. [87]</i>	241		607		660			924

Tableau (3.5) : Fréquences en cm^{-1} des phonons aux centres de la zone de Wurtzite d'AlN.

III-5 Conclusion

La technique PVD (Pulvérisation Vapor Déposition) magnétron présenté dans ce chapitre était utilisée pour déposer des films (couches minces) de nitrure d'aluminium (AlN) sur substrats de silicium. Les différentes techniques tels que la diffraction des rayons X (DRX), l'imagerie haute résolution (HRTEM) et la technique transmission infrarouge (FTIR) ont été utilisées pour la caractérisation de ces films.

Grace aux observations et constatations après la caractérisation des films d'AlN déposé sur substrat silicium et en se basant sur la manière de croissance des films en fonction de l'épaisseur, nous avons établis un modèle de caractérisation de transmission infrarouge (FTIR) et qui fera l'objet du prochain chapitre.

CHAPITRE VI:
MODELISATION DE LA TRANSMISSION
OPTIQUE EN INFRAROUGE (IR) DES
FILMS POLYCRISTALLINS D'ALN

Chapitre d'équation 4 Section 4

VI-1 Introduction

Ce chapitre est organisé en trois grandes parties. Dans la première partie on rappelle les notions concernant la propagation d'une onde électromagnétique dans un milieu anisotrope uniaxe. La seconde partie sera consacrée aux calculs des grandeurs utilisées dans le calcul des spectres de transmission entre trois milieux (*milieu isotrope/milieu anisotrope uniaxe et absorbant/ milieu isotrope*). Dans la dernière partie, on présentera un modèle diélectrique proposé sur la base des caractérisations expérimentales des films d'AlN afin de déterminer les paramètres optiques du nitrure d'aluminium hexagonal. A la fin nous donnerons une conclusion.

VI-2 Propagation d'une onde électromagnétique dans un milieu anisotrope uniaxe

VI-2.1 Équations de Maxwell

La propagation des ondes électromagnétique (E.M.) est décrite par les équations de Maxwell. Ces équations relient le champ électrique \vec{E} , le champ magnétique \vec{B} , le vecteur excitation magnétique \vec{H} , le déplacement électrique \vec{D} , la densité de courant \vec{J} et la charge électrique ρ par les équation suivantes :

$$\vec{\text{rot}} \vec{E} = - \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \quad (4.1)$$

$$\vec{\text{rot}} \vec{H} = \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} \quad (4.2)$$

$$\text{div} \vec{D} = \rho \quad (4.3)$$

$$\text{Div} \vec{B} = 0 \quad (4.4)$$

A ces équations il faut ajouter les équations de la matière qui décrivent le comportement du milieu vis-à-vis l'action du champ E.M. elles sont données par :

$$\vec{J} = \sigma \vec{E} \quad (4.5)$$

$$\vec{D} = \varepsilon_0 \varepsilon_r \vec{E} = \varepsilon \vec{E} \quad (4.6)$$

$$\vec{B} = \mu_0 \mu_r \vec{H} \quad (4.7)$$

Où σ est la conductivité électrique, ε_r et ε_0 sont respectivement la permittivité diélectrique du milieu et du vide μ_r et μ_0 sont respectivement la perméabilité magnétique du milieu et du vide. ε_0 et μ_0 sont reliés par $c^2 \varepsilon_0 \mu_0 = 1$

Dans la suite, nous ne considérons que les propriétés optiques des milieux diélectriques (densité de charge σ et la densité de courant \vec{J} sont nulles), non magnétiques $\vec{B} = \mu_0 \vec{H}$, linéaires et homogènes. Lorsqu'un tel milieu est soumis à un champ électrique, la distribution des charges électrique qui constitue les atomes et les molécules est altérée. Ceci produit un moment dipolaire électrique décrit par le vecteur polarisation électrique \vec{P} . Le vecteur déplacement électrique est donné par la relation :

$$\vec{D} = \varepsilon \vec{E} = \varepsilon_0 \vec{E} + \vec{P} \quad (4.8)$$

ε est relié à l'indice de réfraction par :

$$\varepsilon = n^2 \quad (4.9)$$

Il est à noter que les équations utilisées pour décrire la propagation d'une onde électromagnétique dans un milieu non absorbant sont formellement identiques à celles d'un milieu absorbant à condition de remplacer la permittivité diélectrique réelle ε , par la permittivité complexe ε écrite sous la forme $\varepsilon = \varepsilon' + i\varepsilon''$. Où ε' et ε'' sont respectivement la partie réelle et la partie imaginaire de ε . De même l'indice de réfraction s'écrit sous la forme complexe $n = n + ik$, où n , partie réelle correspond à l'indice de réfraction et k , partie imaginaire, correspond à l'indice d'extinction.

A partir de la relation $n^2 = \epsilon'$ qui relie n et ϵ' , on peut établir deux expressions (voir annexe A1) reliant n et k à ϵ' et ϵ'' , soient :

$$k = \left(\frac{1}{2} \left(\sqrt{\epsilon'^2 + \epsilon''^2} - \epsilon' \right) \right)^{1/2} \quad \text{et} \quad n = \left(\frac{1}{2} \left(\sqrt{\epsilon'^2 + \epsilon''^2} + \epsilon' \right) \right)^{1/2} \quad (4.10)$$

VI-2.2 Tenseur diélectrique

Le tableau (4.1) montre que les milieux des films d'AlN de structure hexagonale sont anisotrope uniaxe

Système cristallin	Classe	Symétrie
Cubique	23, $m\bar{3}$, $\bar{4}3m$, 432, $m\bar{3}m$	Isotrope
Hexagonal	$6, \bar{6}, \frac{6}{m}, 6mm, 62m, \bar{6}22, \frac{6}{m}mm$	Uniaxe
Trigonal	$3, \bar{3}, 3m, 32, \bar{3}m$	
Tétragonal	$4, \bar{4}, \frac{4}{m}, 4mm, \bar{4}2m, 422, \frac{4}{m}mm$	
Orthorhombique	$mm2, 222, mmm$	biaxe
Monoclinique	$m, 2, \frac{2}{m}$	
Triclinique	$1, \bar{1}$	

Tableau (4.1) : l'appartenance d'un cristal à une classe optique.

Quand le milieu est anisotrope la permittivité diélectrique ϵ s'écrit sous une forme tensorielle, et dans un système d'axes (x y z) donné, la correspondance entre les composantes de D et les composantes de E sont alors de la forme :

$$\begin{pmatrix} D_x \\ D_y \\ D_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \epsilon_{xx} & \epsilon_{xy} & \epsilon_{xz} \\ \epsilon_{yx} & \epsilon_{yy} & \epsilon_{yz} \\ \epsilon_{zx} & \epsilon_{zy} & \epsilon_{zz} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} E_x \\ E_y \\ E_z \end{pmatrix} \quad (4.11)$$

On peut toujours choisir une base d'axe $\vec{x}, \vec{y}, \vec{z}$ appelés axes diélectriques principaux du milieu, tel que les éléments non diagonaux de l'équation (4.11) s'annulent. Ainsi le tenseur ϵ_{ij} s'écrit sous la forme :

$$\varepsilon = \begin{pmatrix} \varepsilon_x & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_y & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_z \end{pmatrix} \quad (4.12)$$

Dans le cas où $\varepsilon_x \neq \varepsilon_y \neq \varepsilon_z$ le milieu est dit anisotrope biaxe, dans le cas où $\varepsilon_x = \varepsilon_y \neq \varepsilon_z$ le milieu est dit anisotrope uniaxe. Suivant les valeurs de ε_x , ε_y et ε_z , le milieu est dit uniaxe négatif lorsque $\varepsilon_x = \varepsilon_y > \varepsilon_z$, ou uniaxe positif lorsque $\varepsilon_x = \varepsilon_y < \varepsilon_z$.

On note que le nitrure d'aluminium (AlN) est un *diélectrique et de symétrie hexagonale*.

VI-2.4 Propagation dans un milieu anisotrope uniaxe

Dans la suite de ce document, on s'intéresse à ce type de milieu anisotrope uniaxe. Soit (x, y, z) un système d'axe principal dans lequel le tenseur diélectrique

est de la forme $\begin{pmatrix} \varepsilon_o & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_o & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_e \end{pmatrix}$, où $n_o = \sqrt{\varepsilon_o}$ et $n_e = \sqrt{\varepsilon_e}$, n_o et n_e étant respectivement

les indices de réfraction principaux ordinaire et extraordinaire.

VI-2.5 Surface des indices dans un matériau anisotrope uniaxe

Dans un milieu uniaxe anisotrope, l'équation de Fresnel s'écrit comme :

$$\sum_i \frac{s_i^2}{\frac{1}{n_i^2} - \frac{1}{n^2}} = 0 \quad (4.13)$$

Où $k = \omega \frac{n}{c} \vec{s}$ (\vec{s} vecteur unitaire colinéaire à \vec{k} figure (4.1a)).

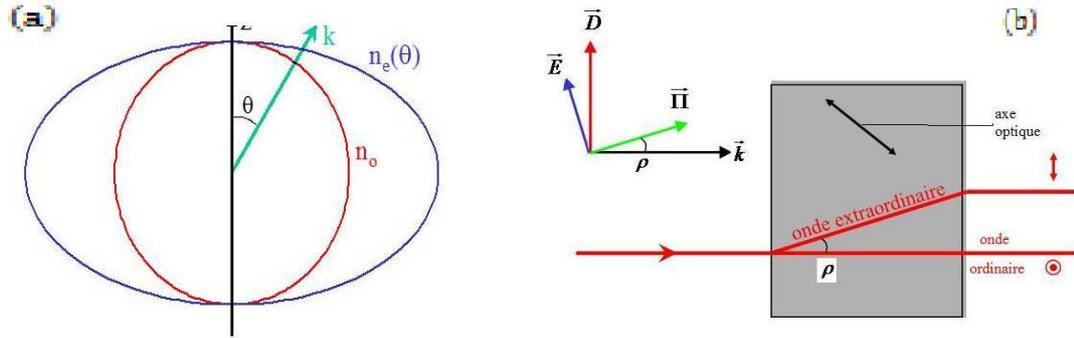


Figure (4.1) (a) Surface des indices d'un matériau uniaxe, (b) L'angle de double réfraction formé entre l'onde ordinaire et extraordinaire dans un matériau uniaxe

On en déduit deux valeurs possible de n pour chaque \vec{s}

- Matériau isotrope $n_x = n_y = n_z = n$
- Matériau uniaxe $n_x = n_y = n_o$, $n_z = n_e$ (n_o indice ordinaire, n_e indice extraordinaire et z l'axe optique).
- Matériau biaxe $n_x \neq n_y \neq n_z$

Dans le cas d'un matériau uniaxe les indices ordinaires et extraordinaires sont reliés par l'équation suivante :

$$\frac{1}{n^2(\theta)} = \frac{\cos^2(\theta)}{n_o^2} + \frac{\sin^2(\theta)}{n_e^2} \quad (4.14)$$

Lors de la traversé d'une onde par un milieu uniaxe cette dernière se réfracte en une onde ordinaire et une extraordinaire et forme un angle de double réfraction ρ figure (4.1b). Cette dernière est donnée par :

$$\tan g(\rho) = \frac{n_e^2(\theta)}{2} \sin(2\theta) \left(\frac{1}{n_e^2} - \frac{1}{n_o^2} \right) \quad (4.15)$$

VI-2.6 Expression de la fonction diélectrique effective de films texturés

Schubert [88, 89] a supposé que les cristallites constituant le film, admettant une taille moyenne entre 5-10 nm de diamètre, présentent une orientation

préférentielle de leur axe optique axe-c par rapport à la normale (voir figure (4.2a)) repéré par l'angle θ_c . Cette angle peut varier de 0 à $\pi/2$.

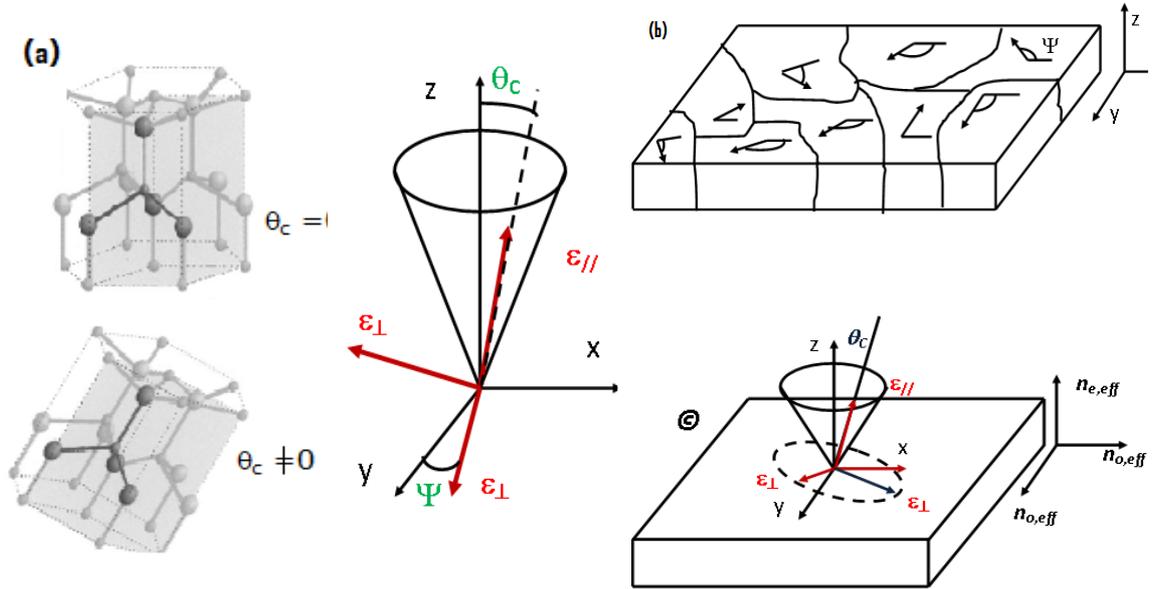


Figure (4.2) Modèle géométrique de l'anisotropie de la microstructure du film *h*-AlN texturé modèle de Schubert.

La projection des axes-c sur le plan du film est aléatoire, ceci peut être déduit de la réponse spectrale IR des couches, en effet une rotation de l'échantillon autour de la normale au substrat n'apporte aucune modification sur les spectres IR en transmission. Dans le cas contraire, on devrait observer un déplacement des modes LO. La projection des axes-c est repérée par un angle Ψ (voir figure (4.2b)). Schubert [89] a proposé une modélisation de la fonction diélectrique effective de ce type de structure, traduisant une réponse optique moyenne des cristallites, en intégrant sur toutes les valeurs possibles de l'angle Ψ , allant de 0 à 2π (annexe A). [88]

L'expression de cette fonction (figure (4.2c)) se sépare en une composante ordinaire $\epsilon_{o,eff}$ dans le plan, et une composante extraordinaire $\epsilon_{e,eff}$ perpendiculaire au plan, sont données par les relations suivantes :

$$\epsilon_{o,eff} = \frac{1}{4} \{ (3 + \cos(2\theta_c)) \epsilon_{\perp} + (1 - \cos(2\theta_c)) \epsilon_{\parallel} \} \quad (4.16)$$

$$\epsilon_{e,eff} = \epsilon_{\parallel} \cos^2(\theta_c) + \epsilon_{\perp} \sin^2(\theta_c) \quad (4.17)$$

Dans ces deux dernières équations ε_{\perp} et $\varepsilon_{//}$ représentent respectivement les fonctions diélectriques du cristal massif suivant les directions perpendiculaires et parallèle. ε_{\perp} et $\varepsilon_{//}$ sont données par l'expression classique d'une fonction de dispersion, de forme lorentzienne [89], donné par l'expression :

$$\varepsilon_{//,\perp} = \varepsilon_{\infty//,\perp} \left(1 + \frac{(\omega_{LO//,\perp}^2 - \omega_{TO//,\perp}^2)}{\omega_{TO//,\perp}^2 - \omega^2 - i\omega\Gamma_{//,\perp}} \right) \quad (4.18)$$

Où $\varepsilon_{\infty//,\perp}$ est la constante diélectrique mesuré dans un champ variable de très haute fréquence par rapport aux fréquences de vibration du milieu. $\varepsilon_{\infty//,\perp}$ est relié à la constante diélectrique statique $\varepsilon_{0//,\perp}$ par la relation de Lyddane, Sachs, Teller [89],:

$$\frac{\omega_{LO//,\perp}^2}{\omega_{TO//,\perp}^2} = \frac{\varepsilon_{0//,\perp}}{\varepsilon_{\infty//,\perp}} \quad (4.19)$$

$\Gamma_{//,\perp}$, $\omega_{LO//,\perp}$ et $\omega_{TO//,\perp}$ sont respectivement l'amortissement et les fréquences de vibrations des modes longitudinaux (LO) et transverses (TO).

