

République Algérienne Démocratique et Populaire  
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique  
Université Abderrahmane Mira de Béjaïa



Faculté des Sciences Exactes  
Département de Physique

## Mémoire

En Vue de l'Obtention du Diplôme de Master en Physique

Spécialité : Physique

Option : Matériaux et Nano-composites

Thème

---

# Modélisation et méthodes d'extraction des paramètres des caractéristiques électriques dans les nanomatériaux

---

Réalisé par :

**M YAHIAOUI Nadjim**

Soutenu le: 02/Juillet/2017

Devant le Jury composé de:

**M BOUFALA Khaled**

**MCB**

**UAMB**

**Président**

**M<sup>me</sup> ZELLAG Saliha**

**MAA**

**UAMB**

**Rapporteur**

**M SOUICI Abdel Hafid**

**MCA**

**UAMB**

**Examineur**

Année universitaire 2016/2017

# Remerciements

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

*Mes plus chaleureux remerciements et toute ma reconnaissance vont à Madame "**ZELLAG Saliha**", Maitre Assistante au département de Physique, Université Abderrahmane Mira de Bejaïa, pour m'avoir accueilli, orienté et encadré pendant ces trois mois. Sa rigueur, sa persévérance, ses connaissances scientifiques et son enthousiasme ont largement contribué à la réussite de ce travail.*

*Je remercie vivement Monsieur "**BOUFALA Khaled**", Maitre Conférence au département de Physique, Université Abderrahmane Mira de Bejaïa, pour l'honneur qu'il m'a fait en acceptant de présider le jury de ce travail de mémoire.*

*Je suis très sensible à l'honneur qui ma fait Mr "**A. SOUICI**", Maitre Conférence au département de Physique, Université Abderrahmane Mira de Bejaïa, pour avoir accepté de juger ce travail, je lui exprime ma profonde reconnaissance.*

*J'adresse également mes sincères remerciements à Mr "**K. LOUZAZNA**", enseignant au département de Physique, Université Abderrahmane Mira de Bejaïa, pour son aide, notamment sa disponibilité durant ces dernières années.*

*Mes remerciements vont également à mes enseignants à l'Université Abderrahmane Mira de Bejaïa, Mr "**A. HOUARI**", Mr "**H. ZENIA**", pour leurs disponibilités et leurs appréciables vertus.*

*Je ne saurais oublier Mr : "**F. BOUDJOUAD**", Doctorant au département de Physique, Université Abderrahmane Mira de Bejaïa, pour son aide, notamment pour ses conseils et sa disponibilité le long de cette année.*

*Enfin je remercie infiniment tous ceux qui ont contribué à la réalisation de ce travail de mémoire.*

# Dédicace

*A mes très chers parents, “Y. Boualem” et “Y. Naïma”.*

*A mes frères, “Ameur, Fawzi, Achour” et ma sœur, “Nawel” et sa fille, “Ben Challèle Elina (ninouche)”.*

*A toute ma famille.*

*A tous mes amis, “Bennacer Nourdine (Jhonny), Tani Massinissa, Rabhi Rahim, Klioua Malik” et mes collègues.*

*Je dédie ce travail.*

*N. Yahiaoui*

# TABLE DES MATIERES

<b>LISTE DES TABLEAUX .....</b>	<b>V</b>
<b>LISTE DES FIGURES.....</b>	<b>VI</b>
<b>INTRODUCTION GENERALE .....</b>	<b>1</b>
<b>CHAPITRE I      GENERALITES      SUR      LES      STRUCTURES</b>	
<b>METAL/SEMICONDUCTEUR ET METAL/ISOLANT/SEMICONDUCTEUR</b>	
<b>1    Introduction.....</b>	<b>Erreur ! Signet non défini.</b>
<b>2    Théorie du contact métal-semi-conducteur MS homogène.....</b>	<b>4</b>
2.1    Le travail de sortie et l'affinité électronique du semi-conducteur.....	5
2.2    Modèles de la formation de la barrière Schottky.....	5
2.2.1    Modèle de Mott-Schottky.....	5
2.2.2    Modèle de Bardeen.....	6
2.2.3    Modèle de Cowley et Sze.....	8
2.3    Zone de charge d'espace.....	9
2.4    Abaissement de la barrière, effet Schottky .....	11
2.5    Mécanismes de transport du courant dans un contact Métal/semi-conducteur en polarisation directe .....	12
2.5.1    Emission au-dessus de la barrière .....	13
2.5.1.1 Théorie de l'émission thermoïonique .....	13
2.5.1.2 Théorie de la diffusion.....	14
2.5.1.3 Théorie mixte, thermoïonique-diffusion.....	15

2.5.2	Courant par effet tunnel.....	17
2.5.2.1	Courant d'émission par effet de champ (FE).....	18
2.5.2.2	Courant d'émission thermoïonique assistée par effet de champ (TFE).....	18
2.5.3	Recombinaison dans la zone de charge d'espace.....	19
2.5.4	Injection des minoritaires.....	19
2.6	Courant en polarisation inverse.....	20
2.6.1	Courant d'émission thermoïonique (TE).....	22
2.6.2	Courant tunnel.....	22
2.6.2.1	Formules de Padovani et Stratton.....	23
2.6.2.2	Formule de Tsu et Esaki.....	24
<b>3</b>	<b>La structure Métal/Oxyde/Semi-conducteur MIS.....</b>	<b>25</b>
3.1	Introduction.....	25
3.2	Diagramme de bandes d'énergie.....	25
3.3	Influence des travaux de sortie.....	26
3.4	Régimes de fonctionnement.....	27
3.4.1	Régime d'accumulation.....	28
3.4.2	Régime de bandes plates.....	30
3.4.3	Régime de déplétion.....	31
3.4.4	Régime d'inversion et de forte inversion.....	33

**CHAPITRE II LES PRINCIPALES PROPRIETES PHYSIQUES ET ELECTRIQUES DES MATERIAUX : Au, TiO<sub>2</sub>, et GaAs**

<b>1</b>	<b>Généralités sur l'or.....</b>	<b>36</b>
1.1	Propriétés des nanoparticules d'or.....	37
<b>2</b>	<b>Généralités sur le dioxyde de Titane (TiO<sub>2</sub>).....</b>	<b>37</b>
2.1	Propriétés physico-chimiques et structure cristalline du TiO <sub>2</sub> .....	38
2.2	Les défauts existants dans le TiO <sub>2</sub> .....	40
2.2.1	Les défauts intrinsèques.....	40
2.2.2	Les défauts extrinsèques.....	40
2.3	Propriétés électriques du TiO <sub>2</sub> .....	40

2.3.1	Comportements électriques des défauts .....	41
2.3.1.1	Niveau d'énergie.....	41
2.3.1.2	Notion de piège.....	41
2.3.1.3	Notion de section de capture.....	41
2.3.2	Différents types de charges dans l'oxyde.....	42
2.3.2.1	La charge fixe .....	42
2.3.2.2	La charge piégée .....	42
2.3.2.3	La charge mobile ionique .....	42
2.3.2.4	La charge piégée des états d'interface .....	42
2.3.3	Propriétés de transport dans l'oxyde .....	43
2.3.4	Différentes types de conduction dans l'oxyde .....	43
2.3.4.1	La conduction thermoïonique :.....	43
2.3.4.2	La conduction tunnel directe : .....	43
2.3.4.3	La conduction par saut (Hopping conduction) : .....	43
<b>3</b>	<b>Généralités sur l'Arséniure de Gallium (GaAs).....</b>	<b>43</b>
3.1	Structure cristalline du GaAs .....	44
3.1.1	Structure de bande d'énergie du GaAs.....	45
3.2	Avantages du GaAs .....	48
3.3	Inconvénients du GaAs.....	48

## CHAPITRE III SIMULATION ET TECHNIQUES DE MODELISATION

<b>1</b>	<b>Introduction .....</b>	<b>49</b>
<b>2</b>	<b>Partie1 : Description du logiciel de simulation .....</b>	<b>49</b>
2.1	Introduction.....	49
2.2	Présentation de logiciel Silvaco.....	50
2.3	Principe de la simulation numérique .....	50
<b>3</b>	<b>Caractérisation courant-tension des structures MS (Au/n-GaAs) et MIS (Au/TiO<sub>2</sub>/n-GaAs) à 100 nm .....</b>	<b>51</b>

**4 Partie 2 : Techniques d'extraction des paramètres homogènes  $n$ ,  $R_s$ ,  $\Phi_B$ , dans les diodes Schottky SDs ..... 53**

    4.1 Méthode Standard (I-V) :..... 53

    4.2 Méthodes de Cheung : ..... 57

**CONCLUSION GENERALE ..... 62**

**REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES..... 64**

# LISTE DES TABLEAUX

Tableau I.1 : Etat de l'interface isolant/semi-conducteur dans une structure MIS en court-circuit.....	27
Tableau II.1 : Quelques propriétés de l'or (Au) et sa structure cristalline (Figure (a)).....	37
Tableau II.2 : Données cristallographiques des phases anatase, rutile et brookite du dioxyde de titane .....	39
Tableau II.3 : Les principaux paramètres physiques et électriques du GaAs.....	46, 47
Tableau III.1 : Paramètres électriques des structures MS et MIS respectivement extrait par la méthode Standard (I-V).....	57
Tableau III.2 : Extraction des paramètres électriques des structures MS et MIS respectivement par les méthodes de Cheung.....	58
Tableau III.3 : Les paramètres électriques des structures MS et MIS respectivement extrait par les différentes méthodes de modélisation.....	61



# LISTE DES FIGURES

Figure I.1 : Diagramme énergétique d'un métal et d'un semi-conducteur de type-n tel que ( $q\phi_M > q\phi_{s.c.}$ ).....	4
Figure I.2 : Diagramme des bandes d'énergie à l'équilibre thermodynamique d'une structure métal/semi-conducteur type-n dans le cas ou ( $q\phi_M > q\phi_{s.c.}$ ).....	5
Figure I.3 : Diagramme énergétique à l'équilibre thermodynamique d'un métal et d'un semi-conducteur de type-n tel que ( $q\phi_M > q\phi_{s.c.}$ ): (a) avant contact et avec états de surface, (b) après contact et avec états de surface .....	6
Figure I.4 : Diagramme énergétique des bandes dans un contact métal/semi-conducteur type-n dans le cas général.....	7
Figure I.5 : Variation du carré de l'inverse de la capacité en fonction de la tension. ....	10
Figure I.6 : L'abaissement de la barrière Schottky par l'effet Schottky .....	11
Figure I.7 : Modes de transport des électrons dans un contact métal/semi-conducteur type-n polarisé en direct .....	12
Figure I.8 : Variation du niveau de Fermi dans le cas d'une conduction mixte ; variation dans la zone de charge d'espace et discontinuité à l'interface .....	16
Figure I.9 : Emission thermoïonique assistée par effet de champ (TFE) et émission de champ (FE) sous une polarisation directe .....	17
Figure I.10 : Mécanismes de transport des charges à travers une barrière Schottky en polarisation inverse .....	21
Figure I.11 : Structure Métal/Isolant/semi-conducteur .....	25
Figure I.12 : Diagramme de bandes d'énergie d'une structure MIS sur Substrat de type-n pour ( $e\phi_{s.c.} < e\phi_m$ ) .....	26
Figure I.13 : Potentiels dans une structure MIS en déplétion .....	28
Figure I.14 : Structures MIS idéales en régime d'accumulation.....	29
Figure I.15 : Structures MIS idéales en régime de bandes plates .....	30
Figure I.16 : Structures MIS idéales en régime de déplétion .....	32

Figure I.17 : Structures MIS idéales en régime d'inversion .....	34
Figure I.18 : Schéma équivalent de la structure MIS .....	35
Figure II.1 : Structures cristallographiques de $TiO_2$ : (a) anatase, (b) brookite, (c) rutile. En vert $Ti^{4+}$ et en rouge $O^{2-}$ .....	40
Figure II.2 : Diagramme d'énergie correspondant aux principaux défauts rencontrés dans les différentes structures du $TiO_2$ .....	42
Figure II.3 : Les types de charges dans l'oxyde et leur localisation .....	43
Figure II.4 : (a) Structure cristalline du GaAs, (b) La première zone de Brillouin d'un cristal cubique, (c) La surface d'énergie constante de bande de conduction de GaAs .....	45
Figure II.5 : Structures de bande électronique de GaAs .....	46
Figure III.1 : le role de simulation.....	49
Figure III.2 : Simulation de la caractéristique courant-tension à l'échelle semi-log des diodes MS (Au/n-GaAs) et MIS (Au/ $TiO_2$ /n-GaAs) à 100 nm à température ambiante ...	52
Figure III.3 : Représentation typique des différentes régions de la caractéristique (lnI-V) d'une diode Schottky, en polarisation directe .....	54
Figure III.4.a : Extraction du facteur d'idéalité n de la structure MS (Au/n-GaAs) par la méthode Standard (I-V) à $T=300^{\circ}k$ .....	56
Figure III.4.b : Extraction du facteur d'idéalité n de la structure MIS (Au/ $TiO_2$ /n-GaAs) par la méthode Standard (I-V) à $T=300^{\circ}k$ .....	56
Figure III.5.a : Extraction du facteur d'idéalité n et la résistance série $R_s$ de la structures MS par la première méthode de Cheung ( $dV/d\ln I$ ) à $T=300^{\circ}k$ .....	59
Figure III.5.b : Extraction du facteur d'idéalité n et la résistance série $R_s$ de la structure MIS par la première méthode de Cheung ( $dV/d\ln I$ ) à $T=300^{\circ}k$ .....	59
Figure III.6.a : Extraction de la résistance série $R_s$ de la structure MS par la deuxième méthode de Cheung H(I) à $T=300^{\circ}k$ .....	60
Figure III.6.b : Extraction de la résistance série $R_s$ de la structure MIS par la deuxième méthode de Cheung H(I) à $T=300^{\circ}k$ .....	60

*Introduction*  
*Générale*

## INTRODUCTION GENERALE

Actuellement, le secteur des nanotechnologies est en développement intense, d'après le 'Nanotechnology Market Forecast' [1], le marché des nanotechnologies suit une croissance annuelle de l'ordre de 20 %. Ce marché représenterait actuellement une valeur de 1,6 milliard de dollars.

Les nanoparticules de dioxyde de titane et d'or occupent une part importante de ce secteur.

Principalement le dioxyde de Titane  $TiO_2$  (4,5 % des applications à lui seul) qui est un candidat très prometteur pour le remplacement de certain oxyde métallique comme le  $SiO_2$  et ce pour ses multiples propriétés.

En fait le  $TiO_2$  a une large bande interdite, une grande stabilité chimique et mécanique, une faible densité d'interface, une constante diélectrique élevée et un faible courant de fuite [2]. Le dioxyde de titane  $TiO_2$  est également utilisé dans la production de la future génération des mémoires DRAM ainsi que dans les applications optoélectroniques comme la photocatalyse, les cellules solaires et les fibres optique [3].

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

Une bonne caractérisation d'une structure Schottky métal/semi-conducteur MS ou métal/isolant/semi-conducteur MIS passe nécessairement par la modélisation de ses propriétés électriques. Cette modélisation nécessite alors des équations mathématiques qui décrivent le comportement électrique de ces SDs.

Les propriétés électroniques des diodes Schottky SDs ne sont jamais bien expliquées sans l'étude des principaux paramètres électriques tels que La hauteur de barrière  $\Phi_B$ , le facteur d'idéalité  $n$ , et la résistance série  $R_s$ .

Cependant, les caractéristiques courant-tension de ces diodes SDs 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 [4], pour étudier d'une part les caractéristiques (I-V) des deux structures Au/n-GaAs et Au/TiO<sub>2</sub>/n-GaAs respectivement, et d'une autre part pour extraire les principaux paramètres des deux diodes tel que le facteur d'idéalité  $n$  et la hauteur de la barrière et la résistance série [5, 6]. 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 développement dans le domaine de l'informatique a connu le même essor que la micro-électronique.

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).

Nous avons organisé la présentation de ce mémoire en trois chapitres :

Dans le premier chapitre, une large étude a été faite sur le fonctionnement du contact métal/semi-conducteur MS avec et sans couche d'isolant TiO<sub>2</sub> à température ambiante. Dans ce même chapitre, nous présentons les modèles de transport des porteurs charges dans ces SDs ainsi que les modèles de formation de la barrière Schottky.

Le deuxième chapitre, est consacré aux propriétés principales des semi-conducteurs en question, notamment sur les caractéristiques de GaAs et du TiO<sub>2</sub>.

Le troisième chapitre est organisé en deux parties :

Dans la première partie, nous présentons le logiciel de simulation Silvaco ainsi que les calculs de la caractéristique courant-tension pour chacune des structures MS et MIS. L'effet de la couche d'interface a été discuté.

Dans la deuxième partie, nous présentons les différentes méthodes d'extraction du facteur d'idéalité  $n$ , la hauteur de la barrière et la résistance série qui sont : la méthode

Standard et les méthodes de Cheung. Les valeurs obtenues avec chacune des méthodes ont été comparées et interprétées.

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

# *Chapitre 1* GÉNÉRALITÉS

*SUR LES STRUCTURES  
MÉTAL/SEMICONDUCTEUR ET  
MÉTAL/ISOLANT/SEMICONDUCTEUR*

## 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 [7]. 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 utilisés pour une grande variété d'applications telles que les cellules solaires, photo détecteurs, transistors Schottky, des mélangeurs à micro-ondes, diode Zener et divers circuits intégrés. La diode Schottky peut également être utilisée comme un condensateur variable dans des circuits paramétriques pour la multiplication de fréquence [8].

## 2 Théorie du contact métal/semi-conducteur MS homogène

La structure métal/semi-conducteur et 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 qui est l'électron ou 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. Ils peuvent se comporter comme des contacts redresseurs ou des contacts ohmiques, Souvent l'application d'une tension sur une structure métal/semi-conducteur produit une caractéristique courant-tension non symétrique, la structure se comporte comme un redresseur [9].

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 [10].

- Le travail de sortie du métal ( $\phi_B$ ).
- Affinité électronique du semi-conducteur ( $\chi$ ).
- La hauteur de la Barrière du potentiel (SBH).



## 2.1 Le travail de sortie et l'affinité électronique du semi-conducteur

La structure de bandes d'énergie d'un métal est caractérisée par son travail de sortie ( $q\phi_M$ ) qui est l'énergie nécessaire pour arracher un électron depuis le niveau de Fermi du métal. Le semi-conducteur est défini par son affinité électronique ( $q\chi_{S.C.}$ ) (c'est l'énergie entre le vide et la bande de conduction), et par son travail de sortie ( $q\phi_{S.C.}$ ) (c'est l'énergie entre le vide et le niveau de Fermi) (Figure I.1).

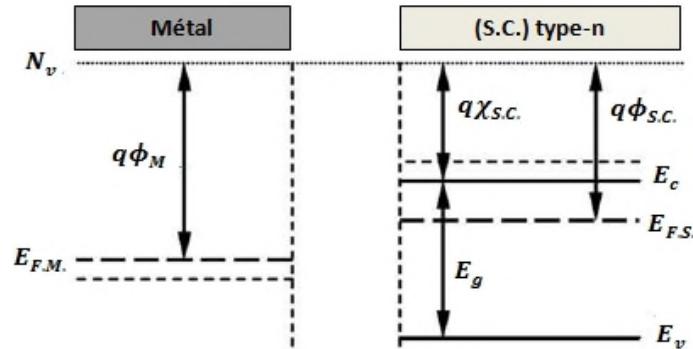


Figure I.1 : Diagramme énergétique d'un métal et d'un semi-conducteur de type-n tel que : ( $q\phi_M > q\phi_{S.C.}$ ) [11].

## 2.2 Modèles de la formation de la barrière Schottky

L'existence de la barrière de potentiel dans les contacts métal/semi-conducteur est décrite selon plusieurs modèles. Nous allons essayer de présenter les trois principaux modèles, qui sont le modèle de Mott-Schottky [12, 13], le modèle de Bardeen [14] et le modèle de Crewll et Sze [15].

### 2.2.1 Modèle de Mott-Schottky

En 1938, Schottky [16] et Mott [17] établissent un modèle pour évaluer la barrière d'énergie entre un métal et un semi-conducteur. Le semi-conducteur et le métal sont supposés être électriquement neutres et sans aucune charge de surface. Pour illustrer ce modèle, prenons une jonction métal/semi-conducteur de type-n, Figure I.2.

Lors de la mise en contact de deux matériaux, et quand le travail de sortie du semi-conducteur est inférieur à celui du métal ( $q\phi_M > q\phi_{S.C.}$ ), les électrons passent du semi-conducteur vers le métal. Il apparaît dans le semi-conducteur une charge d'espace positive et le niveau de Fermi s'éloigne de la bande de conduction BC et se rapproche donc de la bande de valence BV. Cette charge positive est compensée à la surface du métal par une charge

négative. Le régime d'équilibre est alors défini par l'alignement des niveaux de Fermi des deux matériaux. Le diagramme énergétique du contact métal/semi-conducteur de type-n à l'équilibre thermodynamique est représenté dans la Figure I.2.

Dans le cas d'une diode idéal (l'absence d'états d'interfaces), ce contact crée une discontinuité de potentiel en surface appelée barrière de potentiel ( $q\phi_B$ ), qui est donnée par la différence du travail de sortie du métal et de l'affinité électronique du semi-conducteur :

$$q\phi_B = q(\phi_M - \chi_{s.c.}) \quad (I.1)$$

La création d'une barrière d'énergie va limiter la conduction à travers la structure métal/semi-conducteur. Un effet redresseur peut être attendu.

