

Optimisation de diodes Schottky pour les applications THz

Thèse de doctorat de l'Université Paris-Saclay
préparée à l'Université Paris-Sud

École doctorale n°575 : Electrical, Optical, Bio : physics and
Engineering (EOBE)
Spécialité de doctorat : électronique et optoélectronique, nano- et
microtechnologies

Thèse présentée et soutenue à Orsay, le 23 octobre 2018, par

Eric Bernuchon

Composition du Jury :

Luca VARANI Professeur des Universités – IES, Montpellier	Rapporteur
Alain MAESTRINI Maître de conférences – Observatoire de Paris, LERMA	Rapporteur
Raymond QUERE Professeur des Universités – XLIM, Limoges	Examineur
Philippe DOLLFUS Directeur de recherche, CNRS – C2N, Orsay	Examineur
Frédéric Aniel Professeur des Universités, Université Paris-Sud – C2N, Orsay	Directeur de thèse

Titre : Optimisation de diodes Schottky pour les applications THz

Mots clés : diode Schottky, THz, modélisation, Monte-Carlo

Résumé : Le domaine du TéraHertz a suscité beaucoup d'intérêt de la part de la communauté scientifique ces dernières années. La diode Schottky constitue la pierre angulaire des circuits de détection, des multiplieurs de fréquence ou encore des mélangeurs dans cette bande de fréquence, notamment grâce à son comportement non-linéaire. Les travaux menés durant cette thèse visent à optimiser les caractéristiques de ce composant pour deux fonctions non-linéaires – la détection et la multiplication de fréquence – celles-ci ayant des facteurs de mérites bien spécifiques. Un même dispositif ne saurait les satisfaire conjointement La non-linéarité capacitive est généralement mise à profit pour la multiplication de fréquence alors que la détection s'appuie sur la non-linéarité résistive associée à la caractéristique statique. Pour réaliser cette optimisation, un code particulière Monte-Carlo (MC) résolvant l'équation de Boltzmann couplée à l'équation de Poisson a été développé.

La diode Schottky est un composant largement contrôlé par l'interface métal/semi-conducteur et la gestion des conditions aux limites constitue une étape clef dans la modélisation du dispositif. Le principe d'exclusion de Pauli doit être considéré pour un semi-conducteur très dopé et une distribution spécifique pour les porteurs injectés du côté du contact ohmique a été optimisée puis utilisée dans la modélisation de la diode. D'autres effets physiques à l'interface métal/semi-conducteur ont été implémentés tels que l'effet tunnel suivant différents degrés de raffinement, le phénomène de force image ou encore l'abaissement de la hauteur de barrière par le champ électrique dû aux états de surface. Cette modélisation MC a permis de déduire un schéma équivalent électrique petit-signal aux fréquences TéraHertz dont les différents paramètres sont ajustés en prenant en compte la déplétion possible du substrat pour des diodes courtes. L'extraction du schéma équivalent peut s'effectuer suivant différentes stratégies : en excitant la diode avec un signal de faible amplitude ou encore à partir de l'étude des densités spectrales associées aux fluctuations de courant et de tension. Les phénomènes physiques pouvant mettre en défaut ce schéma électrique tels que la vitesse de saturation des porteurs ou le phénomène d'ionisation par choc en polarisation inverse sont discutés.

Le recours à un schéma électrique est motivé par une volonté de l'intégrer facilement au cœur d'un circuit pour une fonction spécifique et de l'exploiter avec un logiciel commercial tel que ADS (Advanced Design System) dans une logique d'optimisation. Des simulations de type « Harmonic Balance » ont été menées afin d'étudier le rendement d'un circuit de détection et d'un multiplieur de fréquence pour dégager les caractéristiques optimales de la diode sur chacun de ces circuits. Le GaAs est souvent un semi-conducteur de choix pour la réalisation de circuits aux fréquences TéraHertz grâce à sa maturité technologique et à sa haute mobilité électronique. D'autres semi-conducteurs tels que l'InGaAs, le GaSb ou encore le GaN sont également étudiés. Une diode avec un couple métal/semi-conducteur présentant une faible hauteur de barrière donne les meilleurs rendements de conversion pour la détection. Pour le multiplieur de fréquence, il existe un dopage optimal en fonction de la longueur de la couche active permettant de maximiser le rendement du circuit.

Title : Optimization of Schottky diodes for THz applications

Keywords : Schottky diode, THz, modeling, Monte-Carlo

Abstract : The terahertz field has generated significant interest from the scientific community in recent years. The Schottky diode is the cornerstone of detection circuits, frequency multipliers or mixers in this frequency band, thanks to its non-linear behavior. The work carried out during this thesis aims at optimizing the characteristics of this component for two non-linear functions - detection and frequency multiplication - these having very specific figures of merit. The same device can not satisfy them together. Capacitive non-linearity is generally used for frequency multiplication while the detection is based on the resistive non-linearity associated with the current-voltage characteristic. To achieve this optimization, a Monte Carlo (MC) particle code solving the Boltzmann transport equation coupled to the Poisson equation was developed.

The Schottky diode is a component essentially controlled by the metal / semiconductor interface and the boundary conditions are a key step in the device modeling. The Pauli exclusion principle must be considered for a highly doped semiconductor and a specific distribution for the carriers injected on the ohmic contact side has been optimized and then used in the diode modeling. Other physical effects at the metal / semiconductor interface have been implemented, such as tunneling following different degrees of refinement, image force barrier lowering or the barrier height lowering by the electric field due to surface states. A small-signal equivalent circuit at Terahertz frequencies was deduced from the MC modeling. The parameters of this circuit are adjusted by taking into account the possible depletion of the substrate for short diodes. The extraction of the equivalent circuit can be carried out according to different strategies: exciting the diode with a low amplitude signal or studying the spectral densities associated with the current and voltage fluctuations. The physical phenomena that can make the equivalent circuit defective, such as the saturation velocity of carriers or the impact ionization at reverse bias, are discussed.

An electrical circuit of the diode was used to be easily integrated into a global circuit for a specific function and exploit it in a commercial software such as ADS (Advanced Design System). Harmonic balance simulations were conducted to study the performance of a detection circuit and a frequency multiplier to reach the optimal characteristics of the diode on each of these circuits. GaAs is often a semiconductor of choice for the design of circuits at Terahertz frequencies thanks to its technological maturity and its high electronic mobility. Other semiconductors such as InGaAs, GaSb or GaN are also investigated. A diode with a metal / semiconductor couple having a low barrier height gives the best conversion efficiencies for detection. For the frequency multiplier, there is an optimal doping as a function of the active layer length which maximize the circuit efficiency.

REMERCIEMENTS

Je tiens à exprimer toute ma reconnaissance à mon directeur de thèse Frédéric Aniel. Sa culture, sa patience, sa disponibilité, sa force de proposition et l'ensemble de nos échanges ont permis que cette thèse se passe dans de bonnes conditions. Je le remercie de m'avoir encadré, orienté, aidé et conseillé pendant ces trois années.

J'adresse mes plus vifs remerciements à Monsieur Varani et à Monsieur Maestrini d'avoir accepté d'être rapporteurs sur cette thèse.

Je tiens également à remercier Monsieur Dollfus et Monsieur Quere pour l'intérêt qu'ils portent à mon travail en participant en tant qu'examineur au jury de cette thèse.

Je remercie toutes les personnes de l'équipe : Anne-Sophie Grimault, notamment pour son aide dans l'ensemble des tâches que j'affectionne particulièrement et Nicolas Zerounian pour ces diverses explications sur les logiciels de simulation utilisés pendant la thèse.

Je souhaite aussi remercier Ugo Ducournau, stagiaire dans l'équipe de recherche, pour toutes les simulations qu'il a lancées et sur lesquelles j'ai pu largement m'appuyer pour rédiger une partie de ce manuscrit. J'espère qu'il a pu acquérir des connaissances, que ce soit sur la partie physique ou sur l'utilisation des logiciels.

Enfin, je dédie cette thèse à mes amis et à ma famille qui m'ont toujours soutenu et encouragé pendant ces trois années.

Table des matières

Chapitre I – Etat de l’art de la diode Schottky au THz.....	1
I. Contextualisation de la thèse	1
II. Etat de l’art de la diode Schottky.....	3
1. La diode Schottky, un composant incontournable	3
2. Etat de l’art de la diode Schottky pour les applications THz.....	6
3. Comparaison avec d’autres dispositifs	10
III. Modélisation physique de la diode Schottky.....	17
1. Introduction.....	17
2. Les modèles déterministes simplifiés.....	18
3. Résolution de l’équation de Boltzmann : stochastique et déterministe.....	20
4. Quelques éléments sur les modèles quantiques	22
IV. Objectif et composition du manuscrit	24
Chapitre II – Modélisation de la diode Schottky : de la modélisation Monte Carlo à la modélisation électrique	31
I. Modélisation Monte Carlo de la diode Schottky.....	32
1. Description générale du simulateur MC	32
2. Conditions aux limites.....	35
3. Principe d’exclusion de Pauli.....	40
4. Interface métal/semi-conducteur.....	47
5. Algorithme de fusion/division des particules	57
6. Ionisation par choc	60
II. Modélisation électrique de la diode Schottky au THz	72
1. Modélisation électrique de la diode Schottky.....	73
2. Extraction à partir des caractéristiques statiques pour le modèle BF.....	76
3. Réponse en courant à différents types d’excitation.....	78
III. Amélioration des lois non linéaires du modèle	88
1. Confrontation avec le modèle analytique	88
2. Domaines de validité du modèle	101
3. Vitesse des porteurs et fréquence du signal	106
IV. Conclusions	111
Chapitre III – Optimisation de la diode Schottky pour la multiplication de fréquence	125
I. Introduction.....	125
II. Principe de la multiplication de fréquence	126
1. Généralités sur la multiplication de fréquence.....	126
2. Facteurs de mérite pour la multiplication de fréquence	127

3.	Approche analytique.....	128
4.	Description du doubleur de fréquence.....	130
III.	Optimisation de la diode Schottky pour le doubleur de fréquence.....	132
1.	Eléments à optimiser	132
2.	Stratégies d'optimisation de la diode Schottky.....	134
3.	Optimisation de la diode Schottky avec un profil de dopage constant	138
4.	Modification du profil de dopage.....	148
IV.	Conclusions	151
Chapitre IV – Optimisation de la diode Schottky pour la rectification		157
I.	Introduction.....	157
II.	Principe de la rectification.....	158
1.	La rectification	158
2.	Facteurs de mérite pour la rectification	160
3.	Description du circuit de rectification	162
III.	Optimisation de la diode Schottky pour la détection	164
1.	Eléments à optimiser	164
2.	Optimisation.....	165
3.	Modification de la géométrie de la jonction métal/SC.....	175
IV.	Conclusions	178
Chapitre V – Conclusion et perspectives.....		181

LISTE DES NOTATIONS

Notation	Unité	Description
A^*	$A.m^{-2}.K^{-2}$	Constante de Richardson
α_T	eV^{-1}	Coefficient de non-parabolicité en vallée Γ
C_d	F	Capacité de déplétion
C_{j0}	F	Capacité de jonction à polarisation nulle
C_N	F	Capacité modélisant le courant de déplacement dans la zone N
C_{N^+}	F	Capacité modélisant le courant de déplacement dans la zone N^+
Δt	s	Pas temporel
Δx	m	Pas spatial
D_n	$m^2.s^{-1}$	Coefficient de diffusion des électrons
ε	J	Energie référencée par rapport au bas de la bande de conduction
ε_0	$F.m^{-1}$	Permittivité du vide
ε_r	$F.m^{-1}$	Permittivité relative du semi-conducteur
ε_{sc}	$F.m^{-1}$	Permittivité du semi-conducteur telle que $\varepsilon_{sc} = \varepsilon_r \varepsilon_0$
E	J	Energie des électrons
E_c	J	Energie de la bande de conduction
E_{Fn}	J	Niveau de Fermi pour les électrons
epp	m^{-2}	Equivalent Porteurs Particules
F	$V.m^{-1}$	Champ électrique
F_{max}	$V.m^{-1}$	Champ électrique maximal
$F_{1/2}$	\emptyset	Intégrale de Fermi-Dirac
h	J.s	Constante de Planck
\hbar	J.s	Constante de Planck réduite telle que $\hbar = h / (2\pi)$
I_0	\emptyset	Fonction de Bessel modifiée de première espèce d'ordre 0
I_s	A	Courant de saturation
$J_{m \rightarrow sc}$	$A.m^{-2}$	Densité de courant due aux électrons provenant du métal
$J_{sc \rightarrow m}$	$A.m^{-2}$	Densité de courant due aux électrons provenant du semi-conducteur
k_B	$J.K^{-1}$	Constante de Boltzmann
ℓ_N	m	Longueur de la zone N
ℓ_{N^+}	m	Longueur de la zone N^+
ℓ_{tot}	m	Longueur totale de la structure telle que $\ell_{tot} = \ell_N + \ell_{N^+}$
L_N	H	Inductance modélisant l'effet inertiel des porteurs dans la zone N

L_{N^+}	H	Inductance modélisant l'effet inertiel des porteurs dans la zone N^+
m_0	kg	Masse des électrons
m_m^*	kg	Masse des électrons dans le métal
m_{sc}^*	kg	Masse des électrons dans le semi-conducteur en vallée Γ
μ_N	$m^2 \cdot V^{-1} \cdot s^{-1}$	Mobilité des électrons à faible champ dans la zone N
μ_{N^+}	$m^2 \cdot V^{-1} \cdot s^{-1}$	Mobilité des électrons à faible champ dans la zone N^+
N_c	m^{-3}	Densité d'états électroniques effective du bas de la bande de conduction
N_d	m^{-3}	Dopage associé à la zone N
N_d^+	m^{-3}	Dopage associé à la zone N^+
ϕ_{bn}	V	Barrière de potentielle vue par les électrons du métal
q	C	Charge élémentaire de l'électron
R_d	Ω	Résistance dynamique telle que $R_d = (dI(V)/dV)^{-1}$
R_N	Ω	Résistance de la zone quasi-neutre dans la zone N
R_{N^+}	Ω	Résistance de la zone N^+
R_s	Ω	Résistance série du schéma équivalent basse-fréquence
T	K	Température électronique
V_{bi}	V	Barrière de potentiel vue par les électrons du semi-conducteur à polarisation nulle (<i>built-in potential</i>)
V_d	V	Barrière de potentiel vue par les électrons du semi-conducteur
V_t	V	Tension thermique telle que $V_t = k_B T / q$
W	m	Longueur de la zone de charge d'espace
W_0	\emptyset	Fonction de Lambert définie sur l'intervalle $[-1/e ; +\infty[$ à valeurs réelles supérieures ou égales à -1 .
W_{-1}	\emptyset	Fonction de Lambert définie sur l'intervalle $[-1/e ; 0[$ à valeurs réelles inférieures ou égales à -1 .

LISTE DES ACRONYMES

ADS	Advanced Design System
APS	Analyse Petit Signal
BC	Bande de Conduction
BF	Basse Fréquence
DD	Dérive-Diffusion
DSP	Densité Spectrale de Puissance
FDTD	<i>Finite-Difference Time-Domain</i> (différences finies dans le domaine temporel)
FI	Force Image
GaAs	Arséniure de Gallium
GaN	Nitride de Gallium
GaSb	Antimoniure de Gallium
HB	Harmonic Balance
HD	Hydrodynamique
HF	Haute Fréquence
IGS	<i>Induced Gap States</i> (états induits dans le gap)
InGaAs	Arséniure de Gallium-Indium
IPC	Ionisation Par Choc
LF	Lugli et Ferry
MC	Monte Carlo
M-SC	Métal-Semi-Conducteur
PEP	Principe d'Exclusion de Pauli
SC	Semi-Conducteur
SE	Schéma équivalent
SHE	<i>Spherical Harmonics Expansion</i> (expansion en harmoniques sphériques)
WKB	Wentzel Kramers Brillouin
ZCE	Zone de Charge d'Espace
ZQN	Zone Quasi Neutre

CHAPITRE I

ÉTAT DE L'ART DE LA DIODE SCHOTTKY AU THz

I. Contextualisation de la thèse

Le domaine du Terahertz est une gamme de fréquence qui se situe entre les micro-ondes et l'infrarouge du spectre électromagnétique, entre 300 GHz et 30 THz, à la frontière entre l'électronique et l'optique (figure I-I.1). Cette bande de fréquence n'est plus hors de portée des composants opto-électroniques ou des composants nano-électroniques très hautes fréquences. L'efficacité de tels composants comble progressivement la frontière entre l'électronique et l'optique.

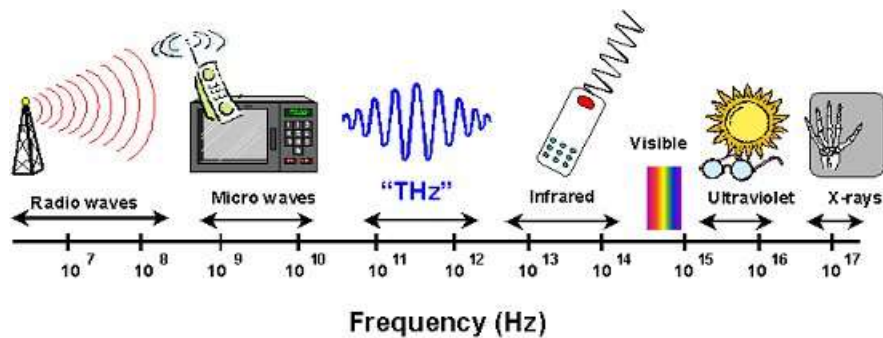


Figure I-I.1 – Le spectre électromagnétique des radiofréquences jusqu’aux rayons X

Les applications nécessitant des composants électroniques dans la gamme THz sont nombreuses, que ce soit dans le domaine des télécoms (futurs réseaux sans fils et à haut débit, à échéance 2030 environ – 6G, communications à courte distance, radars), en imagerie (médecine, biologie, inspection des matériaux, dispositifs ou systèmes de sécurité, fraude), ou en spectroscopie (chimie, contrôle environnemental, astronomie). Ces deux derniers types d’applications sont détaillés dans les paragraphes suivants.

- **Applications de l’imagerie THz**

De nombreux matériaux opaques dans le visible sont transparents aux rayons THz, ce qui permet la réalisation de systèmes d’imagerie dans le domaine de la sécurité [Fed05a], [Fed05b]. D’autre part des applications médicales sont en train de voir le jour [Mai08], tout particulièrement pour la discrimination de cellules cancéreuses [Shi14], [Woo03], [Fit06]. Il est aussi possible de faire du contrôle qualité par imagerie THz, particulièrement dans

l'industrie pharmaceutique et la microélectronique : des appareils permettant une telle utilisation sont déjà commercialisés (Teraview et Tetechs).

- **Applications de la spectroscopie THz**

Le domaine THz est particulièrement intéressant pour la spectroscopie car de nombreuses protéines ont des énergies de rotation et de vibration se trouvant dans cette gamme de fréquence. La spectroscopie THz offre ainsi de nombreuses possibilités dans la recherche, particulièrement biomédicale. Elle a déjà été utilisée pour étudier la dénaturation d'un gène [Mar00] ou déterminer la conformation de protéines [Cas08]. Elle peut aussi servir à déterminer la mobilité dans des semiconducteurs [Coo06]. La spectroscopie THz est également utilisée depuis longtemps par les astrophysiciens [Sta11]. Dans le domaine industriel, elle peut avantageusement être associée à de l'imagerie (imagerie multi-spectrale) pour des applications dans la reconnaissance de substances chimiques, ce qui peut aussi être d'une grande utilité dans la sécurité [She05], [Fis05].

La diode Schottky, composant au cœur de cette thèse, constitue un élément essentiel dans la gamme de fréquence THz, notamment dans les sciences de l'atmosphère, des planètes ou encore en astrophysique. Dans le cadre de la mission d'exploration JUICE (Jupiter ICy moons Explorer) [JUI13] de l'ESA (European Spatial Agency), un instrument hétérodyne submillimétrique a été proposé par un consortium international afin d'explorer l'atmosphère de Jupiter et de deux de ses lunes, Europe et Ganymède (figure I-I.1). Il doit comporter deux canaux couvrant [520 – 630] GHz et [1080 – 1280] GHz. Les diodes Schottky constituent la pierre angulaire de cet instrument, que ce soit pour réaliser le mélangeur [Mae16] ou la source THz de l'oscillateur local pour chacun des canaux [Tre14].

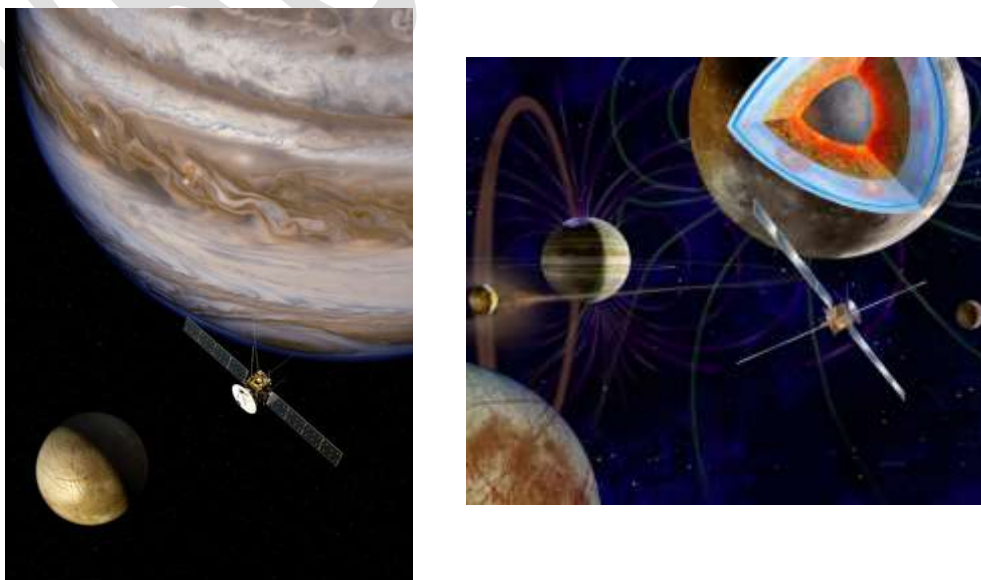


Figure I-I.1 – Mission d'exploration JUICE

II. Etat de l'art de la diode Schottky

1. La diode Schottky, un composant incontournable

a. Historique

Datant de la fin du 19^{ème} siècle, la diode Schottky constitue probablement un des plus vieux composants électroniques connus. Bien que sous une forme différente aujourd'hui, elle est encore présente dans de nombreuses applications en passant de l'électronique de puissance jusqu'à l'électronique haute-fréquence.

Son histoire remonte en 1874 lorsque Karl Ferdinand Braun mis en contact un fil métallique et un cristal de galène, créant ainsi une diode capable de « redresser » le courant alternatif. Cependant, il n'y prêta pas plus attention car aucune application pratique ne pouvait *a priori* en découler mais cette découverte fut en réalité le point de départ de l'électronique à semi-conducteurs. Ce système est utilisé à partir du début du XX^e siècle comme élément de détection du signal radio dans les récepteurs à galène.

En 1906, un détecteur de type « cat whisker » a été breveté par Pickard [Pic06], un des premiers chercheurs en radio. Cette diode était composée d'un fin fil métallique qui reposait légèrement sur un cristal de silicium. Dans le cadre d'un récepteur radio, il fallait tâtonner, en déplaçant la pointe, pour obtenir la meilleure réception. Ces diodes à pointe ont été utilisées en tant que détecteurs pour recevoir des signaux radio et radar. Elles possèdent une capacité et une tension de seuil très faibles.

Mais ce n'est en fait qu'en 1938 que le physicien Walter Schottky découvrit qu'une barrière de potentiel s'établissait à l'interface entre un métal et un semi-conducteur [Sch39]. Aujourd'hui, la structure de base d'une diode Schottky repose sur deux contacts métal/SC (figure I-II.1.1) :

- un contact entre un métal et un semi-conducteur peu ou moyennement dopé pour réaliser le contact Schottky. C'est ce contact qui joue le rôle du contact redresseur et qui permet d'obtenir une caractéristique courant-tension non-linéaire.
- un contact entre un métal et un semi-conducteur fortement dopé (typiquement $5 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ sur GaAs) pour réaliser le contact ohmique.

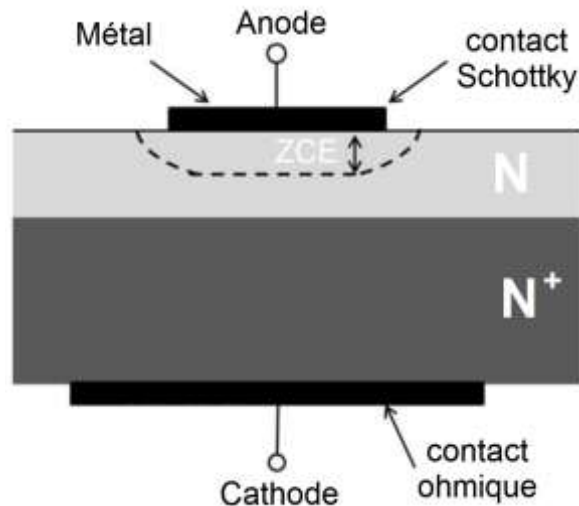


Figure I-II.1.1 - Coupe schématique d'une diode Schottky

Le déplacement des porteurs majoritaires et l'absence de capacité de diffusion dans la diode Schottky contrairement à une diode PN la rendent performante pour des applications fonctionnant à très haute fréquence. En revanche, son courant en inverse est plus élevé et sa tension de claquage plus faible que ceux de diodes varactor (jonction PN).

b. Les applications de puissance

L'électronique de puissance, plutôt orientée vers la gestion de l'énergie, occupe désormais une place prépondérante dans les systèmes. Les diodes Schottky sont très utilisées pour des applications de forte puissance en tant que diodes de redressement. On les retrouve aussi comme diodes de roue libre en parallèle des transistors fonctionnant en commutation pour piloter des machines tournantes (en fonctionnement moteur ou génératrice) par exemple. Leurs avantages par rapport aux diodes P-N classiques sont d'avoir des temps de commutation très courts et des pertes bien plus faibles. Traditionnellement, ces diodes sont fabriquées en technologie silicium car il s'agit d'une technologie mature et fiable. Ces dernières années, d'autres semi-conducteurs à large bande interdite ont été étudiés pour obtenir des composants à faible consommation d'énergie. Ceux-ci possèdent des propriétés particulièrement adaptées à la tenue de hautes tensions ou au travail à haute température : le carbure de silicium (SiC) [Ozp03], le nitrure de galium (GaN) [Zha01] [Sun10] et le diamant [Eon16] sont les semi-conducteurs les plus en vue pour succéder au silicium.

On retrouve également ces diodes dans les cellules photovoltaïques. Elles permettent de court-circuiter les cellules ombragées. Ces diodes dites « bypass », associées généralement à des réseaux de plusieurs cellules photovoltaïques au sein d'un même panneau, permettent au courant de circuler en isolant la cellule ombragée afin d'éviter les baisses de production.

c. Les applications HF

Physiquement, une diode Schottky est une diode qui a un seuil de tension directe très bas et un temps de commutation très court. Ceci permet la détection de faibles signaux HF et hyperfréquences. Le déplacement des porteurs majoritaires et l'absence de capacité de diffusion dans la diode Schottky contrairement à une diode PN la rend également performante pour des applications fonctionnant à ces fréquences.

Elle peut être utilisée pour réaliser de la détection directe (i.e. la conversion d'un signal HF en signal continu ou BF) ou encore de la détection hétérodyne (i.e. le déplacement d'un contenu spectral HF à basse fréquence). La non-linéarité associée à la capacité de déplétion fait de la diode Schottky un bon candidat pour être utilisée en varactor pour des applications de multiplication de fréquence : lorsque celle-ci est polarisée en inverse, elle se comporte essentiellement comme une capacité non-linéaire. Des diodes Schottky sur GaAs sont plus adaptées que des diodes PN sur silicium pour des ondes millimétriques et submillimétriques car elles possèdent un meilleur facteur de qualité Q due entre autres à une capacité plus faible [Maa03]. Ces applications seront davantage décrites dans la section I-II.2.

d. Fabrication des diodes Schottky pour le THz

La fabrication des diodes Schottky a considérablement évolué jusqu'à aujourd'hui. On retrouve principalement deux types de structure : les structures planaires et les structures verticales. Sur une structure planaire, le contact Schottky et le contact ohmique sont situés sur la même face. Ce type de technologie est relativement simple car une seule face du wafer est traitée. Néanmoins, plusieurs effets indésirables peuvent apparaître comme la distribution non uniforme de la densité de courant au niveau de la zone de contact [Car15]. Les structures verticales permettent d'avoir une distribution uniforme de la densité de courant au prix d'une complexité plus élevée puisque cela implique un amincissement ou une élimination complète du substrat.

Les diodes Schottky avec des contacts « whiskers » représentent la première génération de diodes à structure verticale pour les applications millimétriques. Certaines de ces diodes ont montré des bonnes performances au THz [Hub97] [Kur02]. Dans un souci d'intégration, et grâce au progrès de la nanotechnologie à base de semi-conducteurs, les diodes Schottky avec des contacts whiskers ont été peu à peu remplacées par des technologies planaires plus robustes, permettant également une intégration de plusieurs anodes sur une même puce. Bien que les éléments parasites ne soient pas aussi faibles qu'avec les diodes whiskers, des niveaux acceptables ont été atteints, notamment en utilisant des ponts à air comme illustré sur la figure I-II.1.2.

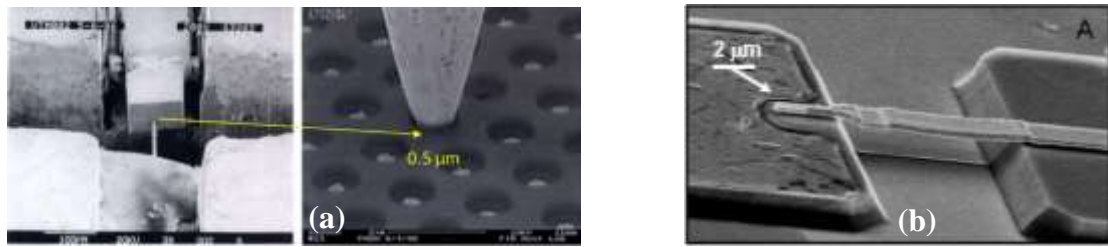


Figure I-II.1.2 – (a) Image d'un microscope électronique à balayage de diodes avec des contacts « whisker » qui étaient utilisés pour le développement de sources THz à base de diodes Schottky [Cha11] (b) Diode planaire avec pont à air.

Cette section n'est pas exhaustive car aucune fabrication de diodes Schottky n'a été entreprise durant la thèse. L'article [Meh17] décrit notamment les procédés technologiques dédiés à la fabrication de diodes Schottky planaires et quasi-verticales pour le THz.

2. Etat de l'art de la diode Schottky pour les applications THz

Les trois applications majeures de la diode Schottky pour les applications THz sont la multiplication de fréquence pour la réalisation de sources THz, la détection directe et la détection hétérodyne. Commençons par la multiplication de fréquence.

Multiplication de fréquence

Ces dernières années, de gros progrès ont été fait dans le développement de sources THz utilisant des multiplieurs de fréquences basés sur des diodes Schottky GaAs. La fréquence du signal d'entrée (typiquement quelques dizaines de GHz) est multipliée puis amplifiée pour générer le signal à la sortie de l'oscillateur local. Le signal d'entrée peut être généré par une diode Gunn ou un synthétiseur de fréquence.

Ces sources sont généralement composées de plusieurs étages. Prenons pour exemple une source à 264 GHz fabriquée chez Virginia Diodes [Hes15] avec une puissance « peak » en sortie de 90 mW. En ajoutant un tripleur de fréquence à la sortie de cette source, une puissance de 1 mW pour une fréquence de 790 GHz a été atteinte. En cascadant deux tripleurs, quelques microwatts de puissances peuvent être générés à 3 THz.

Les diodes Schottky peuvent fonctionner aussi bien à température ambiante qu'à des températures cryogéniques avec des performances accrues [Mae00]. À température ambiante, voici quelques données à l'état de l'art des multiplieurs de fréquences au THz : une puissance de 48 mW à 300 GHz [Mae08], de 1 mW à 900 GHz [Mae10] et de 18 μ W à 2,75 THz [Mae12].

Détection directe et hétérodyne

On peut distinguer deux types de détection : la détection directe et la détection hétérodyne. Nous allons d'abord développer la détection hétérodyne, technique très répandue dans le domaine de la radioastronomie. Ce type de détection est d'une importance capitale pour la connaissance et l'étude de la physique de l'atmosphère. Elle consiste à recueillir, au moyen d'une antenne des signaux radio haute fréquence, à déplacer leur contenu spectral à basse fréquence, puis à les analyser avec un spectromètre à haute résolution. En effet, les technologies permettant la mesure des micro-ondes sont bien plus développées que dans la bande THz. Un schéma de principe d'une chaîne de détection hétérodyne est présenté en figure I-II.2.1.

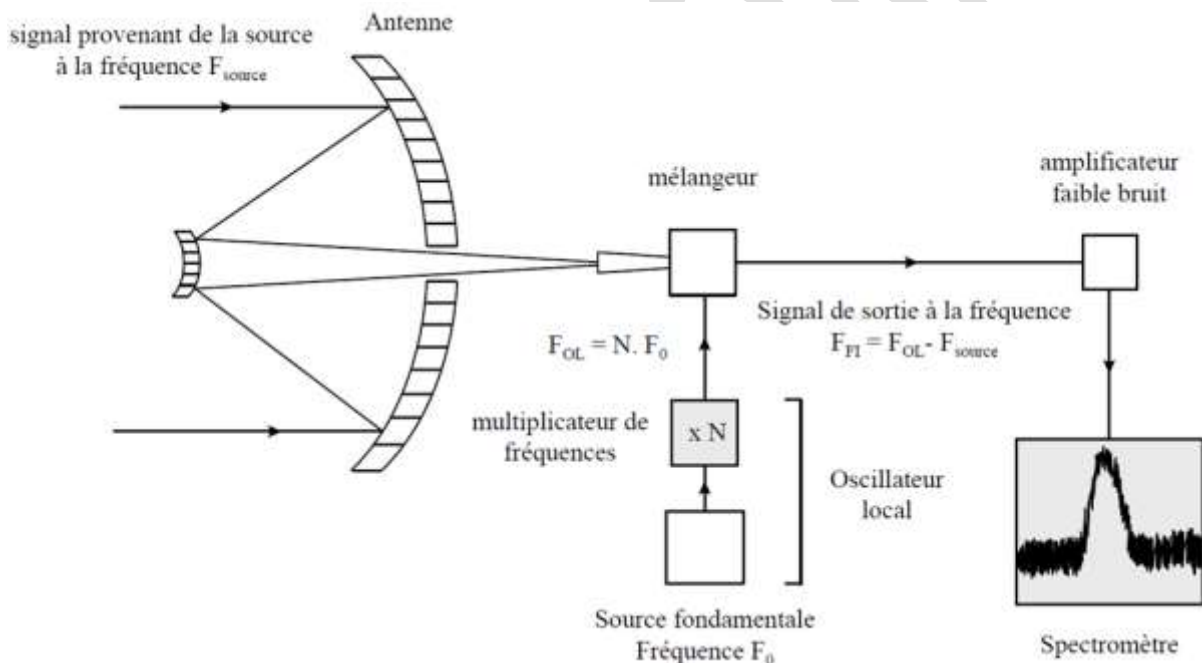


Figure I-II.2.1 – Chaîne de détection hétérodyne [Mae99]

Ce type de de détection permet de réaliser des observations à très haute résolution spectrale avec une très haute sensibilité. La chaîne comprend quatre éléments fondamentaux : un mélangeur (le détecteur), un oscillateur local à partir d'une source cohérente monochromatique de fréquence voisine de celle du signal à observer, une chaîne d'amplification faible bruit à la fréquence intermédiaire pour passer en bande centimétrique généralement et un spectromètre permettant l'analyse du signal FI amplifié. Au cours de la dernière décennie, des progrès importants ont été faits pour la réalisation de récepteurs hétérodynes fonctionnant jusqu'à 4,7 THz.

C'est la diode Schottky qui réalise généralement la fonction de mélangeur du fait de son caractère non-linéaire. Elle permet de transférer l'énergie du signal à une fréquence plus basse par le biais d'un oscillateur local de fréquence très proche du signal à analyser. Une fois le mélange effectué, on retrouve à la sortie la fréquence de l'oscillateur local, la fréquence du signal à analyser, la somme et la différence de ces deux fréquences. C'est la différence des fréquences qui nous intéresse, les autres composantes étant éliminées par filtrage.

Les mélangeurs à base de diodes Schottky peuvent être utilisés de quelques GHz à plusieurs THz et ils possèdent l'avantage principal de pouvoir fonctionner à température ambiante. Cependant, leur sensibilité peut être améliorée en les refroidissant, où ils atteignent leur performance optimale autour de 20 K [Cha04]. Ils ont néanmoins besoin d'être pompé avec un oscillateur local (OL) de forte puissance, de quelques centaines de microwatts jusqu'à quelques milliwatts, ce qui représente leur principale limitation. La puissance de l'OL est généralement choisie pour obtenir la meilleure température de bruit [Mae16]. Les derniers résultats obtenus sur des mélangeurs à base de diodes Schottky conçus et fabriqués par le LERMA ont montré des températures de bruit de 870 K à 557 GHz à température ambiante. En refroidissant le mélangeur à 134 K, la température de bruit a pu être réduite à 200 K [Tre16]. Dans la bande de fréquence entre 1050 et 1280 GHz, l'article [Tho11] obtient une température de bruit comprise entre 4000 et 4500 K à température ambiante.

Les mélangeurs à base de diodes Schottky peuvent aussi être utilisés comme des mélangeurs subharmoniques, c'est-à-dire qu'ils peuvent « mélanger » le signal RF à analyser avec des harmoniques du signal provenant de l'oscillateur local. A titre d'illustration, la figure I-II.2.2 représente une vue 3D du dessus d'un mélangeur ainsi qu'une image au microscope électronique à balayage (MEB) d'une paire de diodes en configuration antiparallèle [Mae16].

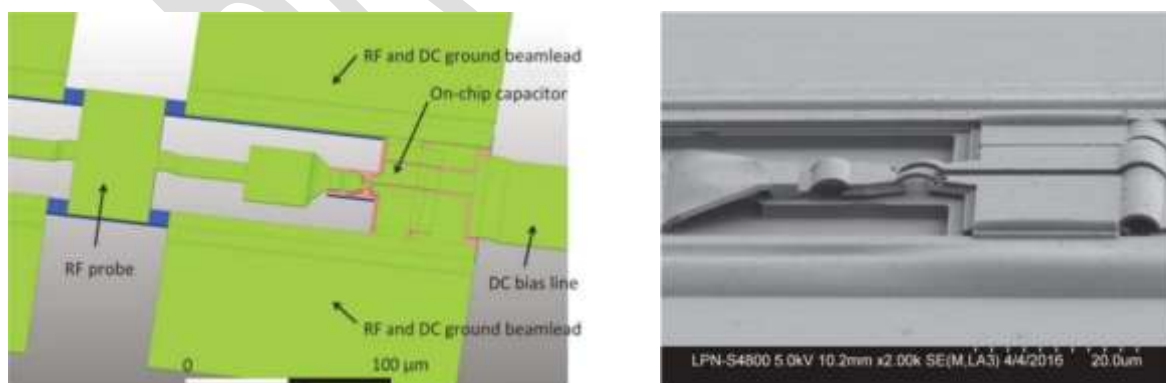


Figure I-II.2.2 – (a) Vue 3D du dessus du mélangeur et (b) image au microscope électronique à balayage d'une paire de diodes en configuration antiparallèle [Mae16]

Le principe de la détection directe est représenté sur la figure I-II.2.3. Un dispositif (diode Schottky par exemple) répond à un faisceau THz en générant un courant ou une tension continue grâce à sa caractéristique $I(V)$ non-linéaire.

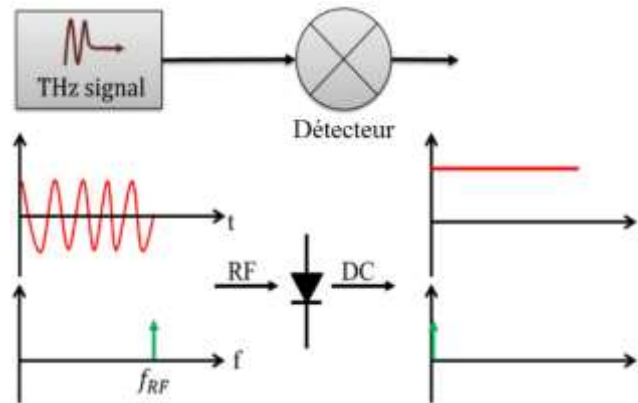


Figure I-II.2.3 – Représentation schématique de la détection directe

Pour la diode Schottky, on évoquera essentiellement la détection à polarisation nulle dans ce manuscrit, ce qui permet de simplifier la conception globale du circuit, de diminuer la puissance consommée et de réduire la contribution du bruit [Car15]. Pour fonctionner de manière optimale dans cette configuration, les caractéristiques de la diode Schottky doivent être choisies avec soin. Afin de pouvoir fonctionner de manière efficace en détection au THz, l'article [Cas11] suggère une résistance dynamique à polarisation nulle d'au plus quelques centaines de $k\Omega$. Voici une description de quelques dispositifs rencontrés dans la littérature et les performances associées.

Une matrice 2×2 de diodes Schottky associée à une antenne patch a été fabriquée dans une technologie CMOS (130 nm). La sensibilité en tension (*voltage responsivity*) de ce dispositif atteint 53 V/W avec une puissance équivalente de bruit égale à $66 \text{ pW}/\sqrt{\text{Hz}}$ à une fréquence de 280 GHz.

Peu d'articles mettent en avant la diode Schottky sur GaAs pour la détection à polarisation nulle. En effet, la sensibilité de la diode Schottky pour la détection serait essentiellement contrôlée par la hauteur de barrière à l'interface métal/SC. La diode doit avoir une hauteur de barrière faible (conduisant à une faible tension de coude) pour diminuer la résistance dynamique à 0V et ainsi améliorer la sensibilité. Plusieurs articles [Han13], [Zin13] ont utilisé l'InGaAs avec une hauteur de barrière autour de 0,2 eV contre 0,9 eV pour GaAs. Dans l'article [Han13], la fabrication d'une matrice 1×20 de diodes Schottky sur InGaAs a conduit à une sensibilité en tension de $98,5 \text{ V/W}$ et d'une puissance équivalente de bruit égale à $106,6 \text{ pW}/\sqrt{\text{Hz}}$ à 250 GHz.

Bien que le GaAs ne soit pas vraiment adapté pour de la rectification à polarisation nulle à cause de sa hauteur de barrière élevée, des diodes Schottky sur GaAs ont été fabriquées pour en modifiant la géométrie de la jonction métal/SC [Cas11] pour obtenir une résistance dynamique de l'ordre de 100 k Ω à polarisation nulle, soit beaucoup plus faible que les diodes GaAs traditionnelles. Le dopage de la couche N, égal à 10¹⁸ cm⁻³, permettrait d'augmenter le courant par effet tunnel en se rapprochant d'un comportement de type ohmique tout en gardant un effet redresseur. La puissance équivalente de bruit à 550 GHz est de 500 pW/ $\sqrt{\text{Hz}}$.

3. Comparaison avec d'autres dispositifs

a. Pour la réalisation de sources THz

Le défi est de réaliser des sources stables et suffisamment puissantes dans la bande de fréquence THz. La figure I-II.3.1 illustre l'état de l'art sur la puissance de sortie de différentes sources THz en fonction de la fréquence.

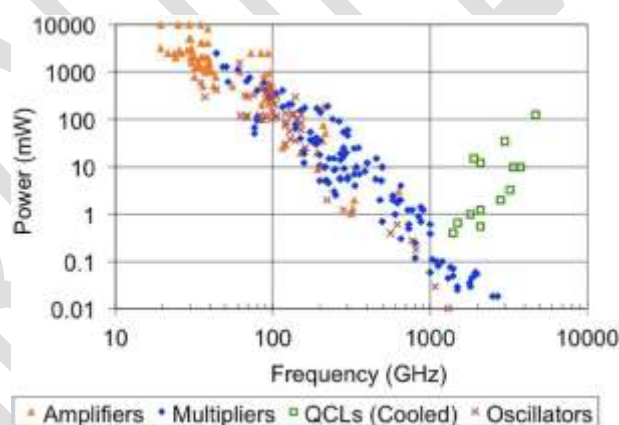


Figure I-II.3.1 – Etat de l'art de la puissance de sortie de différentes sources THz [Hes15]

Entre 3 GHz et 3 THz, les puissances de sortie les plus élevées sont obtenues à partir de multiplieurs de fréquences à base de diodes Schottky en partant d'une source à plus basse fréquence de très forte puissance. D'autres dispositifs à semi-conducteurs tels que la diode HBV (*Heterostructure Barrier Varactor*) peuvent être utilisés. C'est un composant unipolaire constitué d'un matériau à grand gap non-dopé (barrière) intercalée entre deux autres SC à faible gap et dopé N. Contrairement à la diode Schottky où la barrière de potentiel est située à l'interface métal/SC, c'est l'hétérojonction qui joue ici ce rôle. Sa particularité est d'avoir une

caractéristique capacité-tension symétrique lui permettant de ne générer que des harmoniques impairs du signal de pompe. Un tripleur de fréquence composé de trois diodes HBV a permis d'atteindre une puissance de 31 mW à une fréquence de 282 GHz [Vuk12]. L'avantage principal de ce dispositif par rapport aux diodes Schottky est que plusieurs diodes HBV peuvent être empilées par épitaxie [Gol17]. Il peut également être utilisé sans polarisation contrairement à la diode Schottky.

Les lasers à cascade quantique constituent une classe de lasers à semi-conducteurs unipolaires qui mettent à profit les transitions inter-sous-bandes entre états électroniques de plusieurs périodes d'une série de puits quantiques multiples, permettant ainsi le rayonnement d'une certaine longueur d'onde. Ces dispositifs optoélectroniques couvrent la gamme spectrale du THz en utilisant principalement l'association GaAs/AlGaAs. Ils fonctionnent aujourd'hui dans la bande de fréquence 1,2 – 5 THz. Au-dessus de quelques THz, c'est ce dispositif qui permet d'obtenir les meilleurs niveaux de puissance comparés aux sources issues de plusieurs chaînes de multiplication basées sur des diodes Schottky. Le gros inconvénient de ce dispositif est qu'il doit être refroidi à une température cryogénique pour être performant. Ils présentent également de sérieux problèmes avec la stabilité en fréquence, le réglage de la bande passante et le temps de vie [Cha11]. Des QCL à une fréquence de 4,4 THz ont été démontrés avec une puissance crête maximale de 138 mW à une température de 10 K [Wil06]. Certains travaux sur des QCL assistés par un champ magnétique parviennent à émettre dans une bande de fréquence entre 0,68 et 3,33 THz avec des températures de 225 K et un champ de 19,3 T [Wad09]. Un record sur la puissance de sortie a été obtenu en 2016 avec 230 mW en mode continu à une fréquence de 3,11 THz et une température de 15 K [Wan16].

Le photo-mélange peut constituer une alternative intéressante pour générer une onde THz de haute pureté spectrale sur toute la fenêtre du spectre THz. La technique consiste à illuminer une antenne photo-conductive par deux lasers dont la différence de fréquence correspond à la fréquence désirée. Cette technique a l'avantage de fonctionner à température ambiante et est facile d'utilisation. Les photo-mélangeurs ont toutefois des niveaux de puissances modestes comparé à d'autres sources. L'article [Pey13] parvient à une puissance de 1,8 mW à 250 GHz et l'article [Ren08] à une puissance de 24 μ W à 914 GHz.

b. Pour la détection hétérodyne

Pour la détection hétérodyne, trois dispositifs sont principalement utilisés : les diodes à jonction tunnel Supraconducteur-Isolant-Supraconducteur (SIS), les bolomètres à électrons chauds (HEB : *Hot Electron Bolometer*) et les diodes Schottky. Plusieurs paramètres sont à

prendre en compte pour le choix du dispositif suivant la configuration : la nécessité ou non de le refroidir, la sensibilité souhaitée pour l'application visée, la fréquence de travail et la puissance disponible de l'oscillateur local. La figure I-II.3.2 représente une comparaison des températures de bruit de ces trois dispositifs en fonction de la fréquence [Cha08].

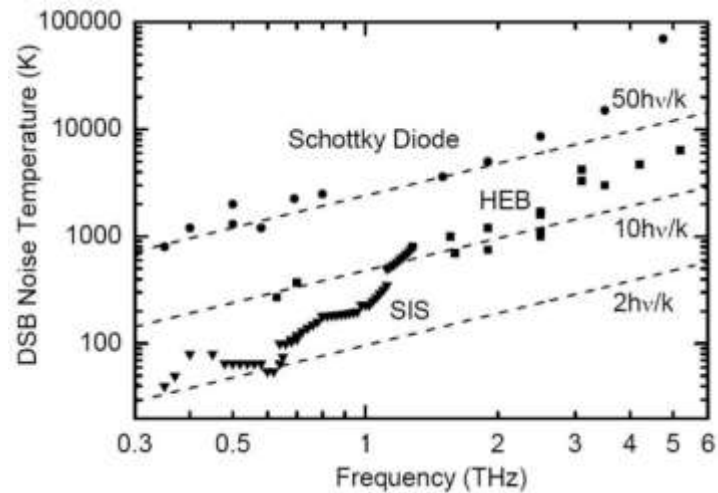


Figure I-II.3.2 – Température de bruit DSB pour les mélangeurs à base de jonctions SIS, de HEB et de diodes Schottky. Les lignes en pointillé représentent trois multiples des limites du bruit quantique ($2 \times$, $10 \times$ et $50 \times$) [Cha08]

Les jonctions SIS possèdent une excellente température de bruit (de 85 K à 500 GHz [Cha04]) mais ils ont besoin d'être refroidi à une température de 4 K avec de l'hélium liquide. La puissance de l'oscillateur local est de l'ordre de quelques microwatts. Ces dispositifs sont utilisés en dessous de 1 THz dans certains télescopes submillimétriques tels que NOEMA [Mai14] ou ALMA [Gra11].

Le bolomètre à électrons chauds est aujourd'hui le dispositif le plus sensible pour les fréquences supérieures à 1,3 THz [Cha08]. Il s'agit d'un détecteur thermique de rayonnement électromagnétique dont la très forte non-linéarité de la résistivité en fonction de la température lui permet d'atteindre de hautes sensibilités. Ces dispositifs ont besoin d'être refroidi à 4 K et peuvent avoir une bande passante de 3 à 4 GHz. Leur température de bruit est meilleure que celle des mélangeurs à diodes Schottky avec environ 1200 K entre 1,4 THz et 1,9 THz pour l'instrument hétérodyne HIFI [Gra04]. Ils ne nécessitent pas une forte puissance sur l'oscillateur local (environ 1-100 nW), c'est-à-dire beaucoup moins que les mélangeurs à diodes Schottky ou à SIS. Ils constituent donc une bonne alternative au-dessus de 1,3 THz quand une grande sensibilité est nécessaire où que la puissance disponible sur l'oscillateur local est faible. Mais il faut un circuit pour sélectionner les longueurs d'ondes et identifier la fréquence et les bolomètres sont lents.

Aujourd'hui, les mélangeurs à base de diodes Schottky sont principalement utilisés pour analyser l'atmosphère autour des planètes où la sensibilité des SIS ou des HEB n'est pas nécessaire. Pour ce type de missions, leur température de fonctionnement plus élevée est un gros avantage puisqu'ils ne nécessitent pas d'être refroidi. La puissance de l'oscillateur local est de l'ordre du mW pour cette technologie.

c. Pour la détection directe

Pour la détection directe, on peut distinguer principalement deux types de détecteurs : les détecteurs de champ et les détecteurs thermiques [Car15]. Ils permettent de convertir directement un rayonnement THz en un signal continu ou BF. Les détecteurs de champ tels que les diodes Schottky répondent à un champ électrique THz et génèrent en sortie une tension ou un courant à travers un terme quadratique dans leur caractéristique statique courant/tension : on parle aussi de « rectification ». Les détecteurs thermiques sont des dispositifs ayant un élément pouvant absorber une onde THz couplé à un transducteur sensible à la température.

Lorsque le transducteur est une thermistance, c'est-à-dire que sa résistance varie avec la température, le détecteur est un bolomètre. Ces détecteurs sont très répandus jusque dans l'infrarouge. Ils ont une bonne détectivité et un niveau de bruit plutôt faible, mais il est nécessaire pour cela de les refroidir à l'hélium liquide.

Lorsque le transducteur est une capacité dépendant de la température basée sur la pyroélectricité, le détecteur est dit pyroélectrique. Il est composé d'un cristal dont la polarisation varie avec la température. Ce capteur très sensible ne peut mesurer que les variations de signal, car c'est la variation de température qui crée un courant.

La cellule de Golay [Gol47] permet également de faire de la détection directe. Elle est constituée d'une chambre contenant du gaz, une des parois de cette chambre étant une membrane surmontée d'un réflecteur. L'élévation de température provoque la dilatation du gaz et donc le mouvement de la membrane, qui est mesuré à l'aide de la réflexion d'un signal optique vers une diode quatre quadrants. L'inconvénient de ce capteur est sa grande sensibilité aux signaux parasites et le fait qu'il ne soit pas intégrable sur une puce.

Le livre [Car15] propose une comparaison assez complète sur ces différents détecteurs. La figure I-II.3.3, extraite de ce livre, représente la puissance équivalente de bruit de différents détecteurs autour de 600 GHz.

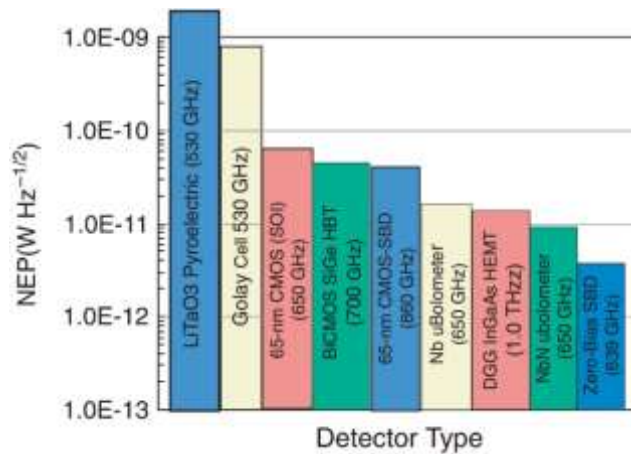


Figure I-II.3.3 – Puissance équivalente de bruit (*Noise Equivalent Power* – NEP) pour différents types de détecteur à une fréquence autour de 600 GHz [Car15]

Les diodes Schottky non polarisées (Zero Bias Schottky Barrier Diode – SBD) semblent avoir les meilleures performances en bruit avec une puissance équivalente de bruit de l'ordre de quelques $\text{pW}/\sqrt{\text{Hz}}$. Ces diodes sont fabriquées chez Virginia Diodes.

D'autres dispositifs sont présents sur la figure tels que les transistors à haute mobilité électronique (*HEMT*: *High Electron mobility transistor*) ou les transistors MOS. Ces détecteurs possèdent des mécanismes de détection basés sur des effets plasma et de la rectification dans le canal où se trouve un gaz bidimensionnel d'électrons.

Des détecteurs de champ autres que la diode Schottky peuvent également être utilisés tels que le dispositif auto-commutant (communément appelé SSD – *Self-Switching Device*) [Son03], la diode Métal/Isolant/Métal (MIM) ou encore la diode géométrique [Bha17]. Les performances de ces détecteurs sont liées à la non-linéarité de la caractéristique statique courant-tension.

En 2003, A. M. Song et al. [Son03] proposent un nouveau type de dispositif électronique ayant une caractéristique $I(V)$ non-linéaire semblable à celle d'une diode Schottky conventionnelle. Comme illustré sur la figure I-II.3.4, deux tranchées isolantes renferment entre elles un canal conducteur de type N qui fait quelques dizaines de nanomètres. La prolongation de ces tranchées jusqu'aux bords du substrat oblige le courant à passer uniquement par le canal nanométrique. Le premier SDD a été fabriqué sur InGaAs [Son03], puis d'autres matériaux ont également été étudiés tels que le GaAs pour de la détection à température ambiante jusqu'à 1,5 THz [Bal11], le ZnO [Irs11], le GaN [San13] ou plus récemment l'InAs [Wes13] qui possède une mobilité électronique plus élevée. Sur GaN, une

sensibilité en tension de 100 V/W avec une puissance équivalente de bruit égale à 280 pW/ $\sqrt{\text{Hz}}$ à 300 GHz.

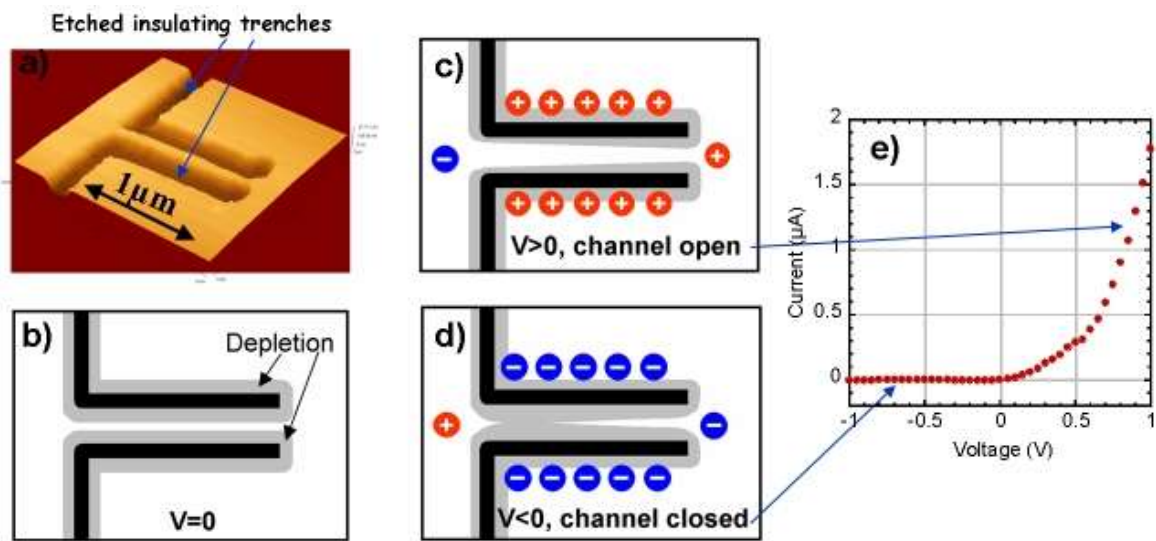


Figure I-II.3.4 – Représentation d’une diode auto-commutante, de son comportement suivant la tension à ses bornes et de sa caractéristique statique [Son03]

Les diodes MIM sont constituées d’une couche mince d’isolant de quelques nanomètres entre deux métaux. L’efficacité du détecteur est fortement dépendante de plusieurs paramètres physiques : les métaux déposés sur chacun des contacts qui vont déterminer la hauteur de barrière suivant l’isolant utilisé et l’épaisseur de la barrière. La surface de tels diodes peut varier entre quelques μm^2 et quelques centaines de μm^2 suivant la fréquence de travail. C’est l’effet tunnel des électrons à travers l’isolant qui permet d’avoir une caractéristique statique non-linéaire. Il reste plusieurs défis à relever sur les procédés de fabrication, notamment due à l’épaisseur de l’isolant, typiquement inférieure à 3 nm [Sil17]. En effet, le contrôle de l’épaisseur de la couche d’isolant est essentiel car elle contrôle le courant qui traverse la diode. Ces diodes ont des fréquences de coupure supérieures à 30 THz [Bha17].

La diode géométrique est un dispositif assez récent. Un brevet a d’ailleurs été déposé en 2009 [Mod09]. Quelques articles sont apparus quelques années plus tard [Mod12], [Zhu13]. Ces dispositifs sont surtout dédiés pour la récupération d’énergie solaire en les couplant à une antenne pour former une *rectenna*. La géométrie particulière de la diode fait qu’elle privilégie un certain mouvement des porteurs dans la direction définie par sa géométrie. Sa structure asymétrique force les porteurs à suivre une direction privilégiée. Une représentation est donnée sur la figure I-II.3.5 à titre d’illustration. Ce type de diode serait capable de convertir un signal AC de quelques THz à 1000 THz en signal continu [Bha17]. Elle présente une capacité de jonction de l’ordre de quelques dizaines d’attofarads et une résistance dynamique de quelques dizaines de k Ω à polarisation nulle [Gro11]. L’article [Zhu13] obtient une

sensibilité 10 fois supérieure aux diodes métal/isolant/métal à une fréquence de 28 THz. Aucune publication n'a cependant été trouvée pour des fréquences de l'ordre de quelques THz.

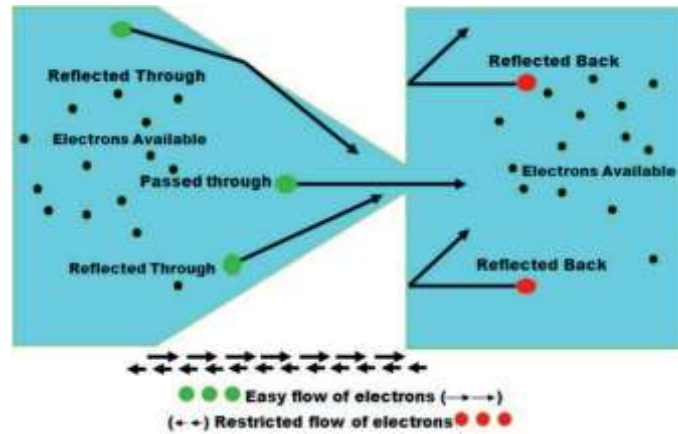


Figure I-II.3.5 – Représentation schématique d'une diode géométrique [Bha17]

La fabrication de diodes Schottky reste néanmoins plus simple et mieux maîtrisée que celle des diodes géométriques ou même des diodes MIM dont l'épaisseur de la barrière doit être maîtrisée car c'est elle qui contrôle le courant par effet tunnel.

III. Modélisation physique de la diode Schottky

1. Introduction

La conception d'un circuit de détection ou d'un multiplieur de fréquence s'effectue en deux étapes [Meh17] :

- La première étape consiste à optimiser conjointement les caractéristiques intrinsèques de la diode tels que la zone N (épaisseur, dopage) ainsi que les impédances optimales à lui présenter pour maximiser le rendement du circuit.
- La deuxième étape consiste à dimensionner les cellules de filtrage en entrée et en sortie.

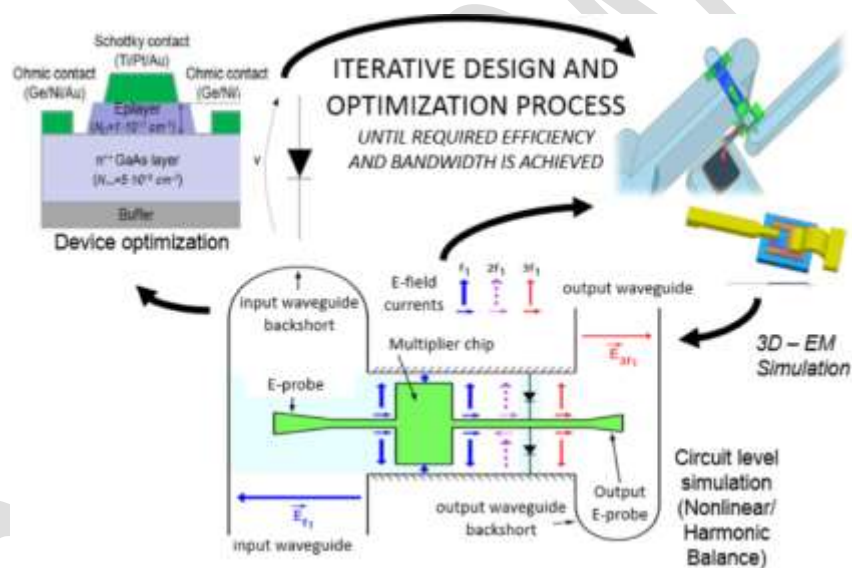


Figure I-III.1 – Les différentes étapes pour l'optimisation des performances d'un circuit [Meh17]

Trois outils différents sont utilisés pour la conception du circuit à partir d'une méthode itérative I-III.1. Suivant la configuration choisie (fréquence, puissance, etc.), un modèle physique de la diode est d'abord utilisé pour optimiser ces caractéristiques (semi-conducteur, dopage, longueur de la zone N, etc.). Ensuite, des outils avec des algorithmes d'équilibrage harmonique (*Harmonic Balance*) sont utilisés. Enfin, une simulation électromagnétique 3D (sous Ansys HFSS par exemple) permet de synthétiser les circuits.

Ce travail de thèse s'est essentiellement concentré sur l'optimisation des caractéristiques de la diode Schottky à partir d'une modélisation physique. La modélisation des composants à base de semi-conducteurs est indispensable pour prédire leur comportement. La complexité du transport électronique dans les matériaux à semi-conducteurs se traduit par la grande diversité des modèles physiques utilisés pour le décrire. Le point de départ de tous ces

modèles est l'équation de transport de Boltzmann qui régit le phénomène de transport de charges dans un matériau semi-conducteur. Cette équation s'écrit :

$$\frac{\partial f}{\partial t}(\vec{r}, \vec{k}, t) + \vec{v} \cdot \vec{\nabla}_r f + \frac{\partial \vec{k}}{\partial t} \cdot \vec{\nabla}_k f = \frac{\partial f}{\partial t} \Big|_{coll} \quad (\text{I-III.1.1})$$

Où f est la distribution des porteurs.

Cette équation est complexe et il n'est possible de la résoudre analytiquement que dans certains cas particuliers. C'est la raison pour laquelle on utilise des hypothèses simplificatrices pouvant amener à une approche déterministe (modèle dérive-diffusion, hydrodynamique, etc.), ou bien à une résolution directe par la méthode Monte-Carlo avec un modèle stochastique particulière.

Mon équipe accueil Ephyscas au sein du laboratoire C2N travaille sur la modélisation du transport des porteurs (électrons et trous) depuis 20 ans. Elle a notamment développé plusieurs solveurs de l'équation de Boltzmann pour les porteurs de charges ainsi que des codes permettant de calculer les structures électroniques des matériaux semi-conducteurs. Elle dispose de codes déterministes (3D et 2D full-band) pour les mécanismes de relaxations des électrons et des trous ainsi que des approches multi-bandes incluant les effets de contraintes et le confinement quantique pour les calculs de structures électroniques. Les versions les plus sophistiquées développées avec un code MC utilisent la structure de bande complète du semi-conducteur (*full band*). La structure électronique y est calculée via la méthode des pseudo-potentiels non local avec couplage Spin-Orbite (SO).

2. Les modèles déterministes simplifiés

Le modèle le plus simple parmi les modèles de transport est le modèle « dérive-diffusion » (DD). Dans ce modèle, on suppose que l'énergie moyenne des porteurs est uniforme et fixée à la valeur d'équilibre avec le réseau cristallin réputé être à une température T_L . Par ailleurs, des paramètres de transport comme la mobilité ou les coefficients de diffusion sont déterminés par les valeurs locales du champ électrique. Le transport des charges est dû à la combinaison de deux phénomènes :

- la diffusion due au gradient de la concentration de porteurs et possiblement de T_L
- la dérive due au champ électrique appliqué.

Le modèle DD se compose principalement de deux équations propres au modèle : l'équation de conservation de la charge et l'équation du courant avec deux termes correspondant chacun aux deux phénomènes explicités précédemment.

