



Faculté des Sciences Exactes
Département de PHYSIQUE

Mémoire de Master

Spécialité : Physique des Matériaux

Thème

Simulation et modélisation de l'effet de la température sur les caractéristiques électriques (I-V-T) dans la structure métal/semi-conducteur ' β -Ti/n-GaAs'

Présentée par

M^{elle}. OUZEROUHANE MARYAMA

Soutenu le: 24 /09/2020

Devant le Jury composé de:

Madame Amatousse Nawel	Professeur	Président
Madame Djassas Houria	MAA	Examineur
Madame Zellag Saliha	MCB	Rapporteur

Année universitaire 2019/2020

Remerciements

Je tiens tout d'abord à remercier le bon dieu tout miséricordieux de m'avoir accordé la santé, le courage et la volonté nécessaire pour arriver au terme de ce travail.

Mes remerciements les plus cordiaux s'dressent en premier lieu à madame ZELLAG SALIHA pour avoir accepté l'encadrement de ce travail qui n'aurait pas été possible sans sa précieuse aide, sa compréhension et sa disponibilité.

Ma profonde gratitude et mes sincères remerciements vont à Melle AMATOUSSE NAWAL pour avoir accepté de présider le jury de ma soutenance.

Je remercie infiniment HOURIA DJASSAS pour avoir accepté de juger ce travail.

Mes remerciements s'adressent particulièrement à ma mère et mes frères, KHOUDIR, YOUNES, YOUSF, et ma sœur, FARIA, pour toutes les orientations et les conseils qui m'ont prodigué et leur soutien tout le long de mon cursus.

J'adresse également mes sincères remerciements à tous mes enseignants.

Enfin, je ne saurais oublier mes amis HAKIMA ,IDLLILILIA, BOUHADJE KAHINA,ADJIN ROSA.

Table des matières

Introduction générale :	1
I.1 Introduction	3
I.2 Structures métal-semi-conducteur	3
I.2.1 Le travail de sortie du métal ϕ_M	3
I.2.2 Le travail de sorties ϕ_{MS} du semi-conducteur	4
I.2.3 L'affinité électronique χ	5
I.2.4 Structure de la barrière potentielle.....	5
I.3 Polarisation de la diode Schottky.....	6
I.3.1 Polarisation direct (dans le cas d'un Semi-conducteur type n).....	6
I.3.2Polarisation inverse.....	7
I.4 Zone de charge d'espace.....	8
I.4.1 Champ et potentiel électrique	8
I.4.3 Capacité de la zone de charge d'espace.....	10
I.5 Effet Schottky.....	11
I.6 Mécanisme de conduction dans les diodes Schottky.....	13
I.6.1Introduction.....	13
I.6.2 Emission au-dessus de la barrière	14
I.6.2.1 Théorie de l'émission thermoinique	14
I.6.2.2 Théorie de diffusion.....	15
I.6.2.3 Théorie de l'émission-diffusion ou (thermoinique diffusion).....	16
I.6.3 Mécanisme du conduction par effet tunnel.....	18
I.6.4 Recombinaison dans la zone de charge d'espace.....	18
I.6.5 Injection des porteurs minoritaires	19
I.7 Phénomène de transport dans la diode Schottky en polarisation inverse	20
II.1 Introduction.....	21
II.2 Structure et propriétés de l'arséniure de gallium (GaAs).....	21
II.2.1 Structure cristallin du GaAs	23
II.2.2 Structure de bande d'énergie	24
II.3 La mobilité des porteurs de GaAs.....	25
II.4 Avantages et inconvénients du GaAs	25
II.4.1 Les avantages.....	26

II.4.2 Les inconvénients	27
II-5 Propriétés du matériau Titane (Ti).....	27
II.5-1 Introduction.....	27
II.5.2 Propriétés physiques du titane [1] :	27
II.5.3 Propriétés cristallographiques	27
II.6.Les isotopes du titane	29
II.7.Les oxydes du titane	29
II.8 Les alliages du titane	29
II.8.1 Exemples d'alliage.....	30
Partie 1 : Description du logiciel de simulation.....	31
III.1.1 Introduction :	31
III.1.2 Présentation de logiciel Silvaco :	31
III.1.3 La VWF : (Virtual Wafer Fab) :	31
III.1.3.1 ATHENA.....	32
III.1.3.2 ATLAS	32
III.1.4 Présentation d'atlas.....	32
III.1.5 Entrés et sorties d'Atlas	33
III.1.6 Principe de la simulation numérique.....	34
III.1.7 Les étapes de simulation avec Atlas.....	35
III.1.8 Différentes étapes de simulation.....	38
III.1.8.1La spécification de la structure.....	38
Partie 2 : résultats et interprétation	38
III.2.1 Introduction.....	38
III.2.2 Caractéristiques courant-tension de la structure β -Ti/n-GaAs en fonction de la température:	39
III.2.3 Extraction des paramètres de la hauteur de barrière et du facteur d'idéalité	40
III.2.4 comparaison des résultats de simulation et avec les résultats expérimentaux.....	46
Conclusion générale :	48

Table des figures

Figure I.1 : Niveaux énergétiques dans un métal et un semi-conducteur	4
Figure I.2 : les niveaux énergétiques d'un métal et d'un semi-conducteur après le contact	6
Figure I.3 : Polarisation de la diode Schottky	6
Figure I.4 : Diagramme de bande d'énergie de contacte métal-semi-conducteur sous polarisation direct.....	7
Figure I.5 : Diagramme de bande d'énergie de contacte métal-semi-conducteur sous polarisation inverse.....	8
Figure I.6 :Variation du carré de l'inverse de la capacité en fonction de la tension .la pente de la courbe permet de déterminer la valeur de la concentration de dopant et la hauteur de barrière à l'équilibre thermodynamique	11
Figure I.7 : Variation de la hauteur de la barrière d'énergie due à la présence du plan conducteur potentielle	12
Figure I.8 : Phénomènes de transport dans une jonction métal-semiconducteur : (1) émission thermoiniquee (au dessus de la barrière),(2) effet tunnel, (3) recombinaison, (4) injection de porteur minoritaires	13
Figure I.9 : Variation du niveau de fermi dans le cas d'une conduction mixte ; variation dans la zone de charge d'espace et discontinuité à l'interface	17
Figure II.1 : (a) Structure cristalline du GaAs, (b) la première zone de brillouin.....	23
Figure II.2 : Structure de bande électronique du GaAs	24
Figure II-3 : Cristallographie du titane pur	28
Figure III.1 : Le rôle de simulation.....	31
Figure III.2 : Entrées et sorties d'Atlas	33
Figure III.3 : Les étapes de simulation avec Atlas	36
FigureIII.4 :Diode Schottky β -Ti/n-GaAs/Ti/Au	38

Figure III-5:Caractéristique courant –tension (I-V) en polarisation directe et inverse à l'échelle semi-log pour la structure β -Ti/n-GaAs en fonction de la température[300 à 400k.....	39
Figure III.6 : Représentation schématique des différentes régions de la caractéristique (lnI-V) d'une diode Schottky, en polarisation directe	41
Figure III.7 :Extraction du facteur d'idéalité n et la hauteur de la barrière de la structure MS (β -Ti/n-GaAs) à T = 300 °K.....	42
Figure III.8 : Extraction du facteur d'idéalité n et la hauteur de la barrière de la structure MS (β -Ti/n-GaAs) à T = 320 °K.....	43
Figure III.9 :Extraction du facteur d'idéalité n et la hauteur de la barrière de la structure MS (β -Ti/n-GaAs) à T = 340 °K.....	43
Figure III.10 :Extraction du facteur d'idéalité n et la hauteur de la barrière de la structure MS (β -Ti/n-GaAs) à T = 360 °K.....	44
Figure III.11 :Extraction du facteur d'idéalité n et la hauteur de la barrière de la structure MS (β -Ti/n-GaAs) à T = 380 °K.....	44
Figure III.12 :Extraction du facteur d'idéalité n et la hauteur de la barrière <i>de la structure</i> MS (β -Ti/n-GaAs) à T = 400°K.....	45
Figure III.13 :La variation du facteur d'idéalité (n) en fonction de la température	
Figure III.14 :La hauteur de la barrière en fonction de la température.....	45
Figure III-15 : La variation de la hauteur de la barrière V_{bi} en fonction de facteur d'idéalité n	46

Liste des tableaux

Tableau I.1 : Travaux de sortie de quelques métaux	4
Tableau II.1 : principales paramètres physiques et électriques du GaAs	22
Tableau II-2 : Exemples d'éléments α -gènes ou β -gènes	30
Tableau III.1 Paramètres de la structure MS simulés et mesurés	47

Introduction générale

Introduction générale :

Les diodes Schottky bien que très anciennes, mais elles restent l'étude de recherche jusqu'à nos jours grâce à ces nombreuses applications.

En fait, les diodes Schottky ont été largement utilisées pour une grande variété d'applications telles que les cellules solaires, photo détecteurs, transistors, les mélangeurs à micro-ondes et divers circuits intégrés. Les diodes β -Ti/GaAs en particulier ont eu beaucoup de succès grâce aux caractéristiques du Titane et à ses alliages.

Le titane est l'élément chimique de numéro atomique 22, de symbole Ti. C'est un métal de transition léger, résistant, d'un aspect blanc métallique, qui résiste à la corrosion. Les alliages du Titane sont très utilisés dans les applications militaires, la construction d'avion. Ils sont également utilisés dans le domaine biomédical en raison de leur biocompatibilité et de leur faible module d'Young. Des nouveaux alliages comme le Ti6Al7Nb, alliage de type $\alpha + \beta$, sont développés dans le but de réduire l'utilisation du Vanadium, toxique pour l'Homme. Particulièrement le Béta-Titane ' β -Ti' a connu un essor remarquable en lunetterie depuis une dizaine d'année et ce pour sa faible densité, sa résistance et son anticorrosion. Ils sont aussi développés dans le but de se rapprocher le plus possible d'un alliage avec un module d'Young très proche de celui de l'os afin d'éviter toute forme d'atrophie [1].

Cependant, les caractéristiques (courant-tension) de ces diodes ne sont pas toutes clarifiées malgré l'ancienneté de leur existence.

Dans le but de les clarifier, on se propose dans ce travail de faire une étude de simulation en utilisant le logiciel Atlas Silvaco [2], pour étudier d'une part les caractéristiques (I-V) de la diode β -Ti /GaAs(n), en fonction de plusieurs températures variant de 300 à 400 K avec un pas de 20, et d'une autre part pour extraire les principaux paramètres de la diode tel que le facteur d'idéalité n et la hauteur de la barrière[3] [4]. Ces paramètres nous donnent des informations sur les mécanismes de transport électriques internes et sur les imperfections des étapes technologiques lors du processus de fabrication.

Le coût exorbitant lors de la fabrication de nouveaux composants a poussé les chercheurs à utiliser la simulation pour mieux comprendre les phénomènes physiques et pour proposer les pistes d'améliorations des structures et de nouvelles architectures de dispositifs à moindre coût. Principalement deux sociétés internationales se partagent le marché mondial de la simulation de composants : Silvaco et SYNOPSIS (ancienne VSE).

Notre travail est organisé en trois chapitres :

Le premier chapitre est consacré à l'étude du contact métal/semi-conducteurs.

En fait, nous avons présenté les phénomènes physiques de la structure MS tels que l'établissement de la hauteur de la barrière, la formation de la zone de charge d'espace et les phénomènes de transport du courant.

Les principales propriétés des semi-conducteur ont été discutées dans le deuxième chapitre en particulier la présentation des caractéristiques du GaAs et du β -Ti.

Le troisième chapitre est organisé en deux parties :

Dans la première nous présentons le logiciel de simulation Silvaco, ses modules et outils de simulation. Nous décrivons par la suite les procédés technologiques nécessaires à la réalisation de notre structure diode Schottky et dans le deuxième nous présenterons nos résultats obtenus avec interprétation et comparaison avec d'autres résultats expérimentaux.

Nous terminerons par une conclusion générale où seront rassemblés nos principaux résultats que nous avons obtenus ainsi que les perspectives du travail.

Chapitre I

Théorie du contact Schottky

I.1 Introduction

La diode Schottky est un contact de surface d'un métal avec un semi-conducteur. Les premières diodes furent découvertes par F.BRAUN en 1874 [5]. Bien que très anciennes, mais elles restent l'intérêt de recherche jusqu'à nos jours grâce à ces nombreuses applications. En fait les diodes Schottky ont été largement utilisées pour une grande variété d'applications telles que les cellules solaires, photo détecteurs, transistors Schottky, des mélangeurs à micro-ondes, diode Zenker et divers circuits intégrés. La diode Schottky peut également être utilisée comme un condensateur variable dans des circuits paramétriques pour la multiplication de fréquence [6].

I.2 Structures métal-semi-conducteur

La structure métal semi-conducteur est le dispositif le plus simple à base d'un grand nombre de structure plus complexe. Dans un contact Schottky le dispositif dit unipolaire, lorsque le courant est assuré par un seul type de porteur de charge qui est l'électron ou le trou. La structure métal-semi-conducteur (Ms) a une grande importance soit dans les applications électroniques modernes et dans la compréhension des dispositifs électroniques d'état solide en hyperfréquence. Les diodes Schottky peuvent se comporter comme des contacts redresseurs au des contacts ohmiques, Souvent l'application d'une tension sur une structure M/SC produit une caractéristique courant-tension non symétrique, la structure se comporte comme un redresseur [7].

Dans le cadre de l'étude d'un contact métal-semi-conducteur il est nécessaire de connaître les grandeurs essentielles qui déterminent le transfert de charge entre les deux matériaux [8].

- Le travail de sortie du métal (ϕ_M).
- L'affinité électronique du semi-conducteur (χ).
- La hauteur de la Barrière du potentiel (SBH).

I.2.1 Le travail de sortie du métal ϕ_M

Le travail ϕ_M est l'énergie minimale nécessaire pour libérer un électron du métal de puis le niveau du fermi E_{FM} jusque au niveau du vide potentiel (Figure I.1) [9].

$$e\phi_M = N_V - E_{FM} \quad (1.1)$$

$e\Phi_M$: La fonction du travail de sorti.

N_V : Niveau du vide.

E_{FM} : L'énergie du fermi du métal.

La valeur de ϕ_M pour les métaux varie entre 2 à 6 eV [5].