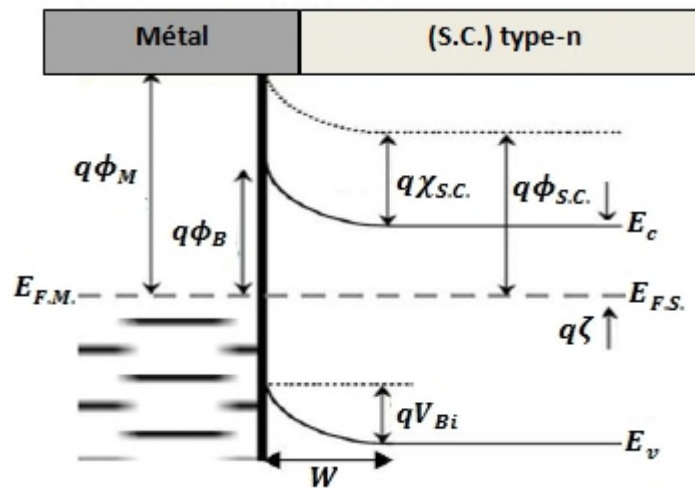


Figure I.2 : Diagramme des bandes d'énergie à l'équilibre thermodynamique d'une structure métal/semi-conducteur type-n dans le cas où ( $q\phi_M > q\phi_{s.c.}$ ) [11].

Le comportement électrique de deux contacts ohmique et Schottky est déterminé par la hauteur de la barrière Schottky. La barrière de potentiel est l'énergie nécessaire pour qu'un électron dans le métal puisse pénétrer dans le semi-conducteur.

### 2.2.2 Modèle de Bardeen

Les travaux menés par l'expérience sur les différentes structures métal/semi-conducteur ont établi que la hauteur de barrière de la jonction n'était pas déterminée systématiquement par les valeurs des travaux de sortie. Bardeen [14] suggéra alors en 1947, l'hypothèse de l'indépendance de la hauteur de la barrière du travail de sortie du métal. Cependant, la barrière est indépendante de la nature du métal. J. Bardeen, a montré que ceci était dû à la présence des états de surface existant sur le semi-conducteur. Ils proviennent de la

rupture du réseau cristallin à la surface du cristal. Ils sont en densité très élevée, environ un état par atome de surface ( $D_{it} > 10^{13} cm^{-3}$ ). La hauteur de barrière serait ainsi déterminée entièrement par ces états de surface. Les diagrammes énergétiques d'un métal et d'un semi-conducteur de type-n sont représentés dans la Figure I.3 avant et après le contact tel que ( $q\phi_M > q\phi_{S.C.}$ ).

Le niveau neutre ( $\phi_0$ ), est défini comme étant la valeur mesurée à partir du niveau supérieur de la bande de valence pour lequel les états de surface doivent être remplis pour avoir une neutralité de charge à la surface du semi-conducteur, ( $\phi_0$ ) est donc un paramètre énergétique qui caractérise les états de surface.

La densité d'états de surface est suffisamment grande lors de la formation du contact métal/semi-conducteur pour accueillir la charge résultant de l'établissement de l'équilibre, si bien que la barrière reste inchangée (Figure I.3.b).

$$q\phi_B = E_g - q\phi_0 \tag{I.2}$$

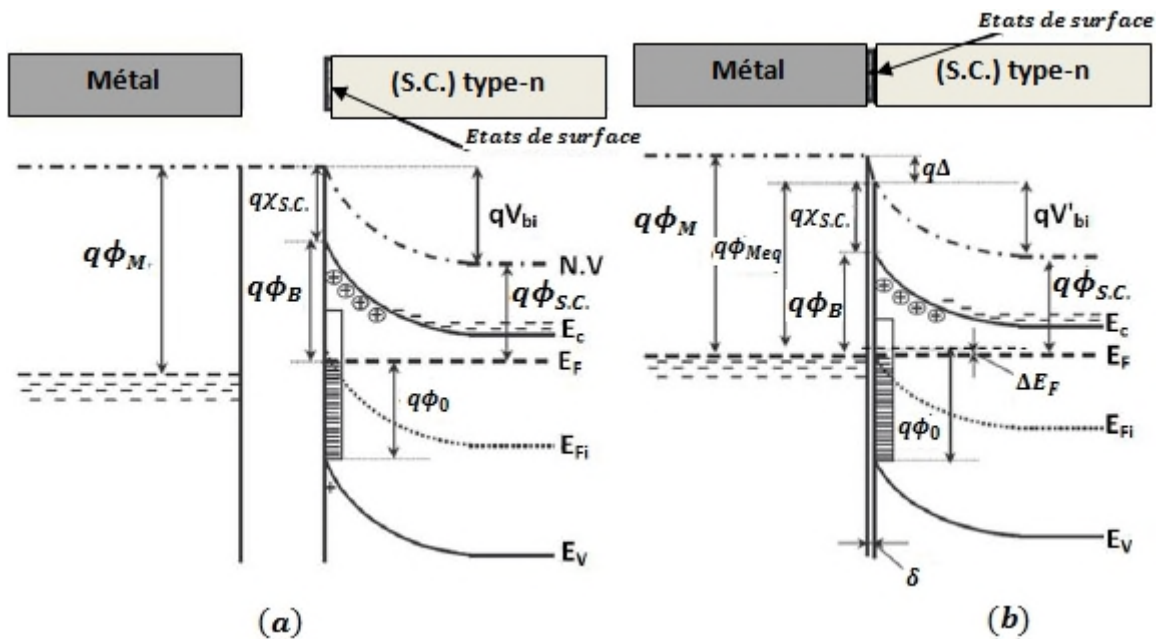


Figure I.3 : Diagramme énergétique à l'équilibre thermodynamique d'un métal et d'un semi-conducteur de type-n tel que ( $q\phi_M > q\phi_{S.C.}$ ): (a) avant contact et avec états de surface, (b) après contact et avec états de surface

[11,18].

**2.2.3 Modèle de Cowley et Sze**

En 1965 un modèle plus général établi par Cowley et Sze [15] ayant pour but de concilier les modèles de Schottky et Bardeen dont les expressions constituent les cas limites opposés. Ils ont posé les hypothèses de départ suivantes :

1. L'existence d'une couche inter-faciale de dimension atomique ( $5^{-10} \text{ \AA}$ ) entre le métal et le semi-conducteur. Cette couche est transparente aux électrons. Mais elle peut aussi supporter une différence de potentiel.
2. La densité d'états de surface est une propriété intrinsèque du semi-conducteur et indépendante du métal.

Des états d'interface extrinsèques créés par des défauts de structure ou d'impuretés peuvent s'ajouter à ces états intrinsèques. De ce fait les valeurs de  $(\phi_B)$ , pour ces types de contacts sont différentes de celles calculées par le modèle de Mott-Schottky.

Ce modèle décrit le transfert de charge à travers l'interface illustré dans le diagramme de bande de la Figure I.4. Pour une distribution continue de densité d'état constante ( $D_{it} (\frac{\text{états}}{\text{cm}^2} \cdot eV)$ ), caractérisée par un niveau neutre( $\phi_0$ ), la hauteur de barrière pour ce modèle dans le cas où le niveau de Fermi ( $E_F$ ) est au-dessus de  $(\phi_0)$  est de la forme :

$$\phi_B = S(\phi_M - \chi) + (1 - S) \left( \frac{E_g}{q} - \phi_0 \right) \tag{I.3}$$

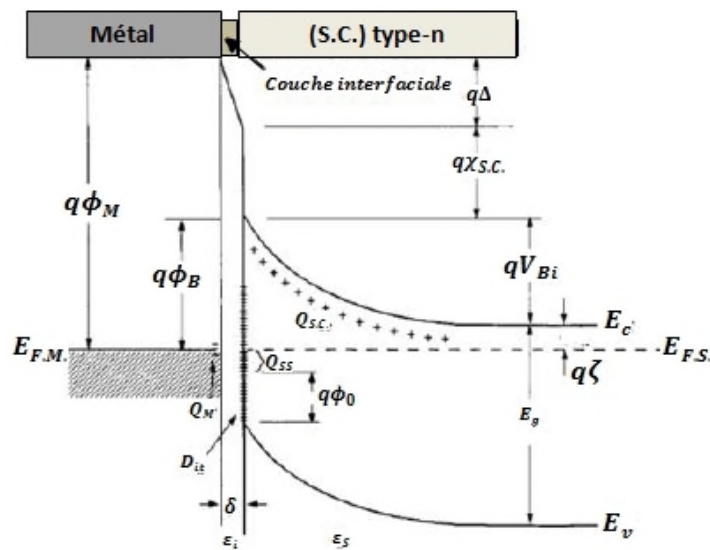


Figure I.4 : Diagramme énergétique des bandes dans un contact métal/semi-conducteur type-n dans le cas général [11].

$$\text{Avec: } \begin{cases} Q_{SS} : \text{densité de charge portée sur l'interface du semi-conducteur} \\ D_{it} : \text{densité d'états d'interface} \\ Q_{S.c.} : \text{densité de charge d'espace dans le semi-conducteur} \\ Q_M : \text{densité de charge surfacique dans le métal} \\ \Delta : \text{la chute de tension dans la couche interfaciale} \end{cases}$$

Le rapport (S) de la permittivité de l'interface sans et avec états de surface est donné par :

$$S = \frac{\partial \phi_B}{\partial \phi_M} = \frac{\epsilon_i}{\epsilon_i + q^2 \delta D_{it}} \quad (I.4)$$

$$\text{Avec: } \begin{cases} \epsilon_i : \text{constante diélectrique de la couche interfaciale} \\ \delta : \text{l'épaisseur} \\ D_{it} : \text{densité des états d'interface} \end{cases}$$

On se rend bien compte de l'importance des états d'interface puisque plus leur densité est élevée, plus S sera faible et inversement.

La hauteur de barrière de potentiel décrite par ce modèle, dépend toujours du travail de sortie du métal, de l'affinité électronique du semi-conducteur et aussi de la présence des états d'interface induits par le contact.

Les deux cas limites distingués sont :

- 1<sup>er</sup> cas : Si ( $D_{it}$ ) tend vers l'infini, donc il y'a beaucoup d'états d'interface, alors S tend vers zéro et la hauteur de barrière ne dépend plus du travail de sortie du métal, donc elle est déterminée par les propriétés de la surface du semi-conducteur (modèle de Bardeen).
- 2<sup>eme</sup> cas : Si ( $D_{it}$ ) tend vers zéro, donc il n'y'a pas d'états d'interface, alors S tend vers l'unité. Donc, la hauteur de barrière est donnée par la relation de Mott-Schottky.

La valeur de la barrière de potentiel est donc affectée par les différentes techniques de préparation de la surface du semi-conducteur.

### 2.3 Zone de charge d'espace

Comme le montre la Figure I.2, la courbure des bandes d'énergie se produit dans une zone d'énergie variant de ( $qV_{Bi}$ ), correspond au potentiel interne à l'équilibre thermodynamique. C'est cette barrière que doivent vaincre les électrons de la bande de conduction du semi-conducteur pour passer dans le métal.

Pour déterminer la zone de charge d'espace, nous utilisons l'équation de Poisson :

$$\frac{\partial^2 V}{\partial x^2} = -\frac{\rho}{\epsilon_{S.C.}} \quad (I.5)$$

Avec :  $\left\{ \begin{array}{l} \rho : \text{la densité de charge dans la zone de charge d'espace} \\ \epsilon_{S.C.} : \text{la permittivité absolue du semi - conducteur} \end{array} \right.$

Pour des contacts où le semi-conducteur est de type-n, sous l'approximation du contact abrupt ( $\rho \approx qN_D$  pour  $x < W$  et  $\rho \approx 0$ , le champ  $\xi \approx 0$  pour  $x > W$ ) on obtient [19] :

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

$$W = \sqrt{\frac{2\epsilon_{S.C.}}{qN_D} \left( V_{Bi} - \frac{KT}{q} \right)} \quad (I.6)$$

- Le champ électrique dans la zone de déplétion :

$$|\xi(x)| = \frac{qN_D}{\epsilon_{S.C.}} (W - x) = \xi_m - \frac{qN_D x}{\epsilon_{S.C.}} \quad (I.7)$$

- Le potentiel dans la zone de déplétion :

$$E_C(x) = q\phi_B - \frac{q^2 N_D}{\epsilon_{S.C.}} \left( Wx - \frac{x^2}{2} \right) \quad (I.8)$$

Lorsque la diode est polarisée par une tension ( $V$ ) la formule (I.6) devient :

$$W = \sqrt{\frac{2\epsilon_{S.C.}}{qN_D} \left( V_{Bi} - V - \frac{K_B T}{q} \right)} \quad (I.9)$$

- La densité de charge par unité de surface à l'équilibre thermodynamique est donnée par :

$$Q_{S.C.} = qN_D W = qN_D \sqrt{\frac{2\epsilon_{S.C.}}{qN_D} \left( V_{Bi} - V - \frac{K_B T}{q} \right)} \quad (I.10)$$

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

$$C = \left| \frac{\partial Q_{S.C.}}{\partial V} \right| = \sqrt{\frac{q\epsilon_{S.C.} N_D}{2(V_{Bi} - V - K_B T/q)}} \quad (I.11)$$

De l'expression (I.11), nous pouvons extraire la variation de l'inverse du carré de la capacité en fonction de la tension appliquée  $V$  :

$$\frac{1}{C^2} = \frac{2(V_{Bi} - V - K_B T/q)}{q \epsilon_{s.c.} N_D} \quad (I.12)$$

La pente de l'inverse du carré de la capacité en fonction de la tension de l'équation (I.12) est directement proportionnelle au dopage  $N_D$  (Figure I.5). En déterminant  $V_i$  par l'extrapolation de la droite à  $1/C^2 = 0$ , la hauteur de barrière est donc donnée par [20] :

$$\phi_B^{CV} = V_i + \zeta + \frac{K_B T}{q} \quad (I.13)$$

Avec :

$$\begin{cases} q\zeta : \text{la différence en énergie entre le niveau de Fermi du semi-conducteur} \\ \text{et le niveau bas de la bande de conduction} \\ N_c : \text{densité d'états électroniques dans la bande de conduction} \end{cases}$$

La valeur de  $(q\zeta)$  est donnée par :

$$q\zeta = K_B T \ln \frac{N_c}{N_D} \quad (I.14)$$

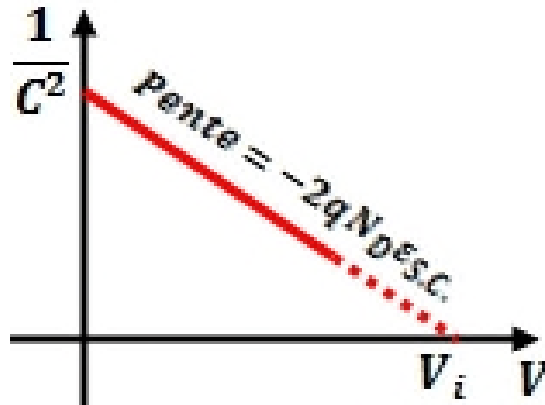


Figure I.5 : Variation du carré de l'inverse de la capacité en fonction de la tension [11].

## 2.4 Abaissement de la barrière, effet Schottky

La hauteur de la barrière  $\phi_B$  du côté métal n'est pas exactement constante mais un peu affectée par la tension appliquée. Un abaissement de  $\phi_B$  est observé à cause de l'effet miroir des charges produites dans le métal par les électrons dans le semi-conducteur. L'étude statistique montre que lorsqu'une charge est au voisinage d'un métal parfait, une charge

miroir de même nature mais de signe opposé est créé à l'intérieur du métal à une distance égale à la distance qui sépare la surface du conducteur de la charge initiale. Par conséquent, la charge du semi-conducteur est attirée par le métal ce qui abaisse la barrière de potentiel  $\phi_B$ . Cet abaissement de  $\phi_B$  est appelé l'effet Schottky défini par la formule suivante [21] :

$$\Delta\phi = \sqrt{\frac{q\xi}{4\pi\epsilon_0}} = 2\xi x_m \quad (I.15)$$

Avec :  $\left\{ \begin{array}{l} \Delta\phi : \text{l'abaissement de barrière} \\ x_m : \text{la distance maximale d'un électron face à un plan conducteur} \\ \xi : \text{le champ électrique} \end{array} \right.$

Si l'effet Schottky est pris en compte, la barrière  $q\phi_B$  est remplacée par la barrière effective  $q(\phi_B - \Delta\phi_B)$ .

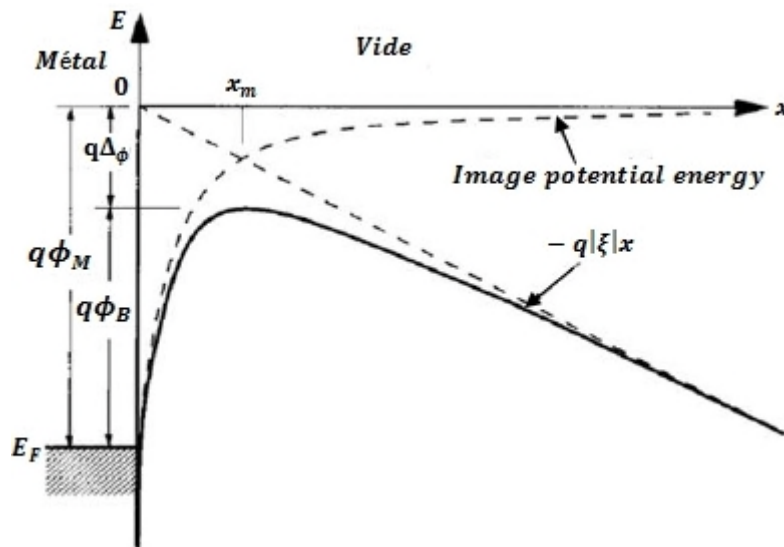


Figure I.6 : L'abaissement de la barrière Schottky par l'effet Schottky [11].

## 2.5 Mécanismes de transport du courant dans un contact métal/semi-conducteur en polarisation directe

Le courant dans la diode Schottky est essentiellement, du aux porteurs majoritaires. Le transport du courant dans une jonction métal/semi-conducteur, peut se faire selon les cinq mécanismes représentés à la Figure I.7 [22].

1. Passage d'électrons possédant une grande énergie (dits électrons chauds) du semi-conducteur dans le métal par-dessus la barrière. Deux modèles rendent compte du phénomène



: le modèle thermoïonique (dans les semi-conducteurs à grande mobilité) et le modèle de diffusion (dans les semi-conducteurs à faible mobilité).

2. Passage des électrons à travers la barrière par effet tunnel.
3. Génération-recombinaison dans la ZCE. En polarisation directe, ce mécanisme correspond à la recombinaison dans la ZCE d'un électron venant du semi-conducteur avec un trou venant du métal.
4. Injection de porteurs minoritaires. Un trou du métal se recombine avec un électron du semi-conducteur dans la zone quasi neutre du semi-conducteur.

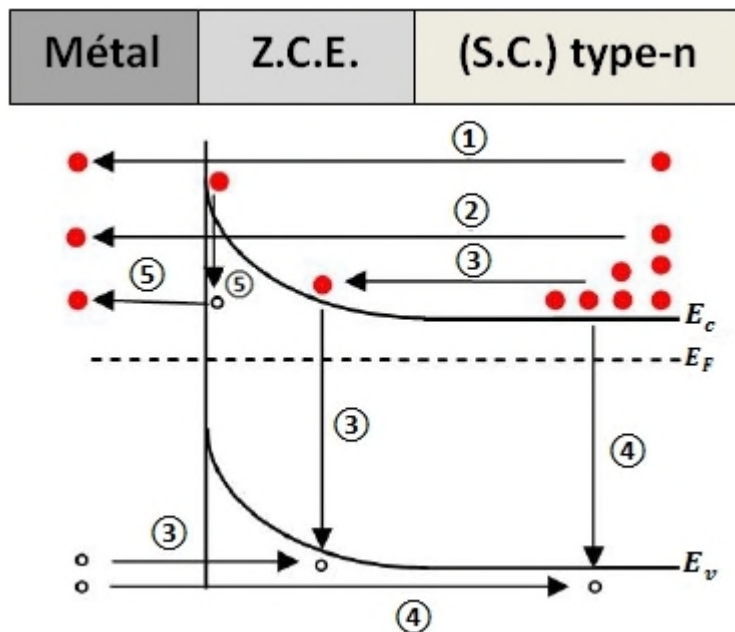


Figure I.7 : Modes de transport des électrons dans un contact métal/semi-conducteur type-n polarisé en direct [11].

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

- Lorsque le contact est redresseur, et pour des dopages faibles ( $< 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ ), le processus (1) est le plus important, car il définit le fonctionnement normal du contact métal/semi-conducteur, par contre les mécanismes (2), (3), (4), et (5) provoquent des déviations par rapport au comportement idéal [23].

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

### 2.5.1 Emission au-dessus de la barrière

Un flux d'électrons est émis au-dessus de la barrière en présence d'un champ électrique, il provient de l'intérieur du semi-conducteur pour se diriger vers l'interface par phénomène de déplacement et de diffusion. Leurs injections dans le métal à travers la barrière sont assimilées à celles des électrons émis dans le vide par une cathode chaude (cathode d'un tube) ; ceci est connu sous le nom de phénomène d'émission thermoïonique.

Ces deux phénomènes se superposent et permettent la création du courant normal de conduction.

