

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE

MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR

ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE

UNIVERSITE DE CONSTANTINE

INSTITUT D'ELECTRONIQUE

THESE DE MAGISTER

Présentée par: **ALIOUECHE AHMED**

Thème:

**DETERMINATION BIDIMENSIONNELLE DU POTENTIEL
ET DU PSEUDOPOTENTIEL DE FERMİ
DANS LES CONTACTS SCHOTTKY**

Soutenue le : 20.11.1995

Devant le jury:

Mr A.DOGHMANE
Mme C.KENZAI
Mr M. BENSLAMA
Mme M. BERRABAH
Mr A.BENGHALIA

Professeur à l'U. Annaba
Professeur à l'U. Constantine
Maitre de Conférence à l'U. Constantine
Maitre de Conférence à l'U. Constantine
Maitre de Conférence à l'U. Constantine

Président
Membre
Membre
Membre
Rapporteur

DEDICACES

A LA MEMOIRE DE MES PARENTS.

A MA FEMME, AMINA.

A MES ENFANTS: YASSER ET YOUSRA.

REMERCIEMENTS

Je tiens tout particulièrement à remercier Mr H. Baudrand, Professeur à l'ENSEEIHIT de Toulouse, d'avoir proposé ce sujet.

Mes remerciements vont également à Mr A. Benghalia pour avoir dirigé ce travail.

Que toutes les personnes qui m'ont apporté une aide trouvent ici l'expression de ma profonde gratitude.

RESUME

Dans cette thèse nous considérons une modélisation du transport de courant dans la zone dépeuplée du contact Schottky à partir de l'équation de transport unidimensionnelle et bi-dimensionnelle. De plus, nous avons développé un programme de résolution des équations non linéaires par optimisation dont la solution permet d'accéder au potentiel V supporté par la Jonction et du pseudopotentiel ϕ dans la zone dépeuplée.

La connaissance du profil des grandeurs V et ϕ nous permet d'accéder à différentes valeurs électriques dont notamment la densité de porteurs mobiles p , la vitesse des porteurs v dans la zone dépeuplée ainsi que le champ électrique E et la densité de courant J en fonction des tensions appliquées.

TABLE DES MATIERES

	page
INTRODUCTION	3
CHAPITRE I: rappels théoriques sur les contacts M/Sc.	
I-CONTACT METAL-SEMICONDUCTEUR	5
I-1: Physique de la barrière de surface d'un contact M/Sc.	5
I-1.1: Métal.	5
I-1.2: Semiconducteur, ou semi isolant.	6
I-1.3: Barrière de contact.	7
1) cas où $\Phi_m = \Phi_s$	7
2) cas où $\Phi_m > \Phi_s$	8
3) cas où $\Phi_m < \Phi_s$	11
4) conclusion	12
I-2 Barrière Schottky	13
I-2.1: Introduction	13
I-2.2: Effet Schottky	16
I-2.3: Les états de surface	17
I-2.4: Méthodes de mesure de la hauteur de barrière	20
1) mesure par I(V)	20
2) mesure par Photocourant	20
3) mesure par C(V)	21
4) conclusion	21
CHAPITRE II: Modèles de transport de courant.	
II-MODELES DE TRANSPORT DE COURANT	24
II-1: Introduction	24
II-2: Modèle de l'émission thermoionique	
II-1-1 Introduction	24
II-1-2 Énoncé de la théorie	25
II-1-3 Conclusion	26
II-3: Modèle de la diffusion	27
II-4: Modèle Mixte (Thermoémission-Diffusion)	31
CHAPITRE III: Résolution Unidimensionnelle	
III-RESOLUTION UNIDIMENSIONNELLE	
DE L'EQUATION DE TRANSPORT	

III-1: Mise en équation du problème	34
III-2: Résolution analytique	37
III-3: Résolution par les différences finies	40
III-4: Discussion des résultats	43
 CHAPITRE IV: Résolution Bidimensionnelle	
IV- RESOLUTION BIDIMENSIONNELLE	
DE L'EQUATION DE TRANSPORT	
 IV-1: Introduction	 58
IV-2: Mise en équation bidimensionnelle	58
IV-3: Résolution bidimensionnelle	60
IV-3-1: Structure à étudier	60
IV-3-2: Conditions aux limites	62
IV-3-3: Mise en équation par les différences finies	63
IV-3-4: Discussion des résultats	65
 CONCLUSION	 78
ANNEXE	79

I-1 Introduction:

-Le redressement du courant dans un contact Schottky fut observé pour la première fois en 1894 par Braun. Il faut attendre 1906 pour que Pickard mette au point la diode à pointe; Pierce publia ses résultats un an plus tard sur les diodes Schottky [1].

-Il a fallu attendre les années 30 quand fut développée la physique des semiconducteurs pour voir apparaître les premières expressions de la densité de courant qui traverse un contact Métal-semiconducteur.

-Mott en 1938 et Schottky et Spenke en 1939 présentent un modèle tenant compte des phénomènes de transport; Bethe en 1942 proposa la théorie de l'émission thermoionique [1].

-Le domaine d'application des contacts Métal-semiconducteur est vaste et englobe notamment: les hyperfréquences, la détection, les circuits intégrés logiques pour améliorer les temps de réponse ainsi que les diodes lasers et les cellules solaires.

-Jusqu'au début des années 70, l'essentiel des travaux ont porté sur l'amélioration de la modélisation du transport de courant. Finalement un troisième modèle est adopté: le modèle Mixte de la thermoémission-Diffusion [2].

-Ces modèles n'ont pas donné satisfaction, les recherches se sont orientées vers une meilleure compréhension de l'interface Métal-semiconducteur. Grâce aux méthodes d'analyse de surfaces, certains laboratoires se consacrent aux mécanismes de formation de la barrière.

-Pour notre part, nous avons tenu à rappeler le contact Schottky et les différents modèles de transport de courant[3] (Thermoémission, Diffusion, et Mixte) ensuite nous nous sommes attachés à rappeler le modèle unidimensionnel par une approche basée sur l'équation de transport et à faire une extension bidimensionnelle.

Dans le chapitre I, un rappel sur les contacts Schottky et les différentes méthodes de mesure de la hauteur de barrière sont exposés[4]. Le chapitre II est consacré à l'exposé des trois modèles de transport de courant.

Dans le chapitre III, une résolution analytique de l'équation unidimensionnelle[1],[5] y est faite, ensuite nous proposons une résolution numérique (par la méthode des différences finies) que nous comparons avec la résolution par Runge-kutta[1],[6].

Dans le chapitre IV, nous effectuons une résolution bidimensionnelle de l'équation de transport à l'aide des différences finies et nous discutons les résultats [7], [8].

CHAPITRE I

RAPPELS THEORIQUES SUR LES CONTACTS MÉTAL-SEMICONDUCTEUR

1-1: Physique de la barrière de surface Métal/Semiconducteur

1.1 Contact M/Semiconducteur sans états de surface:

Pour une première approche, nous allons supposer que les surfaces respectives des deux matériaux en contact sont parfaites et en particulier dépourvues d'états d'interface.

1-1-1: Le métal:

Dans un métal à l'équilibre, la distribution énergétique des électrons à l'allure de la fig 1.1. où E est l'énergie des électrons mesurée depuis le bas de la bande de valence et E_{fm} est l'énergie de Fermi du métal. La fonction de distribution $n(E)$ est donnée par :

$$n(E) dE = N(E).f(E) dE \text{ cm}^{-3} \quad 1.1$$

où $f(E)$ est la probabilité d'occupation ou fonction de Fermi

$$f(E) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - E_{fm}}{kT}\right)} \quad 1.2$$

et $N(E)$ la densité d'états électroniques du métal.

Dans l'approximation des électrons quasi libres

$$N(E) = \frac{1}{4\pi^2} \cdot \left(\frac{2m}{h^2}\right)^{3/2} \cdot E^{1/2} \text{ eV}^{-1} \quad 1.3$$

On peut montrer qu'à la température ordinaire de 300°K, le niveau de Fermi du métal reste très voisin de la position E_{fmo} qu'il occupe au zéro absolu. Or, pour $T=0^\circ\text{K}$, la fonction de Fermi se réduit à:

$$f(E)_{0^\circ\text{K}} = 1 \Rightarrow E < E_{fmo}$$

L'intégration de 1.1 compte tenu de 1.3 sur toute l'étendue énergétique nous donne le nombre d'électrons libres dans le métal

$$N = \int_0^\infty n(E).dE = \frac{1}{4\pi^2} \cdot \left(\frac{2m}{h^2}\right)^{3/2} \cdot \frac{2}{3} \cdot E_{fmo} \quad 1.4$$

Dans un métal, le nombre d'électrons quasi libres (ou électrons de valence) par cm^3 est de l'ordre du nombre d'atomes, soit $N=10^{22} \text{ cm}^{-3}$. l'énergie de Fermi tirée de 1.4 est alors de l'ordre de 4eV. En reportant cette valeur dans 1.3, nous obtenons la densité d'états au voisinage du niveau de Fermi du métal.

$$N(E_{fm}) = \frac{2m}{h^2} \cdot \frac{1}{(4\pi^2)^{2/3}} \cdot \sqrt{\frac{3}{2}} \cdot N^{1/3} \quad 1.5$$

On trouve alors $N(E_{fm}) \sim 5 \cdot 10^{21} \text{ cm}^{-3} \text{ eV}^{-1}$.

Ce chiffre est environ 500 fois plus élevé que la densité d'états du bas de la bande de conduction du Silicium. Il est donc considérable.

Du point de vue des échanges électroniques avec le milieu extérieur, un métal au repos est caractérisé par son travail de sortie Φ_M . C'est l'énergie qu'il faut fournir à un électron ayant l'énergie de Fermi E_{fm} , pour l'extraire du métal et l'éloigner infiniment de sa surface.

L'électron se trouve alors dans un état énergétique appelé niveau du vide.

Si conventionnellement, on choisit ce niveau du vide (énergie d'un électron à l'infini) pour repérer les énergies par rapport au milieu extérieur, on voit que le potentiel électrochimique des électrons du métal est égal à $-\Phi_M$

On appelle potentiel d'extraction, le potentiel correspondant à l'énergie d'extraction d'un électron du métal et elle est donnée par : (voir fig 1.2)

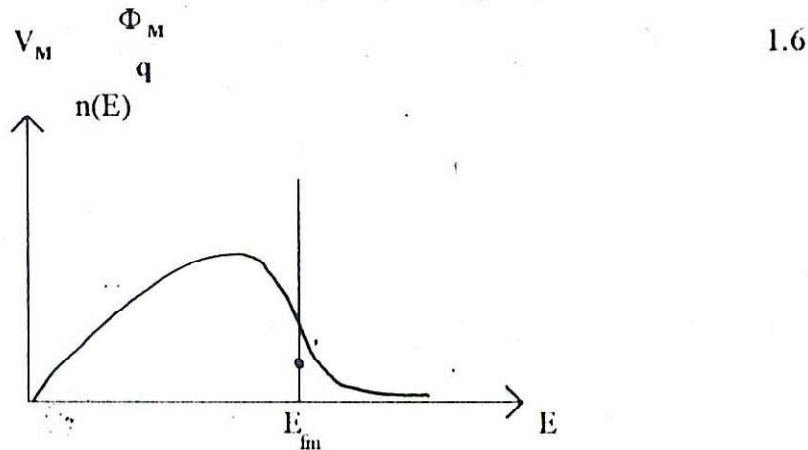


fig.1.1: Fonction de distribution du métal

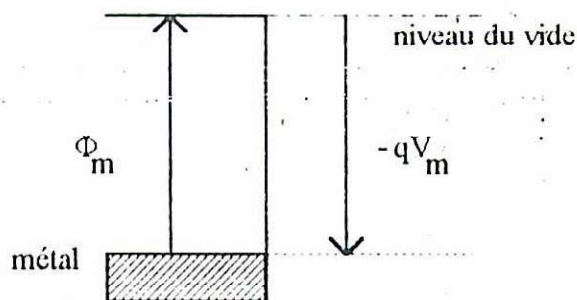


fig.1.2 travail de sortie du métal

I-1-2: Le semi conducteur ,ou semi isolant:

Le semiconducteur au repos sera caractérisé par :

- 1) Le potentiel électrochimique de ses électrons . Mais puisque nous désirons comparer l'état énergétique des électrons du métal et du semiconducteur , nous devons faire choix d'une origine commune des énergies : le niveau du vide.
L'énergie d'extraction d'un électron sera donc en moyenne:

$$q\Phi_s = q(X_s + V_n) \quad 1.7,$$

où X_s est l'affinité électronique du Semiconducteur
et V_n caractérise le dopage du Semiconducteur (voir fig. 1.3)

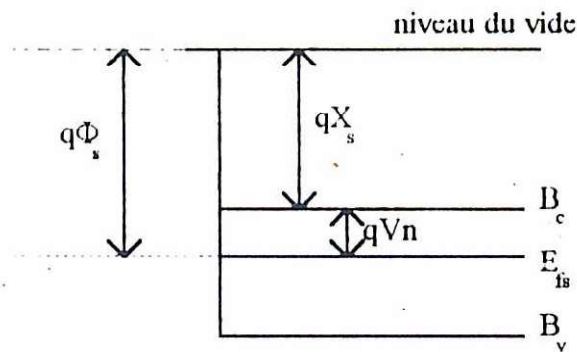


fig.1.3: Travail de sortie du semiconducteur.

2) D'autre part par son affinité électronique X_s , intervalle d'énergie entre le niveau du vide et le bas de la bande de conduction.

1-1-3: Barrière de contact:

L'existence d'une barrière de potentiel au contact M/Semiconducteur tient essentiellement dans les valeurs différentes du potentiel des électrons dans chacun des deux matériaux.

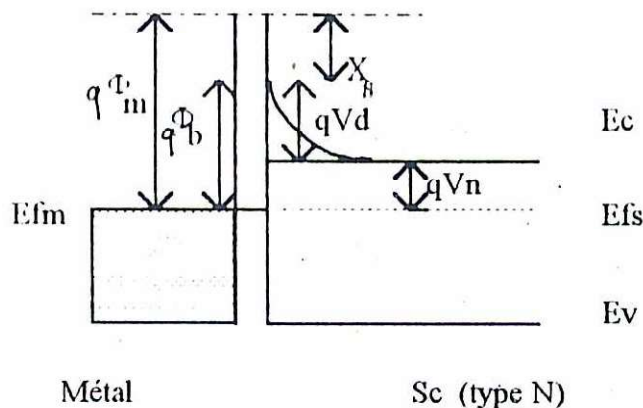


fig.1.4: Diagramme énergétique du contact M/Sc

La fig. 1.4 illustre la structure d'une telle barrière à l'équilibre thermodynamique. On note la conservation du niveau du vide et l'égalisation nécessaire des potentiels électrochimiques.

Si le semiconducteur n'est pas dégénéré, la densité d'électrons y est plusieurs ordres de grandeur plus faible que dans le métal. A l'image d'une jonction très dissymétrique la barrière pénètre fort peu dans le métal et l'essentiel de la circulation du champ électrostatique s'effectue dans le semiconducteur. La hauteur de barrière donnée par

$$q\Phi_b = q(\Phi_m - X_s) \quad 1.8$$

est donc essentiellement représentée par la courbure des bandes.

$q\Phi_m$: représente le travail de sortie du métal.

qX_s : " " l'affinité électronique du semiconducteur.

La structure de bandes au voisinage de l'interface est donc conditionnée par la différence des travaux de sortie des deux matériaux.

1) cas ou $q\Phi_m = q\Phi_s$ (fig 1.5a)

Le travail de sortie d'un électron du métal est égal au travail de sortie d'un électron du semiconducteur. A l'équilibre thermodynamique le niveau de Fermi du métal et celui du semiconducteur s'alignent et ne forment qu'un seul et même niveau. Il n'y a pas besoin d'échange d'électrons entre les deux matériaux puisque l'équilibre existe avant le contact.

Le diagramme énergétique est représenté par la fig. 1.5b, dans la mesure où $\Phi_m = \Phi_s$ une barrière de potentiel s'établit à l'interface et les bandes de conduction et de valences restent horizontales. On dit que le système est en régime de bandes plates. C'est un contact neutre. Ceci est valable quelque soit le type de semiconducteur (N ou P). Il suffit d'ajuster le niveau de Fermi.

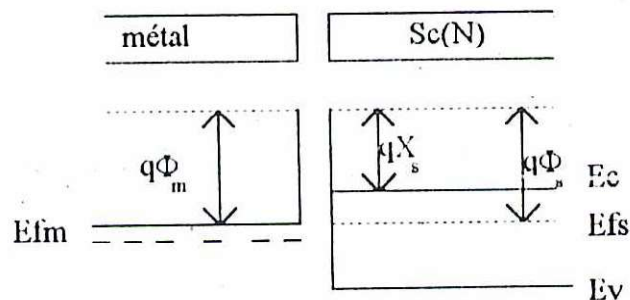


fig.1.5a: bandes d'énergie du métal et du Sc isolés

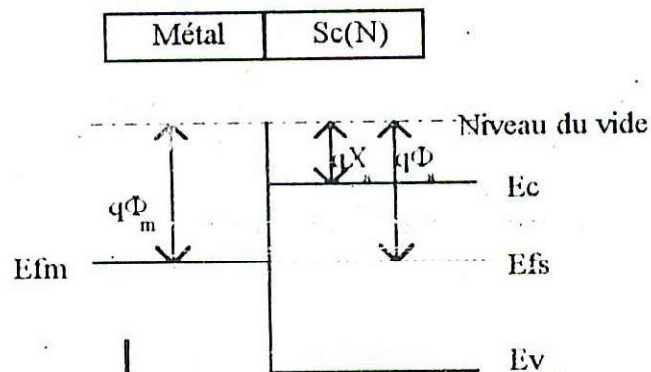


fig.1.5b: contact M/Sc avec $\Phi_m = \Phi_s$

2) Cas ou $q\Phi_m > q\Phi_s$: (voir fig. 1.6)

Le travail de sortie d'un électron du métal est supérieur au travail de sortie du semiconducteur. En réalisant le contact, les électrons passent du semiconducteur vers le métal jusqu'à l'équilibre thermodynamique, c'est-à-dire jusqu'au moment où les niveaux de

Fermi s'alignent. Le diagramme énergétique est différent suivant qu'il s'agisse d'un semiconducteur de type N ou P.

a) Semiconducteur de type N : (voir fig 1.7)

Les électrons passant du Semiconducteur vers le métal, créent une zone de déplétion dans le Semiconducteur. Les ions Nd^+ ne sont plus compensés par les électrons il apparaît donc une charge d'espace positive. La distance bande de conduction niveau de Fermi à l'interface est plus grande (appauvrissement en électrons) que dans le volume; il en résulte une courbure de bandes du Semiconducteur vers le haut puisque le niveau de Fermi reste constant dans les deux matériaux à l'équilibre.

Par contre, dans le métal apparaît une charge négative d'accumulation localisée à sa surface pour équilibrer la charge positive du Semiconducteur.

L'intégralité de la tension de diffusion développée à l'interface se trouve localisée dans la zone dépeuplée.

En effet, ceci est dû au fait que la densité d'état dans le métal (10^{22}) est beaucoup plus importante que dans le Semiconducteur (10^{18}).

Polarisons la structure par une tension Sc-métal négative, c'est à dire $V_{sc}-V_m < 0$, la bande de conduction va s'élever de la quantité qV , la courbure de bande diminue. Donc, la barrière de potentiel s'opposant aux électrons du Sc vers le métal diminue. Par contre la barrière de potentiel s'opposant aux électrons du métal reste inchangée.

L'équilibre est ainsi rompu et les électrons diffusent du Sc vers le métal en créant un courant I dans le sens inverse. Dans ce cas la structure est polarisée en direct.

Si la tension de polarisation est augmentée la barrière continuera à diminuer jusqu'au moment où $V = V_d$; on obtient le régime de bandes plates.

Si maintenant on polarise la structure par une tension V tel que $V = V_{sc}-V_m > 0$, la bande de conduction du Sc est abaissée ce qui a pour effet d'augmenter la barrière de potentielle s'opposant aux électrons du Sc vers le métal, la structure est donc polarisée en inverse.

Le contact M/Sc (type N) avec $q\Phi_m > q\Phi_s$ est un contact redresseur : C'est un contact Schottky.

b) Semiconducteur de type P: (voir fig 1.8)

Lorsque les deux matériaux sont mis en contact, les électrons diffusent du Sc vers le métal jusqu'à l'équilibre thermodynamique. Les niveaux de Fermi des deux matériaux sont alors alignés. Il apparaît comme dans le cas précédent une charge d'espace positive dans le Sc et une charge négative dans le métal.

La diffusion d'électrons du Sc vers le métal entraîne une courbure des bandes de conduction et de valence vers le haut; la bande de valence se rapproche du niveau de Fermi. La charge positive développée du côté du Sc est donc essentiellement une charge d'accumulation de trous. L'étalement de cette charge d'espace dans le Sc reste relativement faible que dans le cas précédent car la densité d'état dans la bande de valence est de l'ordre de 10^{19} .

Dans le métal, la charge d'espace est dû à une accumulation d'électrons à l'interface M/Sc.

Lorsqu'on applique une tension de polarisation au contact M/Sc, cette tension n'est pas localisée dans une charge d'espace mais distribuée uniformément sur tout le Sc.

Suivant le type de polarisation, l'arrivée ou le départ d'un trou dans le Sc est immédiatement compensée par l'arrivée ou le départ d'un électron du métal. il en résulte que le courant circule librement dans les deux sens. C'est un contact Ohmique.

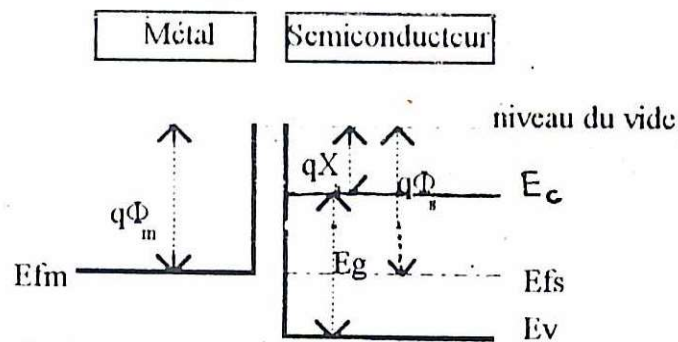


fig. 1.6a: Diagramme énergétique M/Sc avant contact.

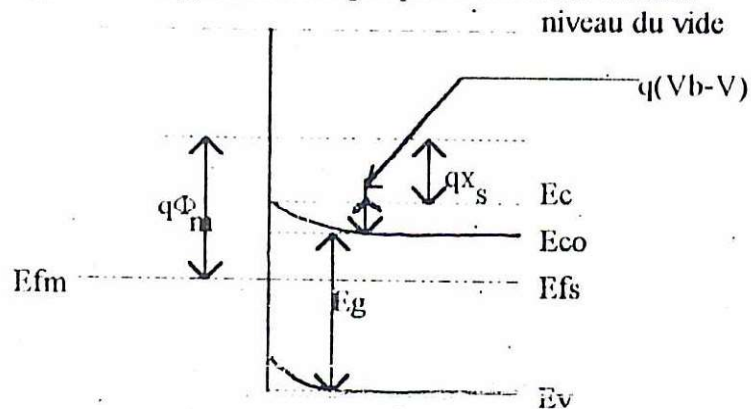
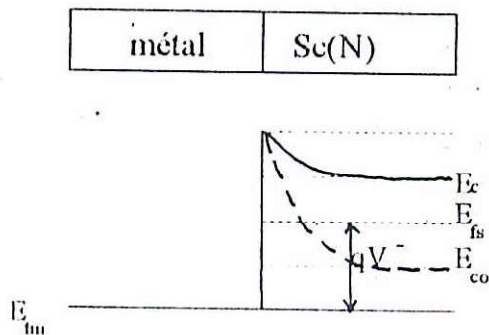
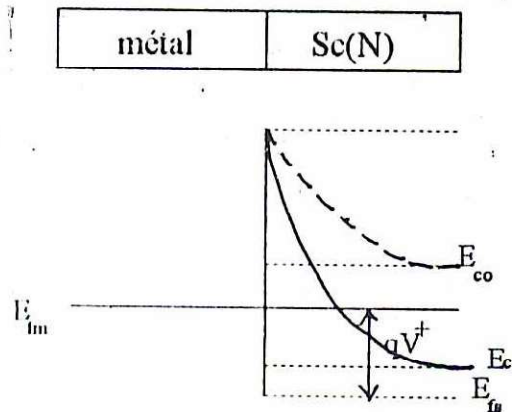


fig. 1.6b: Diagramme énergétique M/Sc en contact intime.



a



b

fig. 1.7 : Contact sous polarisation

a: Polarisation négative $V = V_{sc} - V_m < 0$

b: Polarisation positive $V = V_{sc} - V_m < 0$.

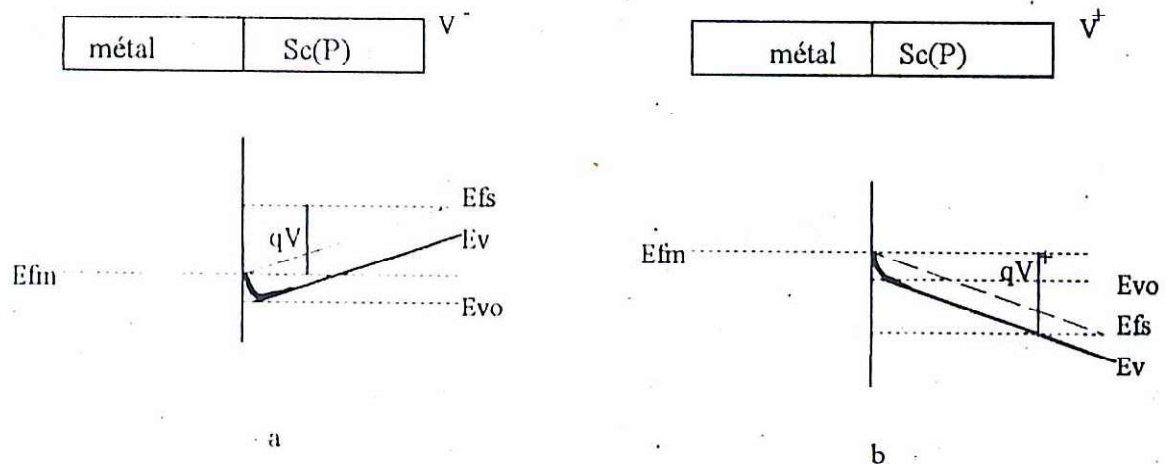


fig.1.8 Contact M/Sc(P) sous polarisation
a: polarisation négative
b: Polarisation positive

2) Cas où $q\Phi_m < q\Phi_s$:

Dans ce cas le travail de sortie du métal est inférieur au travail de sortie du Semiconducteur. quand le métal et le Sc sont mis en contact, les électrons passent du métal vers le Sc. Le Système continue à évoluer jusqu'à l'alignement des niveaux de Fermi : on atteint l'équilibre thermodynamique (fig.1.9).

Le diagramme énergétique est différent suivant le type de Semiconducteur.

a) Semiconducteur de type N:

Les électrons passant du métal vers le Semiconducteur font apparaître dans le métal un déficit d'électrons à l'interface M/Sc. Il en résulte une courbure vers le bas des bandes de conduction et de valence. Dans le métal, apparaît un déficit d'électron à la surface tandis que dans le Sc il apparaît une charge d'accumulation très peu étalée (fig.1.10).

Si on polarise la structure, cette tension se trouve distribuée uniformément dans tout le Semiconducteur. tout électron supplémentaire arrivant à l'interface passe librement. Le contact est dit Ohmique.

b) Semiconducteur de type P:

Les électrons passant du métal vers le semiconducteur se recombinent avec les trous créant ainsi une zone de déplétion due aux ions Na^+ non compensés par des trous.

Polarisons la structure par une tension négative, les bandes de conduction et de valence s'élèvent, il en résulte une augmentation de la barrière, le courant diminue. la structure est donc polarisée en inverse.

Si la tension de polarisation est positive, la barrière que doivent franchir les trous pour passer dans le métal diminue, la structure est polarisée en direct.

Le contact M/Sc(p) est alors un contact redresseur (fig.1.11).

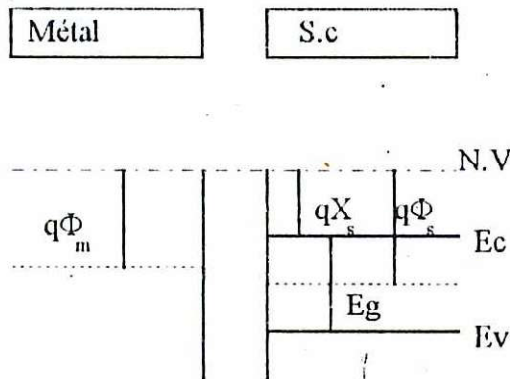


fig.1.9: Contact M/Sc(avec $\Phi_m < \Phi_s$)

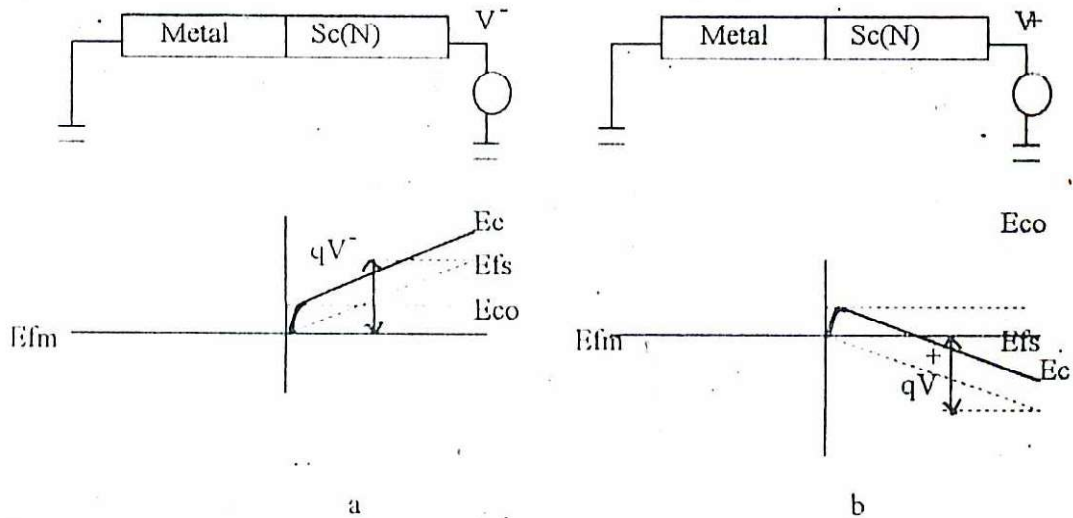


fig.1.10: Contact M/Sc(N) sous polarisation
a: polarisation négative
b: polarisation positive

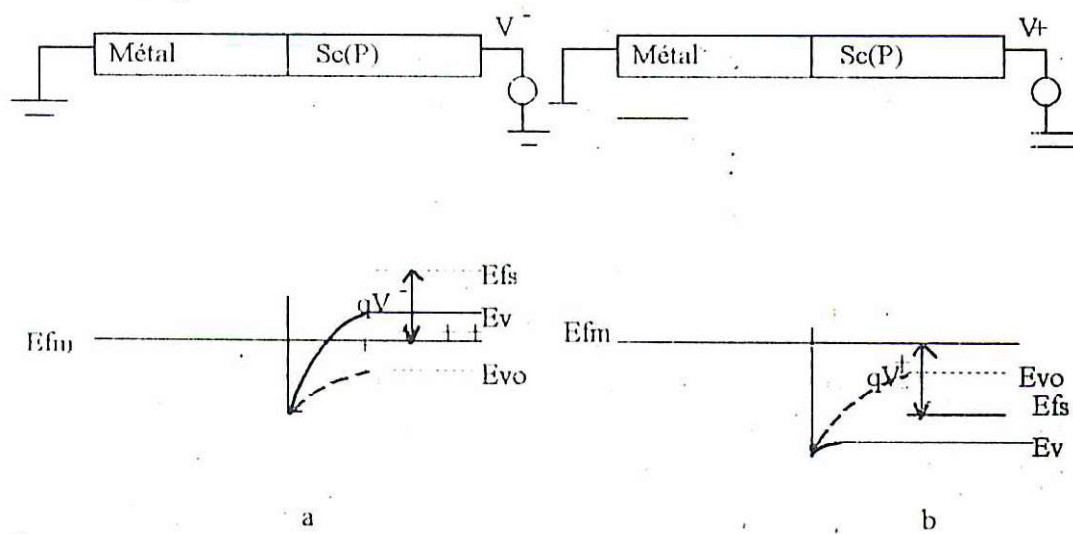


fig.1.11 Contact M/Sc(P) sous polarisation
a: polarisation négative
b: polarisation positive

4: Conclusion

En conclusion nous retiendrons que si $q\Phi_m > q\Phi_s$,
 le contact M/Sc(N) est redresseur
 le contact M/Sc(P) est Ohmique.
 et si $q\Phi_m < q\Phi_s$
 le contact M/Sc(N) est Ohmique
 le contact M/Sc(p) est redresseur.

