



Mémoire de fin d'études

PRESENTÉ EN VUE DE L'OBTENTION
DU DIPLOME DE : Master

Filière : physique
Option : physique des Matériaux

THÈME :

***Détermination de la masse effective des
électrons pour le carbure de silicium (4H-SiC)
par la méthode I-V***

Préparé par :

CHAREF SAMIR

Soutenu le : 11 /07/ 2021

Devant le jury :

Président :	N. Benchiheub	MCB	Université de Bordj Bou Arreridj
Rapporteur :	A. Latreche	Prof	Université de Bordj Bou Arreridj
Examineur :	N. Lebga	MCA	Université de Bordj Bou Arreridj

Année Universitaire 2020-2021

Dédicace

*Je dédie ce travail à mes très chers parents qui ont
toujours été là pour moi.*

*A mes chers frères et sœurs : Kamel, Nadia, Hayet,
Naima, Hakima.*

A tous mes amis.

Samir

REMERCIEMENTS

*Je remercie **ALLAH** tout puissant de m'avoir accordé le courage et la santé pour réaliser ce travail.*

*Je tiens tout d'abord à exprimer mes sincères remerciements et toute ma gratitude à mon encadreur le Professeur « **Latreche Abdelhakim** » pour avoir d'abord proposé ce thème, pour ses conseils précieux, pour sa patience, pour le suivi constant et son aide tout long de ce travail.*

*Ma profonde gratitude et mes sincères remerciements vont à Dr : **N. Benchiheb** pour avoir accepté de présider le jury de ma soutenance.*

*Je remercie infiniment Dr : **N. Lebga** pour avoir accepté d'examiner le travail de cette mémoire.*

Merci à tous ceux qui m'ont aidé avec ce mémoire.

TABLE DES MATIÈRES

Introduction générale	1
Chapitre I : Généralités sur le semi-conducteur SiC et la masse effective	
1 Semi-conducteur	3
1.1 Semi-conducteur intrinsèque	3
1.2 Semi-conducteur extrinsèque	3
1.2.1 Semi-conducteur du type N.....	4
1.2.2 Semi-conducteur du type P	4
2 Le semi-conducteur : carbure de silicium (SiC)	5
2.1 Introduction	5
2.2 Propriété du carbure de silicium.....	5
2.2.1 Propriétés cristallines	5
2.2.2 Propriété physique et électriques.....	7
3 Masse effective	7
3.1 Notion de masse effective.....	7
3.2 Tenseur de masse effective.....	9
4 Masse effective de 4H-SiC	10
4.1 Introduction	10
4.2 Zones de Brillouin de 4H-SiC	10
5 Détermination de la masse effective à partir de structure de bande 4H-SiC	12
5.1 Structure de bande du semi-conducteur 4H-SiC	12
5.2 Approximations paraboliques des bandes	13
6 Détermination de la masse effective expérimentalement	14
6.1 Méthode de résonance cyclotron	14
6.1.1 Introduction	14
6.1.2 Description semi-classique du Drude pour la méthode CR	16
6.2 Méthode de résonance cyclotron détectée optiquement (ODCR)	19
Chapitre II : Théorie du contact Schottky	
1 Introduction.....	23
2 Structure métal/semi-conducteur	23
2.1 Travail de sortie du métal	23
2.2 Affinité électronique du semi-conducteur	24

Table des matières

3	Formation de la barrière Schottky.....	25
4	Zone de charge d'espace.....	26
5	Abaissement de barrière par la force image ; effet Schottky.....	27
6	Mécanismes de transport du courant dans un contact M/S en polarisation inverse.....	29
6.1	Courant tunnel.....	30
6.2	Effet tunnel.....	30
6.3	Courant d'émission thermoïonique (TE).....	31
Chapitre III : Méthode de calcul et Résultats		
1	Modèle de la barrière Schottky en polarisation inverse.....	32
2	Algorithme de calcul du courant tunnel.....	33
3	Extraction de la masse effective par la méthode I-V.....	36
3.1	Données expérimentales.....	36
3.2	Méthode d'optimisation verticale.....	37
4	Résultats et discussion.....	39
4.1	Détermination de la masse effective et la hauteur de barrière par la méthode d'optimisation verticale.....	39
4.2	Effet de la température sur la masse effective.....	44
4.3	Effet de la température sur la hauteur de barrière.....	45
Conclusion générale.....		46
Bibliographie.....		47
Résumé.....		51

LISTE DES TABLEAUX

I.1 Quelques propriétés physiques des principaux polytypes de SiC, comparaison avec celles du Ge, Si, GaAs, GaN et du Diamant	7
I.2 Les différents points de haute symétrie d'hexagonal.....	12
I.3 Quelques valeurs calculées de la masses effective (en m_0) des électrons au minimum de la bande de conduction de 4H-SiC.....	14
II.1 Travail de sortie de quelques métaux.	24
II.2 Affinité électronique de quelques semi-conducteurs.....	24
III.1 Les valeurs obtenues de la masse effective et de la hauteur de barrière pour la diode Ni/4H-SiC à différentes températures	42

TABLE DES FIGURES

I.1 Réseau d'un semi-conducteur intrinsèque (Silicium).....	3
I.2 (a) dopage de type N et (b) dopage de type P	4
I.3 La maille élémentaire du carbure de silicium	6
I.4 Représentation des polytypes 3C, 4H et 6H	6
I.5 La zone de Brillouin de 4H-SiC, avec des points de hautes symétries dans l'espace k et les directions correspondant aux trois axes cristallographiques principaux dans l'espace réel	11
I.6 La structure de bande d'énergie électronique du 4H-SiC dans les directions à hautes symétries	13
I.7 Approximation de la courbe de dispersion aux voisinages de minimum de la bande de conduction et de maximum de la bande de valence.	13
I.8 Principe de la méthode de résonance cyclotron dans un semi-conducteur. Le sens de parcours de l'orbite est opposé pour les électrons et pour les trous.	15
I.9 La puissance d'absorption CR par rapport aux différentes valeurs de $\omega_c \tau$. Les traces sont obtenues à partir de l'équation (I.30). CR se produit à $\omega = \omega_c$ et $\omega_c \tau \gg 1$. L'absorption est exprimée en unités de $ E_0 ^2 \sigma_0 / 4$..	18
I.10 Spectre de transmission obtenu par la méthode de cyclotron résonance pour 3C-SiC, la longueur d'onde est $\lambda = 392.3 \mu\text{m}$, $T = 45 \text{ K}$	19
I.11 Configuration expérimentale pour les enquêtes ODCR. Il se compose d'un spectromètre combiné entre PL et CR avec l'échantillon monté dans un cryostat à hélium liquide pour les études à basse température, et avec une diode PIN intégrée pour la modulation marche-arrêt de la puissance micro-ondes.....	20
I.12 Spectres ODCR pris à $T = 1,6 \text{ K}$ lorsque le champ magnétique B est orienté selon les trois axes cristallographiques principaux du réseau 4H-SiC	21
I.13 Dépendance angulaire des spectres ODCR en faisant tourner B (a) dans le plan (1100) ou (b) dans le plan (1120). Les données expérimentales sont données par les carrés pleins et les courbes d'ajustement en utilisant Equation (I.32) sont représentées par les lignes tracées, en tenant compte de toutes les vallées d'électrons inéquivalentes possibles par rapport à la direction du champ magnétique	22
II.1 Niveaux énergétiques dans un métal et un semi-conducteur avant le contact.....	24

Table des figures

II.2 Diagramme des bandes d'énergie pour un métal et un semi-conducteur (n) lorsque ($q\phi_m > q\phi_s$), (a) avant mise en contact et (b) après mise en contact	25
II.3 L'abaissement de la barrière Schottky par effet Schottky à l'équilibre thermodynamique ($V_R = 0$ volts).	28
II.4 Mécanismes de transport des charges à travers une barrière Schottky sous Polarisation inverse.....	29
II.5 Fonction d'onde d'un porteur d'énergie E, évoluant dans une structure rectangulaire (la fonction d'onde réfléchie n'est pas représentée)	30
III.1 Profil de la barrière Schottky sous polarisation inverse en tenant compte de l'effet de la force image. Le courant total est la somme de courant d'émission thermoionique et le courant tunnel.....	32
III.2 Organigramme pour le calcul de la densité de courant tunnel dans une diode Schottky.	34
III.3 Coefficient de transmission en fonction de l'énergie de particule. (a) échelle linéaire, (b) échelle semi-logarithmique dans les conditions suivantes: $V_R = -50$ volts, $N_D = 2 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-3}$, eV , $m_e^* = 0.2m_0$	35
III.4 Données expérimentales J-V d'une diode Schottky Ni/4H-SiC en polarisation inverse pour différentes températures	36
III.5 Organigramme pour le calcul du critère (S), en balayant la masse effective et la hauteur de barrière.	38
III.6 le critère (S) en fonction de la masse effective (m^*/m_0) pour différentes hauteur de barrière ϕ_b : (a) T = 298 K, (b) T = 359 K, (c) T = 407 K, (d) T = 465 K, (e) T = 496 K, (f) T = 522 K	42
III.7 Caractéristiques I-V-T inverses expérimentales de la diode Schottky Ni/4H-SiC (symboles) et caractéristiques I-V-T inverses théoriques (lignes continues) calculées à l'aide des paramètres extraits listés dans le tableau (III.1)	43
III.8 Masse effective en fonction de la température pour le semi-conducteur 4H-SiC.....	44
III.9 Hauteur de la barrière en fonction de la température pour la diode Schottky Ni/4H-SiC.....	45

INTRODUCTION GÉNÉRALE

Dans les dernières années, avec le développement des techniques de croissance cristalline, l'intérêt pour le carbure de silicium (SiC) et ses applications de dispositifs a augmenté rapidement. Parmi les différents polytypes, de SiC: 3C, 6H et 4H sont des matériaux très prometteurs pour les applications de dispositifs électroniques et ont attiré beaucoup d'attention. En raison de sa large bande interdite, une mobilité électronique élevée, presque isotrope (800–1000 cm²/V.s) à température ambiante, et un champ de claquage le plus élevé, le polytype hexagonal 4H est considéré comme supérieur dans les applications pour les appareils à haute puissance et à haute température [1].

Les masses effectives des porteurs de charge dans les semi-conducteurs, décrites par les masses effectives des électrons m_e^* dans la bande de conduction et les masses effectives des trous m_h^* dans la bande de valence, sont parmi les paramètres les plus importants régissant les propriétés physiques fondamentales des matériaux ainsi que les performances de dispositifs électroniques et optoélectroniques basés sur ces matériaux [2]. Les valeurs de masse effective entrent dans les calculs et les évaluations de nombreuses propriétés clés de transport, optiques et de structure de bande, qui peuvent être théoriquement prédites et également déterminées expérimentalement [2].

Plusieurs techniques expérimentales et computationnelles ont été utilisées pour déterminer les masses effectives des électrons et des trous. Parmi les techniques expérimentales on cite la résonance cyclotron (CR), la résonance cyclotron détectée optiquement (ODCR), l'infrarouge (IR), l'effet hall optique,....etc. Les masses effectives peuvent être théoriquement prédites à partir des calculs de structure de bande basés sur la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT).

Dans notre mémoire, nous allons présenter une nouvelle méthode expérimentale pour déterminer la masse effective des électrons de semi-conducteur 4H-SiC à partir des mesures électriques courant-tension. Pour cela nous utiliserons le courant inverse qui passe dans une diode Schottky à base de carbure de silicium (4H-SiC) dans différentes températures.

Notre mémoire se présente principalement en trois chapitres : Dans le premier chapitre nous présentons le concept de la masse effective de porteurs dans un semi-conducteur, ainsi que

quelques méthodes théoriques et expérimentales pour déterminer la masse effective des électrons pour le carbure de silicium telles que : à partir de la structure de bande, la résonance cyclotron (CR), et la résonance cyclotron détecté optiquement (ODCR). Le deuxième chapitre traite des généralités sur la structure Métal/Semi-conducteur et le mécanisme de transport électronique dans ces jonctions en polarisation inverse. Dans le dernier chapitre nous présenterons la méthode de calcul pour déterminer la masse effective à partir des données expérimentales du courant – tension déjà publiées dans la littérature. La méthode que nous avons utilisé est basée sur la méthode des moindres carrées. Enfin, nous terminerons notre travail par une conclusion générale.



Chapitre I

Généralités sur le semi-conducteur SiC et la masse effective

1 Semi-conducteur

Un semi-conducteur est généralement défini de manière assez large comme un matériau dont la résistivité électrique est comprise entre 10^{-2} à $10^9 \Omega \text{ cm}$. Alternativement, il peut être défini comme un matériau dont le gap d'énergie est compris entre zéro et environ 4 eV. Les matériaux à bande interdite nulle sont des métaux ou des semi métaux, tandis que ceux dont le gap énergétique est supérieur à 4 eV sont plus fréquemment appelés isolants [3]. On distingue deux types de semi-conducteurs, intrinsèque et extrinsèque.

1.1 Semi-conducteur intrinsèque

Un semi-conducteur est dit intrinsèque s'il est l'état pur. Susceptible de modifier la densité de porteurs. Dans un tel cas, l'activation thermique d'un électron de la bande de valence vers la bande de conduction produit un électron libre dans la bande de conduction où leur concentration est notée n et un trou libre dans la bande de valence avec une concentration notée p [4],[5], et les concentrations des électrons et des trous sont égales. La concentration intrinsèque n_i égale aux concentrations n et p :

$$p = n = n_i \quad (\text{I.1})$$

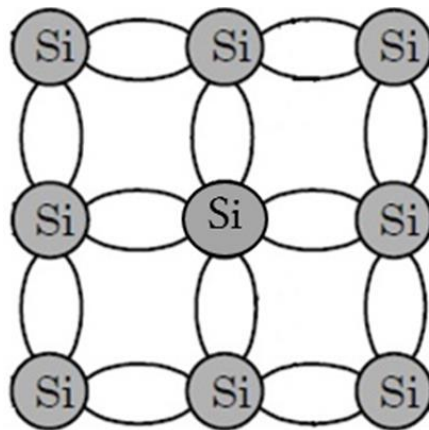


Figure I.1 - Réseau d'un semi-conducteur intrinsèque (Silicium) [6].

1.2 Semi-conducteur extrinsèque

L'introduction de certaines impuretés dans un matériau semi-conducteur intrinsèque permet d'y modifier le nombre de porteurs libres, de choisir le type de conduction (par électrons ou par trous) et de contrôler la conductivité électrique [6]. On distingue qu'il existe deux type de semi-conducteurs extrinsèques :

1.2.1 Semi-conducteur du type N

Considérons un semi-conducteur dopé avec une densité de donneurs supérieure à la densité d'accepteurs, $N_d > N_a$. Il en résulte $n > p$. On dit alors que le semi-conducteur est de type N. Les électrons sont appelés porteurs majoritaires et les trous sont les porteurs minoritaires. Le dopage se fait par des impuretés pentavalentes de densité N_d [7].

En prenant l'exemple du silicium (Si) : Lorsqu'on introduit un atome pentavalent (5 électrons de valence) comme l'arsenic As, dans son réseau cristallin. L'atome de l'arsenic remplace un atome de silicium et établit des liaisons avec les 4 atomes voisins. L'atome de silicium est stable et le 5^{ème} électron reste faiblement lié à l'atome. A la température ambiante, cet électron est libéré et passe dans la bande de conduction laissant derrière lui un atome de l'arsenic ionisé positivement (As^+). L'arsenic est appelé atome donneur.

1.2.2 Semi-conducteur du type P

Le même type de raisonnement s'applique mais avec élément étranger accepteur. Si le dopage est tel que $N_a > N_d$, les porteurs majoritaires sont les trous. Le semi-conducteur est de type P [8]. On introduit un atome trivalent (3 électrons de valence) comme le bore (B) dans le réseau du silicium. L'atome du bore substitue un atome de silicium qui a 4 liaisons avec les atomes voisins alors que le bore n'a que trois électrons, donc il capte un électron d'un atome voisin et crée un trou dans la bande de valence. Ces impuretés ionisées négativement sont appelées atomes accepteurs de concentration N_A .

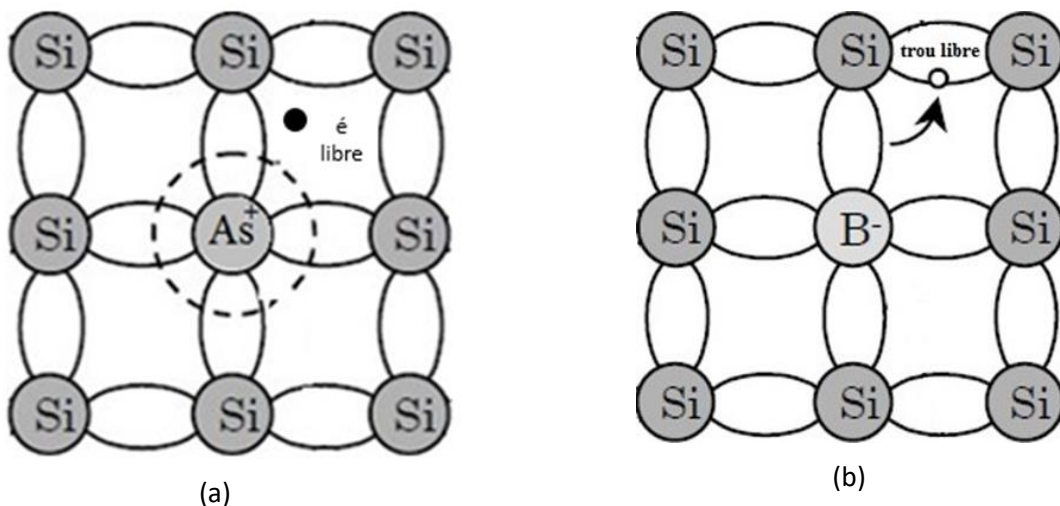


Figure I.2 - (a) dopage de type N et (b) dopage de type P [6].

2 Le semi-conducteur : carbure de silicium (SiC)

2.1 Introduction

Le carbure de silicium (SiC) est un matériau artificiel essentiellement synthétisé pour les besoins de la technologie. Sa première mention remonte à 1824 par le célèbre chimiste suédois nommé Jacob Berzelius qui suggéré l'existence de liaison chimique entre le carbone et le silicium [9].

Les caractéristiques du SiC sont les suivantes :

- Bonne conductivité et stabilité thermique.
- Bonne résistance mécanique.
- Bonne résistance aux rayonnements.

Toutes ces propriétés ouvrent plusieurs opportunités technologiques modernes aux composants électroniques à base de SiC [10]. Les propriétés électroniques et optiques du SiC ont permis plusieurs applications électroniques et optoélectroniques dans plusieurs domaines : microstructure, composants optoélectroniques, applications à hautes températures, applications à haut taux de radiation, et composants à haute puissance [11].