#### 2.5.1.1 Théorie de l'émission thermoïonique

Cette théorie a été établie par Bethe [24]. Le courant dû à cet effet provient des électrons ayant une énergie supérieure à celle de la barrière de potentiel. Sa validité repose sur le respect des hypothèses suivantes [19] :

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

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

$$J = J_S \left( \exp\left(\frac{qV}{K_B T}\right) - 1 \right) \quad (I. 16)$$

$J_S$  est donnée par l'expression suivante :

$$J_S = A^* T^2 \exp\left(-\frac{q\phi_B}{K_B T}\right) \quad (I. 17)$$

$A^*$  est donnée par :

$$A^* = \frac{4\pi q m_e^* K_B^2}{h^3} \quad (I. 18)$$

Avec :

$$\left\{ \begin{array}{l} V : \text{la tension appliquée} \\ J_S : \text{densité de courant de saturation} \\ T : \text{la température} \\ \phi_B : \text{la hauteur de la barrière} \\ A^* : \text{constante de Richardson} \\ m_e^* : \text{masse effective de l'électron dans le semi - conducteur} \\ h : \text{constante de Planck} \end{array} \right.$$

La relation théorique (I.16) est souvent remplacée par une relation semi-empirique de la forme :

$$J = J_S \left( \exp\left(\frac{qV - R_S I}{nK_B T}\right) - 1 \right) \quad (I. 19)$$

Avec :

$$\left\{ \begin{array}{l} R_S : \text{la résistance série du contact} \\ n : \text{le facteur d'idéalité} \end{array} \right.$$

Le facteur d'idéalité  $n$  représente la conformité de la diode à une pure conduction thermoionique. Le facteur d'idéalité  $n$ , est généralement déterminé à partir de la pente de la partie linéaire du courant direct de la courbe  $\ln(I)=f(V)$ .

### 2.5.1.2 Théorie de la diffusion

C'est la première théorie de conduction dans la diode Schottky proposé par Wagner [25] et Schottky et Spenke [26]. La densité de courant d'électrons à travers la zone dépeuplée est donnée par la somme de la composante de courant de déplacement (ou conduction) et celle du courant de diffusion moyennant les hypothèses suivantes [19] :

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

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

$$J = J_D \left( \exp \left( \frac{qV}{K_B T} \right) - 1 \right) \quad (I.20)$$

La densité de courant de saturation  $J_D$  est donnée par :

$$J_D = qN_c \mu_n \left( \frac{2qN_D(V_{Bi} - V)}{\epsilon_S} \right)^{\frac{1}{2}} \exp \left( \frac{-q\phi_B}{K_B T} \right) \quad (I.21)$$

Avec :

$$\begin{cases} J_D : \text{densité de courant de saturation} \\ \mu_n : \text{mobilité des électrons} \\ V_{Bi} : \text{potentiel de diffusion} \\ N_c : \text{densité d'état des électrons dans la bande de conduction} \\ N_D : \text{concentration des atomes donneurs} \end{cases}$$

### 2.5.1.3 Théorie mixte, thermoïonique-diffusion

Ce phénomène de diffusion et de l'émission thermoïonique été présentée par Crowell et Sze en 1966 [27]. Dans ce cas, la conduction est contrôlée à la fois par l'interface et le volume ; la variation du niveau de Fermi est mixte, c'est à dire varie dans la zone de charge d'espace et présente une discontinuité à l'interface comme représenté à la Figure I.8.

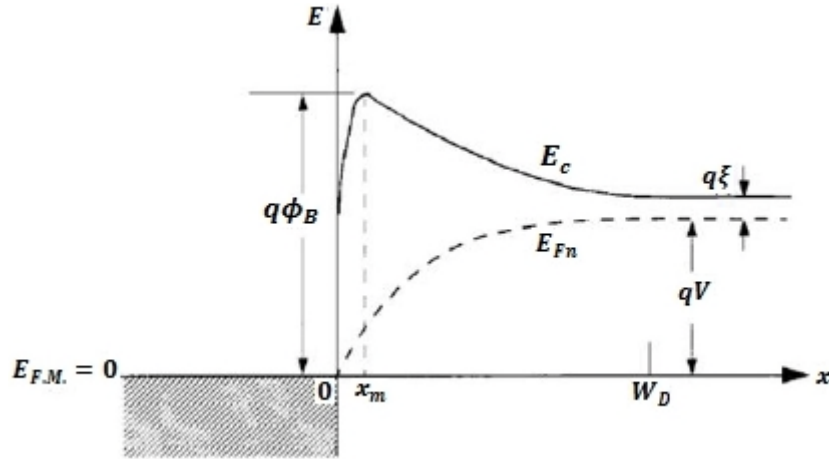


Figure I.8 : Variation du niveau de Fermi dans le cas d'une conduction mixte ; variation dans la zone de charge d'espace et discontinuité à l'interface [11].

La densité de courant thermoïonique-diffusion est donnée par :

$$J_{TED} = \frac{qN_c v_R}{1 + \frac{v_R}{v_d}} \exp \left( -\frac{q\phi_B}{KT} \right) \left[ \exp \left( \frac{qV}{KT} \right) - 1 \right] \quad (I.22)$$

$v_R$  est donnée par :

$$v_R = \frac{A^* T^2}{q N_C} \quad (I.23)$$

$v_d$  est donnée par :

$$v_d \approx \mu_n \xi_m \quad (I.24)$$

Avec:

$\left\{ \begin{array}{l} v_R : \text{vitesse de recombinaison près de l'interface métal/semi - conducteur ou le potentiel est maximum} \\ v_d : \text{vitesse effective de diffusion des électrons} \end{array} \right.$

De l'équation (I.22) on distingue deux cas :

1. Si  $v_d \gg v_R$ , le courant thermoïnique-diffusion est un courant d'émission thermoïnique ( $J_{TED} = J_{TE}$ ).

2. Si  $v_d \ll v_R$ , le courant thermoïnique-diffusion est un courant de diffusion ( $J_{TED} = J_D$ ).

Si on prend en considération les réflexions quantiques à la barrière, les interactions électron phonon, l'effet de force image et la probabilité de transition à travers la barrière, la densité de courant peut se mettre sous la forme [19] :

$$J = A^{**} \exp\left(-\frac{q\phi_B}{KT}\right) \left[ \exp\left(\frac{qV}{KT}\right) - 1 \right] \quad (I.25)$$

$A^{**}$  est donnée par :

$$A^{**} = \frac{A^* f_P f_Q}{1 + f_P f_Q v_R / v_d} \quad (I.26)$$

Avec :

$\left\{ \begin{array}{l} A^{**} : \text{constante de Richardson modifiée dont la valeur tient compte de ces différents phénomènes} \\ f_P : \text{la probabilité d'émission d'électrons à travers le potentiel maximum} \\ f_Q : \text{tient compte de la réflexion quantique à la barrière} \end{array} \right.$

## 2.5.2 Courant par effet tunnel

Il existe deux modes de transport par effet tunnel à travers la barrière Schottky (Figure I.9).

1. émission thermoïonique assistée par effet de champ (TFE) qui dépend de la température.
2. émission par effet de champ (FE) qui dépend du dopage, prédomine dans le comportement électrique des contacts ohmiques sur substrats fortement dopés. Ce type du courant a lieu seulement dans les semi-conducteurs dégénérés [23].

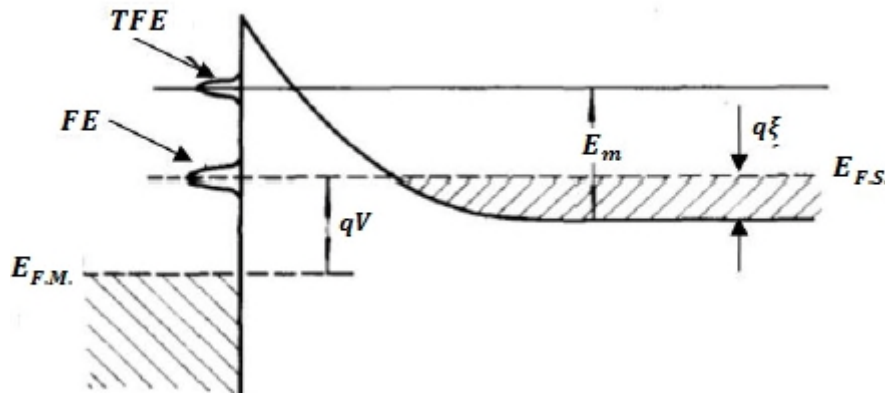


Figure I.9 : Emission thermoïonique assistée par effet de champ (TFE) et émission de champ (FE) en polarisation directe [11, 28].

### 2.5.2.1 Courant d'émission par effet de champ (FE)

Dans le cas d'un semi-conducteur dégénéré (fortement dopé), à basses températures, où la densité des donneurs est très grande, et la barrière est fine, la zone de déplétion devient étroite et les électrons la traversent avec un minimum d'énergie (proches du niveau Fermi). Le transit des charges s'effectue par transmission tunnel au niveau du bas de la barrière.

La densité de courant direct transitant par effet de champ à travers la barrière s'écrit [19, 28] :

$$J = J_S \exp\left(\frac{qV}{E_{00}}\right) \quad (I.27)$$

$E_{00}$  est donnée par :

$$E_{00} = \frac{q\hbar}{2} \sqrt{\frac{N_D}{m_e^* \epsilon_S}} \quad (I.28)$$

Avec  $E_{00}$  :

*l'énergie caractéristique du semiconducteur relative à la probabilité de transmission par effet tunnel*

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

Quand la température augmente, les électrons de la bande de conduction sont excités à des énergies supérieures à  $K_B T/q$  et voient alors une barrière plus fine : leur probabilité de transit est alors plus importante. Et comme la concentration en électrons excités décroît exponentiellement avec l'énergie, il apparait une valeur de l'énergie  $E_m$  pour laquelle la transmission est maximale. C'est l'effet d'émission thermoïonique assisté par effet de champ. Son expression est de la forme :

$$J_{TFE} = J'_S \exp\left(\frac{-q\zeta}{K_B T} - \frac{q(\phi_B - \zeta)}{E_0}\right) \exp\left(\frac{qV_R}{E_0}\right) \quad (I.29)$$

D'ou :

$$E_0 = E_{00} \coth\left(\frac{E_{00}}{K_B T}\right) \quad (I.30)$$

Le rapport  $\left(\frac{E_{00}}{K_B T}\right)$  à température donnée permet de déterminer le mécanisme majoritaire d'injection du courant [29].

- Pour  $\left(\frac{E_{00}}{K_B T} \ll 1\right)$ , l'émission thermoïonique (TE) est prépondérante.
- Pour  $\left(\frac{E_{00}}{K_B T} \gg 1\right)$  c'est l'émission par effet de champs (FE) qui domine.
- lorsque  $(E_{00} \approx K_B T)$  c'est l'émission thermoïonique assistée par effet de champ (TFE) qui domine et se combine avec (TE) et (FE).

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

Yu et Snow [30], ont démontrés l'importance de processus de recombinaison dans la région de déplétion dans une diode Schottky. Les densités de courant dues à la recombinaison de type Shockley-Read sont généralement simulées via un niveau situé au milieu de gap est approximativement donnée par :

$$J_{Rec} = J_r e^{\frac{qV}{2K_B T}} \quad (I.31)$$

D'où :

$$J_r = \frac{qn_i W}{\tau} \quad (I.32)$$

Avec :  $\left\{ \begin{array}{l} n_i : \text{concentration intrinsèque} \\ W : \text{largeur de la zone de déplétion} \\ \tau : \text{durée de vie des électrons dans la zone de déplétion} \end{array} \right.$

La composante de recombinaison est probablement relativement plus importante dans les grandes hauteurs de barrière, les matériaux qui ont une faible durée de vie, et dans les basses tensions et températures [29].

En fait, bien souvent le courant de recombinaison non identifiable se superpose au courant thermoïonique ( $J = J_t + J_{Rec}$ ), est responsable de la valeur élevée de facteur d'idéalité  $n$  [31].

#### 2.5.4 Injection des minoritaires

Dans le cas d'un semi-conducteur type-n, la conduction des minoritaires est due aux trous. L'injection des trous sous polarisation directe dans la diode Schottky formée par les semi-conducteurs type-n a été considérée théoriquement par Scharfetter [32].

La densité de courant des trous est donnée par [19] :

$$J_P = \frac{\mu_p n_i^2 J_n^2}{\mu_n N_D^2 J_{n0}} + \frac{q D_p n_i^2}{N_D L} \exp \left[ \left( \frac{qV}{K_B T} \right) - 1 \right] \quad (I.33)$$

Le rapport de l'injection est alors :

$$\gamma = \frac{J_P}{J_P + J_n} \approx \frac{J_P}{J_n} \approx \frac{\mu_p n_i^2 J_n}{\mu_n N_D^2 J_{n0}} + \frac{q D_p n_i^2}{N_D L J_{n0}} \quad (I.34)$$

Avec :

$\left\{ \begin{array}{l} (\mu_n; \mu_p) : \text{les mobilités des électrons et des trous respectivement} \\ (D_p; L_p) : \text{la constante et la longueur de diffusion des trous respectivement} \\ (J_{n0}; J_n) : \text{densité de courant de saturation et densité de courant des électrons respectivement} \\ \text{données par la théorie thermionique} \end{array} \right.$

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



## 2.6 Courant en polarisation inverse

La polarisation inverse de la diode Schottky possède aussi quatre mécanismes de transport qui donnent le courant inverse (courant de fuite), (Figure I.10) [33] :

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

Dans le cas de la diode Schottky, l'émission thermoïonique et l'émission thermoïonique assistée par effet de champ sont prépondérantes [34]. L'effet de surface et les défauts peuvent produire un courant de fuite qui s'ajoute à ces quatre mécanismes de transports [35].

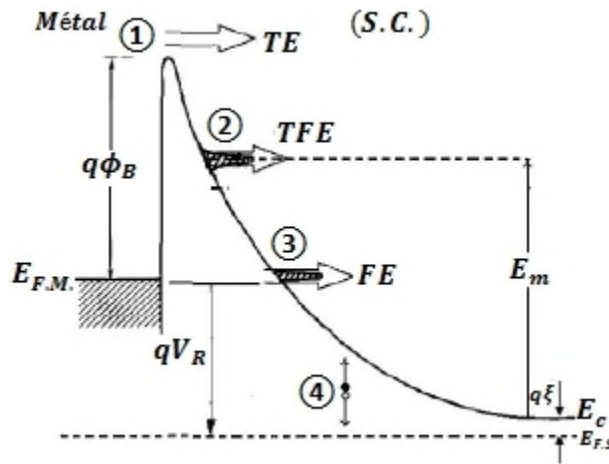


Figure I.10 : Mécanismes de transport des charges à travers une barrière Schottky en polarisation inverse [11].

La densité de courant total  $J$  qui traverse la diode Schottky en polarisation inverse est donnée par la différence entre le courant qui passe du semi-conducteur vers le métal  $J_{SM}$  et le courant passant du métal vers le semi-conducteur  $J_{MS}$  [36] :

$$J = J_{SM} - J_{MS} = \frac{qm^*}{2\pi^2\hbar^3} \int_{E_{min}}^{\infty} T(E_x) \left[ \int_0^{\infty} (f_m(E) - f_s(E)) dE_{II} \right] dE_x \quad (I.35)$$

Avec :  $\begin{cases} T(E_x) : \text{coefficient de transmission} \\ f_s(E) : \text{fonction de probabilité d'occupation dans le semi-conducteur} \\ f_m(E) : \text{fonction de probabilité d'occupation dans le métal} \end{cases}$

$f_s(E)$  et  $f_m(E)$  sont données respectivement par [37] :

$$f_s(E) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{qV_{Bi} - E + q\zeta - qV}{K_B T}\right)} \quad (\text{I.36})$$

Et :

$$f_m(E) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{qV_{Bi} - E + q\zeta}{K_B T}\right)} \quad (\text{I.37})$$

Avec :

$$\left\{ \begin{array}{l} q\zeta : \text{la différence en énergie entre le niveau de Fermi du semiconducteur et le niveau bas de la BC} \\ V_{Bi} : \text{potentiel de diffusion} \\ E : \text{l'énergie cinétique totale est décomposée en deux } (E_x ; E_{II}) \\ E_x : \text{énergie perpendiculaire au plan de la barrière Schottky} \\ E_{II} : \text{énergie parallèle} \end{array} \right.$$

L'équation (I.35) contient deux mécanismes de transport selon les bornes de l'intégrale. En effet, lorsque l'énergie de la particule est supérieure à la barrière Schottky, on est dans le cas de l'émission thermoïonique, et quand c'est l'inverse on est dans le cas de l'effet tunnel.

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

Prépondérant aux faibles tensions. L'émission des charges est fortement dépendante de la température, et la densité de courant peut se déduire à partir de l'équation (I.35) en intégrant sur des énergies supérieures à la barrière Schottky et en mettant  $T(E_x) = 1$  [36] :

$$J_S = A^* T^2 \exp\left(\frac{-q\phi_B}{K_B T}\right) \quad (\text{I.38})$$

$$\text{Avec : } \left\{ \begin{array}{l} A^* : \text{constante de Richardson} \\ K_B : \text{constante de Boltzmann} \\ T : \text{température absolue} \end{array} \right.$$

L'équation (I.38) ne prend pas en compte l'effet Schottky, à savoir la diminution de la hauteur de la barrière causée par l'effet de force image en présence d'un champ électrique. Tenant compte de cet effet, l'équation devient :

$$J_S = A^* T^2 \exp\left(\frac{-q(\phi_B - \Delta\phi)}{K_B T}\right) \quad (\text{I.39})$$

Avec :  $\Delta\phi$  est l'abaissement de barrière de potentiel donné par la formule [38] :

$$\Delta\phi = \left[ \frac{q^3 N_D}{8\pi^2 \epsilon_S^3} (\phi_B - \zeta + V_R) \right]^{\frac{1}{4}} \quad (I.40)$$

## 2.6.2 Courant tunnel

Caractérisé par le passage des porteurs à travers la barrière par effets quanto-mécaniques lorsque leur énergie n'est pas suffisante, et lorsque la barrière est suffisamment mince. En effet, lorsque le dopage du semi-conducteur augmente, la courbure de la bande à l'interface s'accroît, et la largeur de la zone de déplétion diminue, ce qui facilite le passage des électrons à travers la barrière.

### 2.6.2.1 Formules de Padovani et Stratton

Une solution analytique approchée de l'équation (I.35) a été donnée par Padovani et Stratton [28] sans prendre en considération l'effet de la force image ; deux modes de transport peuvent exister :

#### a)- l'émission par effet de champ ou effet tunnel pur (FE)

Seulement dans les semi-conducteurs fortement dopés ou dégénérés et à basses températures et le passage est proche de l'énergie de Fermi du métal, (Figure I.10).

La densité de courant d'émission par effet de champ (FE) est donnée par [28,19] :

$$J_{FE} = A^* \left( \frac{E_{00}}{K_B} \right)^2 \left( \frac{\phi_B + V_R}{\phi_B} \right) \exp \left( - \frac{2q\phi_B^{3/2}}{3E_{00}\sqrt{\phi_B + V_R}} \right) \quad (I.41)$$

#### b)- l'émission thermoïonique assistée par effet de champ (TFE)

Elle concerne les porteurs chauds franchissant le sommet de la barrière par effet tunnel.

La densité de courant d'émission thermoïonique assistée par effet de champ (TFE) est donnée par [28, 19] :

$$J_{TFE} = \frac{A^* T}{K_B} \sqrt{\pi E_{00} q \left( V_R + \frac{\phi_B}{\cosh^2(E_{00}/K_B T)} \right)} \exp \left( - \frac{q\phi_B}{E_0} \right) \exp \left( \frac{qV_R}{\epsilon'} \right) \quad (I.42)$$

Avec :

$$\varepsilon' = \frac{E_{00}}{(E_{00}/K_B T) - \tanh(E_{00}/K_B T)} \quad (I.43)$$

La validité de l'expression de la densité de courant est restreinte (limité) à des tensions de polarisation et des températures vérifiant les conditions :

$$V_R > \phi_B + \frac{3E_{00} \cosh^2(E_{00}/K_B T)}{2q \sinh^3(E_{00}/K_B T)} \quad (I.44)$$

Et :

$$K_B T > \frac{E_{00} \sqrt{\phi_B + V_R}}{\sqrt{\phi_B}} \quad (I.45)$$

### 2.6.2.2 Formule de Tsu et Esaki

L'équation du courant (I.35) a été développée par Tsu et Esaki [39] d'une façon plus simple, et presque la plus utilisée pour la description du courant tunnel.

En supposant que  $T(E)$  ne dépend que de  $E_x$  et en intégrant  $f_m$  et  $f_s$ , le courant tunnel total est donné par l'équation [39], [40, 41] :

$$J_{tun} = \frac{A^* T}{K_B} \int_{E_{min}}^{U_{max}} T(E_x) N(E_x) dE_x \quad (I.46)$$

$N(E_x)$  est la fonction d'offre (supply function) qui reflète la différence dans les nombres d'occupation sur les deux côtés des barrières tunnel [42] définie par :

$$N(E_x) = \int_0^{\infty} (f_m(E) - f_s(E)) dE_{II} = \ln \left( \frac{1 + \exp(-q\zeta - E_x)/K_B T}{1 + \exp(-q\zeta - qV - E_x)/K_B T} \right) \quad (I.47)$$

Avec :  $\left\{ \begin{array}{l} E_{min} : \text{l'énergie minimale pour laquelle l'effet tunnel se produit} \\ E_{max} : \text{l'énergie maximale du profil de la barrière de potentiel considéré} \\ V : \text{tension appliquée aux bornes de la jonction} \\ T : \text{la température} \end{array} \right.$

### 3 La structure Métal/Oxyde/Semi-conducteur MIS

#### 3.1 Introduction

L'interface entre un métal et un semi-conducteur peut être vue comme une diode Schottky. La structure métal/isolant/semi-conducteur MIS est une structure très répandue en micro-électronique et en électronique de puissance car elle constitue une partie fondamentale du transistor (Figure I.11). L'épaisseur des oxydes de ce type de structure peut varier de quelques centaines de nanomètres jusqu'à quelques nanomètres.

