



REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE

MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR

ET DE LARECHERCHE SCIENTIFIQUE

UNIVERSITE DES FRERES MENTOURI CONSTANTINE 1

FACULTE DES SCIENCES ET DE LA TECHNOLOGIE

DEPARTEMENT D'ELECTRONIQUE



N°d'ordre :223/DS/2019

Série :19/Elec/2019

Thèse

Présenté pour obtenir le Diplôme de docteur en science

En électronique

Option

Instrumentation

Par

M^{me} : MOUZAOUI .BOUNEB Ilhem

Modélisation nanométrique des structures à gaz, multidimensionnelles à puits quantique

Soutenue le : 25 / 11 /2018

Devant le jury :

| | | |
|------------|------------|---|
| Président | A. TELIA | Prof université des frères Mentouri Constantine |
| Rapporteur | F. KERROUR | Prof université des frères Mentouri Constantine |
| Examineurs | F. DJEFFAL | Prof U. Mostfa Benboulaid Batna 2 |
| | R. MAHAMDI | Prof U. Mostfa Benboulaid Batna 2 |

Remerciements

Le travail présenté dans cette thèse a été effectué au sein de l'équipe de recherche, des systèmes à énergie renouvelable et composants nanométrique, du laboratoire MoDERNa, modélisation des dispositifs à énergie renouvelable et nanométrique, du département d'électronique de l'UFMC1.

Mes plus sincères remerciements s'adressent à monsieur F. KERROUR professeur à l'université des frères Mentouri de Constantine1, qui a dirigé ce travail, je lui exprime ma profonde gratitude pour l'honneur qu'il me fait en acceptant d'être mon rapporteur, ainsi que pour les conseils avisés et précieux qu'il a su me donner, et pour son aide efficace et constant tout au long de mes recherches.

Je tiens à remercier également monsieur A. TELIA, Professeur au département d'Électronique, à l'Université 1 de Constantine, pour l'honneur qu'il me fait en acceptant de présider ce jury de thèse de doctorat en sciences.

Je tiens vivement à remercier monsieur F. DJEFFAL professeur à l'université Mostefa Benboulaïd Batna 2 pour l'intérêt qu'il a porté à notre travail et pour l'honneur qu'il me fait en acceptant d'être membre de ce jury de thèse de doctorat en sciences.

Je remercie également monsieur R. MAHAMDI professeur à l'université Mostefa Benboulaïd Batna 2, pour avoir accepté d'examiner ce travail et je tiens à lui exprimer mes respects les plus sincères.

Merci à toutes les personnes que je n'ai pas citées et qui ont de près ou de loin contribué, chacune à sa manière, à l'achèvement de ce travail.

Je voudrais remercier également tous les membres de ma famille en particulier mes parents et mon mari de leur soutien et leurs encouragements tout au long de mon cursus.

Résumé

Ce travail est consacré à la simulation nanométrique d'un puits quantique en utilisant le logiciel COMSOL : dans une première étape nous avons calculé les états liés en régime valeur propre en 1D et 2D ; ce résultat est utilisé comme une donnée pour une deuxième étape qui est la résolution du système d'équations Poisson-Schrödinger où on a pu déterminer l'énergie potentielle et la fonction d'onde pour un état lié et avec une position des murs électriques bien déterminée.

On a utilisé le logiciel MATLAB pour la détermination de la variation du niveau de Fermi en fonction de la densité surfacique N_s . On a utilisé aussi une nouvelle expression de l'offset E_c en fonction du dopage effectif N_{Deff} ce qui nous a permis de modéliser le contrôle charge de l'hétéro-structure AlGaAs/GaAs, ainsi l'étude de l'effet de la polarisation spontanée et piézoélectrique sur la densité surfacique dans le canal d'un transistor à haute mobilité HEMT, à base d'hétéro-structure AlGaN/GaN, l'objectif visé était de faire une étude comparative de deux structures nanométriques à hétérojonction AlGaAs/GaAs et AlGaN/GaN.

Abstract

This work is dedicated to the nanometric modeling of a quantum well using the COMSOL software: in a first step we computed the bound states in eigenvalue regime in 1D and 2D; this result is used as a data for a second step which is the resolution of the Poisson-Schrodinger equation system where we have been able to determine the potential energy and the wave function for a bound state and with a position of the electric walls well determined.

The MATLAB software was used to determine the Fermi level variation as a function of the surface density n_s . we also used a new expression of the E_c offset as a function of the effective doping N_{Def} , which allowed us to model the charge control of the AlGaAs / GaAs heterostructure, thus studying the effect of spontaneous polarization and piezoelectric on the surface density in the channel of a HEMT high mobility transistor, based on AlGaN / GaN heterostructure, the objective was to make a comparative study of two nanometric structures AlGaAs / GaAs and AlGaN / GaN heterojunction

Table des matières

| | |
|-----------------------------|---|
| Introduction générale | 1 |
|-----------------------------|---|

Chapitre I : Généralités ,transistor HEMT

| | | |
|-------|---|----|
| I.1 | Introduction..... | 5 |
| I.2 | Propriétés des matériaux..... | 5 |
| I.2.1 | Composés GaAs..... | 5 |
| | a. Structure cristalline..... | 5 |
| | b. Structure de bande..... | 7 |
| | c. Propriétés électroniques..... | 7 |
| I.2.2 | Composés GaN..... | 9 |
| | a. Structure cristalline..... | 9 |
| | c. Propriétés électroniques..... | 9 |
| I.3. | Hétérojonctions | 10 |
| I.3.1 | Hétérojonction isotype et anisotype..... | 11 |
| I.3.2 | Hétérojonction graduelle et abrupte | 11 |
| I.3.3 | Hétérojonction de type I,II et III..... | 12 |
| I.4 | Effets quantiques dans les hétérojonctions..... | 13 |
| I.4.1 | Confinement quantique..... | 13 |
| I.4.2 | Discontinuités des bandes de conduction d'un puits quantique..... | 14 |
| I.4.3 | Occupation des sous bandes dans un puits quantique..... | 15 |
| I.4.4 | La densité surfacique..... | 16 |
| I.5 | Effet de la polarisation de l'hétérojonction AlGaN/GaN..... | 17 |

| | | |
|-------|--|----|
| I.5.1 | Polarisation spontanée..... | 18 |
| I.5.2 | Polarisation piézoélectrique..... | 18 |
| I.5.3 | Polarisation totale de l'empilement AlGa _N /Ga _N | 19 |
| I.6 | Transistor du HEMT..... | 21 |
| I.7 | Principe de fonctionnement d'un transistor HEMT..... | 22 |
| I.8 | Paramètres statiques du transistor HEMT..... | 24 |
| | Conclusion | 28 |
| | Bibliographie | 29 |

Chapitre II : Modélisation et simulation d'une structure quantique

| | | |
|----------|---|----|
| II.1 | Introduction..... | 33 |
| II.2 | Concentration électronique du gaz bidimensionnel..... | 35 |
| II.2.1. | Hétérojonction AlGaAs/GaAs..... | 36 |
| II.2.1.1 | Modèle de Delagebeaudeuf..... | 36 |
| II.2.1.2 | Modèle de Michel Wolny and al. | 40 |
| II.2.1.3 | Modèle pseudo-bidimensionnel d'un transistor pseudo morphique AlGaAs/InGaAs..... | 41 |
| II.2.2 | Hétérojonction AlGa _N /Ga _N | 43 |
| II.2.2.1 | Modèle « donneurs en surface »..... | 43 |
| II.2.2.2 | Modèle de Ridley..... | 45 |
| II.3 | Calcul de la concentration bidimensionnelle contrôlée par une grille Schottky d'un transistor HEMT..... | 46 |
| II.3.1 | Hétérojonction AlGaAs-n/GaAs..... | 48 |
| II.3.1.2 | Tension de seuil..... | 48 |

| | | |
|----------|--|----|
| II.3.1.2 | Dopage effectif | 48 |
| II.3.1.3 | L'offset E_c | 49 |
| II.3.1.4 | La densité surfacique | 49 |
| II.3.1.5 | Barrière de potentiel du contact Schottky..... | 49 |
| II.3.2 | Hétéro-structure AlGaN-n/GaN..... | 50 |
| | Conclusion | 51 |
| | Bibliographie | 53 |

Chapitre III : Simulation d'une structure nanométrique à puits quantique sous COMSOL

| | | |
|-------|--|----|
| III.1 | Introduction..... | 55 |
| III.2 | Environnement de simulation | 55 |
| III.3 | Méthodologie de conception et modélisation sous COMSOL..... | 56 |
| III.4 | Géométrie..... | 56 |
| III.5 | Matériaux | 58 |
| III.6 | Équations physiques et conditions aux limites..... | 58 |
| III.7 | Maillage..... | 60 |
| III.8 | Résultats et discussions..... | 61 |
| | III.8.1 Fonctions d'ondes associées à six états liés en modélisation 1D & 3D..... | 61 |
| | III.8.2 Fonctions d'ondes axiale pour chaque état liée au centre du cylindre | 67 |
| | III.8.3 Variation de la fonction d'ondes radiale pour chaque état lié à l'interface AlGaAs/GaAs..... | 67 |
| III.9 | Modélisation d'un puits quantique | 69 |
| | III.9.1 Equations Physiques et conditions aux limites..... | 70 |
| | III.9.2 Résultats et discussions de la simulation d'un puits quantique en 1D..... | 71 |
| | Conclusion | 74 |

| | |
|---------------------|----|
| Bibliographie | 75 |
|---------------------|----|

Chapitre IV : Résultats & discussions

| | |
|--|----|
| IV.1 Introduction | 77 |
| IV.2 Résultats et discussions..... | 77 |
| IV.2.1 Variation du niveau de Fermi $E_F = f(N_{\text{deff}})$ | 77 |
| IV.2.2 Variation du niveau de Fermi $E_F = f(N_s)$ | 78 |
| IV.2.3 Variation de N_s en fonction de la tension de la grille V_G | 80 |
| IV.2.4 Influence du taux d'Aluminium sur la variation de N_s en fonction de V_G pour l'hétérojonction AlGaIn/GaN et AlGaIn/GaAs..... | 83 |
| IV.2.5 Influence d'épaisseur d sur la variation de N_s en fonction de V_G pour l'hétérojonction AlGaIn/GaN et AlGaIn/GaAs..... | 86 |
| IV.2.6 Influence d'épaisseur d sur la variation de N_s en fonction de V_G | 89 |
| IV.3 Conclusion..... | 90 |
| Bibliographie..... | 92 |
| Conclusion générale..... | 94 |

Liste des figures

| | |
|--|----|
| Figure I-1 : a) Maille élémentaire de la structure zinc blende b) Vue de dessus de la structure zinc Blende | 6 |
| Figure I-2 : Première zone de Brillouin de la structure zinc-blende..... | 6 |
| Figure I-3 : Structure de bande du GaAs..... | 7 |
| Figure I-4: Les différentes structures du GaN | 9 |
| Figure I-5 : Hétérojonction graduelle..... | 11 |
| Figure I-6 : Hétérojonction abrupte..... | 11 |
| Figure. I-7 : Classification des hétérojonctions | 13 |
| Figure I-8 : Divers types de confinement..... | 14 |
| Figure I-9 : Diagramme énergétique d'un puits quantique..... | 14 |
| Figure I-10 : Densité d'état d'un système quasi bidimensionnel..... | 16 |
| Figure I-11 Représentation de l'empilement AlGaIn/GaN et des charges surfaciques induites pas les polarisations piézoélectriques spontanée..... | 20 |
| Figure I-12 : Structure de base d'un HEMT..... | 21 |
| Figure I-13 : Structure d'un transistor PHEMT..... | 22 |
| Figure I-14 : Evolution du diagramme de la bande de conduction avec la tension V_{GS} : canal pincé (figure en haut) et canal ouvert (figure en bas)..... | 23 |
| Figure I-15 : Réseau de caractéristiques d'un transistor HEMT..... | 24 |
| Figure I-16 : Évolution de la vitesse électronique en fonction du champ calculé par la méthode Monte Carlo..... | 24 |
| Figure I-17 : Variation de la capacité grille-drain en fonction de la tension de drain pour un $V_{gs}=0$ V pour un transistor P-HEMT 0,1 de $2 \times 25 \mu\text{m}$ de largeur de grille..... | 26 |
| Figure I-18: Schéma équivalent petit signal de base pour les transistors à effet de champ..... | 28 |
| Figure II-1: Évolution sous la grille de la forme du puits de potentiel en régime dynamique..... | 36 |
| Figure II-2 : Diagramme de bande d'une hétérojonction dont la couche d'accumulation est contrôlée par une jonction Schottky..... | 39 |
| FigureII-3 : Structure de bandes de transistor HEMT à l'équilibre (courbe en pointillé) et sous tension $v_g < 0$ (courbe entrait plein)..... | 40 |

| | |
|---|----|
| Figure II-4 : Diagramme de bande de conduction d'une structure HEMT : cap GaN/barrière/AlN espaceur/canal GaN..... | 44 |
| Figure II-5 : Diagramme de bande d'une structure HEMT selon le modèle de Ridley..... | 45 |
| Figure II-6 : Structure d'un transistor HEMT A- AlGaAs/GaAs B- - AlGaN/GaN | 47 |
| FigureII-7 : Bande de conduction de la structure métal/AlGaN/GaN..... | 50 |
| Figure. III-1: Les différentes étapes pour la création et la simulation d'un model sous COMSOL | 56 |
| Figure. III-2: Structure de l'heterojonctionAlGaAs/GaAs en 1D..... | 57 |
| Figure. III-3: Structure de l'heterojonctionAlGaAs/GaAs en 2D..... | 57 |
| Figure. III-4: Représentation de l'heterojonction cylindrique GaAs/AlGaAs en 2D axiymetrique maillée | 60 |
| Figure. III-5: Représentation 1D de la fonction d'onde psi (1) associée a l'état lié E ₁ pour l'hétérojonction GaAsAl/GaAS..... | 61 |
| Figure. III-6: Représentation 2D de la fonction d'onde psi(1) associée à l'état lié E ₁ pour l'hétérojonction GaAsAl/GaAS..... | 62 |
| Figure. III-7: Représentation de la fonction d'onde psi(2) l'hétérojonction GaAsAl / GaAS | 63 |
| Figure. III-8: Représentation 1D&3D de la fonction d'onde psi (3) associée a l' état lié E ₃ pour l'hétérojonction GaAsAl/GaAS | 64 |
| Figure. III-9: Représentation 1D & 3D de la fonction d'onde psi(4)associée a l' état lié E ₄ pour l'hétérojonction GaAsAl/GaAS..... | 65 |
| Figure. III-10: Représentation 1D de la fonction d'onde psi(5) = f(z) associée a l'état lié E ₅ pour l'hétérojonction GaAsAl/GaAs..... | 66 |
| Figure. III-11: Représentation 1D de la fonction d'onde psi(6)=f(z) associée a l' état lié E ₆ pour l'hétérojonction GaAsAl/GaAS..... | 66 |

| | |
|---|----|
| Figure. III-12: : Représentation des Fonctions d’ondes axiales pour chaque état lié au centre du cylindre pour diverses valeurs de R..... | 67 |
| Figure. III-13: Fonctions d’ondes pour chaque état liée au centre de cylindre le long du rayon r | 68 |
| Figure. III-14: Fonctions d’ondes radiales pour chaque état lié au centre de cylindre pour R=600 Å..... | 69 |
| Figure. III-15: l’énergie potentielle à l’interface de l’hétérojonction AlGaAs/GaAs pour un état lié E_{1s} /GaAs..... | 72 |
| Figure. III-16: Variation de l’énergie potentielle à l’interface de l’hétérojonction AlGaAs/GaAs pour diverses references..... | 73 |
| Figure. III-17: Représentation de la Fonction d’onde pour E_1 pour un puits quantique | 73 |
| Figure IV-1 :Variation du niveau de Fermi E_F en fonction du dopage effectif..... | 78 |
| Figure IV-2 :Variation du niveau de Fermi E_F en fonction de la densité surfacique..... | 79 |
| Figure. IV-3: Variation du niveau de Fermi E_F en fonction de la densité surfacique | 80 |
| Figure IV-4 : Variation de N_s en fonction V_G | 81 |
| Figure IV-4 .bis : Variation de N_s en fonction V_G dans-le TEGFET AlGaAs/GaAs..... | 81 |
| Figure IV-5 : Variation de N_s vs. $V_G(v)$ | 82 |
| Figure IV.6 : Influence du taux d’Alu sur la variation de N_s en fonction de V_{gs} pour AlGaAs/GaAs..... | 83 |
| Figure IV-6.bis : la variation de N_s en fonction de x pour $V_G = -1$ V..... | 83 |
| Figure IV.7 :Influence du taux d’Al sur la variation de N_s en fonction de V_G | 84 |
| FigureIV-7.bis : la variation de N_s en fonction de x pour $V_G = -1$ V..... | 85 |

| | |
|--|----|
| Figure IV-8 : Influence du taux d'Al sur la variation de N_s en fonction de V_G [13]..... | 85 |
| Figure IV-9 : Influence de l'épaisseur « dd » sur la variation de N_s | 86 |
| Figure IV-10 :Influence de l'épaisseur « dd » sur la variation de N_s en fonction de V_G | 88 |
| Figure IV-10 .bis Influence de l'épaisseur « dd » sur la variation de N_s en fonction de V_G | 88 |
| Figure IV-11 :Influence de l'épaisseur «dd » sur la variation de N_s en fonction de V_G résultats rapportés dans la référence..... | 88 |
| Figure IV-12 : Influence de l'épaisseur d sur la variation de N_s en fonction de V_G pour $dd=160\text{\AA}$ | 90 |
| Figure IV-13 :Influence de l'épaisseur d sur la variation de N_s en fonction de V_G résultats | 90 |

Liste des tableaux

| | |
|--|----|
| Tableau I.1 : Propriétés cristallines et électroniques des matériaux GaAs et AlGaAs | 8 |
| Tableau I-2 : Comparaison des propriétés de divers semiconducteurs..... | 10 |
| Tableau I-3. Polarisation spontanée, constantes et paramètres de maille des matériaux AlN et GaN | 18 |
| Tableau I.4 : constantes du matériau AlGaN..... | 19 |
| Tableau II.1 : Valeurs des coefficients..... | 42 |
| Tableau III-1: Les six valeurs des états liés pour l'hétérojonction GaAsAl/GaAs en 1D&2D dimension..... | 62 |
| Tableau III-2 : Paramètres pour la simulation d'un puits quantique..... | 70 |
| Tableau IV.1 : N_s pour $d=320\text{\AA}$, $x=0.25$ | 82 |

Introduction générale

INTRODUCTION GENERALE

L'évolution croissante du marché des télécommunications civiles, et la demande en moyens de communication extrêmement fiable et performante émanant du domaine militaire, poussent les composants électroniques entrant dans la conception des chaînes radiofréquences à atteindre leurs limites[1]. Ces composants doivent pouvoir opérer avec des signaux hautes fréquences de plusieurs gigahertz, émettre de fortes puissances, permettre de hauts rendements énergétiques tout en fonctionnant dans des environnements sévères (température, humidité, ...) et rester à moindre coût. L'ensemble de ces contraintes limitent les technologies traditionnelles sur substrat Silicium, c'est pourquoi de nouvelles filières technologiques sont investiguées[2, 3].

Les composants semi-conducteurs sont devenus le support privilégié de l'information et de la communication. Aujourd'hui, les transistors MOS sur silicium dominent très largement le marché des semi-conducteurs, mais la diminution de la longueur de grille des transistors n'est plus suffisante pour améliorer leurs performances. En particulier, pour les systèmes de télécommunications à haut débit, des composants plus rapides sont nécessaires. C'est pour cette raison qu'ont été proposées des structures alternatives : les hétéro-structures IV-IV ou III-V[4]. Ils utilisent des semi-conducteurs dans lesquels la masse effective des électrons est plus faible que dans le silicium massif, ce qui améliore leur mobilité. Les composants les plus performants dans ce domaine sont les transistors à effet de champ à hétérojonction (High Electron Mobility Transistor : HEMT).

Les composants dits III-V, en référence aux alliages composés des colonnes III et V du tableau périodique des éléments, se révèlent être de bons candidats pour réaliser ces objectifs et tout particulièrement le Nitrure de Gallium (GaN). En effet, comme nous le détaillerons dans ce manuscrit, ce matériau possède des propriétés intéressantes: un grand gap de 3.42eV permettant d'appliquer des tensions de plusieurs dizaines de Volts, une mobilité électronique ainsi qu'une conductivité thermique au moins comparable au Silicium, favorisant un fonctionnement à haute fréquence et sous de fortes puissances[5].

Le développement des hétéro-structures de matériaux semi-conducteurs a donné des illustrations claires de certains concepts de la mécanique quantique comme

le confinement ou la quantification des niveaux d'énergie. La nouvelle génération de dispositifs électroniques notamment le transistor HEMT a été développée mettant à profit ces effets quantiques. Le transistor HEMT ou TEGFET (Two Dimensional Electron Gas FET) est constitué essentiellement d'une hétérojonction GaAsAl/GaAs ou, cette hétérojonction est considérée comme l'hétérojonction abrupte de référence grâce aux paramètres de mailles très proches de GaAsAl et du GaAs et aussi grâce aux techniques de croissance avec lesquelles elle est fabriquée.

L'hétérojonction AlGaN/GaN présente un champ électrique interne important dû aux polarisations spontanées et piézoélectriques permettant la possibilité de réaliser un gaz d'électrons bidimensionnel 2DEG à l'interface avec une concentration très élevée comparée à d'autres hétérojonctions à base de GaAs en l'absence de toute modulation de dopage et excitation externe[5].

Dans ce contexte notre travail consiste en premier lieu à l'étude des phénomènes quantiques tels que la quantification d'énergie et le confinement des charges, unidimensionnelle (Puits quantique) et tridimensionnelle (boîte quantique), pour une hétérojonction cylindrique de type AlGaAs/GaAs. La résolution de l'équation de Schrödinger (décrivant ces phénomènes) avec les conditions aux limites de type Dirichlet et Neumann nous permet d'obtenir les valeurs propres des états liés et la fonction d'onde associée à chaque état. Par la suite nous avons utilisé ces valeurs propres pour effectuer la résolution auto cohérente du système d'équation Poisson-Schrödinger pour un puits quantique, qui nous a permis de déterminer l'énergie potentielle et la fonction d'onde caractérisant un puits quantique pour un état lié.

La deuxième partie de notre thèse consiste à contrôler par une grille de type Schottky de la concentration électronique du gaz bidimensionnel existant à l'interface de l'hétérojonction nanométrique. Où on a également obtenu la variation du niveau de Fermi E_F en fonction de la densité surfacique N_s . Une analyse comparative entre deux hétéro-structures différentes (AlGaAs/GaAs et AlGaN/GaN), dont nous avons analysé les effets des différents paramètres technologiques tels que le taux d'aluminium et le dopage effectif et les paramètres géométriques tel que l'épaisseur de la couche donneuse et l'épaisseur de l'espaceur (spacer) sur la densité N_s du 2DEG en fonction de la tension V_G en tenant compte des effets des polarisations piézoélectrique et spontanée pour l'hétérojonction AlGaN/GaN .

Cette thèse est répartie en quatre chapitres:

Le premier chapitre introduit les bases théoriques, et les notions fondamentales indispensables pour la compréhension de l'ensemble de cette étude passant en premier lieu, par les propriétés du matériau utilisé, où on a porté notre choix sur les matériaux III-V, tels que GaAs, GaN et Les alliages $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, AlGaIn. Nous avons mis aussi en évidence l'existence d'un puits quantique d'une simple hétérojonction, qui en effet résulte de façon directe de la discontinuité de la bande de conduction au niveau de l'interface, et dont les caractéristiques en dépendent. En outre, Le développement des hétéro-structures de matériaux semi-conducteurs a donné des illustrations claires de certains concepts de la mécanique quantique comme le confinement ou la quantification des niveaux d'énergie. Dans la structure du GaN hexagonal, le matériau GaN ainsi que son composé AlGaIn sont le siège de deux polarisations : la polarisation spontanée et la polarisation piézoélectrique. Une des applications de ces structures est le transistor HEMT passant par sa structure, son principe de fonctionnement et les paramètres statiques de ce transistor.

Le deuxième chapitre est consacré à l'étude d'une application des hétéro-structure qui est le transistor HEMT ou le développement de l'épitaxie par jets moléculaires a permis la réalisation des hétérojonctions déjà utilisées dans de nombreux dispositifs tels que les diodes laser et les transistors bipolaires. Plus précisément Dingle en 1978, a montré que l'hétérojonction AlGaAs/GaAs est le siège d'une charge d'accumulation d'électrons extrêmement mobiles dans certaines conditions. En modulant cette charge par un contact Schottky déposé sur l'un des matériaux, on obtient un transistor à effet de champ dont les propriétés devraient être particulièrement intéressantes. On a présenté aussi les différentes approches qui déterminent la densité surfacique contrôlée par un contact Schottky précisant les hypothèses et les méthodes de calcul pour chaque modèle proposé.

Dans le troisième chapitre on a présenté la modélisation d'une structure à hétérojonction de forme cylindrique à puits quantique et à boîte quantique sous environnement COMSOL Multiphysics. L'objectif principal a été l'étude des phénomènes quantiques tels que la quantification d'énergie et le confinement des charges, unidimensionnelle (Puits quantique) et tridimensionnelle (boîte quantique), pour une hétérojonction cylindrique de type AlGaAs/GaAs. La résolution de l'équation de Schrödinger (décrivant ces phénomènes) avec les conditions aux limites de type Dirichlet et Neumann nous a permis de déterminer les valeurs propres des états liés et la fonction d'onde associée à chaque état. Ces valeurs propres sont

utilisées pour effectuer la résolution auto cohérent du système d'équation Poisson–Schrödinger pour un puits quantique, qui nous permet de déterminer l'énergie potentielle et la fonction d'onde caractérisant un puits quantique pour un état lié.

Dans le quatrième chapitre, nous avons présenté les résultats obtenus des modèles établis pour les deux structures nanométriques à hétérojonction AlGaAs/GaAs et AlGaN/GaN. L'objectif visé était de faire une étude comparative de ces deux structures. En introduisant deux nouvelles expressions ($E_c=f(x)$, $N_s=f(E_F)$), nous avons pu modéliser le contrôle de charge de l'hétéro-structure AlGaAs/GaAs. Ainsi nous avons aussi déterminé l'effet de la polarisation spontanée et piézoélectrique sur la densité surfacique dans le canal d'un transistor à haute mobilité HEMT à hétérojonction AlGaN/GaN. Une étude complémentaire de l'influence des paramètres physique (taux d'aluminium x) et technologique (épaisseur de la couche donneuse et l'épaisseur de l'espaceur) sur la densité surfacique contrôlée par un contact Schottky a été achevée. On terminera par une conclusion et perspectives.

1. Delagebeaudeuf, D., et al., *Two-dimensional electron gas MESFET structure*. Electronics Letters, 1980. **16**(17): p. 667-668.
2. Cappy, A., et al., *Etude théorique et expérimentale du transistor à effet de champ à hétérojonction*. Revue de physique appliquée, 1983. **18**(11): p. 719-726.
3. Cappy, A., *Propriétés physiques et performances potentielles des composants submicroniques à effet de champ: structures conventionnelles et à gaz d'électrons bidimensionnel*. 1986, Lille 1.
4. Bouneb, I., *Contribution à la modélisation d'une structure nanométrique*. 2009.
5. Ambacher, O., et al., *Two-dimensional electron gases induced by spontaneous and piezoelectric polarization charges in N-and Ga-face AlGaN/GaN heterostructures*. Journal of applied physics, 1999. **85**(6): p. 3222-3233.

Chapitre I

Généralités : Transistor HEMT

I.1 Introduction

Les premiers transistors à haute mobilité électronique ont été réalisés en 1980 par Thomson-CSF et Fujitsu [1, 2] sous les noms respectifs de TEGFET (Two Dimensional Electron Gas Field Effect Transistor) et HEMT (High Electron Mobility Transistor). Plusieurs autres appellations ont été utilisées pour les définir telle que MODFET (Modulated Doped Field Effect Transistor) et HFET (Heterojunction Field Effect Transistor) [3-6]. Mais de nos jours, le nom HEMT est le plus couramment utilisé. Les premiers HEMTs ont été réalisés à base d'Arséniure de Gallium (GaAs) [2, 7].

Dans ce chapitre nous introduisons les bases théoriques, et les notions fondamentales indispensables pour la compréhension de l'ensemble de cette étude passant premièrement par les propriétés physiques et électriques des matériaux utilisés tels que : GaAs, AlGaAs, GaN et AlGaN. Ces derniers ont des caractéristiques intéressantes pour la réalisation des transistors HEMT.

I.2 Propriétés des matériaux

Les matériaux III-V sont constitués des éléments des colonnes IIIb et Vb de la classification périodique des éléments, offrant ainsi, la possibilité de réaliser divers composés binaires. Les semi-conducteurs III-V sont en majorité à gap direct [8, 9]. L'arséniure de gallium GaAs, avec un gap de 1,414 eV et le phosphore d'indium InP, avec un gap de 1,35 eV sont les plus utilisés, notamment, dans le domaine de l'optoélectronique et les lasers semi-conducteurs. La famille de semi-conducteurs III-V s'est agrandie par la venue d'un nouveau matériau, le nitrure de gallium (GaN). Également à gap direct, le gap du GaN atteint 3,43 eV à 300 K.

I.2.1 Composés GaAs

a. Structure cristalline

Le composé de l'arséniure de gallium (GaAs) ainsi que l'alliage ternaire arséniure de gallium-aluminium (AlGaAs) appartiennent aux groupes III-V. Ils cristallisent dans la structure Zinc-Blende. Cette structure s'apparente à celle du diamant (C), et elle est constituée de deux sous-réseaux à faces centrées l'un d'éléments III l'autre d'éléments V caractérisée par deux sous-réseaux à faces

centrées décalés l'un par rapport à l'autre d'un quart d'une diagonale principale du cube élémentaire (voir la figure I-1) [10, 11],[12].

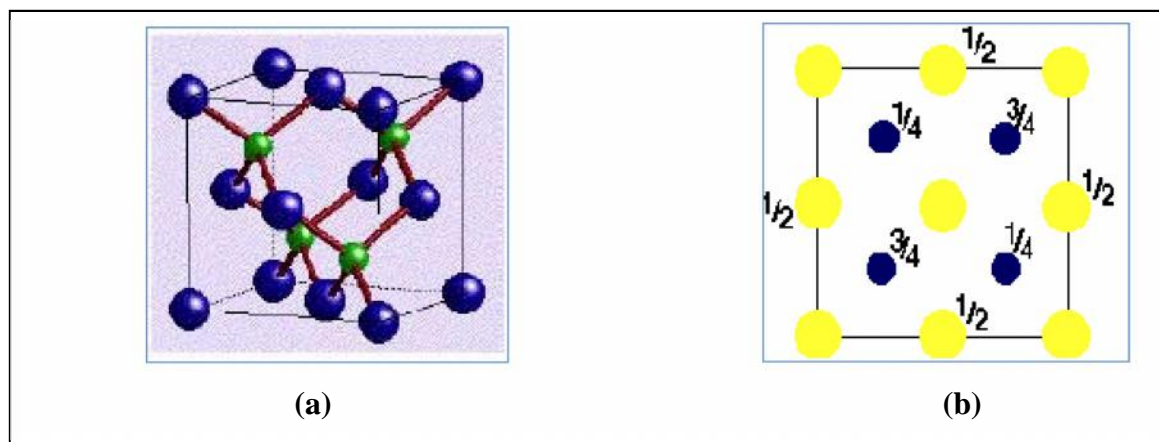


Figure I-1 : a) Maille élémentaire de la structure zinc blende

b) Vue de dessus de la structure zinc blende[10]

La première zone de Brillouin du réseau réciproque, représentée sur la figure I-2, est un octaèdre à faces tronquées dont les points de haute symétrie sont notés (centre de zone), X (bord de zone dans les directions (100) et équivalentes) et L (bord de zone dans les directions (111) et équivalentes).