2.2 Propriété du carbure de silicium

2.2.1 Propriétés cristallines

Le carbure de silicium est un composé binaire formé de deux atomes de la colonne IV du tableau périodique, liés par une liaison covalente. Celle-ci confère au matériau des propriétés particulièrement intéressantes [12], les structure électronique du silicium ($[\text{Ne}] 3s^2 2p^2$) et du carbone ($[\text{He}] 2s^2 2p^2$).

L'unité structural de base dans le carbure de silicium est un tétraèdre, au centre duquel un atome de carbone et lié avec quatre atome de silicium (ou bien de carbone) placés aux sommets [13]. La distance entre l'atome de carbone et de silicium est de 1,89Å et la distance entre les atomes de carbone est de 3,08Å. Les cristaux de SiC sont construits avec ces unités se rejoignant aux coins [14], comme le montre la figure I.3.

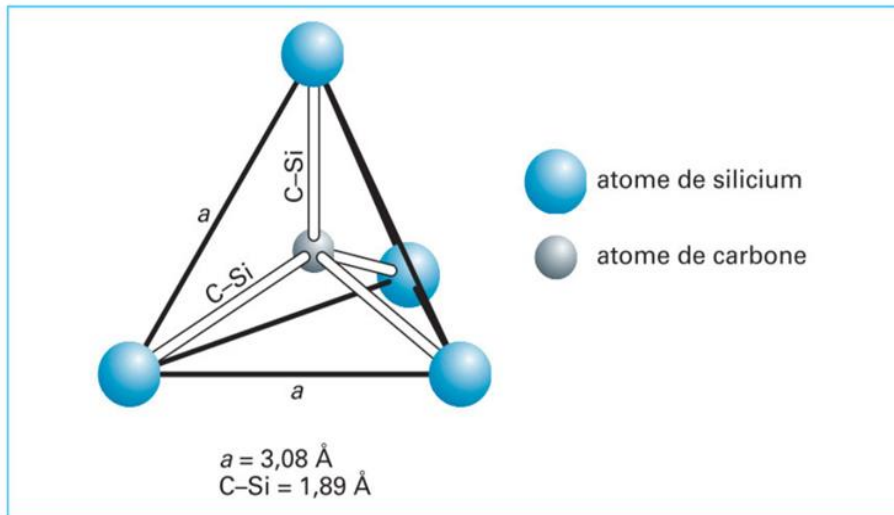


Figure I.3 - La maille élémentaire du carbure de silicium [15].

Le SiC existe sous la forme d'une famille de cristaux, il existe environ 200 polytypes (structures cristallographiques) répertoriés du SiC [16],[17]. Les plus utilisés en électronique de puissance sont le 6H, 4H (H pour hexagonal), le 3C (C pour cubique).

Le polytype est identifié par le nombre de plans cristallins compacts d'une séquence et le type cristallographique [18]. Les trois polytypes les plus utilisés dans la recherche (3C, 4H, 6H) sont représentés sur la figure I.4.

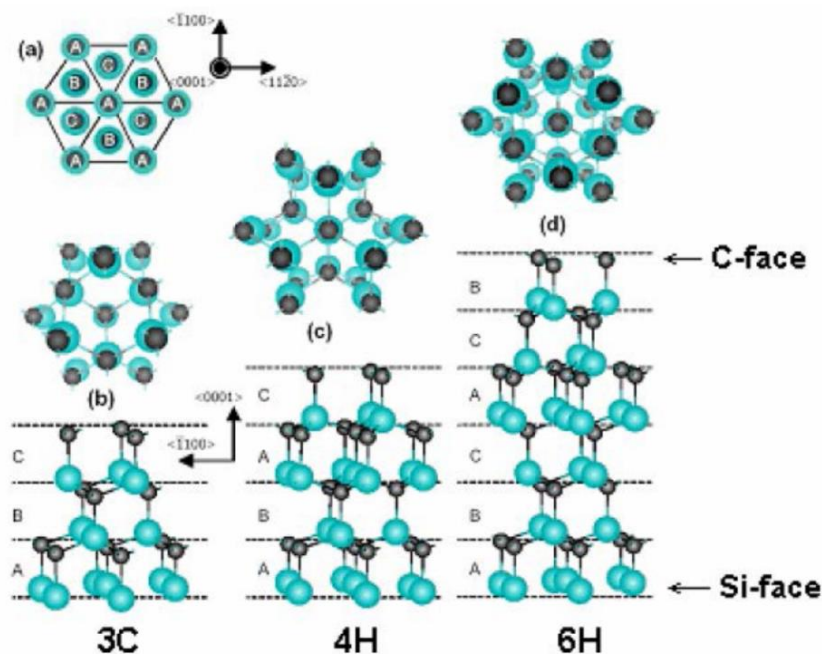


Figure I.4 - Représentation des polytypes 3C, 4H et 6H [19].

2.2.2 Propriété physique et électriques

Le SiC ayant un intérêt technologique, ses propriétés ont été l'objet de nombreux travaux. Les caractéristiques électriques de carbure de silicium diffèrent suivant le polytype. Le SiC est classé dans le semi-conducteur à large de bande interdite [20].

Le tableau (I.1) présent quelques propriété physique des principaux polytypes de SiC, en compare avec d'autres semi-conducteur :

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

Tableau I.1 - Quelques propriétés physiques des principaux polytypes de SiC, comparaison avec celles du Ge, Si, GaAs, GaN et du Diamant [18],[20].

3 Masse effective

3.1 Notion de masse effective

La masse effective est une grandeur tensorielle, utilisée dans le calcul de transport électrique. Dans les semi-conducteurs, la présence du potentiel cristallin périodique modifie les propriétés des électrons, d'où une masse de l'électron qui est différente de la masse de l'électron libre. La masse effective (m^*) désigne typiquement la valeur déterminée expérimentalement de la masse de l'électron, et elle est habituellement donnée en fonction de la masse de l'électron libre (m^*/m_0). Pour les différents semi-conducteurs, ce rapport peut être légèrement supérieur ou inférieur à l'unité [4].

La masse effective est définie au moyen du diagramme E-k, ce qui peut conduire à penser qu'il n'y a aucun moyen d'expliquer précisément la masse effective sans utiliser ce diagramme [21].

Chapitre I Généralités sur le semi-conducteur SiC et la masse effective

Les électrons dans les bandes d'énergie, se comportent différemment de celui des électrons libres (dans le vide). L'électron dans un cristal n'est pas complètement libre, mais son accélération dans un cristal est influencée par des forces externes (ξ est le champ électrique appliqué) et internes.

L'accélération d'un électron dans le vide et dans un cristal est donnée par les équations suivantes :

$$\gamma = \frac{F_{ext}}{m_e} \quad (\text{Dans un vide}) \quad (I.2)$$

$$\gamma = \frac{F_{ext} + F_{int}}{m_e^*} = \frac{F_{ext} + \vec{\nabla}V}{m_e^*} = \frac{F_{ext}}{m_e^*} \quad (\text{Dans un cristal}) \quad (I.3)$$

Avec :

m_e est la masse de l'électron dans le vide ($9.1 \times 10^{-31} Kg$), m_e^* est la masse de l'électron dans le cristal, $\vec{\nabla}V$ est la différence de potentiel.

En conséquence, un électron dans un cristal peut se comporter comme s'il avait une masse différente de la masse de l'électron libre m_e .

Il existe des cristaux dans lesquels la masse effective des porteurs est beaucoup plus grande ou beaucoup plus petite que m_e .

Si l'électron est libre, aucune barrière de potentiel ne limite la propagation de l'onde électronique (c'est-à-dire, $\vec{\nabla}V=0$), donc l'énergie (E) représente uniquement l'énergie cinétique :

Une description tout aussi valable est possible en utilisant la quantité de mouvement p qui nous donne :

$$p = m_e v = \frac{h}{\lambda} = \frac{2\pi\hbar}{\lambda} = \hbar k \quad (I.4)$$

Où v est la vitesse d'électron, λ la longueur d'onde et \hbar est la constante de Planck.

Donc, l'énergie de l'électron est :

$$E = \frac{p^2}{2m_e} = \frac{\hbar^2}{2m_e} k^2 \quad (I.5)$$

Où k est un vecteur d'onde de l'électron

Si le mouvement des électrons se fait dans un cristal, nous rappelons que, pour un paquet d'ondes, la vitesse de groupe (v_g) peut être exprimée comme suit :

$$v_g = \frac{1}{\hbar} = \frac{dE}{dk} \quad (I.6)$$

et l'accélération peut être exprimée comme suit :

$$\gamma = \frac{dv_g}{dt} = \frac{1}{\hbar} \frac{d^2E}{dk dt} = \frac{1}{\hbar} \frac{d^2E}{dk^2} \frac{dk}{dt} \quad (I.7)$$

dE/dt est connue, et dk/dt peut être évaluée à partir de l'expression p

$$\frac{dp}{dt} = \hbar \frac{dk}{dt} \quad (\text{I.8})$$

Avec :

$$\frac{dp}{dt} = m_e^* \frac{dv}{dt} = F_{ext} \quad (\text{I.9})$$

$$\gamma = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2E}{dk^2} F_{ext} \quad (\text{I.10})$$

Où F_{ext} est la force agissant sur un électron

En comparant l'équation (I.2) avec l'équation (I.10) qui est identique à la deuxième loi du mouvement de newton, on peut écrire :

$$m_e^* = \hbar^2 \left(\frac{d^2E}{dk^2} \right)^{-1} \quad (\text{I.11})$$

En d'autres termes, la masse effective des électrons est inversement proportionnelle à la courbure de la bande d'énergie des électrons $E(k)$, c'est-à-dire à la courbure des bandes d'énergie dans l'espace des k au voisinage d'un minimum de la bande de conduction où sont localisés les électrons de conduction.

3.2 Tenseur de masse effective

La masse effective des porteurs en général est dépendante de la direction de ses mouvements dans le semi-conducteur, donc elle est définie par un tenseur d'ordre 2 des dérivées secondes de l'énergie E par rapport au vecteur d'onde k comme suit :

$$\frac{1}{m_{ij}^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E}{\partial k_i \partial k_j} \quad (\text{I.12})$$

Ils correspondent à l'inverse de la dérivée seconde de la relation de dispersion $E(k)$ par rapport aux composantes du vecteur d'onde \vec{k} , c'est donc l'inverse de la courbure de la relation de dispersion [22].

En dimension 3, le tenseur de masse effective est explicitement donné par :

$$m_{i,j}^* = \hbar^2 \left(\begin{array}{ccc} \frac{\partial^2 E(\vec{k})}{\partial k_x^2} & \frac{\partial^2 E(\vec{k})}{\partial k_x \partial k_y} & \frac{\partial^2 E(\vec{k})}{\partial k_x \partial k_z} \\ \frac{\partial^2 E(\vec{k})}{\partial k_x \partial k_y} & \frac{\partial^2 E(\vec{k})}{\partial k_y^2} & \frac{\partial^2 E(\vec{k})}{\partial k_y \partial k_z} \\ \frac{\partial^2 E(\vec{k})}{\partial k_x \partial k_z} & \frac{\partial^2 E(\vec{k})}{\partial k_y \partial k_z} & \frac{\partial^2 E(\vec{k})}{\partial k_z^2} \end{array} \right)^{-1} \quad (\text{I.13})$$

Ainsi, la masse effective des électrons est un tenseur symétrique qui dépend du réseau cristallin via la relation de dispersion.

Dans le cas général, le tenseur de masse effective est anisotrope et possède des éléments non diagonaux, et par rapport aux axes principaux, m_{ij} peut être s'écrit comme suit :

$$m_{ij}^* = \begin{pmatrix} m_1 & 0 & 0 \\ 0 & m_2 & 0 \\ 0 & 0 & m_3 \end{pmatrix} \quad (\text{I.14})$$

Pour GaAs, par exemple, la masse effective de la bande de conduction est indépendant de la direction du crystal, elle devient simplement un scalaire $m_1 = m_2 = m_3$.

4 Masse effective de 4H-SiC

4.1 Introduction

La connaissance des densités équivalentes d'états dans la bande de conduction et la bande de valence est nécessaire à de nombreux calculs comme par exemple le calcul de la densité de porteurs libres d'un matériau dopé, ou le calcul des cinétiques de recombinaison des porteurs photogénérés sur des centres pièges [23]. Le calcul de la densité de porteurs dans les bandes de conduction et de valence nécessite la connaissance de la masse effective des porteurs qui sont incorporées dans les expressions des densités effectives N_C et N_V de la bande de conduction et de valence respectivement :

$$N_C = 2M_c \left(\frac{2\pi m_n^* kT}{h^2} \right)^{3/2} \quad (\text{I.15})$$

$$N_V = 2 \left(\frac{2\pi m_p^* kT}{h^2} \right)^{3/2} \quad (\text{I.16})$$

M_c Correspond au nombre de minimums dans la bande de conduction, h est la constante de Planck et les masses effectives des électrons et des trous m_e^* et m_h^* sont définies au sens de la densité d'état par la formule :

$$m^* = \sqrt[3]{m_{\parallel} m_{\perp 1} m_{\perp 2}} \quad (\text{I.17})$$

4.2 Zones de Brillouin de 4H-SiC

La zone de Brillouin est un concept très important en physique de l'état solide ; elle joue un rôle majeur dans la compréhension théorique des idées élémentaires des bandes d'énergie électroniques [24].

Cette zone se détermine dans le réseau réciproque. En effet, la zone de Brillouin va correspondre au domaine d'influence d'un atome sur les autres atomes voisins. Il faudra raisonner sur les énergies, et donc en fonction des fonctions d'onde. Intuitivement, plus les atomes sont éloignés de l'atome considéré, moins ils auront d'influence. Nous allons ainsi définir des zones d'influence, donc essentiellement avec les plus proches voisins. La notion même de fonction d'onde, rappelle que la quantité de mouvement est très étroitement liée au terme spatialement dépendant de la fonction d'onde. L'espace des phases (les vecteurs k) va en pratique correspondre à celui du réseau réciproque (son origine en fait) [25].

La figure I.5 représente la zone de Brillouin de 4H-SiC, où sont indiqués les points de haute symétrie dans l'espace k et les directions correspondant aux trois principaux axes cristallographiques dans l'espace réel. La description des points de haute symétrie qui constituent la zone de Brillouin réduite de 4H-SiC est résumée dans le tableau (I.2).

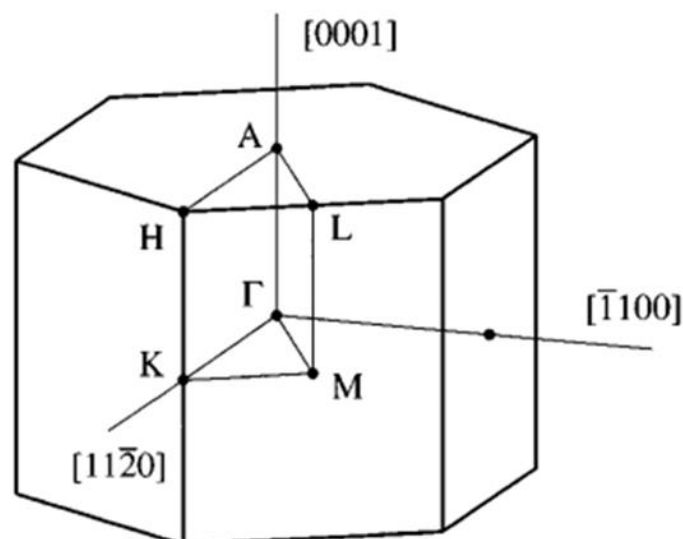


Figure I.5 - La zone de Brillouin de 4H-SiC, avec des points de hautes symétries dans l'espace k et les directions correspondant aux trois axes cristallographiques principaux dans l'espace réel [26].

Symbole	Description
Γ	Centre de la zone de Brillouin
A	Centre d'une face hexagonale
H	Sommet
K	Milieu d'une arête joignant deux faces rectangulaires
L	Milieu d'une arête joignant une face hexagonale et une face rectangulaire
M	Centre d'une face rectangulaire

Tableau I.2 - Les différents points de haute symétrie d'hexagonal

5 Détermination de la masse effective à partir de structure de bande 4H-SiC

5.1 Structure de bande du semi-conducteur 4H-SiC

Les structures électroniques sont calculées généralement pour les géométries atomiques obtenues théoriquement dans le cadre de la théorie de la fonction de la densité (DFT) [27].

Les bandes électroniques de 4H-SiC le long de quelques lignes de hautes symétries sont représentées sur la figure I.6. L'état occupé le plus élevé de la bande de valence est au point Γ . Le minimum de bande de conduction est au point M. Il y a un deuxième minimum de la bande de conduction au point M, qui n'est que de 0,18 eV au-dessus de l'état inoccupé le plus bas. Ces résultats sont cohérents avec l'étude de microscopie balistique à émission d'électrons de Kaczer et al [28] qui ont observé le deuxième minimum d'environ 0,15 eV au-dessus du minimum de bande de conduction la plus basse dans 4H-SiC. La bande interdite indirecte de notre structure électronique calculée de 4H-SiC est de 3,11 eV, ce qui est très proche des données expérimentales d'environ 3,2–3,3 eV [29].

La masse effective de l'électron est calculée au voisinage du minimum de la bande de conduction en faisant un fit parabolique de l'énergie en fonction du vecteur d'onde.

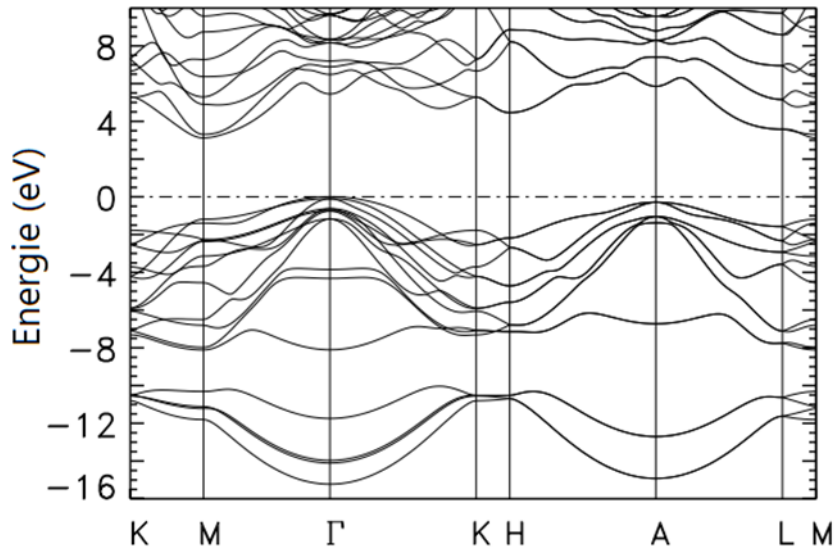


Figure I.6 - La structure de bande d'énergie électronique du 4H-SiC dans les directions à hautes symétries [29].