Dans cette partie nous avons étudié uniquement le mouvement des porteurs pour étudier la jonction métal -Semiconducteur sans prendre en compte la quantification des différentes grandeurs intervenant dans les mécanismes de transport du courant . Nous nous proposons donc de le faire dans la partie suivante .

1-2 Barrière Schottky

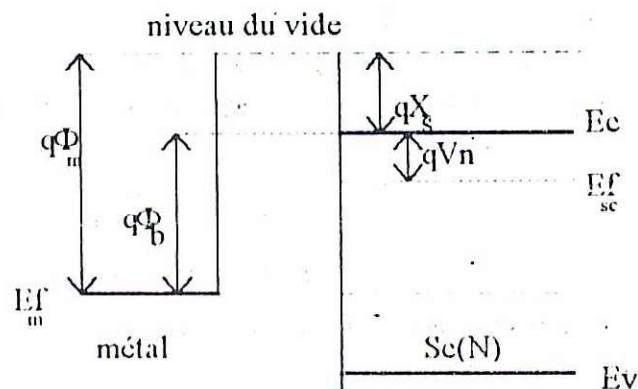
1-2-1 Introduction

Lorsqu'un métal et un semiconducteur sont mis en contact, il se crée sur la surface de contact une discontinuité de potentiel notée Φ_b comme nous l'avons vu précédemment.

$$\Phi_b = \Phi_m - X_s \quad 1.9$$

où Φ_m représente le travail de sortie du métal et X_s l'affinité du semiconducteur

La structure de bande au voisinage de l'interface est conditionnée par la différence éventuelle des travaux de sortie du métal et du semiconducteur



a

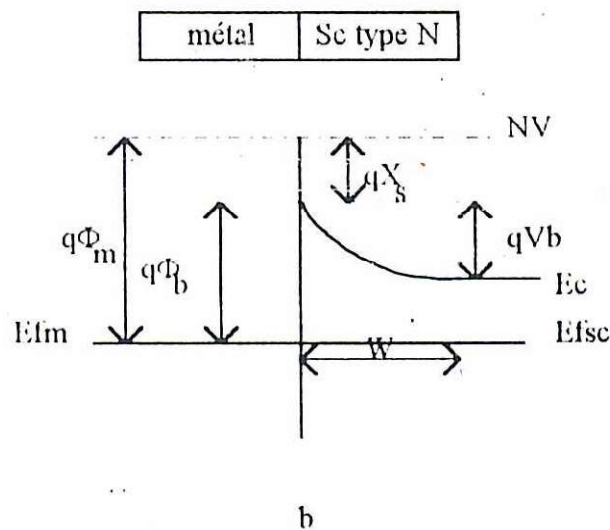


fig.1.12:Diagrammes des bandes

a: matériaux isolés

b: contact idéal

Nous supposons un contact métal-semiconducteur (type N) dont le travail de sortie du métal est supérieur au travail de sortie du semiconducteur. lors de la mise en contact, les électrons passent donc du semiconducteur vers le métal; Ce passage entraine des modifications énergétiques dans chacun des matériaux.

Dans le semiconducteur il se crée une zone de déplétion, les ions donneurs N_d^+ ne sont plus compensés par les électrons, il apparait une zone de charge d'espace positive tandis que dans le métal apparait une charge d'accumulation d'électrons à sa surface pour assurer la neutralité globale du système.

A cette double charge d'espace, sont associés un champ électrique et une tension de diffusion qui équilibrent les forces de diffusion et déterminent l'état d'équilibre. Le potentiel de barrière s'opposant au passage des porteurs est donné par la résolution de l'équation de Poisson dans la zone de charge d'espace.

$$\frac{d^2V}{dx^2} = \frac{\rho(x)}{\epsilon} \quad 1.10$$

En 1938, Mott supposa qu'une fine couche du semiconducteur était dépourvue d'atomes donneurs près du métal: le champ électrique y est constant et le potentiel électrostatique linéaire (fig.1.13a)

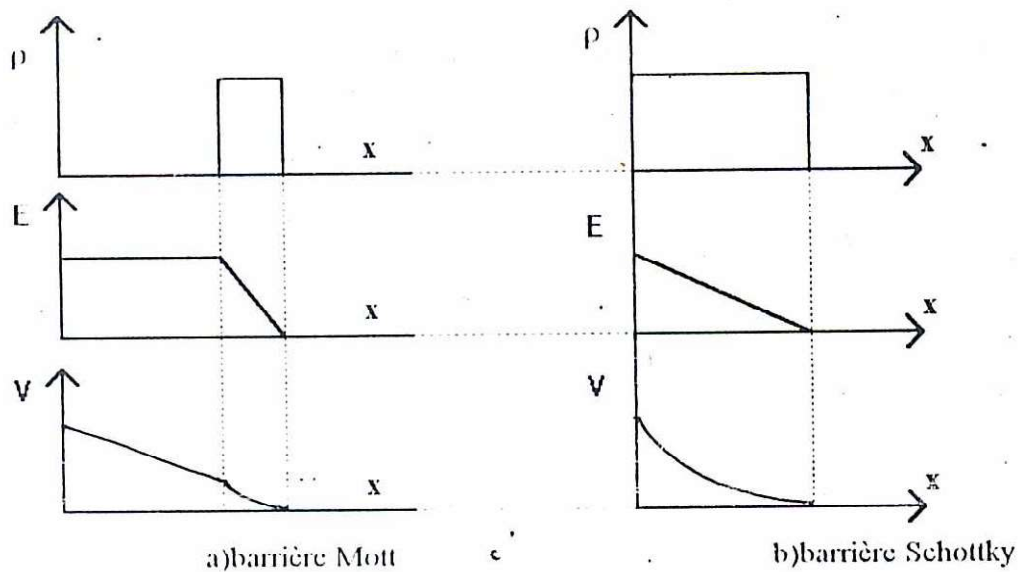


fig.1.13 barrière de potentiel [1]

a: barrière de Mott

b: barrière Schottky

Quant à Schottky (fig.1.13b), il suppose qu'il y avait une charge d'espace uniforme dans la zone déplétée. Dans ce cas le champ électrique est linéaire et le potentiel électrostatique parabolique.

En fait dans ce qui précède nous avons considéré un contact idéal ; un contact réel doit tenir compte des paramètres d'interfaces existant au contact entre le métal et le semiconducteur.

1) L'existence d'une couche d'oxyde de 10 à 20 Å à l'interface qui contribue à diminuer le potentiel d'interface Δ . Cette chute de potentiel Δ peut être négligée si elle est petite devant $(\Phi_m - \chi_s)$.

2) La présence d'états de surface pour expliquer les écarts existants entre la hauteur de barrière et la différence des travaux de sorties. Ces états de surface peuvent provenir des impuretés de superficielles, des queues de distribution du métal dans le semiconducteur ou de la distorsion du réseau cristalin en surface.

3) La présence possible de niveaux de pièges profonds dans la bande interdite provenant des recuits effectués pour augmenter l'adhérence du métal.

4) L'effet de la force image.

Tous ces états d'interfaces font partie des problèmes liés aux interactions physico-chimiques existant entre le métal et le semiconducteur et à la technologie employée pour l'élaboration du contact.

Ces états d'interface créent un potentiel de surface qui peut modifier notablement la barrière de potentiel.

Dans ce qui suit nous exposerons l'effet Schottky.

1-2-2 Effet Schottky:

Lorsqu'un électron est extrait du matériau, il induit une charge $+q$ à la surface de celui-ci. Il en résulte une force de rétention de l'électron par le matériau : c'est l'effet Schottky [9].

La force d'attraction de l'électron à la distance x du matériau est la même que celle qu'exercerait une charge $+q$ située à la distance $-x$ dans le matériau. Cette force est appelée la force image.

$$F = -\frac{q^2}{4\pi(2x)^2\epsilon_0} = -\frac{q^2}{16\pi \cdot x^2} \quad 1.12$$

où ϵ_0 : permittivité du vide

Le travail nécessaire pour amener l'électron à l'infini depuis sa position à la distance x est donnée par :

$$\int_x^\infty F \cdot dx = \frac{q^2}{16\pi \cdot \epsilon_0 x^2} \quad 1.13$$

En présence d'un champ électrique E , l'énergie potentiel $W(x)$ devient :

$$W(x) = \frac{q^2}{16\pi\epsilon_0 x^2} + qEx \quad 1.14$$

l'abaissement de barrière $\Delta\Phi$ au point x_m dû à la force image tel que :

$$\frac{dW(x)}{dx} = 0 \quad \text{nous conduit à :}$$

$$\Delta\Phi = \sqrt{\frac{qE}{4\pi\epsilon_0}} \quad 1.15$$

$$x_m = \sqrt{\frac{q}{16\pi\epsilon_0 E}} \quad 1.16$$

Il est à noter que pour un champ électrique de 10^6 V/m, la diminution de la hauteur de barrière est de 10 milli eV.

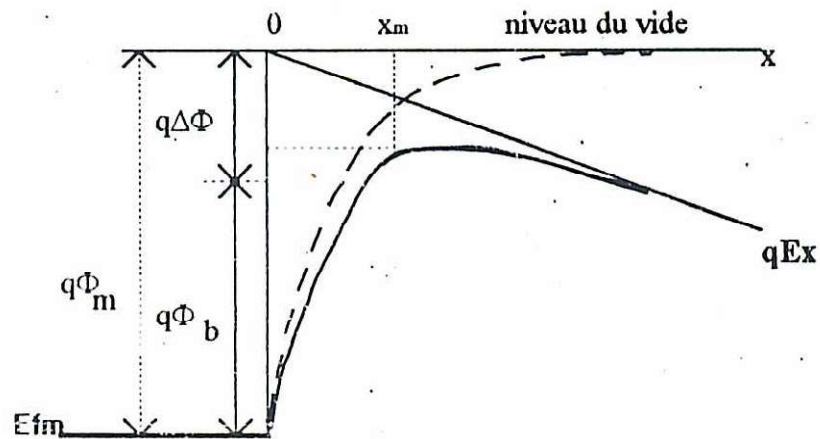


fig.1.14:Diagramme de bande d'énergie entre la surface d'un métal et le vide tenant compte de l'effet Schottky.

La barrière que doit franchir l'électron pour sortir du métal (fig.1.14) est étalée dans l'espace mais conserve la même hauteur. notons également que pour des raisons de continuité l'énergie potentiel de l'électron est égale à l'énergie de Fermi à la surface du métal.

I-2-3 Les états de surface:

L'influence des états de surface sur la hauteur de barrière fut l'objet de nombreux travaux [10].

Le diagramme des bandes d'énergie d'un contact M/sc en présence d'états de surface est représenté par la figure 1.15.

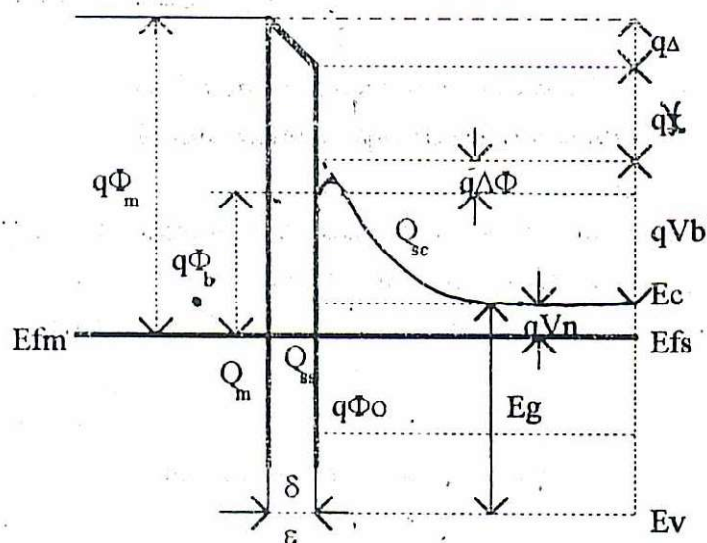


fig.1.15:contact Métal/Sc (type N) en présence d'états de surface.

$\Delta\Phi$: abaissement dû à la force image.

Φ_0 : est le niveau de remplissage à l'équilibre thermodynamique.

Δ : chute de potentiel dû à la couche d'interface (couche d'oxyde).

V_b : potentiel de diffusion.

V_n : doppage du Sc.

Q_{sc} : Densité de charge d'espace dans le semiconducteur.

Q_{ss} : Densité d'états de surface.

Q_m : Densité de charge de surface du métal.

δ : épaisseur de l'oxyde

Pour déterminer la barrière en tenant compte des états d'interface nous ferons les hypothèses suivantes:

- La couche d'oxyde d'interface est de quelques Angströms et elle est transparente aux électrons ayant une énergie supérieure à $q\Phi_b$.

- La densité d'état de surface est une propriété de la surface du Sc et est indépendante du métal. De plus, on suppose une distribution uniforme de la densité de charge D_s dans les états de surface. On néglige les charges fixes contenues dans l'oxyde. Q_{ss} s'écrit:

$$Q_{ss} = qD_s(E_g - q\Phi_0 - q\Phi_b - q\Delta\Phi) \quad \text{Cb/cm}^2 \quad 1.17$$

En résolvant l'équation de Poisson dans la zone déplétée, on obtient:

$$Q_{sc} = \left[2q\epsilon N_d (\Phi_b - V_n + \Delta\Phi - \frac{kT}{q}) \right]^{1/2} \quad \text{Cb/cm}^2 \quad 1.18$$

La condition de neutralité s'écrit dans ce cas:

$$Q_M + Q_{ss} + Q_{sc} = 0 \Rightarrow Q_M = -(Q_{ss} + Q_{sc})$$

L'application de la loi de Gauss nous donne:

$$\Delta = -\delta \cdot \frac{Q_M}{\epsilon_1} \quad 1.19$$

D'autre part Δ est obtenu d'après le diagramme énergétique:

$$\Delta = \Phi_M - (X_s + \Phi_b + \Delta\Phi)$$

En combinant 1.17, 1.18 et 1.19 on obtient :

$$(\Phi_M - X_s) - (\Phi_b + \Delta\Phi) = \left[\frac{2q\epsilon N_d \delta^2}{\epsilon_1^2} (\Phi_b + \Delta\Phi - V_n - \frac{kT}{q}) \right]^{1/2} - \frac{qD_s \delta}{\epsilon_1} (E_g - q\Phi_0 - q\Phi_b - q\Delta\Phi) \quad 1.20$$

Après simplification on arrive à une expression de Φ_b en fonction des états de surface [1].

$$\Phi_b = C_2 (\Phi_M - X_s) + (1 - C_2) \left(\frac{E_g}{q} - \Phi_0 \right) - \Delta\Phi \quad 1.21$$

avec
$$C_2 = \frac{\epsilon_1}{\epsilon_1 + q\delta D_s}$$

a) si $D_s \rightarrow \infty \Rightarrow C_2 \rightarrow 0$ beaucoup d'états de surface

$$\text{alors } \Phi_b = \frac{E_g}{q} - \Phi_0 - \Delta\Phi \quad 1.22$$

la hauteur de barrière dépend essentiellement des états de surface et est indépendante du métal.

b) si $D_s \rightarrow 0 \Rightarrow C_2 \rightarrow 1$ on retrouve le cas idéal à $\Delta\Phi$ près:

$$\Phi_b = \Phi_M - \chi - \Delta\Phi \quad 1.23$$

Pour les contacts au Silicium, S.M.Sze donne la relation empirique suivante:

$$\Phi_b = 0.27\Phi_M - 0.55 \quad 1.24$$

Un exemple édifiant des états de surface est le contact Al-Si qui donnerait une barrière très faible si on tenait compte de l'expression $\Phi_b = \Phi_M - \chi$ Par contre il serait de 0.7V si on tenait compte des états de surface.

Semiconductor	Type	E_g (eV)	Ag	Al	Au	Cr	Cu	Fe	In	Mg	Mn	Ni	Pb	Pd	Pt	Ta	Ti	W
Diamond	p	5.47			1.71													
Ge	n	0.66	0.54	0.48	0.59		0.52		0.64			0.49	0.48					0.48
Ge	p		0.50		0.50				0.55									
Si	n	1.12	0.78	0.72	0.80	0.61	0.58	0.58		0.40	0.68	0.61		0.81	0.90		0.50	0.67
Si	p		0.54	0.58	0.54	0.50	0.46				0.42	0.51	0.55				0.61	0.45
SiC	n	3.00		2.00	1.95													
AlAs	n	2.16			1.20										1.00			
AlSb	p	1.63			0.55													
BiI	p	2.50			3.10													
BP	p	6.00			0.87													
GaSb	n	0.67			0.60													
GaAs	n	1.42	0.88	0.80	0.90		0.82	0.72							0.84	0.85		0.80
GaAs	p		0.63		0.42			0.68										
GaP	n	2.24	1.20	1.07	1.30	1.06	1.20	1.84		1.04	1.13	1.27			1.45		1.12	
GaP	p				0.72													
InSb	n	0.16	0.18*		0.17*													
InAs	p	0.33			0.47*													
InP	n	1.29	0.54		0.52													
InP	p				0.76													
CdS	n	2.43	0.56	Ohmic	0.78		0.50					0.45	0.59	0.62	1.10		0.84	
CdSe	n	1.70	0.43		0.49		0.33								0.37			
CdTe	n		0.81	0.76	0.71										0.76			
ZnO	n	3.20		0.68	0.65		0.45		0.30					0.68	0.75	0.30		
ZnS	n	3.60	1.65	0.80	2.00		1.75		1.50	0.82				1.87	1.84	1.10		
ZnSe	n		1.21	0.76	1.36		1.10		0.91				1.16		1.40			
PbO	n		0.95						0.91			0.96	0.95					

*77 K.

fig. 1.16: hauteurs de barrière expérimentales pour des contacts métal/Si(type N) Sze.

I-2-4: Méthodes de mesure des hauteurs de barrière:

Il existe plusieurs méthodes de mesure des hauteurs de barrière, nous allons rappeler les trois principales.

I-2-4.1: Mesures d'après la caractéristique Courant-Tension:

La caractéristique directe pour des courants pas trop élevés peut s'écrire, si on fait l'hypothèse qu'elle suit la loi de l'émission thermoionique [11]:

$$J = J_0 \left[\exp\left(\frac{qV}{kT}\right) - 1 \right] \quad 1.25$$

avec $J_0 = A^* T^2 \exp\left[-\frac{q(\Phi_b - \Delta\Phi)}{kT}\right] \quad 1.26$

Mais pratiquement aucune diode ne satisfait à l'équation 1.25 mais l'équation modifiée suivante:

$$J = J_0 \exp\left(\frac{qV}{nkT}\right) \left[1 - \exp\left(-\frac{qV}{kT}\right) \right]$$

où n est le facteur d'idéalité, il indique l'écart existant entre la caractéristique expérimentale et la loi de l'émission thermoionique. Ce paramètre est le reflet de l'état physico-chimique de l'interface M/SC.

Pour $V > 3kT/q$ on peut simplement écrire:

$$J = J_0 \exp\left(\frac{qV}{nkT}\right) \quad 1.27$$

d'où $\Phi_b - \Delta\Phi = \frac{kT}{q} \ln\left(\frac{A^* T^2}{J_0}\right) \quad 1.28$

$\Delta\Phi_0$: étant l'effet de la force image pour $V=0$.

Il suffit de tracer la courbe $\ln(J)$ en fonction de la tension V (c'est une droite); pour $V > 3kT/q$, l'intersection de cette droite avec l'axe verticale donne J_0 . Si on connaît A^* , l'équation 1.28 nous permet d'obtenir immédiatement $\Phi_b - \Delta\Phi$.

La pente de cette droite pour $V > 3kT/q$ nous permet d'accéder au facteur d'idéalité n .

Par cette méthode, la hauteur de barrière n'est pas clairement définie parce que la pente de $\ln(J)=f(V)$ doit être inférieure à 1.1 ce qui n'est pas toujours le cas.

I-2-4-2: Mesure photoélectrique: [12]

La diode est éclairée par une radiation monochromatique, si l'énergie de la radiation est supérieure à la barrière $\Phi_b - \Delta\Phi$, les électrons du niveau de Fermi du métal franchissent la barrière et sont balayés par le champ électrique de la zone de charge d'espace; il s'agit donc d'un courant photovoltaïque de la forme:

$$\gamma = 0_0 [h\nu - (\Phi_b - \Delta\Phi)]^2 \quad 1.29$$

Où 0_0 est le nombre de photons atteignant l'interface par cm^2 et par seconde. Si on connaît le courant γ et 0_0 ainsi que la fréquence ν de la radiation on peut alors déterminer $\Phi_b - \Delta\Phi$. Cette méthode permet de mesurer directement et avec précision la hauteur de barrière [Anderson].

1.4.2.3 : Mesure par la capacité:

Si le dopage est uniforme et la diode idéale:

$$C = \frac{dQ_{sc}}{dV} = S \cdot \left(\frac{qNd\epsilon}{2} \right)^{-1/2} \cdot \left(\Phi_b - V_n + V_R - \frac{kT}{q} \right)^{-1/2} \quad 1.30$$

où S est l'aire de la jonction et V_R la tension inverse appliquée.

Nous pouvons écrire :

$$\frac{1}{C^2} = \frac{2}{SqNd\epsilon} \left(\Phi_b - V_n + V_R - \frac{kT}{q} \right) \quad 1.31$$

La courbe $1/C^2$ en fonction de V_R est une droite dont l'intersection avec l'axe des tensions donne la hauteur de barrière.

$$\Phi_b = V_n + V_i + \frac{kT}{q} \quad 1.32$$

où V_i est la tension au point d'intersection.

La pente de cette droite donne le dopage:

$$Nd = \frac{2}{q\epsilon} \left[\frac{1}{S^2 \cdot d \left(\frac{1}{C^2} \right) / dV} \right] \quad 1.33$$

1.2.5 Conclusion:

La disparité des résultats relatifs à la mesure par $C(V)$ et $I(V)$ est due à plusieurs facteurs dont notamment:

- * La contamination de la surface.
- * Les courants de fuite dûs aux effets de bord.
- * Les niveaux pièges.

Dans le chapitre suivant nous nous intéressons aux différents modèles de transport de courant et commencerons par la théorie de l'émission thermoionique qui est basée sur l'extension hors équilibre d'un modèle à l'équilibre.

CHAPITRE II

Modèles de transport de courant

II-1. Introduction:

Les principaux mécanismes de transport de courant électrique à travers une jonction Métal-Sc[1] sont donc connus, il s'agit de:

1. L'effet thermoionique qui se résume au passage des porteurs majoritaires du Sc vers le métal par excitation thermique au dessus de la barrière.
2. L'effet Tunnel à travers la barrière.
3. Les phénomènes de génération-recombinaison des porteurs dans la zone de charge d'espace.
4. L'injection des porteurs minoritaires dans le Sc.

On constate que chaque mécanisme possède un mécanisme antagoniste de sorte qu'à l'équilibre (en l'absence de polarisation) ces mécanismes sont rigoureusement équilibrés.

-Le courant Tunnel ne prend véritablement de l'importance que si la barrière est suffisamment mince ce qui correspondrait à des dopages élevés ($N_d > 10^{18}$). la valeur de ce courant n'est pas influencée par la tension de polarisation.

-Les phénomènes de génération-recombinaison sont négligeables dans les contact au Silicium où la durée de vie des porteurs est grande et les hauteurs de barrière assez faibles.

-Le courant d'injection des minoritaires demeure généralement assez faible devant le courant des majoritaires.

En ce qui concerne le calcul de la densité de courant dans un contact Métal/Sc deux théories ont fait l'objet de nombreuses études [Rhoderick].

- a) La théorie de l'émission Thermoionique de Bethe.
- b) La théorie de la diffusion de Mott et Wagner.
- c) Crowell et Sze ont proposé une théorie faisant la synthèse des deux précédentes: c'est la théorie Mixte.

II-2 Modèle de l'émission Thermoionique: (Sc de type N)

II-1-1: Introduction

D'après ce qui vient d'être dit plus haut, le courant direct de la diode est essentiellement dû aux électrons majoritaires franchissant la barrière par effet thermoionique (théorie de Bethe) [2][3][4][9].

Nous allons calculer la densité de courant en faisant les hypothèses suivantes:

- 1) Les collisions dans la zone déplétée sont négligées.
- 2) La masse des électrons est isotrope et est indépendante de l'énergie.
- 3) La hauteur de barrière est supérieure à kT ; Donc au voisinage du contact la population d'électrons n'est pas dégénérée.

Ces hypothèses rendent immatériel le profil de la barrière, Le courant dépend uniquement de la hauteur de barrière Φ_b .

II-1-2: Enoncé de la théorie:

La densité de courant est donnée par le flux d'électrons ayant une énergie suffisante pour passer au dessus de la barrière dans la direction des x.

$$J_{S \rightarrow M} = \int_{E_f + q\Phi_b}^{\infty} q v_x dn \quad \text{densité de courant du Sc vers le métal.} \quad (2.1)$$

où $dn = f(E)dN$ et $dN = \frac{2}{h^3} \cdot dp_x \cdot dp_y \cdot dp_z$

$$v_x = \frac{p_x}{m^*} \text{ et } f(E) = \exp\left[-\frac{E - E_f}{kT}\right]$$

avec $E = E_c + \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m^*}$

Les vitesses des électrons suivant y et z peuvent être quelconques, la densité de courant s'écrit alors:

$$J_{S \rightarrow M} = \frac{2q}{h^3} \cdot \exp\left(-\frac{qV_n}{kT}\right) \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(-\frac{p_y^2}{2m^*kT}\right) dp_y \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(-\frac{p_z^2}{2m^*kT}\right) dp_z \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(-\frac{p_x^2}{2m^*kT}\right) \cdot \frac{p_x}{m^*} \cdot dp_x \quad (2.2)$$

avec $qV_n = E_c - E_f$

La vitesse minimum que doivent avoir les électrons pour passer au dessus de la barrière est telle que :

$$\frac{1}{2} \cdot m^* \cdot v_x^2 = q(V_b - V) \quad (2.3)$$

L'intégration donne :

$$J_{sm} = \frac{4\pi q m^* K^2 T^2}{h^3} \cdot \exp\left[-\frac{q(V_n + V_b)}{kT}\right] \cdot \exp\left[\frac{qV}{kT}\right] \quad (2.4)$$

or $q(V_n + V_b) = \Phi_b$

et en posant $A^* = \frac{4\pi q m^* k^2 T^2}{h^3}$

nous aurons:

$$J_{sm} = \frac{4\pi q m^* k^2 T^2}{h^3} \cdot \exp\left[-\frac{q\Phi_b}{kT}\right] \cdot \exp\left[\frac{qV}{kT}\right] \quad (2.5)$$

A^* : est appelé la constante de Richardson pour l'émission thermoionique.

La densité de courant totale $J_T = J_{sm} - J_{ms}$

J_{ms} est la densité de courant du métal vers le Semiconducteur-

Ce courant est constant et ne varie pas avec la polarisation parce que les électrons doivent franchir une hauteur de barrière constante égale à Φ_b .

A l'équilibre sans polarisation, le courant total à travers le contact est nul. la densité de courant dans le sens métal-Semiconducteur équilibre parfaitement la densité de courant dans le sens inverse.

$$J_{ms} = |J_{sm}| \quad \text{et} \quad J_T = 0 \quad \text{pour} \quad V=0.$$

$$J_{ms} = J_{sm} (V=0) = A^* T^2 \exp\left[-\frac{q\Phi_b}{kT}\right] \quad (2.6)$$

pour une tension de polarisation V non nulle nous aurons donc :

$$J_T = A^* T^2 \exp\left[-\frac{q\Phi_b}{kT}\right] \exp\left[\frac{qV}{kT}\right] \quad (2.7)$$

$$J_T = J_0 \left[\exp\left(\frac{qV}{kT}\right) - 1 \right] \quad (2.8)$$

c'est la forme idéale de la densité de courant.

$$J_0 = A^* T^2 \exp\left[-\frac{q\Phi_b}{kT}\right] \quad (2.9)$$

J_0 est appelé courant de saturation.

Notons que J_0 ne dépend pas de la tension appliquée mais de la différence des travaux de sortie et de la température.

On pose généralement $A^* = A \cdot \frac{m^*}{m}$ (2.10)

où m^* est la masse effective de l'électron dans le semiconducteur et m sa masse au repos.

Crowell a fait une étude du rapport A^*/A en considérant le caractère tensoriel de la masse effective. Les différents résultats sont résumés dans le tableau suivant:

Semiconducteur	Ge	Si
type P	0.36	0.66
type N(111)	1.07	2.15
type P(100)	1.19	2.05

II-1-3: Conclusion:

Dans cette théorie nous avons admis que seuls les électrons ayant une énergie supérieure à Φ_b pouvait franchir la barrière. Cette théorie est basée sur l'extension hors équilibre d'un modèle à l'équilibre.

Dans la théorie d'émission de Bethe on suppose que le courant d'électron est dominé par le processus d'émission thermoionique au dessus de la barrière. Bethe montre que pour que ce processus soit effectif il suffit que le libre parcours moyen λ des électrons dans le Sc soit supérieur à une longueur minimum a .

Cette longueur représente la distance sur laquelle la barrière s'amortit d'une quantité kT depuis son sommet [11]. Cette condition s'écrit sous la forme

$$\lambda \cdot q \cdot E_{\max} > kT$$

ou bien:

$$\mu \cdot E_{\max} > \frac{v_{th}}{3}$$

où $E_{\max}$ la valeur maximum du champ électrique dans la zone dépeuplée.

μ : la mobilité des électrons.

v_{th} : la vitesse thermique des électrons dans le Sc.

L'hypothèse centrale est donc que les électrons émis dans le métal, conservent leur caractère d'électrons "chauds". Leur énergie est supérieure d'environ 1meV à l'énergie moyenne des électrons dans le métal. Leur thermalisation s'effectue à l'intérieur du métal par collisions électrons-électrons. C'est pourquoi on considère que le potentiel electrochimique des électrons injectés du Sc vers le métal est nettement au dessus du niveau de Fermi du métal. Le niveau de Fermi du Sc $E_{f,sc}$ et celui du métal ne sont pas au même niveau à l'interface M/Sc.

Rhoderick montre qu'il en est ainsi dans les Sc à fortes mobilités (tels que Si, AsGa) pour lesquels la théorie pure de l'émission thermoionique sera seule à rendre compte correctement du comportement de la barrière.

Notons que la densité de courant donnée dans ce cas est idéale, en pratique aucune diode ne satisfait à l'équation 2.8 mais à l'équation modifiée 1.27, aussi nous retiendrons que Φ_b diffère assez souvent de l'expression $\Phi_b = \Phi_m - X$.

Dans le prochain paragraphe nous exposerons la théorie dite de la diffusion.

II-3. Modèle de la diffusion

Les hypothèses utilisées [1][2] sont:

-La barrière $\Phi_b \gg kT$.

-La concentration des électrons à la jonction garde sa valeur à l'équilibre (hypothèse sur le quasi-niveau de Fermi).

-On néglige l'effet de la force image.

Ce modèle consiste à résoudre l'équation de la diffusion des porteurs dans la zone de charge d'espace du Sc compte tenu dans cette zone d'un champ électrique et d'un gradient de concentration .

La densité de courant des électrons est donnée par:

$$J_n = qn\mu E + qD_n \frac{dn}{dx} \quad (2.11)$$

avec $\frac{D_n}{\mu} = \frac{kT}{q}$ appelée relation d'Einstein (2.12)

et

$$E = -\text{grad} V \quad (2.13)$$

le champ électrique dérive d'un potentiel.

Et si on néglige le courant des trous devant celui des électrons (Sc de type N).