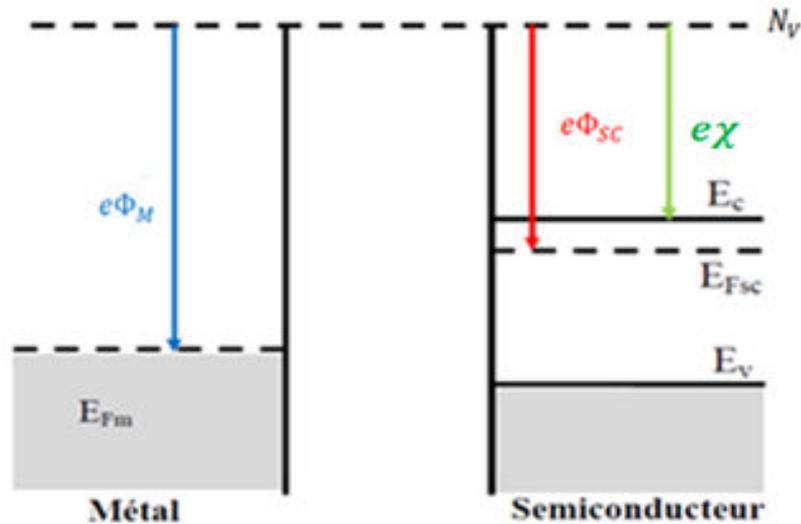


Figure I.1 : Niveau énergétiques dans un métal et un semi-conducteur [10].

Le tableau suivant indique la valeur du travail de sortie de quelques métaux [11].

élément	Mo	Ni	Ti	w	Cu	Ag	Au
$e\phi_M$ (Ev)	4,35	5.22	4.33	4.55	4,29	4,73	4,76

Tableau I.1 : Travaux de sortie de quelques métaux.

I.2.2 Le travail de sorties ϕ_{MS} du semi-conducteur

Définit comme étant l'énergie qu'il faut fournir pour extraire un électron de puis le niveau du fermi E_{FS} jusque au niveau du vide (figure I.1)

$$e\Phi_{sc} = N_V - E_{FSC} \quad (I.2)$$

$e\Phi_{sc}$: La fonction de travail de sortie du semi-conducteur.

I.2.3 L'affinité électronique χ

Définit par la différence énergétique entre le niveau du vide et celui de la bande de conduction E_c du semi-conducteur (figure I.1).

La valeur de l'affinité électronique est voisine de 4eV pour le silicium, et de 4.07 eV pour GaAs[8].

Les valeurs des travaux de sortie et des affinités électroniques données pour chaque matériau (métal, semi-conducteur) permettent de placer le niveau du vide aux interfaces par rapport au niveau de fermi (cas des matériaux) et par rapport à la bande de conduction (cas de semi-conducteur et isolant).

I.2.4 Structure de la barrière potentielle

Lorsqu'on réalise le contact métal-semi-conducteur, les niveaux de fermi s'alignent et un équilibre thermodynamique est établi à travers le transfert d'électrons de puis la bande de conduction du semi-conducteur vers le métal, parce que $E_{CSC} > E_{FM}$. De ce fait, les électrons laisseront d'une part une zone d'atomes donneurs chargés positivement dans le semi-conducteur. Cette région est appelée la zone d'espace de charge et d'une autre part les barrières de potentiel SBH et V_{Bi} se forment, elles sont définies comme suit :

$$SBH = e\Phi_M - e\chi \quad (I.3)$$

La hauteur de la barrière SBH est une barrière énergétique pour les électrons du métal. Elle est tout simplement la différence entre la fonction du travail de sortie du métal et l'affinité électronique.

$$eVB_i = e\Phi_M - e\Phi_{SC} \quad (I.4)$$

eVB_i : C'est une barrière énergétique pour les électrons du Sc. Défini comme la différence entre la fonction de travail du métal et la fonction de travail Sc , (Figure II.2).

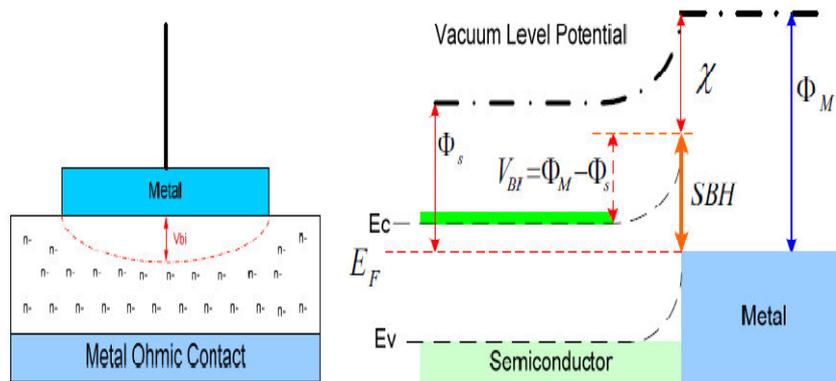


Figure I.2 : les niveaux énergétiques d'un métal et d'un semi-conducteur après le contact[12]

I.3 Polarisation de la diode Schottky

I.3.1 Polarisation direct (dans le cas d'un Semi-conducteur type n)

Dans le cas où le travail de sortie de sortie Φ_M du métal est supérieur au travail de sortie du Sc $\Phi_M > \Phi_{SC}$, les électrons passent du Sc vers le métal. Dans le Sc une zone de déplétion se crée, les ions donneurs ionisés N_d^+ ne sont plus compensés par les électrons, il apparait une charge d'espace positive. D'autre part il en résulte une courbure des bandes vers le haut (figure I.4). Dans le métal, il apparait une accumulation d'électrons à l'interface. A cette double charge d'espace sont associées un champ électrique et une tension de diffusion qui équilibrent les forces de diffusion et déterminent l'état d'équilibre [9].

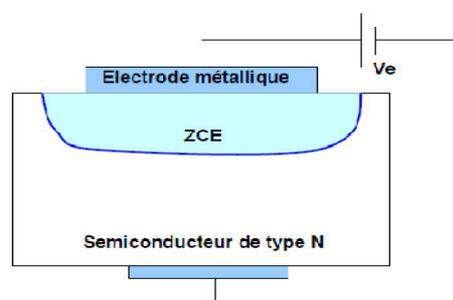


Figure I.3 : polarisation de la diode Schottky [13]

En polarisation directe, on applique une tension positive V_P sur la jonction Metal/Sc (le (+) sur le côté métal, le (-) sur le côté Sc voir (Figure I.4), la bande de conduction du semi-conducteur s'élève de *quelque eV*, la courbure diminue. Ainsi la barrière semi-conducteurs-métal V_{bi} diminue alors que la barrière métal-Sc SBH reste inchangée (Figure I.4). Ce qui donne la possibilité à un grand nombre d'électrons de passer du Sc vers le métal et créent un courant I du métal vers le Sc (c'est le courant direct).

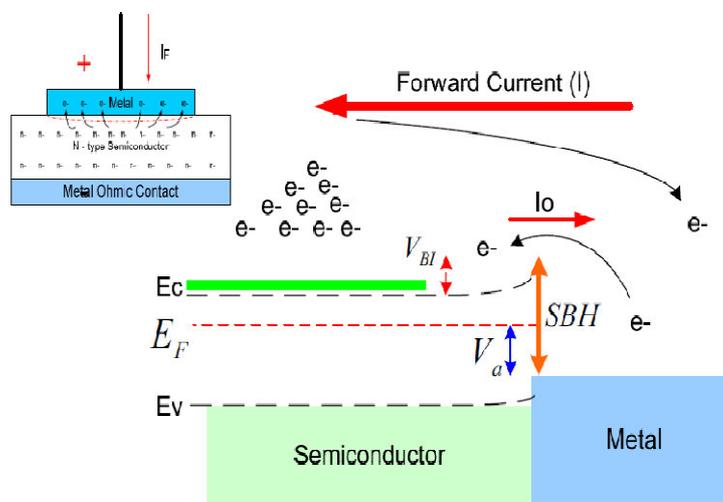


Figure I.4 : diagramme de bande d'énergie de contact métal-semi-conducteur sous polarisation direct [12].

I.3.2 Polarisation inverse

En inversant la polarisation (polarisation inverse), la bande de conduction du Sc est abaissée, ce qui augmente la hauteur de la barrière qui s'oppose à la diffusion des électrons. Un petit courant inverse est observé circulant du métal vers le Sc (Figure I.5).

La structure métal-Sc type (n) avec $\Phi_M > \Phi_{sc}$ constitue donc un contact redresseur c'est diode Schottky.

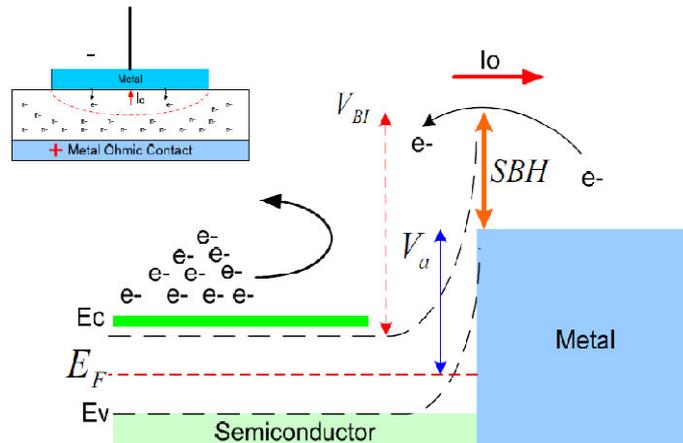


Figure I.5 : diagramme de bande d'énergie de contact métal-semi-conducteur sous polarisation inverse [12].

I.4 Zone de charge d'espace

I.4.1 Champ et potentiel électrique

Considérons la structure métal-semi-conducteur de type n, avec $\Phi_M > \Phi_S$. On obtient la distribution du potentiel dans la zone de charge d'espace en intégrant l'équation de Poisson. On considère que le semi-conducteur est homogène, avec une densité de donneur N_d [9].

Pour

$$0 < x < w \quad \rho(x) = eN_d$$

Et pour $x > w$ $\rho(x) = 0$

Avec w : largeur de ZCE.

L'équation de Poisson s'écrit :

$$\frac{d^2V(x)}{dx^2} = \frac{-\rho}{\epsilon_s} \quad (I.5)$$

ϵ_s : La constante diélectrique du Sc.

ρ : la densité de charge dans la zone de charge d'espace et donné par :

$$\frac{d^2V(x)}{dx^2} = \frac{-qN_d}{\epsilon_s} \quad (I.6)$$

En intégrant une première fois avec la condition $E = 0$ pour $x > w$ on trouve :

$$\frac{dV(x)}{dx} = E(x) = -\frac{qN_d}{\epsilon_s}(x - w) \quad (I.7)$$

Le champ électrique dans la zone de charge d'espace et donné par la relation suivant :

$$E(x) = \frac{qN_d}{\epsilon_s}(w - x) \quad (I.8)$$

Le champ électrique est négatif et varie linéairement dans la ZGE, la valeur de champ électrique à l'interface ($x=0$) :

$$E_s = -\frac{qN_d}{\epsilon_s}w \quad (I.9)$$

En intégrant une deuxième fois en prenant l'origine du potentiel à l'interface, on obtient :

$$V(x) = -\frac{qN_d}{\epsilon_s}\left(\frac{x^2}{2} - wx\right) \quad (I.10)$$

La tension de diffusion ou bornes de la zone de charge d'espace :

$$V_{bi} = \phi_m - \phi_s \quad (I.11)$$

$$V_{bi} = V(x = w) - V(x = 0) = \frac{qN_d}{\epsilon_s}\left(\frac{w^2}{2} - w^2\right) = \frac{qN_d}{2\epsilon_s}w^2 \quad (I.12)$$

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

$$w = \left(\frac{2\epsilon_s}{qN_d}V_{bi}\right)^{\frac{1}{2}} = \left[\frac{2\epsilon_s}{qN_d}(\phi_m - \phi_s)\right]^{\frac{1}{2}} \quad (I.13)$$

En ne négligeant plus la concentration des porteurs libres dans la zone de charge d'espace on obtient :

$$w = \sqrt{\frac{2\epsilon_s}{qN_d}\left(V_{bi} - \frac{KT}{q}\right)} \quad (I.14)$$

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

$$w = \sqrt{\frac{2\varepsilon_s}{qN_d} \left(V_{bi} - \frac{KT}{q} \right)} \quad (I.15)$$

Lorsque la diode est polarisée avec une tension V la formule devient :

$$w = \sqrt{\frac{2\varepsilon_s}{qN_d} \left(V_{bi} - V - \frac{KT}{q} \right)} \quad (I.16)$$

I.4.2 Charge total de la zone de charge d'espace dans le Sc

La charge totale de la zone de charge d'espace est essentiellement due aux atomes dopant ionisés, la densité de charge par unité de surface à l'équilibre thermodynamique s'exprime par [5] [14].

$$Q_{sc} = qN_d w = qN_d \sqrt{\frac{2\varepsilon_s}{qN_d} \left[V_{bi} - V - \frac{KT}{q} \right]} \quad (I.17)$$

I.4.3 Capacité de la zone de charge d'espace

La capacité par unité de surface du semi-conducteur est définie par [15] :

$$C_{sc} = \frac{\partial Q_{sc}}{\partial V} \quad (I.18)$$

$$C_{sc} = \sqrt{\frac{q\varepsilon_s N_D}{2 \left[V_{bi} - V - \frac{KT}{q} \right]}} = \frac{\varepsilon_s}{w} \quad (I.19)$$

De la formule (I.19) on peut déduire l'inverse du carré de la capacité en fonction de la tension V et donné par :

$$\frac{1}{C_{sc}^2} = \frac{2 \left(V_{bi} - V - \frac{KT}{q} \right)}{q\varepsilon_s N_d} \quad (I.20)$$

La variation de la pente de la courbe est directement proportionnelle au dopage (Figure I.6).

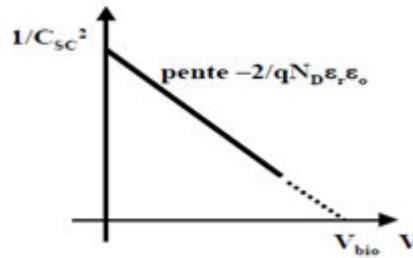


Figure I.6 : variation du carré de l'inverse de la capacité en fonction de la tension .la pente de la courbe permet de déterminer la valeur de la concentration de dopant et la hauteur de barrière à l'équilibre thermodynamique [14].