En outre, la modélisation d'un dispositif électronique impose la résolution couplée de l'équation de conservation de la charge – qui dérive directement de l'équation de Boltzmann par intégration ou des équations de Maxwell – et de l'équation de Poisson. C'est dans l'équation de conservation de la charge qu'il est possible d'introduire des termes de génération et de recombinaison.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{J} = 0 \quad (\text{I-III.1.2})$$

Une deuxième approche déterministe pour résoudre l'EB de manière simplifiée est une approche dite hydrodynamique (HD) – si les dérivées par rapport aux temps sont conservées - ou bien à Balance d'énergie si ces dérivées sont escamotées. Ce niveau de modélisation est nettement plus sophistiqué que l'approche DD car il faut résoudre en parallèle des deux équations du système DD, les équations de relaxation du moment et de relaxation de l'énergie. Ces deux équations sont également déduites de l'équation de Boltzmann.

$$\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} = -\frac{q\vec{E}}{m^*(\xi)} - (\vec{v} \cdot \nabla) \vec{v} - \frac{2}{3m^*(\xi)n} \nabla \cdot (n\xi - nm^*(\xi)v^2) - \frac{\vec{v}}{\tau_m(\xi)} \quad (\text{I-III.1.3})$$

$$\frac{\partial \xi}{\partial t} = -q\vec{v} \cdot \vec{E} - \vec{v} \cdot (\nabla \cdot \xi) - \frac{2}{3n} \nabla \cdot \left[n\vec{v} \left(\xi - \frac{m^*(\xi)}{2} v^2 \right) \right] - \frac{\xi - \xi_0}{\tau_\xi(\xi)} \quad (\text{I-III.1.4})$$

Les variables de ces équations sont :

n : la densité d'électron

\vec{v} : la vitesse moyenne des électrons

ξ : l'énergie moyenne

m^* : la masse effective moyenne des porteurs

$\tau_m(\xi)$: le temps de relaxation du moment dû à la mobilité des électrons

$\tau_\xi(\xi)$: le temps de relaxation de l'énergie qui décrit le temps nécessaire à la distribution pour revenir à sa position d'équilibre après avoir subi une perturbation.

La stabilité du système est précaire à cause des termes de diffusions présents dans la l'équation de relaxation du moment – [Tis10]. L'intégration de l'EB signale qu'on opère avec des grandeurs moyennes représentatives d'une distribution dans l'espace réciproque dont la forme est contrôlée via deux paramètres : le quasi-niveau de Fermi et la température des porteurs qui peut être nettement plus élevée que celle du réseau cristallin. Voilà explicitée la

limite rédhibitoire des approches HD et BE. Dès qu'il s'agira de mécanismes fins impliquant de l'anisotropie ou des évènements rares, ces modèles sont totalement pris en défaut.

Cela ne signifie pas qu'il sera impossible de reproduire un le comportement d'un composant électroniques qui est le siège de tels mécanismes. Mais il s'agirait alors, tout au mieux de simulations et non de modélisations. Les premières ont pour vocation de reproduire le réel lorsque les secondes prétendent l'expliquer. Il est souvent nécessaire de savoir simuler mais il serait illusoire d'expliquer ou d'anticiper des comportements hors de l'espace des configurations ayant permis de fixer les paramètres de la simulation. A titre d'exemple, il est possible de reproduire le fonctionnement d'une diode qui est le siège du mécanisme d'ionisation par choc ou d'effet Auger avec un modèle HD ou BE. Mais si on place la diode dans une configuration éloignée de celui de la mesure, la simulation sera erronée. L'ionisation par choc requiert a minima, des résolutions directes de l'EB avec une structure électronique pertinente.

Les logiciels commerciaux (Synopsis, Silvaco, ...) reposent largement sur des modèles DD et BE, même si des modules Monte-Carlo ou NEGF (*Non Equilibrium Green Function*) sont désormais accessibles. Ces outils commerciaux sont conviviaux, faciles d'usage et offrent de très nombreux raffinement qui les rendent intéressants. Nous avons régulièrement utilisé Silvaco.

3. Résolution de l'équation de Boltzmann : stochastique et déterministe

Les techniques de résolution de l'équation de Boltzmann par une approche particulière de type Monte Carlo sont utilisées depuis plus de 40 ans comme une méthode numérique pour simuler le transport hors-équilibre dans les dispositifs à base de semi-conducteurs. Il s'agit d'un modèle semi-classique, ce qui signifie que les porteurs suivent la structure de bandes et que les interactions sont traitées dans le cadre de la règle d'or de Fermi. Explicitons le terme de collision de l'EB :

$$\left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_{coll} = \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \left[\int P_{k,k'} f_k (1-f_{k'}) d^3k' - \int P_{k',k} f_{k'} (1-f_k) d^3k' \right] \quad (\text{I-III.1.5})$$

$P_{k,k'}$ (resp. $P_{k',k}$) représente la probabilité de diffusion de l'état k (k') vers l'état k' (k) par unité de temps. La probabilité de diffusion d'un état initial k vers un état final k' par unité de temps s'écrit :

$$S_{k,k'}^i = \frac{2\pi}{\hbar} |M_{k,k'}^i|^2 \delta(E) \quad (\text{I-III.1.6})$$

où $M_{k,k'}$ est la transformée de Fourier de l'Hamiltonien perturbatif de l'interaction considérée i évalué entre les états k et k' , et où $\delta(E)$ assure la conservation de l'énergie totale en jeu.

Le principe de la Méthode Monte Carlo est de modéliser des quasi particules (qui représentent chacune une certaine quantité d'électrons ou de trous réels) et de suivre leurs positions dans l'espace réel et dans l'espace réciproque au gré des champs et des interactions. L'abondance des électrons permet de reconstruire la fonction de f . Il ne s'agit pas d'une résolution complète de l'EB. S'agissant du terme de collision, seul le changement d'état depuis la position de l'électrons considéré vers un autre état est considéré. On parle de terme de sortie. La probabilité pour un porteur de venir dans l'état de l'électron considéré (terme d'entrée) correspondrait au terme de sortie d'électrons voisins. Ces termes d'entrée qui doivent être explicités dans les autres technique de résolution de l'EB sont lourds et complexes.

Une résolution stochastique de l'EB consomme beaucoup de temps car il faut considérer beaucoup de particules pour atteindre une certaine fiabilité.

La littérature concernant la résolution de l'EB par des approches MC est extrêmement abondante [Hes91] [Jac89] [Jac12]. Le raffinement du « solveur » s'apprécie suivant la structure électronique considérée, le nombre d'interaction envisagé, le raffinement des calculs des taux d'interaction et des états après l'interaction et enfin la prise en considération du produit scalaires des parties périodiques des fonctions de Bloch. Tout comme pour les modèles DD, HD ou EB la résolution peut être 1D, 2D ou 3D dans l'espace réel. S'agissant de l'approche Monte-Carlo, c'est la dimension du « solveur » de l'équation de Poisson qui déterminera la dimension de l'ensemble.

Cependant, certains mécanismes ne sont pas facilement accessibles via un simulateur MC. Il s'agit de mécanisme lents qui relèveront donc à l'échelle des probabilités d'interaction comme des évènements très rares. On peut songer à des mécanismes de recombinaison radiatifs ou à des mécanismes de recombinaisons via des états localisés en modeste concentration.

Ainsi, pour les dispositifs fonctionnant à très basse température ou dans lesquels les recombinaisons jouent un rôle clef, on peut songer à utiliser des outils de modélisation numériques réalisant une résolution numériquement déterministe de l'équation de Boltzmann. Les professeurs Nougier et Vaissières de l'université de Montpellier [Vai92] ont développé de

telles approches. Dans l'équipe Ephyscas, plus récemment, cette approche a fait l'objet de deux thèses [Cav00] [Ric04]. Mais il s'agissait d'aborder exclusivement l'espace réciproque, le maillage de la zone de Brillouin nécessitant beaucoup de ressources mémoires.

Depuis le début des années 1990, une approche basée sur une décomposition de la fonction de répartition sur une base d'harmoniques sphériques a pris de l'ampleur [Gnu91]. Aujourd'hui, cette approche semble la mieux adaptée pour résoudre directement l'équation de Boltzmann dans les transistors bipolaires. En présence d'hétérojonction, elle semble insurclassable [Jun11]. Mais la prise en considération de certaines interactions demeure lourde et incomplète. Les termes de sortie du terme de collision de l'EB s'appuient sur des intégrales présentant des singularités.

4. Quelques éléments sur les modèles « quantiques »

La dynamique des porteurs dans les semi-conducteurs est par essence quantique. La résolution de l'équation de Boltzmann qui opère sur \mathbf{r} et sur \mathbf{k} ne saurait reproduire parfaitement la nature quantique des particules dans la matière (ne serait-ce qu'à cause de la relation d'incertitude d'Heisenberg). Bien entendu, l'électron dont il est question dans l'EB se trouve toujours sur un état qui est un état propre de l'Hamiltonien non perturbé du cristal (avec les simplifications d'usage afin de disposer d'un opérateur tractable). Certes, les transitions entre ces états, solution stationnaire de l'Hamiltonien, sont traitées dans un formalisme quantique et enfin, il est vrai qu'il est possible d'adjoindre à l'EB des traitements spécifiques pour intégrer l'effet tunnel si nécessaire... Mais il n'en demeure pas moins que l'approche demeure classique.

Dans la référence [Jac11], le lecteur trouvera au chapitre 16, une discussion sur les critères à considérer pour opérer un basculement vers une prise en compte du transport quantique même dans un système homogène. Il n'est pas question de les reprendre intégralement ici. La discussion est subtile et embrasse des questions de fond de la thermodynamique statistique des processus hors équilibre. Mais il faut juste retenir que la cohérence, le déphasage et l'intrication qui opèrent sur des échelles de temps et d'espace respectivement courtes et petites sont également à l'œuvre dans n'importe quel échantillon de SC homogène. Il n'est nul besoin de considérer un MOS Ultime ou une diode à effet tunnel résonnant pour rencontrer la nécessité d'intégrer la modélisation du transport quantique. Les temps courts imposent également cette démarche. Lorsque l'auteur part des temps caractéristiques du transport semi-classique, nommément (le temps moyen de vol libre τ_f , le temps de relaxation du moment et de l'énergie τ_m et τ_e , et le temps correspondant à la durée de l'interaction τ_c), il conclut que le critère fort à respecter pour légitimer le recours à

l'approche semi-classique serait que τ_f soit supérieur à 10 fs. Cependant, il admet qu'en absence d'effet tunnel ou de résonnances, l'approche semi-classique continue à produire des résultats pertinents bien au-delà de cette limite.

Il existe plusieurs méthodes pour modéliser le transport quantique. On peut songer à la résolution de l'équation de Liouville avec le formalisme de la matrice densité [Fer92], le recours aux fonction de Wigner [Dol10] ou l'usage des fonctions de Green hors équilibre [Dat05]. En 2018, cette dernière approche semble faire consensus – si on en juge par le nombre impressionnant d'articles qui s'y réfèrent.

Je n'aborderai pas plus avant la mise en œuvre de ces approches car je n'y ai pas eu recours. Dans le cadre de cette thèse, la résolution de l'EB par l'approche MC a été largement utilisée, sans doute au-delà de ce qu'elle peut produire.

IV. Objectif et composition du manuscrit

La diode Schottky constitue la pierre angulaire des circuits de détection, des multiplieurs de fréquence ou encore des mélangeurs dans la bande de fréquence du THz, notamment grâce à son comportement non-linéaire. L'objectif de cette thèse est d'optimiser les caractéristiques de ce composant pour deux fonctions non-linéaires aux fréquences THz – la détection et la multiplication de fréquence – celles-ci ayant des facteurs de mérites bien spécifiques. Pour réaliser cette optimisation, un code particulier Monte-Carlo (MC) résolvant l'équation de Boltzmann couplée à l'équation de Poisson a été développé.

Le chapitre II constitue une part conséquente du travail de thèse et se décompose en deux parties : une partie est consacrée au développement du code MC et une autre à la modélisation électrique de la diode Schottky issue de la modélisation MC.

Les chapitre III et IV visent l'optimisation des caractéristiques de la diode Schottky pour la multiplication de fréquence – plus spécifiquement le doubleur de fréquence – et la rectification sur un circuit spécifique souvent utilisé pour faire de la récupération d'énergie : la rectenna.

Le chapitre V présente les conclusions de cette thèse ainsi que les améliorations qui peuvent être apportées sur la modélisation, que ce soit sur le code MC ou encore sur la modélisation électrique du composant.

Bibliographie

- [Bal11] C. Balocco *et al.*, « Room-temperature operation of a unipolar nanodiode at terahertz frequencies », *Appl. Phys. Lett.*, vol. 98, n° 22, p. 223501, mai 2011.
- [Car15] G. Carpintero, E. Garcia-Munoz, H. Hartnagel, S. Preu, et A. Räisänen, *Semiconductor TeraHertz Technology: Devices and Systems at Room Temperature Operation*. John Wiley & Sons, 2015.
- [Cas08] E. Castro-Camus et M. B. Johnston, « Conformational changes of photoactive yellow protein monitored by terahertz spectroscopy », *Chem. Phys. Lett.*, vol. 455, n° 4, p. 289-292, avr. 2008.
- [Cas11] R. Casini, A. Di Gaspare, E. Giovine, A. Notargiacomo, M. Ortolani, et V. Foglietti, « Three-dimensional shaping of sub-micron GaAs Schottky junctions for zero-bias terahertz rectification », *Appl. Phys. Lett.*, vol. 99, n° 26, p. 263505, déc. 2011.
- [Cav00] N. Cavassilas, « Etude du phénomène d'ionisation par choc dans les semi-conducteurs III-V : application aux transistors à effet de champ. », Thèse, Université Paris XI – Orsay, 2000
- [Coo06] D. Cooke, F. A. Hegmann, E. C. Young, et T. Tiedje, « Electron mobility in dilute GaAs bismide and nitride alloys measured by time-resolved terahertz spectroscopy », *Appl. Phys. Lett.*, vol. 89, n° 12, p. 122103, 2006.
- [Cha04] G. Chattopadhyay, I. Mehdi, J. S. Ward, E. Schlecht, A. Skalare, P. H. Siegel, et al. « Development of multi-pixel heterodyne array instruments at submillimeter wavelength », *IEEE Asia-Pacific Microwave Conference*, 2004.
- [Cha08] G. Chattopadhyay, « Submillimeter-Wave Coherent and Incoherent Sensors for Space Applications », dans *Sensors*, Springer Berlin Heidelberg, 2008.
- [Cha11] G. Chattopadhyay, « Technology, Capabilities, and Performance of Low Power Terahertz Sources », *IEEE Trans. Terahertz Sci. Technol.*, vol. 1, n° 1, p. 33-53, sept. 2011.
- [Dat05] S. Datta, « Quantum Transport: Atom to Transistor », Cambridge University Press, 2005
- [Dol10] P. Dollfus, D. Querlioz, M. Mouis, « The Wigner Monte-Carlo method for nanoelectronic devices », Wiley, 2010
- [Eon16] D. Eon, A. Traoré, J. Pernot, et E. Gheeraert, « Recent progress on diamond Schottky diode », in *2016 28th International Symposium on Power Semiconductor Devices and ICs (ISPSD)*, 2016, p. 55-58.

- [Fed05] J. F. Federici, B. Schulkin, F. Huang, D. Gary, R. Barat, F. Oliveira et D. Zimdars, « THz sensing and imaging for security applications: explosives, weapons and drugs », *Semicond. Sci. Technol.*, 20 No 7, juillet 2005
- [Fer92] D. Ferry et C. Jacoboni, *Quantum Transport in Semiconductors*. Springer US, 1992.
- [Fis05] B. Fischer, M. Hoffmann, H. Helm, G. Modjesch, et P. U. Jepsen, « Chemical recognition in terahertz time-domain spectroscopy and imaging », *Semicond. Sci. Technol.*, vol. 20, n° 7, p. S246, 2005.
- [Fit06] A. J. Fitzgerald et al., « Terahertz Pulsed Imaging of human breast tumors », *Radiology* 239, 533–540, 2006.
- [Gar09] G. Moddel, « Geometric diode, applications and method », US Patent Application 20110017284, 2009.
- [Gar12] G. Moddel, Z. Zhu, S. Grover, et S. Joshi, « Ultrahigh speed graphene diode with reversible polarity », *Solid State Commun.*, vol. 152, n° 19, p. 1842-1845, oct. 2012.
- [Gnu91] A. Gnudi, D. Ventura, and G. Baccarani, « One-dimensional simulation of a bipolar transistor by means of spherical harmonics expansion of the Boltzmann transport equation », in *Proc. SISDEP*, 1991, pp. 205–213.
- [Gol17] M. Golio, *RF and Microwave Semiconductor Device Handbook*. CRC Press, 2017.
- [Gra04] T. de Graauw et al., « The Herschel-Heterodyne Instrument for the Far-Infrared (HIFI) », in *Infrared and Millimeter Waves, Conference Digest of the 2004 Joint 29th International Conference on 2004 and 12th International Conference on Terahertz Electronics, 2004.*, 2004, p. 579-580.
- [Gra11] T de Graauw et al., « The atacama large millimeter/submillimeter array », *36th International Conference on Infrared, Millimeter and Terahertz Waves (IRMMW-THz)*, pages 1-4, 2011.
- [Gro11] S. Grover, *Diodes for Optical Rectennas*, Thèse, Université du Colorado, Boulder, 2011
- [Hes91] K. Hess, *Monte Carlo Device Simulation: Full Band and Beyond*. Kluwer, 1991.
- [Hes07] J. L. Hesler and T. W. Crowe, « Responsivity and Noise Measurements of Zero-Bias Schottky Diode Detectors », *18th Intl. Symp. Space Terahertz Techn.*, Pasadena, Mars 2007
- [Hes15] J. L. Hesler et T. Crowe, « High-power solid-state terahertz sources », SPIE, 2015

- [Hub97] K. Huber, R. Hillermeier, H. Brand et al., « 2.5 THz corner cube mixer with substrateless Schottky diodes », *Proceedings of the 5th International Workshop on Terahertz Electronics*, Grenoble, France, 1997.
- [Irs11] M. Y. Irshaid, C. Balocco, Y. Luo, P. Bao, C. Brox-Nilsen, et A. M. Song, « Zinc-oxide-based planar nanodiodes operating at 50 MHz », *Appl. Phys. Lett.*, vol. 99, n° 9, p. 092101, août 2011.
- [Jac83] C. Jacoboni et L. Reggiani, « The Monte Carlo method for the solution of charge transport in semiconductors with applications to covalent materials », *Rev. Mod. Phys.*, vol. 55, n° 3, p. 645-705, juill. 1983.
- [Jac11] C. Jacoboni, « Theory of Electron Transport in Semiconductors: A Pathway from Elementary Physics to Nonequilibrium Green Functions », Springer Series in Solid-State Sciences, 2011
- [Jac12] C. Jacoboni et P. Lugli, *The Monte Carlo Method for Semiconductor Device Simulation*. Springer Science & Business Media, 2012.
- [JUI13] JUICE Jupiter Icy Moons Explorer SWI Submillimetre Wave Instrument (SWI), Science Concept Document, JUI-MPSSWI-PL-002, 13/05/2013.
- [Jun11] Sung-Min Hong, Anh-Tuan Pham et Christoph Jungemann, *Deterministic Solvers for the Boltzmann Transport Equation*, Springer-Verlag/Wien, 2011
- [Kur02] D.S. Kurtz, J. L. Hesler, W. Growe, and R. M. Weikle, « Submillimeter-wave sideband generation using varactor Schottky diodes ». *IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques*, 50, 2610, 2002.
- [Maa03] S. A. Maas, *Nonlinear Microwave and RF Circuits*. Artech House, 2003.
- [Mae00] A. Maestrini, « Cryogenic operation of GaAs based multiplier chains to 400 GHz », *8th International THz Conference*, Darmstadt, 2000.
- [Mae08] A. Maestrini, J. Ward, C. Tripon-Canseliet, J. Gill, C. Lee, H. Javadi, G. Chattopadhyay, and I. Mehdi. « In-Phase Power-Combined Frequency Tripler at 300 GHz », *IEEE Microw. Wireless Compon. Lett.*, Vol. 18, pp. 218–220, Mar. 2008.
- [Mae10] A. Maestrini, J. Ward, J. Gill, C. Lee, B. Thomas, R. Lin, G. Chattopadhyay, et I. Mehdi, « A Frequency-Multiplied Source With More Than 1 mW of Power Across the 840-900 GHz Band ». *IEEE Trans. Microw. Theory Techn.*, Vol. 58, pp. 1925–1932, Jul. 2010.
- [Mae12] A. Maestrini, I. Mehdi, J. Siles, J. Ward, R. Lin, B. Thomas, C. Lee, J. Gill, G. Chattopadhyay, E. Schlecht, J. Pearson, et P. Siegel. « Design and Characterization

- of a Room Temperature All-Solid-State Electronic Source Tunable From 2.48 to 2.75 THz », *IEEE Trans. THz Sci. Technol.*, Vol. 2, pp. 177–185, Mar. 2012.
- [Mae16] A. Maestrini et al., « 1200 GHz and 600 GHz Schottky receivers for JUICE-SWI », *27th International Symposium on Space Terahertz Technology*, Nanjing, China, avril 2016.
- [Mai08] M. Maisonneuve, *Les ondes THz et les application biomédicales*, école polytechnique de Montréal, 2008
- [Mai14] D. Maier, J. Reverdy, L. Coutanson, D. Billon-Pierron, C. Boucher, A. Barbier, et al. « Fully integrated sideband - separating mixers for the noema receivers », *25th International Symposium on Space Terahertz Technology*, 2014.
- [Mar00] A. G. Markelz, A. Roitberg, et E. J. Heilweil, « Pulsed terahertz spectroscopy of DNA, bovine serum albumin and collagen between 0.1 and 2.0 THz », *Chem. Phys. Lett.*, vol. 320, n° 1, p. 42-48, mars 2000.
- [Ozp03] B. Ozpineci et L. M. Tolbert, « Characterization of SiC Schottky diodes at different temperatures », *IEEE Power Electron. Lett.*, vol. 1, n° 2, p. 54-57, juin 2003.
- [Pey13] E. Peytavit, P. Latzel, F. Pavanello, G. Ducournau, et J.-F. Lampin. « CW Source Based on Photomixing With Output Power Reaching 1.8 mW at 250 GHz ». *IEEE Electron Device Lett.*, Vol. 34, No. 10, pp. 1277–1279, Oct. 2013.
- [Pic06] G. W. Pickard, « Detector for wireless telegraphy and telephony », US1104073A, 1906.
- [Ren08] C. C. Renaud et al., « Photonically enabled communication systems beyond 1000 GHz », in *2008 International Topical Meeting on Microwave Photonics jointly held with the 2008 Asia-Pacific Microwave Photonics Conference*, 2008, p. 55-58.
- [Ric04] S. Boyer Richard, *Modélisation physique de la structure électronique, du transport et de l'ionisation par choc dans les matériaux IV-IV massifs, contraintes et dans les puits quantiques*. Thèse, Université Paris-Sud, 2004.
- [San13] P. Sangaré et al., « Experimental demonstration of direct terahertz detection at room-temperature in AlGaIn/GaN asymmetric nanochannels », *J. Appl. Phys.*, vol. 113, n° 3, p. 034305, janv. 2013.
- [Sch39] W. Schottky, « Zur Halbleiterttheorie der Sperrschicht- und Spitzengleichrichter », *Z. Für Phys.*, vol. 113, n° 5, p. 367-414, mai 1939.
- [She05] Y C Shen, et al., « Chemical mapping using THz pulsed imaging », *Semicond. Sci. Technol.*, 20 No 7, S254-S257, juillet 2005.

- [Shi14] K. Shiraga *et al.*, « Characterization of Dielectric Responses of Human Cancer Cells in the Terahertz Region », *J. Infrared, Millimeter, Terahertz Waves* **35**, 493–502, 2014.
- [Sil17] L. L. Silva, V. R. Almeida, et N. A. dos S. Gomes, « Metal-insulator-metal tunnel diodes on micro/nano antennas for energy harvesting and detector applications », in *2017 SBMO/IEEE MTT-S International Microwave and Optoelectronics Conference (IMOC)*, 2017, p. 1-5.
- [Sta11] G. J. Stacey, « THz Low Resolution Spectroscopy for Astronomy », *IEEE Trans. Terahertz Sci. Technol.*, vol. 1, n° 1, p. 241-255, sept. 2011.
- [Sun10] V. Sundaramoorthy et I. Nistor, « Design of quasi-vertical GaN high power Schottky diodes based on field plate termination », in *CAS 2010 Proceedings (International Semiconductor Conference)*, 2010, vol. 02, p. 401-404.
- [Tho11] B. Thomas, J. Siles, J. Gill, C. Lee, K. Cooper, A. Maestrini, S. Gulkis, I. Mehdi, et al. « 560 Ghz, 664 Ghz and 1.2 Thz Schottky based MMIC sub - harmonic mixers for planetary atmospheric remote sensing and FMCW radar », *22nd International Symposium on Space Terahertz Technology*, 2011.
- [Tis10] B. Tissafi, « Résolution couplée des équations de l'électromagnétisme et du transport en 3D pour des applications THz : modélisation et optimisation du photo-commutateur », Thèse, Paris 11, 2010.
- [Tre14] J. Treuttel *et al.*, « A 330 GHz frequency doubler using European MMIC Schottky process based on e-beam lithography », in *2014 XXXIth URSI General Assembly and Scientific Symposium (URSI GASS)*, 2014, p. 1-4.
- [Tre16] J. Treuttel *et al.*, « A 520–620-GHz Schottky Receiver Front-End for Planetary Science and Remote Sensing With 1070 K–1500 K DSB Noise Temperature at Room Temperature », *IEEE Trans. Terahertz Sci. Technol.*, vol. 6, n° 1, p. 148-155, janv. 2016.
- [Vai92] J. C. Vaissiere, J. P. Nougier, M. Fadel, L. Hlou, et P. Kocevar, « Numerical solution of coupled steady-state hot-phonon--hot-electron Boltzmann equations in InP », *Phys. Rev. B*, vol. 46, n° 20, p. 13082-13099, nov. 1992.
- [Vuk12] J. Vukusic, T. Bryllert, Ø. Olsen, J. Hanning, et J. Stake, « Monolithic HBV-Based 282-GHz Tripler With 31-mW Output Power », *IEEE Electron Device Lett.*, vol. 33, n° 6, p. 800-802, juin 2012.
- [Wad09] A. Wade *et al.*, « Magnetic-field-assisted terahertz quantum cascade laser operating up to 225 K », *Nat. Photonics*, vol. 3, n° 1, p. 41-45, janv. 2009.

- [Wan16] X. Wang *et al.*, « High-power terahertz quantum cascade lasers with ~ 0.23 W in continuous wave mode », *AIP Adv.*, vol. 6, n° 7, p. 075210, juill. 2016.
- [Wes13] A. Westlund *et al.*, « Terahertz detection in zero-bias InAs self-switching diodes at room temperature », *Appl. Phys. Lett.*, vol. 103, n° 13, p. 133504, sept. 2013.
- [Wil06] B. S. Williams, S. Kumar, Q. Hu, et J. L. Reno. « High-power terahertz quantum-cascade lasers ». *IEE Elec. Lett.* 42(2), 89–91 (2006)
- [Woo03] R. M. Woodward *et al.*, « Terahertz pulse imaging of ex vivo basal cell carcinoma », *J. Invest. Dermatol.*, 120, 72–8, 2003.
- [Zha01] A. P. Zhan *et al.*, « Comparison of GaN p-i-n and Schottky rectifier performance », *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. 48, n° 3, p. 407–411, mars 2001.
- [Zhu13] Z. Zhu, S. Joshi, S. Grover, et G. Moddel, « Graphene geometric diodes for terahertz rectennas », *J. Phys. Appl. Phys.*, vol. 46, n° 18, p. 185101, 2013.

CHAPITRE II

MODELISATION DE LA DIODE SCHOTTKY : DE LA MODELISATION MONTE CARLO A LA MODELISATION ELECTRIQUE

Ce chapitre est composé de quatre parties et constitue une part conséquente de ce travail de thèse. La première partie est essentiellement consacrée au travail de modélisation Monte-Carlo (MC) de la diode Schottky : les conditions aux limites (contact Schottky et ohmique), la prise en compte du principe d'exclusion de Pauli dans le cas d'un SC fortement dopé, les différents effets à l'interface métal/SC tels que l'abaissement de la hauteur de barrière par le champ électrique, l'effet de force image ou encore l'effet tunnel. L'utilisation d'un algorithme de fusion/division des particules a notamment été développé afin de déterminer la caractéristique statique pour de faibles tensions de polarisation lorsque la concentration de porteurs au voisinage du contact Schottky est très faible. Les différentes techniques d'évaluation du courant seront aussi décrites.

La deuxième partie est plutôt consacrée à la modélisation électrique de la diode pour faciliter d'une part son intégration dans un logiciel de simulation électrique et d'autre part son optimisation. Deux modèles électriques sont présentés dont un, plus complet, valable jusqu'au THz en considérant différents effets physiques tels que l'inertie des porteurs. Différentes techniques sont données pour extraire les paramètres de ce modèle complet pour un point de polarisation donné, depuis la réponse en courant à diverses excitations de faible amplitude à fréquence variable jusqu'à l'étude des fluctuations de courant et tension (étude en bruit).

La troisième partie montre la variation des différents éléments du schéma équivalent en fonction de la fréquence en les comparant aux expressions analytiques couramment rencontrées dans la littérature. Certaines expressions sont améliorées pour tenir compte de la possible déplétion du substrat pour des diodes courtes. Une section est dédiée aux effets 2D dans le cadre d'une modélisation bidimensionnelle de la diode Schottky afin d'illustrer l'impact de ces effets sur son comportement dynamique.

Enfin, la dernière partie constitue une conclusion générale sur ce chapitre.

I) Modélisation Monte Carlo de la diode Schottky

Dans cette section, nous commençons dans un premier temps par une description du principe de la méthode Monte-Carlo. Ensuite, nous décrivons succinctement le code MC qui a été développé pour modéliser la diode Schottky en faisant un focus sur les points qui ont demandé un travail particulier : les conditions aux limites avec l'injection des particules au niveau du contact ohmique, un algorithme de fusion/division des particules pour pallier au faible nombre de porteurs proche du contact Schottky, le principe d'exclusion de Pauli lorsque le semi-conducteur est dégénéré et l'intégration du phénomène de force image et de l'effet tunnel à l'interface métal/SC suivant différents degrés de raffinement. L'ionisation par choc, phénomène à l'origine du claquage de composants pour des jonctions fortement polarisées, n'a pas été implémentée dans la version du MC que j'ai couplée à l'espace réel. Ce mécanisme physique qui a fait l'objet de 3 thèses dans l'équipe [Cav00]-[Ric04]-[Tea11] sera introduit dans l'avenir car il s'avère indispensable. Pour les trois thèses évoquées, l'ionisation par choc était modélisée uniquement dans l'espace réciproque. La lourdeur des modèles développés interdisait tout couplage avec l'équation de Poisson. Différentes techniques d'évaluation du courant seront également présentées.

1. Description générale du simulateur MC

La simulation Monte Carlo est un modèle particulière qui consiste à suivre les porteurs (électrons, trous) au cours du temps dans l'espace réel et dans l'espace réciproque des vecteurs d'onde. Ainsi, l'état d'une particule est représenté par les trois composantes du vecteur d'onde $\vec{k}(k_x; k_y; k_z)$ dans l'espace réciproque et les trois composantes du vecteur position $\vec{r}(x; y; z)$ dans l'espace direct. Il s'agit d'une équation de nature classique. Les particules se déplacent à l'intérieur du semi-conducteur sous l'action du champ électrique \vec{F} et interagissent avec le réseau cristallin. Il s'agit d'un processus itératif constitué d'une série de vols libres entrecoupés d'interactions. Durant un vol libre, la particule n'est soumise qu'au champ électrique dont l'effet est de modifier le vecteur d'onde par la relation suivante :

$$\hbar \frac{d\vec{k}}{dt} = q\vec{F} \quad (\text{II-I.1.1})$$

Avec \hbar la constante de Planck réduite, \vec{F} le champ électrique, q la charge de l'électron et \vec{k} le vecteur d'onde.

On peut donc accéder par intégration de l'équation précédente à l'évolution temporelle du vecteur d'onde.

La connaissance de la structure de bande d'énergie $\varepsilon(\vec{k})$ dans laquelle se déplace la particule permet de calculer à chaque instant l'énergie du porteur. Nous prendrons dans cette approche simplifiée :

$$\varepsilon(1 + \alpha_i \varepsilon) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_i^*} \quad (\text{II-I.1.2})$$

Où α_i est le coefficient de non-parabolicité et m_i^* la masse effective de l'électron au minimum de la vallée i considérée. Il est aussi possible de déterminer la vitesse de la particule :

$$\vec{v}(\vec{k}) = \frac{1}{\hbar} \vec{\nabla} \varepsilon(\vec{k}) \quad (\text{II-I.1.3})$$

Le déplacement de la particule dans l'espace réel s'obtient alors par une simple intégrale temporelle de la vitesse de la particule.

Après un vol libre, la particule subit des interactions qui peuvent potentiellement modifier l'énergie du porteur suivant que celles-ci sont élastiques ou inélastiques. Il s'agit de phénomènes aléatoires décrits par des lois de probabilités $S(\vec{k}; \vec{k}')$ qui contrôlent les variations du vecteur d'onde \vec{k} en faisant le lien d'un état initial \vec{k} à un état final \vec{k}' . Lorsque l'interaction est inélastique, de l'énergie peut être échangée avec le réseau cristallin.

Les semi-conducteurs étudiés dans ce manuscrit sont l'Arséniure de Gallium (GaAs), l'Arséniure de Gallium-Indium en accord de maille sur InP ($\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$), l'Antimoniure de Gallium (GaSb) et le Nitrure de Gallium (GaN). Les interactions choisies dans le simulateur sont : les interactions avec les phonons optiques polaires et non polaires, les phonons acoustiques de petit vecteur d'onde, les phonons optiques et acoustiques inter-vallées (sans distinction de nature transverse ou longitudinale), les impuretés ionisées et l'interaction due à l'effet d'alliage pour l'InGaAs. Le calcul de l'inverse de la longueur d'écrantage q_d pour les impuretés ionisées se fait en passant continument du modèle de Debye-Huckel (cas d'une population de porteurs dégénérée) au modèle de Thomas-Fermi (cas d'une population de porteurs non-dégénérée) à l'aide des intégrales de Fermi-Dirac $F_j(\eta)$ [Cha81] :

$$q_d^2 = \frac{nq^2}{\varepsilon_{sc} k_B T} \frac{F_{-1/2}(\eta)}{F_{1/2}(\eta)} \text{ avec } \eta = \frac{E_F}{k_B T} \text{ et} \quad (\text{II-I.1.4})$$

$$F_j(\eta) = \frac{1}{\Gamma(j+1)} \int_0^\infty \frac{x^j}{1 + \exp(x - \eta)} dx$$

Avec n la concentration de porteurs, k_B la constante de Boltzmann, T la température et E_F le niveau de Fermi.

L'approche MC de la dynamique des porteurs constitue une approche semi-classique. Certes, l'équation de Boltzmann manipule explicitement et concomitamment les variables positions et impulsions mais le terme de droite de l'équation de Boltzmann (terme d'interaction – section I-III) s'appuie sur la règle d'or de Fermi (perturbation dépendant du temps entre états stationnaires). Le couplage de l'équation de Boltzmann avec l'équation de Poisson impose une description analytique des bandes et comme nous venons de le voir, nous avons privilégié l'efficacité (rapidité des calculs) au détriment de la précision.

La figure II-I.1.1 représente l'évolution de la vitesse moyenne de dérive des électrons en fonction du champ électrique pour les quatre semi-conducteurs simulés avec un dopage de 10^{16} cm^{-3} . Pour chacun d'entre eux, on peut distinguer deux régimes :

- Un régime linéaire lorsque le champ est inférieur au champ électrique critique. Dans cette zone, la mobilité des électrons est élevée car leur masse effective est faible en vallée centrale où se trouvent les électrons aux faibles énergies.
- Un régime de saturation lorsque le champ est supérieur au champ électrique critique E_{crit} . L'énergie acquise par les porteurs devient suffisante pour qu'ils subissent des interactions inter-vallées, augmentant ainsi leur masse effective et diminuant leur vitesse moyenne.

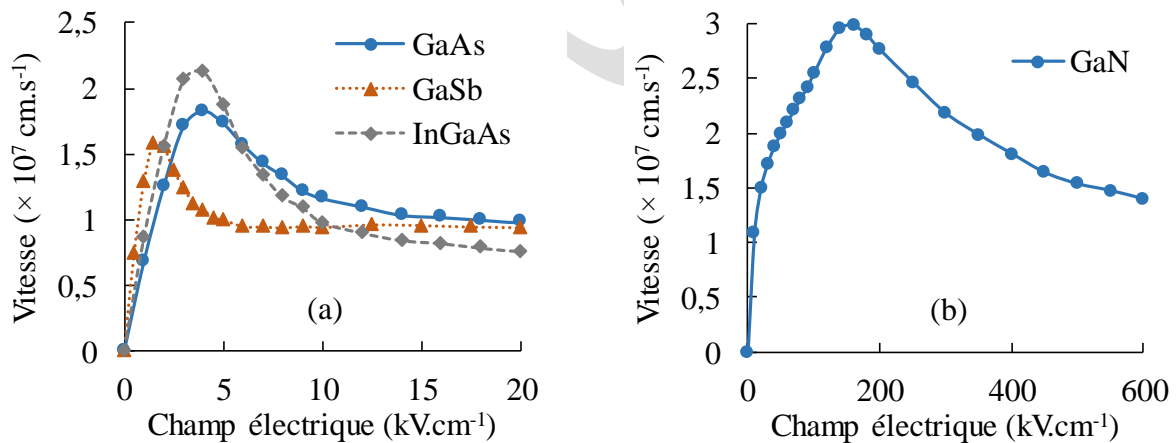


Figure II-I.1.1 – Vitesse moyenne de dérive des électrons en fonction du champ électrique pour (a) GaAs, GaSb, InGaAs et (b) GaN avec une concentration d'impuretés ionisées de 10^{16} cm^{-3} et une température de 300K

Le tableau II-I.1.1 présente quelques caractéristiques du transport pour les quatre SC choisis.

	GaAs	InGaAs	GaSb	GaN
Masse électrons vallée centrale ($\times m_0$)	0,063	0,041	0,041	0,2
Mobilité faible champ à 10^{16} cm^{-3} (cm^2/Vs)	~ 4500	~ 7500	< 3000	~ 900
Bande interdite (eV)	1,424	0,81	0,726	3,39
$E_{\Gamma L}$ (eV)	0,29	0,55	0,084	1,9

Tableau II-I.1.1 – Présentation de quelques caractéristiques du transport des SC étudiés

Le GaAs a souvent été un matériau de choix pour la réalisation de composants électroniques ou optoélectroniques grâce à sa maturité technologique et à sa haute mobilité électronique due à sa faible masse effective en vallée Γ .

Les propriétés du transport de l'InGaAs sont assez voisines du GaAs. La mobilité des électrons à bas-champ est plus élevée grâce notamment à une masse effective plus faible en vallée Γ . Cette caractéristique permet de réduire l'effet des résistances séries et d'améliorer le rendement des dispositifs. Par ailleurs, les contacts métal/SC sur InGaAs présentent une hauteur de barrière beaucoup plus faible que sur GaAs (0,2 vs 0,9 V), ce qui en fait un SC de choix pour réaliser de la détection à polarisation nulle (chapitre IV).

Le GaSb peut paraître également comme un choix intéressant avec une masse effective proche de l'InGaAs. Cependant, l'écart entre la vallée Γ et la vallée L est d'environ 0,1 eV : les électrons de la vallée Γ transfèrent assez rapidement en vallée L. La vitesse de saturation est plus faible que l'InGaAs et le GaAs. Ce SC est surtout utilisé pour réaliser des photo-détecteurs infrarouges avec une bande interdite de 0,726 eV. La solubilité limite de l'impureté dans le GaSb est supérieure au GaAs : cette propriété a été utilisée dans la base des transistors bipolaires à hétérojonction avec des dopages pouvant atteindre 10^{20} cm^{-3} [Wat00].

Le GaN constitue un SC intéressant pour les dispositifs électroniques et optoélectroniques grâce à sa grande bande interdite directe (3,4 eV) qui lui permet d'avoir un champ de claquage, un pic de vitesse et une vitesse de saturation bien plus élevés que les trois autres SC envisagés dans le cadre de ce travail. Le champ électrique critique est légèrement inférieur à 200 kV/cm et la vitesse de saturation est d'environ $1,4 \times 10^7 \text{ cm/s}$. Un inconvénient de ce SC est la faible mobilité des électrons sous faible champ, entraînant des résistances séries plus élevées dans les composants électroniques et une diminution des rendements. En 2018, on ne peut considérer que la filière GaN est pleinement mature. La

densité de dislocations traversantes – qui ne sont pas nécessairement toutes actives électriquement – atteint 10^9 à 10^{11} cm^{-2} selon le substrat hôte (Sapphire ou Silicium).

La gestion des conditions aux limites constitue une étape clef dans la modélisation du dispositif. Elles seront décrites dans la section **II-I.2**. Enfin, la résolution de l'équation de Poisson 1D à partir de la concentration de porteurs permet d'en déduire le champ électrique le long de la structure. La résolution de cette équation se fait par une décomposition LU [Vas06] en utilisant la méthode des différences finies. Deux conditions de Dirichlet sont imposées sur chacun des contacts.

2. Conditions aux limites

a. Du côté du contact Schottky

Dans la configuration où la diode est polarisée très en direct, on peut négliger le courant en inverse : le contact Schottky se comporte alors comme un contact absorbant pour les électrons qui y parviennent. Ceux-ci peuvent éventuellement être réfléchis (effet associé à l'effet tunnel – section **II-I.4.1**) si ce dernier est pris en compte. Autour de 0V et à polarisation négative, le courant en inverse devient prédominant et il devient nécessaire de considérer les électrons qui proviennent du métal pour aller vers les SC. Pour déterminer le nombre de particules à injecter à chaque pas sur le temps, l'équation (**II-I.2.1**) donnant la densité de courant du métal vers le SC est utilisée, de la même façon que dans [Sun03] :

$$J_{m \rightarrow s} = \frac{A^* T}{k_B} \int_0^\infty TC(E) f_m(E) (1 - f_s(E)) dE \quad (\text{II-I.2.1})$$

Avec A^* une pseudo-constante de Richardson, T la température en K, k_B la constante de Boltzmann, TC le coefficient de transmission, f_m et f_s la fonction de distribution de Fermi-Dirac dans le métal et dans le SC.

La pseudo-constante de Richardson A^* est ajustée pour que, à polarisation nulle, la densité de courant totale soit nulle. Dans le cas où l'effet tunnel est considéré, les particules à injecter sont placées au point de retour (*turning point* : point correspondant au passage d'une partie « tunnel » à une partie « classique » ou inversement) suivant leur énergie incidente [Pas07]. Sinon, elles sont injectées au niveau du contact Schottky.

b. Du côté du contact ohmique

L'article [Gon96] propose une modélisation du côté du contact ohmique dans le cas d'une simulation Monte Carlo. L'objectif est de reproduire le comportement d'un contact ohmique idéal, c'est-à-dire une région à l'équilibre thermique même s'il y a du courant. Pour cela, dans la cellule proche du contact ohmique, la concentration de porteurs libres doit rester constante et égale à la densité d'atomes donneurs N_d .

Plusieurs distributions de vitesse sur les particules injectées du côté du contact ohmique ont été comparées afin d'évaluer leur impact sur les caractéristiques statiques et le comportement en bruit d'une diode Schottky. Une distribution Maxwellienne « pondérée par la vitesse » (*velocity-weighted Maxwellian*) pour la composante v_x suivant l'axe de la diode et une distribution Maxwellienne standard pour les deux autres composantes v_y et v_z donnent les résultats physiques les plus cohérents au voisinage du contact ohmique sur la concentration de porteurs, le potentiel, le champ électrique ou encore l'énergie moyenne des particules. Ces distributions sont représentées sur la figure II-I.2.1 et leur fonction de densité respective s'écrit :

$$f(v_x) = \frac{m_{sc}^*}{k_B T} v_x \cdot e^{-\frac{m_{sc}^* v_x^2}{2k_B T}} \quad \text{et} \quad f(v_{y,z}) = \sqrt{\frac{m_{sc}^*}{2\pi k_B T}} e^{-\frac{m_{sc}^* v_{y,z}^2}{2k_B T}} \quad (\text{II-I.2.2})$$

Avec m_{sc}^* la masse effective de l'électron en vallée centrale.

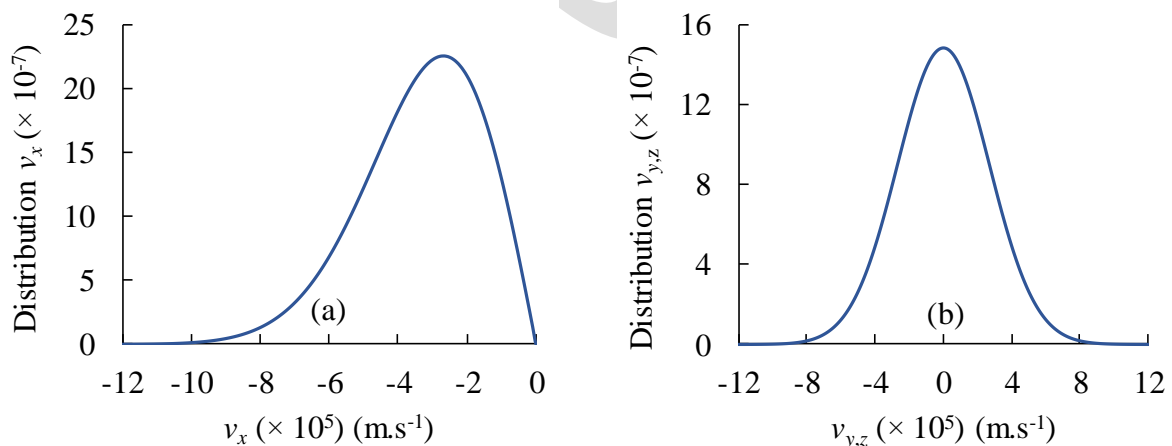


Figure II-I.2.1 – (a) Représentation d'une distribution « Maxwellienne pondérée par la vitesse » pour la vitesse v_x et (b) d'une distribution Maxwellienne pour les vitesses

v_y et v_z

D'après [Hes91], il est nécessaire de pondérer la distribution Maxwellienne classique par v_x afin de tenir compte d'une probabilité plus élevée pour une particule « rapide » d'entrer dans le dispositif. L'article [Gon96] proposait également une autre méthode basée sur un réservoir de particules où les particules ont le temps de stabiliser leur état avant d'entrer dans le dispositif. Elle permet certes de ne pas imposer les distributions sur la vitesse des particules injectées mais nécessite plusieurs mailles supplémentaires pour le réservoir et un temps de simulation plus important.

Les distributions choisies précédemment supposent que les bandes sont paraboliques et que le semi-conducteur n'est pas dégénéré. Cependant, dans la zone N^+ , le dopage N_d peut atteindre $5 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, correspondant pour GaAs à un SC dégénéré avec un niveau de Fermi situé bien au-dessus du bas de la bande de conduction. Ceci conduit à une forte modification des distributions. En considérant que les bandes sont paraboliques et que le SC est dégénéré, la distribution de vitesse n'est plus une Maxwellienne mais vérifie l'équation (II-I.2.3) :

$$f(v_{y,z}) \propto \ln \left[1 + \exp \left(-\frac{m_{sc}^* v_{y,z}^2}{2k_B T} + F_{1/2}^{-1} \left(\frac{\sqrt{\pi} N_d}{2 N_c} \right) \right) \right] \quad (\text{II-I.2.3})$$

Où N_c représente la densité d'états effective du bas de la bande de conduction, N_d le dopage et $F_{1/2}^{-1}$ la fonction réciproque de l'intégrale de Fermi $F_{1/2}$ telle que :

$$F_{1/2}(\eta) = \int_0^\infty \frac{\sqrt{\varepsilon}}{1 + \exp(\varepsilon - \eta)} d\varepsilon \quad (\text{II-I.2.4})$$

Comme précédemment, la distribution de vitesse suivant l'axe de la diode $f(v_x)$ doit être multipliée par v_x .

Dans le cas du GaAs, le coefficient de non-parabolicité α modifie dans une moindre mesure les distributions. En tenant compte de la dégénérescence et de la non-parabolicité, la distribution en énergie est donnée dans ce cas par [Ari92] :

$$f(\varepsilon) \propto \frac{(1 + 2\alpha\varepsilon)\sqrt{\varepsilon(1 + \alpha\varepsilon)}}{1 + \exp\left(\frac{E_c - E_F}{k_B T}\right) \exp\left(\frac{\varepsilon}{k_B T}\right)} \text{ avec } E_c - E_F = -F_{1/2}^{-1}\left(\frac{\sqrt{\pi} N_d}{2 N_c}\right) \quad (\text{II-I.2.5})$$

Dans cette configuration, il est difficile d'obtenir analytiquement une distribution pour chaque composante du vecteur vitesse. On propose alors de déterminer les distributions de k_x , k_y et k_z par une méthode numérique permettant de reconstruire la distribution en énergie

donnée par (II-I.2.5). La relation entre l'énergie et les composantes du vecteur d'onde k_x , k_y et k_z dans le cas de bandes non-paraboliques est :

$$\varepsilon = \frac{1}{2\alpha} \left[\sqrt{1 + \frac{2\alpha\hbar^2}{m_{sc}^*} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)} - 1 \right] \quad (\text{II-I.2.6})$$

Pour reconstruire la distribution en énergie, on crée plusieurs triplets (k_x, k_y, k_z) dont chaque composante suit une distribution uniforme entre k_{\min} et $k_{\max} = -k_{\min}$. On calcule ensuite l'énergie associée à chaque triplet à partir de la relation (II-I.2.6) en créant une nouvelle distribution en énergie. Si on « dépasse » la distribution en énergie souhaitée, le triplet (k_x, k_y, k_z) est rejeté. Ce processus est réitéré tant que la distribution n'est pas entièrement reconstruite. Les triplets (k_x, k_y, k_z) non rejetés permettent d'obtenir une nouvelle distribution, normalement identique pour chaque composante. On peut déduire la distribution de vitesse [Hoc81] telle que :

$$\vec{v} = \frac{\frac{\hbar}{m_{sc}^*} \vec{k}}{1 + 2\alpha\varepsilon} \quad (\text{II-I.2.7})$$

L'injection de porteurs du côté du contact ohmique pourra ainsi s'appuyer sur cette nouvelle distribution. Les distributions des trois composantes du vecteur vitesse et du vecteur d'onde sont représentées sur la figure II-I.2.2 pour du GaAs dopé à $5 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$. On remarque que la forme de la distribution s'approche de la Maxwellienne dans le cas d'un semi-conducteur non dégénéré mais celle-ci est plus étalée, amenant ainsi à une énergie moyenne plus élevée, de l'ordre de $4k_B T$ pour un dopage égal à $5 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$. Le coefficient de non-parabolicité modifie légèrement les distributions. Pour la distribution suivant l'axe de la diode, il est nécessaire de la pondérer par v_x comme ce qui a été fait précédemment.

Dans cette configuration de semi-conducteur fortement dégénéré, les nouvelles distributions créées ne peuvent s'appliquer que si le principe d'exclusion de Pauli est pris en considération dans la zone N^+ . Celui-ci sera explicité dans la partie suivante.

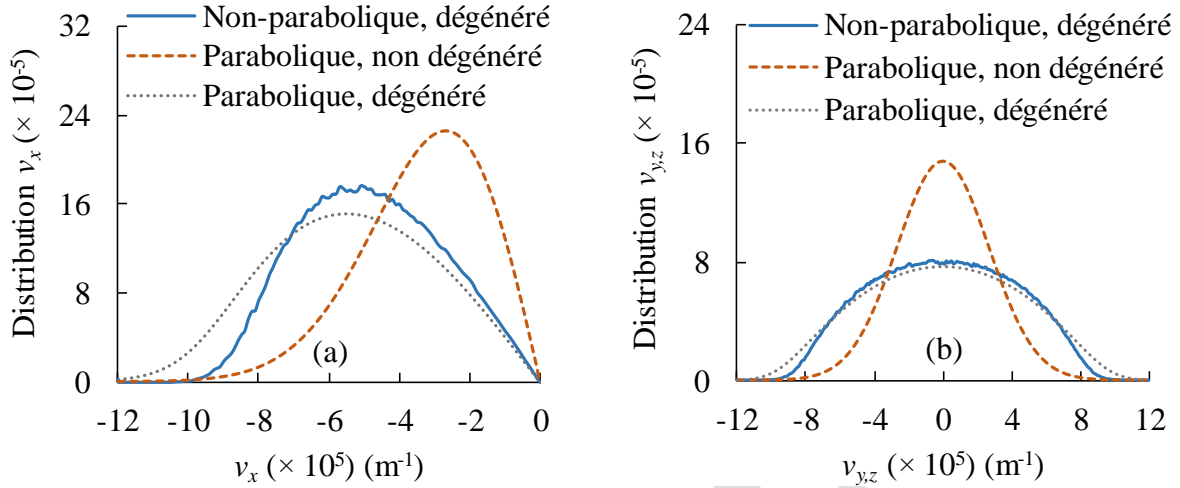


Figure II-I.2.2 – Distribution des vitesses pour du GaAs dopé à $5 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$. Les distributions ont été normalisées telles que l'intégrale sur toute la distribution soit égale à 1

3. Principe d'exclusion de Pauli

Le principe d'exclusion de Pauli (PEP) joue un rôle dans la détermination de la probabilité de transition de l'état \vec{k} vers un état \vec{k}' par l'intermédiaire du terme $1 - f(\vec{k}')$ qui traduit la probabilité que l'état d'arrivée soit disponible. Pour un matériau non dégénéré, le niveau de Fermi se trouve en dessous de la bande de conduction, amenant à $f(\vec{k}') \ll 1$ et le principe d'exclusion de Pauli ne joue aucun rôle. Dans les diodes Schottky sur GaAs, la zone dopée peut atteindre $5 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$. Le niveau de Fermi est alors au-dessus du bas de la bande de conduction et le terme $1 - f(\vec{k}')$ doit être calculé. Mais ceci suppose que l'on connaisse *a priori* la fonction de distribution des électrons à chaque instant et il devient alors nécessaire de recalculer à chaque pas sur le temps les probabilités d'interaction, ce qui semble prohibitif en temps de calculs et en occupation mémoire. Pour contourner cette difficulté, on propose d'utiliser la méthode de réjection de Lugli et Ferry [Lug85].

La première étape consiste à mailler l'espace réciproque. Le maillage le plus simple consiste en une décomposition de l'espace réciproque en plusieurs cellules cubiques de longueur Δk comme dans l'article [Lug85]. Chaque cellule de volume $\Omega_c = \Delta k^3$ peut comporter au plus N_e électrons avec :

$$N_e = \frac{2\Omega_c N}{8\pi^3 N_d} = \frac{2\Delta k^3 N}{8\pi^3 N_d} \quad (\text{II-I.3.1})$$

Où N est le nombre de particules simulées et N_d le dopage.

En simulant 100 000 particules et en considérant une concentration de porteurs égale à $5 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, on obtient $\Delta k = 2,92 \times 10^5 \text{ cm}^{-1}$ pour avoir $N_e = 4$ particules par cellule. On souhaite mailler entièrement la sphère de Fermi dont le rayon, à température nulle vaut :

$$|k_f| = (3\pi^2 N_d)^{1/3} \quad (\text{II-I.3.2})$$

Pour un dopage $N_d = 5 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, on a $|k_f| = 5,29 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$. Afin de limiter la taille du tableau comptant le nombre de particules par cellule élémentaire, seulement un huitième de l'espace réciproque est maillé en considérant les valeurs absolues des composantes du vecteur d'onde $|k_x|$, $|k_y|$ et $|k_z|$. Le nombre total de mailles s'élève dans ce cas à 6859.

Lorsqu'on est à une température T non nulle, il n'est pas nécessaire de mailler toute la sphère de Fermi. Les porteurs qui participent à la conduction sont ceux qui ont une énergie comprise entre $-k_B T$ et $k_B T$.

Pour facilement faire le lien entre l'énergie et le vecteur d'onde k associées à chaque élément de volume, on pourrait éventuellement penser à effectuer une discrétisation sphérique. Cependant, en gardant un espacement dk constant entre chaque sphère, le nombre d'électrons maximal que doit contenir chaque maille n'est pas constant, ce qui amène à sur-échantillonner le centre de zone et à sous-échantillonner le reste. On peut néanmoins avoir recours à un maillage non-linéaire avec une recherche rapide des index sur les éléments du volume. L'espacement dk entre chaque sphère n'est donc plus constant pour contenir le même nombre de particules. Le rayon k_p de la p -ième sphère pour obtenir N_e particules dans chaque élément de volume vérifie dans ce cas :

$$pN_e = \frac{2\Omega_c V}{8\pi^3} = \frac{k_p^3 N}{3\pi^2 N_d} \text{ d'où } k_p = \left(\frac{3p\pi^2 N_e N_d}{N} \right)^{1/3} = p^{1/3} k_s \text{ avec } k_s = \left(\frac{3\pi^2 N_e N_d}{N} \right)^{1/3} \quad (\text{II-I.3.3})$$

L'indice de l'élément de volume p correspondant au k de la particule à traiter est alors déduit facilement en prenant :

$$p = \left\lceil \left(\frac{k}{k_s} \right)^3 \right\rceil \text{ où } \lceil \cdot \rceil \text{ représente la partie entière par excès} \quad (\text{II-I.3.4})$$

Le maillage de l'espace réciproque est seulement réalisé à l'intérieur de la sphère de Fermi. L'indice maximum p_{\max} correspondant au dernier élément de volume vaut alors :

$$p_{\max} = \left\lceil \left(\frac{k_f}{k_s} \right)^3 \right\rceil = \left\lceil \frac{N}{N_e} \right\rceil \quad (\text{II-I.3.5})$$

En prenant la même configuration que précédemment ($N = 100\,000$ et $N_e = 4$), on arrive à un total de 25 000 mailles en maillant toute la sphère de Fermi, soit presque quatre fois plus qu'en maillant un huitième de l'espace réciproque avec des éléments cubiques.

Après le processus d'interaction, une technique de réjection a été mise en œuvre pour accepter ou non le processus d'interaction : un nombre aléatoire est tiré entre 0 et 1 puis comparé au taux d'occupation de la maille considérée. Dans le cas où ce nombre est supérieur au taux d'occupation, l'interaction est rejetée. Sinon, elle subit l'interaction et continue son vol libre. Cette méthode permet d'éviter de recalculer à chaque pas sur le temps les taux d'interactions. Cependant, cette technique de réjection n'est appliquée qu'à la fin de chaque interaction mais pas à la fin des vols libres, ce qui peut conduire à une fonction de distribution supérieure à un pour de faibles énergies [Bor98]. En effet, les particules peuvent se retrouver dans une cellule où elles n'ont pas d'état disponible et donc dépasser le taux d'occupation maximal de la cellule d'arrivée. On propose, dans le cas où l'état d'arrivée n'est pas disponible à la fin du vol libre, que la particule retourne dans la cellule où son dernier état était disponible. De plus, les trois composantes du vecteur d'onde sont randomisées en veillant à ce que la particule reste dans sa cellule. Ce traitement spécifique a été ajouté car des « sauts » étaient observés dans les distributions.

La distribution en énergie et la fonction de distribution obtenues pour un champ de 1 kV/cm avec les deux maillages présentés (cubique et sphérique) sont donnés sur la figure II-I.3.1. Ces courbes sont également comparées à la distribution en énergie donnée par l'équation (II-I.2.5) et à la fonction de Fermi-Dirac. Quelle que soit la discrétisation utilisée, on constate que la fonction de distribution est bien inférieure à 1 pour toutes les énergies et qu'elle est voisine de la fonction de Fermi-Dirac. Néanmoins, la discrétisation sphérique augmente d'un facteur deux les temps de simulations à cause du calcul de l'indice p donné par l'équation (II-I.3.4).

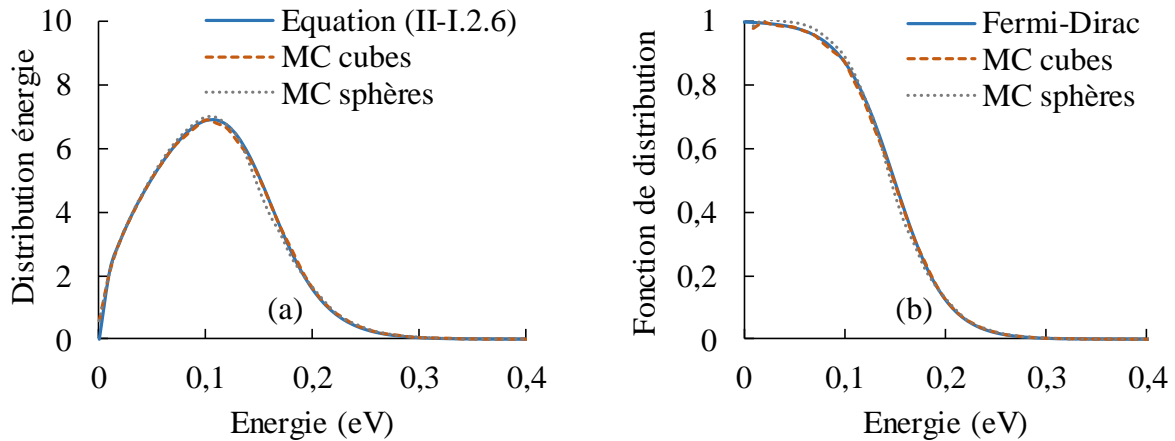


Figure II-I.3.1 – (a) Distribution en énergie des particules et (b) fonction de distribution associée avec la méthode de Lugli et Ferry (LF) pour $N_d = 5 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, $N = 100\ 000$, $N_e = 4$ et un champ électrique de 1 kV/cm avec un maillage cubique et sphérique

Etude d'une diode Schottky

Lorsque le principe d'exclusion de Pauli n'est pas pris en compte, le potentiel sur le contact ohmique est calculé en faisant l'approximation de Boltzmann et les distributions de vitesse dans le cas d'un SC non-dégénéré (section II-I.2.b) sont utilisées pour l'injection des porteurs.

La figure II-I.3.2 illustre la distribution spatiale normalisée de l'énergie le long d'une diode Schottky dopée à $5 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ sur 250 nm (zone N) et à $5 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ sur 50 nm (zone N^+). Avec ces valeurs de dopage, le PEP doit être pris en compte sur toute la longueur et la distribution de vitesse des porteurs injectés sur le contact ohmique est modifiée telle que présentée dans la section II-I.2.b. On observe bien une modification de la distribution le long de la structure dans la zone N, dans la zone N^+ et au niveau de la transition N- N^+ . Sans le PEP, la distribution n'est pas modifiée le long de la structure et on retrouve la distribution classique d'un SC non-dégénéré, excepté dans la région proche du contact Schottky où la distribution de vitesse tend vers une demi-Maxwellienne [Bac76], expliquant ainsi l'allure de la distribution dans cette zone sur la figure II-I.3.2.

Bien que la méthode de Lugli et Ferry (LF) présente l'inconvénient d'être lourde en temps de calcul et en stockage de données lors du couplage avec l'espace réel, nous conserverons cette solution pour prendre en compte le PEP lorsque des dopages supérieurs à $5 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ sont considérés. Le maillage sous forme de cubes est également retenu pour garder des temps de simulation raisonnables par rapport au maillage sphérique. D'autres auteurs [Fis88] [Zeb07] ont également proposé de calculer au cours du temps les paramètres de la fonction de

distribution et d'utiliser ensuite la même méthode de réjection de LF pour accepter ou non le processus d'interaction.

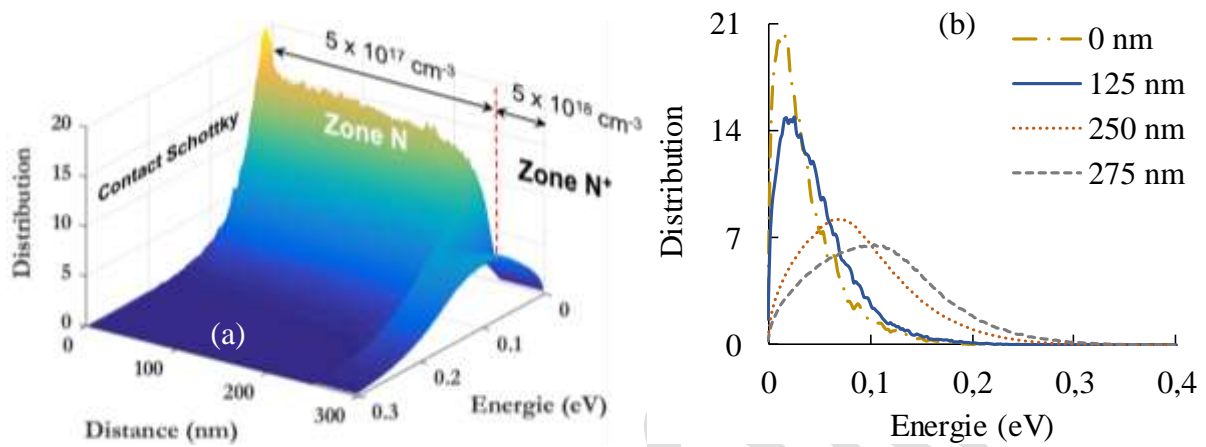


Figure II-I.3.2 – (a) Distribution spatiale normalisée de l'énergie pour une diode dopée à $5 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ dans la zone N et à $5 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ dans la zone N⁺ (b) Distribution normalisée de l'énergie à une distance de 0 nm (contact Schottky) 125 nm (zone N), 250 nm (transition N-N⁺) et 275 nm (zone N⁺)

Avec la condition aux limites précédente, il faut également veiller à ce qu'il existe un état disponible pour la particule injectée dans la cellule proche du contact ohmique. La figure II-I.3.3 représente la variation spatiale de la concentration de porteurs et du champ électrique du côté du contact ohmique dans la même configuration que la figure II-I.3.2. On remarque que le champ électrique n'est pas nul sur le contact ohmique ($x = 300 \text{ nm}$) à cause d'une accumulation de porteurs dans cette zone avec cette condition aux limites. La concentration de porteurs en $x = 300 \text{ nm}$ est néanmoins bien égale à $5 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$. Nous avons tenté de modifier cette condition limite en ajoutant un réservoir de 50 nanomètres, dans le même esprit que l'article [Gon96]. Bien que le temps de simulation soit multiplié par 1,2 avec l'augmentation sensible du nombre de porteurs dans la zone N⁺, la concentration de porteurs est bien constante proche du contact ohmique et le champ électrique est nul. Nous conserverons pour la suite cette condition aux limites lorsque le principe d'exclusion de Pauli est considéré dans la zone N⁺.

Nous avons également constaté, en modifiant différents paramètres physiques tels que la longueur de la zone N, la longueur de la zone N⁺, ou encore la longueur du réservoir que des écarts de 30 % sur le courant statique pouvaient être observés suivant la configuration considérée.

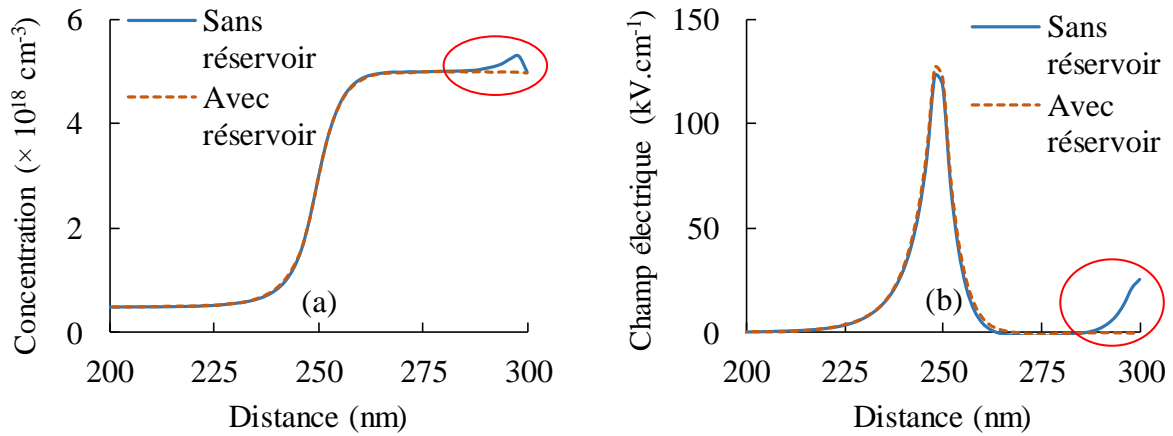


Figure II-I.3.3 – (a) Variation spatiale de la concentration de porteurs et (b) du champ électrique. Le contact ohmique est situé en $x = 300$ nm et l'homo-jonction N/N⁺ à 250 nm.