En combinant les équations 3.1, 3.2 et 3.3 on obtient:

$$J = qDn \left[-\frac{q}{kT} n(x) \frac{dV}{dx} + \frac{dn(x)}{dx} \right] \quad (2.14)$$

En régime stationnaire J est indépendant de x et si on multiplie les deux membres de (2.14) par $\exp(-\frac{qV(x)}{kT})$ et en intégrant l'équation le long de la zone dépeuplée entre $x=0$ et $x=W$ on obtient:

$$J \int_0^W \exp(-\frac{qV(x)}{kT}) dx = qDn \left[n(x) \exp(-\frac{qV(x)}{kT}) \right]_0^W \quad (2.15)$$

Il reste à déterminer les conditions aux limites pour $n(x)$ et $V(x)$, si on prend l'origine des potentiels à la jonction on aura:

en $x=0$ $n(x=0)=N_c \exp[-(E_c-E_f)/kT] = N_c \exp[-\Phi_b/kT]$

$V(x=0)=0$

en $x= W$ $n(x=W)=N_d=N_c \exp(-qV_n/kT)$

$V(x=W)=V_b-V$

En explicitant les conditions aux limites on obtient:

$$J = \frac{qDnN_d \exp(-\frac{qV_b}{kT})}{\int_0^W \exp\left[-\frac{qV(x)}{kT}\right] dx} \cdot \left[\exp\left(\frac{qV}{kT}\right) - 1 \right] \quad (2.16)$$

Si on fait l'approximation de Schockley le potentiel parabolique est donné par:

$$V(x) = -\frac{qNd}{\epsilon} \left(\frac{x^2}{2} - Wx \right) \quad (2.17)$$

avec
$$W^2 = \frac{2\epsilon}{qNd} (Vb - V) \quad (2.18)$$

$$E_{\max} = -\frac{qNd}{\epsilon} W \quad (2.19)$$

$E_{\max}$: Champ électrique à la jonction M/Sc.

Compte tenu de 2.18, 2.17 devient:

$$V(x) = Vb - V - \frac{qNd}{2\epsilon} (x - W)^2 \quad (2.20)$$

Dans ce cas l'intégrale du dénominateur de (2.16) s'écrit:

$$Int = \exp \left[-\frac{q(Vb - V)}{kT} \right] \cdot \int_0^W \exp \left[\frac{q^2 Nd}{2\epsilon kT} (x - W) \right] dx \quad (2.21)$$

Posons $a^2 = \frac{q^2 Nd}{2\epsilon kT}$ et effectuons le changement de variable suivant :

$$u^2 = a^2 (x - W)^2 \Rightarrow 2u du = 2a^2 (x - W) dx$$

$$\text{donc } dx = a^{-1} du$$

pour $x=0, \quad u^2 = q/kT (Vb - V)$

$$x=W, \quad u^2=0$$

et posons $z = \sqrt{\frac{q}{kT} (Vb - V)}$, l'intégrale devient:

$$Int = a^{-1} \exp(-z^2) \int_0^z \exp(u^2) du$$

posons $D(aW) = \exp(-z^2) \int_0^z \exp(u^2) du$

$D(aW)$ est connue sous le nom d'intégrale de Dawson.

si $(aW) \gg 1$ alors $D(aW) = 1/2aW$ cette condition correspond à $Vb - V > kT/q$.

Ce qui est largement vérifié sauf pour de fortes polarisations directes, l'intégrale devient en explicitant W (dans l'hypothèse de Schockley):

$$Int = a^{-1} \frac{1}{2aW} = \frac{\epsilon \cdot kT}{q^2 Nd \cdot W}$$

Si on explicite la valeur de l'intégrale dans l'expression du courant 2.16 on obtient:

$$J = \frac{q^3 N_d^2 \cdot D_n}{\epsilon kT} \cdot W \cdot \exp\left(-\frac{qV_b}{kT}\right) \left[\exp\left(\frac{qV}{kT}\right) - 1 \right] \quad (2.22)$$

posons $J_{sd} = \frac{q^3 N_d^2 \cdot D_n}{\epsilon kT} \cdot W \cdot \exp\left(-\frac{qV_b}{kT}\right)$ (2.23)

or $\mu = \frac{qD_n}{kT}$ et $E_s = \frac{qN_d \cdot W}{\epsilon}$

E_s : Le champ électrique à la jonction "champ maximum" (dans l'approximation de Schockley).

et $v_d = \mu E_s$ vitesse maximum des porteurs à l'interface, alors J_{sd} devient:

$$J_{sd} = qN_d \cdot v_d \cdot \exp\left(-\frac{qV_b}{kT}\right) \quad (2.24)$$

sachant que $N_d \cdot \exp(-qV_b/kT) = N_c \cdot \exp(-q\Phi_b/kT)$

$$J_{sd} = q \cdot v_d \cdot N_c \exp\left(-\frac{q\Phi_b}{kT}\right) \quad (2.25)$$

Mais dans ce cas J_{sd} ne se sature plus en inverse mais augmente en $\sqrt{|V|}$. La densité de courant J s'écrit donc sous la forme:

$$J = J_{sd} \left[\exp\left(\frac{qV}{kT}\right) - 1 \right] \quad (2.26)$$

Conclusion:

Cette théorie est appelée loi de Mott et Wagner. Le courant des majoritaires est gouverné par le processus de dérive diffusion dans la zone de charge d'espace. L'hypothèse centrale de cette théorie est que la population d'électrons majoritaires du Sc doit être en équilibre avec les électrons situés au voisinage immédiat de l'interface M/Sc.

L'argument avancé pour justifier cette hypothèse est que les collisions électrons-électrons dans le métal sont suffisamment nombreuses (dû à la forte densité d'électrons du métal) pour thermaliser instantanément les électrons injectés par le Sc. Donc le niveau de Fermi du métal coïncide avec le niveau de Fermi du Sc à l'interface.

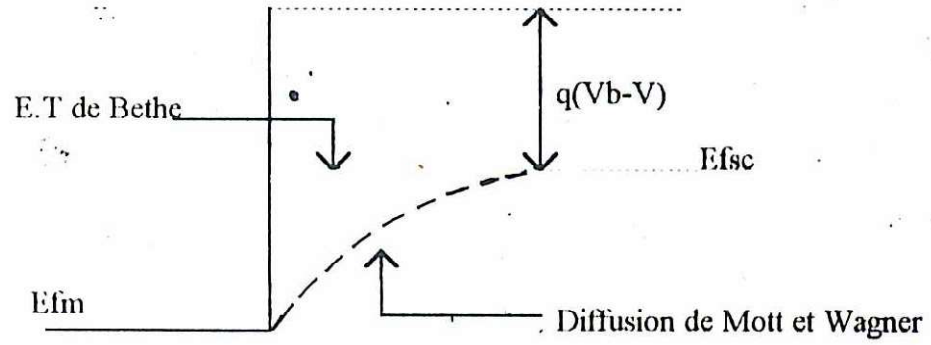


fig.2.1 Niveau de Fermi à l'interface pour l'E.T et la Diffusion

II-4 Modèle Mixte:

Dans ce modèle on considère que les courants d'émission thermoionique et de diffusion sont en série [3]. A l'interface le courant est thermoionique et il est de diffusion dans la zone de charge d'espace.

La condition de raccordement consiste à écrire que ces courants sont égaux. Dans le calcul de chacun des courants nous avons considéré que la densité de porteurs à l'interface était donné par le régime de pseudoéquilibre $n(x=0) = N_d \exp(-\Phi_b/kT)$, c'est à dire que la densité de porteurs était indépendante du flux de porteurs résultant du passage de courant.

Dans le modèle de la diffusion, cette condition est équivalente à l'introduction d'une vitesse de recombinaison " v_r " à l'interface d'une part et d'autre part que la densité de porteurs sous une polarisation V est $n(x=0) = n_s(V)$.

Le courant de diffusion est toujours donné par l'équation (2.16) mais la modification d'une condition aux limites modifie l'équation, qui devient:

$$J \int_0^w \exp\left(\frac{qV}{kT}\right) \cdot qDn \left[N_d \exp\left(\frac{q(V_b - V)}{kT}\right) - n_s(V) \right]$$

Le courant J_d s'écrit alors :

$$J_d = qN_d \exp\left[-\frac{q(V_b - V)}{kT}\right] - q \cdot v_d \cdot n_s(V) \quad (2.27)$$

Dans le cas de l'émission thermoionique si on tient compte de la vitesse " v_r "; où " v_r " est la vitesse de recombinaison en surface.

$$J_e = qN_d \cdot v_r \cdot \exp\left(-\frac{qV_b}{kT}\right) \left[\exp\left(\frac{qV}{kT}\right) - n_s(V) \right] \quad (2.28)$$

pour $V \gg kT/q$ il vient $J_e = q \cdot n_s(V) \cdot v_r$
 Il suffit d'écrire que $J = J_e = J_d$ pour obtenir $n_s(V)$.

$$n_s(V) = N_d \cdot \frac{v_c^2}{v_d + v_r} \cdot \exp\left[\frac{q(V_b - V)}{kT}\right]$$

Le courant J_e devient, si on pose $v^* = (1/v_d) + (1/v_r)$

$$J_e = N_d \cdot v^* \cdot \exp\left(\frac{q(V_b - V)}{kT}\right)$$

-si $v_d \ll v_r \Rightarrow v^* = v_d$: Le courant dans la structure est un courant de diffusion des porteurs dans la zone de charge d'espace.

- si $v_d \gg v_r \Rightarrow v^* = v_r$ le courant est un courant thermoionique.

[Mathieu] montre que la condition $v_d \gg v_r$ est équivalente à $V_b - V \gg 1mV$; ceci est généralement vrai sauf pour de fortes polarisations directes où $V_b \approx V$. le courant dans la structure est essentiellement de nature Thermoionique.

Conclusion:

Une discussion a été faite par L.Vidal et D.Bajon sur les conditions de validité de l'un ou l'autre des modèles de transport de courant.

Discuter les limites de la théorie Mixte reviendrait à discuter la validité de l'une ou l'autre des théories (T.E et Diff.). le modèle Mixte peut être amélioré en prenant en compte la réflexion quantique.

En effet un électron passant au dessus de la barrière peut être rétrodiffuser par absorption ou émission d'un phonon quantique. Crowell et Sze ont calculé l'expression de la densité de courant en tenant compte de ce phénomène[13].

$$J = A^{**} T^2 \exp\left(-\frac{q\Phi_b}{kT}\right) \left[\exp\left(\frac{qV}{kT}\right) - 1 \right]$$

avec
$$A^{**} = \frac{f_p \cdot f_q \cdot A^*}{1 + f_p \cdot f_q \cdot \frac{v_r}{v_d}}$$

Le coefficient de réflexion a été calculé par ces mêmes auteurs, il est de l'ordre de 50% pour des énergies supérieures de 0.05 eV de la hauteur de barrière Φ_b .

où A^{**} est la constante de Richardson modifiée.

Dans le cas du Silicium, A^{**} vaut:

-pour les électrons	$A^{**} \sim 112 \text{ Acm}^{-2} \text{ } ^\circ\text{K}^{-2}$
-pour les trous	$A^{**} \sim 32 \text{ Acm}^{-2} \text{ } ^\circ\text{K}^{-2}$

-L'utilisation de la théorie de la diffusion et de la théorie Mixte passe nécessairement par la connaissance du profil de barrière pour déterminer les caractéristiques $I(V)$.

Dans le chapitre III, nous déterminerons les caractéristiques $I(V)$ en utilisant l'équation de transport sans faire d'hypothèses sur le profil de barrière mais seulement en tenant compte des conditions aux limites.

CHAPITRE III

RESOLUTION UNIDIMENSIONNELLE DE L'EQUATION DE TRANSPORT

III.1: Mise en équation du problème:

L'équation de Boltzman s'écrit :

$$m \frac{dv}{dt} = q(E + v \wedge B) - \frac{mv}{\tau} - kT \frac{\text{grad}(\rho)}{\rho} - k \text{grad}(T) \quad (\text{III.1})$$

L'équation de transport c'est l'équation de Boltzman d'ordre 1 [2][5][6][7][9]. En négligeant les forces magnétiques et le gradient de température cette équation s'écrit:

$$m \frac{dv}{dt} = qE - \frac{mv}{\tau} - kT \frac{\text{grad}(\rho)}{\rho} \quad (\text{III.2})$$

Ecrivons que E dérive d'un potentiel $E = -\text{grad}(V)$

dans le cas du régime permanent $\frac{dv}{dt} = 0$

$$0 = qE - \frac{mv}{\tau} - kT \frac{\text{grad}(\rho)}{\rho} \quad (\text{III.3})$$

En combinant III.1, III.2 et III.3 l'équation III.1 devient:

$$\frac{mv}{\tau} = -\text{grad} \left(V + \frac{kT}{q} \ln|\rho| \right) \quad (\text{III.4})$$

$$\text{posons : } \phi = V + \frac{kT}{q} \ln|\rho| \quad (\text{III.5})$$

l'équation III.4 devient:

$$\frac{mv}{\tau} = -\text{grad}(\phi) \Rightarrow v = -\mu \text{grad}(\phi) \quad (\text{III.6})$$

ou $\mu = \frac{q\tau}{m}$ et ϕ : est le pseudopotentiel de Fermi

Pour déterminer ρ la densité de charge, intégrons l'équation III.5 il vient :

$$\rho = \rho_0 \cdot \exp \left[-\frac{q(V - \phi)}{kT} \right] \quad \text{donc} \quad n = n_0 \cdot \exp \left[-\frac{q(V - \phi)}{kT} \right] \quad (\text{III.7})$$

la conservation du courant $\text{div}(J) = 0$

$$\text{avec} \quad J = \rho v \quad (\text{III.8})$$

nous pouvons donc écrire en combinant III.6, III.7 et III.8 dans le cas unidimensionnel que:

$$J = -q\mu \cdot n(x) \cdot \frac{d\phi}{dx} \quad \text{et} \quad n(x) = n_0 \cdot \exp \left[-\frac{q(V - \phi)}{kT} \right]$$

Nous travaillerons avec V et ϕ définis comme étant la variation d'énergie par rapport à leurs valeurs à l'intérieur du Semiconducteur.

$$V(x) = \frac{E_c - E_{c\infty}}{q} \quad \text{et} \quad \phi(x) = \frac{E_f' - E_f'_{\infty}}{q}$$

$E_{c\infty}$: étant le niveau de conduction du Semiconducteur

$E_f'_{\infty}$: le quasi-niveau de Fermi à l'intérieur du Sc.

Dans ce cas la constante d'intégration ne vaut Nd et nous aurons:

$$J = q\mu n(x) \frac{d\phi}{dx} \quad (III.9) \text{ et}$$

$$n(x) = Nd \exp \left[-\frac{q}{kT} (V(x) - \phi(x)) \right] \quad (III.10)$$

L'équation de Poisson dans le Sc s'écrit, en supposant le Sc de type N:

$$\frac{d^2 V}{dx^2} = -\frac{\rho - \rho_0}{\epsilon} \quad (III.11)$$

où ϵ est la permittivité du Sc

ρ : densité de porteurs mobiles $= qn$

ρ_0 : densité de porteurs fixes en supposant tous les atomes ionisés $= qNd$

Posons $\sigma_0 = q\mu Nd$

et $\Psi = V - \phi$

avec $u_T = \frac{kT}{q}$

(III.9) devient:

$$J = -q\mu Nd \frac{d\phi}{dx} \exp\left(-\frac{\Psi}{u_T}\right) \Rightarrow \frac{d\phi}{dx} = -\frac{J}{\sigma_0} \exp\left(\frac{\Psi}{u_T}\right) \quad (III.12)$$

L'équation de Poisson s'écrit alors :

$$\frac{d^2 V}{dx^2} = -\frac{\rho_0}{\epsilon} \left[\exp\left(-\frac{\Psi}{u_T}\right) \right] \quad (III.13)$$

L'équation (III.12) peut être déterminée en tenant compte de la conservation du courant :

$$\frac{d^2 \phi}{dx^2} = \frac{J}{\sigma_0 u_T} \exp\left(\frac{\Psi}{u_T}\right) \frac{d\Psi}{dx} \quad (III.14)$$

En retranchant III.14 de III.13 on obtient:

$$\frac{d^2 \Psi}{dx^2} = -\frac{\rho_0}{\epsilon} \left[\exp\left(-\frac{\Psi}{u_T}\right) - 1 \right] + \frac{J}{\sigma_0 u_T} \exp\left(\frac{\Psi}{u_T}\right) \frac{d\Psi}{dx} \quad (III.15)$$

Après normalisation des potentiels V, ϕ et Ψ homogènes aux tensions par rapport à $u_T = \frac{kT}{q}$ et

des grandeurs homogènes aux longueurs par rapport à la longueur de Debye

$$L_d = \sqrt{\frac{\epsilon u_T}{\rho_0}}, X = \frac{x}{L_d}; \text{ les grandeurs homogènes aux densités de charges par rapport à } \cdot$$

$\rho_o = qNd$, le champ par rapport à $\frac{Ld}{u_T}$ et la densité de courant J par rapport à $J_N = J \cdot \mu \cdot n \frac{kT}{q \cdot Ld}$

Nous obtenons l'équation de transport unidimensionnelle normalisée suivante:

$$\frac{d^2 \psi}{dX^2} = 1 - \exp(-\psi) + J_N \exp(\psi) \cdot \frac{d\psi}{dX} \quad (\text{III.16})$$

$$J_N = J \cdot \mu \cdot n \frac{kT}{q \cdot Ld} \quad J_N \cdot K_N = J$$

J_N : est la densité de courant normalisée : J

C'est une équation différentielle de second ordre en ψ .

L'origine des X étant prise à la jonction, les conditions aux limites sont celles de la théorie de la diffusion.

$$\begin{array}{ll} \psi(0) = V_B & \psi(W) = 0 \\ \Phi(0) = V_A & \Phi(W) = 0 \\ V(0) = V_A + V_B & V(W) = 0 \end{array}$$

Où W est la largeur de la zone de charge d'espace et V_A la tension appliquée, étant entendu que toute la tension appliquée se retrouve intégralement aux bornes de la zone dépeuplée.

La chute Ohmique dans la zone neutre étant négligée.

Le potentiel V présente une discontinuité égale à $V_A + V_B$.

Nous donnons ci-dessous les profils de V, Φ et ψ d'après J.R.MacDonald [14] et L.Vidal[2].

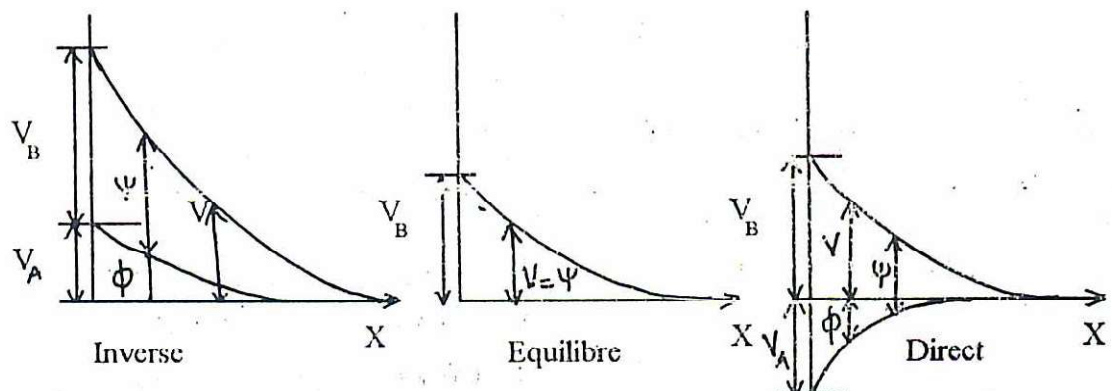


Fig III-1: Profils des potentiels

III.2: Résolution analytique :

Dans notre cas , la résolution analytique est une résolution approximative d'une équation exacte. Il n'est pas question de trouver des résultats exacts seulement une première approche nous permet de simplifier les équations pour pouvoir les traiter analytiquement.

Les méthodes analytiques utilisent des simplifications pour évaluer approximativement la fonction sans entrer dans les calculs. C'est ce que nous avons fait, en utilisant l'approximation de Schokley améliorée.

Puisque nous avons à résoudre l'équation III.16 , utilisons l'approximation de Schockley améliorée.

L'approximation de Schockley améliorée consiste à approcher la fonction $1 - \exp(-\Psi)$ par la courbe (Fig III.1).

pour $|\psi| < 1 \Rightarrow \exp(-\psi) = 1 - \psi$ que nous appellerons la zone neutre.

pour $|\psi| > 1 \Rightarrow$ " " " la zone dépeuplée.

Nous aurons donc à étudier deux cas distincts.

Le raccordement se faisant en $\psi=1$; En ce point les deux fonctions sont égales $\psi_1 = \psi_2$ d'une

part et que les dérivées le sont aussi : $\frac{d\psi_1}{dX} = \frac{d\psi_2}{dX}$

la fonction ψ_1 décrit la fonction ψ pour $|\psi| < 1$

la fonction ψ_2 décrit la fonction ψ pour $|\psi| > 1$

Toutes les valeurs sont données en grandeurs normalisées:

A) Cas où $|\psi| < 1$ donc $\exp(-\psi) = 1 - \psi$ et $\exp(\psi) = \frac{1}{1 - \psi} \approx 1$

L'équation III.16 devient:

$$\frac{d^2\psi}{dX^2} = \psi + J_N \frac{d\psi}{dX} \quad (\text{III.17})$$

La solution de l'équation (III.17) est de la forme:

$$\psi_1 = A \cdot e\left(\frac{X}{\lambda_1}\right) + B \cdot e\left(-\frac{X}{\lambda_2}\right) \quad (\text{III.18})$$

avec $\lambda_{1,2} = \frac{J \pm \sqrt{J^2 + 4}}{2}$ pour J faible $\Rightarrow \lambda_{1,2} = \pm 1$

Dans ce cas la solution de l'équation devient:

$$\psi_1 = A \cdot \exp(X) + B \cdot \exp(-X) \quad (\text{III.19})$$

quand $X \rightarrow \infty$ alors $\psi(X) \rightarrow 0$ (la fonction $\psi(X)$ est nulle dans le volume loin de l'interface)

$\Rightarrow A=0$ l'équation III.19 devient:

$$\psi_1 = B \cdot \exp(-X) \quad (\text{III.20})$$

$$\psi_1 = B \cdot \exp(-X) \quad (\text{III.20})$$

et
$$\frac{d\psi_1}{dX} = -\psi_1$$

B) Cas où $|\psi| > 1$ on pose $\exp(-\psi) = 0$

l'équation III.16 devient:

$$\frac{d^2\psi_2}{dX^2} = 1 + J_N \cdot \frac{d\psi_2}{dX} \cdot \exp(\psi_2)$$

en intégrant une fois nous obtenons:

$$\frac{d\psi_2}{dX} = X + J_N \cdot \exp(\psi_2) \quad (\text{III.21})$$

La solution de l'équation III.21 est de la forme:

$$\exp(-\psi_2) = -J_N \cdot u(X) + y_0 \exp(-\frac{X^2}{2}) \quad (\text{III.22})$$

avec
$$u(X) = \exp(-X^2) \int_0^X \exp(\frac{t^2}{2}) dt \quad (\text{III.24})$$

C) Raccordement des 2 fonctions:

Le raccordement des deux courbes se fait en $|\psi| = 1$ donc il faut trouver l'abscisse X_0 pour laquelle $|\psi_1| = |\psi_2| = 1$

cas A) $\psi_1 = 1 \rightarrow B \exp(-X_0) = 1$

$$B = \exp(X_0) \quad (\text{III.25})$$

et
$$\frac{d\psi_1}{dX} = -\psi_1 = -1$$

cas B) $\exp(-\psi_2) = J_N \cdot u(X_0) + y_0 \cdot \exp(-\frac{X_0^2}{2}) \quad (\text{III.26})$

et

$$\frac{d\psi_2}{dX} = X_0 + J_N \cdot e = -1 \Rightarrow X_0 = -1 - J_N \cdot e$$

Pour J_N faible $X_0 = -1$ cette condition définit le coefficient B dans l'équation III.25

$$B = 1/e.$$

Pour $|\psi| < 1$ la solution du système est : $\psi_1 = \exp[-(X+1)]$

**La fonction $|\psi_1|$ varie exponentiellement dans la zone Neutre (III.27)

Pour $|\psi| > 1$ déterminons y_0

En effet au raccordement nous avons $\psi = 1$ et $X = X_0$ l'équation III.26 s'écrit:

$$\exp(-1) = J_N \cdot u(1) + y_0 \cdot \exp(-\frac{1}{2})$$

si de plus on suppose que J_N est faible nous obtenons:

$y_0 = e^{-1/2}$ et l'équation III.26 s'écrit:

$$\exp(-\psi_2) = -J_n \cdot u(X) + \exp\left(-\frac{(1+X^2)}{2}\right)$$

pour J_n faible $\Rightarrow J_n \cdot u(X) = 0$

$$\exp(\psi_2) = \exp\left(\frac{(1+X^2)}{2}\right) \Rightarrow \psi_2 \approx \frac{1+X^2}{2} \quad (\text{III.28})$$

**La variation de ψ_2 en fonction de X est parabolique dans la zone dépeuplée.

Pour déterminer l'abscisse de la jonction X_J , il suffit d'écrire que $V = V_b = \psi_2$

donc que $V_b = \frac{1+X_J^2}{2} \Rightarrow X_J = \pm \sqrt{2V_b - 1}$ mais comme $X_J < X_0 = -1$

$$X_J = -\sqrt{2V_b - 1}$$

pour tracer la forme de la solution de l'équation de transport unidimensionnelle nous devons considérer les deux demi-plans séparés par la droite $X_0 = -1$ (voir fig III.2)

Pour les $X < -1$ ψ est décrite par la fonction ψ_2

Pour les $X > -1$ ψ est décrite par la fonction ψ_1

Pour $X = 0 \Rightarrow \psi_1 = 1/e$

La jonction est située à l'abscisse $X_J = -\sqrt{2V_b - 1}$

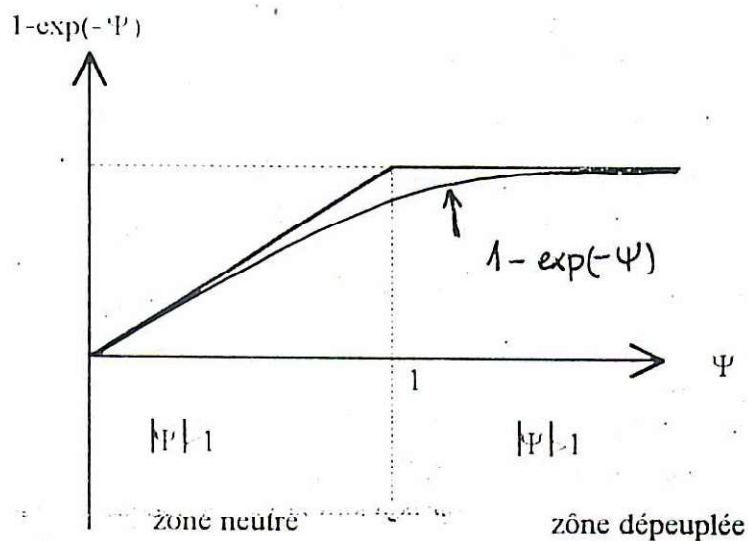


fig. III.2: approximation de Schockley

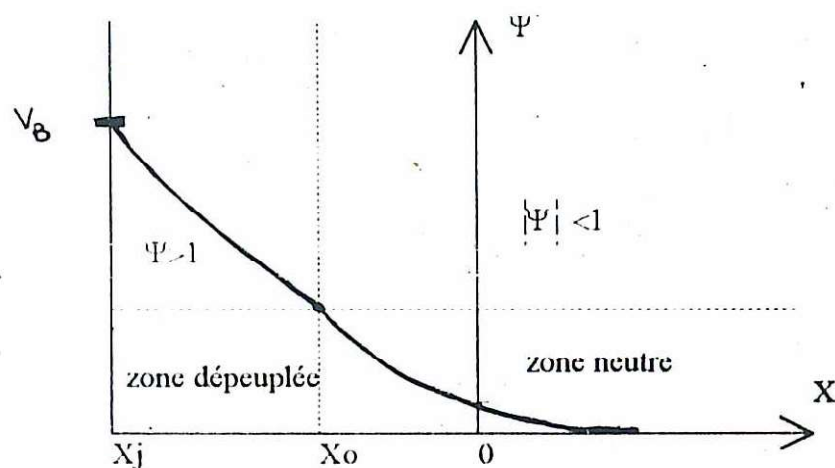


fig. III.3: l' fonction ψ d'après la résolution analytique

III.3 Résolution par les différences finies:

Pour résoudre l'équation III.16, il faut d'abord écrire les différentielles $\frac{d^2\Psi}{dX^2}$ et $\frac{d\Psi}{dX}$ à l'aide des différences finies, ce qui nous permet de transformer l'équation III.16 en une équation algébrique non linéaire.

Cette écriture consiste à faire un développement limité de Taylor de la fonction au point $x+h$ et au point $x-h$ en s'arrêtant au 2ème ordre (voir Annexe).

En explicitant $\frac{d^2\Psi}{dX^2}$ et $\frac{d\Psi}{dX}$ en notation indicielle où
 $\Psi(X)=\Psi(J)$ $\Psi(X+h)=\Psi(J+1)$ et $\Psi(X-h)=\Psi(J-1)$ (III.28)
 c'est à dire à l'aide des différences finies, on aura:

$$\begin{aligned} \frac{d^2\Psi(J)}{dX^2} &= (1/h^2) [\Psi(J+1) + \Psi(J-1) - 2\Psi(J)] \\ \frac{d\Psi(J)}{dX} &= (1/2h) [\Psi(J+1) - \Psi(J-1)] \end{aligned} \quad (III.29)$$

l'équation (III.16) devient:

$$\begin{aligned} (1/h^2) [\Psi(J+1) + \Psi(J-1) + 2\Psi(J)] &= 1 - \exp(-\Psi(J)) + \\ &+ J \exp(\Psi(J)) (1/2h) [\Psi(J+1) - \Psi(J-1)] \end{aligned} \quad (III.30)$$

L'équation (III.30) n'est autre que la fonction image aux différences finies de l'équation III.16.

La résolution de l'équation III.30 au lieu de III.16 reviendrait à commettre une erreur de l'ordre de h sur l'évaluation de la fonction [15].

Nous obtenons donc une équation algébrique non linéaire en Ψ où tous les autres termes sont connus à l'itération considérée.

En d'autres termes, au lieu de résoudre l'équation (III.16) de façon continue dans toute la zone dépeuplée (X variant de 0 à W), nous résolvons l'équation (III.30) aux points J sachant que J varie de 1 à N par pas égal à h dans toute la zone dépeuplée.

En mettant (III.30) sous la forme $F(\Psi)=0$, nous obtenons:

$$F(\Psi(J)) = (1/h^2)[\Psi(J+1) + \Psi(J-1) - 2\Psi(J)] - Jn \frac{1}{2h} \exp(\Psi(J))[\Psi(J+1) - \Psi(J-1)] + \exp(-\Psi(J)) - 1 \quad (\text{III.31})$$

Pour la résolution de cette équation nous avons opté pour la résolution des équations non linéaires par optimisation, les deux méthodes de résolution non linéaires utilisées sont les suivantes:

- la méthode de Newton-Raphson.
- la méthode de la plus grande pente (méthode du gradient).

Il est à noter que le courant et la tension normalisés sont négatifs en direct et positifs en inverse [2][6][7].

Conditions aux limites:

Puisque la résolution est unidimensionnelle et l'équation (III-31) dépend uniquement de ψ nous devons donc connaître les valeurs de ψ aux limites.

Nous avons pour cela pris les conditions aux limites de J.R.MacDonald [14] dans le souci de pouvoir comparer nos résultats avec ceux de la littérature [1][14][16].

A l'origine, c'est à dire à l'interface pour $X=0$, $\psi(0)=V_B$ tandis que loin de la jonction, dans la zone neutre $\psi(W)=0$.

J.R.MacDonald considère une tension $V_B = 10 u_T$ et une largeur de zone dépeuplée W égale à $10\lambda_D$.

Résolution:

Connaissant la valeur de ψ aux limites c'est à dire $\psi(0)=V_B$ et $\psi(W)=0$ il suffit d'effectuer la résolution point par point en divisant la largeur de la zone dépeuplée en N espaces égaux à h ; Donc $h=W/N$.