VI-2.7 Coefficients de Fresnel dans matériau anisotrope uniaxe

Les coefficients de Fresnel expriment les liens entre les amplitudes des ondes réfléchies et transmises et l'amplitude de l'onde incidente. Ils dépendent des angles d'incidence, de réflexion et de réfraction, ainsi que des constantes diélectriques des milieux d'entrée et de sortie, ils dépendent aussi de la polarisation des ondes.

Une onde plane **polarisée** P (//) ou S (\perp) incidente d'un milieu supposé anisotrope uniaxe et absorbant subit une réflexion et une réfraction au niveau de l'interface d'un milieu supposé aussi anisotrope et absorbant. Sur la figure (4.3a) on a représenté tous les paramètres caractérisant la nature de ces milieux pour chaque polarisation.

On note ici que lorsque l'onde est polarisée parallèlement dans un milieu uniaxe le champ électrique $\vec{E}^{//}$ et le vecteur d'onde $\vec{k}^{//}$ forment entre eux un angle

de double réfraction ρ donné par l'équation (4.22). Si on suppose de plus que les deux milieux sont absorbants les angles ont des valeurs complexes.

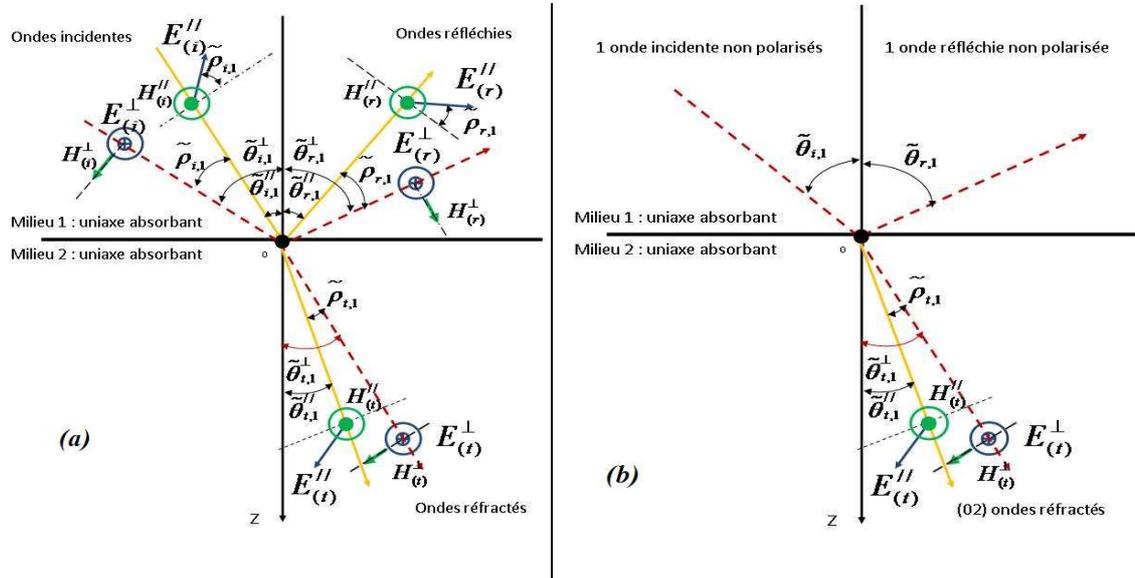


Figure (4.2) Propagation au voisinage d'une interface entre deux milieux uniaxes absorbants des ondes polarisés parallèles ($//$) Lignes continues et perpendiculaires (\perp) lignes discontinues. (a) Une onde polarisée ($//$ ou \perp) donne naissance à une onde réfléchie ($//$ ou \perp) et une réfracté ($//$ ou \perp). (b) Une onde non polarisée donne naissance à une onde réfléchie non polarisée et deux ondes réfractés ($//$ et \perp)

On définit les coefficients de réflexion $r_{12}^{//}$ et de transmission $t_{12}^{//}$. A l'interface ($z=0$), les conditions aux limites de la continuité des champs électriques magnétiques \vec{E} et \vec{H} des composantes tangentielle conduisent aux équations pour ces deux coefficients (équations de Fresnel pour la polarisation TM ($//$)) :

$$r_{12}^{(//)} = \frac{E_{(r)}^{//}}{E_{(i)}^{//}} = \frac{n_1 \cos(\tilde{\rho}_1) \cos(\tilde{\theta}_2 + \tilde{\rho}_2) - n_2 \cos(\tilde{\rho}_2) \cos(\tilde{\theta}_1 + \tilde{\rho}_1)}{n_1 \cos(\tilde{\rho}_1) \cos(\tilde{\theta}_2 + \tilde{\rho}_2) + n_2 \cos(\tilde{\rho}_2) \cos(\tilde{\theta}_1 + \tilde{\rho}_1)}$$

$$t_{12}^{(//)} = \frac{E_{(t)}^{//}}{E_{(i)}^{//}} = \frac{2n_1 \cos(\tilde{\rho}_1) \cos(\tilde{\theta}_1 + \tilde{\rho}_1)}{n_1 \cos(\tilde{\rho}_1) \cos(\tilde{\theta}_2 + \tilde{\rho}_2) + n_2 \cos(\tilde{\rho}_2) \cos(\tilde{\theta}_1 + \tilde{\rho}_1)}$$
(4.20)

De même, les équations de Fresnel pour la polarisation TE (\perp)

$$r_{12}^{(\perp)} = \frac{E_{(r)}^{\perp}}{E_{(i)}^{\perp}} = \frac{n_1 \cos(\tilde{\theta}_1) - n_2 \cos(\tilde{\theta}_2)}{n_1 \cos(\tilde{\theta}_1) + n_2 \cos(\tilde{\theta}_2)}$$

$$t_{12}^{(\perp)} = \frac{E_{(t)}^{\perp}}{E_{(i)}^{\perp}} = \frac{2n_1 \cos(\tilde{\theta}_1)}{n_1 \cos(\tilde{\theta}_1) + n_2 \cos(\tilde{\theta}_2)}$$
(4.21)

VI-2.7 Indice de réfraction dans un matériau anisotrope uniaxe

VI-2.7.1 Axe optique parallèle à la normale de la surface de séparation

Considérons un milieu où l'axe optique est parallèle à la normale de la surface de séparation des milieux 1 et 2. :

- Toute onde incidente **non polarisée** et faisant un angle avec la normale, donne naissance à une onde réfléchie et deux ondes réfractés [33], une onde ordinaire et l'autre extraordinaire (Voir Figure 4.2 a)
- Une onde incidente **polarisé S (L)** donne naissance à une onde réfléchie et une seule onde réfracté [90] (Voir Figure 4.2 b), son déplacement électrique vibre suivant la direction \vec{ox} . L'indice vu par cette onde est :

$$\tilde{n}_2 = \tilde{n}_o \quad (4.22)$$

- Une onde incidente **polarisé P (//)** donne naissance à une onde réfléchie et une onde réfracté. Cependant son déplacement électrique est contenu dans le plan (y,z). L'indice est calculé à partir de l'équation de diffraction de Snell Descartes et l'équation (4.21) :

$$\tilde{n}_2 = \left(\tilde{n}_o^2 + \sin^2(\tilde{\theta}_{1,i})^2 \left(\frac{\tilde{n}_e^2 - \tilde{n}_o^2}{\tilde{n}_e} \right) \right)^{1/2} \quad (4.23)$$

VI-2.7.2 Axe optique quelconque

Soit le repère $(o, \vec{x}, \vec{y}, \vec{z})$ relié à la surface de séparation entre le milieu 1 et le milieu 2 et soit le repère $(o, \vec{a}, \vec{b}, \vec{c})$ relié au milieu anisotrope et uniaxe, le passage entre ces deux repères est effectué par deux rotations, la première autour de l'axe \vec{z} avec un angle ψ et la deuxième autour de l'axe \vec{a} avec un angle θ_c . (x, y, z) et (a, b, c) sont respectivement les coordonnées d'un point M dans les repères absolu et principal. Elles sont reliées entre elles par :

$$\begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos(\psi) & \sin(\psi) & 0 \\ -\cos(\theta_c)\sin(\psi) & \cos(\theta_c)\cos(\psi) & -\sin(\theta_c) \\ -\sin(\theta_c)\sin(\psi) & \sin(\theta_c)\cos(\psi) & \cos(\theta_c) \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \quad (4.24)$$

Soit un point M (a, b, c) appartenant à l'ellipsoïde des indices, il vérifie le système d'équation donné par :

$$\begin{cases} \frac{a^2}{\varepsilon_{\perp}} + \frac{b^2}{\varepsilon_{\perp}} + \frac{c^2}{\varepsilon_{//}} = \frac{1}{\varepsilon_2} \\ a^2 + b^2 + c^2 = 1 \end{cases} \quad (4.25)$$

Dans le cas de **polarisation s** (\perp), le déplacement électrique ainsi que le champ électrique sont portés dans la direction \vec{z} ce qui fait qu'ils ont des composantes nuls dans les autres directions ce qui conduit à l'expression suivante de l'indice de réfraction :

$$\tilde{n}_s = \sqrt{\varepsilon_2} = \left(\frac{\varepsilon_{\perp}\varepsilon_{//}}{(\sin(\psi)\sin(\theta_c))^2(\varepsilon_{\perp} - \varepsilon_{//}) + \varepsilon_{//}} \right)^{1/2} \quad (4.26)$$

Dans le cas de **polarisation P** ($//$), le déplacement électrique ainsi que le champ électrique sont portés dans la direction (yoz), donc $x=0$ $\tilde{\varepsilon}_2$ peut être exprimé en fonction des paramètres $\tilde{\theta}_{1,i}^{\perp}$, θ_c , ψ , $\tilde{\varepsilon}_{\perp}$, $\tilde{\varepsilon}_{//}$ suivant l'équation :

$$\frac{1}{\tilde{\varepsilon}_2} = \frac{1}{\tilde{\varepsilon}_{\perp}} + (A + B \sin^2(\tilde{\theta}_{1,i}^{\perp}) + C \sin(2\tilde{\theta}_{1,i}^{\perp})) \left(\frac{1}{\tilde{\varepsilon}_{//}} - \frac{1}{\tilde{\varepsilon}_{\perp}} \right) \quad (4.27)$$

$$\text{avec : } \begin{cases} \frac{1}{\tilde{\varepsilon}} = \left(\frac{1}{\tilde{\varepsilon}_{//}} - \frac{1}{\tilde{\varepsilon}_{\perp}} \right) \\ A = \frac{1}{\tilde{\varepsilon}_{\perp}} + \frac{1}{\tilde{\varepsilon}} (\cos^2(\psi) \sin^2(\theta_c)) \\ B = \frac{1}{\tilde{\varepsilon}} (\cos^2(\theta_c) - \cos^2(\psi) \sin^2(\theta_c)) \\ C = \frac{1}{\tilde{\varepsilon}} \left(\frac{\cos^2(\psi) \sin^2(2\theta_c)}{2} \right) \end{cases} \quad (4.28)$$

VI-2.8 Modèle optique multicouche

Le calcul de la transmission optique des films minces que nous allons développer repose sur l'approche classique d'une lame mince à faces parallèles modèle multicouche figure (4.3). On suppose que les surfaces de séparation entre les milieux de surfaces sont totalement planes et que ces milieux sont optiquement homogènes.

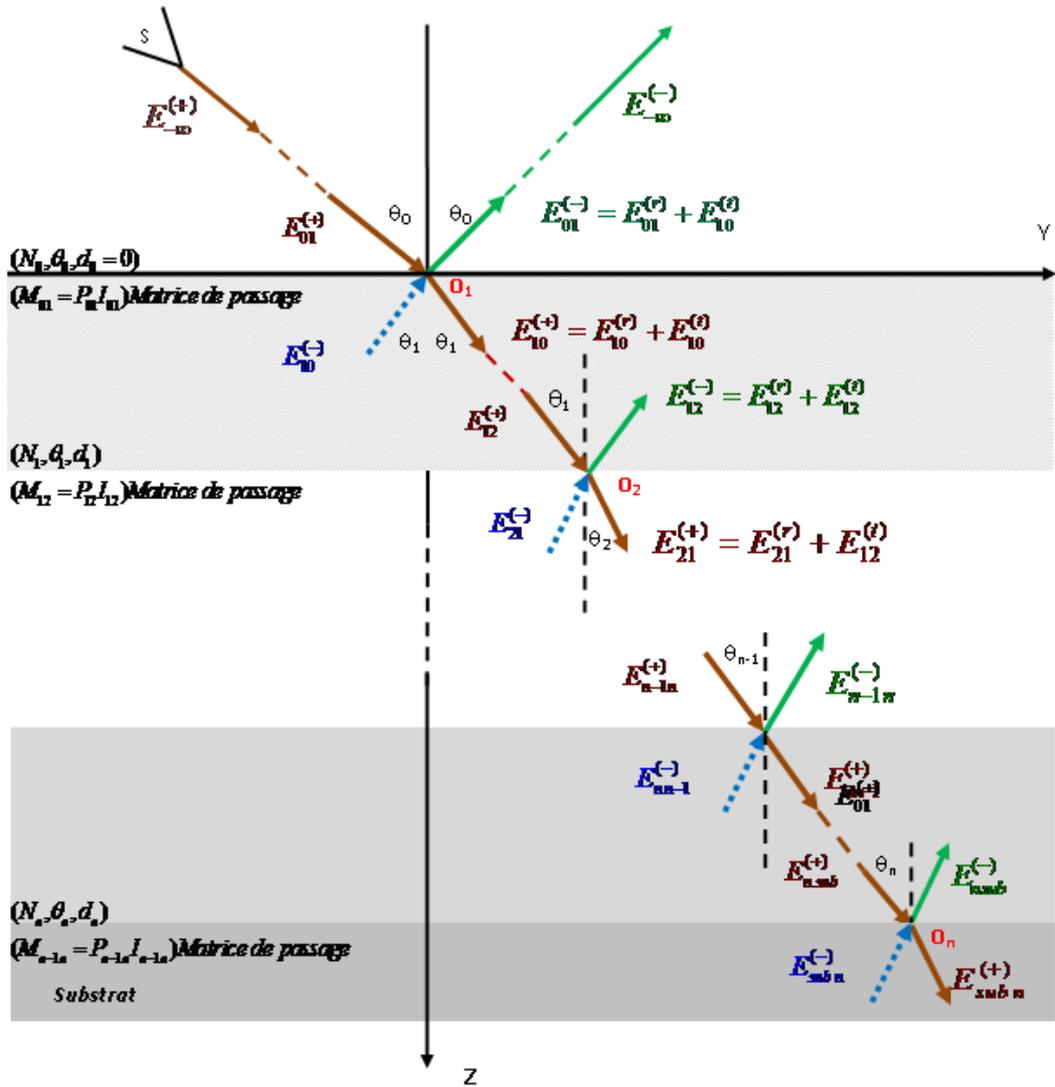


Figure (4.3) Représentation schématique des réflexions et des transmissions multiples dans le film modèle multicouche

Ce système est formé par un premier milieu isotrope (air), d'indice de réfraction réel supposé égale à l'unité, les différentes multicouches que forme le film (film de nitrure d'aluminium AlN hexagonale) sont supposés milieux anisotropes

uniaxes et absorbants d'épaisseurs d_i ($i = 1 \text{ à } n$) et d'indices de réfraction complexe le substrat en Si étant un milieu isotrope et d'indice de réfraction complexe.