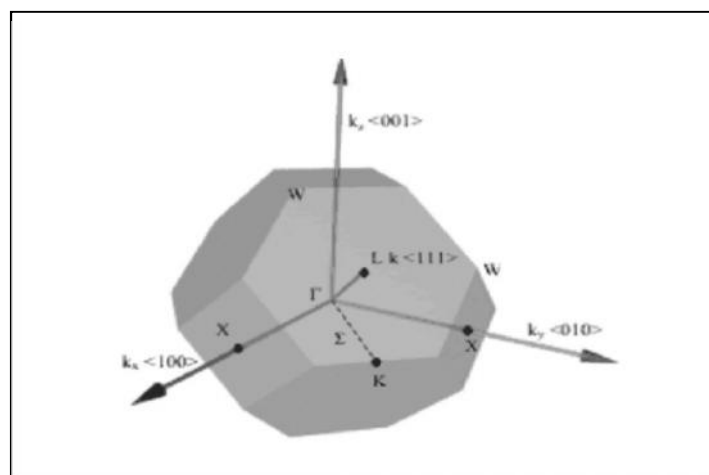


Figure I-2 : Première zone de Brillouin de la structure zinc-blende [10].

L'alliage AlGaAs est une solution solide de GaAs et de AlAs, dont les caractéristiques physiques sont obtenues par la combinaison des deux paramètres correspondants au GaAs et à l'AlAs. Ils ont la même structure cristalline et leurs paramètres physiques sont voisins et se rejoignent aux alentours de 900°C [9].

b. Structure de bande

La nature de la transition énergétique de l'alliage $\text{Al}_x \text{Ga}_{1-x}\text{As}$ change selon le taux d'Aluminium x , avec $0 < x < 1$. Pour une fraction d'Aluminium inférieure à 0.45, la transition de l'alliage est identique à celle du GaAs caractérisée par une transition directe. Quand le taux d'Aluminium devient supérieur à 0.45 la transition devient indirecte comme celle de l'AlAs [4, 13] (figure I-3).

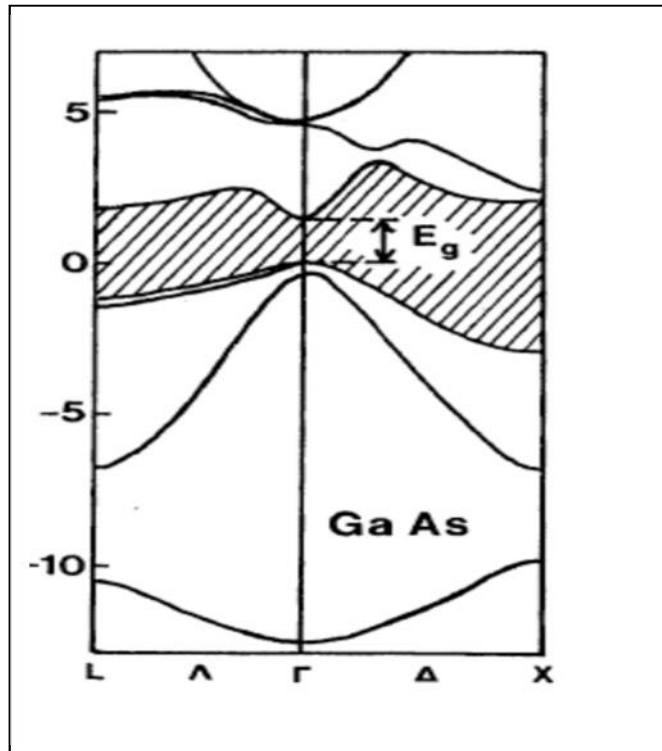


Figure I-3 : structure de bande du GaAs [3]

c. Propriétés électroniques

Le tableau (I-1), regroupe les paramètres cristallins et électriques des matériaux GaAs et AlGaAs (Il est à noter que ces paramètres sont donnés en fonction de la fraction molaire x) [14].

Tableau I-1 : Propriétés cristallines et électroniques des matériaux GaAs et AlGaAs

| P | GaAs | AlGaAs | |
|---|-----------------|---|----------|
| Constante de maille a (Å) | 5.6533 | 5.6533+0.0078x | |
| Densité (g .cm ⁻³) | 5.360 | 5.36-1.6x | |
| Coefficient de dilatation thermique V _{th} (10 ⁻³ °C) | 6.4 | 6.4-1.2x | |
| Constante diélectrique ϵ_r | 13.18 | 13.18-3.12x | |
| Largeur de la bande interdite E _g (eV) | 1.424 | 1.424+1.247x 0 x 0.45 1.900+0.125x+0.143x ² 0.45<x 1 | |
| L'affinité électronique (eV) | 4.07 | 4.07-1.1x | 0 x 0.45 |
| | | 3.64-0.14x | 0.45<x 1 |
| Masse effective des électrons m _n [*] (×m ₀) | 0.067 | 0.067+0.083x | 0 x 0.45 |
| | | 0.85-0.14x | 0.45<x 1 |
| Masse effective des trous m _p [*] (×m ₀) | 0.62 | 0.62+0.14x | |
| Mobilité des électrons μ_n (cm ² /V.s) | 8800 | 8.10 ³ -2.2.10 ⁴ x+10 ⁴ x ² 0 x 0.45 -255+1160x-720x ² | 0.45<x 1 |
| Mobilité des trous μ_p (cm ² /V.s) | 400 | 370-970x+740x ² | |
| Coefficient de diffusion des électrons D _n (cm ² /s) | 220 | 200-550x+250x ² | 0 x 0.45 |
| | | -6.4+29x-18x ² | 0.45<x 1 |
| Coefficient de diffusion des trous D _p (cm ² /s) | 10 | 9.2-24x+18.5x ² | |
| Vitesse thermique des électrons (cm/s) | 10 ⁷ | (4.4-2.1x)×10 ⁷ 0 x 0.45 | |
| Vitesse thermique des trous (cm/s) | 10 ⁷ | (1.8-0.5x) ×10 ⁷ | |

I.2.2 Composés GaN

a. Structure cristalline

Le GaN possède trois structures cristallines différentes : la structure hexagonale ou Wurtzite, la structure cubique ou Zinc Blende et la structure sel gemme (rock salt en anglais) qui est une structure haute pression. La structure Wurtzite est la plus utilisée car elle est la plus stable thermodynamiquement [15-20]. La figure I-4 présente les trois structures cristallines du GaN.

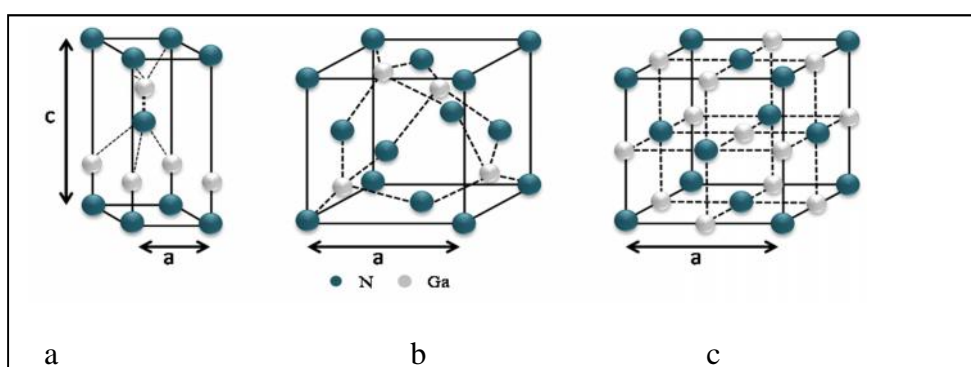


Figure I-4: les différentes structures du GaN (a) Wurtzite ; (b) Zinc Blende
et (c) rock salt

b. Propriétés électroniques

Les deux poly types du GaN présentent comme la plupart des matériaux III-V, une bande interdite directe. La largeur de cette bande a été estimée à 3.4 eV à température ambiante. Le tableau qui suit résume quelques propriétés du GaN ainsi que d'autres semi-conducteurs candidats pour les applications électroniques [18, 20, 21].

Tableau I-2 : Comparaison des propriétés de divers semi-conducteurs

| | Si | GaAs | SiC | GaN |
|---|--------------------------|---------------------------|---------------------------|---------------------------|
| Energie du gap à 300°k (eV) | <i>1.11</i> | <i>1.43</i> | <i>3.2</i> | <i>3.4</i> |
| Champ de claquage E(V/cm) | <i>6.510⁵</i> | <i>6.5*10⁵</i> | <i>3.5*10⁵</i> | <i>3.5*10⁵</i> |
| Vitesse de saturation (cm/s) | <i>1010⁷</i> | <i>2.010⁷</i> | <i>2.010⁷</i> | <i>2.510⁷</i> |
| Mobilité des électrons (cm²/vs) | <i>1350</i> | <i>6000</i> | <i>800</i> | <i>1600</i> |
| Conductivité thermique (W/cmK) | <i>1.5</i> | <i>0.46</i> | <i>3.5</i> | <i>1.7</i> |

I.3 Hétérojonctions

Les hétéro-structures sont des semi-conducteurs obtenus par la croissance alternée de fines couches de matériaux ayant une énergie de bande interdite différente mais présentent des paramètres de maille voisine [12].

La plus simple des hétéro-structures c'est l'hétérojonction qui est une jonction entre deux semi-conducteurs différents [13].

L'hétérojonction AlGaAs/GaAs présente de nombreux avantages [8] : largeur de bande interdite relativement importante qui autorise un fonctionnement à haute température, mobilité électronique élevée qui permet d'atteindre de bonnes performances, mailles cristallines assez proche qui minimisent les recombinaisons parasites. Beaucoup de composants ont bénéficié de ces performances notamment le transistor HEMT.

I.3.1 Hétérojonction isotype et anisotype

Lorsque deux semi-conducteurs sont de même type (N-N ou P-P) on dit que l'hétérojonction est isotype et elle est dite anisotype quand ils sont de type différent [12, 22, 23].

I.3.2 Hétérojonction graduelle et abrupte [1]

Si une hétérojonction est réalisée entre deux matériaux pour lesquels il existe un puits quantique de solution solide comme entre le GaAs/AlAs ($\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ existe pour tout $0 < x < 1$) ou en faisant varier progressivement la composition de l'alliage ternaire et les dopages des deux semi-conducteurs, cette hétérojonction est dite graduelle (figure I-5). La barrière de potentiel d'une hétérojonction graduelle est beaucoup plus difficile à décrire, la variation progressive du paramètre de composition x de l'alliage ternaire induit des modifications de la plupart des caractéristiques du matériau. Contrairement à l'hétérojonction abrupte ou à la fois la composition des matériaux et les dopage changent brusquement lors du passage du plan d'interface (figure I-6)[24].

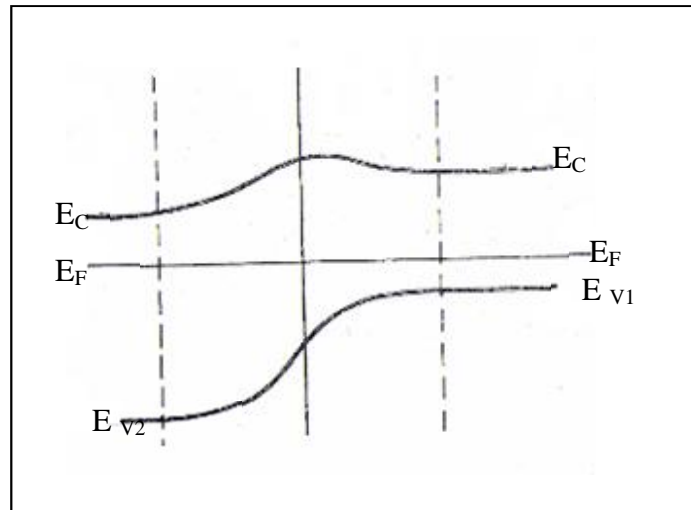


Figure I-5 : Hétérojonction graduelle [24]

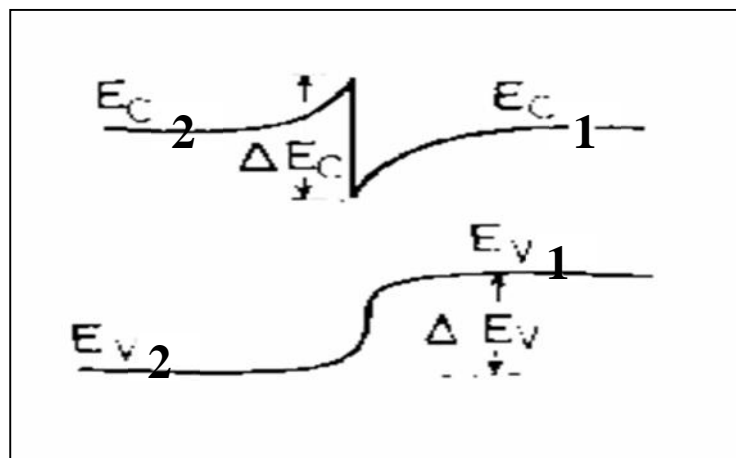


Figure I-6 : Hétérojonction abrupte [12, 24]

I.3.3 Hétérojonction de type I, II et III

Selon leur alignement de bande, les hétérojonctions peuvent être classées en trois groupes, comme le montre la figure I-7. On dit qu'une hétérojonction est de type I ou hétérojonction à gaps chevauchants, si le minimum de la bande de conduction de l'un des matériaux est plus haut que celui de l'autre et le maximum de la bande de valence de ce matériau est plus bas que celui de l'autre. Naturellement, ce matériau doit avoir la bande interdite la plus grande. Autrement dit, si les deux discontinuités de bande sont positives cela signifie que la bande interdite de ce matériau en serre la bande interdite de l'autre [3].

Si les deux discontinuités de bande ont des signes différents et si la bande interdite de l'un des semi-conducteurs n'est contenue que partiellement dans l'autre bande interdite (du côté de la bande de conduction ou de la bande de valence), il s'agit d'une hétérojonction de type II ou hétérojonction à gap décalée. Donc les électrons qui sont collectés au plus bas niveau d'énergie E_C et les trous qui sont collectés au plus haut E_V sont confinés dans des espaces différents [3].

Enfin, si en plus des signes contraires des deux discontinuités de bande, aucune des bandes interdites ne contient l'autre, l'hétérojonction est dite de type III ou hétérojonction à gaps brisés (à gaps brisés). Cela signifie que la bande de conduction de l'un est en-dessous de la bande de valence de l'autre. Ce cas est un cas particulier de type II mais, il est le moins courant [3].

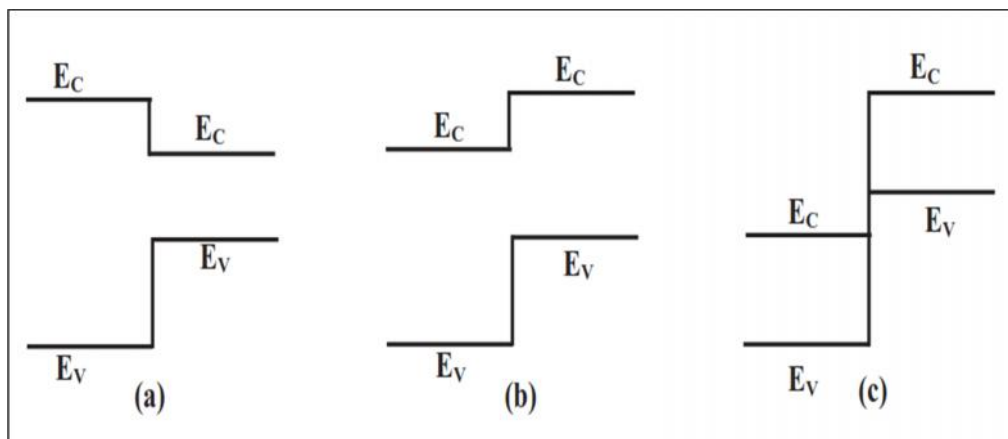


Figure. I-7 : Classification des hétérojonctions

(a) Type-I ou hétérojonction à gap chevauchants (straddling heterojunction)

(b) Type-II ou hétérojonction à gaps décalée (staggered heterojunction)

(c) type-III ou hétérojonction à gaps brisés (broken-gap heterojunction)

I.4 Effets quantiques dans les hétérojonctions

I.4.1 Confinement quantique

Le développement des hétéro-structures de matériaux semi-conducteurs a donné des illustrations claires de certains concepts de la mécanique quantique comme le confinement ou la quantification des niveaux d'énergie. Les progrès accomplis dans les techniques de croissance ont permis de réaliser différentes formes de nanostructures semi-conductrices (puits, fils et boîtes quantiques) de manière à confiner les porteurs dans une, deux ou trois directions de l'espace.

Quatre cas peuvent avoir lieu, selon les dimensions de la boîte et la longueur d'onde λ de la particule [25] (figure I-8).

a. Confinement sur 0 dimension

Dans ce cas, les trois dimensions de la boîte sont très grandes par rapport à la longueur d'onde λ . C'est le cas d'un cristal massif.

b. Confinement sur une dimension

Ce cas se présente lorsqu'on restreint une dimension de l'espace. Les particules sont confinées dans un plan, c'est-à-dire l'une de dimensions est comparable à la longueur d'onde de la particule. Il s'agit des puits quantiques ou "quantum Wells".

c. Confinement sur deux dimensions

Dans ce cas, deux des trois dimensions sont comparables à la longueur d'onde des particules, les fils quantiques ou "quantum wires". Correspondent à une telle structure.

d. Confinement sur trois dimensions

Dans ce cas les trois dimensions de la boîte sont comparables à celles de la longueur d'onde des particules. Il s'agit des points quantiques ou "quantum dots".

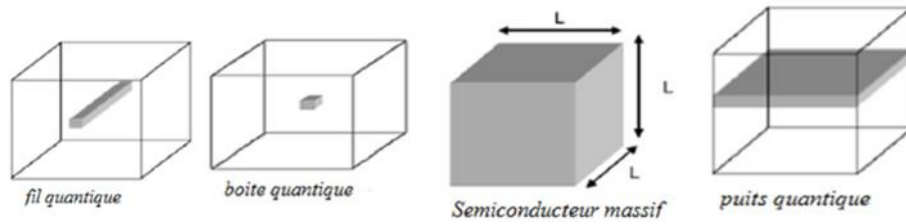


Figure I-8 : Divers types de confinement [25]

I.4.2 Discontinuités des bandes de conduction d’un puits quantique

D’après les règles d’Anderson[26], lorsque les deux matériaux sont assemblés (Figure I-9) et à équilibre thermodynamique, les niveaux de Fermi doivent s’aligner et le niveau du vide ne peut subir de discontinuité. Il en résulte des discontinuités des bandes de conduction et de valence à l’interface [26] Il se crée un puits de potentiel.

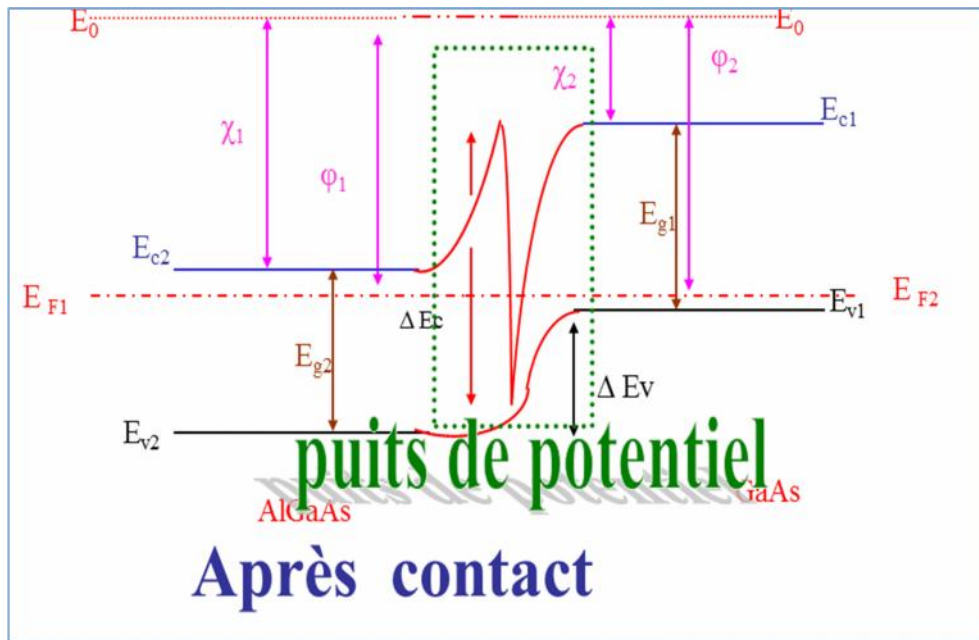


Figure I-9 : Diagramme énergétique d’un puits quantique

E_{c1}, E_{c2} :: la bande de conduction du materiau 1et du materiau 2.

E_{v1}, E_{v2} ; la bande de valence du materiau 1 et du materiau 2.

E_c, E_v : écart énergétique entre les bandes de conduction du matériau 1 et 2 (offset)

E_{g1}, E_{g2} : largeur de la bande interdite du matériau 1 et 2

, : le travail de sortie et l’affinité electronique du matériau 1 et 2

E_F : niveau de Fermi du matériau 1 et 2.

E_0 : niveau du vide du matériau 1 et 2

Nous pouvons observer la formation d'un puits quantique à l'interface, dans le matériau de plus faible largeur de bande interdite. Ce puits se situe dans la partie supérieure du matériau à plus faible gap non dopé car, au-dessus, le matériau de plus grande largeur de bande interdite joue le rôle de barrière. C'est dans ce puits que se regroupent les charges libres entraînant le phénomène de conduction à l'origine de la formation d'un gaz d'électrons à deux dimensions ; c'est le canal[19]. La densité de porteurs dans ce canal dépendra du niveau de Fermi dans la bande interdite du matériau (niveau de dopage), de la différence de largeur de cette bande entre les deux matériaux (E_g) et du dopage considéré.

Une tension appliquée sur la grille d'un HEMT permet le contrôle du courant qui circule entre drain et source.

Une saturation du courant s'observe en raison de la vitesse de saturation des électrons pour des fortes valeurs de tension entre drain et source. Si l'on compare une fois encore le HEMT au MESFET, la mobilité des électrons étant plus élevée dans un gaz que dans un matériau dopé, il est plus rapide que ce dernier, permettant des applications à plus haute fréquence.

I.4.3 Occupation des sous bandes dans un puits quantique

Le confinement spatial entraîne l'apparition de sous bandes d'énergie, aussi bien dans la bande de conduction (BC) que dans la bande de valence (BV). La densité d'états par unité d'aire et unité d'énergie est définie selon [3] par la relation (I-1) :

$$n(E) = \frac{g_v m_e}{\pi \eta^2} \quad (\text{I-1})$$

Où g_v est le facteur de dégénérescence de vallée qui nous renseigne sur les bandes d'énergie équivalentes, avec un facteur 2 pour la dégénérescence de spin.

La structure choisie fait partie de la famille des semi-conducteurs III-V, qui ont pour particularité d'être uni vallées ($g_v = 1$), et une densité d'état électronique constante.

Puisque la largeur d'un puits de potentiel est de l'ordre de grandeur de la longueur d'onde de Broglie $=h/p$ ($=250\text{\AA}$ dans le GaAs) et la densité d'état

électronique est constante, les effets quantiques introduisent une suite de niveaux d'énergie discrets E_i . Ces niveaux E_i décrivent la quantification des états électroniques dans la direction perpendiculaire à l'interface [12, 27]. Le nombre de sous bandes occupés dépend de la densité d'électrons et de la température, lorsque un seul électrons se trouve dans le puits celui-ci occupe le niveau de plus faible d'énergie, c'est-à-dire E_0 et si on augmente le nombre des électrons, ces derniers vont occuper de manière successive les niveaux d'énergie supérieures [26-28].

La courbe de la densité d'état $n_{2D}(E)$ à la limite de basse température est illustré par la figure (I-10) pour deux valeurs de E_F ($E_{F1} < E_{F2}$, $E_{F1} > E_{F2}$) [7, 12, 27, 28].

Pour $E_F = E_{F1}$ il y a occupation de la première sous bande, mais l'occupation de la seconde sous bande est négligeable à cause de la condition $(e_2 - E_{F1} \gg K_B T)$. Pour une densité d'électrons plus importante l'énergie de Fermi entre dans la deuxième sous bandes comme le deuxième cas de la figure (I-10) $E_F = E_{F2}$. La densité maximale d'électrons qui peut occuper le système avant d'entrer dans la deuxième sous bande est donnée par l'expression (I-2) suivante :

$$E_F = E_{F2} = \frac{m}{\pi \hbar^2} (e_2 - e_1) \tag{I-2}$$

La séparation entre les niveaux d'énergie devrait être maximisée, en utilisant un puits étroit augmentant ainsi l'écart $(e_2 - e_1)$ qui optimise cette densité.

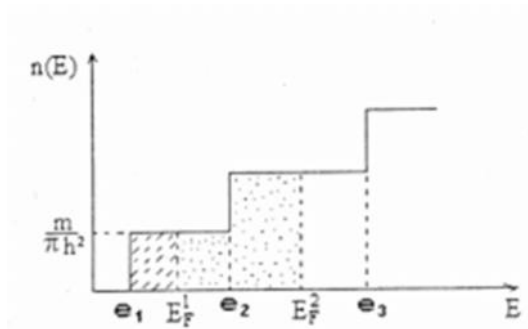


Figure I-10 : Densité d'état d'un système quasi bidimensionnel

I.4.4 La densité surfacique

Lorsque l'équilibre est rompu ($T > 0$), certains états d'énergie, vides à l'origine, se peuplent et la fonction de distribution de Fermi-Dirac, donnée par l'expression (I-3),

renseigne sur la probabilité qu'un électron se trouve dans un état d'énergie E à une température T , avec E_F l'énergie de Fermi définie comme l'énergie du niveau rempli le plus élevé, T la température en Kelvin, et k_B la constante de Boltzmann égale en unité d'énergie à 0.086 meV/K [28]

$$f(E, T) = \frac{1}{\exp\left(\frac{E - E_F}{k_B T}\right) + 1} \quad (\text{I-3})$$

La densité surfacique des électrons par unité de surface N_s est donnée selon [25, 28, 29] par :

$$N_s = \int n(E) \cdot f(E, E_F) \cdot dE \quad (\text{I-4})$$

Où $n(E)$ est la densité d'état

La densité superficielle peut être fractionnée en sous bandes :

$$n_{2D} = \sum n_j \quad (\text{I-5})$$

Où n_j est la densité des électrons dans la sous bande j du niveau plus bas E_j et qui est donnée par l'équation suivante [28]:

$$n_j = \frac{mk_B T}{f h^2} \ln \left[1 + \exp\left(\frac{E_F - E_j}{k_B T}\right) \right] \quad (\text{I-6})$$

I.5 Effet de la polarisation de l'hétérojonction AlGaIn/GaN

Dans la structure du GaN hexagonal, le matériau GaN ainsi que son composé AlGaIn sont le siège de deux polarisations [21, 30, 31]: la polarisation spontanée et la polarisation piézoélectrique. Ces dernières engendrent l'apparition de charges positives ou négatives aux interfaces entre ces matériaux et d'autres matériaux ou le vide. Dans un empilement AlGaIn/GaN, ce sont ces polarisations qui sont à l'origine du 2DEG, contrairement à la structure blende zinc où la polarisation spontanée se perd à cause de la forte symétrie cristalline sur l'axe c [9, 32]. Le sens de cette polarisation dépend de la face du GaN considérée. [33-36]

I.5.1 Polarisation spontanée

Le matériau GaN lorsqu'il se cristallise selon la structure Wurtzite, se compose de tétraèdres. Le non alignement de l'atome central avec le barycentre déchargés du tétraèdre engendre l'apparition d'une polarisation, appelée polarisation spontanée [16, 33-36]. Celle-ci existe lorsque le matériau n'est pas contraint, ni soumis à un champ électrique extérieur. La valeur de cette polarisation dans le GaN et pour une croissance selon une polarité gallium figure dans le tableau I-3 [33-36].

Tableau I-3. Polarisation spontanée, constantes et paramètres de maille des matériaux AlN et GaN [23, 24][37]

| Constantes | AlN | GaN |
|-------------------------------|--------|--------|
| P_{sp} (C/m ²) | -0.081 | -0.029 |
| e_{33} (C/m ²) | 1.46 | 0.73 |
| e_{31} (C/m ²) | -0.6 | -0.49 |
| C_{13} (GPa) | 108 | 103 |
| C_{33} (GPa) | 373 | 405 |
| a_0 (Å°) | 3.112 | 3.189 |

Le calcul de la polarisation spontanée des alliages ternaires est effectué par le modèle linéaire de Vegard [33]. Ce calcul appliqué à l'AlGaIn permet d'obtenir l'expression (I-7) [16] [38] [38]:

$$P_{SP}(x) = x.P_{sp}(AlN) + (1 - x)P_{sp}(GaN) \quad (I-7)$$

Avec x la fraction molaire d'aluminium.

En substituant les valeurs de P_{SP} de l' AlN et du GaN nous en déduisons l'expression de la polarisation spontanée du l'AlGaIn en fonction du x ($P_{SP}(x)$) donnée par l'expression (I-8) [16]:

$$P_{SP}(x) = (-0.052x. -0.029) \text{ C/m}^2 \quad (I-8)$$

I.5.2 Polarisation piézoélectrique

La croissance d'un matériau GaN ou AlGaIn sur un matériau possédant une maille différente engendre l'apparition d'une contrainte mécanique[39, 40]. Cette dernière, provoque une perturbation des charges du cristal du matériau donnant ainsi une polarisation nommée polarisation piézoélectrique[34, 41]. Dans le cas de

l'hétérojonction AlGaIn/GaN, c'est la couche supérieure d'AlGaIn qui lors de sa croissance sur le GaN subit une contrainte mécanique engendrant une polarisation piézoélectrique[38, 42].

En effet, dans un HEMT, la couche GaN de l'hétéro-structure est environ 100 fois plus épaisse que la couche AlGaIn et donc considérée relaxée de toute contrainte mécanique.

La polarisation piézoélectrique (notée P_{pz}) ne présente qu'une seule composante suivant l'axe c [31, 34, 43]. Cette dernière vient se superposer à la polarisation spontanée, elle peut la renforcer ou l'affaiblir, selon le signe de la déformation (tension ou compression) et l'orientation initiale de la maille (polarité gallium ou azote). On cherche donc à calculer la valeur de la polarisation piézoélectrique de la couche d'AlGaIn pour un empilement AlGaIn/GaN épitaxié selon la polarité du gallium. Toutes les constantes utilisées sont regroupés dans le tableau 1.3.