Le tableau II-I.3.1 illustre les différentes configurations simulées avec le courant obtenu pour une tension de 0,7 V (tension pour laquelle la résistance série n'est pas visible sur la caractéristique statique) et l'erreur sur le courant par rapport à la configuration 1. ℓ_N représente la longueur de la zone N, ℓ_{res} la longueur du réservoir, t_{trans} le temps attendu avant de commencer à calculer la moyenne du courant, t_{moy} le temps choisi pour faire la moyenne du courant, Δt le pas temporel, Δx le pas spatial, N_d^+/ℓ_{N^+} le dopage et la longueur de la zone N⁺. Le dopage de la zone N est fixé à $5 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ et la surface à $1 \mu\text{m}^2$. $np1$ représente le nombre de particules simulées dans une maille de longueur Δx pour une concentration de porteurs égale à N_d^+ . Les paramètres qui influencent le plus le courant sont : le dopage de la zone N⁺ (configuration 9), la longueur du réservoir (configuration 3 et 13), la longueur de la zone N⁺ (configuration 10 et 14). Ces valeurs ne devraient pas être si différentes de la configuration 1.

Cette étude montre que l'injection des porteurs du côté du contact ohmique conditionne le courant en statique. Dans l'article [Par11b], la simulation d'une diode 1D sur GaAs en Monte-Carlo sans prendre en compte l'effet tunnel à l'interface métal/SC conduit à un coefficient d'idéalité n d'environ 1,4 sur la caractéristique statique. Il n'y a *a priori* aucune raison que le coefficient d'idéalité ne soit pas proche de 1 dans cette configuration, le SC n'étant pas dégénéré dans la zone N (10^{17} cm^{-3}). Il est possible que le traitement effectué sur la condition aux limites avec le principe d'exclusion de Pauli dans la zone N⁺ dopée à $2 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ en soit la cause. Par ailleurs, même en considérant le modèle de l'émission thermoïonique pour un semi-conducteur dégénéré (sans effet tunnel), le coefficient d'idéalité reste égal à 1. En effet, à partir d'une certaine tension, la distribution associée à la portion de

porteurs qui ont l'énergie suffisante au début de la ZCE pour atteindre le contact Schottky suit l'approximation de Boltzmann.

BROUILLON

Config.	ℓ_N (nm)	ℓ_{res} (nm)	t_{trans} (ps)	t_{moy} (ps)	dt (fs)	dx (nm)	np1	N_d^+ (cm ⁻³)	ℓ_{N^+} (nm)	Courant (mA)	Erreur (%)
1	100	50	10	10	1	2	6000	5×10^{18}	50	0,134	0
2	150	50	10	10	1	2	6000	5×10^{18}	50	0,140	4,5
3	100	100	10	10	1	2	6000	5×10^{18}	50	0,150	11,9
4	100	50	20	10	1	2	6000	5×10^{18}	50	0,129	3,7
5	100	50	10	20	1	2	6000	5×10^{18}	50	0,131	2,2
6	100	50	10	10	0,5	2	6000	5×10^{18}	50	0,132	1,5
7	100	50	10	10	1	1	6000	5×10^{18}	50	0,134	0
8	100	50	10	10	1	2	12 000	5×10^{18}	50	0,120	10,4
9	100	50	10	10	1	2	6000	10^{18}	50	0,178	32,8
10	100	50	10	10	1	2	6000	5×10^{18}	100	0,142	6,0
11	300	50	10	10	1	2	6000	5×10^{18}	50	0,150	11,9
12	500	50	10	10	1	2	6000	5×10^{18}	50	0,151	12,7
13	100	200	10	10	1	2	6000	5×10^{18}	50	0,166	23,9
14	100	50	10	10	1	2	6000	5×10^{18}	200	0,155	15,7

Tableau II-I.3.1 – Influence de la variation de différents paramètres sur le courant total et calcul de l'erreur par rapport à la configuration 1 pour une tension de 0,7 V, un dopage de 5×10^{17} cm⁻³ dans la zone N et une surface de 1 μm^2

4. Interface métal/semi-conducteur

a. Hauteur de barrière

Le premier modèle sur la formation d'une barrière Schottky à l'interface entre un métal et un semi-conducteur a été proposé par Schottky [Sch39] et Mott [Mot39] en 1939. Ce modèle considère le métal et le semi-conducteur indépendants l'un de l'autre. La hauteur de barrière ϕ_{Bn} vue par les électrons du métal, réputés être au voisinage de la surface de Fermi, est alors donnée par la différence entre le travail de sortie $q\phi_m$ du métal (i.e. l'énergie nécessaire pour extraire un électron du niveau de Fermi du métal) et l'affinité électronique $q\chi_s$ du métal (i.e. l'énergie nécessaire pour promouvoir un électron localisé en bas de la bande de conduction au niveau du vide) :

$$\phi_{Bn} = \phi_m - \chi_s \quad (\text{II-I.4.1})$$

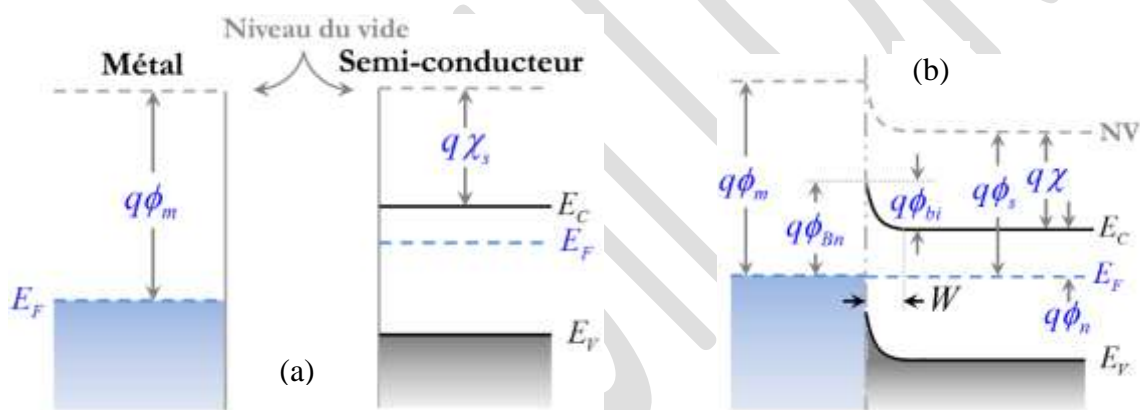


Figure II-I.4.1 – Diagramme des bandes pour un contact métal/SC (a) avant mise en contact et (b) après mise en contact à l'équilibre (pour $\phi_m > \phi_s$)

Rappelons quelques éléments de la théorie IGS (*Induced Gap States*). En 1965, Cowley et Sze [Cow65] ont proposé un modèle analytique d'une barrière Schottky non idéales qui intégrerait des états de surfaces. Les principales caractéristiques du modèle sont indiquées en figure II-I.4.2. Une très fine couche d'interface isolante entre le métal et le semi-conducteur dont l'épaisseur δ est de l'ordre de quelques couches atomiques est introduite. Dans l'approche initiale l'origine de cette couche est obscure. Mais elle joue un rôle essentiel dans la conservation de la charge :

$$Q_M + Q_S + Q_{SS} = 0 \quad (\text{II-I.4.2})$$

Q_M est la charge superficielle à la surface du métal, Q_S est la charge de la zone déplétée du côté du semi-conducteur et Q_{SS} est la charge de surface constituée d'un dipôle électrique avec une séparation de l'ordre des dimensions atomiques (dipôle microscopique).

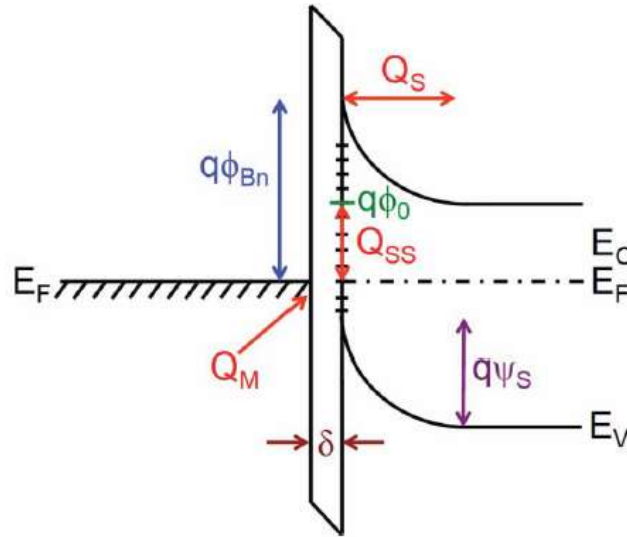


Figure II-I.4.2 – Diagramme de bande à l'équilibre pour une barrière Schottky non idéale d'après Cowley and Sze

Plutôt que d'imaginer le métal et le SC séparés par une fine couche d'isolant comme le firent Cowley et Sze, la modélisation IGS consiste à supposer que l'interface est une couche de SC mais dont la réponse électronique est caractérisée par sa fonction diélectrique à haute fréquence (optique), ϵ_{ISR} , plutôt que par sa fonction diélectrique statique.

D'après des considérations liées à l'électrostatique et aux bandes d'énergie, Cowley and Sze ont estimé la hauteur de barrière Schottky ϕ_{Bn} sous la forme suivante (en ignorant l'effet de force image) :

$$\phi_{Bn} = S_{MS} (\phi_m - \chi_s) + (1 - S_{MS}) \left(\frac{E_G}{q} - \phi_0 \right) \quad (\text{II-I.4.3})$$

E_G est l'énergie de bande interdite, ϕ_0 est le niveau de neutralité de la charge référencé par rapport au sommet de la bande de valence et S_{MS} est un facteur de pondération qui dans le cadre des IGS s'apparente à pente $S_{MS} = d\phi_{Bn}/d\phi_m$. D'autre part, ce paramètre peut être calculé d'une autre façon et peut être mesuré à l'aide de mesures de capacité.

$$S_{MS} = \frac{1}{1 + \frac{qD_{SS}}{C_i}} = \frac{1}{1 + \frac{C_{SS}}{C_i}} \quad (\text{II-I.4.4})$$

Où D_{SS} est la densité d'états de surface, C_i la capacité par unité de surface de la fine couche d'isolant d'interface et C_{SS} la capacité par unité de surface liée aux états de surface.

La formule de la hauteur de barrière tend vers la jonction idéale si D_{SS} tend vers 0 (on retrouve alors la relation de Mott-Schottky). En revanche, si la densité d'états de surface est très grande, S_{MS} tend vers 1 et $\phi_{Bn} \approx \frac{E_G}{q} - \phi_0$. On parle de blocage du niveau de Fermi (*Fermi level pinning*).

En 1977, Louie et al. [Lou77] ont montré que les effets des états d'interface étaient plus prononcés dans les matériaux à fort caractère covalent que dans les semi-conducteurs à fort caractère ionique. En 1977 et 1978, Tejedor et Flores [Tej77] [Tej78] ont introduit le concept de niveau de neutralité de charge et de dipôle dans la problématique des interfaces. En 1984, Tersoff a produit un modèle pour la jonction Métal-SC [Ter84]. Tersoff a souligné que la localisation du niveau de neutralité de charge pouvait être lié au point de branchement de la structure électronique complexe du semi-conducteur massif.

En 1986, Mönch propose une formulation empirique du paramètre d'interface SMS, sous la forme :

$$S_{MS} = \frac{A_X}{1 + 0.1(\epsilon_{\infty SR} - 1)^2} \quad (\text{II-I.4.5})$$

$A_X = 0.86$ eV/Unité de Miedema est le coefficient de proportionnalité entre le travail de sortie et l'électronégativité de Miedema des métaux.

Cette formule joue un rôle clef dans les approches empiriques des états de surface.

D'après Mönch, la hauteur de barrière idéale d'une Schottky de type p, s'établit sous la forme :

$$\Phi_{Bp} = \Phi_{Bp}^p - S_{MS} (X_m - X_{SC}) \quad (\text{II-I.4.6})$$

où $\Phi_{Bp} = W_{bp} - W_v(\Gamma)$ est la différence d'énergie entre le sommet de la bande de valence en centre de zone à l'énergie de point de branchement. Il correspond à une hauteur de barrière sans transfert de charge.

Le concept explicité par Baldereschi [Bal73] selon lequel la valeur de fonction en certains points k, spéciaux, de la zone de Brillouin est égale à la valeur moyenne de la fonction sur toute la zone de Brillouin facilite le calcul de l'énergie au point de branchement des semi-

conducteurs réels. Selon l'auteur, le meilleur point spécial serait $k_{mv} = (2\pi/a) (0.6223, 0.2953, 0)$, a étant le paramètre de maille.

En ajustant les résultats de Tersoff, Mönch a établi la relation :

$$\Phi_{Bp}^p = 0.49W_{dg} - [W_v(\Gamma) - W_v(k_{mv})] \quad (\text{II-I.4.7})$$

Où W_{dg} est l'énergie de bande interdite diélectrique. Le lecteur trouvera le détail des calculs dans la référence [Mön11].

Cette approche phénoménologique n'est pas pleinement satisfaisante. Il conviendrait pour chaque couple métal/SC d'effectuer des calculs ab initio afin d'apprécier finement les états électroniques de surface dans le gap ou au-delà des extrema des bandes du matériau massif ainsi que les densités d'états. Cependant, de tels calculs, à supposer qu'ils soient corrects, ne diraient rien d'éventuels états extrinsèques. Le lecteur fera profit de la lecture de l'article de review de Raymond T. Tung [Tun14] qui discute assez longuement des limites des approches analytiques dont relèveraient, selon lui, celles de Mönch. Pour Tung, il n'y a pas d'alternative aux calculs ab initio pour le calcul des états de surface ou d'interface.

Cependant, le traitement évoqué au début de ce paragraphe peut être mis en œuvre en présence d'états intrinsèques ou extrinsèques et s'appuie, possiblement, sur des mesures. La couche d'oxyde suggérée par Cowley et Sze n'existe, sans doute pas souvent, et nous avons vu comment dépasser cette contradiction.

S'il ne s'agissait que de reproduire la caractéristique I-V de la diode Schottky en direct, entre $V = 0$ et le voisinage de ϕ_{bn} , il ne serait pas nécessaire de discuter plus avant. Une valeur moyenne de cette hauteur de barrière serait largement suffisante car le champ électrique à l'interface varie assez peu et les effets de force image et tunnel associés à l'émission thermoionique conviendraient pour reproduire ou expliquer le courant en régime direct. Mais il n'en va pas de même pour la diode polarisée en inverse. Suivant la longueur et le dopage de la zone N, le pic de champ électrique à l'interface peut devenir très élevé. Le courant tunnel peut donc varier avec la tension inverse appliquée V_r . Trois effets contrôlent ce courant et son augmentation avec V_r .

En effet, si on ne considère que l'émission thermoionique pour expliquer le courant en inverse sans modulation de la hauteur de barrière, alors ce courant devrait être strictement constant. La prise en compte de l'effet tunnel introduit une première dépendance du courant en inverse I_r avec V_r . La prise en compte de l'effet de force image impose une dépendance de I_r avec V_r . Ces deux effets sont qualifiés de doux. L'effet physique de nature à produire une

manifestation spectaculaire sur le réseau I_r - V_r est la modulation de la hauteur de barrière par le champ électrique à l'interface.

Revenons à la densité d'états d'interface D_{SS} . On a vu que plus elle était élevée, plus on assistait à un verrouillage du niveau de Fermi à l'interface. Suivant ce paramètre, la hauteur de barrière sera susceptible d'être modulée par la valeur du champ électrique à l'interface, indépendamment de l'effet de force image. Dans la référence [Rho88], Rhoderick et Williams propose une formulation de la hauteur de barrière de la jonction M-SC sous la forme :

$$\phi_{Bn} = \phi_{Bn0} - \alpha F_{\max} \quad \text{avec} \quad \alpha = \frac{\delta \epsilon_s}{\epsilon_i + q \delta D_{SS}} \quad (\text{II-I.4.8})$$

Où F_{\max} est le champ électrique au sommet de la barrière.

Nous aurons besoin de ce paramètre plus tard pour divers matériaux III-V. Malgré une étude bibliographique serrée, il n'a pas été possible de déterminer ce paramètre avec précision pour InGaAs et GaSb. Alors que quelques données permettraient de le calculer pour GaAs et GaN. Dans la phase de recherche de la structure optimale de la diode Schottky pour réaliser un doubleur de fréquence ou un circuit de rectification, nous avons choisi de réaliser des simulations avec deux valeurs extrêmes de ce paramètre : explicitement 15 et 35 Angströms. Nous pourrions ainsi nous faire une opinion sur le rôle qu'il joue sur le fonctionnement de la diode en inverse.

b. Effet de force image

Le phénomène de force image [Sze06] qui se produit à l'interface métal/semi-conducteur entraîne un abaissement de la barrière de potentiel à cause du champ électrique au voisinage de cette interface. En effet, lorsqu'un électron du semi-conducteur approche de l'interface, il induit dans le métal une charge positive fictive, symétrique de celle de l'électron par rapport à l'interface. L'interaction électrostatique entre ces deux charges va faciliter le passage de l'électron dans le métal, ce qui peut être assimilé à un abaissement spatial de la barrière de potentiel au voisinage du contact Schottky. En supposant que la bande de conduction est linéaire sur quelques nanomètres, l'ajout de l'effet de force image modifie le profil tel que :

$$E_c(x) = q\phi_{bn} - qF_{\max}x - \frac{q^2}{16\pi\epsilon_{sc}x} \quad (\text{II-I.4.1})$$

Avec ϕ_{bn} la hauteur de barrière à l'interface métal/SC vue par les électrons du métal, F_{\max} le champ électrique maximal à l'interface métal/SC et ϵ_{sc} la permittivité du SC.

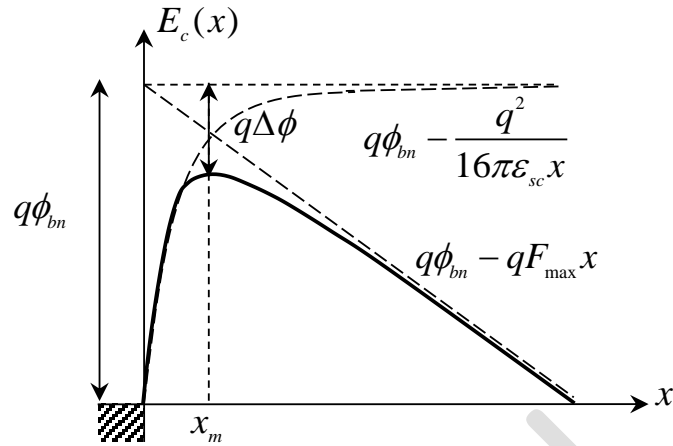


Figure II-I.4.1 – Variation de la bande de conduction proche de l’interface métal/SC avec la prise en compte de l’effet de force image

La figure **II-I.4.1** illustre l’évolution spatiale de la bande de conduction. On constate un abaissement de la barrière de valeur $\Delta\phi$ à la distance x_m telle que :

$$\Delta\phi = \sqrt{\frac{qF_{\max}}{4\pi\epsilon_{sc}}} \text{ et } x_m = \sqrt{\frac{q}{4\pi\epsilon_{sc}F_{\max}}} \quad (\text{II-I.4.2})$$

L’allure du potentiel à l’interface métal/SC sera légèrement modifiée pour le calcul du coefficient de transmission avec la prise en compte de l’effet tunnel.

c. Effet tunnel

Dans le modèle de l’émission thermoionique (TH) [Sze06], les électrons qui ont une énergie E inférieure à la hauteur de barrière ne peuvent pas passer la barrière de potentiel et retournent au début de la ZCE. Le coefficient de transmission TC définissant la probabilité qu’un électron d’énergie E (référéncée par rapport au niveau de Fermi dans le métal E_{fm}) passe la barrière vaut dans ce cas :

$$TC(E) = \begin{cases} 1 & \text{si } E > q\phi_{bn} \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (\text{II-I.4.3})$$

La prise en compte d’effets quantiques en considérant la nature ondulatoire de l’électron permet de montrer non seulement que la probabilité de traverser la barrière est non nulle lorsque $E < q\phi_{bn}$ mais aussi qu’elle est différente de 1 lorsque $E > q\phi_{bn}$ (l’électron peut être réfléchi) : c’est l’effet Tunnel. Ce processus a un impact non négligeable sur le comportement des diodes Schottky, notamment lorsque la barrière de potentiel est fine, ce qui est le cas pour des dopages élevés (typiquement supérieurs à 10^{17} cm^{-3} pour le GaAs).

Dans l'approximation de la fonction enveloppe et de la masse effective, la résolution de l'équation de Schrödinger 1D donnée par l'équation (II-I.4.4) permet alors de déterminer le coefficient de transmission associé à la barrière.

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + q\phi(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad (\text{II-I.4.4})$$

Avec : m^* la masse effective des porteurs dans la zone considérée
 $\phi(x)$ le potentiel le long de la structure en volt
 $\psi(x)$ la fonction d'onde
 E l'énergie de l'électron

Plusieurs degrés d'approximations peuvent être utilisés pour résoudre cette équation. En faisant l'hypothèse d'un potentiel variant lentement avec la position, on arrive à l'approximation WKB (Wentzel Kramers Brillouin) qui ne considère pas la réflexion potentielle des porteurs ayant une énergie supérieure à la hauteur de barrière. Si l'effet de force image n'est pas pris en compte, le potentiel peut être considéré comme linéaire sur quelques dizaines de nanomètres et le profil de la bande de conduction vérifie :

$$E_c(x) = -qF_{\max}x + q\phi_{bn} \quad (\text{II-I.4.5})$$

Avec F_{\max} le champ électrique maximal à l'interface.

Le coefficient de transmission vaut alors, dans l'approximation WKB [Mat00] :

$$TC(E) = \begin{cases} \exp\left(-\frac{4}{3} \frac{\sqrt{2m_{sc}^*}}{\hbar q F_{\max}} (q\phi_{bn} - E)^{3/2}\right) & \text{si } E < q\phi_{bn} \\ 1 & \text{si } E > q\phi_{bn} \end{cases} \quad (\text{II-I.4.6})$$

Les solutions « exactes » de l'équation de Schrödinger simplifiée (II-I.4.4) dans le semi-conducteur font intervenir les fonctions de Airy de première et de seconde espèce, respectivement notées Ai et Bi [For11]. En supposant que la fonction d'onde dans le métal s'écrit sous la forme d'une onde plane et en appliquant la continuité des fonctions d'ondes et de leurs dérivées à l'interface, le coefficient de transmission est déduit à partir du rapport des courants de probabilité associés à l'onde incidente et à l'onde transmise à travers la barrière de potentiel [Rek99] :

$$TC(E) = \frac{4v_{ms}\pi^{-1}}{(\text{Ai}0 + v_{ms}\text{Bi}0')^2 + (\text{Bi}0 - v_{ms}\text{Ai}0')^2} \quad (\text{II-I.4.7})$$

Avec : $\text{Ai}0 = \text{Ai}(u_0)$; $\text{Bi}0 = \text{Bi}(u_0)$; $\text{Ai}0' = \left. \frac{d\text{Ai}(u)}{du} \right|_{u=u_0}$; $\text{Bi}0' = \left. \frac{d\text{Bi}(u)}{du} \right|_{u=u_0}$; $u_0 = k_F \frac{q\phi_{bn} - E}{qF_{\max}}$

$$v_{ms} = \frac{m_m^* k_F}{m_{sc}^* k_m} ; k_m = \sqrt{\frac{2m_m^* E}{\hbar^2}} \text{ et } k_F = \left(\frac{2m_{sc}^* qF_{\max}}{\hbar^2} \right)^{1/3} .$$

La prise en compte de l'effet de force image modifie le potentiel au voisinage du contact Schottky (section II-I.4.b) et il devient alors nécessaire de calculer numériquement le coefficient de transmission. L'utilisation des matrices de transfert en considérant le potentiel linéaire par morceaux est une technique répandue [Ren07]. Pour chaque nœud i du maillage dans la zone où l'effet tunnel est considéré, il existe une matrice T_i permettant de relier de part et d'autre, l'onde incidente et l'onde transmise. Les termes de la matrice T_i dépendent du champ électrique dans chaque maille et font intervenir les fonctions de Airy. Le coefficient de transmission total est déduit à partir du produit des matrices de transfert.

Avec l'effet de force image, le profil de la bande de conduction est donné par l'équation (II-I.4.1). Cette équation est problématique lorsque x tend vers 0 car le potentiel tend vers l'infini. Par conséquent, on propose de modifier l'allure du potentiel pour éviter cette divergence. Il est choisi constant et égale à $\phi_{bn} - \Delta\phi$ jusqu'à $2x_m$ puis égal au potentiel sans FI au-delà dans le même esprit que [Bar13]. Le coefficient de transmission sera légèrement sous-estimé pour des énergies voisines de la hauteur de barrière. La méthode des matrices de transfert peut devenir lourde en temps de calcul et cet arrangement du potentiel a également l'avantage de se ramener au produit de deux matrices de transfert pour le calcul du coefficient de transmission.

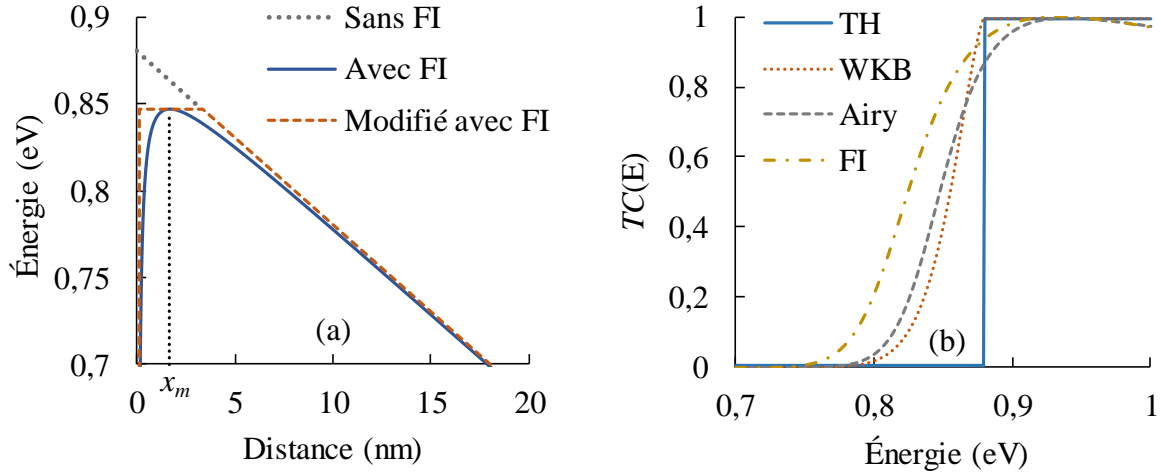


Figure II-I.4.2 – (a) Profil du potentiel sans l'effet de force image (FI), avec FI et modifié pour le calcul du coefficient de transmission en fonction de la distance, (b) Coefficient de transmission en fonction de l'énergie pour les différents degrés d'approximation (TH, WKB, Airy et FI) avec $F_{max} = 100$ kV/cm et $\phi_{bn} = 0,88$ eV sur GaAs

La figure II-I.4.2 présente le coefficient de transmission en fonction de l'énergie pour les quatre modèles (TH, WKB, AIRY et FI) avec un champ électrique égal à 100 kV/cm à l'interface métal/SC. La hauteur de barrière est égale à 0,88 eV et le semi-conducteur est le GaAs. Le choix de la masse de l'électron dans le métal n'a, à ma connaissance, jamais été tranchée. L'article [Ren07] choisit de prendre la même masse que l'électron dans le SC, [Ber17] la choisit telle que $m_{sc}^* = m_0$ et d'autres [Bar13] présentent les résultats pour ces deux masses. Certains auteurs [Win00] la considèrent également comme un paramètre d'ajustement. Le coefficient de transmission TC(E) tracé sur la figure II-I.4.2 suppose que $m_{sc}^* = m_0$. Le modèle WKB surestime la valeur du coefficient de transmission pour des énergies proches et supérieures à la hauteur de barrière. Les comportements du coefficient de transmission pour les modèles AIRY et FI sont assez voisins. Le coefficient de transmission du modèle AIRY est décalé vers des énergies plus basses, ceci étant dû à l'abaissement de la hauteur de barrière.

Dans le cas où la bande de conduction ne peut plus être considérée comme linéaire mais qu'une approximation parabolique est envisageable, les solutions de l'équation (II-I.4.4) font intervenir la fonction hypergéométrique confluyente de première espèce [Bed17].

Pour les particules susceptibles de sortir du côté de contact Schottky en atteignant le point de retour (*turning point*) dans la zone où l'effet tunnel est considéré, une technique de réjection faisant intervenir le coefficient de transmission a été implémentée pour décider si la particule est « absorbée » par le métal ou réfléchi.

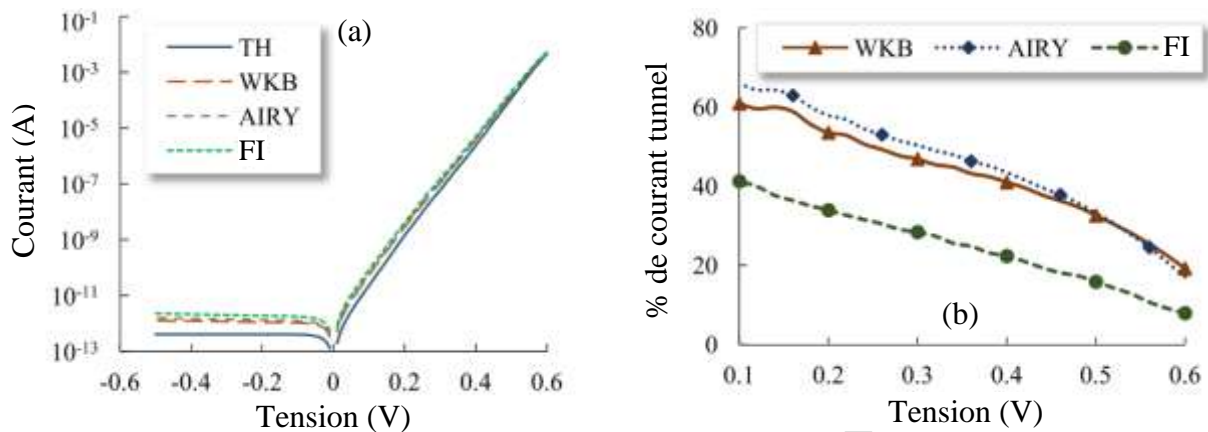


Figure II-I.4.2 – (a) Caractéristiques courant-tension d’une diode Schottky déduites du simulateur MC avec les quatre modèles présentés (TH, WKB, AIRY et FI) (b) Pourcentage de courant tunnel en fonction de la tension pour les modèles WKB, AIRY et IF [Ber17]. La zone N mesure 10^{16} cm^{-3} et mesure 400 nm. La zone N⁺ mesure 10^{17} cm^{-3} et mesure 50 nm. Une hauteur de barrière $\phi_{bn} = 0,735 \text{ eV}$ est considérée.

La figure II-I.4.2 présente la caractéristique courant-tension d’une diode pour les différents modèles de l’effet tunnel décrits précédemment. Les caractéristiques de la diode sont indiquées dans la légende de la figure II-I.4.2. On a également représenté la part du courant tunnel pour les modèles WKB, AIRY et IF. En polarisation inverse, en diminuant la tension, nous pouvons observer une légère augmentation du courant pour l’ensemble des modèles, excepté pour le modèle TH. En effet, avec le modèle TH, la hauteur de barrière vue par les électrons du métal n’est pas modifiée avec la tension et le nombre de particules qui passent du métal vers le SC reste constant. Comme l’épaisseur de la barrière de potentiel diminue lorsque la tension devient de plus en plus négative, les électrons ont une probabilité plus élevée de traverser la barrière par effet tunnel pour les modèles WKB, AIRY et IF, entraînant ainsi une augmentation du courant. Le coefficient d’idéalité n augmente légèrement avec la prise en compte de l’effet tunnel en passant de 1,02 pour le modèle TH à 1,072 pour le modèle FI.

Le courant tunnel est calculé en comptant les particules qui traversent la barrière de potentiel. Le courant thermoïonique est obtenu en comptant les électrons qui passent au-dessus de la barrière. Pour tous les modèles, la part du courant tunnel décroît plutôt linéairement avec l’augmentation de la tension. Dans le cas du modèle avec force image (FI), cette part reste plus faible que celle du courant thermoïonique pour tous les points de polarisation en direct contrairement aux autres modèles. En effet, l’abaissement de la hauteur de barrière est plus prononcé, favorisant le passage des électrons au-dessus de la barrière

comparé aux autres modèles. Le courant devient majoritairement un courant tunnel pour le modèle WKB et AIRY en dessous de 0,3 V.

5. Algorithme de fusion/division des particules

On ne peut pas utiliser le code MC tel que décrit pour de faibles tensions de polarisation (inférieures à 0,7 V pour une hauteur de barrière de 0,88 eV sur GaAs). La difficulté réside dans la diminution drastique du nombre de particules lorsqu'on se rapproche de la barrière de potentiel à ces tensions-là. Le nombre de particules simulées ne doit pas être choisi au hasard car il s'agit d'un facteur direct sur la consommation en mémoire. Il doit aussi être suffisant pour éviter d'introduire du bruit artificiellement. Ces différences de concentration peuvent provoquer des fluctuations au niveau des résultats (vitesse, énergie...) dans les zones où le nombre de porteurs est faible. Pour cela, l'article [Mar96] propose de modifier la représentativité des particules tout le long de la structure en ajoutant un algorithme de fusion/division des particules pour garder un nombre suffisant de porteurs quelle que soit la zone de la diode.

Initialement, la structure est divisée en plusieurs régions S_i où le poids des particules est différent suivant la région dans laquelle elles se situent. Pour définir ces régions, une simulation de toute la structure est d'abord initiée sans prendre en compte l'algorithme afin de connaître la concentration spatiale de porteurs. Dans le même esprit que l'article [Mar96], on propose ensuite de déduire la concentration de porteurs n_i d'une cellule i à partir de celle de la cellule $i+1$ et de la différence de potentiel entre la cellule i et la cellule $i+1$:

$$n_i = n_{i+1} \exp\left(\frac{q(V_{i+1} - V_i)}{k_B T}\right) \quad (\text{II-I.5.1})$$

Cette relation est appliquée à partir de l'endroit où la concentration de porteurs devient faible. Cette faible concentration de porteurs n'a quasiment pas d'influence sur le potentiel déduit de l'équation de Poisson car $N_d \gg n$. Il peut donc être utilisé pour déduire approximativement la concentration de porteurs dans cette région. Une frontière entre deux régions est créée lorsque la concentration de porteurs est divisée par deux.

L'algorithme de fusion/division des particules intervient à l'interface entre deux régions adjacentes. Quand une particule passe d'une région S_{i+1} à une région S_i moins peuplée, une division de la particule en deux particules est réalisée. Inversement, lorsqu'une particule arrive dans une région plus peuplée, une fusion de 2 particules est réalisée (figure II-I.5.1).

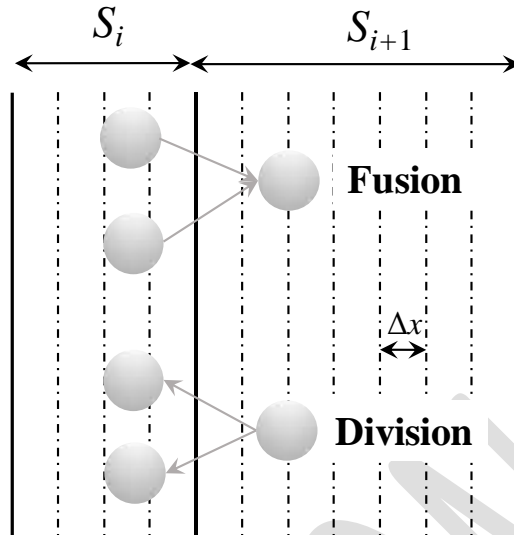


Figure II-I.5.1 – Description schématique de l’algorithme de fusion/division des particules

Lors du processus de fusion/division des particules, il faut veiller à ne pas modifier les distributions et à garder la conservation spatiale du courant en assignant les caractéristiques pertinentes pour les particules divisées ou fusionnées. La façon la plus pratique est de ne choisir que les caractéristiques d’une particule sur les deux pour la fusion. Pour la division, les caractéristiques de la particule mère sont recopiées pour les deux particules filles ainsi créées.

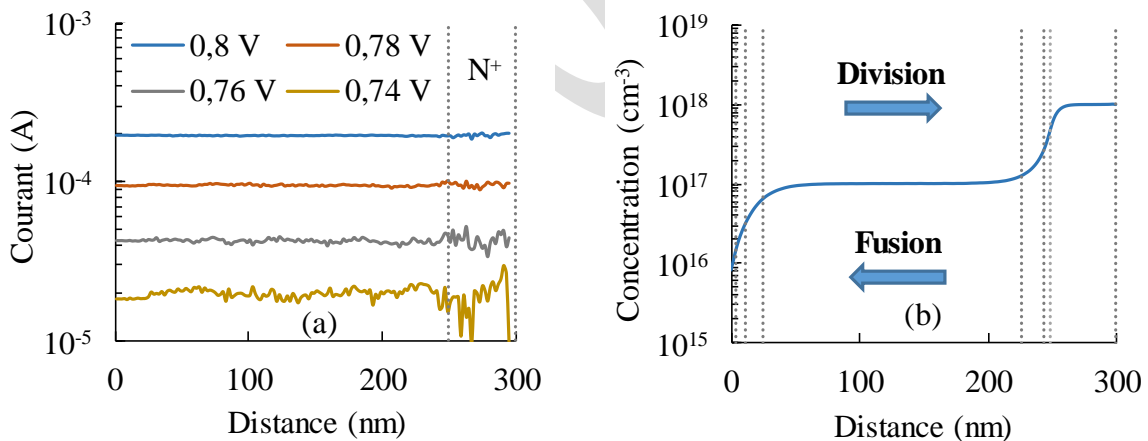


Figure II-I.5.2 – (a) Evolution du courant le long de la structure pour plusieurs points de polarisation (0,8 V / 0,78 V / 0,76 V / 0,74 V). (b) Illustration du découpage de la structure en 8 régions sur la concentration de porteurs pour une tension de polarisation de 0,8 V. La zone N mesure 200 nm avec un dopage de 10^{17} cm^{-3} . La zone N⁺ mesure 100 nm avec un dopage de 10^{18} cm^{-3} .

La figure **II-I.5.2a** illustre le courant le long de la structure pour plusieurs points de polarisation entre 0,74 V et 0,8 V avec le processus de fusion/division des particules. Les caractéristiques de la structure sont indiquées dans la légende. La figure **II-I.5.2b** présente la variation spatiale de la concentration de porteurs pour une tension de polarisation de 0,8 V avec un découpage de 8 régions. Les frontières de ces régions sont surtout situées dans les zones où la variation spatiale de la concentration de porteurs est la plus forte. On constate que le courant est quasiment constant le long de la structure quelle que soit la tension de polarisation et ne présente aucune discontinuité qui pourrait être due au processus de fusion/division entre deux régions consécutives. Ce résultat est en accord avec la conservation du courant et montre la pertinence des choix adoptés pour les caractéristiques des particules après la fusion ou la division. Par ailleurs, les valeurs du courant avec et sans l'algorithme de fusion/division donne des différences de quelques pourcents au maximum pour ces niveaux de tension. Des caractéristiques statiques allant jusqu'à 0 V ont déjà été présentées dans la section précédente (**II-I.4**) sur une autre structure.

On remarque également sur la figure **II-I.5.2a** que les fluctuations du courant sont fortement corrélées à la concentration de porteurs, ce que souligne d'ailleurs l'article [Mat00]. En effet, dans les zones peu peuplées, la vitesse moyenne des particules est plus élevée et les fluctuations de vitesse sont moins visibles. Plus le courant diminue, plus les fluctuations dans la zone quasi-neutre et la zone N^+ sont importantes. C'est pourquoi le courant est plutôt calculé à partir du nombre de particules qui sortent par le contact Schottky. Le calcul du courant à partir de la vitesse des particules dans la cellule proche du contact Schottky donne des résultats similaires. En régime dynamique, il n'est pas utile d'utiliser cet algorithme, même si la tension aux bornes de la diode est inférieure à 0,7 V. En effet, dans cette configuration, le courant de conduction créé par les électrons qui passent la barrière est négligeable devant le courant de conduction total (calculé à partir de la vitesse des particules dans toute la structure). Les différentes techniques pour calculer ce courant de conduction sont décrites dans la section **II-I.7**.

Cet algorithme de fusion/division des particules pourrait éventuellement permettre d'étudier le bruit à des niveaux de tension relativement faible ($< 0,7$ V pour GaAs). Cependant, l'article [Gon03] souligne qu'une étude en bruit n'est pas envisageable pour des tensions supérieures à quelques $k_B T$ en-dessous de la tension de bande plate, sans pour autant donner d'explications.

6. Ionisation par choc

L'Ionisation Par Choc (IPC) est un effet connu pour détériorer les performances de composants électroniques. Elle peut être initiée par un électron ou par un trou. Cependant, comme il est beaucoup plus facile d'avoir un électron énergétique plutôt qu'un trou à cause de la structure de bandes (par excitation optique ou l'application d'un fort champ électrique), seuls les processus d'IPC initiés par des électrons seront considérés ici. En effet, lorsqu'un porteur k_1 possède une énergie cinétique excédant l'énergie de bande interdite (E_G), il peut céder cette énergie en créant une paire électron-trou (figure II-I.6.1). On se retrouve alors avec davantage de porteurs mais chacun possédant une énergie faible. On peut imaginer que si un champ électrique accélère constamment et très rapidement les porteurs, les densités croissantes de porteurs par IPC mèneront à des taux nets d'interactions porteur-porteur et porteur-phonon très élevés, ce qui dégrade les propriétés de transport.

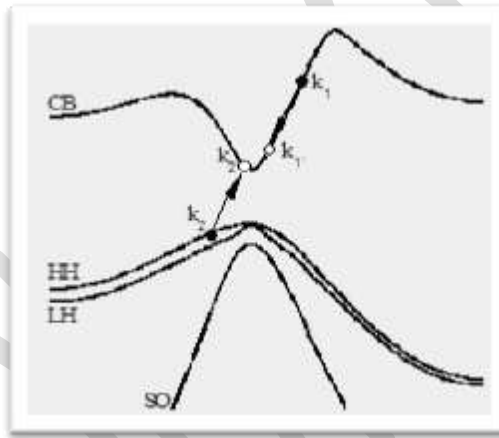


Figure II-I.6.1 – Schéma d'un processus d'ionisation par choc initié par un électron

Le processus d'IPC met en jeu 2 particules initiales qui entrent en collision (k_1, k_2), puis qui diffusent vers 2 états finaux (k_1', k_2'). La probabilité d'IPC par unité de temps pour les couples est donnée par la règle d'or de Fermi avec l'interaction coulombienne :

$$S(k_1, k_1', k_2, k_2') = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \frac{e^2}{\epsilon\Omega} \frac{I_{k_1, k_1'} I_{k_2, k_2'}}{q^2} \right|^2 \delta(E) \quad (\text{II-I.6.1})$$

où ϵ est la permittivité diélectrique, Ω le volume de la maille élémentaire, $I_{k_1, k_1'}$ et $I_{k_2, k_2'}$ sont les facteurs de recouvrement (entre état initial et état final) des parties périodiques des ondes de Bloch des particules 1 et 2. Les 4 états doivent respecter la conservation de l'énergie et de l'impulsion. L'énergie et le vecteur d'onde échangés entre k_1 et k_2 sont :

$$\begin{cases} E_x = E_{k_1} - E_{k_1'} = E_{k_2'} - E_{k_2} \\ \vec{q} = \vec{k}_1 - \vec{k}_1' = \vec{k}_2' - \vec{k}_2 \end{cases} \quad (\text{II-I.6.2})$$

Le taux d'interaction par IPC pour l'électron initiateur (k_1) est :

$$w(k_1) = \sum_{k_1', k_2, k_2'} \frac{2\pi}{\hbar} \left| \frac{e^2}{\epsilon\Omega} \frac{I_{k_1, k_1'} I_{k_2, k_2'}}{q^2} \right|^2 \delta(E) \quad (\text{II-I.6.3})$$

Ce taux d'interaction, malgré son aspect simpliste, est assez difficile à évaluer car la triple somme est extrêmement lourde. La documentation sur le sujet propose différentes approximations pour (II-I.6.3) qui permettent de traiter l'IPC avec un coût calculatoire plus faible. Citons, notamment, l'approche « random-k » [Kan67] et le modèle de Keldysh [Kel60]. Le modèle de Keldysh (et ses variantes) sont des équations qui reconstruisent le taux d'interaction par IPC en fonction de l'énergie du porteur initiateur à partir de paramètres d'ajustement P_i et de l'énergie de seuil d'ionisation E_0 en dessous de laquelle, l'électron k_1 ne peut pas initier un processus d'IPC (E_0 est aussi un paramètre d'ajustement, il n'a pas forcément pour valeur E_G).

$$\begin{cases} \text{Keldysh} & \begin{cases} w(E) = P \left(\frac{E - E_0}{E_0} \right)^2, & E \geq E_0 \\ w(E) = 0 & , E < E_0 \end{cases} \\ \text{variante} & \begin{cases} w(E) = P_1 (E - E_0)^{P_2}, & E \geq E_G \\ w(E) = 0 & , E < E_G \end{cases} \end{cases} \quad (\text{II-I.6.4})$$

Ces modèles, offrant des évaluations numériques extrêmement rapides, requièrent cependant l'ajustement des différents paramètres sur la base de mesures expérimentales ou à partir de calculs moins empiriques. L'approche « random-k », quant à elle, calcule réellement (II-I.6.3) à l'aide de deux simplifications : l'élément de matrice d'interaction est considéré constant et la conservation de l'impulsion est négligée. Le taux d'interaction par IPC pour le porteur initiateur k_1 ne dépend alors que des densités d'états accessibles aux trois autres particules. En faisant usage de la conservation de l'énergie, on obtient :

$$\begin{cases} M_{CME}^2 = \left| \frac{e^2}{\epsilon\Omega} \frac{I_{k_1, k_1'} I_{k_2, k_2'}}{q^2} \right|^2 = \text{constant} \\ w(E_{k_1}) \propto M_{CME}^2 \int D(E_{k_1'}) D(E_{k_2}) D(E_{k_2'}) dE_{k_1'} dE_{k_2} \end{cases} \quad (\text{II-I.6.5})$$

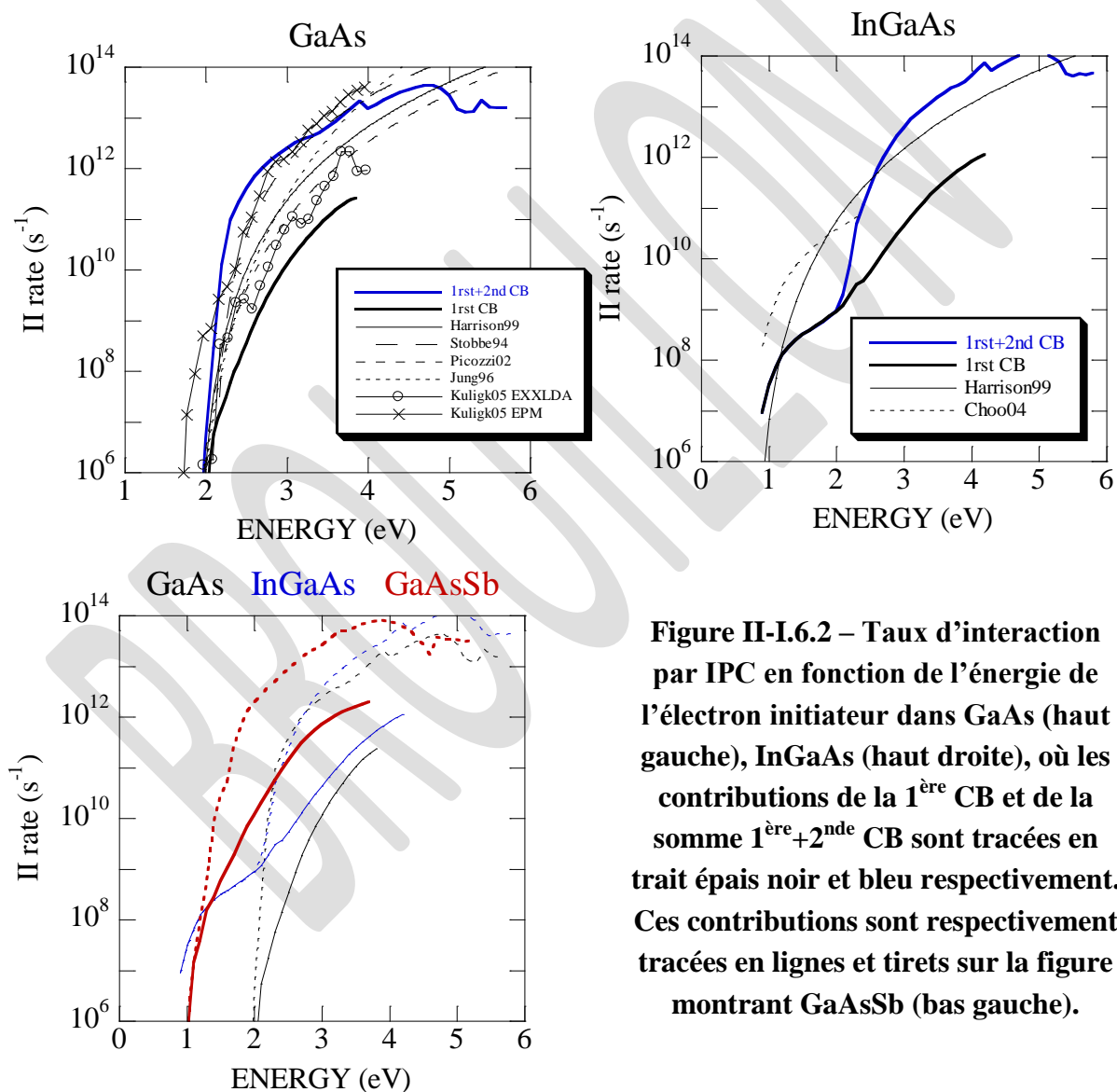
Pour utiliser ce modèle, il faut évidemment évaluer M_{CME}^2 . Cette constante peut être ajustée, mais elle peut également être calculée, faisant de « random-k » un modèle beaucoup moins empirique que celui de Keldysh. Si ces densités d'états sont calculées sur une structure électronique issue de calculs pertinents alors l'approche « random-k » fournit des résultats satisfaisants. Il a été montré que cette approche fonctionne parfaitement bien pour les semi-conducteurs à bande interdite indirecte tels que Si, Ge et SiGe [Kan67] [Har99]. Dans ces matériaux, les vecteurs d'onde échangés \vec{q} lors des processus d'IPC sont relativement grands (par rapport aux dimensions de la 1^{ère} zone de Brillouin), ce qui tend à favoriser les processus Umklapp [And72]. Un processus est qualifié « Umklapp » lorsque l'addition au vecteur d'onde échangé d'un vecteur du réseau réciproque, qui transforme tout point de l'espace réciproque en un point équivalent, est nécessaire pour garantir la présence de $(\vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{k}_1', \vec{k}_2')$ dans la 1^{ère} zone de Brillouin. Les approximations « élément de matrice constant » et « non conservation de l'impulsion » pour le calcul du taux d'interaction sont donc pleinement justifiées. Cependant, ces deux approximations sont plus discutables pour les semi-conducteurs à bande interdite directe [Har99]. La seule similarité entre les approches de Keldysh et « random-k » est qu'elles donnent un taux d'interaction par IPC moyen, fonction de l'énergie du porteur initiateur et non de sa position repérée par \vec{k}_1 dans la zone de Brillouin. Cela pose un problème car l'anisotropie du taux d'interaction en fonction de \vec{k}_1 peut être très forte. Des calculs ab initio qui prennent en compte la nature anisotrope de la structure de bandes montrent, entre autre, que le taux d'interaction par IPC est fortement anisotrope [Kul05] [San92] [Sto91] [Sto94].

Dans sa thèse effectuée dans l'équipe de recherche [Tea11], Eric Téa a eu recours à une méthode de calcul « rapide » mais qui permet toutefois d'obtenir le taux par IPC avec précision. Dans l'équation (II-I.6.3), la somme triple peut être réduite à une somme double car avec la connaissance de 3 des protagonistes, le 4^e peut être déduit de la conservation de l'impulsion. Les processus Umklapp sont pris en compte.

Les taux d'interaction par IPC que l'on peut trouver dans la littérature peuvent varier sur plusieurs décades car ils dépendent fortement de la structure de bande utilisée. En effet, le taux d'interaction dépend uniquement de la structure électronique du matériau (facteurs de recouvrements $I_{k_1, k_1'}^2, I_{k_2, k_2'}^2$ calculés sur la structure électronique et permittivité ε connue). Il n'y a ici aucun paramètre d'ajustement (contrairement aux potentiels de déformation pour les interactions porteur-phonon par exemple).

Les figures présentées ci-dessous ont été empruntées à la thèse d'E. Tea [Tea11]. Il a travaillé sur GaAs, InGaAs et GaAsSb. Nous ne disposons pas directement d'éléments sur GaSb. Mais les éléments concernant GaAsSb nous éclairerons un peu sur GaSb.

Sur la figure II-I.6.2, les énergies sont mesurées par rapport au minimum de la 1^{ère} bande de conduction. On note que pour GaAs, les résultats de calculs par d'autres auteurs varient sur plusieurs ordres de grandeur, notamment à cause des différences entre les structures de bande utilisées.



Pour GaAs et GaAsSb, la prise en compte dans le modèle d'E Tea [Tea11] de la 2nde bande de conduction donne lieu à un seuil d'ionisation très dur (pente raide autour de l'énergie de seuil d'ionisation). Cela est relié aux facteurs de recouvrements moyens pris en

compte. L'InGaAs présente deux seuils. En effet, la 1^{ère} bande de conduction de InGaAs montre des taux d'interaction par IPC non négligeables, et plus grands que pour GaAs et GaAsSb. Enfin, GaAsSb semble être le plus sensible à l'ionisation par choc car il présente les taux les plus élevés.

Expérimentalement, l'efficacité de l'IPC s'apprécie grâce au coefficient d'IPC, qui est l'inverse de la distance parcourue moyenne limitée par les processus d'IPC.

$$\alpha = \frac{\sum_{\vec{k}} w(\vec{k}) f_{\vec{k}}}{\sum_{\vec{k}} v(\vec{k}) f_{\vec{k}}} \quad (\text{II-I.6.6})$$

où $v(\vec{k})$ est la vitesse et $f_{\vec{k}}$ l'occupation de l'état \vec{k} . Dans la pratique, la vitesse est mesurée suivant l'axe d'application du champ électrique. Le coefficient d'IPC est donc le taux net d'IPC moyenné par la vitesse des porteurs. Un grand coefficient traduit alors des propriétés de transport détériorées par l'IPC. Ce coefficient est illustré dans la figure II-I.6.3 La détermination expérimentale du coefficient d'IPC est une opération délicate, ce qui donne lieu à des valeurs mesurées pouvant varier sur plusieurs décades. Cependant, un grand nombre de mesures permet d'estimer une plage de valeurs pour les coefficients calculés. Pour InGaAs, l'accord avec d'autres calculs [Cho04] [Bud92] et mesures [Ng03] [Osa85] [Pea80] est excellent. Pour GaAs, l'accord avec d'autres calculs [Bud92] et mesures [Gro03] [Pea78] est raisonnable. Aucune mesure du coefficient d'IPC n'a été trouvée pour GaAsSb. GaAsSb est le matériau qui montre le plus grand coefficient d'IPC sur la plage de champs électriques étudiée (de 100 à 500 kV/cm). Il sera donc le matériau qui montrera les propriétés de transport les plus affectées par les processus d'IPC à fort champ électrique.

Outre les effets de l'IPC sur les propriétés de transport, les effets sur les populations de porteurs sont également de grande importance. Il ne faut pas oublier que l'IPC est un processus de génération, laissant derrière lui une paire électron-trou supplémentaire. Ces paires électron-trou, en surplus par rapport aux densités de porteurs nominales des matériaux, vont se recombiner par la suite.

Il n'a pas été possible de prendre en compte les mécanismes de recombinaisons dans la version du MC « espace réel » présenté ici.

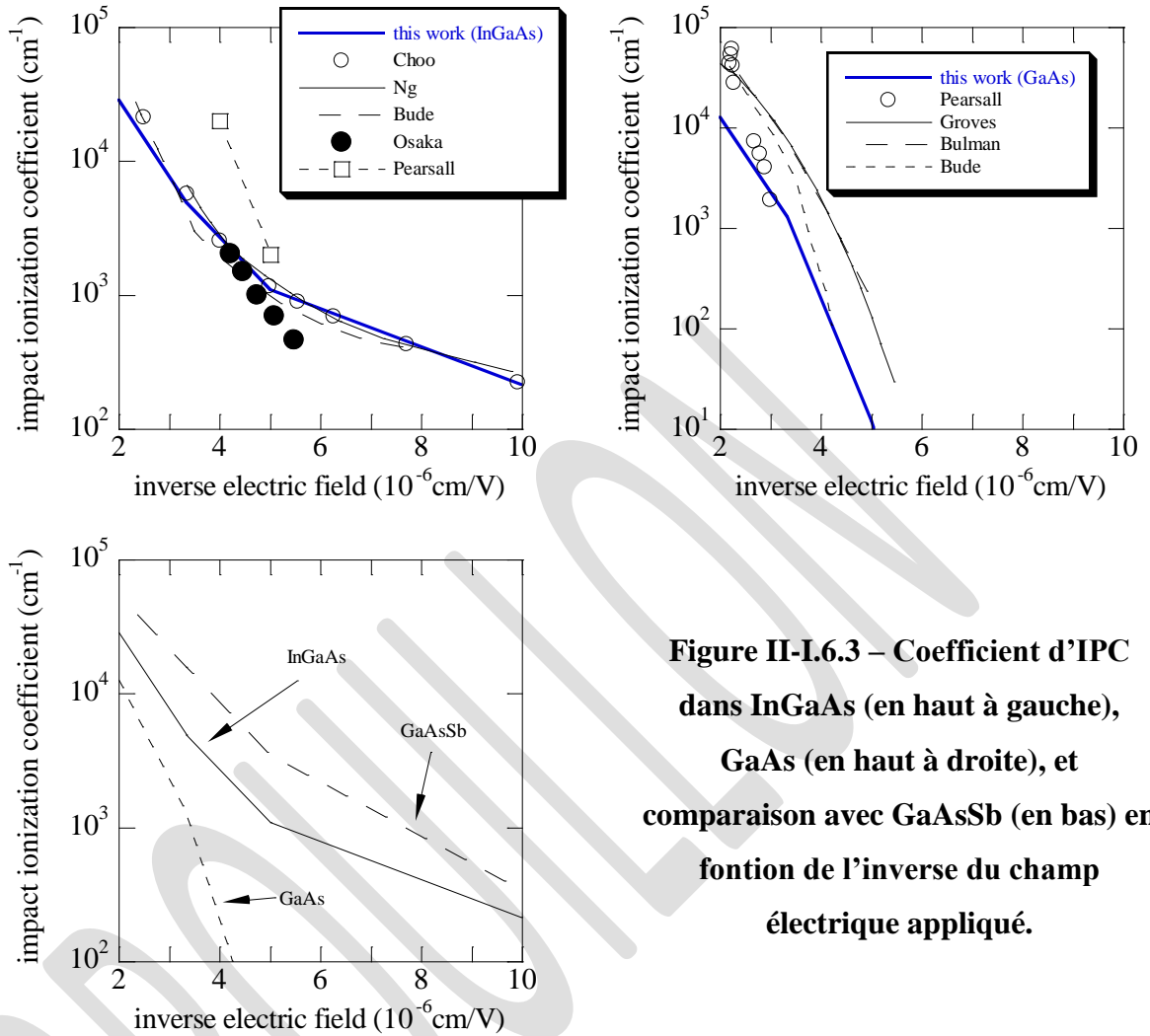


Figure II-I.6.3 – Coefficient d’IPC dans InGaAs (en haut à gauche), GaAs (en haut à droite), et comparaison avec GaAsSb (en bas) en fonction de l’inverse du champ électrique appliqué.

Prise en compte d’IPC dans la modélisation de la diode Schottky

Les coefficients d’ionisation présentés précédemment ont été calculés dans l’espace réciproque uniquement. Le couplage de l’IPC avec l’espace réel dans un dispositif n’est pas simple à mettre en œuvre et aurait probablement nécessité une thèse supplémentaire.

Pour la diode Schottky, le paramètre souvent évoqué dans les caractéristiques techniques pour décrire leur limitation en tension à cause de l’IPC pouvant conduire à sa destruction est la tension de claquage notée V_{br} (*breakdown voltage*). Pour déterminer cette tension, plusieurs auteurs ont recours à l’intégrale d’ionisation définie par l’équation (II-I.6.7) [Bul85] :

$$1 - \frac{1}{M_n} = \int_0^w \alpha_n(x) \exp\left[-\int_0^x (\alpha_n(x') - \alpha_p(x')) dx'\right] dx \quad (\text{II-I.6.7})$$

Où M_n représente le coefficient de multiplication des porteurs et W la zone de charge d'espace. Le modèle généralement utilisé pour les coefficients d'ionisation des électrons α_n et des trous α_p est le modèle de Selberherr [Sel84] dont la dépendance en fonction du champ électrique F s'écrit :

$$\alpha_n = a_n \exp\left[-\left(\frac{b_n}{F}\right)^{\beta_n}\right] \text{ et } \alpha_p = a_p \exp\left[-\left(\frac{b_p}{F}\right)^{\beta_p}\right] \quad (\text{II-I.6.8})$$

Avec $a_n, b_n, \beta_n, a_p, b_p, \beta_p$ des coefficients d'ajustement permettant de reproduire les données expérimentales pour le SC d'intérêt.

L'équation (II-I.6.7) est souvent donnée pour les jonctions P-N mais a aussi été utilisée pour les diodes Schottky [Sch01] afin de calculer la tension de claquage V_{br} en faisant tendre le coefficient M_n vers l'infini. La figure II-I.6.1 représente l'évolution de la tension de claquage dans une diode Schottky sur GaAs et InGaAs en fonction de la longueur de la zone N pour plusieurs valeurs de dopages. Celle-ci a été calculée à partir du potentiel déduit de simulations MC et de l'intégrale d'ionisation (II-I.6.7). Les coefficients d'ionisations pour les 4 SC qui seront étudiés dans les chapitres III et IV sont récapitulés dans le tableau II-I.6.1 et II-I.6.2.

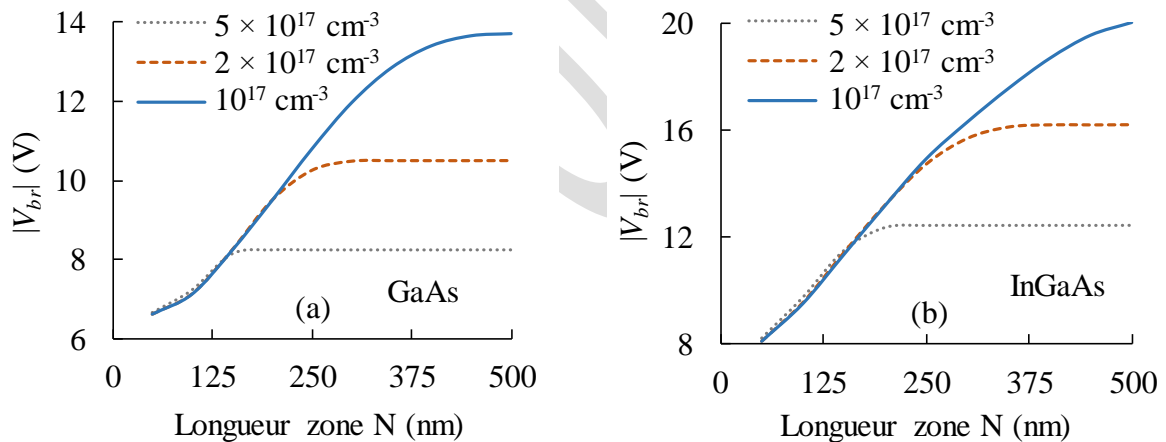


Figure II-I.6.1 – Tension de claquage V_{br} en fonction de la longueur de la zone N et du dopage pour une diode Schottky sur GaAs et sur InGaAs.

Pour un point de polarisation donné, la diminution du dopage entraîne une diminution du champ électrique, ce qui se traduit effectivement par une augmentation de la tension de claquage (en valeur absolue). Il est intéressant de noter que la tension V_{br} dépend aussi de la longueur de la zone N. En effet, tant que la zone N n'est pas complètement déplétée, la longueur impacte peu puisque la répartition spatiale du champ électrique n'est pas modifiée et que celui-ci est nul dans la ZQN. En revanche, lorsque la déplétion débute dans la zone N⁺, la

valeur du champ électrique est globalement plus élevée et entraîne une diminution de la tension de claquage.

	$a_n (\times 10^5 \text{ cm}^{-1})$	$b_n (\times 10^5 \text{ cm}^{-1})$	β_n
GaAs [Che15]	Pour $150 \text{ kV.cm}^{-1} \leq F \leq 500 \text{ kV.cm}^{-1}$		
	1,45	5	2,1
	Pour $500 \text{ kV.cm}^{-1} \leq F \leq 1100 \text{ kV.cm}^{-1}$		
	4,7	12	0,9
	Pour $1110 \text{ kV.cm}^{-1} \leq F \leq 1400 \text{ kV.cm}^{-1}$		
	6,39	16	0,9
InGaAs [Ng03]	Pour $130 \text{ kV.cm}^{-1} \leq F \leq 150 \text{ kV.cm}^{-1}$		
	0,0203	1,98	1,05
	Pour $150 \text{ kV.cm}^{-1} \leq F \leq 230 \text{ kV.cm}^{-1}$		
	0,43	9,3	0,81
	Pour $230 \text{ kV.cm}^{-1} \leq F \leq 300 \text{ kV.cm}^{-1}$		
	37,2	47,6	0,67
GaSb [Hil80]	Pour $30 \text{ kV.cm}^{-1} \leq F \leq 40 \text{ kV.cm}^{-1}$		
	60,2	3,77	1
GaN [Özb12]	1,5	141,3	1

Tableau II-I.6.1 – Paramètres du modèle de Selberherr pour le calcul du coefficient d'ionisation des électrons α_n pour les 4 SC

	a_p	b_p	β_p
GaAs [Che15]	Pour $150 \text{ kV.cm}^{-1} \leq F \leq 500 \text{ kV.cm}^{-1}$		
	1,55	5,5	2
	Pour $500 \text{ kV.cm}^{-1} \leq F \leq 1100 \text{ kV.cm}^{-1}$		
	4,0	11	1
	Pour $1110 \text{ kV.cm}^{-1} \leq F \leq 1400 \text{ kV.cm}^{-1}$		
	5,92	15,5	0,95
InGaAs [Ng03]	0,76	7,63	1,45
GaSb [Hil80]	547,8	4,77	1
GaN [Özb12]	6,4	145,4	1

Tableau II-I.6.2 – Paramètres du modèle de Selberherr pour le calcul du coefficient d'ionisation des trous α_p pour les 4 SC

Les tensions de claquage obtenues pour GaAs sont voisines de celles données dans l'article [Sil08]. L'article [Sch01b] propose également une formule empirique sur l'évolution du V_{br} en fonction du dopage et de la température basée sur la même approche. La figure II-I.6.2 illustre une comparaison des tensions de claquage pour une température de 300K en fonction du dopage. Ces valeurs supposent que toute la zone N ne soit jamais complètement déplétée.