On peut réaliser une structure MIS grâce aux trois étapes suivantes :

- Croissance d'une couche diélectrique à la surface d'un semi-conducteur.
- Dépôt d'une électrode métallique, dite grille à la surface diélectrique.

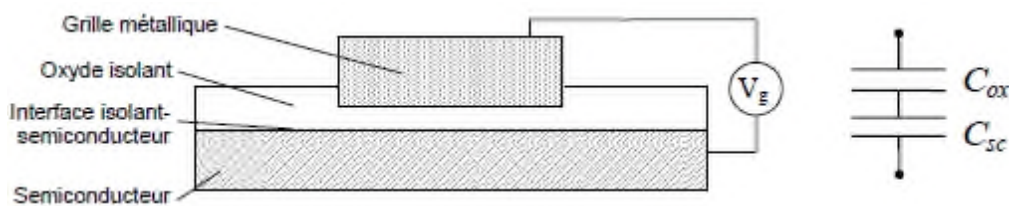


Figure I.11 : Structure métal/isolant/semi-conducteur [43].

La capacité électrique équivalente de la structure correspond à la capacité de l'oxyde  $C_{ox}$  en série avec la capacité créée à l'interface isolant/semi-conducteur  $C_{sc}$ . Elle s'écrit :

$$\frac{1}{C} = \frac{1}{C_{ox}} + \frac{1}{C_{s.c.}} \quad (I.48)$$

#### 3.2 Diagramme de bandes d'énergie

Le diagramme de bande de la structure MIS doit prendre en compte les niveaux de Fermi de chaque matériau, ainsi que l'effet du champ électrique sur les porteurs dans le semi-conducteur. Nous verrons que la charge dans le semi-conducteur dépend de la densité de porteurs libres, qui est associée à la variation du niveau de Fermi dans la bande interdite, lui-même associé au potentiel de surface du semi-conducteur  $V_s$ .

Dans un condensateur, nous pouvons donc écrire :

$$Q_m = -Q_{s.c.} \tag{I.49}$$

Avec :  $\begin{cases} Q_m : \text{la quantité de charge dans le métal} \\ Q_{s.c.} : \text{la quantité de charge dans le semi-conducteur} \end{cases}$

### 3.3 Influence des travaux de sortie

Considérons une structure MIS avec un semi-conducteur de type-n, dont le travail de sortie  $e\phi_{s.c.}$  est inférieur à celui du métal  $e\phi_m$  (Figure I.12).

En effet, pour  $(e\phi_{s.c.} < e\phi_m)$  il y a une déplétion des électrons à l'interface isolant/semi-conducteur de type-n en court-circuit. Inversement, si  $(e\phi_{s.c.} > e\phi_m)$  il y a une accumulation d'électrons à l'interface isolant/semi-conducteur de type-n (même raisonnement pour un semi-conducteur de type-p) [43].

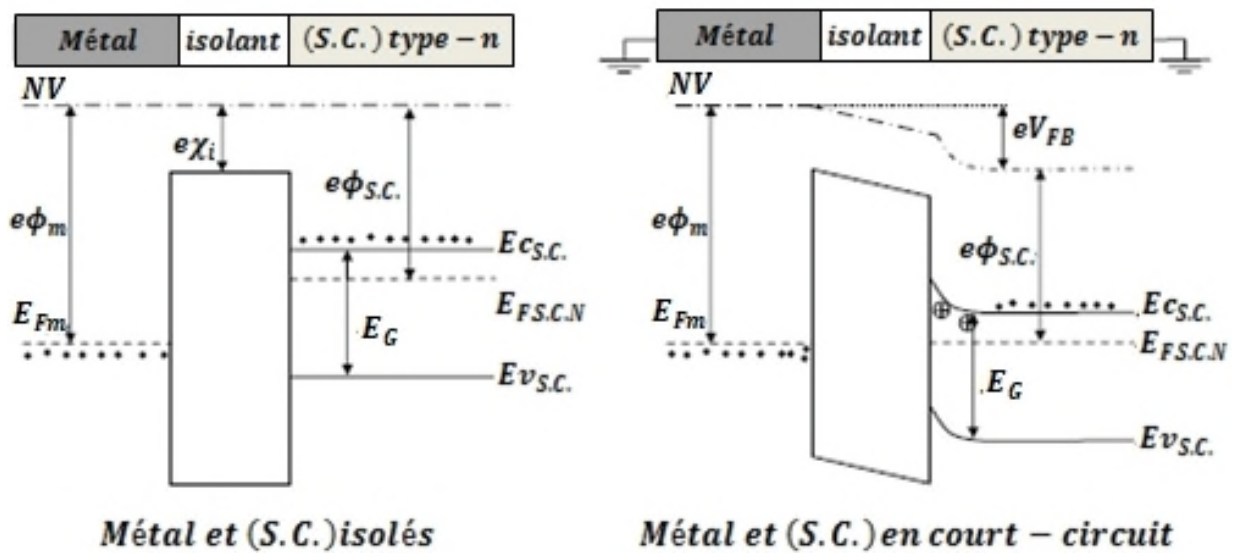


Figure I.12 : Diagramme de bandes d'énergie d'une structure MIS sur Substrat de type-n pour  $(e\phi_{s.c.} < e\phi_m)$  [43].

L'état de la densité des porteurs à l'interface isolant/semi-conducteur pour les deux types de semi-conducteur et pour chaque cas est présenté dans le Tableau I.1.

	<b>MIS sur substrat N</b>	<b>MIS sur substrat P</b>
$(e\phi_{S.C.} < e\phi_m)$	<b>Déplétion d'électrons</b> ( $Q_{S.C.} > 0$ )	<b>Accumulation de trous</b> ( $Q_{S.C.} > 0$ )
$(e\phi_{S.C.} > e\phi_m)$	<b>Accumulation d'électrons</b> ( $Q_{S.C.} < 0$ )	<b>Déplétion de trous</b> ( $Q_{S.C.} < 0$ )

Tableau I.1 : Etat de l'interface isolant/semi-conducteur dans une structure MIS en court-circuit [43].

La tension de bandes plates  $V_{FB}$  c'est la tension de grille  $V_g$  à appliquer à la structure pour que les bandes d'énergie soient plates (pas de chute de potentiel entre l'interface et le volume du semi-conducteur), donc le potentiel de surface  $V_s$  est nul.

Si l'isolant est parfait, la tension de bandes plates correspond alors à la différence des travaux de sortie :

$$V_{FB} = \phi_{m.s.} = \phi_m - \phi_{S.C.} \quad (I.50)$$

Le travail de sortie pour chaque semi-conducteur donné par :

$$\begin{cases} e\phi_m = NV - E_{Fm} \\ e\phi_{S.C.} = NV - E_F \\ e\chi = NV - E_C \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \phi_{S.C.N} = \chi + \frac{E_g}{2e} - \phi_{Fi} \\ \phi_{S.C.P} = \chi + \frac{E_g}{2e} + \phi_{Fi} \end{cases} \quad (I.51)$$

Le potentiel  $\phi_{Fi}$  est défini par :

$$\begin{cases} e\phi_{Fi} = E_F - E_{Fi} \end{cases} \Rightarrow \phi_{Fi} = \frac{E_F - E_{Fi}}{e} \quad (I.52)$$

### 3.4 Régimes de fonctionnement

Quatre régimes de fonctionnement (l'accumulation, la déplétion, l'inversion et la forte inversion) apparaissent lorsqu'une différence de potentiels  $V_g$  est appliquée entre la grille et le substrat d'une structure MIS.

Le potentiel de grille  $V_g$  se décompose alors en une somme de différences de potentiels (Figure I.13) :

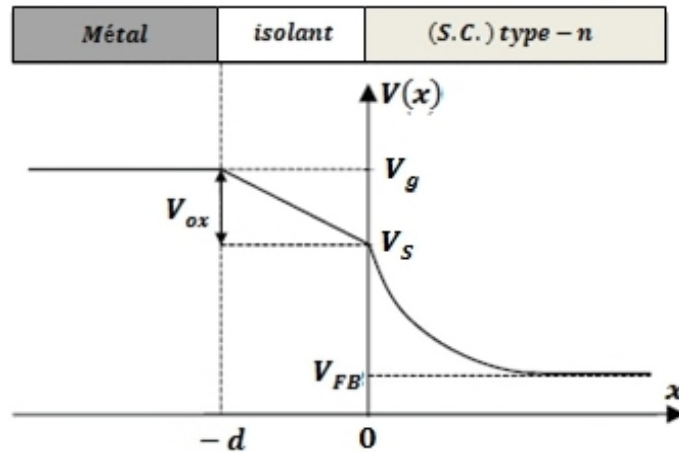


Figure I.13 : Potentiels dans une structure MIS en déplétion [43].

Le potentiel de grille dans une structure MIS est donc la somme des potentiels :

$$V_g = V_{ox} + V_S + V_{FB} \quad (\text{I.53})$$

Où :

$$\left\{ \begin{array}{l} (V_{ox} = V_g - V_S) \text{ est la différence de potentiels supportée par l'oxyde d'épaisseur } d \\ (V_S) \text{ est le potentiel de surface (différence de potentiels entre le substrat et l'interface isolant/semi-conducteur)} \\ (V_{FB}) \text{ est la tension de bandes plates} \end{array} \right.$$

### 3.4.1 Régime d'accumulation

Les porteurs majoritaires sont attirés vers l'interface isolant/semi-conducteur : une accumulation de porteurs majoritaires se forme à cette interface. C'est le régime d'accumulation.

Pour les semi-conducteur dont les porteurs majoritaires sont les électrons (semi-conducteur de type-n), le régime d'accumulation apparaît pour ( $V_g > V_{FB}$ ). De même pour les semi-conducteurs dont les porteurs majoritaires sont les trous (semi-conducteur de type-p), le régime d'accumulation apparaît pour ( $V_g < V_{FB}$ ).

La Figure I.14 montre les diagrammes de bandes d'énergie, la répartition de la charge et du champ électrique dans une structure MIS sur substrat de type-n et dans une structure MIS sur substrat de type-p en régime d'accumulation.



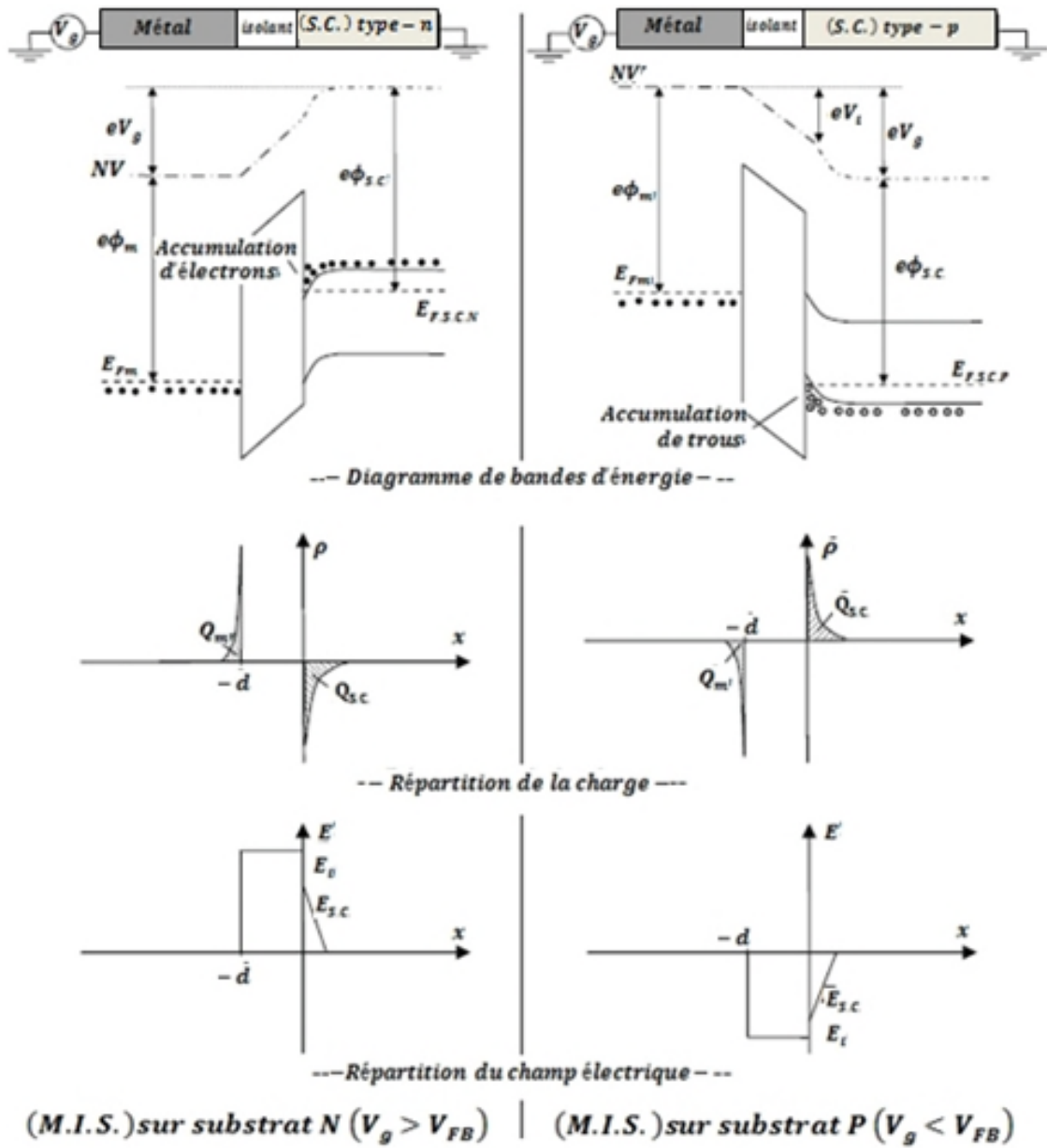


Figure I.14 : Structures MIS idéales en régime d'accumulation [43].

Comme dans un condensateur, la charge accumulée dans le substrat est égale à la charge accumulée sur la grille :

$$Q_m = -Q_{S.C.} = \frac{\epsilon_{ox}}{d} V_g [C \cdot m^{-2}] \tag{I.54}$$

Avec :  $\left\{ \begin{array}{l} \epsilon_{ox} : \text{la permittivité diélectrique de l'oxyde} \\ d : \text{l'épaisseur de l'oxyde.} \end{array} \right.$

Etant donné que les porteurs sont accumulés à l'interface isolant/semi-conducteur, dans une première approximation, la capacité de l'interface peut être négligeable et la capacité équivalente de la structure s'écrit alors (I.48) :

$$\frac{1}{C} = \frac{1}{C_{ox}} \tag{I.55}$$

### 3.4.2 Régime de bandes plates

Lorsque le potentiel de surface à l'interface isolant/semi-conducteur est nul ( $V_S = 0$ ), c'est le régime de bandes plates.

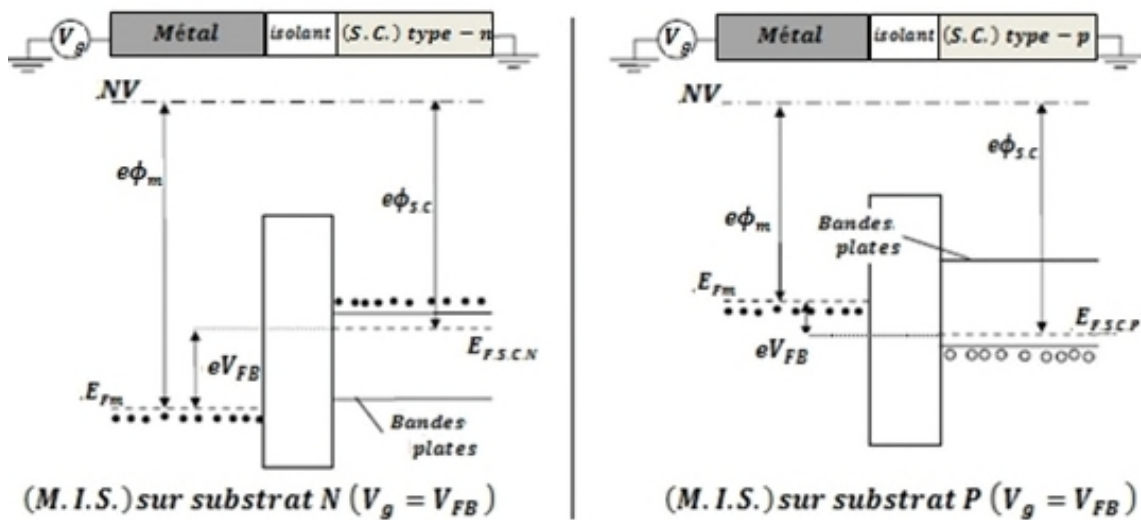


Figure I.15 : Structures MIS idéales en régime de bandes plates [43].

Dans le modèle idéal, il n'y a pas de charges dans l'isolant donc la chute de potentiel est nulle dans l'isolant ( $V_i = 0$ ). La tension de grille définie à l'équation (I.53) correspond donc à la tension de bandes plates (I.50):

$$|V_g| = |V_{FB}| = |\phi_{ms}| = |\phi_m - \phi_{SC}| \tag{I.56}$$

Cependant on peut définir la capacité de bandes plates par :

$$\frac{1}{C_{FB}} = \frac{1}{C_{ox}} + \frac{L_D}{\epsilon_{S.C.} S} \tag{I.57}$$

Avec :  $\left\{ \begin{array}{l} S : \text{la surface de grille} \\ \epsilon_{S.C.} : \text{la permittivité diélectrique du semi-conducteur} \\ L_D : \text{longueur de Debye} \end{array} \right.$

La longueur de Debye  $L_D$ , correspondant à la longueur de diffusion des porteurs due à la discontinuité causée par l'interface [44] :

$$L_D = \sqrt{\frac{\epsilon_{S.C.} K T}{e^2 N}} \quad (I. 58)$$

### 3.4.3 Régime de déplétion

En polarisant au-delà de  $V_{FB}$ , les porteurs majoritaires sont repoussés de l'interface isolant/semi-conducteur par influence. Il apparaît alors une zone de charge d'espace ZCE d'épaisseur  $W$  dans le semi-conducteur. Il y a une déplétion des porteurs majoritaires à l'interface isolant/semi-conducteur, c'est le régime de déplétion.

La Figure I.16 présente le diagramme de bandes d'énergie, la répartition de la charge et la répartition du champ électrique dans une structure MIS idéale sur substrat de type-n et dans une structure MIS idéale sur substrat de type-p en régime de déplétion.

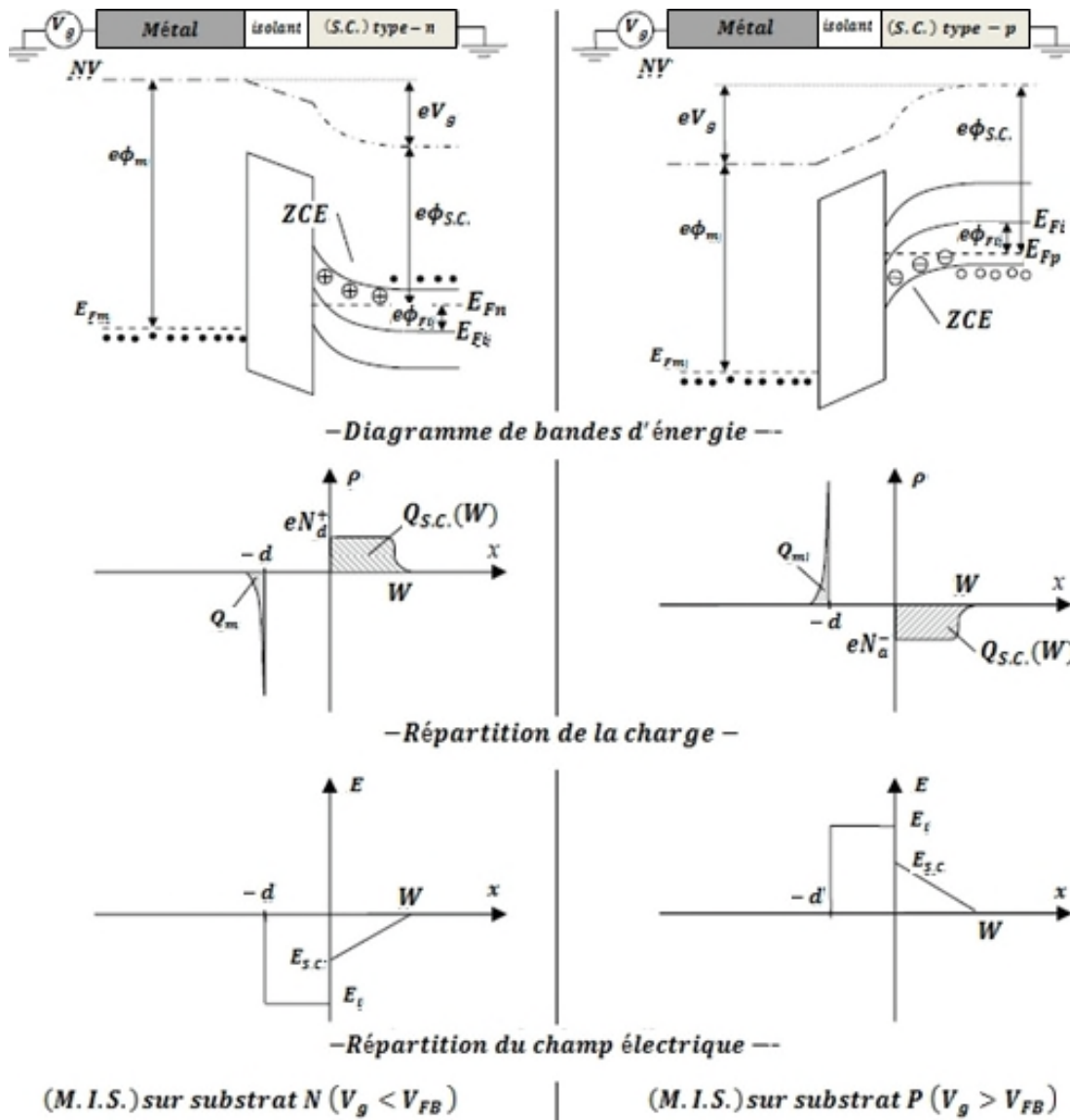


Figure I.16 : Structures MIS idéales en régime de déplétion [43].