Ambacher [39] utilise l'équation (I-9) exprimant la polarisation piézoélectrique en fonction des constantes piézoélectriques [16, 33, 38]:

$$P_{PZ}(x) = 2 \frac{a(0)-a(x)}{a(x)} \left[e_{31}(x) - e_{33}(x) \frac{C_{31}(x)}{C_{33}(x)} \right] \quad (I-9)$$

Les expressions des constantes en fonction de la fonction molaire x sont regroupées dans le tableau I-4 suivant :

Tableau I-4 : constantes du matériau AlGaIn

| | | |
|---|-----------------|-----------------------------|
| Constantes piézoélectriques (C/m ²) | e ₃₃ | 0.73x + 0.73 |
| | e ₃₁ | 0.11x - 0.49 |
| Constantes élastiques (GPa) | C ₃₁ | 5.x + 103. |
| | C ₃₃ | -32x + 405 c/m ² |
| Paramètre de maille (Å°) | a | 5.6533 + 0.0078 x |

I.5.3 Polarisation totale de l'empilement AlGaIn/GaN

Dans l'espace, si la polarisation P change, alors il y aura une apparition d'une densité de charge ρ_p qui lui saura associée, et elle est donnée par l'équation I.10 selon Ambacher, [35] [44]:

$$\sigma_p = \nabla P \quad (I-10)$$

La figure (I-11) illustre la répartition des charges surfaciques engendrées par les polarisations spontanées et piézoélectrique dans l'empilement AlGa_xN/GaN.

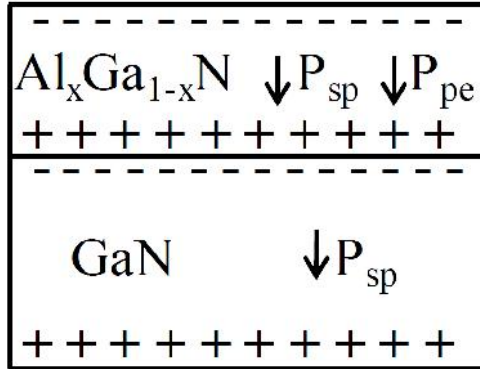


Figure I-11 Représentation de l'empilement AlGa_xN/GaN et des charges surfaciques induites par les polarisations piézoélectrique et spontanée

Aux interfaces des matériaux AlGa_xN et GaN, la polarisation peut chuter dans l'empilement, ce qui engendre l'apparition d'une charge surfacique. D'après les travaux d'Ambacher, cette charge surfacique à l'interface AlGa_xN/GaN [34, 35, 44], peut-être calculée, si l'on considère la couche de GaN relaxée, alors sa polarisation piézoélectrique est nulle. On obtient alors l'expression de la charge surfacique suivante [43] :

$$\sigma_p(x) = P_{SP}(GaN) - [P_{SP}(AlGaN) + P_{PE}(AlGaN)] \quad \text{(I-11)}$$

Les polarisations piézoélectrique et spontanée l'Al-GaN sont exprimées en fonction du % d'Al de la couche d'AlGa_xN. En se basant, sur la polarisation spontanée du GaN extraites des travaux d'Ambacher (tableau I.3), on peut déduire l'expression de cette charge de surface en fonction du % d'Al de la couche AlGa_xN [35].

$$\sigma_p(x) = \left| 2 \frac{a(0)-a(x)}{a(x)} \left[e_{31}(x) - e_{33}(x) \frac{C_{31}(x)}{C_{33}(x)} \right] \times P_{SP}(x) - P_{SP}(x) \right| \quad \text{(I-12)}$$

I.6 Transistor HEMT

I.6.1 Structure du HEMT

a. Transistor HEMT conventionnel

Le transistor HEMT est constitué essentiellement de trois matériaux différents : le substrat, un matériau à large bande interdite et un matériau à plus faible bande interdite, c'est la jonction de ces deux derniers matériaux qui conduit à la formation d'un gaz d'électrons à l'interface modulé par la tension appliquée au composant [12, 28, 29, 45] . La figure (I-12) présente la structure de base d'un HEMT conventionnel, il est constitué de :

- **Substrat GaAs**
- **Couche tampon GaAs non dopé** : elle est également appelée "buffer "cette couche est constituée d'un matériau de plus faible largeur de bande interdite. C'est dans ce matériau et dans la partie supérieure de la couche que va se former le gaz bidimensionnel.
- **Le canal** : c'est la zone de confinement des électrons, il est formé à l'interface de la couche tampon GaAs et du spaceur AlGaAs.
- **Le espaceur AlGaAs non dopé** : cette couche représente le matériau de plus large gap, l'épaisseur de cette couche est de l'ordre de quelque nanomètre, elle permet de réduire les interactions électrons –donneurs entre le gaz d'électrons et la couche dopée.
- **Couche donneuse N-AlGaAs** : fournit des électrons de conduction au canal. Ces électrons libres occupent le plus bas d'énergie disponible du côté couche tampon GaAs non dopé.
- **Couche SCHOTTKY** : cette couche à grand gap non dopée réalise le contact Schottky de la grille.

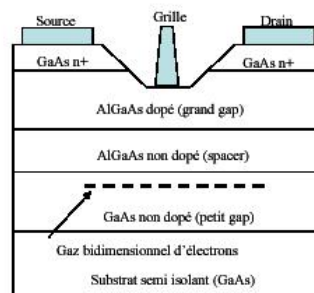


Figure I-12 : Structure de base d'un HEMT

b. Transistor PHEMT

Les transistors PHEMT GaAs se différencient des transistors HEMT par l'ajout d'une couche d'InGaAs intercalée entre les couches AlGaAs et GaAs (Figure I-14) qui va former le canal du transistor. Les électrons bénéficient de très bonnes propriétés de transport de l'InGaAs [46].

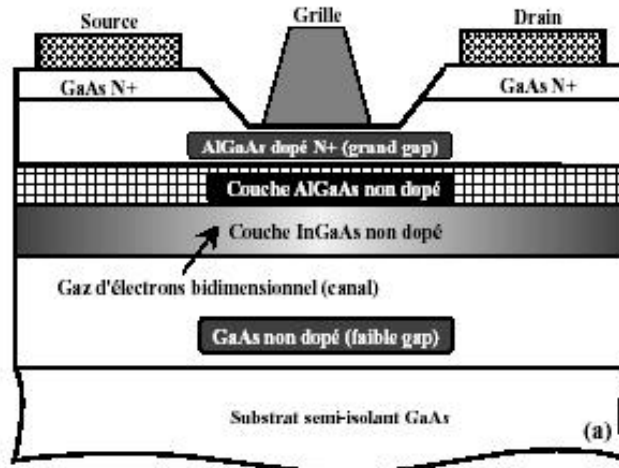


Figure I-13 : Structure d'un transistor PHEMT

I.7 Principe de fonctionnement d'un transistor HEMT

Le principe de base consiste à mettre à profit les propriétés de haute mobilité d'un gaz bidimensionnel d'électron formé à l'interface d'une hétérojonction. L'idée de base est de séparer spatialement les électrons libres, des donneurs ionisés dont ils proviennent [15].

La couche donneuse N-AlGaAs fournit des électrons de conduction au canal. Ces électrons libres occupent le plus bas d'état d'énergie disponible du côté GaAs de l'hétérojonction. L'accumulation des électrons dans le canal GaAs et la présence des atomes donneurs ionisés dans la couche AlGaAs séparée du canal par le spaceur créé un champ électrique transversal [12, 28]. La dispersion des électrons dans la couche GaAs est empêchée par l'action du champ qui ramène les électrons vers l'interface. La bande de conduction se courbe et devient un puits de potentiel dans lequel les électrons sont confinés.

Les porteurs du gaz bidimensionnel d'électrons formés à l'interface d' $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ et GaAs sont confinés suivant la direction de croissance z et sont libres dans les deux autres directions x, y [28].

Le transfert dans le puits quantique est géré par une change thermodynamique au niveau de l'interface couche donneuse- couche tampon, et la densité de charge dans le canal est contrôlée par la tension appliquée sur la grille [1, 12, 28].

Le contact de grille est un contact Schottky il y a formation dans le semi-conducteur (le canal) d'une zone dépeuplée dont l'épaisseur varie en fonction du potentiel de grille. Lorsque cette couche dépeuplée atteint le substrat, on dit alors que le canal est pincé, la tension V_{GS} correspond étant la tension de pincement V_P .

La figure (I-14) illustre ce phénomène du point de vue du diagramme de la bande de conduction pour un transistor à désertion (tension de pincement négative) [47]

Le principe de fonctionnement rassemble à celui du MESFET, le canal sera pincé ou ouvert suivant la polarisation appliquée sur la grille.

On retrouve alors les deux régimes de fonctionnement classiques selon la polarisation du drain : le régime linéaire pour des faibles valeurs de V_{DS} , puis le régime de saturation à V_{DS} plus élevé figure (I-15)

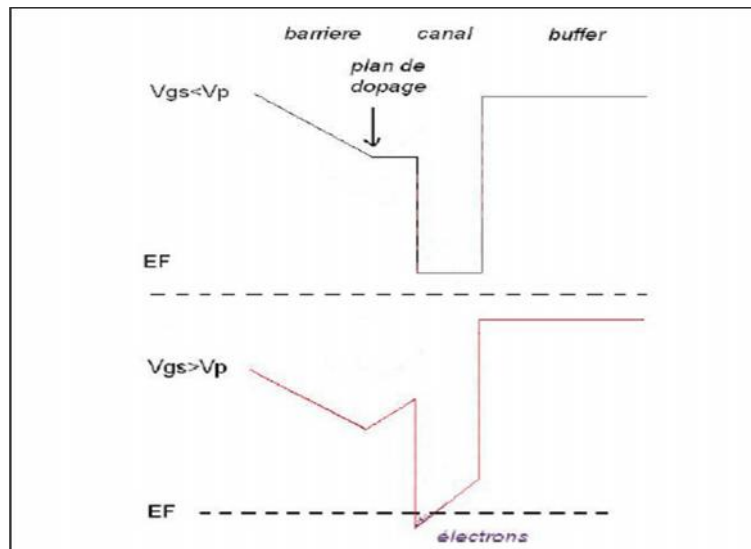


Figure I-14 : Evolution du diagramme de la bande de conduction avec la tension V_{gs} : canal pincé (figure en haut) et canal ouvert (figure en bas)[47]

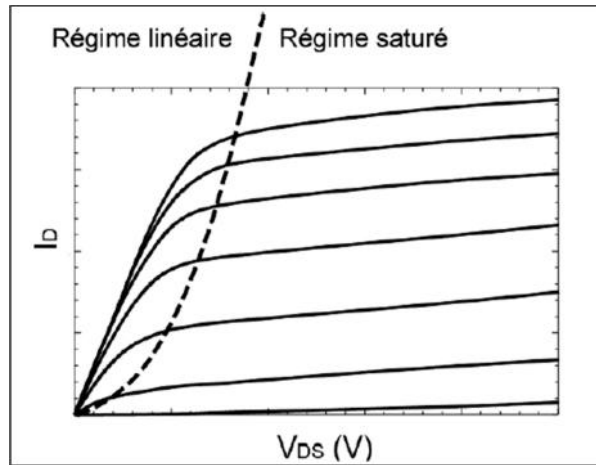


Figure I-15 : Réseau de caractéristiques d'un transistor HEMT

En régime linéaire, le courant de drain varie linéairement avec la tension de polarisation : le transistor se comporte comme une résistance contrôlée par la tension de grille. En régime de saturation sous l'effet du champ électrique croissant coté drain, le courant arrête son augmentation. Cela s'explique essentiellement par deux phénomènes : le pincement du canal ou bien la saturation de la vitesse électronique dans le semi-conducteur, la figure (I-16) illustre cette variation de la mobilité des électrons en fonction du champ électrique F . On voit une chute de vitesse due à la diminution de la mobilité des électrons, à partir d'un champ critique E_{cri} , qui traduit le passage des électrons en vallée latérale[46].

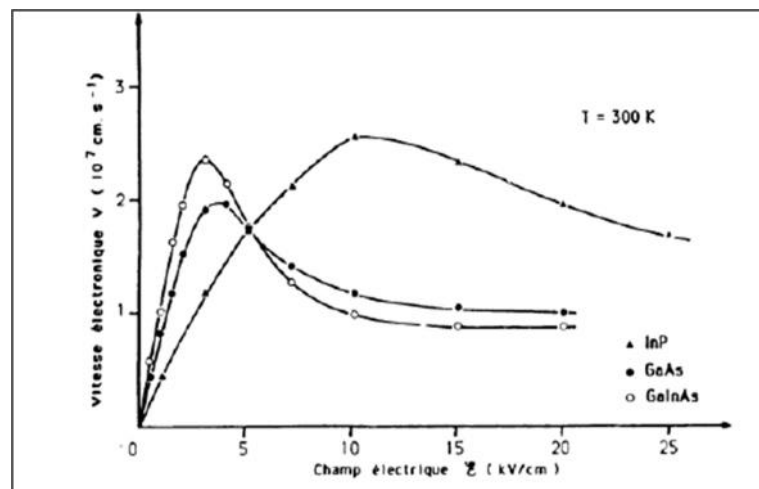


Figure I-16 : Évolution de la vitesse électronique en fonction du champ calculé par la méthode Monte Carlo[46]

Cette figure illustre également la différence de vitesse électronique suivant les matériaux.

I.8 Paramètres statiques du transistor HEMT

Le comportement électrique des HEMTS est défini par des grandeurs qui vont déterminer leurs performances. Ces paramètres sont fortement liés à la technologie, tant au niveau matériau qu'au niveau des procédés [14].

Nous verrons dans ce paragraphe les grandeurs statiques du transistor, avant de faire le lien entre ces paramètres remarquables et la technologie du composant, via son schéma équivalent [14].

I.8.1 Transductance g_m

La transductance g_m est définie comme la variation du courant en fonction de la tension V_{GS} à V_{DS} constant :

$$g_m = \left(\frac{\partial I_D}{\partial V_{GS}} \right) \cdot \dot{\lambda} (V_{DS} = cste) \quad (\text{I-13})$$

Elle traduit l'efficacité de la modulation du courant dans le canal par la tension appliquée sur la grille.

I.8.2 Conductance de sortie g_d

La conductance de sortie g_d est définie comme la variation du courant I_D en fonction de V_{DS} à V_{GS} constant :

$$g_d = \left(\frac{\partial I_D}{\partial V_{DS}} \right) \cdot \dot{\lambda} (V_{GS} = cste) \quad (\text{I-14})$$

La conductance g_d traduit la conduction parasite drain-source de la structure. Il sert l'indicateur de régime de saturation.

I.8.3 Capacité grille-source C_{GS}

C_{GS} décrit l'interaction capacitive sous la grille entre la grille et la source. Sa valeur est majoritairement déterminée par la partie de la capacité de la zone de charge d'espace de la jonction Schottky Grille - Source.

$$C_{GS} = \left(\frac{\partial Q_g}{\partial V_{GS}} \right) \cdot \dot{\lambda} (V_{DS} = cste) \quad (\text{I-15})$$

Q : La charge de la ZCE de la jonction Schottky.

I.8.4 Capacité grille-drain C_{gd}

C_{gd} est définie comme l'interaction capacitive dans le semi-conducteur entre la grille et le drain. Elle reflète la variation de la quantité de charge dans la ZCE de la jonction Schottky à tension V_{GS} constante.

$$C_{gd} = \left(\frac{\partial Q_g}{\partial V_{DS}} \right) \cdot \Delta(V_{GS} = cste) \quad (\text{I-16})$$

Cette capacité détériore les performances dynamiques de deux façons différentes :

-Effet Miller : Une partie de C_{gd} (ou multiple de C_{gd}) se retrouve reportée à l'entrée du transistor s'additionnant avec la capacité C_{gs} et diminuant ainsi le gain extrinsèque du transistor à haute fréquence.

-Couplage direct : A haute fréquence, C_{gd} relie directement l'entrée du transistor à sa sortie et peut provoquer des instabilités.

Comme l'illustre la Figure (I-17), pour une utilisation à haute fréquence, il est plus avantageux de travailler avec des tensions V_{gd} au-delà de 1,5 V afin de minimiser l'influence de C_{gd} .

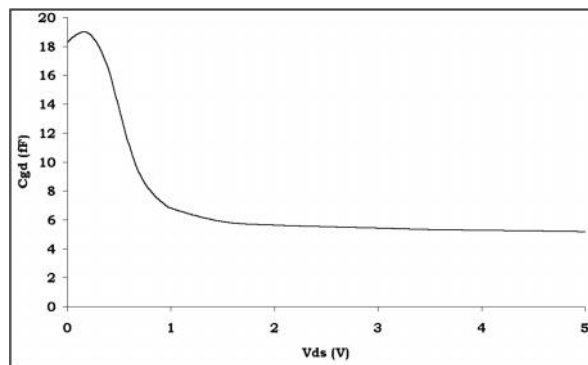


Figure I.17 : Variation de la capacité grille-drain en fonction de la tension de drain pour un $V_{gs}=0$ V pour un transistor P-HEMT 0,1 de $2 \times 25 \mu\text{m}$ de largeur de grille [46].

I.8.5 Capacité entre le drain et la source

L'origine de C_{ds} est l'interaction capacitive entre les deux régions du canal sous les contacts ohmiques de drain et de source.

I.8.6 Tension de seuil et tension de pincement

On parle de transistor pincé lorsque la zone désertée dans le canal s'étend jusqu'à venir contacter l'interface avec la couche tampon. La tension de grille correspondante est alors appelée tension de pincement. C'est la tension appliquée sur la grille pour laquelle il n'existe aucune charge libre sous la grille. On peut aussi définir la tension de seuil V_T en fonctionnement du transistor, qui va correspondre à la fermeture du transistor en termes de courant de drain.

I.8.7 Résistances R_i et R_{gd}

Même lorsque la barrière est totalement dépletée sous la grille, elle ne l'est pas complètement dans les zones qui ne sont pas exactement sous la grille, surtout dans les régions d'accès au canal actif. De ce fait, les capacités C_{gs} et C_{gd} se retrouvent en série avec deux zones partiellement conductrices, respectivement R_i et R_{gd} .

I.8.8 Résistances d'accès R_d et R_s

Elles proviennent d'une part des résistances des contacts ohmiques de drain et de source. Et d'autre part, de la densité de charge limitée dans les régions d'accès. Le gain extrinsèque du transistor $g_{mextrinseque}$ diminue pour des valeurs élevées de R_s .

I.8.9 Éléments extrinsèques

Un premier schéma équivalent petit signal du HEMT peut déjà être établi en utilisant les éléments cités ci-dessus. Ces paramètres décrivent l'effet HEMT et les parasites issus de sa propre structure. Par ailleurs, lorsqu'un transistor HEMT est physiquement réalisé, quelques inductances se rajoutent au schéma, L_g , L_d , L_s : Les inductances parasites d'accès, respectivement aux grilles, drain, et source.

I.8.10 Tension de claquage de la jonction grille drain V_{BGD}

Ce paramètre renseigne sur la tenue en tension du transistor, c'est-à-dire la tension maximale que l'on peut appliquer sur la grille sans détérioration du composant. Cette tension est déterminée à partir de la tension de claquage de la jonction grille drain car c'est elle qui subira un champ électrique intense lors du fonctionnement du transistor.

I.8.11 Le schéma équivalent

Le schéma équivalent petit signal pour les transistors à effet de champ, y compris le HEMT, peut être décrit comme suit dans sa version la plus élémentaire [46]:

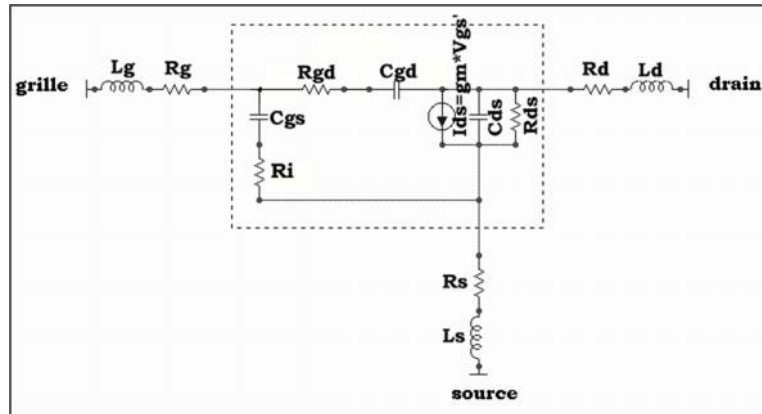


Figure I-18: Schéma équivalent petit signal de base pour les transistors à effet de champ

I.9 Conclusion

Plusieurs laboratoires de recherche ont montré l'intérêt d'utiliser les transistors à effet de champ à grille Schottky pour la réalisation des circuits intégrés pour satisfaire la demande du marché industriel. Une telle avancée des réalisations technologique ne peut se faire sans aucune connaissance approfondie de la physique du composant et de tous les phénomènes intrinsèques et extrinsèques qui peuvent en limiter les performances, donc la nécessité de maîtriser le composant était l'objectif de ce chapitre.

Cette présentation détaillée du fonctionnement, des propriétés du transistor HEMT et de l'optimisation physique du composant, nous a permis de mieux cibler la modélisation physique numérique du composant sur lequel on va porter notre travail.

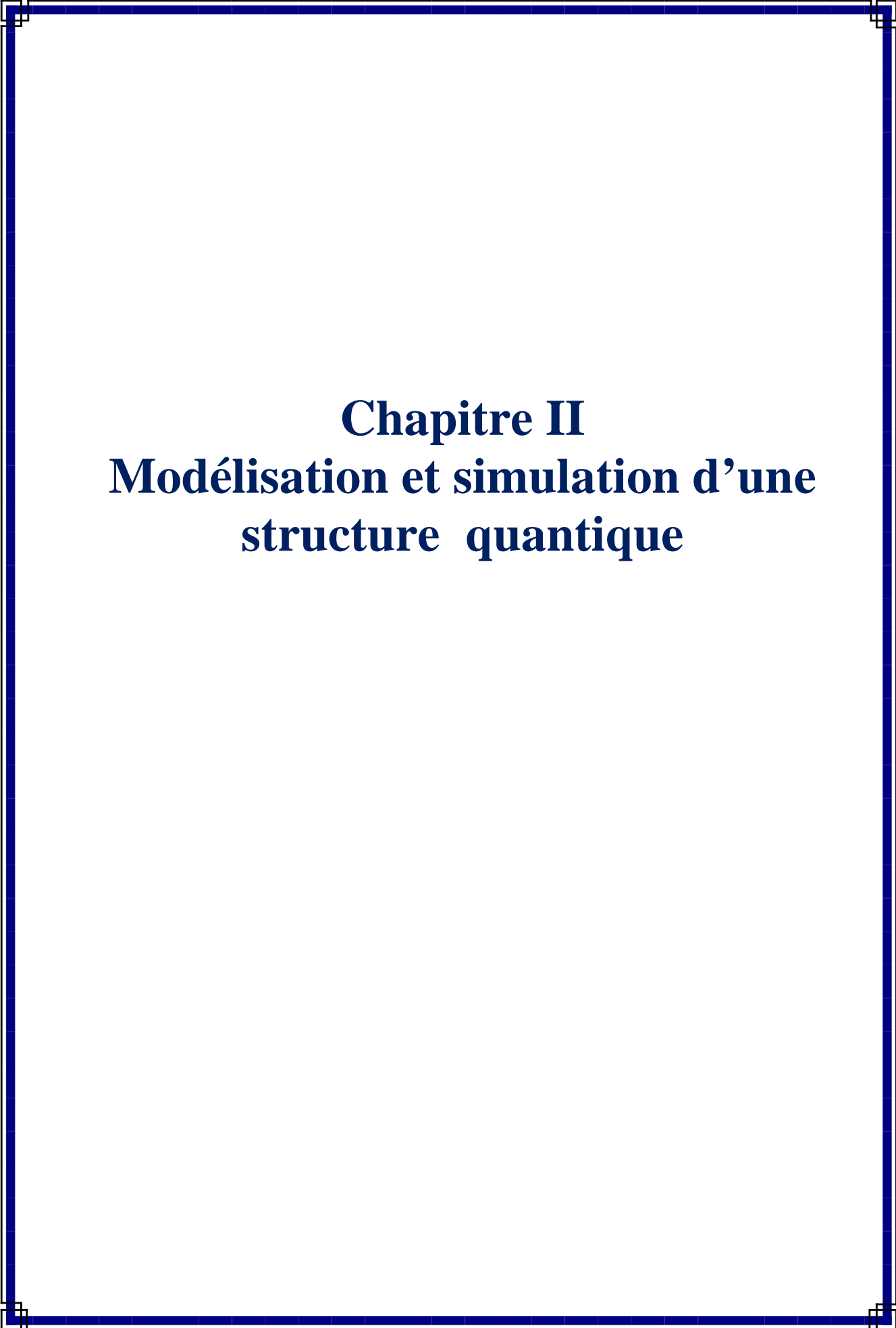
Bibliographie

1. Mimura, T., et al., A new field-effect transistor with selectively doped GaAs/n-Al_xGa_{1-x}As heterojunctions. Japanese journal of applied physics, 1980. **19**(5): p. L225.
2. Delagebeaudeuf, D., et al., Two-dimensional electron gas MESFET structure. Electronics Letters, 1980. **16**(17): p. 667-668.
3. B.R. Nag L. R. Carly, G.D., F. M. Klaassen,, Physics of Quantum Well Devices. Kluwer Academic Publishers, 2002.
4. Khilil, R., Étude d'un gaz bidimensionnel d'électrons dans des hétérostructures AlGaAs/GaAs par des mesures courant-tension et bruit basses fréquences en température. 2005, Reims.
5. Lazaro, M., I. Santamaria, and C. Pantaleon. A smooth and derivable large-signal model for microwave HEMT transistors. in Circuits and Systems, 2000. Proceedings. ISCAS 2000 Geneva. The 2000 IEEE International Symposium on. 2000. IEEE.
6. Cheng, C.-S., Y.-J. Shih, and H.-C. Chiu, A modified Angelov model for InGaP/InGaAs enhancement-and depletion-mode pHEMTs using symbolic defined device technology. Solid-state electronics, 2006. **50**(2): p. 254-258.
7. Bastard, G., Wave mechanics applied to semiconductor heterostructures (Les Ulis Cedex, France; New York, NY: Les Editions de Physique; Halsted Press). 1988.
8. R.Castagné, J.P.D., M.Gloanecet Ch.Rumelhard, « circuits intégrés en Arséniure de galilum », physique, et regles de conception. ,Masson, 1989.
9. Djefdjouf, F., Modélisation de l'hétérostructure HFET AiGa_N/Ga_N incluant les effets électriques. 2007.
10. Bouragba, T., Propriétés optiques de puits quantiques GaInAs_N/GaAs. 2006, Université Blaise Pascal-Clermont-Ferrand II.
11. Bonnaud, O., Composants à semiconducteur: de la physique du solide aux transistors. 2006: Ellipses.
12. Bouneb, I., Contribution à la modélisation d'une structure nanométrique. 2009.
13. Mathieu, H., T. Bretagnon, and P. Lefebvre, Physique des Semiconducteurs et des Composants Electroniques-Problèmes Résolus. 2001: Dunod.

14. Samira, K., Modélisation d'une cellule solaire Ga_{1-x}Al_xAs(n)-GaAs(i)-GaAs(p) mémoire de magister, université Béchar. , 2011.
15. Strite, S. and H. Morkoç, GaN, AlN, and InN: a review. *Journal of Vacuum Science & Technology B: Microelectronics and Nanometer Structures Processing, Measurement, and Phenomena*, 1992. **10**(4): p. 1237-1266.
16. Ambacher, O., et al., Pyroelectric properties of Al (In) GaN/GaN hetero-and quantum well structures. *Journal of physics: condensed matter*, 2002. **14**(13): p. 3399.
17. Djeflal, F., et al., Particle swarm optimization versus genetic algorithms to study the electron mobility in wurtzite GaN-based devices. *Solid-State Electronics*, 2009. **53**(9): p. 988-992.
18. Meyer, S.d., Etude d'une nouvelle filière de composants HEMTs sur technologie nitrure de gallium: Conception d'une architecture flip-chip d'amplificateur distribué de puissance à très large bande. 2005, Limoges.
19. Zhang, N., High voltage GaN HEMTs with low on-resistance for switching applications. 2002, University of California, Santa Barbara.
20. Rennesson, S., Développement de nouvelles hétérostructures HEMTs à base de nitrure de gallium pour des applications de puissance en gamme d'ondes millimétriques. 2013, Université Nice Sophia Antipolis.
21. Bernardini, F. and V. Fiorentini, Nonlinear macroscopic polarization in III-V nitride alloys. *Physical Review B*, 2001. **64**(8): p. 085207.
22. Colinge, J.-P. and C.A. Colinge, *Physics of semiconductor devices*. 2005: Springer Science & Business Media.
23. Laloue, A., Modélisation non linéaire distribuée des transistors à effet de champ: application à l'analyse de la stabilité des transistors et des caractéristiques en bruit dans les circuits MMIC millimétriques. 2001, Limoges.
24. Mamri, B., Modélisation d'une cellule solaire à puits quantique en GaAs/AlGaAs.
25. Paul Harrison *Quantum Well, Wires and Dots*. 2002.
26. Anderson, R.L., Experiments on ge-gaas heterojunctions, in *Electronic Structure of Semiconductor Heterojunctions*. 1988, Springer. p. 35-48.
27. Greiner, W., *Mécanique quantique. Une introduction*. 1999: Springer Science & Business Media.

-
28. WOLNY, M., et al., Transistors à haute mobilité électronique obtenus par épitaxie en phase vapeur aux organométalliques. *Acta electronica*, 1988. **28**: p. 55-63.
 29. PATILLON, J.-N. and J.-P. ANDRE, Propriétés de transport dans les hétérostructures à base de composés III-V. *Acta electronica*, 1988. **28**: p. 15-26.
 30. Vellas, N., Études expérimentales de transistors HFET de la filière nitrure de gallium pour des applications de puissances hyperfréquences. 2003, Lille 1.
 31. Nguyen, T.D.H., Réalisation et caractérisation de HEMTs AlGa_N/Ga_N sur silicium pour applications à haute tension. 2013, Paris 11.
 32. Abdelaziz, F.Z., Caractérisation électrique des HEMTs à base de nitrure de gallium AlGa_N/Ga_N.
 33. Ambacher, O., et al., Two-dimensional electron gases induced by spontaneous and piezoelectric polarization charges in N- and Ga-face AlGa_N/Ga_N heterostructures. *Journal of applied physics*, 1999. **85**(6): p. 3222-3233.
 34. Lehmann, J., Caractérisation électrique d'hétérostructures AlGa_N/Ga_N pour des applications de puissance. 2015, Université Grenoble Alpes.
 35. Nsele, S.D., Analyse électrique et en bruit basse fréquence et haute-fréquence des technologies InAlN/Ga_N HEMTs en vue de la conception d'amplificateurs robustes faible bruit en bande Ka. 2014, Université de Toulouse, Université Toulouse III-Paul Sabatier.
 36. Baron, N., Optimisation de l'épitaxie sous jets moléculaires d'hétérostructures à base de Ga_N: application aux transistors à haute mobilité d'électrons sur substrat silicium. 2009, Université Nice Sophia Antipolis.
 37. Bernardini, F., V. Fiorentini, and D. Vanderbilt, Spontaneous polarization and piezoelectric constants of III-V nitrides. *Physical Review B*, 1997. **56**(16): p. R10024.
 38. Gangwani, P., et al., Polarization dependent analysis of AlGa_N/Ga_N HEMT for high power applications. *Solid-state electronics*, 2007. **51**(1): p. 130-135.
 39. Ambacher, O., et al., Two dimensional electron gases induced by spontaneous and piezoelectric polarization in undoped and doped AlGa_N/Ga_N heterostructures. *Journal of applied physics*, 2000. **87**(1): p. 334-344.