Bien entendu, on peut augmenter la précision dans le calcul de ψ en diminuant h c'est à dire en augmentant le nombre de noeuds dans la zone de charge d'espace mais ceci conduit à une augmentation du nombre d'équations que l'on doit résoudre ; d'où une difficulté supplémentaire dans le choix du vecteur de départ, ce qui amènerai à recommencer la résolution en introduisant un autre vecteur de départ [17].

De plus, une diminution assez importante de h ne conduirait pas à une meilleure résolution (meilleure convergence), voir fig III-4 d'après [A. Wexler].

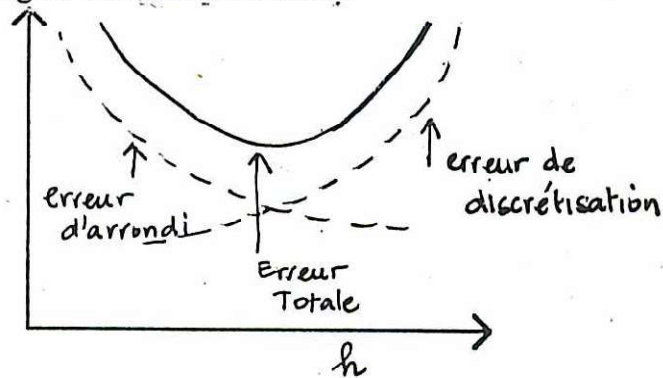
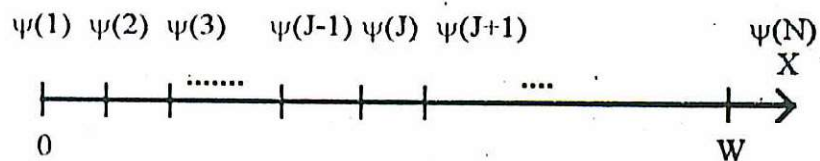


fig.III-4: Erreur totale commise.

La méthode de discrétisation consiste, comme il a été dit plus haut, à diviser l'espace des X (espace dans lequel nous effectuons le calcul) en N espaces égaux; Ainsi nous obtenons N nœuds sur cet espace unidimensionnel $[0-W]$.



$\psi(0)$ et $\psi(N)$ forment les conditions aux limites et doivent être connues; sans cela il n'est pas possible de faire la résolution à l'aide des différences finies.

Pour commencer la résolution il faut donner un vecteur de départ. Ce vecteur contiendra tous les $\psi(J)$ avec J variant de 1 à N et balayant tout l'espace $[0-W]$.

Nous noterons ce vecteur de départ par ψ^0 , avec $\psi^0 = \psi(1), \psi(2), \dots, \psi(J), \psi(J+1), \dots, \psi(N)$.

La rapidité de convergence dépendra de ce vecteur de départ ψ^0 .

La convergence est d'autant plus rapide que le choix de ce vecteur initial est proche de la solution cherchée. Donc il est nécessaire d'ajuster ce vecteur initial afin d'obtenir une bonne convergence en un minimum d'itérations.

Dans notre cas, nous utiliserons la méthode de résolution ^{explite} implicite qui consiste à faire le calcul point par point évitant par là des manipulations de matrices (cas bidimensionnel) contenant beaucoup de zéros (dans le cas présent des matrices tridiagonales).

À l'itération 1, nous calculons le vecteur ψ^1 et ainsi de suite jusqu'à l'itération m nous obtenons le vecteur $\psi^m = \psi^m(1), \psi^m(2), \dots, \psi^m(N)$.

Si la méthode de résolution converge $\psi^m \rightarrow \psi^*$ qui est solution du système.

Le travail de simulation a consisté à mettre au point un programme de résolution unidimensionnelle utilisant les méthodes de Newton et du gradient:

Vtr.m : Programme principal.

Ce programme fait appel à deux sous programmes de résolution:

Vtrsol.m: méthode de Newton.

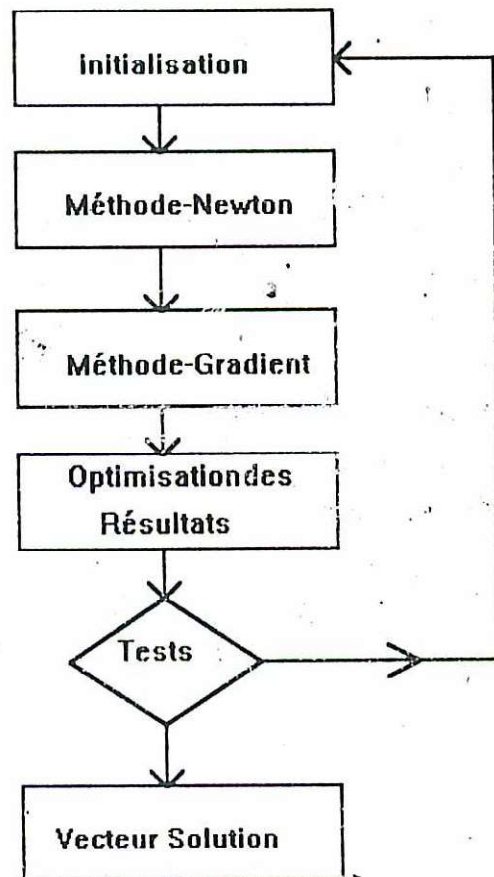
Ugrnou.m: méthode du gradient.

Vtrsol à son tour fait appel à 2 sous-programmes (vtrddx et vtrali).

Ugrnou " " " à 4 " " (ugrcd1,ugrcd2,ugrgrad et ugrad).

Ces sous-programmes ont été fractionnés afin de pouvoir les utiliser dans d'autres programmes sans aucune intervention .ainsi par exemple, il suffit d'écrire un programme principal simple en faisant appel aux programmes ci-dessus, nous pouvons résoudre les équations algébriques non linéaires.

Nous donnons ci-dessous l'organigramme de la résolution unidimensionnelle que nous avons réalisée.



III-4: Résultats et Commentaires:

Il est à noter que cette tension $V_B = 10 u_T$ donnée par J.R.MacDonald correspondrait à un contact Ti-Si ($\Phi_b=0.5$ volt) de $2\Omega.cm$ avec $N_d = 2.10^{15} cm^{-3}$ à $300^\circ K$ [2].

Pour ce contact, la constante de normalisation $K_N = 1.47.10^3$ sachant que $\beta = J_N \cdot K_N$.

Nous rappelons à titre indicatif les valeurs de K_N pour deux types de contacts Au-Si et Au-Si dans le tableau suivant fourni par [2].

N_D	10^{18}	10^{17}	10^{16}	$4.56.10^{15}$	$1.4.10^{14}$
V_B Al-Si	24.4	22	19.75	19.9	15.5
V_B Au-Si	27.5	25	22.8	22	18.6
K_N	$2.68.10^6$	$2.3.10^5$	$1.58.10^4$	$4.23.10^3$	26.5

Nous avons présenté fig III-15 , un réseau de caractéristiques représentant les potentiels $\psi(X)$ pour différentes tensions de polarisation (positives, négatives et nulle) . De la courbe 1 à 3 polarisations directes (courants négatifs) ; la courbe 4 sans polarisation et les courbes 5,6 et 7 en polarisations inverses.

Nos résultats sont en accord avec ceux de Ross MacDonald et de L.Vidal.

Pour des polarisations directes ψ varie très rapidement sur de faibles longueurs, par contre en polarisation inverse les courbes $\psi(X)$ présentent rapidement un pallier et les profils de $V(X)$ et $\phi(X)$ sont identiques : C'est le courant de conduction qui domine.

Le réseau de la figure III-15 représente le résultat de la résolution de l'équation de transport sur une distance égale à $10 \cdot \lambda_D$ et une tension de diffusion égale à $10u_T$.

En figures (III-5, III-6 et III-7) , nous traçons $\psi(X)$, $V(X)$, $\phi(X)$ ainsi que la densité des porteurs mobiles et le champ électrique E supporté par la jonction.

Les figures (III-8 , III-9 et III-10) représentent les distributions de $\psi(X)$, $V(X)$ et $\phi(X)$ en ce qui concerne les potentiels . Nous retrouvons bien le cas où aucune tension n'est appliquée , $\phi(X) = 0$: Le niveau et le Pseudoniveau de Fermi se confondent.

La densité de charges mobiles nous renseigne sur le dépeuplement de la zone de charge d'espace. Cette zone est plus importante que dans le cas d'une polarisation directe.

La distribution du champ électrique E est plus importante et est cinq fois plus grande à l'interface que lors d'une polarisation directe ($J = -10^{-1}$) .

En figure III-9 , à titre de comparaison, nous représentons $\psi(X) = V(X)$ tirée de la résolution unidimensionnelle par Runge-Kutta donnée par [1].

De la figure III-12 à III-14 nous représentons un réseau de caractéristiques en polarisation inverse. Les variations de $\psi(X)$ et $V(X)$, résultats de la résolution, varient beaucoup moins vite que

lors de la polarisation directe : Ceci est dû principalement à l'augmentation de la zone dépeuplée dans le semiconducteur.

Le champ électrique E_y est représenté et est comparé avec celui obtenu par l'approximation de Schockley. Les valeurs du champ E à l'interface sont légèrement plus faibles que celles obtenues par [1]. Ceci est dû en partie aux tensions inverses importantes.

En polarisation inverse, la vitesse des porteurs diminue lentement jusqu'à une distance de $5\lambda_D$, puis chute à zéro aux environs de $7\lambda_D$. Etant entendu que la vitesse des porteurs est le rapport de la vitesse normalisée sur la vitesse de saturation.

Nos résultats sont en accord avec ceux de RossMacDonald et de L.Vidal.

Enfin, la figure III-16 représente la densité de charges réduite pour une polarisation directe ($V_a = -6.5$), nulle ($V_a = 0$) et inverse ($V_a = +6$).

Il est important de signaler que ce qui est intéressant c'est d'abord le calcul de ψ , résultat de la résolution ; toutes les autres grandeurs en sont déduites. Une erreur commise sur ψ se transmet intégralement à l'ensemble des autres grandeurs en plus des erreurs inhérentes au calcul par la méthode des différences finies, particulièrement au niveau des raccordements aux frontières.

FIG III.5: $\psi(x)$ en polarisation directe

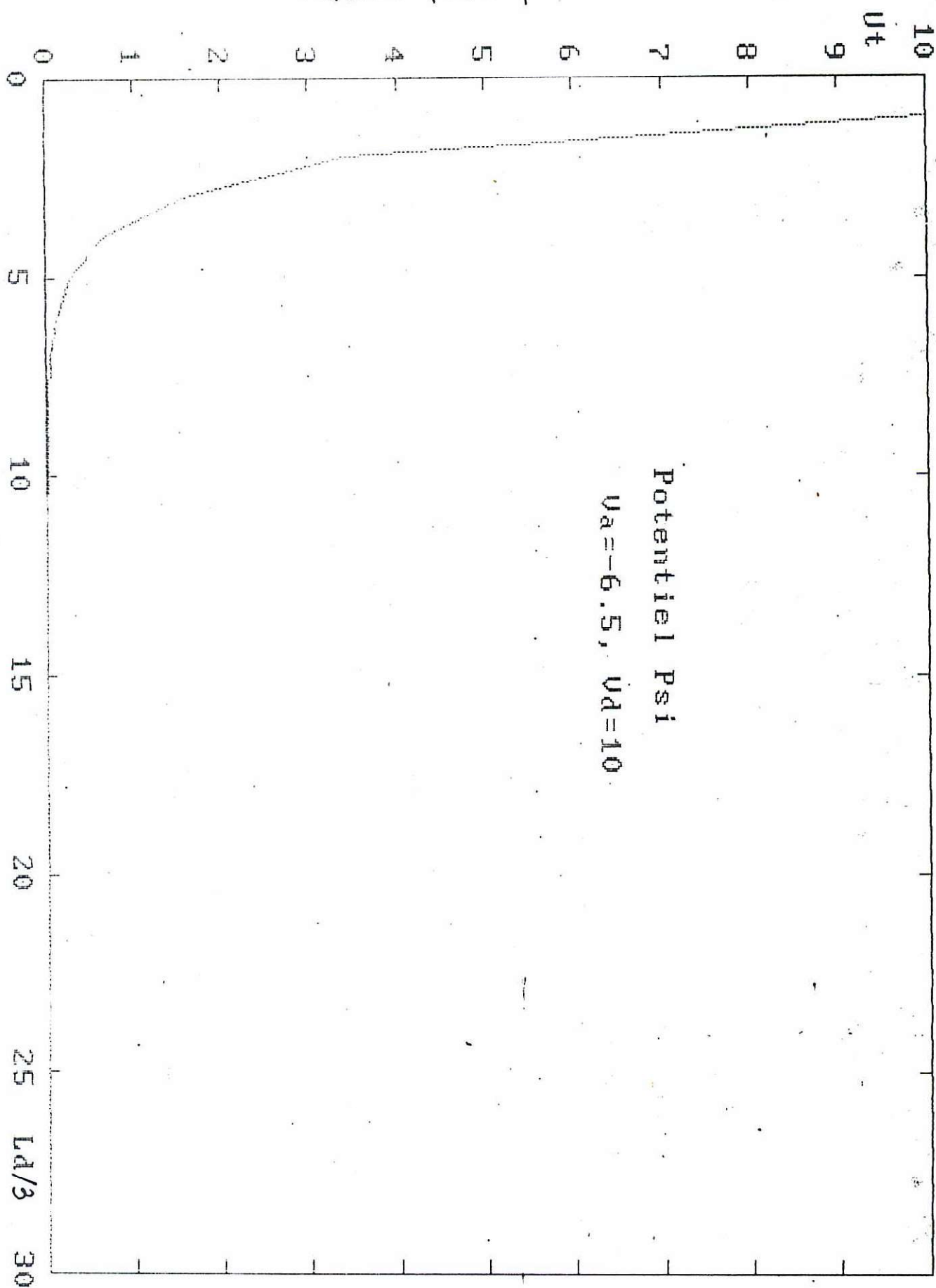


Fig III.6: $\sqrt{\epsilon(z)}$ en fonction de z

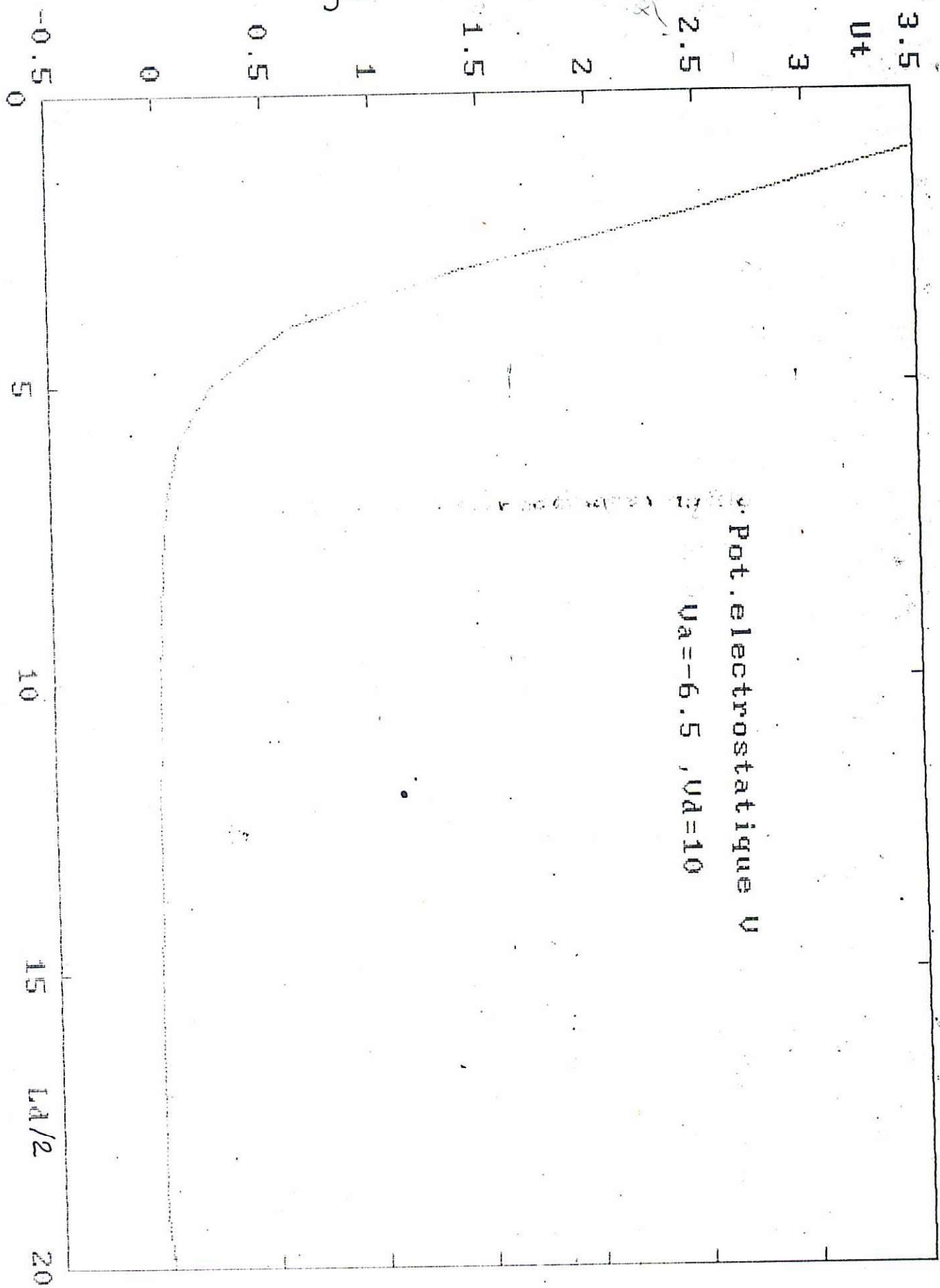
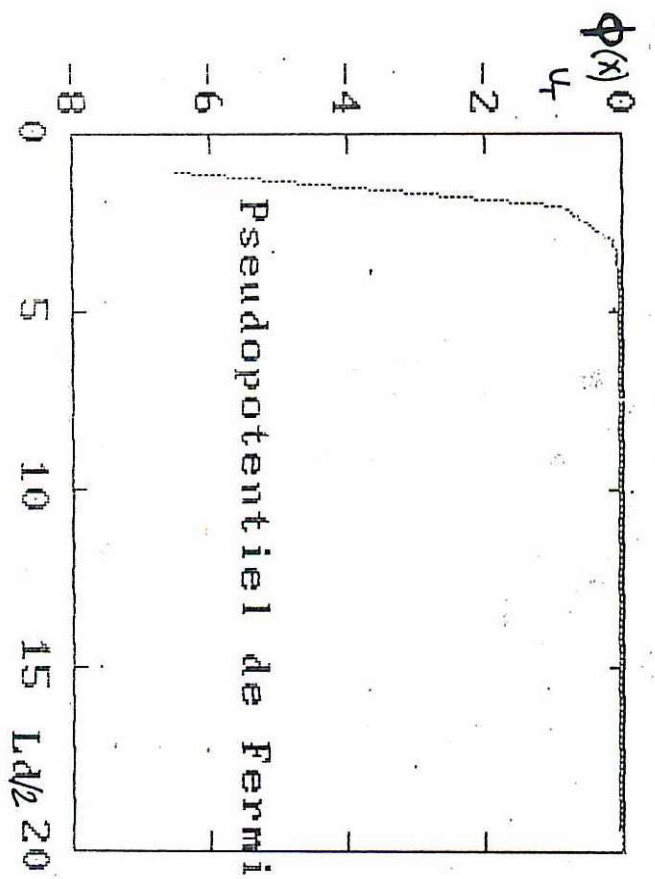
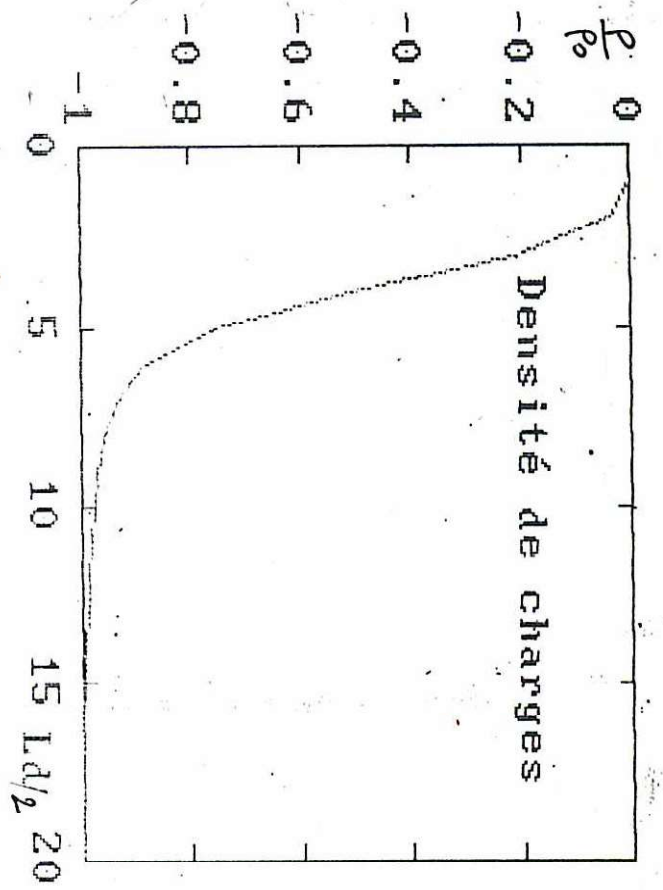


Fig III.7 : Réseau de caractéristiques en polarisation directe



$$U_a = -6.5, U_d = 10$$

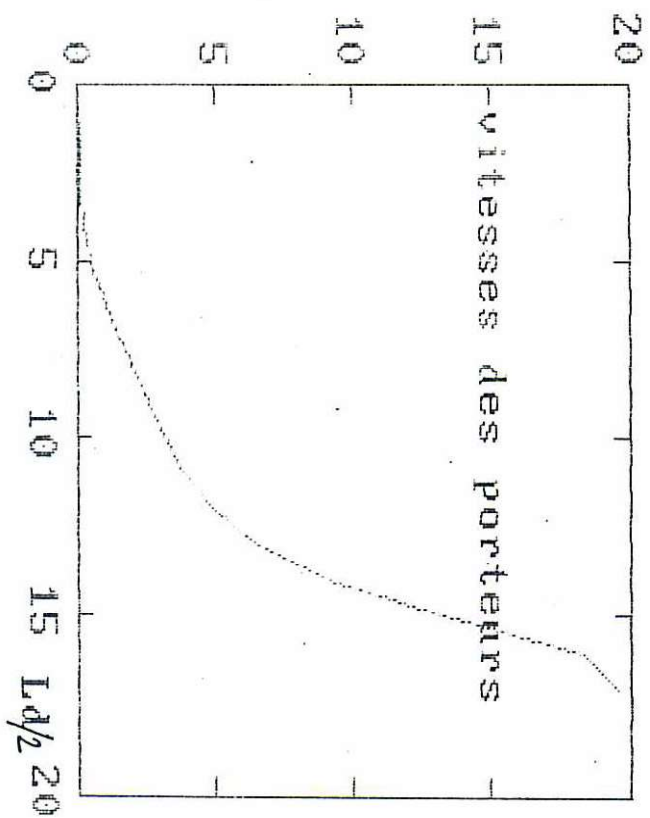
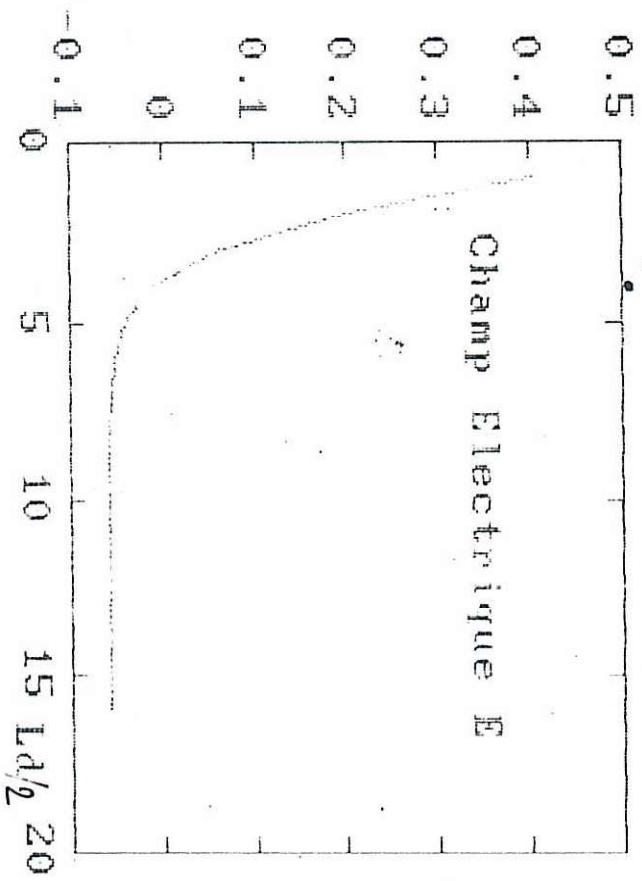