La ZCE créée à l'interface comprend une charge  $Q_{s.c}$  qui provient des dopants du semi-conducteur. La répartition des dopants étant considérée comme homogène, la répartition de la charge dans la ZCE est considérée constante dans tout le semi-conducteur. La quantité de charge dans le semi-conducteur en régime de déplétion est donnée par :

$$Q_{s.c.}(W) = -eN W \tag{I.59}$$

Avec :  $\begin{cases} N : \text{la concentration des dopants dans le semi-conducteur} \\ W : \text{l'épaisseur de la ZCE.} \end{cases}$

En régime de déplétion, la ZCE est assimilable à une capacité  $C_{sc}(W)$  à l'interface isolant/semi-conducteur, qui varie en fonction de  $W$ . La capacité équivalente de la structure (I.48) s'écrit alors :

$$\frac{1}{C} = \frac{1}{C_{ox}} + \frac{1}{C_{S.C.}(W)} \quad (I.60)$$

La charge totale de la zone désertée devient donc maximale lorsque la ZCE est maximum.

La valeur maximale de la ZCE vaut alors [44] :

$$W_{max} = \sqrt{\frac{2\varepsilon_{S.C.}}{eN} 2\phi_{Fi}} \quad (I.61)$$

Avec :  $\left\{ \begin{array}{l} \varepsilon_{S.C.} : \text{ la permittivité diélectrique du semi - conducteur} \\ \phi_{Fi} : \text{ est donné par l'équation (I.52)} \end{array} \right.$

Nous définirons alors la quantité de charge maximale dans la ZCE due aux dopants du semi-conducteur par (I.59):

$$Q_W = -eN W_{max} \quad (I.62)$$

### 3.4.4 Régime d'inversion et de forte inversion

Appliquons une tension fortement négative, elle a pour effet d'attirer les porteurs minoritaires vers la surface du semi-conducteur, la densité de ces trous sur une mince couche à la surface du semi-conducteur deviendra alors supérieure à la densité des électrons, on dit qu'il y a formation d'une couche d'inversion à la surface, on dira qu'il y a une forte inversion si le potentiel de surface  $V_S$  est égal à  $2\phi_{Fi}$  (Figure I.17).

La Figure I.17 présente le diagramme de bandes d'énergie, la répartition de la charge et la répartition du champ électrique dans une structure MIS idéale sur substrat de type-n et dans une structure MIS idéale sur substrat de type-p en régime d'inversion.

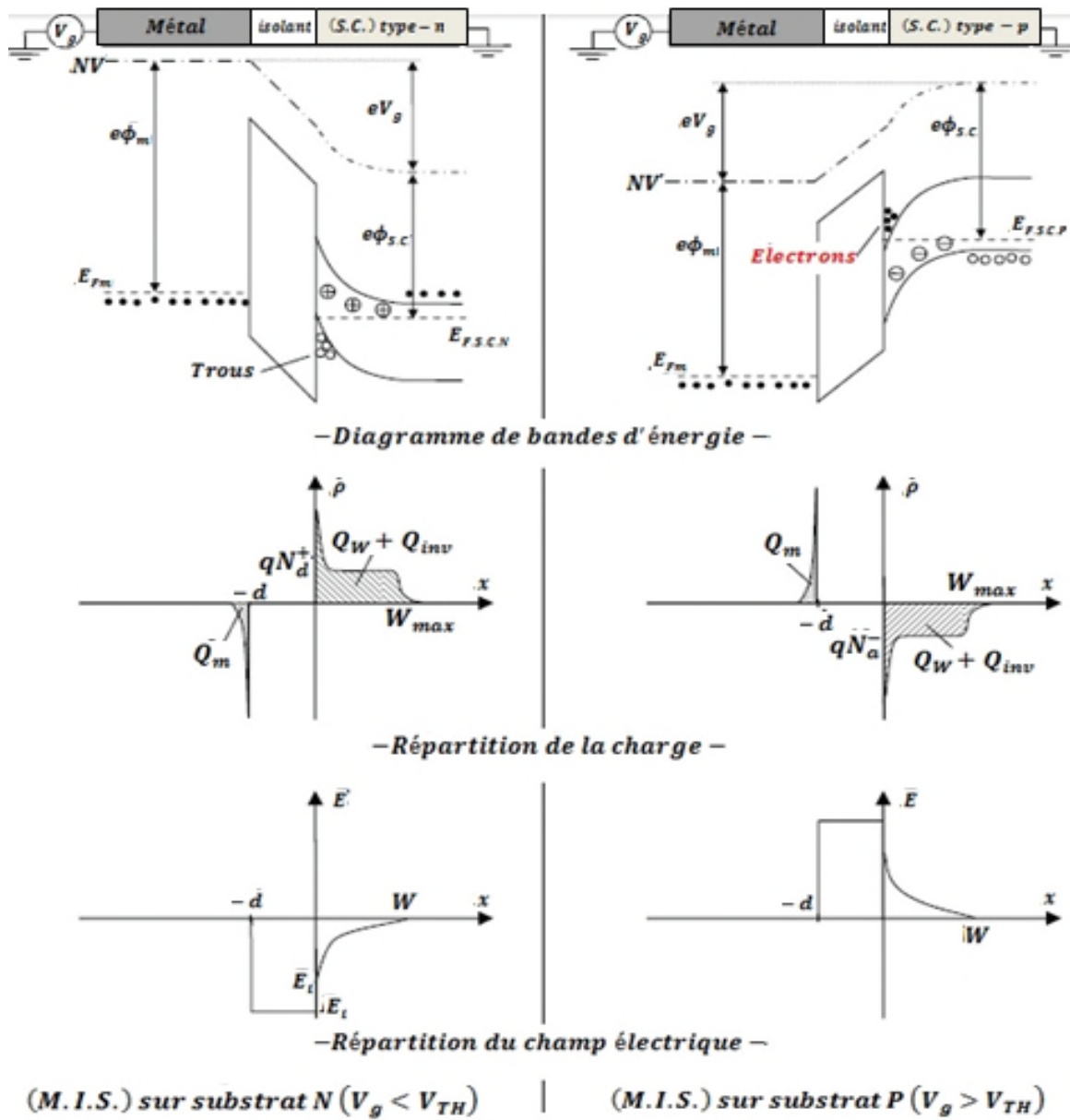


Figure I.17 : Structures MIS idéales en régime d'inversion [43].

En régime d'inversion, la charge dans le semi-conducteur est la somme des charges issues des dopants du semi-conducteur  $Q_W$  (I.62) dans la ZCE et des porteurs minoritaires accumulés à l'interface isolant/semi-conducteur  $Q_{inv}$ .

$$Q_{s.c.} = Q_W + Q_{inv} \tag{I.63}$$

On a :

$$C_{s.c.} = -\frac{dQ_{s.c.}}{dV_s} = -\frac{dQ_W}{dV_s} - \frac{dQ_{inv}}{dV_s} \tag{I.64}$$

$$\text{Avec : } \begin{cases} Q_W = -eN W \\ C_W = -\frac{dQ_W}{dV_S} \end{cases} \quad (\text{I. 65})$$

La capacité de l'interface  $C_{sc}$  est maximale en régime d'inversion, car la ZCE est maximale  $W = W_{\max}$  de (I.61). La capacité totale de la structure (I.48) s'écrit alors (Figure I.18):

$$\frac{1}{C} = \frac{1}{C_{ox}} + \frac{1}{C_W + C_{inv}} \quad (\text{I. 66})$$

Avec :

$$\begin{cases} C_{ox} : \text{la capacité de l'oxyde} \\ C_W : \text{la capacité due à la ZCE} \\ C_{inv} : \text{capacité due aux porteurs minoritaires accumulés à l'interface isolant/semiconducteur} \end{cases}$$

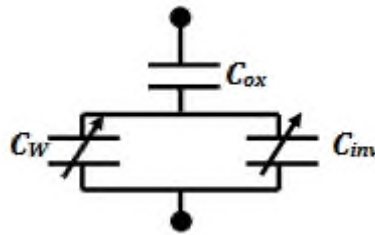


Figure I.18 : Schéma équivalent de la structure MIS [43].

***Chapitre 2*** **LES PRINCIPALES**  
**PROPRIÉTÉS PHYSIQUES ET**  
**ÉLECTRIQUES DES MATÉRIAUX Au,**  
**TiO<sub>2</sub>, et GaAs**



## 1 Généralités sur l'or

L'Or, meilleur marché, étudié depuis des siècles qui possède des propriétés uniques, meilleure conductivité, peu altérable, permettant la cuisson dans l'air, seul métal avec le cuivre possédant des bandes d'absorption dans le visible, excellente résistance à l'oxydation, excellente stabilité des nanoparticules même nues. Il a l'inconvénient majeur d'être assez soluble à la soudure. C'est un métal particulièrement riche en électrons de conduction.

Les métaux nobles, tels que l'or, présentent un confinement de leurs électrons de conduction conduisant à la création d'une onde dipolaire appelée plasmon pouvant rentrer en résonance avec le champ électrique oscillant d'un rayonnement lumineux incident. La résonance plasmonique entraîne la création d'un champ électrique de forte intensité aux alentours de la nanoparticule métallique.

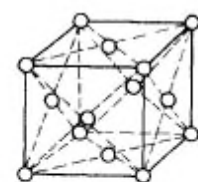
Les nanoparticules d'or présentent une section efficace d'absorption jusqu'à 100 fois supérieure à leur dimension et leur absorption d'un photon permet l'injection d'un électron au sein du semi-conducteur sur lequel elles sont déposées.

Les nanoparticules de métal noble permettent à la fois d'agir comme piège à électron, de diffuser la lumière à travers le matériau et de faciliter la formation de paires électron-trou dans le semi-conducteur environnant grâce au champ électrique créé par effet plasmon [45, 46].

L'utilisation de nanoparticules de métal nobles présentant un effet plasmon permet en plus de sensibiliser le semi-conducteur. En effet, ces nanoparticules peuvent absorber efficacement la lumière et générer des paires excitoniques dissociées à l'interface avec le semi-conducteur, piéger des électrons et servir de sites réactionnels [47, 48].

## 1.1 Propriétés des nanoparticules d'or

Propriétés de l'or (Au)	Valeurs correspondantes	Unités correspondantes
Conductivité thermique (K)	3.0	W/cm°C
Travail de sortie ( $e\phi_m$ )	4.8	eV



Structure cristalline de l'or (Au)

(a)

Tableau II.1 : quelques propriétés de l'or (Au) et sa structure cristalline (Figure (a)) [49].

Les propriétés des nanoparticules d'or commencent à différer de celles de l'or massif lorsqu'on descend à des tailles inférieures à 20 nm.

L'uniformité de taille, la chimie de surface particulière des nanoparticules d'or et leurs interactions spécifiques avec les champs électriques sont utilisées en nano électronique.

Les nanoparticules d'or ont aussi de nombreuses applications en physique, elles peuvent par exemple servir de connecteurs dans des circuits électroniques nanométriques, et de nano-transistor mono-électronique.

Bien qu'il ait été constaté de meilleures intensités de courant pour les systèmes employant l'or.

La présence de nanoparticules métalliques peut aussi modifier l'état de surface du semi-conducteur, provoquant la formation de pièges à électrons et de sites de recombinaison préférentiels [50].

## 2 Généralités sur le dioxyde de Titane (TiO<sub>2</sub>)

Le marché des nano-poudres de TiO<sub>2</sub> était estimé à 360 millions de dollars en 2009 avec une croissance prévue à 1,5 milliards de dollars en 2017.

Les oxydes métalliques tels que SiO<sub>2</sub>, ZnO ou TiO<sub>2</sub> sont les nanomatériaux les plus utilisés dans le marché des produits nanotechnologies après l'argent et le carbone, suite à leur intérêt particulier dans le secteur des hautes technologies.

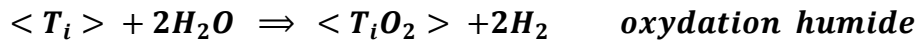
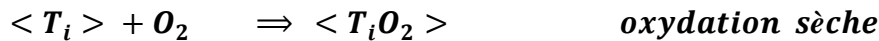
Le dioxyde de titane TiO<sub>2</sub> est le matériau semi-conducteur le plus utilisé en Photo-détections pour ses propriétés optiques. Il se présente sous différentes phases cristallines : brookite, anatase et rutile.

La pureté de la phase cristalline du matériau et son état de surface influent sur la conduction électronique et le temps de vie des électrons excités au sein du matériau.

La structure de bande et l'état de surface de ce matériau lui permettent d'avoir des propriétés optiques, et électriques particulièrement intéressantes. La présentation de ces différentes caractéristiques est illustrée par les applications des nanoparticules de dioxyde de titane.

## 2.1 Propriétés physico-chimiques et structure cristalline du TiO<sub>2</sub>

Le dioxyde du titane peut s'obtenir par deux types d'oxydations à s'avoir l'oxydation sèche et l'oxydation humide :



Le dioxyde de titane est un semi-conducteur qui existe sous différentes formes allotropiques [51]. L'oxyde TiO<sub>2</sub> appartient à la grande famille des oxydes (Ti<sub>n</sub>O<sub>2n-1</sub>) qui sont décrits comme ayant une structure cristalline déformée de type (CS).

Le dioxyde de titane TiO<sub>2</sub> existe sous plusieurs formes dont les trois principales sont l'anatase, le rutile et la brookite. Leurs structures cristallographiques sont représentées sur la Figure II.1, et le Tableau II.2 résume les données cristallographiques de ces trois phases.

Pour ajouter à cette complexité, le TiO<sub>2</sub> peut accepter les formes non stœchiométriques de type (TiO<sub>2-x</sub>) ou (TiO<sub>2+x</sub>) [52]. L'oxyde de TiO<sub>2</sub> peut se trouver à l'état solide, dans deux états : amorphe ou cristallin. La phase rutile est la phase haute température de l'oxyde de titane TiO<sub>2</sub>. Elle est thermodynamiquement stable.

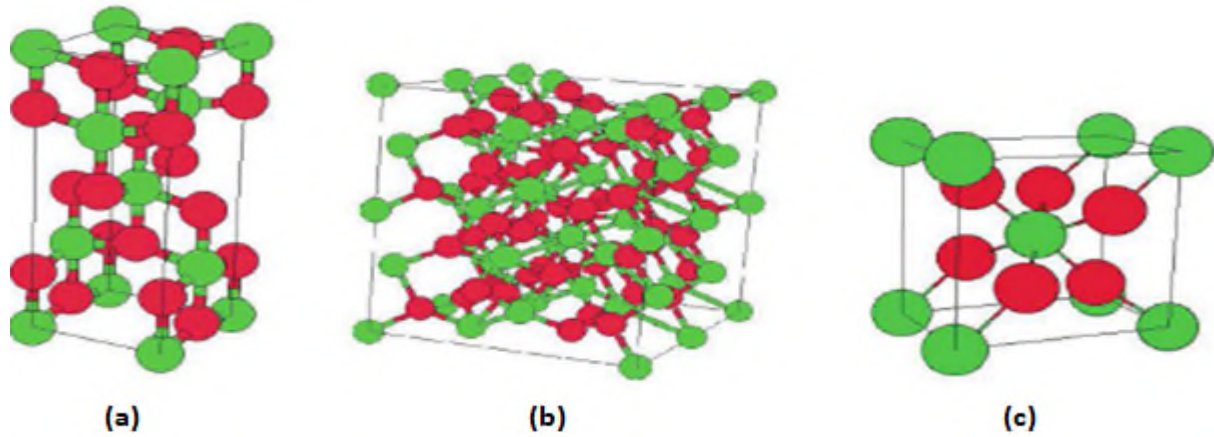


Figure II.1 : Structures cristallographiques de TiO<sub>2</sub> : (a) anatase, (b) brookite, (c) rutile. En vert Ti<sup>4+</sup> et en rouge O<sup>2-</sup> [53].

Seuls l’anatase et le rutile présentent actuellement un intérêt technologique industriel. Ces deux phases sont tétraogonales. Dans les deux structures, l’atome de titane est entouré de six atomes d’oxygène et chaque atome d’oxygène est entouré de trois atomes de titane.

Pour l’anatase, la coordination des octaèdres est moins compacte, et chacun n’est connecté qu’à huit voisins. Le rutile est donc la plus dense avec une masse volumique de (4,25 g/cm<sup>3</sup>) alors que celle de l’anatase est de (3,89 g/cm<sup>3</sup>), et celle de la brookite est de (4,12 g/cm<sup>3</sup>) [54].

	Anatase	Rutile	Brookite
<b>Structure</b>	Tétragonale	Tétragonale	Orthorhombique
<b>Groupe d'espace</b>	$I \frac{4_1}{a} md$	$P \frac{4_2}{m} nm$	$Pbca$
<b>Paramètres de maille (nm)</b>	$\begin{cases} a = 0.37852 \\ c = 0.95139 \end{cases}$	$\begin{cases} a = 0.45930 \\ c = 0.29590 \end{cases}$	$\begin{cases} a = 0.54558 \\ b = 0.91819 \\ c = 0.51429 \end{cases}$
<b>Z</b>	4	2	8

Tableau II.2 : Données cristallographiques des phases anatase, rutile et brookite du dioxyde de titane [53].

## 2.2 Les défauts existants dans le TiO<sub>2</sub>

Les conditions de croissance de l'oxyde (la qualité de surface sur laquelle l'oxyde croit), et les traitements subis par la structure tel que les traitements thermiques, et les contraintes mécaniques, sont des sources d'apparition des défauts.

### 2.2.1 Les défauts intrinsèques

Les défauts intrinsèques sont des imperfections qui perturbent la périodicité du réseau, c'est des défauts ponctuels ou complexes. Ces défauts sont dus à la présence d'un atome du réseau entre les atomes (des interstitiels) ou à la place d'un atome du réseau (des substitutions). Aussi à des lacunes (d'oxygène ou de titane) venants des liaisons pendantes [53].

### 2.2.2 Les défauts extrinsèques

Les défauts extrinsèques sont liés à la présence d'atomes étrangers dans l'oxyde et qui peuvent se combiner avec le réseau en plusieurs manières. Ces impuretés pénètrent dans l'oxyde selon plusieurs processus :

Soit : durant l'oxydation thermique, si ces impuretés sont déjà présentes dans le substrat ou bien durant les étapes qui suivent la croissance ou la déposition de l'oxyde.

## 2.3 Propriétés électriques du TiO<sub>2</sub>

Les défauts ont une grande influence sur le transport de charge dans le dioxyde de titane TiO<sub>2</sub> parce qu'ils servent de pièges à électrons [55]. Parmi les défauts les plus couramment rencontrés, on peut citer :

- lacunes d'oxygène  $V_O$
- lacunes métalliques  $V_{Ti}$
- atome interstitiel
- électron  $Ti^{3+}$
- trous  $O^-$

Ces défauts engendrent des niveaux énergétiques dans la bande interdite comme nous le montrons à la Figure II.2.

Le TiO<sub>2</sub> présente principalement des lacunes en oxygène créant ainsi un niveau donneur dans la bande interdite et expliquant ainsi le fait qu'il est considéré comme un semi-conducteur de type -n [55].

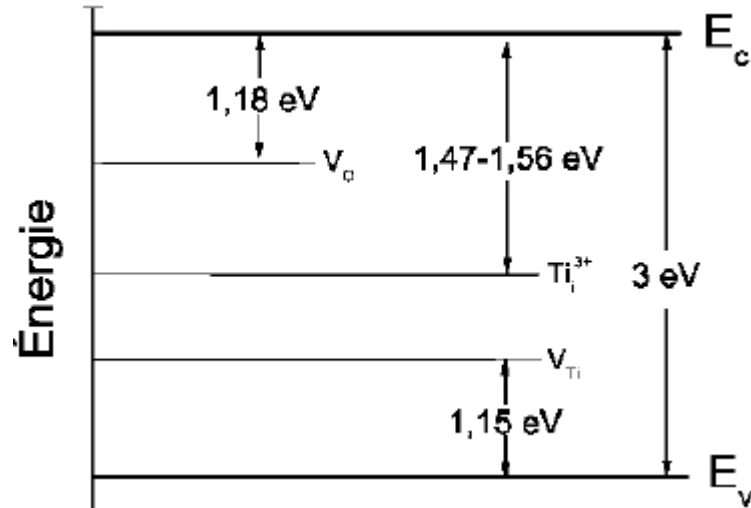


Figure II.2 : Diagramme d'énergie correspondant aux principaux défauts rencontrés dans les différentes structures du TiO<sub>2</sub> [55].

## 2.3.1 Comportements électriques des défauts

### 2.3.1.1 Niveau d'énergie

Quand la périodicité du réseau est perdue par la présence des défauts, des niveaux d'énergie supplémentaires apparaissent à l'intérieur de la bande interdite du TiO<sub>2</sub> [56].