40. Garrido, J., et al., Polarization fields determination in AlGa_N/Ga_N heterostructure field-effect transistors from charge control analysis. Applied physics letters, 1999. **75**(16): p. 2407-2409.
41. Yu, E., et al., Measurement of piezoelectrically induced charge in Ga_N/AlGa_N heterostructure field-effect transistors. Applied Physics Letters, 1997. **71**(19): p. 2794-2796.
42. Zhang, Y. and J. Singh, Charge control and mobility studies for an AlGa_N/Ga_N high electron mobility transistor. Journal of Applied Physics, 1999. **85**(1): p. 587-594.
43. Wang, X.-D., et al., The study of self-heating and hot-electron effects for AlGa_N/Ga_N double-channel HEMTs. IEEE Transactions on Electron Devices, 2012. **59**(5): p. 1393-1401.
44. Wood, C. and D. Jena, Polarization effects in semiconductors: from ab initio theory to device applications. 2007: Springer Science & Business Media.
45. Godts, P., et al., Méthode générale de modélisation du transistor à effet de champ à hétérojonction. Revue de physique appliquée, 1989. **24**(2): p. 151-170.
46. Schwierz, F. and J.J. Liou, Modern microwave transistors: theory, design, and performance. 2003: Wiley-Interscience.
47. Cappy, A., Propriétés physiques et performances potentielles des composants submicroniques à effet de champ: structures conventionnelles et à gaz d'électrons bidimensionnel. 1986, Lille 1.



Chapitre II

Modélisation et simulation d'une structure quantique

II.1 Introduction

Une des propriétés fondamentales de la famille des composés III-V est la possibilité de former des hétérojonctions avec une interface de bonne qualité cristallographique (par exemple : AlGaAs/GaAs ou AlGaN/GaN). Le gaz formé par les électrons accumulés à l'interface d'une telle structure présente un caractère bidimensionnel et une mobilité très élevée [1]. Les principales caractéristiques de la structure sont celles du puits quantique (la largeur du puits devient de l'ordre de la longueur de Louis de Broglie), que l'on peut énumérer comme suit :

- ◆ L'offset ΔE_c : largeur et profondeur du puits qui correspond à la discontinuité de la bande de conduction.
- ◆ Fonctions d'ondes associées aux différentes énergies liées du puits (ψ_{ll}).
- ◆ Densité du gaz bidimensionnel N_s

Pour diminuer le temps de transit entre la source et le drain, il est naturel de chercher à utiliser les fortes mobilités électroniques observées dans un gaz bidimensionnel. Depuis 1980, des nouvelles structures dans lesquelles la concentration d'un gaz d'électrons bidimensionnel (gaz 2D) est contrôlée par une grille sont étudiées. On l'appelle : **HEMT** (*High Electron Mobility Transistor*).

Le transistor HEMT est un cas particulier des transistors FET (Field Effect Transistor). Il est constitué d'un contact Schottky qui constitue la grille et de deux contacts ohmiques qui constituent le drain et la source situés de part et d'autre du contact de grille. Le courant circule du drain vers la source dans le puits de potentiel créé à l'interface de deux matériaux l'un de grand gap est appelée couche donneuse ou couche barrière, et dont l'autre est de petit gap, est appelée couche tampon.

Le principe de base du HEMT est de contrôler par une grille de type Schottky déposée sur la couche donneuse, la concentration électronique du gaz bidimensionnel existant à l'interface de l'hétérojonction.

Dans ce travail, nous nous intéressons à la modélisation de cette concentration électronique pour deux types d'hétérojonctions AlGaAs/GaAs et AlGaN/GaN. Pour cela nous étudions divers modèles tels que [1-6]:

- Pour l'hétérojonction AlGaAs/GaAs :

- 1- Modèle de Delagebeaudeuf.
 - 2- Modèle de Michel Wolny and al,
 - 3- Modèle pseudo-bidimensionnel d'un transistor pseudo morphique AlGaAs/InGaAs/GaAs,
- Pour l'hétérojonction AlGaN/GaN :
- 1- Modèle « Donneur en surface »
 - 2- Modèle le modèle de Ridley.

Ces modèles décrivent parfaitement le fonctionnement du HMET dans le cas de deux états liés en utilisant différentes approximations (proposition de la forme du puits, proposition de la fonction d'ondes, etc..), mais malheureusement présente les anomalies suivantes :

- 1- La première concerne l'offset ΔE_c , qui est une fonction empirique linéaire de ΔE_G , alors que réellement vue la juxtaposition des matériaux engendre une courbure des bandes énergétiques.
- 2- La seconde concerne la contribution du dopage globale dans la conduction.
- 3- La troisième concerne la concentration surfacique à l'équilibre N_s qui est une relation affine du niveau de Fermi et qui ne tient pas en compte le dopage effectif N_{Def} .

Pour pallier à ces différents points, Nous nous proposons d'étudier la même structure dans le cas d'un état lié en se basant sur l'utilisation d'une nouvelle expression de l'offset E_c en fonction du dopage effectif N_{Def} et une nouvelle expression de la densité surfacique en fonction du niveau de Fermi. Ces deux nouvelles expressions seront introduits dans la loi de contrôle de charge bidimensionnelles des deux hétéro structures AlGaAs/GaAs, AlGaN/GaN. Quant à la deuxième hétéro structure AlGaN/GaN, nous prenons en considération l'effet de la polarisation spontanée et piézoélectrique, qui n'est pas négligeable, sur la densité surfacique dans le canal du transistor.

II.2 Concentration électronique du gaz bidimensionnel

La modélisation la couche active d'un HEMT[1] peut être effectuée par les deux procédés suivants :

- 1- Résolution combinée de l'équation de transport et l'équation de Poisson incluant les effets bidimensionnels dans un modèle 2D,
- 2- Résolution de l'équation de transport et une loi de commande de charge dans un modèle 1D où la concentration électronique du gaz bidimensionnel est établie à partir de la modélisation de l'hétérojonction isolée c'est-à-dire la résolution du système d'équation Schrödinger-Poisson.

Dans notre cas nous avons utilisé le modèle issu de la résolution du système d'équation couplé « Poisson Schrödinger » qui nous donne les expressions des paramètres d'influence proposés (N_s , ΔE_c et $N_{D_{eff}}$). Ces deux paramètres sont utilisés dans une loi de commande de charge par une grille de type Schottky, de la concentration surfacique du gaz bidimensionnel[2].

Pour décrire le comportement du HEMT, qui est assez complexe du à la plus grande complexité de la structure de la couche active. Il nous semble utile de préciser les différents effets physiques intervenant lorsque la polarisation de source et de drain sont appliqués et que le composant est hors équilibre.

Lorsque la tension drain V_{ds} est appliquée, l'évolution du potentiel dans le canal entraine une modification de la géométrie du puits de potentiel sous la grille [1]. Ce premier effet peut être assimilé à un effet de « pincement de canal », identique à celui que l'on rencontre dans les TEC conventionnels, la figure (II-1) représente qualitativement l'évolution de la forme de la bande de conduction sous la grille en présence d'une tension V_{DS} . Cette évolution se caractérise essentiellement par un élargissement de la bande de conduction sous la grille, voire la disparition complète du puits de potentiel, associée à une diminution de la densité surfacique des électrons.

L'apparition de la tension drain aura également pour une conséquence l'existence d'un courant de drain I_{DS} , dont la valeur dépend directement des caractéristiques de la dynamique électronique dans la couche active.

Dans la structure HEMT, cette dynamique est rendue complexe par[1]la présence d'un gaz d'électron bidimensionnel dégénérée. Où,la dynamique des porteurs dépend de la position relative des différentes sous bandes, et par conséquent de la largeur du puits.

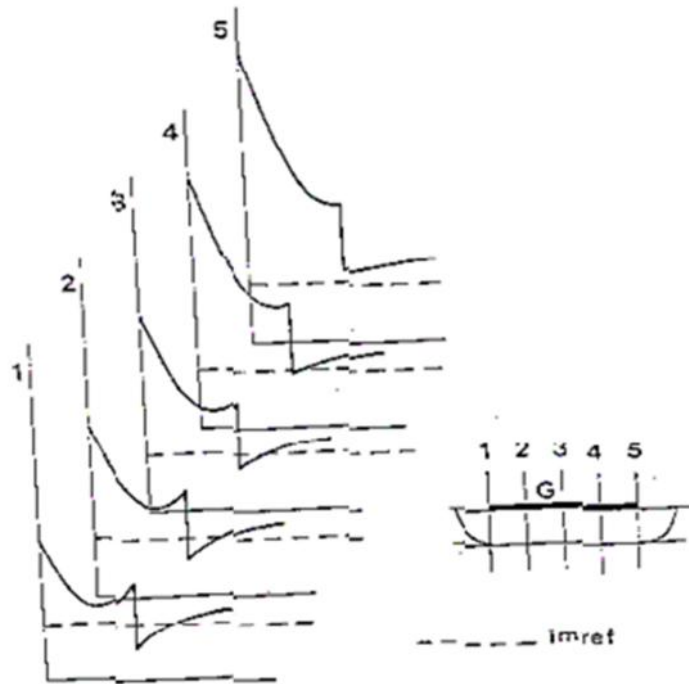


Figure II-1: Évolution sous la grille de la forme du puits de potentiel en régime dynamique[1]

Différentes études théoriques concernant la mobilité en champ faible d'un tel système, ont montré que cette mobilité surfacique diffèrait peu de celle en volume[1], et ceci quel que soit la largeur du puits. Par contre en régime dynamique, cette différence est significative, et ceci est dû à la méconnaissance de la mobilité des électrons du fait de l'évolution de la largeur du puits, et de la coexistence des porteurs soumis à une dynamique tridimensionnelle à l'extérieur du puits de potentiel, et des porteurs soumis à une dynamique bidimensionnelle à l'intérieur du puits.

II.2.1. Hétérojonction AlGaAs/GaAs

II.2.1.1 Modèle de Delagebeaudeuf

La première étude de cette commande de charge est due à D.DELAGEBEAUEUF et N.T.LINH. Bien qu'elle soit limitée du point de vue

réalité physique, cette méthode par son accessibilité analytique est précieuse, le modèle est basé sur quelques hypothèses simplificatrices qui sont [1]:

- Hétérojonction AlGaAs/GaAs
- Puits de potentiel est supposé triangulaire.
- Champ électrique est constant.
- Commande de la couche bidimensionnelle se fait par une grille Schottky.

L'énergie potentielle des électrons dans la direction perpendiculaire à l'interface et à l'intérieur de la couche GaAs est obtenue à partir de la résolution de l'équation de Poisson prenant en compte la densité de charges $\rho(z)$ qui s'écrit :

$$\rho(z) = q \sum_{i=0}^{\infty} n_i |\varphi_i(z)|^2 \quad (\text{II-1})$$

Où φ_i est l'amplitude de la fonction d'onde (φ_i) , solution de l'équation de Schrödinger et n_i la concentration d'électrons correspondant à chaque niveau quantique, qui est donnée par [1]:

$$n_i = D_{etat} \left(\frac{k_B T}{q} \right) \text{Ln} \left[1 + \exp \left(\frac{E_F - E_i}{k_B T} \right) \right] \quad (\text{II-2})$$

Où D_{etat} est la densité d'état dans l'espace des énergies qui s'écrit dans le cas d'un système 2D pour une sous-bande :

$$D_{etat} = \frac{q m_e}{\pi \hbar^2} \quad (\text{II-3})$$

Dans un système 2D, D_{etat} est une constante en fonction de l'énergie. E_i est l'énergie de la i ème sous-bande qui s'écrit dans le cas de l'approximation d'un puits triangulaire :

$$E_i = \left(\frac{\hbar^2}{2m_e} \right)^{1/2} \left(\frac{2}{3} f \cdot q \cdot F \left(i + \frac{3}{4} \right) \right)^{3/2} \quad (\text{II-4})$$

Où i est un entier non nul.

Une simple intégration de l'équation de Poisson dans la couche donneuse AlGaAs donne l'expression de la tension V_2 (figure II.2)[3] :

$$V_2 = \frac{qN_D}{2\varepsilon} (d - e)^2 - F \cdot d \quad (\text{II-5})$$

Dans cette expression F représente le champ électrique à l'interface GaAs/AlGaAs.

D'autre part, et en se basant sur la figure II-2, on a :

$$V_2 = \phi_B - qV_G + E_F - \Delta E_C \quad (\text{II-6})$$

Soit en introduisant la charge Q_s qui est donnée par :

$$Q_s = \varepsilon \frac{E_s}{q} = qN_s = \frac{q\varepsilon}{d} \left(V_G - V_{off}^0 - \frac{E_F}{q} \right) \quad (\text{II-7})$$

ϕ_B et ΔE_C sont considérés comme une fonction du dopage N_D du taux d'Al

L'expression II-7 montre que la commande de charge est linéaire en fonction de V_G , ce qui correspond à une capacité de grille dans la gamme des tensions où la couche d'accumulation est effectivement commandée. Dans ce modèle, la formule l'expression de l'offset E_C dans l'expression de la tension de seuil V_{off} est donnée par les formules [6] :

$$\Delta E_C = 0.62\Delta E_g \quad (\text{II-8})$$

Avec V_{off} qui est exprimée par :

$$V_{off} = \phi - \Delta E_C - \frac{qN_D}{2\varepsilon} (d - e)^2 \quad (\text{II-8})$$

Où :

ϕ_B : est la barrière de potentiel du contact Schottky ;

ΔE_C : est la discontinuité de la bande de conduction de hétérojonction,

N_D :est la concentration du dopage.

d: est l'épaisseur de la couche d'AlGaAs dopée

ε : perméabilité du matériau AlGaAs

x : taux d'Aluminium

Dans l'expression de la tension V_2 (Equ.II-6) notons que E_F représente la position du niveau de Fermi par rapport au fond du puits de potentiel, est une fonction de N_s , et en se limitant à 2 sous bandes, N_s est donnée par :

$$N_s = \frac{m^*kT}{\pi\hbar^2} \ln \left[\left(1 + \exp \left(\frac{E_F - E_0}{KT} \right) \right) \left(1 + \exp \left(\frac{E_F - E_1}{KT} \right) \right) \right] \quad (\text{II-10})$$

Pour des valeurs de N_s supérieures à $3.10^{15}m^{-2}$, l'expression II.10 peut se reformuler de la manière suivante [1]:

$$E_F = E_{F0}(T) + aN_s \tag{II-11}$$

Avec $E_F \cong 0mv$ et $25mev$ à $300K$ et $77K$ et $a \cong 0.125 \cdot 10^{-16} V/m^2$

On en déduit alors l'expression finale de la charge Q_s suivante:

$$Q_s \cong qN_s = \frac{\epsilon}{d+\Delta d} (V_g - V_{off}) \tag{II-12}$$

Avec : $\Delta d = \frac{\epsilon a}{q} \cong 80\text{\AA}$

A partir de l'expression II-12 nous pouvons calculer le courant de drain I_{ds} le long de l'axe ox ,:

$$I_{ds} = Q_s W v(x) \tag{II-13}$$

Où W est la largeur de la grille et $v(x)$ la vitesse électronique à l'abscisse x .

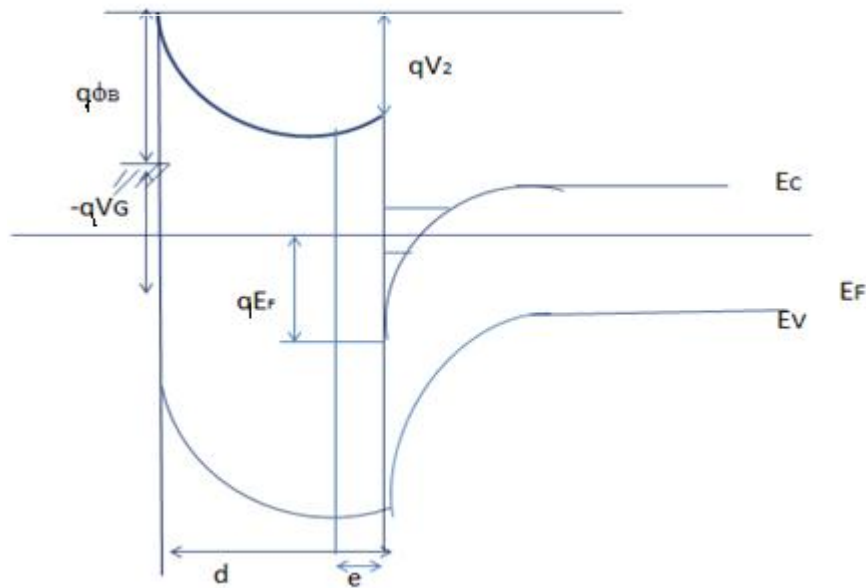


Figure II-2 : Diagramme de bande d'une hétérojonction dont la couche d'accumulation est contrôlée par une jonction Schottky[1]

II.2.1.2 Modèle de Michel Wolny and al.

Dans ce modèle, on assimile le HEMT à un transistor MOSFET[3] , ce qui permet d'établir une loi linéaire liant la tension grille V_G et la concentration d'électrons N_s dans le gaz 2D, à l'aide d'un modèle extrêmement simple[2] donné par:

$$N_s = \frac{\epsilon}{d} (V_G - V_{off}) \quad (\text{II-14})$$

ϵ est la permittivité ; d est l'épaisseur de la couche AlGaAs sous la grille, V_{off} tension de pincement du transistor figure (II-3).

Suivant l'équation (II-14) la loi de commande de charge est alors modifiée et peut se mettre sous la forme :

$$N_s = \frac{\epsilon}{q(d+\Delta d)} (V_G - V_{off}) \quad (\text{II-15})$$

Avec $\Delta d = \frac{\epsilon a}{q} \cong 80 \text{ \AA}$

Et
$$V_{off} = \phi_B - QN_D \frac{d^2}{2\epsilon} - \Delta E_C + \Delta E_F^0(T) \quad (\text{II-16})$$

Où ϕ_B est la hauteur de barrière métal semi-conducteur

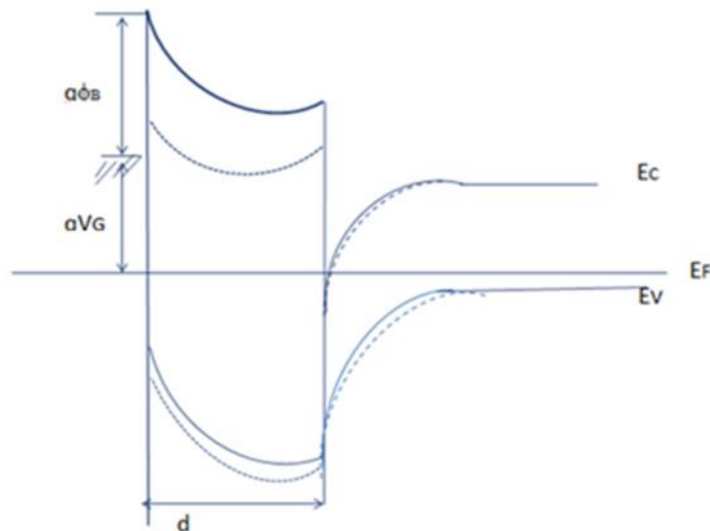


Figure II-3 : Structure de bandes de transistor HEMT à l'équilibre (courbe en pointillé) et sous tension $v_g < 0$ (courbe entrait plein)

Les hypothèses de travail dans ce modèle sont :

- 1- Niveau de fermi ne dépend pas de N_s
- 2- d représente la moitié de l'épaisseur du canal c'est-à-dire du gaz.

En tenant compte du fait que l'ordre de grandeur de correction $d(80\text{Å})$ n'est pas négligeable face à $d(300-400\text{Å})$ [3]. Ceci montre que le niveau de fermi doit dépendre de N_s ce qui met en évidence les limites de ce modèle. De plus la loi de commande de charge linéaire [1] n'est valide que dans le cas où N_s reste inférieure à la concentration électronique d'équilibre c'est-à-dire que la tension V_G reste inférieure à une tension V_{GMAX} telle que [3] :

$$V_{Gmax} = \phi - qN_D \left(d - \frac{n_{sequi}}{N_D} \right)^2 / 2\epsilon \quad (\text{II-17})$$

Lorsque $V_G > V_{Gmax}$, une conduction parasite s'établit dans la couche AlGaAs-N+, entraîne une dégradation des performances du transistor, ce qui limite les performances de ce modèle.

II.2.1.3 Modèle pseudo-bidimensionnel d'un transistor pseudo morphique AlGaAs/InGaAs

Ce modèle est un modèle analytique pour le calcul de la densité surfacique du puits de potentiel de l'hétéro structure AlGaAs/GaInAs/GaAs en fonction du potentiel de grille et de ses différents paramètres. Les hypothèses de travail dans le cadre de ce modèle sont [4] :

- Considération d'une jonction abrupte.
- la densité volumique de charge dans le puits d'accumulation est une variation exponentielle c'est la forme la plus physique permettant d'élaborer un modèle analytique.
- Hétérojonctions idéales qui ne présentent pas de dislocation, il n'y a donc pas de densité surfacique de charge au niveau des différentes interfaces.
- Hétérojonction GaInAs/GaAs joue le rôle de barrière de potentiel (Spacer).

Lorsque la tension de grille diminue, la valeur de la densité surfacique varie de sa valeur d'équilibre lors du pincement [4]:

$$N_s = \frac{\varepsilon}{q(dD + \frac{\varepsilon c}{q})} (V_G - V_{off}) \quad (\text{II-18})$$

Où V_G représente la tension de grille, $C=0.125 \cdot 10^{16} \text{v.m}^{-2}$

$$\begin{aligned} V_{off} &= \frac{\phi}{q} - \frac{\Delta E_c}{q} - \frac{qN_{aeff}}{2\varepsilon} (dD - d)^2 \\ \Delta E_c(\text{AlGaAs/GaAs}) &= 0.65 \cdot \Delta E_{g0} \\ \Delta E_c\left(\frac{\text{GaAs}}{\text{InGaAs}}\right) &= 0.9 \cdot \left(\Delta E_{g1} - 2a \frac{C_{11} - C_{12}}{C_{11}} E_r \right) \end{aligned} \quad (\text{II-19})$$

$$\Delta E_c(\text{GaAsAl/InGaAs}) = 0.65 \Delta E_{g0} + 0.9 \cdot \left(\Delta E_{g1} - 2a \frac{C_{11} - C_{12}}{C_{11}} E_r \right)$$

Dans ces expressions x , y sont respectivement le taux d'Aluminium et d'Indium ΔE_{g0} et ΔE_{g1} représentent respectivement les différences de bandes interdites entre AlGaAs et GaAs et GaAs et InGaAs. E_r représente le coefficient de déformation du paramètre de maille a est le coefficient de déformation de potentiel. C_{11} et C_{12} sont des coefficients d'élasticité, le tableau II-1 regroupent leur valeur[4] :

Tableau II-1 : Valeurs des coefficients AlGaAs/InGaAs [4]

| | |
|----------------------|-----------------------------------|
| ΔE_{g0} (ev) | $1.087x + 0.438x^2$ |
| ΔE_{g1} (ev) | $1.548y + 0.478y^2$ |
| a | $= -8.4 + 2.4y$ |
| C_{11} | $11.88 - 3.55y$ |
| C_{12} | $5.37 - 0.84y$ |
| E_r | $\frac{-0.405y}{5.6533 + 0.405y}$ |

En conclusion on peut dire que ce modèle prend en compte le dopage effectif c'est-à dire il considère que les électrons intervenant dans la conduction. Et l'ajout d'un espacer améliore la valeur de la concentration surfacique N_s . Mais avec un offset ΔE_c linéaire en fonction de E_g .

Dans ces trois modèles l'effet de polarisation spontanée et piézoélectrique est négligeable pour les deux matériaux GaAs et AlGaAs qui constitue l'hétérojonction GaAs / AlGaAs alors dans le cas d'une hétérojonction (Al,Ga)N/GaN, la présence de forts champs de polarisation rend possible la formation d'un 2DEG sans qu'aucun dopage intentionnel de la barrière (Al,Ga)N ne soit nécessaire.

II.2.2. Hétérojonction AlGaN/GaN

II.2.2.1 Modèle « donneurs en surface »

La première observation d'un gaz d'électrons bidimensionnel à l'hétérojonction (Al,Ga)N/GaN a été faite par M.A. Khan et al en 1992 [7]. Plusieurs sources d'électrons peuvent contribuer à cette accumulation d'électrons à l'hétéro-interface : la couche tampon GaN, la barrière AlGaN ou encore des états de surface. Cependant, la couche tampon GaN présente des dopages résiduels trop faibles, tandis que le dopage résiduel de la barrière semble ne contribuer qu'en partie à la formation du 2DEG. Par conséquent, et même si l'origine physique des électrons du 2DEG est toujours sujette à controverse, les charges semblent être plus probablement liées à la présence de niveaux donneurs en surface [7] ou qui se comportent comme tels sous la surface. Il s'agit du modèle de Smorchkova repris par Ibbetson[6], adapté à une structure HEMT avec un cap GaN et une couche AlN espaceur. Le niveau de Fermi est bloqué par des états donneurs en surface (figure II.4). Ainsi, la densité de porteurs dans le gaz 2D est principalement déterminée par le potentiel de surface ϕ_{sc} [6].

La Figure II-4 représente le diagramme de bande de conduction d'une hétérostructure HEMT GaN/GaN en présence d'une couche superficielle (cap) de GaN. Nous ne prenons pas en compte le dopage résiduel de la barrière car son effet sur la densité de charges dans le canal est faible par rapport aux effets de polarisation.

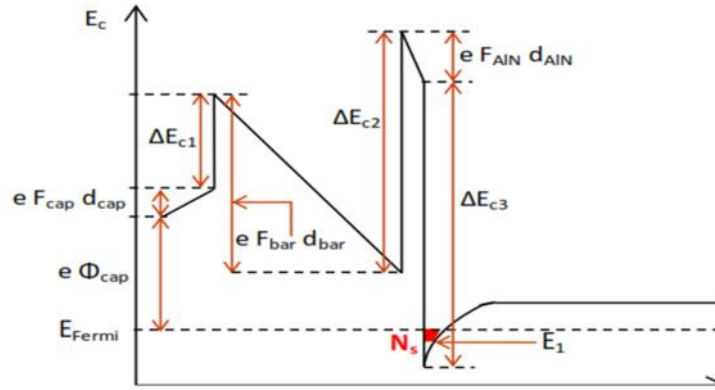


Figure II-4 : Diagramme de bande de conduction d'une structure HEMT : cap
GaN/barrière/AlN espaceur/canal GaN[6]

De la Figure II-4 nous pouvons en déduire l'égalité suivante qui relie la position du niveau de Fermi aux paramètres de la structure:

$$e\phi_{cap} - eF_{cap}d_{cap} + \Delta E_{C1} - eF_{bar}d_{bar} + \Delta E_{C2} - eF_{AlN}d_{AlN} - \Delta E_{C3} + E_1 + (E_F - E_1) = 0 \quad (\text{II.20})$$

Sur la Figure II-4, F_{cap} , F_{bar} (barrière) et F_{AlN} espaceur représentent les champs électriques dans chaque couche, qui sont exprimés comme suit :

$$\begin{aligned} F_{cap} &= \frac{eN_s}{\epsilon_{cap}} \\ F_{bar} &= \frac{\sigma_{pol1} - eN_s}{\epsilon_{bar}} \\ F_{AlN} &= \frac{\sigma_{pol2} - eN_s}{\epsilon_{AlN}} \end{aligned} \quad (\text{II.21})$$

Où σ_{pol1} et σ_{pol2} correspondent aux différences de polarisation entre la barrière (1) /l'AlN espaceur (2) et le canal respectivement. ϵ_{cap} , ϵ_{bar} et ϵ_{AlN} sont les constants diélectriques absolus des couches considérées.

La densité de porteurs dans le gaz 2D est nulle pour une certaine épaisseur de barrière dite critique d_{bar}^{cr} et pour une certaine tension de pincement V_p :

$$d_{bar}^{cr} = \left(e\phi_{cap} - e\sigma_{pol2} \frac{d_{AlN}}{\epsilon_{AlN}} \right) \frac{\epsilon_{bar}}{e\sigma_{pol1}} \quad (\text{II.22})$$

$$V_p = \left(e\phi_{cap} - e\sigma_{pol1} \frac{d_{bar}}{\epsilon_{bar}} \right) - e\sigma_{pol2} \frac{d_{AlN}}{\epsilon_{AlN}} \quad (\text{II.23})$$

La densité de charges dans le gaz 2D s'exprime de la manière suivante :

$$N_S = \frac{\sigma_{pol1} \frac{d_{bar}}{\epsilon_{bar}} - \sigma_{pol2} \frac{d_{AlN}}{\epsilon_{AlN}} - \phi_{cap} - E_1}{e \left(\frac{d_{cap}}{\epsilon_{cap}} + \frac{d_{bar}}{\epsilon_{bar}} + \frac{d_{AlN}}{\epsilon_{AlN}} + \frac{\pi \hbar^2}{m^* e} \right)} \quad (II-24)$$

Avec ϕ_{cap} : hauteur de barrière de Schottky GaN/métal, et est égale à 1 Ev. et correspond au blocage du niveau de Fermi par des défauts dans la région inférieure de la structure.

II.2.2.2 Modèle de Ridley

Contrairement au modèle de donneurs en surface qui bloque le niveau de Fermi en surface, le modèle électrostatique de Ridley [5, 6] est basé sur le fait que le niveau de Fermi est bloqué par le potentiel de la couche tampon (buffer) ϕ_{buffer} comme représenté sur la Figure II-5. Avec d_{cap} , d_{bar} et d_{buffer} sont les différentes épaisseurs des couches.