5.2 Approximations paraboliques des bandes

Pour calculer la masse effective, la courbe de dispersion $E(k)$ au voisinage du minimum est approximé a une parabole (lignes en pointillés) comme le montre la figure I.7, et donc tous les éléments du tenseur (I.13) hors diagonal seront nuls, et la masse effective de l'électron devient un scalaire. La relation de dispersion $E(k)$ est ajustée par une loi parabolique comme suit :

$$E_c(k) = \frac{\hbar^2}{m^*} k^2 \quad (\text{I.18})$$

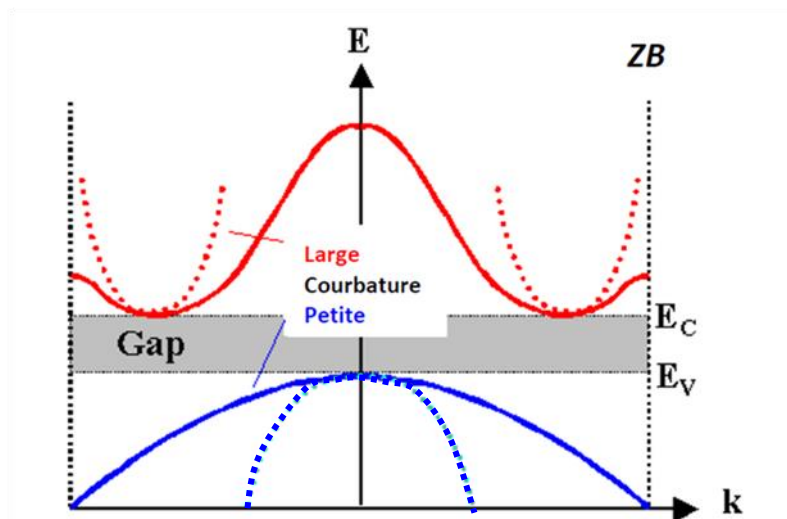


Figure I.7 - Approximation de la courbe de dispersion aux voisinages de minimum de la bande de conduction et de maximum de la bande de valence.

Chapitre I Généralités sur le semi-conducteur SiC et la masse effective

Comme le montre la figure I.7, la ligne rouge en pointillé a une courbure plus grande que le bleu, de sorte que nous nous attendons à ce que la masse effective des électrons soit inférieure à la masse effective des trous.

Dans un matériau anisotrope comme le 4H-SiC, la masse effective calculée à droite du minimum est différente de celle obtenue à gauche. Les masses effectives sont calculées dans les directions des points de hautes symétries $M \rightarrow K$, $M \rightarrow \Gamma$ et $M \rightarrow L$.

Plusieurs chercheurs ont utilisé la méthode DFT et ses approximations pour calculer la masse effective des électrons dans le semi-conducteur 4H-SiC. Le tableau (I.3) résume quelques résultats publiés dans la littérature.

$m_{\parallel} (m_{ML})$	$m_{\perp 1} (m_{M\Gamma})$	$m_{\perp 2} (m_{MK})$	m^*_e (Eq1.18)	Référence
0.31	0.62	0.27	0.37	[29]
0.62	0.39	0.13	0.31	[27]
0.31	0.57	0.28	0.37	[26]

Tableau I.3 - Quelques valeurs calculées de la masses effective (en m_0) des électrons au minimum de la bande de conduction de 4H-SiC

6 Détermination de la masse effective expérimentalement

6.1 Méthode de résonance cyclotron

6.1.1 Introduction

La résonance cyclotron (CR) est une méthode de mesure de la masse effective des porteurs de charge dans les solides. C'est de loin, la méthode la plus directe et la plus précise pour fournir de telles informations. Dans la description la plus simple, le principe de la méthode peut être énoncé comme suit : Une particule de masse effective m^* et de charge e dans un champ magnétique continu B exécute un mouvement hélicoïdal autour de B avec la fréquence cyclotron $\omega_c = eB / m^*$ comme le montre la figure I.8. Si maintenant un champ électrique alternatif de fréquence ω est appliqué au système, perpendiculairement à B , alors en plus de son mouvement de rotation à la fréquence cyclotron ω_c , la particule chargée oscillera simultanément à la fréquence ω également. De plus, si $\omega = \omega_c$, la particule gagnera de l'énergie par résonance du champ électrique alternatif et augmentera son rayon d'orbite dans une spirale toujours croissante [30].

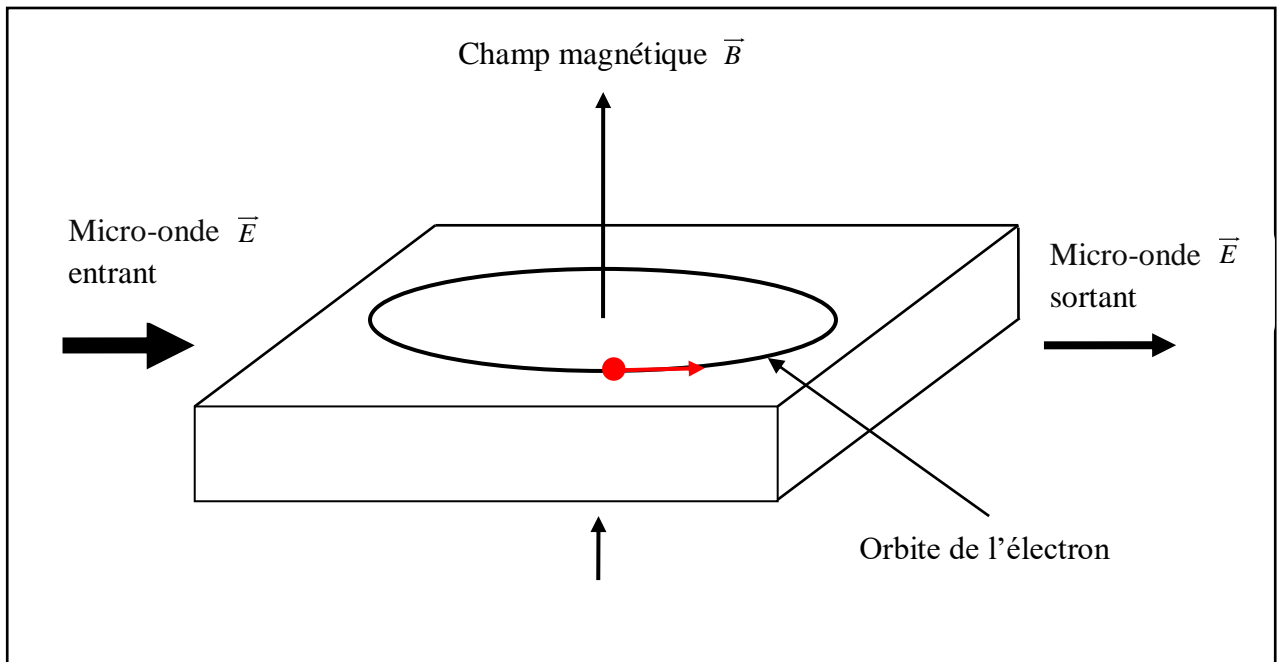


Figure I.8 - Principe de la méthode de résonance cyclotron dans un semi-conducteur. Le sens de parcours de l'orbite est opposé pour les électrons et pour les trous.

Étant donné que B et/ou ω peuvent être balayés en continu à travers la résonance et connus avec un degré de précision très élevé, m^* peut être déterminé directement avec une grande précision par $\omega_c = eB / m^*$. Dans l'expérience CR, les transitions CR sont détectées comme un changement dans l'absorption des rayonnements Micro-ondes, c'est-à-dire la différence entre l'intensité de rayonnement incident et celui sortant de l'échantillon.

Comme objectif secondaire, on peut également utiliser la méthode CR pour étudier les phénomènes de collision des porteurs dans les solides en examinant le temps entre les collisions τ , également connu sous le nom de temps de collision ou de temps de relaxation de transport, qui peut être trouvé à partir de l'équation $\omega_c \tau = 2B_r / \Delta B$. Où B_r est le champ magnétique de résonance, et ΔB est la largeur de raie des pics CR à la moitié du maximum.

À mesure que la fréquence des événements de collision augmente, la largeur de ligne CR augmente et, finalement, CR devient inobservable lorsque la collision se produit trop fréquemment. Plus quantitativement, pour observer CR, τ doit être suffisamment long pour permettre à l'électron de parcourir au moins $1/2\pi$ de tour entre deux événements de collision, c'est-à-dire :

$$\tau \gamma \frac{T_c}{2\pi} = \frac{1}{\omega_c} \quad (\text{I.19})$$

Où

$$\omega_c \tau \gamma \frac{eB}{m^*} \tau = \frac{e\tau}{m^*} B = \mu B \gamma > 1 \quad (\text{I.20})$$

Où T_c est la période du mouvement cyclotron et $\mu = \frac{e\tau}{m^*}$ est la mobilité statique de l'électron.

6.1.2 Description semi-classique du Drude pour la méthode CR

Dans ce modèle [30], [31] chaque électron est supposé indépendamment obéir à l'équation du mouvement :

$$\vec{m}^* \frac{d\vec{v}}{dt} + \vec{m}^* \frac{\vec{v}}{\tau} = e (\vec{E} + \vec{v} \wedge \vec{B}) \quad (\text{I.21})$$

Où \vec{m}^* est le tenseur de la masse effectif, \vec{v} est la vitesse de dérive des électrons, τ est le temps de relaxation (qui est supposée constante), \vec{E} est le champ électrique alternatif et \vec{B} est le champ magnétique continu.

Le tenseur de conductivité complexe $\vec{\sigma}$ est alors défini comme :

$$\vec{J} = ne\vec{v} = \vec{\sigma}\vec{E} \quad (\text{I.22})$$

Où \vec{J} est la densité de courant, et n la densité des porteurs. En supposant que le champ alternatif et la vitesse de dérive ont la forme harmoniquement variable, c'est-à-dire : $\vec{E}(t) = \vec{E}_0 e^{-i\omega t}$ et $\vec{v}(t) = \vec{v}_0 e^{-i\omega t}$, on peut résoudre l'équation (I.21) d'une manière simple. En particulier, pour $\vec{B} \parallel \vec{Z}$, $\vec{\sigma}$ est donnée par

$$\vec{\sigma} = \begin{bmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} & 0 \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & \sigma_{zz} \end{bmatrix} \quad (\text{I.23})$$

$$\sigma_{xx} = \sigma_{yy} = \sigma_0 \frac{i\omega\tau + 1}{(i\omega\tau + 1)^2 + \omega_c^2 \tau^2} \quad (\text{I.24})$$

$$\sigma_{xy} = -\sigma_{yx} = \sigma_0 \frac{\omega_c \tau}{(i\omega\tau + 1)^2 + \omega_c^2 \tau^2} \quad (\text{I.25})$$

$$\sigma_{zz} = \sigma_0 \frac{1}{(i\omega\tau + 1)} \quad (\text{I.26})$$

$$\sigma_0 = ne \mu \frac{ne^2 \tau}{m^*} \quad (\text{I.27})$$

Où μ est la mobilité du porteur et σ_0 est la conductivité statique.

Une fois que nous connaissons le tenseur de conductivité, nous pouvons évaluer la puissance P_a absorbée par les porteurs à partir du champ alternatif comme :

$$P_a = \langle \vec{J}(t) \cdot \vec{E}(t) \rangle = \frac{1}{2} \text{Re} \left(\vec{J}(t) \cdot \vec{E}^*(t) \right) \quad (\text{I.28})$$

Pour une onde électromagnétique polarisée linéairement dans la direction x, c'est-à-dire

$\vec{E} = (E_x, 0, 0)$, l'équation (I.28) se simplifie comme

$$P_a = \frac{1}{2} \text{Re} (J_x \cdot E_x^*) = \frac{1}{2} |E_0|^2 \text{Re} (\sigma_{xx}) \quad (\text{I.29})$$

En remplaçant l'équation (I.24) dans l'équation (I.29), on obtient

$$P_a = \frac{1}{4} |E_0|^2 \sigma_0 \frac{1 + (\omega^2 + \omega_c^2) \tau^2}{\left[1 + (\omega_c^2 - \omega^2) \tau^2 \right]^2 + 4\omega^2 \tau^2} \quad (\text{I.30})$$

L'équation (I.30) est tracé sur la figure I.9 pour différentes valeurs du paramètre $\omega_c \tau$ pour les valeurs positives de ω . Il est évident d'après cette figure qu'un pic d'absorption se produit lorsque $\omega = \omega_c$ et $\omega_c \tau \gg 1$.

Examinons cette condition d'observabilité CR pour un ensemble réaliste de paramètres, si : $m^* = 0.1 m_0$ (où $m_0 = 9.1 \times 10^{-31} \text{ kg}$), et $B = 1 \text{ T}$, alors $\omega_c \approx 2 \times 10^{12} \text{ s}^{-1}$. Ainsi, il faut un champ de micro-ondes d'une fréquence de $f_c = \omega_c / 2\pi \approx 3 \times 10^{11} \text{ HZ}$. Ensuite, afin de pour satisfaire l'équation (I.20), il faut une mobilité minimale de $\mu = 1 \times 10^4 \text{ cm}^2 / (\text{Vs})$. Cette valeur de mobilité ne peut être atteinte que dans un nombre limité de semi-conducteurs de haute pureté à basse température, ce qui constitue une limite importante aux observations de la CR micro-ondes [31].

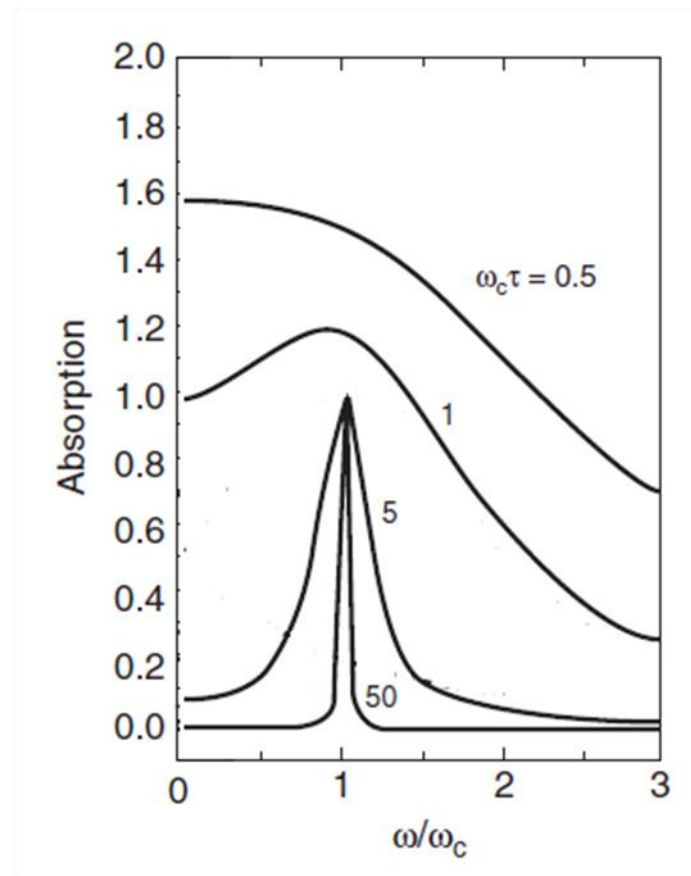


Figure I.9 - La puissance d'absorption CR par rapport aux différentes valeurs de $\omega_c \tau$. Les traces sont obtenues à partir de l'équation (I.30). CR se produit à $\omega = \omega_c$ et $\omega_c \tau \gg 1$. L'absorption est exprimée en unités de $|E_0|^2 \sigma_0 / 4$ [31].

À température ambiante, les temps de relaxation des porteurs dans les cristaux sont de l'ordre de 10^{-13} à 10^{-15} s. Il faut en général travailler sur des cristaux de haute pureté à la température de l'hélium liquide pour obtenir des temps de relaxation suffisamment longue [31].

Ces conditions sont moins sévères avec un rayonnement à haute fréquence, mais il faut alors des champs magnétiques plus élevés.

La figure (I.10) représente un exemple de la méthode de la résonance cyclotron pour le SiC dans sa phase Zinc Blind (3C-SiC) [32]. Les valeurs de la masse effective obtenues dans cette expérience sont : $m_{\parallel} = 0.667 m_0$ et $m_{\perp} = 0.24m_0$.

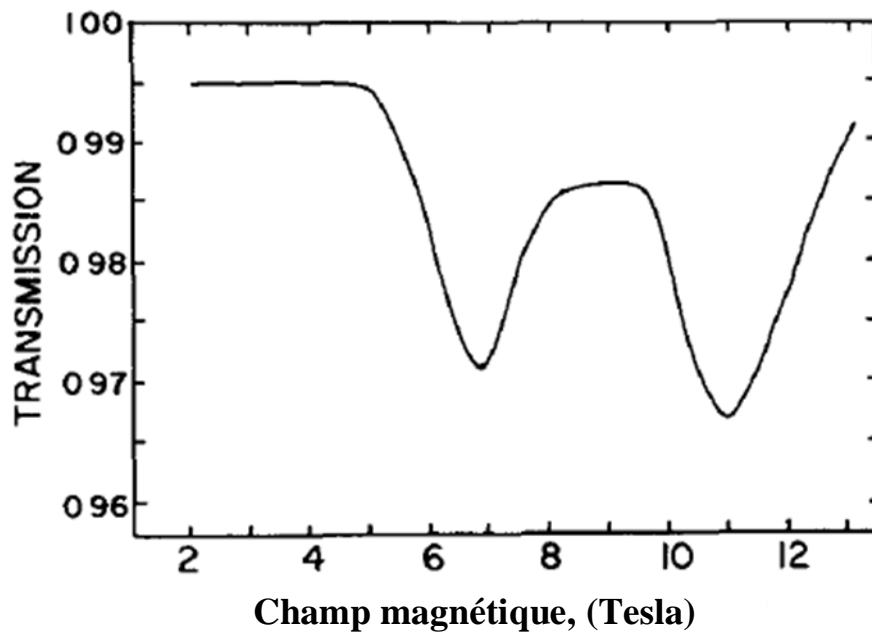


Figure I.10 - Spectre de transmission obtenu par la méthode de cyclotron résonance pour 3C-SiC, la longueur d'onde est $\lambda = 392.3 \mu\text{m}$, $T = 45 \text{ K}$ [32].