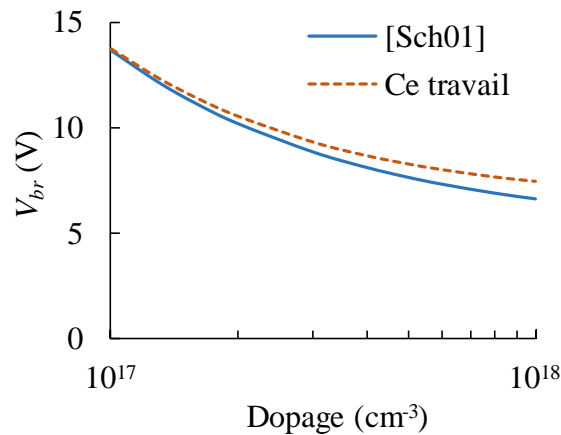


Figure II-I.6.2 – Evolution du V_{br} en fonction du dopage avec la formule empirique de l'article [Sch01b] et du calcul de l'intégrale d'ionisation (ce travail). Ces valeurs supposent que la zone N n'est jamais complètement déplétée.

Les deux courbes sont assez voisines quel que soit le dopage avec une différence inférieure à un volt. Les résultats expérimentaux sur une diode dopée à $3 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ [Sch01a] semble également confirmer cette loi empirique, bien que la longueur de la couche dopée N ne soit pas précisée. En effet, la formule proposée ne prend pas en compte la longueur de la couche active et celle-ci peut jouer un rôle lorsqu'elle est complètement déplétée. En revanche pour les autres matériaux, cette méthode ne fonctionne pas et les valeurs de V_{br} obtenues ne sont pas cohérentes. Par exemple, sur InGaAs, les tensions de claquage calculées par l'intégrale d'ionisation (II-I.6.7) sont supérieures à GaAs alors que le gap est plus faible (0,81 contre 1,424 pour GaAs). Le problème pourrait provenir d'une part de la limitation du modèle associé à l'intégrale d'ionisation pour déduire V_{br} et d'autre part des coefficients d'ionisation trouvés dans la littérature qui ne sont valables que jusqu'à quelques centaines de kV/cm alors que le champ électrique peut potentiellement atteindre 1 MV/cm localement à l'interface pour des tensions proches de la tension de claquage. Il convient de rappeler ici que la diode ne restera possiblement polarisée de telle sorte que le champ électrique à l'interface atteigne ces valeurs très élevées que durant une fraction très courte d'une période de signal, avec une période qui elle-même est très courte, de l'ordre de la picoseconde. Si le matériau devait rester « longtemps » polarisé à de telles valeurs de champ, non seulement nous

observerions un claquage lié à l'ionisation par choc mais nous observions de l'effet tunnel bande à bande.

Le concept de tension de claquage est un peu naïf. Et ce n'est pas parce que la référence [Sch01a] met en avant des résultats expérimentaux que nous pouvons nous en prévaloir, directement. En effet, l'ionisation par choc est un mécanisme physique non local et non stationnaire qui est spécifique à une configuration. L'article [Gra00] différencie d'ailleurs une tension de claquage statique et une tension de claquage RF qui elle-même dépend de la fréquence.

Notre mode opératoire est grossier et nous sommes bien conscients qu'une modélisation fine de l'ionisation par choc avec la prise en compte des trous dans le code MC couplé à l'espace réel associé à une modélisation des mécanismes de recombinaison – ce qui constitue le point bloquant, aujourd'hui – serait nécessaire pour rendre plus fiable la modélisation du seuil de « claquage ». Cette modélisation permettrait également de mieux appréhender le comportement dynamique de la diode au voisinage de la tension de claquage. Néanmoins, nous nous en tiendrons là pour le présent travail.

7. Evaluation du courant

Plusieurs techniques d'évaluation du courant ont été expérimentées :

- a. A partir de la vitesse v_k des particules dans toute la structure, c'est le théorème de Ramo-Shockley [Sho38] [Ram39]. Le courant en fonction du temps vaut alors :

$$i(t) = \frac{q \times S \times Ne}{n_x \times \Delta x} \sum_{k=1}^{n(t)} v_k(t) \quad (\text{II-I.7.1})$$

Avec n_x le nombre total de mailles dans la structure, Δx le pas spatial, n le nombre total de particules, et Ne la représentativité des particules permettant de faire le lien entre le nombre de particules simulées et le nombre réel d'électrons.

- b. A partir du nombre de particules qui traversent une frontière entre deux mailles à chaque pas sur le temps Δt . Avec cette méthode, les particules qui restent dans une maille pendant Δt ne contribuent pas au courant. Si on note respectivement n_k^+ et n_k^- le nombre de particules qui traversent la k ème frontière en direction du contact Schottky et dans l'autre direction à chaque pas sur le temps, le courant total s'écrit :

$$i(t) = \frac{q \times Ne \times S}{\Delta t (n_x + 1)} \sum_{k=1}^{n_x+1} [n_k^+(t) - n_k^-(t)] \quad (\text{II-I.7.2})$$

Le courant ne peut prendre que des valeurs discrètes et est un multiple du courant élémentaire δi tel que :

$$\delta i = \frac{q \times Ne \times S}{\Delta t (n_x + 1)} \quad (\text{II-I.7.3})$$

c. A partir de la vitesse des particules dans la cellule proche du contact Schottky :

$$i(t) = \frac{q \times S \times Ne}{\Delta x} \sum_{k=1}^{n_1(t)} v_k(t) \quad (\text{II-I.7.4})$$

d. A partir du nombre de particules qui sortent du contact Schottky :

$$i(t) = \frac{q \times Ne \times S \times n_1^+(t)}{\Delta t} \quad (\text{II-I.7.5})$$

Toutes ces techniques donnent les mêmes résultats pour le tracé de la caractéristique statique en moyennant durant un certain temps (typiquement quelques picosecondes), à condition que la tension de polarisation soit telle qu'il reste encore suffisamment de porteurs à l'interface métal/SC. Dans le cas où l'algorithme de fusion/division est utilisé pour garder un nombre suffisant de porteurs proche du contact Schottky, il est préférable de calculer le courant soit en calculant la vitesse des particules dans la cellule proche du contact Schottky (c.), soit en comptant les particules qui sortent par le contact Schottky (d.). C'est cette dernière technique qui a été retenue dans l'article [Ber17] pour obtenir la caractéristique statique I(V) jusqu'à 0 V. Pour de très faibles niveaux de courant, la fluctuation de la vitesse de l'ensemble des particules est telle qu'on a peu de précisions sur la valeur du courant, notamment dans la zone quasi-neutre de la structure, et d'autant plus dans la zone N⁺ où la vitesse des porteurs est très faible. Par conservation du courant le long de la structure, la vitesse moyenne des porteurs est bien plus élevée proche du contact Schottky – la concentration de porteurs étant plus faible – permettant d'avoir une meilleure précision sur la valeur du courant après moyennage.

Lorsqu'on est en régime dynamique, certaines techniques ne peuvent pas être appliquées. Calculons l'évolution temporelle du courant par ces différentes techniques lorsque la diode est excitée par un signal sinusoïdal d'amplitude 2 V autour du point de polarisation -2 V. La figure II-I.7.1 représente la réponse en courant (courant de conduction uniquement) calculée par les techniques a. et b. pour une diode dopée à 10¹⁷ cm⁻³ de longueur 350 nm dans la zone N et dopée à 10¹⁸ de longueur 50 nm dans la zone N⁺.

Les courants calculés par les techniques a. et b. donnent des résultats très voisins. La technique qui consiste à compter les particules qui traversent les frontières (b) entre deux mailles voisines est plus bruitée pour deux raisons. D'une part, toutes les particules ne

contribuent pas forcément au courant puisque certaines restent dans leur maille Δx pendant un pas sur le temps Δt . D'autres part, comme évoqué précédemment, il existe un bruit de quantification dû au comptage du nombre de particules. Ce bruit peut être éliminé par filtrage. Les techniques c. et d. n'ont pas été tracées sur la figure II-I.7.1 car le courant est nul quelle que soit la tension. Comme la tension aux bornes de la diode reste toujours négative au cours du temps, aucune particule ne peut atteindre le contact Schottky, conduisant à un courant nul. Ces deux techniques ne sont alors pas adaptées en régime dynamique.

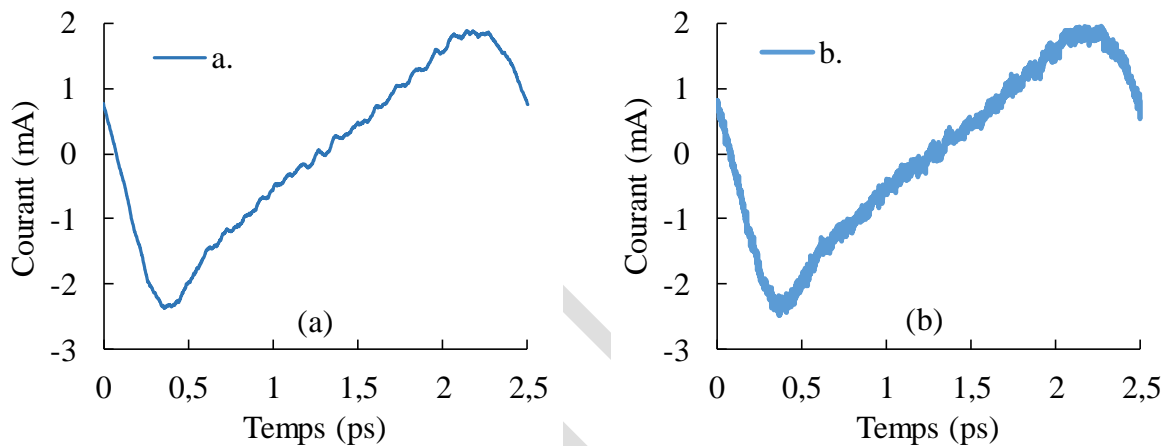


Figure II-I.7.1 – Courant de conduction en fonction de temps pour la technique de courant (a) a. et (b) b. lorsque la diode est excitée par un signal sinusoïdal d'amplitude 2 V autour du point de polarisation -2 V.

Pour obtenir le courant total, il faut ajouter au courant de conduction le courant de déplacement $i_d(t)$ défini par [Sta96] :

$$i_d(t) = \frac{\varepsilon_{sc} S}{\ell_{tot}} \frac{dv(t)}{dt} \quad (\text{II-I.7.8})$$

Où ℓ_{tot} est la longueur totale de la diode.

L'amplitude de ce courant est d'autant plus grande que la fréquence est élevée ou que l'amplitude de l'excursion en tension aux bornes de la diode est grande.

L'évaluation du courant en présence de génération ou de recombinaison locale de porteurs pose question. Le théorème de Ramo-Shockley suppose *a priori* que le courant est le même le long de la structure, ce qui n'est plus le cas en présence de ces deux processus. L'article [Yod96] a développé un théorème de Ramo-Shockley généralisé en prenant en compte ces configurations. Comme ces processus n'ont pas été mis en œuvre pour la modélisation de l'ionisation par choc dans le simulateur MC, ce théorème généralisé n'a pas été étudié et implémenté.

II) Modélisation électrique de la diode Schottky au THz

Cette section présente une description des modèles disponibles dans la littérature pour les diodes Schottky basés sur un schéma équivalent électrique en passant du modèle classique basse fréquence (BF – quelques centaines de GHz maximum) jusqu'à un modèle plus complet valide au THz. Ce schéma électrique est nécessaire pour faire la médiation entre les résultats de simulations MC et d'un outil de simulation de circuits non-linéaires. Pour éviter les écarts éventuels avec le schéma électrique, certains auteurs [Sil10] [Par14] ont directement couplé un modèle physique (MC ou déterministe) à un algorithme d'équilibrage harmonique (*Harmonic Balance* (HB)), technique de résolution couramment utilisée avec des circuits non-linéaires. Cependant, la modélisation de lignes de transmission dans le domaine temporel (nécessaires pour les circuits des chapitres III et IV) ou de tout autre dispositif HF distribué demande un solveur électromagnétique 3D (FDTD par exemple) et l'optimisation non-linéaire des cellules d'adaptation en entrée et en sortie nécessite des algorithmes complexes dont le développement ne constituait pas l'objet de cette thèse. Par ailleurs, un logiciel de simulation tel que Advanced Design System (ADS) offre déjà un module d'équilibrage harmonique et plusieurs algorithmes d'optimisation.

Différentes techniques d'extraction du schéma équivalent de la diode Schottky à partir du simulateur MC sont présentées. La plus courante consiste à extraire les paramètres sur les caractéristiques statiques $I(V)$ et $C(V)$ pour le schéma équivalent BF. Néanmoins, la résistance série est souvent considérée comme indépendante de la tension. Cette hypothèse est fautive en pratique et seule une analyse « petit signal » (APS) permet de l'extraire pour chaque point de polarisation.

Le SE BF peut être étendu jusqu'au THz en ajoutant les effets inertiels des porteurs ainsi que le courant de déplacement dans les régions non-déplétées, respectivement modélisées par des inductances et des capacités. L'APS peut être effectuée suivant différentes stratégies : en excitant la diode avec un signal de faible amplitude tel qu'une sinusoïde à différentes fréquences, une Gaussienne de très courte durée pour obtenir un large spectre fréquentiel ou encore à partir des fluctuations de tension et de courant.

Nous nous focalisons sur les mécanismes intrinsèques pour la modélisation de la diode. Il existe également plusieurs mécanismes extrinsèques parasites qui ne sont pas adressés ici. On peut citer entre autres les résistances de contact, les résistances du métal, les inductances et les capacités parasites (incluant possiblement des effets de surface), la variation des grandeurs sur la surface de contact, telle qu'une inhomogénéité de la hauteur de barrière, les effets de bords, la distribution du champ au voisinage de la diode, les effets de géométrie 3D, effet de peau, etc...

Pour discuter des domaines de validité des schémas équivalents et quantifier les écarts entre ces différents modèles et le modèle MC, un coefficient d'erreur est calculé sur la réponse en courant de la diode lorsque celle-ci est excitée par une tension sinusoïdale avec différentes amplitudes et sur différents points de polarisation.

1. Modèle électrique de la diode Schottky

Le schéma électrique équivalent de la diode Schottky communément utilisé pour des fréquences allant jusqu'à quelques centaines de GHz [Par14] est représenté sur la figure II-II.1.1. Le contact Schottky est modélisé par une source de courant $I_d(V)$ en parallèle avec une capacité non-linéaire $C_d(V)$ représentant la zone de charge d'espace (ZCE). En régime dynamique, la source de courant peut être représentée par une résistance dynamique $R_d(V)$ telle que :

$$\frac{1}{R_d(V)} = \frac{\partial I_d(V)}{\partial V} \quad (\text{II-II.1.1})$$

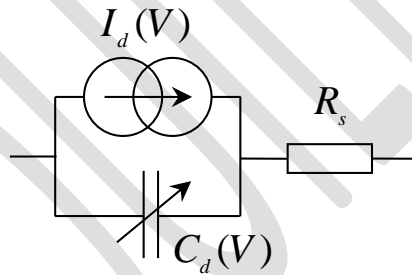


Figure II-II.1.1 – Schéma électrique BF de la diode Schottky

Les expressions de $I_d(V)$ et de $R_d(V)$ sont issues du modèle de l'émission thermoïonique et sont définies par les équations (II-II.1.2) et (II-II.1.3) :

$$I_d(V) = I_s \left[\exp\left(\frac{qV}{nk_bT}\right) - 1 \right] \quad (\text{II-II.1.2})$$

$$R_d(V) = \frac{nk_bT}{qI_s} \exp\left(-\frac{qV}{nk_bT}\right) \quad (\text{II-II.1.3})$$

Avec I_s le courant de saturation, n le coefficient d'idéalité, k_b la constante de Boltzmann et T la température.

Le coefficient d'idéalité n est un facteur empirique qui permet de prendre en compte l'écart par rapport au modèle de l'émission thermoionique [Sze06] où n est strictement égal à 1. En pratique, celui-ci est plutôt compris entre 1 et 1,5 à cause notamment de l'effet tunnel à l'interface ou encore des états d'interface [Tun92].

L'expression couramment utilisée pour la capacité non-linéaire $C_d(V)$ est issue de l'approximation de complète déplétion dans la ZCE, et vaut :

$$C_d(V) = \frac{C_{j0}}{(1 - V/V_{bi})^M} = \frac{\varepsilon_{sc} \mathcal{S}}{W(V)} \quad (\text{II-II.1.4})$$

Avec C_{j0} la capacité de jonction à polarisation nulle, V_{bi} le potentiel de jonction (*built-in potential*), M le coefficient de jonction lié au profil de dopage et $W(V)$ la longueur de la ZCE.

La résistance série R_s , supposée habituellement indépendante de la polarisation, prend en compte la résistance de la zone N lorsque celle-ci est non-déplétée et la résistance de la zone N^+ . Cependant, la résistance série peut possiblement varier avec la tension dans le cas où la longueur de la zone de déplétion est modifiée.

Le schéma équivalent électrique de la figure II-II.1.1 peut être amélioré pour des fréquences de l'ordre du THz en ajoutant les effets inertiels des porteurs [Cha66] (les électrons ne peuvent plus suivre instantanément les variations du champ électrique à ces fréquences) et le courant de déplacement. Ces phénomènes physiques sont respectivement modélisés par une inductance et une capacité dans la zone N non déplétée et la zone N^+ . On parvient ainsi au schéma équivalent intrinsèque complet de la figure II-II.1.2.

Ces éléments peuvent être définis en toute première approximation par les relations [Gon97] :

$$R_N(V) = \frac{\ell_N - W(V)}{Sq\mu_N N_d} \quad (\text{II-II.1.5})$$

$$C_N(V) = \frac{\varepsilon_{sc} \mathcal{S}}{\ell_N - W(V)} \quad (\text{II-II.1.6})$$

$$L_N(V) = \frac{m_{sc}^* [\ell_N - W(V)]}{Sq^2 N_d} \quad (\text{II-II.1.7})$$

$$R_{N^+} = \frac{\ell_{N^+}}{Sq\mu_{N^+} N_d^+} \quad (\text{II-II.1.8})$$

$$L_{N^+} = \frac{\ell_{N^+} m_{sc}^*}{S N_d^+ q^2} \quad (\text{II-II.1.9})$$

$$C_{N^+} = \frac{S \varepsilon_{sc}}{\ell_{N^+}} \quad (\text{II-II.1.10})$$

où S est la surface de l'anode, N_d et N_d^+ le dopage associé à la zone N et N^+ , μ_N et μ_{N^+} la mobilité à faible champ dans la zone N et la zone N^+ , ℓ_N et ℓ_{N^+} la longueur de la zone N et N^+ , m_{sc}^* la masse effective, q la charge élémentaire et ε_{sc} la permittivité du semi-conducteur.

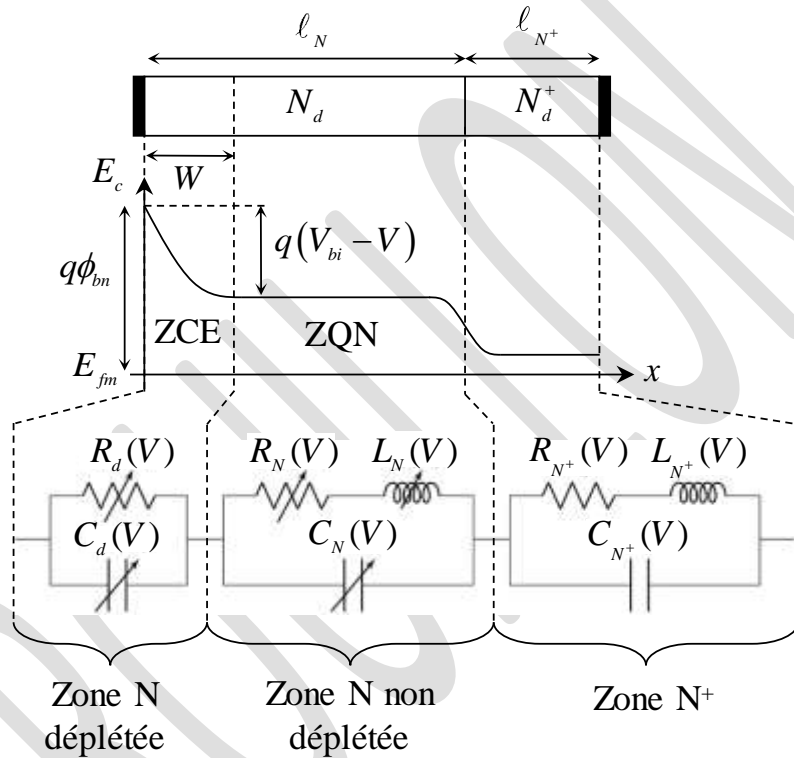


Figure II-II.1.2 – Représentation schématique d’une diode Schottky 1D, du profil de la bande de conduction E_c en fonction de la distance x , et du schéma équivalent petit-signal électrique associé à chacune des zones

Pour la suite, on choisit comme diode de référence pour présenter les principaux résultats de simulation les caractéristiques de la structure données dans le tableau II-II.1.1. La surface a été choisie par défaut. Celle-ci sera optimisée pour les applications de rectification et de multiplication de fréquence dans les chapitres III et IV. La longueur de la zone N^+ a été raccourcie en comparaison des valeurs trouvées dans la littérature afin de limiter le temps de simulation.

ℓ_N (nm)	ℓ_{N^+} (nm)	N_d (cm^{-3})	N_d^+ (cm^{-3})	S (μm^2)	ϕ_{bn} (V)
---------------	-------------------	----------------------------	------------------------------	-------------------------	-----------------

250	50	10^{17}	10^{18}	1	0,88
-----	----	-----------	-----------	---	------

Tableau II-II.1.1 – Caractéristiques de la diode de référence sur GaAs

BROUILLON

2. Extraction à partir des caractéristiques statiques pour le modèle BF

Les paramètres du schéma équivalent de la diode Schottky à basse fréquence (figure II-II.1.1) sont généralement extraits à partir des caractéristiques statiques $I(V)$ et $C(V)$. Tant que la tension de polarisation n'est pas trop élevée, on peut supposer que la résistance dynamique R_d est très grande devant la résistance série R_s et que l'inverse de la dérivée de la caractéristique statique $I_d(V)$ donne directement accès à la résistance dynamique et aux paramètres n et I_s .

La caractéristique statique $I(V)$ et l'inverse de la dérivée sont représentées sur la figure II-II.2.1.

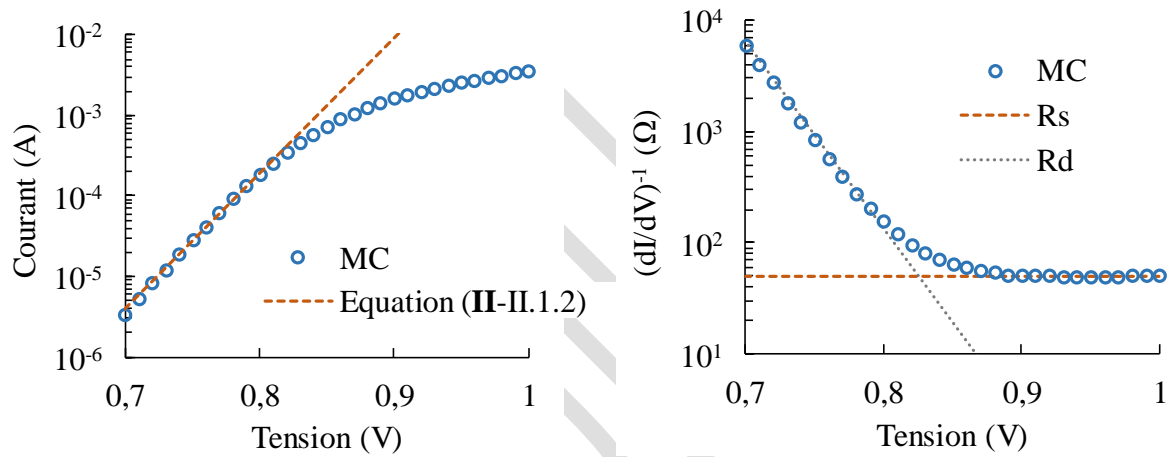


Figure II-II.2.1 – (a) Caractéristique courant tension et (b) inverse de la dérivée de la caractéristique

Comme l'effet tunnel n'a pas été considéré dans ce cas présent, le coefficient d'idéalité est bien égal à 1 (tableau II-II.2.1) pour des tensions inférieures à 0,8 V, vérifiant ainsi le modèle de l'émission thermoionique. Pour des tensions supérieures à 0,8 V, la loi en exponentielle n'est plus vérifiée à cause de la résistance série. En la supposant indépendante de la polarisation, la caractéristique courant tension devient :

$$I_d(V_d) = \frac{nV_t}{R_s} W_0 \left(\frac{R_s I_s}{nV_t} \exp \left(\frac{V_d + R_s I_s}{nV_t} \right) \right) - I_s \quad (\text{II-II.2.1})$$

Avec W_0 la fonction de Lambert définie sur l'intervalle $[-1/e ; +\infty[$. Un équivalent en l'infini donne :

$$I_d(V_d) \sim \frac{V_d}{R_s} - \frac{nV_t}{R_s} \ln \left(\frac{V_d}{R_s I_s} \right) \approx \frac{V_d}{R_s} \quad (\text{II-II.2.2})$$

Pour $V \gg V_{bi}$, la caractéristique statique est quasiment une droite de pente R_s^{-1} . C'est dans cette gamme de polarisation que la résistance série est généralement extraite expérimentalement (figure II-II.2.1). L'article [Ber17] a cependant montré que cette technique d'extraction était assez approximative et que la résistance série ne pouvait pas être considérée comme constante pour des applications de rectification lorsque les puissances mises en jeu étaient faibles (de l'ordre de -20 dBm). En effet, comme évoqué dans la partie II-II.2, la résistance série modélise la zone quasi-neutre et sa longueur varie avec la polarisation, elle ne peut donc pas être considérée comme constante. Les valeurs de n , I_s et R_s extraites sont récapitulées dans le tableau II-II.2.1.

n	I_s (fA)	R_s (Ω)
1,0	0,075	50,6

Tableau II-II.2.1 – Valeurs du coefficient d'idéalité n , du courant de saturation I_s et de la résistance série R_s pour la configuration donnée dans le tableau II-II.1.1

Pour déterminer l'évolution de la capacité C_d , la méthode couramment utilisée dans une simulation MC consiste à calculer la variation des charges avec la polarisation dans toute la structure [Gon97]. Cette méthode peut sembler curieuse puisque la capacité de déplétion C_d ne modélise que la zone de charge d'espace. Pour montrer où la variation de charges est localisée, la capacité linéique (en fF/nm) en fonction de la tension et de la distance a été tracée sur la figure II-II.2.1. L'intégration de la capacité linéique sur toute la distance permet d'avoir la capacité totale. On remarque que pour des tensions inférieures à V_{bi} , la variation des charges est localisée dans la zone de charge d'espace et représente bien la capacité de déplétion. Au-dessus de V_{bi} , il existe d'abord une variation du nombre de charges localisée dans la région proche du contact Schottky en diminuant puis au niveau de la transition N-N⁺ pour des tensions plus élevées. Cette variation n'est donc plus liée à la capacité de déplétion. Cependant, avoir une bonne précision sur le comportement de la capacité autour de V_{bi} et au-delà n'est pas nécessaire puisque celle-ci est court-circuitée par une résistance dynamique très faible. La capacité n'affectera donc pas le comportement de la diode dans cette gamme de polarisation. Par ailleurs, l'expression (II-II.1.4) peut poser problème dans les logiciels de simulations puisque celle-ci n'est pas définie pour $V \geq V_{bi}$ [Maa03]. Une extrapolation linéaire est généralement effectuée dans cette zone. Les valeurs de C_{j0} , I_s et R_s extraites sont indiquées dans le tableau II-II.2.2.

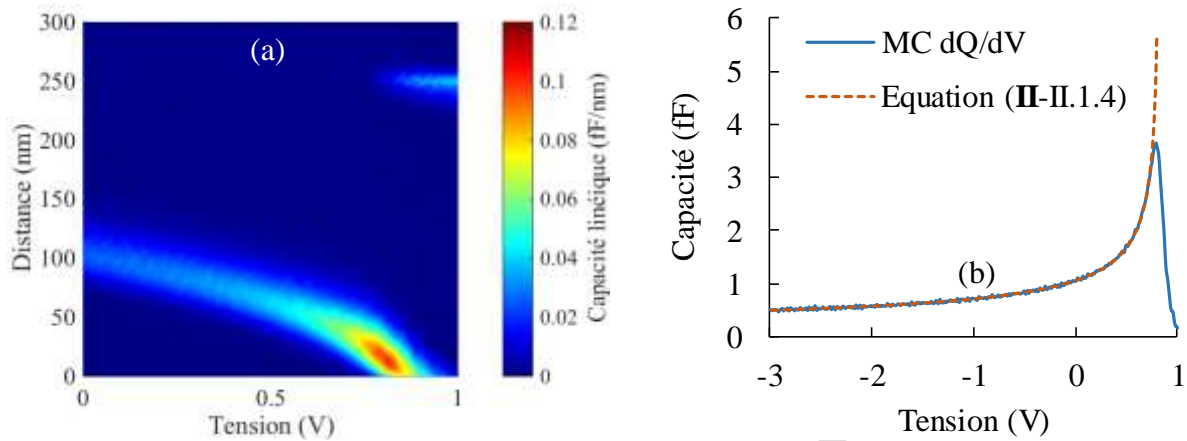


Figure II-II.2.2 – (a) Capacité linéique en fonction de la distance et de la tension pour la diode de référence (tableau II-II.1.1) (b) Capacité totale en fonction de la tension déterminée par la variation de charges (dQ/dV) et à partir de l'équation (II-II.1.4) et des valeurs du tableau II-II.2.2

C_{j0} (fF)	V_{bi} (V)	M
1,05	0,829	0,5

Tableau II-II.2.2 – Valeurs du coefficient d'idéalité n , du courant de saturation I_s et de la résistance série R_s pour la configuration donnée dans le tableau II-II.1.1

Pour déterminer l'évolution de la résistance série en fonction de la polarisation, il est nécessaire de passer à une analyse « petit signal » (APS) autour de différents points de polarisation.

3. Réponse en courant à différents types d'excitation

a. Excitation sinusoïdale

La diode est excitée par un signal sinusoïdal $V(t)$ de faible amplitude tel que :

$$V(t) = V_0 + V_1 \cos(\omega t) \text{ avec } \omega = 2\pi f \quad (\text{II-II.3.1})$$

L'amplitude choisie est $V_1 = 20$ mV pour rester en régime linéaire autour du point de polarisation V_0 . Lorsque la tension aux bornes de la diode est variable dans le temps, le courant total est la somme du courant de conduction (calculé par le théorème de Ramo-Shockley en sommant la vitesse de toutes les particules dans la structure) et du courant de déplacement $i_d(t)$ définit par [Sta96] :

$$i_d(t) = \frac{\varepsilon_{sc} S}{\ell_{tot}} \frac{dv(t)}{dt} = -\frac{V_1 \omega \varepsilon_{sc} S}{\ell_{tot}} \sin(\omega t) \quad (\text{II-II.3.2})$$

L'objectif est d'extraire l'impédance pour plusieurs points de fréquence à chaque point de polarisation choisi. On peut déterminer l'impédance $Z(\omega)$ du dispositif à partir du rapport entre la transformée de Fourier de la tension et la transformée de Fourier du courant total (conduction et déplacement) à la fréquence f considérée. Une fois ce calcul effectué, un algorithme de minimisation de fonction sur la partie réelle et imaginaire de l'impédance par la méthode des moindres carrés permet d'extraire l'ensemble des éléments du schéma équivalent complet de la figure II-II.1.2. La partie réelle et imaginaire de l'impédance pour une tension de 0,8 V sont représentées sur la figure II-II.3.1 et comparées au schéma équivalent de la figure II-II.1.2 avec les valeurs du tableau II-II.3.1. On constate une très bonne adéquation entre le schéma équivalent et le modèle MC.

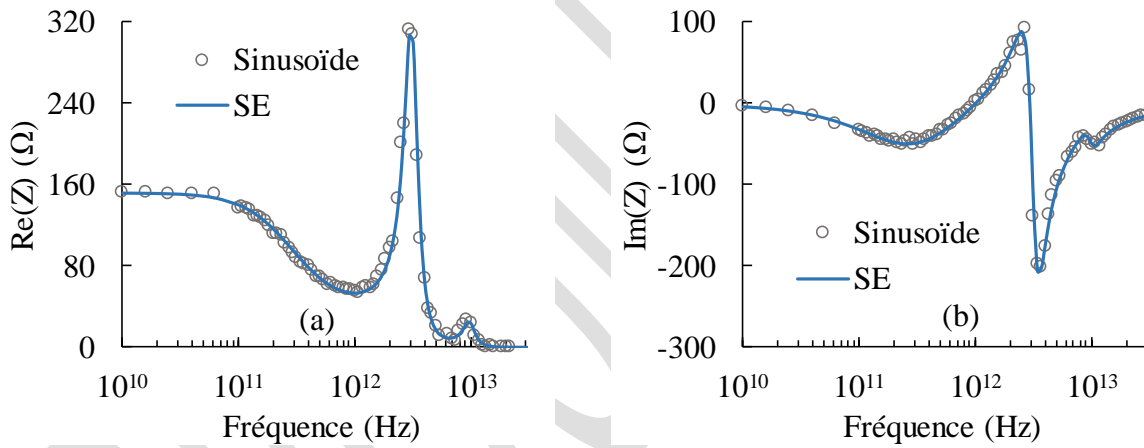


Figure II-II.3.1 – (a) Partie réelle et (b) partie imaginaire de l'impédance en fonction de la fréquence à une tension de polarisation de 0,8 V (diode de référence tableau II-II.1.1) obtenues par une série d'excitations sinusoïdales et par le schéma équivalent (SE) de la figure II-II.1.2 avec les valeurs du tableau II-II.3.1

R_d (Ω)	C_d (fF)	R_N (Ω)	C_N (fF)	L_N (pH)	R_{N^+} (Ω)	C_{N^+} (fF)	L_{N^+} (pH)
113,7	4,88	36,0	0,512	5,07	2,69	2,11	0,133

Tableau II-II.3.1 – Valeurs des paramètres pour le point de polarisation $V_0 = 0,8$ V

La figure II-II.3.2 illustre la partie réelle et imaginaire de l'impédance de la diode pour une tension de polarisation de 0,78 V obtenues avec le modèle du simulateur MC et un modèle « Dérive-Diffusion » (DD) du simulateur Silvaco dans lequel les lois de vitesse des porteurs ont été ajustées à partir des résultats de simulations MC. On constate des écarts entre

ces deux modèles dans la bande de fréquence THz. En effet, les deux cellules RLC de la figure II-II.1.2 produisent des résonances qui n'apparaissent pas avec un modèle DD où l'effet inertiel des porteurs n'est pas considéré puisque ceux-ci suivent instantanément les variations du champ électrique. Une approche «energy balance» (EB) des mêmes simulateurs commerciaux ne serait d'aucune utilité pour remédier à cette limitation des approches DD. En effet, ces codes ne modélisent pas réellement l'équation de relaxation du moment pour des raisons de stabilité numérique. Seul un code hydrodynamique (HD) original [Lep96] ou un code résolvant l'équation de transport de Boltzmann (BTE) (Spherical Harmonics Expansion -SHE- ou MC) peut faire sens.

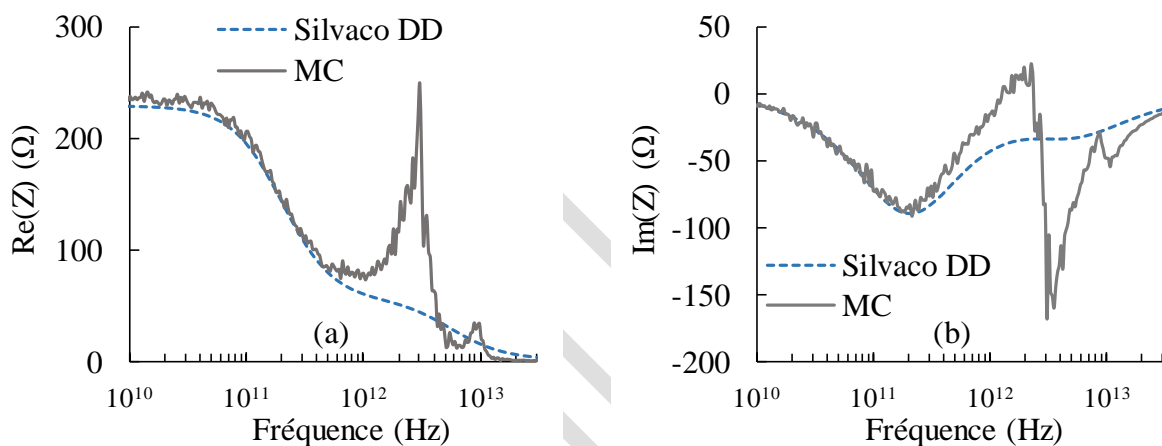


Figure II-II.3.2 – (a) Partie réelle et (b) partie imaginaire de l'impédance en fonction de la fréquence à une tension de polarisation de 0,78 V (diode de référence tableau II-II.1.1) obtenues par une série d'excitations sinusoïdales (MC) et avec un modèle DD (Silvaco)

La technique du balayage en fréquence avec des excitations sinusoïdales a l'avantage d'être simple à mettre en œuvre mais prend beaucoup de temps à cause du balayage en fréquence pour chaque point de polarisation. Il faut compter une journée pour une configuration avec l'ensemble des paramètres dépendants de la polarisation. Il faut suffisamment de points à hautes fréquences (lieu des résonances) afin d'obtenir un minimum de précision sur les éléments du SE représentatif de la ZQN et de la zone N^+ .

b. Excitation Gaussienne

Pour remédier à ce problème principal de la méthode basée sur une excitation sinusoïdale à plusieurs fréquences, on propose d'appliquer un signal ayant un large spectre fréquentiel telle qu'une gaussienne de courte durée autour d'un point de polarisation V_0 tel que :

$$V(t) = V_0 + V_1 \exp\left(-\frac{(t - \mu_t)^2}{2\sigma_t^2}\right) \quad (\text{II-II.3.3})$$

Avec V_0 la tension de polarisation, V_1 l'amplitude du signal, μ_t la moyenne et σ_t l'écart-type.

Le rapport entre la transformée de Fourier de la tension et celle du courant donne directement accès à l'évolution de l'impédance du dispositif en fonction de la fréquence. Le choix de σ_t a un impact sur le spectre fréquentiel désiré. Pour obtenir un signal avec un large spectre fréquentiel, une excitation de courte durée est nécessaire. En effet, la transformée de Fourier $V(\omega)$ du signal $V(t)$ est également une gaussienne mais dont l'écart-type σ_ω vaut :

$$\sigma_\omega = \sigma_t^{-1} \quad (\text{II-II.3.4})$$

Afin de comparer les impédances avec la méthode précédente, on présente les résultats pour le même point de polarisation $V_0 = 0,8 \text{ V}$ et la même amplitude $V_1 = 0,02 \text{ V}$ avec $\sigma_t = 20 \text{ fs}$.

La figure II-II.3.4 et II-II.3.5 représentent respectivement la réponse en courant du dispositif à cette excitation puis la partie réelle et imaginaire de l'impédance du dispositif.

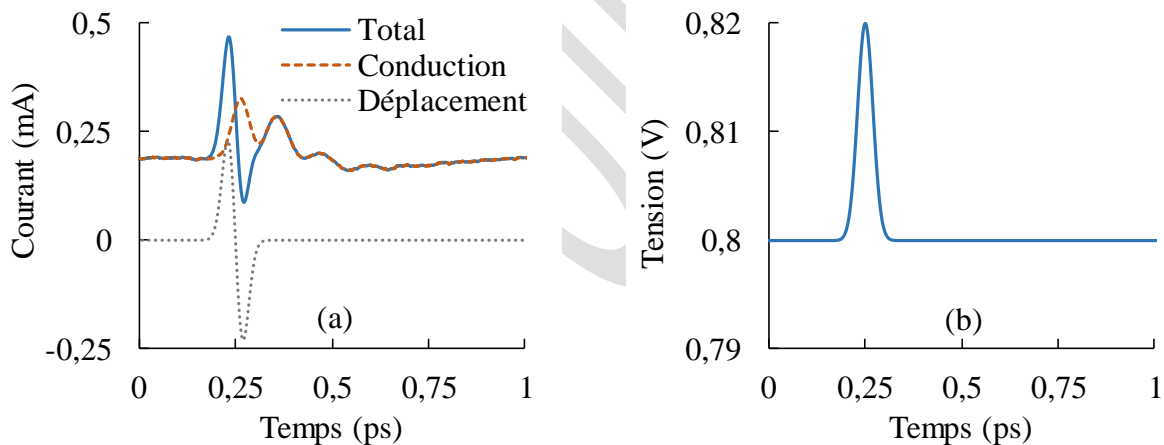


Figure II-II.3.4 – (a) Réponse en courant à (b) une excitation Gaussienne en tension autour de 0,8 V pour la diode de référence (voir tableau II-II.1.1)

On retrouve une bonne adéquation sur l'impédance entre la série d'excitations sinusoïdales et l'excitation Gaussienne. Les valeurs des différents éléments du schéma sont très voisines de celles de la méthode précédente. Une simulation peut être effectuée en une heure, soit beaucoup plus rapidement qu'avec les excitations sinusoïdales. Néanmoins, il est parfois nécessaire de procéder à quelques opérations de filtrage sur la réponse temporelle qui peuvent modifier significativement l'impédance, notamment à basse fréquence.

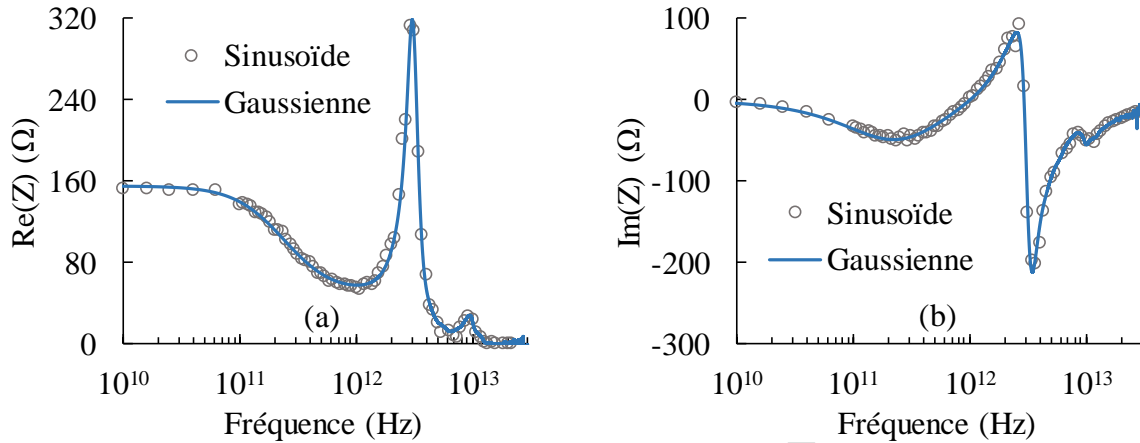


Figure II-II.3.5 – (a) Partie réelle et (b) partie imaginaire de l'impédance autour de 0,8 V obtenues avec l'excitation gaussienne et la série d'excitations sinusoïdales.

c. Extraction à partir des fluctuations de tension et de courant

L'étude des fluctuations de tension et de courant constitue une alternative intéressante pour avoir accès à l'impédance du dispositif en fonction de la fréquence. Pour un point de polarisation ($V_0 ; I_0$) donné, on peut distinguer deux configurations [Reg92] :

- « *Current-noise operation* » : la tension aux bornes de la diode reste constante et égale à V_0 en fonction du temps puis les fluctuations de courant autour de I_0 sont analysées.
- « *Voltage-noise operation* » : le courant reste constant et égal à I_0 en fonction du temps et les fluctuations de tension aux bornes du dispositif autour de V_0 sont analysées.

Pour caractériser le bruit électronique d'un dispositif, on utilise généralement comme grandeur la densité spectrale, respectivement notée $S_I(f)$ et $S_V(f)$ pour les fluctuations de courant et de tension. Elle est définie comme la transformée de Fourier de la fonction d'autocorrélation C_X des fluctuations de la grandeur X considérée. En effet, d'après le théorème de Wiener-Khintchine, on a [Reg97] :

$$S_X(f) = 2 \int_{-\infty}^{\infty} \exp(i2\pi ft) C_X(t) dt \quad \text{avec} \quad C_X(t) = \overline{\delta X(t') \delta X(t'+t)} \quad (\text{II-II.4.1})$$

où $\delta X(t) = X(t) - \bar{X}$ correspond aux fluctuations de X autour de la valeur moyenne \bar{X} .

Pour un dispositif à deux ports, il est possible de relier la densité spectrale de courant $S_I(f)$ et de tension $S_V(f)$ au module de l'impédance du dispositif par la relation :

$$|Z(f)|^2 = \frac{S_V(f)}{S_I(f)} \quad (\text{II-II.4.2})$$

La figure II-II.4.1 illustre les fonctions d'autocorrélation des fluctuations de courant et de tension autour du point de polarisation $V_0 = 0,8$ V ainsi que les densités spectrales de puissance (DSP) associées. Elles sont comparées aux DSP déduites du schéma équivalent complet (SE) [Gon97] à partir des équations (II-II.4.2) et (II-II.4.3) :

$$S_V(\omega) = 4k_B T \left[\frac{n}{2} \text{Re}(Z_d(\omega)) + \text{Re}(Z_N(\omega) + Z_{N^+}(\omega)) \right] \quad (\text{II-II.4.3})$$

Avec $Z(\omega) = Z_d(\omega) + Z_N(\omega) + Z_{N^+}(\omega)$, $Z_d(\omega) = \frac{R_d}{1 + jR_d C_d \omega}$,

$$Z_N(\omega) = \frac{R_N + jL_N \omega}{1 + jR_N C_N \omega - L_N C_N \omega^2}, \quad Z_{N^+}(\omega) = \frac{R_{N^+} + jL_{N^+} \omega}{1 + jR_{N^+} C_{N^+} \omega - L_{N^+} C_{N^+} \omega^2}$$

Les fonctions d'autocorrélations sont calculées par une transformée de Fourier inverse de la DSP. On constate une très bonne adéquation entre les DSP calculées à partir des fluctuations et celles déduites directement du schéma équivalent. Avant de déterminer l'impédance de la diode, analysons la densité spectrale de bruit en courant $S_I(f)$. Dans l'article [Tri86], Trippe et al ont étudié le bruit dans les contacts Schottky en décomposant les électrons dans la ZCE en deux populations :

- **Groupe 1** : ces électrons ont une vitesse initiale suffisante au début de la ZCE pour pouvoir atteindre le contact Schottky et contribuent donc au courant DC. Le temps de transit τ_F de ces porteurs pour atteindre le métal dépend de leur vitesse initiale. La densité spectrale en courant associée à ces électrons à basse fréquence est constante et vaut $2qI$ (bruit de grenaille). Celle-ci chute autour de la fréquence plasma f_p telle que :

$$f_p = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{q^2 N_d}{\epsilon_{sc} m_{sc}^*}} \quad (\text{II-II.4.4})$$

- **Groupe 2** : ces électrons n'ont pas une vitesse suffisante et reviennent donc au début de la ZCE. Ils ne contribuent pas au courant DC mais contribuent au bruit. Il est intéressant de noter que tous ces porteurs mettent le même temps τ_R pour revenir au début de la ZCE, quelle que soit leur vitesse initiale. La DSP en courant associée à ce groupe d'électrons croît en f^2 à basse fréquence, atteint une valeur maximale pour

$f \approx 1,4f_p$ puis chute au-delà.

La figure II-II.4.2 illustre le portrait de phase associé à ces deux groupes d'électrons dans la ZCE, c'est-à-dire l'ensemble des courbes représentant l'évolution de la vitesse de l'électron v_x en fonction de sa position x pour plusieurs vitesses initiales. Ces courbes représentent des portions d'ellipses.

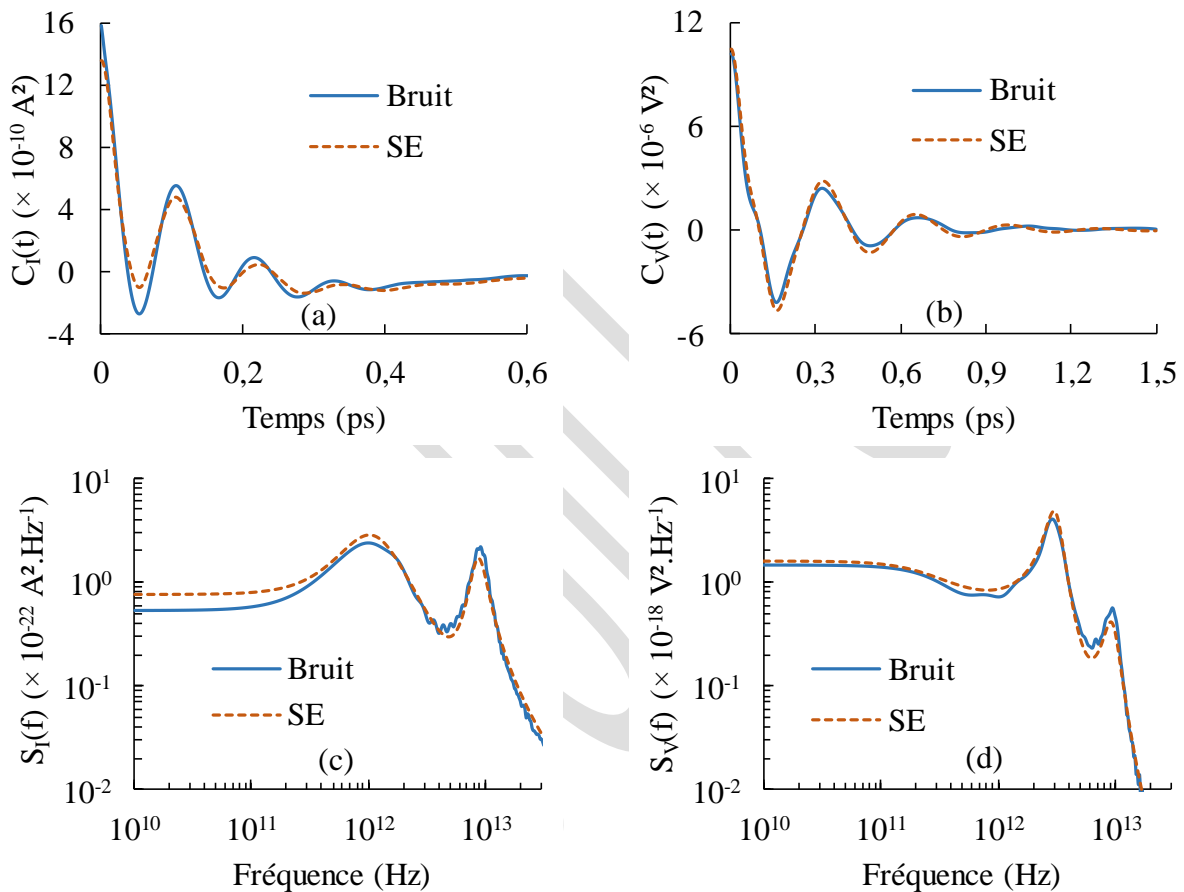


Figure II-II.4.1 – (a) Fonction d'autocorrélation des fluctuations du courant $C_I(t)$ et (b) de la tension $C_V(t)$ et (c)-(d) densité spectrale associée $S_I(f)$ et $S_V(f)$ pour une tension de 0,8 V. Comparaison avec le schéma équivalent complet au THz (SE) et les valeurs du tableau II-II.3.1

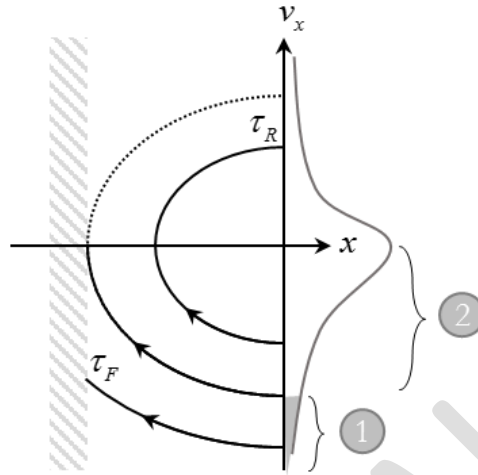


Figure II-II.4.2 – Portrait de phase représentant l'évolution des électrons de chaque groupe dans l'espace des phases $(x; v_x)$ pour plusieurs vitesses initiales. La position $x = 0$ représente le début de la ZCE.

Bien que cette décomposition en deux groupes suppose que les électrons ne subissent pas d'interactions et qu'ils ne se déplacent que sous l'action du champ électrique dans la ZCE, on retrouve certaines similitudes avec les résultats du code MC de la figure II-II.4.1. Le plateau à basse fréquence peut être associé aux électrons du groupe 1 avec la DSP associée au bruit de grenaille $2qI$. Le premier pic correspond aux électrons du groupe 2 (*returning carrier resonance*). Le deuxième pic est causé par les fluctuations de la vitesse des porteurs au niveau de l'homo-jonction N-N⁺, conduisant à des fluctuations du champ électrique par le biais de l'équation de Poisson [Gon97]. Le modèle de Trippe [Tri86] ajoute la contribution des résistances séries (zone N non déplétée et zone N⁺) par un bruit thermique, modifiant ainsi la DSP à basse fréquence. Néanmoins, ce modèle ne prédit pas la présence du deuxième pic qui se situe à une fréquence intermédiaire entre la fréquence plasma de la zone N et de la zone N⁺ [Par11a]. Un modèle analytique a été proposé par Shiktorov et al. [Shi05] sur ce pic à partir de l'équation de Langevin.

L'équation (II-II.4.2) nous permet de calculer le module de l'impédance à partir des densités spectrales de puissance (figure II-II.4.3). Une confrontation avec les résultats issus du schéma équivalent montre une différence de quelques pourcents sur le module à basse fréquence.

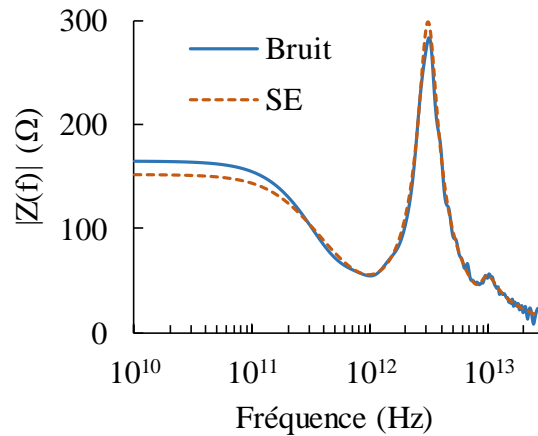


Figure II-II.4.3 – Module de l'impédance déduit des densités spectrales associées aux fluctuations de courant et de tension. Comparaison avec le schéma équivalent complet au THz (SE) et les valeurs du tableau II-II.3.1

Cependant, la relation (II-II.4.2) ne permet d'avoir que le module de l'impédance à partir des densités spectrales des fluctuations de courant et de tension. Pour obtenir la partie réelle et imaginaire de $Z(f)$, une information supplémentaire est nécessaire. L'article [Sta96] propose d'insérer une résistance non bruyante en série avec la diode et d'étudier les fluctuations de tension aux bornes de cette résistance (« *circuit-noise operation* ») afin de disposer d'une équation supplémentaire. Cependant, cette méthode suppose que la partie imaginaire de l'impédance soit toujours négative, ce qui n'est pas forcément le cas comme illustré sur la figure II-II.3.1, notamment à cause de la résonance associée au circuit RLC de la ZQN.

d. Un modèle « boîte noire » : les paramètres X

Les modèles électriques présentés précédemment restent des modèles dits « quasi-statiques », c'est-à-dire que les éléments du schéma équivalent changent presque instantanément avec les stimuli – ce qui ne signifie pas que les « output » changent instantanément avec les stimuli –. Pour obtenir par les mesures les paramètres du modèle, les expérimentateurs peuvent utiliser un analyseur de réseau vectoriel (*VNA : Vectorial Network Analyzer*) et mesurer les paramètres S du dispositif pour chaque point de polarisation afin d'extraire les paramètres du modèle.

De nouveaux paramètres ont été créés pour des dispositifs non-linéaires : les paramètres X [Roo13]. Ceux-ci correspondent à une extension des paramètres S en prenant en compte les non-linéarités du dispositif lorsque celui-ci est excité par un grand signal ou par plusieurs fréquences. Ils peuvent être calculés à partir d'un VNA dit non-linéaire (*NVNA : Non-linear*

Vectorial Network Analyzer) sur un dispositif réel. Ils comprennent l'amplitude et la phase de toutes les composantes spectrales présentes sans exception en sortie du quadripôle.

On aurait pu s'inspirer de cette méthode pour créer un fichier regroupant les paramètres X du dispositif calculés à partir de la réponse en courant de la diode en MC puis en exploitant ce fichier dans un environnement de type « Equilibrage Harmonique » sous ADS par exemple. Mais, ce modèle « boîte noire » pose la question de la pertinence des excitations à imposer aux bornes de la diode suivant l'application visée pour extraire ces paramètres X. Par ailleurs, cette méthode fait perdre le sens physique associé à chaque élément du schéma équivalent et permet difficilement d'effectuer une optimisation des paramètres physiques de la diode Schottky sous un logiciel de simulation. Cette approche n'a donc pas été retenue.

III) Amélioration des lois non linéaires du modèle

Nous avons présenté dans la section précédente différentes démarches d'extraction du schéma équivalent pour un point de polarisation donné à partir des résultats du simulateur MC. La méthode la plus longue mais la plus sûre reste d'appliquer une excitation sinusoïdale de faible amplitude pour plusieurs fréquences.

Cette section vise à montrer l'évolution des différents éléments du SE en fonction de la polarisation pour la diode choisie comme référence (tableau II-II.1.1) afin de la confronter aux formulations analytiques simples – section II-II.1. – (issu de l'approximation de complète déplétion pour la capacité de déplétion ou encore du modèle de l'émission thermoionique par exemple pour la caractéristique statique) dont les expressions pour chaque élément sont rappelées et certaines améliorées afin de prendre en compte la déplétion possible du substrat pour des diodes courtes. Le calcul d'un coefficient d'erreur en comparant le courant de conduction issu du simulateur MC et celui issu de trois modèles électriques différents lorsque la diode est excitée par un signal sinusoïdal sous ADS permet de dégager les domaines de validité pour chacun des modèles. Une approche descriptive de la vitesse de saturation des porteurs est proposée.

L'objectif des deux prochains chapitres est de présenter les caractéristiques optimales de la diode Schottky lorsque celle-ci est insérée dans un circuit de détection ou encore dans un multiplieur de fréquence. L'extraction de tous les paramètres pour plusieurs configurations (dopage, longueur, hauteur de barrière, couple métal/SC, etc.) avec le simulateur MC n'est bien sûr pas envisageable en raison des temps de simulation importants, d'où l'intérêt de se rapprocher d'un modèle analytique pour chacun des éléments avec quelques ajustements issus des résultats MC sur les lois utilisées.

1. Confrontation avec le modèle analytique

a. Capacité de déplétion C_d

En supposant que la concentration de porteurs est très faible devant la concentration d'impuretés ionisées dans la zone N (approximation de complète déplétion) [Sze06], on peut déduire l'expression de la capacité C_d en fonction de la polarisation V lorsque $V < V_{bi}$:

$$C_d(V) = \frac{C_{j0}}{\sqrt{1 - V/V_{bi}}} = \frac{\epsilon_0 \epsilon_r S}{W(V)} \quad (\text{II-III.1.1})$$

Avec $C_{j0} = S \sqrt{\frac{\epsilon_{sc} q N_d}{2V_{bi}}}$, $V_{bi} = \phi_{bn} + \frac{k_B T}{q} F_{1/2}^{-1} \left(\frac{\sqrt{\pi} N_d}{2 N_c} \right)$ et $N_c = 2 \left(\frac{k_B T m_{sc}^*}{2\pi \hbar^2} \right)^{3/2}$

$F_{1/2}^{-1}$ représente la fonction réciproque de l'intégrale de Fermi définie par :

$$F_{1/2}(\eta) = \int_0^\infty \frac{\sqrt{\epsilon}}{1 + \exp(\epsilon - \eta)} d\epsilon \quad (\text{II-III.1.2})$$

Dans le cas où $N_d < 2,6N_c$ [Mat09], on peut approximer la fonction réciproque de l'intégrale de Fermi afin d'obtenir l'expression (II-III.1.3) pour V_{bi} :

$$V_{bi} \approx \phi_{bn} - \frac{k_B T}{q} \ln \left(\frac{N_c}{N_d} - \frac{1}{4} \right) \quad (\text{II-III.1.3})$$

Cette expression est valable jusqu'à des dopages de 10^{18} cm^{-3} pour GaAs.

La figure II-III.1.1 représente l'évolution de la capacité C_d et de C_d^{-2} en fonction de la polarisation déduite d'une extraction petit-signal (APS), de la variation de charges par rapport à la tension (dQ/dV) et du modèle analytique pour la diode de référence (tableau II-II.1.1).

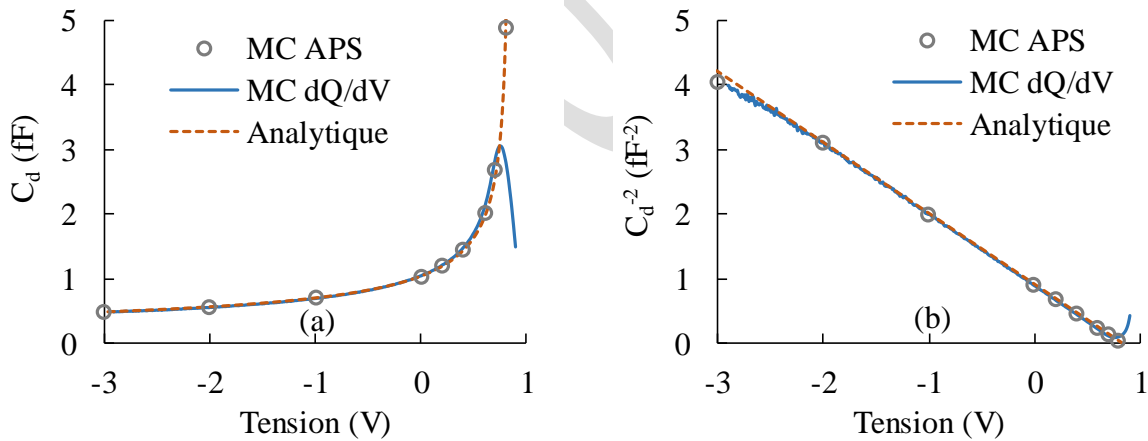


Figure II-III.1.1 – Evolution de la capacité C_d et de C_d^{-2} en fonction de la tension calculée à partir du simulateur MC par une analyse petit-signal (APS), par la variation de charges (dQ/dV) et avec le modèle analytique donné par l'équation (II-III.1.1)

Le calcul de la capacité par la variation de charges ou par une APS donne des résultats similaires. Le modèle analytique de la capacité est bien vérifié par rapport aux résultats issus du MC avec une erreur inférieure à 1 % pour C_{j0} et d'environ 2 % sur la valeur de V_{bi} (tableau II-III.1.1).

	C_{j0} (fF)	V_{bi} (V)
Analytique	1,04	0,846
MC	1,05	0,829

Tableau II-III.1.1 – Valeurs du modèle de la capacité de l'équation (II-III.1.1) avec le modèle analytique et une extraction directe sur les résultats issus du simulateur MC

Le tracé de $C_d^{-2}(V)$ met bien en évidence une loi linéaire. Le point obtenu en MC pour $-3V$ semble s'écarter de cette loi linéaire car la déplétion commence à s'effectuer dans la zone de diffusion autour de l'homo-jonction N-N⁺. En effet, le modèle classique de la capacité donnée par l'équation (II-III.1.1) ne considère pas la déplétion possible du substrat. En supposant que la concentration de porteurs varie de manière abrupte au niveau de l'homo-jonction N-N⁺, la tension V_{00} pour laquelle la zone N de longueur ℓ_N est complètement déplétée vaut :

$$V_{00} = -V_{bi} \left[\left(\frac{\ell_N C_{j0}}{\epsilon_0 \epsilon_r S} \right)^2 - 1 \right] \quad (\text{II-III.1.4})$$

Lorsque $V < V_{00}$, une partie de la zone N⁺ est également déplétée et la capacité pour cette gamme de polarisation s'écrit [Mor17]:

$$C_d(V) = \frac{C_{j0^+}}{\sqrt{1 - \frac{V}{V_{bi^+}}}} \text{ avec } C_{j0^+} = \frac{C_{j0}}{\sqrt{1 - \frac{V_{00}}{V_{bi}} \left(1 - \frac{N_d}{N_d^+} \right)}} \text{ et } V_{bi^+} = \frac{N_d^+ C_{j0}^2}{N_d C_{j0^+}^2} V_{bi} \quad (\text{II-III.1.5})$$

La figure II-III.1.2 représente la capacité déduite du code MC sur une plus large gamme de tension avec une analyse petit signal et celle calculée à partir des équations (II-III.1.1) et (II-III.1.5) suivant la valeur de V . Le tracé de C_d^{-2} montre que la capacité autour de V_{00} n'est pas correctement reproduite à cause de la diffusion des porteurs dans la zone de transition N-N⁺, la concentration de porteurs ne variant pas de manière abrupte dans cette zone.

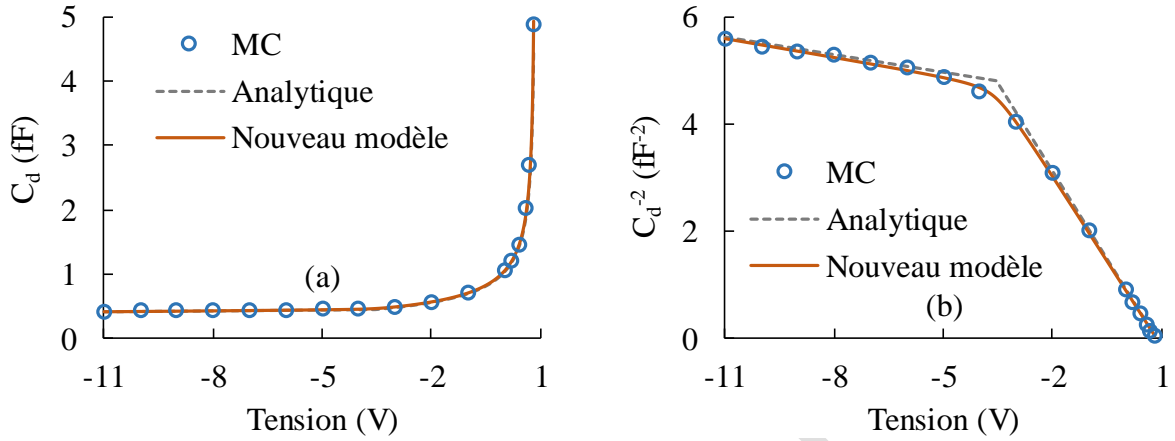


Figure II-III.1.2 – Evolution de C_d^{-2} en fonction de la tension. Les ronds représentent l'extraction petit-signal de la capacité en MC et la courbe en trait plein représente la loi donnée par l'équation (II-III.6) avec les valeurs du tableau II-III.1.2

On constate que pour $V \gg V_{00}$ et $V \ll V_{00}$, la capacité extraite avec le MC tend asymptotiquement vers le modèle analytique décrit par les équations (II-III.1.1) et (II-III.1.5). Afin d'avoir une unique équation et donc continuité de la capacité quelle que soit la tension aux bornes de la diode inférieure à V_{bi} , on propose d'utiliser la relation (II-III.1.6) où γ est un paramètre d'ajustement permettant de faire le lien entre (II-III.1.1) et (II-III.1.5).

$$\frac{2}{C_d^2(V)} = -\left(\frac{1}{C_{j0}^2 V_{bi}} + \frac{1}{C_{j0^+}^2 V_{bi^+}}\right)V + \left(\frac{1}{C_{j0}^2} + \frac{1}{C_{j0^+}^2}\right) + \left(\frac{1}{C_{j0^+}^2 V_{bi^+}} - \frac{1}{C_{j0}^2 V_{bi}}\right) \sqrt{\left(V + \frac{C_{j0^+}^2 - C_{j0}^2}{C_{j0}^2 / V_{bi^+} - C_{j0}^2 / V_{bi}}\right)^2 + \gamma^2} \quad (\text{II-III.1.6})$$

Le tracé de la loi (II-III.1.6) est représenté sur la figure II-III.1.2 et les valeurs des 5 paramètres associés sont récapitulées dans le tableau II-III.1.2.