### 2.3.1.2 Notion de piège

Un défaut est électriquement actif, et peut se comporter comme :

Lieu de piégeage, s'il capture un porteur de la bande de conduction ou de valence et le réémet vers la même bande, ou comme lieu de recombinaison, s'il peut échanger des porteurs avec les bandes de conduction ou de valence [57].

### 2.3.1.3 Notion de section de capture

C'est la facilité avec laquelle un défaut peut capturer un porteur, notée ( $\sigma$  en [cm<sup>2</sup>]). Elle varie en fonction de la température et du champ appliqué [58].

### 2.3.2 Différents types de charges dans l'oxyde

On distingue quatre types de charges dans l'oxyde : la charge fixe, la charge piégée, la charge mobile ionique, la charge des états d'interface [59].

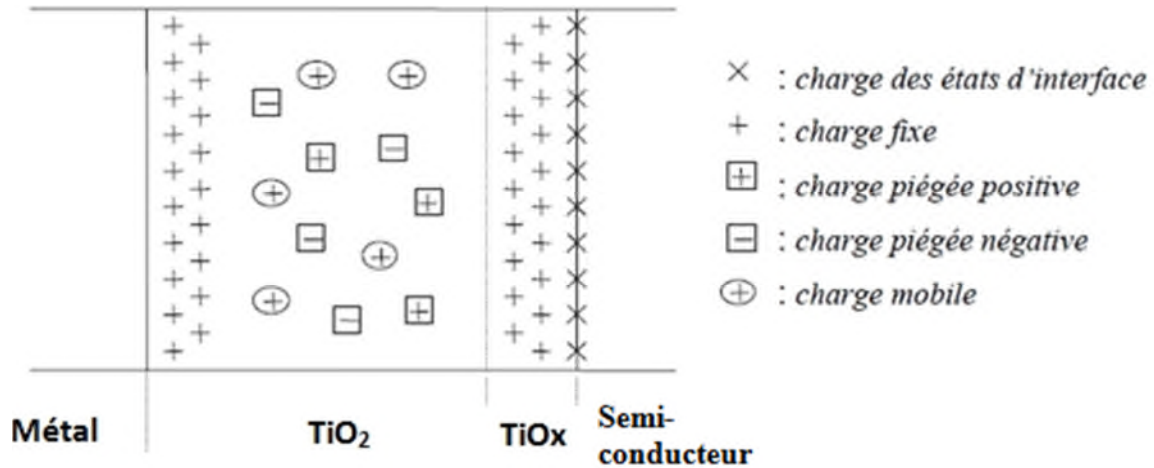


Figure II.3 : Les types de charges dans l'oxyde et leur localisation [60].

#### 2.3.2.1 La charge fixe

C'est une charge positive localisée très près des interfaces (semi-conducteur/TiO<sub>2</sub>).

#### 2.3.2.2 La charge piégée

C'est une charge qui peut être positive ou négative stockée par les pièges du volume de l'oxyde.

#### 2.3.2.3 La charge mobile ionique

Elle est due à la contamination de l'oxyde par des impuretés ioniques.

#### 2.3.2.4 La charge piégée des états d'interface

C'est une charge piégée par les défauts (états d'interface) résultant de la discontinuité du réseau à l'interface (semi-conducteur/TiO<sub>2</sub>). Ces défauts rentrent en communication électrique directe avec le semi-conducteur.

### 2.3.3 Propriétés de transport dans l'oxyde

L'injection et le transport de porteurs à partir des interfaces reste possible pendant le fonctionnement du dispositif pour des épaisseurs faible de l'oxyde.

### 2.3.4 Différentes types de conduction dans l'oxyde

Lors de l'injection de porteurs dans l'oxyde, trois importantes types de conduction qui parvient :

#### 2.3.4.1 La conduction thermoïonique :

Aura lieu lorsque l'énergie de l'électron est supérieure à la hauteur de la barrière, donc le porteur (dit chaud) pénètre dans l'oxyde en surmontant la barrière.

#### 2.3.4.2 La conduction tunnel directe :

Si la tension appliquée à l'oxyde ne dépasse pas la hauteur de la barrière, et l'épaisseur de l'oxyde est petite, l'électron peut passer directement sous faible champ électrique.

#### 2.3.4.3 La conduction par saut (Hopping conduction) :

La conduction s'effectue d'un site à l'autre par effet tunnel local seulement si l'énergie de l'électron est inférieure au maximum de la hauteur de barrière énergétique entre deux pièges [61].

## 3 Généralités sur l'Arséniure de Gallium (GaAs)

Comme on le sait, l'arséniure de gallium est l'un des semi-conducteur avantageux pour la grande mobilité des porteurs de charge, il appartient à la famille des éléments (III-V) possédant une grande mobilité électronique (six fois plus élevée que celle se Silicium) et une durée de vie de l'ordre de la nanoseconde, utilisées comme matériaux de base pour la réalisation des composants électronique rapides en hyperfréquences, optoélectroniques, circuits logiques et capteurs de gaz. Ses caractéristiques remarquables, lui permettant d'être l'intérêt majeur de nombreuses applications en nanotechnologie.



### 3.1 Structure cristalline du GaAs

La structure cristallographique (réseau + motif) de GaAs est de type Zinc blende (le réseau réciproque associé à cette structure et cubique centré) constituée de deux sous réseaux cubique à face centrées (CFC) avec différents types d'atomes entre les sous réseaux (l'un d'éléments Galium (Ga) du groupe III et l'autre d'élément Arséniure (As) du groupe V) décalé l'un par rapport à l'autre de (1/4) de la grande diagonale (voir Figure II.3.a). La maille élémentaire contient deux atomes, l'un en (0 0 0) c'est le (As) et l'autre à la position (a/4 a/4 a/4) pour (Ga), ou 'a' est le paramètre de la maille du matériau. La première zone de Brillouin du réseau réciproque à la forme d'octaèdre tronqué par les six faces d'un cube (Figure II.3.b).

Le minimum de la bande de conduction est situé en (k=0) au point (Γ) . Il est par conséquent unique. Les surfaces d'énergie constante au voisinage du minimum sont des sphères centrées au point (Γ) (Figure II.3.c). On dit que le GaAs est un semi-conducteur uni-vallée [62].

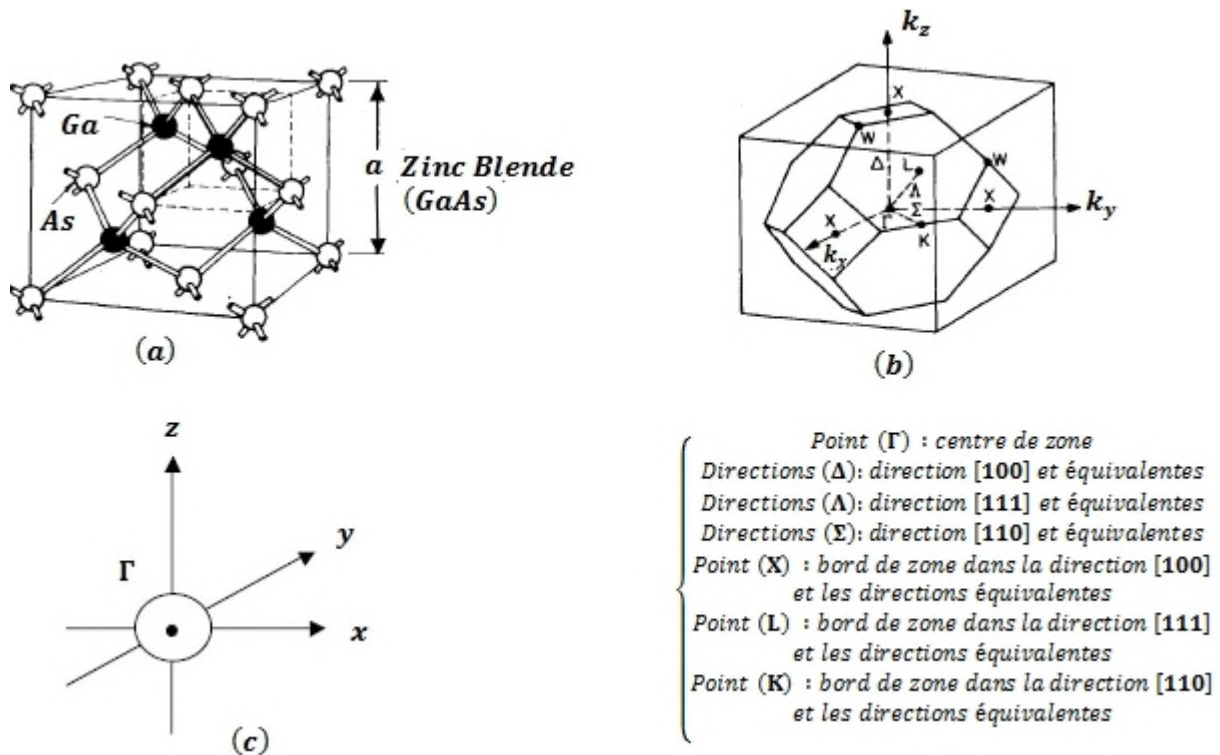


Figure II.4 : (a) Structure cristalline du GaAs, (b) La première zone de Brillouin d'un cristal cubique, (c) la surface d'énergie constante de bande de conduction de GaAs [49, 63].

### 3.1.1 Structure de bande d'énergie du GaAs

Sa structure de bande lui confère des propriétés électroniques importantes en optoélectronique et à la réalisation des circuits très rapides (il se prête mieux que le Silicium).

La Figure II.4 illustre les états d'énergie possibles des électrons dans le cas du semi-conducteur GaAs en fonction de leur vecteur d'onde ( $\vec{k}$ ) dans les directions les plus symétriques de la première zone de Brillouin. Comme la structure de bande de l'arséniure de gallium est assez complexe (unique), le minimum de la bande de conduction est situé en ( $K=0$ ) au point ( $\Gamma$ ) et les surfaces d'énergie constantes au voisinage de ce point sont des sphères centrées, l'étude des propriétés de conduction de GaAs impose la compréhension de sa structure de bande.

Le GaAs est un semi-conducteur à gap direct ayant une énergie de gap  $E_g$  égale à 1.43 eV à 300°K et égale à 1.52 eV à 400°K, sachant que le minimum de la bande de conduction correspond à des électrons de faible masse effective (très mobiles), et le vecteur d'onde ( $\vec{k}$ ) est conservé lors de la transition des électrons de la bande de valence BV vers la bande de conduction BC.

Les différentes propriétés physiques et électriques de GaAs à température ambiante (300°K) sont données dans le Tableau II.3:

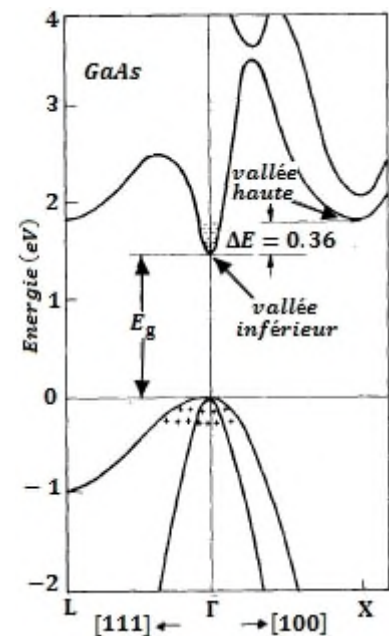


Figure II.5 : Structure de bande électronique de GaAs [49].

Les propriétés de {GaAs} à 300°K (en ordre alphabétique)	Les valeurs correspondantes	Unité
Affinité électronique { $e\chi$ }	4.07	eV
Champ électrique de saturation	10	Kv/cm
Champ de claquage { $E_c$ }	$0.4 \cdot 10^6$	V/cm
Conductivité thermique {K}	0.45	W/cm.K
Constante diélectrique relative { $\epsilon_r$ }	10.9 – 11.5	/
Densité d'états dans la (B.C.) { $N_c$ }	$5 \cdot 10^{17}$	cm <sup>-3</sup>
Densité d'états dans la (B.V.) { $N_v$ }	$70 \cdot 10^{17}$	cm <sup>-3</sup>
Densité de porteurs intrinsèque { $n_i$ }	$(3 - 11) \cdot 10^6$	cm <sup>-3</sup>
Dilatation thermique { $\alpha$ }	$5.8 \cdot 10^{-6}$	$\frac{1}{K}$
Durée de vie des porteurs minoritaires	$\sim 10^{-8}$	S
Energie de la bande interdite	$E_g = 1.43$	eV

Tableau II.3 : Les principaux paramètres physiques et électriques du GaAs [49, 64].

Les propriétés de {GaAs} à 300°K (en ordre alphabétique)	Les valeurs correspondantes	Unité
Hauteur de la barrière Schottky	0.7 – 0.8	V
Largeur de sous – bandes de conduction { $\Delta E_{\max}$ }	57	meV
Mobilité des électrons { $\mu_n$ }	8500	cm <sup>2</sup> /V/S
Mobilité des trous { $\mu_p$ }	300	cm <sup>2</sup> /V/S
Mobilité électronique (à $N_D$ = $10^{17}$ cm <sup>-3</sup> )	5000	cm <sup>2</sup> /V/S
Nombre d'atomes	$2.21 \cdot 10^{22}$	Atome/cm <sup>3</sup>
Paramètre de maille	5.6534	Å
Pemittivité	11.6	pF/cm
Poids atomique	144.63	g/mol
Rapport de masses effectives des électrons { $m_e/m_0$ }	0.067	/
Rapport de masses effectives des trous { $m_p/m_0$ }	0.12 – 0.5	/
Résistivité max	$\sim 10^9$	Ω.cm
Structure cristalline	Zinc blende	/
Travail de sortie max	5.50	eV
Type de bande interdite	<i>Gap Direct</i>	/
Vitesse max des électrons	$2 \cdot 10^7$	cm.S <sup>-1</sup>
Vitesse de saturation des électrons { $V_s$ }	$1 \cdot 10^7$	cm/s

Tableau II.3 : Les principaux paramètres physiques et électriques du GaAs (Suite) [49, 64].

### 3.2 Avantages du GaAs

- La réalisation d'ensembles de télécommunications optiques (composants optoélectroniques basé sur sa structure de bande) utilisant des émetteurs lasers à semi-conducteur de GaAs.
- La possibilité de l'obtenir sous forme semi-isolant et l'état élevée de sa résistivité le rend particulièrement favorable pour le développement d'une technologie planaire de circuits intégrés.
- La valeur importante de largeur de sa bande interdite lui confère un fonctionnement à haute température, possible grâce à sa mobilité électronique particulièrement élevée : sept fois plus grande que celle du silicium.
- Il est mieux adapté à la réalisation des diodes Schottky à hauteur de barrière élevée obtenues à l'aide de différent métaux (Au, Al,...).
- Les jonctions Schottky réalisées en utilisant le GaAs comme semi-conducteur présentent d'excellents facteurs d'idéalité et de très faibles courants inverses.

### 3.3 Inconvénients du GaAs

- Sa physico-chimie se prête moins bien que le silicium aux associations de matériaux semi-conducteur, métaux, isolants, requis par les circuits intégrés, ce qui complique les méthodes de fabrication et réduit les rendements de production.
- Sa limitation dans des circuits à hautes fréquences (supérieures à 1GHZ).
- Son cout élevé et son état d'obtention (plaquettes de 3 à 4 pouces et de diamètre 7.5 à 10 cm) limite le nombre de circuits intégrés fabriqués.

# *Chapitre 3* **SIMULATION ET TECHNIQUES DE MODÉLISATION**

## 1 Introduction

Le fonctionnement de la diode Schottky est décrit généralement par la caractéristique (I-V) qui permet de donner des informations sur les mécanismes du transport électrique interne et sur les imperfections des étapes technologiques lors du processus de fabrication. Cette caractéristique dépend de plusieurs paramètres électriques, tels que la résistance série  $R_s$ , la hauteur de barrière  $\Phi_B$ , et le facteur d'idéalité  $n$ . Plusieurs travaux ont été consacrés à l'extraction de ces paramètres. La détermination et la connaissance, avec grande précision, de ces derniers, permet de comprendre et d'expliquer certains phénomènes électriques dans ces jonctions.

Nous présentons dans ce chapitre d'une part notre travail de simulation des caractéristiques électriques courant-tension (I-V) en polarisation directe et inverse de la structure MS (Au/n-GaAs) avec et sans la couche d'interface  $TiO_2$ , l'effet de la couche interfaciale a été étudié.

D'une autre part, les techniques d'extraction des principaux paramètres cités plus haut ont été développées, à s'avoir la méthode Standard (I-V) et les méthodes de Cheung [65].

## 2 Partie1 : Description du logiciel de simulation

### 2.1 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 [66].

## 2.2 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 Design). 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) [67]. Le logiciel ATLAS, appartient à la famille de logiciels 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,...) [68].

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 statistiques de Fermi-Dirac et Boltzmann [67]. 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 nœud a des propriétés qui lui sont associés telles que le type de matériau, le type de dopage, la concentration du dopant, etc.

## 2.3 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.

### **3 Caractérisation courant-tension des structures MS (Au/n-GaAs) et MIS (Au/TiO<sub>2</sub>/n-GaAs) à 100 nm**

La simulation des diodes Schottky SDs à savoir la structure MS (Au/n-GaAs) et la structure MIS (Au/TiO<sub>2</sub>/n-GaAs) avec une épaisseur de l'interface de 100nm à été faite par le simulateur Atlas-Silvaco comme le montre la Figure III.2.

Cette figure représente la variation du courant (I) en fonction de la tension (V) à l'échelle semi-logarithmique à une température T=300°K avec une concentration de ( $10^{+19} \text{ cm}^{-3}$ ).

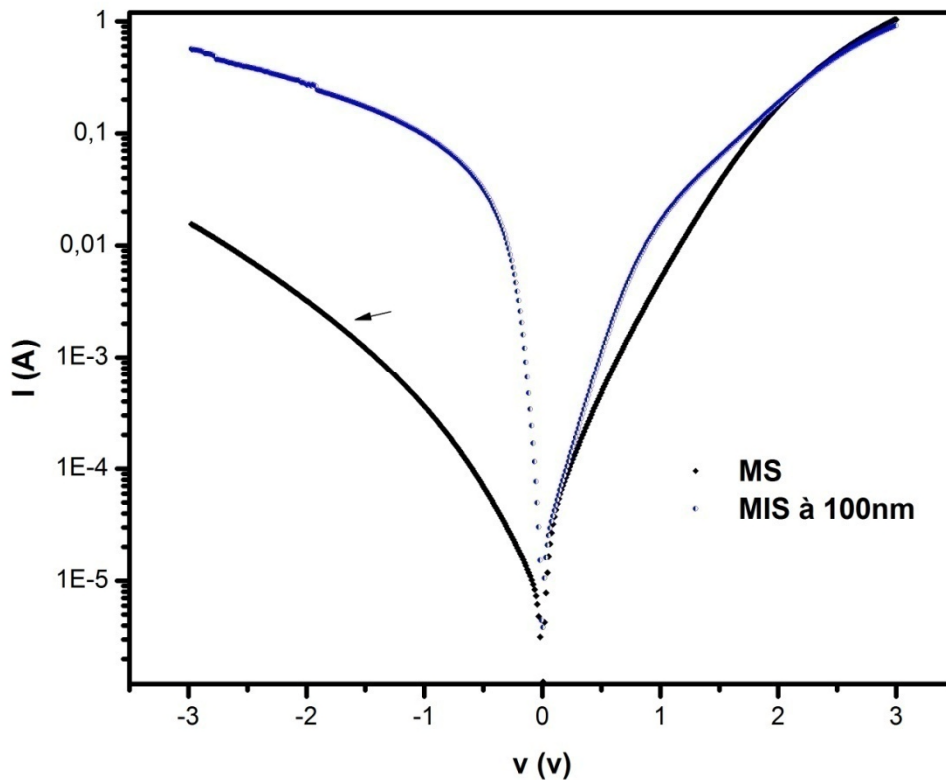


Figure III.2 : Simulation de la caractéristique courant-tension à l'échelle semi-log des diodes MS (Au/n-GaAs) et MIS (Au/TiO<sub>2</sub>/n-GaAs) à 100 nm à température ambiante.

Nous constatons donc d'après l'allure de la courbe de la caractéristique (I-V) et ce pour les deux structures MS et MIS, deux régions distinctes. La première région présente une allure linéaire pour les basses tensions (Figure III.2) 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 et aux états d'interface.

Les résultats obtenus toujours de la Figure III.2 montrent un comportement redresseur pour la structure MS (Au/n-GaAs), par contre la structure MIS (Au/TiO<sub>2</sub>/n-GaAs) révèle plutôt un comportement ohmique.

En fait, on observe bien une augmentation anormale ou plutôt inattendue du courant inverse dans la structure MIS (Au/TiO<sub>2</sub>/n-GaAs). Ce changement de comportement est nouveau et contraire à la littérature, car habituellement la couche d'isolant réduit le courant [11, 60, 65].

En fait ce phénomène d'augmentation du courant inverse prouvé par la simulation est expliqué par le transport des électrons par effet tunnel, étant le seul modèle de transport dominant dans ce cas. D'un autre coté, les défauts d'interface dans la structure (TiO<sub>2</sub>/n-GaAs), les pièges d'électrons, les défauts intrinsèques de chacun des matériaux GaAs et TiO<sub>2</sub> déjà cités dans le "Chapitre 2", ainsi que les lacunes d'oxygène existantes, donnent que la conduction se fait par saut d'électrons (Hopping conduction) [60, 69, 70].