Dans le cas d'une concentration variable de dopage, ce qui est très souvent le cas, il est possible de tracer de la variation de cette pente :

$$N_d = \frac{-2}{q\epsilon_s} \frac{1}{d\left(\frac{1}{C_{sc}^2}\right)dV} \quad (I.21)$$

I.5 Effet Schottky

Lorsque un électron est situé à une distance x du métal, une charge positive ($+q$) va être induite sur la surface du métal. La force d'attraction entre l'électron et la charge positive ($+q$) induite est équivalente à la force qui existerait entre l'électron et une charge positive égale à $(-x)$, Cette force attractive est nommée la force d'image. Par conséquent la charge du Sc est attirée par le métal ce qui abaisse la barrière de potentiel V_{bi} .cet abaissement

$\Delta E = \Delta\Phi$ est appelé l'effet Schottky définit par la formule suivante [5].

Equation (I .22) trouvée comme suit :

La force attractive coulombien :

$$F = \frac{-q^2}{4\pi(2x)^2\epsilon_0} = \frac{-q^2}{16\pi\epsilon_0 x^2} \quad (I.23)$$

ϵ_0 : Est la permittivité de l'espace libre.

Le travail fourni par un électron pour arriver de l'infini vers le point x et donné par :

$$E(x) = \int_{\infty}^x F dx \tag{I.23}$$

$$E(x) = \frac{q^2}{16\pi\epsilon_0} \frac{1}{x} \tag{I.24}$$

Quand le champ extérieur $\xi(x)$ est appliqué, l'énergie potentielle totale $E_p(x)$ en fonction de la distance (mesuré suivant x), elle est donnée

$$E_p(x) = \frac{q^2}{16\pi\epsilon_0 x} + q\xi x \tag{I.25}$$

Cette équation a une maximale, la distance x_m maximale et L'abaissement de la barrière de Schottky ΔE sont donnés par la condition :

$$\frac{dE_p(x)}{dx} = 0 \tag{I.26}$$

$$x_m = \sqrt{\frac{q}{16\pi\epsilon_0 \xi}} \tag{I.27}$$

$$\Delta\Phi = \sqrt{\frac{q\xi}{4\pi\epsilon_0}} = 2\xi x_m \tag{I.22}$$

ξx_m : Champ électrique maximum appliqué.

ΔE : La valeur d'abaissement de la barrière Schottky.

La fonction de travail efficace est diminuée quand un champ électrique est appliqué à la surface. L'abaissement est causé par les effets combinés du champ et la force d'image.

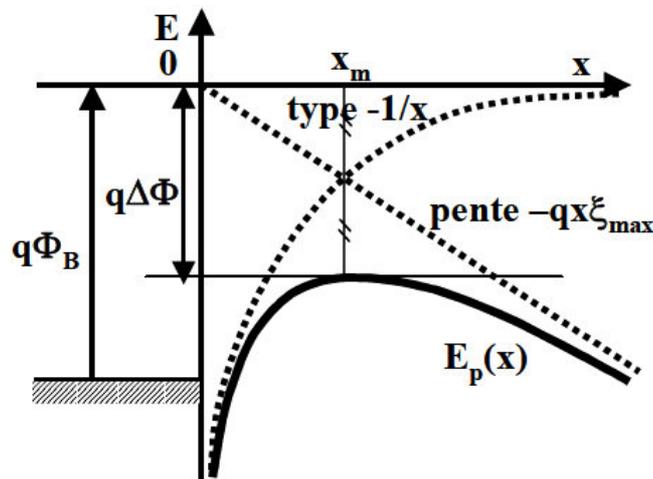


Figure I.7 : variation de la hauteur de la barrière d'énergie due à la présence du plan conducteur potentielle [14].

I.6 Mécanisme de conduction dans les diodes Schottky

I.6.1 Introduction

Le courant dans la structure M/Sc est essentiellement, du aux porteurs majoritaires, ce courant est conditionné par des phénomènes physiques différents [5] dans les différentes régions illustrées par la figure (I.8).

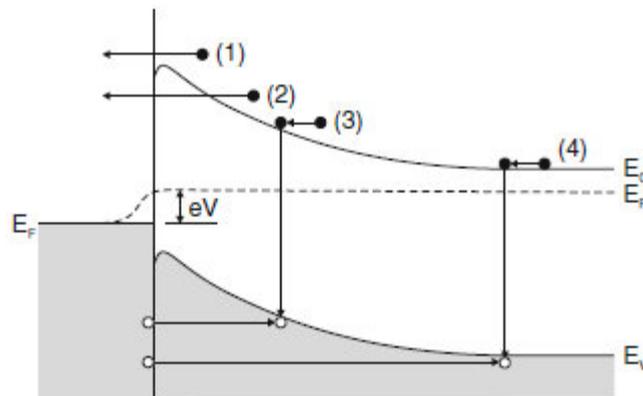


Figure I.8 : phénomènes de transport de dans une jonction métal-semiconducteur : (1) émission thermoiniquee (au dessus de la barrière),(2) effet tunnel, (3) recombinaison, (4) injection de porteur minoritaires[16].

1. Effet thermoïnique : c'est le plus déminent, dans le cas où le semi-conducteur et faiblement dopé ($\leq 17\text{cm}^{-3}$). En fait les porteurs majoritaires (électron chaud) passent facilement par-dessus de la barrière de potentiel.
2. Effet tunnel : Les porteurs de charge franchissent directement la barrière de potentiel à sa base avec une énergie constante. Ce mécanisme est typique au cas de fort dopage où le semi-conducteur présente une barrière de potentiel très étroite avec le métal.

3. Effet de recombinaison : c'est la recombinaison entre un électron et un trou dans la zone de charge d'espace à travers la bande interdite du Sc dans e cas d'existence de centre de recombinaison.
4. Injection des porteurs minoritaires dans la région neutre : ce processus et similaire au effet de recombinaison de la zone de charge espace mais dans ce cas, la recombinaison se produit dans le volume neutre du semi-conducteur.
5. Courant de recombinaison sur les états d'interface : les électrons du semi-conducteur sont piégés au niveau d'un centre d'interface vide puis il passe par effet tunnel dans le métal.

I.6.2 Emission au-dessus de la barrière

I.6.2.1 Théorie de l'émission thermoinique

Cette théorie est basée essentiellement sur les hypothèses suivantes [17] :

- La hauteur de la barrière d'energie et très grand devant $K_B T$.
- Cette théorie est établie à l'équilibre thermique dans le plan qui détermine l'émission de porteur de charge.
- L'existence d'un courant net n'affecte pas cet équilibre, donc on peut superposer deux flux de courant dans un contact schottky, un courant circule du métal vers le semiconducteur et l'autre dans le sens inverse.

D'après ses hypothèses, le flux du courant dépend seulement de la hauteur de la barrière. La densité du courant due à l'émission thermoinique des électrons au dessus de la barrière est donné par [18].

$$J = J_0 \left[\exp\left(\frac{qV}{KT}\right) - 1 \right] \quad (I.29)$$

$$J_0 = A^{**} T^2 \exp\left(-\frac{q\phi_B}{KT}\right) \quad (I.30)$$

$$A^{**} = \frac{4\pi m^* q k^2}{\hbar^3} \quad (I.31)$$

V : la tension applique.

T : la température

J_0 : la densité du courant de saturation

m^* : la masse effective des électron dans le semiconducteur.

A^{**} : La constante de Richardson.

Dans le cas pratique il faut tenir compte de la surface (A) de la diode et d'une résistance série R_s . L'équation (I.29) est donc remplacée par :

$$j = j_0 \left(e^{\left(\frac{qv - R_s I}{NKT} \right)} - 1 \right) \quad (I.32)$$

En analysant la courbe expérimentale courant tension, il est donc possible de trouver I_0 , R_s, n , et par conséquent Φ_B , la hauteur de la barrière pour autant que la surface A de la diode soit connue. Une manière élégante de traiter la relation (I.32) est de l'inverser, $V = f(I)$, et de trouver par fit ou simulation numérique les paramètres qui donnent la meilleure approximation de la courbe expérimentale.

I.6.2.2 Théorie de diffusion

La théorie de diffusion proposée par Schottky et Spenser en 1936 [19], cette théorie suppose la présence d'une charge d'espace au voisinage de l'interface métal/semiconducteur, donnant lieu à la formation d'une barrière électrostatique. Les électrons passent du semiconducteur vers le métal par-dessus la barrière en traversant la zone appauvrie du semiconducteur, ce qui restreint le courant direct. Ce modèle théorique du courant de diffusion est basé sur les suppositions suivantes [17] :

- La hauteur de la barrière Schottky est très grande devant kT
- L'effet des collisions des électrons dans la région de déplétion est inclus (diffusion).
- La concentration des porteurs de charge à $X = 0$ et $X = W_D$ (largeur de la région de déplétion) n'est pas affectée par le flux du courant.
- La concentration de dopage est inférieure à la densité effective d'état dans la bande de conduction du semiconducteur N_C et le niveau de Fermi est de quelque ordre de kT au-dessous du niveau de conduction E_C .

La concentration des électrons dans le côté du semiconducteur de l'interface de M/S est donnée par :

$$n = N_c \exp \left[\frac{-q(E_C - E_F)}{KT} \right] \quad (I.33)$$

La densité du courant dans la zone de charge d'espace :

$$J = qn\mu E + qD_n \frac{dn}{dx} \quad (I.34)$$

E : le champ électrique de la barrière.

D_n : le coefficient de diffusion.

μ : la mobilité des électrons.

L'équation finale de la caractéristique densité du courant :

$$J = J_0 \left[\exp \left(\frac{qV}{KT} \right) - 1 \right] \quad (I.35)$$

La densité du courant de saturation J_0 est :

$$J_0 = qN_c \mu E_{max} \left[\exp \left(- \frac{q\phi_B}{KT} \right) \right] \quad (I.36)$$

Le champ électrique maximum dans la jonction est donné par :

$$E_{max} = \frac{N_D w}{\epsilon_S} \quad (I.37)$$

w : est la largeur de la zone de déplétion du semiconducteur.

I.6.2.3 Théorie de l'émission-diffusion ou (thermoinique diffusion)

La théorie mixte de l'émission thermoinique-diffusion était présentée d'abord par Crowell et Sze en 1966 [20]. Dans cette théorie, la conduction est contrôlée à la fois par l'interface et le volume ; la variation du niveau du Fermi est mixte, il varie dans la zone de charge d'espace et présente une discontinuité à l'interface. Dans cette théorie on définit une vitesse de recombinaison v_r au maximum potentiel.

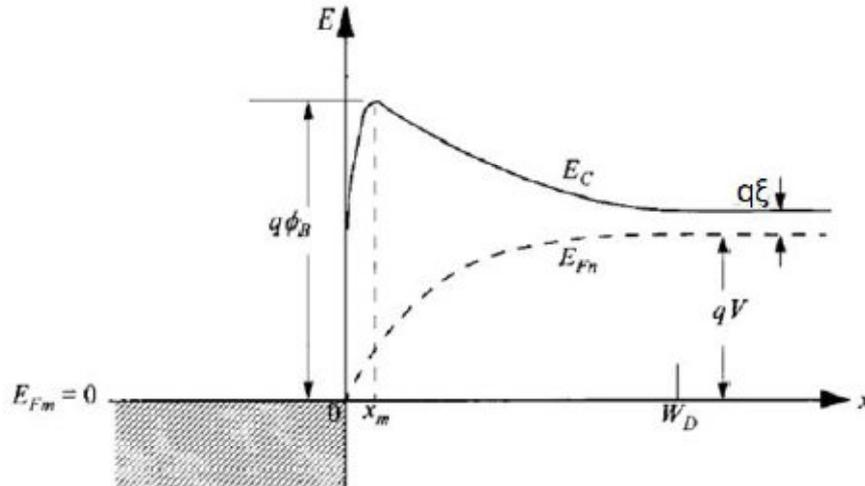


Figure I.9 : variation du niveau de fermi dans le cas d'une conduction mixte ; variation dans la zone de charge d'espace et discontinuité à l'interface[21].

La densité du courant au sommet de la barrière et donné par :

$$J = q(n_m - n_0)v_r \quad (I.38)$$

n_m : le densité des électron à x_m (position du potentiel maximum) sous polarisation :

$$n_m = N_c \exp \left[\frac{-q(\Phi_B - \Phi(x_m))}{KT} \right] \quad (I.39)$$

$\Phi(x_m)$: et le quasi-niveau de fermi à x_m sous en tension de polarisation V.

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

$$n_0 = N_c \exp \left[\frac{-q\Phi_B}{KT} \right] \quad (I.40)$$

L'expression finale du courant est la même que la théorie de diffusion et l'émission thermoinique, la différence réside au niveau du courant de saturation comme le montre la relation suivant :

$$J = \frac{qN_c v_r}{1 + v_r/v_d} \left(\exp \left(\frac{-q\Phi_B}{KT} \right) \cdot \left(\exp \left(\frac{qV}{KT} \right) - 1 \right) \right) \quad (I.41)$$

La vitesse de recombinaison est donnée par :

$$v_r = \frac{A^* T^2}{q N_C} \quad (I.42)$$

I.6.3 Mécanisme du conduction par effet tunnel

La conduction par effet tunnel est caractérisée par le passage à travers la barrière, des porteurs par effet quanta-mécanique lorsque leur énergie n'est pas suffisante pour pouvoir la sauter et lorsqu'elle est suffisamment mince pour se laisser traverser.

En effet, lorsque le dopage du Sc augmente la courbure de la bande à l'interface s'accroît et la largeur de la zone appauvrie diminue, ce qui facilite le passage des électrons à travers la barrière.

L'expression du courant d'effet tunnel est la suivante :

$$J_{Tun} \approx \exp \left[-\frac{q\phi_{Bn}}{E_{00}} \right] \quad (I.43)$$

$$E_{00} = \frac{q\hbar}{2} \sqrt{\frac{N_D}{\epsilon_s m^*}} \quad (I.44)$$

Avec E_{00} représente l'énergie caractéristique du semi-conducteur relative à la probabilité de transmission par effet tunnel.

I.6.4 Recombinaison dans la zone de charge d'espace

Le processus de recombinaison dans la région de déplétion dans une diode Schottky est lié à l'existence des centres localisés dans la bande interdite.

Le taux de recombinaison dans la région de déplétion est donné par l'expression suivante :

$$U = \frac{n.p - n_i^2}{\tau_n(n+n_i) + \tau_p(p+n_i)} \quad (I.45)$$

$\tau_n \tau_p$: La durée de vie des électrons et des trous respectivement dans le semi-conducteur.