Le rayon incident faisant un angle θ_0 avec la normale de la surface de séparation du milieu 0 et milieu 1, subit des réflexions et des réfractions multiples au niveau des surfaces de séparation. Ces surfaces sont caractérisées par des coefficients de réflexions et de réfractions complexes, données respectivement pour chaque surface par \tilde{r}_{ij} et \tilde{t}_{ij} entre les milieux i et j . Lors de la propagation au sein du film formé par les différentes multicouches, l'onde subit d'une part un déphasage de parcours et d'autre part une atténuation d'amplitude proportionnel au facteur $\exp(i\beta_i)$ [91]. Le facteur β est donné par :

$$\beta_i = 2\pi n_i^{\square} d_i \omega \cos(\theta_i) \quad (4.29)$$

Au point O_1 , le passage des composantes des champs électrique $\begin{pmatrix} E_{-\infty}^{(+)} \\ E_{+\infty}^{(-)} \end{pmatrix}$ vers $\begin{pmatrix} E_{10}^{(+)} \\ E_{10}^{(-)} \end{pmatrix}$ se fait à l'aide de la matrice de transfert M_{01} représentant le produit des deux matrices de passages P_{01} et I_{01} qui sont donné par [92] :

$$P_{01} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \text{ et } I_{01} = \frac{1}{t_{01}} \begin{pmatrix} 1 & r_{01} \\ r_{01} & 1 \end{pmatrix} \quad (4.30)$$

P_{01} est la matrice de passage des composantes du champs à l'intérieur du même milieu $\begin{pmatrix} E_{-\infty}^{(+)} \\ E_{+\infty}^{(-)} \end{pmatrix}$ vers $\begin{pmatrix} E_{01}^{(+)} \\ E_{01}^{(-)} \end{pmatrix}$. Cependant, I_{01} représente la matrice de passage à l'interface 1 : des composantes $\begin{pmatrix} E_{01}^{(+)} \\ E_{01}^{(-)} \end{pmatrix}$ vers $\begin{pmatrix} E_{10}^{(+)} \\ E_{10}^{(-)} \end{pmatrix}$. Ici les éléments de la matrice ne sont que les coefficients de réflexions et de transmissions, dépendant de la polarisation et sont données par les équations (4.24) et (4.25). On remarque bien que la matrice P_{01} est unitaire car le milieu 0 (air) représente un milieu non absorbant. Si le milieu (i) est

absorbant, on le représente par un indice de réfraction complexe, la matrice de passage P_{ij} est donné par :

$$P_{ij} = \begin{pmatrix} \exp(\beta_i) & 0 \\ 0 & \exp(-\beta_i) \end{pmatrix} \quad (4.31)$$

Finalement, On peut généraliser ce résultat au cas d'un film formé par n couches différente; la matrice du transfert totale

$$M = M_{0N} = M_{01} \times M_{12} \times \dots \times M_{n-1n} \quad (4.32)$$

Chaque matrice du transfert caractérise l'interface (ij) qui sera décrit par leurs coefficients Fresnel de transmission et réflexion. Les éléments de la matrice totale ont mené directement aux coefficients Fresnel du film formés de n couches différentes :

$$\begin{aligned} t_{0N} &= \frac{1}{m_{(1,1)}}, & r_{0N} &= \frac{m_{(2,1)}}{m_{(1,1)}} \\ t_{N0} &= \frac{1}{m_{(2,2)}}, & r_{N0} &= \frac{T_{(1,2)}}{m_{(2,2)}} \end{aligned} \quad (4.33)$$

Il est important de noter que l'utilisation de t_{0N} et r_{0N} conduit au même résultat si on utilise t_{N0} et r_{N0} car $|t_{0N}| = |t_{N0}|$ et $|r_{0N}| = |r_{N0}|$. La transmission optique du film correspond à la puissance lumineuse et elle est proportionnelle au module carré du coefficient de transmission complexe t_{0N} , c'est-à-dire

$$T = t_{0N} t_{0N}^* \quad (4.34)$$

VI-2.9 Étape de calcul de la transmission (Algorithme de calcul)

La transmission est calculée à partir de l'équation (4.19). Les expressions des coefficients de Fresnel sont données par les équations (4.20) et (4.21) et dépendent de la polarisation des lumières utilisées. Le calcul de la transmission T se fait numériquement, en plusieurs étapes que montre l'algorithme donné par la figure suivante.

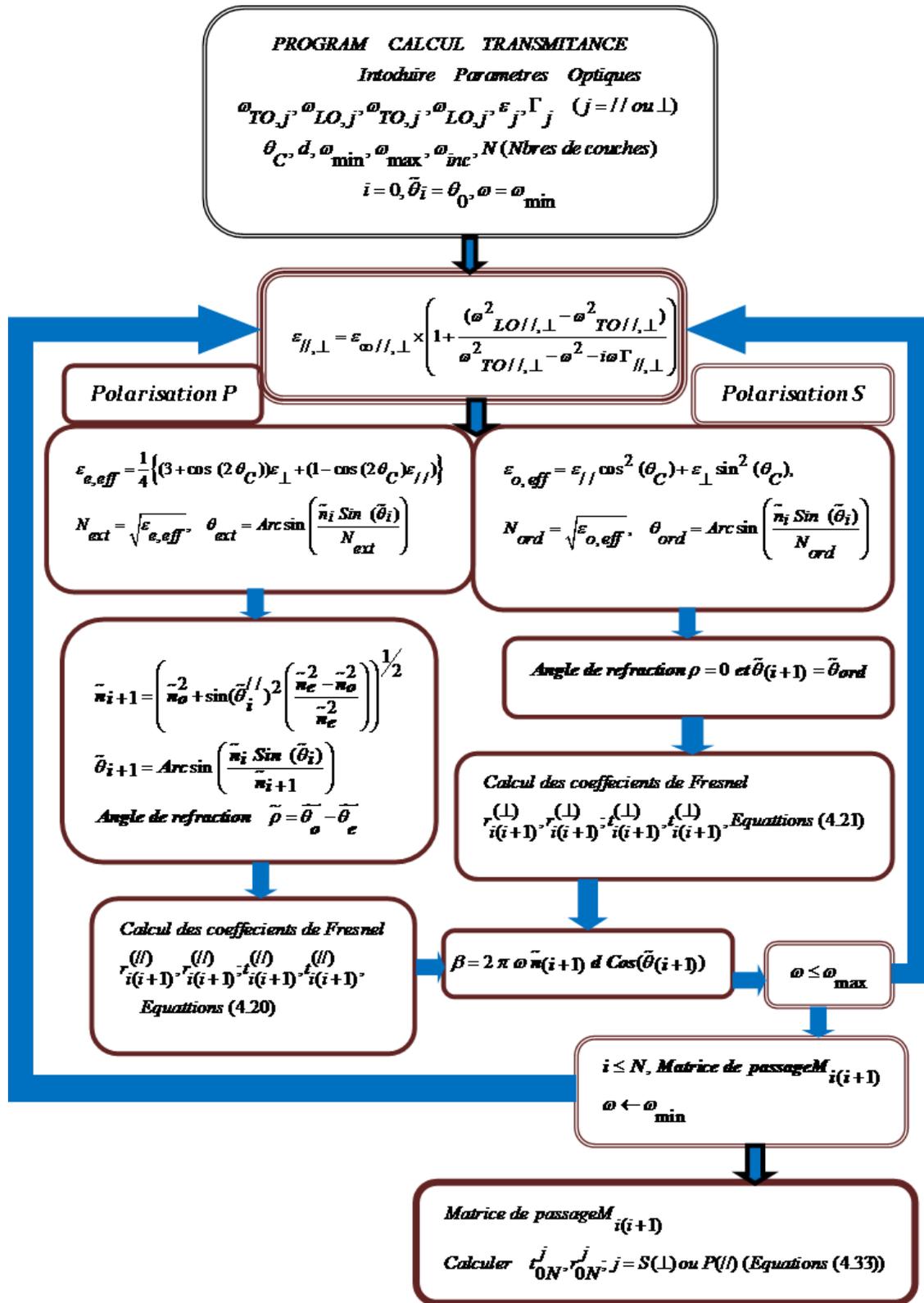


Figure (4.4) Algorithme de calcul de la transmission T d'un film modèle multicouche

*VI-3 Modélisation des spectres FTIR d'un film polycristallin**VI-3 1 Dépôt par PVD des films d'ALN de la série 1*

L'objectif est d'étudier les propriétés optiques par la technique FTIR des films d'ALN déposés sur substrats de silicium et de trouver une corrélation avec leurs propriétés structurale. Précisément ceux de la diffraction des RX. Pour ce faire, on a réalisé des couches minces d'ALN sur substrats de silicium par PVD. Cette première *série 1* d'échantillons de couches minces d'ALN est présentée dans le tableau (4.2). Les épaisseurs nominales des films sont mesurées avec un profilomètre (Veeco Dektak-3).

Films	T1	T5	T3	T48	T8
Épaisseurs nominal (nm)	250	535	660	1200	1500

Tableau (4.2) Épaisseurs Nominale de la *série 1* des films déposés par PVD à l'I.M.N, Nantes France

Les films d'ALN ont été obtenus à température ambiante par pulvérisation magnétron réactif DC. On a utilisé une cathode cible Minimak de 150 mm (99.999% de pureté) connecté à un générateur de puissance variable de type FUG MCN 700-1250 et sous haute pureté de mélange d'azote et d'argon. Les substrats utilisés sont de silicium Si (100). Les échantillons sont nettoyés par l'éthanol dans un bain ultrason pendant 10 mn puis sont séchés par l'azote pour éliminer l'oxyde natif. Lorsque la pression de travail est de 3 mTorr, on commence le dépôt avec un pourcentage 30% d'azote $P_N/(P_{Ar}+P_N)$. On fixe la puissance de décharge à 100 W et la distance cible substrat à 3 cm. On atteint, sous ces conditions, une vitesse de déposition dans l'intervalle de 30 et 40 nm/min.

VI-3.2 Caractérisation optique par la technique FTIR et discussion

Les spectres de transmission infrarouge FTIR sont mesurés à température ambiante avec un spectrophotomètre FTIR Nicollet 5-PC. Ces spectres sont relevés en mode de transmission en balayant l'intervalle de 400 à 4000 cm^{-1} avec une

résolution spectrale de 4 cm^{-1} . Les variables sont le type de polarisation de lumière et l'angle d'incidence du rayon IR sur le film à caractériser. On signale que la raie d'absorption du Substrat Si (100) est soustraite des spectres de l'AlN / Si (100) que nous présenterons par la suite. On présente sur les figures (4.5a-e) les spectres d'absorption FTIR des films d'AlN polycristallins. Ces spectres montrent l'effet de l'angle d'incidence ainsi que l'effet de la lumière de polarisation.

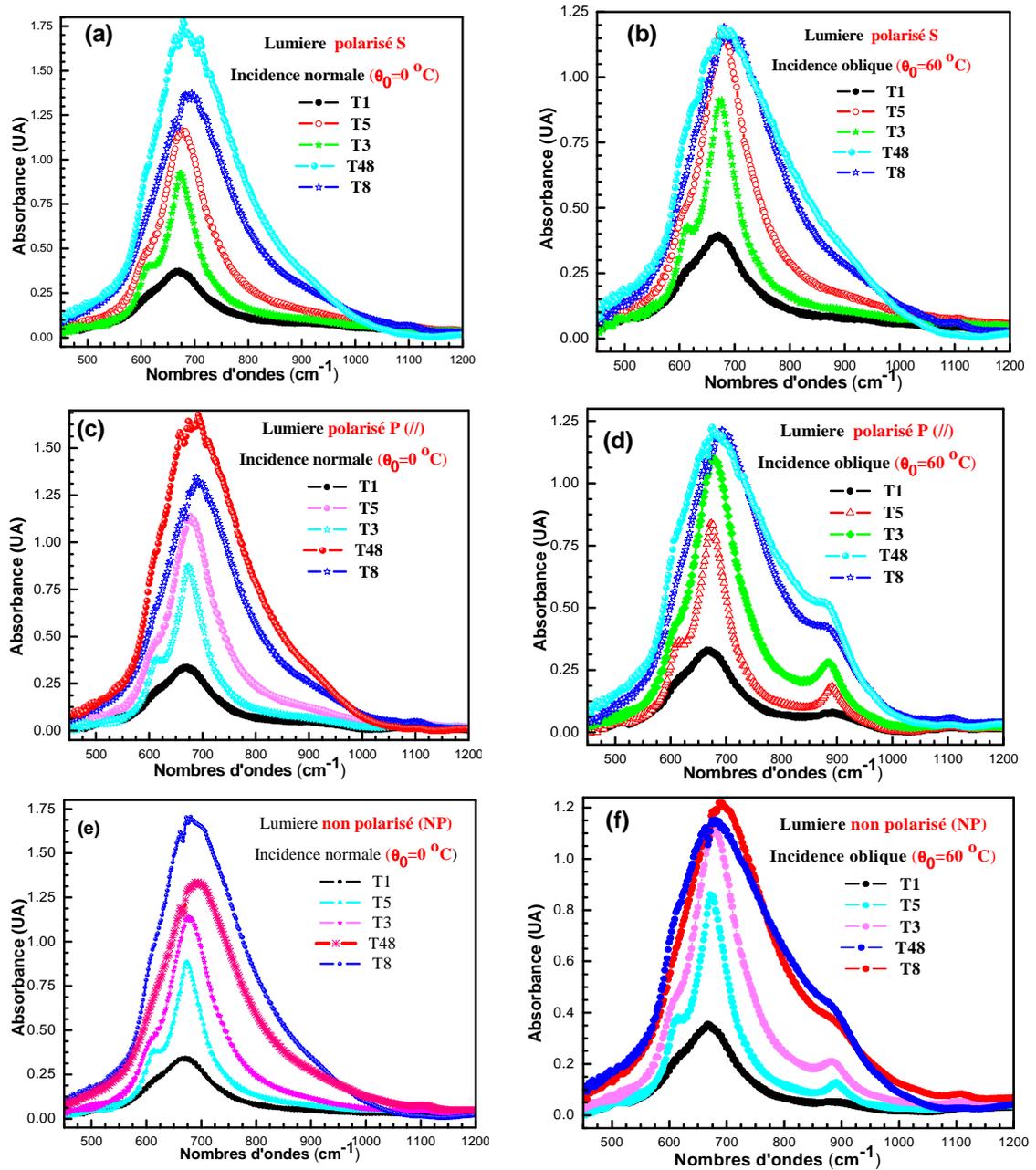


Figure (4.5) : Spectres FTIR des films (série PVD-1) déposés d'AlN montrant l'effet de polarisation ($S \leftrightarrow \perp$, $P \leftrightarrow //$) ainsi que celui de l'incidence.

En effet, le nitrure d'aluminium (AlN) a pour représentation réductible $\Gamma = 1A_1 + 1E_1 + 2E_2 + 2B_1$ [93]. A_1 et E_1 sont les modes actifs en infrarouge. Il s'agit des deux modes transversaux optiques vers 613 cm^{-1} et 665 cm^{-1} aux quels sont associés les modes longitudinaux optiques $A_1(\text{LO})$ et $E_1(\text{LO})$ vers 886 cm^{-1} et 915 cm^{-1} , respectivement.

On observe que l'apparition des modes actifs en IR dépend des paramètres propres de la lumière, à savoir l'angle d'incidence de l'onde et sa polarisation. En effet, en polarisation S et quelque soit l'incidence, seuls les modes transverses sont actifs figures (4.5a et b). Cependant, en lumière polarisée P ou non polarisé (NP) et uniquement en incidence oblique, d'autres modes supplémentaires sont actifs vers 858 cm^{-1} et 915 cm^{-1} figures (4.5c, d, e et f). Il s'agit des modes longitudinaux. Ces observations sont en conformité avec l'effet Berreman [94]. Cet effet stipule que l'on peut observer des bandes d'absorption associée aux modes de vibration longitudinaux LO en travaillant en incidence oblique. En effet, en incidence oblique, la composante parallèle à l'axe oz, du champ électrique interagit avec les modes LO, cette dernière se propage dans le plan parallèle à oz. En incidence normale ou polarisation S, aucun couplage entre le champ électrique de l'onde et les modes LO n'est possible vu que leurs directions sont perpendiculaires.

En outre, l'effet Berreman n'est observé que si l'épaisseur du milieu traversé est inférieure à la longueur d'onde de l'onde incidente de sorte que la composante du champ électrique parallèle reste constante tout au long de cette épaisseur. Dans le cas de l'excitation IR, la longueur d'onde est comprise entre 2.5 et $25 \mu\text{m}$. Ce qui est largement supérieur aux épaisseurs des films utilisés (généralement en dessous du μm)

On note que l'analyse d'un spectre FTIR d'un film polycristallin n'est pas facile à comprendre car ces propriétés structurales tels que la taille du grain et son orientation préférée, sa déformation, les défauts du réseau, etc. ne sont pas encore bien clairement déterminées. En effet, ces propriétés affectent beaucoup l'énergie et

la forme des bandes d'absorption IR. Plusieurs auteurs [95, 96] ont rapporté la présence des modes vibrationnelles $A_1(\text{TO})$ et $E_1(\text{TO})$ dans les films minces d'AlN et il existe parmi eux qui ont essayés de relier les spectres IR aux propriétés du cristal.