C_{j0} (fF)	C_{j0^+} (fF)	V_{bi} (V)	V_{bi^+} (V)	γ (V)
1,048	0,480	0,852	37,39	0,513

Tableau II-III.1.2 – Valeurs des cinq paramètres de la loi donnée par l'équation (II-III.1.6) et ajustées à partir d'une APS avec le simulateur MC pour la diode de référence

L'implémentation de l'équation (II-III.1.1) dans un logiciel de simulation de circuits est problématique si $V \geq V_{bi}$ [Maa03]. Une extrapolation linéaire est généralement effectuée sur la capacité pour $V > \alpha V_{bi}$ avec $0 < \alpha < 1$ telle que :

$$C_d(V) = \frac{C_{j0}}{\sqrt{1-\alpha}} \left[1 + \frac{V - \alpha V_{bi}}{2V_{bi}(1-\alpha)} \right] \quad (\text{II-III.1.7})$$

Cette expression permet d'assurer une continuité pour C_d et sa dérivée en $V = \alpha V_{bi}$. La précision sur la capacité dans cette zone n'est pas nécessaire puisque celle-ci est shuntée par la résistance dynamique R_d de faible valeur [Ber17].

Effet 2D et 3D sur la capacité

Lorsque la surface du contact Schottky diminue, deux effets de nature à accroître la valeur de la capacité établie à partir de modélisation 1D se produisent :

1/ Modulation de la ZCE en dehors de la surface de l'anode. Cet effet est dépendant du diamètre de l'anode.

2/ Effets des états de surface entre SC et oxyde

Afin d'établir la contribution du point 1/ qui dépend de la configuration de la diode (hauteur de barrière, dopage, longueur des diverses zones, ...) des modélisations bidimensionnelles sous Atlas de Silvaco ont été entreprises. Une régression linéaire des capacités obtenues pour des surfaces variables (de $0,2 \times 1 \mu\text{m}^2$ à $4 \times 1 \mu\text{m}^2$) permet d'accéder à cette zone située dans le volume en périphérie du contact Schottky. Les chapitres III et IV décriront l'effet de la capacité parasite due à ces effets 2D pour la multiplication de fréquence et la rectification.

Pour quantifier le rôle des états de surface – ou plus précisément, d'interface entre le SC et l'oxyde – il faudrait disposer de la densité d'états locale des états de surfaces localisés dans le gap du semi-conducteur puis recourir à un solveur 2D de l'équation de Poisson avec une prise en compte fine du taux d'occupations de ces états à mesure que le potentiel du contact métallique évolue. Nous ne disposons pas d'un tel modèle et je crains qu'aujourd'hui, il n'existe pas. Atlas de Silvaco permet de prendre en compte les états d'interface à travers une densité surfacique de charge ou bien via des états dans le gap (de type « acceptor like » et « donor like » suivant qu'ils se trouvent proche de la bande de conduction ou de la bande de valence). Mais ces états sont discrets. Nous n'avons pas souhaité utiliser plusieurs niveaux discrets pour tenter de copier le comportement du continuum d'états dans le gap. Nous avons donc opté pour la densité de charges fixes comme dans la référence [Mor16]. La structure 2D que nous avons utilisée pour les modélisations avec Atlas est celle de cet article et est représentée sur la figure II-III.1.2.

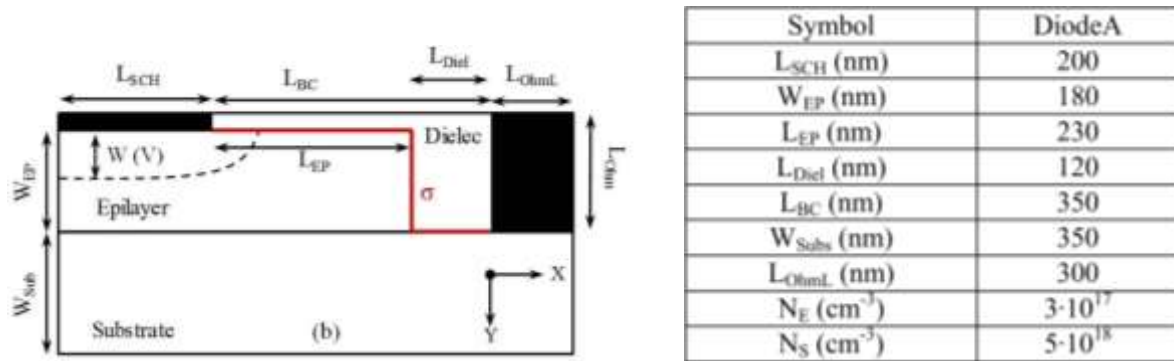


Figure II-III.1.2 – Représentation de la structure 2D d’une diode Schottky et valeurs des différentes longueurs et des dopages pour chaque zone [Mor16]. Une profondeur de 1 μm a été choisie par défaut.

On propose dans un premier temps de ne pas tenir compte des états de surface à l’interface entre l’oxyde et le SC et d’étudier l’influence de la prise en compte d’une structure 2D sur la capacité de déplétion. La figure II-III.1.3 représente la capacité par unité de surface sur toute la structure pour différents points de polarisation entre 0 V et -5 V. Celle-ci a été calculée en faisant la variation des charges par rapport à la tension (dQ/dV). La capacité totale 2D est déduite en intégrant la capacité surfacique sur toute la surface et est représentée sur la figure II-III.1.4. On a également superposé la capacité 2D déduite d’une APS, la capacité 1D déduite d’une coupe de la structure 2D sous le contact Schottky (dQ/dV) et la capacité calculée avec l’expression (II-III.1.1). On remarque un écart pouvant aller jusqu’à 40 % entre la capacité calculée en 1D et celle calculée en 2D. En effet, en prenant la géométrie 2D, on remarque sur la figure II-III.1.3 qu’il existe également une variation de charges sous l’isolant, ce qui a pour effet d’augmenter la capacité totale. On a une erreur inférieure à 1% en calculant la valeur de la capacité avec une analyse petit signal ou à partir de la variation de charges avec la polarisation. Le modèle analytique de la capacité issu de l’hypothèse de complète déplétion dans la zone de charge d’espace se superpose bien à la capacité calculée en 1D.

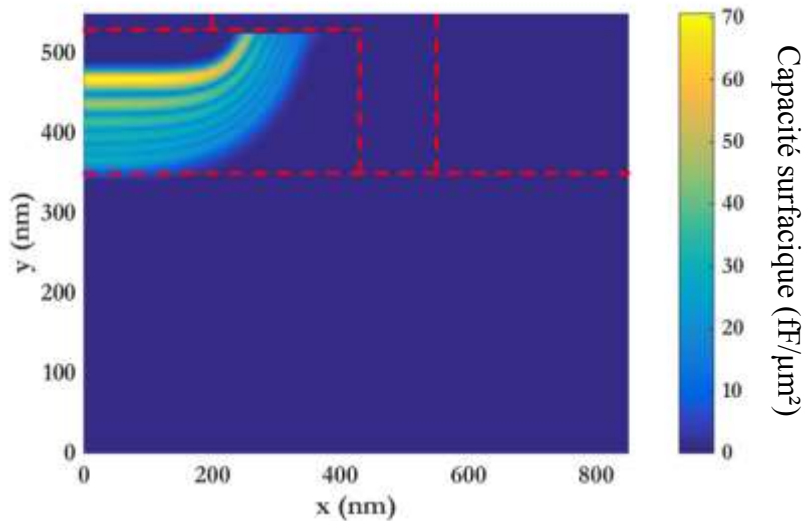


Figure II-III.1.3 – Contribution spatiale de la capacité totale pour plusieurs points de polarisation (0V, -1V, -2V, -3V, -4V et -5V). La barre représente la valeur de la capacité par unité de surface en fF/μm². Pour obtenir la capacité totale, il suffit d'intégrer la capacité surfacique sur toute la surface.

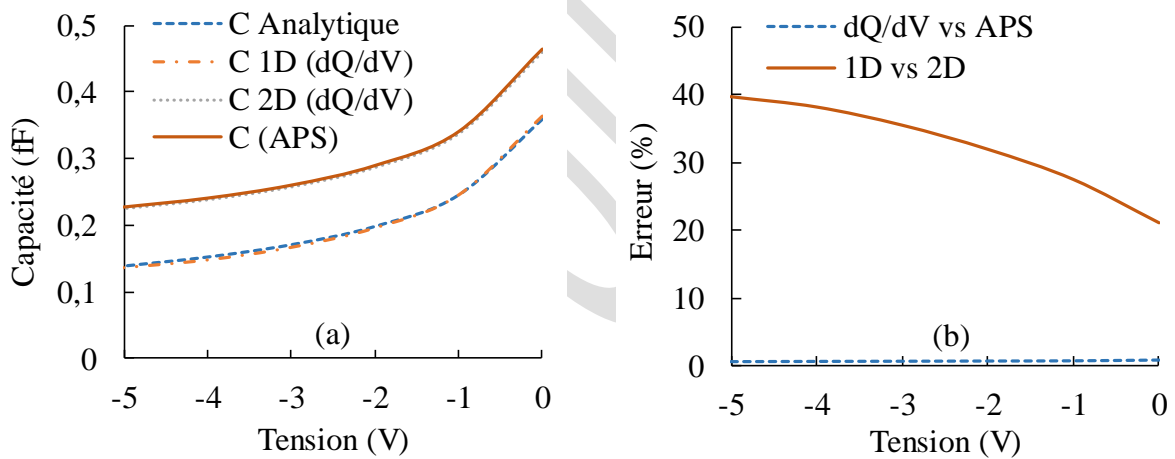


Figure II-III.1.4 – Capacité en fonction de la polarisation par plusieurs méthodes (analytique 1D / extraction 1D / extraction 2D et analyse petit signal) et erreur commise entre analyse petit signal/ variation de charges et 1D/2D

On propose maintenant de prendre en compte une densité surfacique de charges à l'interface entre l'isolant et le semi-conducteur comme ce qui est fait dans l'article [Mor16]. Cette densité surfacique de charges est reliée à un potentiel de surface V_s telle que :

$$\sigma = -\sqrt{2qN_d |V_s| \epsilon_{sc}} \quad (\text{C.m}^{-2}) \quad (\text{II-III.1.8})$$

Pour $|V_s| = 0,7 \text{ V}$, valeur la plus élevée donnée dans [Mor16], on obtient $\sigma = 2,8 \times 10^{-7} \text{ C.m}^{-2}$.

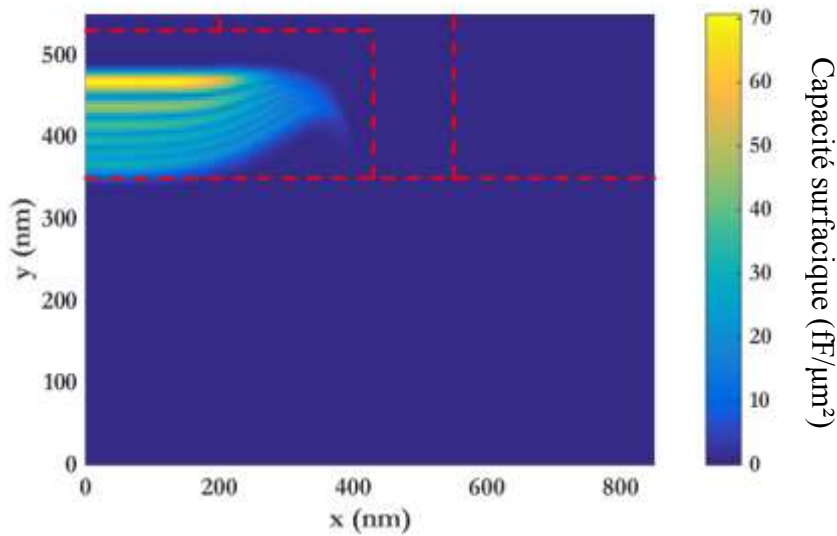


Figure II-III.1.5 – Contribution spatiale de la capacité totale pour plusieurs points de polarisation (0V, -1V, -2V, -3V, -4V et -5V). La barre représente la valeur de la capacité par unité de surface en fF/μm². Pour obtenir la capacité totale, il suffit d’intégrer la capacité surfacique sur toute la surface.

On observe une modification de la contribution spatiale de la capacité avec la prise en compte de charges fixes comparée à la figure II-III.1.5. La figure II-III.1.6 représente la capacité obtenue avec et sans considérer cette densité surfacique de charges.

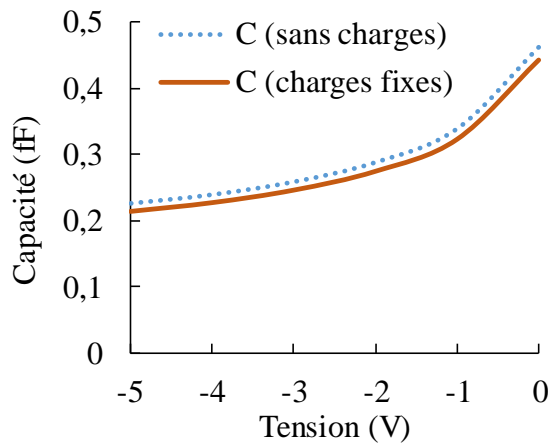


Figure II-III.1.6 – Capacité en fonction de la polarisation pour avec et sans la prise en compte de charges fixes et écart entre les deux modèles.

La capacité est un peu plus faible avec la densité surfacique de charges. L’écart entre les deux modèles est autour de 5%.

b. Caractéristique statique I(V)

Revenons sur le calcul analytique de la caractéristique I(V) de la diode Schottky. Nous aurions pu commencer ce chapitre par cette section. Mais si nous l'abordons ici, c'est qu'elle n'est pas aussi essentielle que nous le pensions initialement. Certes, elle joue un rôle sur le fonctionnement de la diode. Mais, à mieux connaître cette structure, il s'avère que la caractéristique en direct ne constitue pas l'élément décisif du fonctionnement de la diode. S'il était possible de refaire le travail, un effort beaucoup plus conséquent serait apporté à la caractéristique en inverse.

Dans une jonction métal/SC, le transport du courant est lié au déplacement des porteurs majoritaires contrairement à une jonction PN. Il existe deux théories décrivant l'évolution du courant en fonction de la tension aux bornes de la diode :

- la théorie de la diffusion de Wagner (1931), Schottky et Spenke (1939),
- la théorie de l'émission thermoïonique de Bethe (1942) [Bet42].

Suivant le modèle dérive-diffusion, le courant est conditionné par les processus de dérive et de diffusion dans la ZCE, alors que dans le modèle de l'émission thermoïonique, c'est l'émission des électrons au-dessus de la barrière qui conditionne le courant. Une troisième approche, intermédiaire, a également été développée par Crowell et Sze [Sze06] et regroupe les deux modèles précédents en prenant en compte le phénomène de force image à l'interface métal/SC.

L'objectif n'est pas de présenter de manière exhaustive les différents calculs mais d'en donner les mécanismes physiques qui les sous-tendent et de présenter les expressions des caractéristiques statiques pour chacune d'entre elles afin de les comparer aux résultats du simulateur MC.

Dans le modèle de diffusion, le courant s'écrit comme la somme d'un courant de dérive dû au mouvement des charges sous l'action du champ électrique et d'un courant de diffusion dû au mouvement des charges sous l'action de leur gradient de concentration. L'hypothèse majeure faite dans ce modèle pour parvenir à l'expression de la caractéristique courant/tension concerne la concentration de porteurs à l'interface du côté du semi-conducteur qui ne dépend pas de la tension appliquée : le quasi-niveau de Fermi est nul à l'interface et rejoint le niveau de Fermi du métal. Le mouvement des électrons est donc uniquement régi par la dérive et la diffusion qui peut s'explicitier à partir du gradient du quasi-niveau de Fermi [Rho88]. La caractéristique statique J_d s'écrit alors :

$$J_d = \mu_n N_c \sqrt{\frac{2N_d q^2 k_B T}{\epsilon_{sc} \pi}} \frac{\exp\left(\frac{qV_d}{k_B T}\right)}{\operatorname{erfi}\left(\sqrt{\frac{qV_d}{k_B T}}\right)} \exp\left(-\frac{\phi_{bn}}{k_B T}\right) \left[\exp\left(\frac{qV}{k_B T}\right) - 1 \right] \quad (\text{II-III.1.7})$$

Avec erfi la fonction d'erreur imaginaire telle que $\operatorname{erfi}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x \exp(\zeta^2) d\zeta$ et $V_d = V_{bi} - V$

. Il est intéressant de noter que le facteur devant le terme $\exp\left(\frac{qV}{k_B T}\right) - 1$ dépend de la tension appliquée V par l'entremise de V_d .

Dans le modèle de l'émission thermoïonique, les effets de dérive et de diffusion dans la ZCE sont négligés et le courant est conditionné par l'émission des électrons au-dessus de la barrière. Ce modèle suppose que le quasi-niveau de Fermi est constant et égal à qV le long de la ZCE [Rho72], et ce jusqu'à l'interface métal/SC. En considérant une distribution Maxwellienne des vitesses, le calcul de la densité de courant total J_{th} s'effectue en considérant que seuls les porteurs ayant une énergie supérieure à la hauteur de barrière au début de la ZCE contribuent au courant :

$$J_{th} = A^* T^2 \exp\left(-\frac{q\phi_{bn}}{k_B T}\right) \left[\exp\left(\frac{qV}{k_B T}\right) - 1 \right] \text{ avec } A^* = \frac{qm_{sc}^* k_B^2}{2\pi^2 \hbar^3} \quad (\text{II-III.1.8})$$

Contrairement au modèle de diffusion, le courant de saturation est indépendant de la tension appliquée.

Crowell et Sze ont combiné le modèle de l'émission thermoïonique et le modèle dérive-diffusion en considérant ces deux mécanismes en série [Sze06]. Ils ont introduit le concept de « vitesse de recombinaison » v_r en haut de la barrière tel que la densité de courant s'écrit $J = qv_r(n - n_0)$ avec n la concentration de porteurs à l'interface et n_0 la concentration de porteurs à polarisation nulle. La condition pour raccorder les deux modèles consiste à écrire que les deux courants sont égaux [Mat09]. La concentration de porteurs à l'interface n'est plus une constante mais devient une variable d'ajustement, dépendante de la polarisation, qui permet d'arriver à l'expression (II-III.1.9) pour la densité de courant total.

$$J_{TED} = \frac{qN_c v_r}{1 + v_r / v_d} \exp\left(-\frac{q\phi_{bn}}{k_B T}\right) \left[\exp\left(\frac{qV}{k_B T}\right) - 1 \right] \quad (\text{II-III.1.9})$$

$$\text{avec } v_d = \mu_n \sqrt{\frac{2N_d k_B T}{\pi \epsilon_{sc}}} \frac{\exp\left(\frac{qV_d}{k_B T}\right)}{\operatorname{erfi}\left(\sqrt{\frac{qV_d}{k_B T}}\right)} \text{ et } v_r = \sqrt{\frac{k_B T}{2m_{sc}^* \pi}}.$$

Pour $v_d \ll v_r$, le courant dans la structure est conditionné par la diffusion des porteurs dans la zone de charge d'espace. Pour $v_d \gg v_r$, le courant dans la structure est conditionné par l'émission thermoïonique à l'interface.

La figure II-III.2 illustre l'évolution de v_d et v_r en fonction de la tension ainsi que la caractéristique statique avec le modèle MC, le modèle de l'émission thermoïonique (TH) et le modèle de diffusion (D) pour la diode de référence.

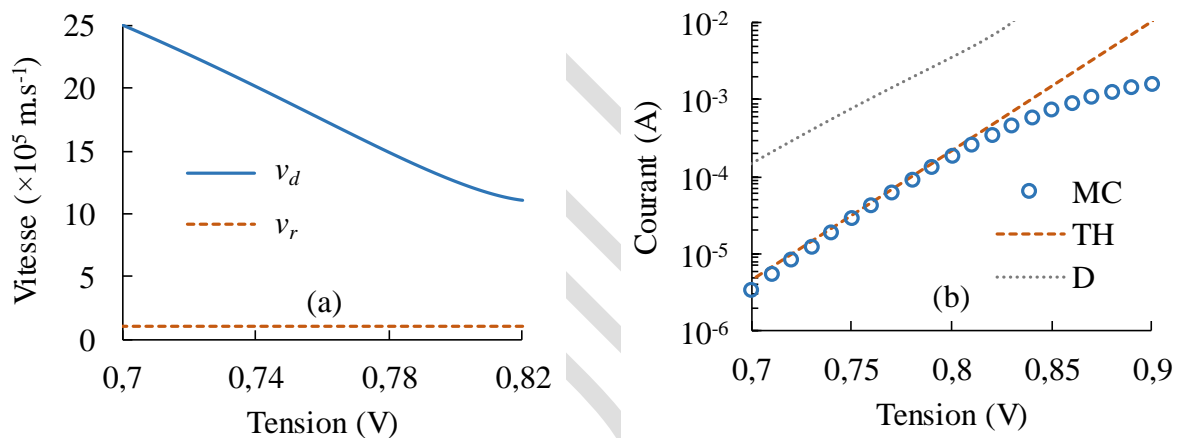


Figure II-III.1.3 – (a) Evolution des vitesses v_d et v_r en fonction de la tension et (b) caractéristique courant-tension pour le modèle de l'émission thermoïonique (TH), le modèle de diffusion (D) et le modèle MC

Dans notre configuration de référence, quelle que soit la tension appliquée, on a toujours $v_d \gg v_r$, ce qui confirme que le courant est majoritairement conditionné par l'émission thermoïonique. Il est presque surprenant que ce modèle soit très voisin d'un modèle basé sur une approche particulière du type Monte Carlo avec une caractéristique statique en exponentielle et un coefficient d'idéalité n proche de 1 (aucun effet physique tel que l'effet tunnel ou l'abaissement de la hauteur de barrière n'a été considéré). Cette bonne adéquation entre ces deux modèles a d'ailleurs été constatée dans d'autres articles [Gon96]. Ceci semble indiquer que la nature du transport et la dynamique des électrons dans la ZCE n'est pas déterminant sur la caractéristique statique...

Les modèles présentés précédemment ne tiennent pas compte de l'effet tunnel, de l'effet de force image ou encore de l'abaissement de la hauteur de barrière par le champ électrique à

l'interface. Tous ces effets entraînent une augmentation globale du courant, soit par abaissement de la barrière à l'interface, soit par passage des électrons à travers la barrière. Pour obtenir la caractéristique statique sur une grande gamme de polarisation (en inverse jusqu'à la tension de claquage et en direct), l'algorithme de fusion/division des particules doit être utilisé. Néanmoins, cet algorithme est chronophage et la précision sur le courant est d'autant plus faible quand on se rapproche de 0V, notamment lorsque la hauteur de barrière est élevée (cas du GaAs). Par ailleurs, avoir une précision élevée n'est pas essentielle dans cette gamme de polarisation. En effet, l'article [Ber17] a montré qu'une extraction précise du coefficient d'idéalité autour de 0V ne modifiait quasiment pas le rendement d'un circuit de rectification et qu'une extraction en direct était suffisante.

Comme le transport des électrons dans la ZCE n'est pas de première importance et que le modèle de l'émission thermoionique semble être adapté, le courant total peut être calculé numériquement à partir de l'équation (II-III.1.10) [Str62] [Mat00] en s'appuyant sur l'évolution spatiale du potentiel obtenue avec le simulateur MC.

$$J_{tot}(V) = \frac{A^*T}{k_B} \int_{E_0}^{\infty} T(E) \ln \left[\frac{1 + \exp\left(-\frac{E - qV}{k_B T}\right)}{1 + \exp\left(-\frac{E}{k_B T}\right)} \right] dE \quad \text{avec } A^* = \frac{qm_{sc}^* k_B^2}{2\pi^2 \hbar^3} \quad (\text{II-III.1.10})$$

L'énergie E est référencée par rapport au niveau de Fermi dans le métal.

L'énergie E_0 dans la borne inférieure de l'intégrale représente l'énergie minimale considérée pour prendre en compte l'effet Tunnel. L'effet de force image est intégré dans $T(E)$.

La détermination du coefficient de transmission a été décrit dans la section II-I.4. Il est calculé numériquement à partir du produit des matrices de transfert en prenant en compte le profil de la bande de conduction au voisinage du contact métal/SC. Une fois le coefficient de transmission $T(E)$ calculé, la densité de courant totale est déterminée puis ajustée sur la loi analytique suivante, inspirée de [Sch01b], pour être facilement implémentée dans ADS :

$$J_{tot}(V) = J_s \left[\exp\left(\text{sign}(V) \left| \frac{qV}{nk_B T} \right|^{m_d}\right) - \exp\left(-\text{sign}(V) \left| \frac{V}{V_{tr}} \right|^{m_i V + p_i}\right) \right] \quad (\text{II-III.1.11})$$

Où J_s , n , m_d , m_i , p_i et V_{tr} sont des paramètres d'ajustement.

La figure II-III.1.4 représente la caractéristique statique pour une diode dopée à 10^{17} cm^{-3} dans la zone N et à $5 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ dans la zone N⁺ en fonction de la longueur de la zone N, ℓ_N . Beaucoup d'effets physiques qui jouent à rôle à l'interface ont été considérés. La longueur a

une forte influence sur la caractéristique statique, notamment en inverse lorsque la zone N est complètement déplétée. En direct, le courant ne varie quasiment pas avec la longueur car l'évolution du potentiel au voisinage de l'interface métal/SC change peu. Pour des diodes très courtes, l'abaissement de la hauteur de barrière par le champ électrique est plus important en inverse, ce qui favorise le passage des électrons au-dessus de la barrière et à travers la barrière par effet tunnel. La présence d'un courant du même ordre de grandeur en inverse qu'en direct peut devenir problématique et dégrader le rendement des multiplieurs de fréquence.

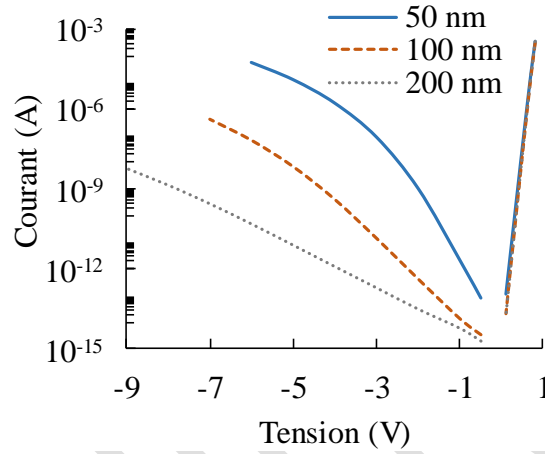


Figure II-III.1.4 – Caractéristique courant-tension pour une diode dopée à 10^{17} cm^{-3} dans la zone N et à $5 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ dans la zone N^+ avec l'ensemble des effets physiques à l'interface pour plusieurs longueurs de la zone N

c. Cellules associée à la zone N non déplétée et à la zone N^+

Tous les éléments associés à la zone N non déplétée et à la zone N^+ sont déduits de la capacité de déplétion C_d par le biais de la longueur de la ZCE W . On propose les expressions suivantes pour chacun d'entre eux :

$$R_N(V) = R_{N0} \left(1 - \frac{W(V)}{\ell_N} \right) = R_{N0} \left(1 - \frac{\varepsilon_{sc} S}{\ell_N C_d(V)} \right) \quad (\text{II-III.1.12})$$

$$C_N^{-1}(V) = C_{N0}^{-1} \left(1 - \frac{W(V)}{\ell_N} \right) = C_{N0}^{-1} \left(1 - \frac{\varepsilon_{sc} S}{\ell_N C_d(V)} \right) \quad (\text{II-III.1.13})$$

$$L_N(V) = L_{N0} \left(1 - \frac{W(V)}{\ell_N} \right) = L_{N0} \left(1 - \frac{\varepsilon_{sc} S}{\ell_N C_d(V)} \right) \quad (\text{II-III.1.14})$$

$$R_{N^+}(V) = \min \left[R_{N0^+} \left(1 - \frac{W(V)}{\ell_{tot}} \right), R_{N1^+} \right] \quad (\text{II-III.1.15})$$

$$C_{N^+}^{-1}(V) = \min \left[C_{N0^+}^{-1} \left(1 - \frac{W(V)}{\ell_{tot}} \right), C_{N1^+}^{-1} \right] \quad (\text{II-III.1.16})$$

$$L_{N^+}(V) = \min \left[L_{N0^+} \left(1 - \frac{W(V)}{\ell_{tot}} \right), L_{N1^+} \right] \quad (\text{II-III.1.17})$$

La figure II-III.1.5 illustre l'évolution de chacun de ces éléments en fonction de la tension ainsi que l'ajustement sur les lois proposées avec les valeurs du tableau II-III.1.2. Ces lois semblent adaptées et seront utilisées pour construire le modèle complet de la diode sous le logiciel de simulation ADS.

$R_{N0} (\Omega)$	$C_{N0} (\text{fF})$	$L_{N0} (\text{pH})$
37,8	0,469	5,38

$R_{N0^+} (\Omega)$	$R_{N1^+} (\Omega)$	$L_{N0^+} (\text{pH})$	$L_{N1^+} (\text{pH})$	$C_{N0^+} (\text{fF})$	$C_{N1^+} (\text{fF})$
10,7	2,9	0,726	0,14	0,381	2,02

Tableau II-III.1.2 – Valeurs des différents éléments

2. Domaines de validité du modèle

Les techniques d'extraction présentées pour déterminer les paramètres du schéma équivalent s'appuient sur des excitations de faible amplitude pour chaque point de polarisation avec une approche quasi-statique. On peut s'interroger sur la pertinence de ce schéma équivalent lorsque la diode est excitée par un signal de forte amplitude. Pour estimer les domaines de validité du modèle complet de la diode, on propose de simuler le circuit de la figure II-III.2.1 sous le logiciel de simulation ADS.

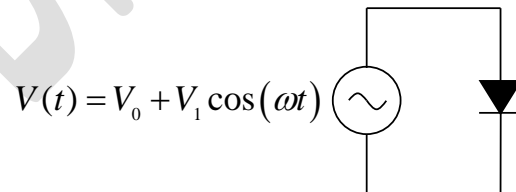


Figure II-III.2.1 – Circuit pour la validation des différents modèles

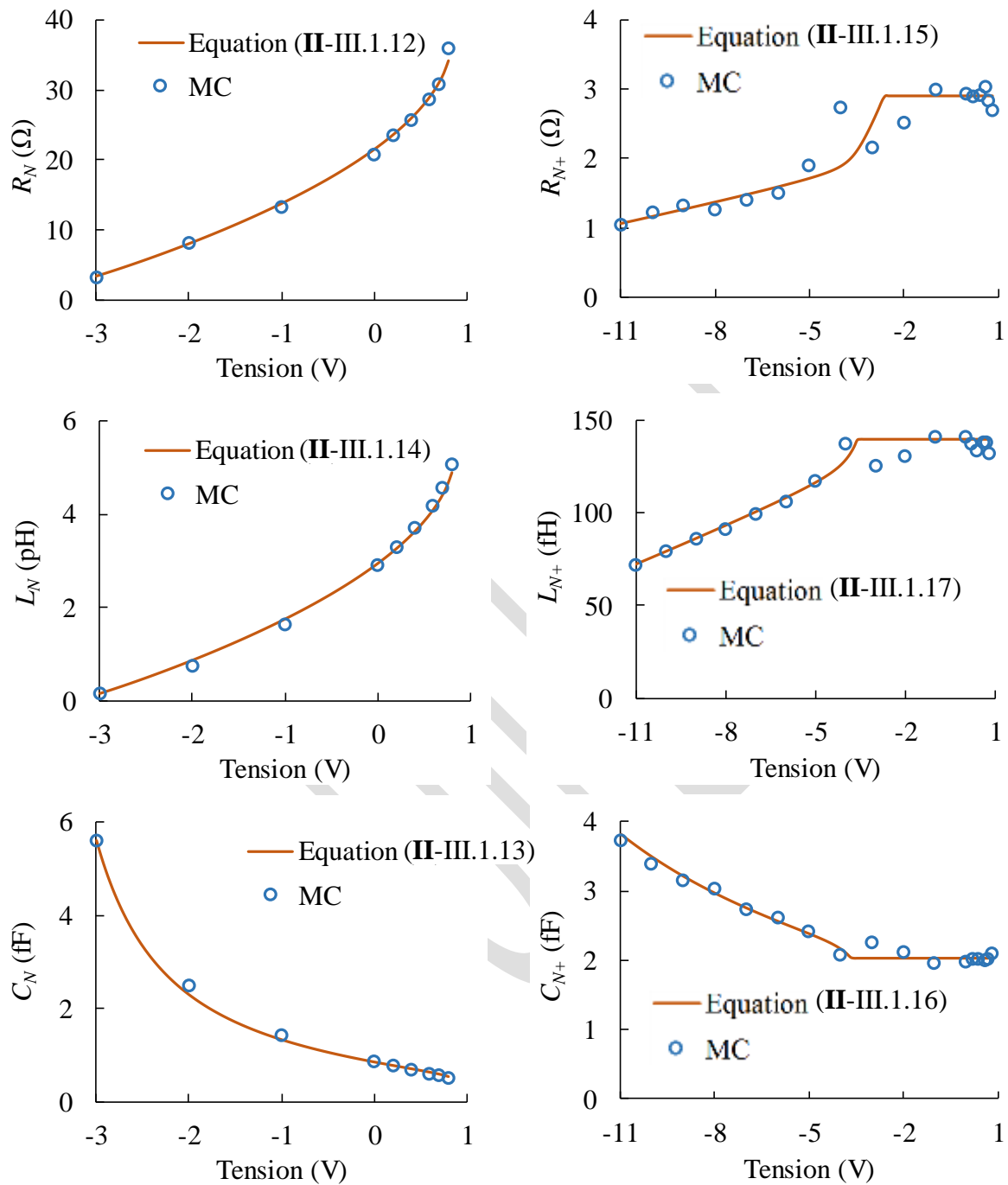


Figure II-III.1.5 – Evolution des différents éléments de la cellule associée à la zone N non déplétée et à la zone N^+ en fonction de la tension. Les cercles représentent les extractions faites à partir d'une APS avec le code MC et les traits représentent les lois ajustées

Il existe plusieurs méthodes de résolution numériques pour simuler des circuits électriques. Celles-ci sont différentes pour les circuits linéaires et non-linéaires. Pour les circuits non-linéaires, on préfère avoir recours à une analyse temporelle alors qu'une analyse fréquentielle est mieux adaptée pour étudier un circuit linéaire. Une méthode répandue dans le cadre d'un circuit non-linéaire est la méthode de l'équilibrage harmonique (*Harmonic Balance*) [Gil91]. L'idée est de décomposer le circuit non-linéaire en un sous-circuit linéaire et un autre non-linéaire. Elle a ainsi l'avantage de combiner la méthode d'analyse fréquentielle et temporelle pour traiter efficacement la partie linéaire et non-linéaire et donner des informations assez précises sur le comportement du système. Une solution stationnaire existe si les courants et les tensions aux différents nœuds du circuit sont identiques pour les deux sous-circuits linéaire et non-linéaire. Les signaux sont approximés par un nombre limité de fréquence.

Les éléments non-linéaires du modèle électrique complet ont été implémentés sous ADS à partir du composant SDD (*Symbolically-Defined Device*) en définissant plusieurs équations avec des représentations explicites ou implicites [docADS]. La diode est reliée directement à un générateur de tension sinusoïdale telle que la tension à ses bornes soit sous la forme :

$$V(t) = V_0 + V_1 \cos(\omega t) \quad (\text{II-III.2.1})$$

Les trois modèles, précédemment présentés, sont confrontés :

- **Modèle A** : modèle classique basse-fréquence avec une résistance série constante (figure II-II.1.1). La déplétion du substrat n'est pas considérée et on suppose que l'expression de la capacité donnée par l'équation (II-III.1.1) est valable quelle que soit la tension.
- **Modèle B** : modèle classique basse-fréquence avec une résistance série dépendant de la polarisation. La déplétion du substrat est considérée.
- **Modèle C** : modèle complet de la diode représenté sur la figure II-II.1.2.

Pour quantifier l'écart entre chaque modèle (A, B et C) et la simulation MC, on propose de calculer un coefficient d'erreur R défini par l'équation (II-III.2.2).

$$R = \frac{\sqrt{\int_0^T [i_m(t) - i_{MC}(t)]^2 dt}}{\sqrt{\int_0^T i_{MC}^2(t) dt}} \quad (\text{II-III.2.2})$$

Avec T la période du signal, i_m et i_{MC} respectivement le courant de conduction obtenu avec le schéma équivalent petit signal (modèle A, B et C) et celui obtenu en MC (référence) lorsqu'une tension sinusoïdale est appliquée aux bornes de la diode.

Cette étude permet d'avoir une estimation des domaines de validité de chacun des modèles en fonction de l'amplitude de la tension aux bornes de la diode, de la fréquence et du point de polarisation.

Plusieurs conclusions peuvent être tirées de la figure **II-III.2.2** :

- Quelle que soit la fréquence de travail, le schéma équivalent du modèle C est celui qui se rapproche le plus du modèle MC.
- Le modèle A avec une résistance série constante n'est plus pertinent pour des fréquences supérieures à 300 GHz. L'écart assez important pour une tension inférieure à -3V à 250 GHz est dû à la non-prise en compte de la déplétion dans le substrat qui modifie la capacité de déplétion.
- Quelle que soit la fréquence pour les modèles B et C, on peut découper la figure en deux zones (voir figure **II-III.2.3**). La zone 1 montre que le schéma électrique équivalent modélise correctement le modèle MC avec un coefficient d'erreur inférieur à 5 %. Dans la zone 2, le coefficient d'erreur est supérieur à 5 %. La surface de cette zone est d'autant plus grande que la fréquence est élevée. Le phénomène physique qui met en défaut le schéma équivalent électrique est l'effet de saturation de la vitesse des porteurs (section **II-III.2.1**).

Pour des applications comportant une diode Schottky telle que la détection et la multiplication de fréquence, la tension aux bornes de la diode n'est pas sinusoïdale et on peut douter de la pertinence des résultats présentés. Cependant, ces courbes permettent d'avoir une bonne appréciation de la zone de validité du schéma équivalent de la diode. Dans les chapitres III et IV, on pourra récupérer sous ADS l'allure de la tension aux bornes de la diode et vérifier que le courant de conduction associé est identique avec le MC pour valider le schéma équivalent complet dans chacune des applications visées (doubleur ou rectification).

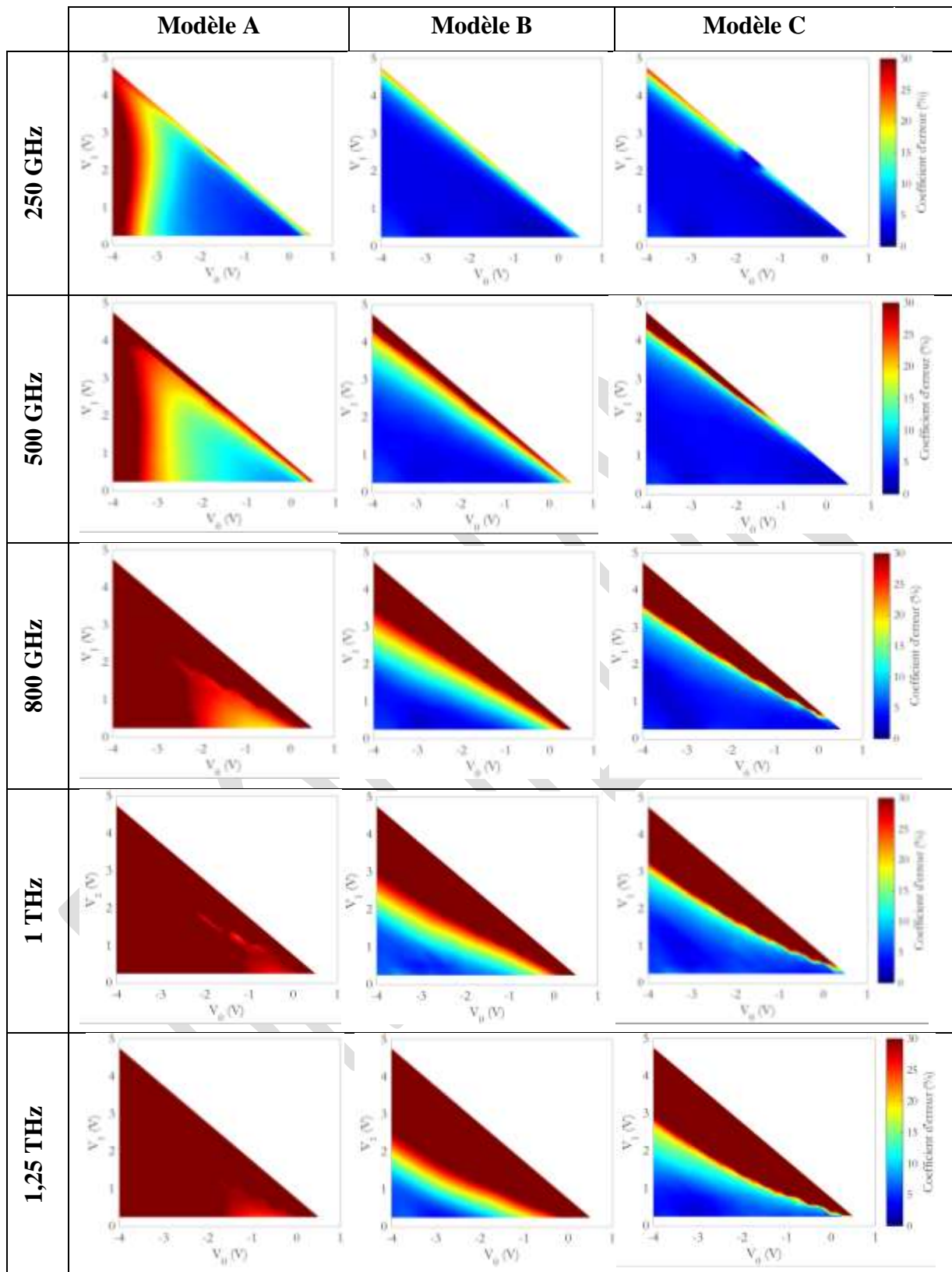


Figure II-III.2.2 – Coefficient d’erreur R (défini par l’équation (II-III.2.2)) sur le courant de conduction lorsque la diode est excitée par un signal sinusoïdal d’amplitude V_1 et de composante continue V_0 pour chaque modèle (A, B et C) et pour plusieurs fréquences (250 GHz, 500 GHz, 800 GHz, 1 THz et 1,25 THz)

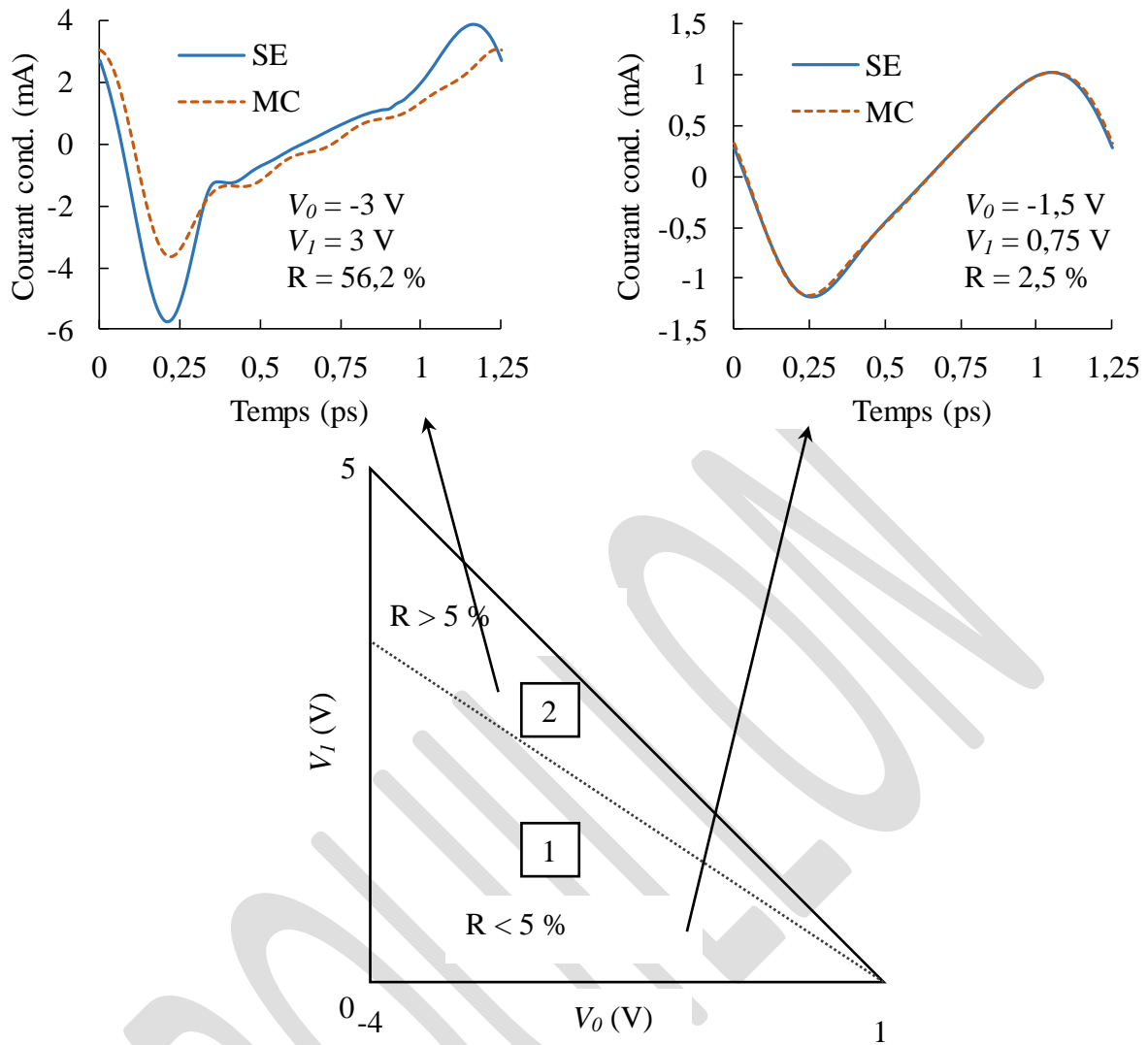


Figure II-III.2.3 – Découpage en plusieurs zones de la représentation du coefficient d’erreur en fonction de V_0 et de V_I pour une fréquence de 800 GHz

3. Vitesse des porteurs et fréquence du signal

L’impact de la vitesse de saturation des porteurs sur le comportement des multiplieurs à haute fréquence a d’abord été mis en évidence par Kollberg en 1992 [Kol92]. La conservation du courant le long de la diode impose que le courant de déplacement I_{dep} dans la zone de déplétion soit égal au courant de conduction I_{cond} dans la zone N non déplétée. Ces deux courants s’écrivent respectivement :

$$I_{dep} = qN_d S \frac{\partial W(t)}{\partial t} \quad \text{et} \quad I_{cond} = qN_d v_e(t) S \quad (\text{II-III.3.1})$$

Avec v_e la vitesse des électrons dans la zone N non déplétée. La vitesse à laquelle la ZCE est modulée ne peut excéder la vitesse maximum des porteurs $v_{e,max}$ d’où :

$$\frac{\partial W(t)}{\partial t} < v_{e,\max} \quad (\text{II-III.3.2})$$

D'après la figure II-I.1.1, la vitesse maximale des électrons pour GaAs en régime permanent est d'environ $2 \times 10^5 \text{ m.s}^{-1}$ pour un champ électrique de 4 kV.cm^{-1} . Cependant, la vitesse maximale dans les régimes transitoires peut largement dépasser cette valeur : c'est le phénomène de survitesse. La vitesse maximale est donc plus élevée à hautes fréquences [Lou94].

Ce phénomène est d'autant plus marqué que la fréquence est élevée et que l'amplitude de la tension aux bornes de la diode est grande ou encore que le point de polarisation est élevé. En effet, l'excursion de la capacité – et donc de la ZCE – pour une même amplitude de tension, est plus élevée quand on augmente le point de polarisation.

On propose d'illustrer l'influence de ce phénomène sur la modulation de la ZCE en estimant la longueur de cette dernière à partir de la concentration de porteurs. Connaissant la capacité pour chaque point de polarisation $C(V)$, on peut déduire la longueur de la ZCE $W(V)$ à partir de l'équation (X) et ainsi en déduire la concentration associée.

$$C(V) = \frac{\epsilon_{sc} S}{W(V)} \quad (\text{II-III.3.3})$$

Nous avons tracé sur la figure II-III.3.1 la concentration de porteurs au niveau de la ZCE évaluée par l'équation (II-III.3.3) en fonction de la tension de polarisation pour la diode de référence. On remarque que cette valeur est relativement constante lorsque la déplétion s'effectue dans la zone N (tension supérieure à -3 V) et égale à $5,5 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$, soit 55 % du dopage dans la zone N. On suggère d'utiliser ce critère pour estimer la longueur de la ZCE avec les simulations MC.

On conserve la même structure que celle présentée dans le tableau II-II.1.1 avec une longueur de 350 nm pour la zone N. Celle-ci a volontairement été allongée de 100 nm pour s'assurer que la déplétion ne s'effectue que dans cette couche et conserver le critère de 55 % du dopage de la zone N. La diode est excitée par un signal sinusoïdal d'amplitude 2 V autour de -2 V. La figure II-III.3.2 représente l'évolution de la concentration spatiale de porteurs sur une période pour différentes fréquences. Les couleurs représentent le pourcentage de porteurs en vallée gamma. On constate que le comportement des électrons est différent suivant la fréquence. En augmentant la fréquence, les électrons sont fortement accélérés et un nombre important transfère dans les vallées L et X (jusqu'à 80 % au-dessus de 600 GHz).

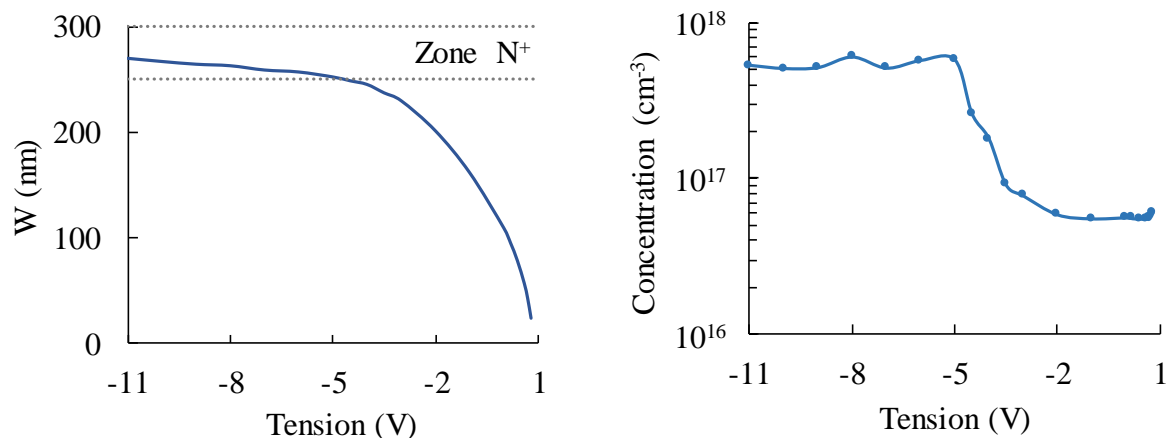


Figure II-III.3.1 – Evolution de la ZCE déduite de la capacité à partir de l'équation (II-III.3.3) et de la concentration de porteurs à la frontière entre la ZCE et la ZQN en fonction de la tension de polarisation

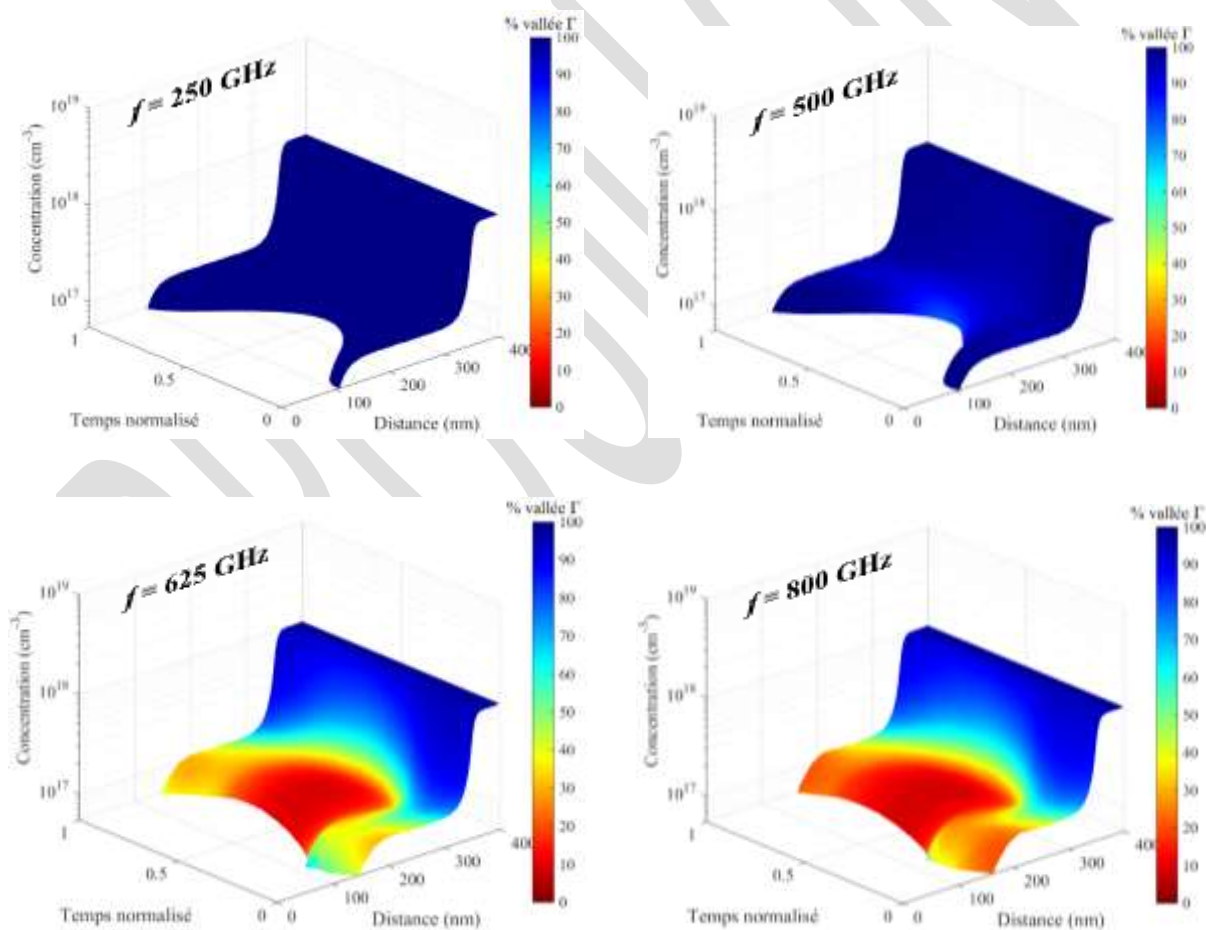


Figure II-III.3.2 – Evolution de la concentration spatiale de porteurs sur une période pour plusieurs fréquences lorsque la diode est excitée par une tension sinusoïdale d'amplitude 2V autour de -2V. Les couleurs représentent le pourcentage de porteurs en vallée Γ .

La figure II-III.3.3 donne l'évolution spatiale de la ZCE pour plusieurs fréquences, le pourcentage de porteurs en vallée Γ pour les porteurs situés au bord de la ZCE, la vitesse de ces porteurs ainsi que la puissance dissipée dans la diode. Pour une fréquence de 250 GHz, la ZCE est modulée entre 100 et 250 nm, les porteurs restent en vallée Γ sur toute la période et la vitesse moyenne des porteurs est inférieure à 1 m.s^{-1} . A 500 GHz, une fraction significative de porteurs parvient à transférer dans les vallées supérieures (jusqu'à 20 %) sur une fraction de la période. Cela impacte peu la modulation de la ZCE. Pour 625 GHz et au-delà, la majorité des porteurs ne se trouve plus en vallée centrale. La vitesse moyenne des porteurs au bord de la ZCE atteint une valeur maximale d'environ $3 \times 10^5 \text{ m.s}^{-1}$, valeur voisine de la vitesse maximale en régime stationnaire et similaire à celle donnée dans [Lou94] ($2,9 \times 10^5 \text{ m.s}^{-1}$). L'article [Eas95] a également mis en évidence que les porteurs mettent environ trois fois plus de temps ($\sim 2,75 \text{ ps}$) pour retourner dans une vallée à haute mobilité que l'inverse ($< 1 \text{ ps}$). Ce phénomène est visible sur la figure II-III.3.3b : les porteurs transfèrent rapidement dans les vallées supérieures autour de $0,25 \times T_0$ mais mettent beaucoup plus de temps à redescendre dans la vallée centrale. Il existe alors une accumulation de porteurs dans les vallées L et X avec une faible mobilité pour ces fréquences et au-delà puisque ceux-ci n'ont pas le temps de redescendre en vallée centrale.

La figure II-III.3.3c illustre la puissance dissipée dans la diode P_{diss} définie par :

$$P_{diss} = \frac{1}{T_e} \int_0^{T_e} I_d(t)V(t)dt \quad (\text{II-III.3.4})$$

On observe une augmentation brutale de la puissance dissipée entre 500 GHz et 625 GHz, quasiment d'un facteur 4. C'est le transfert des porteurs dans les vallées X et L qui augmentent les pertes résistives dans la zone N, à cause d'une part d'une modulation plus faible de la ZCE et d'autre part d'une dégradation de la mobilité dans ces vallées.

Une limitation majeure du schéma équivalent électrique considéré dans ce manuscrit est la non-prise en compte de ce phénomène de saturation de la vitesse des porteurs qui n'a, à ma connaissance, pas été traitée de manière satisfaisante d'un point de vue électrique. Comme illustré précédemment, il s'agit d'un phénomène assez complexe. Dans l'article [Kol92], l'effet de la vitesse maximum a été simplement modélisée par une résistance non-linéaire dont la valeur augmente avec le courant. La loi non-linéaire utilisée est une loi empirique qui s'appuie sur des résultats expérimentaux. Il faudrait un modèle électrique plus poussé en prenant en compte finement la dynamique des porteurs qui transfèrent dans les vallées supérieures et qui mettent un certain temps pour redescendre en vallée centrale [Eas95] suivant la tension aux bornes de la diode et la fréquence du signal. L'article [Sch01a] a proposé de décomposer la résistance associée à la ZQN en deux résistances représentant les porteurs en vallée centrale et ceux dans les vallées supérieures. Une équation différentielle est

résolue pour connaître l'évolution de la densité de porteurs dans chaque vallée. Cette méthode n'a pas été expérimentée car il est complexe d'implanter la résolution d'équations différentielles directement dans un logiciel de simulation électrique. Certains articles [Eri98] [Par14] [Mae05] [Mae10] proposent également de conserver un produit $R_s \times C_{j0}$ constant, ce produit dépendant de la bande de fréquence mais aussi du dopage.

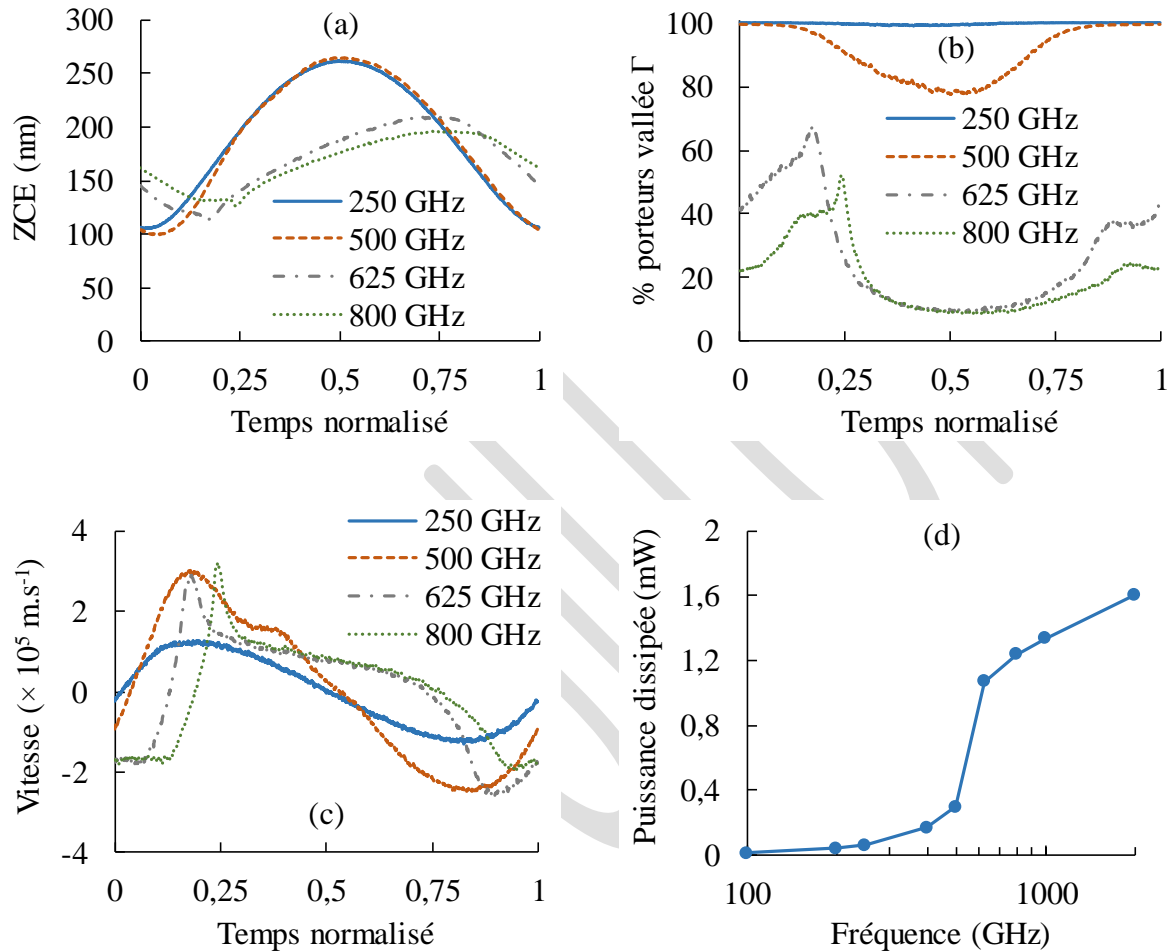


Figure II-III.3.3 – (a) Evolution de la ZCE, (b) du pourcentage de porteurs en vallées Γ , (c) de la vitesse moyenne des porteurs au bord de la ZCE sur une période pour plusieurs fréquences. (d) Puissance dissipée dans la diode en fonction de la fréquence.

IV) Conclusions

Ce chapitre de thèse comportait deux volets : un plutôt orienté sur la modélisation MC de la diode Schottky et l'autre sur sa modélisation électrique déduite du simulateur MC pour être facilement exploitable dans un logiciel commercial de simulation de circuits. Quatre semi-conducteurs ont été intégrés dans le simulateur : le GaAs, l'InGaAs, le GaSb et le GaN. En effet, chacun de ces SC présente des avantages (mais également des inconvénients). La maturité technologique du GaAs et sa haute maturité technologique en font un matériau de choix pour la réalisation de composants électroniques. L'InGaAs possède également de bonnes propriétés de transport avec une masse effective plus faible que GaAs, conduisant à une mobilité à bas-champ plus élevée. La différence principale avec le GaAs repose sur la hauteur de barrière à l'interface métal/SC (de l'ordre de 0,2 V) comparé au GaAs (autour de 0,9 V). Bien que le transport du GaSb soit fortement dégradé à cause du faible écart entre la vallée Γ et la vallée L, les niveaux de dopage peuvent atteindre 10^{20} cm^{-3} , ce qui autorise la réalisation de faibles résistances séries. Le GaN est un SC qui a suscité beaucoup d'intérêt ces dernières années, notamment grâce à sa bonne tenue en puissance, même si sa mobilité est plus faible que les autres SC.

Les conditions aux limites constituent une étape clef dans la modélisation MC du dispositif, surtout du côté du contact ohmique. Pour ce contact, des distributions de vitesse spécifiques – Maxwellienne pondérée par la vitesse pour la composante suivant l'axe de la diode et Maxwellienne pour les deux autres composantes – ont été choisies pour les particules injectées tout en gardant une concentration de porteurs égale au dopage dans la cellule proche du contact. D'autres conditions aux limites ont été développées pour considérer le cas de SC très dopés, ce qui est généralement le cas dans la zone N^+ pour limiter la résistance série dans cette zone. Malgré la mise en place de ces nouvelles distributions, nous avons constaté des artefacts sur la concentration de porteurs dans la zone proche du contact ohmique, conduisant à un champ électrique non nul dans cette zone. En ajoutant une zone « tampon » d'une cinquantaine de nanomètres dans laquelle l'équation de Poisson n'est pas résolue et en conservant la même condition aux limites, nous avons annihilé cet artefact. Le temps de simulation a été multiplié par 1,2. Nous avons ainsi pu observer que ces conditions limites conditionnaient le courant total dans la structure et que des écarts de plusieurs dizaines de pourcents pouvaient apparaître suivant la longueur du réservoir ou encore la distribution de vitesse des particules injectées. Nous avons décidé de conserver 50 nm de réservoir dans le cas d'un SC très dopé pour les différentes configurations dans les chapitres III et IV afin de conserver des temps de simulation raisonnables.

La mise en place de cette nouvelle condition aux limites ne peut être appliquée sans considérer le principe d'exclusion de Pauli dans le cas d'un SC dégénéré. Celui-ci a été

implémenté en s'inspirant de la méthode de réjection de Lugli et Ferry basée sur une discrétisation de l'espace réciproque en plusieurs cellules cubiques où chaque cellule élémentaire ne peut contenir plus d'un certain nombre de particules. Cette méthode permet de ne pas recalculer à chaque pas sur le temps les taux d'interactions. La technique de réjection n'est appliquée qu'à la suite du processus d'interaction et pas à la fin d'un vol libre, ce qui peut conduire à des cellules où le taux d'occupation est supérieur à 1. Un traitement spécifique a donc été appliqué pour ces cas particuliers. Pour éviter qu'une particule ne se retrouve dans une cellule où aucun état est disponible après un vol libre, celle-ci retourne dans sa dernière cellule où l'état était disponible. Par ailleurs, les trois composantes du vecteur d'onde sont randomisées tout en veillant à ce que la particule reste dans sa cellule. Cette dernière opération a été nécessaire pour éviter d'avoir des discontinuités dans les distributions. Pour facilement faire le lien entre l'énergie et le vecteur d'onde associé à chaque élément de volume, une discrétisation sphérique de l'espace réciproque a été proposée et comparée à la discrétisation cubique. Bien que cette discrétisation donnait des distributions en énergie identiques à la discrétisation cubique, le calcul de l'indice correspondant au numéro de l'élément de volume engendrait un allongement du temps de simulation d'un facteur deux. C'est pourquoi la discrétisation sous forme de cubes a été privilégiée. Cette méthode a été appliquée à une diode Schottky où le PEP a été appliqué sur toute la structure (dopage de $5 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ dans la zone N et de $5 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ dans la zone N⁺). Le tracé de la distribution en énergie le long de la structure montre une énergie moyenne plus élevée dans la zone N⁺ que dans la zone N sans aucune discontinuité de la distribution dans chaque maille Δx . Par ailleurs, la distribution est identique le long de la zone N⁺ et le long de la zone N, sauf au niveau de l'homojonction N-N⁺ où la concentration de porteurs varie. Ces résultats ont permis de valider cette méthode.