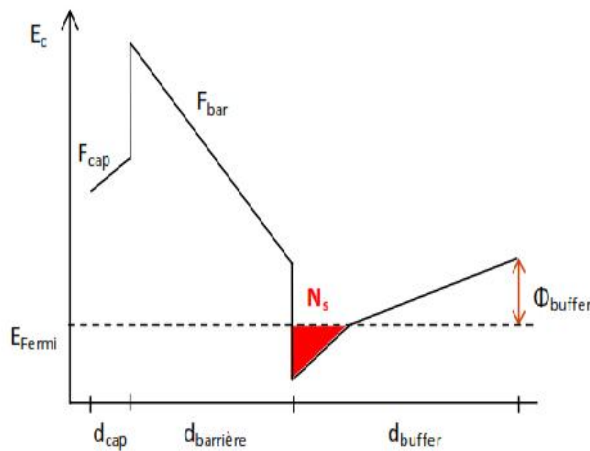


Figure II-5 : Diagramme de bande d'une structure HEMT selon le modèle de Ridley[5, 6]

Dans ce modèle, nous considérons 3 couches non intentionnellement dopées : le cap GaN, la barrière et la couche tampon GaN. Comme nos barrières sont généralement épitaxiées sur une couche d'AlN espaceur, nous considérons la barrière comme étant une barrière effective avec une épaisseur effective $dbareff$ et une teneur

en Aluminium x_{Al}^{eff} correspondant à la teneur en aluminium de l'AlN diluée dans la barrière effective, qui est donnée par :

$$\begin{aligned} d_{bar}^{eff} &= d_{bar} + d \\ x_{Al}^{eff} &= \frac{d_{bar}x_{Al} + d_{AlN}}{d_{bar}^{eff}} \end{aligned} \quad (\text{II-25})$$

l'expression de la densité de porteurs est la suivante :

$$N_S = \frac{\sigma_{pol} \frac{d_{bar}}{\epsilon_{bar}} - \phi_{buffer} \left[1 - \frac{\epsilon_{buffer}}{d_{buffer}} \left(\frac{d_{cap}}{\epsilon_{cap}} + \frac{d_{bar}}{\epsilon_{bar}} \right) \right]}{e \left(\frac{d_{cap}}{\epsilon_{cap}} + \frac{d_{bar}}{\epsilon_{bar}} + \frac{\pi \hbar^2}{m^* e} \right)} \quad (\text{II-26})$$

Notons que les modèles de d'Ibbetson [6] ou encore de Ridley [5] ne rendent pas complètement compte de l'évolution de la densité de charges dans le 2DEG avec l'évolution des structures (compositions et épaisseurs).

II.3 Calcul de la concentration bidimensionnelle contrôlée par une grille Schottky d'un transistor HEMT

La modélisation du puits quantique dans la structure HEMT nécessite la résolution auto cohérente du système d'équation de Poisson-Schrödinger. Que nous avons résolu dans des travaux antérieurs, ce qui nous a permis de déterminer les nouvelles relations des variations de la densité surfacique N_s en fonction du niveau de Fermi et la variation de l'offset E_C en fonction de $N_{D,eff}$, qui seront utilisées dans notre modèle.

Nous entamons notre étude par une description sommaire de ces dispositifs qui sont présentées en figure II-6.

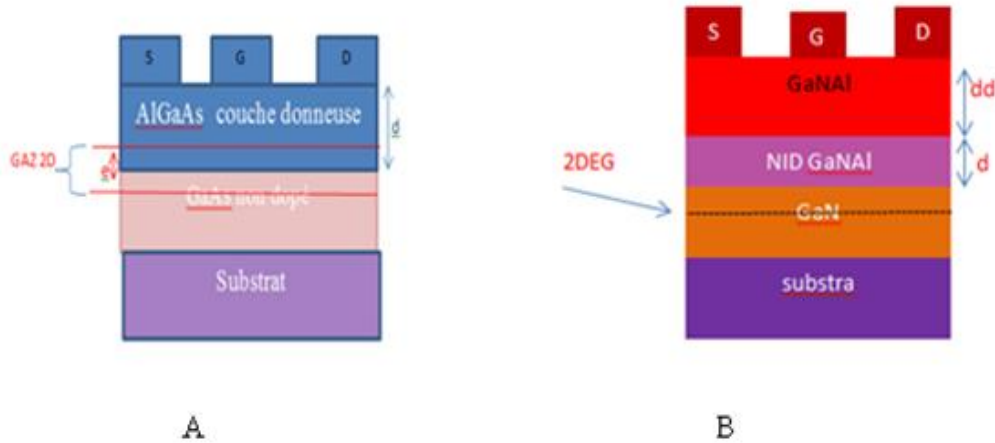


Figure II-6: Structure d'un transistor HEMT A- AlGaAs/GaAs B- - AlGaN/GaN

Notre structure est comme le montre la Figure II.6 , elle est constituée d'un substrat ,couche tampon (c'est dans cette couche et dans la partie supérieure où le gaz bidimensionnel se constitue),couche donneuse ,deux contacts ohmiques qui constituent le drain et la source situés de part et d'autre du contact de grille qui est de type Schottky et une couche d'espaceur dans la structure d'un transistor HEMT pseudo -morphique en AlGaN/GaN .

Avec :

dd : épaisseur de la couche donneuse dopée

e : épaisseur de la zone depleté coté couche donneuse

d : épaisseur de la couche donneuse non dopée (espaceur)

Pour mettre en évidence notre modèle, nous allons définir tous les paramètres utilisés (tension de seuil, l'offset E_c , la densité surfacique, barrière de potentiel du contact Schottky et le dopage effectif) pour le calcul de la concentration bidimensionnelle contrôlée par une grille Schottky et cela pour les deux dispositifs sous investigation (AlGaAs/GaAs,AlGaN/GaN).

II.3.1 Hétérojonction AlGaAs-n/GaAs

II.3.1.1 Tension de seuil

On définit la tension de seuil du HEMT, V_{off} , comme la tension de polarisation qu'il faut appliquer à la grille pour amener la surface du GaAs au seuil d'inversion [6]

L'expression de la tension de seuil V_{off} où on a utilisé un dopage effectif est donnée par l'équation suivante:

$$V_{off} = \varphi_B - \Delta E_C - \frac{qN_{def}d_d^2}{2\varepsilon} \quad (\text{II-27})$$

Où :

φ_B : est la barrière de potentiel du contact Schottky ;

ΔE_C : est la discontinuité de la bande de conduction de hétérojonction,

N_{def} : est la concentration de dopage.

d_d : est l'épaisseur de la couche d'AlGaAs dopée

ε : perméabilité du matériau AlGaAs

x : taux d'Aluminium

φ_B et ΔE_C sont considérés comme une fonction du dopage N_D , du dopage effectif

N_{Def} et du taux d'Al

Pour faire intervenir tous les phénomènes agissant au niveau de cette structure, on fait apparaître :

II.3.1.2 Dopage effectif

Soit N_D le dopage en atomes donneurs Silicium, appelons N_{dl} et N_{dx} les concentrations respectives en atomes donneurs légers et profond, de manière évidente, nous pouvons dire :

$$N_D = N_{dl} + N_{dx} \quad (\text{II-28})$$

Selon la statistique de Fermi-Dirac, N_{dl} , N_{dx} sont donnés par les formules suivantes [4]:

$$N_{dl} = \frac{N}{1 + \frac{1}{2}e^{\left(\frac{E_{dl} - E_F}{KT}\right)}} \quad (\text{II-29})$$

$$N_{dx} = \frac{N}{1 + \frac{1}{2} e^{\left(\frac{E_{dx} - E_F}{KT}\right)}} \quad (\text{II-30})$$

Où E_F est le niveau de Fermi et N est considérée constante.

Un calcul simple nous permet d'accéder à la valeur de N_{dl} qui, leurs hypothèses n'est autre que le dopage effectif N_{Def} [4]:

$$N_{Def} = \frac{N_D}{1 + \frac{1}{2} \exp\left(\frac{E_{dl} - E_F}{KT}\right)} \cdot \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E_{dx} - E_F}{KT}\right)} \quad (\text{II-31})$$

II.3.1.3 L'offset E_C

Dans ce travail, notre contribution se porte aussi par l'introduction d'une nouvelle formule de E_C (dans l'expression de la tension de seuil V_{off} au lieu d'utiliser l'ancienne formule [8-11])(Equ II-9).

La nouvelle approche de V_{off} suggérée s'articule sur la même base théorique néanmoins, ΔE_C dans ce cas est donné par l'équation suivante[12]:

$$\Delta E_C = 0.023N_D^4 - 0.18N_D^3 + 0.53N_D^2 - 0.66N_D + 0.34 \quad (\text{II-32})$$

II.3.1.4 La densité surfacique

L'utilisation de la résolution du système d'équation Poisson Schrödinger a permis l'explication de la base physique du gaz bidimensionnel et de trouver la densité surfacique en fonction du niveau de Fermi pour un état liée, N_s est donnée par la formule suivante :

$$N_s = a + B \times E_F \quad (\text{II-33})$$

Avec : $a = N_{S0}$, $B = 0.05 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2} / \text{ev}$. ou N_{S0} c'est la densité surfacique où $V_G = 0$ (à l'équilibre)

II.3.1.5 Barriere de potentiel du contact Schottky

La valeur de la hauteur de barrière (Al,Ga)N est généralement tirée de la relation empirique [6] :

$$\varphi_B = 1.38. x + 0.84 \quad (\text{II-34})$$

Néanmoins, le paramètre φ_B est adapté uniquement au calcul de la densité de porteurs dans les structures avec contact Schottky[5]

On rappelle que l'équation classique de la concentration électronique dans le canal bidimensionnel à l'hétéro-interface s'exprime [8, 13-15] :

$$N_s = \frac{\epsilon}{qd} (V_G - V_{off} - E_F/q) \quad (\text{II-35})$$

II.3.2 Hétéro-structure AlGaN-n/GaN

Dans les structures AlGaN/GaN, il est intéressant d'étudier la provenance des électrons qui peuplent le gaz d'électrons à deux dimensions. De même, il est utile de calculer la densité de porteurs en fonction de la charge surfacique à l'interface AlGaN/GaN.

Indépendamment de toute hypothèse concernant la provenance des électrons dans le gaz 2D, on a utilisé le modèle d'Ambacher qui propose une méthode de calcul de la densité de porteurs dans le puits de potentiel pour un empilement AlGaN/GaN avec un contact Schottky où on a procédé un dopage effectif du matériau AlGaN.

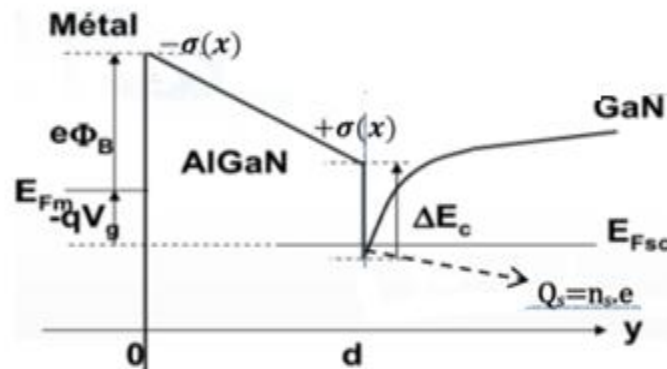


Figure II-7 : Bande de conduction de la structure métal/AlGaN/GaN

On considère que le potentiel dans la couche tampon est nul. Et d'après le diagramme de bande (Figure II-7), on peut déterminer le potentiel électrostatique V dans la couche d'AlGaN[15] :

$$V_{AlGaN}(x) = -qV_G + q\phi_b + E_F - \Delta E_C \quad (\text{II-36})$$

En se base sur l'application du théorème de Gauss sur notre structure représentée sur la figure on peut écrire :

$$V_{AlGaN}(x) = \frac{\sigma(x)(dd + d) - q N_S d_a - q N_{Def} d_a^2}{\epsilon_{AlGaN}} \quad (\text{II. 37})$$

En regroupant les équations II-36 et II-37, on établit une nouvelle équation de modélisation de la densité de porteurs dans le gaz 2D contrôlé par grille schottky:

$$N_s = \frac{1}{q(dd + d)} (V_G - V_{off} - E_F) \quad (\text{II. 35})$$

où :

$$V_{off} = \phi_B - E_C - \frac{q N_{deff} d_a^2}{2 \epsilon_{AlGaN}} - \frac{(dd + d)}{\epsilon_{AlGaN}} \sigma(x) \quad (\text{II. 36})$$

Avec ;

- (x) c'est l'expression de la charge de surface en fonction du % d'Al de la couche AlGaN, elle est donnée par Equ I-12.
- ϕ_B La barrière de potentiel Schottky est donné par l'équation II-34.
- L'offset E_C et le niveau de Fermi sont donnés par les équations II-32 et II-33 respectivement, ces expressions sont issu d'un calcul complet de la résolution des équations de Schrödinger et de Poisson couplées.

Selon l'équation (II-35), lorsque $V_G = V_{off} - E_F / q$, la densité du gaz d'électrons bidimensionnel devient nulle. Par conséquent, la tension $(V_{off} - E_F)$ est appelée la tension de pincement [7]

II.4 Conclusion

Ce chapitre a été dédié à la modélisation de la concentration surfacique du HEMT qui constitue le principal paramètre gouvernant les performances du HEMT. En première étape nous avons rappelé les différents modèles qui existent dans la littérature et nous avons mis en évidence leur limite. Par la suite nous avons déterminé la concentration des porteurs dans le gaz bidimensionnel dans deux structure à hétérojonction AlGaAs / GaAs et AlGaN / GaN hors équilibre où le contrôle de charge de la concentration surfacique du HEMT s'effectue par une grille Schottky ($N_s(V_G)$) .

Pour cela nous avons utilisé une nouvelle expression de E_c et du niveau de fermi du dopage effectif. Ces nouvelles expressions ont été obtenues par la résolution auto-cohérente du système d'équation Poisson-Schrödinger, qui gouverne le fonctionnement du transistor à l'équilibre.

Afin d'avoir des valeurs de comparaison nous effectuons cette résolution sous environnement COMSOL dans le chapitre suivant.

Bibliographie

1. Cappy, A., Propriétés physiques et performances potentielles des composants submicroniques à effet de champ: structures conventionnelles et à gaz d'électrons bidimensionnel. 1986, Lille 1.
2. Delagebeaudeuf, D., et al., Two-dimensional electron gas MESFET structure. Electronics Letters, 1980. **16**(17): p. 667-668.
3. WOLNY, M., et al., Transistors à haute mobilité électronique obtenus par épitaxie en phase vapeur aux organométalliques. Acta electronica, 1988. **28**: p. 55-63.
4. TEMPLE-Boyer, P., Elaboration d'un modèle Pseudo - Bidimensionnel d'un transistor pseudomorphique GaAlAs/GaInAs/GaAs. laboratoire d'électronique Philips, Juin 1990.
5. Ridley, B., Polarization-induced electron populations. Applied Physics Letters, 2000. **77**(7): p. 990-992.
6. Rennesson, S., Développement de nouvelles hétérostructures HEMTs à base de nitrure de gallium pour des applications de puissance en gamme d'ondes millimétriques. 2013, Université Nice Sophia Antipolis.
7. Baron, N., Optimisation de l'épitaxie sous jets moléculaires d'hétérostructures à base de GaN: application aux transistors à haute mobilité d'électrons sur substrat silicium. 2009, Université Nice Sophia Antipolis.
8. Pu, J., J. Sun, and D. Zhang, An accurate polynomial-based analytical charge control model for AlGaIn/GaN HEMT. Semiconductors, 2011. **45**(9): p. 1205.
9. VANBÉSIEN, O., Composants à hétérostructures: applications en nanoélectronique et nanophotonique. 2006: Ed. Techniques Ingénieur.
10. Mathieu, H., T. Bretagnon, and P. Lefebvre, Physique des Semiconducteurs et des Composants Electroniques-Problèmes Résolus. 2001: Dunod.
11. Djefdjouf, F., Modélisation de l'hétérostructure HFET AlGaIn/GaN incluant les effets électriques. 2007.
12. Bouneb, I. and M. Marir-Benabbas. Modelisation of accumulation barrier of nanostructure AlGaAs/GaAs. in Proceedings of the 2nd WSEAS international conference on Nanotechnology. 2010. World Scientific and Engineering Academy and Society (WSEAS).

13. Charfeddine, M., et al., Electrical characterization of traps in AlGa_N/Ga_N FAT-HEMT's on silicon substrate by CV and DLTS measurements. *Journal of Modern Physics*, 2012. **2**(10): p. 1229.
14. Abdelaziz, F.Z., Caractérisation électrique des HEMTs à base de nitrure de gallium AlGa_N/Ga_N.
15. Lehmann, J., Caractérisation électrique d'hétérostructures AlGa_N/Ga_N pour des applications de puissance. 2015, Université Grenoble Alpes.

Chapitre III
Simulation d'une structure
Nanométrique à puits quantique
Sous COMSOL

III.1 Introduction

Le recours à la simulation numérique nous offre la possibilité de concevoir notre modèle, d'intégrer toutes les caractéristiques techniques disponibles et d'étudier le comportement de notre structure nanométrique en fonction de tous les paramètres d'influence.

En résumé, le modèle numérique consiste d'une part à représenter géométriquement une configuration du modèle et d'une autre part à établir les lois régissant son comportement.

En vue de prédire les paramètres caractérisant une structure nanométrique de type hétérojonction AlGaAs/GaAs, notre travail, a été effectué sous environnement COMSOL Multi physiques. Il permet un "couplage" entre diverses interfaces physiques appelées modules. Dans notre cas, nous utilisons solveur couplé de Schrödinger-Poisson[1-3].

Ce chapitre consiste en l'étude des phénomènes quantiques tels que la quantification d'énergie et le confinement des charges, unidimensionnelle (Puits quantique) et tridimensionnelle (boite quantique), pour une hétérojonction cylindrique de type AlGaAs/GaAs. La résolution de l'équation de Schrödinger (décrivant ces phénomènes) avec les conditions aux limites de type Dirichlet et Neumann, que l'on précisera par la suite. Les résultats de cette résolution sont des valeurs propres des états liés et la fonction d'onde associée à chaque état.

Par la suite nous utilisons ces valeurs propres pour effectuer la résolution auto cohérent du système d'équation Poisson-Schrödinger pour un puits quantique, qui nous permet de déterminer l'énergie potentielle et la fonction d'onde caractérisant un puits quantique pour un état lié.

III.2 Environnement de simulation

COMSOL Multi physiques est un moteur de solution qui résout des équations différentielles partielles via la méthode des éléments finis (FEM) pour une simulation particulière [4]. Flexible et performant pour l'étude des physique couplées. Dans le paragraphe qui suit nous citerons les étapes essentielles permettant la résolution d'un problème proposé.

III.3 Méthodologie de conception et modélisation sous COMSOL

Le calcul des états liés d'un puits quantique ou bien d'une hétérojonction à l'échelle nanométrique en 1D et 3D est régit par l'équation de Schrödinger[5]. De ce fait, nous utilisons les modules « quantum mechanics » et « Poisson equation » en régime « eigenvalue ». Notre algorithme sera structuré de la manière suivante (figure III.1) :

1. Définition de la physique (dimension, quantum mechanic et equation de Poisson, type d'étude)
2. Création de la structure : géométrie
3. Introduction des paramètres de données et propriétés des matériaux et définition des variables
4. Introduction des équations physique et des conditions aux limites
5. Maillage
6. Exécution
7. Affichage des résultats ou post traitement.

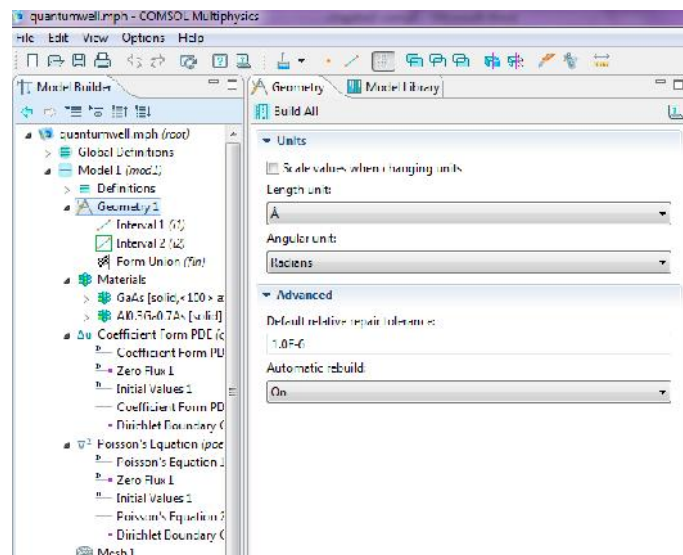


Figure III.1 : les différentes étapes pour la création et la simulation d'un modèle sous COMSOL.

III.4 Géométrie

Dans le but de modéliser le confinement unidimensionnel et tridimensionnel en symétrie cylindrique, l'hétérojonction à modéliser est constituée par juxtaposition de

deux cylindres de même rayon R pour les deux matériaux de différent gap (grand gap et petit gap) de hauteur de W , comme le montrent les figures III-2 et III-3. En plus cette structure nanométrique est de type :

- Anisotype ou les deux matériaux GaAs et AlGaAs sont dopés de type différent (GaAs dopé P, AlGaAs dopé type N).
- Abrupte : la composition des matériaux et les dopages changent brusquement lors du passage du plan d'interface.
- D'alignement de bande de type I
- $R=60 \text{ \AA}$
- $W= \pm 160 \text{ \AA}$

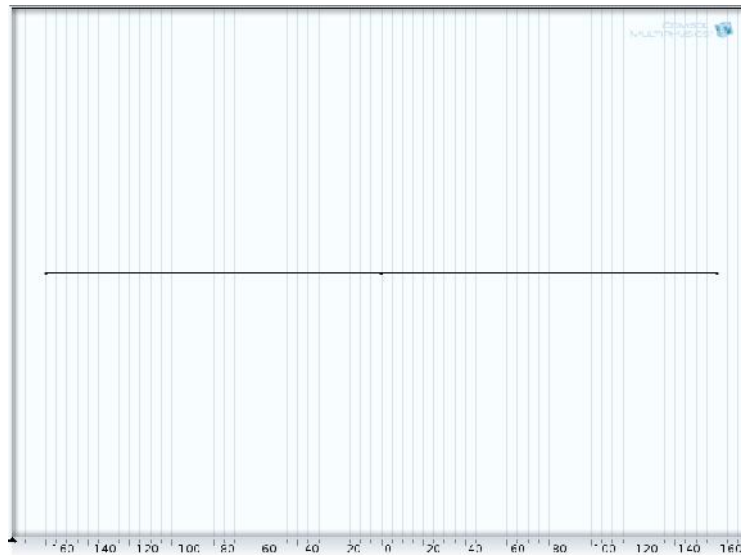


Figure III-2 : Structure de l'heterojonction AlGaAs/GaAs en 1D

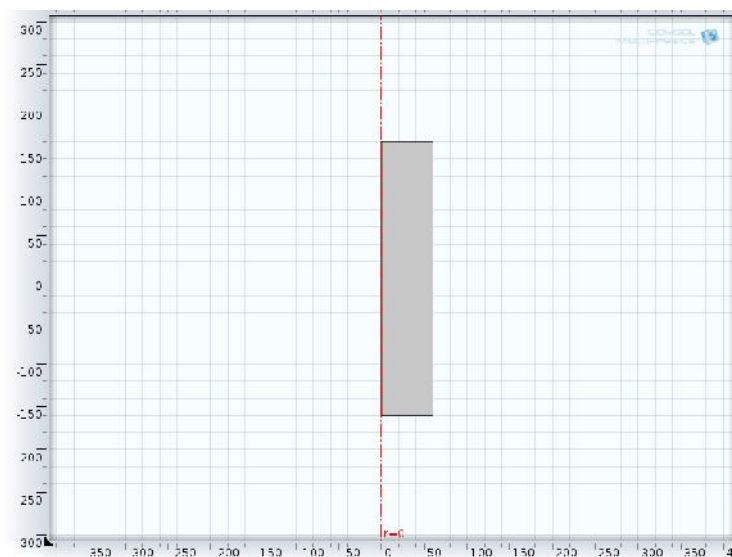


Figure III-3 : Structure de l'heterojonction AlGaAs/GaAs en 2D axisymétrique

III.5 Propriétés des Matériaux

La conception d'un dispositif nanométrique nous amené à choisir des matériaux selon plusieurs critères parmi lesquels on peut citer : la disponibilité, le cout, les conditions d'utilisation, les caractéristiques et les propriétés du nanomatériau choisi.

Dans notre cas les matériaux choisis sont un nanomatériau à grand gap AlGaAs et un nanomatériau à petit gap GaAs ou leur mise en contact forme une hétérojonction dont les propriétés dépendent des propriétés physiques et géométriques des deux nanomatériaux utilisées. Les principales caractéristiques de ces nanomatériaux sont indiquées dans le tableau I.1.

III.6 Équations physiques et conditions aux limites

Puisque la largeur d'un puits de potentiel est de l'ordre de grandeur de la longueur d'onde de Broglie $\lambda = h/p$ ($\approx 250 \text{ \AA}$ dans le GaAs), les effets quantiques introduisent une suite de niveaux d'énergie discrets E^i qui décrivent la quantification des états électronique [6, 7].

Pour calculer les états électroniques pour un puits quantique, on doit résoudre l'équation de Schrödinger dans l'approximation de masse effective et l'approximation de Hatree[1, 3]:

$$-\nabla \left(\frac{\hbar^2}{8\pi^2 m_e} \nabla \Psi^i \right) + V\Psi = E^i \Psi^i \quad (\text{III-1})$$

Où :

- ∇ : Le Laplacien
- m_e : Masse effective d'électron
- V : Énergie potentielle
- E^i : Énergie totale de l'électron
- Ψ^i : Fonction d'onde
- $\hbar = \frac{h}{2\pi}$: où h est la Constante de Planck

On peut maintenant séparer la fonction d'onde totale [5, 7, 8] :

$$\Psi = \chi(z, r) \Theta \quad (\text{III-2})$$

Où φ est l'angle azimutal.

L'équation de Schrödinger (III-1), peut être réécrite en coordonnées cylindriques comme suit :

$$-\frac{\hbar^2}{8\pi^2} \left[\frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{1}{m_e} \frac{\partial \chi}{\partial z} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{r}{m_e} \frac{\partial \chi}{\partial r} \right) \right] \Theta - \frac{\hbar^2}{8\pi^2} \frac{\chi}{m_e r^2} \frac{d^2 \Theta}{d\varphi^2} + V \chi \Theta = E \chi \Theta \quad (\text{III-3})$$

La division de l' équation (III-3) par [5]:

$$\frac{\chi(z, r)}{m_e r^2} \Theta(\varphi)$$

Et la réorganisation de ces termes conduit aux deux équations indépendantes suivantes :

$$\frac{1}{\Theta} \frac{d^2 \Theta}{d\varphi^2} = -l^2 \quad (\text{III-4})$$

Et

$$-m_e r^2 \frac{\hbar^2}{8\pi^2} \left[\frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{1}{m_e} \frac{\partial \chi_l}{\partial z} \right) \frac{1}{\chi_l} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{r}{m_e} \frac{\partial \chi_l}{\partial r} \right) \frac{1}{\chi_l} \right] + m_e r^2 [V - E] = -\frac{\hbar^2}{8\pi} l^2 \quad (\text{III-5})$$

L'équation (III-4) a des solutions évidentes de la forme $\Theta = \exp[i l \varphi]$; Où la condition de périodicité $\Theta(\varphi + 2\pi) = \Theta(\varphi)$ implique que l , le nombre quantique principal, doit être un entier.

Il reste à résoudre l'équation (III-5), qu'on peut la réécrire comme suit:

$$-\frac{\hbar^2}{8\pi^2} \left[\frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{1}{m_e} \frac{\partial \chi_l}{\partial z} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{r}{m_e} \frac{\partial \chi_l}{\partial r} \right) \right] + \left(\frac{\hbar^2}{8\pi^2 m_e r^2} l^2 + V \right) \chi_l = E_l \chi_l \quad l \in Z \quad (\text{III-6})$$

On peut noter, qu'il s'agit d'une forme de PDE avec des coefficient, que l'on réécrit comme suit [5],

$$\Delta. (-c \nabla u - \alpha u + \gamma) + a u + \beta. \nabla u = d_a \lambda u \quad (\text{III-7})$$

$$\text{Ou : } c = \frac{\hbar^2}{8\pi^2 m_e}, \quad a = \frac{\hbar^2}{8\pi^2 m_e} \frac{l^2}{r^2} + V, \quad B_r = -\frac{\hbar^2}{8\pi^2 m_e} \frac{1}{r}, \quad d_a = 1$$

Avec :

d_a : est le coefficient d'amortissement ou un coefficient de masse

- c : est le coefficient de diffusion.
 v : est le coefficient de convection de flux conservateur.
 β : est le coefficient de convection.
 α : est le coefficient d'absorption.
 S : est le terme source de flux conservateur.

La fonction d'onde s'annule aux murs électriques qui sont positionnés à $W=\pm 160\text{\AA}$ [3].

III.7 Maillage

Le maillage est une étape importante et laborieuse où on doit déterminer la valeur de la fonction à chaque nœud dans la résolution des équations aux dérivées partielles (PDE) alors que sous environnement COMSOL cela se fait simplement en choisissant dans un menu de type de maillage souhaité. Il consiste à la discrétisation du problème, par la méthode des éléments finis. La figure III-4 représente la structure maillée.

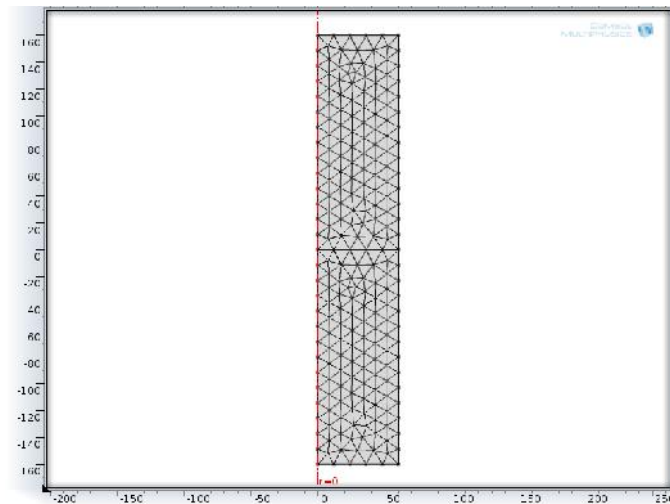


Figure III-4 : Representation de l'heterojonction cylindrique GaAs/AlGaAs en 2D axiymetrique maillée

La distribution d'éléments peut être uniforme ou non uniforme, et peut donc être manipulée pour fournir une résolution requise. COMSOL fournit plusieurs options pour manipuler la distribution de maillage d'éléments, allant de normal à extra-fin à grossier. La méthode des éléments finis (FEM) est utilisée par COMSOL en arrière-scène afin de trouver des approximations d'équations différentielles partielles. Presque à tout moment, une simulation exige la résolution d'équations différentielles partielles

multiples[9]. Lorsque le problème est complètement défini, il est mis sous forme matricielle. Par la suite nous effectuons l'exécution de la simulation. La dernière étape consiste à l'affichage des résultats de simulation.