VI-3.3 Observations expérimentales (bases du modèle)

À partir d'observations expérimentales, le modèle que nous proposons devra être construit sur la base des propriétés structurales du polycristal. On doit donc tenir en compte de la variation des paramètres tels que, l'épaisseur du film, le type de polarisation et l'angle d'incidence.

Nous avons commencé par caractériser les films montés dans le tableau (4.2) par la diffraction des RX de la raie $\text{CuK}\alpha$ (D500 MOXTEK) et en mode scan θ - 2θ .

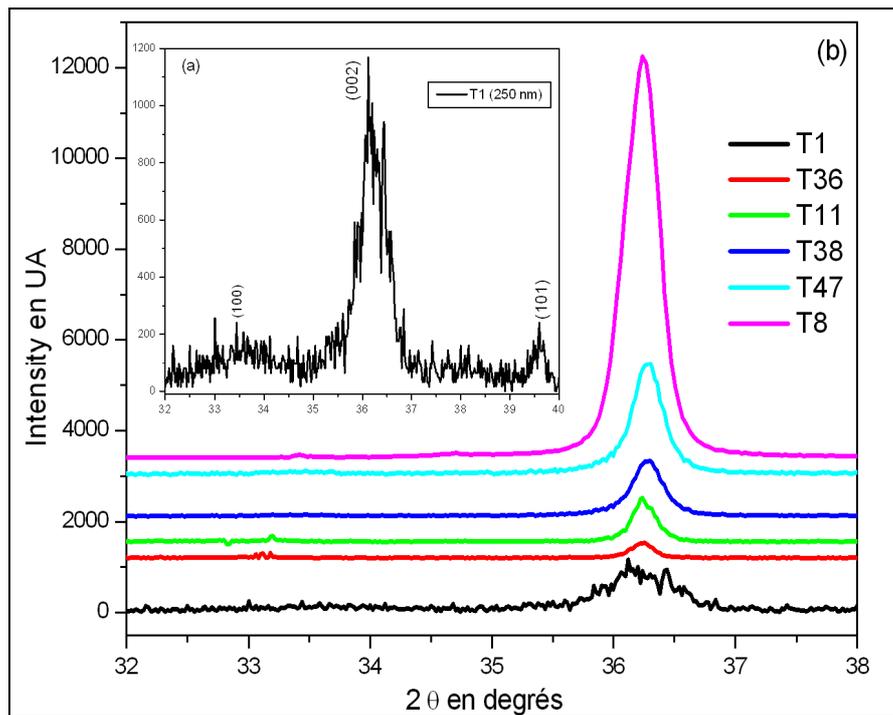


Figure (4.8). Spectres de diffractions des films déposés (série PVD_1) pour différentes épaisseurs. (a) L'échantillon d'épaisseur de 250 nm montre la présence de trois différents pics d'orientation (100), (002) et (101)

D'après la figure (4.8a), le spectre de diffraction de l'échantillon de faible épaisseur (T1_250 nm) non cristallin. Cependant, On voit une amélioration de cristallinité en fonction de l'augmentation de l'épaisseur. Sous les conditions de

dépôt qu'on a choisi, on estime que la cristallinité de cette série de film commence lorsque l'épaisseur atteint environ la valeur de 350 nm. Les spectres de diffraction obtenus pour les échantillons dont les épaisseurs inférieures à 350 nm présente bien trois pics : deux pics intenses associés aux plans d'AlN cristallins (100) et (002) correspondant respectivement aux angles $2\theta = 23.2^\circ$ et 36.1° et un large pic à pour angle 2θ égale à 38.1° associé au plan cristallin (101). Au delà de l'épaisseur de 350 nm, le pic du plan d'orientation (002) devient plus intense figure (4.8b). On peut confirmer l'orientation des plans (002) devient préférentielle lorsque l'épaisseur devient supérieure à 780 nm

Pour avoir une idée claire de la disposition des cristallites c.à.d. de la variation de leurs angles θ_c de l'axe-c à la surface du film. L'image de la figure (4.9) est obtenue par un microscope électronique de haute résolution (HRTEM-Hitachi HF 2000) caractérisé par une tension d'accélération 200 kV et une résolution spécifique de 0.33 nm. Ce dernier nous permet donc une étude plus fine de la structure des films d'AlN.

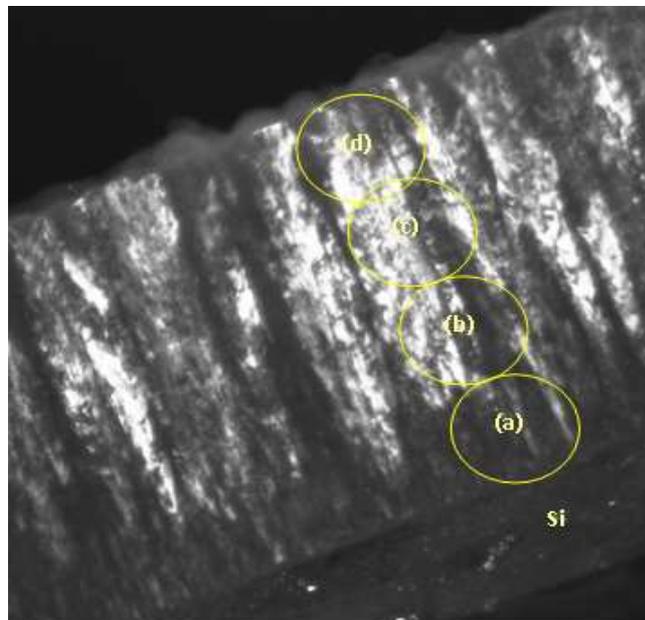


Figure (4.9) : Analyse du Cross-sectional TEM du film d'AlN T8 (1500 nm) montrant les intervalles localisant les Surfaces Area Électron Diffraction (SAED patterns) correspondant respectivement : (a) 0 à 400 nm, (b) 400 à 800 nm, (c) 800 à 1200 nm et (d) 11000 to 1500 nm.

Sur la figure (4.9), l'image TEM de l'échantillon T8 d'épaisseur 1500 nm montre bien la présence à l'interface Si-AlN d'une couche amorphe, suivie par une couche polycristalline d'AlN possédant différentes orientations et qui s'observent clairement à partir des images SAED que montre la figure (4.10). Pour l'échantillon T8 (1500 nm d'épaisseur), on observe une structure fortement colonnaire (002) texturé avec des grains ayant des valeurs d'angles avec la normale à la surface diminuant avec l'augmentation de l'épaisseur du film.

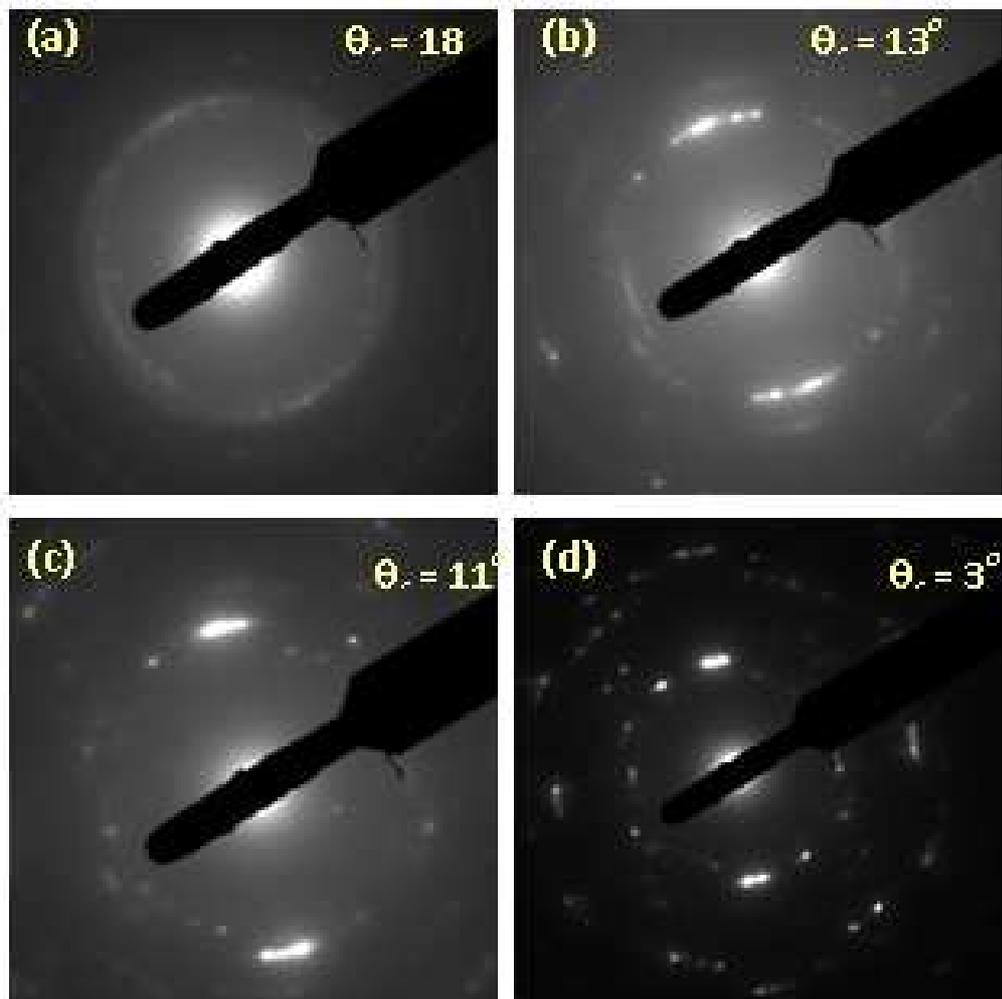


Figure (4.10): SAED patterns de l'échantillon T8 (1500 nm) correspondent aux intervalles montrés sur la figure (4.9).

L'angle θ_c déterminé au milieu de la colonne à pour valeur 18° , 13° et 11° pour les intervalles montrés par les endroits entourés par des cercles respectivement a, b et c. Au top de la colonne on voit la présence de deux intenses spots avec un angle de

6 endroits présentés par le cercle d, la valeur de cet angle montre l'amélioration de la qualité cristalline du film avec l'épaisseur. Cette distribution de valeur d'angle θ_c déterminé pour l'échantillon T8 est représentée sur la figure (4.11).

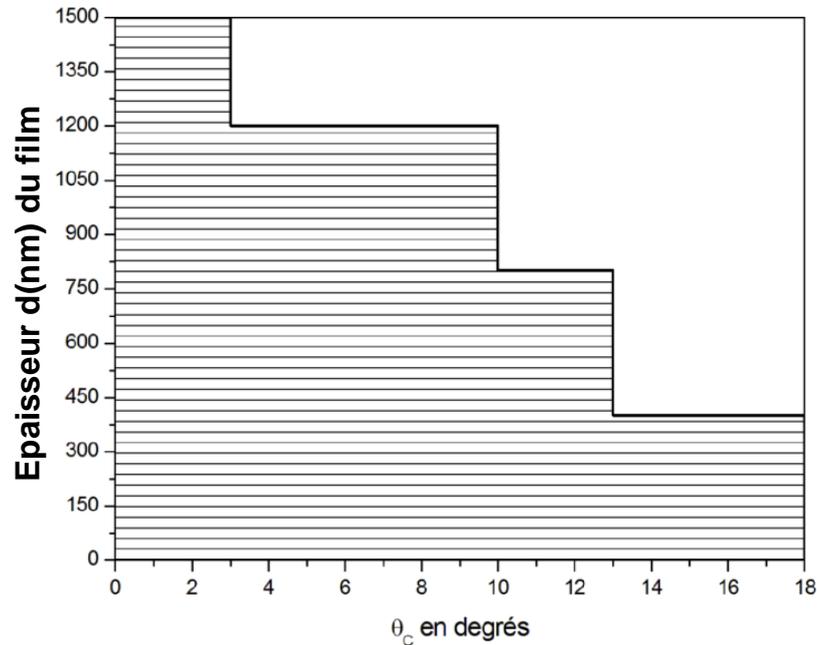


Figure (4.11). Distribution statique des angles θ_c en fonction de l'épaisseur du film de l'échantillon T8 obtenu a partir du SAED montré sur la figure (4.10)

A partir de ces observations et ceux se trouvant dans la littérature [97, 98], on peut faire l'hypothèse suivante : Qu'au début de la croissance du film, il se forme une faible couche amorphe atteint jusqu'à les 10 nm. Ensuite la cristallisation commence, elle dépend de la technique de dépôt utilisée. On pense au modèle montré par la figure (4.12). Les grains se déposent avec différentes orientations possible. Puis dans une seconde étape se produit une compétition entre les grains ayant différentes orientations, le taux de croissance et le taux de ré-pulvérisation, cette dernière dépend fortement des conditions expérimentales [98, 99]. Après une épaisseur donnée, quelque orientations disparaîtront et reste une unique orientation conduisant à la couche texturé, valeur difficilement de l'estimer avec précision sur l'unique base de nos résultats. Les étapes de croissance figure (4.12) sont :

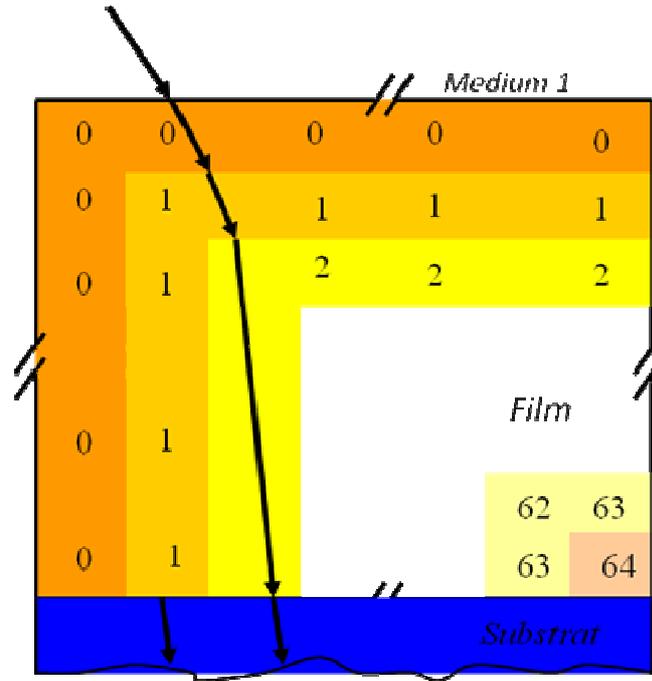


Figure (4.12): Modèle propose pour la simulation des films polycristallins base sur la variation de l'angle de θ_c en degrés des grains h-AlN grain en fonction de l'épaisseur.

- a) La différence des paramètres de mailles à l'interface du substrat et du film conduit à la formation d'une couche amorphe d'environ de 10 nm d'épaisseur et elle négligée dans notre modèle
- b) Au début de la croissance le substrat est moins chauffé, il apparait deux différentes orientations cristallographiques des plans. Le premier (002) avec différentes orientations des grains h-AlN de l'axe-c dans une plage de 0 à 18° et la seconde orientation des plans est le (100) dont les axes-c des grains sont dans l'intervalle 70 à 90°. Cette dernière supposition est basé aussi sur le calcul de l'énergie libre de Gibbs donnée pour un système hexagonale par [100] :

$$G = G_0 - \frac{1}{2} \sigma^2 \left\{ 2(s_{11} + s_{12} - \sigma^2 s_{33} - s_{13}) + (1 - \sigma^2) s_{11} + \sigma^2 s_{33} + \sigma_3 (1 - \sigma_3) (2s_{13} + s_{44}) \right\} \quad (4.35)$$

Les valeurs des composantes s_{ij} du tenseur de compliances pour le nitrure d'aluminium (AlN) sont données au tableau suivant

Compliances	AlN value (GPa) ⁻¹
s_{11}	2.89×10^{-3}
s_{12}	-0.93×10^{-3}
s_{13}	-0.50×10^{-3}
s_{33}	2.82×10^{-3}
s_{44}	8.00×10^{-3}

Tableau (4.3) : Valeurs des composantes s_{ij} du tenseur de compliances l'AlN.