Lorsque la diode est polarisée autour de 0 V ou en inverse, des porteurs passent du métal au SC du côté du contact Schottky. Le nombre de porteurs à injecter par unité de temps est déduit de l'expression analytique du courant qui est fonction de la constante de Richardson, du coefficient de transmission à l'interface métal/SC et de la fonction de Fermi dans le SC et dans le métal. La constante de Richardson est ajustée pour faire en sorte que la somme du courant en inverse et du courant en direct soit nulle. Au-delà de 0,1 V (pour GaAs), le contact peut être considéré comme un contact absorbant pour les électrons qui y parviennent. Ils peuvent éventuellement être réfléchis si l'effet tunnel est pris en compte.

La diode Schottky est un composant largement contrôlée par son interface. Plusieurs modèles de la hauteur de la barrière de potentiel à l'interface métal/SC ont évoqués. Pour l'optimisation de la diode, nous garderons le modèle pragmatique de Rhoderick et Williams qui considère une hauteur de barrière dépendant du champ électrique maximal à l'interface

par l'entremise d'un paramètre α . La valeur de ce paramètre est typiquement comprise entre 15 et 35 Ångström.

Deux autres effets ont été intégrés dans le simulateur MC : l'effet de force image et l'effet tunnel. Le phénomène de force image a pour effet d'abaisser la barrière de potentiel à l'interface à cause de l'interaction entre l'électron qui se rapproche du contact Schottky et son image dans le métal pouvant être représentée par une charge positive fictive. Plusieurs degrés de raffinement ont été proposés pour la prise en compte de l'effet tunnel en résolvant l'équation de Schrödinger dans l'approximation de la fonction enveloppe et de la masse effective. La résolution de cette équation permet de déduire le coefficient de transmission à l'interface métal/SC, c'est-à-dire la probabilité pour qu'une particule ayant une certaine énergie traverse la barrière. L'approche WKB suppose que le potentiel varie lentement avec la position et ne prend pas en compte la réflexion potentielle des porteurs ayant une énergie supérieure à la barrière de potentielle. Sans cette hypothèse, la solution de l'équation de Schrödinger fait intervenir les fonctions de Airy pour un potentiel triangulaire et la fonction hypergéométrique confluyente de première espèce pour un potentiel parabolique. Les particules peuvent dans ce cas être réfléchies, même si leur énergie est supérieure à la hauteur de barrière. L'effet de force image modifie le potentiel à l'interface et le potentiel n'est ni linéaire, ni parabolique dans la zone proche du contact Schottky. Dans ce cas, la méthode des matrices de transfert est utilisée en supposant le potentiel linéaire par morceau. Cette matrice permet de relier l'onde incidente et l'onde transmise entre deux mailles. Une légère modification du potentiel a été proposée pour limiter le nombre de matrices de transfert à multiplier pour déduire le coefficient de transmission. Une fois le coefficient de transmission calculé, une technique de réjection est utilisée pour décider si la partie est réfléchie ou si elle traverse la barrière de potentiel. La prise en compte de l'effet tunnel augmente le coefficient d'idéalité et le courant de saturation puisque les électrons peuvent traverser la barrière de potentiel. L'application du phénomène de force image ajouté à l'effet tunnel accentue d'autant plus cet effet.

Une faible concentration de porteurs proche de l'interface métal/SC est une particularité de la diode Schottky qui peut induire du bruit sur les résultats obtenus. En effet, la caractéristique statique ne peut être tracée que pour des tensions supérieures à quelques $k_B T$ en dessous de la tension de bande plate (typiquement supérieures à 0,7 V pour GaAs), la concentration de porteurs diminuant de manière exponentielle avec la tension. Un algorithme de fusion-division a donc été développé pour garder un nombre de particules constant le long de la structure. Pour cela, la structure a été découpée en plusieurs zones où la représentativité des particules est différente. Un soin particulier a été apporté aux caractéristiques des particules fusionnées et divisées pour s'assurer de conserver la continuité du courant le long de la structure. D'après certains auteurs, l'utilisation d'un tel algorithme ne serait pas

compatible avec une étude en bruit du dispositif. Il n'est pas nécessaire d'appliquer cet algorithme en régime dynamique car le courant de conduction créé par ses électrons est faible devant le courant de conduction total (déduit en sommant la vitesse de toutes les particules dans la structure).

À ce stade, le code MC développé est à l'état de l'art de ce qu'on peut trouver pour la modélisation de diodes Schottky. Des travaux récents sur le développement de mélangeurs et de multiplieurs THz [Mor17] n'ont par ailleurs pas intégrés l'effet de force image et l'effet tunnel dans la modélisation 2D de la diode.

L'ionisation par choc est un phénomène bien connu qui peut conduire à la destruction du composant du composant avec la création en cascade de paires électrons-trous. Le phénomène de claquage du composant est souvent décrit par une tension V_{br} dite tension de claquage (*breakdown voltage*). En première intention, cette tension a été calculée à partir de l'intégrale d'ionisation qui dépend du champ électrique spatial et des coefficients d'ionisation des électrons et des trous. Le champ électrique a été calculé à partir de simulations MC et les coefficients d'ionisation ont été trouvés dans la littérature. Cette approche montre bien que cette tension V_{br} dépend certes du dopage mais aussi de la longueur de la zone N. Bien que les résultats obtenus sur GaAs semblent cohérents par rapport aux résultats d'autres articles, ce n'est pas du tout le cas pour les autres SC. Une tension V_{br} plus élevée pour InGaAs que pour GaAs a même été trouvée alors que l'énergie de bande interdite d'InGaAs est nettement plus faible que celle de GaAs. Une règle de trois a donc été appliquée sur la tension V_{br} du GaAs par rapport au gap des deux SC pour déduire la tension V_{br} d'InGaAs. Une stratégie similaire a été adoptée sur GaSb en multipliant les tensions de claquage de GaAs par un coefficient. Nous sommes conscients des limites de ce modèle et il faudrait en effet intégrer ce phénomène dans le code MC en considérant les trous et la recombinaison des porteurs pour le modéliser finement.

Enfin, différentes techniques d'évaluation du courant ont été présentées, soit en comptant le nombre de particules qui traversent une (ou plusieurs) frontières entre deux mailles, soit à partir de la vitesse des particules. En régime statique, toutes ces techniques donnent les mêmes résultats tant qu'on reste dans des niveaux de tension supérieures à quelques C'est le théorème de Ramo-Shockley qui est utilisé pour le régime dynamique en sommant la vitesse des particules dans toute la structure. Dans le cas de génération ou de recombinaison de porteurs, ce théorème ne peut plus s'appliquer.

L'objectif de cette modélisation MC était de pouvoir optimiser les caractéristiques de la diode Schottky pour des applications spécifiques au THz – multiplication de fréquence et rectification – lorsque celle-ci est insérée dans un circuit. Une optimisation rapide et efficace

de la diode directement avec le simulateur MC ne semble pas réalisable en raison des temps de simulation. Par ailleurs, comme il s'agit de circuits non-linéaires, il aurait fallu d'une part développer un code Harmonic-Balance couplé au code MC pour pouvoir les simuler, ce que certains auteurs ont déjà proposés [Tai94] [Sil10] [Par14]. D'autre part, l'environnement autour de la diode, notamment les lignes de transmission, demanderaient un solveur électromagnétique 3D (FDTD par exemple) et l'optimisation non-linéaire des cellules d'adaptation en entrée et en sortie nécessiterait des algorithmes complexes dont le développement ne constituait pas l'objet de de cette thèse. Certains logiciels commerciaux de simulations de circuits non-linéaires tels que ADS disposent déjà de ces outils mais un couplage avec un code maison n'est pas envisageable. Nous nous sommes donc tournés vers une modélisation électrique du composant déduite de la modélisation MC pour qu'il puisse être inséré facilement dans ADS.

La section II a permis de présenter différentes techniques d'extraction du schéma équivalent intrinsèque de la diode Schottky jusqu'au THz à partir du simulateur MC décrit dans la section I. Nous avons présenté deux schémas électriques équivalent de la diode Schottky : le circuit classique basse fréquence (BF) couramment utilisé jusqu'à une centaine de GHz et un autre modèle plus complet permettant de prendre en compte certains effets physiques tels que le courant de déplacement et l'inertie des porteurs qui interviennent pour des fréquences supérieures à quelques centaines de GHz, ces deux phénomènes étant respectivement modélisés par une capacité et une inductance dans la zone quasi-neutre et dans la zone N^+ .

Trois techniques d'extraction ont été présentées : l'extraction classique sur les caractéristiques statiques $I(V)$ et $C(V)$ pour le schéma électrique BF, l'extraction à partir de la réponse en courant pour différents types d'excitations – sinusoïdale et gaussienne – et l'extraction à partir de l'étude des fluctuations de courant et de tension. La technique d'extraction la plus robuste, mais la plus longue, est d'exciter la diode avec une série de sinusoïdes à différentes fréquences.

Une méthode plus rapide consiste à étudier la réponse en courant de la diode avec une excitation possédant une grande étendue spectrale telle qu'une gaussienne. Cette méthode nécessite cependant quelques opérations de filtrage pour gagner en précision sur l'impédance à basse fréquence.

L'étude des fluctuations de tension et de courant constitue également une méthode intéressante et permet d'avoir des informations sur le transport. Cependant, elle reste assez restrictive car il faudrait que la partie imaginaire de l'impédance soit toujours négative, ce qui n'est pas toujours le cas, notamment autour des fréquences de résonance associées à chaque cellule RLC du schéma équivalent.

L'extraction de tous les paramètres du modèle par la méthode des moindres carrés sur la partie réelle et la partie imaginaire de l'impédance montre la pertinence du schéma équivalent haute-fréquence. Une comparaison des impédances avec un modèle déterministe de type Dérivé-Diffusion utilisé par le logiciel commercial Silvaco a également été menée. Elle a permis de montrer qu'un tel modèle ne permettait pas de modéliser finement l'effet inertiel des porteurs modélisé par des inductances dans le schéma équivalent.

Un modèle de type « boîte noire » a également été évoqué en calculant les paramètres X du dispositif. Il s'agit d'une extension des paramètres S en considérant les non-linéarités du dispositif. Le calcul de ces paramètres X passe nécessairement par l'application de différents stimuli avec plusieurs niveaux de puissance. Nous n'avons pas considéré cette option afin de ne pas perdre le sens physique associé aux différents éléments du schéma équivalent.

La section III du chapitre II, avait pour but de confronter l'évolution des différents éléments du schéma équivalent en fonction de la polarisation aux modèles analytiques classiquement discutés dans la littérature. Les deux éléments centraux du schéma équivalent qui permettent de réaliser les fonctions de multiplication de fréquence et de rectification sont respectivement la capacité de déplétion et la caractéristique statique $I(V)$.

Concernant la capacité de déplétion, l'expression classique issue de l'hypothèse de complète déplétion pour une diode 1D fonctionne bien. Cependant, ce modèle n'est plus valide lorsque la déplétion s'effectue dans la zone N^+ . Une unique expression composée de 5 paramètres a donc été proposée pour n'importe quelle tension inférieure à V_{bi} afin de prendre en compte cette déplétion. La détermination de ces paramètres ne peut se faire qu'à partir d'une simulation physique de la diode (MC dans notre cas). Nous nous sommes aussi interrogés sur la valeur de la capacité de déplétion dans le cadre d'une diode 2D simulée sous Silvaco et d'une prise en compte des états de surface entre l'oxyde et le SC. Nous avons pu observer que le débordement de la ZCE sous le contact Schottky augmentait significativement la valeur de la capacité de déplétion. En revanche, la modélisation des états de surface par une densité de charges fixes ne semble pas modifier sensiblement cette capacité. Une différence de quelques pourcents a été observée. Une estimation de la capacité parasite associée aux effets 2D pour quelques configurations a permis de quantifier son influence sur les rendements du multiplieur de fréquence et du circuit de détection présenté dans les chapitres III et IV.

Concernant la caractéristique statique $I(V)$, les deux modèles couramment rencontrés dans la littérature sont le modèle de l'émission thermoïonique – le courant est conditionné par l'émission des électrons au-dessus de la barrière – et le modèle de diffusion – le courant est conditionné par les processus de dérive et de diffusion dans la ZCE –. Le modèle qui se

rapproche le plus de la modélisation MC est le modèle de l'émission thermoïonique, ce qui semble indiquer que la nature du transport et la dynamique des électrons dans la ZCE n'est pas déterminant sur la caractéristique statique et que c'est l'interface qui contrôle essentiellement le courant. Les éléments associés à la zone quasi-neutre et à la zone N^+ sont déduits de la capacité de déplétion.

Les méthodes d'extraction décrites dans la section II reposent sur des excitations de faible amplitude pour plusieurs points de polarisation et les modèles déduits sont dits « quasi-statiques », c'est-à-dire que les différents éléments varient instantanément avec les stimuli. Afin d'apprécier le domaine de validité du modèle pour des signaux de forte amplitude, nous avons choisi de calculer un coefficient d'erreur en comparant le courant de conduction issu du simulateur MC et celui issu de trois modèles électriques différents lorsque la diode est excitée par un signal sinusoïdal sous ADS. Il y a un modèle représentant le modèle classique BF de la diode (A), un autre avec le même modèle mais une résistance série dépendant de la polarisation (B) et un dernier en considérant le modèle complet HF où tous les éléments dépendent de la polarisation. Parmi les trois modèles, c'est le modèle le plus complet (C) qui se rapproche le plus des résultats du simulateur MC. Même pour le modèle C, il existe une zone où le modèle électrique n'est plus valable, avec un coefficient d'erreur supérieur à 5 %.

Le phénomène physique qui met en défaut le schéma équivalent dans cette zone est liée à la vitesse maximum des porteurs en lien avec la fréquence d'excitation. En effet, la vitesse de modulation de la ZCE ne peut excéder cette vitesse de saturation. Une partie plutôt descriptive de ce phénomène a été présentée afin d'observer le passage des électrons dans les vallées supérieures lors d'une augmentation de la fréquence pour une excitation donnée. Peu d'articles proposent une modélisation électrique simple et pertinente de ce phénomène. Lors de l'optimisation de la diode sous le logiciel ADS pour les différentes applications, une confrontation du courant de conduction pour une même excitation en tension aux bornes de la diode sera proposée pour valider ou non le modèle électrique.

Il est assez difficile de définir précisément la limite du modèle électrique. Celle-ci dépend des caractéristiques de la diode (dopage, longueur, etc.), de la forme de l'excitation appliquée à ses bornes, de son excursion en tension, du point de polarisation statique ou encore de sa fréquence. Nous avons considéré que des signaux sinusoïdaux pour le calcul du coefficient d'erreur.

Ce schéma équivalent complet de la diode Schottky intrinsèque utilisable par n'importe quel logiciel de simulation nous permettra d'effectuer une optimisation rapide et efficace du composant pour des applications de détection et de multiplication de fréquence.

L'ionisation par choc, l'injection de porteurs en inverse, les mécanismes de génération et de recombinaison et enfin l'effet dit de saturation de la vitesse des porteurs sont très complexes à reproduire à l'aide d'un modèle électrique car, associé à une large gamme d'excursion de la tension aux bornes de la diodes, ils imposeraient la prise en considération d'effets mémoire.

BROUILLON

Bibliographie

- [And72] C. L. Anderson et C. R. Crowell, « Threshold Energies for Electron-Hole Pair Production by Impact Ionization in Semiconductors », *Phys. Rev. B*, vol. 5, n° 6, p. 2267-2272, mars 1972.
- [Ari91] V. Ariel-Altschul, E. Finkman, et G. Bahir, « Approximations for carrier density in nonparabolic semiconductors », *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. 39, no 6, p. 1312-1316, juin 1992.
- [Bac76] G. Bacarani et A. M. Mazzone, « Monte Carlo simulation of current transport in forward-biased Schottky-barrier diodes », *Electron. Lett.*, vol. 12, n° 2, p. 59-60, janv. 1976.
- [Bal73] A. Baldereschi, « Mean-Value Point in the Brillouin Zone », *Phys. Rev. B*, vol. 7, n° 12, p. 5212-5215, juin 1973.
- [Bar13] A. Baraskar, A. C. Gossard, et M. J. W. Rodwell, « Lower limits to metal-semiconductor contact resistance: Theoretical models and experimental data », *J. Appl. Phys.*, vol. 114, no 15, p. 154516, oct. 2013
- [Bed17] M. Bednarik et M. Cervenka, « The exact solution of the Schrödinger equation with a polynomially spatially varying mass », *J. Math. Phys.*, vol. 58, n° 7, p. 072103, juill. 2017.
- [Ber17] E. Bernuchon, F. Aniel, N. Zerounian, et A. S. Grimault-Jacquín, « Monte Carlo modelling of Schottky diode for rectenna simulation », *Solid-State Electron.*, vol. 135, n° Supplement C, p. 71-77, sept. 2017
- [Bet42] H. A. Bethe, « Theory of the Boundary Layer of Crystal Rectifiers », *MIT Radiation Laboratory Report*, 43-12 (1942)
- [Bor98] P. Borowik et J.-L. Thobel, « Improved Monte Carlo method for the study of electron transport in degenerate semiconductors », *J. Appl. Phys.*, vol. 84, n° 7, p. 3706-3709, oct. 1998.
- [Bul85] G. E. Bulman, V. M. Robbins, et G. E. Stillman, « The determination of impact ionization coefficients in (100) gallium arsenide using avalanche noise and photocurrent multiplication measurements », *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. 32, n° 11, p. 2454-2466, nov. 1985.
- [Bud92] J. Bude et K. Hess, « Thresholds of impact ionization in semiconductors », *J. Appl. Phys.*, vol. 72, n° 8, p. 3554-3561, oct. 1992.
- [Cav00] N. Cavassilas, « Etude du phénomène d'ionisation par choc dans les semi-conducteurs III-V : application aux transistors à effet de champ. », Thèse, Université Paris XI – Orsay, 2000

- [Cha66] K. S. Champlin, D. B. Armstrong, et P. D. Gunderson, « Charge carrier inertia in semiconductors », *Proc. IEEE*, vol. 52, no 6, p. 677-685, juin 1964.
- [Cha81] D. Chattopadhyay et H. J. Queisser, « Electron scattering by ionized impurities in semiconductors », *Rev. Mod. Phys.*, vol. 53, n° 4, p. 745-768, oct. 1981.
- [Che15] J. S. Cheong, M. M. Hayat, X. Zhou, et J. P. R. David, « Relating the Experimental Ionization Coefficients in Semiconductors to the Nonlocal Ionization Coefficients », *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. 62, n° 6, p. 1946-1952, juin 2015.
- [Cho04] K. Y. Choo et D. S. Ong, « Analytical band Monte Carlo simulation of electron impact ionization in In_{0.53}Ga_{0.47}As », *J. Appl. Phys.*, vol. 96, n° 10, p. 5649-5653, nov. 2004.
- [Eas95] J. East, « Monte Carlo simulation of Schottky barrier mixers and varactors », in *Proc. 6th Int. Symp. Space Terahertz Tech.*, Pasadena, CA, USA, Mar. 1995, pp. 442-457.
- [Eri98] N.R. Erickson, « Diode frequency multipliers for terahertz local-oscillator applications », in *Proc. SPIE: Advanced Technology MMW, Radio, and Terahertz Telescopes*, Vol. 3357, Kona, HI, pp. 75-84, Mars 1998.
- [Fis88] M. V. Fischetti et S. E. Laux, « Monte Carlo analysis of electron transport in small semiconductor devices including band-structure and space-charge effects », *Phys. Rev. B*, vol. 38, n° 14, p. 9721-9745, nov. 1988.
- [For11] R. G. Forbes et J. H. B. Deane, « Transmission coefficients for the exact triangular barrier: an exact general analytical theory that can replace Fowler & Nordheim's 1928 theory », *Proc. R. Soc. A*, vol. 467, issue 2134, oct. 2011.
- [Gil91] R. J. Gilmor et M. B. Steer, « Non-linear circuit analysis using the method of harmonic balance – A review of the art. Part I. Introductory concepts. », *International Journal of Microwave and Millimeter-Wave Computer-Aided Engineering*, vol. 1, no 1, p. 22-37, 1991.
- [Gon96] T. González et D. Pardo, « Physical models of ohmic contact for Monte Carlo device simulation », *Solid-State Electron.*, vol. 39, no 4, p. 555-562, avr. 1996.
- [Gon97] T. González, D. Pardo, L. Reggiani, et L. Varani, « Microscopic analysis of electron noise in GaAs Schottky barrier diodes », *J. Appl. Phys.*, vol. 82, n° 5, p. 2349-2358, sept. 1997.
- [Gon03] T. González *et al.*, « Monte Carlo Simulation of Noise in Electronic Devices: Limitations and Perspectives », *AIP Conf. Proc.*, vol. 665, n° 1, p. 496-503, mai 2003.
- [Gra00] J. Grajal, V. Krozer, E. Gonzalez, F. Maldonado, et J. Gismero, « Modeling and design aspects of millimeter-wave and submillimeter-wave Schottky diode varactor

- frequency multipliers », *IEEE Trans. Microw. Theory Tech.*, vol. 48, no 4, p. 700-711, avr. 2000.
- [Gro03] C. Groves, R. Ghin, J. P. R. David, et G. J. Rees, « Temperature dependence of impact ionization in GaAs », *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. 50, n° 10, p. 2027-2031, oct. 2003.
- [Har99] D. Harrison, R. A. Abram, et S. Brand, « Impact ionization rate calculations in wide band gap semiconductors », *J. Appl. Phys.*, vol. 85, n° 12, p. 8178-8185, mai 1999.
- [Hes91] K. Hess, *Monte Carlo Device Simulation: Full Band and Beyond*. Kluwer, 1991.
- [Hil80] O. Hildebrand, W. Kuebart, et M. H. Pilkuhn, « Resonant enhancement of impact in $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{Sb}$ », *Appl. Phys. Lett.*, vol. 37, n° 9, p. 801-803, nov. 1980.
- [Hoc81] R. W. Hockney et J. W. Eastwood, *Computer Simulation Using Particles*. McGraw-Hill, 1981.
- [Kan67] E. O. Kane, « Electron Scattering by Pair Production in Silicon », *Phys. Rev.*, vol. 159, n° 3, p. 624-631, juill. 1967.
- [Kel60] L. V. Keldysh, « Kinetic Theory of Impact Ionization in Semiconductors », *Sov. Phys. JETP* vol. 10, n°3, p. 509, 1960.
- [Kol92] E. L. Kolberg, T. J. Tolmunen, M. A. Frerking, et J. R. East, « Current saturation in submillimeter-wave varactors », *IEEE Trans. Microw. Theory Tech.*, vol. 40, n° 5, p. 831-838, mai 1992.
- [Kul05] A. Kuligk, N. Fitzer, et R. Redmer, « Ab initio impact ionization rate in GaAs, GaN, and ZnS », *Phys. Rev. B*, vol. 71, n° 8, p. 085201, févr. 2005.
- [Lep96] S. Lepaul, F. Aniel, L. Peymayeche, A. de Lustrac, F. Bouillault, R. Adde, « Non-isothermal quasi-bidimensionnal energy balance model », *Electron. Lett.*, vol. 32, No. 7, pp. 692-694, 1996
- [Lou77] S. G. Louie, J. R. Chelikowsky, et M. L. Cohen, « Ionicity and the theory of Schottky barriers », *Phys. Rev. B*, vol. 15, n° 4, p. 2154-2162, févr. 1977.
- [Lou94] J. T. Louhi et A. V. Räisänen, « On the modelling of the millimeter wave Schottky varactor », *Proceedings of the Fifth International Symposium on Space Terahertz Technology*, mai 1994
- [Lug85] P. Lugli et D. K. Ferry, « Degeneracy in the ensemble Monte Carlo method for high-field transport in semiconductors », *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. 32, n° 11, p. 2431-2437, nov. 1985.
- [Maa03] S. A. Maas, *Nonlinear Microwave and RF Circuits*. Artech House, 2003.
- [Mae05] A. Maestrini, J. Ward, J. Gill, H. Javadi, E. Schlecht, C. Tripon-Canseliet, G. Chattopadhyay, et I. Mehdi, « A 540-640 GHz high efficiency four-anode

- frequency tripler », *IEEE Trans. Microw. Theory Techn.*, vol. 53, no. 9, pp. 2835–2843, sept. 2005.
- [Mae10] A. Maestrini *et al.*, « Schottky diode-based terahertz frequency multipliers and mixers », *Comptes Rendus Phys.*, vol. 11, n° 7, p. 480-495, août 2010.
- [Mar96] M. J. Martín, T. González, D. Pardo, et J. E. Velázquez, « Monte Carlo analysis of a Schottky diode with an automatic space-variable charge algorithm », *Semicond. Sci. Technol.*, vol. 11, n° 3, p. 380, 1996.
- [Mat00] K. Matsuzawa, K. Uchida, et A. Nishiyama, « A unified simulation of Schottky and ohmic contacts », *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. 47, no 1, p. 103-108, janv. 2000.
- [Mat09] H. Mathieu et H. Fanet, *Physique des semi-conducteurs et des composants électroniques - 6ème édition : Cours et exercices corrigés*. Dunod, 2009.
- [Mön11] W. Mönch, « Branch-point energies and the band-structure lineup at Schottky contacts and heterostructures », *J. Appl. Phys.*, vol. 109, n° 11, p. 113724, juin 2011.
- [Mor16] D. Moro-Melgar *et al.*, « Monte Carlo Study of 2-D Capacitance Fringing Effects in GaAs Planar Schottky Diodes », *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. 63, n° 10, p. 3900-3907, oct. 2016.
- [Mor17] D. Moro Melgar, « Conception et Optimisation de la Tête Haute Fréquence d'un Récepteur Hétérodyne à 1,2 THz pour l'Instrument JUICE-SWI », Thèse, Université Pierre et Marie Curie, 2017.
- [Mot39] N. F. Mott, « The theory of crystal rectifiers », *Proc R Soc Lond A*, vol. 171, n° 944, p. 27-38, mai 1939.
- [Ng03] J. S. Ng, C. H. Tan, J. P. R. David, G. Hill, et G. J. Rees, « Field dependence of impact ionization coefficients in $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$ », *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. 50, n° 4, p. 901-905, avr. 2003.
- [Osa85] F. Osaka, T. Mikawa, et T. Kaneda, « Impact ionization coefficients of electrons and holes in », *IEEE J. Quantum Electron.*, vol. 21, n° 9, p. 1326-1338, sept. 1985.
- [Özb12] A. M. Özbek, « Measurement of impact ionization coefficients in GaN », Thèse, North Carolina State University, 2012.
- [Par11a] D. Pardo, J. Grajal, S. Pérez, B. Mencía, J. Mateos, et T. González, « Analysis of noise spectra in GaAs and GaN Schottky barrier diodes », *Semicond. Sci. Technol.*, vol. 26, no 5, p. 055023, 2011.
- [Par11b] D. Pardo, J. Grajal, B. Mencía, S. Pérez, J. Mateos et T. González, « Harmonic Generation and Noise in GaAs and GaN Schottky Diodes », 21-st International Symposium on Space Terahertz Technology, Oxford, 23-25 March, 2010, pp. 400-403

- [Par14] D. Pardo, J. Grajal, C. G. Pérez-Moreno, et S. Pérez, « An Assessment of Available Models for the Design of Schottky-Based Multipliers Up to THz Frequencies », *IEEE Trans. Terahertz Sci. Technol.*, vol. 4, n° 2, p. 277-287, mars 2014.
- [Pas07] E. Pascual, R. Rengel, et M. J. Martín, « Microscopic modelling of reverse biased Schottky diodes: influence of non-equilibrium transport phenomena », *Semicond. Sci. Technol.*, vol. 22, no 9, p. 1003, 2007.
- [Pea78] T. P. Pearsall, F. Capasso, R. E. Nahory, M. A. Pollack, et J. R. Chelikowsky, « The band structure dependence of impact ionization by hot carriers in semiconductors: GaAs », *Solid-State Electron.*, vol. 21, n° 1, p. 297-302, janv. 1978.
- [Pea80] T. P. Pearsall, « Impact ionization rates for electrons and holes in $\text{Ga}_{0.47}\text{In}_{0.53}\text{As}$ », *Appl. Phys. Lett.*, vol. 36, n° 3, p. 218-220, févr. 1980.
- [Ram39] S. Ramo, « Currents Induced by Electron Motion », *Proc. IRE*, vol. 27, n° 9, p. 584-585, sept. 1939.
- [Reg92] L. Reggiani, T. Kuhn, et L. Varani, « Noise and correlation functions of hot carriers in semiconductors », *Appl. Phys. A*, vol. 54, n° 5, p. 411-427, mai 1992.
- [Reg97] L. Reggiani *et al.*, « Monte Carlo analysis of electronic noise in semiconductor materials and devices », *Microelectron. J.*, vol. 28, n° 2, p. 183-198, févr. 1997.
- [Rek99] A. Reklaitis et L. Reggiani, « Monte Carlo study of shot-noise suppression in semiconductor heterostructure diodes », *Phys. Rev. B*, vol. 60, no 16, p. 11683-11693, oct. 1999.
- [Ren07] R. Rengel, E. Pascual, et M. J. Martín, « Injected Current and Quantum Transmission Coefficient in Low Schottky Barriers: WKB and Airy Approaches », *IEEE Electron Device Lett.*, vol. 28, no 2, p. 171-173, févr. 2007.
- [Rho72] E. H. Rhoderick, « Comments on the conduction mechanism in Schottky diodes », *J. Phys. Appl. Phys.*, vol. 5, n° 10, p. 1920, 1972.
- [Rho88] E. H. Rhoderick et R. H. Williams, *Metal-semiconductor contacts*. Clarendon Press, 1988.
- [Ric04] S. Boyer Richard, *Modélisation physique de la structure électronique, du transport et de l'ionisation par choc dans les matériaux IV-IV massifs, contraints et dans les puits quantiques*. Thèse, Université Paris-Sud, 2004.
- [Roo13] D. E. Root, J. Verspecht, J. Horn, et M. Marcu, *X-Parameters: Characterization, Modeling, and Design of Nonlinear RF and Microwave Components*. Cambridge University Press, 2013.
- [San92] N. Sano et A. Yoshii, « Impact-ionization theory consistent with a realistic band structure of silicon », *Phys. Rev. B*, vol. 45, n° 8, p. 4171-4180, févr. 1992.

- [Sch01a] E. Schlecht, F. Maiwald, G. Chattopadhyay, S. Martin, et I. Mehdi, « Design considerations for heavily-doped cryogenic Schottky diode varactor multipliers », *12th International Symposium on Space Terahertz Technology*, févr. 2001.
- [Sch01b] E. Schlecht, G. Chattopadhyay, A. Maestrini, D. Pukala, J. Gill, S. Martin, F. Maiwald et I. Mehdi, « A High-Power Wideband Cryogenic 200 GHz Schottky “Substrateless” Multiplier: Modeling, Design and Results », *9th International Conference on Terahertz Electronics*, oct. 2001
- [Sch39] W. Schottky, « Zur Halbleiterttheorie der Sperrschicht- und Spitzengleichrichter », *Z. Für Phys.*, vol. 113, n° 5, p. 367-414, mai 1939.
- [Sel84] S. Selberherr, *Analysis and Simulation of Semiconductor Devices*, Wien, New York: Springer-Verlag, 1984.
- [Shi05] P. Shiktorov, E. Starikov, V. Gruzinskis, L. Reggiani, L. Varani, et J. C. Vaissiere, « Analytical model of high-frequency noise spectrum in Schottky-barrier diodes », *IEEE Electron Device Lett.*, vol. 26, no 1, p. 2-4, janv. 2005.
- [Sho38] W. Shockley, « Currents to Conductors Induced by a Moving Point Charge », *J. Appl. Phys.*, vol. 9, n° 10, p. 635-636, oct. 1938.
- [Sil08] J. V. Siles et J. Grajal, « Capabilities of GaN Schottky Multipliers for LO Power Generation at Millimeter-Wave Bands », *Proceedings of the Nineteenth International Symposium on Space Terahertz Technology*, Groningen, p.504, April 28-30, 2008.
- [Sil10] J. V. Siles et J. Grajal, « Physics-Based Design and Optimization of Schottky Diode Frequency Multipliers for Terahertz Applications », *IEEE Trans. Microw. Theory Tech.*, vol. 58, n° 7, p. 1933-1942, juill. 2010.
- [Sta96] E. Starikov *et al.*, « Monte Carlo calculation of noise and small-signal impedance spectra in submicrometer GaAs n⁺n⁺ diodes », *J. Appl. Phys.*, vol. 79, n° 1, p. 242-252, janv. 1996.
- [Sto91] M. Stobbe, A. Könies, R. Redmer, J. Henk, et W. Schattke, « Interband transition rate in GaAs », *Phys. Rev. B*, vol. 44, n° 20, p. 11105-11110, nov. 1991.
- [Sto94] M. Stobbe, R. Redmer, et W. Schattke, « Impact ionization rate in GaAs », *Phys. Rev. B*, vol. 49, n° 7, p. 4494-4500, févr. 1994.
- [Sun03] L. Sun, X. Y. Liu, M. Liu, G. Du, et R. Q. Han, « Monte Carlo simulation of Schottky contact with direct tunnelling model », *Semicond. Sci. Technol.*, vol. 18, no 6, p. 576, 2003.
- [Sze06] S. M. Sze et K. K. Ng, *Physics of Semiconductor Devices*. John Wiley & Sons, 2006.

- [Tai94] G. B. Tait, « Efficient solution method for unified nonlinear microwave circuit and numerical solid-state device simulation », *IEEE Microw. Guid. Wave Lett.*, vol. 4, n° 12, p. 420-422, déc. 1994.
- [Tea11] E. Tea, *Résolution de l'équation de transport de Boltzmann par une approche Monte Carlo (full-band), application aux cellules solaires à porteurs chauds et aux composants ultra-rapides*, Thèse, Université Paris-Sud, 2011.
- [Tej77] C. Tejedor, F. Flores, et E. Louis, « The metal-semiconductor interface: Si (111) and zincblende (110) junctions », *J. Phys. C Solid State Phys.*, vol. 10, n° 12, p. 2163, 1977.
- [Tej78] C. Tejedor et F. Flores, « A simple approach to heterojunctions », *J. Phys. C Solid State Phys.*, vol. 11, n° 1, p. L19, 1978.
- [Ter84] J. Tersoff, « Schottky Barrier Heights and the Continuum of Gap States », *Phys. Rev. Lett.*, vol. 52, n° 6, p. 465-468, févr. 1984.
- [Tri86] M. Trippe, G. Bosman, et A. V. D. Ziel, « Transit-Time Effects in the Noise of Schottky-Barrier Diodes », *IEEE Trans. Microw. Theory Tech.*, vol. 34, no 11, p. 1183-1192, nov. 1986.
- [Tun92] R. T. Tung, « Electron transport at metal-semiconductor interfaces: General theory », *Phys. Rev. B*, vol. 45, n° 23, p. 13509-13523, juin 1992.
- [Tun14] R. T. (董梓則) Tung, « The physics and chemistry of the Schottky barrier height », *Appl. Phys. Rev.*, vol. 1, n° 1, p. 011304, janv. 2014.
- [Yod96] P. D. Yoder, K. Gärtner, et W. Fichtner, « A generalized Ramo-Shockley theorem for classical to quantum transport at arbitrary frequencies », *J. Appl. Phys.*, vol. 79, n° 4, p. 1951-1954, févr. 1996.
- [Vas06] D. Vasileska et S. M. Goodnick, *Computational Electronics*. Morgan & Claypool Publishers, 2006.
- [Wat00] S. P. Watkins *et al.*, « Heavily carbon-doped GaAsSb grown on InP for HBT applications », *J. Cryst. Growth*, vol. 221, n° 1, p. 59-65, déc. 2000.
- [Win00] B. Winstead et U. Ravaioli, « Simulation of Schottky barrier MOSFET's with a coupled quantum injection/Monte Carlo technique », *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. 47, no. 6, pp. 1241-1246, Jun. 2000
- [Zeb07] M. Zebarjadi, C. Bulutay, K. Esfarjani, et A. Shakouri, « Monte Carlo simulation of electron transport in degenerate and inhomogeneous semiconductors », *Appl. Phys. Lett.*, vol. 90, n° 9, p. 092111, févr. 2007.

CHAPITRE III

OPTIMISATION DE LA DIODE SCHOTTKY POUR LA MULTIPLICATION DE FREQUENCE

I. Introduction

Nous avons vu précédemment comment obtenir le schéma équivalent petit-signal de la diode Schottky à partir du simulateur MC en vue d'une optimisation de ses caractéristiques pour la multiplication de fréquence et la détection. Ce chapitre se propose de rechercher les caractéristiques intrinsèques optimales de la diode pour le multiplieur de fréquence – et plus particulièrement le doubleur – à savoir le couple métal/SC, le dopage et la longueur de chacune des couches. La multiplication de fréquence peut, aussi bien, être obtenue en polarisation directe qu'en polarisation inverse. C'est généralement la non-linéarité capacitive, en inverse, qui est mise à contribution pour limiter les pertes et obtenir un meilleur rendement.

Dans un premier temps, quelques généralités sur ce processus non-linéaire sont présentées. Quelques facteurs de mérites couramment rencontrés dans la littérature sont discutés et peuvent permettre d'orienter certains choix pour l'optimisation de la diode Schottky. Un circuit relativement simple réalisant la multiplication de fréquence avec une diode Schottky est décrit en explicitant les pertes possibles dans le circuit.

Ensuite, les stratégies d'optimisation sont présentées, depuis la simulation des différentes configurations avec le simulateur MC jusqu'à l'implémentation des éléments non-linéaires du schéma équivalent sous ADS. Ces éléments suivent des lois non-linéaires dont chacun des paramètres dépend à la fois de la longueur et du dopage de la zone N. Pour faciliter l'optimisation des caractéristiques de la diode, une interpolation bilinéaire a donc été effectuée pour prendre en compte la dépendance avec ces deux variables. Certaines caractéristiques de la diode ont été fixées pour limiter l'espace des configurations.

Plusieurs études sont enfin menées pour tenter de comprendre l'influence de différents paramètres sur le rendement du doubleur de fréquence. Celles-ci sont réalisées sur le GaAs qui reste encore un SC de choix pour réaliser ces fonctions non-linéaires. D'autres semi-conducteurs sont aussi étudiés tels que l'InGaAs pour ses propriétés de transport et sa faible hauteur de barrière, le GaSb pour ses dopages pouvant aller jusqu'à 10^{20} cm^{-3} et le GaN pour sa tenue en puissance. La modification du profil de dopage dans la couche active modifie la caractéristique non-linéaire associée à la capacité de déplétion et pourrait améliorer le rendement des multiplieurs de fréquence.

II. Principe de la multiplication de fréquence

1. Généralités sur la multiplication de fréquence

La figure III-II.1.1 présente le schéma d'un multiplieur de fréquence permettant de générer un signal dont la fréquence en sortie est un multiple (harmonique) de la fréquence d'entrée f_0 . C'est la non-linéarité (capacitive) associée à la capacité de déplétion qui est généralement mise à contribution (mode *varactor*). Idéalement, le filtre placé à l'entrée est conçu pour laisser passer uniquement le fondamental et mettre en court-circuit tous les autres harmoniques. Le filtre placé en sortie impose le transit que de l'harmonique souhaité. Nous nous focalisons uniquement sur le doubleur de fréquence dans ce manuscrit, c'est donc l'harmonique 2 que le filtre en sortie doit sélectionner. Les cellules d'adaptation en entrée et en sortie permettent de transmettre un maximum de puissance de la source vers la charge.

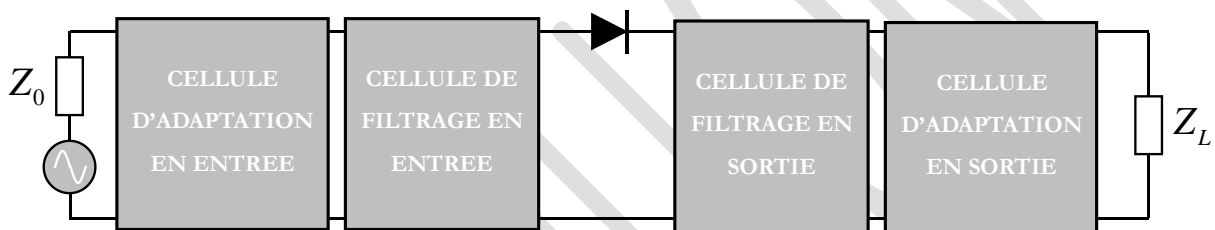


Figure III-II.1.1 – Schéma d'un multiplieur de fréquence

Manley et Rowe ont développé deux relations permettant de quantifier la puissance associée à chaque fréquence obtenue par le processus de mélange (i.e. les harmoniques) à partir d'un élément non-linéaire réactif (inductance ou capacité). En considérant qu'il existe deux fréquences d'excitation f_0 et f_1 , ces deux relations s'écrivent [Man56] :

$$\sum_{m=0}^{\infty} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \frac{mP_{m,n}}{mf_0 + nf_1} = 0 \quad \text{et} \quad \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=-\infty}^{\infty} \frac{nP_{m,n}}{mf_0 + nf_1} = 0 \quad (\text{III-II.1.1})$$

Avec $P_{n,m}$ la puissance moyenne circulant dans l'élément réactif non-linéaire à la fréquence $mf_0 + nf_1$.

Il est important de noter que :

- ces relations sont indépendantes de l'évolution de l'élément non-linéaire en fonction de la tension,
- les niveaux de puissances des sources sont sans importance,
- les éléments ajoutés autour de la capacité ou de l'inductance n'affecte pas la façon dont est distribuée la puissance sur les harmoniques.

Dans le cas d'un multiplicateur de fréquence, il n'existe qu'un seul signal d'excitation à la fréquence f_0 ($f_1 = 0$). La somme sur n n'intervient plus et les équations (III-II.1.1) se résument en une seule équation :

$$\sum_{m=0}^{\infty} P_m = 0 \quad \text{(III-II.1.2)}$$

Où P_m est la puissance active à la fréquence mf_0 .

La somme des puissances associées à chaque harmonique doit être égale à la puissance d'entrée. Dans cette configuration, si le circuit est conçu de telle façon que seules la puissance active à la fréquence d'entrée f_0 et celle à la fréquence de sortie mf_0 peuvent circuler, la somme (III-II.1.2) s'écrit simplement $P_m = -P_1$. Dans ce cas, la puissance de sortie sur l'harmonique m souhaité est égale à la puissance d'entrée et on peut obtenir théoriquement un rendement de 100 %. Ce résultat n'est pas surprenant puisque qu'il s'agit d'un élément réactif, il ne peut donc pas dissiper de puissance. Cependant, il est difficile d'atteindre ce rendement en pratique, notamment à cause des résistances séries des diodes Schottky utilisées pour réaliser l'élément réactif non-linéaire. Les relations de Manley-Rowe ne peuvent alors plus s'appliquer.

2. Facteurs de mérite pour la multiplication de fréquence

Pour des applications en multiplication de fréquence, la diode peut être utilisée soit en mode varistor, soit en mode varactor. Le mode varistor utilise la non-linéarité résistive de la diode Schottky associée à la résistance dynamique R_d alors que le mode varactor utilise la non-linéarité capacitive associée à la capacité de déplétion C_d . Le rendement de conversion est défini par :

$$\eta = \frac{P_{out,m}}{P_{in}} \quad \text{(III-II.2.1)}$$

Où P_{in} représente la puissance d'entrée disponible et $P_{out,n}$ la puissance de sortie à l'harmonique de rang m .

En mode varistor, le rendement théorique maximum qu'il est possible d'atteindre est $1/m^2$ [Pag58]. En revanche, pour le mode varactor, il est théoriquement possible d'atteindre un rendement de 100% d'après les équations de Manley-Rowe. Néanmoins, cette valeur n'est jamais atteinte en pratique à cause de la résistance série du circuit, des désadaptations d'impédance en entrée et en sortie ainsi que les pertes associées à ces circuits. Pour de fortes

puissances d'entrée, la tension aux bornes de la diode est positive pendant une fraction du temps à chaque période et les performances du circuit sont dégradées à cause de la multiplication résistive qui intervient dans cette gamme de tension.

Un autre facteur de mérite est aussi utilisé pour une varactor : la fréquence de coupure dynamique. Celle-ci est définie par :

$$f_{cd} = \frac{1}{2\pi R_s} (S_{\min} - S_{\max}) = \frac{1}{2\pi R_s} \left(\frac{1}{C_{\min}} - \frac{1}{C_{\max}} \right) \quad (\text{III-II.2.2})$$

Où R_s représente la résistance série, S_{\max} et S_{\min} sont respectivement l'élastance maximale et minimale. L'excursion de l'élastance ($S_{\max} - S_{\min}$) peut être limitée par la tension de claquage V_{br} , par la longueur de la zone N si celle-ci est complètement déplétée avant d'atteindre la tension V_{br} ou encore par la vitesse de saturation des porteurs.

3. Approche analytique

Comme évoqué précédemment, la génération d'harmoniques repose essentiellement sur la non-linéarité du dispositif associée à la capacité de déplétion. Plusieurs articles ont tenté une approche analytique pour déterminer le rendement des multiplieurs de fréquence [Tan66] [Lip98] [Dun09]. Celle-ci est néanmoins rendue difficile à cause du caractère non-linéaire du processus de multiplication. Nous nous appuyerons dans ce manuscrit sur les résultats de l'article [Dun09] avec le circuit équivalent de la figure III-II.3.1.

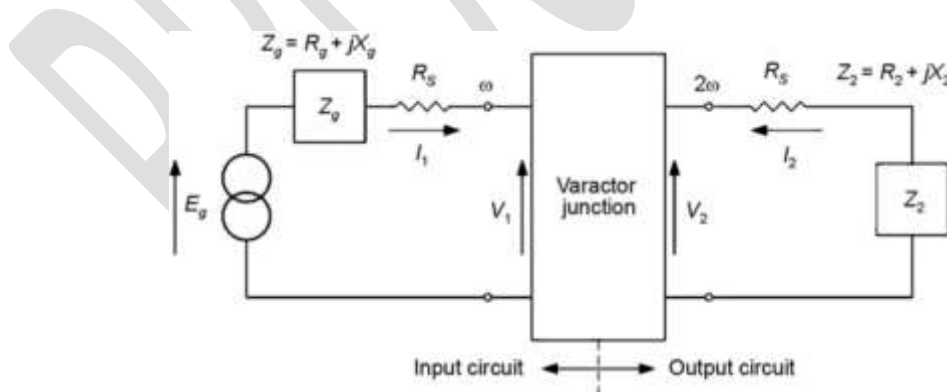


Figure III-II.3.1 – Circuit équivalent du doubleur de fréquence [Dun09]

Plusieurs hypothèses sont faites :

- le dopage dans la zone N est constant,
- les filtres sont idéaux : seuls le fondamental et l'harmonique 2 sont considérés,
- le schéma équivalent est celui de la figure II-II.1.1 avec une résistance série constante,

- la capacité de déplétion suit la loi donnée par l'équation (II-III.1.1).

Comme la diode en mode varactor peut être modélisée par une capacité non-linéaire en série avec une résistance, il devient plus pratique de travailler avec l'élastance S qui est l'inverse de la capacité. En supposant que la diode est excitée par des signaux périodiques de pulsation ω_0 , une décomposition en série de Fourier de S donne :

$$S = S_0 \left[1 + \sum_{k=-\infty}^{\infty} m_k \exp(jk\omega_0 t) \right] \text{ avec } m_{-k} = m_k^* \quad (\text{III-II.3.1})$$

Où S_0 représente l'élastance au point de polarisation V_{bias} choisi.

En supposant que la diode est excitée par un signal sinusoïdal d'amplitude $V_{bi} - V_{bias}$, la puissance totale absorbée par la diode sur le fondamental P_1 et l'harmonique 2 P_2 s'écrivent :

$$P_1 = P_2 = 4V_{bi}^2 C_{j0} (C_{j0} S_0)^3 \omega |m_1|^2 |m_2| \quad (\text{III-II.3.2})$$

Les puissances dissipées dans la résistance série pour le fondamental P_{dis1} et l'harmonique 2 P_{dis2} :

$$P_{dis1} = 4V_{bi}^2 C_{j0}^2 (C_{j0} S_0)^2 \omega^2 |m_1|^2 R_s \quad (\text{III-II.3.3})$$

$$P_{dis2} = 16V_{bi}^2 C_{j0}^2 (C_{j0} S_0)^2 \omega^2 |m_2|^2 R_s \quad (\text{III-II.3.4})$$

Le rendement du doubleur de fréquence peut être ainsi déduit :

$$\eta = \frac{P_2}{P_1 + P_{dis1} + P_{dis2}} = \frac{1}{1 + \frac{4\omega_0 R_s}{S_0} \times \frac{|m_1|^2 + 4|m_2|^2}{|m_1|^2 |m_2|}} \text{ avec} \quad (\text{III-II.3.5})$$

$$S_0 \text{ tel que } V_{bias} = V_{bi} \left[1 - (C_{j0} S_0)^2 (1 + 2|m_1|^2 + 2|m_2|^2) \right]$$

Les détails du calcul pour parvenir à ce résultat sont explicités dans l'article [Dun09]. On peut remarquer que, dans le cas où $R_s = 0$, le rendement est égal à 1, ce qui confirme les formules de Manley et Rowe dans cette configuration. Pour maximiser la puissance sur l'harmonique 2, une méthode numérique permet de déduire les valeurs de $|m_1|$ et $|m_2|$:

$$|m_1| = 0,502 \text{ et } |m_2| = 0,166 \quad (\text{III-II.3.6})$$

4. Description du doubleur de fréquence

Le circuit proposé pour le doubleur de fréquence est représenté sur la figure III-II.4.1.

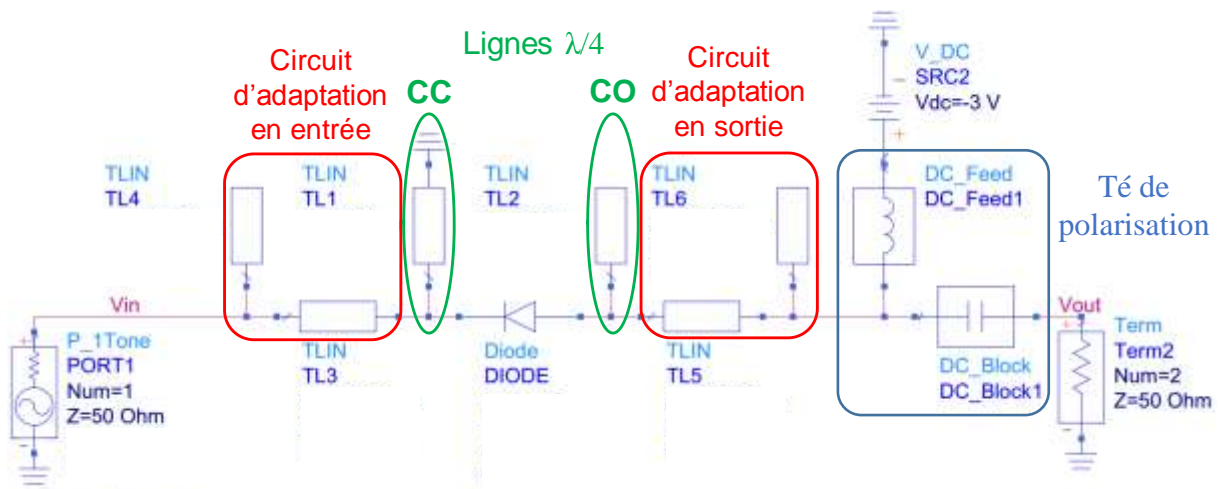


Figure III-II.4.1 – Représentation d'un doubleur de fréquence

Les cellules d'adaptation en entrée et en sortie sont réalisées à partir de stubs supposés idéaux et sont optimisées pour maximiser le rendement du circuit.

Les cellules de filtrage sont des lignes quart d'onde à la fréquence du fondamental en court-circuit à l'entrée ou en circuit ouvert à la sortie [Maa03]. La ligne quart d'onde en circuit ouvert permet de mettre à la masse l'anode par rapport à la fréquence fondamentale sans impacter l'harmonique de rang 2. Inversement, la ligne quart d'onde en court-circuit permet de mettre à la masse la cathode par rapport à l'harmonique de rang 2 sans incidence pour le signal à la fréquence fondamentale. Les impédances de source et charge sont supposées réelles et égales à 50Ω .

Les pertes dans le circuit sont de plusieurs natures :

- Les pertes par désadaptation à l'entrée et à la sortie.
- Les pertes dans les harmoniques en sortie : la ligne quart d'onde en sortie impose que la fréquence fondamentale soit filtrée mais tous les harmoniques de $2f_0$ ne le sont pas. Ces pertes-là sont généralement négligeables et dépendent de la puissance d'entrée.
- Les pertes dans la diode : elles représentent l'essentiel des pertes. Elles sont surtout dues aux pertes dans la couche active, dans le substrat et dans une moindre mesure dans la résistance dynamique lorsque la tension aux bornes de la diode se situe dans la zone où la non-linéarité résistive intervient (surtout en direct et éventuellement en inverse à cause de l'abaissement de la barrière par le champ électrique à l'interface [Rho88]).

Dans les doubleurs de fréquence au THz, les topologies plutôt utilisées sont les configurations dites « équilibrées » dont un schéma équivalent est donné sur la figure III-II.4.2. Les harmoniques impairs sont générés en opposition de phase sur chacune des deux branches et les harmoniques pairs sont quant à eux générés en phase. Cela conduit à une annulation des harmoniques impairs et rend la conception du circuit plus simple puisque seul les harmoniques pairs se propagent.

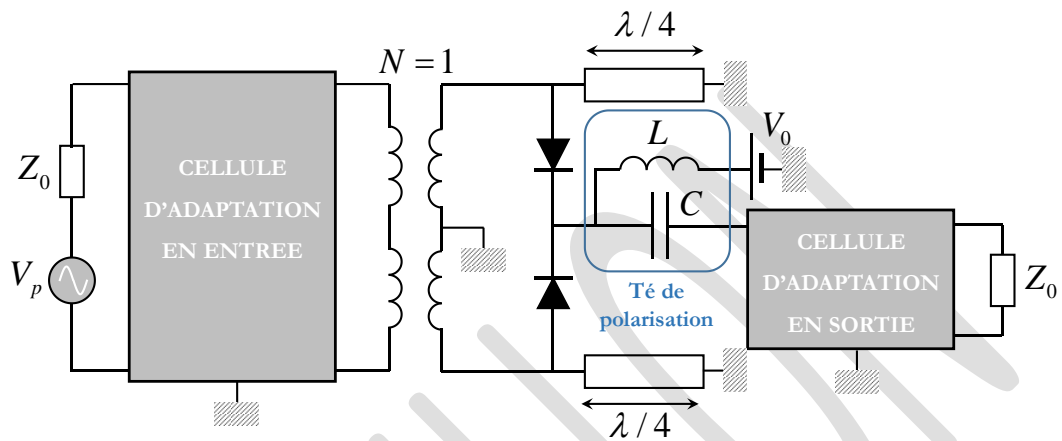


Figure III-II.4.2 – Topologie d'un doubleur de fréquence équilibré [Mae99]

Cette topologie de doubleur n'a pas été étudiée dans le cadre de cette thèse.

III. Optimisation de la diode Schottky pour le doubleur de fréquence

La section II-II.1 explicitait le modèle électrique de la diode Schottky jusqu'au THz en prenant en compte certains phénomènes physiques qui jouent un rôle prépondérant à ces fréquences (inertie des porteurs, courant de déplacement, etc.), mettant ainsi en défaut le schéma équivalent classique basse-fréquence. Cette médiation du schéma électrique a été motivée par une volonté d'intégrer facilement la diode au cœur d'un circuit pour une application spécifique (rectification et multiplication de fréquence) et de l'exploiter avec un logiciel de simulation pourvu de multiples fonctionnalités. Nous nous sommes rendus compte que les lois analytiques données pour les différents éléments du schéma équivalent (figure II-II.1.2) étaient plutôt bien vérifiés par rapport aux résultats issus du simulateur MC. Une amélioration du modèle de la capacité a été proposée afin de prendre en compte d'une part la déplétion possible dans le substrat pour des diodes courtes et d'autre part l'abaissement de la hauteur de barrière avec le champ électrique à l'interface. On propose alors d'utiliser ces lois dans une logique d'optimisation rapide et efficace de la diode Schottky pour chaque application à partir des algorithmes disponibles dans le logiciel ADS, ce qui n'aurait pas été faisable directement avec un code MC en raison des temps de simulation importants. Le simulateur MC n'est pas pour autant délaissé et pourra, dans les configurations simulées, servir de référence pour comparer les résultats, effectuer des ajustements sur l'optimisation si nécessaire et discuter des limites du modèle électrique, notamment lorsque la vitesse de saturation des porteurs intervient. Après avoir décrit les stratégies d'optimisation et les paramètres que nous avons jugés nécessaire d'optimiser pour limiter l'espace des configurations, plusieurs études sont proposées afin de dégager les caractéristiques optimales de la diode.

1. Éléments à optimiser

On rappelle que l'objectif est de trouver les caractéristiques optimales de la diode afin de maximiser le rendement du doubleur de fréquence. Pour une puissance d'entrée et un semi-conducteur donnés, il y a possiblement sept paramètres à optimiser :

- la hauteur de barrière $q\phi_{bn}$
- la longueur ℓ_N de la zone N
- le dopage N_d de la zone N
- la longueur ℓ_{N^+} de la zone N^+
- le dopage N_d^+ de la zone N^+
- la surface S
- le point de polarisation V_0

On pressent qu'une optimisation des caractéristiques de la zone dopée N^+ avec ADS tendra vers une longueur nulle et un dopage le plus élevé possible afin de réduire la résistance série. La longueur et le dopage de la zone N^+ sont donc fixés. Pour limiter le nombre de configurations, la hauteur de barrière est fixée. Les valeurs choisies sont récapitulées dans le tableau III-III.1.1. Les quatre éléments d'optimisation sont donc la surface, le point de polarisation, le dopage et la longueur de la zone N.

	GaAs	InGaAs	GaSb	GaN
$q\phi_{bn}$ (eV)	0,88 [Wal84] (Au)	0,21 [Opr10] (Ti-Pt-Au)	0,6 [Pol92] (Au / Pd)	0,88 [Wan96] [Sch96] (Au)
N_d^+ (cm^{-3})	5×10^{18} [Mor16]	3×10^{19} [Zin13]	1×10^{20} [Wat00]	3×10^{18} [Jin15]
ℓ_{N^+} (nm)	50	50	50	50
α (nm)	3 [Sch01a]	1,5 [Rho88]	1,5 – 3,5 [Rho88]	1,5 – 3,5 [Rho88]

Tableau III-III.1.1 – Valeurs des paramètres pour les différents matériaux étudiés

Afin de pouvoir confronter les résultats d'ADS avec le code MC et garder des temps de simulation raisonnables, nous conserverons une longueur de 50 nm pour le substrat sur chacun des matériaux bien que son épaisseur soit beaucoup plus grande en pratique dans les diodes Schottky [Mor16]. Ceci aura pour incidence d'augmenter le rendement du circuit mais ne modifiera pas les conclusions sur les différentes optimisations effectuées. L'abaissement de la hauteur de barrière avec le champ électrique par l'entremise du paramètre α est considéré pour tous les SC. Très peu de publications ont été trouvées sur ce paramètre pour les semi-conducteurs autres que GaAs. Ce paramètre pouvant potentiellement varier entre 1,5 et 3,5 nm [Rho88], ces deux valeurs seront utilisées sauf pour InGaAs où il sera fixé à 1,5 nm car le verrouillage du niveau de Fermi à l'interface métal/SC est plus marqué que sur GaAs [Rho88]. Mais ce point nécessite des études complémentaires. Des simulations MC ont été effectuées pour extraire l'évolution de la capacité en fonction du dopage et de la longueur de la zone N pour n'importe quelle tension supérieure à la tension de claquage V_{br} . Les dopages dans les zones d'accès ont été choisis parmi les valeurs les plus élevées rencontrées dans la littérature sur les diodes Schottky afin de minimiser la résistance série dans cette zone. Pour GaSb, le dopage peut atteindre 10^{20} cm^{-3} [Wat00] mais il sera limité ici à 10^{18} cm^{-3} pour les simulations MC afin de conserver un nombre raisonnable de porteurs dans la zone N et d'éviter l'application du principe d'exclusion de Pauli qui n'a pas été implémenté dans les vallées autres que la vallée centrale dans la version du code MC que j'ai utilisé. En effet, pour de telles valeurs de dopage avec ce SC (10^{20} cm^{-3}) le PEP est indispensable en vallée L car les porteurs sont essentiellement situés dans cette vallée. Le principe d'exclusion de Pauli a en

revanche été pris en compte dans le simulateur MC pour tous les autres SC, uniquement dans la vallée centrale.

La capacité non-linéaire constitue l'élément clé des multiplieurs de fréquence et nécessite d'être modélisée avec attention. La figure III-III.1.1 représente l'évolution de la capacité extraite avec le code MC pour plusieurs longueurs, un dopage de $2 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ et une surface par défaut de $1 \mu\text{m}^2$ pour GaAs.

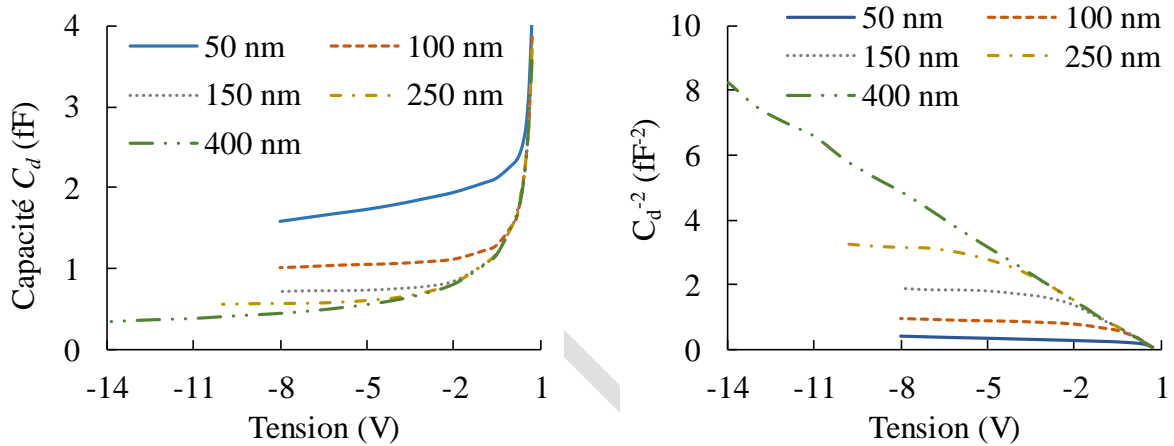


Figure III-III.1.1 – Evolution de la capacité C_d et de C_d^{-2} obtenue en MC pour plusieurs longueurs avec un dopage de $2 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ et une surface de $1 \mu\text{m}^2$

On constate que la longueur de la zone N impacte fortement l'évolution de la capacité notamment lorsque les diodes sont courtes (longueurs inférieures à 300 nm pour $2 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$). En effet, il existe pour ces longueurs une tension, supérieure à la tension de claquage, à partir de laquelle la zone N est complètement déplétée et la modulation de la ZCE s'effectue dans la zone N^+ . Pour 400 nm, le tracé de C_d^{-2} en fonction de la polarisation met en évidence une loi linéaire quelle que soit la tension de polarisation, signifiant que le substrat n'est jamais déplété et que la capacité vérifie bien l'équation (II-III.1.1).

2. Stratégies d'optimisation de la diode Schottky

Nous abordons dans cette section les différentes étapes pour l'optimisation de la diode Schottky dans le cadre de deux applications aux fréquences THz : la multiplication de fréquence et la détection. Les différentes étapes depuis les simulations MC jusqu'à l'optimisation sous ADS sont décrites ci-dessous.

- **Etape 1 : Simulations MC**

On a simulé dans un premier temps, avec le code MC, plusieurs couples $(\ell_N; N_d)$ pour les 4 semi-conducteurs étudiés – GaAs, InGaAs, GaSb et GaN – afin d’obtenir l’évolution du potentiel, du champ électrique et de la concentration de porteurs en fonction de la distance pour plusieurs points de polarisation. Nous avons choisi de faire varier le dopage de la zone N entre 10^{17} et 10^{18} cm^{-3} avec une dizaine de points et la longueur de la zone N entre 50 nm et 500 nm par pas de 50 nm, soit un total d’environ 400 configurations simulées pour les 4 SC. Pour les SC autres que GaAs et InGaAs, deux valeurs « extrêmes » de α (1,5 et 3,5 nm) ont en plus été choisies par manque de données dans la littérature.

- **Etape 2 : Calcul de la capacité, de la tension de claquage V_{br} et de la caractéristique statique**

* La variation spatiale du potentiel extraite en MC permet de déterminer la caractéristique statique I(V). Cette dernière n’est pas directement déduite des résultats de simulation MC pour plusieurs raisons. Il faudrait utiliser l’algorithme de fusion/division mais celui devient difficilement exploitable autour de 0 V lorsque la hauteur de barrière est élevée (GaAs, GaSb ou GaN) à cause des fortes fluctuations de vitesse (section II-I.5). D’autre part, les simulations sont d’autant plus longues que la tension de polarisation est faible avec ce processus à cause de l’augmentation du nombre de régions pour avoir suffisamment de porteurs atteignant le contact Schottky.

* La concentration spatiale de porteurs permet de déterminer l’évolution de la capacité en fonction de la polarisation à partir de la variation de charges dans toute la structure avec la tension. On aurait aussi pu l’extraire à partir d’une analyse petit-signal mais les temps de simulations auraient été beaucoup plus importants. Nous avons par ailleurs observé dans la section II-III.1 que ces deux méthodes d’extraction donnaient des résultats similaires.

* Le champ électrique permet de calculer l’intégrale d’ionisation décrite dans la section II-I.6 pour estimer la tension de claquage V_{br} .

- **Etape 3 : Extraction des paramètres**

La caractéristique statique I(V), la capacité C(V) sont respectivement ajustées sur les lois (II-III.1.11) et (II-III.1.1) pour chaque configuration par une méthode des moindres carrés. Les différents paramètres de ces lois (6 pour I(V) et 5 pour C(V)) dépendent donc de la longueur ℓ_N et du dopage N_d . Nous avons vu que la tension de claquage dépendait également de ℓ_N et de N_d . Les autres éléments du schéma équivalent (cellule N non déplétée et cellule N^+) sont déduits de la caractéristique C(V) (section II-III.1c).

- **Etape 4 : Implémentation du schéma équivalent sous ADS**

La diode Schottky est représentée sous ADS par un bloc SDD (*Symbolically Defined-Devices*) en définissant plusieurs équations non-linéaires avec des représentations explicites ou implicites [ADS]. Pour le modèle complet de la diode donné sur la figure III-III.2.1 avec tous les éléments non-linéaires, un bloc SDD avec 6 ports est nécessaire.