6.2 Méthode de résonance cyclotron détectée optiquement (ODCR)

La résonance cyclotron détectée optiquement (ODCR) est la méthode dans laquelle la résonance cyclotron ordinaire (CR) est combinée avec les mesures de photoluminescence (PL) [33]. En conséquence, l'ODCR a le mérite de chaque mesure et il est possible d'étudier les différentes propriétés fondamentales des semi-conducteurs. Lorsque l'électron CR apparaît dans les semi-conducteurs, les électrons absorbent en résonance le rayonnement électromagnétique et sont promus dans des états «chauds» ou hors équilibre, qui sont déviés de l'état normal d'équilibre thermique. Les électrons chauds affectent d'autres particules dans des états libres et / ou liés, et par conséquent, l'intensité PL et / ou le spectre PL changent. Dans les mesures ODCR, le signal est détecté en observant les changements d'intensité PL induits par CR [33].

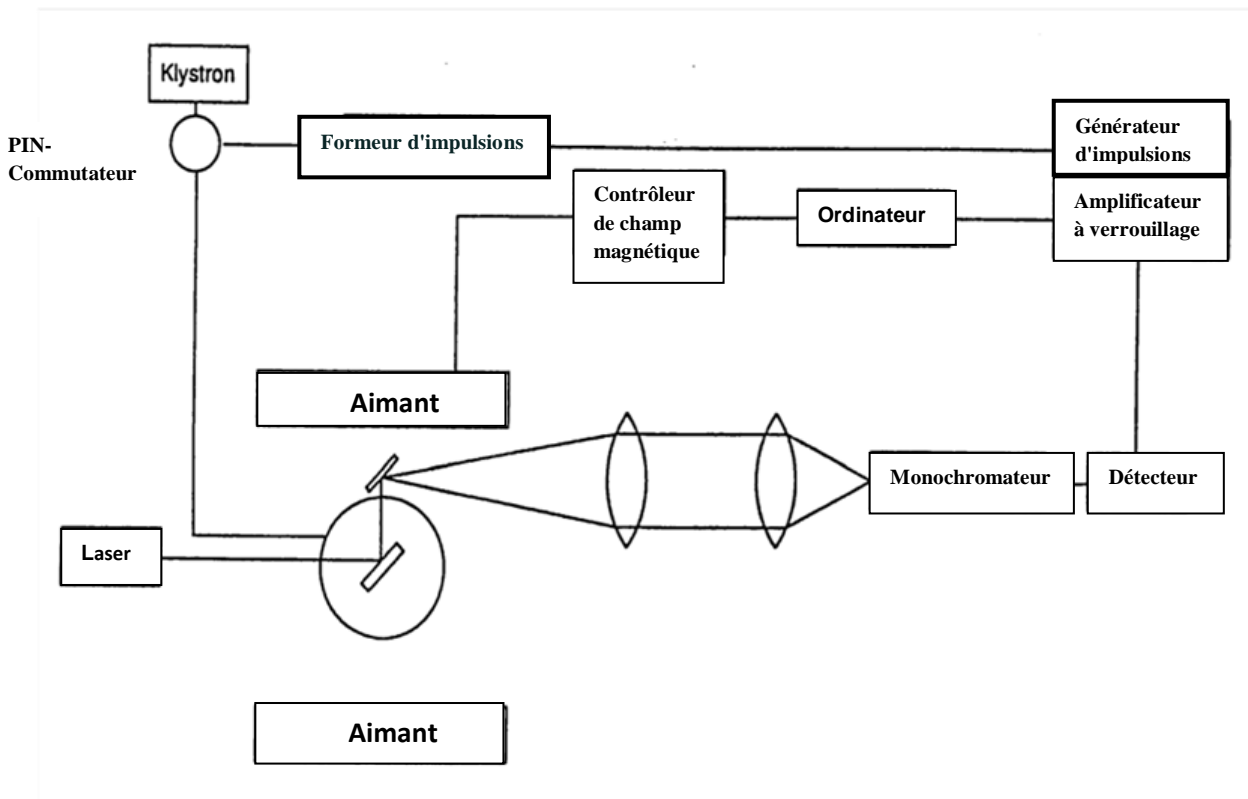


Figure I.11 - Configuration expérimentale pour les enquêtes ODCR. Il se compose d'un spectromètre combiné entre PL et CR avec l'échantillon monté dans un cryostat à hélium liquide pour les études à basse température, et avec une diode PIN intégrée pour la modulation marche-arrêt de la puissance micro-ondes [34].

Dans la figure (I.11) on représente l'une des expériences ODCR où l'échantillon a été immergé dans de l'hélium superfluide au centre d'une cavité micro-onde cylindrique. Un champ magnétique jusqu'à 4 T était fourni par un aimant supraconducteur à bobine divisée. La photoluminescence (PL) a été excitée par la raie à 325 nm d'un laser HeCd (< 10 mW) et a été recueillie par un photomultiplicateur à travers un monochromateur à réseau unique de 1/4 m. Le changement d'intensité PL résultant du champ micro-onde modulé en amplitude était phase sensible enregistrée par un amplificateur de verrouillage, donnant naissance au signal dit ODCR [26]. La figure (I.12) représente les spectres de l'intensité ODCR pour le semi-conducteur 4H-SiC dont le champ magnétique est dirigé selon les trois axes principaux à $T = 1.6$ K.

Lorsque le champ magnétique B était le long de la direction [0001] (c'est-à-dire l'axe c), donnant lieu à une masse efficace d'électrons combinés dans le plan basal : $m^*(\Gamma\text{-M-K}) 0,425m_0$.

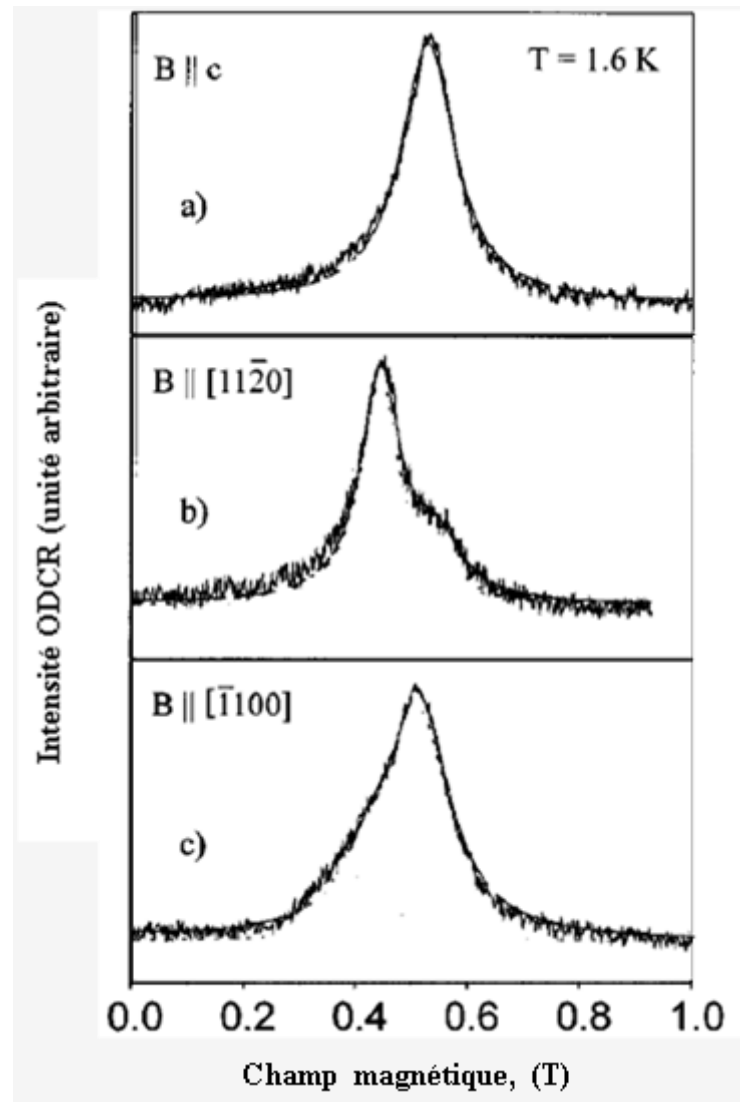


Figure I.12 - Spectres ODCR pris à $T = 1,6 \text{ K}$ lorsque le champ magnétique B est orienté selon les trois axes cristallographiques principaux du réseau 4H-SiC [26].

Les spectres ODCR représentés sur les Fig.I.12 (b) et Fig I.12 (c) obtenus pour les deux axes cristallographiques dans le plan basal sont assez différents de la Fig. I.12(a), confirmant l'anisotropie de la masse électronique parallèle et perpendiculaire à l'axe c . De plus, le spectre ODCR pris lorsque $B \parallel [\bar{1}100]$ [Fig(I.12) (c)] diffère clairement de celui lorsque $B \parallel [11\bar{2}0]$ [Fig(I.12) (b)]. Ces deux valeurs de masse proviennent de deux ensembles d'orientation inéquivalente du tenseur de masse de différentes vallées électroniques, par rapport à la direction de B . Pour résoudre complètement l'anisotropie de la masse effective, l'étude dépendante angulaire des spectres ODCR doit être faite en faisant tourner B dans le plan $(\bar{1}100)$ ou dans le plan $(11\bar{2}0)$. Les résultats sont résumés sur la figure (I.13) et sont analysés en utilisant une expression générale de la masse efficace du cyclotron :

$$m^* = \left(\frac{m_1 m_2 m_3}{m_1 l_1^2 + m_2 l_2^2 + m_3 l_3^2} \right)^{1/2} \quad (I.31)$$

Où l_1, l_2, l_3 sont les cosinus directeurs du champ magnétique par rapport aux axes principaux du tenseur de masse.

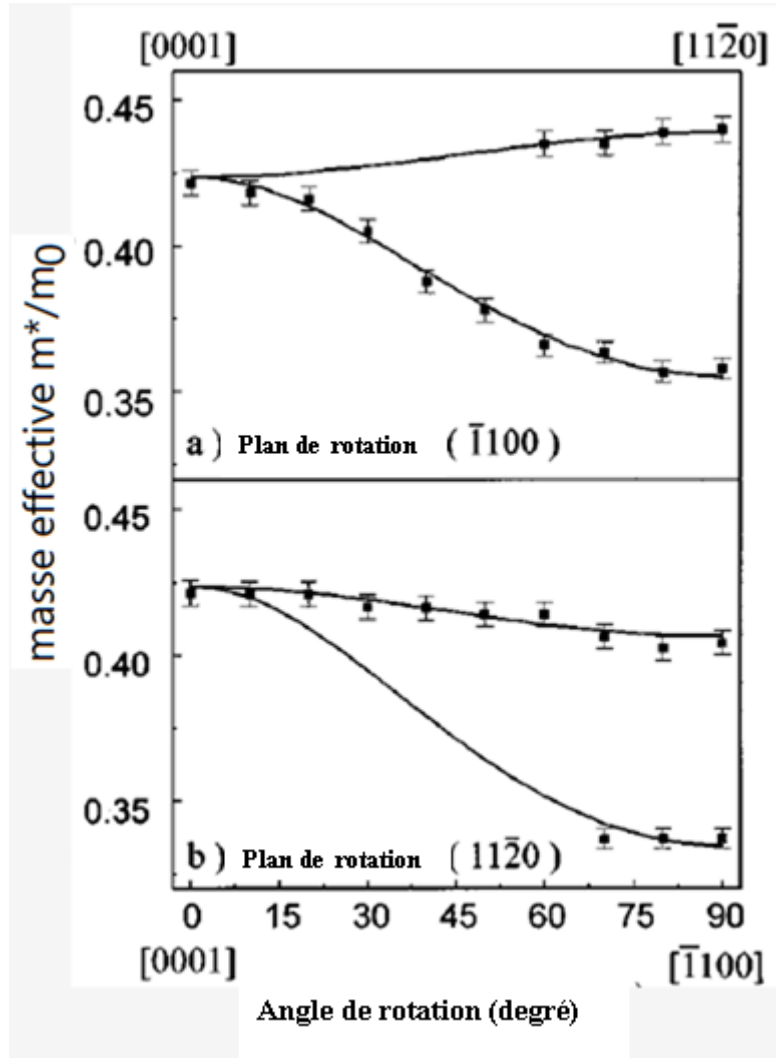


Figure I.13 - Dépendance angulaire des spectres ODCR en faisant tourner B (a) dans le plan (1100) ou (b) dans le plan (1120). Les données expérimentales sont données par les carrés pleins et les courbes d'ajustement en utilisant Equation (I.31) sont représentées par les lignes tracées, en tenant compte de toutes les vallées d'électrons inéquivalentes possibles par rapport à la direction du champ magnétique [26].

Les trois valeurs de masses principales sont déterminées à partir d'un meilleur ajustement aux données expérimentales comme $m_3 = m_{\parallel} (m_{ML}) = 0.33m_0$, $m_1 = m_{\perp 1} (m_{M\Gamma}) = 0.58m_0$ et $m_2 = m_{\perp 2} (m_{Mk}) = 0.31m_0$. Son [35] dans sa part a trouvé les valeurs suivantes $m_{\parallel} = 0.29m_0$, $m_{\perp} = 0.42m_0$.



Chapitre II

Théorie du contact Schottky

1 Introduction

La diode Schottky est un contact de surface d'un métal avec un semi-conducteur. La première diode a été élaborée en 1874 par F.BRAUN [36]. En raison de leur importance dans les applications à courant continu et micro-ondes et en tant que parties complexes d'autres dispositifs semi-conducteurs, les contacts métal-semi-conducteur ont été largement étudiés. Plus précisément, ils ont été utilisés comme photodétecteurs, cellules solaires, comme électrode de grille du MESFET, etc. Plus important encore, le contact métallique sur un semi-conducteur fortement dopé forme un contact ohmique qui est requis pour chaque dispositif semi-conducteur afin de faire passer le courant dans et hors de l'appareil [37].

2 Structure métal/semi-conducteur

Le contact métal-semi-conducteur est un dispositif dit unipolaire, comme le courant est porté par un seul type de porteur (électron ou le trou). La structure métal-semi-conducteur a un grand intérêt dans la conception des comportements électroniques modernes et dans les dispositifs électroniques fonctionnant en hyperfréquence. Ce type de contact peut manifester des effets redresseurs ou des effets ohmiques. En général l'action d'une tension externe sur une structure métal/semi-conducteur donne lieu à une caractéristique courant-tension non symétrique et la structure en question se comporte comme un redresseur : c'est une diode Schottky [38].

Pour étudier la jonction métal-semi-conducteur, il est nécessaire de connaître les grandeurs essentielles qui déterminent le transfert de charge entre les deux matériaux :

- a- Le travail de sortie du métal
- b- L'affinité électronique de semi-conducteur
- c- La hauteur de la barrière du potentiel

2.1 Travail de sortie du métal

On appelle travail de sortie, l'énergie qu'il faut fournir à un électron situé au niveau de Fermi pour l'arracher du métal et l'amener du vide NV [39], comme le montre la figure II.1. Le travail de sortie d'un métal s'écrit :

$$q\phi_m = NV - E_F \quad (\text{II.1})$$

$q\phi_m$: est une constant physique du métal considéré.

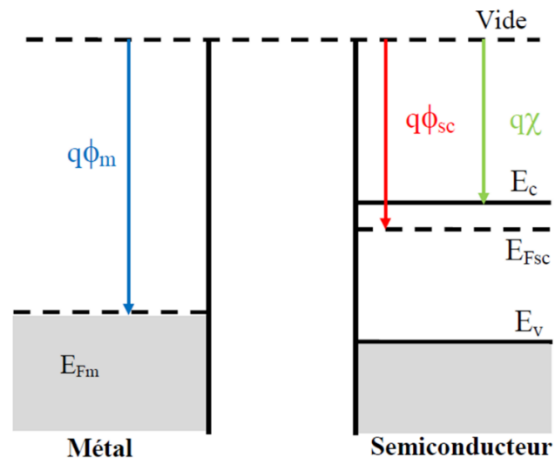


Figure II.1 - Niveaux énergétiques dans un métal et un semi-conducteur avant le contact [40].

Dans le tableau II.1 nous donnons quelques valeurs du travail de sortie de certains métaux :

Métal	Cr	Fe	Ni	Al	Ag	Au
$q\phi_m (eV)$	4.6	4.4	4.4	4.3	4.3	4.8

Tableau II.1 - Travail de sortie de quelques métaux [41].

2.2 Affinité électronique du semi-conducteur

Dans les semi-conducteurs et les isolants, le travail de sortie $q\phi_s$ est défini de la même manière, cependant pour les semi-conducteurs la position du niveau de Fermi (E_F) dépend du dopage et $q\phi_s$ n'est pas constant [39].

Sauf pour les semi-conducteurs dégénérés, il n'y a pas d'électrons au niveau de Fermi. On définit alors l'affinité électronique $q\chi_s$ comme l'énergie qu'il faut fournir à un électron situé dans le bas de la bande de conduction pour l'amener au niveau du vide (NV) [42], comme le montre la figure II.1.

$$q\chi_s = NV - E_c \quad (\text{II.2})$$

$$q\phi_s = NV - E_F \quad (\text{II.3})$$

Le tableau (II.2) résume l'affinité électronique de quelques semi-conducteurs :

Semi-conducteur	Si	Ge	4H-SiC	Diamant
$q\chi_s (eV)$	4.01	4.00	3.30	2.7

Tableau II.2 - Affinité électronique de quelques semi-conducteurs [43].

3 Formation de la barrière Schottky

Lorsqu'on met en contact un métal et un semi-conducteur, et quand le travail de sortie du semi-conducteur est inférieur à celui du métal ($q\phi_m > q\phi_s$), les électrons du semi-conducteur ont une plus grande énergie que ceux du métal. Ils vont donc passer du semi-conducteur vers le métal en laissant derrière eux des donneurs ionisés qui ne sont plus compensés. A l'équilibre thermodynamique, les niveaux de Fermi de deux matériaux sont alignés ce qui entraîne la courbure des bandes vers le haut côté semi-conducteur. Une zone de charge d'espace (ZCE) (dite aussi zone de déplétion) de largeur W apparaît alors entre les deux matériaux. Il se crée une accumulation d'électron à l'interface côté métal comme le montre le diagramme des bandes de la figure II.2. La ZCE créée s'étend davantage côté semi-conducteur, alors que le nombre de charge positives côté semi-conducteur est le même que le nombre de charge négatives accumulées à l'interface côté métal [44].