III.8 Résultats et discussions

III.8.1 Fonctions d'ondes associées à six états liés en modélisation 1D & 3D

Les figures III-5 et III-6 montrent les fonctions d'ondes associées à l'état lié E_1 pour l'hétérojonction GaAsAl/GaAs en modélisation unidimensionnelle (confinement 1D) et en modélisation tridimensionnelle (confinement 3D) respectivement. On remarque que dans la région AlGaAs (où $-W < z < z_c$) la fonction d'onde est nulle, par contre elle est non nulle dans la région GaAs où ($z_c < z < +W$). Cela confirme que la juxtaposition d'un matériau à grand gap et un matériau à petit gap fait l'apparition d'un puits de potentiel confiné entre les murs électriques ($+W$ et $-W$). Ce puits de potentiel se situe à quelque dizaine d'angström de l'interface ($z_c < z < +W$). Ces deux figures montrent aussi, que la grande probabilité de trouver les porteurs se situe aussi dans cette région, où ils sont confinés[10], sachant que si une particule reste confinée dans une région de l'espace, alors qu'elle sera à tout moment nulle ailleurs. Sa fonction d'onde est donc normalisable et les valeurs de son énergie sont quantifiées (apparition d'une suite de niveaux d'énergie discret), et on dit que la particule se trouve dans des états liés [8, 11, 12]

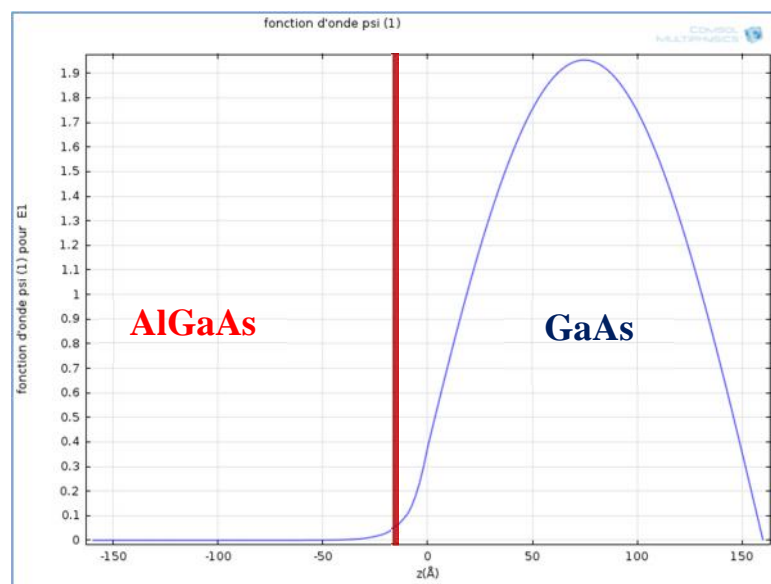


Figure III-5 : Représentation 1D de la fonction d'onde $\psi(1)$ associée à l'état lié E_1 pour l'hétérojonction GaAsAl/GaAs

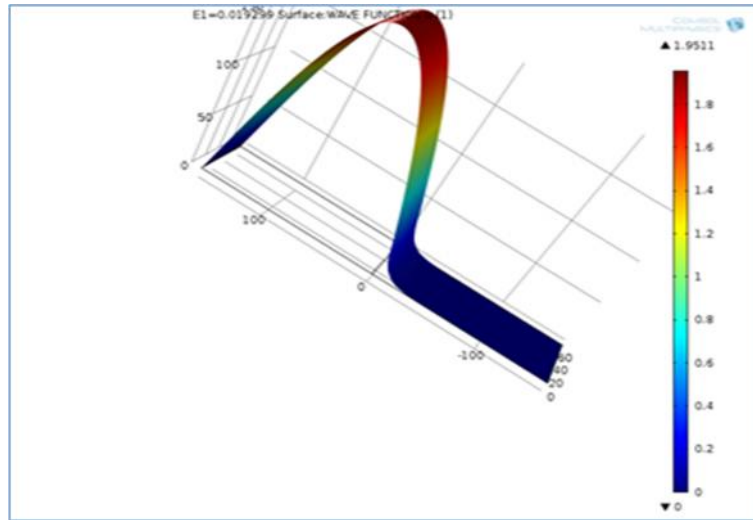


Figure III-6 : Représentation 2D de la fonction d'onde $\psi(1)$ associée à l'état lié E_1 pour l'hétérojonction GaAsAl/GaAS

Cette simulation nous a permis de calculer les états électroniques pour un puits quantique et d'un court nano fil (boite quantique) cylindrique AlGaAs / GaAs [7] où les valeurs propres d'énergie des états liés sont regroupées dans le tableau III-1 suivant :

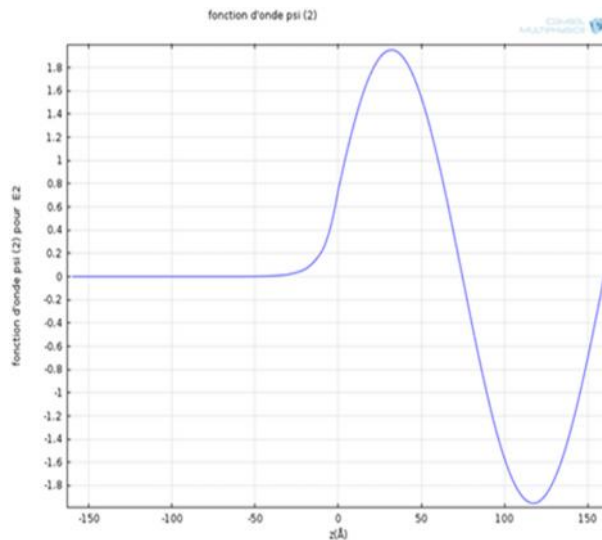
Tableau III-1: Les six valeurs des états liés pour l'hétérojonction GaAsAl/GaAS en 1D & 3D .

| N° état i | $E_i(1D)(ev)$ | $E_i(3D)(ev)$ |
|-----------|---------------|---------------|
| 1 | 0.0192880 | 0.019299 |
| 2 | 0.0771090 | 0.077149 |
| 3 | 0.1732970 | 0.173368 |
| 4 | 0.3074416 | 0.251119 |
| 5 | 0.4780720 | 0.307463 |
| 6 | 0.6717400 | 0.308652 |

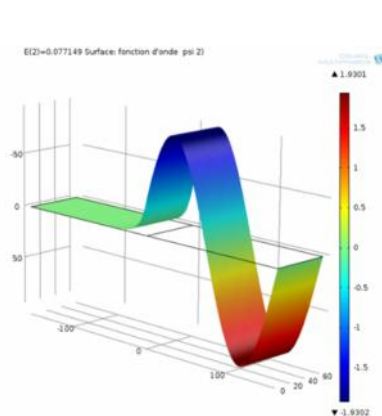
La comparaison des modèles 1D et 3D pour l'hétérojonction AlGaAs / GaAs cylindrique de rayon $R=60 \text{ \AA}$ et de hauteur $2W=320 \text{ \AA}$, montre que les niveaux d'énergies impairs (E_1, E_3) ont les mêmes valeurs comme le montre les figures III-5, III-6 et III-8.

Par contre elles sont différentes pour les niveaux d'énergies paires E_2 , E_4 qui représentent les modes transverses pour le confinement 3D [10, 13]:

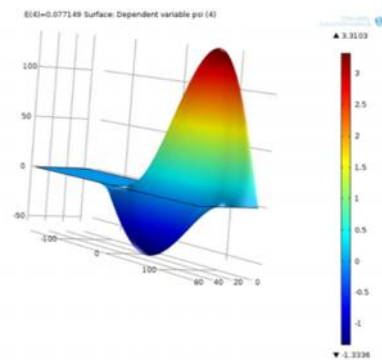
- E_2 se compose des deux modes E_{12} , E_{21} qui représentent le confinement suivant z et r voir figure III-7.
- E_4 se compose des deux modes E_{23} , E_{32} , c'est un niveau dégénéré ou les énergies sont égales mais leur fonction d'onde sont différentes, voir figure III-9.



A- Représentation 1D de la fonction d'onde $\psi(2)=f(z)$ associée à l'état lié E_2 pour l'hétérojonction GaAsAl/GaAs



B- Représentation 3D de la fonction d'onde $\psi(2)$ associée à l'état lié E_{12} pour l'hétérojonction GaAsAl/GaAs



C- Représentation 3D de la fonction d'onde $\psi(2)$ associée à l'état lié E_{21} pour l'hétérojonction GaAsAl/GaAs

Figure III-7 : Représentation de la fonction d'onde $\psi(2)$ l'hétérojonction GaAsAl/GaAs

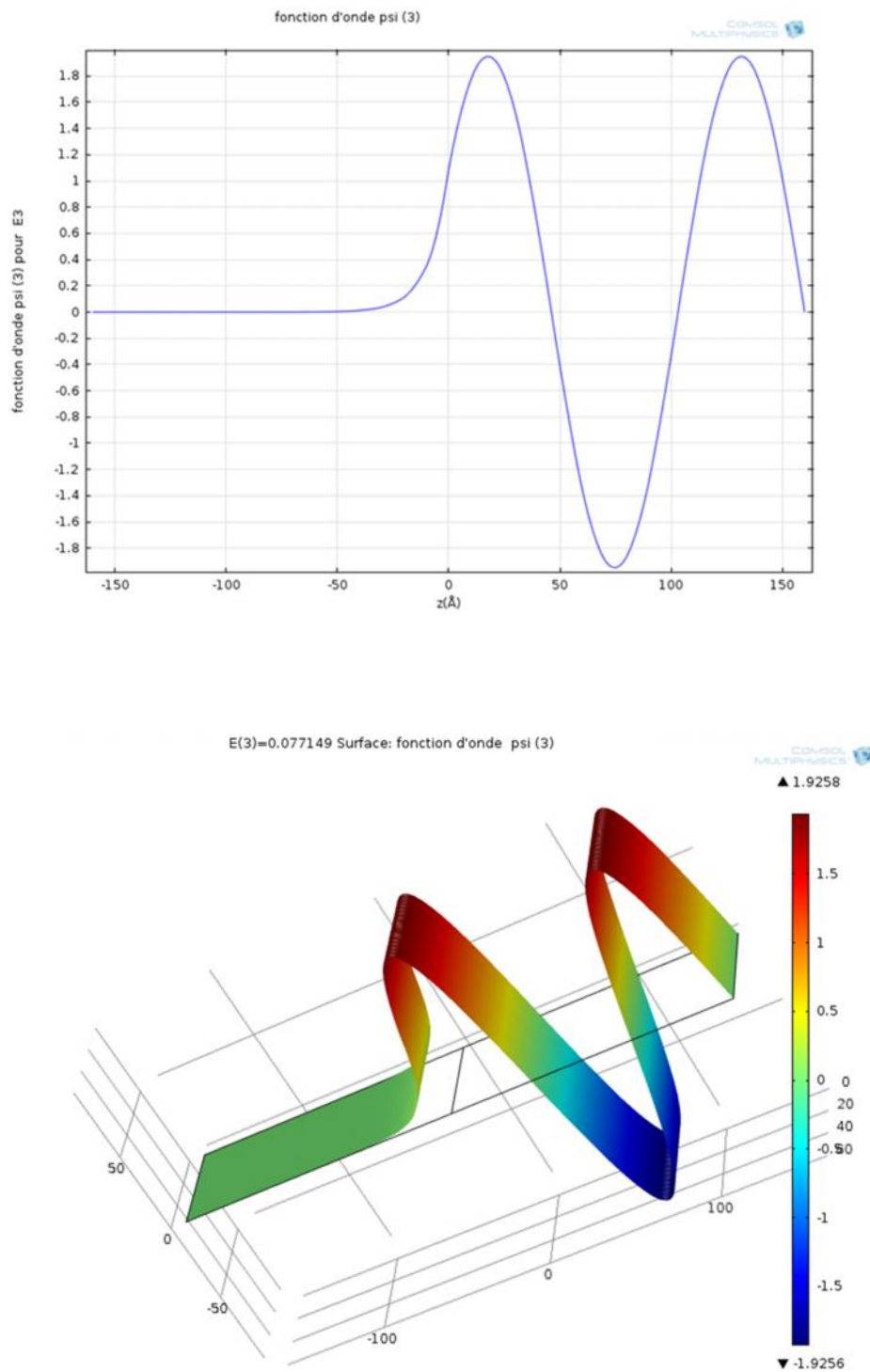
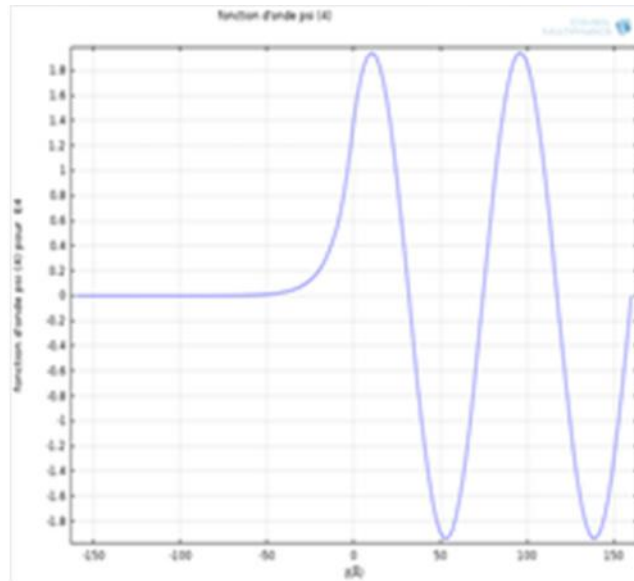
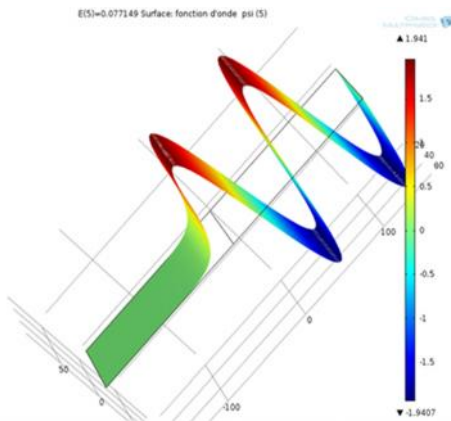


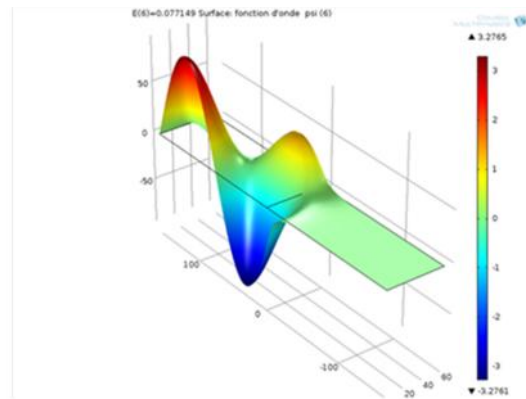
Figure III-8 : Représentation 1D&3D de la fonction d'onde psi (3) associée a l' état lié E_3 pour l'hétérojonction GaAsAl/GaAS



A- Représentation 1D de la fonction d'onde $\psi(4)=f(z)$ associée a l'état lié E_4 pour l'hétérojonction GaAsAl/GaAS



B-Représentation 3D de la fonction d'onde $\psi(4)$ associée à l'état lié E_{23} pour l'hétérojonction GaAsAl/GaAS



C-Représentation 3D de la fonction d'onde $\psi(4)$ associée à l'état lié E_{32} pour l'hétérojonction GaAsAl/GaAS

Figure III-9 : Représentation 1D & 3D de la fonction d'onde $\psi(4)$ associée a l'état lié E_4 pour l'hétérojonction GaAsAl/GaAS

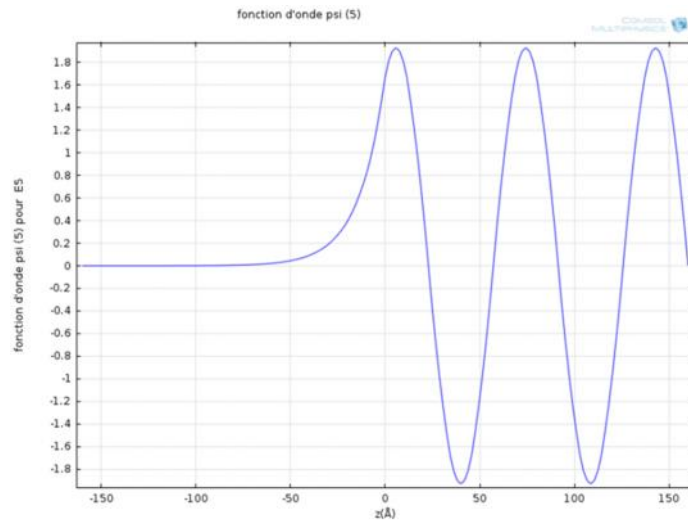


Figure III-10 : Représentation 1D de la fonction d’onde $\psi(5) = f(z)$ associée à l’état lié E_5 pour l’hétérojonction GaAsAl/GaAs

Les figures III-10 et III-11 représentent la fonction d’onde $\psi(5)$ associée à l’état lié E_5 et la fonction d’onde $\psi(6)$ associée à l’état lié E_6 respectivement pour l’hétérojonction GaAsAl/GaAS en 1D. Nous constatons que l’énergie est quantifiée et les valeurs de E sont discrettes. Ces états sont donnés par un nombre fini de valeurs de E , à savoir $E_1 < E_2 < E_3 < E_4 < E_5 < E_6$, ce qui est en bon accord avec les résultats établis dans la littérature [7, 8].

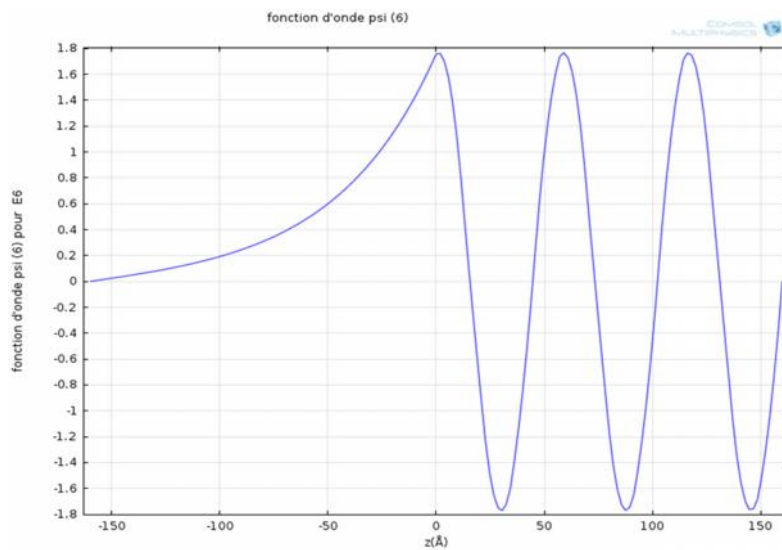


Figure III-11 : Représentation 1D de la fonction d’onde $\psi(6)=f(z)$ associée à l’état lié E_6 pour l’hétérojonction GaAsAl/GaAS

III.8.2 Fonction d'ondes axiale pour chaque état lié au centre du cylindre

La figure III-12 montre que le confinement et la quantification de l'énergie se situent dans la couche tampon, et que les électrons occupent au maximum quatre états pour $R=60\text{Å}$ et un état pour $R=600\text{Å}$ mais pour $R=6\text{Å}$ les électrons occupent les six niveaux d'énergie. Ceci est du que le confinement en énergie des porteurs varie selon les dimensions de la boîte quantique, plus la boîte est petite, plus le confinement est fort et plus les niveaux d'énergie sont éloignés du fond du puits (comme pour un puits unidimensionnel). Donc si la boîte est trop petite, elle se comporte comme un puits de potentiel unidimensionnel.

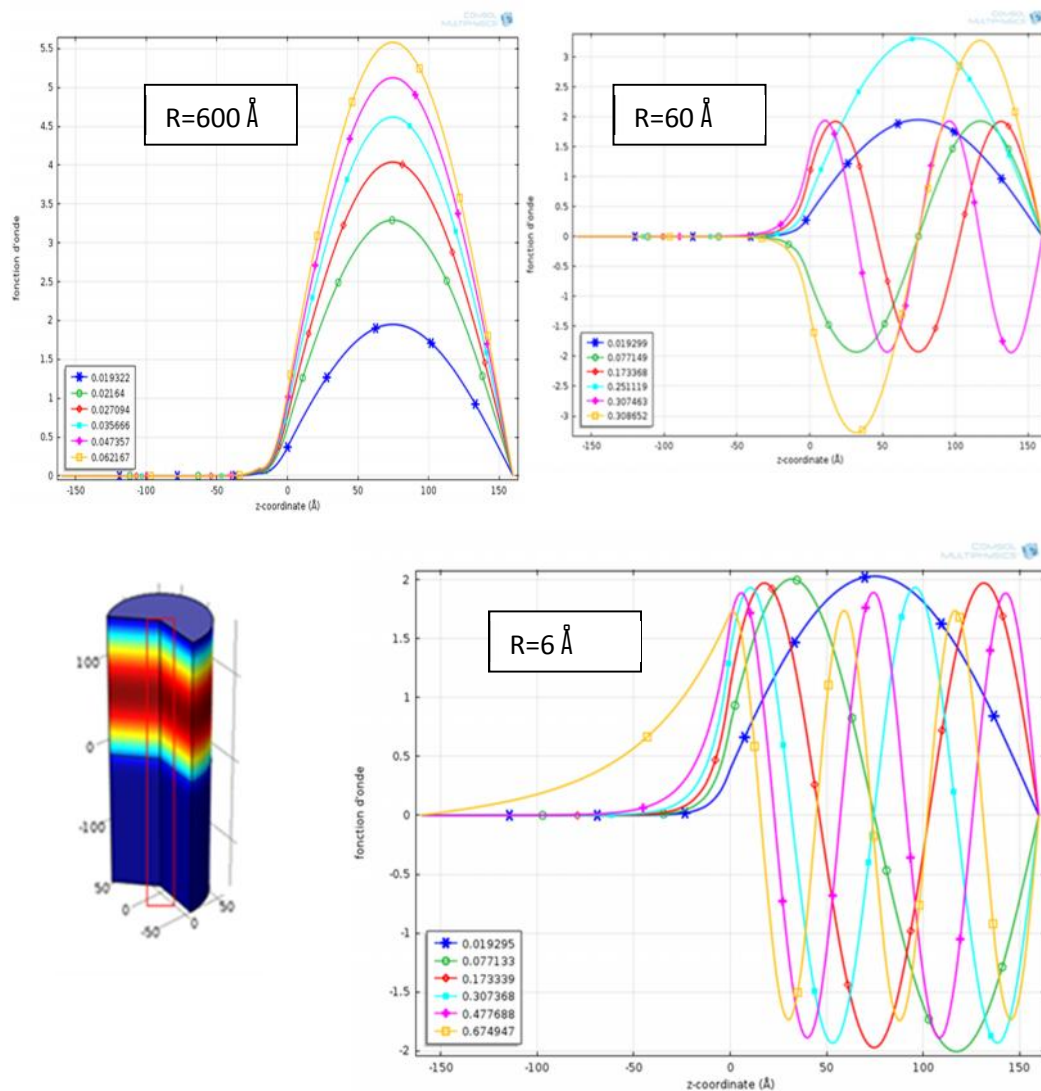


Figure III-12 : Représentation des Fonction d'onde axiales pour chaque état lié au centre du cylindre pour diverses valeurs de R

III.8.3 Variation de la fonction d'onde radiale pour chaque état lié a l'interface AlGaAs/GaAs

La representation graphique de la variation de la fonction d'onde en fonction du rayon R de la boite quantique cylindrique est illustrée sur la figure III-13.

- Pour les états E_1 , et E_3 : la figure III-13 montre que la fonction d'onde est constante le long du rayon r ce qui signifie que pour cette structure (cylindre $2W=320 \text{ \AA}$, $R=60 \text{ \AA}$) le confinement et la quantification d'énergie dans une boite quantique sont les mêmes que celui d'un puits quantique.
- Pour les états E_4, E_2 : la figure III-13 montre que les fonctions d'ondes qui sont de forme sinusoidale avec amortissement ce qui est conforme à la théorie des fonctions de Bessel [14, 15]

Ce résultat est en accord avec la résolution analytique de l'équation de Schrödinger ou les électrons sont confinés dans les trois directions pour une boite quantique cylindrique[12]

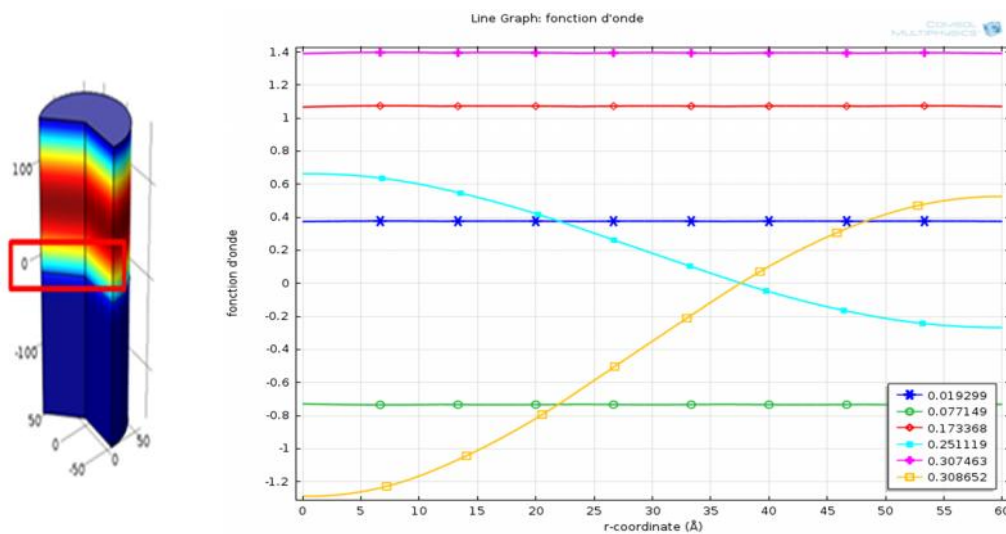


Figure III-1 3 : Représentation des fonctions d'ondes radiales pour chaque état lié au centre du cylindre pour $R=60 \text{ \AA}$

La figure III-14 illustre les fonctions d'ondes radiales pour chaque état lié au centre du cylindre pour $R=600 \text{ \AA}$. Ce ui nous a permis de mieux voir l'effet d'amortissement représenté par les fonctions de Bessel.

En effet, on voit bien que les fonctions de Bessel du premier type sont les solutions radiales de l'équation de Schrödinger sur un disque avec la condition

d'annulation au bord. Ces fonctions sont donc particulièrement adaptées aux problèmes à symétrie cylindrique[15].

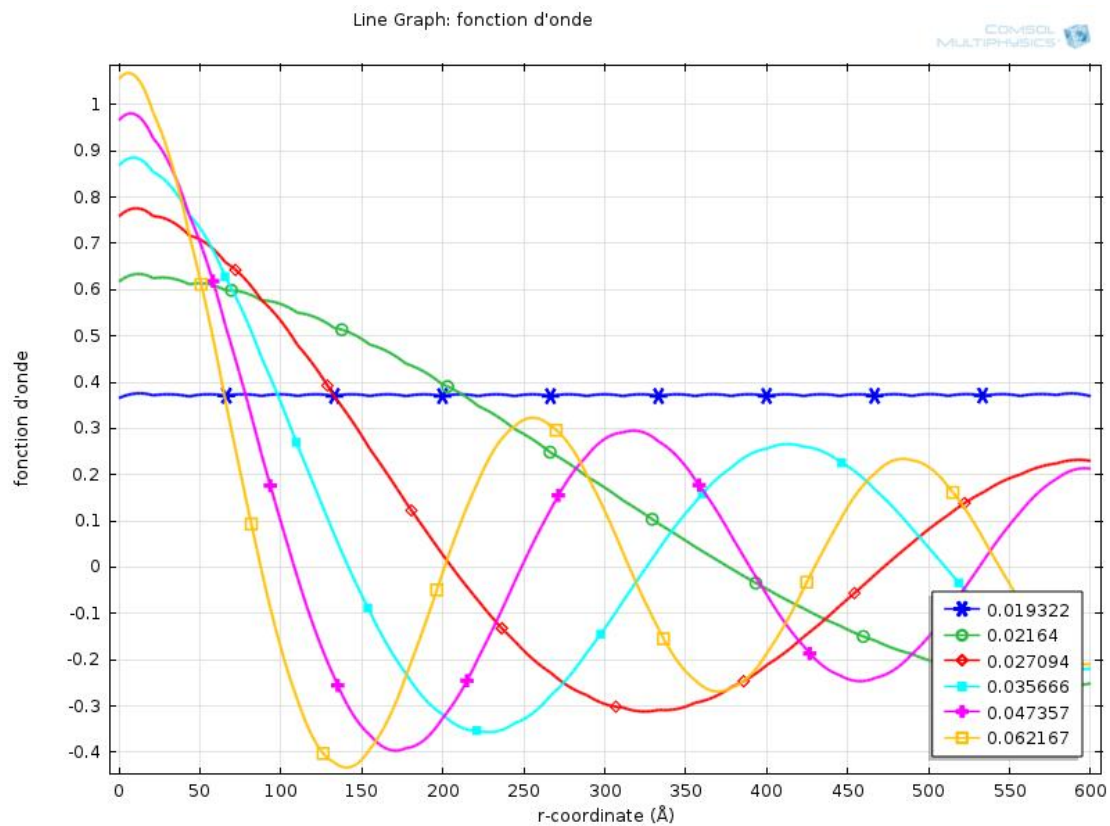


Figure III-14 : Fonctions d’ondes radiales pour chaque état lié au centre de cylindre pour $R=600 \text{ \AA}$

III.9 Modélisation d’un puits quantique

La modélisation d’un puits quantique, passe par la résolution du système d’équations Schrödinger-Poisson à cause des effets quantiques qui se produisent au niveau de l’interface.

La résolution du système d’équation Poisson - Schrödinger a été menée soit par des méthodes approximatives soit par des méthodes de type self consistant.

Les méthodes approximatives sont simples lorsque les utilise mais ont le défaut du manque de précision surtout lorsque on cherche à connaître l’allure exacte du potentiel et la fonction d’onde associées à chaque état lié. C’est pour cela nous avons porté notre choix sur le calcul self consistant qui est le plus précis et qui peut être appliqué dans toutes les circonstances.

Pour cette simulation, nous rajoutons des paramètres supplémentaires que l'on regroupe dans le tableau suivant :

Tableau III-2 : Paramètres pour la simulation d'un puits quantique.

| Paramètre | Valeur | Description |
|-----------|------------------------------|------------------------------|
| E_1 | 0.0185ev | Le premier niveau d'énergie |
| q | $1.6 \cdot 10^{-19}c$ | Charge d'électron |
| N_D | $5 \cdot 10^{23}at/m^3$ | Concentration AlGaAs |
| N_A | $10^{20}at/m^3$ | Concentration GaAs |
| N_i | $0.3364 \cdot 10^{16}at/m^3$ | Concentration intrinsèque |
| L | $160A^\circ$ | Position des murs électrique |

III.9.1 Equations Physiques et conditions aux limites

La structure étudiée consiste en une couche donneuse AlGaAs de type N et une couche tampon GaAs de type P. Pour cela, nous utilisons COMSOL multiphysics avec les approximations de masse effective et de Hartree sous les conditions de Dirichlet où la fonction d'onde d'enveloppe s'annule à l'interface [5-8].