Fig III.8 : $V(x) = \psi(x)$ sans polarisation

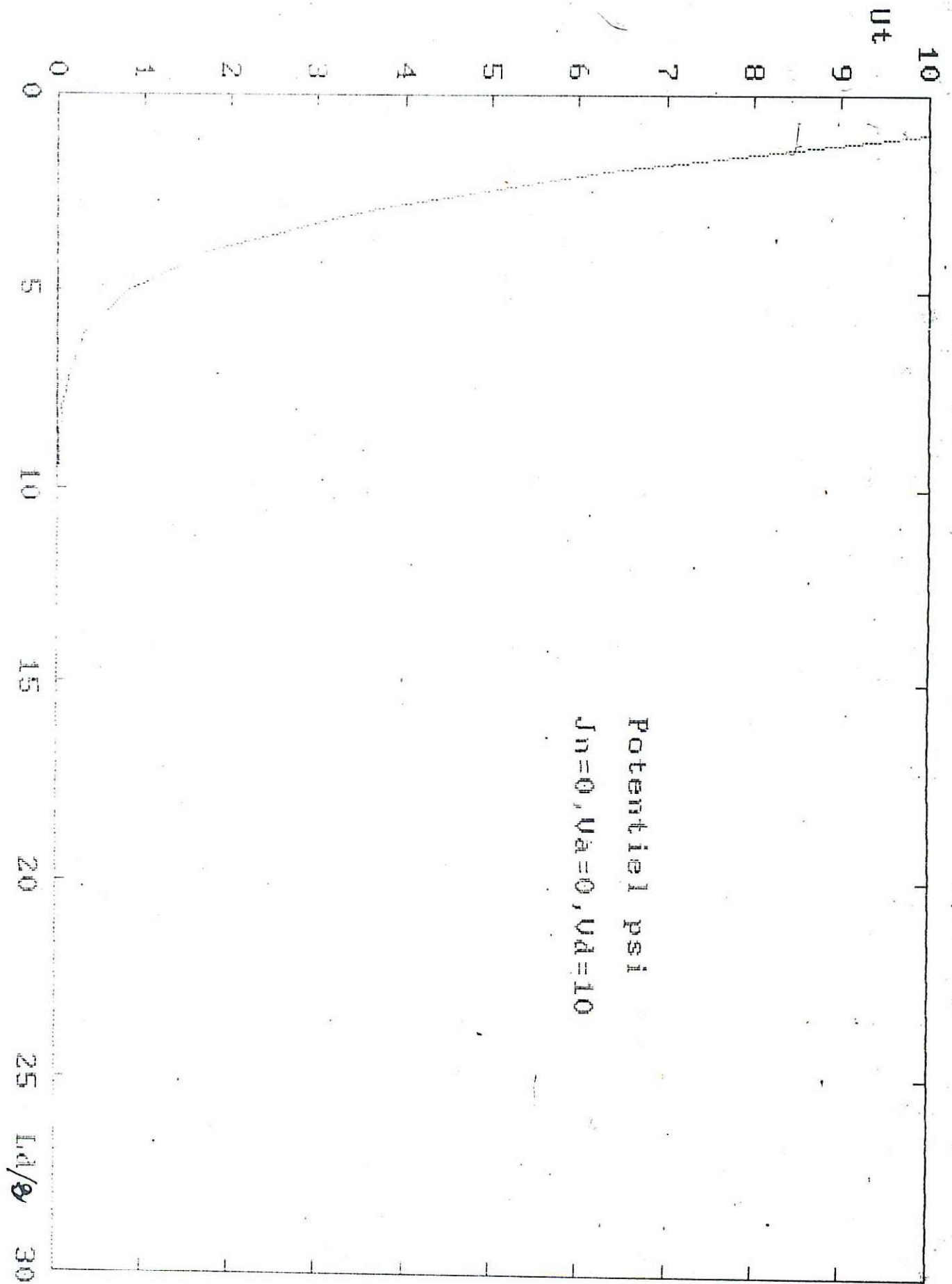


Fig III.9 : $V(x)$ sans polarisation

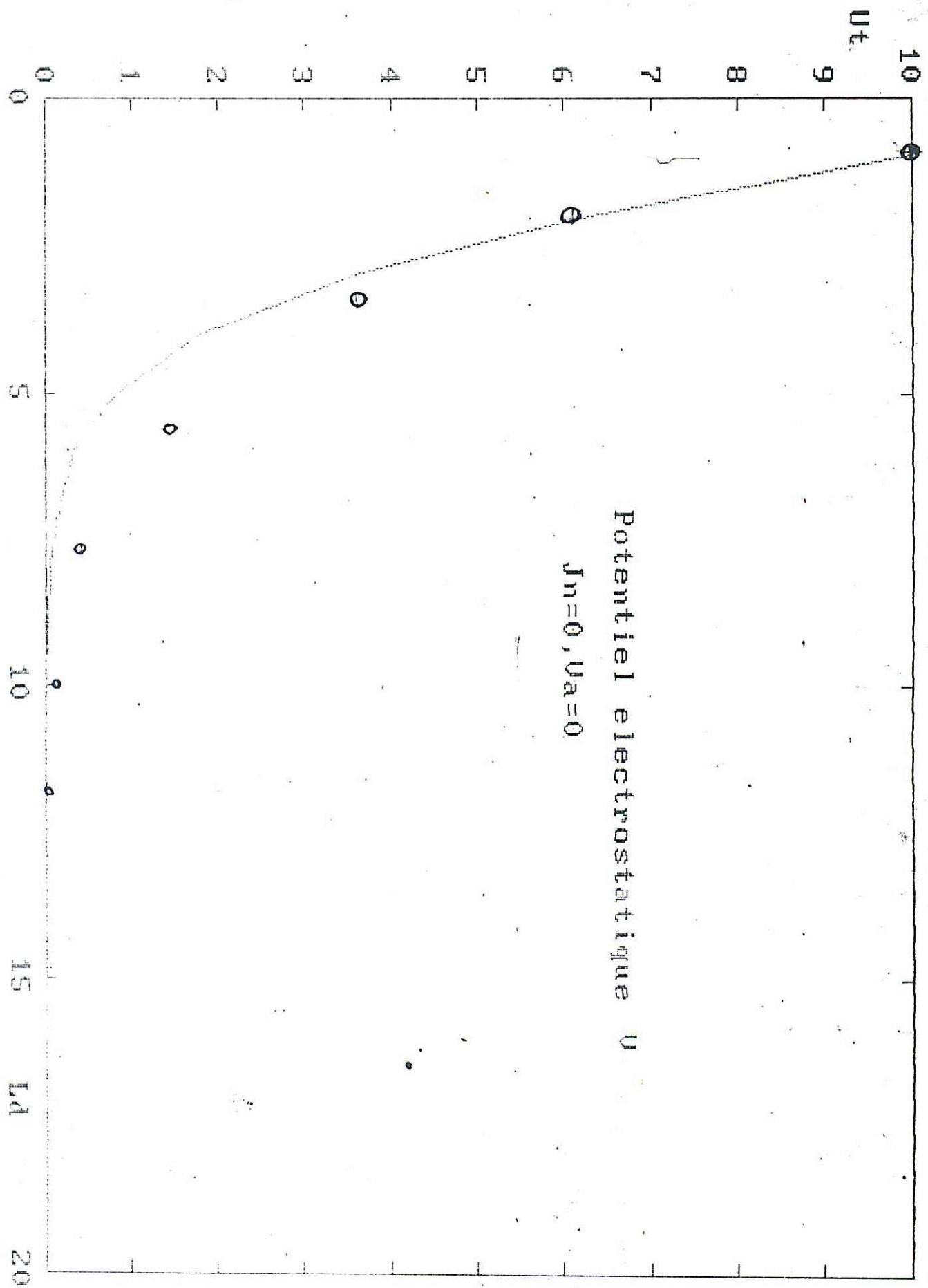


fig III.10 : Réseau de Caractéristiques sans polarisation

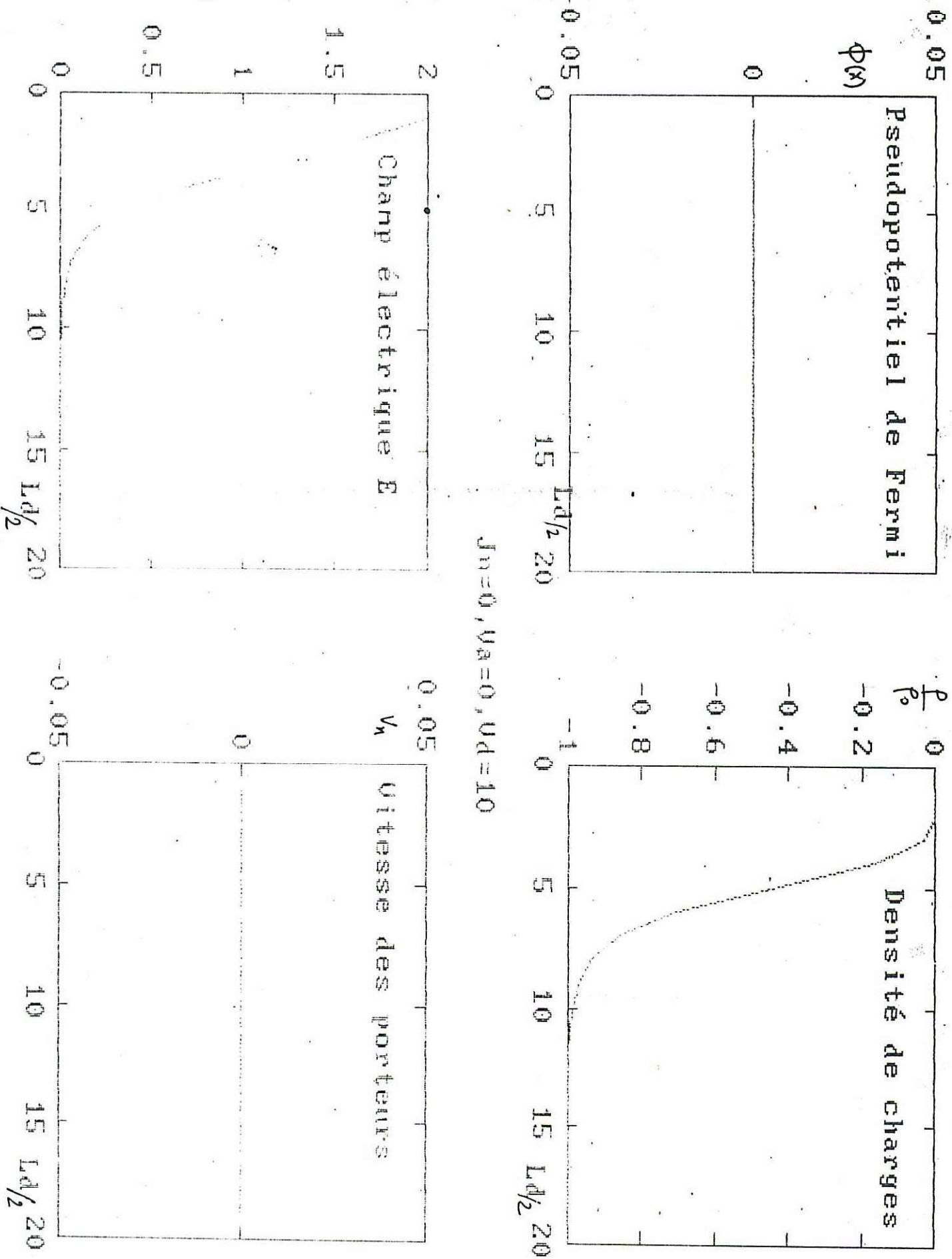


Fig III.11 : $\phi(x)$ en Polarisation Inverse

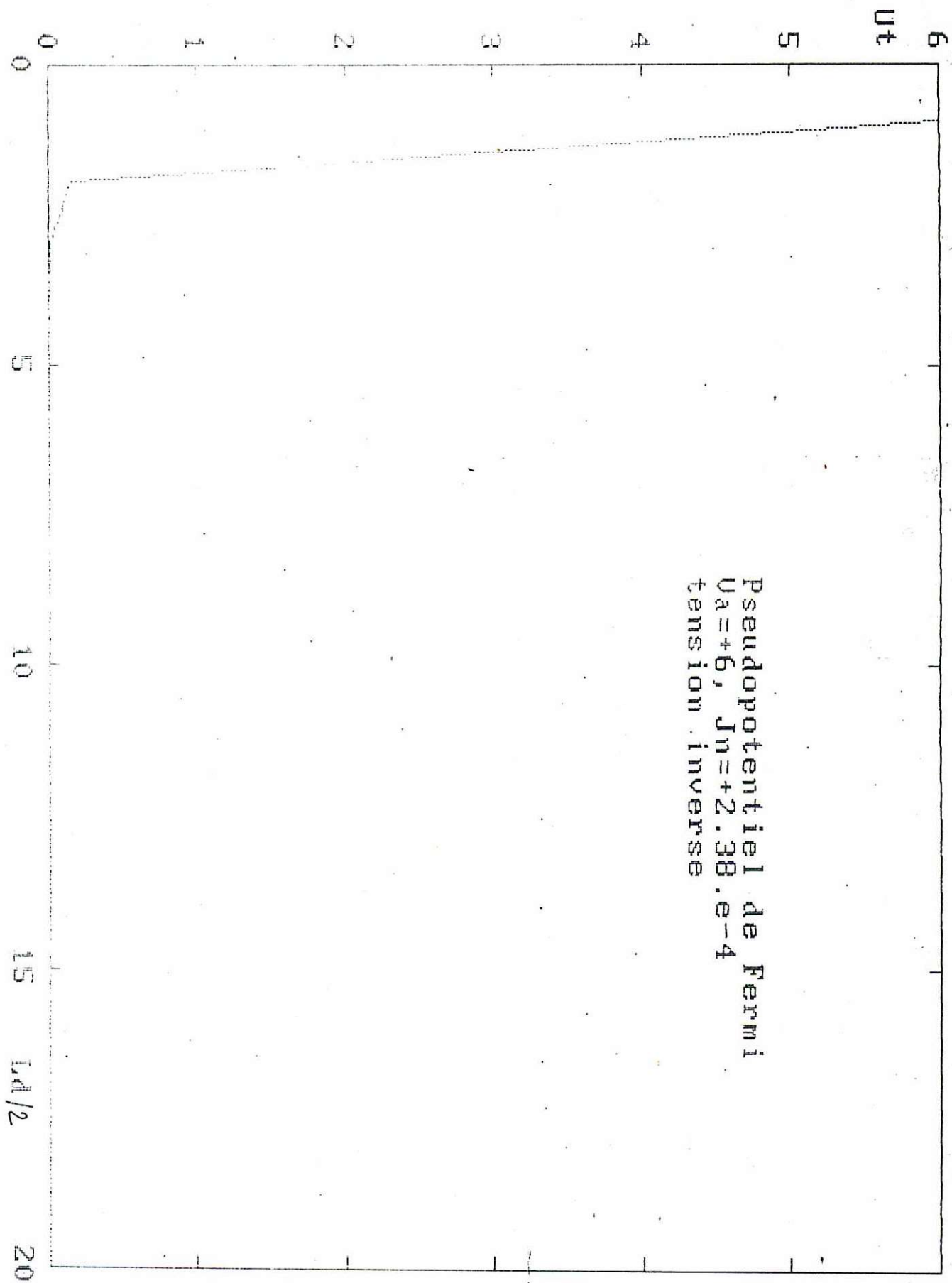


fig.III.12 : $\psi(x)$ en Polarisation Inverse

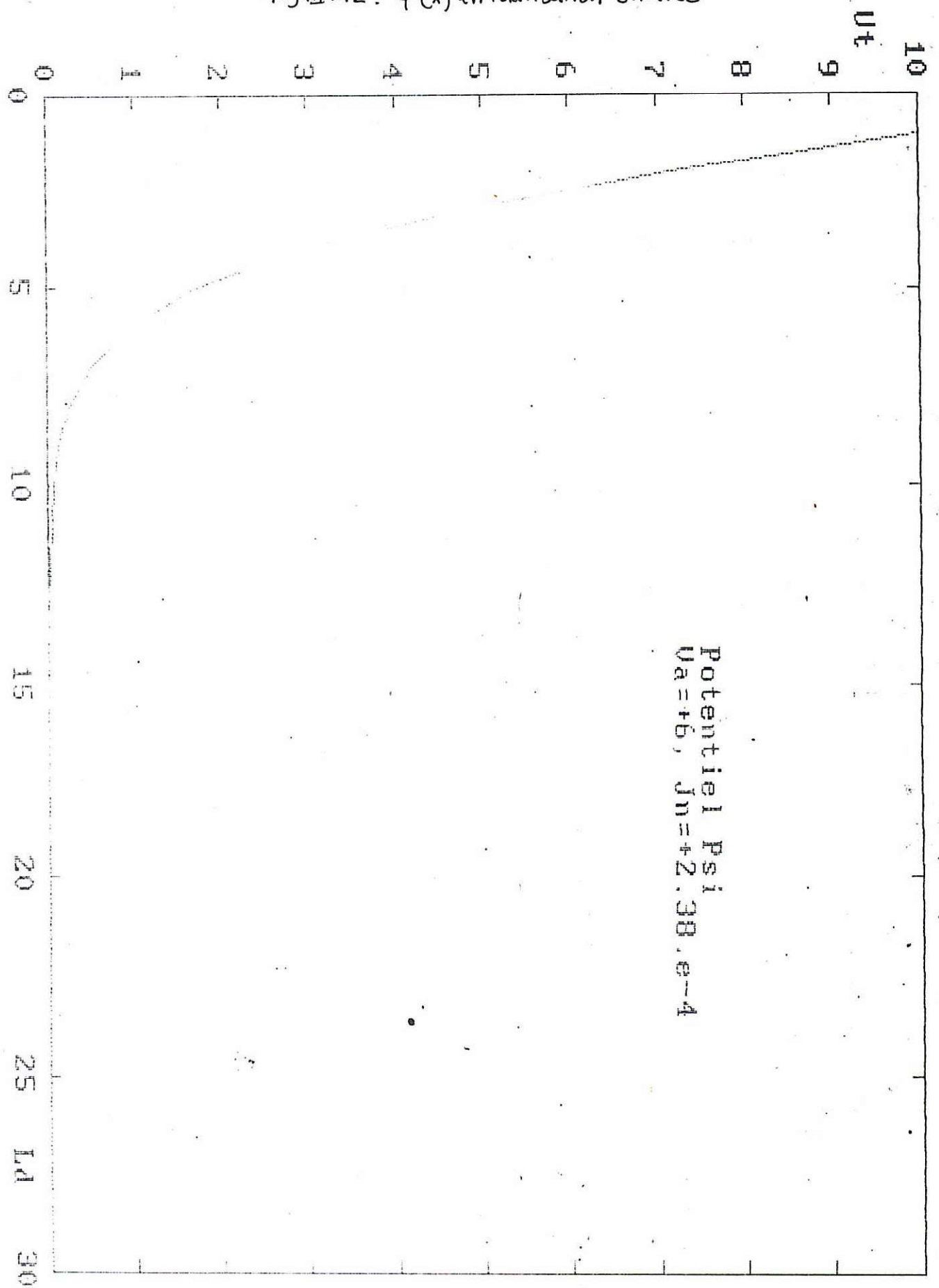


fig III.13 : $V(x)$ en Inverse

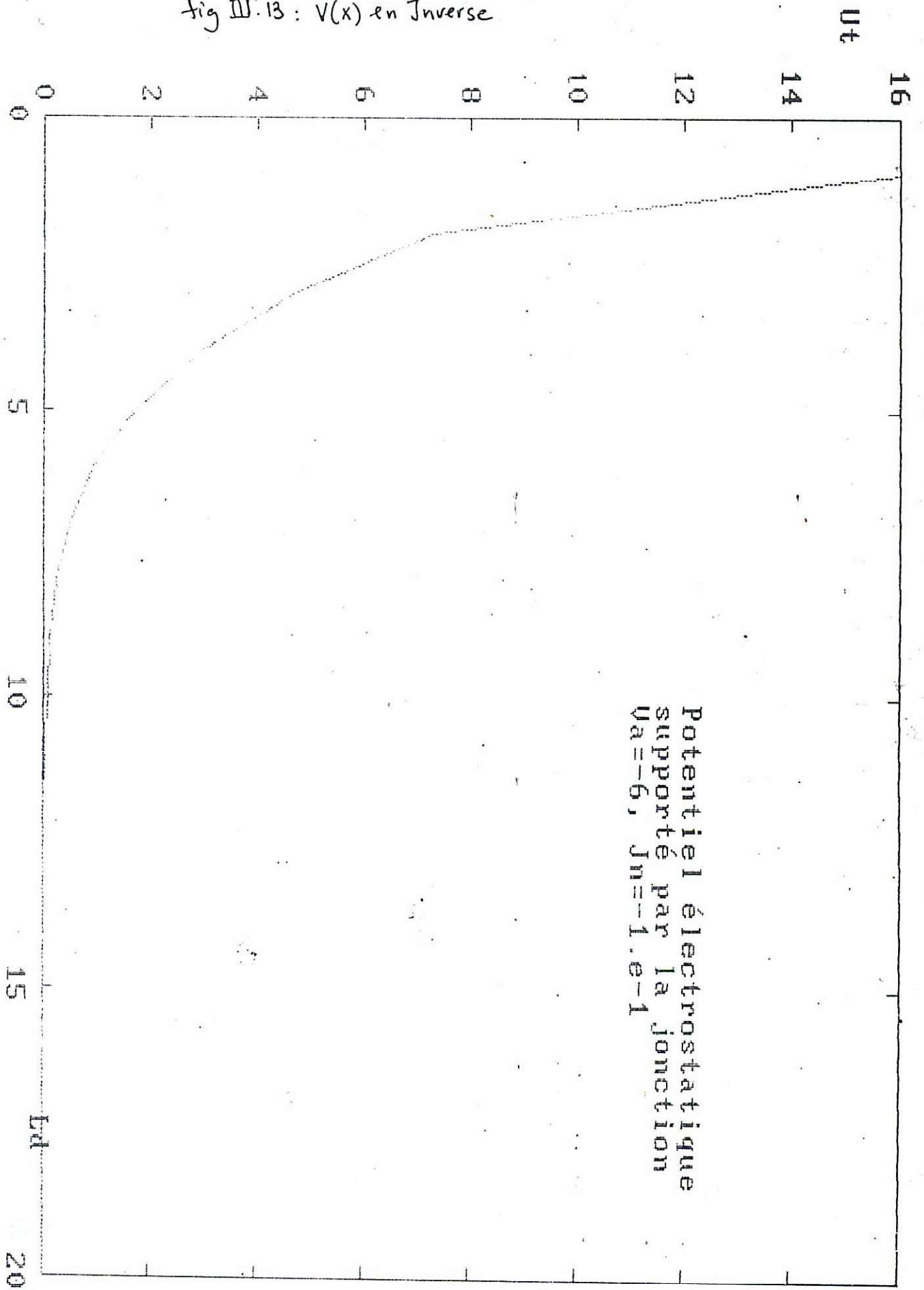
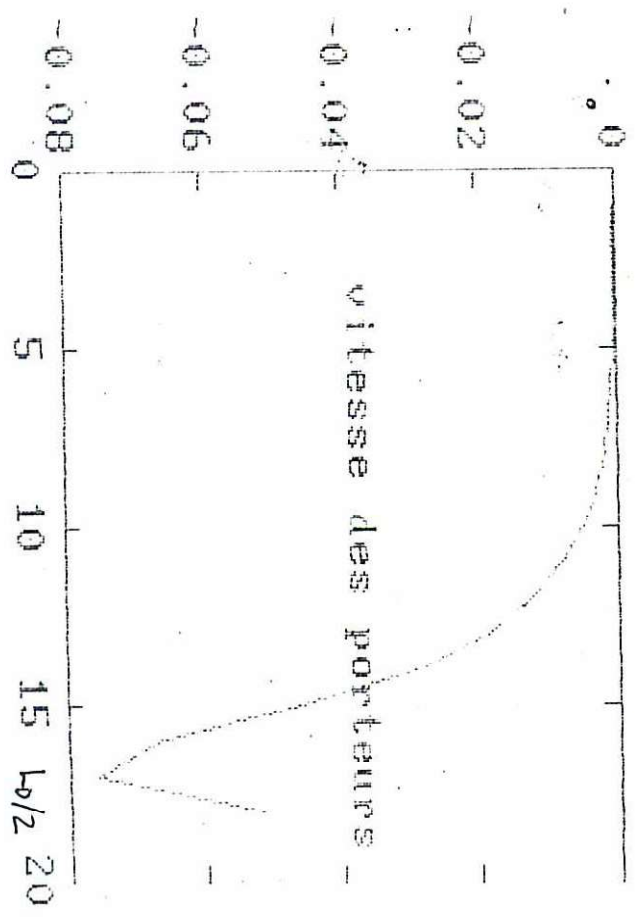
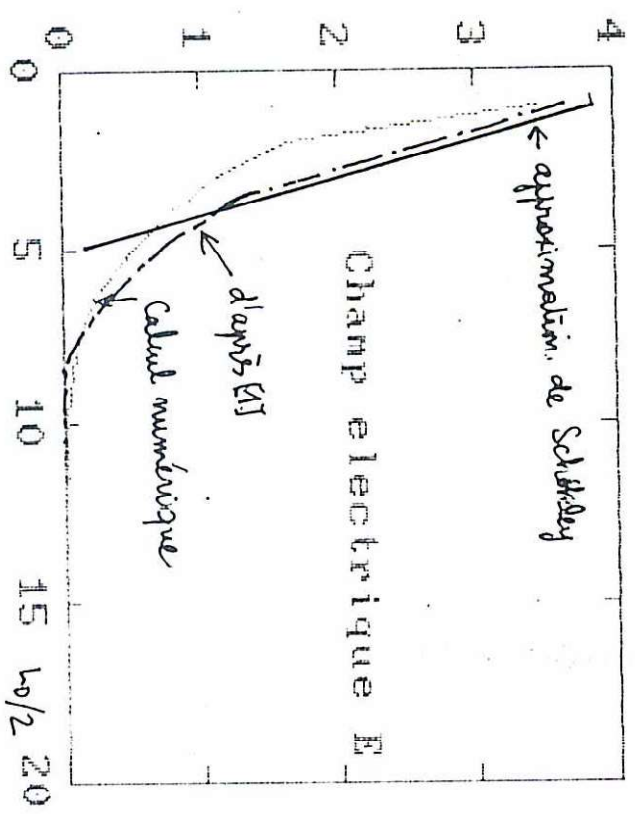
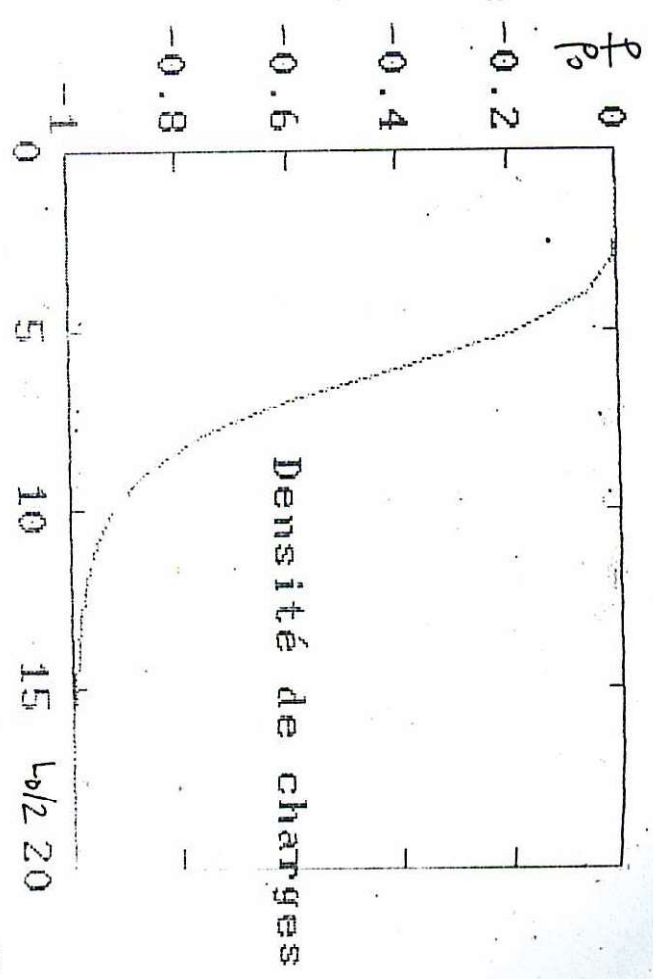
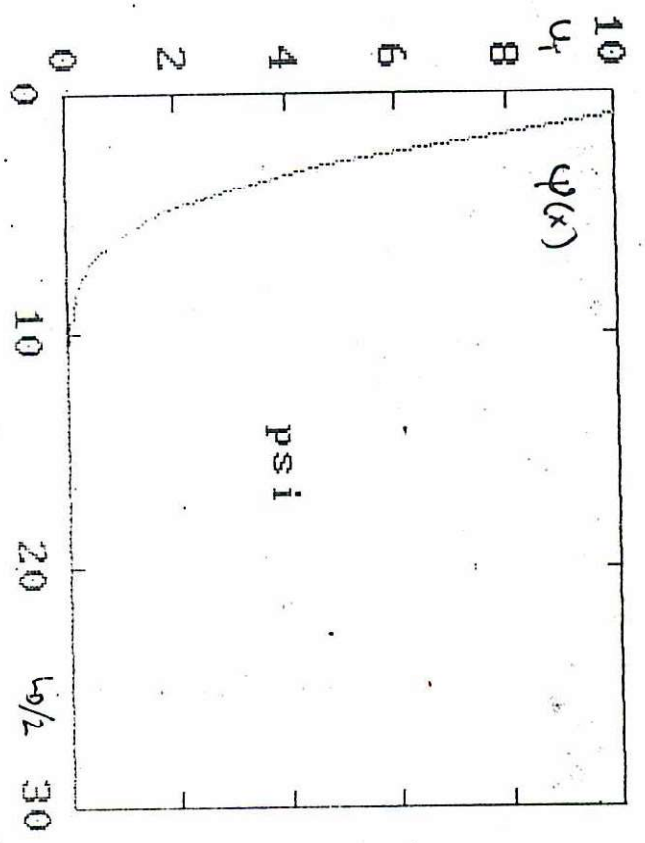


fig III. 14: Réseau de Caractéristiques en Inverse



Tension Inverse

fig III. 15: $\psi(x)$ pour différentes tensions
directes et Inverses

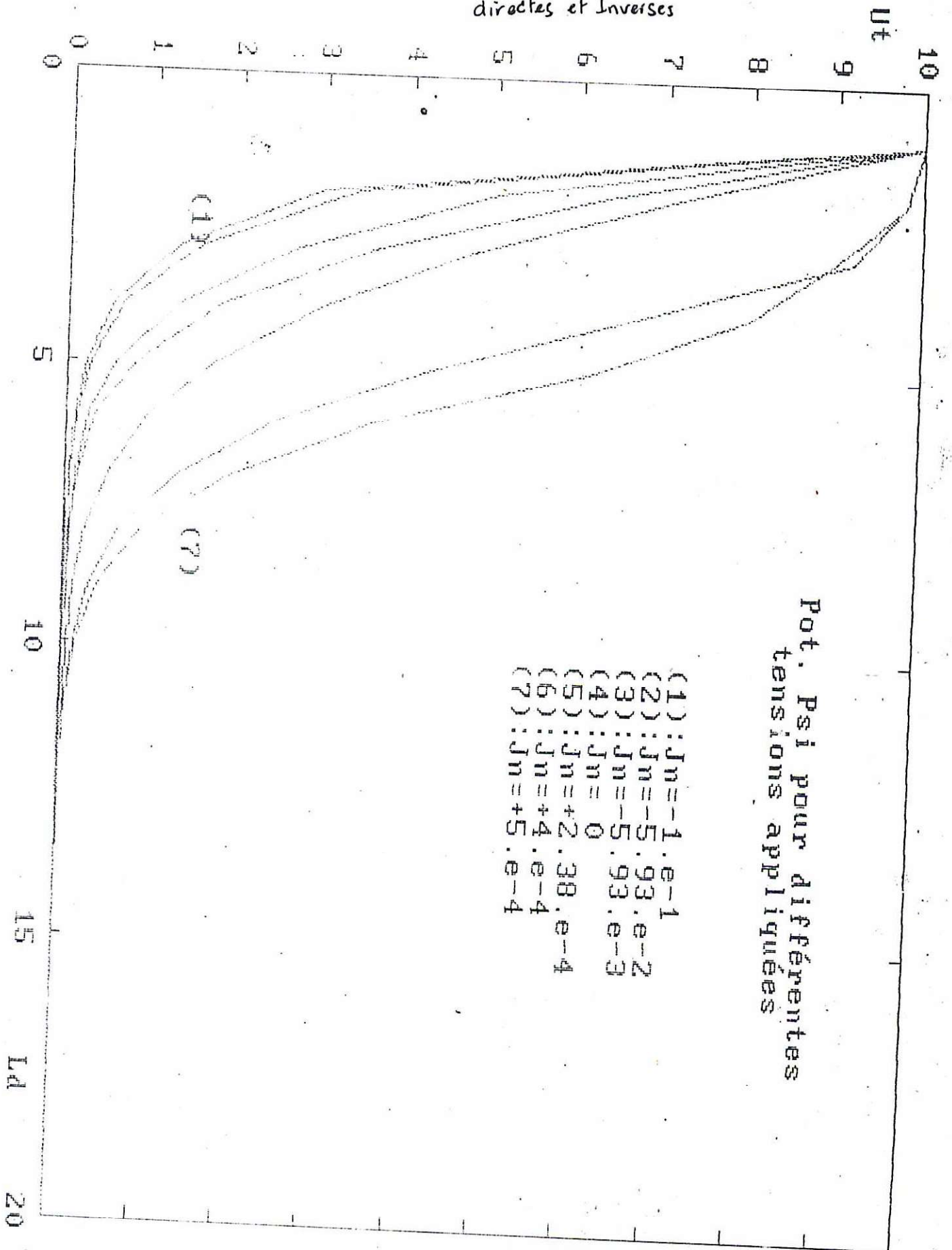
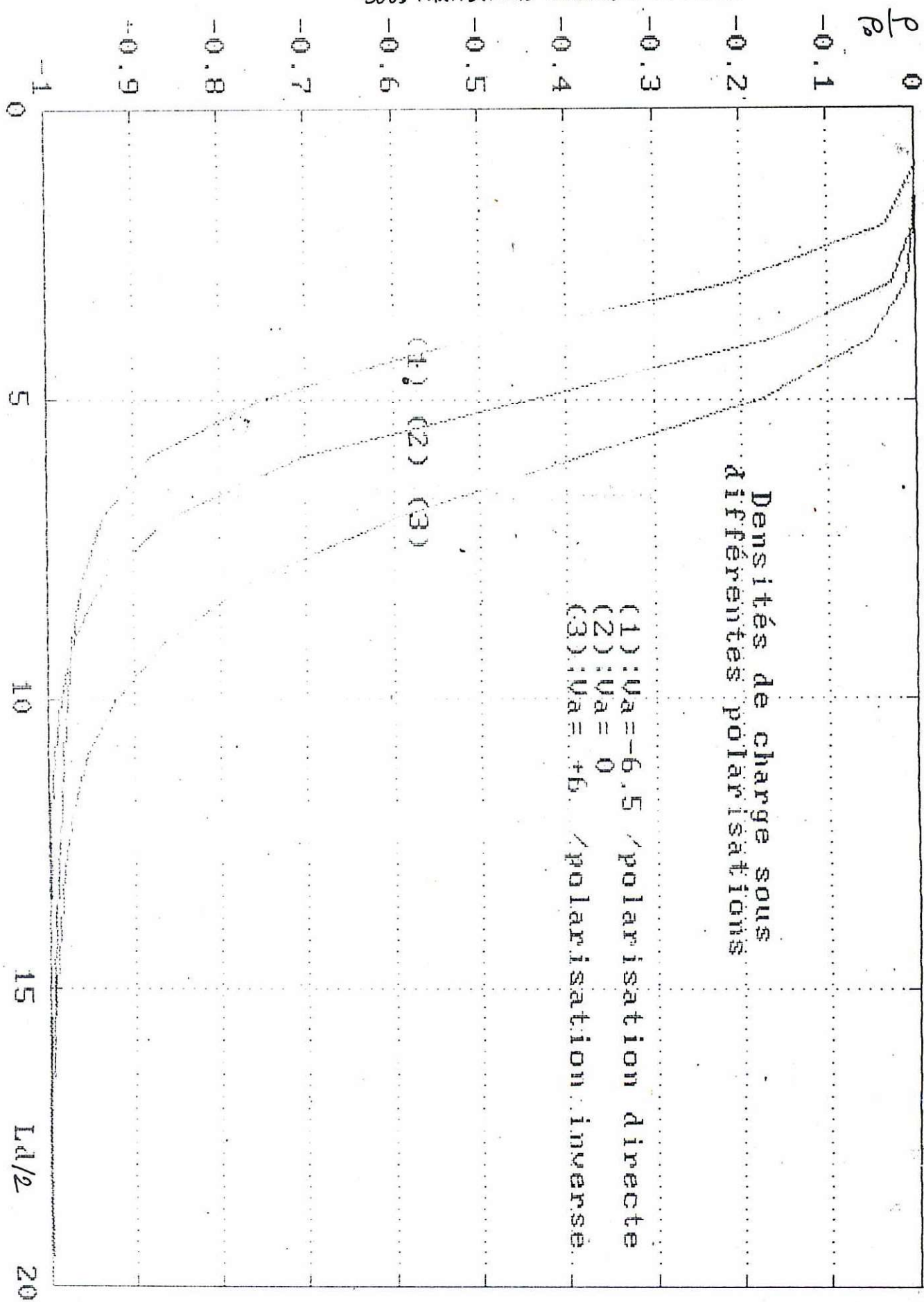


fig III. 16 : Densités de charges mobiles
sous Polarisation directe et inverse



CHAPITRE IV

RESOLUTION BIDIMENSIONNELLE DE L'EQUATION DE TRANSPORT

IV.1: Introduction:

La modélisation du transport de courant dans un contact Métal/semiconducteur a été décrit par Mott (1938) et Schottky et Spenke en 1939. Ensuite Bethe proposa en 1942, la théorie de l'émission thermoionique ou (thermoémission). La théorie de la diffusion est venue s'ajouter aux modèles déjà existants jusqu'à l'adoption d'un nouveau modèle, qui est celui du modèle Mixte de Thermoémission-Diffusion.

Ce modèle déjà expliquée plus haut décrit le transport de courant dans la zone de charge d'espace.

Cet espace est subdivisé en deux zones $[0-x_m]$ et $[x_m-w]$. Dans la première zone, on tient compte de la vitesse de recombinaison tandis que dans la deuxième zone $[x_m-w]$ les vitesses de recombinaison sont négligées car la variation du potentiel est faible devant le libre parcours moyen des électrons.

Quant à nous, nous avons adopté un modèle à partir de l'équation de Boltzman.

Dans le cas d'un semiconducteur non dégénéré Okoumou -moko montre que la distribution des porteurs dans le contact Métal/semiconducteur est Gaussienne, à cet effet les particules obéissent à l'équation de Boltzman d'ordre 1, qui n'est autre que l'équation de transport si les forces d'origine magnétiques ainsi que tout gradient de température sont négligées.

A partir de l'équation de transport combinée aux équations de Maxwell et à l'équation de Poisson dans la zone de charge d'espace et en tenant compte des conditions aux limites nous obtenons un autre modèle basé sur l'équation de transport.