## 4 Partie 2 : Techniques d'extraction des paramètres homogènes n, R<sub>s</sub>, Φ<sub>B</sub>, dans les diodes Schottky SDs

La caractéristique électrique courant-tension en polarisation directe nous permet d'extraire le facteur d'idéalité n, la hauteur de la barrière Φ<sub>B</sub> et la résistance série R<sub>s</sub>. La détermination de ces grandeurs s'obtient en utilisant plusieurs méthodes. Dans ce travail nous avons utilisé la méthode Standard et les méthodes de Cheung.

### 4.1 Méthode Standard (I-V) :

La méthode Standard (I-V) est une méthode d'extractions des paramètres homogènes tels que le facteur d'idéalité n, et la hauteur de la barrière Φ<sub>B</sub> en utilisant la partie linéaire des caractéristiques électriques (lnI-V) en polarisation directe (voir Figure III.3). En fait cette méthode suppose un contact parfait (idéal) entre le métal et le semi-conducteur.

Le calcul du facteur d'idéalité n et la hauteur de la barrière Φ<sub>B</sub> ce fait 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 [65]:

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

Dans le cas des faibles tensions (région linéaire) de la polarisation directe le terme (R<sub>s</sub>I) est négligeable devant la tension (V), avec (V >> KT/q), l'équation (III.1) devient alors :

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

D'où :

$$I_S \approx A^* T^2 A \exp\left(\frac{-q\Phi_b}{KT}\right) \quad (\text{III.3})$$

Aussi :

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

Avec :

- $T$  : Température absolue ( $300^\circ\text{K}$ )
- $V$  : Tension appliquée en [Volt]
- $K$  : Constante de Boltzman ( $1.381 * 10^{-23} \text{ J} \cdot \text{K}^{-1} = 8.62 * 10^{-5} \text{ eV} \cdot \text{K}^{-1}$ )
- $q$  : La charge de l'électron ( $1.602 * 10^{-19} \text{ C}$ )
- $I_S$  : Courant de saturation de la diode (équation III.3)
- $A$  : La surface de la diode ( $10.99 * 10^5 \text{ } \mu\text{m}$ )
- $A^*$  : Constante de Richardson (équation III.4)
- $m^*$  : Masse effective de l'électron
- $h$  : Constante de Planck ( $6.625 * 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$ )
- $I$  : Courant créé par effet thermionique

Cette méthode consiste à faire un fit linéaire du courant direct de la caractéristique (lnI-V) avec le logiciel Origin. On choisit la région qui présente plus de linéarité pour le calcul du fit linéaire. (Figure III.3).

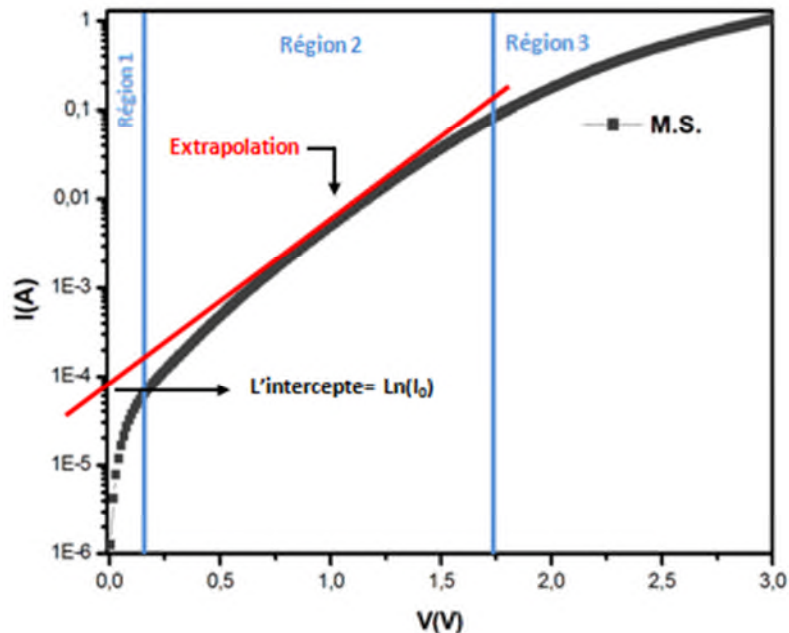


Figure III.3 : Représentation typique des différentes régions de la caractéristique (lnI-V) d'une diode Schottky, en polarisation directe.

Par conséquent, un fit linéaire de la partie linéaire de la courbe  $\ln I = f(V)$  nous donne une équation de la forme  $y = a + b \cdot x$ , avec 'a' est l'intercepte du fit, qui correspond à la valeur de courant de saturation ( $I_0$ ), par contre le facteur d'idéalité  $n$  (voir Figures III.4.a et III.4.b), est donné par la valeur de 'b' qui représente la pente 'le Slope' du fit linéaire. Le calcul du facteur d'idéalité  $n$  est donné par l'équation III.5 [65].

On a :

$$n = \frac{q}{KT} \frac{dV}{d(\ln I)} = \frac{q}{KT} \frac{1}{2.303 b} \quad (\text{III.5})$$

$$n = \frac{q}{KT} \frac{1}{2.303 * \text{Slope}} \quad (\text{III.6})$$

La hauteur de la barrière est calculée par la relation :

$$\phi_B = \frac{KT}{q} \ln \left( \frac{\text{Surface} \cdot T^2 \cdot A^*}{I_0} \right) \quad (\text{III.7})$$

Avec :  $\{ I_0 : \text{Le courant de saturation.} \}$

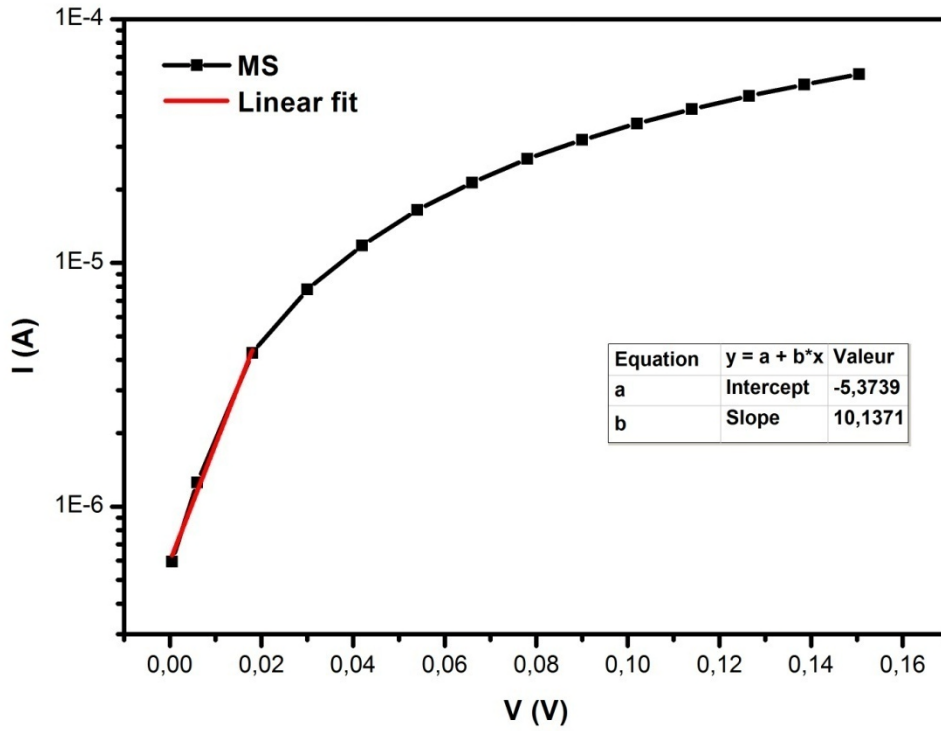


Figure III.4.a : Extraction du facteur d'idéalité  $n$  de la structure MS (Au/n-GaAs) par la méthode Standard (I-V) à  $T=300^{\circ}\text{k}$ .

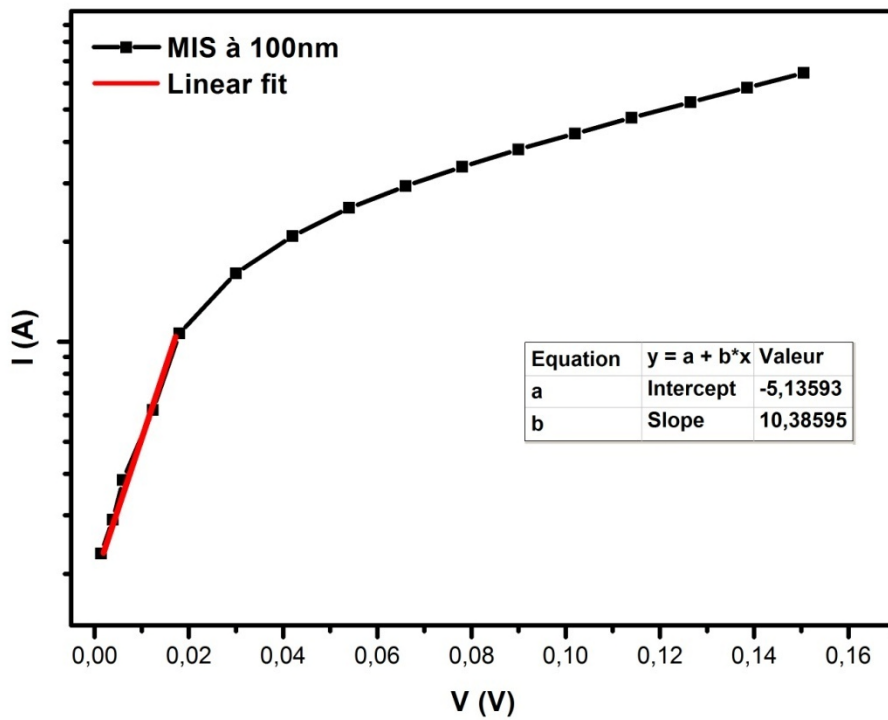


Figure III.4.b : Extraction du facteur d'idéalité  $n$  de la structure MIS (Au/TiO<sub>2</sub>/n-GaAs) par la méthode Standard (I-V) à  $T=300^{\circ}\text{k}$ .

Les valeurs obtenues par cette méthode sont donc résumées dans le Tableau III.1 :

Structure	$I_0$ (A)	n (I-V)	$\Phi_B$ (I-V) (eV)
MS	<b>0.00463</b>	<b>1.658</b>	<b>0.609</b>
MIS à 100 nm	<b>0.00588</b>	<b>1.618</b>	<b>0.603</b>

Tableau III.1 : Paramètres électriques des structures MS et MIS respectivement extrait par la méthode Standard (I-V).

Du Tableau III.1 nous remarquons que les valeurs du facteur d'idéalité sont un peu loin de l'unité, elles sont loin donc de la diode idéale (ou  $n = 1$ ), et ceci est dû à l'existence de la couche d'interface, à l'effet de la résistance série et aux états d'interface. Même la structure MS a un comportement MIS à cause de la couche d'oxyde native [49, 19, 43].

La hauteur de la barrière par contre, de la structure MIS a été réduite par-rapport à celle de la structure MS, ce qui explique l'augmentation du courant dans les structures MIS par rapport aux structures MS. Ce résultats est contraire à ce qu'on devrait avoir à cause de l'existence des différents types de pièges déjà expliquer dans le chapitre 2.

#### 4.2 Méthodes de Cheung :

Les méthodes de Cheung sont utilisées pour la détermination de la valeur du facteur d'idéalité  $n$ , et la résistance série  $R_s$  des diodes Schottky SDs en prenant en considération l'effet de la résistance série. L'extraction est donc faite dans la région qui représente une courbure.

Les deux équations de Cheung peuvent s'écrire tels que [65] :

$$\frac{dV}{d \ln I} = n \frac{KT}{q} + IR_s \quad (III.8)$$

$$H(I) = V - n \frac{KT}{q} \ln \left( \frac{I}{AA^*T^2} \right) \quad (III.9)$$

Et  $H(I)$  est donné aussi comme suit [65]:

$$H(I) = n\phi_B + IR_s \quad (III.10)$$

En utilisant l'équation (III.8), l'allure de la courbe ( $dV/d\ln I$ ) en fonction de ( $I$ ) est obtenue sous forme d'une ligne droite (voir Figures III.5.a et III.5.b). De même le fit linéaire de cette courbe nous permet d'avoir la résistance série  $R_s$  qui est donnée directement par la pente 'le Slope', et l'intercepte de cette ligne droite avec l'axe des ordonnées 'y' correspond à la valeur de  $nKT/q$ , d'où le calcul du facteur d'idéalité  $n$  est comme suit [65]:

$$n = \text{l'intercepte} * \frac{q}{KT} \quad (\text{III.11})$$

La deuxième méthode de Cheung méthode  $H(I)$  est utilisée également dans la même région des hautes tensions ou l'effet de la résistance série  $R_s$  n'est pas négligeable et toujours pour les caractéristiques électriques en polarisation directe.

Utilisant la valeur de  $n$  extraite de la première méthode de Cheung ( $dV/d\ln I$ ) et en se basant sur les équations (III.9) et (III.10), On trace la courbe  $H(I)$  en fonction de ( $I$ ) (voir Figures III.6.a et III.6.b). De même pour la fonction  $H(I)$ , cette dernière est également représentée par une ligne droite. En utilisant un fit linéaire a cette courbe, on obtient la résistance série  $R_s$  comme étant la pente 'le Slope', et la valeur de  $n\Phi_B$  est plutôt donnée par l'intercepte de cette même ligne droite avec l'axe des ordonnées 'y' [65].

Les valeurs obtenues par cette méthode sont donc données dans le Tableau III.2 :

Structure	$n$ ( $dV/d\ln I$ )	$R_s$ ( $dV/d\ln I$ ) ( $\Omega$ )	$R_s$ ( $H(I)$ ) ( $\Omega$ )
MS	1.675	1.294	1.193
MIS à 100 nm	1.625	1.189	1.150

Tableau III.2 : Extraction des paramètres électriques des structures MS et MIS respectivement par les méthodes de Cheung.



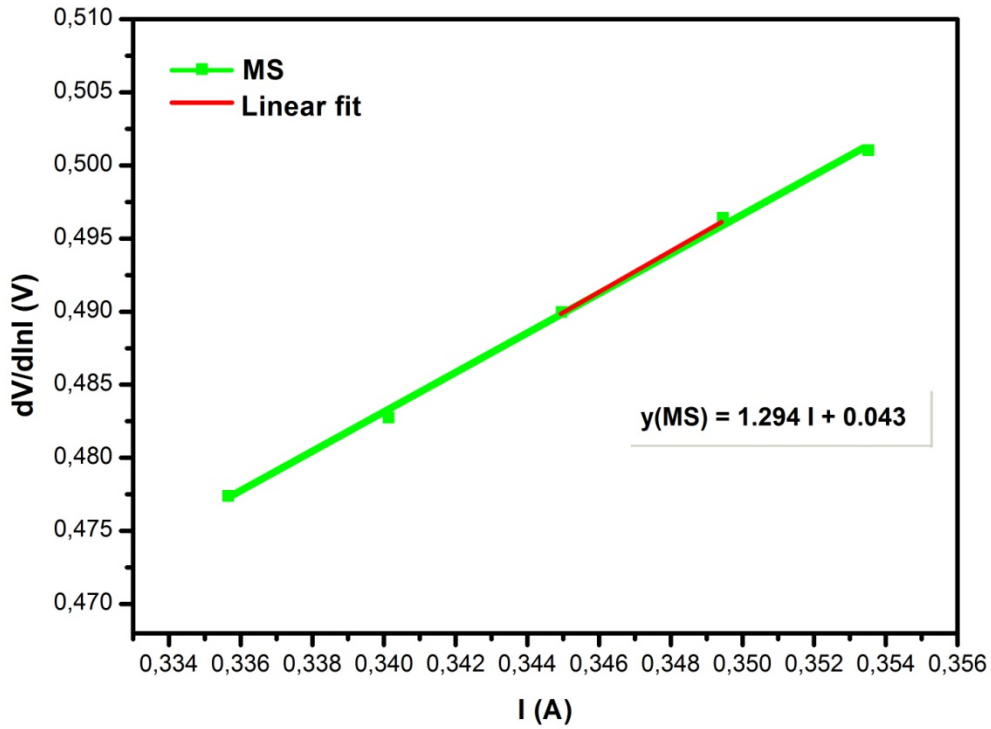


Figure III.5.a : Extraction du facteur d'idéalité  $n$  et la résistance série  $R_s$  de la structures MS par la première méthode de Cheung ( $dV/d\ln I$ ) à  $T=300^\circ\text{k}$ .

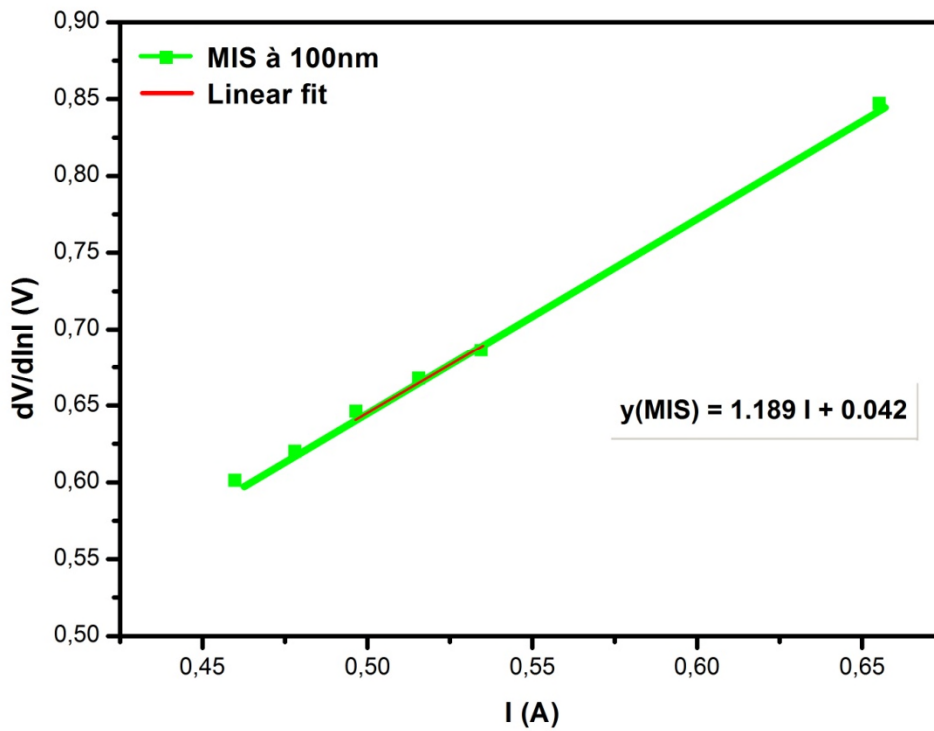


Figure III.5.b : Extraction du facteur d'idéalité  $n$  et la résistance série  $R_s$  de la structure MIS par la première méthode de Cheung ( $dV/d\ln I$ ) à  $T=300^\circ\text{k}$ .

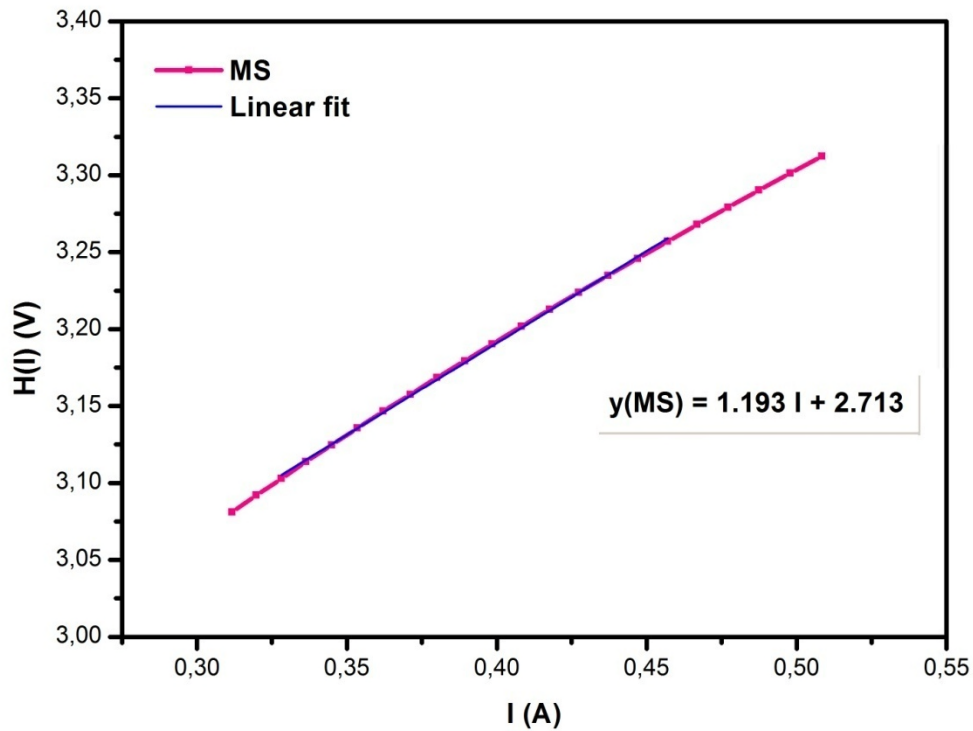


Figure III.6.a : Extraction de la résistance série  $R_s$  de la structure MS par la deuxième méthode de Cheung  $H(I)$  à  $T=300^\circ\text{k}$ .