La densité du courant de recombinaison est donnée par :

$$J = q \int_0^w U(x) dx \quad (I.46)$$

Avec les simplifications suivant : $n, p \gg n_i$ et $\tau_n = \tau_p = \tau$

L'expression de la densité du courant pour des basses températures est donnée par la relation suivant :

$$J = J_0 \exp\left(\frac{qV}{2kT}\right) \cdot [1 - \exp\left(-\frac{qV}{kT}\right)] \quad (I.47)$$

$$J_0 = qn_i \frac{w}{2\tau} \quad (I.48)$$

Ou

n_i : Et la concentration intrinsèque des électrons.

w : La largeur de la zone de déplétion.

I.6.5 Injection des porteurs minoritaires

La diode à barrière schottky est principalement un dispositif des porteurs majoritaires. La conduction des minoritaires dans le cas d'un semiconducteur de type n est due au trous, l'échange entre le métal et le semi conducteur à l'interface et en général est très rapide. Le taux du courant des porteurs minoritaires et du courant total devient très important (dans le cas d'une grande polarisation directe).

L'expression du courant total des trous est donnée par [17] :

$$J_p = \frac{\mu_p n_i^2 J_n^2}{\mu_p N_D J_{n0}^2} + \frac{q D_p n_i^2}{N_D L} \exp\left[\exp\left(\frac{qV}{kT}\right) - 1\right] \quad (I.49)$$

μ_p, μ_n : mobilité des trous et des électron respectivement

J_{n0} : densité de courant de saturation

J_n : densité du courant de la diffusion.

N_i concentration des porteurs intrinsèques .

D_p : coefficient de diffusion des trous.

L : région quasi-neutre.

N_D : concentration des atomes donneurs dans le semiconducteur.

Le taux d'injection ν est défini par :

$$\nu = \frac{J_p}{J_p + J_n} \cong \frac{J_p}{J_n} \cong \frac{\mu_p n_i^2 J_n}{\mu_n N_D^2 J_{n0}} + \frac{q D_p n_i^2}{N_D L J_{n0}} \quad (I.50)$$

$$\cong \frac{\mu_p n_i^2 J_n}{\mu_n N_D^2 J_{n0}} + \mu_0 \quad (I.51)$$

Pour minimiser le courant des minoritaires dans la diode schottky on doit répondre au critère suivant :

- 1-faible résistivité (N_D très grand).
- 2-faible valeur de Φ_b (J_{n0} très grand).
- 3-valeur considérable de la largeur de la bande interdite (petit n_i).
- 4-éviter les hautes tensions [5].

I.7 Phénomène de transport dans la diode Schottky en polarisation inverse

Les phénomènes sont équivalents comme dans la polarisation directe de la diode Schottky, sauf que la hauteur de barrière vue par les électrons du métal reste quasiment constante en fonction de la polarisation. Ainsi, la composante principale correspond au courant thermoïonique. Dans ce cas il existe aussi quatre mécanismes qui conduisent à la fuite des courants (courant inverse) [21].

- Emission Thermoïonique.
- Emission thermoïonique assistée par effet de champ (TFE).
- Emission par effet de champ ou effet tunnel (FE).
- Génération dans la zone de déplétion.

Chapitre II

Propriétés des principaux matériaux

II.1 Introduction

Les semiconducteurs III-V sont des éléments essentiels pour le développement des composants hyperfréquences, optoélectroniques, circuits logiques et capteurs de gaz.

L'arséniure de gallium est un semiconducteur de la famille des composés III-V, le GaAs possède une grande mobilité électronique (presque six fois plus élevée que celle du silicium), des durées de vie de l'ordre de la nanoseconde, et d'une bande interdite directe permettant l'émission de la lumière. Il est donc intéressant pour les composants électroniques rapides.

II.2 Structure et propriétés de l'arséniure de gallium (GaAs)

L'arséniure de gallium (GaAs) est le seul composé intermétallique qui est couramment commercialisé. Le gallium est un métal liquide à 30 C° avec l'aspect du mercure. Il réagit avec la vapeur d'arsenic à 1240 C° pour donner l'arséniure de gallium fondu. Il est refroidi lentement, puis purifié. Lors de ce traitement il est particulièrement instable ; l'arsenic a tendance à se vaporiser et il faut opérer sous pression pour maintenir l'équilibre des deux composants [22]. L'arséniure de gallium présente de nombreux avantages dans les différents domaines de recherches grâce à sa structure de bande qui lui confère des propriétés électroniques importantes en optoélectronique, il se prête mieux que le silicium, à la réalisation de circuits très rapides. Le GaAs se prête facilement à la réalisation de diodes Schottky à hauteur de barrière élevée obtenues à l'aide de différents métaux (Au, Al...). Les jonctions Schottky réalisées présentent d'excellents facteurs d'idéalité et de très faibles courants inverses. On conçoit que son prix de revient soit particulièrement élevé [22].

Les propriétés physiques et électriques de l'arséniure de gallium à la température ambiante (300 K) sont représentées dans le tableau suivant :

Les Propriétés du GaAs à	Les valeurs correspondent	Unité
Structure cristallin	Zinc blende	
Poids atomique	144.36	g / mol
Type de la bande interdite	Directe	/
Energie de la bande interdite	$E_g = 1.43$	eV
La permittivité	11.6	pF/ cm
La conductivité thermique	0.45	w/cm.k
Mobilité des électrons	8500	$\text{cm}^2 \cdot \text{v}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$
Mobilité des trous	250	$\text{cm}^2/\text{v/s}$
La vitesse maximale des électrons	$2 \cdot 10^7$	$\text{cm} \cdot \text{s}^{-1}$
Le champ électrique de saturation	10	K.v /cm
Mobilité électronique à $N_D = 10^{17} \text{cm}^{-3}$	5000	$\text{cm}^2/\text{V}/\text{S}$
Densité d'états dans la bande de conduction	$5 \cdot 10^{17}$	cm^{-3}
Résistivité maximale	$\sim 10^9$	$\Omega \cdot \text{cm}$
Durée de vie des porteurs minoritaires	$\sim 10^{-8}$	S
Hauteur de barrière de Schottky	0,7-0,8	V

Tableau II.1 : principales paramètres physiques et électriques du GaAs [5] [23].

II.2.1 Structure cristallin du GaAs

Le semi-conducteur du GaAs (arséniure de gallium), a une structure cristallographique de type « zinc blende ». Cette structure, qui s'apparente à celle du diamant (Si, Ge, etc...), et constituée de deux sous réseaux cubique à face centrées (cfc), l'un des éléments III (Ga) et l'autre d'élément V c'est (As) décalé l'un par rapport à l'autre du quart de la diagonale principale (figure II.1.a). La maile élémentaire comporte

deux atomes, le premier (Ga) se trouve à $(a/4, a/4, a/4)$, ou a représente le paramètre de maille du matériau. Le réseau réciproque associé à la structure zinc blende et cubique centré.

La première zone de Brillouin du réseau réciproque à la forme octaèdre Tronqué (figure II.1.b) par les six faces d'un cube. Elle présente un centre de symétrie à l'origine noté Γ et les axes de symétrie à Δ, Λ et ϵ . Les points de croisement de chacun de ces axes avec les frontières de la zone de Brillouin sont les points de haute symétrie, et ils jouent un rôle primordial dans la structure de bande [5] [24].



Figure II.1 : (a) structure cristalline du GaAs, (b) la première zone de Brillouin [5] [24].

II.2.2 Structure de bande d'énergie

La structure de bande d'un corps solide donne les états d'énergie possibles pour les électrons en fonction de leur vecteur d'onde dans les directions de plus haute symétrie de la première zone de Brillouin. L'arséniure de gallium est un semi-conducteur à gap direct, sa structure de bande est assez complexe, nous nous intéressons aux bandes de conduction et de valence qui interviennent dans les propriétés de transport des matériaux (figure II.2). Le minimum de la bande de conduction est situé en $K = 0$ au point Γ . Il est par conséquent unique. Les surfaces d'énergie constantes au voisinage du minimum sont des sphères centrées au point Γ . On dit que le GaAs est un semi-conducteur univallée [9]. Puisque le minimum de la bande de conduction et le maximum de la bande de valence sont situés au même point de l'espace K , les électrons transitent de la bande de valence vers la bande de conduction avec conservation du vecteur d'onde k [25]. On dit que GaAs est un semi-conducteur à gap direct ayant une énergie de gap 1.52 eV et 1.43

eV, à 400K et 300K respectivement [5]. Dans les semi-conducteur à gap direct, le minimum central de la bande de conduction correspond à des électrons de faible masse effective, donc très mobiles.

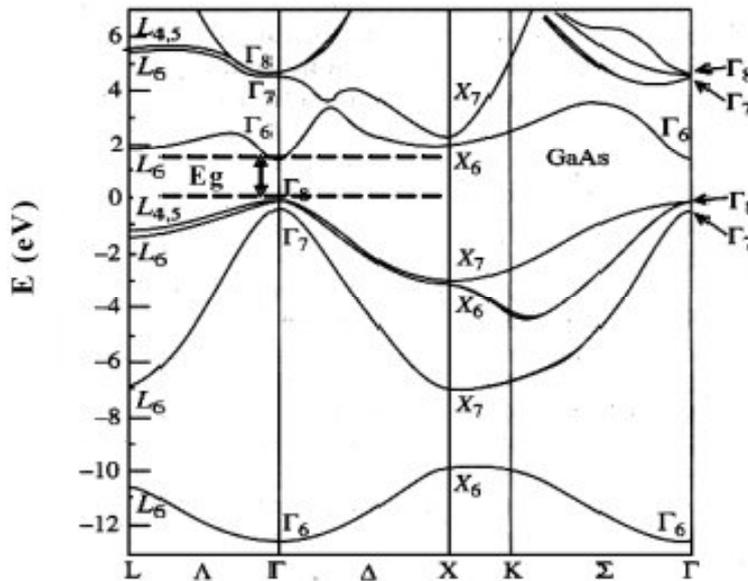


Figure II.2 : structure de bande électronique du GaAs [26].

II.3 La mobilité des porteurs de GaAs

La mobilité μ d'un type de porteur, se définit d'après sa vitesse moyenne d'entraînement v quand un champ électrique E est appliqué au cristal : $\mu = v/E = q\tau/m_{eff}$. La vitesse v dépend du temps de relaxation τ . La mobilité et la vitesse des porteurs représentent deux grandeurs physiques très intéressantes caractérisant les matériaux semi-conducteurs. L'arséniure de gallium de type n présente d'excellente propriétés de transport pour les faibles valeurs du niveau de dopage du matériau la mobilité en champ faible peut atteindre les valeurs de 8000-9000 $\text{cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}^{-1}$ au niveau de dopage usuels la mobilité des électrons et leur vitesse maximale de transport sont respectivement six fois et deux fois plus élevées dans le GaAs que dans le silicium [15] [11].

II.4 Avantages et inconvénients du GaAs

Même si le silicium reste le matériau de base le plus largement utilisé dans le secteur des semi-conducteurs, on constate l'émergence rapide de nouveaux marchés demandant des matériaux spécifiques. Le besoin de nouveaux composants pour les hyperfréquences, la logique rapide, l'optoélectronique a poussé le développement des matériaux III-V dont les propriétés de transport électronique et les propriétés optiques ne sont pas accessibles au silicium.

II.4.1 Les avantages

Le GaAs, dont les avantages par rapport au silicium résident en particulier dans la possibilité d'obtenir un matériau semi isolant et aussi dans une mobilité électronique plus élevée (sept fois plus grande que celle du silicium). Ces deux dernières propriétés étant favorables à un fonctionnement à fréquence élevée. Ces caractéristiques ont rendu ce matériau très prometteur pour répondre aux nouvelles exigences dans les domaines des hautes fréquences et de l'optoélectronique.

Dans le domaine des composants optoélectroniques, on utilise surtout les propriétés de sa structure de bande. Ainsi, le développement de la technologie de fibres optiques à faible perte et la maîtrise de l'élaboration de GaAs ont abouti à la réalisation d'ensembles de télécommunications optiques utilisant des émetteurs lasers à semi-conducteur GaAs [27].

Un autre atout très important de ce matériau est la possibilité de l'obtenir sous forme semi-isolant ; cet état de résistivité élevée est particulièrement favorable pour le développement d'une véritable technologie planaire de circuits intégrés sur GaAs. Aussi la largeur de sa bande interdite relativement importante qui autorise un fonctionnement à haute température.

II.4.2 Les inconvénients

L'inconvénient majeur du GaAs est son coût élevé. Par exemple les circuits intégrés en arséniure de gallium sont beaucoup plus cher : le matériau ne s'obtient qu'en plaquettes de 3 à 4 pouces de diamètre (de 7.5 à 10 cm) au maximum, ce qui limite le nombre de circuits intégrés fabriqués, sa physicochimie se prête moins bien que le silicium aux associations de matériaux (semi-conducteurs, isolants, métaux) requis par les circuits

intégrés, ce qui rend les méthodes de fabrication plus délicates et les rendements de fabrication plus faibles. Ces handicaps limitent l'arséniure de gallium aux utilisations où il est indispensable, à savoir lorsque l'on veut des circuits fonctionnant à des fréquences supérieures à 1 gigahertz.

II-5 Propriétés du matériau Titane (Ti).

II.5-1 Introduction

Le titane est l'élément chimique de numéro atomique 22, de symbole Ti. C'est un métal de transition léger, résistant, d'un aspect blanc métallique, qui résiste à la corrosion. Les alliages du Titane sont très utilisés dans les applications militaires, la construction d'avion,. Ils sont également utilisés dans le domaine biomédical en raison de leur biocompatibilité et de leur faible module d'Young. Des nouveaux alliages comme le Ti6Al7Nb, alliage de type $\alpha + \beta$, sont développés dans le but de réduire l'utilisation du Vanadium, toxique pour l'Homme. Particulièrement le Béta-Titane ' β -Ti' a connu un essor remarquable en lunetterie depuis une dizaine d'année et ce pour sa faible densité, sa résistance et son anticorrosion. Ils sont aussi développés dans le but de se rapprocher le plus possible d'un alliage avec un module d'Young très proche de celui de l'os afin d'éviter toute forme d'atrophie [1].