Dans un contact métal/semiconducteur, la résolution de l'équation de transport passe nécessairement par la résolution d'équations différentielles du deuxième ordre non linéaires dans la zone dépeuplée.

En général, les équations différentielles peuvent être résolues de plusieurs manières et chaque méthode a ses avantages et ses inconvénients suivant le type d'équations.

Pour notre part, nous avons opté pour une écriture des équations aux différences finies qui nous permet de transformer les dérivées partielles en opérations algébriques linéaires, ensuite nous résolvons les équations algébriques non linéaires ainsi obtenues par les méthodes de résolution non linéaires par optimisation.

IV.2: Mise en équation bidimensionnelle:

Reprenons l'équation (III.8) du chapitre III, nous avons:

$$J = q \cdot p \cdot v$$

Or d'après (III.7) pour la densité de charges mobiles dans la zone dépeuplée nous avons:

$$\rho = \rho_0 \cdot \exp\left[-\frac{q(V - \phi)}{kT}\right]$$

Et comme $v = \mu \cdot \text{grad}(\phi)$ d'après (III.6), l'expression de la densité de courant s'écrit :

$$J = -\mu \cdot \rho_0 \cdot \exp\left[-\frac{q(V - \phi)}{kT}\right] \cdot \text{grad}(\phi) \quad (\text{IV.1})$$

La conservation du courant impose que :

$$\text{div}(J) = 0 \quad (\text{IV.2})$$

Remplaçons J par sa valeur dans (IV.2), nous obtenons:

$$\text{div}\left[-\mu\rho_0 \exp\left[-\frac{V - \phi}{kT}\right] \cdot \text{grad}(\phi)\right] = 0 \quad (\text{IV.3})$$

Sachant que :

$$\text{div}(m \cdot A) = A \cdot \text{grad}(m) + m \cdot \text{div}(A)$$

où m est un scalaire et A un vecteur.

en posant $\sigma_0 = \mu\rho_0$

$$m = -\mu\rho_0 \exp\left[-\frac{V - \phi}{kT}\right] \quad \text{et} \quad A = \text{grad}(\phi)$$

l'équation (IV.3) s'écrit alors:

$$\text{div}(J) = \sigma_0 \cdot \exp\left[-\frac{V - \phi}{kT}\right] \cdot [\Delta\phi - \text{grad}(\phi) \cdot \text{grad}(V - \phi)] = 0$$

En passant aux grandeurs normalisées $\phi = \frac{\phi}{u_T}$, on obtient:

$$\Delta\phi - \text{grad}(\phi) \cdot \text{grad}(V - \phi) = 0 \quad (\text{IV.4})$$

Or l'équation de Poisson normalisée nous donne:

$$\Delta V = 1 - \exp(-\psi) \quad (\text{IV.5})$$

En retranchant (IV.5) de (IV.4) nous obtenons:

$$\Delta V - \Delta\psi = 1 - \exp(-\psi) - \text{grad}(\phi) \cdot \text{grad}(V - \phi) \quad (\text{IV.6})$$

Ou en tenant compte du fait que $V - \phi = \psi$ on aura :

$$\Delta\psi = 1 - \exp(-\psi) - \text{grad}(\psi) \cdot \text{grad}(\psi)$$

Que nous pouvons mettre sous la forme $F(V, \psi) = 0$

$$\Delta\psi + \text{grad}(V - \psi) \cdot \text{grad}(\psi) - \exp(-\psi) - 1 = 0 \quad (\text{IV.7})$$

Nous obtenons donc une équation différentielle de second ordre en V et ψ .

La résolution de l'équation (IV.7) jumelée à l'équation de Poisson (IV.5) permet de déterminer V et ψ dans toute la zone dépeuplée.

Dans le cas bidimensionnelle, les potentiels V et ψ dépendent uniquement des coordonnées X et Y [6][7][8].

La connaissance de V et ψ permet de déterminer le Pseudopotentiel de Fermi ϕ dans toute la zone de charge d'espace.

Remarque:

Nous devons être en mesure de retrouver l'équation unidimensionnelle (III.16) donnée au chapitre III à partir de l'équation bidimensionnelle (IV.7).

En effet, à une dimension suivant l'axe des X , toutes grandeurs normalisées l'équation (IV.7) s'écrit:

$$\frac{d^2\psi}{dX^2} = 1 - \exp(-\psi) - \frac{d\psi}{dX} \cdot \frac{d\phi}{dX}$$

En tenant compte de (III.12) et en posant $J_N = \frac{J}{\sigma_0 u_T}$ l'équation ci-dessus devient:

$$\frac{d^2\psi}{dX^2} = 1 - \exp(-\psi) + J_N \cdot \exp(\psi) \cdot \frac{d\psi}{dX}$$

On retrouve bien l'expression unidimensionnelle de l'équation de transport donnée au chapitre III.

J_N : densité de courant normalisée définie au chapitre III.

IV.3: Résolution bidimensionnelle :

IV.3.1: Structure à étudier:

Nous avons à étudier une structure ayant d'un côté un contact Schottky et de l'autre un contact Ohmique.

Ce schéma idéal ne se rencontre pas en pratique car il faudrait en plus tenir compte d'une couche interfaciale entre le métal et le semiconducteur que certains auteurs ont mis en évidence.

On peut aussi signaler la présence possible d'une couche d'oxyde mais celle-ci peut être éliminée par attaque chimique juste avant la réalisation du contact.

Il faut aussi prendre en compte les états de surface qui sont étroitement liés à la hauteur de barrière Φ_b .

De plus, nous négligeons la chute Ohmique dans la zone neutre et supposons que la tension appliquée V_a se répartit intégralement dans la zone dépeuplée.

Nous considérons donc la structure planaire suivante (fig. IV.1).

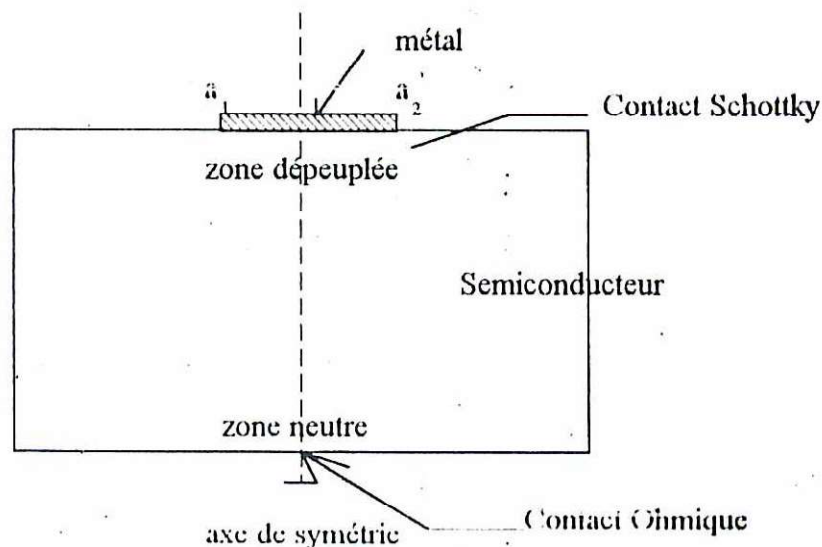


fig. IV.1: Structure à étudier

En appliquant une tension, V_a sur le métal, il se crée sous celui-ci une zone dépeuplée de porteurs dont la largeur est modulée par la tension appliquée V_a . Si cette tension est directe (se référer au chapitre I), la zone dépeuplée tend à diminuer par contre si V_a est en inverse, elle s'élargit ce qui a pour effet de réduire considérablement la conduction dans le contact Schottky.

Nous avons choisi de prendre les contours de zones dépeuplées données par Brito calculés par la méthode des fonctions de Green pour différentes tensions appliquées V_a (fig IV-2). Le choix du contour qui formera les conditions aux limites du domaine de résolution de l'équation de transport est nécessaire car la méthode des différences finies l'exige.

Les résultats obtenus sont tributaires du choix des limites de la zone dépeuplée.

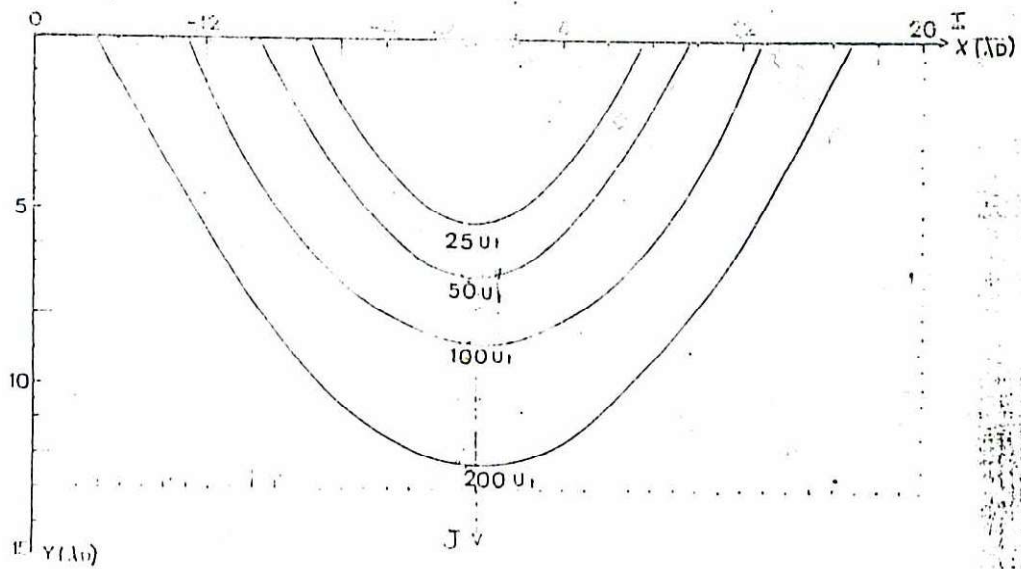


fig IV-2: Contours de zones dépeuplées pour différentes tensions appliquées F.Brito.

IV.3.2: Conditions aux limites :

Le contour choisi est rectangulaire et la zone dépeuplée est prise dans une première approximation égale à celle donnée par Brito. Mais la méthode elle même devrait permettre de trouver la limite de cette zone puisque sur cette limite les potentiels V et ψ sont nuls.

D'autres part pour simplifier le problème tout en restant performant, nous effectuons un quadrillage de pas constant et égal à h suivant les deux directions de parcours X et Y (voir figure IV.2)

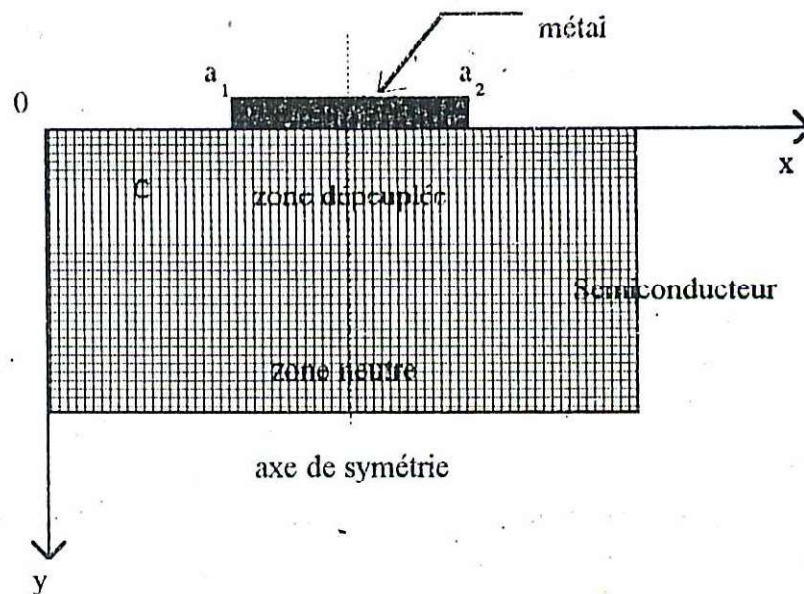


fig.IV.3: Maillage de la zone dépeuplée

Nous simplifions également le calcul en utilisant l'axe de symétrie placé perpendiculairement au métal et partageant la zone dépeuplée en deux régions identiques.

-L'origine des axes X et Y est prise à la limite supérieure gauche de la zone dépeuplée. Sur le contour C , $V=\psi=0$ c'est la limite de la zone dépeuplée.

-Juste sous le métal pour $Y=0$ et $a_1 \leq X \leq a_2$ le potentiel V est pris égal à $V = V_b + V_a$ et le potentiel $\psi = V_b$; où V_b est le potentiel de diffusion de la jonction. Ce sont les conditions aux limites de Neumann [15].

-Sur le contour formé par $Y=0$ et $X < a_1$ et $X > a_2$,

$$\frac{\partial V}{\partial Y} = 0 \quad \text{et} \quad \frac{\partial \psi}{\partial Y} = 0.$$

Ce sont les conditions aux limites de Dirichlet.

-La largeur du métal ($a_2 - a_1$), les tensions appliquées V_a ainsi que le contour C de la zone dépeuplée sont pris égaux à ceux calculés par Brito.

IV.3.3: Mise en équation par les différences finies:

Les équations (IV-5) et (IV-7) qui décrivent les potentiels V et ψ peuvent se mettre sous forme d'un système (A-13) et (A-14) donné en Annexe.

Pour résoudre le système (A13.A14) dans la zone dépeuplée, nous devons d'abord commencer la résolution sur la première ligne. En effet celle-ci offre les conditions aux limites de Neumann $\frac{\partial V}{\partial n}$ et $\frac{\partial \psi}{\partial n}$ qui se traduit dans notre cas par $\frac{\partial V}{\partial Y} = 0$ et $\frac{\partial \psi}{\partial Y} = 0$.

Nous devons tenir compte de cette condition uniquement sur la première ligne, les conditions aux limites sur le métal sont les conditions aux limites de Dirichlet, puisque sur le métal les potentiels V et ψ valent respectivement $V = V_a + V_b$ et $\psi = V_b$ [14]. Cette condition traduit le fait que sur le métal, la densité des porteurs est indépendante de la tension appliquée.

A l'intérieur de la zone dépeuplée, les grandeurs V et ψ vérifient le système A13-A14.

Sur le contour C , nous rappelons que ce contour a été calculé par F.Brito et A.Benghalia en utilisant les fonctions de Green, les fonctions V et ψ sont nulles. C'est ce contour qui sera utilisé pour séparer la zone dépeuplée de la zone neutre du Semiconducteur.

Dans la méthode des différences finies, nous effectuons un maillage de la zone dépeuplée en tenant compte des conditions aux limites indiquées ci-dessus. La résolution se fera ligne par ligne et dans le même sens; l'axe de symétrie de la structure servira à diviser l'intervalle en deux zones identiques et la résolution se fera sur une seule zone. Ce qui allégera considérablement les calculs.

Le système d'équations à résoudre est le suivant:

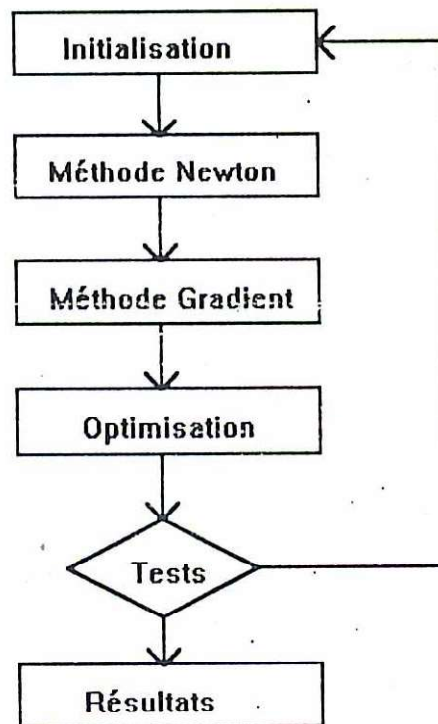
$$F_1(V, \psi) = 1 - \exp(-\psi) - \Delta V$$

$$F_2(V, \psi) = -1 + \exp(-\psi) + \text{grad}(\psi) \cdot \text{grad}(V - \psi) + \Delta \psi$$

Pour l'écriture de ce système par les différences finies, voir annexe.

VI-3-4: Résolution:

Pour effectuer cette résolution, nous avons élaboré un programme informatique permettant de calculer le Potentiel V et ϕ dont l'organigramme est indiquée ci-dessous.



IV-3-5: Résultats et commentaires:

Pour les conditions aux limites du contour C bidimensionnel séparant la zone dépeuplée de la zone neutre du semiconducteur, nous avons effectué d'abord un agrandissement de la zone dépeuplée fournie par Brito [8]. Ensuite nous avons fait manuellement le maillage de cette zone.

Le dispositif sur lequel s'effectuera la résolution (moitié du réseau) comprend 30 lignes et 26 colonnes. De plus les noeuds pour lesquels $V=\psi=0$ ont été déterminés approximativement (fonction en escalier au lieu d'une fonction continue). Ainsi nous obtenons une matrice de 30x26 noeuds où nous résolvons le système des équations IV-5 et IV-7 pour chaque noeud en appliquant les deux méthodes de résolution des équations non linéaires : Méthodes de Newton et du gradient.

L'efficacité et la rapidité de convergence résident dans le bon choix des deux matrices de départ, une pour V et une autre pour ψ .

La résolution se faisant ligne par ligne et dans le même sens (comme exigée par la méthode des différences finies), les erreurs commises en début de ligne se transmettent à la fin de celle-ci, donc sur l'axe de symétrie.

Nos résultats sont obtenus après 20 itérations, sachant que pour une seule itération nous résolvons 2x30x26 équations.

En figures(IV-4,IV-5,IV-6 et IV-7) nous représentons respectivement les distributions bidimensionnelles de $\psi(X)$, $V(X)$, $\phi(X)$ et $\rho(X)$. Les courbes sont tracées par le "Plot-Matlab" où les axes tridimensionnels n'existent pas.

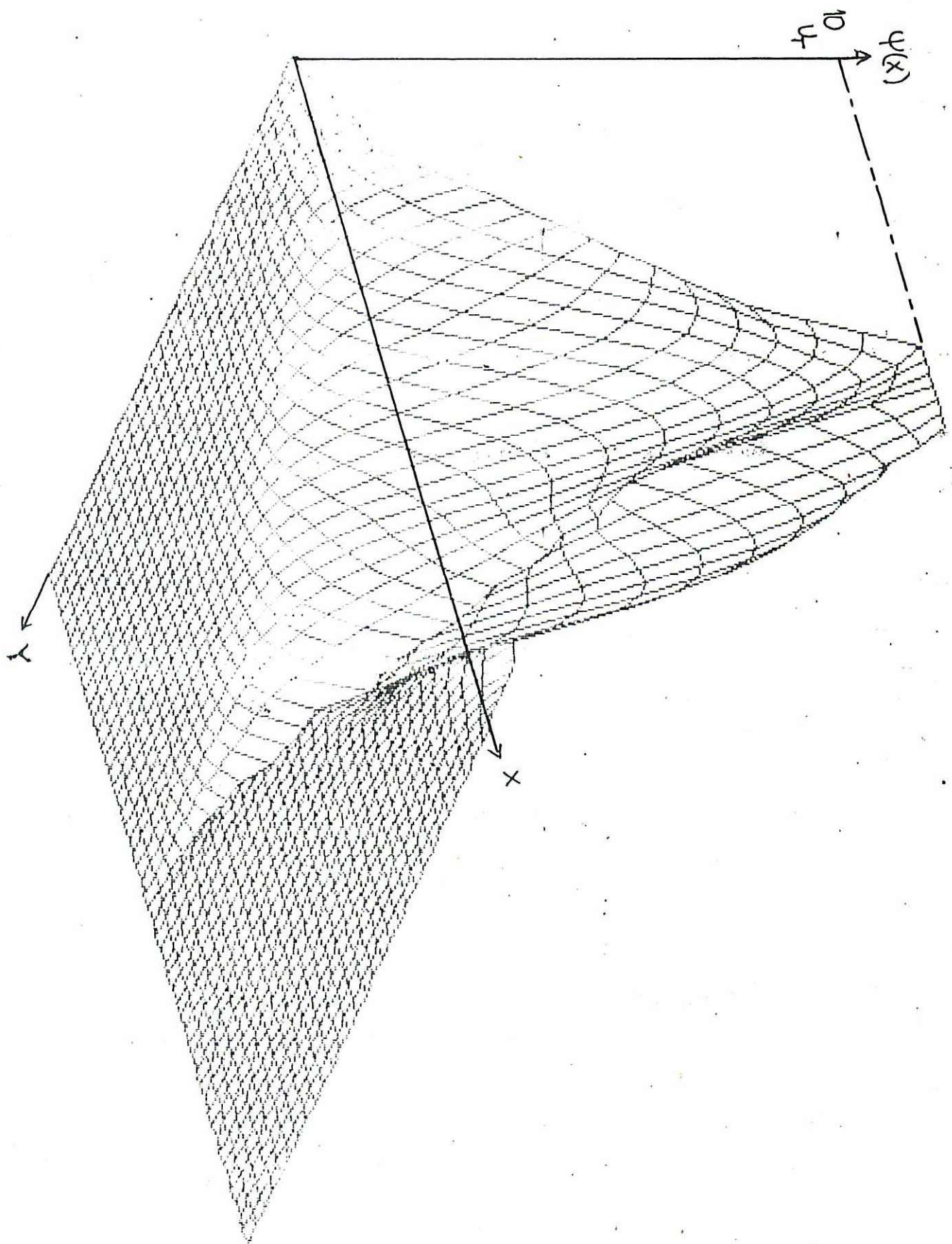
Le réseau de caractéristiques(figures IV-8,IV-9,IV-10 et IV-11) représente les différents contours ou équipotentiels de $\psi(X)$, $V(X)$, $\phi(X)$ pour une tension de diffusion $V_D = 10.u_T$ et une tension appliquée $V_A = 100.u_T$.

Sur la figure IV-11, nous avons schématisé et le contour de Brito et le maillage.

Les figure IV-12 et IV-13 donnent un aperçu sur la résolution : en effet la meilleure résolution est obtenue pour la fonction à optimiser la plus faible possible. Nous évaluons cette fonction ligne par ligne (fig IV-12) et en bidimensionnel (fig IV-13).

Enfin, une distribution ligne par ligne de $\psi(X)$, $V(X)$ et $\phi(X)$ est représentée respectivement en figures IV-14,IV-15 et IV-16.

Fig IV.4: Distribution tridimensionnelle
du Potentiel $\psi(x)$ dans le semiconducteur



Pot. Psi

Fig IV.5 : Distribution du Potentiel électrostatique
supporté par la Jonction.

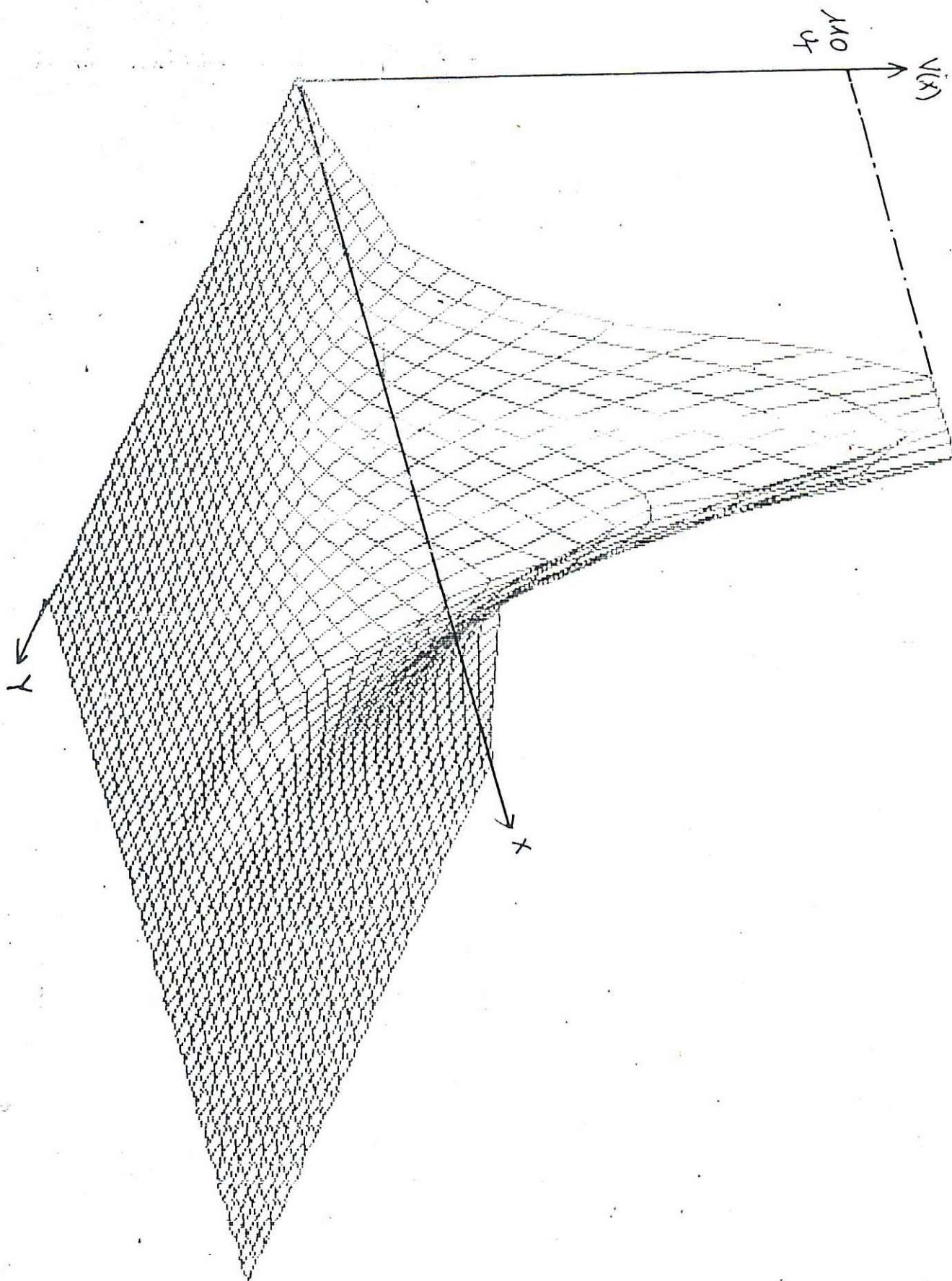


Fig IV.6: Distribution du Pseudopotential de Fermi

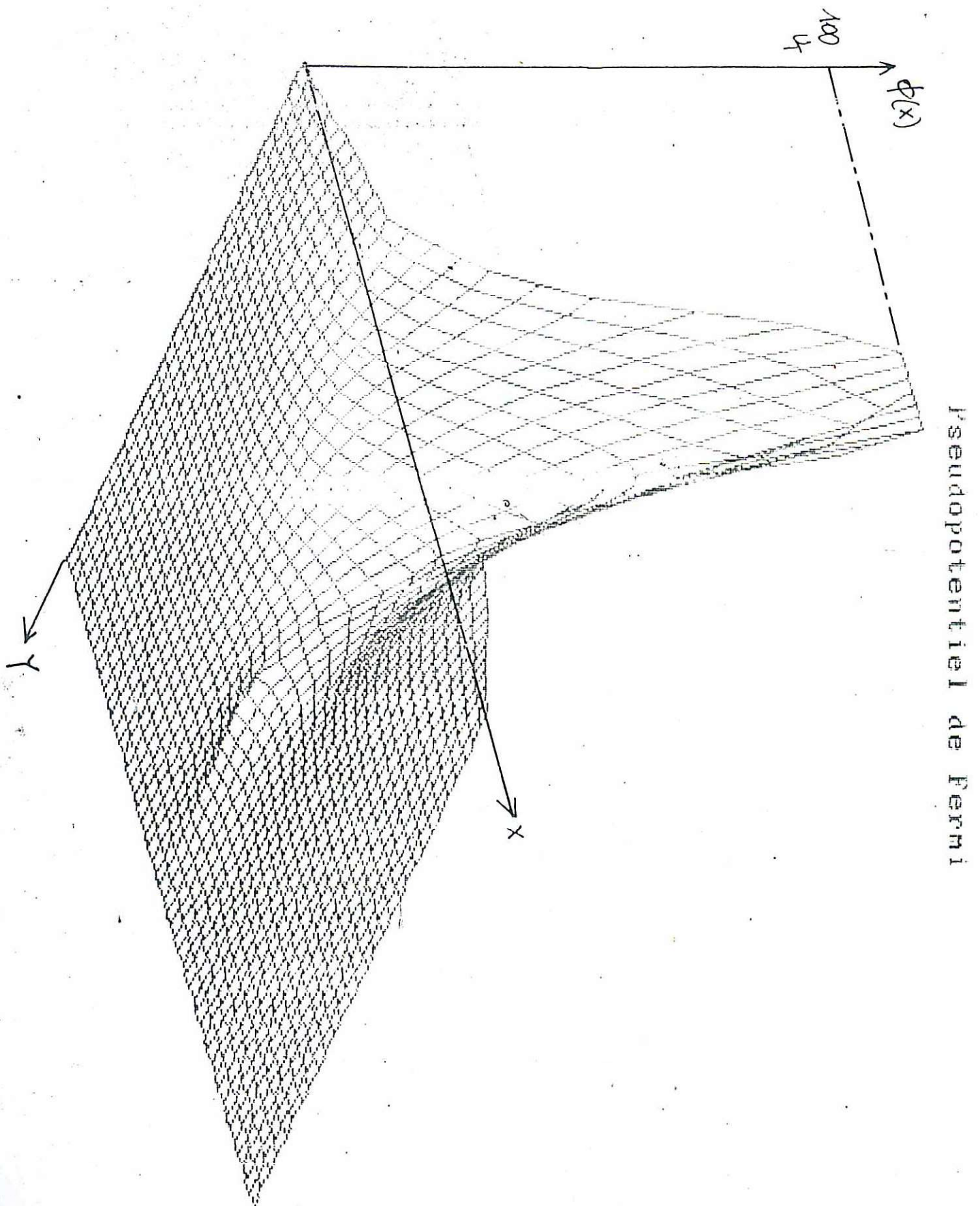
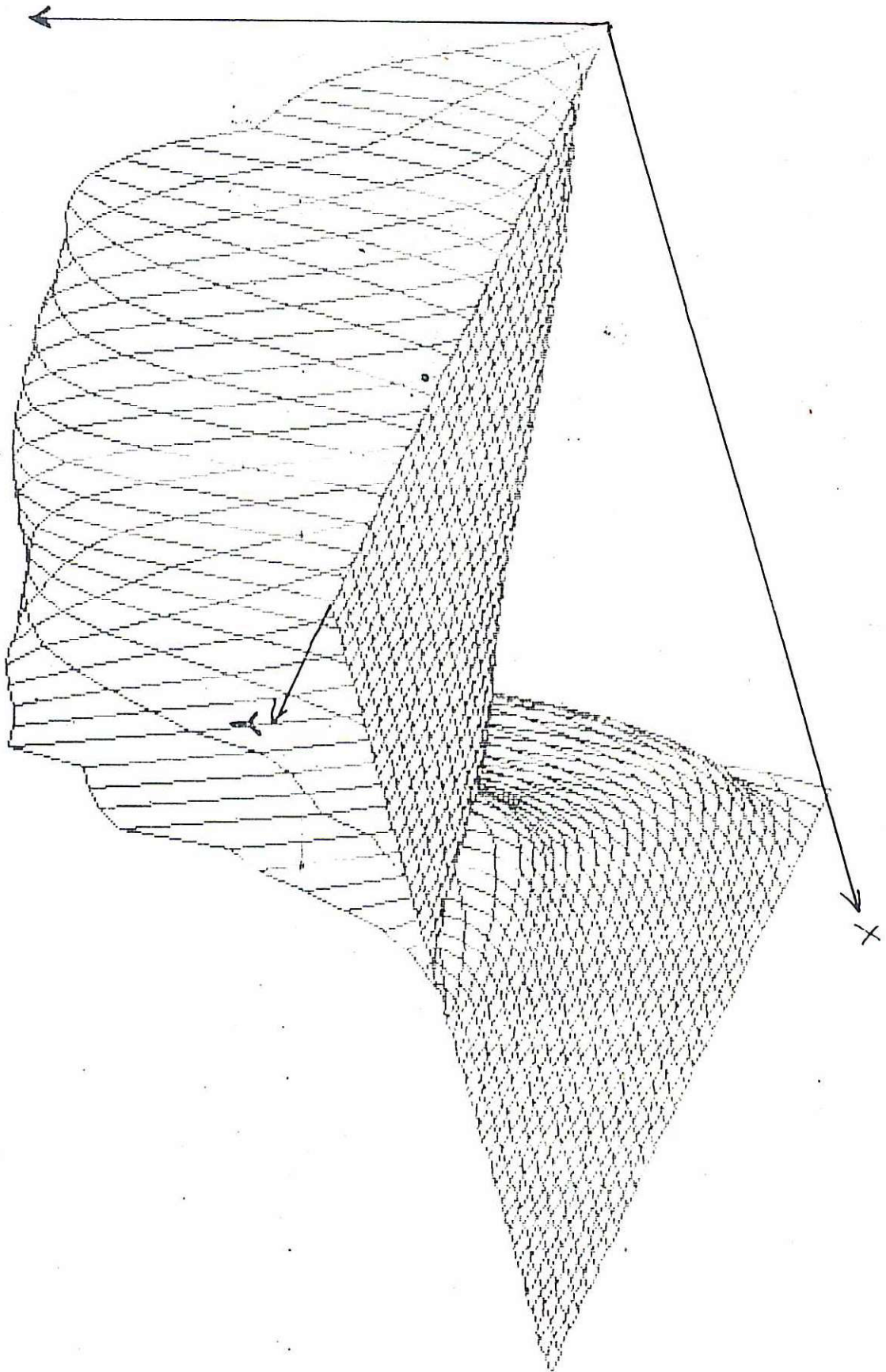


Fig IV.7 : Distribution bidimensionnelle de la Densité
de Charges mobiles.