Pour calculer la fonction d'onde et l'énergie potentielle pour un état lié, nous avons utilisé le module de physique PDE forme (quantique) et le module de l'équation de Poisson représentés par l'équation Eq.III-8. Le modèle résout pour une étude d'étape stationnaire avec des paramètres initiaux très précis, pour lesquels nous devons entrer des données physiques et des constantes appropriées.

$$\left. \begin{aligned}
 &(-c\nabla u - \alpha u + \gamma) + au + \beta \cdot \nabla u = d_a \lambda u \\
 &\nabla \cdot (-c\nabla u) = f
 \end{aligned} \right\} \tag{III-8}$$

Où :

f : Représente la densité des charges des électrons libres donnée par l'eq.III.9 suivante [6, 16]:

$$f = \begin{cases} qN_D - q \sum n(E^i) |u^i(z)|^2 & \dots \dots \dots \text{dans GaAsAl} \\ -qN_A - q \sum n(E^i) |u^i(z)|^2 & \dots \dots \dots \text{dans GaAs} \end{cases} \quad \text{(III-9)}$$

Avec :

q : représente la charge d'électron.

qN_D et $-q N_A$: représentent les charges fixes (N_D : dopage en donneurs, N_A : dopage en accepteurs)

$q \sum n(E^i) |u^i(z)|^2$: Représente les charges mobiles

Avec :

$n(E^i)$: représente la densité (au niveau de la sous bande i) des électrons obtenue par la distribution de Fermi Dirac, donnée par [6, 16]:

$$n(E^i) = \left(\frac{m_e k_B T}{\pi \hbar^2} \right) \log \left(1 + \exp \frac{E_F - E^i}{k_B T} \right) \quad \text{(III-10)}$$

E_F : Énergie du niveau de Fermi.

k_B : Constante de Boltzmann

T : Température absolue

i : Nombre d'état lié possible.

$$a = \frac{\hbar^2}{8\pi^2 m_e} \frac{l^2}{r^2} + u2 \quad \text{(III-11)}$$

III.9.2 Résultats et discussions

La figure III.15 représente le profil de puits potentiel à l'interface pour un état lié obtenu à partir de la résolution du système d'équation Schrödinger –Poisson. Il est à noter qu'on n'utilise à priori aucune forme donnée du potentiel et/ou de fonction d'onde, cette méthode est dite calcul auto-cohérent (self consistent).

On constate bien que le puits de potentiel se situe à quelques dizaines d'Angstrom de l'interface voir figure III-15. Cela est dû à la juxtaposition d'un matériau à grand gap et un matériau à petit gap qui fait l'existence d'un puits quantique d'une simple hétérojonction, qui en effet résulte de façon directe de la discontinuité de la bande de conduction au niveau de l'interface, et dont les caractéristiques en dépendent.

Afin de valider nos résultats nous procédons à une comparaison aux résultats obtenus ultérieurement dans la littérature, dont on représente sur la figure III-16. Cette figure est la superposition de divers modèles, où est mis en évidence la différence et l'influence des différents modèles physiques numériques sur l'allure du puits de potentiel. Ces modèles proposés par les auteurs [6,16,17] sont basés sur le calcul approximatif d'un puits de potentiel triangulaire. Cependant, dans notre modèle on n'utilise aucune forme d'approximation ni à l'énergie potentielle et / ou à la fonction d'onde.

Ce résultat est en accord avec celui établi dans la littérature [6,16,17] ce qui confirme la validité de notre modèle.

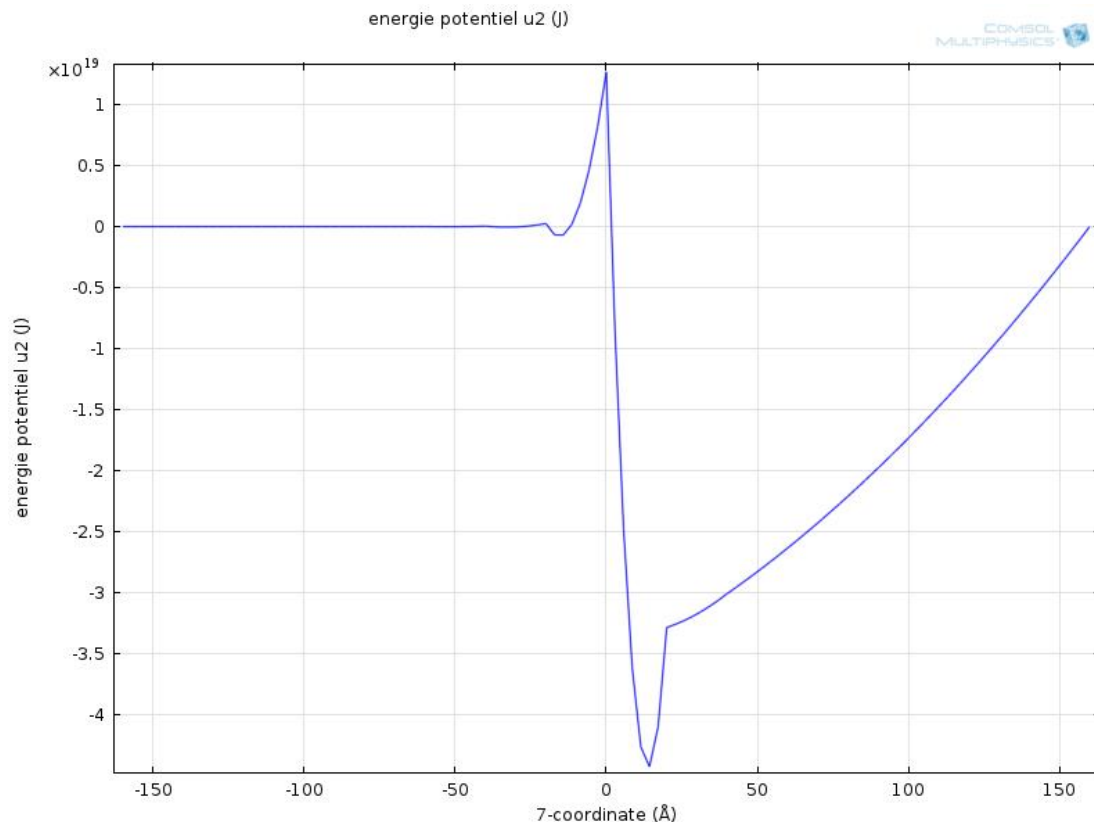


Figure III-15 : l'énergie potentielle à l'interface de l'hétérojonction AlGaAs/GaAs pour un état lié E_1 .

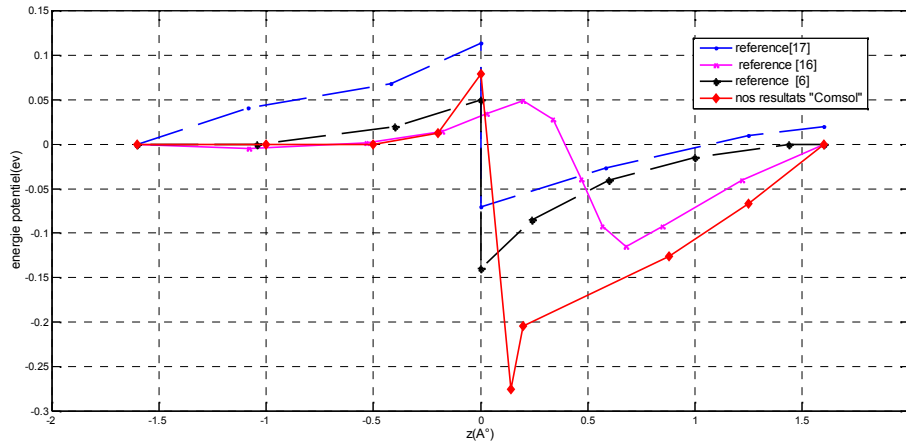


Figure III.16 : Variation de l'énergie potentielle à l'interface de l'hétérojonction AlGaAs/GaAs pour diverses references [6, 16, 17]

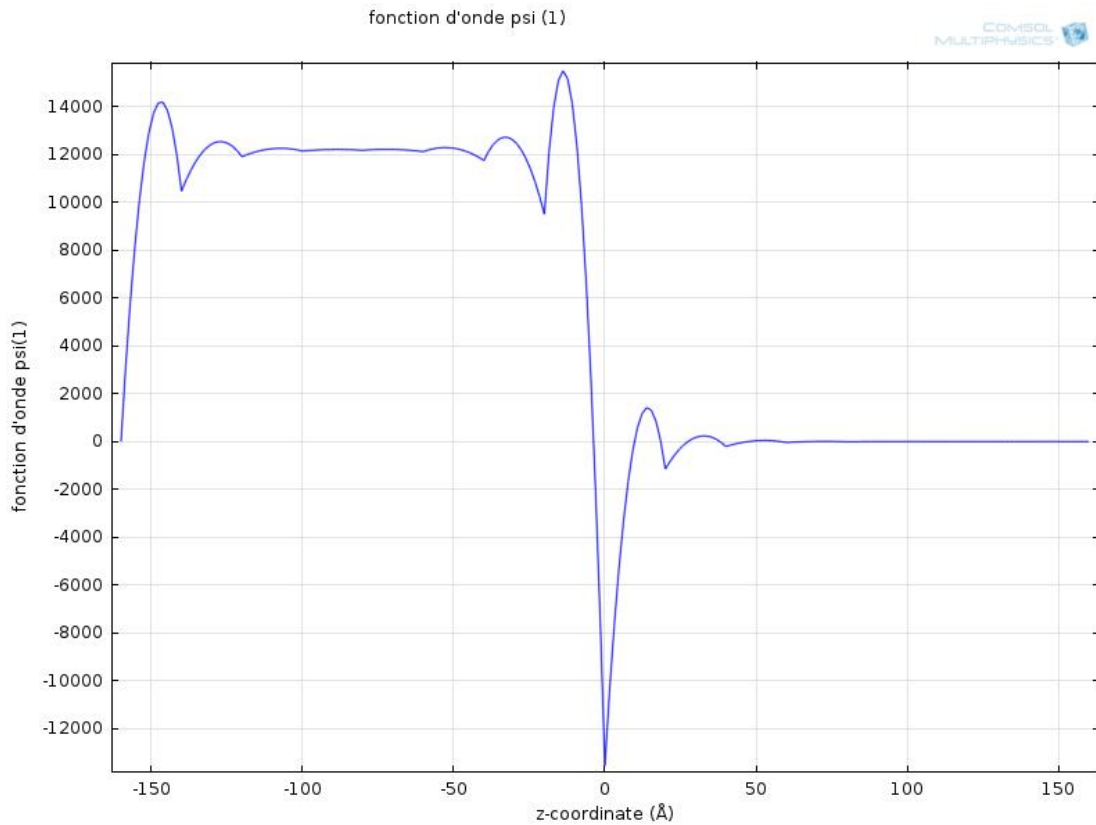


Figure III-17 : Représentation de la Fonction d'onde pour E_1 pour un puits quantique.

La fonction d'onde associée à un état lié est illustrée sur la figure III-17, où nous avons observé que la grande probabilité de trouver des électrons se situe également à une dizaine d'Å°. Ce qui implique une pénétration de la fonction d'onde dans le puits de potentiel.

III.10 Conclusion

Le but de ce chapitre a été d'étudier les phénomènes quantiques caractérisant l'hétérojonction nanométrique AlGaAs/GaAs décrits, par le système d'équation couplé Poisson - Schrödinger.

Pour cela, nous avons établi un modèle, sous environnement COMSOL Multiphysics, qui peut être appliqué à toute autre hétérojonction quantique avec couche d'inversion ou d'accumulation.

Les résultats obtenus de la résolution de l'équation de Schrödinger, pour un puits carré fini, sont les valeurs propres des états liés. Une étude comparative nous a permis de distinguer entre le confinement 1D et 3D où cette étude montre que les six états liés pour le confinement 3D sont des modes transverses, alors qu'ils ne sont qu'une suite de niveaux d'énergie discrets pour le confinement 1D.

Par la suite nous avons effectué la résolution auto cohérente d'un système d'équations de Schrödinger-Poisson globalement non linéaire en utilisant les valeurs propres des états liés déterminés auparavant afin de définir l'énergie potentiel et la fonction d'onde pour un état lié à l'interface d'une hétérojonction GaAsAl / GaAs. La comparaison des résultats obtenus nous a permis de valider nos modèles établis.

Bibliographie

1. Ahsan, M., A. Hayat, and A. Nath, Time-independent schrodinger-poisson coupled simulation based study of InP and InAlAs quantum well field effect transistors. 2016, BRAC University.
2. M.Benabbas, B.E.M., M.Baazouzi, modélisation d'heterostructure pseudomorphique en (GaAlAs/GaInAs/GaAs revue des sciences technologies ET developpement, ANDRU n°4, pp 114-123, 2007.
3. Bouneb, I., Contribution à la modélisation d'une structure nanométrique. 2009.
4. Pryor, R.W., Multiphysics modeling using COMSOL: a first principles approach. 2009: Jones & Bartlett Publishers.
5. Melnik, R. and M. Willatzen, Bandstructures of conical quantum dots with wetting layers, in Nanotechnology. 2003. p. 1.
6. Cappy, A., Propriétés physiques et performances potentielles des composants submicroniques à effet de champ: structures conventionnelles et à gaz d'électrons bidimensionnel. 1986, Lille 1.
7. Bastard, G., Wave mechanics applied to semiconductor heterostructures (Paris: Les Éditions de Physique). 1988.
8. Rosencher, E. and B. Vinter, Optoelectronics. 2002: Cambridge University Press.
9. Zienkiewicz, O.C., et al., The finite element method. Vol. 3. 1977: McGraw-hill London.
10. Loehr, J.P., Physics of strained quantum well lasers. 2013: Springer Science & Business Media.
11. Huo, J. and X. Ma, Quantum Particle Swarm Optimization Algorithm Based on Dynamic Adaptive Search Strategy. TELKOMNIKA (Telecommunication Computing Electronics and Control), 2014. **13**(1): p. 321-330.
12. Marreaud, N., Caractérisation de puits quantiques GaInAs/InP par spectrométrie magnéto-optique. 1997, Metz.
13. Balaguru, R.J.B. and B. Jeyaprkash, Quantum Wells, Quantum Wires, Quantum Dots, Quantum Limit of Conductance, Quantum Capacitance & Quantum HALL Effect.

14. Baira, M., Propriétés optiques et modélisation des structures à base de boîtes quantiques pour l'émission à 1.3 μm . 2009, Institut des Nanotechnologies de Lyon.
15. Nguyên, D.P., Confinements non-usuels dans les boîtes quantiques semiconductrices. 2005, Université Pierre et Marie Curie-Paris VI.
16. Bouneb, I. and M. Marir-Benabbas. Modelisation of accumulation barrier of nanostructure AlGaAs/GaAs. in Proceedings of the 2nd WSEAS international conference on Nanotechnology. 2010. World Scientific and Engineering Academy and Society (WSEAS).
17. S.E.Benchaiba, B.E.M., M.Marir, a new variational method for Schrodinger's equations,application to a quantum heterostructure, in 5th international conference on advanced semiconductor devices and microsystems (ASOMAM2004)Slominice Castle, Slavarica,. october 17-21,2004.

Chapitre IV

Résultats & discussions

IV.1 Introduction

Dans des travaux antérieurs effectués sous environnement Matlab[1-4], nous avons déterminé la variation du niveau de Fermi en fonction de la densité surfacique N_s . Où, nous avons utilisé une nouvelle expression de l'offset E_c en fonction du dopage effectif N_{Def} , ce qui nous a permis de modéliser le contrôle charge de l'hétéro-structure AlGaAs/GaAs, ainsi que l'influence de quelques paramètres technologiques. Les résultats obtenus de la résolution du système d'équation Poisson Schrödinger sont : l'énergie potentielle, la fonction d'onde, variation de la densité surfacique N_s et de l'offset E_c en fonction du dopage effectif N_{Def} .

Les propriétés des structures GaAsAl / GaAs et AlGaN/GaN modélisées sont :

- Puits quantique a un état lié sans espaceur pour GaAsAl / GaAs.
- Anisotype où les deux couches sont dopées de type différent (GaAs dopé P, AlGaAs dopé N).
- Abrupte: la composition des matériaux et le dopage changent soudainement au moment du passage du plan d'interface.
- Alignement de bande d'énergie de type I.
- Valeur très précise du taux d'aluminium [6].

IV.2 Résultats et discussions

Dans le but de contrôler et d'optimiser la concentration surfacique par un contact de grille de type Schottky ($N_s = f(V_G)$), la détermination de l'offset E_c en fonction du dopage effectif et le niveau de fermi en fonction de la densité surfacique est inévitable.

L'offset E_c a été déterminé en fonction du dopage effectif en se basant sur le modèle de résolution du système d'équation Schrödinger-Poisson à l'équilibre[6]

IV.2.1 Variation du niveau de Fermi $E_F = f(N_{\text{Def}})$

Pour l'obtention de la variation du niveau de Fermi en fonction de la densité surfacique on a déterminé d'abord la variation du niveau de Fermi en fonction du dopage effectif à partir des résultats expérimentaux établis par Temple-Boyer [7] qui exprime le dopage effectif en fonction du taux d'Aluminium (x) et l'étude théorique qui exprime le dopage effectif en fonction de E_F par l'équation II-31[7]:

$$N_{Def} = \frac{N_D}{1 + \frac{1 + \frac{1}{2} \exp\left(\frac{E_{dl} - E_F}{KT}\right)}{1 + \exp\left(\frac{E_{dx} - E_F}{KT}\right)}} \quad (II.31)$$

Avec :

$$\begin{cases} E_{cg} = 0 \\ E_{dl} = 0.006 \\ E_{dx} = 0.17 - 0.58x - 0.31x^2 \\ E_{cl} = 0.31 - 0.58x - 0.31x^2 \end{cases}$$

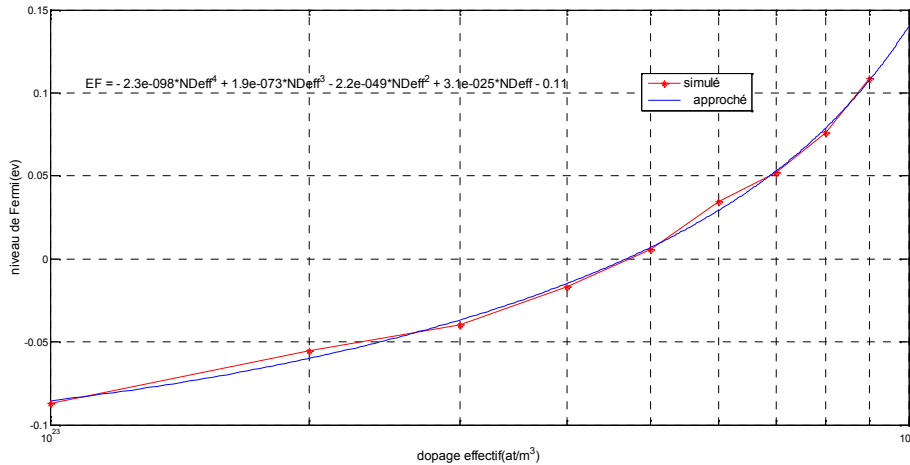


Figure IV-1 : Variation du niveau de Fermi E_F en fonction du dopage effectif N_{Deff}

La Figure IV-1 montre que l’augmentation du dopage effectif provoque une augmentation du niveau de Fermi.

Pour avoir une relation analytique de la variation du niveau de Fermi en fonction du dopage effectif nous avons effectué une interpolation polynomiale d’ordre 4, qui est l’approximation optimale avec un taux de résidu de $8,8 \cdot 10^{-3}$.

IV.2.2 Variation du niveau de Fermi $E_F = f(N_s)$

En 1982, Delagebeaudeuf [8] a tout d’abord suggéré que la modélisation de la densité de charge des gaz d’électrons à l’interface, la résolution simultanée de l’équation électrostatique dans le semi-conducteur large bande interdite et de l’équation de Schrödinger pour le puits quantique à l’interface sont nécessaires. Grâce

à une approximation de puits triangulaire, et en supposant deux sous-bandes, dans le GaAs, Delagebeaudeuf a montré que la variation de la densité de porteurs N_s varie exponentiellement en fonction du niveau de Fermi. Le but étant l'obtention d'une solution analytique, en négligeant la variation du niveau de Fermi en fonction de la densité dans le puits quantique. Ce qui limite le modèle en termes de précision. Plusieurs approches tenant compte de la variation du niveau de Fermi en fonction de la densité ont été proposées dans la littérature[9].

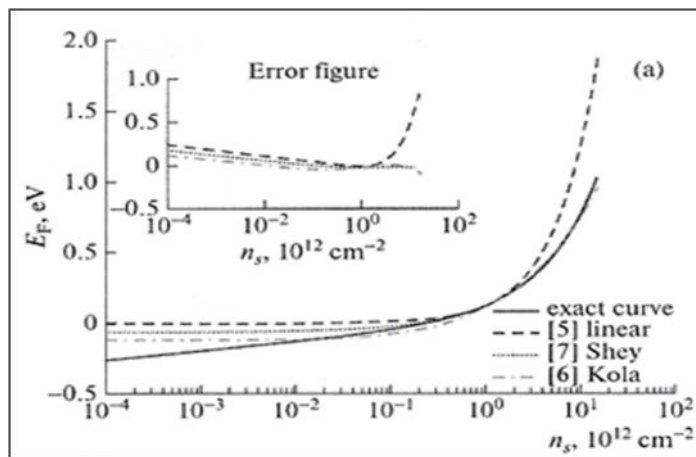


Figure IV-2 : Variation du niveau de Fermi E_F en fonction de la densité surfacique[9]

En 1982, Drummond et al ont proposé une Variation linéaire du niveau de Fermi E_F en fonction de la densité surfacique N_s [10]. Tandis qu'en 1988, Kola [11] et Shey [12] ont fait une approximation non linéaire de cette variation comme le montre la figure IV-2.

En plus, l'effet de quantification pour ces modèles sus cités (avec des puits de potentiel à deux états liés assez large), n'est point important.

Dans notre cas pour la détermination de cette relation ($E_F=f(N_s)$), nous prenons en compte tous les paramètres d'influence pour un état lié, qui constitue notre contribution. Aussi nous déterminons la densité surfacique N_s et le niveau de Fermi en fonction du dopage effectif N_{Deff} tels que : ($N_s=f(N_{\text{Deff}})$, $E_F=f(N_{\text{Deff}})$).

Il est à noter, que l'obtention de N_s en fonction du dopage effectif est issu de la résolution du système d'équation Poisson-Schrödinger, pour un état lié où on a fait une résolution générale sans aucune approximation ni pour le potentiel et /ou la fonction d'onde [1]. Et que la prise en compte du dopage effectif est essentiellement

due au taux d'aluminium utilisé dans la structure. Le résultat obtenu est illustré sur la figure IV-3. Cette figure montre que l'allure de la variation du niveau de Fermi en fonction de la densité surfacique est similaire à celle obtenue dans la littérature [10, 11, 12], cependant leurs valeurs sont différentes. Cette différence pourrait s'expliquer par l'utilisation du dopage effectif et de la densité surfacique issue de la résolution auto-cohérente du système Poisson-Schrödinger pour un seul état lié.

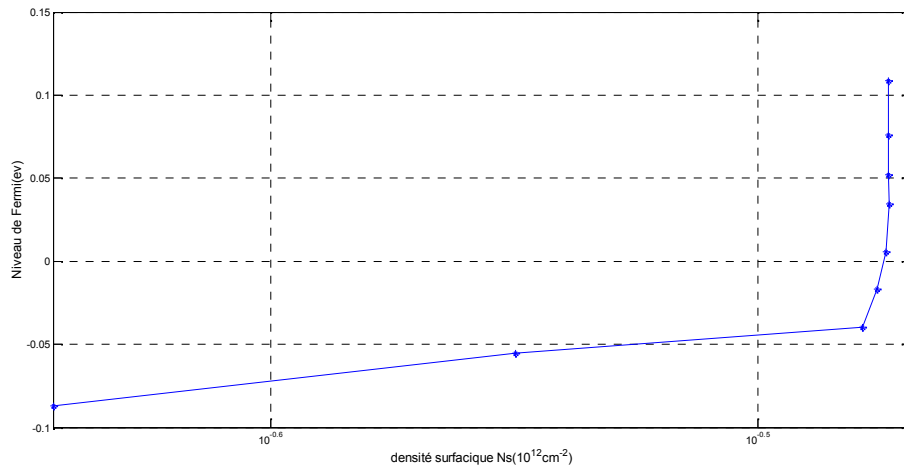


Figure IV-3 : Variation du niveau de Fermi E_F en fonction de la densité surfacique

IV.2.3 Variation de N_S en fonction de la tension de la grille V_G

La figure IV-4 représente la variation de N_S en fonction de V_G pour l'hétérojonction AlGaAs/GaAs, on voit bien que la densité surfacique N_S est proportionnelle à la tension de grille V_G , montrant que la densité de charges N_S est bien contrôlée par la tension de grille, ce qui est conforme aux résultats obtenus dans la littérature. La pente de cette courbe correspond à la capacité de la structure liée directement aux paramètres technologiques et géométriques (dd , d , x et le type de matériaux). La figure IV-4 montre aussi que la commande de charge est linéaire ce qui correspond à une capacité de grille constante.

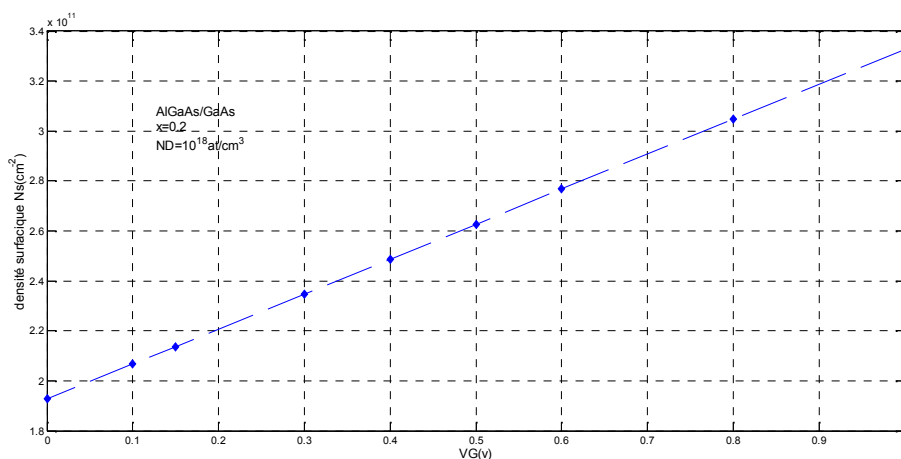


Figure IV-4 : Variation de N_s en fonction V_G

La comparaison des résultats obtenus à ceux établis dans la littérature [3] représentés sur la figure (IV-4.bis) montre qu'il a conformité entre eux, ce qui permet la validation de notre modèle établi.

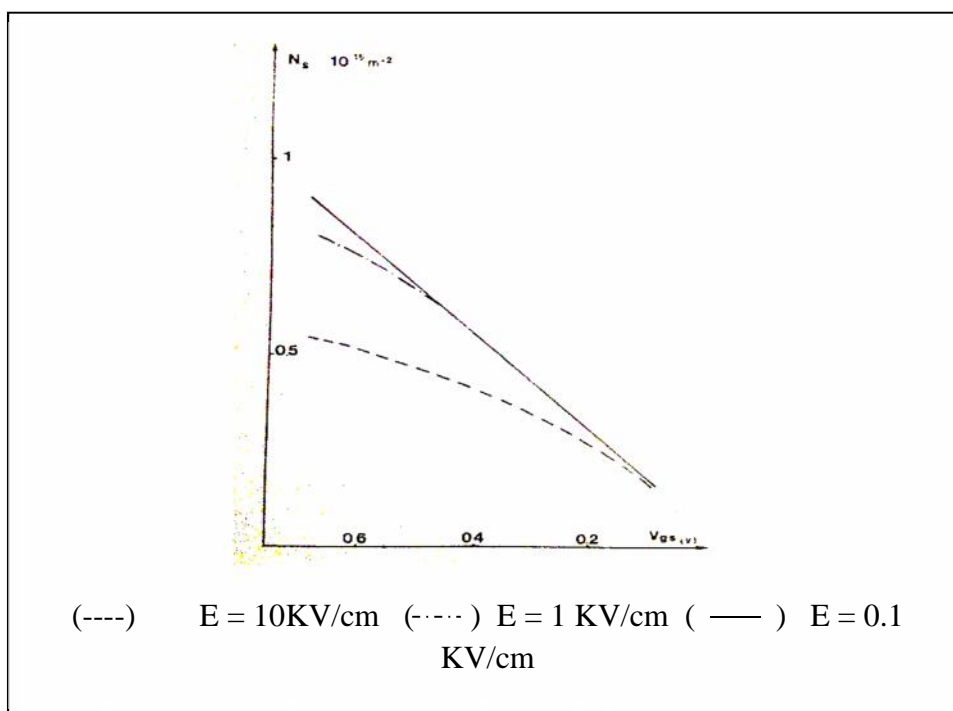


Figure IV-4.bis : Variation de N_s en fonction V_G dans le TEGFET AlGaAs/GaAs[3]

La figure IV-5 représente la variation de la densité de porteurs de charge en fonction de la polarisation de grille pour l'hétérojonction AlGaN/GaN, de nos résultats et ceux de la littérature. On constate bien, que nous avons une commande de charge linéaire. Ce résultat est en accord avec celui de la littérature [9]. Cependant, nous notons une valeur de la pente de $(1.44.10^{12}\text{cm}^{-2}/\text{v})$ pour notre résultat et une pente de $1.34.10^{12}\text{cm}^{-2}/\text{v}$ pour la référence [9] avec une tension de pincement différente. Cette différence peut-être due à l'introduction de nouvelles expressions de la densité surfacique N_s , issues de la résolution auto-cohérente du système d'équation Poisson –Schrödinger. Ces expressions tiennent en compte de la notion du dopage effectif, (qui constitue notre contribution principale).

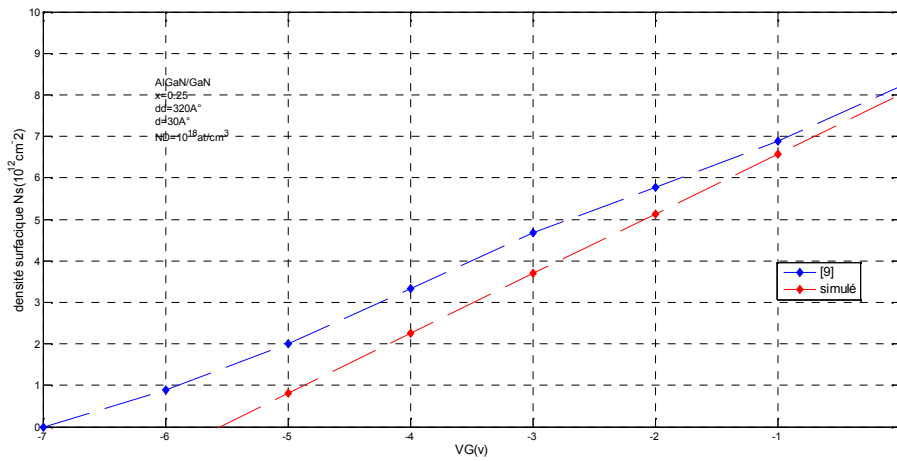


Figure IV-5 : Variation de N_s vs. $V_G(\text{v})$

Des courbes des figure IV.5 et IV.4 on releve les valeurs suivantes :

Tableau IV-1 : N_s pour $dd=320\text{A}^\circ, x=0.25$

| $V_G(\text{v})$ | -7 | -6 | -5 | -4 | -3 | -2 | -1 | 0 |
|---|----|--------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|
| N_s GaN ($10^{12}/\text{cm}^2$) | 0 | 1.2077 | 2.6497 | 4.0917 | 5.5337 | 6.9757 | 8.4177 | 9.8597 |
| N_s GaAs ($10^{11}/\text{cm}^2$) | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0.5271 |

La comparaison entre la densité surfacique commandé par la tension de grille schottky de l'hétérojoncton AlGaN/GaN et AlGas/GaAs (figures IV.5 et IV.4) montre que la valeur de la densité surfacique de l'heterojonction AlGaN/GaN est

superieure à celle de AlGaAs/GaAs . Cette différence est due à l'effet de polarisation spontanée et pizoélectrique qui caracterise le materiau GaN.