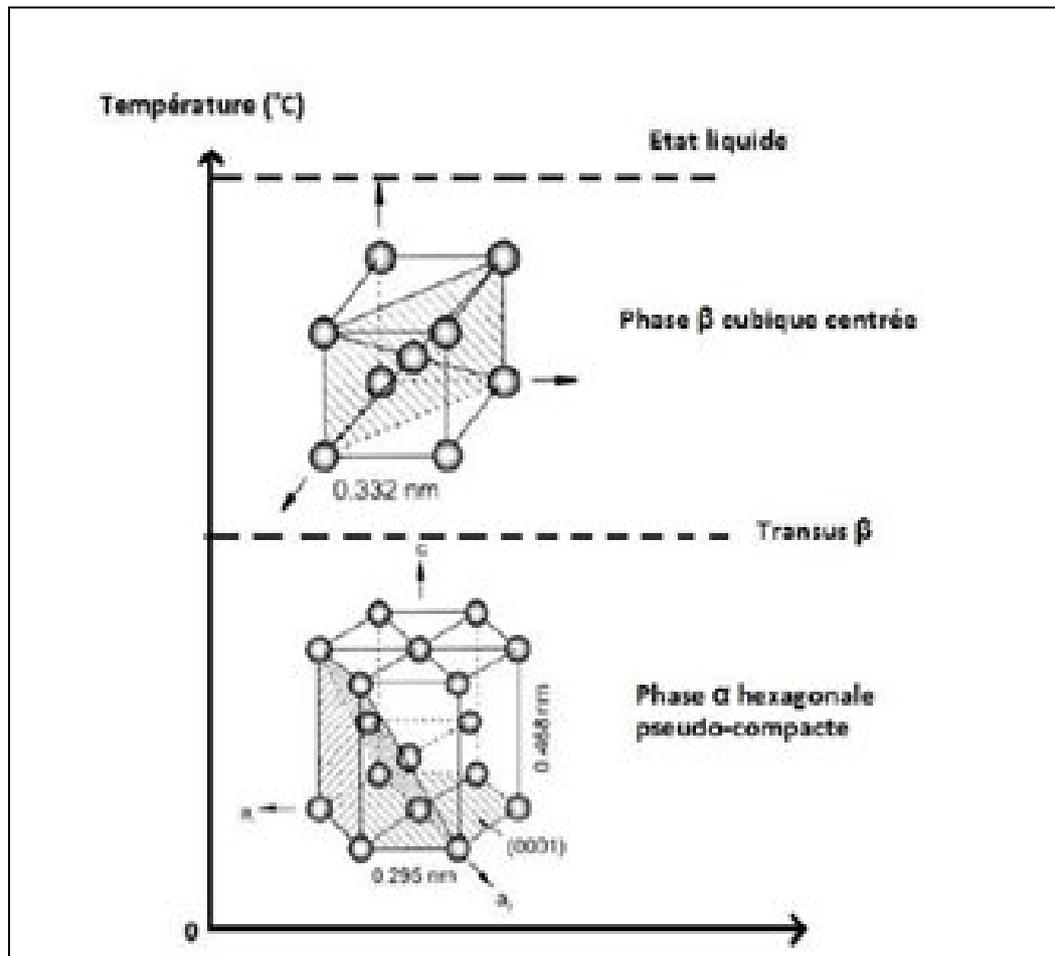
II.5.2 Propriétés physiques du titane [1] :

- sa masse volumique est environ 60 % de celle de l'acier ;
- sa tenue à la corrosion est exceptionnelle dans de nombreux milieux tels que l'eau de mer ou l'organisme humain ;
- ses caractéristiques mécaniques restent élevées jusqu'à une température d'environ 600 °C et restent excellentes jusqu'aux températures cryogéniques ;
- il est disponible sous des formes et des types de produits très variés : lingots, billettes, barres, fils, tubes, brames, tôles, feuillard ;
- sa valeur de susceptibilité magnétique ($1,8$ à $2,3 \times 10^{-4}$) est très inférieure à celle du fer (3×10^5). C'est donc un matériau avantageux en cas de diagnostic par IRM : diminution des artefacts ;

- son coefficient de dilatation, légèrement inférieur à celui de l'acier, est moitié moins que celui de l'aluminium. On prendra pour valeur moyenne un coefficient de dilatation de $8,5 \times 10^{-6} \text{ K}^{-1}$;
- son module de Young ou module d'élasticité longitudinal se situe entre 100 000 et 110 000 MPa. Cette valeur assez faible comparée à l'acier inox (220 000 MPa) en fait un matériau particulièrement intéressant pour sa biocompatibilité.

II.5.3 Propriétés cristallographiques

Le titane pur est le siège d'une transformation allotropique de type martensitique au voisinage de 882 °C. En dessous de cette température, la structure est hexagonale pseudo-compacte ($a = 0,295 \text{ nm}$, $c = 0,468 \text{ nm}$, $c/a = 1,633$) et est appelée Ti α (groupe d'espace n° 194 P63/mmc). Au-dessus de cette température la structure est cubique centrée ($a = 0,332 \text{ nm}$) et est appelée Ti β . La température de transition $\alpha \rightarrow \beta$ est appelée transus β . La température exacte de transformation est largement influencée par les éléments substitutifs et interstitiels. Elle dépend donc fortement de la pureté du métal.



FigureII-3 : cristallographie du titane pur [28]

II.6. Les isotopes du titane

On trouve le titane sous la forme de 5 isotopes dans la nature : ^{46}Ti , ^{47}Ti , ^{48}Ti , ^{49}Ti , ^{50}Ti . Le ^{48}Ti représente l'isotope majoritaire avec une abondance naturelle de 73,8 %. 21 radio-isotopes ont été observés, le plus stable le ^{44}Ti possède une demi-vie de 63 ans.

II.7. Les oxydes du titane

Le titane peut se trouver sous plusieurs états d'oxydation comme de nombreux métaux de transition. Il possède donc plusieurs oxydes correspondant à ces degrés d'oxydation:

- Monoxyde de titane TiO .
- Trioxyde de di-titane Ti_2O_3 .

- Dioxyde de titane TiO_2 .
- Trioxyde de titane TiO_3 .

II.8 Les alliages du titane

Les alliages de titane peuvent être constitués soit exclusivement par la phase α , soit exclusivement par la phase β ou encore, le plus souvent, par un mélange des deux. On

Peut donc les classer en trois grandes familles α , β et $\alpha+\beta$. Les alliages α (100 % α à 20°C) sont résistants ; les alliages β (100 % β à 20°C) sont plastiques et sensibles aux traitements thermiques. Il est possible, en faisant varier les proportions de chaque phase, d'obtenir différents compromis. Les alliages $\alpha + \beta$ sont donc mixtes On peut distinguer 3 types différents d'éléments d'addition [1], [28] :

- Les éléments stabilisant α ou alphasènes, qui élèvent la température de transformation allotropique (transus β), sont l'aluminium, l'oxygène, le carbone et l'azote.
- Les éléments stabilisant β ou bétagènes, diminuent la température de transformation de la phase β . Parmi ceux-ci on distingue les éléments β eutectoïdes comme le manganèse, le fer, le chrome, le silicium, le nickel et le cuivre, pouvant former des précipités.
- Enfin, certains éléments sont qualifiés de neutres, tels que le zirconium et l'étain.

II.8.1 Exemples d'alliage

Elles se feront avec des éléments métalliques de rayon atomique voisin de celui du titane voir tableau II-2.

- L'**aluminium**, élément alphasène, durcit la phase α ; on constate une amélioration de la résistance et une baisse de ductilité; la tenue au fluage est améliorée. On limite à 7 % (en poids) sa concentration dans les alliages.
- Le **molybdène**, améliore la résistance, la ductilité et le fluage à moyenne température. Il augmente aussi la tenue à l'oxydation.
- Le **vanadium**, élément bétagène isomorphe, améliore la ductilité, mais baisse la tenue à l'oxydation.

- Le **fer**, élément β -gène-eutectoïde, améliore le compromis résistance-ductilité-fluage à moyenne température ; il baisse considérablement T_{β} et permet de travailler à température plus basse.

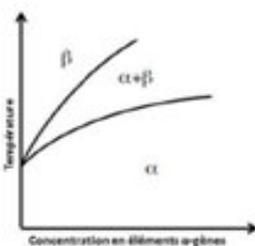
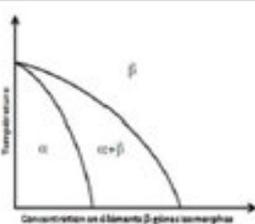
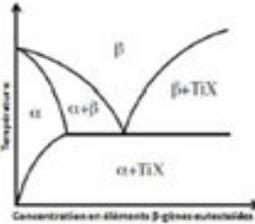
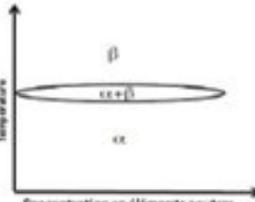
Eléments		Influence des éléments d'alliage Diagramme de phases	Insertion	Substitution
α -gènes			O_2, C, N_2, B	Al
β -gènes	β -isomorphes			Mo, V, Nb, Ta
	β -eutectoïdes		H_2	Mn, Fe, Cr, Si, Ni, Cu, W, Co, Ag, Au
Neutres				Zr, Sn, Hf, Ga

Tableau II-2 Exemples d'éléments α -gènes ou β -gènes[28]

Chapitre III

Simulation et interprétation de résultats

Partie 1 : Description du logiciel de simulation

III.1.1 Introduction :

La simulation fournit un lien entre le monde expérimental et le monde théorique comme le montre la figure III.1 elle complète la théorie et l'expérimental et construit la réalité physique.



Figure III.1 : le rôle de simulation [29].

III.1.2 Présentation de logiciel Silvaco :

Silvaco (silicon valley corporation) est une société Américaine, ayant son siège à Santa Clara en Californie. Elle est un des principaux fournisseurs de chaînes professionnelles de logiciels de simulation par éléments finis et de conception assistée par ordinateur pour les technologies de l'électronique TCAD (Technology Computer Aided Desing). Ces outils sont employés par les compagnies de microélectronique dans le domaine de la recherche, du développement et de la conception de dispositifs, il est constitué d'une gamme d'outil de simulation formant ce qu'on appelle la VWF (virtuelle wafer fabrication) [2].

III.1.3 La VWF : (Virtual Wafer Fab) :

Parmi les différents logiciels qu'il forme la **VWF** on note les deux fameux les plus utilisés **ATHENA** et **ATLAS** :

III.1.3.1 ATHENA

C'est un logiciel de simulation compris dans le Silvaco et sert à la fabrication virtuelle des différents constituant d'un dispositif électronique, il traite la simulation comme une série d'événements consécutifs, et simule généralement en simultanéité avec Atlas.

III.1.3.2 ATLAS

C'est un logiciel de simulation traitant les systèmes (dispositif) avec performance à base de 2D et 3D et prédit le comportement électrique des structures des semi-conducteurs divers.

III.1.4 Présentation d'atlas

Le logiciel ATLAS, appartient à la famille de logiciel de la société SILVACO. L'outil de simulation ATLAS est spécialement conçu pour la modélisation bidimensionnelle et tridimensionnelle des dispositifs semi-conducteurs. Il possède une bibliothèque regroupant des matériaux prédéfinis comme il permet à l'utilisateur de définir d'autres matériaux de son choix. Il est capable de prédire les caractéristiques électriques de la plupart des composants à semi-conducteurs. Il donne aussi des informations sur les phénomènes physique internes associés au fonctionnement des dispositifs (concentration des porteurs, les lignes du courant, le champ électrique,...) [2].

Ceci est réalisé en résolvant numériquement l'équation de poisson et les équations de continuité des électrons et des trous en un nombre fini de points formant le maillage de la structure définie par l'utilisateur ou par le programme.

La simulation réalisée sous ATLAS est composé de deux parties : Une partie de traitement numérique (méthode d'intégration, de discrétisation....).Une partie formée des modèles physiques des composants les plus courants : modèles de recombinaison (shockley Read Hall), d'ionisation par impact (Pearson et Monte Carlo), ainsi le modèle de mobilité, et les statiques de Fermi-Dirac et Boltzmann [2]. ATLAS permet de simuler le comportement électrique d'un composant semi-conducteur créé et modélisé comme par exemple une diode ou un transistor. Le composant étudié est représenté comme une structure maillée ou chaque noeud a des propriétés qui lui sont associés telles que le type de matériau, le type de dopage, la concentration du dopant, etc.

III.1.5 Entrées et sorties d'Atlas

La plupart des simulations réalisées sous « Atlas » utilisent deux fichiers d'entrée. Le premier fichier est un fichier script contenant les commandes pour qu'Atlas s'exécute (représenté par « Fichier de commande »). Le second fichier est un « Fichier de structure » qui définit la structure qui sera simulée.

A la sortie d'Atlas, trois types de fichiers qui existent :

Le premier fichier de sortie est le « Runtime », qui nous indique, la progression, les erreurs et les messages d'avertissements durant la simulation. Le deuxième type de fichier « log » qui enregistre (stocke) toutes les valeurs de tensions et des courants provenant de l'analyse du dispositif simulé. Le troisième fichier c'est le « fichier de solution » son rôle est le stockage en 2D et 3D les données concernant les valeurs des variables solution dans les dispositifs en un point donnée.

Le schéma de la (figureIII.2) représente les différents types d'information qui s'échangent en entrée et en sortie « d'Atlas ».

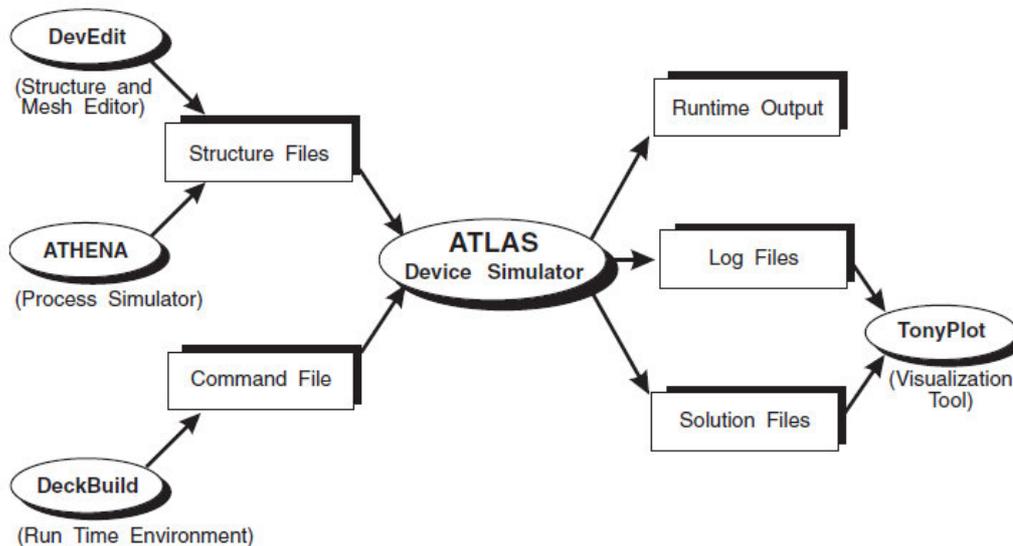


Figure III.2 : Entrées et sorties d'Atlas [2].