Les Calculs qui utilisent l'équation (4.35) et ces compliances produisent la variation de l'énergie libre de Gibbs en fonction de l'angle θ est montré sur la Figure (4.13). Les minimums sont donc les configurations le plus énergiquement favorables dans un champ de déformation biaxiale qui se produisent quand le c-axe est incliné à un angle de 26° par rapport au plan du film (c.à.d. $\theta = 64^\circ$ et 116° par rapport à la normale de la figure). L'orientation le plus énergiquement défavorable est normale au film. Lorsque $\theta = 0^\circ$ et 180° . Donc, nous attendrions que le c-axe de la structure du wurtzite doive se trouver approximativement dans le plan du film quand le stress bi-axial est grand.

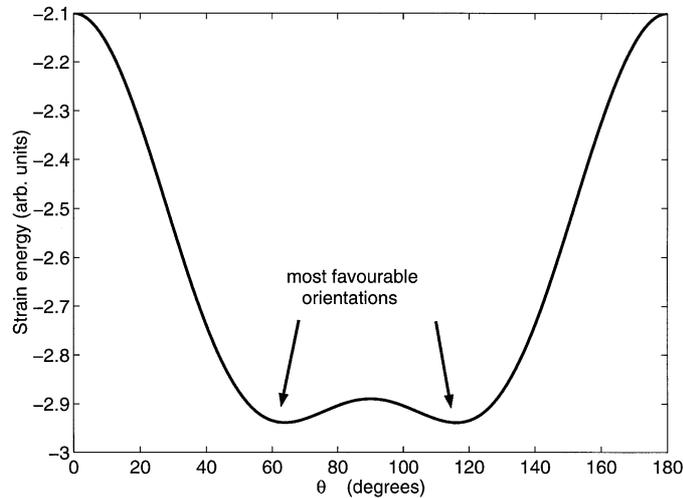


Figure (4.13) : Densité normalisé de l'énergie de déformation (Strain energy) contrainte d'énergie en fonction de l'angle d'inclinaison θ [101]

c) On suppose ensuite qu'avec l'augmentation de l'épaisseur, les axes-c des grains s'orientent vers les faibles valeurs de l'angle des plans formant l'orientation

cristallographique (002). Cependant, l'orientation préférentielle (100) disparaîtra complètement.

d) On ne supposera que l'allure de décroissance de l'angle avec l'épaisseur à une forme gaussienne.

VI-3.4 Distribution de l'orientation des cristallites autour d'un angle donné

Une des hypothèses adoptées lors de l'utilisation de la fonction diélectrique du film, est que les cristallites admettent une orientation préférentielle θ_c autour de la normale. Dans ce paragraphe on va supposer que cette orientation n'est pas unique, mais admet une distribution gaussienne g autour d'un angle donné θ_c , distribution supposée gaussienne avec un écart type de σ .

$$g(\theta) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(\theta - \theta_c)^2}{2\sigma^2}\right) \quad (4.36)$$

Cette distribution s'écrit sous la forme Dans cette hypothèse, le calcul de la transmission, se fait en calculant dans un premier temps la transmission du film pondérée par la fonction poids g pour chaque valeur de θ variant dans un intervalle $[\theta_c - \theta_{\max}, \theta_c + \theta_{\max}]$. Dans un deuxième temps, une moyenne de toutes ces valeurs est effectuée.

Cependant, l'hypothèse adoptée dans notre calcul est basé sur les observations expérimentales est que l'épaisseur du film à une forme gaussienne en fonction de l'orientation θ_c des cristallites Suivant l'expression :

$$d = d_0 \times g(\theta) \quad (4.37)$$

VI-3.5 Algorithme du modèle proposé

L'algorithme des multicouches montré par la figure (4.4) est utilisé pour le calcul calculer des spectres de transmission en IR de nos films, mais suivant le modèle de forme gaussienne que montre la figure suivante.

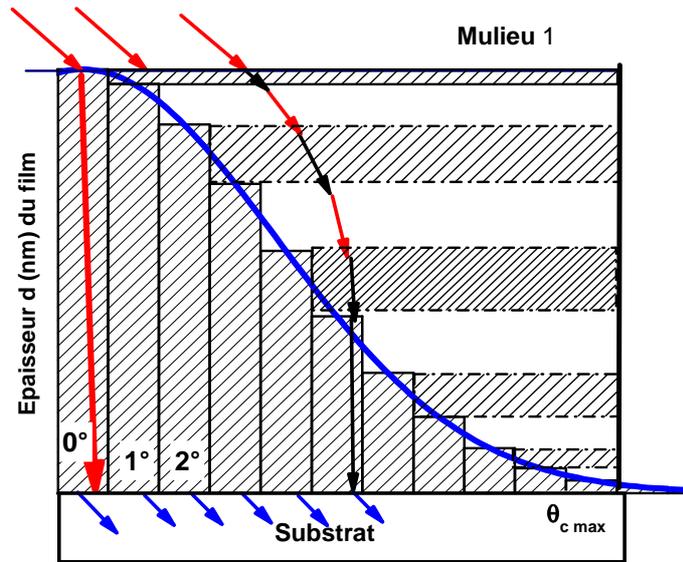


Figure (4.14): Modèle propose pour la simulation des films polycristallins base sur la variation de l'angle de θ_c en degrés des grains h-ALN grain en fonction de l'épaisseur.

VI-3.4 Présentation et Interprétation des résultats des films polycristallins

VI-3.4.1 Série1 des films déposés par PVD

Le tableau (4.4) suivant montre les valeurs des paramètres extraits du modèle,

Films	T1	T3	T5	T48	T8
d (nm)	250	335	760	1200	1500
$FWMH$ (exp) (DRX)	/	/	/	/	10.6
$FWMH$	13.18	8.50	11.02	8.92	8.77
θ_{Cmax}	14.79	30.64	12.19	9.82	44.74
θ_{inc}	1.40	1.39	0.96	1.68	0.95
$\omega_{TO, //}$ (cm^{-1})	665.0	665.00	665.00	665.00	665.00
$\omega_{LO, //}$ (cm^{-1})	903.168	915.73	907.55	901.33	903.78
$\Gamma_{//}$ (cm^{-1})	68.659	37.87	60.97	95.54	98.10
$\omega_{TO, \perp}$ (cm^{-1})	605.325	613.65	607.86	613.95	611.18
$\omega_{LO, \perp}$ (cm^{-1})	889.617	896.419	890.97	892.87	897.42
Γ_{\perp} (cm^{-1})	26.298	31.64	13.77	69.20	25.75
σ_{er} (%)	6.47	5.21	4.13	10.11	8.67

Tableau (4.4) : Paramètres des deux modes A1 et E1 actives en infrarouge en supposant une distribution gaussienne des cristallites en fonction de l'épaisseur

* Utilisation des algorithmes génétiques comme outil d'extraction des paramètres des deux modes.* Utilisation des courbes expérimentales en polarisation S et une incidence P

à partir des spectres FTIR des échantillons de la série par PVD_1, montrés par le tableau (4.2). En fait, ce modèle est proposé sur la base de l'analyse des spectres de cette série d'échantillons.

Ce dernier tableau montre que les valeurs des fréquences obtenues pour les deux modes actifs dans le spectre infrarouge A_1 et E_1 (Tableau (4.4) [85, 86]) sont en bon accord avec les valeurs des spectres expérimentales. On remarque aussi que l'amortissement du mode A_1 est plus grand que celui du mode E_1 . Ceci revient à la faible intensité du mode A_1 vis-à-vis au mode E_1 . Une corrélation entre les valeurs des largeurs des mi-hauteurs déterminé à partir de la gaussienne du modèle utilisé pour interpoler le spectre infrarouge de l'échantillon analysé et ceux obtenus directement à partir de diffraction des RX en mode Rocking figure (4.15).

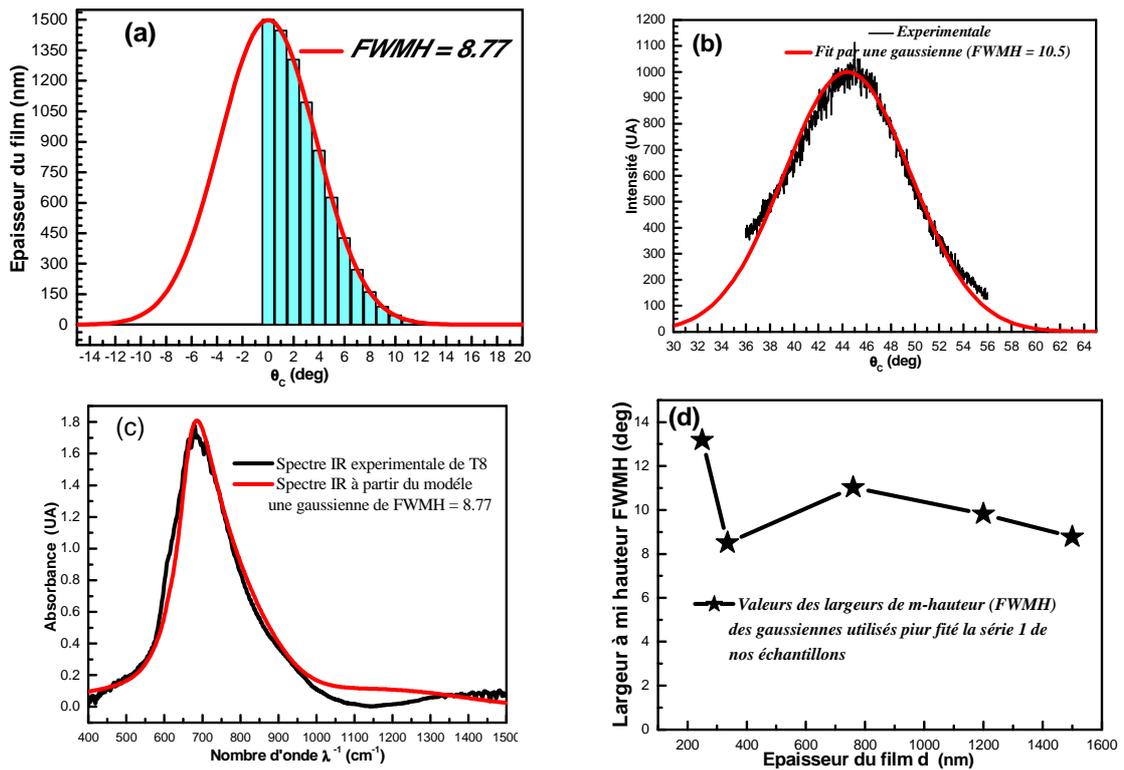


Figure (4.15) : Résultats du fit déterminés à partir du modèle proposé en comparaison avec l'expérimentale : (a) Une gaussienne de largeur à mi hauteur de 8.77 est utilisé pour fiter le spectre T8 (1500 nm). (b) la courbe de Rocking-curve pour l'échantillon qui montre une distribution de forme gaussienne ($FWMH = 10.5$). (c) Spectre d'absorbance IR de l'échantillon T8 expérimentale en comparaison avec celui déterminé à partir du modèle. (d) Valeurs des largeurs à mi-hauteurs des gaussiennes utilisées pour fiter la série déposée par PVD.

Par exemple pour l'échantillon T8, une valeur obtenue de **8.77** qui est un ordre de grandeur comparable à celui déterminée à partir de diffraction des RX en mode Rocking de **10.60** figure (4.15a et b). On peut relier la différence entre les deux valeurs de largeurs à mi-hauteur des deux gaussiennes (gaussienne du modèle et celle de la diffraction RX en mode Rocking) à la différence du type de rayonnement, aux simplifications supposés dans ce modèle, ...

VI-3.4.2 Série 2 des films déposés par PECVD

Afin de faire une corrélation des résultats DRX e mode Rocking curve et le modèle FTIR proposé, une deuxième série d'échantillons (série 2) déposés avec un plasma microonde (2.4GHz) dans un réacteur PECVD et à une pression 60 mTorr. Le tableau (4.4) résume les résultats de cette deuxième série2 d'échantillons.

<i>Films</i>	<i>J4</i>	<i>J2</i>	<i>J7</i>	<i>J8</i>	<i>J5</i>	<i>J6</i>	<i>J1</i>
<i>d (nm)</i>	<i>145.0</i>	<i>280.00</i>	<i>285.00</i>	<i>540</i>	<i>580</i>	<i>1000.0</i>	<i>1250.0</i>
<i>FWMH(exp)</i>	<i>11.07</i>	<i>11.18</i>	<i>11.18</i>	<i>9.52</i>	<i>9.06</i>	<i>9.29</i>	<i>7.91</i>
<i>FWMH</i>	<i>8.59</i>	<i>12.52</i>	<i>11.58</i>	<i>12.17</i>	<i>10.49</i>	<i>9.19</i>	<i>11.73</i>
θ_{Cmax}	<i>39.15</i>	<i>21.73</i>	<i>23.40</i>	<i>47.10</i>	<i>47.06</i>	<i>46.16</i>	<i>40.44</i>
θ_{inc}	<i>0.82</i>	<i>1.00</i>	<i>1.46</i>	<i>1.62</i>	<i>1.32</i>	<i>1.06</i>	<i>1.23</i>
$\omega_{TO, //} (cm^{-1})$	<i>666.44</i>	<i>667.97</i>	<i>669.35</i>	<i>667.30</i>	<i>665.78</i>	<i>666.11</i>	<i>665.08</i>
$\omega_{LO, //} (cm^{-1})$	<i>915.55</i>	<i>909.70</i>	<i>925.07</i>	<i>911.02</i>	<i>907.78</i>	<i>905.50</i>	<i>908.03</i>
$\Gamma_{//} (cm^{-1})$	<i>58.69</i>	<i>47.01</i>	<i>51.37</i>	<i>45.31</i>	<i>47.50</i>	<i>51.67</i>	<i>50.71</i>
$\omega_{TO, \perp} (cm^{-1})$	<i>616.16</i>	<i>608.94</i>	<i>612.40</i>	<i>619.42</i>	<i>620.20</i>	<i>612.60</i>	<i>619.50</i>
$\omega_{LO, \perp} (cm^{-1})$	<i>887.99</i>	<i>882.42</i>	<i>893.07</i>	<i>882.54</i>	<i>879.04</i>	<i>871.49</i>	<i>886.67</i>
$\Gamma_{\perp} (cm^{-1})$	<i>20.26</i>	<i>21.73</i>	<i>51.06</i>	<i>13.45</i>	<i>65.06</i>	<i>51.56</i>	<i>45.98</i>
$\sigma_{er} (%)$	<i>7.47</i>	<i>9.37</i>	<i>4.13</i>	<i>8.31</i>	<i>8.67</i>	<i>7.63</i>	<i>5.17</i>

Tableau (4.4) : Paramètres des deux modes A1 et E1 actives en infrarouge en supposant une distribution gaussienne des cristallites en fonction de l'épaisseur.

* Utilisation des algorithmes génétiques comme outil d'extraction des paramètres des deux modes.

* Utilisation des courbes expérimentales en polarisation S et une incidence P

Une première lecture de valeurs des fréquences obtenues pour les deux modes actives dans le spectre infrarouge A₁ et E₁. En outre, Le modèle proposé peut nous renseigner de la taille des grains du moment où qu'on peut corréliser entre les valeurs

des largeurs des mi-hauteurs déterminé à partir de la gaussienne du modèle utilisé pour fiter le spectre infrarouge de l'échantillon à analyser et le ceux obtenus directement à partir de Rocking-curve.

Les valeurs de FWHM obtenues pour cette série2 d'échantillons sont comparable à ceux déterminé expérimentalement figure (4.16a-d) à partir du modèle en comparaison avec ceux déterminée à partir de la courbe de DRX en mode Rocking-curve.