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

$$q\phi_b = q(\phi_m - \chi_s) \quad (\text{II.4})$$

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

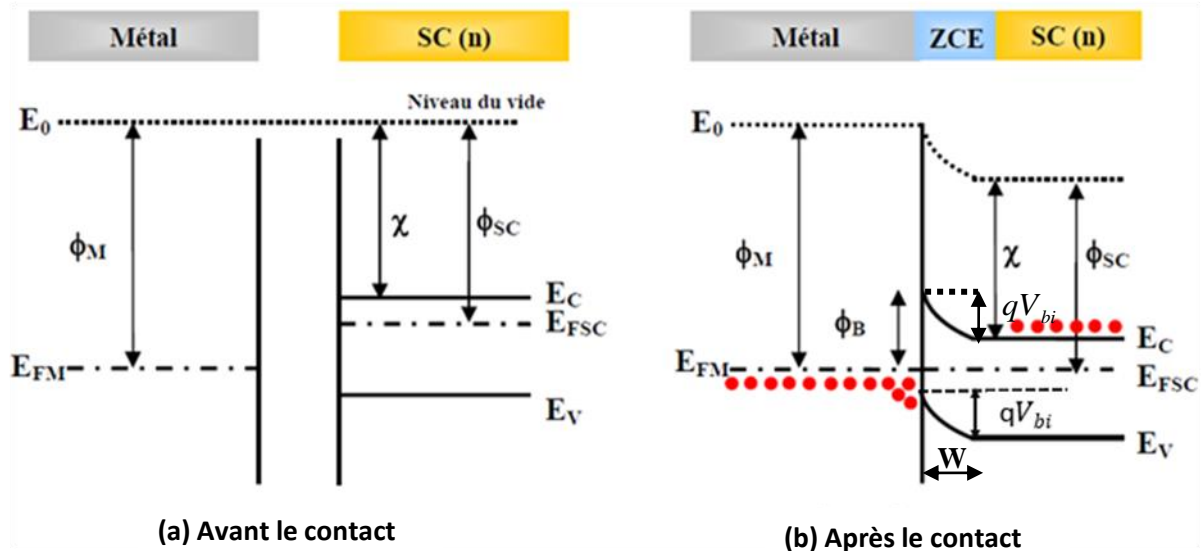


Figure II.2 - Diagramme des bandes d'énergie pour un métal et un semi-conducteur (n) lorsque ($q\phi_m > q\phi_s$), (a) avant mise en contact et (b) après mise en contact [44].

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

Dans le cas réelle, il existe toujours des états de surface au niveau de contact métal/semi-conducteur et la hauteur de barrière de potentiel (ϕ_b) dépend du travail de sortie du métal et de l'affinité électronique du semi-conducteur mais aussi de la présence des états d'interface induits par le contact [45].

4 Zone de charge d'espace

Comme le montre la figure II.2, La courbure des bandes d'énergie du semi-conducteur 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 repartons de l'équation de Poisson :

$$\frac{\partial^2 V}{\partial x^2} = - \frac{\rho}{\epsilon_s} \quad (\text{II.5})$$

Où ρ : la densité de charge dans la zone de charge d'espace.

ϵ_s : la permittivité absolue du semi-conducteur.

V: est le potentiel dans la ZCE.

Pour des contacts où le semi-conducteur est de type (n), sous l'approximation du contact abrupt ($\rho \approx q N_D$ pour $x < w$ et $\rho \approx 0$, le champ $E \approx 0$ pour $x > w$) On obtient [46] :

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

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

Où k_B est la constante de Boltzmann, N_D est la densité des porteurs donneurs et T est la température.

✓ Le champ électrique dans la zone de déplétion :

$$|\xi(x)| = \frac{qN_D}{\epsilon_s} (W - x) \quad (\text{II.7})$$

✓ Le potentiel dans la zone de déplétion :

$$E_c(x) = q\phi_b - \frac{q^2 N_D}{\epsilon_s} \left(Wx - \frac{x^2}{2} \right) \quad (\text{II.8})$$

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

$$W = \sqrt{\frac{2\varepsilon_s}{qN_D} (V_{bi} - V - \frac{k_B T}{q})} \quad (\text{II.9})$$

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

$$Q_{sc} = q N_D W = q N_D \sqrt{\frac{2\varepsilon_s}{qN_D} (V_{bi} - V - k_B T/q)} \quad (\text{II.10})$$

- ✓ La différence en énergie entre le niveau de Fermi du semi-conducteur et le niveau bas de la bande de conduction loin dans le substrat est notée $q\zeta$, sa valeur est donnée par :

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

5 Abaissement de barrière par la force image ; effet Schottky

Lorsqu'un électron se trouve à une distance (x) du métal, une charge positive est induite sur la surface du métal. La force d'attraction entre l'électron et la charge positive induite est équivalente à la force qui existerait entre l'électron et une charge positive égale située à ($-x$). Cette charge positive est appelée charge image. Par conséquent la charge du semi-conducteur est attirée par le métal ce qui abaisse la barrière de potentiel ϕ_B [46].

La force attractive coulombien est donnée par :

$$F = - \frac{q^2}{16\pi\varepsilon_0} \frac{1}{x^2} \quad (\text{II.12})$$

ε_0 : Est la permittivité de l'espace libre.

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

$$U(x) = - \frac{q^2}{16\pi\varepsilon_0} \frac{1}{x} \quad (\text{II.13})$$

Quand un champ externe ξ est appliqué, l'énergie potentielle totale E_p en fonction de la distance (mesurée suivant l'axe x), est donnée par :

$$E_p(x) = - \frac{q^2}{16\pi\varepsilon_0} \frac{1}{x} - q\xi x \quad (\text{II.14})$$

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

$$x_m = \sqrt{\frac{q}{16\pi\varepsilon_0 \xi}} \quad (\text{II.15})$$

$$\Delta \phi_B = \sqrt{\frac{q\xi}{4\pi\varepsilon_0}} = 2\xi x_m \quad (\text{II.16})$$

Ces résultats peuvent être appliqués aux systèmes métal-semi-conducteurs comme le montre la figure II.3. Cependant, le champ doit être remplacé par le champ approprié à l'interface, et la

permittivité du vide ϵ_0 , doit être remplacée par une permittivité appropriée ϵ_s , caractérisant le milieu semi-conducteur, c'est-à-dire,

$$\Delta \phi_B = \sqrt{\frac{q\xi_m}{4\pi\epsilon_s}} \tag{II.17}$$

Dans une diode Schottky pratique, le champ électrique n'est pas constant avec la distance, et la valeur maximale à la surface basée sur l'approximation d'appauvrissement peut être utilisée,

$$\xi_m = \sqrt{\frac{2qN_D}{\epsilon_s}(\phi_B - \zeta + V)} \tag{II.18}$$

En substituant ξ_m dans l'équation (I.17) on obtient l'expression d'abaissement de la barrière Schottky $\Delta\phi_B$:

$$\Delta \phi_B = \sqrt{\frac{q\xi_m}{4\pi\epsilon_s}} = \left[\frac{q^2 N_D}{8\pi^2 \epsilon_s^3} (\phi_b - \zeta + V_R) \right]^{1/4} \tag{II.19}$$

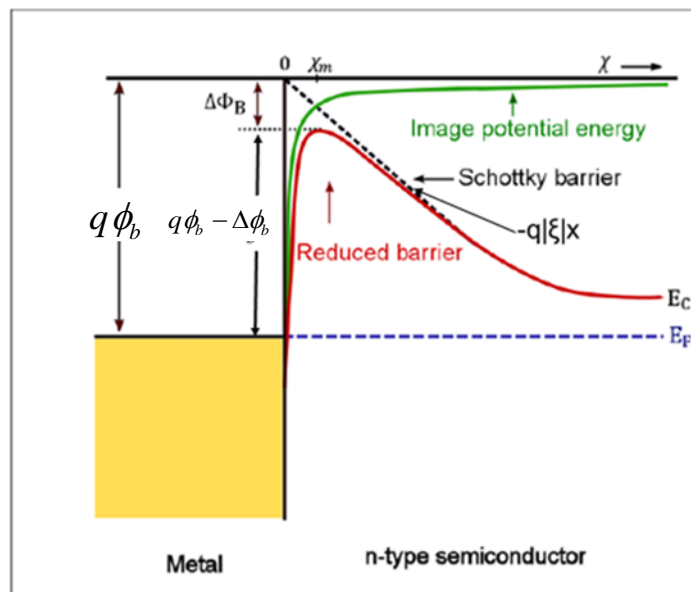


Figure II.3 - L'abaissement de la barrière Schottky par effet Schottky é l'équilibre thermodynamique ($V_R = 0$ volts) [47].

6 Mécanismes de transport du courant dans un contact M/S en polarisation inverse

Dans une jonction métal/semi-conducteur polarisée en inverse, le transport du courant peut se faire selon les deux mécanismes représentés à la figure II.4

1. Emission Thermoïonique.
2. effet tunnel.

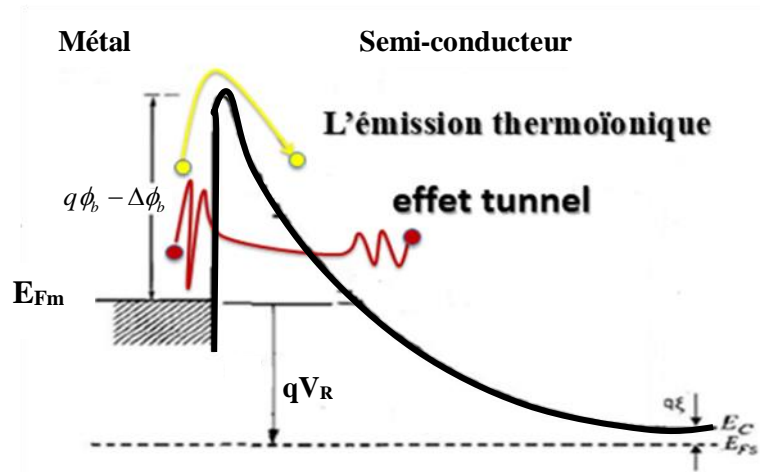


Figure II.4 - Mécanismes de transport des charges à travers une barrière Schottky sous Polarisation inverse.

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

$$J = J_{SM} - J_{MS} = \frac{qm^*}{2\pi^2\hbar^3} \int_0^\infty T(E_x) \ln \left(\frac{1 + \exp(-q\zeta - E_x/K_B T)}{1 + \exp(-q\zeta - qV - E_x/K_B T)} \right) dE_x = J_{Tun} + J_{Therm} \quad (\text{II.20})$$

Avec $T(E_x)$ est le coefficient de transmission, $q\zeta$: la différence en énergie entre le niveau de Fermi du semi-conducteur et le niveau bas de la bande de conduction, E_x : est l'énergie perpendiculaire au plan de la barrière Schottky

L'équation (II.20) 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 (J_{Therm}), et quand l'énergie est inférieure à la barrière on est dans le cas de l'effet tunnel (J_{Tun}).

6.1 Courant tunnel

Ce mécanisme est caractérisé par un passage des porteurs de charge à travers la barrière par effet tunnel quantique lorsque leur énergie n'est pas suffisante pour la surmonter, et lorsque cette 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 [18].

Le courant tunnel total résultant est donné par l'équation

$$J_{tu} = \frac{A^*T}{K_B} \int_{E_{min}}^{E_{max}} T(E_x) \ln \left(\frac{1 + \exp(-q\zeta - E_x/K_B T)}{1 + \exp(-q\zeta - qV - E_x/K_B T)} \right) dE_x \quad (\text{II.21})$$

Avec: E_{min} : L'énergie minimale pour laquelle l'effet tunnel se produit.

E_{max} : L'énergie maximale du profil de la barrière de potentiel considéré.

6.2 Effet tunnel

Considérons un potentiel rectangulaire $U(x)$ s'annulant pour $x \rightarrow \pm\infty$, possédant un maximum unique U_0 (Figure II.5) et une particule d'énergie $0 < E < U_0$. La trajectoire classique possède deux points de rebroussement "Turning points" x_1 et x_2 .

Supposons que la particule arrive de la région $x \rightarrow -\infty$ en se propageant vers la droite.

Une particule classique serait renvoyée en $x = x_1$ par la barrière de potentiel, mais une particule quantique possède une probabilité non nulle de franchir la barrière. En effet, la fonction d'onde ne s'annule pas dans la région $x_1 \leq x \leq x_2$, et il est possible de la raccorder à une onde plane dans la région $x > x_2$. Le phénomène est analogue à celui d'une onde évanescente en optique. Le problème est donc de calculer le coefficient de transmission (transparence) $T(E)$ qui est la probabilité que la particule réussisse à traverser ce potentiel [48].

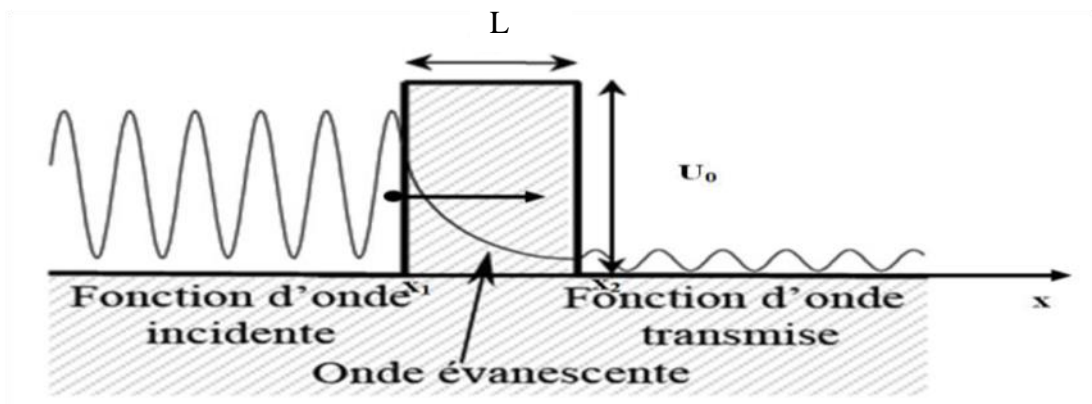


Figure II.5 - Fonction d'onde d'un porteur d'énergie E , évoluant dans une structure rectangulaire (la fonction d'onde réfléchi n'est pas représentée) [48].

Dans notre travail, nous allons utiliser la méthode d'approximation Wentzel-Kramers-Brillouin (WKB) pour calculer le coefficient de transmission.

La méthode Wentzel-Kramers-Brillouin permet le calcul quasi-classique de la transparence d'une barrière de potentiel quelconque. Ce formalisme développé en 1926 [48] repose sur l'idée que la mécanique quantique tend vers la mécanique classique quand \hbar tend vers zéro.

L'approche WKB a pour principal avantage le fait d'être analytique quel que soit le profil de potentiel. La condition nécessaire pour que cette approche soit applicable au calcul de la transparence est que l'énergie potentielle doit varier lentement à l'échelle de la longueur d'onde des porteurs incidents.

Le coefficient de transition T_{WKB} :

$$T_{WKB} = \exp\left(-2\left(\frac{2m^*}{\hbar^2}\right)^{1/2} \int_{x_1}^{x_2} (U(x) - E)^{1/2} dx\right) \quad (\text{II.22})$$

6.3 Courant d'émission thermoïonique (TE)

Pour ce phénomène qui est prépondérant dans le cas des faibles tensions, l'émission des porteurs de charges est fortement dépendante de la température et la densité de courant peut se déduire de l'équation (II.20) en intégrant sur un intervalle des énergies supérieures à la barrière Schottky et en posant $T(E_x) = 1$ [49] :

$$J = J_s \left(e^{\frac{qV}{k_B T}} - 1 \right) \quad (\text{II.23})$$

Avec J_s est le courant de saturation :

$$J_s = A^* T^2 e^{\left(\frac{-q\phi_b}{k_B T}\right)} \quad (\text{II.24})$$

A^* : la constante effective de Richardson donnée par la relation :

$$A^* = \frac{4\pi q m_e k_B^2}{h^3} \quad (\text{II.25})$$

L'équation (II.24) ne prend pas en compte l'effet Schottky, à savoir la diminution de la hauteur de la barrière causée par l'effet de la force image en présence d'un champ électrique.

Tenant compte de cet effet, l'équation devient :

$$J_s = A^* T^2 e^{\left(\frac{-q(\phi_b - \Delta\phi)}{k_B T}\right)} \quad (\text{II.26})$$

Avec $\Delta\phi$ est l'abaissement de barrière de potentiel donné par l'équation (II.19)



Chapitre III

Méthode de calcul et Résultats

1 Modèle de la barrière Schottky en polarisation inverse

Le profil de la barrière du contact métal/semi-conducteur est représenté sur la figure III.1. Le courant total qui circule dans la diode Schottky est la somme du courant tunnel et thermoïonique.

La barrière d'énergie $U(x)$ est en fonction de la distance x (l'origine $x = 0$ est localisée à l'interface du contact), elle est mesurée en respectant l'énergie basse de la bande de conduction dans la région neutre du semi-conducteur et son expression est donné par :

$$U(x) = \frac{q^2 N_D}{2 \epsilon_S} (W - x)^2 - \frac{q^2}{16 \pi \epsilon_S x} \quad (\text{III.1})$$

Où N_D est la concentration de dopage (type n), ϵ_S est la permittivité du semi-conducteur, W est la largeur de la zone de déplétion qui dépend de la tension appliquée (V_R) au contact Schottky et de la hauteur de barrière (ϕ_b) donnée par :

$$W = \sqrt{\frac{2 \epsilon_S}{q N_D} (\phi_b - \zeta - V)} \quad (\text{III.2})$$

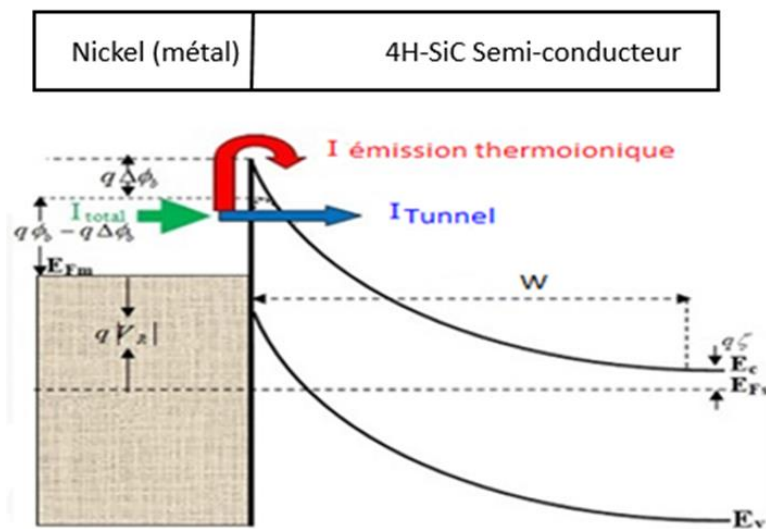


Figure III.1 - Profil de la barrière Schottky sous polarisation inverse en tenant compte de l'effet de la force image. Le courant total est la somme de courant d'émission thermoïonique et le courant tunnel.