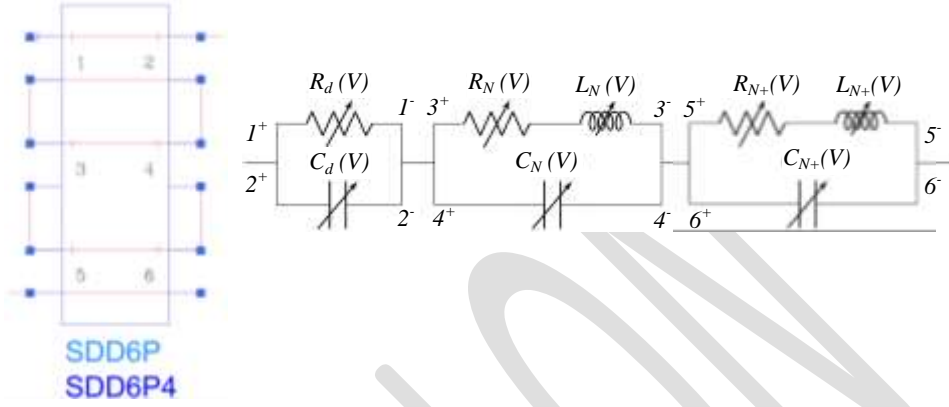


Figure III-III.2.1 – Représentation du SDD 6 ports sous ADS pour l’implémentation du schéma équivalent

Pour implémenter les 12 paramètres décrits précédemment, une interpolation bilinéaire est effectuée sur ℓ_N et N_d par rapport aux valeurs discrètes choisies lors des simulations MC. Par exemple, pour la tension de claquage V_{br} , on obtient l’équation suivante :

$$V_{br}(\ell_N, N_d) = a_{V,i} \ell_N N_d + b_{V,i} N_d + c_{V,i} \ell_N + d_{V,i} \quad \text{pour} \quad \text{(III-III.2.1)}$$

$$N_d \in [N_{d,i} ; N_{d,i+1}] \quad \text{et} \quad \ell_N \in [\ell_{N,i} ; \ell_{N,i+1}] \quad \text{avec} :$$

$$\left\{ \begin{array}{l} a_{V,i} = \frac{V_{br}(\ell_{N,i}, N_{d,i}) + V_{br}(\ell_{N,i+1}, N_{d,i+1}) - V_{br}(\ell_{N,i}, N_{d,i+1}) - V_{br}(\ell_{N,i+1}, N_{d,i})}{(\ell_{N,i+1} - \ell_{N,i})(N_{d,i+1} - N_{d,i})} \\ b_{V,i} = \frac{\ell_{N,i} [V_{br}(\ell_{N,i+1}, N_{d,i}) - V_{br}(\ell_{N,i+1}, N_{d,i+1})] + \ell_{N,i+1} [V_{br}(\ell_{N,i}, N_{d,i+1}) - V_{br}(\ell_{N,i}, N_{d,i})]}{(\ell_{N,i+1} - \ell_{N,i})(N_{d,i+1} - N_{d,i})} \\ c_{V,i} = \frac{N_{d,i} [V_{br}(\ell_{N,i}, N_{d,i+1}) - V_{br}(\ell_{N,i+1}, N_{d,i+1})] + N_{d,i+1} [V_{br}(\ell_{N,i+1}, N_{d,i}) - V_{br}(\ell_{N,i}, N_{d,i})]}{(\ell_{N,i+1} - \ell_{N,i})(N_{d,i+1} - N_{d,i})} \\ d_{V,i} = \frac{N_{d,i} [\ell_{N,i} V_{br}(\ell_{N,i+1}, N_{d,i+1}) - \ell_{N,i+1} V_{br}(\ell_{N,i}, N_{d,i+1})] + N_{d,i+1} [\ell_{N,i+1} V_{br}(\ell_{N,i}, N_{d,i}) - \ell_{N,i} V_{br}(\ell_{N,i+1}, N_{d,i})]}{(\ell_{N,i+1} - \ell_{N,i})(N_{d,i+1} - N_{d,i})} \end{array} \right.$$

Il s’agit d’une équation de surface dont une représentation est donnée sur la figure III-III.2.2. Ce sont les valeurs des coefficients $a_{V,i}$, $b_{V,i}$, $c_{V,i}$, $d_{V,i}$ qui sont insérées dans ADS suivant le couple d’intervalles $([N_{d,i} ; N_{d,i+1}] ; [\ell_{N,i} ; \ell_{N,i+1}])$ choisi. La méthode

est identique pour les dix autres paramètres issus des lois non-linéaires $I(V)$ et $C(V)$. Elle est certes assez longue et fastidieuse à mettre en œuvre mais elle permet d'avoir continuité des différents paramètres en fonction de N_d et de ℓ_N et par conséquent de faciliter l'optimisation de la diode sous ADS.

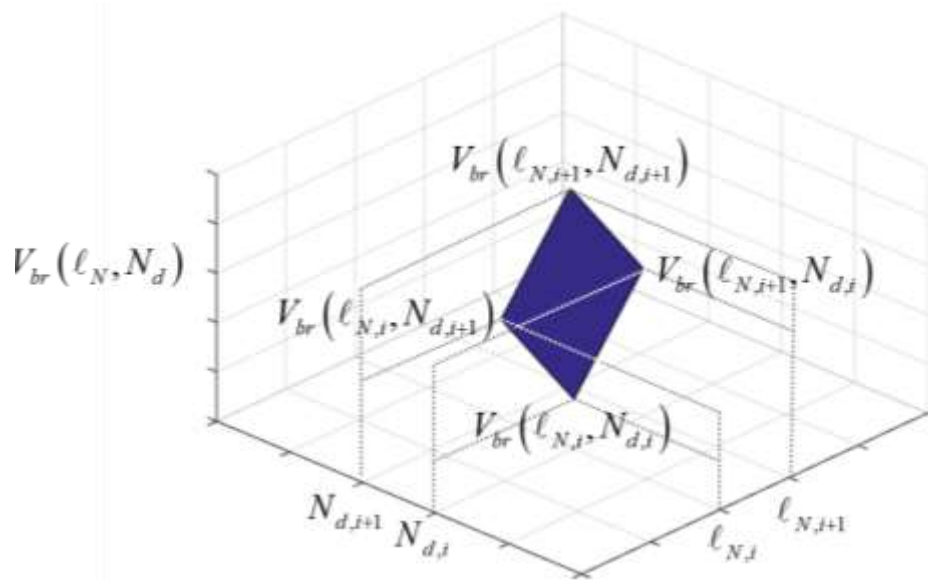


Figure III-III.2.2 – Représentation de la surface obtenue par interpolation bilinéaire sur $V_{br}(\ell_N, N_d)$ pour $N_d \in [N_{d,i} ; N_{d,i+1}]$ et $\ell_N \in [\ell_{N,i} ; \ell_{N,i+1}]$

- **Etape 5 : Simulation sous ADS**

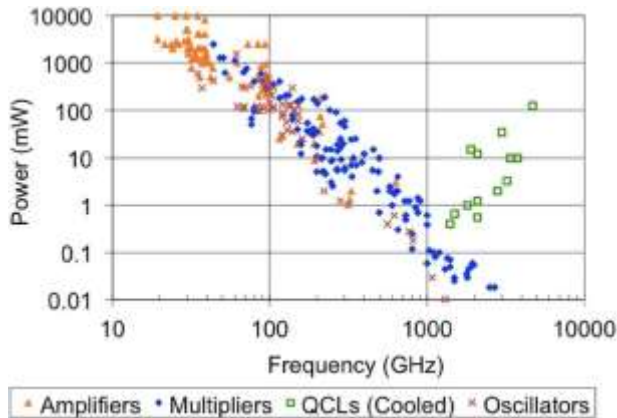
Que ce soit pour le multiplieur de fréquence ou le circuit de détection du chapitre IV, l'optimisation comporte deux objectifs :

- Une maximisation du rendement de conversion : les longueurs des stubs, supposés idéaux et sans pertes, sont systématiquement optimisées pour n'importe quelle configuration. D'autres éléments peuvent être optimisées en plus suivant l'étude.
- La tension minimale aux bornes de la diode ne peut dépasser la tension de claquage du composant : cette tension dépend du dopage et de la longueur de la zone N (section II-I.6).

Les choix sur la puissance d'entrée et la fréquence se sont appuyés sur la figure III-III.2.3. Celle-ci représente l'état de l'art de la puissance de sortie de différentes sources THz réalisées à partir d'amplificateurs, de multiplieurs de fréquences basés sur des diodes Schottky, de lasers à cascade quantique (refroidi) et d'autres sources tels que des diodes Gunn, des diodes à effet tunnel résonant ou encore des photo-mélangeurs [Hes15].

On propose de choisir les couples fréquence/puissance à l'état de l'art du tableau de la figure **III-III.2.3** pour les différentes configurations étudiées.

BROUILLON



Fréquence	P_{\max}
300 GHz	~ 15 dBm
500 GHz	~ 10 dBm
800 GHz	~ 0 dBm
1 THz	~ -3 dBm

Figure III-III.2.3 – Etat de l’art de la puissance de sortie de différentes sources THz pour plusieurs fréquences [Hes15]

3. Optimisation de la diode Schottky avec un profil de dopage constant

a. Optimisation sur GaAs

L’optimisation des diodes Schottky pour les multipliers de fréquence au THz a fait l’objet de nombreux articles dans la littérature [Sch01a] [Sch01b] [Lou96]. L’article [Lou96] a proposé une méthode d’optimisation assez simple en trois étapes :

- **Optimisation de la longueur de la zone N** : elle est basée sur la forme d’onde typique de la tension aux bornes de la diode en fonction du temps. La zone de charge d’espace ne pouvant varier plus rapidement que la vitesse maximale des porteurs v_{\max} , l’excursion maximale de la zone de charge d’espace ΔW peut s’approcher par :

$$\Delta W = \frac{v_{\max}}{2f_{out}} \quad (\text{III-III.2.1})$$

Où f_{out} est la fréquence de sortie du multiplieur.

La longueur optimale de la couche active est déduite en ajoutant quelques dizaines de nanomètres à l’excursion maximale de la ZCE ΔW .

- **Optimisation du dopage de la zone N** : une augmentation du dopage présente l’avantage de diminuer la résistance série (de la zone non déplétée) et de supporter des courants plus importants mais l’excursion en tension aux bornes de la diode est alors limitée par la tension de claquage V_{br} due au phénomène d’ionisation par choc (section II-I.6), limitant ainsi l’excursion de la ZCE. Le dopage optimal est choisi de telle sorte

que la tension V_{br} ne soit pas atteinte tout en ayant une zone N complètement déplétée :

$$N_d = \frac{F_c \epsilon_{sc}}{q \ell_N} \quad (\text{III-III.2.2})$$

Avec F_c le champ électrique critique qui dépend du dopage. Cette expression suppose que la ZCE s'étend, pour le champ électrique F_c , sur toute la zone N.

- **Optimisation du diamètre de l'anode** : une simulation de type équilibrage harmonique permet, suivant la puissance et la fréquence d'entrée considérée de déduire la surface et donc le diamètre de l'anode qui maximise le rendement du multiplicateur de fréquence.

Avec une vitesse maximale $v_{\max} = 2,9 \times 10^5 \text{ m.s}^{-1}$ [Lou94] et une fréquence de sortie $f_{\text{out}} = 1 \text{ THz}$, l'article [Lou96] suggère une longueur optimale pour la zone N de 200 nm et un dopage optimal de $2 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$. Pour une puissance d'entrée de 10 dBm, une simulation de type HB pour le circuit de la figure III-II.4.1 avec le modèle complet de la diode donne une surface optimale d'environ $10 \mu\text{m}^2$ pour une tension de polarisation de -4,2 V avec un rendement de 80,2 %. Les courants (conduction, déplacement et total) ainsi que la tension aux bornes de la diode pour cette configuration sont représentés sur la figure III-III.3.1. Le courant de conduction est confronté à une simulation MC en excitant la diode avec la même tension.

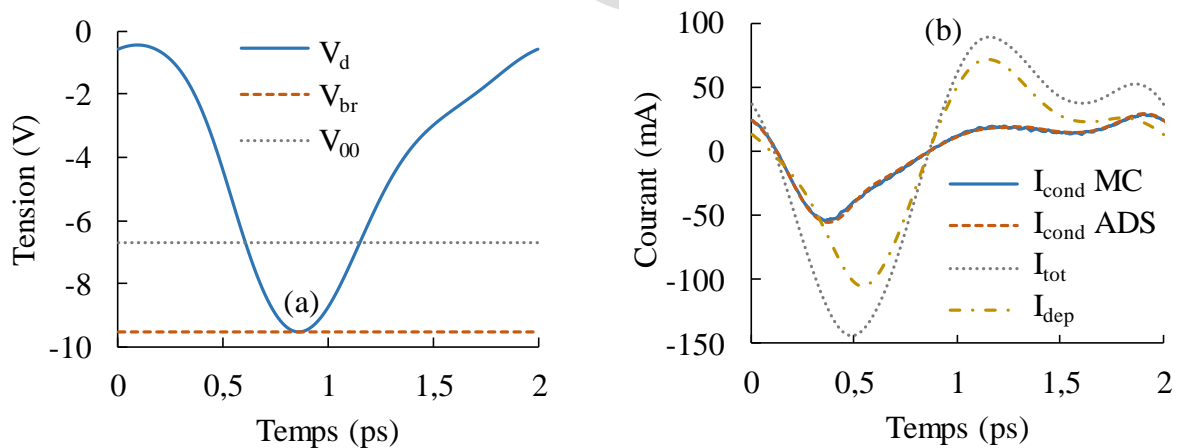


Figure III-III.3.1 – (a) Evolution de la tension V_d aux bornes de la diode en fonction du temps. V_{br} représente la tension de claquage et V_{00} la tension pour laquelle la zone N est complètement déplétée. (b) Evolution temporelle du courant total, du courant de déplacement et du courant de conduction déduit des simulations HB sous ADS et comparé au simulateur MC

La tension aux bornes de la diode sur la figure III-III.3.1a est d'une part toujours négative afin de ne pas atteindre la zone où la non-linéarité résistive intervient et d'autre part demeure toujours supérieure à la tension de claquage V_{br} (environ égale -9,5 V). On a également représenté la tension V_{00} pour laquelle la zone N est complètement déplétée, montrant ainsi que la zone N^+ est légèrement déplétée (sur 5 nm environ – figure III-III.3.2a) pendant une partie du temps. La somme des pertes par réflexion, des pertes dans les harmoniques en sortie ainsi que des pertes dans la résistance dynamique sont inférieures à 1 % (par rapport à la puissance d'entrée). L'essentiel des pertes est dû à la zone N non déplétée (environ 17 % de la puissance d'entrée) et dans une moindre mesure à la zone N^+ (2 % de la puissance d'entrée). Sur la figure III-III.3.1b, on constate une très bonne adéquation entre le courant de conduction en MC et sous ADS, ce qui illustre la pertinence du schéma équivalent pour cette configuration. Bien que l'excursion en tension aux bornes de la diode soit élevée (presque 10 V), la vitesse de modulation de la ZCE (figure III-III.3.2a) ne dépasse la vitesse maximale des porteurs ($\sim 2,9 \times 10^5 \text{ m.s}^{-1}$ [Lou94]) que pendant une très faible fraction du temps. Le courant de conduction n'est donc pas affecté par ce phénomène (section II-III.3).

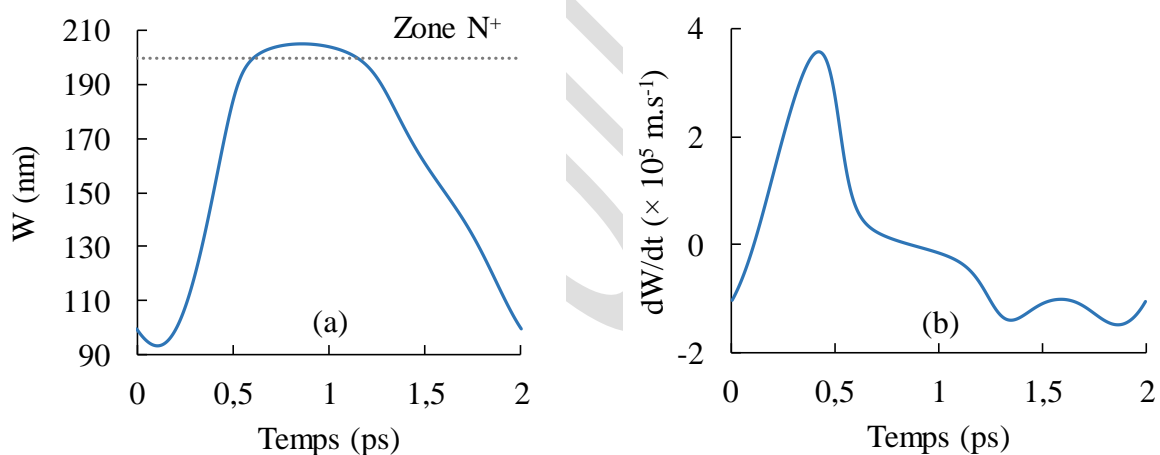


Figure III-III.3.2 – (a) Evolution de la ZCE et (b) Vitesse de modulation de la ZCE en fonction du temps dW/dt

Cette optimisation ne tient pas compte du circuit dans lequel la diode est insérée. L'optimisation de la diode sous ADS pour $\ell_N = 200 \text{ nm}$ nous donne d'ailleurs une déplétion partielle de la zone N^+ pendant une fraction non négligeable du temps, ce qui n'est pas pris en compte ici. Bien que cette optimisation soit assez grossière, le dopage optimal pour $\ell_N = 200 \text{ nm}$ nous donne également une valeur proche de $2 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$. Nous verrons par la suite que ce couple $(\ell_N ; N_d)$ n'est pas celui qui donne le meilleur rendement.

On propose maintenant plusieurs études sur l'influence de différents paramètres sur le rendement du multiplieur. Commençons par la surface et la longueur de la zone N.

Influence de la surface et de la longueur de la zone N

Le dopage est fixé à $2 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ et la tension de polarisation est systématiquement optimisée pour obtenir un rendement maximum. La figure III-III.3.3 représente l'évolution du rendement en fonction de la surface pour plusieurs longueurs de la zone N à une fréquence de 800 GHz et une puissance d'entrée de 0 dBm. On constate, quelle que soit la longueur de la zone N, qu'il existe une surface optimale permettant de maximiser le rendement. Le rendement maximal obtenu lors de cette étude paramétrique est atteint pour une longueur de 50 nm et vaut 80 %.

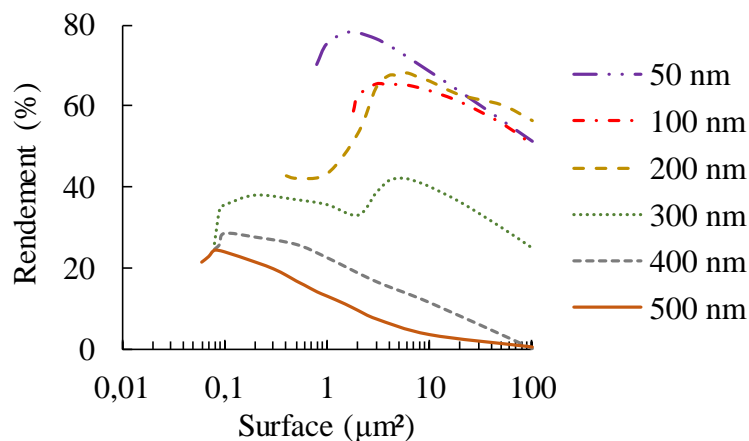


Figure III-III.3.3 – Evolution du rendement en fonction de la surface pour plusieurs longueurs de la zone N à une fréquence d'entrée de 800 GHz et une puissance d'entrée de 0 dBm. Le dopage dans la zone N est égal à $2 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ et la tension de polarisation de polarisation a été optimisée pour maximiser le rendement.

Analysons de plus près quelques configurations. On note pour la suite V_{\min} la tension minimale aux bornes de la diode, V_{\max} la tension maximale aux bornes de la diode, V_d0 la tension de polarisation, V_{00} la tension pour laquelle la zone N est complètement déplétée et V_{br} la tension de claquage.

Nous choisissons dans un premier temps de présenter les résultats pour $\ell_N = 50 \text{ nm}$. La figure III-III.3.4 donne l'évolution des différentes tensions énoncées précédemment en fonction de la surface ainsi que les puissances dissipées dans chacun des éléments du circuit.

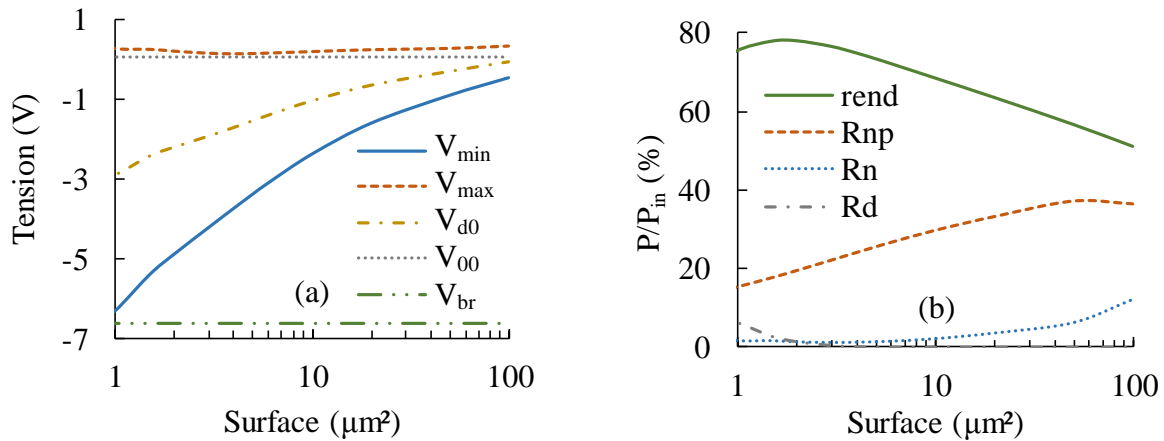


Figure III-III.3.4 – (a) Evolution de V_{\min} , V_{\max} , V_{d0} , V_{00} et de V_{br} en fonction de la surface (b) Rendement (rend) et puissance dissipée dans la résistance dynamique (Rd), dans la résistance série de la ZQN (Rn) et de la zone N^+ (Rnp) normalisée par rapport à la puissance d’entrée en fonction de la surface. La zone N mesure 50 nm.

- La diminution de la surface de la diode entraîne une augmentation de l’excursion en tension aux bornes de la diode avec une amplitude pic à pic d’environ 7 V pour 1 μm^2 . Pour une fréquence de 800 GHz, une telle amplitude devrait commencer à faire apparaître un transfert des porteurs en vallée L avec une masse effective plus élevée, ce que ne prend pas en compte le modèle électrique.
- Les pertes par réflexions et les pertes dans les harmoniques en sortie sont négligeables devant les pertes dans les résistances séries et dans la résistance dynamique.
- La zone N est quasiment toujours déplétée ($V_{\max} \simeq V_{00}$) et la modulation de la ZCE se fait essentiellement dans la zone N^+ sur une quinzaine de nanomètres environ pour une surface de 2 μm^2 . Les pertes sont donc essentiellement dues à la puissance dissipée dans la résistance série de la zone N^+ .
- Le rendement maximum atteint 78 % pour une surface d’anode de 2 μm^2 .
- En dessous de 2 μm^2 , le rendement diminue à cause des pertes dans la résistance dynamique. En effet, la tension aux bornes de la diode est largement positive pendant une partie du temps.
- Quelle que soit la surface entre 1 et 100 μm^2 , la tension de claquage n’est jamais atteinte.

Analysons les mêmes courbes mais pour une longueur $\ell_N = 500$ nm (figure III-III.3.5).

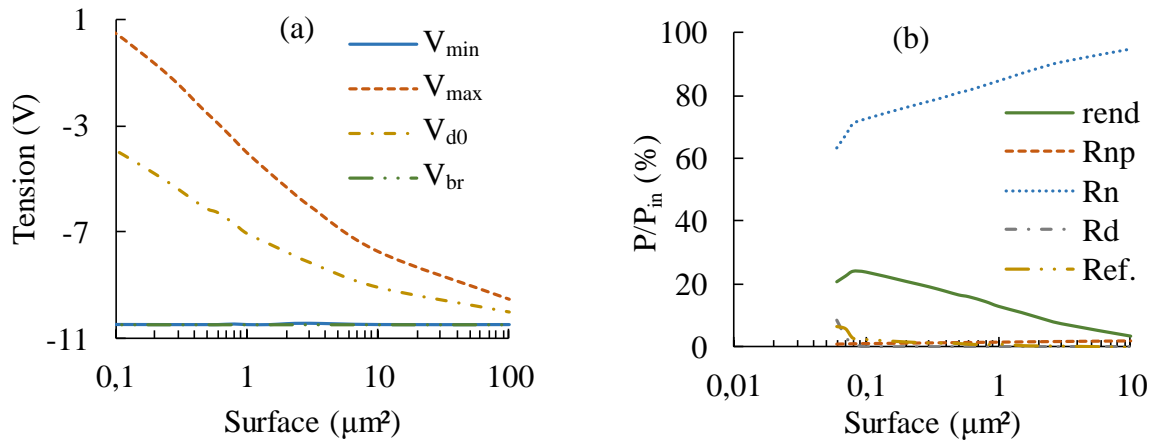


Figure III-III.3.5 – (a) Evolution de V_{\min} , V_{\max} , V_{d0} et de V_{br} en fonction de la surface (b) Rendement (rend) et puissance dissipée dans la résistance dynamique (Rd), dans la résistance série de la ZQN (Rn) et de la zone N^+ (Rnp) normalisée par rapport à la puissance d'entrée en fonction de la surface. La zone N mesure 500 nm.

- Le rendement maximum atteint 24,1 % pour une surface de $0,8 \mu\text{m}^2$. Cette valeur ne pourra jamais être atteinte en pratique à cause du transfert des porteurs en vallée L qui n'est pas modélisé électriquement.
- La tension pour laquelle la zone N est complètement déplétée vaut -34 V environ. Cette tension est largement plus faible que la tension de claquage ($-10,5 \text{ V}$) et ne sera du coup jamais atteinte. On peut en conclure qu'il existera toujours une partie non déplétée de la zone N qui contribuera aux pertes et à la dégradation du rendement.
- Quelle que soit la surface, la tension minimale pour optimiser le rendement est toujours égale à V_{br} afin de limiter les pertes dans les résistances séries (zone N).
- La majeure partie des pertes est due à la zone N qui n'est jamais déplétée au cours du temps. En effet, pour la tension V_{br} , la ZCE s'étend jusqu'à environ 284 nm, laissant ainsi 216 nm de zone jamais déplétée.
- En dessous de $0,8 \mu\text{m}^2$, le rendement diminue à cause des pertes dans la résistance dynamique et également à cause des pertes par réflexions. En effet, la tension aux bornes de la diode devient positive et supérieure à la tension de coude pendant une partie du temps.

La prochaine étude concerne l'influence de la longueur et du dopage de la zone N.

Influence de la longueur et du dopage de la zone N

On propose maintenant de faire varier le dopage de la zone N dans la gamme 10^{17} – 10^{18} cm^{-3} pour des longueurs de la zone faiblement dopée sous le contact Schottky comprises entre 50 nm et 300 nm afin d'observer l'évolution du rendement pour une puissance de 10 dBm et une fréquence de 500 GHz. La surface et la tension de polarisation sont optimisées pour chaque configuration.

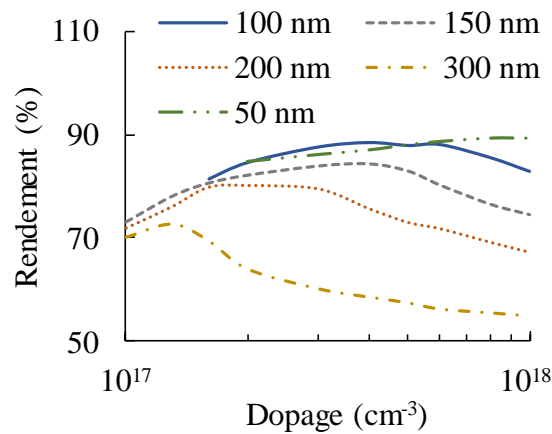


Figure III-III.3.6 – Rendement du doubleur de fréquence en fonction du dopage pour plusieurs longueurs entre 50 nm et 300 nm à une fréquence de 500 GHz

L'évolution du rendement en fonction du dopage pour plusieurs longueurs de la couche dopée N est représentée sur la figure III-III.3.6. Pour chaque longueur, il existe un dopage optimal permettant de maximiser le rendement. Le dopage optimal augmente quand la longueur de la zone N diminue. Ce résultat n'est pas étonnant. En effet, une augmentation du dopage réduit l'extension de ZCE pour une même excursion en tension aux bornes du dispositif, laissant possiblement une partie de la zone N jamais déplétée au cours du temps. La réduction de la zone N permet d'éliminer cette zone. Le rendement le plus élevé (89,2 %) est atteint pour une longueur de 50 nm et un dopage de 8×10^{17} cm^{-3} dans la zone N. La figure III-III.3.7 représente le dopage optimal en fonction de la longueur de la zone N pour plusieurs points de fréquence. La fréquence et la puissance d'entrée ne semble pas modifier significativement le dopage optimal pour une longueur donnée.

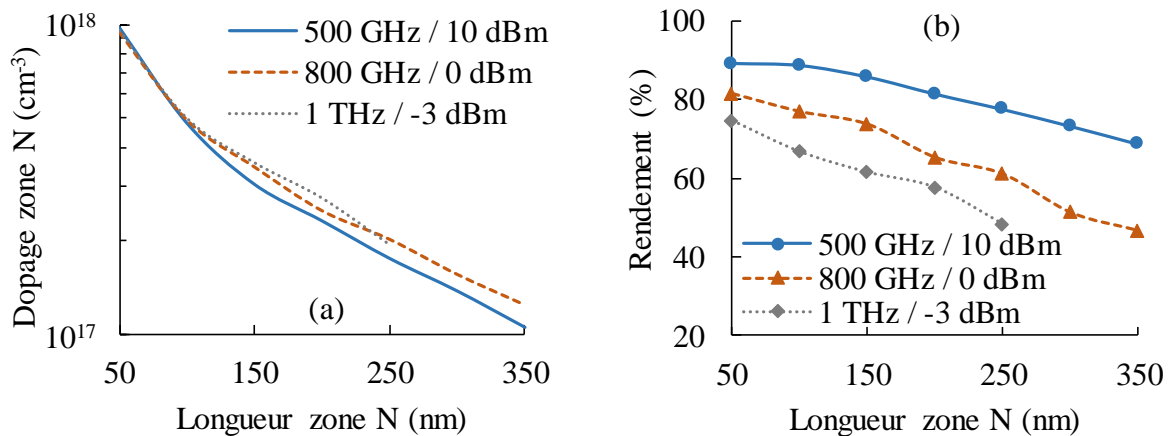


Figure III-III.3.7 – (a) Valeur optimale du dopage de la zone N en fonction de la longueur de la zone N et (b) rendement en fonction de la longueur de la zone N.

Influence des effets 2D

La simulateur MC a été développé pour modéliser des diodes Schottky 1D. Nous proposons dans cette section de quantifier l'influence de la capacité parasite induite par les effets 2D sur le rendement des multiplieurs (section II-III.1).

Fréquence et puissance d'entrée	500 GHz / 10 dBm	800 GHz / 0 dBm	1 THz / -3 dBm
C_p (fF)	2,07	1,42	1,37
C_{j0} (fF)	21,6	9,5	8,8
Surface optimale (μm^2)	9,2	4,0	3,7
Rendement sans C_p (%)	87,9	76,4	66,6
Rendement avec C_p (%)	85,1	65,7	51,8
Ecart (%)	3,3	16	28,6

Tableau III-III.3.1 – Influence de la capacité parasite sur le rendement du multiplieur de fréquence pour trois points de fréquence. La longueur de la zone N est égale à 100 nm.

Pour chaque configuration, la capacité parasite représente environ 10 % de la capacité de jonction à 0V, pouvant entraîner une diminution de presque 30 % sur le rendement à 1 THz pour une puissance d'entrée à -3 dBm.

Il aurait fallu mener l'étude de l'optimisation de la surface en intégrant les capacités parasites (2D ou 3D) mais l'étude qui aurait permis la tabulation des deux contributions parasites n'a pas été possible, faute de temps.

b. Comparaison avec d'autres semi-conducteurs

Toutes les simulations possibles dans l'espace des configurations pour les autres semi-conducteurs – InGaAs, GaSb, GaN – n'ont pu être menées. En effet, l'insertion des valeurs sous ADS pour l'interpolation bilinéaire de l'ensemble des paramètres est assez longue et fastidieuse. Une étude non exhaustive est donc proposée dans cette partie en comparant quelques configurations sur les différents SC. Le tableau III-III.3.2 récapitule les configurations simulées et les rendements obtenus. Nous nous sommes focalisés sur deux couples fréquence/puissance : 500 GHz / 10 dBm et 1 THz / -3dBm. La valeur de α a été fixée à 1,5 nm pour InGaAs, GaSb et GaN. Nous verrons dans le chapitre IV que pour $\alpha = 1,5$ nm ou $\alpha = 3,5$ nm, la capacité de déplétion n'est quasiment pas modifiée en fonction de la tension.

	Longueur zone N	Dopage optimal zone N	Rendement 500 GHz 10 dBm	Rendement 1 THz -3 dBm
GaAs	200	$2,3 \times 10^{17}$	81,3	--
GaAs	200	$2,8 \times 10^{17}$	--	57,5
InGaAs	200	$\sim 4 \times 10^{17}$	50,1	--
InGaAs	200	$\sim 4 \times 10^{17}$	--	23,9
GaSb $\alpha = 1,5$ nm	200	10^{17}	79,2	--
GaSb $\alpha = 1,5$ nm	200	10^{17}	--	69,7
GaN $\alpha = 1,5$ nm	200	10^{17}	65,9	--
GaN $\alpha = 1,5$ nm	200	10^{17}	--	30,5

Tableau III-III.3.2 – Confrontation des rendements pour différentes configurations

InGaAs : bien que les propriétés de transport de l'InGaAs soient meilleures que GaAs, ce SC ne semble pas adapté pour la multiplication de fréquence en grande partie à cause de sa faible hauteur de barrière quel que soit le métal utilisé. La tension de coude étant plus faible, c'est le mode « varistor » qui est aussi mis à contribution pendant une partie du temps, dégradant ainsi les performances du multiplieur. 20 % de la puissance d'entrée est perdue à cause du courant de fuite en inverse et du courant de conduction en direct. Pour une longueur de la zone N égale à 200 nm à une fréquence de 500 GHz, les simulations sous ADS donnent un rendement d'environ 50 % pour un dopage optimal de $4 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$, une surface optimale de $1 \mu\text{m}^2$ et une tension de polarisation optimale de -0,6 V. Le rendement était supérieur à 80 % pour une configuration similaire sur GaAs. 20 % de la puissance d'entrée est perdue à cause du courant de fuite en inverse et du courant de conduction en direct. Par ailleurs, bien que la tension V_{br} d'InGaAs soit plus faible que GaAs, la tension minimale aux bornes de la diode n'atteint jamais la tension de claquage afin de limiter les effets du courant en inverse.

GaSb : les rendements obtenus sont comparables, voir meilleurs que ceux du GaAs avec 69,3 % à une fréquence de 1 THz pour une puissance d'entrée de -3 dBm. Il convient de nuancer ces résultats et de questionner la modélisation électrique, en particulier pour ce SC. En effet, le faible écart entre la vallée centrale et la vallée L fait que les porteurs sont majoritairement dans la vallée L dès les faibles énergies, ce qui n'est pas modélisé électriquement. Par ailleurs, les résistances série associée à la zone N^+ est plus faible que pour les autres SC grâce au dopage élevé de cette couche.

GaN : L'essentiel des pertes se situe dans la résistance série à cause de la faible mobilité électronique de ce SC. Pour une puissance d'entrée de 10 dBm à 500 GHz, le rendement atteint 65,9 %. Les tensions de claquage pour ce SC sont telles qu'elles ne constituent pas une limitation pour le fonctionnement du multiplieur. Le meilleur rendement a été obtenu pour un dopage égal à 10^{17} cm^{-3} en fixant la longueur de la zone N à 200 nm. La bonne tenue en puissance avec ce SC pourrait conduire à des conceptions simplifiées des différents étages de multiplication actuels pour la création de sources THz, par exemple en utilisant des circuits avec une seule diode plutôt que plusieurs paires de diodes dans une configuration dite « balancée ». Certaines conceptions proposent 6 voire 8 diodes pour les premiers étages de multiplication sur GaAs [War04].

4. Modification du profil de dopage

Lorsque la résistance série n'est pas considérée, le rendement des multiplieurs avec un élément non-linéaire réactif (capacité ou inductance) peut atteindre 100% d'après les lois de Manley-Rowe [Man56], et ce, quel que soit le « degré » de non-linéarité de la capacité $C(V)$. Cependant, la présence inévitable d'éléments résistifs réduit le rendement des multiplieurs de fréquence.

Dans son livre [Gol17], Golio évoque la non-linéarité de la capacité comme un facteur impactant le rendement des multiplieurs à base de diodes Schottky. Pour ce faire, un profil de dopage de type « hyper-abrupte » peut être utilisé avec une augmentation progressive du dopage en se rapprochant du côté du contact Schottky. Ce type de profil a déjà été utilisé dans les articles [Shi61], [Lun83] et plus récemment [Heo15]. On propose d'évaluer l'impact de ce profil sur la caractéristique $C_d(V)$ et sur les performances du multiplieur pour une configuration donnée. L'étude sera uniquement menée sur GaAs pour quelques configurations.

a. Modèle analytique de la capacité

On suppose un dopage hyper-abrupte tel que la concentration d'impuretés dans la zone N s'écrit :

$$N(x) = N_0 + N_1 \exp(-x/\lambda) \quad (\text{III-III.4.1})$$

Le dopage au niveau du contact Schottky vaut $N_0 + N_1$ et tend vers N_0 lorsqu'on s'en éloigne. Trois paramètres sont alors réglables : N_0 , N_1 et la longueur caractéristique λ permettant d'ajuster la distance sur laquelle la variation de dopage s'effectue.

En faisant l'approximation de complète déplétion et en résolvant l'équation de Poisson, la capacité C_d vérifie l'équation (III-III.4.2) [Shi61] :

$$\frac{qN_0}{2\varepsilon_{sc}} \left(\frac{\varepsilon_{sc}}{C_d} \right)^2 + \frac{qN_1\lambda}{\varepsilon_{sc}} \left[\lambda \left(1 - \exp\left(-\frac{\varepsilon_{sc}}{C_d\lambda} \right) \right) - \frac{\varepsilon_{sc}}{C_d} \exp\left(-\frac{\varepsilon_{sc}}{C_d\lambda} \right) \right] = V_{bi} - V \quad (\text{III-III.4.2})$$

A titre d'illustration, la figure III-III.4.1 représente l'évolution de la capacité calculée numériquement à partir de l'équation (III-III.4.2) comparée à celle obtenue avec le modèle MC pour un dopage hyper-abrupte en prenant $N_0 + N_1 = 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, $N_0 = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ et $\lambda = 50 \text{ nm}$. La longueur de la zone dopée N est de 250 nm. On constate une très bonne adéquation entre le modèle analytique de la capacité de déplétion et celle obtenue à partir du simulateur MC.

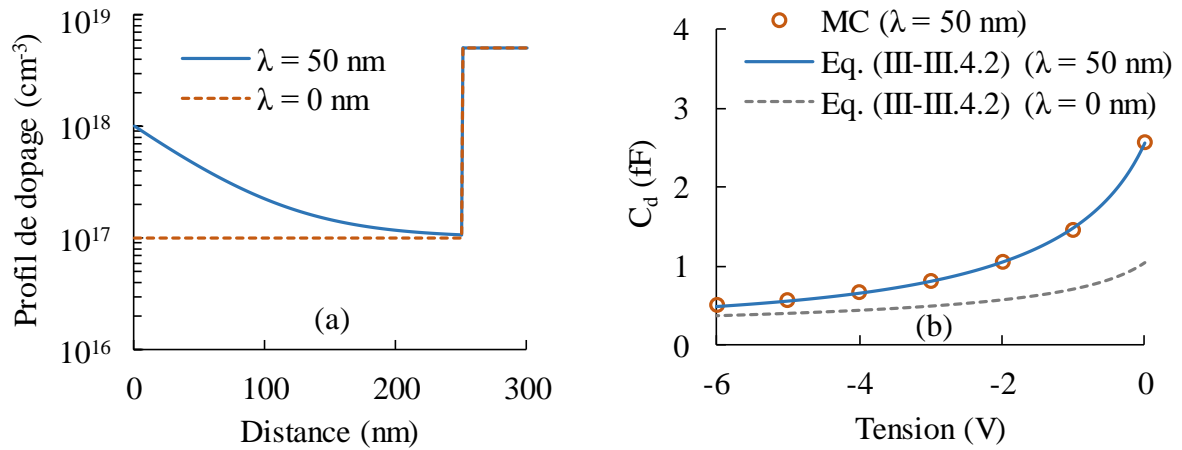


Figure III-III.4.1 – (a) Evolution du profil du dopage en fonction de la distance et (b) évolution de la capacité de déplétion C_d fonction de la tension pour $\lambda = 0$ nm et $\lambda = 50$ nm

Dans le cas d'un profil de dopage non-uniforme, la résistance de la couche N non déplétée est donnée par [Lun83] :

$$R_N(V) = \int_{w(V)}^{\ell_N} \frac{dx}{q\mu_N(N(x))N(x)A} \quad (\text{III-III.4.3})$$

La résistance série dépendra donc de la loi $C(V)$ par l'intermédiaire de la ZCE $W(V)$, du profil de dopage, et de la mobilité (variant spatialement avec le dopage).

Pour une longueur $\ell_N = 250$ nm, le dopage optimal dans le cas d'un profil uniforme vaut approximativement 2×10^{17} cm⁻³. Un profil de dopage hyper-abrupte avec $N_0 + N_1 = 2 \times 10^{18}$ cm⁻³, $N_0 = 2 \times 10^{17}$ cm⁻³ et deux valeurs de λ (25 nm et 50 nm) a été choisi. La capacité de déplétion C_d et la résistance série R_N en fonction de la polarisation ont été représentées sur la figure III-III.4.2.

Bien que la non-linéarité de la capacité soit plus prononcée avec ce profil de dopage, on pressent qu'avec les configurations choisies, le rendement ne pourra être meilleur que celui avec le profil de dopage constant :

- L'optimisation de la diode pour le profil de dopage constant ($\lambda = 0$ nm) avec une zone N de 250 nm conduisait à une tension minimale aux bornes de la diode égale à la tension de claquage. On remarque d'ailleurs que la ZCE est entièrement déplétée pour la tension de claquage (la résistance série est quasiment nulle), permettant ainsi de limiter l'effet de la résistance série dans la ZQN. En passant à $\lambda = 25$ nm ou $\lambda = 50$ nm, la tension de claquage diminue (en valeur absolue) et par conséquent l'excursion

en tension également (tableau III-III.4.1). Par ailleurs, la résistance série est assez élevée pour cette tension-là car la ZCE n'est pas complètement déplétée.

- Que ce soit pour $\lambda = 25$ nm ou $\lambda = 50$ nm, la résistance série est toujours plus élevée que le cas du profil de dopage uniforme. Pour un point de polarisation donné, le dopage étant globalement plus élevé dans la zone N, l'extension de la ZCE est plus faible que pour $\lambda = 0$ nm (dopage uniforme) et la résistance série est donc plus élevée.

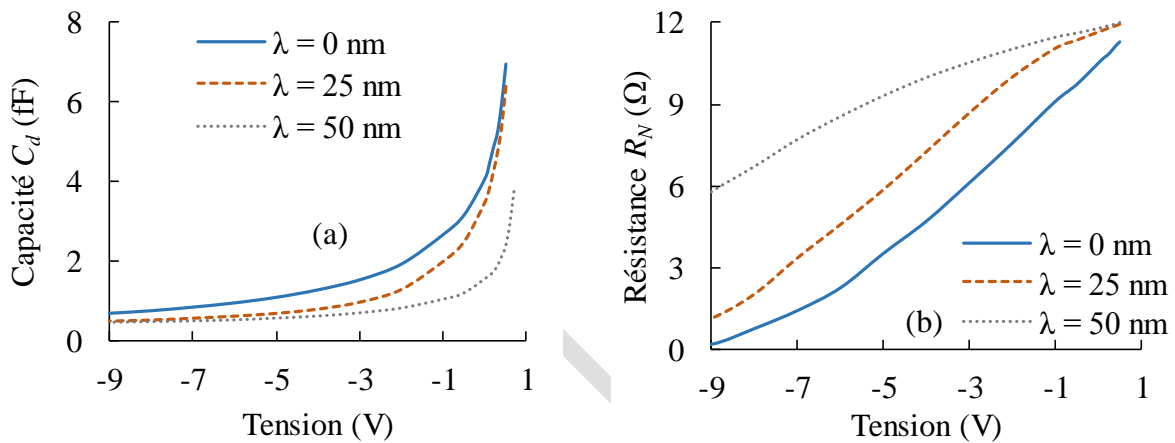


Figure III-III.4.2 – Evolution de (a) la capacité C_d et de (b) la résistance série de la zone N non déplétée en fonction de la tension pour trois valeurs du paramètres λ avec $N_0 + N_1 = 2 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, $N_0 = 2 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$. Une surface par défaut de $1 \mu\text{m}^2$ a été choisie.

	$\lambda = 0$ nm	$\lambda = 25$ nm	$\lambda = 50$ nm
V_{br}	-10,3	-10,1	-8,4

Tableau III-III.4.1 – Tension de claquage pour les différentes configurations

Les conclusions étant assez évidentes sur ces configurations, aucune simulation sous ADS n'a été menée. On aurait certainement pu diminuer la longueur de la zone N pour éviter qu'une partie ne soit jamais déplétée au cours du temps. Il faudrait réaliser un travail plus approfondi en étudiant d'autres configurations, notamment sur la valeur des dopages. En effet, l'espace des configurations est agrandi avec ce nouveau profil puisque l'expression du dopage en fonction de la distance fait intervenir trois paramètres (N_0 , N_1 et λ).

IV. Conclusions

La diode Schottky constitue la pierre angulaire des multiplieurs de fréquence au THz. Ses caractéristiques optimales ne peuvent être choisies indépendamment de son environnement. Et cela d'autant plus que la fonction réalisée avec le composant opère dans la gamme THz.

Une optimisation multidimensionnelle du composant dans le cadre d'un doubleur de fréquence a été menée en faisant le lien entre les éléments du schéma équivalent électrique et les paramètres physiques de la diode. Ce type d'optimisation aurait été difficilement envisageable directement avec le code MC en raison des temps de simulation.

Les paramètres qui ont été fixés pour limiter l'espace des configurations sont : la longueur et le dopage de la zone N^+ , la hauteur de barrière pour un couple métal/SC donné. Les paramètres qui ont été optimisés sont : la longueur et le dopage de la zone N^+ , la surface. La tension de polarisation constitue également un élément de l'optimisation du circuit.

Une stratégie d'optimisations en cinq étapes a été utilisée. Tout d'abord, des simulations MC sont menées pour l'ensemble des configurations choisies suivant la longueur et le dopage de la zone N. Celles-ci permettent d'obtenir la variation spatiale du potentiel, du champ électrique et de la concentration de porteurs pour plusieurs points de polarisation. Le potentiel donne accès à la caractéristique statique, le champ électrique à la tension de claquage du composant et la concentration de porteurs à la capacité de déplétion. Par une interpolation bilinéaire sur la longueur et le dopage de la zone N, tous les paramètres des lois non-linéaires correspondant à $C(V)$, $I(V)$ et V_{br} ont été implémentés sous ADS. L'objectif principal de l'optimisation est de maximiser le rendement de conversion tout en gardant la tension minimale aux bornes de la diode supérieure à la tension V_{br} .

Nous nous sommes rendus compte qu'il existait systématiquement une surface optimale. Deux paramètres ont donc systématiquement été optimisés simultanément afin de maximiser le rendement du circuit : la tension de polarisation et la surface. L'optimisation conjointe de ces deux paramètres permet de faire en sorte que l'excursion en tension aux bornes de la diode ne dépasse pas la tension de claquage et qu'elle n'atteigne pas le mode « varistor » en direct.

Pour une longueur de zone N donnée, il existe un dopage optimal permettant de maximiser le rendement du doubleur. La puissance et la fréquence ne semble pas impacter de manière sensible cette valeur du dopage optimal. Pour le GaAs, le meilleur rendement a été obtenu pour une diode dopée à $8 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ avec une longueur de 50 nm, atteignant quasiment 90 %.

Parmi tous les SC simulés, le GaAs reste le SC le plus intéressant. La faible hauteur de barrière de l'InGaAs et sa faible tenue en tension n'en font pas un bon candidat pour cette application. Sa tension de claquage est plus faible que GaSb et la diode conduit dès les faibles tensions en direct. L'excursion en tension aux bornes de la diode est donc réduite, limitant ainsi le rendement du circuit même si les propriétés de transport de ce SC sont intéressantes. Les rendements du circuit pour le GaSb sont comparables au GaAs mais les limites du modèle électrique font que ces valeurs sont à nuancer à cause du faible écart entre la vallée Γ et la vallée L. Le gros point faible du GaN est la faible mobilité des électrons comparée à celle de GaAs. Son principal avantage reste sa tension de claquage élevée. Ce SC a été surtout envisagé pour de fortes puissances à basse fréquence dans le premier étage de multiplication pour éviter l'utilisation de plusieurs paires de diodes sur GaAs dans une configuration « balancée » [Sil08].

L'optimisation a été menée sur une structure de doubleur de fréquence simple. Il faudrait étudier de plus près les structures dites « balancées » qui ont été présentées succinctement dans la section III-II.4.2 et qui seraient plus simple à mettre en œuvre.

Bibliographie

- [ADS] <https://www.keysight.com/en/pc-1297113/advanced-design-system-ads?cc=FR&lc=fr>
- [Dun09] G. E. Dunaevskii et V. I. Perfil'ev, « Analysis and synthesis of varactor frequency doublers. Part 1. Basic relationships », *Russ. Phys. J.*, vol. 52, n° 10, p. 1052-1059, oct. 2009.
- [Gol17] M. Golio, *RF and Microwave Semiconductor Device Handbook*. CRC Press, 2017.
- [Heo15] J.-W. Heo, S. Hong, S.-G. Choi, A. ul H. S. Rana, et H.-S. Kim, « Characteristics of GaAs varactor diode with hyperabrupt doping profile », *Phys. Status Solidi A*, vol. 212, n° 3, p. 612-616, mars 2015.
- [Hes15] J. L. Hesler et T. Crowe, « High-power solid-state terahertz sources », SPIE, 2015
- [Jin15] C. Jin, « GaN Schottky diodes for signal generation and control », Thèse, Technische Universität, Darmstadt, 2015.
- [Lip98] R. E. Lipsey et S. H. Jones, « Accurate design equations for 50-600 GHz GaAs Schottky diode varactor frequency doublers », *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. 45, n° 9, p. 1876-1882, sept. 1998.
- [Lou94] J. T. Louhi et A. V. Räisänen, « On the modelling of the millimeter wave Schottky varactor », *Proceedings of the Fifth International Symposium on Space Terahertz Technology*, mai 1994
- [Lou96] J. T. Louhi et A. V. Raisanen, « Optimization of the Schottky varactor for frequency multiplier applications at submillimeter wavelengths », *IEEE Microw. Guid. Wave Lett.*, vol. 6, n° 6, p. 241-242, juin 1996.
- [Lun83] K. Lundien, R. J. Mattauch, J. Archer, et R. Malik, « Hyperabrupt Junction Varactor Diodes for Millimeter-Wavelength Harmonic Generators », *IEEE Trans. Microw. Theory Tech.*, vol. 31, n° 2, p. 235-238, févr. 1983.
- [Maa03] S. A. Maas, *Nonlinear Microwave and RF Circuits*. Artech House, 2003.
- [Mae99] A. Maestrini, *Modélisation et conception de multiplicateurs de fréquence utilisant des diodes planaires aux longueurs d'onde millimétriques et submillimétriques*, Thèse, Université de Bretagne Occidentale, 1999.
- [Man56] J. M. Manley et H. E. Rowe, « Some General Properties of Nonlinear Elements-Part I. General Energy Relations », *Proc. IRE*, vol. 44, n° 7, p. 904-913, juill. 1956.
- [Mor16] D. Moro-Melgar *et al.*, « Monte Carlo Study of 2-D Capacitance Fringing Effects in GaAs Planar Schottky Diodes », *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. 63, n° 10, p. 3900-3907, oct. 2016.

- [Opr10] I. Oprea, A. Walber, O. Cojocari, H. Gibson, R. Zimmermann, et H. L. Hartnagel, « 183 GHz miwer on InGaAs Schottky diodes », *21st International Symposium on space terhartz technology*, mars 2010.
- [Pag58] C. H. Page. « Harmonic Generation with Ideal Rectifiers », *Proc. IRE*, Vol. 46, No. 10, pp. 1738–1740, Oct. 1958.
- [Pol92] A. Y. Polyakov, M. Stam, A. G. Milnes, et T. E. Schlesinger, « Electrical properties of GaSb Schottky diodes and p-n junctions », *Mater. Sci. Eng. B*, vol. 12, n° 4, p. 337-343, févr. 1992.
- [Rho88] E. H. Rhoderick et R. H. Williams, *Metal-semiconductor contacts*. Clarendon Press, 1988.
- [Sch01a] E. Schlecht, F. Maiwald, G. Chattopadhyay, S. Martin, et I. Mehdi, « Design considerations for heavily-doped cryogenic Schottky diode varactor multipliers », *12th International Symposium on Space Terahertz Technology*, févr. 2001.
- [Sch01b] E. Schlecht, G. Chattopadhyay, A. Maestrini, D. Pukala, J. Gill, S. Martin, F. Maiwald et I. Mehdi. « A High-Power Wideband Cryogenic 200 GHz Schottky – Substrateless Multiplier », *In proceedings of the 9th Int. Conf. on Terahertz Electronics, Charlottesville, VA, USA*, oct. 2001.
- [Sch96] A. C. Schmitz, A. T. Ping, M. A. Khan, Q. Chen, J. W. Yang, et I. Adesida, « Schottky barrier properties of various metals on n-type GaN », *Semicond. Sci. Technol.*, vol. 11, n° 10, p. 1464, 1996.
- [Shi61] A. Shimizu et J. Nishizawa, « Alloy-diffused variable capacitance diode with large figure-of-merit », *IRE Trans. Electron Devices*, vol. 8, n° 5, p. 370-377, sept. 1961.
- [Sil08] J. V. Siles et J. Grajal, « Capabilities of GaN Schottky Multipliers for LO Power Generation at Millimeter-Wave Bands », *Proceedings of the Nineteenth International Symposium on Space Terahertz Technology*, Groningen, p.504, April 28-30, 2008.
- [Tan66] C. C. H. Tang, « An Exact Analysis of Varactor Frequency Multipliers », *IEEE Trans. Microw. Theory Tech.*, vol. 14, n° 4, p. 210-212, avr. 1966.
- [Wal84] J. R. Waldrop, « Schottky-barrier height of ideal metal contacts to GaAs », *Appl. Phys. Lett.*, vol. 44, n° 10, p. 1002-1004, mai 1984.
- [Wan96] L. Wang, M. I. Nathan, T. Lim, M. A. Khan, et Q. Chen, « High barrier height GaN Schottky diodes: Pt/GaN and Pd/GaN », *Appl. Phys. Lett.*, vol. 68, n° 9, p. 1267-1269, févr. 1996.
- [War04] J. Ward, E. Schlecht, G. Chattopadhyay, A. Maestrini, J. Gill, F. Maiwald, H. Javadi et I. Mehdi, « Capability of THz sources based on Schottky diode frequency multiplier chains », *IEEE MTT-S International Microwave Symposium Digest*, pp.1587-1590, June 2004.

- [Wat00] S. P. Watkins *et al.*, « Heavily carbon-doped GaAsSb grown on InP for HBT applications », *J. Cryst. Growth*, vol. 221, n° 1, p. 59-65, déc. 2000.
- [Zin13] Z. Jingtao, Y. Chengyue, G. Ji, et J. Zhi, « Planar InP-based Schottky barrier diodes for terahertz applications », *J. Semicond.*, vol. 34, n° 6, p. 064003, 2013.

BROUILLON

BROUILLON

CHAPITRE IV

OPTIMISATION DE LA DIODE SCHOTTKY POUR LA RECTIFICATION

I. Introduction

Dans ce chapitre, nous cherchons à dégager les caractéristiques intrinsèques optimales de la diode Schottky (valeur des dopages, profil de dopage, matériau, dimension des zones, etc.) pour la rectification (i.e. la conversion d'un signal THz en signal continu ou BF). À la différence du multiplieur de fréquence présenté dans le chapitre III qui mettait à profit la non-linéarité capacitive de la diode associée à la capacité de déplétion, c'est la non-linéarité résistive associée à la caractéristique statique $I(V)$ qui est ici mise à contribution. Deux types de détection sont utilisées au THz : la détection directe et la détection hétérodyne (chapitre I). On se focalisera dans ce manuscrit sur la détection directe. Plus spécifiquement, nous aborderons la rectification à polarisation nulle : la diode est auto-polarisée en inverse. Ce fonctionnement spécifique impose certaines contraintes sur la diode Schottky pour qu'elle fonctionne efficacement. Nous ne prétendons pas épuiser le sujet à travers cette étude spécifique sur la rectification THz. Il s'agit notamment de montrer que l'optimisation est liée à la fonctionnalité visée.

La partie II vise la description du principe de la rectification à partir d'un élément non-linéaire : la diode Schottky. Plusieurs facteurs de mérite sont notamment présentés. Bien que ceux-ci ne soient pas forcément pertinents lorsque la diode est insérée dans un circuit de détection tel qu'une rectenna, quelques-uns permettent d'orienter certains choix sur les caractéristiques de la diode Schottky à utiliser. Le facteur de mérite d'intérêt reste le rendement pour le circuit de détection proposé, c'est-à-dire le quotient de la puissance délivrée à la résistance de charge par la puissance d'entrée. Une description des différents éléments du circuit est présentée en explicitant les origines possibles des pertes.

La partie III décrit les paramètres de la diode qui sont fixés et ceux qui sont optimisés lors de la simulation du circuit de rectification sous ADS. Les stratégies d'optimisation sont identiques à celles présentées pour la multiplication de fréquence dans le chapitre III. Pour le GaAs, plusieurs études sont menées pour montrer l'influence de différents paramètres physiques tels que la longueur et le dopage de la zone N ou encore la surface sur le rendement du circuit. Une comparaison de plusieurs configurations avec d'autres SC tels que l'InGaAs,

le GaSb ou encore le GaN est réalisée pour dégager le SC le plus adapté pour la rectification.

Les conclusions de cette optimisation sont données dans la dernière partie avec les caractéristiques optimales de la diode Schottky pour la rectification. Les limites du modèle électrique sont également explicitées.

II. Principe de la rectification

1. La rectification

La rectification consiste à générer un signal continu à partir d'un signal AC grâce à la caractéristique non-linéaire du dispositif choisi. Pour illustrer l'effet de la rectification avec une diode Schottky, on propose de déterminer la tension V_0 en sortie du circuit de la figure IV-II.1.1. On suppose que le courant traversant la diode est décrit par l'équation suivante :

$$I_d(t) = I_s \left(\exp\left(\frac{V_d(t)}{nV_t}\right) - 1 \right) \text{ avec } V_t = \frac{k_B T}{q} \quad (\text{IV-II.1.1})$$

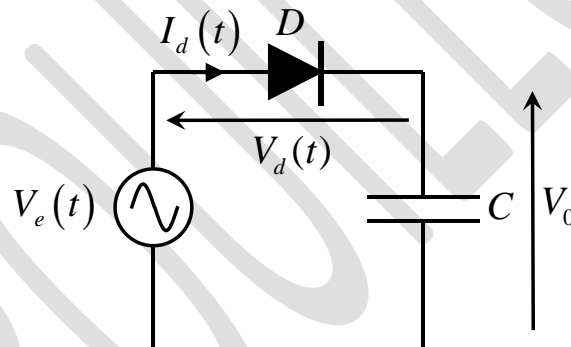


Figure III-II.1 – Circuit pour la rectification

Le circuit est excité par un signal sinusoïdal tel que :

$$V_e(t) = V_p \cos(\omega t) \quad (\text{IV-II.1.2})$$

On ne tient pas compte ici de la capacité de la diode et de la chute de tension occasionnée par la résistance série pour simplifier les calculs. On suppose par ailleurs que la capacité C est assez grande pour que la tension V_0 à ses bornes reste constante. La tension V_0 vérifie :

$$\frac{I_d(t)}{I_s} + 1 = \exp\left(-\frac{V_0}{nV_t}\right) \exp\left(\frac{V_p \cos(\omega t)}{nV_t}\right) \quad (\text{III-II.1.3})$$

La capacité C impose que la valeur moyenne du courant traversant la diode soit nulle. En intégrant l'équation (IV-II.1.3) sur une période, on arrive à l'équation (IV-II.1.4) :

$$2\pi = \exp\left(-\frac{V_0}{nV_t}\right) \int_0^{2\pi} \exp\left(\frac{V_p \cos(\varphi)}{nV_t}\right) d\varphi \quad (\text{IV-II.1.4})$$

Or, $\int_0^{2\pi} \exp\left(\frac{V_p \cos(\varphi)}{nV_t}\right) d\varphi = 2\pi I_0\left(\frac{V_p}{nV_t}\right)$ avec I_0 est la fonction de Bessel modifiée de première espèce et d'ordre 0. On peut ainsi en déduire la tension de sortie V_0 [Yan13] :

$$V_0 = nV_t \ln \left[I_0\left(\frac{V_p}{nV_t}\right) \right] \quad (\text{IV-II.1.5})$$

Dans le cas où $V_p \ll nV_t$, $V_0 \sim \frac{V_p^2}{4nV_t}$. La tension de sortie est alors proportionnelle au carré de l'amplitude du signal d'entrée : le détecteur est dit quadratique.

Dans le cas où $V_p \gg nV_t$, $V_0 \sim V_p - nV_t \ln\left(\sqrt{\frac{2\pi V_p}{nV_t}}\right) \approx V_p$. La tension de sortie est quasiment égale à l'amplitude du signal d'entrée : le détecteur fonctionne en régime linéaire.

La figure IV-II.1.2 représente l'évolution de la tension de sortie normalisée $V_0/(nV_t)$ en fonction de la tension du signal d'entrée normalisée $V_p/(nV_t)$ ainsi que l'extrapolation quadratique pour de faible niveau de tension et l'extrapolation linéaire pour de fortes amplitudes du signal d'entrée.

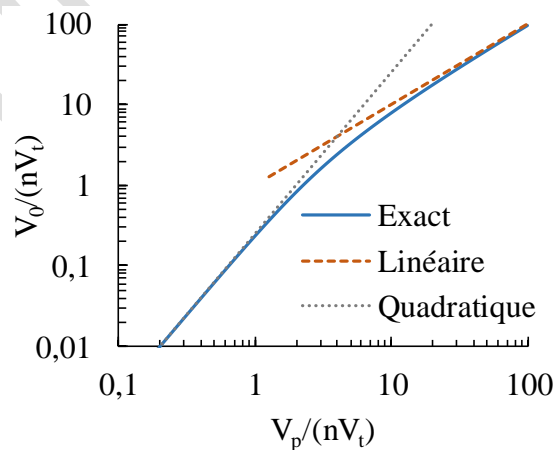


Figure IV-II.1.2 : Tension de sortie normalisée en fonction de l'amplitude de la tension d'entrée normalisée

On comprend ici, le principe de fonctionnement de la rectification. Cherchons désormais les paramètres électriques qui signalent que la rectification est performante.

2. Facteurs de mérite pour la rectification

Les facteurs de mérite présentés dans cette section repose sur le modèle équivalent basse-fréquence de la diode Schottky (figure II-II.1.1) composé de la résistance série R_s , de la capacité de déplétion C_d et de la résistance dynamique R_d donnée par l'équation (II-II.1.3).

Sensibilité en courant

Un facteur de mérite qui est couramment utilisé pour évaluer la non-linéarité de la diode est la sensibilité en courant $\mathfrak{R}_{I,f}$. Ce paramètre est déterminé à partir du rapport entre le courant redressé et la puissance absorbée par la diode lorsque celle-ci est court-circuitée. Son expression est donnée par [Tor48] :

$$\mathfrak{R}_{I,f} = \frac{\mathfrak{R}_{I,0}}{\left(1 + \frac{R_s}{R_d}\right)^2 \left[1 + \left(\frac{f}{f_{c1}}\right)^2\right]} \quad \text{(IV-II.2.1)}$$

Avec $\mathfrak{R}_{I,0} = \frac{d^2 I(V)}{2 \frac{dI(V)}{dV}} = \frac{q}{2nk_B T}$ et $f_{c1} = \left[2\pi C_j \sqrt{\frac{R_s R_d}{1 + R_s / R_d}}\right]^{-1}$

Où $\mathfrak{R}_{I,0}$ représente la sensibilité en courant statique dans le cas où $R_d \gg R_s$. Celle-ci est indépendante du point de polarisation et vaut, dans le cas idéal où $n = 1$ et à température ambiante 19,3 A/W.

Sensibilité en tension

Quand le détecteur est connecté à une impédance élevée telle qu'une entrée d'un oscilloscope ou un amplificateur [Car15], on utilise plutôt la sensibilité en tension $\mathfrak{R}_{V,f}$ qui est définie comme le produit de la sensibilité en courant par la résistance dynamique :

$$\mathfrak{R}_{V,f} = R_d \mathfrak{R}_{I,f} = \frac{R_d \mathfrak{R}_{I,0}}{\left(1 + \frac{R_s}{R_d}\right)^2 \left[1 + \left(\frac{f}{f_{c1}}\right)^2\right]} \quad (\text{IV-II.2.2})$$

Cette sensibilité dépend du point de polarisation contrairement à la sensibilité en courant.

Fréquences de coupure

La limitation en fréquence des diodes Schottky est souvent caractérisée par la fréquence de coupure f_{c2} telle que :

$$f_{c2} = \frac{1}{2\pi R_s C_{j0}} \quad (\text{IV-II.2.3})$$

Avec R_s la résistance série et C_{j0} la capacité de jonction à polarisation nulle.

Ce facteur de mérite n'est pas vraiment adapté pour de la détection à polarisation nulle. La fréquence de coupure f_{c1} donnée dans l'équation (IV-II.2.1) est plus pertinente puisqu'elle fait intervenir la résistance dynamique R_d qui joue un rôle essentiel dans le processus de rectification. À polarisation nulle, on a généralement $R_d \gg R_s$ et cette fréquence s'écrit :

$$f_{c2} \approx \frac{1}{2\pi C_j \sqrt{R_s R_d}} \quad (\text{IV-II.2.4})$$

En prenant des valeurs typiques comme $R_s \approx 10 \Omega$ et $C_j \approx 1 \text{ fF}$, la résistance dynamique doit être inférieure à 30 k Ω pour avoir une fréquence de coupure supérieure à 300 GHz. Dans le modèle de l'émission thermoionique, la résistance dynamique R_d est donnée par [Sze06] :

$$R_d = \frac{nV_t}{I_s} \text{ avec } I_s = \frac{4\pi q m_{sc}^* k_B^2}{h^3} S T^2 \exp\left(-\frac{q\phi_{bn}}{k_B T}\right) \quad (\text{IV-II.2.5})$$

Pour une température de 300 K, le courant de saturation doit donc être supérieur à 200 nA, alors que celui-ci est plutôt de l'ordre de quelques dizaines de fA pour les diodes sur GaAs, soit un écart de plusieurs ordres de grandeurs. Pour modifier significativement le courant de saturation, la solution la plus simple consiste donc à diminuer la hauteur de barrière ϕ_{bn} , c'est-à-dire, modifier le couple métal/semi-conducteur. Un semi-conducteur tel que l'InGaAs semble être un bon candidat avec une hauteur de barrière de 0,21 eV [Opr10] sur Ti-Pt-Au et des propriétés de transport meilleures que dans GaAs (section II-I.1), ce qui permet de réduire la résistance série. On peut également atteindre des dopages plus élevés que GaAs dans les zones dopées, permettant ainsi de diminuer les résistances séries ($3 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ [Jin13]). À une température de 77K, l'interface Au-InSb montre une hauteur de barrière entre

0,1 et 0,15 eV [Hat82]. Cependant, ce matériau est moins bien connu que InGaAs ou GaAs, la technologie reste moins bien maîtrisée et son coût est plus élevé.