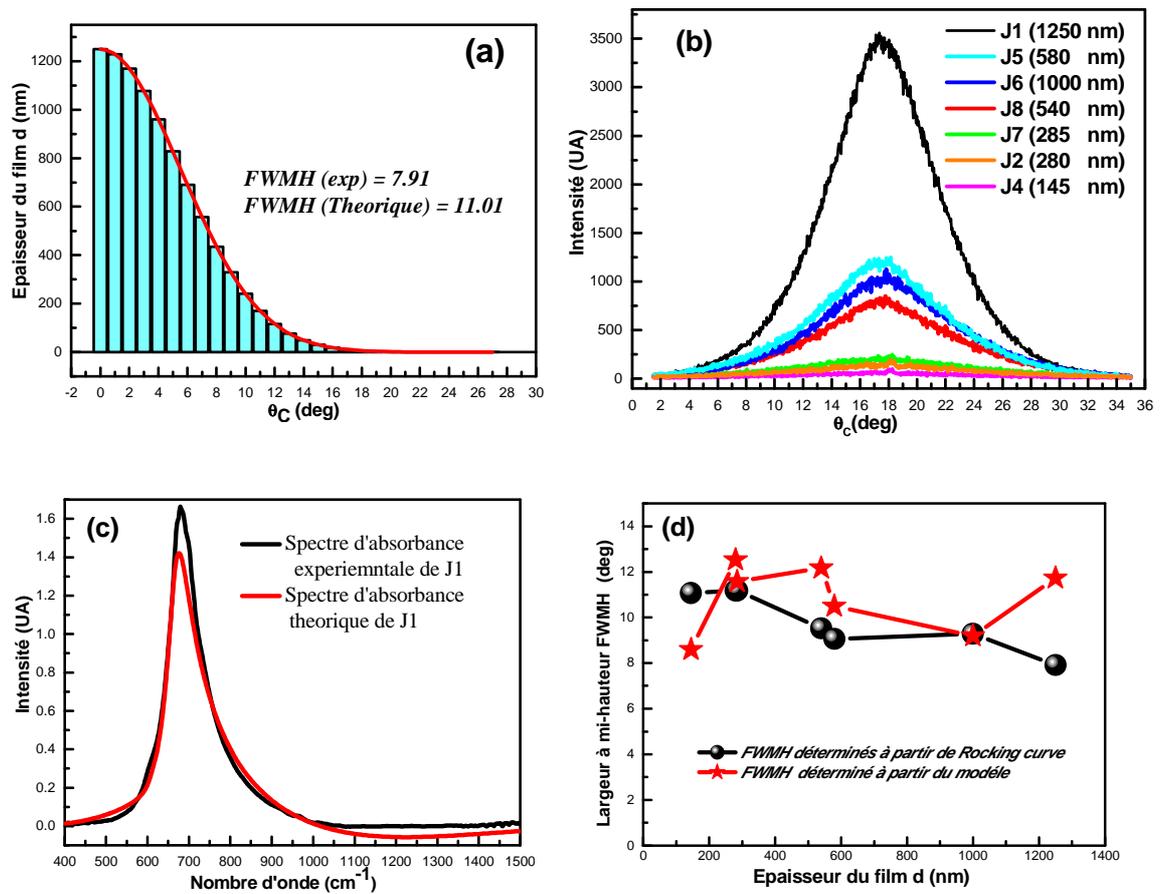


Figure (4.16) : Résultats du fit déterminés à partir du modèle proposé en comparaison avec l'expérimentale : (a) Une gaussienne de largeur à mi hauteur de 11.01 est utilisé pour fiter le spectre J1 (1250 nm). (b) Les courbe de DRX en mode Rocking-curve pour la série 2 des échantillons montré dans le tableau (4.4). (c) Spectre d'absorbance IR de l'échantillon J1 expérimentale en comparaison avec celui déterminé à partir du modèle. (d) Valeurs des largeurs à mi-hauteurs des gaussiennes utilisées pour fiter la série 2 en comparaison avec les valeurs expérimentaux.

VI-3.4.3 Série 3 des films déposés par PVD

Enfin, une troisième série d'échantillons (série 3) déposés dans la chambre à vide de pulvérisation (Leybold Z-550). Cependant, on a choisi pour cette série: une puissance de décharge à 150 W, une pression de 2 mTorr et la distance cible substrat à 3 cm. Le tableau (4.5) résume les résultats de cette deuxième série2 d'échantillons.

Une première lecture de valeurs des fréquences obtenues pour les deux modes actives dans le spectre infrarouge A₁ et E₁. En outre, Le modèle proposé peut nous renseigner de la taille des grains du moment où qu'on peut corrélérer entre les valeurs des largeurs des mi-hauteurs déterminé à partir de la gaussienne du modèle utilisé pour fiter le spectre infrarouge de l'échantillon à analyser et le ceux obtenus directement à partir de Rocking-curve.

<i>Films</i>	<i>PVD20</i>	<i>PVD6</i>	<i>PVD10</i>	<i>PVD15</i>
<i>d (nm)</i>	300.0	800.00	820.00	1200.00
<i>FWMH (exp)</i>	8.00			7.5
<i>FWMH</i>	9.41	10.66	7.97	10.98
θ_{Cmax}	12.50	30.09	41.17	12.61
θ_{inc}	1.00	2.00	1.00	1.00
$\omega_{TO, //} (cm^{-1})$	666.00	668.379	666.569	673.175
$\omega_{LO, //} (cm^{-1})$	908.92	923.757	904.459	919.148
$\Gamma_{//} (cm^{-1})$	17.82	30.911	20.914	32.863
$\omega_{TO, \perp} (cm^{-1})$	612.78	605.351	622.879	609.630
$\omega_{LO, \perp} (cm^{-1})$	888.60	894.499	876.866	887.411
$\Gamma_{\perp} (cm^{-1})$	16.38	20.142	46.806	26.816
$\sigma_{er} (%)$	6.29	7.16	11.15	7.34

Tableau (4.5) : Paramètres des deux modes A₁ et E₁ actives en infrarouge de la série 3.

Les valeurs de largeurs à mi-hauteurs (FWMH) obtenues pour cette série 3 d'échantillons sont comparable à ceux déterminées expérimentalement figure (4.15a-d) à partir du modèle en comparaison avec ceux déterminée à partir de la courbe de DRX en mode Rocking-curve.

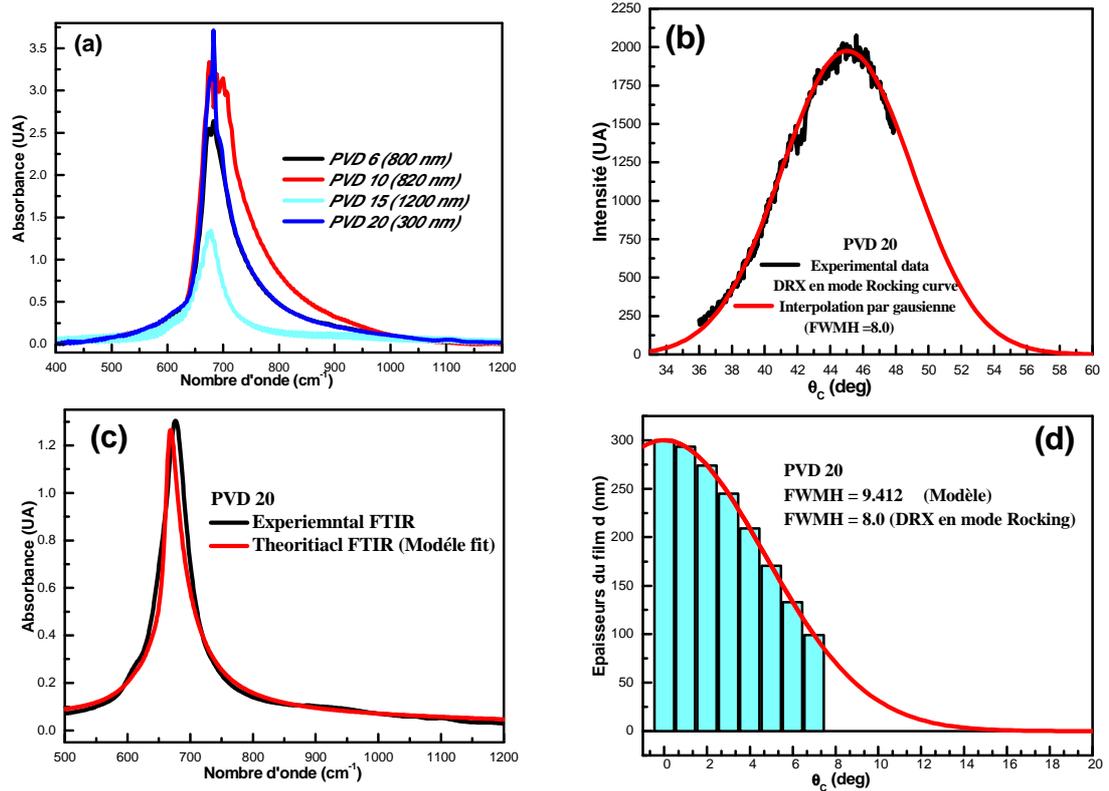


Figure (4.15) : Résultats du fit déterminés à partir du modèle proposé en comparaison avec l'expérimentale : (a) Une gaussienne de largeur à mi hauteur de 11.01 est utilisé pour fiter le spectre J1 (1250 nm). (b) Les courbe de DRX en mode Rocking-curve pour la série 2 des échantillons montré dans le tableau (4.4). (c) Spectre d'absorbance IR de l'échantillon J1 expérimentale en comparaison avec celui déterminé à partir du modèle. (d) Valeurs des largeurs à mi-hauteurs des gaussiennes utilisées pour fiter la série 2 en comparaison avec les valeurs expérimentaux.

VI-4 Conclusion

La modélisation du comportement optique des films repose sur l'expression de la fonction diélectrique du milieu. Dans ce travail, nous avons développé un modèle basé sur la croissance du film en fonction de l'orientation des cristallites. L'orientation des cristallites autour d'un pic de diffraction, se fait d'une manière gaussienne. Ce qui nous à conduit à corrélér les résultats de la largeur à mi-hauteur du modèle avec la largeur du courbe de Rocking curve obtenu à partir de diffraction des RX. Les valeurs de largeur à mi-hauteur de la gaussienne du modèle sont donc comparé avec les valeurs de largeurs à mi-hauteur de la diffraction des RX. Ce travail qui est novateur, peut par ailleurs être employé à la modélisation de la transmission

optique de tout film mince de même nature. Cependant, notre modèle ne produit pas des résultats exacts avec la caractérisation par Rocking curve. D'autres travaux doivent être suivis pour trouver des solutions à ce problème.

Conclusion Générale

Ce travail avait pour but l'étude du comportement électrique des contacts métal-semiconducteurs et spécialement les diodes Schottky de puissance à base de carbure de silicium (4H-SiC) ceci d'une part et d'autre part l'étude structurale des films de nitrures d'aluminium (AlN).

Une première partie était consacrée à des diodes Schottky à base du carbure de silicium fournies par Cree Research Inc, réalisées sur un substrat en 4H-SiC type-n. Trois types de diodes ont été réalisées Mo/4H-SiC, Ni/4H-SiC et W/4H-SiC. Les mesures I-V ont été faites pour chaque métal en fonction du dosage et en fonction de la température. Nous avons abordés, dans ce travail, les points suivants :

- Etude des propriétés physiques et électriques du carbure de silicium (SiC). Le fonctionnement de la diode Schottky à base du SiC est rappelé et il est comparé avec les autres diodes de silicium.

- Après un exposé général sur la physique des semi-conducteurs, les différents mécanismes de transport de courant à travers l'interface de la jonction métal-Semiconducteur ont été discutés. Nous avons appliqué la méthode des algorithmes génétique (GAs) pour l'extraction des paramètres des diodes Schottky à base du 4H-SiC à partir de la caractéristique I-V directe. Les résultats obtenus à partir de cette méthode sont en bon accord avec ceux obtenues à partir des méthodes standards.

- L'inhomogénéité des barrières des diodes à larges bande interdite est expliquée par les deux modèles de Werner et Tung. Ces derniers sont appliqués pour déterminés les paramètres des structures Schottky à base de SiC et les

résultats sont comparés avec ceux obtenus par les modèles à barrières homogènes.

Dans la deuxième partie de ce travail, nous avons étudié un autre semi-conducteur à large bande interdite en l'occurrence le nitrure d'aluminium (AlN). Dans le cas du SiC, les diodes étaient fournies par Cree Research Inc., par contre, pour l'AlN nous avons entamé un travail de longue haleine qui consiste à étudier le matériau diélectrique, à le doper et enfin à réaliser des diodes de puissances à base de ce matériau. Dans le cadre de notre travail de thèse, nous nous sommes limités à l'étude des propriétés structurale des couches de nitrures par l'établissement des modèles d'extraction des paramètres optiques. En effet, l'AlN est relativement connue en tant que matériau isolant et les difficultés apparaissent lors de son dopage suite à la présence de défauts natifs et d'impuretés résiduelles. Nous avons donc décidé de mieux comprendre l'origine et l'influence de ces défauts de structure, avant dopage, en couplant des caractérisations fines du matériau (FTIR, Raman, HRTEM, DRX, Rocking curve,...) avec des modèles optiques.

Dans ce manuscrit :

- Nous avons rappelés les propriétés des nitrures et essentiellement le nitrure d'aluminium (AlN). Nous avons décrit les méthodes de dépôt par pulvérisation magnétron et PECVD, la procédure expérimentale ainsi que les techniques de caractérisation utilisé dans ce travail..

- Les films de nitrures d'aluminium réalisé ont été caractérisés par différentes techniques tels que la diffraction des rayons X, Rocking curve, par microscopie électronique (SAED) et par la technique FTIR. Sur la base des observations expérimentales de ces films, nous avons établi un modèle de la fonction diélectrique. Ce modèle était utilisé pour extraire les paramètres optiques des films d'AlN préparés sous différentes conditions au moyen de la méthode des algorithmes génétiques. Les résultats de la largeur à mi-hauteur de la gaussienne proposé dans ce modèle ont été corrélé avec la largeur de mi-hauteur déterminé a partir la

diffraction des rayons X (RX).

Les résultats obtenus ont permis de mieux caractériser les films d'AlN et de comprendre l'évolution de sa structure avec l'épaisseur. Ils seront précieux, lors du dopage de ces films qui introduira nécessairement d'autres défauts.

Ce travail qui a consisté à étudier deux matériaux à large Gap très différents tel que le SiC et l'AlN a permis dans le cas du premier de modéliser la jonction métal/semiconducteur et du deuxième de modéliser optiquement des couches minces d'AlN. Nous espérons dans la suite de ce travail, pouvoir améliorer la qualité des films d'AlN, les doper et enfin réaliser des diodes de puissance et les caractériser par les modèles utilisés pour le SiC

Bibliographique

- [1] C. KITTEL, *Introduction à la physique de l'état solide* 1972), p. 751.
- [2] G. MÜLLER, and G. KRÖTZ, *The 7 th International Conference on Solid State Sensors and Actuators* 1996), pp. 948.
- [3] D. R. Hamilton, J. R. O'Connor, and J. Smilens, *In Silicon Carbide-A High Temperature Semiconductor* (NY, Pergamon, 1960).
- [4] W. J. CHOYKE , and G. PENSL, edited by M. Bulletin1997), pp. 25.
- [5] M. MEHREGANY, M. G. ALLEN, and S. D. SENTURIA, Tech. Dig. IEEE Solid State Sensor and Actuators Workshop **June 2-5** (1986).
- [6] M. Bhatnagar, P. K. McLarty, and B. J. Baliga, IEEE, Electron Device Letters **13** (1992).
- [7] R. Singh *et al.*, IEEE transaction On Electronics Devices **49 n°4** (2002).
- [8] W. Schottky, *Naturwissenschaften* **26** (1938).
- [9] N. F. MOTT, *Proc. Cambridge Philos. Soc.* **34** (1938).
- [10] D. Geppert, A. Coweley, and B. Bore, **37** (1966).
- [11] J. Bardeen, *Phys.Rev* **71**, 717 (1947).
- [12] I. Tamm, *Phys. Z. Sowjetunion* (1932).
- [13] A. M. Cowley, and S. M. Sze, *J. Appl. Phys* **36** (1965).
- [14] W. Schottky, and E. Spenke, *Wiss. Veröff. Siemens-Werke* **18** (1939).
- [15] E. H. Rhoderick, *Metal-semiconductor contacts* (Oxford: Clarendon Press, 1978).
- [16] E. H. Rhoderick, and R. H. Williams, *Metal-Semiconductor contacts, 2nd ed.* (Clarendon, Oxford, 1988).
- [17] I. Ohdamarri, and K. Tu, *J. App. Phys* **51** (1980).
- [18] J. H. Werner, and H. H. Güttler, *J. Appl. Phys.* **69**, 1522 (1991).
- [19] S. Chand, and J. Kumar, *Semicond. Sci. Technol.* **11**, 1203 (1996).
- [20] H. H. Weiteringa *et al.*, *J. Appl. Phys.* **79** (1996).