Le premier terme de l'équation (III.1) est la forme parabolique conventionnelle de la barrière Schottky à l'interface. Le deuxième terme est le potentiel de la force image additionné à la composante de la zone de déplétion. La position x_{max} qui correspond à la valeur maximale U_{max} du profil de l'énergie de potentiel est donnée par la résolution de cette équation :

$$\frac{dU(x)}{dx} = \frac{q^2}{16 \pi \epsilon_S x_{max}^2} - \frac{q^2 N_D}{\epsilon_S} (W - x_{max}) = 0 \quad (\text{III.3})$$

2 Algorithme de calcul du courant tunnel

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

1. Calcul de la valeur maximale U_{max} du profil de potentiel exprimé par la relation (III.1) en calculant d'abord l'abscisse correspondante x_{max} par la dérivation par rapport à la distance x puis le résultat de la dérivation est résout par la méthode itérative de Newton.
2. Pour chaque valeur donnée de l'énergie E de la particule, on résout l'équation (III.4) pour trouver les deux point de rebroussement x_1 et x_2 :

$$\frac{q^2 N_D}{2\epsilon_S} (W - x)^2 - \frac{q^2}{16\pi\epsilon_S x} = E \quad (\text{III.4})$$

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

3. Calcul de coefficient de transmission $T(E)$ en calculant l'intégrale par la méthode de trapèzes

$$T_{WKB} = \exp\left(-2\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^{1/2} \int_{x_1}^{x_2} (U(x) - E)^{1/2} dx\right) \quad (\text{III.5})$$

4. Calcul de la densité de courant en intégrant la relation suivante par la méthode de trapèzes :

$$J_{tun} = \frac{A^* T}{k_B} \int_{E_{min}}^{E_{max}} T(E_x) \ln \frac{1 + \exp\left(\frac{-q\zeta - E_x}{k_B}\right)}{1 + \exp\left(\frac{-q\zeta - qV - E_x}{k_B T}\right)} dE_x \quad (\text{III.6})$$

On note ici que l'énergie E_{min} est choisie de telle manière que la densité de courant totale soit pratiquement constante pour chaque valeur de la tension V ($E_{min} \approx U_{max} - q\phi_b$).

Pour résumer les étapes précédentes nous construisons l'organigramme représenté sur la figure III.2

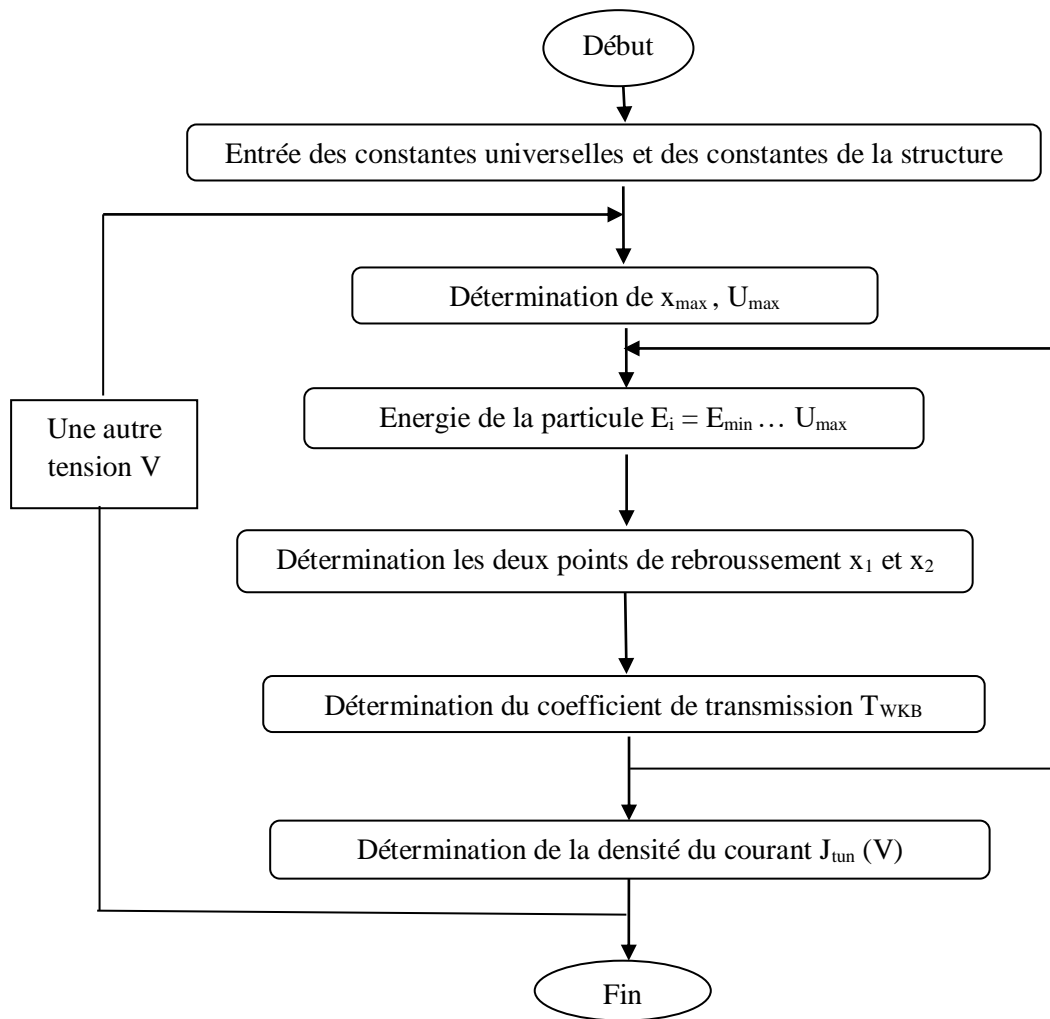


Figure III.2 - Organigramme pour le calcul de la densité de courant tunnel dans une diode Schottky.

Un exemple de calcul pour le coefficient de transmission par la méthode WKB est représenté sur la Figure III.3. De cette figure on constate que le coefficient de transmission diminue lorsque l'énergie de la particule diminue et quand elle s'approche de l'énergie maximale de la barrière de potentiel de la diode Schottky (U_{max}) elle atteint l'unité (1). Cette diminution est expliquée par le grandissement de la largeur de la barrière Schottky lorsque l'énergie est diminuée.

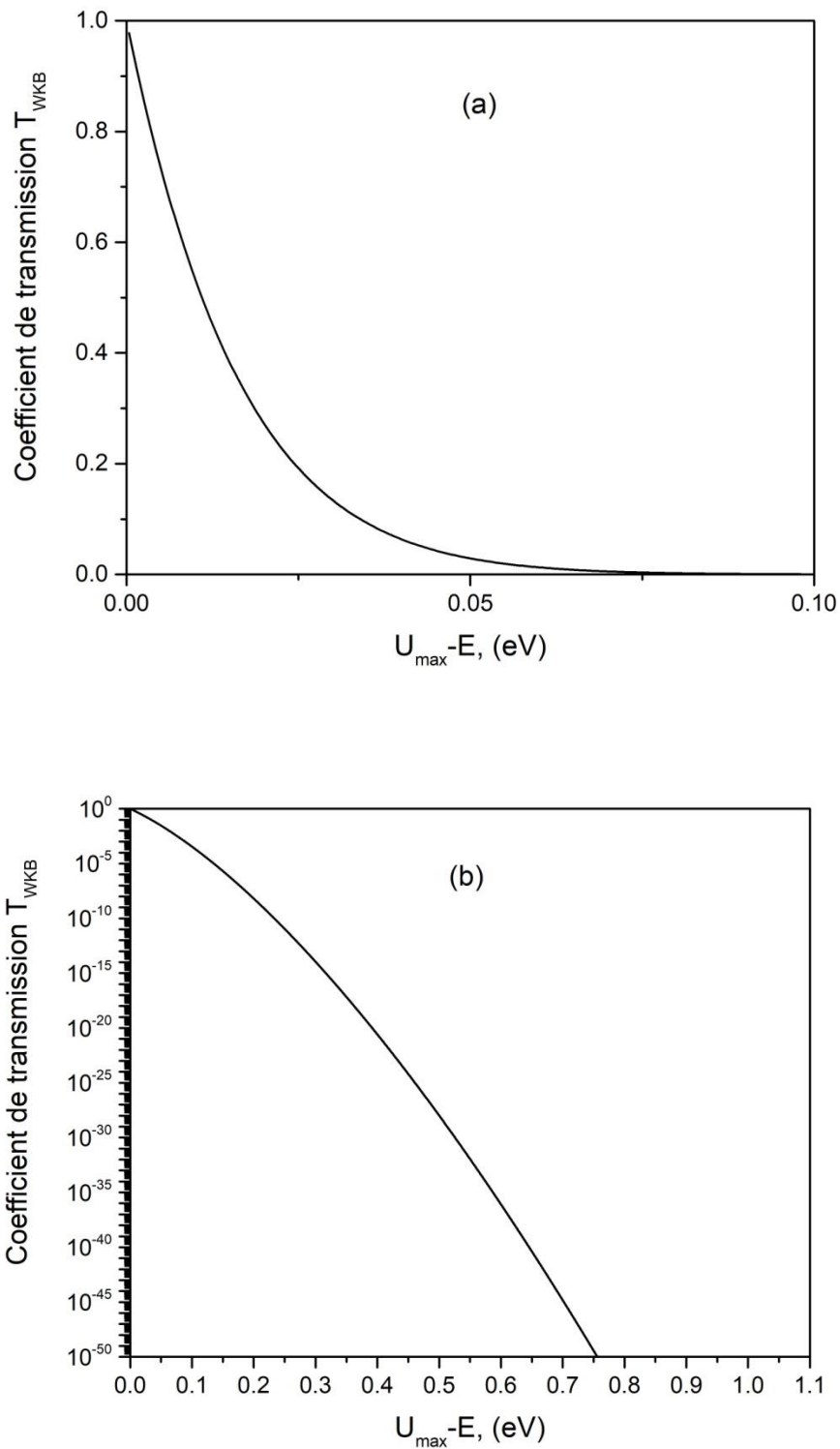


Figure III. 3 - Coefficient de transmission en fonction de l'énergie de particule. (a) échelle linéaire, (b) échelle semi-logarithmique dans les conditions suivantes : $V_R = -50$ volts,

$$N_D = 2 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-3}, \phi_b = 1.1 \text{ eV}, m_e^* = 0.2m_0.$$

3 Extraction de la masse effective par la méthode I-V

3.1 Données expérimentales

Pour appliquer la méthode I-V pour la détermination de la masse effective des électrons dans le semi-conducteur 4H-SiC nous avons utilisés des caractéristiques expérimentales I-V de la diode Schottky Nickel/4H-SiC déjà publiées dans la littérature [50]. La diode Schottky a été fabriqués sur la base du matériau épitaxial commercial 4H-SiC produit par le semi-conducteur intrinsèque : la concentration de donneurs dans la couche-n était $N_D = 2 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$, et l'épaisseur de la couche-n était $d = 12 \mu\text{m}$. Le contact d'anode de $250 \mu\text{m}$ de diamètre ont été formés par le dépôt de nickel par faisceau d'électrons sous vide poussé (l'épaisseur de la couche de Ni était d'environ 150 nm). En outre, le contact ohmique de nickel avec le substrat (cathode), qui a été meulé par l'arrière, a été formé par pulvérisation ionique d'une cible de Ni (l'épaisseur de la couche de Ni était d'environ 100 nm) avec un recuit ultérieur sous vide à une température de 950°C pendant 15 min .

Les caractéristiques I-V inverses pour différentes températures de cette diode Schottky sont illustrés sur la figure III.4.

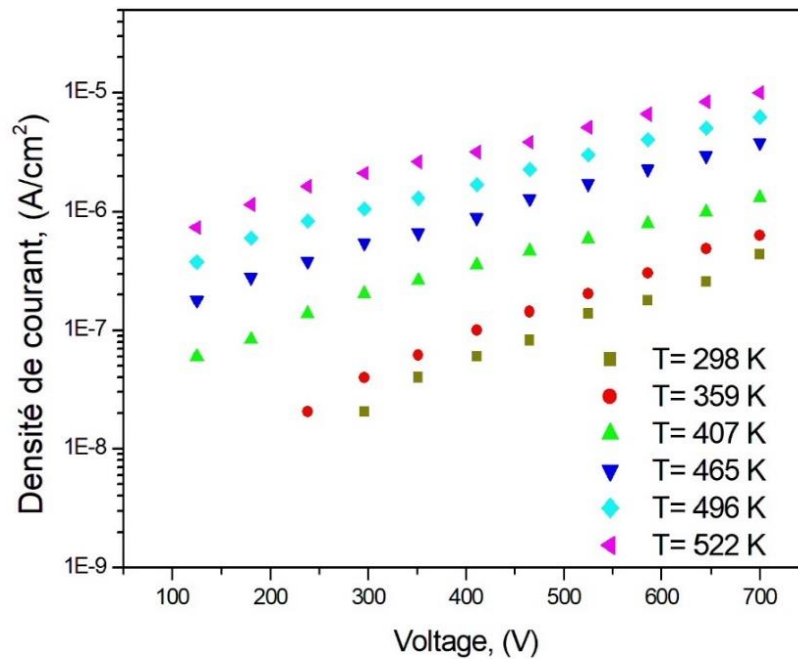


Figure III.4 - Données expérimentales J-V d'une diode Schottky Ni/4H-SiC en polarisation inverse pour différentes températures [50].

3.2 Méthode d'optimisation verticale

La méthode des moindres carrés est l'une des méthodes la plus utilisée pour modéliser des mesures expérimentales par une fonction analytique prédéterminée. Cette méthode consiste à minimiser l'écart moyen relatif entre l'ensemble de N mesures J_i^{exp} et l'ensemble des résultats J_i^{th} calculés par le modèle de l'équation (II.20). En d'autre terme, il s'agit de minimiser la fonction suivante :

$$S = \sum_{i=1}^N \left(\frac{J_i^{ex} - J_i^{th}}{J_i^{th}} \right)^2 \quad (III.7)$$

Où J_i^{ex} est la valeur expérimentale, J_i^{th} est la valeur d'ajustement du courant et N est le nombre de points de mesure.

Dans notre présent travail et pour déterminer les valeurs de la masse effective et de la hauteur de barrière qui correspond au meilleur ajustement pour les données expérimentales nous utilisons la méthode de balayage qui est une méthode pour trouver des valeurs approchées de la solution de l'équation $S(m^*/m_0, \phi_b) = 0$. Pour cela on effectue les opérations suivantes :

a) On commence par balayer l'intervalle $[(m^*/m_0)_{initial}, (m^*/m_0)_{final}] = [0.01, 1]$ avec un pas de 0.1. C'est-à-dire qu'on calcule $S(0.01), S(0.1), S(0.2), \dots$ pour une valeur fixe de la hauteur de barrière ϕ_b de l'intervalle $[0.9, 1.5]$. On refait le même calcul pour des autres valeurs de $\phi_b = 0.9 + i*0.1$. Puis on trace la variation de S en fonction de m^*/m_0 pour différentes valeurs de ϕ_b .

b) Dès qu'on trouve les deux valeurs de la masse effective $(m^*/m_0)_1$ et la hauteur de barrière $(\phi_b)_1$ qui vérifient la minimisation de S on balaie ensuite les deux nouveaux intervalles $[(m^*/m_0)_1 - 0.1, (m^*/m_0)_1 + 0.1]$ et $[(\phi_b)_1 - 0.1, (\phi_b)_1 + 0.1]$ avec un pas de 0.01 pour les deux paramètres m^*/m_0 et ϕ_b . Puis on trace une autre fois la variation de S en fonction de m^*/m_0 pour différentes valeurs de ϕ_b .

c) Dès que on détermine les deux valeurs de $(m^*/m_0)_2$ et $(\phi_b)_2$ qui minimisent le critère S on continue en balayant les intervalles $[(m^*/m_0)_2 - 0.01, (m^*/m_0)_2 + 0.01]$ et $[(\phi_b)_2 - 0.01, (\phi_b)_2 + 0.01]$ avec un pas 0.001 pour les deux paramètres m^*/m_0 et ϕ_b .

L'organigramme illustré sur la figure III.5 résume les différentes étapes pour la détermination du critère d'optimisation (S).