Densité de charges mobiles

Fig IV-8 : Contours de $\Psi(x)$ dans la zone de peuplée

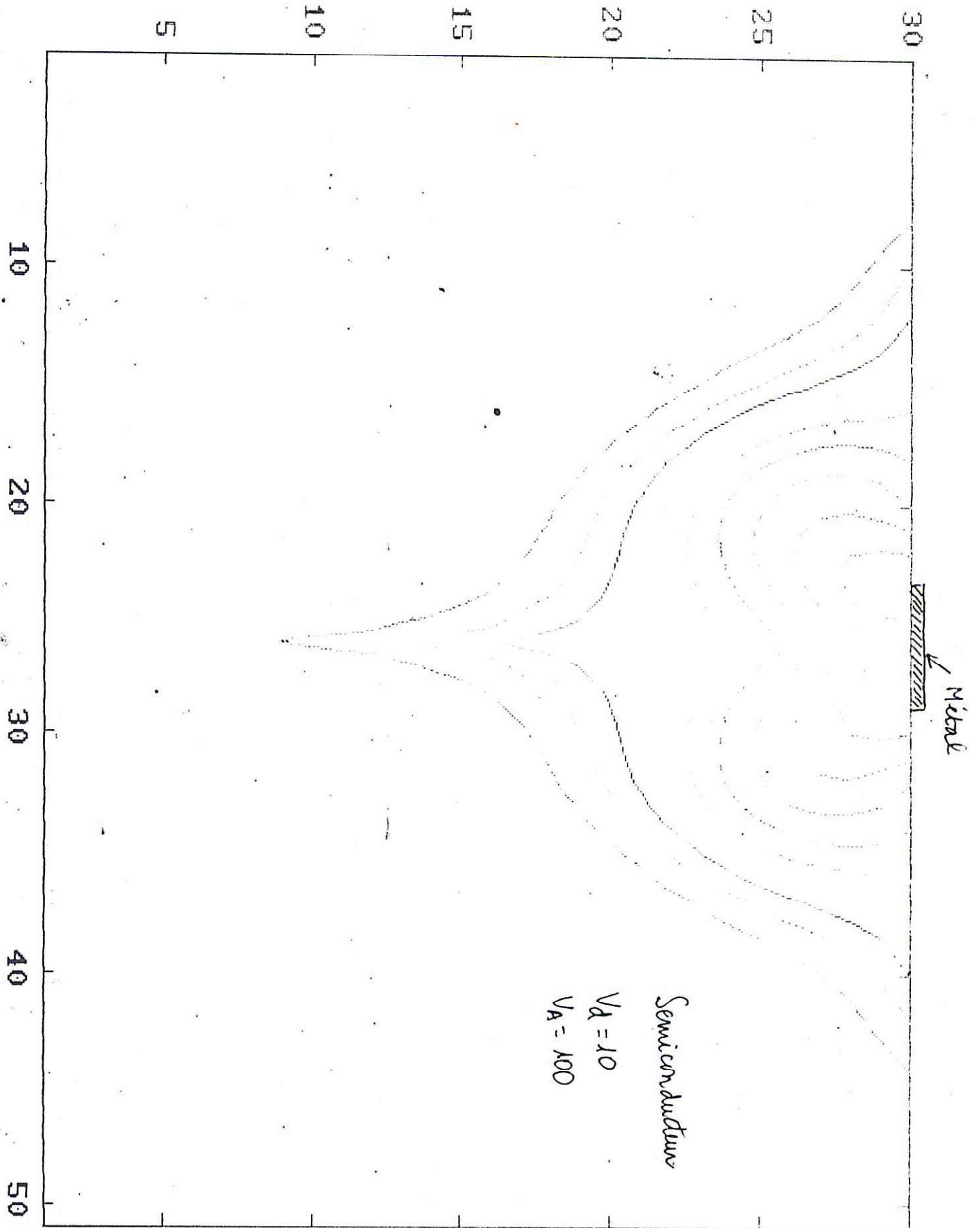


Fig IV.9 : Equipotentiellles de $V(x)$ supporté par la Jonction

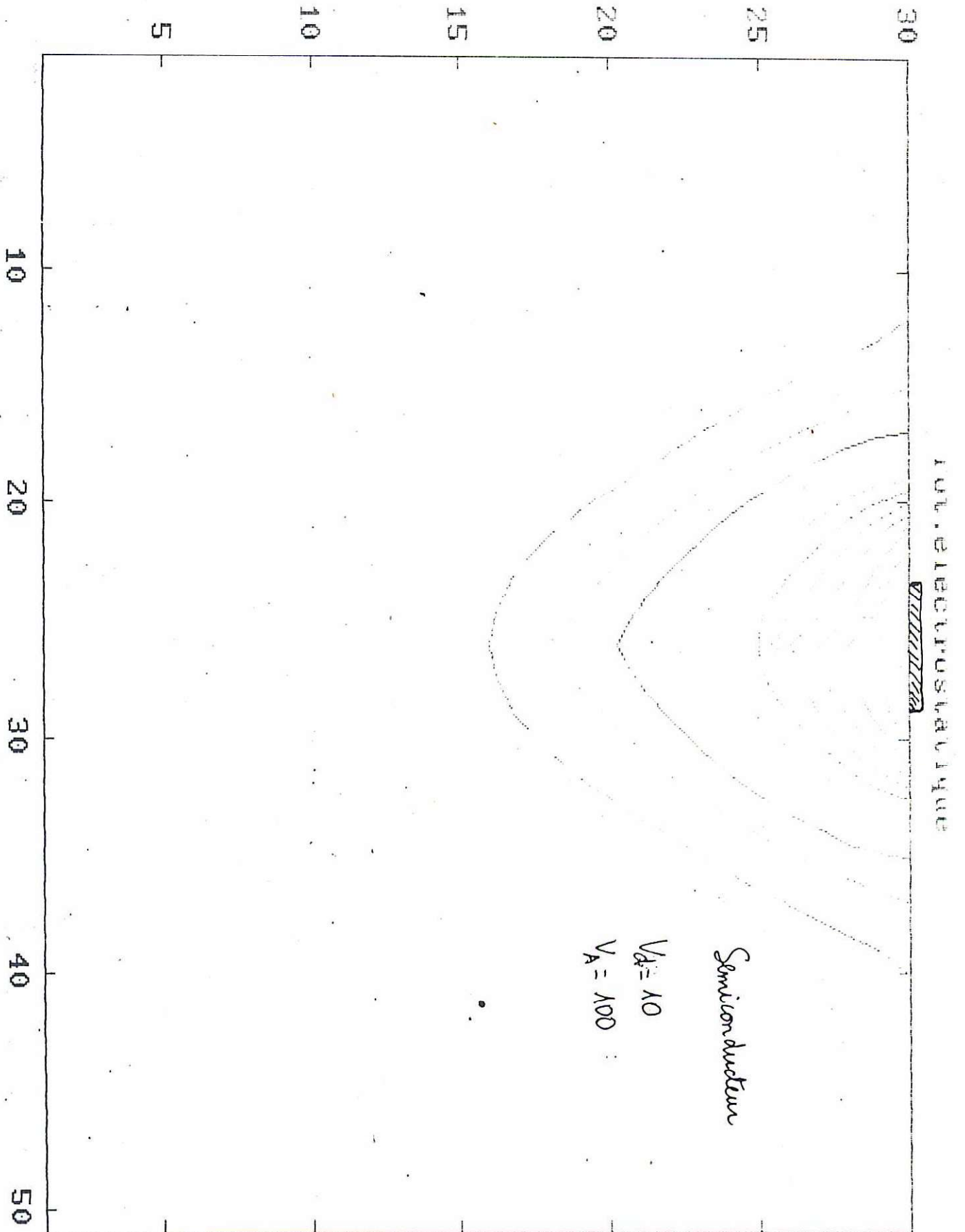


Fig III.10 : Equipotentielles du Pseudo-potential de Fernie Φ

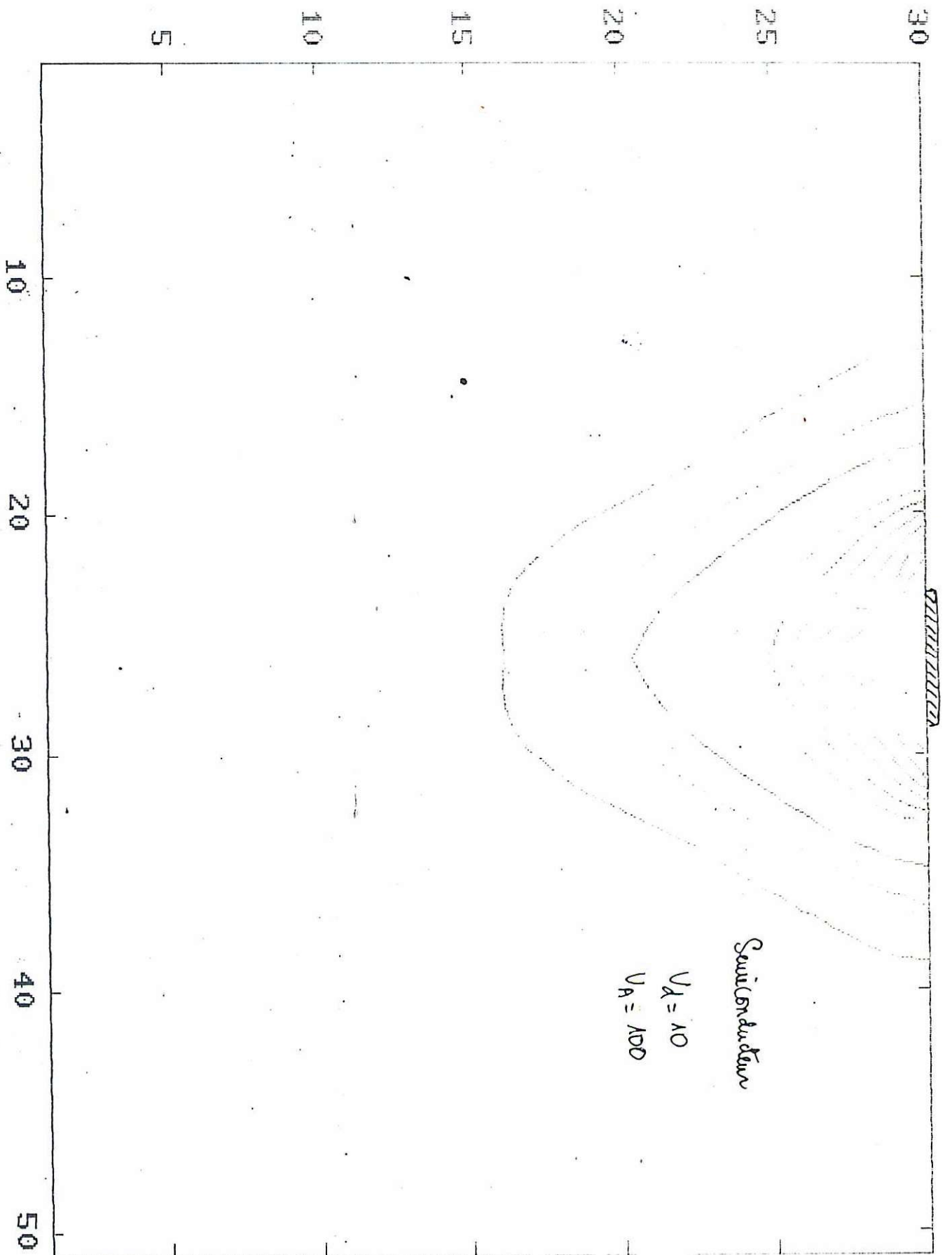


Fig 10.11: Représentation du Contour de Brito [8] $\mathcal{C}$
pour lequel $v(x) = \psi(x) = 0$.

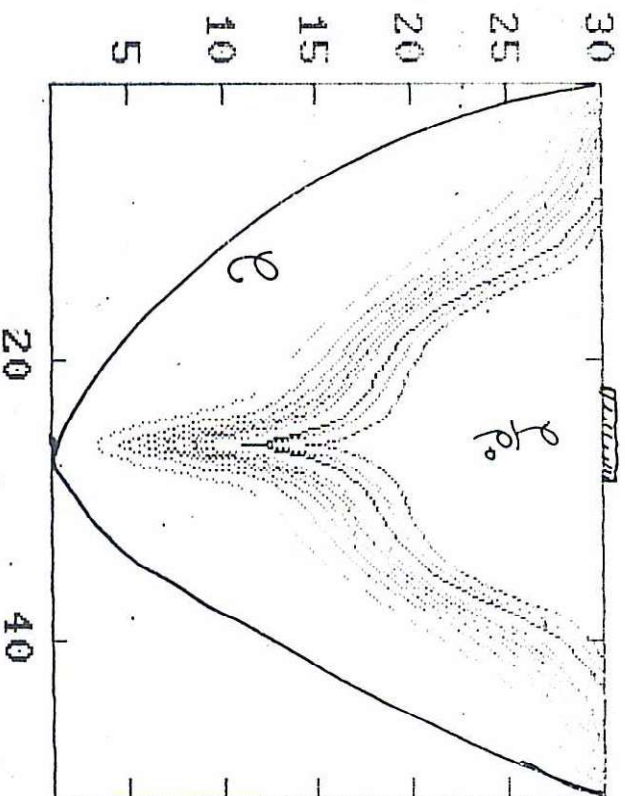
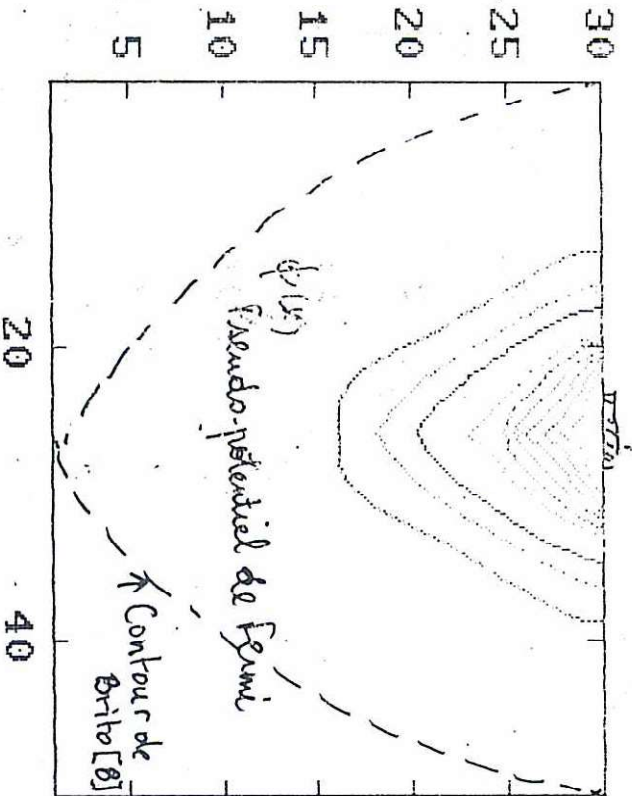
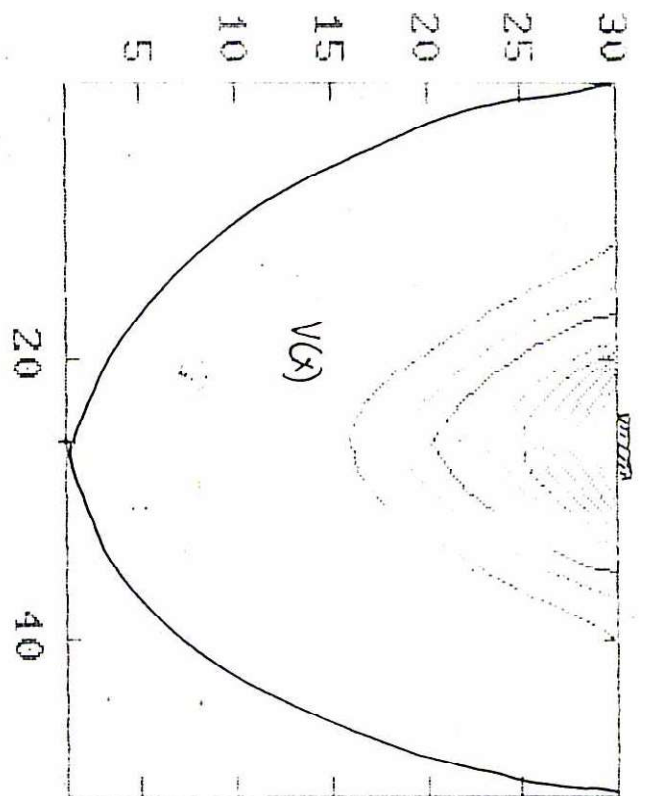
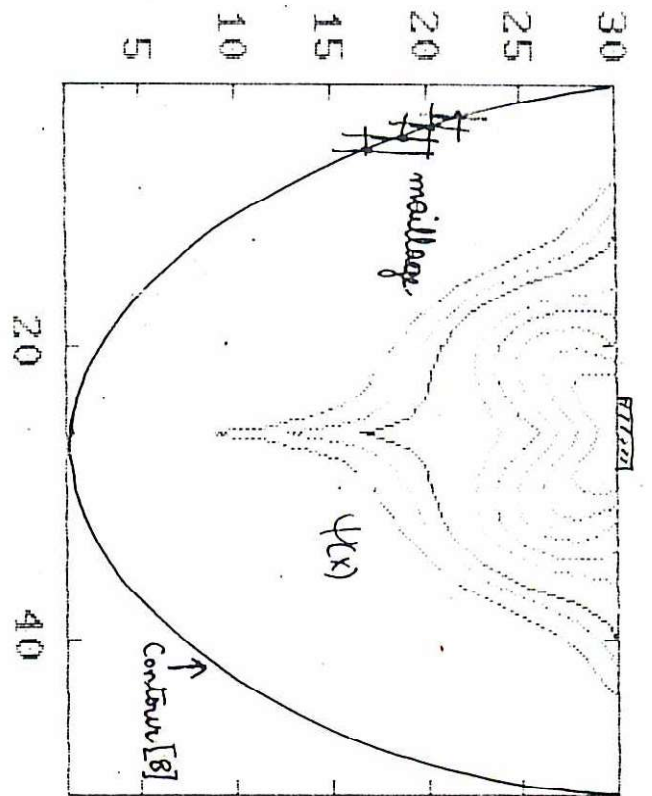


Fig IV.12 : Evaluation de la fonction à Optimiser
sur tout le réseau ligne par ligne.

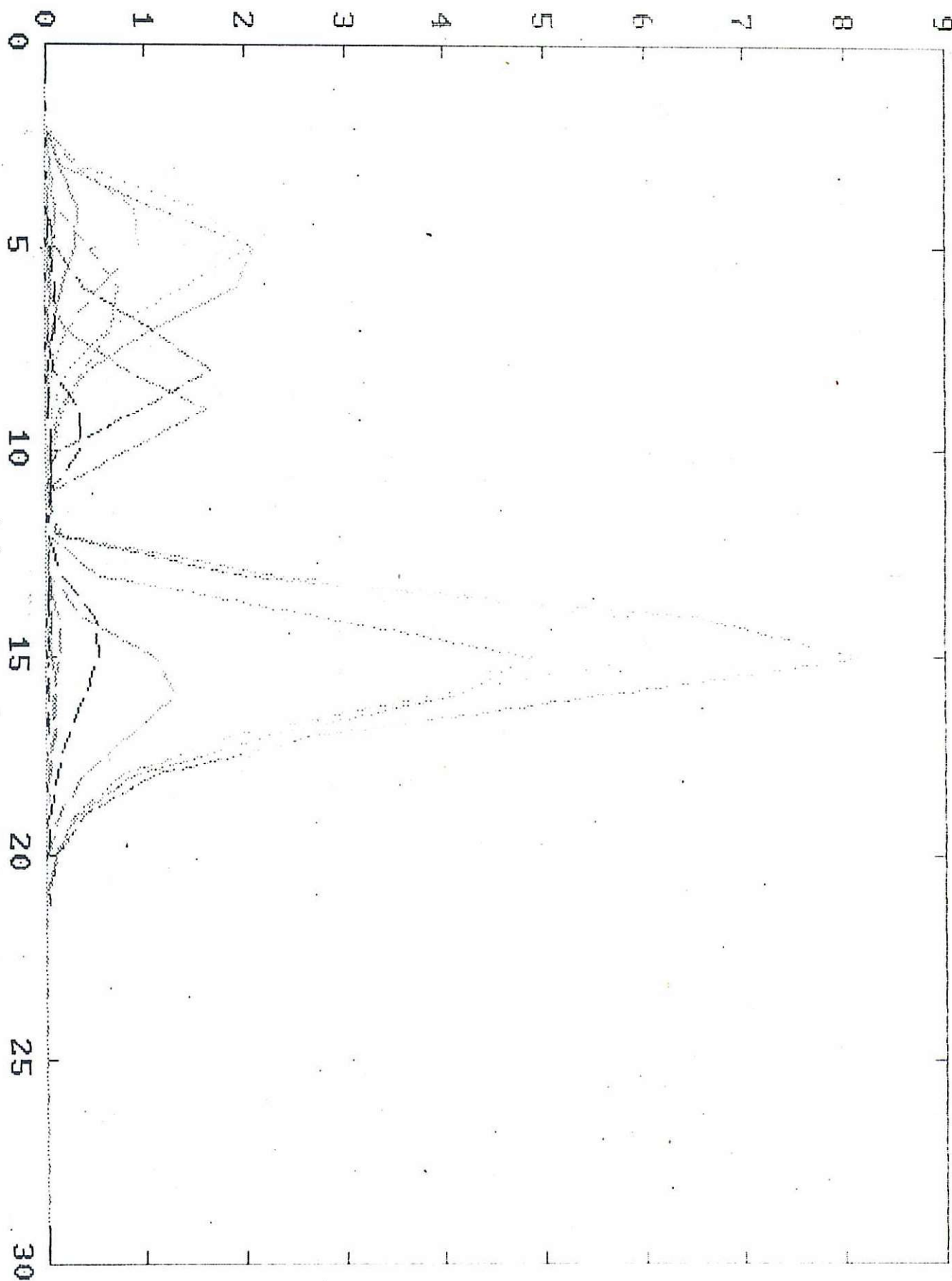


Fig IV. 13: Représentation bidimensionnelle de la fonction
à Optimiser à la fin de la résolution.