IV.2.4 Influence du taux d'Aluminium sur la variation de N_s en fonction de V_G pour l'hétérojonction AlGaN/GaN et AlGas/GaAs

La figure IV-6 représente la variation de la densité de surface N_s en fonction de la tension de grille pour diverses valeur du taux d'aluminium x . on constate bien l'effet de x , où sa diminution provoque une augmentation de N_s et cela est en accord avec ce qui est rapporté dans la théorie [7]. En effet nous avons montré que le taux d'aluminium x est inversement proportionnel au dopage effectif N_{Deff} , qui lui, est proportionnel à N_s .

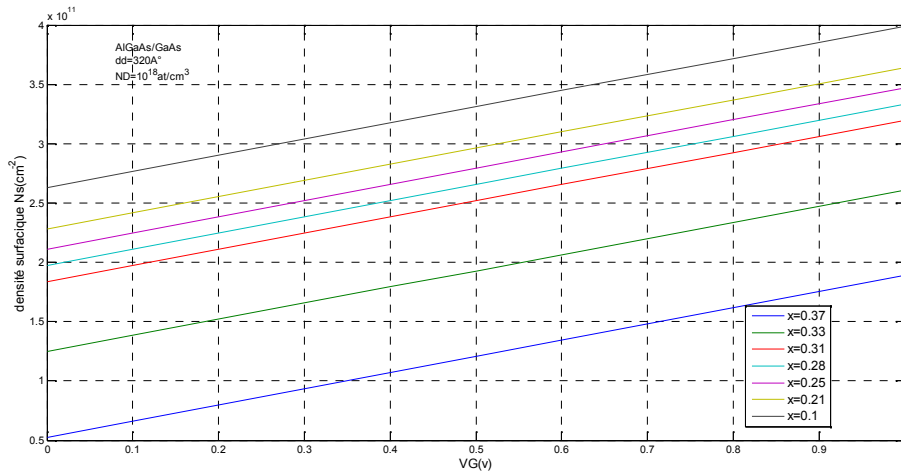


Figure IV-6 : Influence du taux d'Aluminium sur la variation de N_s en fonction de V_G pour AlGaAs/GaAs

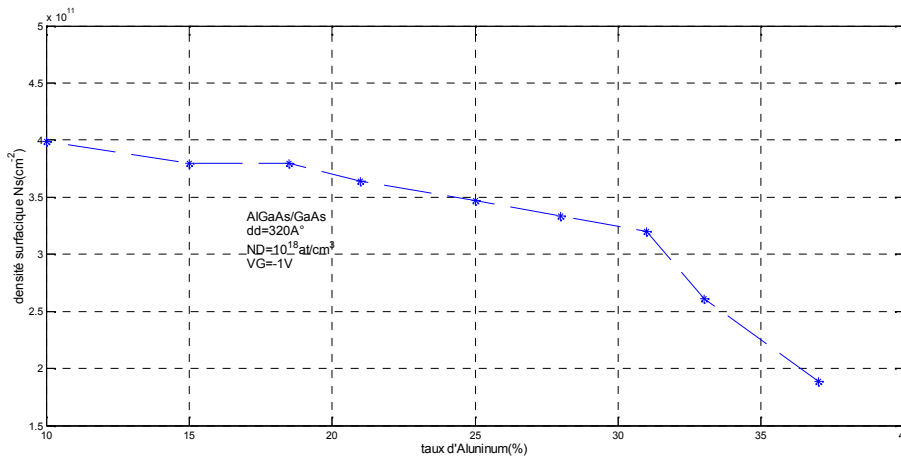


Figure IV-6.bis : la variation de N_s en fonction de x pour $V_G = -1$ V.

Pour mettre en évidence l'influence du taux d'aluminium x sur la variation de $N_s=f(V_G)$, nous représentons sur la figure IV-6.bis la variation de N_s en fonction de x pour une tension arbitraire $V_G = -1$ V.

A partir de cette courbe nous constatons que lorsque le taux d'Aluminium augmente légèrement cela provoque une diminution de la densité surfacique et cela est dû à l'influence du taux d'aluminium sur le dopage effectif où son augmentation du provoque une diminution du dopage effectif ainsi l'augmentation de la position du niveau donneur E_D .

Dans le cas de l'hétérojonction AlGaIn/GaN, nous représentons cette variation sur la figure IV-7. Cette dernière montre bien que l'effet de x est important. Pour le mettre en évidence, nous traçons la variation de N_s en fonction de x pour une tension arbitraire de $V_G=-1$ V. La courbe de la figure IV-7.bis montre bien qu'il y a une valeur du taux d'Aluminium x optimisant N_s égale à 0.31 au-delà de cette valeur on observe une forte diminution de la densité surfacique. Cela pourrait s'expliquer par l'influence du taux d'aluminium qui ne dépend pas que de la polarisation totale de l'hétérojonction AlGaIn/GaN mais aussi du dopage utilisé, de l'offset E_C , de la position du niveau donneur et des propriétés cristallines du matériau. Ces résultats sont en accord avec ceux obtenus dans la littérature[13] que l'on a représenté en figure (IV-8)(pour $x<0.31$).

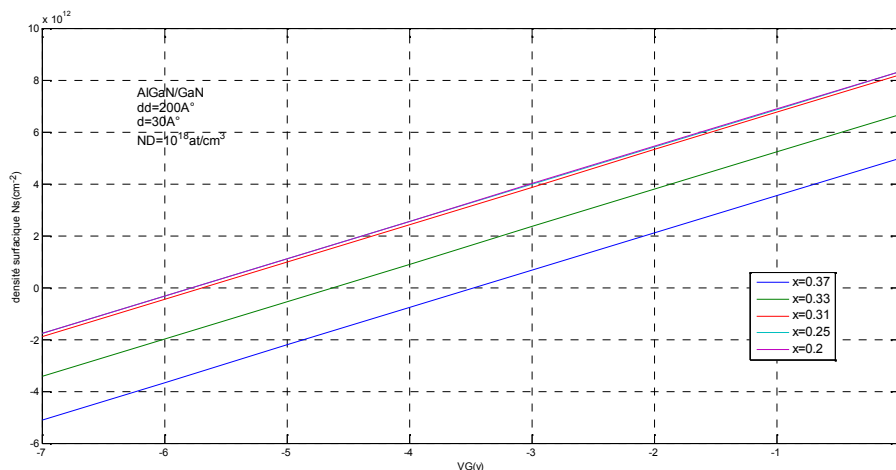


Figure IV-7 : Influence du taux x sur la variation de N_s en fonction de V_G .

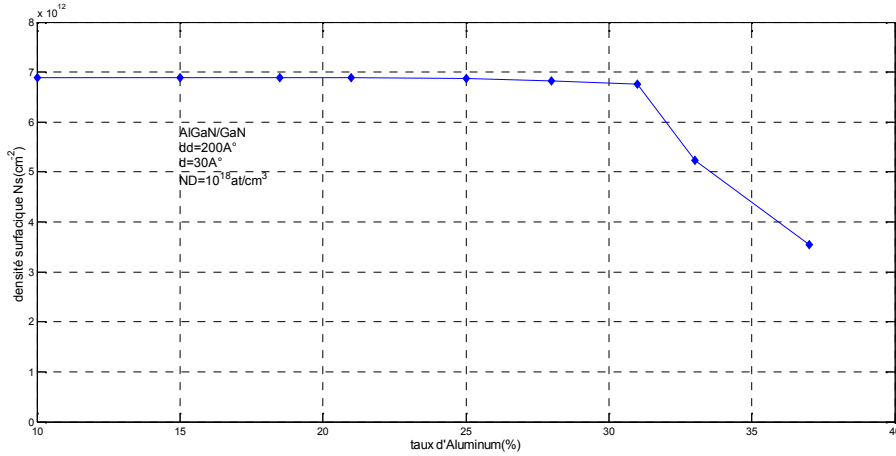


Figure IV-7.bis : La variation de N_s en fonction de x pour $V_G = -1V$

En réalité, au-delà de $x = 0.38$, le paramètre de maille a du GaN décroît sensiblement et entraîne une contrainte du GaN en compression[14, 15] ce qui se traduit par une décroissance systématique de la polarisation piézoélectrique dans la couche AlGaIn, ainsi par une diminution de la barrière E_C , et à partir de $x = 0,5$ la qualité cristalline se dégrade et une relaxation partielle de la couche d'AlGaIn apparaît[15]. Le taux d'aluminium le plus utilisé pour l'hétérojonction AlGaIn/GaN dans la littérature est d'environ 30% [15]

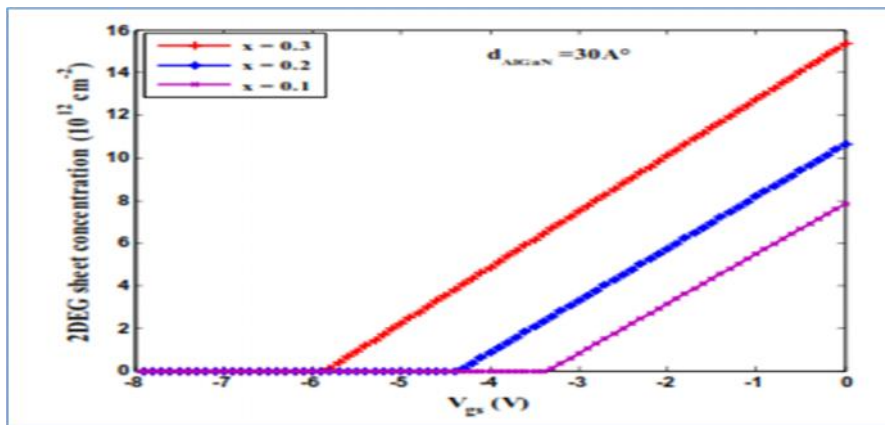


Figure IV.8 : Influence du taux d'Aluminium x sur la variation de N_s en fonction de V_G [13]

Le taux d'Aluminium est un paramètre qui détermine la discontinuité de la bande de conduction E_C et la position du niveau donneur dans l'alliage E_D . Une valeur élevée de x est souhaitable pour accroître la discontinuité E_C mais cet accroissement devrait être assez faible pour $x < x_{max}$, (avec $x_{max} = 0,31$). Par contre

une valeur élevée de x augmente l'écart E_D entre la position du niveau donneur et le bas de la bande de conduction[5]. Ce qui donne lieu à divers effets secondaires tels que la neutralisation d'un pourcentage non négligeable de donneurs, dont l'influence sur la loi de commande est importante[5]. Il semble que pour cette valeur maximale du taux x , le niveau donneur est peu profond ce qui assure une densité d'électrons libres voisine de N_D , ainsi une commande optimale du gaz d'électrons par grille.

Par ailleurs, cette élévation du taux d'aluminium se présente également sur la tension de pincement du transistor HEMT. Cet effet consiste à déplacer cette dernière vers les valeurs les plus négatives.

IV.2.5 Influence de l'épaisseur dd sur la variation de $N_s = f(V_G)$

Afin de déterminer l'influence de l'épaisseur de la couche donneuse dd sur la variation de N_s du gaz bidimensionnel 2-DEG en fonction de V_G , nous avons relevés ces variations pour diverses épaisseurs de la couche donneuse AlGaAs dd . Les résultats obtenus sont représentés sur la figure IV-9.

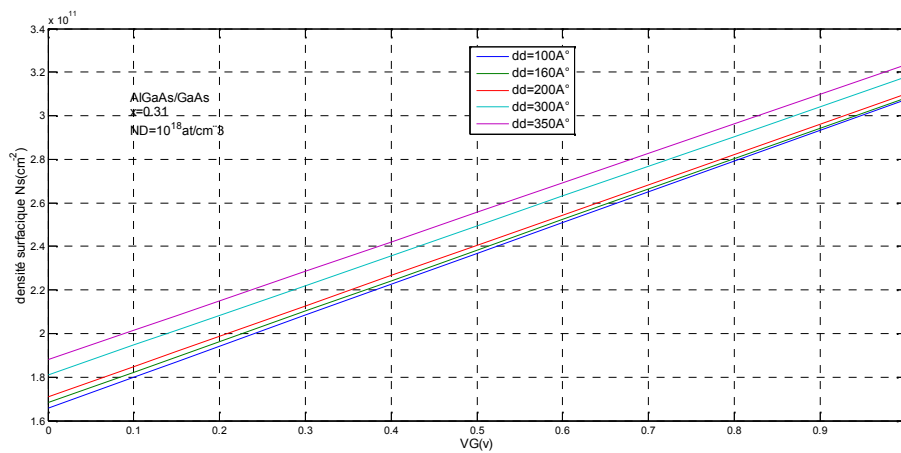


Figure IV-9 : Influence de l'épaisseur « dd » sur la densité surfacique N_s

On constate que l'augmentation de l'épaisseur de la couche donneuse dd a provoqué une augmentation de la concentration du gaz bidimensionnel 2-DEG : on n'a pas pris en compte que l'épaisseur de la couche donneuse détermine l'offset E_C , si dd augmente cela provoque une augmentation de E_C , qui provoque à son tour, une diminution de la densité surfacique contrôlée par un contact Schottky.

En plus le dopage et l'épaisseur de la couche donneuse sont des paramètres fondamentaux car ils déterminent la densité surfacique et la tension de pincement parce que l'utilisation de la densité d'impuretés de valeurs aussi élevées demande un contrôle précis de l'épaisseur de la couche sous la grille qui détermine la tension de pincement[5].

Compte tenu des difficultés de réaliser des couche AlGaAs très fortement dopées et de bonnes barrières Schottky sur des matériaux très dopés ainsi l'utilisation des dopage élevé provoque une valeur très importante du champ électrique au niveau de la jonction Schottky et donc les risques plus importants de claquage[5].

Une solution possible consiste à l'utilisation d'un dopage variable pour la couche AlGaAs[5] :

- La densité d'impuretés au voisinage de l'hétérojonction doit être élevée avec une faible épaisseur afin que la densité surfacique soit maximale.
- Le dopage au voisinage de la barrière Schottky doit être plus faible et de plus grand épaisseur afin d'améliorer la qualité du contact et de diminuer la valeur du champ électrique.

Pour voir l'influence du matériau utilisé, nous avons aussi, effectué la variation de N_s en fonction de V_G pour diverses valeurs de dd , pour l'hétéro jonction AlGaAs.

Les variations de N_s en fonction V_G pour plusieurs valeurs de dd sont reportées sur la figure IV-10. Cette figure montre que de l'augmentation de l'épaisseur de la couche dd engendre une diminution de la concentration de 2-DEG.

La comparaison des résultats obtenus à ceux établis dans la littérature[13] représentés sur la figure (IV-11) montre qu'il a conformité entre eux, ce qui permet la validation de notre modèle établi[13].

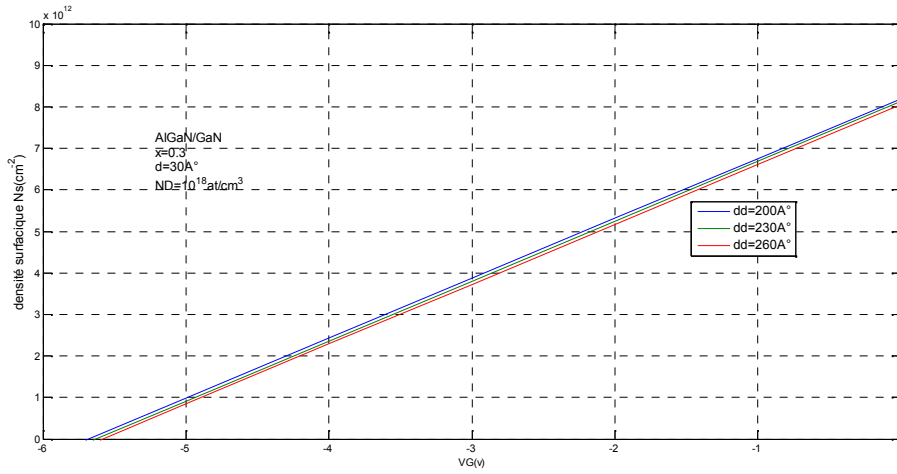


Figure IV.10 : Influence de l'épaisseur « dd » sur la variation de N_s en fonction de V_G

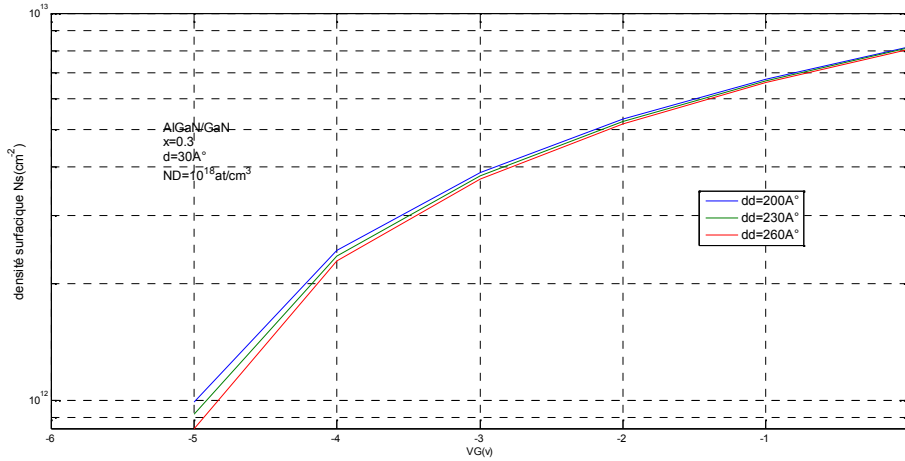


Figure IV-10 .bis : Influence de l'épaisseur « dd » sur la variation de N_s en fonction de V_G

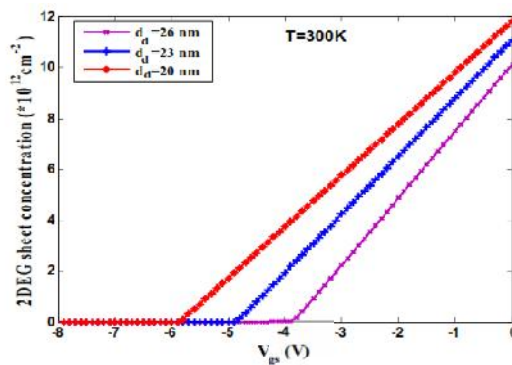


Figure IV-11 : Influence de l'épaisseur « d_d » sur la variation de N_s en fonction de V_{gs} pour l'heterojonction AlGaIn/GaN $d=30\text{\AA}$ [13]

IV.2.6 Influence de l'épaisseur d sur $N_s = f(V_G)$

Le rôle de cette couche non dopée au voisinage de l'interface d'une hétérojonction quantique est d'augmenter la séparation spatiale entre les électrons libres de gaz 2D et les impuretés ionisées de la couche donneuse. L'introduction de l'espaceur a donc pour effet de diminuer la valeur de la densité surfacique et par conséquent la mobilité du gaz d'électrons en réduisant les interactions avec les donneurs ionisés.

Néanmoins, l'introduction de cette couche supplémentaire a un effet secondaire pour l'hétérojonction AlGaAs/GaAs, à savoir la réduction de la densité surfacique d'électrons accumulés. Concernant la largeur optimum de l'espaceur, LEE et al [5] ont montré que la mobilité n'augmentait plus à partir d'une largeur égale à 40 \AA , cette valeur peut donc être considérée comme une borne supérieure [5].

Pour évaluer l'influence de l'épaisseur de l'espaceur d sur la variation de la densité 2-DEG en fonction de la tension de grille V_G pour l'hétérojonction AlGaIn/GaN, nous avons relevé cette variation pour plusieurs valeurs de d . Les résultats obtenus sont représentés sur la figure IV-12. De cette figure on peut constater une diminution de la densité surfacique lors de l'augmentation de l'épaisseur de l'espaceur. Cette légère diminution est due à l'influence de l'effet de polarisation totale de l'hétérojonction AlGaIn/GaN.

La comparaison des résultats obtenus à ceux établis dans la littérature [5] représentés sur la figure (IV-13) montre qu'il y a conformité entre eux, ce qui permet la validation de notre modèle établi.

La comparaison des résultats obtenus à ceux établis dans la littérature [5] représentés sur la figure (IV-13) montre qu'il y a conformité entre eux, ce qui permet la validation de notre modèle établi.

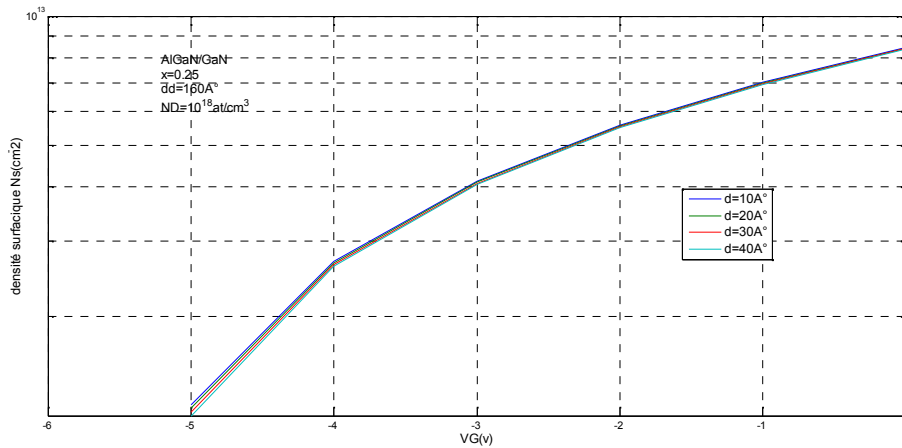
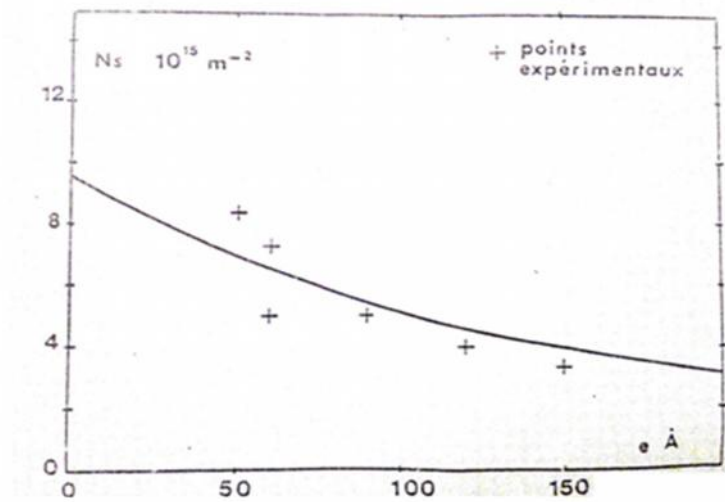


Figure IV.12 : Influence des epaisseur d sur la variation de N_s en fonction de V_G pour $dd=160\text{\AA}$.



FigureIV.13 : Evolution de la densité surfacique avec la largeur du espaceur[5]

IV.3 Conclusion

Dans ce chapitre nous nous somme intéressé au contrôle de la densité surfacique par grille Schottky pour un transistor HEMT. Pour réaliser ce contrôle, nous avons relevés les variations de N_s en fonction de V_G , en se basant principalement sur les deux points suivants:

- Une nouvelle expression linéaire de variation de niveau de Fermi avec densité de gaz d'électrons bidimensionnelle, en outre elle est basée principalement sur la notion de dopage effectif.
- Une nouvelle expression de E_C .

Ce qui nous a permis, en premier lieu, de modéliser le contrôle charge de l'hétéro structure AlGaAs/GaAs. Et en second lieu, de déterminer l'effet de la polarisation spontanée et piézoélectrique sur la densité surfacique dans le canal d'un transistor à haute mobilité HEMT, à base d'hétéro structure AlGaN/GaN.

L'objectif visé était de faire une étude comparative de deux structures nanométriques à hétérojonction AlGaAs/GaAs et AlGaN/GaN ainsi l'influence des paramètres physiques et géométriques.

Les résultats obtenus concordent avec ceux de la littérature ce qui valide nos modèles établis.

Il est à noter que notre contribution peut être appliquée à toute hétéro-structure à couche d'inversion ou d'accumulation

Bibliographie

1. Bouneb, I. and M. Marir-Benabbas. Modelisation of accumulation barrier of nanostructure AlGaAs/GaAs. in Proceedings of the 2nd WSEAS international conference on Nanotechnology. 2010. World Scientific and Engineering Academy and Society (WSEAS).
2. I. Bouneb, M.B.M., N. Raveu, H.Baudrand, Influence of different technological parameters on the accumulation barrier of nanostructure AlGaAs/GaAs. International Review of PHYSICS 2011. **Vol. 5** (N.2).
3. Cappy, A., et al., Etude théorique et expérimentale du transistor à effet de champ à hétérojonction. Revue de physique appliquée, 1983. **18**(11): p. 719-726.
4. Godts, P., et al., Méthode générale de modélisation du transistor à effet de champ à hétérojonction. Revue de physique appliquée, 1989. **24**(2): p. 151-170.
5. Cappy, A., Propriétés physiques et performances potentielles des composants submicroniques à effet de champ: structures conventionnelles et à gaz d'électrons bidimensionnel. 1986, Lille 1.
6. Bouneb, I., Contribution à la modélisation d'une structure nanométrique. 2009.
7. TEMPLE-Boyer, P., Elaboration d'un modèle Pseudo - Bidimensionnel d'un transistor pseudomorphique GaAlAs/GaInAs/GaAs. laboratoire d'électronique Philips, Juin 1990.
8. Delagebeaudeuf, D., et al., Two-dimensional electron gas MESFET structure. Electronics Letters, 1980. **16**(17): p. 667-668.
9. Pu, J., J. Sun, and D. Zhang, An accurate polynomial-based analytical charge control model for AlGaN/GaN HEMT. Semiconductors, 2011. **45**(9): p. 1205.
10. T.J. Drummond, H.M., K. Lee, M. Shur., IEEE Electron Dev. Lett., . 1982. **EDL-3**,(338).
11. S. Kola, J.M.G., G.N. Maracas. , Electron. Dev. Lett., , 1988. **9**(136).
12. A.J. Shey, W.H.K., Electron. Dev. Lett., , 1988. **9**(624).
13. Charfeddine, M., et al., 2-D theoretical model for current-voltage characteristics in AlGaN/GaN HEMT's. Journal of Modern Physics, 2012. **3**(08): p. 881.

-
14. Nguyen, T.D.H., Réalisation et caractérisation de HEMTs AlGa_N/Ga_N sur silicium pour applications à haute tension. 2013, Paris 11.
 15. Ambacher, O., et al., Two-dimensional electron gases induced by spontaneous and piezoelectric polarization charges in N- and Ga-face AlGa_N/Ga_N heterostructures. *Journal of applied physics*, 1999. **85**(6): p. 3222-3233.
 16. Abdelaziz, F.Z., Caractérisation électrique des HEMTs à base de nitrure de gallium AlGa_N/Ga_N.

Conclusion générale

CONCLUSION GENERALE

L'objectif principal de ce travail était la modélisation physique numérique du transistor HEMT plus précisément l'hétérojonction quantique qui est la couche active de ce composant. Cette modélisation se divise en deux parties :

Dans une première partie nous avons établi un modèle, sous environnement COMSOL Multiphysics à pour but d'étudier le confinement et la quantification quantique de l'hétérojonction nanométrique cylindrique. Les résultats obtenus sont les valeurs propres des états liés, pour un puits carré fini. Une étude comparative nous a permis de distinguer entre le confinement 1D et 3D où cette étude montre que les six états liés pour le confinement 3D sont des modes transverses, alors qu'ils ne sont qu'une suite de niveaux d'énergie discrets pour le confinement 1D.

Par la suite nous avons effectué la résolution auto cohérente d'un système d'équations de Schrödinger-Poisson globalement non linéaire en utilisant les valeurs propres des états liés déterminés auparavant afin de définir l'énergie potentielle et la fonction d'onde pour un état lié à l'interface d'une hétérojonction GaAsAl / GaAs. La comparaison des résultats obtenus nous a permis de valider nos modèles établis.

Une deuxième partie consiste à contrôler la densité surfacique par grille Schottky pour un transistor HEMT. Pour réaliser ce contrôle, nous avons relevés les variations de N_s en fonction de V_G en se basant sur les deux points suivants :

- Une nouvelle expression linéaire de variation de niveau de Fermi avec densité de gaz d'électrons bidimensionnelle, en outre elle est basée principalement sur la notion de dopage effectif.
- Une nouvelle expression de ΔE_C .

Cette étude nous a permis d'étudier l'influence des paramètres technologique (matériau, le taux d'Aluminium, dopage effectif) et paramètres géométriques (l'épaisseur de la couche donneuse, épaisseur du espaceur) sur la densité surfacique contrôler par un contact Schottky.

Dans les perspectives il est à noter que notre contribution peut être appliquée à toute hétéro-structure à couche d'inversion ou d'accumulation ou on peut aussi introduire un offset E_C et une barrière de contact Schottky en fonction de l'épaisseur

de la couche donneuse pour le contrôle de la concentration surfacique par un contact Schottky .



Résumé

Ce travail est consacré à la simulation nanométrique d'un puits quantique en utilisant le logiciel COMSOL : dans une première étape nous avons calculé les états liés en régime valeur propre en 1D et 2D ; ce résultat est utilisé comme une donnée pour une deuxième étape qui est la résolution du système d'équations Poisson-Schrödinger où on a pu déterminer l'énergie potentielle et la fonction d'onde pour un état lié et avec une position des murs électriques bien déterminée.

On a utilisé le logiciel MATLAB pour la détermination de la variation du niveau de Fermi en fonction de la densité surfacique N_s . On a utilisé aussi une nouvelle expression de l'offset E_c en fonction du dopage effectif N_{Deff} ce qui nous a permis de modéliser le contrôle charge de l'hétéro-structure AlGaAs/GaAs, ainsi l'étude de l'effet de la polarisation spontanée et piézoélectrique sur la densité surfacique dans le canal d'un transistor à haute mobilité HEMT, à base d'hétéro-structure AlGaN/GaN, l'objectif visé était de faire une étude comparative de deux structures nanométriques à hétérojonction AlGaAs/GaAs et AlGaN/GaN.

Abstract

This work is dedicated to the nanometric modeling of a quantum well using the COMSOL software: in a first step we computed the bound states in eigenvalue regime in 1D and 2D; this result is used as a data for a second step which is the resolution of the Poisson-Schrodinger equation system where we have been able to determine the potential energy and the wave function for a bound state and with a position of the electric walls well determined.

The MATLAB software was used to determine the Fermi level variation as a function of the surface density n_s . we also used a new expression of the E_c offset as a function of the effective doping N_{Deff} , which allowed us to model the charge control of the AlGaAs / GaAs heterostructure, thus studying the effect of spontaneous polarization and piezoelectric on the surface density in the channel of a HEMT high mobility transistor, based on AlGaN / GaN heterostructure, the objective was to make a comparative study of two nanometric structures AlGaAs / GaAs and AlGaN / GaN heterojunction