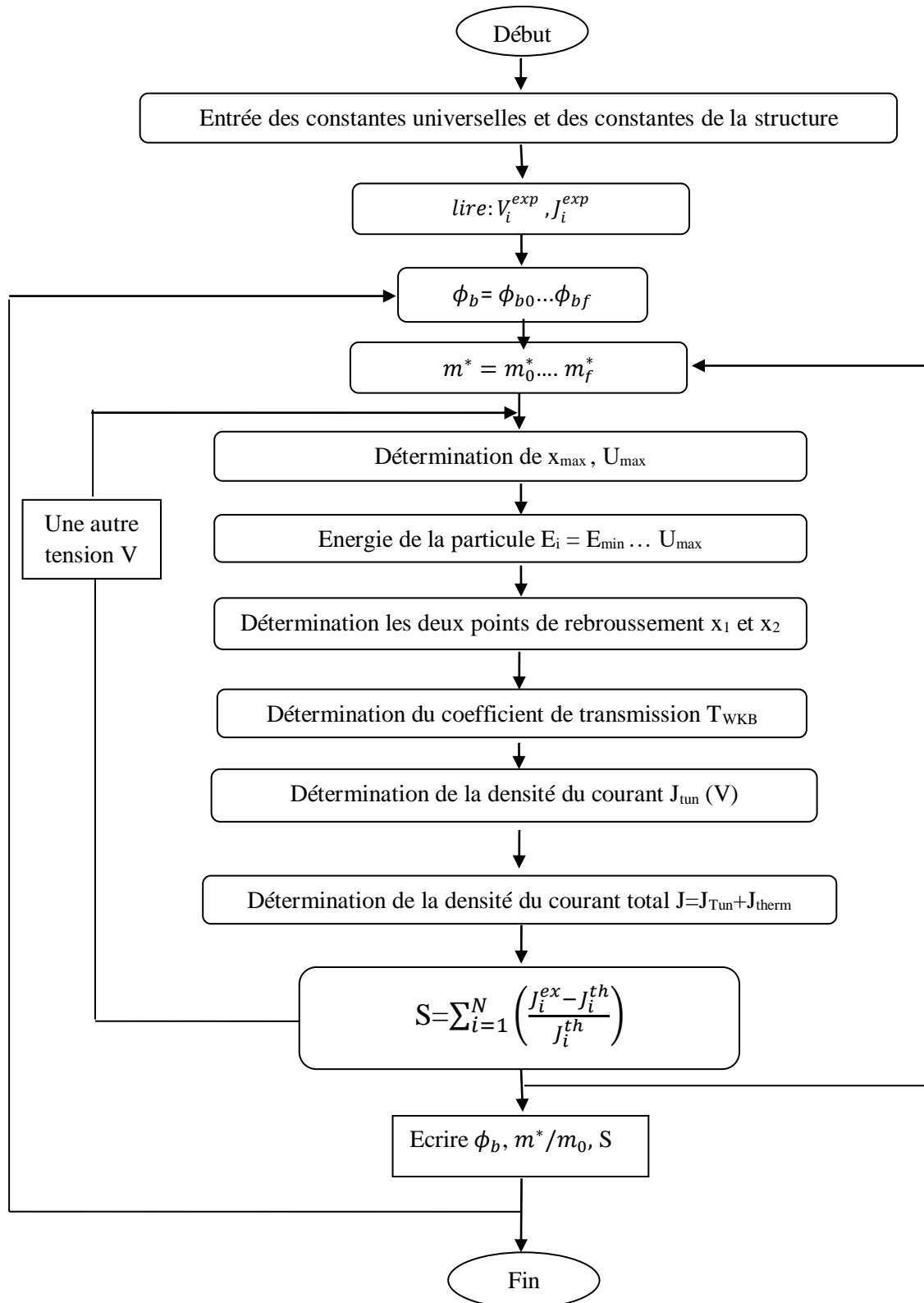
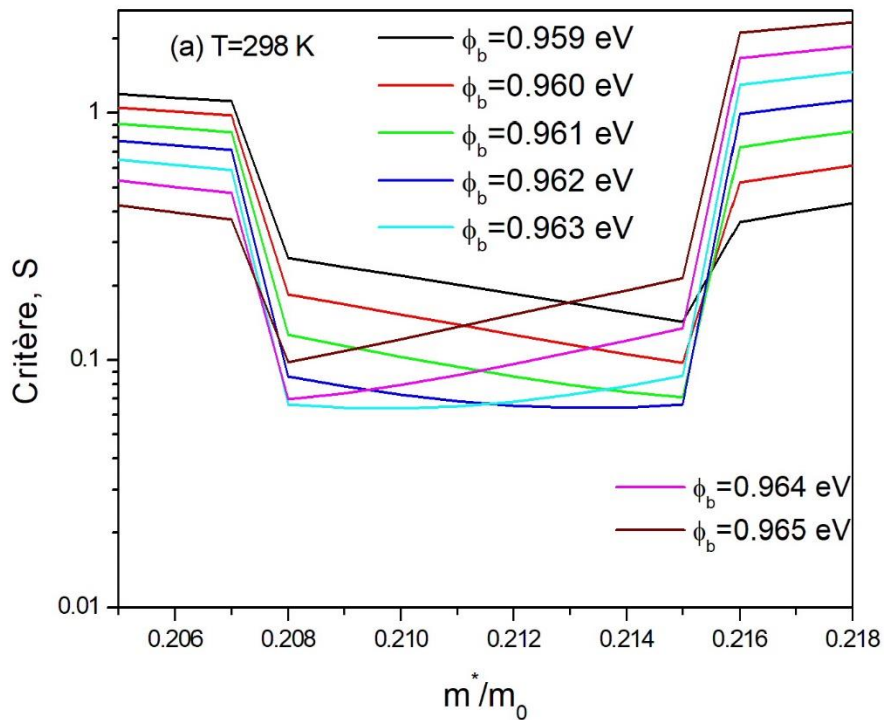


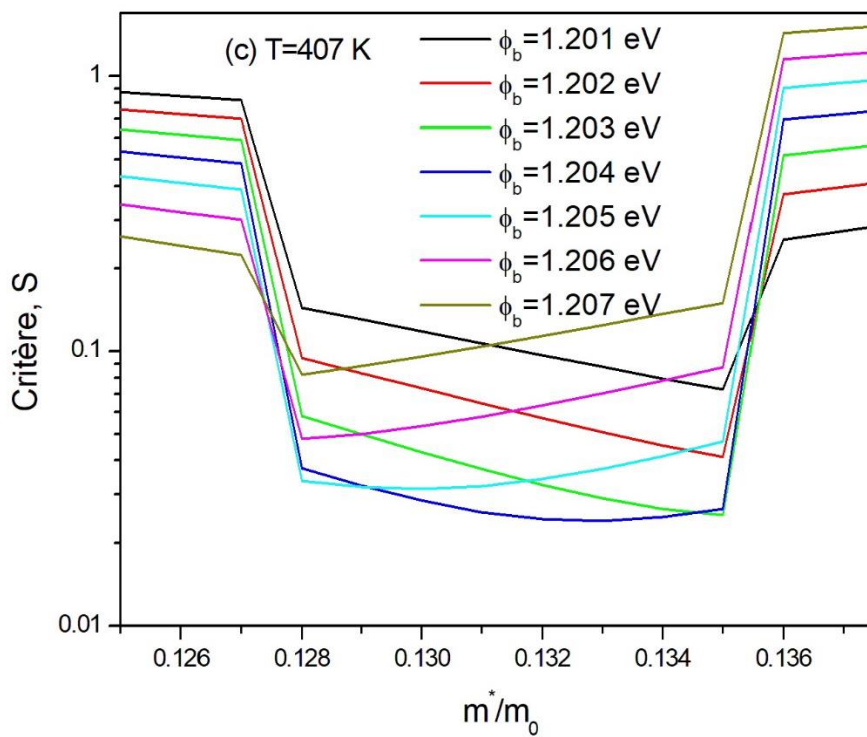
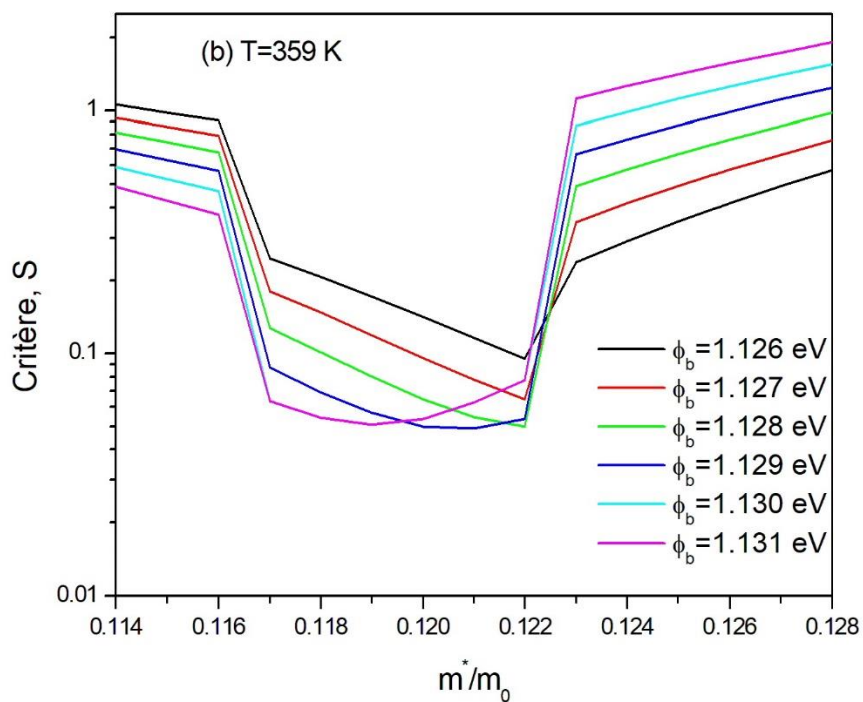
Figure III.5 - Organigramme pour le calcul du critère (S), en balayant la masse effective et la hauteur de barrière.

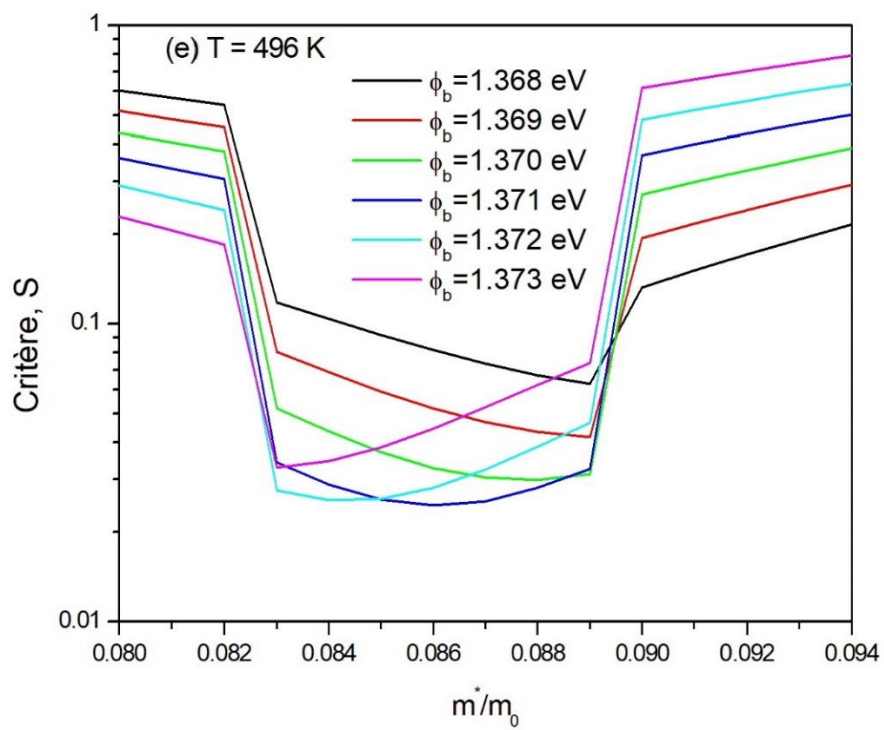
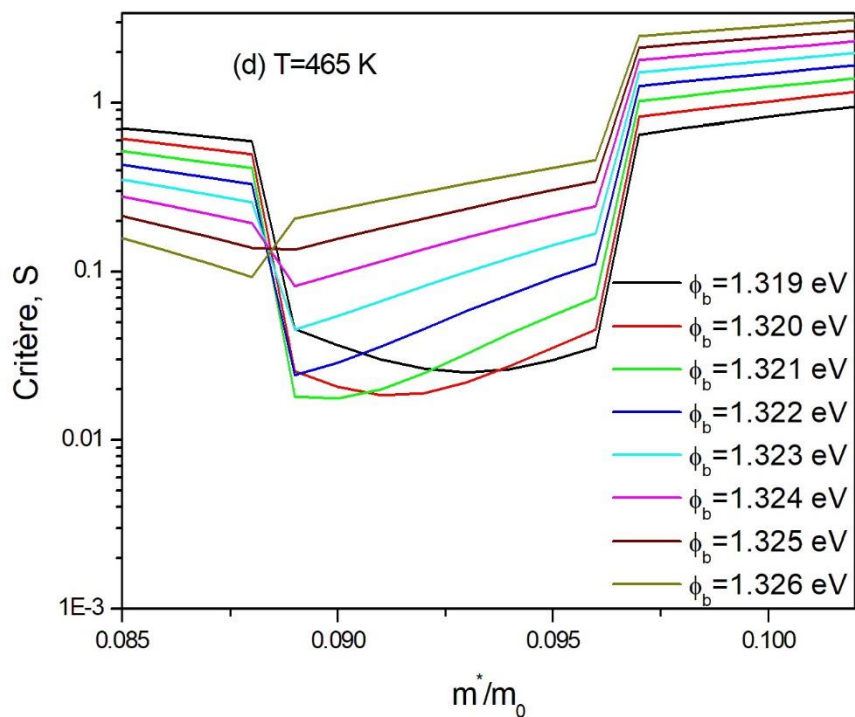
4 Résultats et discussion

4.1 Détermination de la masse effective et la hauteur de barrière par la méthode d'optimisation verticale

La figure III.6 (a-f) représente la variation du critère (S) en fonction de la masse effective (m^*/m_0) pour plusieurs hauteurs de barrière ϕ_b pour chaque température donnée. Le pas de balayage est de 0.001 pour les deux paramètres m^*/m_0 et ϕ_b . Le minimum de critère (S) nous donne les valeurs de la masse effective (m^*/m_0) et de la hauteur de barrière ϕ_b qui correspondent à la solution: $S(m^*/m_0, \phi_b) \approx 0$.







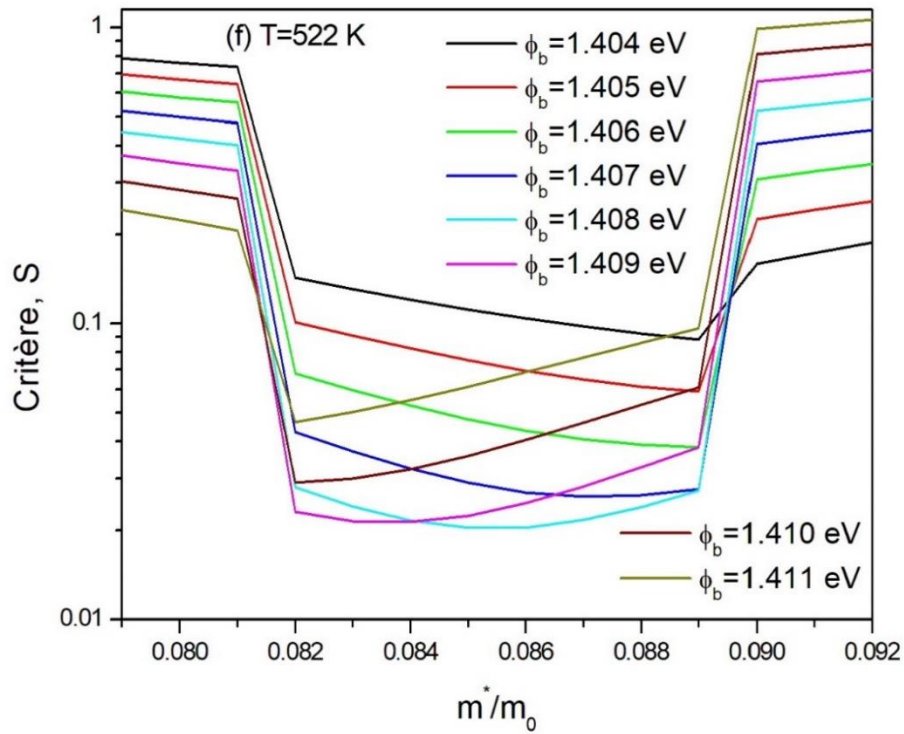


Figure III.6 - le critère (S) en fonction de la masse effective (m^*/m_0) pour différentes hauteurs de barrière ϕ_b : (a) $T = 298$ K, (b) $T = 359$ K, (c) $T = 407$ K, (d) $T = 465$ K, (e) $T = 496$ K, (f) $T = 522$ K.

Les valeurs de la masse effective et de la hauteur de barrière qui correspondent au minimum du critère S, pour chaque température sont regroupées dans le tableau III.1:

diode	Température T(K)	Masse effective (m^*/m_0)	Hauteur de la barrière (eV)
Ni/4H-SiC	298	0.210	0.963
	359	0.121	1.129
	407	0.133	1.204
	465	0.090	1.321
	496	0.086	1.371
	522	0.085	1.408

Tableau III.1 - Les valeurs obtenues de la masse effective et de la hauteur de barrière pour la diode Ni/4H-SiC à différentes températures.

La masse effective des électrons à la température 300 K est égale $m^*/m_0 = 0.21$ qui est en bon accord avec la valeur obtenue par Lomakina [51] ($m_e^*/m_0 = 0.20$ - méthode de conductivité électrique-) et la valeur obtenue par Gotz [52] ($m_e^*/m_0 = 0.19$ - méthode Infra rouge-).

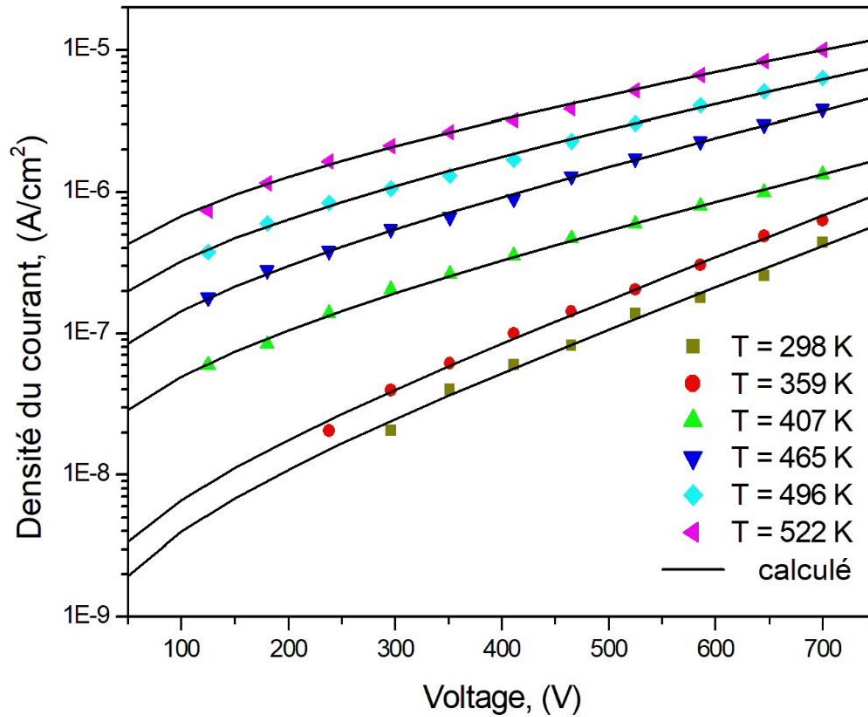


Figure III.7 - Caractéristiques I-V-T inverses expérimentales de la diode Schottky Ni/4H-SiC (symboles) et caractéristiques I-V-T inverses théoriques (lignes continues) calculées à l'aide des paramètres extraits listés dans le tableau (III.1)

La figure III.7 montre les caractéristiques I-V-T inverses de la diode Ni/4H-SiC mesurées à différentes températures (symboles) et les courbes ajustées (lignes) calculées en utilisant l'équation (II.20) avec les deux paramètres (m^* , ϕ_b) extraits à l'aide du processus d'optimisation. Comme le montre la figure III.7, les courbes I-V-T expérimentales coïncident totalement avec les courbes I-V-T simulées sur toute la plage de polarisation, ce que signifie que les valeurs obtenus de la masse effective et de la hauteur de barrière sont justes.

4.2 Effet de la température sur la masse effective

Dans la figure III.8 nous traçons la dépendance de la masse effective obtenu du semi-conducteur 4H-SiC avec la température. Comme le montre cette figure, la masse effective de l'électron a tendance à diminuer avec l'augmentation de la température. Donc la courbature de bande d'énergie au voisinage du minimum de la bande de conduction devient plus large lorsqu'on augmente la température, puisque la masse effective est inversement proportionnelle à la courbature de la bande d'énergie.