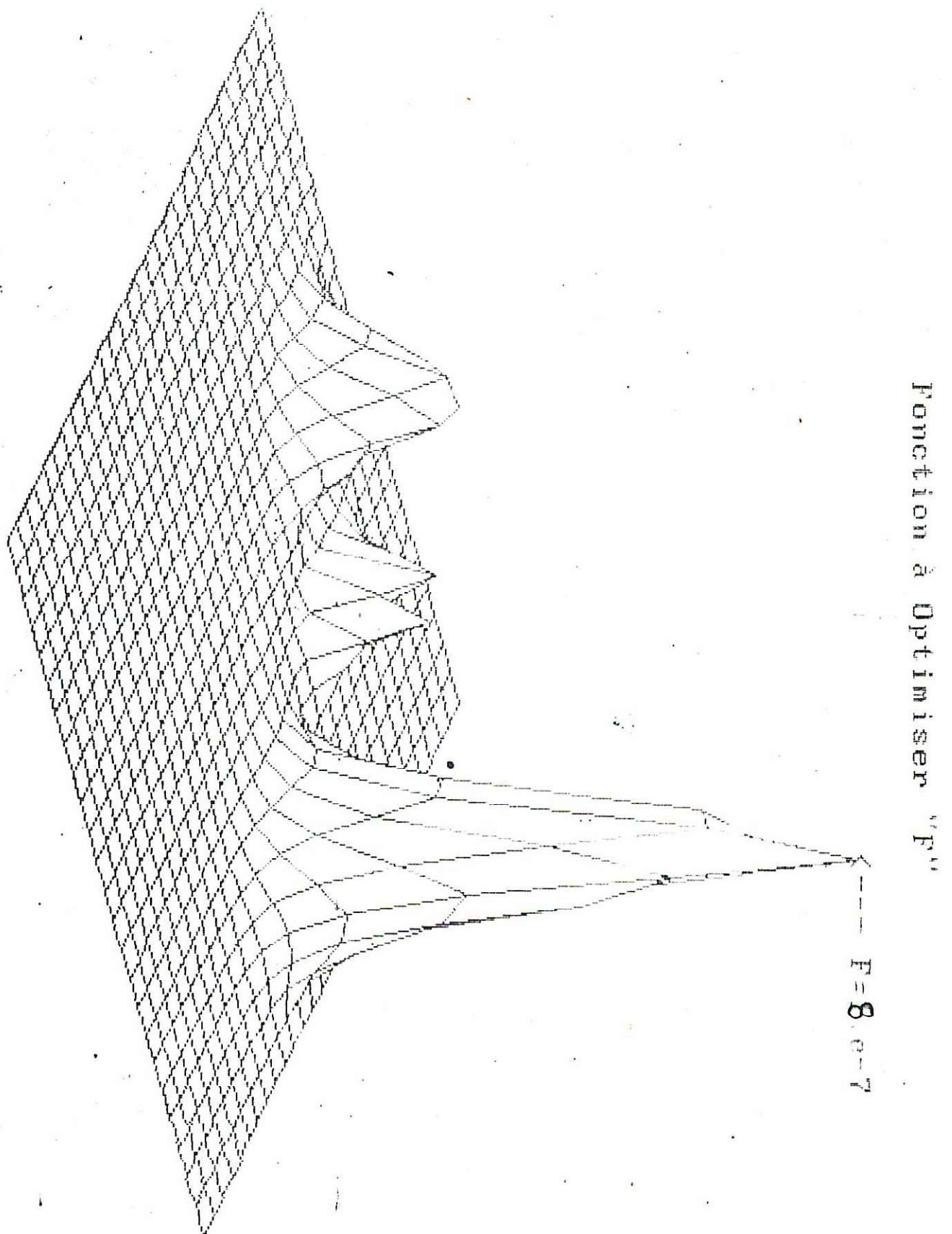


Fig. IV.14 : Distribution de $\psi(x)$ ligne par ligne

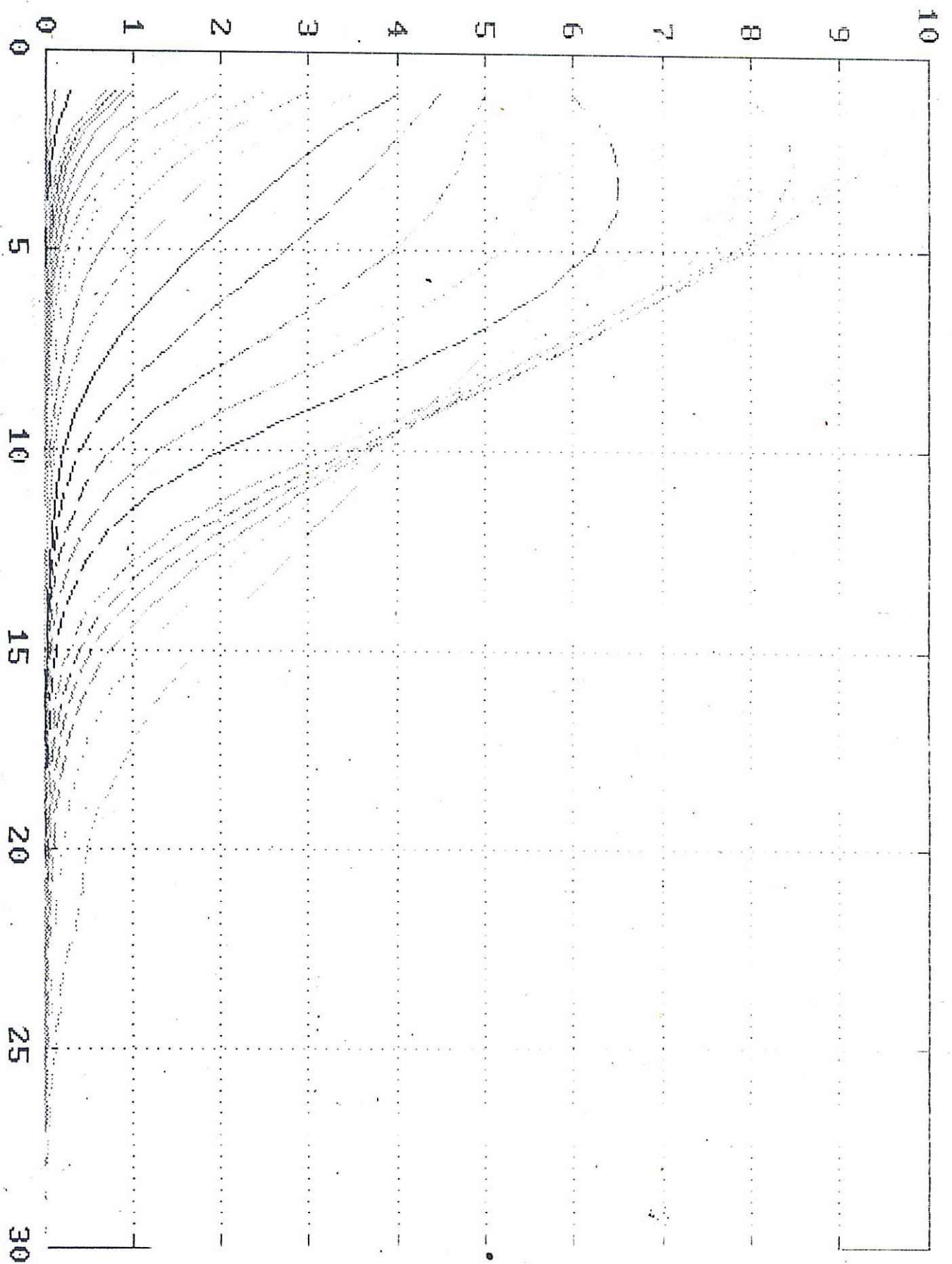


Fig IV. 15 : Distribution de $V(x)$ ligne par ligne

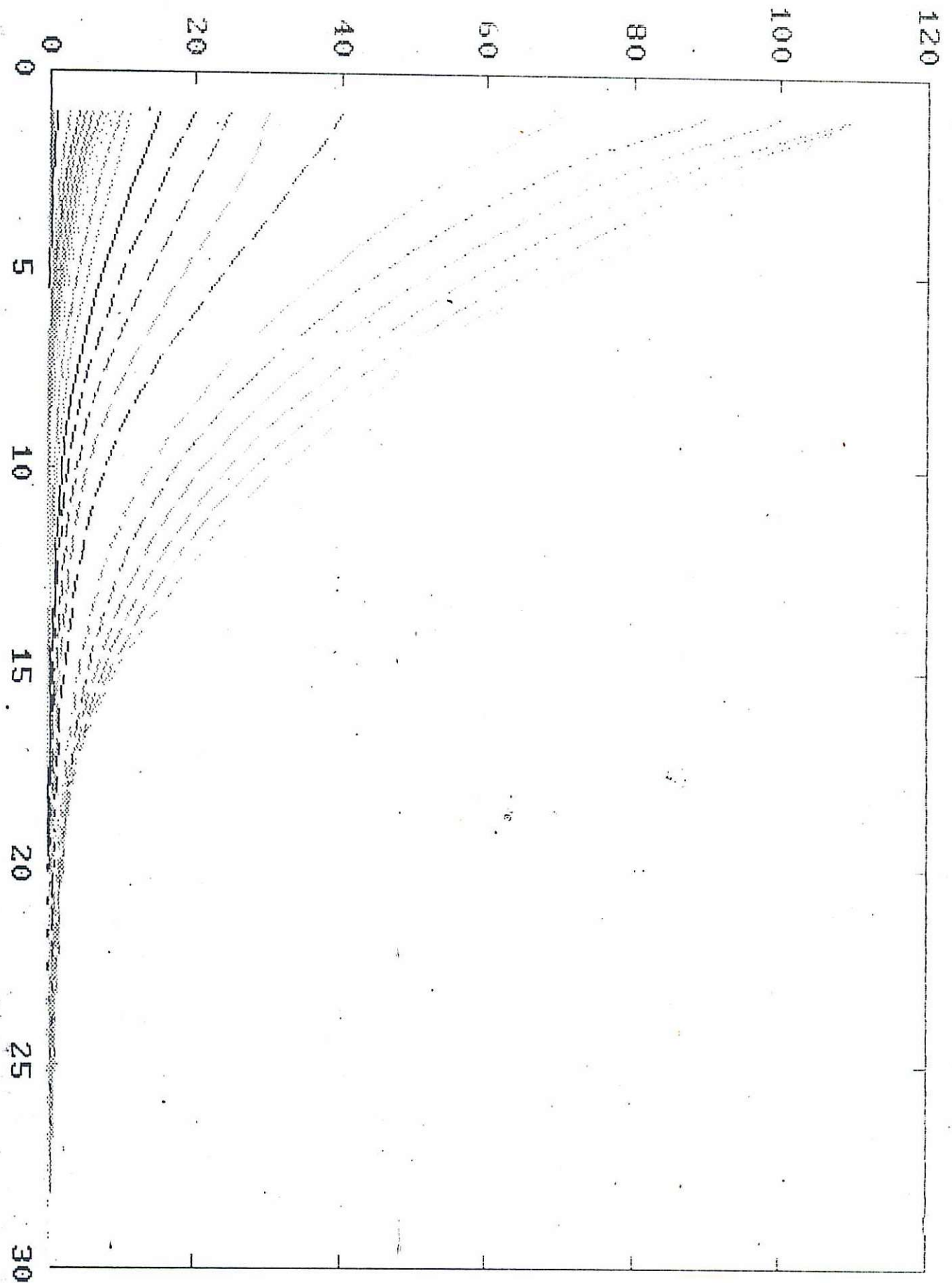
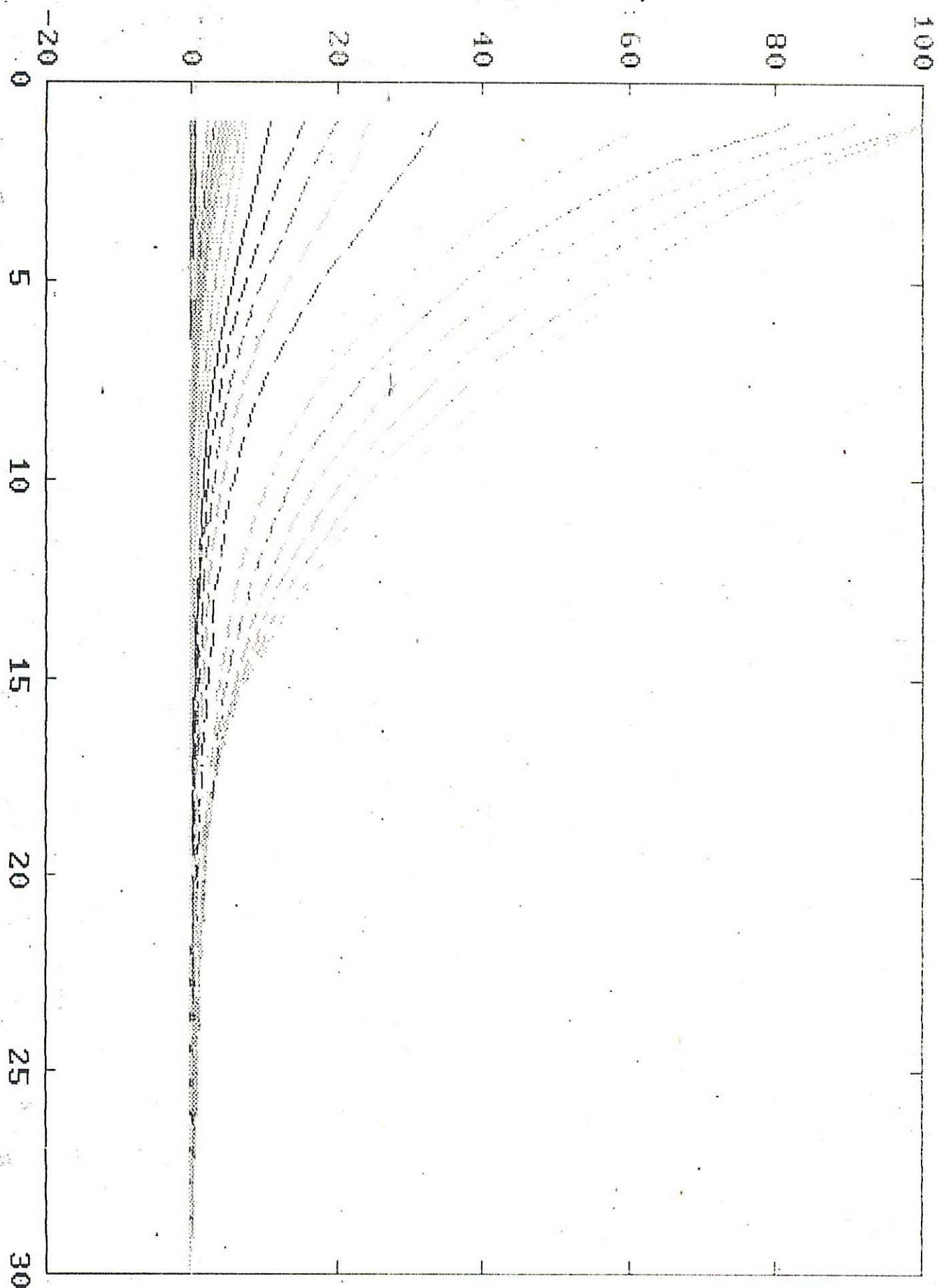


Fig. II.16: Distribution de $\phi(x)$ Pseudopotentiel
de Fermi ligne par ligne



CONCLUSION

Dans ce travail nous nous sommes intéressés à la modélisation et à la résolution de l'équation de transport très utilisée dans le domaine de la physique des semiconducteurs.

En premier lieu nous avons modélisé cette équation ,établie grace à la méthode des différences finies, dans un système unidimensionnel. Les résultats de la résolution de cette équation différentielle du second ordre, obtenue en utilisant deux méthodes de résolution des systèmes non linéaires par optimisation à savoir la méthode de Newton et la méthode du Gradient, nous ont permis de déduire certains paramètres ($V, \phi, \psi, \rho, E, v$ etc...). Ces derniers sont en accord avec les résultats publiés par J.Ross MacDonald et L.Vidal.

En second lieu, nous avons développé le modèle bidimensionnel de l'équation de transport. Ce modèle est décrit par un système de deux équations à deux inconnues. Sa résolution nous a permis de déterminer la distribution bidimensionnelle du potentiel V et du pseudopotential de Fermi ϕ dans la zone dépeuplée d'un contact Schottky. Moyennant certaines conditions aux limites, notre modèle permet de calculer les autres paramètres caractérisant la zone de charge d'espace.

Le logiciel que nous avons élaboré permet par ailleurs de résoudre les systèmes de m équations à m inconnues ce qui le rend par conséquent un outil très utile dans la simulation d'autres processus .

ANNEXE

ANNEXE 1

Méthode de résolution des systèmes non linéaires par optimisation

La méthode d'optimisation consiste à ramener la résolution d'un système d'équation non linéaire au problème de la recherche du minimum d'une fonction de plusieurs variables.

Résoudre un système de N équations à N inconnues

$f_i(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0 \quad i = 1, 2, \dots, n$ est équivalent à chercher le minimum, égal à zéro de la fonction Ψ définie comme suit:

$$\Psi(x_1, x_2, \dots, x_n) = \sum_{i=1}^n f_i^2(x_1, x_2, \dots, x_n) \quad a1-1$$

$$X = (x_1, x_2, \dots, x_n) \text{ de } \mathbb{R}^n; \quad \Psi(X) \geq 0$$

Si $X^* = (x_1^*, x_2^*, \dots, x_n^*)$ est une solution du système, nous pouvons donc écrire:

$$f_i(X^*) = 0 \quad (i=1, 2, \dots, n) \rightarrow \Psi(X^*) = 0$$

*si certaines fonctions $f_i(x_1, x_2, \dots, x_n)$ sont positives il n'est pas nécessaire de les élever au carré dans le calcul de Ψ .

*Si $A = (a_{ij})$ est une matrice symétrique définie positive d'ordre n , c'est à dire vérifiant

$$Y^T A Y \geq 0 \quad \forall Y \in \mathbb{R}^n \text{ avec } Y^T A Y = 0 \Leftrightarrow Y = 0$$

On pourra prendre :

$$\Psi(x_1, x_2, \dots, x_n) = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n a_{ij} f_i(x_1, x_2, \dots, x_n) f_j(x_1, x_2, \dots, x_n)$$

$$\text{où: } \Psi(X) = [F(X)]^T \cdot A \cdot F(X)$$

$\Psi(X)$ admet un minimum nul en un point X^* et vérifiant $F(X^*) = 0$.

La résolution d'un système d'équation non linéaire est ramené à la recherche d'un minimum nul d'une fonction multidimensionnelle $\Psi(X)$ application de $\mathbb{R}^n$ dans $\mathbb{R}$.

1) Méthode de RAPHSON-NEWTON:

1.3: Résolution par optimisation:

L'emploi d'une méthode d'optimisation pour résoudre un système d'équation nécessite, en premier lieu, de ramener la résolution d'un système d'équation non linéaire au problème de la recherche du minimum d'une fonction de plusieurs variables.

C'est à dire résoudre le système de m équations à m inconnues :

$$f_i(x_1, x_2, \dots, x_m) = 0 \quad [i = 1, 2, \dots, m]$$

est équivalent à rechercher le minimum égal à zéro de la fonction $\Psi(X)$ définie par :

$$\Psi(X) = \sum_{i=1}^m f_i^2(X)$$

Si on effectue un développement de Taylor limité au premier ordre, les fonctions $f_k(x_1, \dots, x_m)$ s'écrivent:

$$\begin{cases} f_1(X^*) = f_1(X) + \sum_{j=1}^m \Delta x_j \cdot \frac{\partial f_1}{\partial x_j}(X) + \dots \\ f_2(X^*) = f_2(X) + \sum_{j=1}^m \Delta x_j \cdot \frac{\partial f_2}{\partial x_j}(X) + \dots \\ \dots \dots \dots \\ f_n(X^*) = f_n(X) + \sum_{j=1}^m \Delta x_j \cdot \frac{\partial f_n}{\partial x_j}(X) + \dots \end{cases}$$

Que nous résumons par $f_k(x_1, x_2, \dots, x_m)$ avec $k=1, 2, \dots, m$

$$f_k(X^*) = f_k(X) + \sum_{j=1}^m \Delta x_j \cdot \frac{\partial f_k}{\partial x_j}(X) + \dots \quad \text{avec } i = 1, 2, \dots, m$$

et
$$\Psi(X^*) = \sum_{k=1}^m \left(f_k(X) + \sum_{j=1}^m \Delta x_j \cdot \frac{\partial f_k}{\partial x_j}(X) + \dots \right)^2$$

à l'extrémum nous aurons
$$\frac{\partial \Psi}{\partial (\Delta x_i)} = 0 \quad i = 1, 2, \dots, m$$

Soit en se limitant au développement du premier ordre et en tenant compte de a1.5 et si $\det(J) \neq 0$ on peut écrire:

$$J \Delta X = -F$$

Toutefois cette correction d'un vecteur X par l'addition de ΔX , n'assure pas toujours une minimisation de la fonction Ψ . Il faut donc choisir ΔX de manière à ce qu'il vérifie la condition a1.6:

$$\Psi(X + \Delta X) < \Psi(X) \quad \text{a1.6}$$

Ainsi nous sommes assurés que la fonction Ψ diminue à chaque itération.

Donc si $\Psi(X^n) > 0$ on peut dire que $\Psi(X^n) \rightarrow \Psi(X^*)$ et que $X^n \rightarrow X^*$ qui est solution du système non linéaire défini tout à fait au début (1.1).

Pour assurer la condition 1.6 nous utiliserons l'artifice suivant:

Supposant qu'à la nième itération nous ayons obtenu ΔX^n ;

nous poserons $\tau = \Delta X^n$ et $\alpha = 1$ et calculons $\Psi(X^n + \alpha\tau)$:

a) si $\Psi(X^n + \alpha\tau) < \Psi(X^n)$ on considérera comme satisfaisant le point : $X^n + \Delta X^n$.

b) si $\Psi(X^n + \alpha\tau) \geq \Psi(X^n)$ alors α est divisée par 2 jusqu'à l'obtention de

$$\Psi(X^n + \alpha_p \tau) < \Psi(X^n) \quad \text{a1.7}$$

, à ce moment le nouveau vecteur sera :

$$X^{n+1} = X^n + \alpha_p \Delta X^n$$

où α_p est le premier α pour lequel la relation a1.7 est vérifiée.

II) Méthode de la plus grande pente ou méthode du gradient:

Principe:

Soit $X^0 = (x_1^0, x_2^0, \dots, x_n^0)$ une approximation de la solution cherchée en X^0 , $\Psi(X)$ vaut $\Psi(X^0)$. On recherche la direction dans laquelle $\Psi(X)$ décroît le plus rapidement à partir de X^0 .

Soit un vecteur unitaire $u = (u_1, u_2, \dots, u_n)$ définissant une direction à partir de X^0 et un scalaire positif λ écrivons le développement de Taylor au point X^0 :

$$\Psi(X^0 + \lambda u) = \Psi(X^0) + \lambda \sum_i u_i \frac{\partial \Psi}{\partial x_i}(X^0) + \frac{1}{2} \lambda^2 \sum_i \sum_j u_i u_j \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x_i \partial x_j}(X^0) + \dots$$

$$\text{or } \text{grad} \Psi(X) = \left(\frac{\partial \Psi(X)}{\partial x_1}, \frac{\partial \Psi(X)}{\partial x_2}, \dots, \frac{\partial \Psi(X)}{\partial x_n} \right)$$

$$\text{et } \sum_i u_i \frac{\partial \Psi}{\partial x_i}(X^0) \text{ est le produit scalaire des vecteurs } u \text{ et } \text{grad} \Psi(X^0) \text{ que nous noterons : } (u, \text{grad} \Psi(X^0))$$

donc la variation de $\Psi(X)$ autour de X^0 est, en se limitant au premier ordre donnée par:

$$\Psi(X^0 + \lambda u) = \Psi(X^0) + \lambda (u, \text{grad} \Psi(X^0)) + \dots$$

la direction de décroissance max (respectivement de croissance max) est obtenue pour :

$$u^0 = \frac{\text{grad } \Psi_0}{\|\text{grad } \Psi_0\|} \quad \text{respectivement} \quad u^0 = \frac{\text{grad } \Psi_0}{\|\text{grad } \Psi_0\|}$$

$$\text{avec } \text{grad } \Psi_0 = \text{grad } \Psi(X^0) \quad \text{et} \quad \|\text{grad } \Psi_0\| = \left[\sum_{j=1}^n \left[\frac{\partial \Psi}{\partial x_j}(X^0) \right]^2 \right]^{1/2}$$

On recherche alors dans la direction de $-\text{grad } \Psi_0$ le point où $\Psi(X)$ prend la valeur minimum c'est à dire en prenant des notations modifiées, on détermine le scalaire μ_0 qui rend minimum la fonction $\Psi(X^0 - \mu \cdot \text{grad } \Psi_0)$:

$$\Psi(X^0 - \mu \cdot \text{grad } \Psi_0) = \min \Psi(X^0 - \mu \cdot \text{grad } \Psi_0)$$

avec $\mu \geq 0$

cette fonction $\Psi(X^0 - \mu \cdot \text{grad } \Psi_0)$ est une fonction de la variable μ par l'intermédiaire des n variables $x_i = \mu \cdot \frac{\partial \Psi(X^0)}{\partial x_i}$ avec $i=1,2,\dots,n$

Sa dérivée par rapport à μ s'obtient par le théorème de dérivation des fonctions composées. Cette dérivée est nulle en X^0 et le calcul montre que X^0 vérifie:

$$-\sum_{i=1}^n \frac{\partial \Psi(X^0)}{\partial x_i} \cdot \frac{\partial \Psi(X^0 - \mu \cdot \text{grad } \Psi_0)}{\partial x_i} = 0$$

ainsi le nouveau point X^1 est défini par:

$$X^1 = X^0 - \mu_0 \cdot \text{grad } \Psi_0$$

L'équation 1 devient:

$$(\text{grad } \Psi_0, \text{grad } \Psi_1) = 0$$

Le processus est ensuite itéré à partir de cette nouvelle approximation X^1 de la solution cherchée.

Nous passons de l'itération n à l'itération $n+1$ par les relations de récurrence suivantes:

$$v_n = \text{grad } \Psi_n$$

$$X^{n+1} = X^n - \mu_n \cdot v^n$$

où μ_n est défini par :

$$\Psi(X^n - \mu_n \cdot v^n) \leq \Psi(X^n - \mu \cdot v^n)$$

$$\forall \mu \geq 0$$

II-2 Aspect algorithmique:

II-2-1 Détermination du scalaire μ :

Nous n'effectuons pas le calcul de μ comme il a été défini précédemment mais une approximation de μ . au lieu de résoudre des équations non linéaires nous utiliserons la méthode exposée ci-dessous pour déterminer une approximation de μ . Cette valeur de μ n'affecte en rien la rapidité de la résolution.

Soit un pas h , on norme v c'est à dire on écrit que $u^n = \frac{v^n}{\|v^n\|}$ avec la notation:

$$g(\mu) = \Psi(X^n - \mu \cdot u^n) \quad \text{avec} \quad g(0) = \Psi(X^n)$$

On calcule $g(\mu)$ pour $\mu=h$

a) si $g(h) < g(0)$

on calcule $g(2^p h)$ pour $p=1,2,\dots,n$

en effectuant le test suivant:

$$g(2^p h) < g(2^{p-1} h)$$

p_0 est le premier entier pour lequel cette équation n'est pas vérifiée on prend l'approximation $\mu = 2^{p_0-1} h$

b) si $g(h) > g(0)$

on calcule $g(h/2^p)$ pour $p=1,2,\dots$ en faisant le test :

$$g(h/2^p) \geq g(0)$$

p_0 étant le premier entier pour lequel cette relation n'est pas vérifiée, on continue ensuite le calcul de $g(h/2^p)$ pour $p=p_0+1,\dots$ Tant que :

$$g(h/2^p) < g(h/2^{p-1})$$

et on prend l'approximation $\mu = h/2^{p_1-1}$ où p_1 est le premier entier pour lequel cette relation n'est pas vérifiée.

ANNEXE 2

III- Méthode des différences finies:

III-1: Introduction:

Nous exposerons la méthode des différences finies que nous appliquerons à l'équation de transport jumelée à l'équation de Poisson pour la détermination du potentiel électrostatique V et du pseudopotentiel de Fermi ψ dans la zone dépeuplée.

Le problème n'est plus unidimensionnel comme il a été le cas dans le chapitre III mais il s'agit maintenant d'effectuer un calcul bidimensionnel dans toute la zone dépeuplée.

Pour cela, il suffit de considérer le plan perpendiculaire au métal et d'effectuer un quadrillage suivant x et y dans le semiconducteur (voir fig a.1).

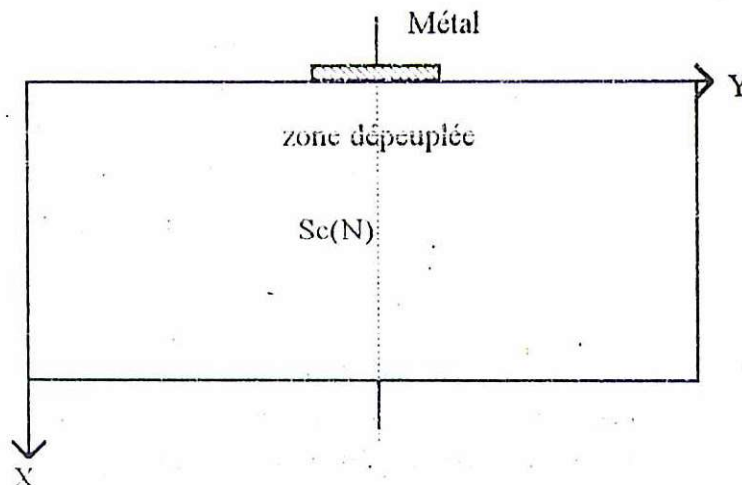


fig. a.1: quadrillage de la zone dépeuplée sous le métal

Les conditions aux limites de la zone dépeuplée sont ceux de Brito. Bien entendu, la limite de la zone dépeuplée est fonction de la tension appliquée V_a , plus celle-ci est grande plus la zone

dépeuplée s'élargit . F.Brito calcule les limites de plusieurs zones dépeuplées pour plusieurs tensions appliquées V_a (V_a 25 ,50, 100 et 200u_t)

III 2: Méthode des différences finies:

Ayant à résoudre des équations différentielles dans le plan , on peut quadriller le plan x,y par des droites $x=\text{constantes}$ et $y=\text{constantes}$; chaque noeud du réseau est ainsi repéré par (x,y) ou par des indices (I,J) de la manière suivante:

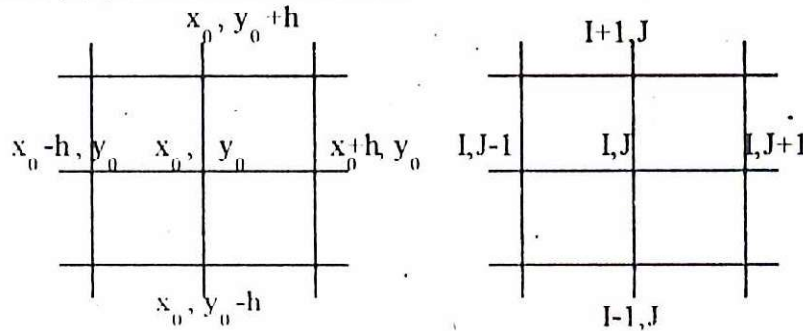


fig.a2: cellules élémentaires

Soit à déterminer une fonction $V(x,y)$ dans tous les noeuds du réseau .

En un point de coordonnées (x_0, y_0) , on peut appliquer la formule de Taylor arrêtée au second ordre ,soit:

$$V(x,y) = V(x_0, y_0) + \frac{\partial V}{\partial x_0} dx + \frac{\partial V}{\partial y_0} dy + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 V}{\partial x_0^2} dx^2 + \frac{\partial^2 V}{\partial x_0 \partial y_0} dx dy + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 V}{\partial y_0^2} dy^2$$

Si on applique cette formule aux quatre points du réseau ci-dessus, nous obtenons pour les quatre équations suivantes:

$$V(x_0 + h, y_0) = V(x_0, y_0) + h \cdot \frac{\partial V(x, y)}{\partial x_0} + \frac{h^2}{2} \cdot \frac{\partial^2 V(x, y)}{\partial x_0^2} \quad a2.1$$

$$V(x_0 - h, y_0) = V(x_0, y_0) - h \cdot \frac{\partial V(x, y)}{\partial x_0} + \frac{h^2}{2} \cdot \frac{\partial^2 V(x, y)}{\partial x_0^2} \quad a2.2$$

$$V(x_0, y_0 + h) = V(x_0, y_0) + h \cdot \frac{\partial V(x, y)}{\partial y_0} + \frac{h^2}{2} \cdot \frac{\partial^2 V(x, y)}{\partial y_0^2} \quad a2.3$$

$$V(x_0, y_0 - h) = V(x_0, y_0) - h \cdot \frac{\partial V(x, y)}{\partial y_0} + \frac{h^2}{2} \cdot \frac{\partial^2 V(x, y)}{\partial y_0^2} \quad a2.4$$

Pour simplifier nous avons supposer que les droites $x=\text{cte}$ sont équidistantes de h ainsi que les droites $y=\text{cte}$.

Si on additionne les équations 1 et 2 ,nous obtenons:

Si on applique cette formule aux quatre points du réseau ci-dessus, nous obtenons pour les quatre équations suivantes:

$$V(x_0 + h, y_0) = V(x_0, y_0) + h \cdot \frac{\partial V(x, y)}{\partial x_0} + \frac{h^2}{2} \cdot \frac{\partial^2 V(x, y)}{\partial x_0^2} \quad a2.1$$

$$V(x_0 - h, y_0) = V(x_0, y_0) - h \cdot \frac{\partial V(x, y)}{\partial x_0} + \frac{h^2}{2} \cdot \frac{\partial^2 V(x, y)}{\partial x_0^2} \quad a2.2$$

$$V(x_0, y_0 + h) = V(x_0, y_0) + h \cdot \frac{\partial V(x, y)}{\partial y_0} + \frac{h^2}{2} \cdot \frac{\partial^2 V(x, y)}{\partial y_0^2} \quad a2.3$$

$$V(x_0, y_0 - h) = V(x_0, y_0) - h \cdot \frac{\partial V(x, y)}{\partial y_0} + \frac{h^2}{2} \cdot \frac{\partial^2 V(x, y)}{\partial y_0^2} \quad a2.4$$

Pour simplifier nous avons supposé que les droites $x = \text{cte}$ sont équidistantes de h ainsi que les droites $y = \text{cte}$.

Si on additionne les équations 1 et 2, nous obtenons:

$$\frac{\partial^2 V(x, y)}{\partial x^2} = \frac{1}{h^2} \cdot [V(x_0 + h, y_0) + V(x_0 - h, y_0) - 2V(x_0, y_0)] \quad a2.5$$

$$\frac{\partial^2 V(x, y)}{\partial y^2} = \frac{1}{h^2} \cdot [V(x_0, y_0 + h) + V(x_0, y_0 - h) - 2V(x_0, y_0)] \quad a2.6$$

Où en passant en notation indicielles (I, J) les équations 5 et 6 deviennent respectivement:

$$\frac{\partial^2 V(x, y)}{\partial x^2} = \frac{1}{h^2} \cdot [V(I, J + 1) + V(I, J - 1) - 2V(I, J)] \quad a2.7$$

$$\frac{\partial^2 V(x, y)}{\partial y^2} = \frac{1}{h^2} \cdot [V(I, J + 1) + V(I, J - 1) - 2V(I, J)] \quad a2.8$$

Pour calculer $\frac{\partial V(x, y)}{\partial x}$ et $\frac{\partial V(x, y)}{\partial y}$ il suffit de retrancher l'équation a2.2 de l'équation a2.1 et l'équation a2.4 de l'équation a2.3, et en passant en notation indicielle nous aurons:

$$\frac{\partial V(x, y)}{\partial x} = \frac{1}{2h} [V(I, J + 1) - V(I, J - 1)] \quad a2.9$$

$$\frac{\partial V(x, y)}{\partial y} = \frac{1}{2h} [V(I + 1, J) - V(I - 1, J)] \quad a2.10$$

Reprenons maintenant l'équation de transport bidimensionnelle en $\psi(x, y)$ et $V(x, y)$

$$\Delta \psi = 1 - \exp(-\psi) + \text{grad}(\psi) \cdot \text{grad}(V - \psi) \quad a2.11$$

$$\Delta V = 1 - \exp(-\psi) \quad a2.12$$

Que nous pouvons écrire sous forme $F_1(V, \psi) = 0$ et $F_2(V, \psi) = 0$ nous aurons donc:

$$F_1(V, \psi) = \Delta V - 1 + \exp(-\psi) \quad \text{a2.13}$$

$$F_2(V, \psi) = \Delta \psi - \text{grad}(\psi) \cdot \text{grad}(V - \psi) + \exp(-\psi) - 1 \quad \text{a2.14}$$

Par la méthode des différences finies ce système s'écrira, en tenant compte des relations (5,6,9 et 10):

$$F_1(V, \psi) = 1 - \exp[-\psi(I, J)] + \frac{1}{H^2} [V(I, J+1) + V(I, J-1) - 2V(I, J)] + \frac{1}{H^2} [V(I-1, J) + V(I+1, J) - 2V(I, J)] \quad \text{a2.15}$$

$$\begin{aligned} F_2(V, \psi) = & 1 - \exp[-\psi(I, J)] + \frac{1}{4H} [V(I, J) - V(I, J-1)] [\psi(I, J) - \psi(I, J-1)] \\ & + \frac{1}{4H} [V(I+1, J) - V(I-1, J)] [\psi(I+1, J) - \psi(I-1, J)] \\ & - \frac{1}{4H^2} [\psi(I, J+1) - \psi(I, J-1)]^2 - \frac{1}{4H^2} [\psi(I+1, J) - \psi(I-1, J)]^2 \\ & + \frac{1}{H^2} [\psi(I, J+1) + \psi(I, J-1) - 2\psi(I, J)] \\ & + \frac{1}{H^2} [\psi(I-1, J) + \psi(I+1, J) - 2\psi(I, J)] \end{aligned}$$

a2.16

REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES

- [1] L. Vidal : 'Contribution à l'étude des phénomènes de transport dans les contacts Schottky'-
Thèse de 3^o cycle-ENSEEHT-Toulouse-(1985).
- [2] E.H. Rhoderick: 'Transport process in Schottky diodes', Institute of Physics N°22, pp:3-18.
- [3] S.M.Sze: 'Physics of Semiconductor Devices' John Wiley & Sons-(1981).
- [4] D. P. Verret: 'The problems of correlating Schottky diode barrier height with an ideality factor using I.V. measurements' IEEE electron. device letters, Vol EDL5 N°5, pp:142-144.
- [5] A. Martinez: Thèse de Docteur es Sciences Université Paul Sabatier Toulouse -1976.
- [6] H.K. Henisch et Y. Moreau: 'Schottky barrier ideality, real and imagined', Solid state electronics, Vol 27, N°11, pp:1033-1034, (1984).
- [7] Mead and Hoffman: 'Electric field dependance of GaAs Schottky barriers', Solid state electronics, Vol 11, pp:201-204, (1968).
- [8] F. Brito: 'Thèse de 3^o cycle I N P Toulouse-1986
- [9] D. Bajan: 'Contribution à l'étude des contacts M/Sc'- Thèse de 3^o cycle -INPToulouse-(1986)
- [10] A. Dahalani Said Abasse: 'Contribution à l'étude des diodes Schottky à temps de transit'. INPToulouse, Thèse de 3^{ème} cycle, Juillet (1984).
- [11] H. Mathieu : 'Physique des Semiconducteurs et des composants électroniques-Ed Masson-(1987).
- [12] J. Ross Mac Donald: 'Accurate solution of an idealised one carrier M/Sc junction problem' Sol state elect -Vol 5-pp11-37-1962.

- [13] Y. Moreau and H.K. Henisch: 'On the width of Schottky barriers', Solid states electronics, Vol 25, N°2, pp:137-139, 1980.
- [14] -M.Okoumo: 'Contribution à la modélisation bidimensionnelle des phénomènes de transport des contacts Schottky. Thèse de 3ème cycle, ENSEEIHT Toulouse, (1988).
- [15] A. Wexler: 'Computation of electromagnetic fields', IEEE, Vol MTT 17, N°8 Aout (1969), pp:416-428.
- [16] J. Vignes: 'Algorithmes numériques: analyse et mise en oeuvre', Tome II, 'Equations et Systèmes non linéaires' Edition Technip, (1980).
- [17] J.P.Pelletier: 'Techniques numériques appliquées au calcul scientifique'
- [18] E. H. Rhoderick: 'Metal Sc contacts' IEE Proc. Vol 129 Pt 1, N°1, pp:1-13, 1982.