- [21] S. Chand, and J. Kumarz, *Semicond. Sci. Technol.* **12**, 899 (1997).
- [22] S. Huang, and F. Lu, *Applied Surface Science* **XX** (2005).
- [23] J. H. Werner, and H. H. Guttler, *Physica Scripta.* **T39** (1991).
- [24] V. W. L. Chin, M. A. Green, and J. W. V. Storey, *Solid-State Electron.* **33** (1990).
- [25] Y. P. Song *et al.*, *Solid-State Electron* **29**, 633 (1986).
- [26] N. Rouag *et al.*, *Semicond. Sci. Technol.* **22** (2007).
- [27] S. Chand, and J. Kumar, *J. Appl. Phys.* **80** (1996).
- [28] S. Chand, *Semicond. Sci. Technol.* **19** (2004).
- [29] S. Chand, and J. Kumar, *J. Appl. Phys.* **82 (10)** (1997).
- [30] S. Y. Zhu *et al.*, *Solid-State Electron.* **44** (2000).
- [31] J. H. Werner, and H. H. Gijttler, *J. Appl. Phys.* **73 (3)** (1993).
- [32] R. T. Tung, *Appl. Phys. Lett.* **58** (1991).
- [33] S. Forment *et al.*, *Semicond. Sci. Technol.* **19** (2004).
- [34] R. T. Tung, *Physical review* **B 45** (1992).
- [35] C. Detavernier *et al.*, *J. Appl. Phys.* **84**.
- [36] H. H. Weitering *et al.*, *J. Appl. Phys.* **79** (1996).
- [37] A. Olbrich *et al.*, *J. Appl. Phys.* **83** (1998).
- [38] R. F. Schmitsdorf, T. U. Kampen, and W. Mo"nch, *J. Vac. Sci. Technol.* **B 15** (1997).
- [39] S. Zhu *et al.*, *Solid-State Electronics* **48**, 29 (2004).
- [40] K. Sarpatwari *et al.*, *Solid-State Electronics* **51**, 644 (2007).
- [41] B. Markus, and B. Wolfgang, in *Linear Genetic Programming*, edited by L. Springer Science+Business Media2007).
- [42] A. Ortiz-Conde *et al.*, *Solid-State Electronics* **45** (2001).
- [43] K. Sato, and Y. Yasmura, *J. Appl. Phys.* **58**, 3655 (1985).
- [44] A. Ferhat-Hamida *et al.*, *Solid State Elec-tronics* **46** (2002).

- [45] C. D. Lien, F. C. T. SO, and M. A. Nicolet, IEEE Trans. Electron Devices **31** (1984).
- [46] K. E. Bohlin, J. Appl. Phys. **60** (1986).
- [47] J. C. Manificier *et al.*, J. Appl. Phys. **64** (1988).
- [48] A. Itoh, T. Kimoto, and H. Matsunami, IEEE Electron Device Lett. **16** (1995).
- [49] A. Ferhat, in *Physique* (Ferhat Abbes- Setif, 2007).
- [50] S. M. Sze, *Physics of semiconductor devices* (John Wiley and Sons, 1982).
- [51] V. Saxena, J. N. Su, and A. J. Steckl, IEEE Trans. Electron Devices **46** (1999).
- [52] F. L. Via *et al.*, Microelectron. Eng. **60** (2002).
- [53] F. Roccaforte *et al.*, IEEE Trans. Electron Devices **50** (2003).
- [54] F. Roccaforte *et al.*, J. Appl. Phys. **93**, 9137 (2003).
- [55] F. Roccaforte *et al.*, J. Appl. Phys. **93** (2003).
- [56] R. Pérez *et al.*, Phys. Solid. Stat.(a) **43** (2005).
- [57] J. M. Bluet *et al.*, Superlattces and Microstructures **40** (2006).
- [58] J. Sullivan *et al.*, J. Appl. Phys. **70** (1991).
- [59] H. J. Im *et al.*, Phys. Rev. B **64** (2001).
- [60] A. N. Saxena, Surf. Sci. **13** (1969).
- [61] G.-P. Ru *et al.*, Solid-State Electronics **49**, 606 (2005).
- [62] P. Lahnor *et al.*, Appl. Phys. A **61**, 369 (1995).
- [63] S. Zhu *et al.*, Solid-State Electronics **44**, 663±671 (2000).
- [64] A. F. Hamida *et al.*, Semicond. Sci. Technol **23** (2008).
- [65] I. Vurgaftman, J. R. Meyer, and L. R. Ram-Mohan, J. Appl. Phys **89** (2001).
- [66] C. Adelman *et al.*, Appl. Phys. Lett. **4154-6**, 6 (2003).
- [67] S. K. Pugh *et al.*, Semiconductor Science And Technology **14** (1999).
- [68] M. Goano *et al.*, J. Appl. Phys **88** (2000).
- [69] M. Goano *et al.*, J. Appl. Phys **88** (2000).

- [70] M. Suzuki, and T. Uenoyama, *Band structure of group III nitrides, dans Gallium nitride and related semiconductors* 1999), Vol. 23, p. 153.
- [71] M. Suzuki, T. Uenoyama, and A. Yanase, Phys. Rev. B **52** (1995).
- [72] M. Leroux, and B. Gil, *Bandedge and optical functions of GaN, dans Gallium nitride and related semiconductors* (J. H. Edgar, S. Strite, I. Akasaki, H. Amano, et C. Wetzel, 1999), Vol. 23.
- [73] K. Karch, and F. Bechstedt, Phys. Rev. B **56**, 15 (1997).
- [74] K. Karch *et al.*, Materials Science Forum 264-268 pt. 1, 6 (1998).
- [75] V. I. Gavrilenko, and R. Q. Wu, Phys. Rev. B **61**, 42 (2000).
- [76] O. Martinez *et al.*, Phys. stat. sol. A **195**, 26 (2003).
- [77] S. Shokhovets *et al.*, J. Appl. Phys. **94**, 12 (2003).
- [78] A. S. Barker, Jr., and M. Ilegems, Phys. Rev. B **7**, 50 (1973).
- [79] C. Bungaro, K. Rapcewicz, and J. Bernholc, Phys. Rev. B **61**, 5 (2000).
- [80] M. Leroux, and B. Gil, *Bandedge and optical functions of InN, dans Gallium nitride and related semiconductors* (IEE, London, 1999), Vol. 23, p. 115.
- [81] R. Hui *et al.*, Appl. Phys. Lett. **83** (2003).
- [82] F. Bernardini, V. Fiorentini, and D. Vanderbilt, Phys. Rev. B **56** (1997).
- [83] M. Ohring, *Materials Science of thin films* 2002).
- [84] D. M. Mattox, *Handbook of Physical Vapor Deposition (PVD) Processing* 1998).
- [85] L. E. McNeil, M. Grimsditch, and R. H. French, J. Am. Ceram. Soc. **76** (1993).
- [86] H. J. Trodahl *et al.*, Appl. Phys. Lett. **89** (2006).
- [87] P. Perlin, A. Polian, and T. Suski, Phys. Rev. B **47** (1993).
- [88] M. Elliaoui, (Univesité-Metz, 2005).
- [89] M. Schubert, and B. Rheinlander, Phys. Rev. B. **56** (1997).
- [90] J. P. Pérez, *Optiques fondements et applications* 2004).
- [91] H. Cheng, Y. Sun, and J. X. Zhang, J. of Crystal Growth **46** (2003).
- [92] J. J. Monz'ón, and L. L. S'ánchez-Soto, Eur. J. Phys. **23** (2002).

- [93] R. Y. Krupitskaya, and G. W. Aunera, *Journal of Appl. Phys* **84** (1998).
- [94] D. W. Berreman, *Phys; Rev. B* **130** (1963).
- [95] J. Pastrna 'k, and B. Hejda, *Phys. Sol. Stat.* **35** (1969).
- [96] F. Randriamora, J. C. Bruye`r e, and A. Deneuille, *Mater. Sci. Eng.* **B 50** (1997).
- [97] X. D. Wang *et al.*, *Thin Solid Films* **351** (1994).
- [98] B. Wang, Y. N. Zhao, and Z. He, *J. Vac.* **48** (1997).
- [99] X. H. Xu *et al.*, *Thin Solid Films* **62**, 388 (2001).
- [100] D.R. McKenzie, and M. M. M. Bilek, *Thin Solid Films* **382** (2001).
- [101] D. R. McKenziea, and M. M. M. Bilekb, *Thin Solid Films* **382**, 280 287 (2001).
- [102] P. X. Feng, *Solid State Communications* **110** (1999).

Section d'équation (suivante)

Annexe A: Modèle de Schubert**Onde polarisé P**

Soit une onde électromagnétique se propageant dans un milieu anisotrope uniaxe suivant la direction θ_2 , et soit \vec{E} le champ électrique de cette onde. On peut l'écrire sous forme d'une somme d'une composante parallèle et perpendiculaire à l'axe \vec{y} . On a :

$$\vec{E} = E_{//} \vec{y} + E_{\perp} \vec{z} \quad (\text{A.1})$$

Qu'on peut écrire sous la forme :

$$\vec{E} = \vec{E}_{//} + \vec{E}_{\perp} \quad (\text{A.2})$$

Composantes parallèle :

Dans la base absolue $(o, \vec{x}, \vec{y}, \vec{z})$ la composante parallèle du champ \vec{E} s'écrit :

$$\vec{E} = E_{//} \vec{y} \quad (\text{A.3})$$

En passant dans la base liée à la cristallite $(o, \vec{a}, \vec{b}, \vec{c})$, \vec{E} s'écrit :

$$\begin{aligned} \vec{E}_{//} &= E_{//} \left(\sin(\psi) \vec{a} + \cos(\psi) \cos(\theta_C) \vec{b} + \cos(\psi) \sin(\theta_C) \vec{c} \right) \\ \vec{E}_{//} &= E_{//} \begin{pmatrix} \sin(\psi) \\ \cos(\psi) \cos(\theta_C) \\ \cos(\psi) \sin(\theta_C) \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} \vec{a} \\ \vec{b} \\ \vec{c} \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

D'autre part on sait que la polarisation est donnée dans le cas où le tenseur diélectrique est diagonal par :

$$\vec{P} = \varepsilon_0 (\varepsilon_{ij} - 1) \vec{E} \quad (\text{A.5})$$

On a :

$$\vec{P}_{//} = E_{//} \begin{pmatrix} \varepsilon_0 (\varepsilon_{r\perp} - 1) \sin(\psi) \\ \varepsilon_0 (\varepsilon_{r\perp} - 1) \cos(\psi) \cos(\theta_C) \\ \varepsilon_0 (\varepsilon_{r//} - 1) \cos(\psi) \sin(\theta_C) \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} \vec{a} \\ \vec{b} \\ \vec{c} \end{pmatrix} \quad (\text{A.6})$$

En passant dans la base absolue, la polarisation parallèle s'écrit :

$$\vec{P}_{//} = E_{//} \varepsilon_0 \begin{bmatrix} (\varepsilon_{r\perp} - 1) \sin(\psi) (\cos(\psi) \vec{x} + \sin(\psi) \vec{y}) + \\ (\varepsilon_{r\perp} - 1) \cos(\psi) \cos(\theta_C) [-\sin(\psi) \cos(\theta_C) \vec{x} + \cos(\psi) \cos(\theta_C) \vec{y} - \sin(\theta_C) \vec{z}] \\ (\varepsilon_{r//} - 1) \cos(\psi) \sin(\theta_C) [-\sin(\psi) \sin(\theta_C) \vec{x} + \cos(\psi) \sin(\theta_C) \vec{y} + \cos(\theta_C) \vec{z}] \end{bmatrix} \quad (\text{A.7})$$

$$\Leftrightarrow \vec{P}_{//} = E_{//} \varepsilon_0 \begin{bmatrix} (\varepsilon_{r\perp} - 1) [\sin(\psi) \cos(\psi) - \sin(\psi) \cos(\theta_C)] - (\varepsilon_{r//} - 1) \cos(\psi) \sin(\psi) \sin^2(\theta_C) \\ (\varepsilon_{r\perp} - 1) [\sin^2(\psi) + \cos^2(\psi) \cos^2(\theta_C)] - (\varepsilon_{r//} - 1) \cos^2(\psi) \sin^2(\theta_C) \\ -(\varepsilon_{r\perp} - 1) \cos(\psi) \sin(\psi) \cos(\theta_C) - (\varepsilon_{r//} - 1) \cos(\psi) \cos(\theta_C) \sin(\theta_C) \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \vec{x} \\ \vec{y} \\ \vec{z} \end{pmatrix} \quad (\text{A.8})$$

$$\Leftrightarrow \vec{P}_{//} = E_{//} \varepsilon_0 \begin{bmatrix} \sin(\psi) \cos(\psi) [(\varepsilon_{r\perp} - 1) - (\varepsilon_{r\perp} - 1) \cos^2(\theta_C) - (\varepsilon_{r//} - 1) \sin^2(\theta_C)] \\ (\varepsilon_{r\perp} - 1) \sin^2(\psi) + \cos^2(\psi) [(\varepsilon_{r\perp} - 1) \cos^2(\theta_C) + (\varepsilon_{r//} - 1) \sin^2(\theta_C)] \\ \cos(\psi) \sin(\psi) \cos(\theta_C) [-(\varepsilon_{r\perp} - 1) + (\varepsilon_{r//} - 1)] \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \vec{x} \\ \vec{y} \\ \vec{z} \end{pmatrix} \quad (\text{A.9})$$

$$\Leftrightarrow \begin{cases} \vec{P}_x = E_{//} \varepsilon_0 \{ (\varepsilon_{r\perp} - \varepsilon_{r//}) + \cos^2(\theta_C) (\varepsilon_{r//} - \varepsilon_{r\perp}) \} \cos(\psi) \\ \quad = E_{//} \varepsilon_0 \{ \sin^2(\theta_C) (\varepsilon_{r//} - \varepsilon_{r\perp}) \} \cos(\psi) \\ \vec{P}_y = E_{//} \varepsilon_0 \{ (\varepsilon_{r\perp} - 1) (1 - \cos^2(\psi)) + [(\varepsilon_{r\perp} - 1) \cos^2(\theta_C) + (\varepsilon_{r//} - 1) \sin^2(\theta_C)] \cos^2(\psi) \} \\ \vec{P}_z = E_{//} \varepsilon_0 \{ \cos(\psi) \cos(\theta_C) \sin(\theta_C) (\varepsilon_{r//} - \varepsilon_{r\perp}) \} \end{cases} \quad (\text{A.10})$$

Composantes perpendiculaires :

Dans la base $(o, \vec{x}, \vec{y}, \vec{z})$ la composante perpendiculaire \vec{E} s'écrit :

$$\vec{E}_{\perp} = E_{\perp} \vec{z} \quad (\text{A.11})$$

En passant dans la base liée à la cristallite $(o, \vec{a}, \vec{b}, \vec{c})$, \vec{E} s'écrit :

$$\begin{aligned}\vec{E}_\perp &= E_\perp \left(-\sin(\theta_C)\vec{b} + \cos(\theta_C)\vec{c} \right) \\ \vec{E}_\parallel &= E_\parallel \begin{pmatrix} 0 \\ -\sin(\theta_C) \\ \cos(\theta_C) \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} \vec{a} \\ \vec{b} \\ \vec{c} \end{pmatrix}\end{aligned}\quad (\text{A.12})$$

D'autre part on sait que la polarisation est donnée dans le cas où le tenseur diélectrique est diagonal par l'équation (A1.5). On a :

$$\vec{P}_\parallel = E_\parallel \begin{pmatrix} 0 \\ -\varepsilon_0(\varepsilon_{r\perp} - 1)\sin(\theta_C) \\ \varepsilon_0(\varepsilon_{r\parallel} - 1)\cos(\theta_C) \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} \vec{a} \\ \vec{b} \\ \vec{c} \end{pmatrix}\quad (\text{A.13})$$