III.1.6 Principe de la simulation numérique

L'étude de la plus part des dispositifs à semi-conducteurs est basée sur la résolution simultanée de l'équation de poisson et de l'équation de continuité. Avec pour problématique la détermination d'un grand nombre d'inconnues : le potentiel, les concentrations d'électrons et de trous, le champ électrique, les densités de courant, etc. ces grandeurs physiques internes évoluent au sein du composant dans le temps et l'espace. Elles apparaissent sous une forme discrétisée, comme une suite d'éléments finies. Sous cette condition, les équations traitées dans ces simulateurs peuvent être résolues de façon dynamique en tout point.

L'équation de poisson établit un premier système d'équations différentielles entre le potentiel et la densité des porteurs [2] :

$$\varepsilon \Delta V = q(p - n + N_D - N_A) \quad (\text{III.1})$$

ε : est la constante diélectrique,

V : Le potentiel,

q : La charge élémentaire d'électrons,

N_D et N_A sont les concentration des dopants donneurs et accepteurs ionisés.

n et p sont les densités des porteurs.

L'évolution temporelle des densités de porteurs doit obéir aux équations de continuité (conservation des charges) pour les électrons et les trous :

$$\vec{J}_n = qn\mu_n\vec{E} + qD_n\overrightarrow{gradn} \quad (\text{III.2})$$

$$\vec{J}_p = qp\mu_p\vec{E} + qD_p\overrightarrow{gradp} \quad (\text{III.3})$$

D_n et D_p sont les coefficients de diffusion.

Les dérivations basées sur la théorie de transport de Boltzmann ont prouvé que la densité des courants dans les équations de continuité peut être définie par le modèle d'entraînement diffusion.

Les densités de courants sont exprimées en fonction de termes. Le premier correspond à l'entraînement des charges par le champ électrique et le second correspond à la diffusion des porteurs.

$$\frac{dn}{dt} = G_n - U_n + \frac{1}{q} \operatorname{div} \vec{J}_n \quad (\text{III.4})$$

$$\frac{dp}{dt} = G_p - U_p + \frac{1}{q} \operatorname{div} \vec{J}_p \quad (\text{III.5})$$

Get U Sont respectivement les taux de génération et de recombinaison des porteurs.

Les trois équations (l'équation de poisson plus les deux équations de continuité pour les électrons et les trous), à résoudre localement en tout point, sont des équations différentielles non linéaires couplées (n et p dépendent non linéairement du potentiel). Leur résolution numérique ne peut se faire qu'en remplaçant les accroissements différentiels par des accroissements finis. Pour les variations spatiales, ces accroissements sont ceux définis entre les nœuds d'une grille préalablement fixée. Cette grille, appelée maillage, a pour fonction première de subdiviser l'intérieur de la structure en cellules élémentaires [2].

III.1.7 Les étapes de simulation avec Atlas

Il existe cinq groupes de commandes, ces groupes doivent être organisés correctement lors de la réalisation d'un programme de simulation (Figure III.3). Si l'ordre n'est pas respecté, un message d'erreur apparaît et le programme ne s'exécute pas d'une façon correcte. Par exemple, si les paramètres ne sont pas placés dans l'ordre, le simulateur ne les prend pas en compte .

<i>Group</i>		<i>Statements</i>
1. Structure Specification	—————	MESH REGION ELECTRODE DOPING
2. Material Models Specification	—————	MATERIAL MODELS CONTACT INTERFACE
3. Numerical Method Selection	—————	METHOD
4. Solution Specification	—————	LOG SOLVE LOAD SAVE
5. Results Analysis	—————	EXTRACT TONYPLOT

Figure III.3 : Les étapes de simulation avecAtlas[2].

Les commandes fondamentales d'atlas

- **MESH** : cette commande produit un maillage.
- **REGION** : c'est une instruction qui définit une région dans une structure.
- **ELECTRODE** : indique l'endroit et les noms des électrodes dans une structure.
- **DOPING** : indique le type et le profil de dopage.
- **MATERIAL** :associe des paramètres physique aux matériaux utilisés dans la simulation par exemple : affinité électronique, énergie de gap, la fonction de la densité d'états,les durées de vie des porteurs minoritaires, etc..et aussi il faut faire attention parce que le logiciel a des paramètres de materiau définis par défaut pour les semi-conducteurs standards.
- **MODELS** : cette instruction permet de faire appel aux modèles physique existants dans le logiciel, nous pouvons citer comme exemples les modèles de recombinaison Shockley Read Hall (SRH), Auger et les modèles concernant les statistiques des porteurs de Boltzmann,Fermi, etc...
- **CONTACT** : indique les attributs physiques d'une électrode : anode, cathode , drain, etc...

- **INTERFACE** : indique les paramètres d'interface aux limites de semiconducteur / isolant, comme exemple, la vitesse de recombinaison en surface et la densité de charge à l'interface.
- **METHODE** : place les méthode numiriques à employer pour résoudre les équations et les paramètres liés à ces algorithmes. Les méthodes numériques qui peuvent être spécifiées par cette instruction incluent des méthodes telles que celles de Gummel et de Newton.
- **LOG** : permet à toutes caractéristiques finales de simulation d'être enregistrées dans un fichier (ouvre un fichier de type log (log en minuscule veut dire le type de fichier, LOG en majuscule veut dire la commande dans le programme)). N'importe quel type de donnée, qu'elle soit C.C., transistoire ou C.A., générée par la commande SOLVE est enregistrée après la commande LOG (donc les information enregistrée sont de type électrique elles sont, par exemple, en fonction de la tension de polarisation ou de la source de lumière). Si dans le programme il ya plusieurs commandes LOG, chaque fois le fichier log qui a été ouvert avant est fermé et un nouveau fichier log est ouvert.
- **SOLVE** : ordonne à Atlas d'exécuter une solution pour un ou plusiur points de polarisation.
- **LOAD** : charge des solutions précédentes à partir de fichiers en tant que conditions initiales à d'autres points de polarisation.
- **SAVE** : sauve toutes les informations d'un point nœud du maillage dans un fichier de sortie (les fichiers de sortie sont de type structure). Les informations sauvées correspondent à un étet électrique bien précis.
- **EXTRACT** : les commandes de ce type sont utilisées pour extraire les valeurs bien précises des paramètres des deux types des fichiers log ou solution.
- **TONYPLOT** : Tonyplot c'est le post processus graphique des données. Cette commande permet de présenter les solutions trouvées pendant la simulation sous forme de graphe.

III.1.8 Différentes étapes de simulation

III.1.8.1 La spécification de la structure

Notre structure de référence que nous allons étudier par simulation est une diode Schottky réalisée sur un substrat en GaAs type n. Le contact métallique étant un alliage de titane (Ti 77.5/Mo12/Zr 6/Sn4.5) en phase β avec un travail de sortie de 4.3 eV. Les dimensions du composant étudié sont données par la (figure III.4). Les deux contacts au dessous du substrat n-GaAs à savoir le Ti et l'Au sont des contacts ohmiques.

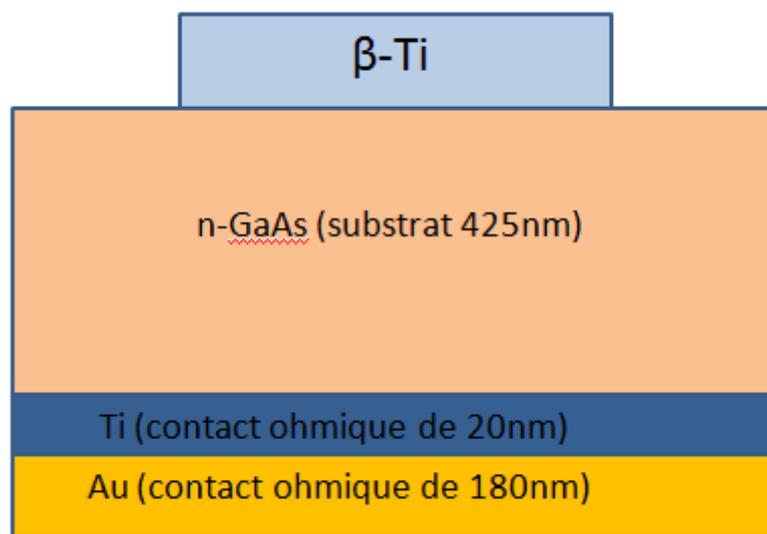


Figure III.4 : Diode Schottky β -Ti/n-GaAs/Ti/Au

Partie 2 : résultats et interprétation

III.2.1 Introduction

Nous présenterons dans cette partie notre travail de simulation basé en particulier sur l'étude des propriétés électriques courant-tension (I-V) de la structure β -Ti/n-GaAs(n) en fonction de la température de 300 à 400K avec un pas de 20.

Un deuxième travail de modélisation a été fait pour l'extraction des principaux paramètres de la diode tels que le facteur d'idéalité « n » et la hauteur de la barrière de

potentiel en utilisant la méthode standard sur les caractéristiques électriques en polarisation directe.

En fin on termine ce chapitre avec une comparaison de nos résultats avec ceux de l'expérimental.

III.2.2 Caractéristiques courant-tension de la structure β -Ti/n-GaAs en fonction de la température:

La simulation en utilisant le simulateur AtlasSilvaco de la structure en question, nous a permis d'obtenir les caractéristiques (I-V) pour un large intervalle de température variant de 300 à 400K avec un pas de 20 comme le montre la Figure III-5 qui représentent la variation du courant (I) en fonction de la tension (V) à l'échelle semi-logarithmique avec une concentration de porteur de charge de 10^{17} cm^{-3} .

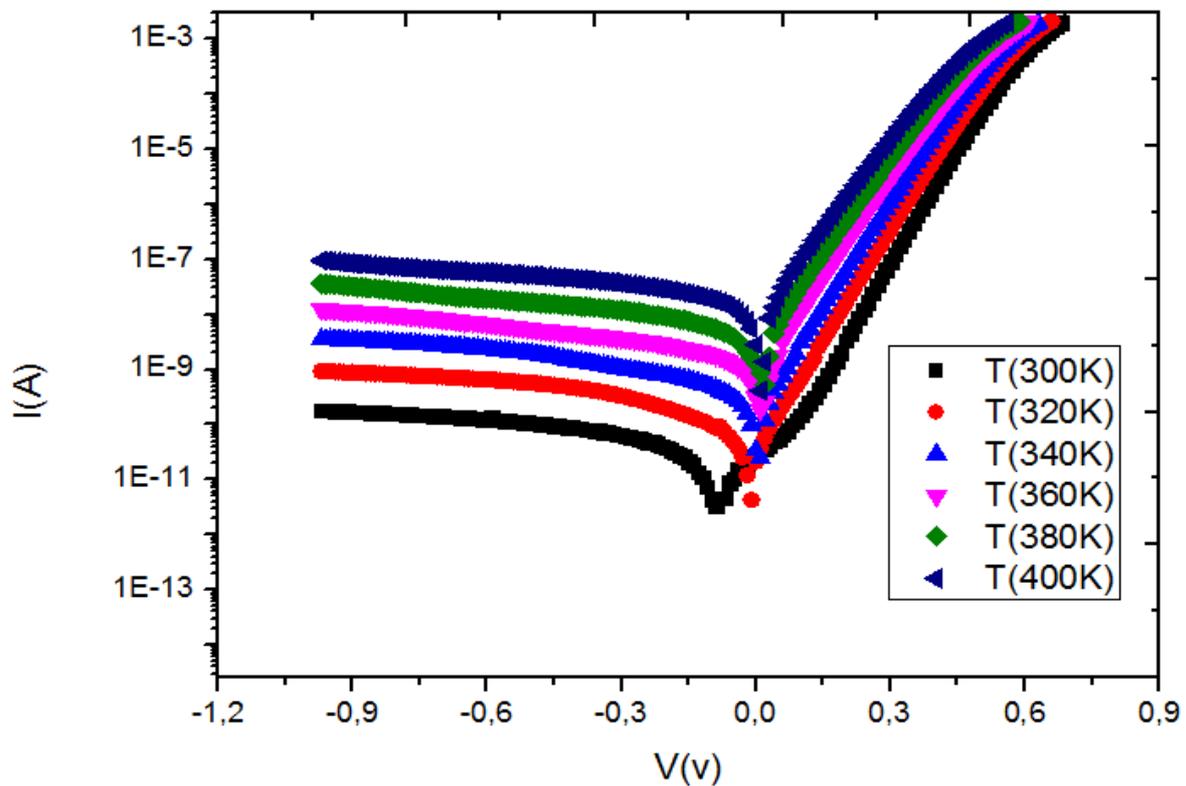


Figure III-5: caractéristique courant –tension (I-V) en polarisation directe et inverse à l'échelle semi-log pour la structure β -Ti/n-GaAs en fonction de la température [300 à 400k]

Nous constatons donc d'après l'allure de la courbe que le courant en polarisation directe et inverse dépend de la température, il augmente proportionnellement avec celle-ci (Figure III.5) et surtout en polarisation inverse. Cela affirme les mécanismes de transport antérieurement expliqués au chapitre I. De ce fait, lorsque la température augmente la concentration de porteurs de charges augmente suite à la rupture des liaisons engendrant ainsi les phénomènes de recombinaison.

Nous remarquons également qu'en polarisation directe que la caractéristique (I-V) à une allure linéaire pour les basses tensions (figure III.5) mais dévie considérablement de la linéarité vers les hautes tensions donnant une deuxième région courbée. Cette courbure est due à l'effet de la résistance série ou états d'interface.