BROUILLON

NEP : Noise Equivalent Power

La puissance équivalente de bruit (*NEP : Noise Equivalent Power*) permet de mesurer la sensibilité d'un détecteur. Il s'agit de la puissance donnant un rapport signal sur bruit égal à un pour une bande passante de sortie de 1 Hz. Elle est égale à la densité spectrale de bruit divisée par la sensibilité. Pour la diode Schottky, en ne considérant que le bruit thermique, on a [Nad17] :

$$\text{NEP} = \frac{\sqrt{4k_B T (R_s + R_d)}}{\mathfrak{R}_{v,f}} \quad (\text{IV-II.2.6})$$

Plus le NEP est faible, plus le détecteur est sensible. La valeur typique du NEP pour les détecteurs à base de diodes Schottky est de l'ordre de quelques $\text{pW}/\sqrt{\text{Hz}}$.

Ces facteurs de mérite couramment donnés dans la littérature [Cow66] permettent d'apprécier les caractéristiques d'une diode Schottky performante pour la rectification mais ne sont pas forcément tous pertinents lorsque la diode est insérée dans un circuit de détection.

3. Description du circuit de rectification

Nous proposons d'étudier une rectenna (abréviation de *rectifier antenna*) dans la bande du THz. Ce type de circuit est souvent utilisé pour faire de la récupération d'énergie électromagnétique [Mon12] et on trouve quelques réalisations aux fréquences THz [Sie07]. Il s'agit d'une antenne couplée à un circuit de rectification, qui convertit le champ électromagnétique en un signal électrique continu.

Des simulations de type Harmonic Balance (HB) ont été effectuées sous ADS pour simuler le circuit de la figure IV-II.3.1. Tous les éléments non-linéaires extraits dans la partie précédente (II-III.1) ont été intégrés dans le modèle de la diode grâce à l'outil *Symbolically-Defined Devices* (SSD) de ADS qui permet de créer son propre modèle de composant non-linéaire à partir d'équations utilisant des représentations implicites ou explicites [docADS]. L'association de la capacité C avec la résistance de charge R_L joue le rôle de filtre passe-bas et permet de récupérer en sortie une tension continue aux bornes de la diode. L'antenne est modélisée par un générateur de tension sinusoïdale d'amplitude V_p avec une impédance interne R_a supposée réelle à la fréquence de travail et égale à 50 Ohms. Pour maximiser le transfert de puissance de l'antenne au circuit de rectification, une cellule d'adaptation à base de stubs a été insérée. Les caractéristiques de cette cellule sont fortement dépendantes de la puissance d'entrée, de la fréquence et de la résistance de charge R_L . L'inductance L permet d'assurer un circuit fermé pour la composante DC du courant.

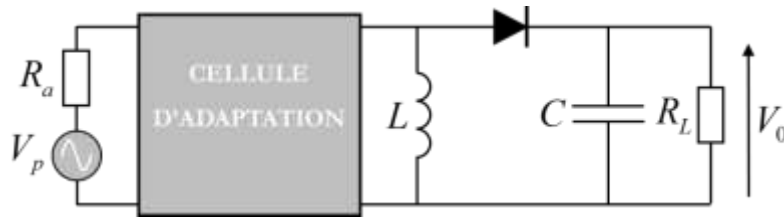


Figure IV-II.3.1 – Circuit de rectification (rectenna)

Un facteur de mérite des rectennas est le rendement de conversion défini comme la puissance P_{out} délivrée à la charge R_L divisée par la puissance d'entrée P_{in} :

$$\eta = \frac{P_{out}}{P_{in}} \text{ avec } P_{out} = \frac{V_0^2}{R_L} \text{ et } P_{in} = \frac{V_p^2}{8R_a} \quad (\text{IV-II.3.1})$$

Pour chaque simulation effectuée, les stubs de la cellule d'adaptation et la résistance de charge R_L seront optimisées afin de maximiser le rendement de conversion. On suppose que les lignes sont idéales et sans pertes. Avec cette hypothèse, voici la répartition des puissances dans le circuit :

- puissance perdue par désadaptation,
- puissance dissipée dans la résistance dynamique de la diode,
- puissance dissipée dans la résistance série associée à la ZQN et à la zone N^+ ,
- puissance délivrée à la résistance de charge R_L .

Il existe d'autres topologies de circuit de rectification (avec une diode en parallèle, doubleur de tension, etc.) [Ohi13] qui ne seront pas abordées dans ce chapitre. Les harmoniques d'ordre supérieur générés par la diode Schottky peuvent dégrader le fonctionnement du circuit. Un filtre HF peut éventuellement être placé avant l'antenne pour bloquer ces harmoniques [Tak10].

III. Optimisation de la diode Schottky pour la détection

1. Eléments à optimiser

L'objectif est de trouver les caractéristiques optimales de la diode afin de maximiser le rendement du circuit de rectification présenté dans la figure IV-II.3.1. Contrairement au multiplicateur de fréquence donné dans la figure III-II.4.1, il n'y a pas de polarisation appliquée aux bornes de la diode : celle-ci est auto-polarisée en inverse. Ceci permet de simplifier la conception globale du circuit, de diminuer la puissance consommée et de réduire la contribution du bruit [Car15]. La tension de polarisation ne constitue donc pas un élément d'optimisation pour la rectification. On conserve les mêmes éléments d'optimisation que pour le multiplicateur de fréquence : la surface, la longueur et le dopage de la zone N. Les autres paramètres sont fixés et donnés dans le tableau III-III.1.1. Les stratégies d'optimisation sont identiques à celles présentées dans la section III-III.2. Plusieurs études sont d'abord menées sur GaAs puis d'autres SC sont envisagés et simulés afin de dégager le meilleur pour la rectification.

La caractéristique statique $I(V)$ constitue l'élément clef des détecteurs. Celle-ci est fortement dépendante de la longueur et du dopage, notamment en inverse à cause de différents effets physiques : l'abaissement de la hauteur de barrière par le champ électrique, l'effet tunnel et l'effet de force image. La figure IV-III.2.1 présente la caractéristique statique sur GaAs pour plusieurs longueurs de la zone N (50, 100 et 200 nm) avec un dopage égal à 10^{17} cm^{-3} et pour plusieurs valeurs de dopage (10^{17} , 4×10^{17} et 10^{18} cm^{-3}) avec une longueur de 50 nm.

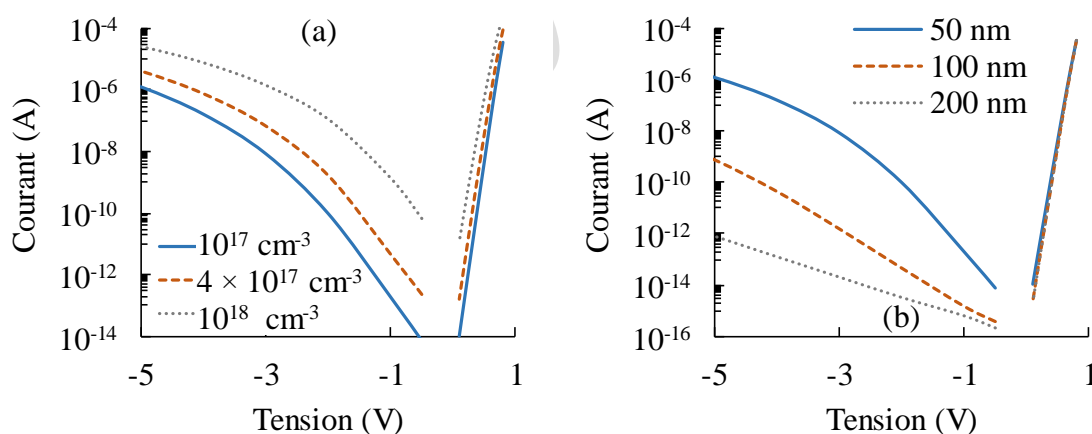


Figure IV-III.2.1 – Caractéristique courant-tension sur GaAs pour plusieurs longueurs de la zone N (50, 100 et 200 nm) avec un dopage égal à 10^{17} cm^{-3} et pour plusieurs valeurs de dopage (10^{17} , 4×10^{17} et 10^{18} cm^{-3}) avec une longueur de 50 nm. La surface est fixée à $0,1 \mu\text{m}^2$.

La caractéristique courant-tension est fortement dépendante de la longueur et du dopage de la zone N, surtout en inverse. Dans le modèle de l'émission thermoïonique (section II-III.1), l'expression du courant en fonction de la tension ne dépend pas du dopage, ce qui n'est pas le cas ici. En effet, différents effets physiques ont été considérés autour de la jonction métal/SC tels que l'effet tunnel, le phénomène de force image ou encore l'abaissement de la hauteur de barrière par le champ électrique. Ces effets sont fortement corrélés au profil du potentiel au voisinage de l'interface métal/SC, qui lui-même dépend du dopage. Pour un dopage de 10^{18} cm^{-3} , le champ électrique est plus élevé à l'interface métal/SC, la barrière est plus fine (l'effet tunnel est favorisé), ce qui conduit à un courant plus élevé que pour des dopages plus faibles. Un tel écart sur le comportement en inverse suivant la longueur de la zone N n'est pas évident. Comme le dopage choisi est faible (10^{17} cm^{-3}), la zone N est rapidement déplétée en polarisation inverse et le champ électrique augmente plus rapidement lorsque la déplétion s'effectue dans la zone N^+ , entraînant une augmentation du courant d'autant plus importante en inverse que la longueur de la zone N est courte. Ces courbes pourront servir de base pour la discussion des résultats présentés dans la prochaine section.

2. Optimisation

Commençons par étudier l'influence de la résistance de charge sur le rendement.

Optimisation de la résistance de charge

On choisit la configuration suivante sur GaAs : $\ell_N = 50 \text{ nm}$, $N_d = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ et $S = 0,1 \text{ } \mu\text{m}^2$. La figure IV-III.2.1 donne le rendement en fonction de la résistance de charge R_L pour trois puissances d'entrée à une fréquence de 300 GHz. Quelle que soit la puissance d'entrée, il existe une résistance de charge permettant d'optimiser le rendement du circuit de détection. Cette résistance est d'autant plus grande que la puissance d'entrée est faible et elle est plus élevée quand la fréquence. L'écart entre les deux points de fréquence choisis est d'autant plus grand que la puissance d'entrée est faible. Pour la suite, la valeur de la résistance de charge est donc optimisée pour obtenir un rendement maximum. Elle dépend de la fréquence et de la puissance d'entrée. Observons maintenant l'influence de la longueur de la zone N sur le rendement.

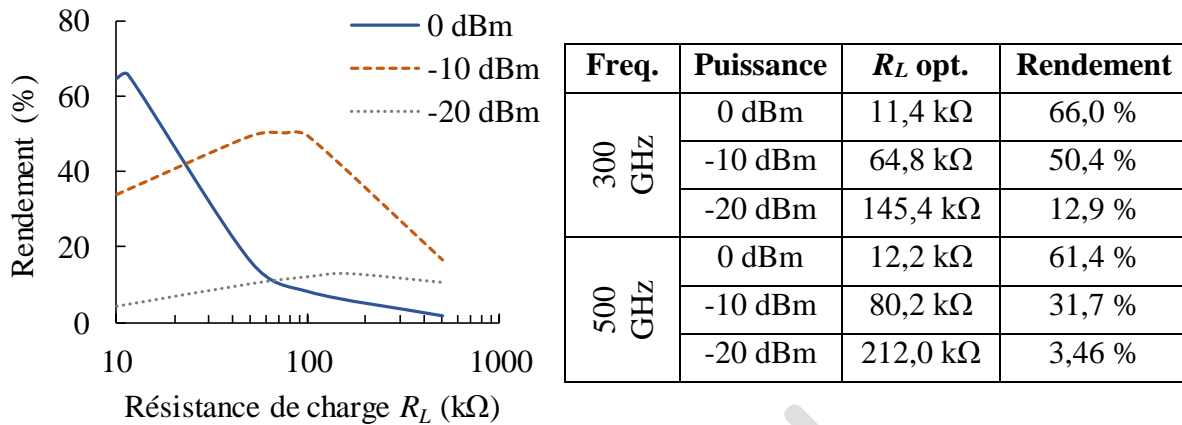


Figure IV-III.2.1 – (a) Rendement en fonction de la résistance de charge R_L pour plusieurs puissances d’entrée à 300 GHz (b) Tableau donnant le rendement et la résistance de charge optimale pour 300 GHz et 500 GHz à 0 dBm, -10 dBm et -20 dBm

Influence de la longueur de la zone N

Dans cette étude, le dopage de la zone N est fixé à 10^{18} cm^{-3} et la surface à $0,1 \mu\text{m}^2$. La figure IV-III.2.2 représente le rendement en fonction de la longueur de la zone N pour trois puissances d’entrée – 0 dBm, -10 dBm et -20 dBm – à une fréquence de 300 GHz. On a également quantifié la répartition des puissances pour chaque puissance d’entrée. Globalement, la longueur de la zone N qui donne le meilleur rendement semble converger vers la valeur la plus petite – 50 nm ici –, bien que la variation du rendement soit modeste, de quelques pourcents pour 0 et -10 dBm jusqu’à une dizaine de pourcents pour -20 dBm entre 50 nm et 250 nm. Cette faible variation peut s’expliquer par la valeur du dopage assez élevée (10^{18} cm^{-3}). En effet, la caractéristique statique varie très peu pour une polarisation en direct suivant la longueur de la diode. Il est intéressant de noter que, suivant la puissance d’entrée choisie, les puissances ne sont pas réparties de la même façon.

À une puissance d’entrée de 0 dBm et de -10 dBm, la majeure partie de la puissance est dissipée dans la résistance de charge (environ 60 % et 40 % de la puissance d’entrée respectivement). Quelle que soit la puissance d’entrée, la puissance dissipée dans la résistance série associée à la ZQN augmente quand la longueur de la zone N augmente. En effet, il existe dans ce cas une partie de la zone N qui n’est jamais déplétée au cours du temps et qui contribue à augmenter la résistance série. Cette augmentation est plus marquée à faible puissance d’entrée (-20 dBm) car l’excursion en tension est plus faible. Dans cette configuration, elle représente d’ailleurs la plus grande partie de la puissance dissipée au-dessus de 100 nm. On comprend donc la nécessité de réaliser des diodes courtes, de quelques dizaines de nanomètres, afin d’éviter qu’une partie de la zone N ne soit jamais déplétée au

cours du temps. La résistance de charge vaut environ 10 kΩ pour 0 dBm, 26 kΩ pour -10 dBm et 80 kΩ pour -20 dBm.

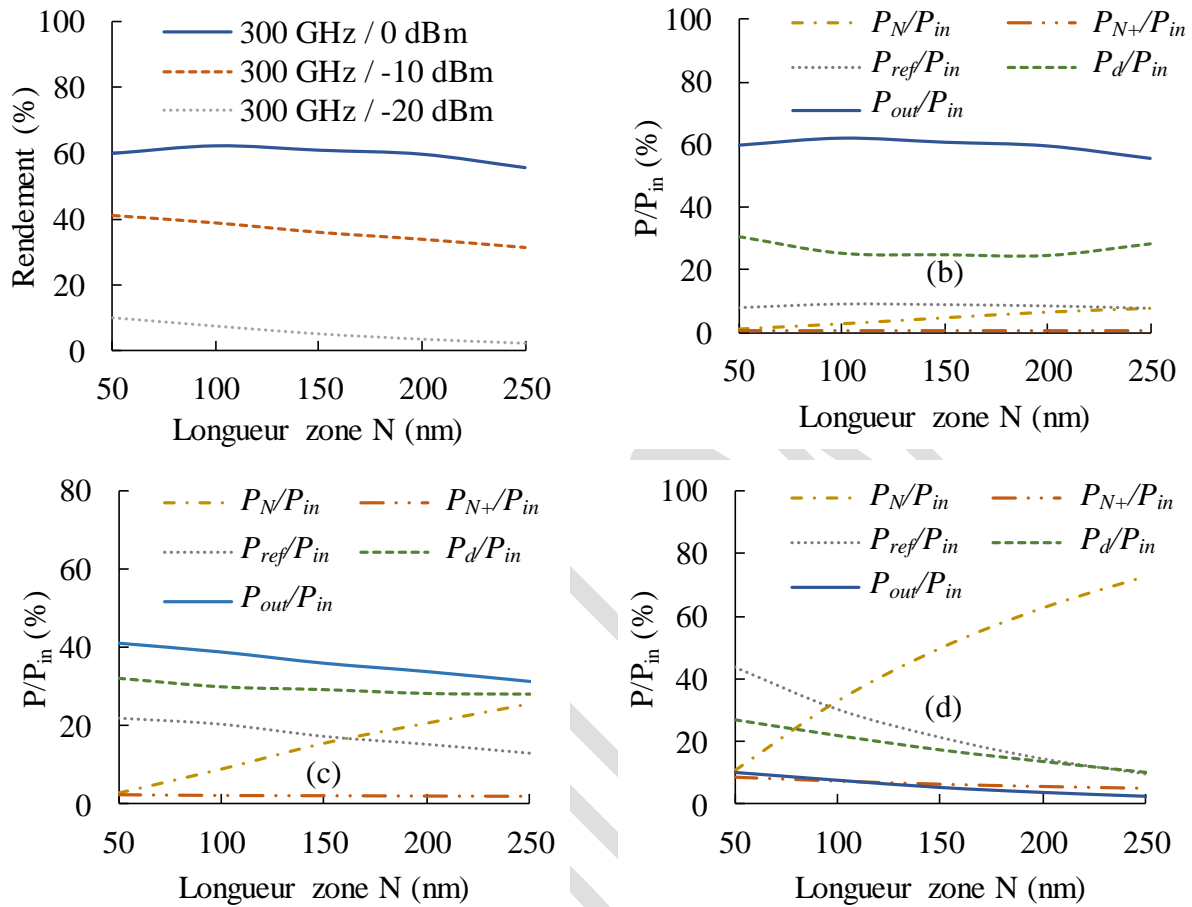


Figure IV-III.2.2 – (a) Rendement en fonction de la longueur de la zone N pour un dopage de 10^{18} cm^{-3} à une fréquence de 300 GHz et une puissance d'entrée de 0 dBm, -10 dBm et -20 dBm. (b) Puissance dissipée normalisée (par rapport à la puissance d'entrée) dans la résistance dynamique P_d/P_{in} , dans la résistance série de la zone N non déplétée P_N/P_{in} , dans la résistance série de la zone N⁺ P_{N+}/P_{in} , pertes par réflexions P_{ref}/P_{in} , dans la charge P_{out}/P_{in}

Plus la zone N est petite, meilleur est le rendement à faible puissance. En revanche, un optimum semble se profiler à forte puissance. La prochaine étude concerne l'influence du dopage sur le rendement du circuit de détection.

Influence du dopage

La figure IV-III.2.3 représente le rendement en fonction du dopage pour une puissance d'entrée de 0 dBm, -10 dBm et -20 dBm à 300 GHz et à 500 GHz avec une longueur de 50 nm pour la zone N. Globalement, le dopage de la zone N semble tendre vers la plus petite

valeur. Cependant, on n'a pas de variation franche du rendement. Cette constatation peut s'expliquer assez simplement. Nous avons parlé à maintes reprises dans ce manuscrit du modèle couramment utilisé pour la caractéristique courant-tension : le modèle de l'émission thermoïonique. Dans ce modèle, le dopage n'intervient pas comme le montre l'équation (II-III.1.8). La figure IV-III.2.1 montre néanmoins une variation de la caractéristique statique avec le dopage, surtout en inverse. Il y a en fait deux effets qui se compensent :

- Le courant par effet tunnel augmente avec le dopage, ce qui a pour effet d'augmenter le courant de saturation et de diminuer la résistance dynamique à polarisation nulle donnée par l'équation (IV-II.2.5). La dégradation du coefficient d'idéalité est moins importante que l'augmentation du courant de saturation, ce qui devrait améliorer la sensibilité du détecteur et donc le rendement du circuit.
- Pour une même polarisation, la ZCE est moins étendue avec un dopage élevé. Pendant une période, le temps pendant lequel la zone N est complètement déplétée est donc plus court et la résistance série est plus élevée.

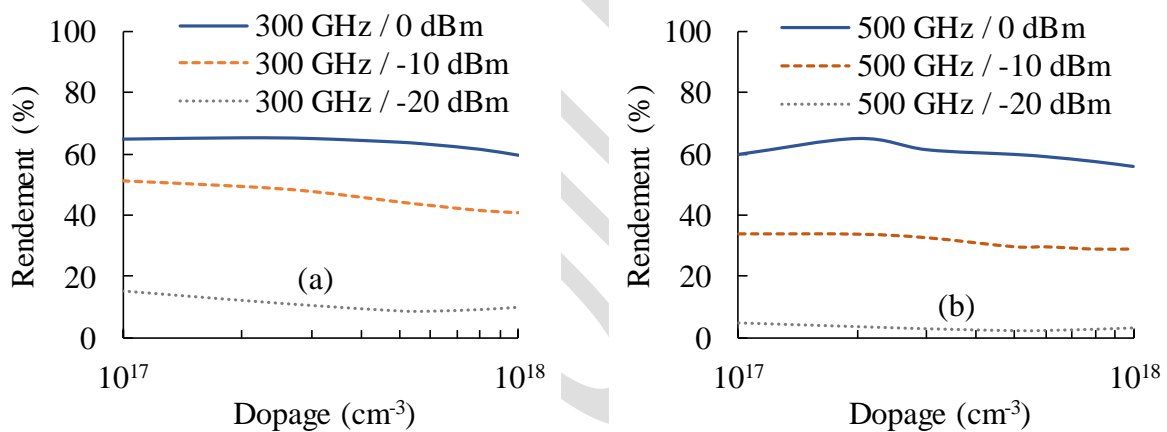


Figure IV-III.2.3 – (a) Rendement en fonction du dopage pour une puissance d'entrée de 0 dBm, -10 dBm et -20 dBm à 300 GHz et à (b) 500 GHz avec une longueur de 50 nm pour la zone N

Analysons maintenant l'influence de la surface de la diode.

Influence de la surface

Nous avons vu qu'il existait une surface optimale permettant de maximiser le rendement du multiplieur de fréquence présenté dans le chapitre III. La figure IV-III.2.4 représente l'évolution du rendement en fonction de la surface pour une diode dopée à $1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ de longueur 50 nm sur GaAs pour trois puissances d'entrée : 0 dBm, -10 dBm et -20 dBm à une fréquence de 300 GHz. L'excursion en tension aux bornes de la diode ainsi que la tension de

polarisation est donnée. On rappelle que la résistance de charge est optimisée pour chaque configuration simulée.

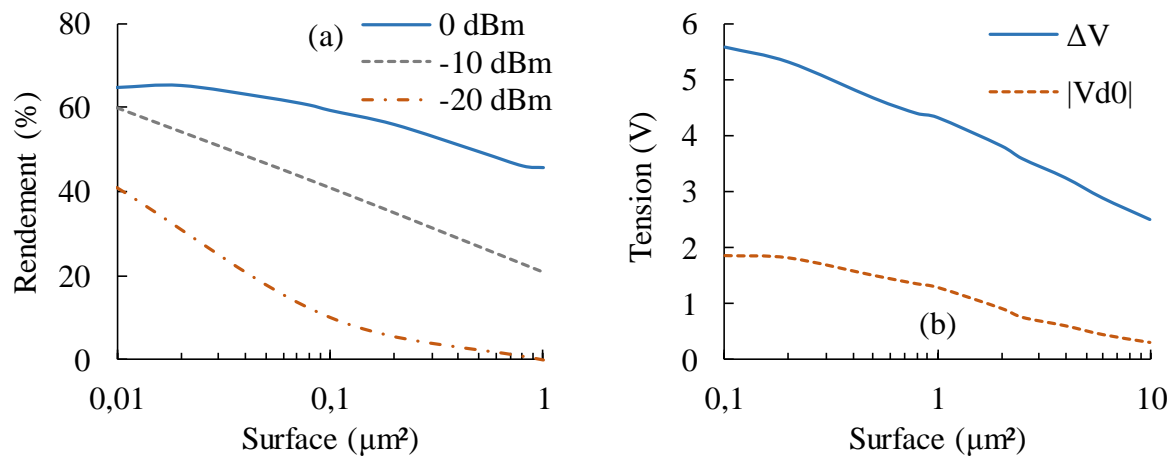


Figure IV-III.2.4 – (a) Rendement et (b) excursion en tension aux bornes de la diode ΔV avec point de polarisation $|Vd0|$ en fonction de la surface pour 0 dBm à 300 GHz. La zone N mesure 50 nm et est dopée à $1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$

On constate qu'il n'existe pas de surface optimale contrairement au multiplicateur de fréquence, celle-ci tendant toujours vers la valeur la plus faible possible. En effet, une diminution de la surface entraîne une augmentation de l'excursion en tension aux bornes de la diode et favorise ainsi le fonctionnement de la diode dans un régime autour de la tension de coude où la non-linéarité de la caractéristique statique est la plus forte. La tension continue aux bornes de la résistance de charge devient aussi plus élevée et permet d'améliorer le rendement du circuit. On atteint un rendement de 10 % avec une puissance de -20 dBm à 300 GHz et une surface de $0,1 \mu\text{m}^2$. Suite à ces résultats, on propose de fixer, pour toutes les configurations suivantes, la surface à $0,1 \mu\text{m}^2$.

Ces résultats sont à nuancer. En effet, on pressent que la surface ne peut être réduite indéfiniment sans d'autres effets susceptibles de dégrader le rendement. Cette diminution de la surface entraîne également une diminution de la capacité de déplétion, et la capacité parasite (due en partie aux effets de périphérie) en prenant en compte un modèle 2D de la diode (section II-III.1) devient du même ordre de grandeur que la capacité de déplétion. Il aurait fallu rentrer dans le modèle électrique d'ADS l'évolution de la capacité parasite suivant les caractéristiques géométriques de la diode, y compris la surface. On propose dans la prochaine étude de quantifier l'influence de la capacité parasite sur le rendement pour quelques configurations.

Influence des effets 2D

La méthode pour déduire la capacité parasite a été décrite dans la section II-III.1. Le tableau IV-III.2.1 récapitule la valeur des rendements pour 500 GHz avec et sans prendre en compte la capacité parasite. La valeur de la capacité de jonction à 0 V

Fréquence et puissance d'entrée	500 GHz -10 dBm	800 GHz -10 dBm
C_p (fF)	0,27	
C_{j0} (fF)	0,22	
Surface (μm^2)	0,1	
Rendement sans C_p (%)	34,2	5,7
Rendement avec C_p (%)	20,4	1,3
Ecart (%)	67,7	338,5

Tableau IV-III.2.1 – Influence de la capacité parasite sur le rendement du circuit de rectification pour deux points de fréquence (500 GHz / 800 GHz) à une puissance d'entrée de -10 dBm.

On constate que la capacité de jonction à 0 V C_{j0} est du même ordre de grandeur que la capacité parasite. Celle-ci dégrade fortement le rendement avec une diminution de presque 68 % à 500 GHz pour une puissance d'entrée de -10 dBm. L'écart est encore plus marqué avec une division par 4 du rendement à 800 GHz pour la même puissance. Comme pour le multiplieur, une étude plus exhaustive n'a pas pu être menée pour quantifier ces capacités parasites dues aux effets 2D ou 3D pour chacune des configurations.

Ces différentes études semblent converger vers une diode courte (quelques dizaines de nanomètres) avec un faible dopage et une petite surface pour maximiser l'excursion en tension aux bornes de la diode. Nous conserverons un dopage de 10^{17} cm^{-3} et une surface de $0,1 \mu\text{m}^2$ lors de l'étude suivante sur une confrontation des rendements avec les autres SC étudiés.

Comparaison avec d'autres semi-conducteurs

Toutes les simulations possibles dans l'espace des configurations pour les autres semi-conducteurs n'ont pu être menées, l'insertion des valeurs sous ADS pour l'interpolation bilinéaire de l'ensemble des paramètres étant assez longue et fastidieuse. Une étude non exhaustive est donc proposée dans cette partie. Seulement quelques configurations sur les différents SC sont comparées. Le tableau IV-III.2.2 récapitule les configurations simulées et les rendements obtenus. D'autres données complémentaires sont directement indiquées dans les commentaires pour faciliter l'interprétation des résultats. Nous nous focaliserons sur la détection de signaux de faible amplitude en considérant une puissance d'entrée de -10 dBm et -20 dBm pour une fréquence de 300 GHz et 500 GHz. Pour ces niveaux de puissance, l'ionisation par choc ne constitue donc pas une limitation.

	Longueur zone N	Dopage zone N	Rendement 300 GHz -10 dBm	Rendement 500 GHz -10 dBm	Rendement 300 GHz -20 dBm	Rendement 500 GHz -20 dBm
GaAs	50	10^{17}	51,3	34,1	15,3	4,7
InGaAs	100	10^{17}	65,7	51,7	43,9	29,9
InGaAs	200	10^{17}	60,9	43,5	39,2	21,5
GaSb $\alpha = 1,5$ nm	100	10^{17}	54,9	38,8	19,6	6,9
GaSb $\alpha = 3,5$ nm	100	10^{17}	60,5	48,8	29,1	13,7
GaSb $\alpha = 1,5$ nm	200	10^{17}	42,5	26,1	10,1	0,95
GaSb $\alpha = 3,5$ nm	200	10^{17}	47,0	28,4	11,7	1,3
GaN $\alpha = 1,5$ nm	200	10^{17}	21,6	2,9	< 0,1	< 0,1
GaN $\alpha = 3,5$ nm	200	10^{17}	22,8	3,4	< 0,1	< 0,1
GaN $\alpha = 1,5$ nm	100	10^{17}	36,6	14,7	3,4	< 0,1
GaN $\alpha = 3,5$ nm	100	10^{17}	40,7	18,5	5,0	0,15

Tableau IV-III.2.2 – Rendement du circuit de détection pour plusieurs configurations.

La surface est fixée à $0,1 \mu\text{m}^2$.

Pour toutes les configurations simulées, la longueur de la zone N la plus faible (100 nm) donne bien les meilleurs rendements, ce qui confirme la conclusion donnée sur GaAs. On peut classer les SC par ordre décroissant de rendement : InGaAs, GaSb, GaAs et GaN. Voici une brève description pour chacun d'entre eux.

InGaAs : la grosse différence entre l'InGaAs et les autres SC repose sur la hauteur de barrière qui lui permet d'avoir un courant de saturation beaucoup plus élevé (plusieurs décades d'écart). Ceci lui permet d'obtenir des rendements de 60,5 % à une fréquence de 300 GHz pour une puissance d'entrée de -10 dBm. Bien que la zone N soit deux fois plus élevée que pour la configuration optimale sur GaAs, le rendement sur InGaAs reste bien meilleur quelles que soient la puissance d'entrée et la fréquence, notamment à 500 GHz avec quasiment un facteur 6 pour -20 dBm. On pourrait encore améliorer cette valeur en diminuant la longueur de la zone N afin de limiter l'effet de la ZQN.

GaSb : la hauteur de barrière pour le GaSb est plus élevée que pour InGaAs (0,6 eV) mais plus petite que GaAs. Il n'est donc pas étonnant que le GaSb donne des rendements tout à fait acceptables pour le circuit de rectification et plus élevés que sur GaAs, même avec une longueur deux fois plus grande. Certains auteurs sont parvenus à abaisser la hauteur de barrière en insérant un oxyde (TiO_2) à l'interface entre de l'aluminium et du GaSb [Yua11]. Cette technique pourrait permettre d'améliorer davantage le rendement. La figure IV-III.2.5 montre une comparaison de la caractéristique statique et de la capacité de déplétion pour $\alpha = 1,5$ nm et $\alpha = 3,5$ nm. La capacité est très peu modifiée par le paramètre α . L'effet de α est surtout visible en inverse sur la caractéristique statique et légèrement en direct. Le courant de saturation est multiplié par 2 en passant de $\alpha = 1,5$ nm à $\alpha = 3,5$ nm. Le passage des électrons est donc facilité à l'interface et les rendements sont meilleurs que pour 1,5 nm, quelle que soit la configuration choisie. On atteint un rendement égal à 29,1 % pour 500 GHz avec une puissance d'entrée de -20 dBm. Il faut être prudent par rapport à ces résultats issus d'une modélisation électrique. En effet, dès les faibles énergies, les électrons transfèrent rapidement en vallée L pour ce SC et ce phénomène n'a pas été modélisé d'un point de vue électrique. L'utilisation du GaSb pour les diodes Schottky aux fréquences THz a déjà été questionnée dans [Sch08] pour les applications de mélange. Bien que la masse effective des électrons en vallée centrale pour GaSb soit plus faible que sur GaAs, le transport est fortement dégradé à cause du faible écart entre la vallée Γ et L (inférieure à 0,1 eV). Le bruit inter-vallée associé au transfert des électrons serait également problématique [Sch08].

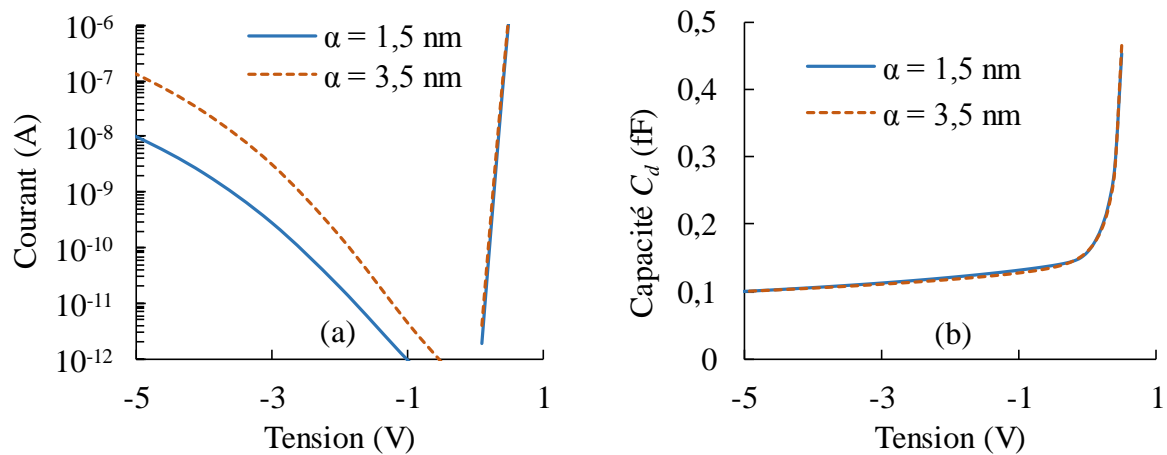


Figure IV-III.2.5 – (a) Comparaison de la caractéristique statique et de (b) la capacité de déplétion en fonction de la tension sur GaSb pour $\alpha = 1,5$ nm et $\alpha = 3,5$ nm avec un dopage égal à 10^{17} cm⁻³ dans la zone N et une longueur de 100 nm ($S = 0,1$ μm^2)

GaN : ce SC n'est pas adapté pour faire de la détection à polarisation nulle pour deux raisons. La hauteur de barrière est élevée (0,88 eV), voisine de GaAs, et la mobilité des électrons est plus faible que GaAs, ce qui induit une augmentation de la résistance série. Comme pour GaSb, le courant de saturation est plus élevé lorsque α est égal à 1,5 nm et la variation de la capacité de déplétion n'est quasiment pas affectée par ce paramètre (figure IV-III.2.6). Le rendement reste inférieur à 0,1 % pour 500 GHz avec une puissance d'entrée égale à -20 dBm.

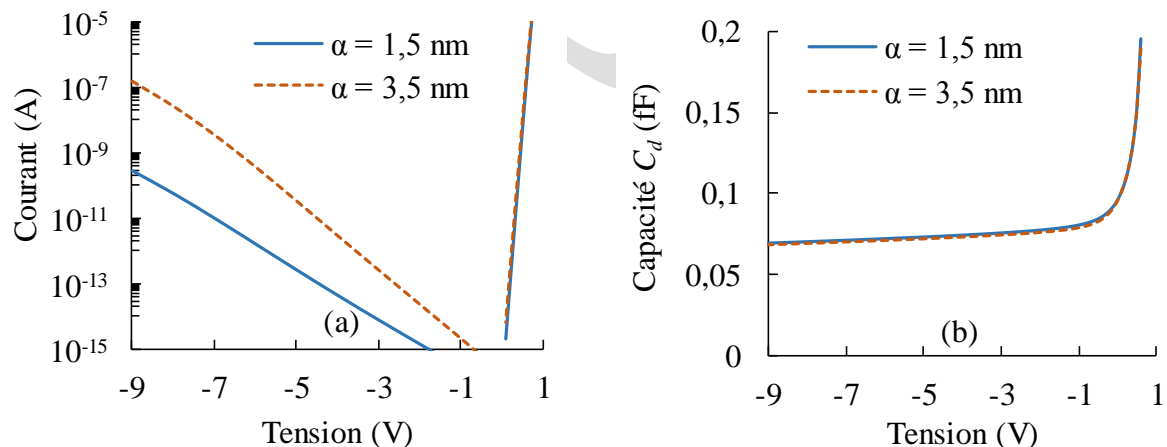


Figure IV-III.2.6 – Comparaison de (a) la caractéristique statique et de (b) la capacité de déplétion en fonction de la tension sur GaN pour $\alpha = 1,5$ nm et $\alpha = 3,5$ nm avec un dopage égal à 10^{17} cm⁻³ dans la zone N et une longueur de 100 nm ($S = 0,1$ μm^2)

Le facteur premier de la diode Schottky qui affecte le rendement du circuit de détection est la hauteur de barrière à l'interface métal/SC. Le SC le plus adapté reste donc l'InGaAs pour de la détection à polarisation nulle. Les différentes études présentées convergent vers

une diode courte (de quelques dizaines de nanomètres) avec un faible dopage pour limiter la ZQN et les pertes dans cette zone ainsi qu'une surface réduite pour maximiser l'excursion en tension. Il faut cependant avoir en mémoire qu'une réduction de la surface entraîne une diminution de la capacité de déplétion et la capacité parasite n'est plus négligeable, ce qui entraîne une dégradation du rendement.

Le tableau IV-III.2.3 présente les caractéristiques de trois diodes fabriquées sur InGaAs – [Han13], [Zin13] et [Hus17] – pour de la détection. L'article le plus récent [Hus17] a conçu une diode sur couche mince d'une trentaine de nanomètre dopée à $7 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ avec une surface de $140 \text{ nm} \times 140 \text{ nm}$ pour de la détection à 28,3 THz, ce qui confirme les conclusions énoncées précédemment sur les caractéristiques optimales de la diode Schottky pour cette application. Deux métaux différents ont été choisis pour chacun des contacts et un δ -dopage ($2 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$) de quelques nanomètres a été utilisé pour réaliser le contact ohmique, minimisant ainsi l'effet de la résistance série.

	[Han13]	[Zin13]	[Hus17]
Dopage N (cm^{-3})	5×10^{16}	2×10^{17}	7×10^{15}
Longueur N (nm)	100	200	30
Dopage N⁺ (cm^{-3})	2×10^{18}	3×10^{19}	2×10^{19}
Longueur N⁺ (nm)	800	1500	2
Diamètre anode (μm)	3	2	--
Surface (μm^2)	7,07	3,14	0,0196
Facteur d'idéalité	1,26	1,185	1,3
Résistance série (Ω)	110	3,32	$\sim 20 \Omega$
Responsivity (V/W)	98,5	--	--
NEP ($\text{pW}/\sqrt{\text{Hz}}$)	106,6	--	--
Tension de coude (V)	--	$< 0,2$	-
Courant saturation (A)	--	$0,58 \times 10^{-6}$	$1,96 \times 10^{-7}$
Résistance d. 0 V (Ω)	--	$52,9 \times 10^3$	172×10^3
Capacité à 0 V (fF)	--	9,1	0,0724

Tableau IV-III.2.3 – Caractéristiques des diodes Schottky sur InGaAs trouvées dans la littérature pour la détection

3. Modification de la géométrie de la jonction métal/SC

Bien que le GaAs ne soit pas vraiment adapté pour de la rectification à polarisation nulle à cause de sa hauteur de barrière élevée, des diodes Schottky sur GaAs ont été fabriquées pour cette application en modifiant la géométrie de la jonction métal/SC [Cas11] pour obtenir une résistance dynamique de l'ordre de 100 k Ω à polarisation nulle. Le dopage de la couche N, égal à 10^{18} cm $^{-3}$, permettrait d'augmenter le courant par effet tunnel en se rapprochant d'un comportement de type ohmique tout en gardant un effet redresseur. Par ailleurs, la zone N est relativement courte (100 nm) et la couche N $^+$ mesure 1 μ m avec un dopage de 5×10^{18} cm $^{-3}$.

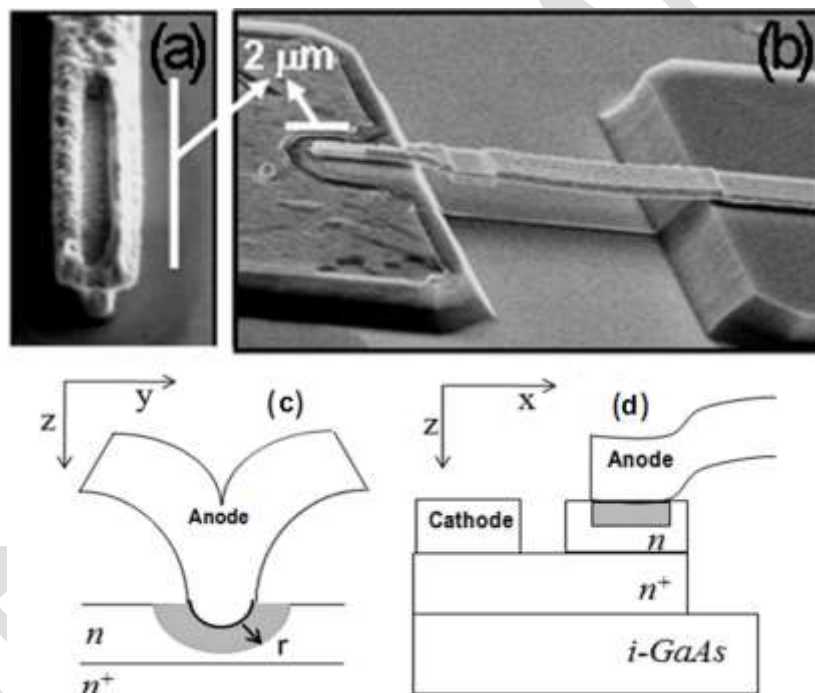


Figure IV-III.3.1 – (a – b) Image de la diode en T avec une empreinte rectangulaire et (c – d) représentation schématique de la géométrie de la jonction dans deux plans distincts [Cas11]

Il s'agit d'une anode en «T» avec une empreinte rectangulaire de dimension $0,2 \mu\text{m} \times 2 \mu\text{m}$. On constate sur la figure IV-III.3.1 (c) que le contact entre le métal et le SC n'est pas plat mais a un profil cylindrique, modifiant ainsi les propriétés de la jonction. On propose d'étudier analytiquement les caractéristiques de cette jonction avec une représentation cylindrique. On suppose que les grandeurs sont invariantes suivant x et suivant θ et ne dépendent que de r , ce qui n'est pas forcément vérifié à chaque extrémité du cylindre et lorsque la zone N $^+$ commence à être déplétée. L'équation de Poisson s'écrit :

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial \phi}{\partial r} \right) = \frac{qN_d}{\varepsilon_0 \varepsilon_r} \text{ avec } r_0 \leq r \leq r_0 + W \quad (\text{IV-III.3.1})$$

La solution de cette équation différentielle vérifie, en choisissant les conditions aux limites appropriées en $x = 0$ et en $x = W$ sur le champ électrique et le potentiel :

$$\phi(r) = \frac{qN_d}{4\varepsilon_0 \varepsilon_r} (r^2 - r_0^2) - \frac{qN_d}{2\varepsilon_0 \varepsilon_r} (r_0 + W)^2 \ln \left(\frac{r}{r_0} \right) + \phi_{bn} \text{ pour } r_0 \leq r \leq r_0 + W \quad (\text{IV-III.3.2})$$

avec $W = r_0 \left[\sqrt{\exp \left(W_0 \left(\frac{4e^{-1} \varepsilon_0 \varepsilon_r V_d}{qN_d r_0^2} - e^{-1} \right) + 1 \right)} - 1 \right]$ où W_0 représente la fonction de Lambert définie sur l'intervalle $[-1/e ; +\infty[$ à valeurs réelles supérieures ou égales à -1 .

En prenant la référence $r = 0$ au début de la zone de charge d'espace, le potentiel et le champ électrique le long de la structure s'écrivent :

$$\begin{cases} \phi(r) = \frac{qN_d r}{4\varepsilon_0 \varepsilon_r} (r + 2r_0) - \frac{qN_d}{2\varepsilon_0 \varepsilon_r} (r_0 + W)^2 \ln \left(1 + \frac{r}{r_0} \right) + \phi_{bn} \\ F(r) = \frac{qN_d}{2\varepsilon_0 \varepsilon_r} \frac{(r + 2r_0 + W)(W - r)}{r + r_0} \end{cases} \text{ pour } 0 \leq r \leq W \quad (\text{IV-III.3.3})$$

En faisant tendre r_0 vers l'infini, on retrouve les résultats dans le cas d'une jonction plate.

Pour une polarisation donnée, le champ électrique est plus intense avec ce type de jonction comparé à une jonction plate. Ceci a pour effet de réduire l'épaisseur de la barrière et d'augmenter le courant par effet tunnel.

La figure **IV-III.3.2** représente une comparaison du courant total calculé numériquement comme décrit dans la section **II-I.4.2** avec l'utilisation des matrices de transfert pour l'effet tunnel. La diode fabriquée présente une caractéristique statique I(V) avec un coefficient d'idéalité proche de 8 en direct. Bien que les articles [Cas11]-[Ort12] avance qu'un tel comportement est dû à la diminution de l'épaisseur de la barrière et à l'augmentation de l'effet tunnel, ceci ne peut expliquer à lui seul une valeur si élevée du coefficient d'idéalité. On pourrait l'expliquer par une hauteur de barrière plus faible qui dépend du champ électrique maximal à l'interface [Rho82] à cause des états d'interface. Par ailleurs, une limite forte du modèle proposé concerne la hauteur de barrière du contact métal/SC : celle-ci dépend de la

direction cristallographique dans le SC. Or, nous avons supposé qu'elle était identique quelle que soit l'angle θ , ce qui est faux en pratique...

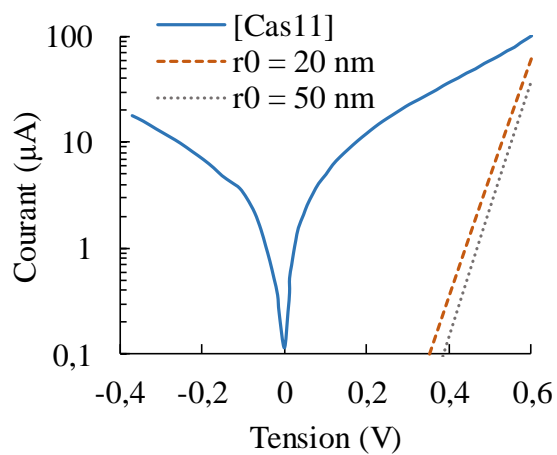


Figure IV-III.3.2 – Comparaison de la caractéristique statique avec les données expérimentales [Cas11] et le modèle analytique pour $r_0 = 20$ nm et $r_0 = 50$ nm en calculant numériquement le coefficient de transmission.

IV. Conclusions

De tous les SC présentés, l'InGaAs semble être le SC le plus adapté pour la détection à polarisation nulle grâce à sa faible hauteur de barrière, lui offrant ainsi une grande sensibilité. Le GaN n'est en revanche pas vraiment adapté. Bien que les propriétés de transport du GaAs soient intéressantes, sa hauteur de barrière assez élevée ne lui permet pas d'avoir des rendements élevés pour la détection aux fréquences THz. Comme sa technologie est bien maîtrisée, certains auteurs ont tenté de modifier le profil de la jonction en passant d'un profil classique plat à un profil cylindrique. Ils sont parvenus à obtenir une résistance dynamique autour de 0 V d'une centaine de kiloOhms pour améliorer sa sensibilité. Les auteurs attribuent cette valeur à l'augmentation de l'effet tunnel à l'interface métal/SC due conjointement à ce type de profil et au dopage très élevé (10^{18} cm^{-3}). Nous avons montré que cette justification n'était pas suffisante et une modélisation plus précise du profil devrait être menée, bien que délicate à effectuer. En effet, la hauteur de barrière dépend de la direction cristallographique et une étude plus approfondie sur la nature de cette interface métal/SC avec un tel profil serait nécessaire.

Pour conclure, une diode Schottky optimale pour la détection semble donc converger vers un couple métal/SC présentant une faible hauteur de barrière telle que l'InGaAs (sur Ti-Pt-Au par exemple) et une zone N relativement petite (quelques dizaines de nanomètres). En effet, une modulation de la ZCE n'est pas recherchée pour la détection et une réduction de la zone N permet de la rendre quasiment toujours déplétée afin de diminuer la résistance série. Un faible dopage de la zone N va également dans ce sens puisque la ZCE est plus étendue. Ces conclusions sont en accord avec des diodes sur couche mince de type métal/SC/métal qui ont récemment été fabriquées sur InGaAs [Hus17] pour des applications de détection à 28,3 THz avec un dopage de $7 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ et une longueur de 30 nm pour la zone N.

Bibliographie

- [Car15] G. Carpintero, E. Garcia-Munoz, H. Hartnagel, S. Preu, et A. Räisänen, *Semiconductor TeraHertz Technology: Devices and Systems at Room Temperature Operation*. John Wiley & Sons, 2015.
- [Cas11] R. Casini, A. Di Gaspare, E. Giovine, A. Notargiacomo, M. Ortolani, et V. Foglietti, « Three-dimensional shaping of sub-micron GaAs Schottky junctions for zero-bias terahertz rectification », *Appl. Phys. Lett.*, vol. 99, n° 26, p. 263505, déc. 2011.
- [Cow66] A. M. Cowley et H. O. Sorensen, « Quantitative Comparison of Solid-State Microwave Detectors », *IEEE Trans. Microw. Theory Tech.*, vol. 14, n° 12, p. 588-602, déc. 1966.
- [Han13] S.-P. Han *et al.*, « InGaAs Schottky barrier diode array detector for a real-time compact terahertz line scanner », *Opt. Express*, vol. 21, n° 22, p. 25874-25882, nov. 2013.
- [Hat82] K. Hattori, M. Yuito, et T. Amakusa, « Electrical Characteristics of the InSb Schottky Diode », *Phys. Status Solidi A*, vol. 73, n° 1, p. 157-164, sept. 1982.
- [Hus17] R. Hussin, L. Liu, et Y. Luo, « Thin Film In_{0.53}Ga_{0.47}As Schottky Diodes for 28.3-THz Detection », *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. 64, n° 11, p. 4450-4456, nov. 2017.
- [Jin13] Z. Jingtao, Y. Chengyue, G. Ji, et J. Zhi, « Planar InP-based Schottky barrier diodes for terahertz applications », *J. Semicond.*, vol. 34, n° 6, p. 064003, 2013.
- [Mon12] G. Monti, F. Congedo, D. De Donno, et L. Tarricone, « Monopole-Based Rectenna for Microwave Energy Harvesting of UHF RFID Systems », *Prog. Electromagn. Res.*, vol. 31, p. 109-121, 2012.
- [Nad17] S. Nadar *et al.*, « High Performance Heterostructure Low Barrier Diodes for Sub-THz Detection », *IEEE Trans. Terahertz Sci. Technol.*, vol. 7, n° 6, p. 780-788, nov. 2017.
- [Ohi13] T. Ohira, « Power efficiency and optimum load formulas on RF rectifiers featuring flow-angle equations », *IEICE Electronics Express*, juin 2013.
- [Opr10] I. Oprea, A. Walber, O. Cojocari, H. Gibson, R. Zimmermann, et H. L. Hartnagel, « 183 GHz miwer on InGaAs Schottky diodes », *21st International Symposium on space terhartez technology*, mars 2010.
- [Ort12] M. Ortolani, A. D. Gaspare, R. Casini, E. Giovine, S. Lupi, et V. Foglietti, « Fabrication and Characterization of Quasi-Optical Terahertz Nanorectifiers with Integrated Antennas », *J. Phys. Conf. Ser.*, vol. 359, n° 1, p. 012017, 2012.

- [Sch08] E. Schlecht and R. Lin, « Schottky diode mixers on gallium arsenide antimonide or indium gallium arsenide? », *19th. Int. Symp. Space THz Technol.*, Groningen, The Netherlands, Apr. 2008, pp. 221–223.
- [Sie07] P. Siegel, « Microrectenna: A Terahertz Antenna and Rectifier on a Chip », *Nasa Tech Briefs*, sept. 2007.
- [Sze06] S. M. Sze et K. K. Ng, *Physics of Semiconductor Devices*. John Wiley & Sons, 2006.
- [Tak10] H. Takhedmit, *Modélisation et conception de circuits de réception complexes pour la transmission d'énergie sans fil à 2.45 GHz*, Thèse, Ecully, Ecole centrale de Lyon, 2010.
- [Tor48] H. C. Torrey et C. A. Whitmer, « Crystal Rectifiers », New-York, NY, USA: McGraw-Hill, 1948
- [Yan13] Y. Wu, J. P. Linnartz, H. Gao, M. K. Matters-Kammerer, et P. Baltus, « Modeling of RF energy scavenging for batteryless wireless sensors with low input power », in *2013 IEEE 24th Annual International Symposium on Personal, Indoor, and Mobile Radio Communications (PIMRC)*, 2013, p. 527–531.
- [Yua11] Z. Yuan, A. Nainani, Y. Sun, J.-Y. J. Lin, P. Pianetta, et K. C. Saraswat, « Schottky barrier height reduction for metal/n-GaSb contact by inserting TiO₂ interfacial layer with low tunneling resistance », *Appl. Phys. Lett.*, vol. 98, n° 17, p. 172106, avr. 2011.
- [Zin13] Z. Jingtao, Y. Chengyue, G. Ji, et J. Zhi, « Planar InP-based Schottky barrier diodes for terahertz applications », *J. Semicond.*, vol. 34, n° 6, p. 064003, 2013.

CHAPITRE V

CONCLUSION ET PERSPECTIVES

Dans le cadre de ce travail de thèse, un simulateur Monte-Carlo résolvant l'équation de Boltzmann couplée à l'équation de Poisson a été développé pour analyser et optimiser les performances de diodes Schottky aux fréquences THz dans des applications de multiplication de fréquence et de rectification.

Le chapitre II constitue une part importante du travail de cette thèse avec la modélisation 1D de la diode Schottky et une modélisation électrique issue de la modélisation physique. Une attention particulière a été apportée sur la condition aux limites du côté du contact ohmique dans le cas d'un SC fortement dopé car elle conditionne sensiblement le courant du côté du contact Schottky. La distribution de vitesse des particules injectées a été modifiée pour s'adapter à cette configuration de SC dégénéré et une zone tampon de quelques dizaines de nanomètres a été ajoutée pour limiter l'apparition d'un artefact sur la concentration de porteurs et donc sur le potentiel et le champ électrique au voisinage du contact ohmique. Le principe d'exclusion de Pauli a été mis en œuvre par la technique de réjection introduite par Lugli et Ferry [Lug85], en 1985, via l'ajout d'un traitement spécifique des particules après leur vol libre. Une discrétisation sphérique, originale, de l'espace réciproque a été tentée mais elle augmente d'un facteur deux le temps de simulation.

Tout ce travail concourt à montrer que la diode Schottky est un composant largement contrôlée par son interface métal/SC et que les modèles permettant d'apprécier la hauteur de barrière restent encore aujourd'hui des sujets de discussion [Tun14] alors que le premier modèle avait déjà été proposé par Schottky en 1939 [Sch39]. Le modèle choisi (modèle de Rhoderick et Williams) considère une hauteur de barrière variant linéairement avec le champ électrique par l'entremise d'un paramètre α . Celui-ci n'a quasiment pas d'influence sur la capacité de déplétion en fonction de la polarisation mais modifie nettement la caractéristique courant-tension en régime inverse. D'autres effets au voisinage de l'interface métal/SC tels que l'effet tunnel ou encore l'effet de force image contribuent à augmenter le courant.

En ne considérant aucun autre effet physique spécifique à l'interface métal/SC, la caractéristique $I(V)$ issue de la modélisation MC semble se rapprocher du modèle de l'émission thermoïonique dans lequel le courant est conditionné par l'émission des électrons

au-dessus de la barrière. Ceci indique que la nature du transport et la dynamique des électrons dans la ZCE n'est pas déterminant sur la caractéristique statique et que c'est l'interface qui contrôle essentiellement le courant. Cela nous a interpellé au début de ce travail. Le code MC aujourd'hui disponible, est à l'état de l'art concernant la modélisation de diodes Schottky. Il demeure cependant perfectible.

L'optimisation des caractéristiques de la diode Schottky ne peut être menée indépendamment de l'environnement dans lequel elle est insérée suivant l'application visée. Le couplage d'un code MC avec un code d'Equilibrage Harmonique pour la simulation des circuits non-linéaires n'a pas été développé dans l'équipe. Outre la difficulté inhérente à la démarche, il ne permettrait pas une optimisation simple et efficace de la diode. La solution la plus simple a donc consisté dans le recours à un modèle électrique s'appuyant sur des schémas équivalents « petit-signal » avec des éléments dépendants de la polarisation. Et ce modèle a été inséré dans un logiciel de simulation de circuits commercial, ADS. Ce schéma électrique a été amélioré par rapport au circuit BF classique de la diode Schottky, afin de pouvoir fonctionner jusqu'au THz, grâce à l'ajout d'inductances et de capacités modélisant finement la ZQN et la zone N^+ où le courant de déplacement et l'effet inertiel des porteurs jouent un rôle.

Plusieurs techniques ont donc été présentées pour déterminer l'évolution de ces éléments en fonction de la tension à partir du simulateur MC, depuis la réponse en courant à diverses excitations de faible amplitude à fréquence variable jusqu'à l'étude des fluctuations de courant et tension (bruit). La technique la plus performante mais la plus longue reste d'appliquer plusieurs excitations sinusoïdales de faible amplitude à différentes fréquences.

Après la détermination des éléments du schéma par une méthode des moindres carrés, nous avons constaté une très bonne adéquation entre les impédances déduites du MC et celles du schéma électrique complet jusqu'au THz avec la valeur des éléments, illustrant ainsi la pertinence du schéma. Dans le même temps, nous avons souligné les limites d'un modèle dérive-diffusion (par exemple utilisé par le logiciel commercial Silvaco) qui ne permet pas de prendre en compte l'effet inertiel des porteurs qui intervient massivement dans la bande de fréquence THz.

Nous avons également mis en lumière les limites de l'approche « quasi-statique » adoptée. Elle ne peut en aucun cas reproduire le comportement de la diode dans toutes les configurations dans lesquelles nous l'avons placée. En imposant des excitations sinusoïdales de forte amplitude et/ou de fréquence élevée, nous avons pu constater une erreur importante sur les courants de conduction déduits du MC et ceux déduits de la simulation électrique. En

effet, la vitesse de modulation de la ZCE ne peut excéder la vitesse maximale des porteurs et ce phénomène physique n'a pas été modélisé électriquement.

Nous avons aussi souligné l'absolu nécessité de modéliser finement l'ionisation par choc et l'abaissement de la barrière de potentiel Métal/SC en inverse (les deux mécanismes étant liés) pour prétendre se rapprocher du comportement de véritables dispositifs. Nous ne savons pas comment les effets produits par ces deux mécanismes pourraient être fidèlement simulés par un modèle électrique. Nous avons choisi par manque de temps d'inclure l'ionisation par choc via une tension de claquage. C'est notoirement insuffisant et constitue la limite actuelle de notre démarche.

Les chapitres III et IV nous ont permis de dégager les caractéristiques optimales de la diode Schottky pour la multiplication de fréquence et pour la rectification aux réserves soulevées par les deux précédents paragraphes près. La non-linéarité recherchée – capacitive associée à la capacité de déplétion pour la multiplication ou résistive associée à la caractéristique statique pour la rectification – n'étant pas la même pour chaque application, il n'est pas étonnant d'obtenir des caractéristiques optimales assez différentes.

Pour la multiplication de fréquence, une optimisation multidimensionnelle de la diode sur GaAs conduit à un dopage de $9 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ et une longueur de 50 nm dans la zone N avec un rendement de 90 % pour une fréquence d'entrée égale à 500 GHz et une puissance d'entrée de 10 dBm. Aucune diode n'a été trouvée dans la littérature avec un tel niveau de dopage et une longueur si faible. Il est en effet assez difficile d'établir une comparaison directe avec des publications car l'optimisation de la diode est en partie liée à l'environnement dans lequel elle est située. Cependant, le dopage optimal pour des longueurs de zone N de quelques centaines de nanomètres n'est pas éloigné de ce qu'on peut trouver dans la littérature [Mai03] [Cha04] [Mor17]. Pour une longueur de 200 nm, un dopage optimal entre $2,3 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ et $2,7 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ a été trouvé suivant la puissance et la fréquence d'entrée. Les valeurs des surfaces optimales sont quant à elles difficilement comparables avec des publications car plusieurs diodes sont généralement insérées dans le circuit [War04] et nous en avons considéré qu'une seule dans une configuration simple. Il faudrait tendre vers des structures dites « balancées » en prenant une ou plusieurs paires de diodes. Bien qu'une simulation de ce type de structure ait été tentée, des gros problèmes de convergence ont été observés et aucun résultat n'a pu être obtenu.

La modification du profil de dopage a été évoquée dans plusieurs articles comme un moyen d'améliorer le rendement des multiplieurs avec un profil hyper-abrupte [Heo15] [Gol17]. Les quelques configurations choisies n'ont pas permis de vérifier cette assertion mais

il faudrait réaliser un travail plus approfondi sur ce point. En effet, l'espace des configurations est agrandi avec ce nouveau profil puisque l'expression du dopage en fonction de la distance fait intervenir trois paramètres supplémentaires.

Pour la rectification, une diode Schottky réalisée à partir d'un couple métal/SC présentant une faible hauteur de barrière pour améliorer sa sensibilité, semble optimale. L'InGaAs sur Ti-Pt-Au, avec une hauteur de barrière d'environ 0,21 eV constitue une configuration de choix pour cette application. La longueur de la zone N doit être faible (quelques dizaines de nanomètres) pour limiter la ZQN et les pertes liées à la résistance. Un faible dopage va également dans ce sens puisque la ZCE est plus étendue pour un même point de polarisation. Les meilleurs rendements étaient obtenus pour une surface de diode la plus faible possible. Cette surface ne peut bien sûr être réduite indéfiniment car d'autres effets parasites tels que la capacité due aux effets 2D deviennent problématiques. Ces résultats concordent avec la fabrication récente [Hus17] de diodes Schottky sur InGaAs pour des applications de détection à 28,3 THz avec un dopage de $7 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ et une longueur de 30 nm pour la zone N.

Quelques perspectives

Bien qu'un modèle électrique soit plus pratique à utiliser dans un logiciel de simulation, nous avons pu en voir les limites tout au long de ce manuscrit :

- L'effet dit de saturation de la vitesse des porteurs, c'est-à-dire l'incapacité des électrons à suivre la vitesse à laquelle la ZCE est modulée au-delà d'une certaine puissance et/ou d'une certaine fréquence, n'est pas simple à transposer en un schéma électrique. En effet, il faudrait prendre en compte finement la dynamique des porteurs qui transfèrent dans les vallées supérieures et qui mettent un certain temps pour retourner en vallée centrale. Ce phénomène fait en plus intervenir des effets de survitesse et des effets non-stationnaires.
- Le mode opératoire proposé pour prendre en compte l'ionisation par choc est très approximatif. Il aurait fallu modéliser ce mécanisme dans le code MC couplé à l'espace réel en prenant en compte les trous avec une modélisation des mécanismes de recombinaison pour mieux estimer un seuil de claquage et ainsi mieux appréhender le comportement dynamique de la diode au voisinage de ce seuil.
- Nous avons étudié sur quelques configurations l'influence de la capacité parasite à cause des effets 2D et possiblement des états de surface entre l'oxyde et le SC mais nous n'avons pas intégrés ces effets pour toutes les configurations lors de l'optimisation. Il

faudrait faire évoluer le modèle 1D actuel en un modèle 2D pour pouvoir les prendre en compte dans le modèle électrique suivant les configurations choisies.

- Nous nous sommes focalisés sur les mécanismes intrinsèques de la diode Schottky pour sa modélisation électrique. Il faudrait également tenir compte plusieurs mécanismes extrinsèques parasites qui n'ont pas été adressés dans ce manuscrit : les résistances de contact, les résistances du métal, les inductances et les capacités parasites (incluant possiblement des effets de surface), la variation des grandeurs sur la surface de contact, telle qu'une inhomogénéité de la hauteur de barrière, les effets de bords, la distribution du champ au voisinage de la diode, les effets de géométrie 3D, l'effet de peau, etc...

Nous avons effectué une étude du bruit de la diode Schottky en étudiant les fluctuations de courant et de tension autour d'un point de polarisation pour déterminer l'impédance de la diode. Une description des densités spectrales de puissances associées à ces fluctuations a été faite. Il aurait été intéressant d'effectuer une étude en bruit par rapport aux différentes applications visées en ayant recours au bruit cyclostationnaire [Shi04].

Nous nous sommes focalisés sur le multiplieur de fréquence et un circuit de rectification au cours de ce manuscrit. L'autre circuit couramment utilisé au THz est le mélangeur. L'optimisation de la diode Schottky au sein de ce circuit semble plus complexe car elle fait intervenir un élément supplémentaire, l'oscillateur local.

L'auto-échauffement constitue également un facteur limitant les performances des multiplieurs de fréquence et des mélangeurs [Tan12]. Sa modélisation pourrait fournir une meilleure description de la diode Schottky.

Bibliographie

- [Cha04] G. Chattopadhyay, E. Schlecht, J. S. Ward, J. J. Gill, H. H. S. Javadi, F. Maiwald, et I. Mehdi, « An all-solid-state broad-band frequency multiplier chain at 1500 GHz », *IEEE Trans. Microw. Theory Techn.*, vol. 52, no. 5, pp. 1538–1547, May 2004.
- [Gol17] M. Golio, *RF and Microwave Semiconductor Device Handbook*. CRC Press, 2017.
- [Heo15] J.-W. Heo, S. Hong, S.-G. Choi, A. ul H. S. Rana, et H.-S. Kim, « Characteristics of GaAs varactor diode with hyperabrupt doping profile », *Phys. Status Solidi A*, vol. 212, n° 3, p. 612–616, mars 2015.
- [Hus17] R. Hussin, L. Liu, et Y. Luo, « Thin Film $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$ Schottky Diodes for 28.3-THz Detection », *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. 64, n° 11, p. 4450–4456, nov. 2017.
- [Mai03] F. Maiwald, E. Schlecht, A. Maestrini, G. Chattopadhyay, J. C. Pearson, D. Pukala, et I. Mehdi, « THz frequency multiplier chains based on planar Schottky diodes », *in Proc. SPIE*, vol.4855, pp. 447–458, fev. 2003.
- [Mor17] D. Moro Melgar, « Conception et Optimisation de la Tête Haute Fréquence d'un Récepteur Hétérodyne à 1,2 THz pour l'Instrument JUICE-SWI », Thèse, Université Pierre et Marie Curie, 2017.
- [Shi04] P. Shiktorov et *al.*, « Monte Carlo simulation of Schottky diodes operating under terahertz cyclostationary conditions », *IEEE Electron Device Lett.*, vol. 25, n° 1, p. 1–3, janv. 2004.
- [Tan12] A. Y. Tang, E. Schlecht, R. Lin, G. Chattopadhyay, C. Lee, J. Gill, I. Mehdi, and J. Stake. « Electro-Thermal Model for Multi-Anode Schottky Diode Multipliers ». *IEEE Trans. THz Sci. Technol.*, Vol. 2, No. 3, pp. 290–298, 2012.
- [Tun14] R. T. (董梓則) Tung, « The physics and chemistry of the Schottky barrier height », *Appl. Phys. Rev.*, vol. 1, n° 1, p. 011304, janv. 2014.