L'expression permettant de modéliser la variation de la masse effective (m^*/m_0) en fonction de la température (T) peut être donnée par l'expression suivante :

$$m^*/m_0 = 0.08419 + 49.204 \exp(-T / 49.92) \quad (\text{III.8})$$

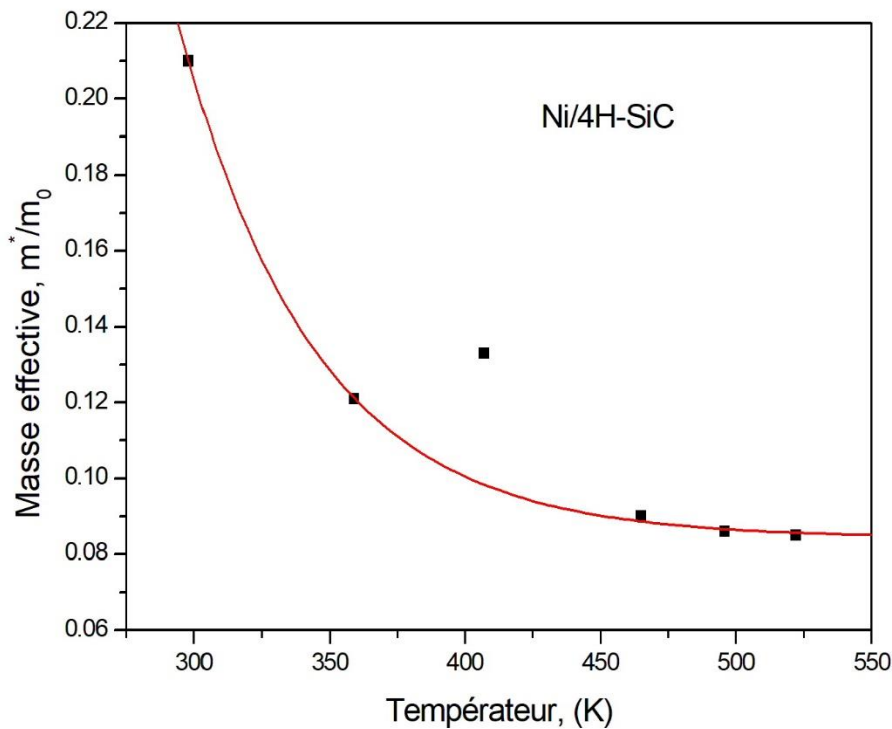


Figure III.8 - Masse effective en fonction de la température pour le semi-conducteur 4H-SiC.

4.3 Effet de la température sur la hauteur de barrière

La figure III.9 représente la variation de la hauteur de barrière en fonction de la température. La hauteur de barrière de la diode Schottky augmente lorsqu'on augmente la température. Cette augmentation de la barrière peut s'expliquer dans le cadre du modèle inhomogène de Werner [53]. Werner assume que au niveau du contact métal-semi-conducteur la barrière n'est pas homogène dans tous les points du contact mais plutôt inhomogène et présente une distribution spatiale de cette barrière due à l'interaction atomique de l'interface métal-semi-conducteur.

L'expression permettant de modéliser la variation de la hauteur de la barrière (ϕ_b) en fonction de la température (T) est donnée par l'expression suivante :

$$\phi_b = -4.33 \times 10^{-2} + 4.21 \times 10^{-3}T - 2.74 \times 10^{-6}T^2 \quad (\text{III.9})$$

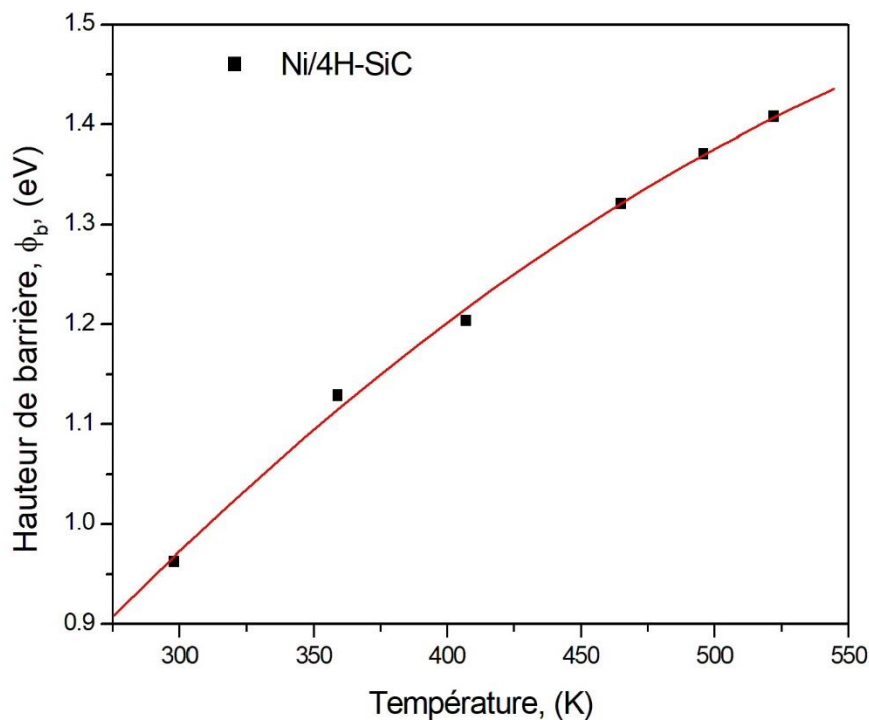


Figure III.9 - Hauteur de la barrière en fonction de la température pour la diode Schottky Ni/4H-SiC.

CONCLUSION GÉNÉRALE

La masse effective des électrons dans la bande de conduction et les trous dans la bande de valence est importante pour décrire diverses propriétés électriques et optiques du matériau 4H-SiC et également pour déterminer les propriétés de transport. La valeur de la masse effective dépend de la courbure locale de la bande près de l'extremum de la bande. La connaissance de la masse effective inhérente à l'électron dans la bande de conduction et du trou dans la bande de valence est très nécessaire pour les ajustements des moindres carrées des caractéristiques électriques expérimentales à la dépendance en température des paramètres des dispositifs électroniques. Plusieurs méthodes ont été utilisées pour déterminer la valeur de la masse effective des électrons dans le semi-conducteur carbure de silicium dans sa phase hexagonale (4H-SiC). Dans ce présent travail nous avons utilisé une autre méthode basée sur les mesures courant – tension pour déterminer la masse effective des électrons dans 4H-SiC. Les données I-V sont des mesures faites sur une diode Schottky Ni/4H-SiC en polarisation inverse à différentes températures. La méthode d'optimisation que nous avons utilisée est la méthode des moindres carrés qui est basée sur l'erreur relative. La valeur que nous avons obtenue pour la masse effective des électrons à température ambiante est en bon accord avec d'autres valeurs expérimentales de la masse effective des électrons obtenues par d'autres méthodes. On a constaté aussi que la masse effective diminue exponentiellement avec l'augmentation de la température.

BIBLIOGRAPHIE

- [1] Son N. T, Kordina O, Konstantinov A. O et al, Electron effective masses and mobilities in high-purity 6H-SiC chemical vapor deposition layers, *Applied physics letters*, vol. 65, no. 25, pp. 3209-3211, 1994.
- [2] Chen W. M, Son N. T et al, Effective masses in SiC determined by cyclotron resonance experiments, *physica status solidi (a)*, vol. 162, no. 1, pp. 79-93, 1997.
- [3] Peter Y, Yu and Manuel Cardona, *Fundamentals of Semiconductors, Fourth Edition*, Springer Verlag Berlin Heidelberg, 2005.
- [4] Amir Fath Allah, Regroupement de technique de caractérisation de matériaux destinés à l'énergie solaire pour optimisation et mesures industrielles, thèse doctorat, université paris sud, 2015.
- [5] Ngô C & Ngô H, *Physique des semi-conducteur, 4^e Edition*, Dunod, 2012.
- [6] Alain Chovet et Pascal Masson, *Physique des semi-conducteur. Ecole polytechnique-université de Marseille*, 2004.
- [7] Mathieu H et Fanet H, *Physique des semiconducteurs et des composants électriques, 6^e édition*, Dunod, Paris, 2009.
- [8] KETROUCI Hadjira, Modifications des propriétés Electriques et Optiques d'une jonction InP/ electrolyte par la decomposition Cathodique, mémoire de Magister, Université d'Oran, 2010.
- [9] Jérémie Lefevre, Etude des effets d'irradiation dans le polytype cubique du carbure de silicium par les technique spectroscopiques de photoluminescence et de resonance paramagnetique electrique, thèse de doctorat, école polytechnique, Palaiseau, 2008.
- [10] B. G. YACOBI, *semiconductor Materials : An Introduction to Basic Principles*, KLUWER Academic Publishers, 2004.
- [11] Toumi Sihem, Etudes des composants électroniques(CELLULES SOLAIRES, DIODES SCHOTTKY) En utilisant les algorithmes genetiques et le langage VHDL AMS, thèse doctorat, université ferhat Abbas- SETIF, 2012.
- [12] Madyan Amer, Carbure de Silicium 4H et 3C : microstructures de déformation dans le domaine fragile, thèse de doctorat, université de Poitiers, 2012.
- [13] KEFIF Kheira, Elaboration et Caractérisation Optique des Semiconducteur amorphes et nanocristallins de silicium (a-Si :H, nc-Si :H) et de carbure de silicium (a-SiC :H, nc-SiC :H), thèse doctorat, université de Ahmed Ben Belle -Oran 1, 2015.
- [14] Pawel Kwasnicki, Evaluation of doping in 4H-SiC by optical spectroscopies, doctoral thesis, Université Montellier II, 2014.

Bibliographie

- [15] Besar ASLLANI, Caractérisation et modélisation de diodes schottky et JBS SiC-4H pour des application haute tension, thèse doctorat, université de Lyon, 2016.
- [16] Lambrecht W. R. L, Limpijumnong S et al , Electronic Band Structure of SiC polytypes : A discussion of theory and Experiment, *phy. Stat. Sol. (B)*, vol, 202, pp.5-33, 1997.
- [17] Agarwal A. K, Seshadri S et al, Status of SiC, power devices at Northrop Grumman, *Diamond and Relted Materials*, vol. 8, pp. 295-301, 1999.
- [18] Latreche abdelhakim, Non-homogénéités dans les structures métal/semiconducteurs, thèse doctorat, universite ferhat Abbas- setif, 2012.
- [19] Heu VANG, optimisation des étapes technologiques pour la fabrication de composants de puissance en carbure de silicium, thèse doctorat, ecole doctorale electronique, electrotechnique Automatique de lyon, 2006.
- [20] Rodriguez R. P, Planar edge termination and related manufacturing process technology for high power 4H-SiC diodes, thèse doctorat, Univ. Autonoma. Barcelona, 2005.
- [21] Alvarez Lydia, Introduction of the concepts of hole and effective mass using an alternative to the E-k diagram, *Revista mexicana de fisica E*, vol. 59, no 2, pp. 12-132, 2013.
- [22] Adeline Crépieux, Introduction à la physique de la matière condensée : propriétés électroniques, Dunod, Paris, 2019.
- [23] Baptiste Berenguier, Mesures des propriétés opto-électriques du carbure de silicium par déphasage micro-onde et sensibilité spectrale, thèse doctorat, université de Marseille, 2015.
- [24] Misra Prasanta, *Physics of Condensed matter*, 1st edition, Academic Press Inc, 2011.
- [25] Bonnaud O, physique des solides, des semiconducteurs et Dispositifs, université de Rennes, 2003.
- [26] Volm D, Meyer B. K, D. M. Hofmann D. M et al, Determination of the electron effective-mass tensor in 4H SiC, *Physical Review B*, vol. 53, no. 23, pp. 15409, 1996.
- [27] Käckell P, Wenzien B and Bechstedt F, Electronic properties of cubic and hexagonal SiC polytypes from ab initio calculations, *Physical Review B*, vol. 50, no. 15, pp. 10761, 1994.
- [28] Kaczer B, Im H. J, pelz J. P, Chen J and Choyke W.J, Direct observation of conduction-band structure of 4H and 6H-SiC using ballistic electron emission microscopy, *Physical Review B*, vol. 57, no 7, p. 4027, 1998.
- [29] Zhao G. L and Bagayoko D, Electronic structure and charge transfer in 3C-and 4H-SiC, *New Journal of Physics*, vol. 2, no. 1, pp. 16, 2000.
- [30] Lax Benjamin and John G. M, Cyclotron resonance, *Solid State Physics*, vol. 11, pp. 261-400, 1960.

Bibliographie

- [31] Hilton D. J, Arikawa and kono J, cyclotron resonance, *Characterization of materials*, pp. 1-15, 2002.
- [32] Kaplan R, Wagner R. J et al, electron cyclotron resonance in cubic SiC, vol. 55, no. 1, pp. 67-69, 1985.
- [33] Satoh K, Nakata H, Ohyama T and Isshiki M, Optically Detected Cyclotron Resonance in CdTe, *Journal of the Physical Society of Japan*, vol. 70, no. 7, pp. 2185-2194, 2001.
- [34] Godlewski M, Chen W. M and Monemar B, Optical detection of cyclotron resonance for characterization of recombination processes in semiconductors, *Critical Reviews in Solid State and Material Sciences*, vol. 19, no. 4, pp. 241-301, 1994.
- [35] Son N. T, Chen W. M, Kordina O et al, Electron effective masses in 4H SiC, *Applied physics letters*, vol. 66, no. 9, pp. 1074-1076, 1995.
- [36] Sheng S. LI, *Semiconductor Physical Electronics*, 2nded, Springer, USA, 1969.
- [37] Sze S. M and Kwok K. Ng, *Physics of Semiconductor Devices*, 3rd Edition, John Wiley & Sons. Inc, 2007.
- [38] Zellag Saliha, Modélisation et simulation des propriétés électriques d'une structure metal-isolant-semi-conducteur MIS, thèse doctorat, université de Mohamed Khider- Biskra, 2018.
- [39] Guilhem Larrieu, Elaboration et caractérisation de transistor MOS schottky en régime nanométrique, these doctorat, université de Lille, 2004.
- [40] H. K. Henisch, *Rectifying semiconductor contacts*, Clarendon, oxford, 1957.
- [41] Hamida Ayed, contribution a l'étude des propriétés du silicium microcristallin, thèse de doctorat, université Badji Mokhtar- Annaba, 2016/2017.
- [42] Khemissi Saadeddine, Modelisation non lineaire des composant a effet de champ, thèse de Doctorat, universite Mentouri-constantine, 2009.
- [43] Bourouba Farid, Modelisation et simulation des contacts metal-semiconducteur a barrier inhomogene, memoire de Magister, universite Ferhat Abbas-setif, 2010.
- [44] Anne-Elisabeth Bazin, Conception de diodes schottky sur 3C-SiC epitaxies ur silicium, these doctorat, université francois-Rabelais de tours, 2009.
- [45] Cowley A. M & Sze S. M, Surface States and Barrier Height of Metal- Semiconductor Systems, *J. Appl. Phys*, vol. 36, no. 10, p. 3212-3220, 1965.
- [46] Sze S.M, *Physics of Semiconductor Devices*. John Wiley & sons, New York. London. Sydney. Toronto, 1969.
- [47] Fadwa Alshaeer, A study of current transport in schottky diodes based on AlInSb/InSb-QW Heterostructures, doctoral thesis, Cardiff University, 2018.

Bibliographie

- [48] Khemka V, Chow T.P et Gutmann R. J, Effect of Reactive Ion Etch- Induced Damage on the Performance of 4H-SiC Schottky Barrier Diodes, *Journal of Electronic Materials*, vol. 27, no. 10, pp. 1128-1135, 1998.
- [49] Furno M, Bonani F, Ghione G, Transfer matrix method modelling of inhomogeneous Schottky barrier diodes on silicon carbide, *Solid-State Electronics*, vol. 51, pp. 466-474, (2007).
- [50] Ivanov P. A, Grekhov I. V, Potapov A. S et al, Excess Leakage Currents in High-Voltage 4H-SiC Schottky Diodes, *Semiconductors*, vol. 44, no. 5, pp. 653-656, 2010.
- [51] Lomakina G. A and Vodakov Y. A, Comparative investigation of the anisotropy of electrical conductivity in various SiC polytypes, *Sov. Phys. Solid State*, vol. 15, no. 1, pp. 83-86. 1973.
- [52] Götz W, Schöner A, Pensl G et al, Nitrogen donors in 4H-silicon carbide. *J. Appl. Phys*, vol. 73, no. 7, pp. 3332–3338, 1993.
- [53] Werner J. H and Güttler H. H, Barrier inhomogeneities at Schottky contacts, *Journal of applied physics*, vol. 69, no. 3, pp. 1522-1533, 1991.

Abstract

In this study, we have directly determined the electron effective mass in 4H-SiC by applying the I-V method to 4H-SiC Schottky barrier diode. The effective mass has been found to decrease with the increase in temperature. The value of the electron effective masse at room temperature have been experimentally determined as $m^* = 0.21m_0$. Very good agreement has been found between our experimental result and the other experimental electron effective mass values $m^* = 0.19m_0$ and $m^* = 0.20m_0$ obtained using other methods.

Résumé

Dans ce travail, nous avons déterminé directement la masse effective des électrons dans le 4H-SiC en appliquant la méthode I-V à la diode Schottky à base de 4H-SiC. La masse effective diminue avec l'augmentation de la température. La valeur de la masse effective des électrons à température ambiante a été déterminée expérimentalement comme $m^* = 0,21 m_0$. Un très bon accord a été trouvé entre notre résultat expérimental et les autres valeurs expérimentales de masse effective d'électrons $m^* = 0,19 m_0$ et $m^* = 0,20 m_0$ obtenues en utilisant d'autres méthodes.

ملخص

في هذه الدراسة ، حددنا بشكل مباشر الكتلة الفعالة للإلكترون في 4H-SiC من خلال تطبيق طريقة I-V على الصمام الثنائي لشوتكي ذو القاعدة 4H-SiC . تم الحصول على أن الكتلة الفعالة تتناقص مع زيادة درجة الحرارة . تم تحديد قيمة الكتلة الفعالة للإلكترون في درجة حرارة الغرفة بشكل تجريبي على أنها $m^* = 0.21m_0$. تم الحصول على توافق جيد جدًا بين نتائجنا التجريبية وقيم تجريبية أخرى للكتلة الفعالة للإلكترون تحصل عليها بطرق تجريبية أخرى $m^* = 0.19m_0$ و $m^* = 0.20m_0$.