III.2.3 Extraction des paramètres de la hauteur de barrière et du facteur d'idéalité

Comme nous l'avons vu dans le chapitre I, le contact redresseur est caractérisé par sa hauteur de barrière Φ_B exprimée en électronvolt et par son facteur d'idéalité n . ces deux paramètres peuvent être obtenus par différentes méthodes, à savoir par la mesure de la capacité en fonction de la tension, par les méthodes de Cheung et par la méthode standard [31].

Dans ce mémoire nous avons opté pour la méthode standard. Cette dernière est une méthode d'extraction des paramètres homogènes en utilisant un fit linéaire sur les caractéristiques du courant-tension en polarisation directe voir [Figure III-6...Figure III-12]. En fait cette méthode suppose un contact parfait (idéal) entre le métal et le semi-conducteur.

La détermination de ces grandeurs s'obtient par identification de la mesure du courant direct traversant la diode avec la relation physique reliant la tension appliquée et le courant crée par effet thermoïnique [31].

$$I = I_s \left[\exp\left(\frac{qV - R_s I}{nKT}\right) - 1 \right] \quad (\text{III.6})$$

Pour les faibles tensions de la polarisation la tension $R_s I$ est négligeable devant v

et pour $V \gg \frac{KT}{q}$

$$I \approx I_s \exp\left(\frac{qV}{nKT}\right) \text{ (III.7)}$$

T : est la température absolue (K).

V : La tension appliquée (V).

K : La constante de Boltzman ($1.38110^{23} JK^{-1}$)

q : La charge de l'électron ($1.610^{-19} C$)

I_s : Le courant de saturation de la diode donné par la relation :

$$I_s \approx A^* T^2 A \exp\left(\frac{-qV_b}{KT}\right) \text{ (III.8)}$$

A : La surface de la diode.

A^* : est la constante de Richardson donné la relation :

$$A^* = \frac{4\pi q k^2 m^*}{h^3} \text{ (III.9)}$$

m^* : La masse effective des électrons.

h^* : est la constante de Planck ($6.63 \cdot 10^{-31}$).

$$n = \frac{dV}{d(\ln I)} = \frac{q}{KT} \frac{1}{2.303 b} \text{ (III.10)}$$

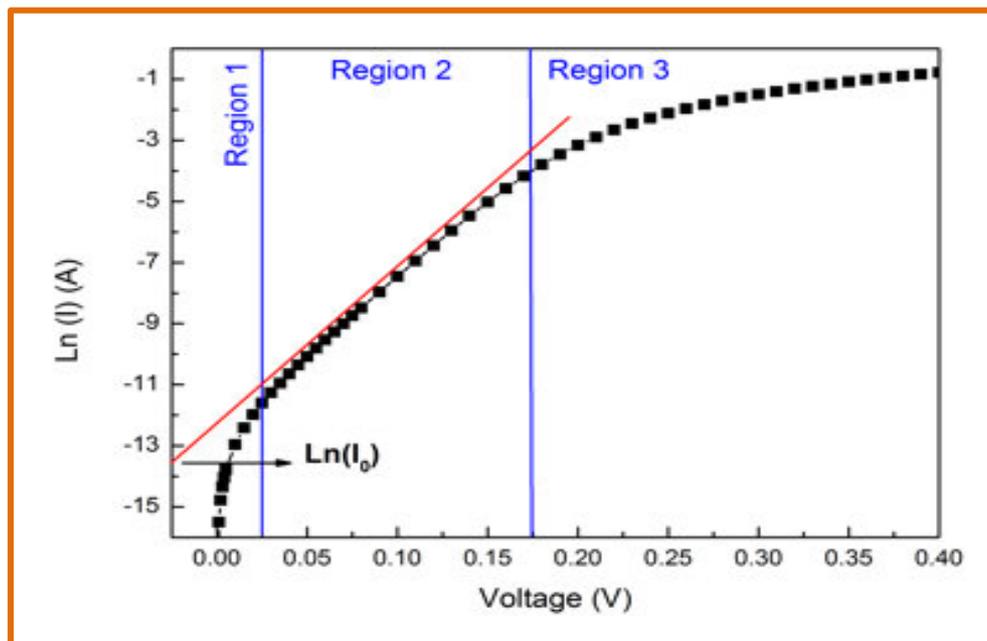


Figure III.6 : Représentation schématique des différentes régions de la caractéristique ($\ln I$ - V) d'une diode Schottky, en polarisation directe.

On a donc :

$$n = \frac{q}{KT} \frac{1}{2.303 * \text{Slope}} \quad (\text{III.11})$$

La hauteur de la barrière peut être calculée ainsi :

$$\Phi_B = \frac{KT}{q} \ln \frac{(\text{surface} T^2 A^*)}{I_0} \quad (\text{III.12})$$

Par conséquent, les valeurs de I_0 et le facteur d'idéalité « n » peuvent être obtenus de l'interception et la pente b de la courbe $\log(I) = f(V)$, respectivement (voir figure III.6).

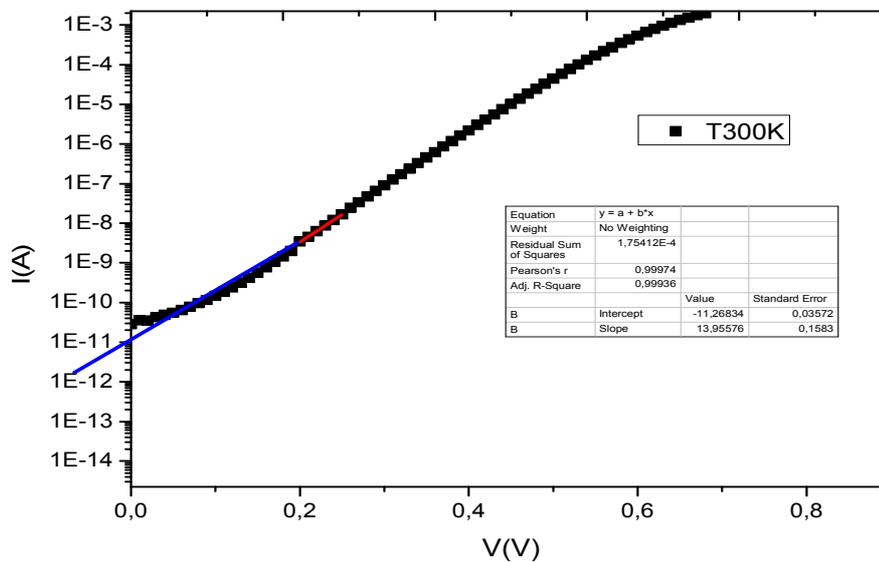


Figure III.7 :Extraction du facteur d'idéalité n et la hauteur de la barrière de la structure MS (β -Ti/n-GaAs) à T = 300 °K

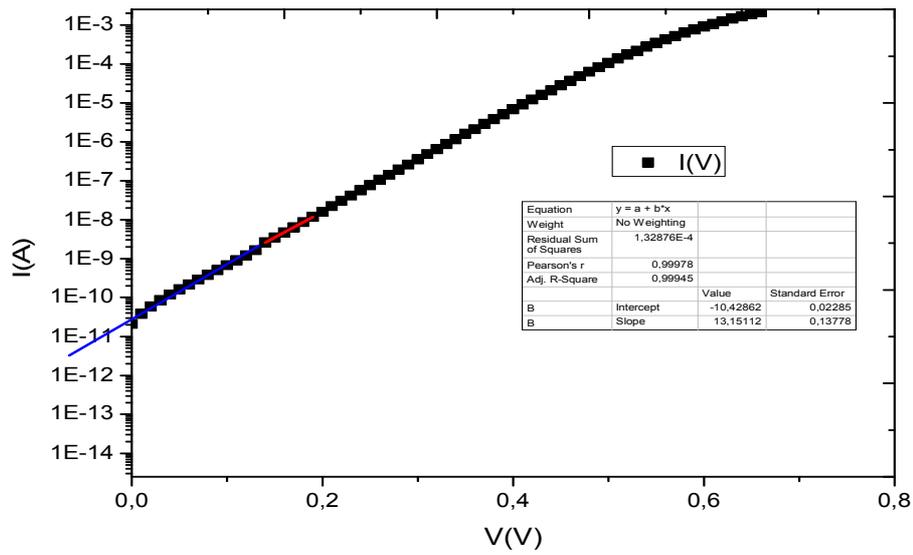


Figure III.8 : Extraction du facteur d'idéalité n et la hauteur de la barrière de la structure MS (β -Ti/n-GaAs) à T = 320 °K

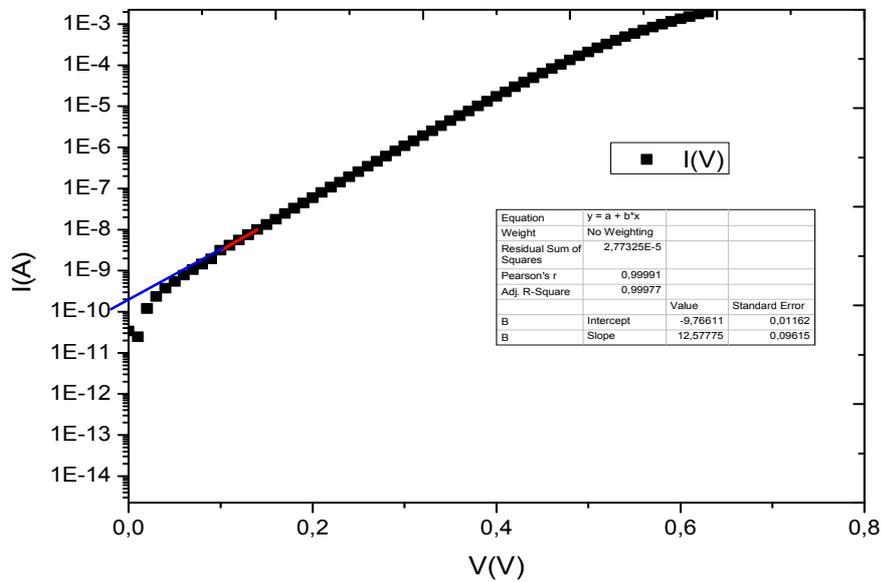


Figure III.9:Extraction du facteur d'idéalité n et la hauteur de la barrière de la structure MS (β -Ti/n-GaAs) à T = 340 °K

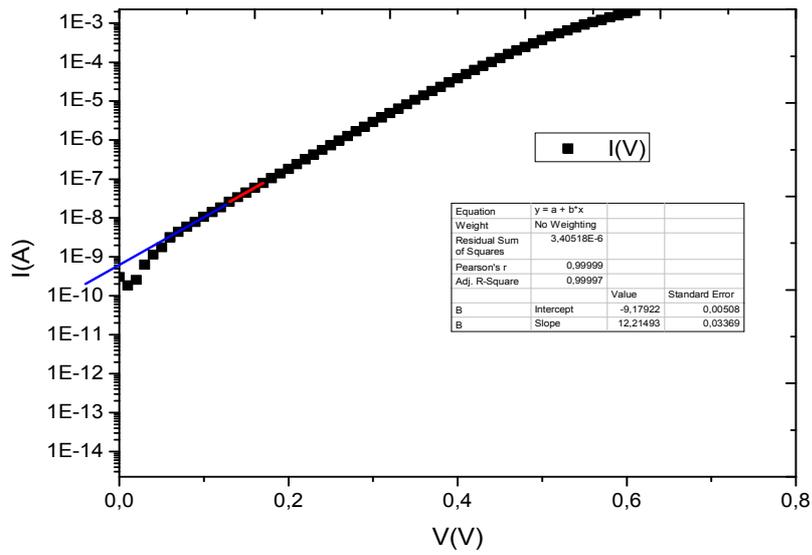


Figure III.10 :Extraction du facteur d'idéalité n et la hauteur de la barrière de la structure MS (β -Ti/n-GaAs) à T = 360 °K

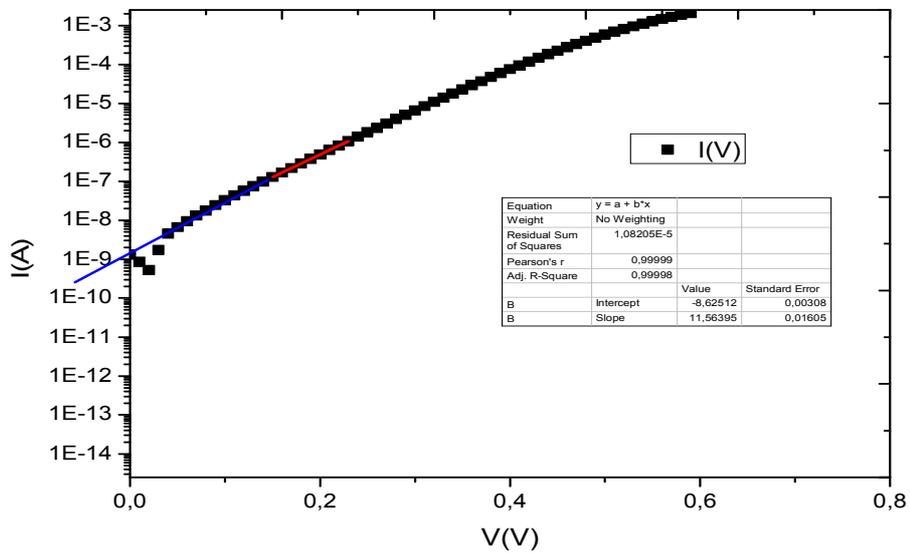


Figure III.11: Extraction du facteur d'idéalité n et la hauteur de la barrière de la structure MS (β -Ti/n-GaAs) à T = 380 °K