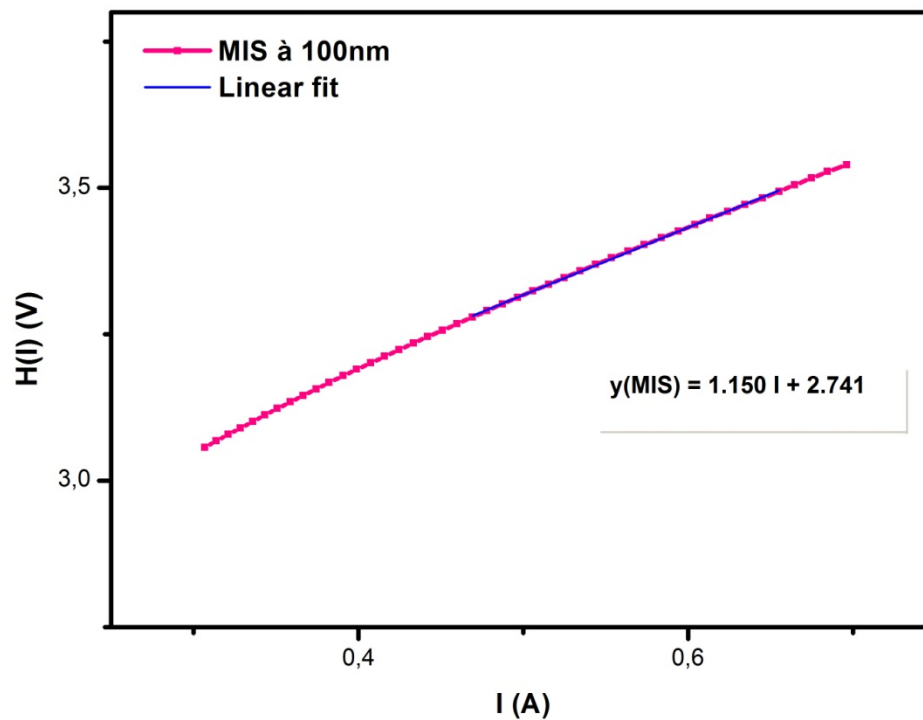


Figure III.6.b : Extraction de la résistance série  $R_s$  de la structure MIS par la deuxième méthode de Cheung  $H(I)$  à  $T=300^\circ\text{k}$ .

Les valeurs obtenues de  $n$ ,  $\Phi_B$ , et  $R_s$  par les différentes méthodes de modélisation décrites plus haut des structures MS et MIS respectivement sont regroupées dans le Tableau III.3.

Structure	n (I-V)		n (dV/dlnI)		$\Phi_B$ (I-V) (eV)		Rs (dV/dlnI) ( $\Omega$ )		Rs (H(I))( $\Omega$ )	
	Sim	Exp	Sim	Exp	Sim	Exp	Sim	Exp	Sim	Exp
MS	1.658	1.651	1.675	1.669	0.609	0.61	1.294	1.285	1.193	1.19
MIS à 100 nm	1.618	1.613	1.625	1.614	0.603	0.6	1.189	1.174	1.150	1.145

Tableau III.3 : Les paramètres électriques des structures MS et MIS respectivement extrait par les différentes méthodes de modélisation.

Du Tableau III.3 nous remarquons bien que les valeurs obtenues de  $n$ ,  $\Phi_B$ , et  $R_s$ , des différentes méthodes convergent bien entre elles, d'où la validité de notre travail de la modélisation.

Le facteur d'idéalité et la résistance série de la structure MIS sont légèrement inférieure à ceux de la structure MS, d'où l'intérêt de l'effet de la couche inter-faciale.

Nos résultats convergent bien avec ceux de l'expérimental, ce qui prouve également la validité de notre travail de simulation et de la modélisation.

*Conclusion*  
*Générale*

## CONCLUSION GENERALE

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

Dans un premier temps la diode Schottky d'or réalisé sur un substrat GaAs type-n à température ambiante avec et sans la couche d'isolant  $\text{TiO}_2$ . En effet, les caractéristiques courant-tension de chacune des structures MS et MIS ont été calculées par le simulateur Atlas Silvaco.

La structure MIS ( $\text{Au}/\text{TiO}_2/\text{n-GaAs}$ ) révèle un comportement plutôt ohmique. Cette augmentation du courant est anormale ou plutôt inattendue. Ce changement de comportement est nouveau et contraire à la littérature, car habituellement la couche d'isolant réduit le courant.

En fait ce phénomène d'augmentation du courant inverse prouvé par la simulation est expliqué par le transport des électrons par effet tunnel, étant le seul modèle de transport dominant dans ce cas. D'un autre côté, les défauts d'interface dans la structure ( $\text{TiO}_2/\text{n-GaAs}$ ), les pièges d'électrons, les défauts intrinsèques de chacun des matériaux GaAs et  $\text{TiO}_2$ , ainsi que les lacunes d'oxygène existantes, donnent que la conduction se fait par saut d'électrons (Hopping conduction).

En deuxième lieu, nous avons fait l'extraction des paramètres électriques du courant direct de la caractéristique courant-tension à la température ambiante des diodes Schottky SDs à savoir  $\text{Au}/\text{n-GaAs}$  et  $\text{Au}/\text{TiO}_2/\text{n-GaAs}$  en utilisant la méthode standard (I-V) et les deux méthodes de Cheung.

Les valeurs obtenues des principaux paramètres tel que le facteur d'idéalité  $n$ , la résistance série  $R_s$ , et la hauteur de la barrière  $\Phi_B$  calculées par les différentes méthodes d'extraction, convergent bien entre elle, ce qui appuis notre travail de modélisation.

Les résultats obtenues du facteur d'idéalité sont un peu loin de l'unité, elles sont loin donc de la diode idéale (ou  $n = 1$ ), et ceci est dû à l'existence de la couche d'interface, à l'effet de la résistance série et aux états d'interface. Même la structure MS a comportement MIS à cause de la couche d'oxyde native.

La hauteur de la barrière par contre, de la structure MIS a été réduite par-rapport à celle de la structure MS, ce qui explique l'augmentation du courant dans les structures MIS par rapport aux structures MS. Ce résultat est contraire à ce qu'on devrait avoir à cause de l'existence des différents types de pièges. C'est l'inconvénient majeur du  $\text{TiO}_2$  en contact avec un matériau de haute mobilité comme le GaAs.

Le facteur d'idéalité et la résistance série de la structure MIS sont légèrement inférieure à ceux de la structure MS, d'où l'intérêt de l'effet de la couche inter-faciale.

Nos résultats convergent bien avec ceux de l'expérimental, ce qui prouve également la validité de notre travail de simulation et de la modélisation.

En résumé, la connaissance des principaux paramètres de la diode tels que, le facteur d'idéalité, la hauteur de la barrière, et la résistance série, permet de comprendre et d'expliquer certains phénomènes électriques dans ces contacts.

En termes de perspective, il serait très intéressant d'une part de minimiser le courant inverse (de fuite) de la structure MIS et d'une autre part d'illuminer la structure à fin d'étudier l'effet de la lumière.

*Références*  
*Bibliographiques*

---

# REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES

- [1] Maxwell, J. *A treatise on electricity and magnetism*. (Clarendon press, 1881).
- [2] O. Pakma, N. Serin, T. Serin, S. Altindal, J. *Sol-Gel Sci. Technol.* 50 (1) (2009) 28-34.
- [3] L. Yang, S. S. Saavedra, N. R. Armstrong, J. Hayes, *Anal Chem.* 66 (8) (1994) 1254-1263.
- [4] *Silvaco-Tcad, Atlas User's Manual. Device Simulation Software, Silvaco International, Santa Clara, CA, 2013*
- [5] H. Altuntas, S. Altindal, S. Özcelik, H. Shtrikman, *Elsevier.* 83 (1) (2009) 1060-1065.
- [6] M. Gökçen, S. Altindal, M. Karaman, U. Aydemir. *Physica B.* 406 (21) (2011) 4119-4123.
- [7] S. M. Sze, "Physics of Semiconductor Devices", John Wiley & sons, New York. London. Sydney. Toronto. 1969.
- [8] Sheng S. Li, "Semiconductor Physical Electronics", 2<sup>nd</sup>ed, Springer, USA, 1969.
- [9] B. Lakehal, "Etude des propriétés électriques photopile à base d'une structure Schottky", Thèse de Magister, Université Batna, 2009.
- [10] A. Chovet, P. Masson, "Physique des semi-conducteurs", Ecole Polytechnique Universitaire de Marseille, Département Micro-électronique et Télécommunication, 2004.
- [11] Latreche Abdelhakim, "Non-Homogénéité dans les Structures Métal/Semi-conducteurs", thèse de doctorat, Université Farhat Abas, Setif, 2012.
- [12] N.F. Mott, "Note on the Contact between a Metal and an Insulator or Semiconductor", *Proc. Cambr. Philos. Soc.*, vol. 34, p. 568, 1938.
- [13] W. Schottky, "Halbleitertheorie der Sperrschicht", *Naturwissenschaften*, vol. 26, p. 843, 1938.
- [14] J. Bardeen, "Surface States and Rectification at a Metal Semiconductor Contact", *Phys. Rev.*, vol. 71, no. 10, pp. 717-727, 1947.



- 
- [15] A.M. Cowley et S.M. Sze, "Surface States and Barrier Height of Metal-Semiconductor Systems", *J. Appl. Phys.*, vol. 36, no. 10, p. 3212-3220, 1965.
- [16] W. Schottky, "Halbleitertheorie der sperrschicht. *Naturwissenschaften*", 26(52) :843. doi :10.1007/BF01774216, Jun 1938.
- [17] N. F. Mott, "Note on the contact between a metal and an insulator or semi-conductor", *Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, 34 :568, 1938.
- [18] N. Vellas, "Etudes expérimentales de transistors de la filière nitrure de gallium pour des applications de puissance hyperfréquences", thèse doctorat, *Uni.Scién.Tech de Lille*, 2003.
- [19] S.M. Sze and K. Ng Kwok, "Physics of Semiconductor Devices", 3ème édition, Wiley, New Jersey, 2006.
- [20] J.H. Werner et H.H. Guttler, "Barrier inhomogeneities at Schottky contacts", *J. Appl. Phys.*, vol. 69, no. 3, pp. 1522-1533, 1991.
- [21] J. Tersoff, *Phys. Rev.*, B30 (1984) 4874.
- [22] A.E. Bazin, "Conception de diodes schottky sur 3C-SiC épitaxie sur silicium", thèse de doctorat, *Université François-Rabolaïs*, 2009.
- [23] E.H. Rhoderick, "Metal-semiconductor contacts", *IEE PROC*, vol. 129, Pt. I, no. 1, pp. 1 14, 1982.
- [24] H.A. Bethe, "Theory of the Boundary Layer of Crystal Rectifiers", *MIT Radiation. Laboratory. Report 43-12*, 1942.
- [25] C. Wagner, "Theory of current rectifiers", *Phys. Z*, Vol. 32, pp. 641-645, 1931.
- [26] W. Schottky and E. SPENKE, "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.
- [27] C.R. Crowell et S.M. Sze, "Current Transport in Metal-Semiconductor Barriers", *Solid- State Electronics*, vol. 9, pp. 1035-1048, 1966.
- [28] F.A. Padovani et R. Stratton, "Field and Thermionic-Field Emission in Schottky Barriers", *Solid-State Electronics*, vol. 9, pp. 695-707, 1966.
- [29] J. Crofton, L.M. Porter et J.R. Williams, "The Physics of Ohmic Contacts to SiC", *phys. stat. sol. (b)*, vol. 202, pp. 581-603, 1997.
- [30] Yu, A.Y.C., et Snow, E.H., "Minority carrier injection of metalsilicon contacts", *Solid-State Electron.*, vol.12, no. 3, pp. 155-160, 1969.
-

- 
- [31] A.S. Bhuiyan, "Contribution à l'étude des contacts metal-arséniure de gallium", thèse de 3ème cycle, Université Paul Sabatier de Toulouse, 1979.
- [32] Sharfetter, D.L., "Minority Carrier Injection and Charge Storage in epitaxial Schottky Barrier diodes", *Solid-State Electronics*, vol. 8, no. 3, pp. 299-311, 1965.
- [33] K.J. Schoen, M. Jerry, J.M. Woodall, "Design Considerations and Experimental Analysis of High-Voltage SiC Schottky Barrier Rectifiers", *IEEE Transactions on electron devices*, vol. 45, no. 7, pp. 1595-1604, 1998.
- [34] M. Jang, and J. Lee, "Analysis of Schottky Barrier Height in Small Contacts Using a Thermionic-Field Emission Model", *ETRI Journal*, vol. 24, no. 6, pp. 455-461, 2002.
- [35] S.Q. Wen, Z.Y. Ming et al, "Analytical model for reverse characteristics of 4H SiC merged PN Schottky (MPS) diodes", *Chinese Physics B*, vol. 18, no. 12, pp. 5474-5478, 2009.
- [36] M. Furno, F. Bonani, G. Ghione, "Transfer matrix method modelling of inhomogeneous Schottky barrier diodes on silicon carbide", *Solid-State Electronics*, vol. 51, pp. 466-474, 2007.
- [37] C.Y. Chang, S.M. SZE, "Carrier transport across metal semiconductor barriers", *Solid-State Electronics*, Pergamon Press., vol. 13, pp. 727-740, 1970.
- [38] E.H. Rhoderick, R.H. Williams, "Metal-semiconductor contacts, Oxford University Press", Oxford, 1988.
- [39] R. Tsu et L. Esaki, "Tunneling in a finite superlattice", *Appl.phys.lett.*, vol. 22, no. 11, pp. 562-564, 1973.
- [40] L. Zheng, R.P. Joshi, C. Fazi, "Effects of barrier height fluctuations and electron tunneling on the reverse characteristics of 6H-SiC Schottky contacts", *J. Appl. Phys.*, vol. 85, no. 7, pp. 3701-3707, 1999.
- [41] J. Eriksson, N. Rorsman, H. Zirath, "4H-Silicon Carbide Schottky Barrier Diodes for Microwave Applications", *IEEE Transactions on microwave theory and Techniques*, vol. 51, no. 3, pp. 797-804, 2003.
- [42] G. Gildenblat, "Compact Moding : Priniples, Techniques and applications", Dordrecht : Springer, 2010.
- [43] Olivier Fruchier, "Etude du comportement dela charge d'espace dans les s tructures MOS", Université Montpellier II - Sciences et Techniques du Languedoc, 2006.
- [44] H. Mathieu, "Physique des semi-conducteurs et des composants électroniques, Dunod 5<sup>e</sup> édition, 2001.
-

- [45] V. Zhdanov, C. Hagglund & B. Kasemo, "Relaxation of plasmons in nm-sized metal particles located on or embedded in an amorphous semiconductor", *Surf. Sci.* 599, L372-L375, 2005.
- [46] E. Thimsen, F. Le Formal, M. Grätzel & S.C. Warren, "Influence of plasmonic Au nanoparticles on the photoactivity of Fe<sub>2</sub>O<sub>3</sub> electrodes for water splitting", *Nano Lett.* 11, 35–43, 2011.
- [47] X. Wang et al, "A mesoporous Pt/TiO<sub>2</sub> nanoarchitecture with catalytic and photocatalytic functions", *Chem. Eur. J.* 11, 2997–3004, 2005.
- [48] J. Virkutyte & R.S. Varma, "Fabrication and visible light photocatalytic activity of a novel Ag/TiO<sub>2</sub>-xNx nanocatalyst", *New J. Chem.* 34, 1094, 2010.
- [49] O. Pakma, N. Serin, T. Serin, S. Altindal, *J. Sol-Gel Sci. Technol.* 50 (1) (2009) 28-34.
- [50] G. Zhao, H. Kozuka & T. Yoko, "Effects of the incorporation of silver and gold nanoparticles on the photoanodic properties of rose bengal sensitized TiO<sub>2</sub> film electrodes prepared by sol-gel method", *Sol. Energy Mater. Sol. Cells* 46, 219–231, 1997.
- [51] H. Roux & L. Glasser, "Transferable potentials for the Ti–O system", *J. Mater. Chem.* 7, 843–851, 1997.
- [52] J.P. Jolivet, "P. de la Solution a l'Oxyde, Condensation des cations en solution aqueuse, *Chimie de surface des oxydes*", 387, 1998.
- [53] Frederic Mesguich, "Stratégie innovante pour la mise en forme de nanostructures TiO<sub>2</sub>/Au à propriétés synergétiques pour le photovoltaïque", *Université Pierre et Marie Curie -Paris VI*, 2014.
- [54] H. Tang, F. Lévy, H. Berger & P. Schmid, "Urbach tail of anatase TiO<sub>2</sub>", *Phys. Rev. B. Condens. Matter* 52, 7771–7774, 1995.
- [55] Bruno Pattier, "Étude de gels d'oxyde de titane entrant dans la fabrication de cellules photovoltaïques", *Thèse Doctorat, Université du Maine, France*, 2010.
- [56] O. Carp, "Photoinduced reactivity of titanium dioxide". *Prog. Solid State Chem.* 32, 33 177, 2004.
- [57] S. Mo & W. Ching, "Electronic and optical properties of three phases of titanium dioxide: Rutile, anatase, and brookite", *Phys. Rev. B. Condens. Matter* 51, 13023–13032, 1995.
- [58] M. Koelsch, S. Cassaignon, C. Ta Than Minh, J.F. Guillemoles & J.P. Jolivet, "Electrochemical comparative study of titania (anatase, brookite and rutile)

- nanoparticles synthesized in aqueous medium, Thin Solid Films*’, 451-452, 86–92, 2004.
- [59] B.E. Deal, ‘‘Standardized Terminology for Oxide Charges Associated with Thermally Oxidized Silicon’’, *IEEE Electron Dev. Lett.*, vol. 27 (3), p. 606, 1980.
- [60] Yves Maneglia, ‘‘Analyse en profondeur des défauts de l’interface Si-SiO<sub>2</sub> par la technique du pompage de charges’’, *Physics. Institut National Polytechnique de Grenoble - INPG*, 1998.
- [61] M. Baraton, ‘‘Surface chemistry of TiO<sub>2</sub> nanoparticles: influence on electrical and gas sensing properties’’, *J. Eur. Ceram. Soc.* 24, 1399–1404, 2004.
- [62] R. Besson, ‘‘Technologie des composants électroniques diodes, transistor, circuit intégrés, opto-électronique’’, Tome 2, 5<sup>ème</sup> édition radio, Paris, 1981.
- [63] Henry Mathieu et Hervé Fanet, ‘‘Physique des Semi-conducteurs et des Composants Electronique, 6<sup>e</sup> édition.
- [64] R. Soares, Graffeul et J. Obregon, ‘‘Application des Transistors à effet de champ en arséniure de Gallium’’, Eyrolles et CENT-ENST, Paris, 1984.
- [65] H. Altuntas, S. Altindal, S. Ozçelik, H. Shtrikman, ‘‘Electrical characteristics of Au/n-GaAs Schottky barrier diodes with and without SiO<sub>2</sub> insulator layer at room temperature’’, *Vacuum* 83, 1060–1065, 2009.
- [66] F. Bourouba, ‘‘Modélisation et simulation des contacts métal-semiconducteur à barrière inhomogène’’, *Mémoire Magister, Physique, Université Ferhat Abbas- Sétif*, 2010.
- [67] *Atlas user manual device simulation. Silvaco International, Santa Clara*, 2011.
- [68] 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.
- [69] S.Q. Wen, Z.Y. Ming et al, ‘‘Analytical model for reverse characteristics of 4H SiC merged PN Schottky (MPS) diodes’’, *Chinese Physics B*, vol. 18, no. 12, pp. 5474-5478, 2009.
- [70] Z. pang, *Thèse de doctorat, Université McMaster*, 1997.

---

## Résumé

Notre travail consiste à faire l'étude des caractéristiques courant-tension (I-V) en polarisation directe de la structure MS (Au/n-GaAs) avec et sans couche d'isolant TiO<sub>2</sub>.

L'extraction des principaux paramètres électriques tels que le facteur d'idéalité  $n$ , la hauteur de barrière  $\Phi_B$  et la Résistance série  $R_s$  a été faite en utilisant plusieurs méthodes de modélisation. Les valeurs obtenues de ces derniers à température ambiante sont respectivement 1.658, 0.609 eV et 1.294  $\Omega$  pour la structure MS (Au /n-GaAs) et 1.618, 0.603 eV, 1.189  $\Omega$  pour la structure MIS (Au / TiO<sub>2</sub> / n-GaAs). Les diodes manifestent un comportement (I-V) non idéal avec un facteur d'idéalité supérieur à l'unité. Ce comportement est attribué à la couche isolante inter-faciale et aux états d'interface. Nos résultats de modélisation convergent fort bien avec l'expérience.

## Abstract

Our work consists in studying the current-voltage characteristics (I-V) in forward bias of the metal-semiconductor (MS) Schottky diodes structures (Au / n-GaAs) with and without TiO<sub>2</sub> insulator layer. The extraction of the main electrical parameters such as the ideality factor  $n$ , the barrier height  $\Phi_B$  and the series resistance  $R_s$  was made using several modeling methods. The values of the latter at room temperature are respectively 1.658, 0.609 eV and 1.294  $\Omega$  for the metal-semiconductor (MS) structure (Au / n-GaAs) and 1.618, 0.603 eV, 1.189  $\Omega$  for the metal-insulator-semiconductor (MIS) structure (Au / TiO<sub>2</sub> / n-GaAs) with small dimensions. The diodes exhibit a non-ideal behavior (I-V) with an ideality factor greater than unity. This behavior is attributed to the interfacial insulator layer and the interface states. Our modeling results converge very well with experience.

---