En passant dans la base absolue $(o, \vec{x}, \vec{y}, \vec{z})$ et après développement du calcul, les composantes du vecteur \vec{P}_\perp sont données par :

$$\Leftrightarrow \begin{cases} \vec{P}_x = \varepsilon_0 E_\perp \{ (\varepsilon_{r\perp} - \varepsilon_{r\parallel}) \sin(\theta_C) \cos(\theta_C) \sin(\psi) \} \\ \vec{P}_y = \varepsilon_0 E_\perp \{ (\varepsilon_{r\parallel} - \varepsilon_{r\perp}) \sin(\theta_C) \cos(\theta_C) \sin(\psi) \} \\ \vec{P}_z = \varepsilon_0 E_\perp \{ (\varepsilon_{r\perp} \sin^2(\theta_C) + \varepsilon_{r\parallel} \cos^2(\theta_C)) - 1 \} \end{cases}\quad (\text{A.14})$$

Calcul de Schubert

Cas des composantes parallèles :

En moyennant les composantes du vecteur polarisation sur toutes les valeurs possibles de l'angle ψ (angle entre la projection de l'axe optique c sur la surface de l'échantillon et l'axe y). Les valeurs de cet angle varient entre 0 et 2π , on a :

$$\begin{cases} \langle \cos(\psi) \rangle = 0 \Rightarrow \langle P_x \rangle = \langle P_z \rangle = 0 \\ \langle P_y \rangle = \varepsilon_0 E_\parallel \{ (\varepsilon_{r\perp} - 1) (1 - \langle \cos^2(\psi) \rangle) + [(\varepsilon_{r\perp} - 1)\cos^2(\theta_C) + (\varepsilon_{r\parallel} - 1)\sin^2(\theta_C)] \langle \cos^2(\psi) \rangle \} \end{cases}\quad (\text{A.15})$$

Sachant que

$$\langle \cos^2(\psi) \rangle_{[0, 2\pi]} = \frac{1}{2}\quad (\text{A.16})$$

On a :

$$\Leftrightarrow \langle P_y \rangle = \varepsilon_0 E_{//} \left\{ (\varepsilon_{r\perp} - 1) \left[\frac{1}{2} + \frac{1}{2} \cos^2(\theta_C) \right] + (\varepsilon_{r//} - 1) \frac{\sin^2(\theta_C)}{2} \right\} \quad (\text{A.17})$$

$$\Leftrightarrow \langle P_y \rangle = \varepsilon_0 E_{//} \left\{ \varepsilon_{r\perp} \left(\frac{1 + \cos^2(\theta_C)}{2} \right) + \varepsilon_{r//} \frac{\sin^2(\theta_C)}{2} - \frac{1}{2} \left(\frac{\cos^2(\theta_C) + \sin^2(\theta_C)}{2} \right) \right\} \quad (\text{A.18})$$

D'autre part, d'après la relation trigonométrique suivante

$$\frac{1 + \cos^2(\theta_C)}{2} = \frac{3 + \cos^2(2\theta_C)}{4} \quad (\text{A.19})$$

On aura :

$$\langle P_y \rangle = \varepsilon_0 E_{//} \left\{ \varepsilon_{r\perp} \left(\frac{3 + \cos^2(2\theta_C)}{4} \right) + \varepsilon_{r//} \left(\frac{1 - \cos^2(\theta_C)}{4} \right) - 1 \right\} \quad (\text{A.20})$$

Cas des composantes perpendiculaires :

En moyennant sur toute les valeurs possibles de l'angle ψ variant entre 0 et 2π , on a :

$$\begin{cases} \langle \cos(\psi) \rangle = 0 \Rightarrow \langle P_x \rangle = \langle P_y \rangle = 0 \\ \langle P_z \rangle = \varepsilon_0 E_{\perp} \left\{ [\varepsilon_{r\perp} \sin^2(\theta_C) + \varepsilon_{r//} \cos^2(\theta_C)] - 1 \right\} \end{cases} \quad (\text{A.21})$$

Onde polarisé S (\perp) :

Dans le cas, la composante du champ électrique parallèle à l'axe \vec{z} est nulle, seule la composante suivant la direction \vec{x} est non nulle. Pour déterminera la valeur moyenne des composantes du vecteur polarisation, on effectue le même calcul fait auparavant, on abouti aux résultats suivants :

$$\begin{cases} \langle \cos(\psi) \rangle = 0 \Rightarrow \langle P_y \rangle = \langle P_z \rangle = 0 \\ \langle P_x \rangle = \varepsilon_0 E_{//} \left\{ \varepsilon_{r\perp} \left(\frac{3 + \cos^2(2\theta_C)}{4} \right) + \varepsilon_{r//} \left(\frac{1 - \cos^2(\theta_C)}{4} \right) - 1 \right\} \end{cases} \quad (\text{A.22})$$

Fonction diélectrique effective :

D'après les équations (A. 5), (A. 20), (A. 21) et (A. 22) la fonction diélectrique

est donnée par :

$$\begin{cases} \varepsilon_{//,eff} = \varepsilon_{r\perp} \left(\frac{3 + \cos^2(2\theta_C)}{4} \right) + \varepsilon_{r//} \left(\frac{1 - \cos^2(\theta_C)}{4} \right) - 1 \\ \varepsilon_{\perp,eff} = (\varepsilon_{r\perp} \sin^2(\theta_C) + \varepsilon_{r//} \cos^2(\theta_C)) - 1 \end{cases} \quad (\text{A.23})$$

Remarque

Puisque on travaille dans un milieu uniaxe, l'indice ($//$) et (\perp) sont remplacés respectivement par (o) et (e) comme abréviation des mots ordinaire et extraordinaire.

Chapitre d'équation 3 Section 3

Annexe B: *Fonction diélectrique prenant en considération la dispersion des vibrations des modes optique*

Dans la limite des grandes longueurs d'onde, les vibrations des modes optiques sont bien décrites par la théorie de Born et Huang. Elle permet la description de la réponse spectrale d'un milieu par l'intermédiaire de la fonction diélectrique Feng et al [102] ont obtenu une nouvelle fonction diélectrique qui prend en considération la dispersion des vibrations optiques des modes LO e TO. Cette dispersion est exprimée sous la forme:

$$\omega_{LO(TO)}^2(q) = \omega_{LO(TO)}^2 - \beta_{LO(TO)}^2 \cdot q^2 \quad (B.1)$$

Où β_{TO} et β_{LO} sont respectivement les paramètres de vitesse phénoménologiques transverse et longitudinale. En incluant cette dispersion, l'équation de Born-Huang généralisé est exprimée sous la forme :

$$\begin{cases} (\omega^2 - \omega_{TO}^2) \vec{u} + \alpha \cdot \vec{E} - [(\beta_{LO}^2 - \beta_{TO}^2) \cdot \vec{\nabla} \cdot (\vec{\nabla} \vec{u}) + \beta_{TO}^2 \vec{u}] = 0 \\ \vec{P} = \alpha \cdot \vec{u} + \gamma \cdot \vec{E} \end{cases} \quad (B.2)$$

Où α et γ sont des coefficients. u représente le déplacement relatif des cations par rapport aux anions, ce déplacement peut être décrit par l'équation d'une onde plan du type

$$\vec{u} = \vec{u}_0 \cdot \exp(i\vec{q}\vec{r}) \quad (B.3)$$

La substitution de u dans l'équation (B. 2) permet de d écrire

$$(\omega^2 - \omega_{TO}^2) \vec{u} + \alpha \cdot \vec{E} - [(\beta_{LO}^2 - \beta_{TO}^2) \cdot \vec{\nabla} \cdot (\vec{q}\vec{u}) + \beta_{TO}^2 \vec{u}] = 0 \quad (B.4)$$

En éliminant P entre la relation (B. 2) et l'équation :

$$\vec{E} + 4\pi\vec{P} = \alpha\vec{E} \quad (\text{B.5})$$

On obtient :

$$\vec{u} = \frac{1}{\alpha} \left(\frac{1}{4\pi} (\varepsilon - 1) - \gamma \right) \vec{E} \quad (\text{B.6})$$

a) Cas où $\vec{u} \cdot \vec{q} \neq 0$

En remplaçant (B. 6) en (B. 4) et en éliminant le facteur $\vec{E} \cdot \vec{q}$ on obtient la fonction diélectrique de ω et q exprimé sous la forme :

$$\varepsilon(\omega, q) = 1 + 4\pi \left(\gamma + \frac{\alpha^2}{\omega_{TO}^2 - \beta_{TO}^2 \cdot q^2 - \omega^2} \right) \quad (\text{B.7})$$

A partir de cette relation, les constantes diélectriques basse et hautes fréquences peuvent être déduite en remplaçant respectivement ω par 0 et ∞ . Elles sont exprimées sous la forme :

$$\begin{cases} \varepsilon(\infty, q) = 1 + 4\pi\omega \\ \varepsilon(0, q) = 1 + 4\pi \left(\gamma + \frac{\alpha^2}{\Omega_{TOj}^2(q)} \right) \\ \text{avec : } \Omega_{TOj}^2(q) = \omega_{LO}^2 - \beta_{LO}^2 \cdot q^2 \end{cases} \quad (\text{B.8})$$

A partir des équations, une relation semblable à celle de Lyddane, Sachs, Tellers peut être obtenue. Elle s'exprimé sous la forme :

$$\begin{cases} \omega_{TOj}^2(q) = \Omega_{TOj}^2(q) \frac{\varepsilon(0, q)}{\Omega_{TOj}^2(q)} \\ \text{avec : } \omega_{TOj}^2(q) = \omega_{LO}^2 - \beta_{LO}^2 \cdot q^2 \end{cases} \quad (\text{B.9})$$

A partir des équations (C. 8), l'équation (C. 7) peut être réécrite sous la forme :

$$\varepsilon(\omega, q) = \varepsilon_{\infty} \left(1 + \frac{\omega_{LO}^2(q) - \Omega_{TO}^2(q)}{\Omega_{TO}^2(q) - \omega^2} \right) \quad (\text{B.10})$$

b) Cas où $\vec{u} \cdot \vec{q} = 0$

Dans ce cas $\vec{u} \cdot \vec{q} = 0$ l'équation (B. 4) s'écrit :

$$(\omega^2 - \omega_{TO}^2) \vec{u} + \alpha \vec{E} + \beta_{TO}^2 q^2 \vec{u} = 0 \quad (B.11)$$

A partir de l'équation (B. 6) on a :

$$\vec{E} = \left(\frac{4\pi}{(\varepsilon - 1) - 4\pi\gamma} \right) \alpha \vec{u} \quad (B.12)$$

En remplaçant \vec{E} dans l'équation (mode TO) on obtient :

$$\varepsilon(\omega, q) = 1 + 4\pi \left(\gamma + \frac{\alpha^2}{\omega_{TO}^2(q) - \omega^2} \right) \quad (B.13)$$

Aussi la relation LST est écrite sous la forme

$$\begin{cases} \Omega_{LO}^2 = \omega_{TO}^2(q) \cdot \frac{\varepsilon(0, q)}{\varepsilon_\infty} \\ \Omega_{LO}^2(q) = \omega_{LO}^2 - \beta_{TO}^2 \cdot q^2 \end{cases} \quad (B.14)$$

L'équation (B. 13) peut être réécrite sous la forme :

$$\varepsilon(\omega, q) = \varepsilon_\infty \left(1 + \frac{\Omega_{TO}^2(q) - \omega_{TO}^2(q)}{\Omega_{TO}^2(q) - \omega^2} \right) \quad (B.15)$$

c) Milieu absorbant :

Si le milieu est absorbant, ce qui est le cas des films h-AlN la fréquence ω est remplacé par $\omega + i\frac{\Gamma}{2}$ et puisque la valeur de Γ est faible devant les fréquences utilisé le terme :

$$\omega + i\frac{\Gamma}{2} \approx \omega^2 + i\Gamma \quad (B.16)$$

Les équations (B. 10) et (B. 15) donnant $\varepsilon(\omega, q)$ deviennent :

$$\varepsilon(\omega, q) = \varepsilon_\infty \left(1 + \frac{\omega_{LO}^2(q) - \Omega_{TO}^2(q)}{\Omega_{TO}^2(q) - \omega^2 - i\Gamma \cdot \omega} \right) \quad (B.17)$$

$$\varepsilon(\omega, q) = \varepsilon_{\infty} \left(1 + \frac{\Omega_{TO}^2(q) - \omega_{TO}^2(q)}{\Omega_{TO}^2(q) - \omega^2 - i\Gamma\omega} \right) \quad (\text{B.18})$$

En utilisant les équations (B. 10) et (B. 15) donnant $\Omega_{TO}^2(q)$ qui devient :

$$\Omega_{TO}^2(q) = \omega_{TO}^2 - \omega_{LO}^2 - \omega_{LO}^2(q) \quad (\text{B.19})$$

La relation (B. 17) peut être réécrite uniquement en fonction de la relation de dispersion des modes LO suivant l'expression :

$$\varepsilon(\omega, q) = \varepsilon_{\infty} \left(1 + \frac{\omega_{TO,j}^2 - \omega_{TO,j}^2}{\omega_{TO,j}^2 - \omega_{LO,j}^2 + \omega_{LO,j}^2(q) - \omega^2 - i\omega\Gamma_j} \right) \quad (\text{B.20})$$

ABSTRACT

The present work has for objective the studies of electric and structural materials of large forbidden band (Gap) for their applications in powers diodes.

In the first part of this work, we used the method of the genetic algorithms in order to extract the parameters from the direct current-tension characteristic, to different temperatures of a power diodes, on the Silicon carbide such us a (Mo/4H-SiC, W/4H-SiC and Ni/4H-SiC). We have used different models of homogeneous barriers and inhomogeneous barriers. The results of the parameters obtained from the models contributed to understand the mechanisms of current conduction in these diodes.

In the second part, some AlN films have been prepared by PVD, PECVD techniques namely the RF magnetron sputtering. We have proposed a model of characterization some of properties of the AlN films from the technical FTIR. The parameters obtained are correlated to those obtained from another technique of characterization (Rocking curves). The model contributed to the understanding the structure of these films of large Gap.

RESUME

Ce présent travail a pour objectif l'étude électrique et structurale des matériaux à large bande interdite en vue de leurs applications dans les diodes de puissances.

Dans la première partie de ce travail nous avons utilisé la méthode des algorithmes génétiques en vue de l'extraction des paramètres des diodes de puissance à base du carbure de Silicium en (Mo/4H-SiC, W/4H-SiC et Ni/4H-SiC) à partir des caractéristiques courant-tension en directe, à différentes températures. Nous avons utilisé les différents modèles à barrières homogènes et à barrières inhomogènes. Les résultats des paramètres obtenus à partir des modèles ont contribué à comprendre les mécanismes de transport de courants ce type de diodes.

Dans la deuxième partie de ce travail, des films AlN ont été élaborés par une technique PVD and PECVD en l'occurrence la pulvérisation RF magnétron. Un modèle optique est proposé de caractérisation des films AlN à partir de la technique FTIR, basé sur la manière de croissance de ces films, ce qui nous a permis de corréler les paramètres de deux différentes techniques de caractérisation FTIR et Rocking curve (DRX). Le modèle a contribué à la compréhension de la structure de ces films à large bande interdite.

ملخص

يهدف هذا العمل إلى دراسة الخصائص البنيوية والخصائص الكهربائية للمواد ذات العصابة الممنوعة الواسعة قصد تطبيقها كمكونات في الإلكترونيك ذات الاستطاعة العالية

في الجزء الأول استخدمنا طريقة الخوارزميات الجينية لاستخراج مميزات الوصلات ذات الأساس 4H-SiC و ذات الاستطاعة العالية (Mo/4H-SiC, W/4H-SiC, Ni/4H-SiC) عند درجات حرارة مختلفة من خلال الخاصية الكهربائية تيار-توتر (I-V). استخدمنا نماذج مختلفة لحواجز النقل الكهربائي في الوصلات المتجانسة وغير المتجانسة. إن استقراء النتائج التي تم الحصول عليها من هذه النماذج قد ساعدت على فهم آليات النقل في الصمامات الثنائية ذات الاستطاعة العالية.

في الجزء الثاني استعملنا تقنية الرش المهيبي بمفعول مغناطيسي لترسيب الشرائح (AlN). وعلى أساس التقنيات المختلفة المستعملة لوصف بنية هذه الشرائح من انعراج الأشعة السينية (DRX), HRTEM, اقتراحنا بناء على كيفية نمو هذه الشرائح نموذج لوصف الخصائص البنيوية من خلال تقنية طيف FTIR. وهو الأمر الذي سمح لنا لربط بين تقنيتين للوصف طيف FTIR و منحنيات (DRX) Rocking curve. هذا النموذج قد ساهم في فهم بنية هذه الشرائح ذات العصابة الممنوعة الواسعة.