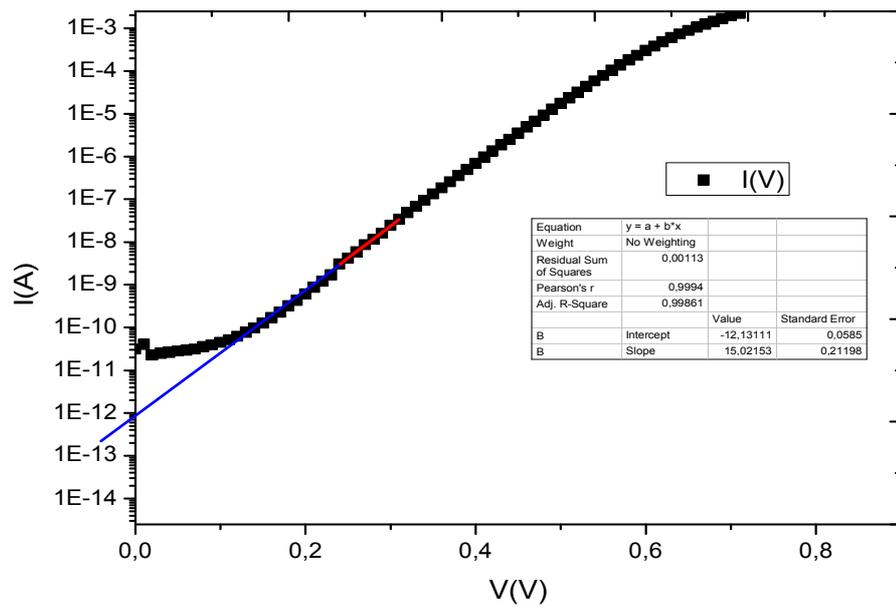


Figure III.12 :Extraction du facteur d'idéalité n et la hauteur de la barrière de la structure MS (β -Ti/n-GaAs) à $T = 400^\circ\text{K}$

Pour une meilleure interprétation des courbes trouvées nous avons tracé le facteur (n) et la hauteur de la barrière en fonction de la température voir figure III-13 et III-14

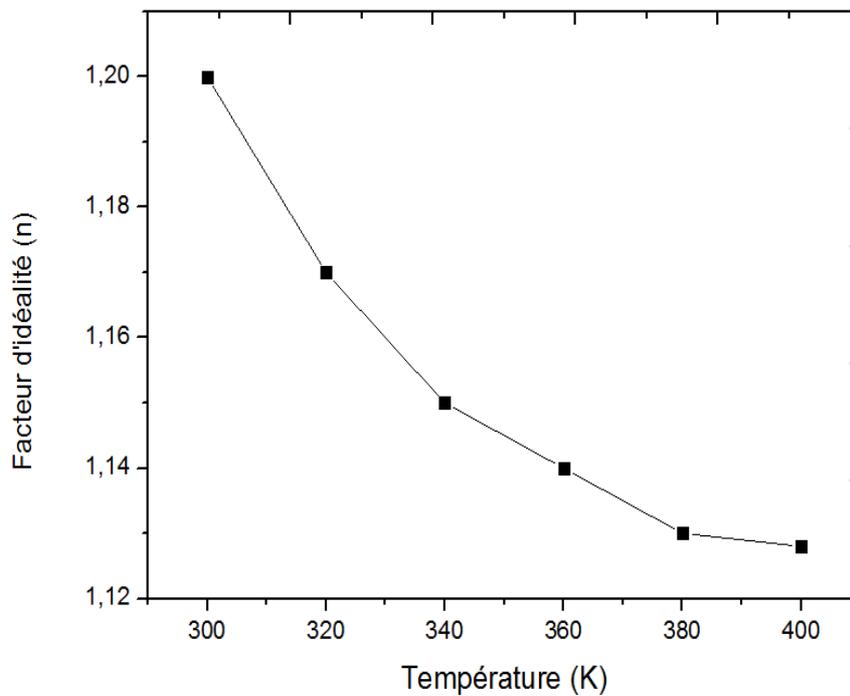


Figure III.13: La variation du facteur d'idéalité (n) en fonction de la température.

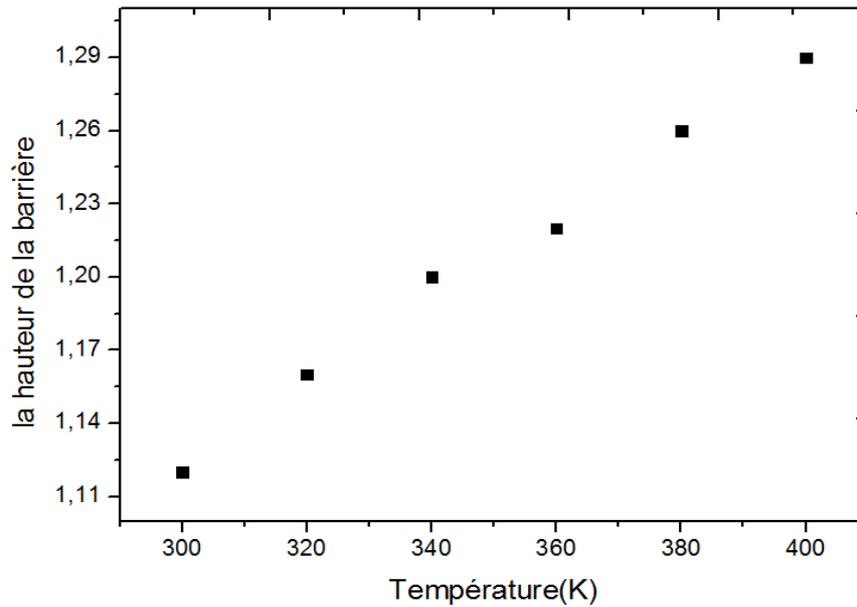


Figure III.14 : La variation de la hauteur de la barrière en fonction de la température

- Les figures III.13 et III.14 montrent que le facteur d'idéalité diminue avec l'augmentation de la température contrairement à la hauteur de la barrière qui est proportionnelle à celle-ci. Ce phénomène est en contradiction avec la théorie est ceci est dû à l'inhomogénéité des barrières Schottky.
- L'inhomogénéité dans les barrières Schottky est principalement due aux états d'interface.
- Le facteur d'idéalité s'approche de l'unité à haute température ($T > 380^\circ\text{K}$)
- Nos résultats sont conformes avec ceux trouvés par d'autres auteurs [32]

III.2.4 comparaison des résultats de simulation et avec les résultats expérimentaux

Les valeurs simulées et expérimentales du facteur d'idéalité et de la hauteur de la barrière sont résumées dans le Tableau III.1. En comparant notre travail de simulation le travail expérimental [33] présenté dans (le tableau III.1) on remarque une bonne convergence des deux résultats d'où la validité de notre travail de simulation.

Température (°K)	Facteur d'idéalité simulé	Facteur d'idéalité mesuré	La hauteur de la barrière simulée	La hauteur de la barrière mesurée
300	1,20	1.192	1,12	1.12
320	1,17	1.164	1,16	1.152
340	1,15	1.141	1,20	1.189
360	1,148	1.138	1,22	1.215
380	1,13	1.125	1,26	1.26
400	1,128	1.122	1,29	1.29

Tableau III.1 Paramètres de la structure MS simulés et mesurés.

Conclusion générale

Conclusion générale :

Les composants électroniques à base des jonctions, telles que les diodes Schottky, les circuits intégrés et les cellules photovoltaïques, connaissent une grande focalisation scientifique et technique dans les dernières années, car elles présentent un grand intérêt économique, énergétique et environnemental.

Au cours de ce travail présenté dans ce mémoire, nous avons étudié :

Pour un premier temps la diode Schottky β -Ti réalisé sur un substrat GaAs type n en fonction de la température. Les alliages du Titane sont très utilisés dans les applications militaires, la construction d'avion. Ils sont également utilisés dans le domaine biomédical en raison de leur biocompatibilité et de leur faible module d'Young. Des nouveaux alliages comme le Ti6Al7Nb, alliage de type $\alpha + \beta$, sont développés dans le but de réduire l'utilisation du Vanadium, toxique pour l'Homme. Particulièrement le Béta-Titane ' β -Ti' a connu un essor remarquable en lunetterie depuis une dizaine d'année et ce pour sa faible densité, sa résistance et son anticorrosion. Ils sont aussi développés dans le but de se rapprocher le plus possible d'un alliage avec un module d'Young très proche de celui de l'os afin d'éviter toute forme d'atrophie

Le logiciel Atlas -Silvaconous a permis en premier lieu de présenter la géométrie de la structure à deux dimensions et en deuxième lieu nous avons simulé les caractéristiques courant-tension (I-V) de la diode β -Ti/GaAs (n) à des températures entre (300 -400 K°) et de voir l'influence de la température sur l'évolution de la caractéristique.

L'augmentation de la température fait augmenter le courant qui traverse la diode surtout en polarisation inverse.

Nous avons donc conclu que la dépendance en température des caractéristiques (I-V) peut être expliquée avec succès sur la base du mécanisme thermoïonique et les modèles de recombinaison.

Les caractéristiques courant-tension simulées sont en bon accord avec ceux trouvés par d'autres auteurs.

La caractéristique (I-V) ne donne pas de clarification sur les phénomènes de transport dans la diode d'où la nécessité d'extraire certains paramètres tel que le facteur d'idéalité et la hauteur de la barrière de potentiel.

L'extraction de ces paramètres a été faite par la méthode de fit (standard) en utilisant la courbe simulée de la caractéristique (I-V) et en substituant les valeurs dans les équations bien définies dans le chapitre 3.

Le facteur d'idéalité diminue avec l'augmentation de la température contrairement à la hauteur de la barrière qui est proportionnelle à celle-ci. Ce phénomène est en contradiction avec la théorie est ceci est du à l'inhomogénéité des barrières Schottky

No résultats de simulation converge bien avec ceux de l'expérience.

En termes de perspective, il serait très intéressant d'étudier la même structure à basse température.

- [1] Niimoni M. The effect of deformation induced transformation on the fracture toughness of commercial titanium alloy. *Met Trans.*, 1990, vol. 21A, pp. 1733-1744.
- [2] Atlas user manuale device Simulation .silvaCo International, Santa Clara , 2011.
- [3] H. Altuntas, S. Altindal, S. Özcelik, H. Shtrikman, "Electrical characteristic of Au/n-GaAs Schottky barrier diodes with and without SiO₂ insulator layer at room temperature", *Vacuum* 83 (2009) 1060-1065.
- [4] K. Zeghdar, "*Simulation des caractéristiques courant-tension à base d'une diode Schottky en Phosphore d'indium InP*", Thèse Magister, Université Mohamed Khider-Biskra 2014 .
- [5] S. M. Sze, "*physics of semiconductor Devices*", John Wiley & sons, New York, London, Sydney, Toronto, 1969.
- [6] R. LEGROS, "*Physique des semi-conducteur Technologie-diodes*" , Eyrolles paris, 1974
- [7] Y. Beddiafi, "*Modélisation d'un transistor MESFET en GaAs en utilisant le simulateur atlas-silvaco*" Université Mohamed Khider-Biskra 2013 .
- [8] Sheng S. Li, "*Semiconductor Physical Electronics*", 2nd ed, Springer, USA, 1969.
- [9] H. Mathieu, H. fanet, "Physique des semiconducteur et des composants électriques", 6^{ème} édition, Dunod, Paris, 2009.
- [10] B. Lakehal , "*Etudes des propriétés électrique photopile à base d'une structure Schottky*" , Thèse de Magister, Université Batna, 2009.
- [11] p. Baranski, V. Klotchkov, I. Potykevitch, "*Électronique des semi-conducteur*", Edition de Moscou 1975.
- [12] H.K. Henisch, "*Rectifying semiconductor Contacts, clarendo*" Oxford, 1957.
- [13] M. D. Barlow, "*Metal-Semiconductor Contacts for Schottky Diode Fabrication*", Youngstown State University, December 2007.
- [14] S. Khemissi, "Modélisation non linéaire des composants à effet de champ", Thèse Doctorat, Université Mentouri -Constantine, 2009.
- [15] R. Soares, J. Graffeul et J. Obregon, "*Application des Transistors à effet de champ en arséniure de Gallium*" , Eyrolles et CENT -ENST , Paris, 1984.
- [16] O. Bonneaud, "*Physique des solides, des semi-conducteurs et dispositifs*", Université de Rennes1, Juin 2003.
- [17] M. Grundmann , "*The physics of semi-conducteurs*" 2nd ed, Springer - verlag Berlin Heidelberg, 2010.

- [18] Schttky W. and SENKE E, "Quantitative treatment of the space charge and boundary-layer theory of the crystal rectifier", *Wiss. Veroff. a. d. Siemens-Werken*, Vol. 18, PP. 225-229, 1939.
- [19] Sze S.M. and Kwok K.ng, "Physique of semiconductor devices", 3^{ème} édition, Wiley, New Jersey, 2006.
- [20] Crowell C.R. et Sze S.M, Current, "transport in Metal-Semiconductor Barriers", *SOLIDE State Electronic*, Vol. 9, PP. 1035-1048, 1966.
- [21] K.J. Schoen, M. Jerry, J. M. Woodal, "Desing Consideration and Experimental Analysis of High-Voltage, Sic Schttky Barrier Rectifier", *IEEE Transation on devices*, Vol. 45, No. 7, PP. 1595-1604, 1998.
- [22] R. Besson, "Technologie des composants électroniques diodes, Transistor, circuit integres, opto-électronique", Tome 2, 5^{ème} édition radio, Paris, 1981
- [23] R. Soares, J. Graffeul et J. Obregon, "Application des Transistors à effet de champ en arséniure de Gallium", *Eyrolles et CENT -ENST*, Paris, 1984.
- [24] T. N. Quang, "Effet de spin dans les nanostructures semi-conducteurs : modélisation et expériences de magnéto-transport", thèse de Doctorat, L'école polytechnique, France, p8, 2006.
- [25] James R. Chelikowsky and Marvin L. Cohen, "Nonlocal pseudopotential calculation for the electronic structure of eleven diamond and Zinc-blende semiconductors", *Phys. Rev.*, Vol. 14, No. 2, PP. 556-582, July 1976.
- [26] C. Hermann and C. Weisbuch, *Phys. Rev. B* 15, 823, 1977.
- [27] M. T. Yin and M. L. Cohen, *Phys. Rev. B* 26, 5668, 1982.
- [28] Combres Y., *Traitements thermiques des alliages de titane*, *Techniques de l'Ingénieur*, m1335, 2013.
- [29] F. Bourouba, "Modélisation et simulation des contacts metal-semiconducteur à barrier inhomogène", Mémoire Magister, Physique, Université Ferhat Abbes-Sétif, 2010.
- [30] D. K. Schroder, "Semiconductor Material and Device Characterization", John Wiley & Sons, Vol. 836, 1998.
- [31] M. Wade, "Fbrication et etude des proprietes de diodes Schottky sur diamante homoépitaxié p / p⁺", *Physics*, Université Joseph-Fourier 6 Grenoble, I, French, 2005.
- [32] K. Ejerha, S. Duman, C. Nuhoglu *journal of Applied Physiques*, 234503 (2014).
- [33] E. OZVCI, S. Demirezen, *U. Aydemier Sensos and Atuators A* (194) (2013) 259-268