

Applications

4.1 Introduction

Les chapitres précédents étaient dévolus à quelques concepts généraux sur la manière de traiter des systèmes électroniques bidimensionnels, nous allons maintenant nous intéresser dans ce chapitre à l'application de ces concepts pour l'investigation des hétérostructures présentant un gaz bidimensionnel des électrons sous plusieurs conditions. C'est ainsi qu'on a développé un code numérique réalisé sous l'environnement MATLAB, tous en vérifiant l'efficacité et la validité de ces concepts.

4.2 Première application : vérification du code

En premier lieu, nous essayons de valider le code numérique en comparant les résultats de notre code par celles du travail de Snowden [53].

4.2.1 Modèle utilisé

La structure à simuler d'un composant à quatre couches est représentée sur la figure 4.1. Les interfaces ont été prises à $i_1=30$ nm, $i_2=50$ nm, $i_3=70$ nm avec une épaisseur totale de 170 nm. La température est fixée à 300 K. La fraction molaire d'Aluminium est $x=0.3$ à travers les couches 1 et 3 et $x=0.0$ dans les couches 2 et 4. Le dopage est fixé à $N_d=1.5 \times 10^{18}$ cm⁻³ pour les couches 1 et 3, et $N_d=1 \times 10^{14}$ cm⁻³ pour les couches 2 et 4 avec une énergie d'ionisation $E_d=0.032$ eV mesurée du bas de la bande de conduction. La discontinuité énergétique ΔE_c , la masse effective m^* et la permittivité relative ϵ_r au niveaux de chaque couche sont fonction de fraction molaire d'Aluminium via les formules :

$$\Delta E_c = 0.65 \cdot \Delta E_g = 0.65 \cdot (1.55x + 0.37x^2) \quad [\text{eV}]$$

$$m = (0.067 + 0.083x) \cdot m_e \quad [\text{Kg}]$$

$$\epsilon_r = 13.18 - 3.12x$$

L'équation de Poisson est résolue le long de la direction perpendiculaire à la grille avec deux conditions aux limites sur le potentiel électrique V :

$$* \quad V = V_g - V_b \quad \text{sur la grille } y=0.$$

$$* \quad \frac{dV}{dy} = 0 \quad \text{sur la fin de la structure.}$$

Où V_g et le potentiel appliqué sur la grille et $V_b = 0.7$ eV choisi comme barrière de Schottky.

Dans notre code la densité des trous soit négligée, soit calculée par l'intégrale de fermi Dirac d'ordre $\frac{1}{2}$. Ici la densité des trous est négligée.

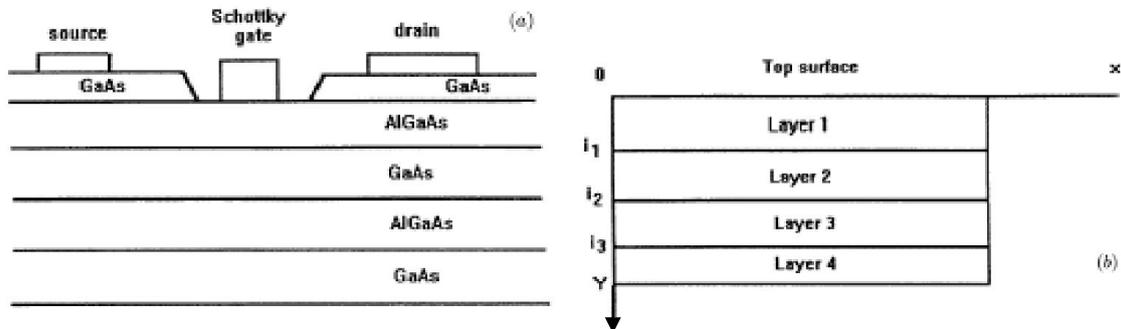


Figure 4-1 : a) Une section transversale d'un HEMT de cinq couches et b) les axes et les frontières de couche d'une structure à quatre couches sous la grille à barrière de Schottky.

4.2.2 Energie potentielle

Les figures 4-2 et 4-3 présentes la bande de conduction à l'équilibre thermodynamique obtenue par Snowden et notre code respectivement montrant les puits quantique et quelques énergies des sous bandes associées . Il est claire que les deux résultats sont très proches.

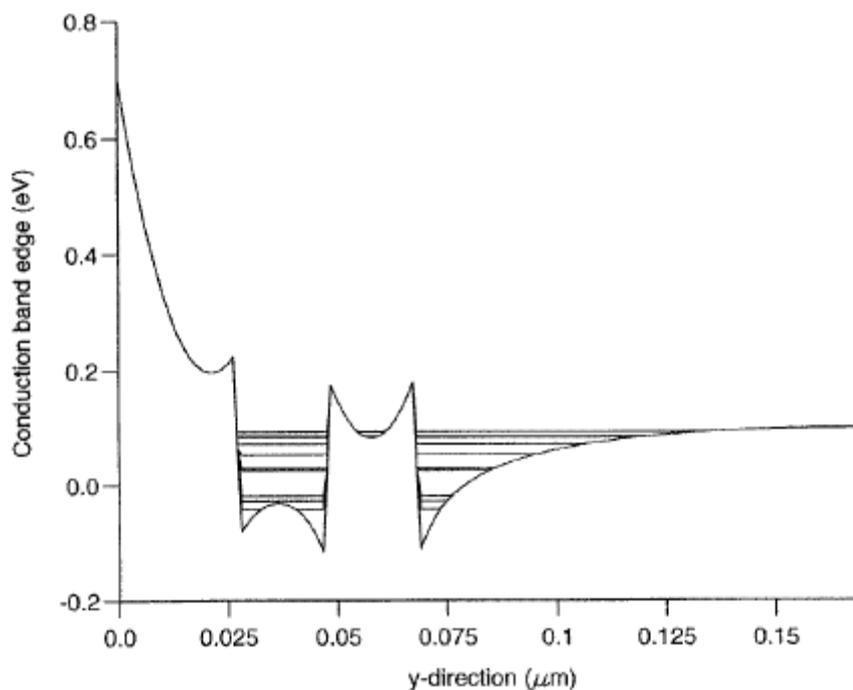


Figure 4-2 Un profil typique de bande de conduction pour un composant à quatre couches montrant les puits quantique et quelques niveaux énergie quantifiées obtenue par Snowden [53].

La figure suivante montre la bande de conduction et le niveau de Fermi (ce qui est constant et a la valeur de 0 eV) pour la structure indiquée ci-dessus. Cette bande est la solution auto-cohérente de l'équation de Schrödinger et de Poisson.

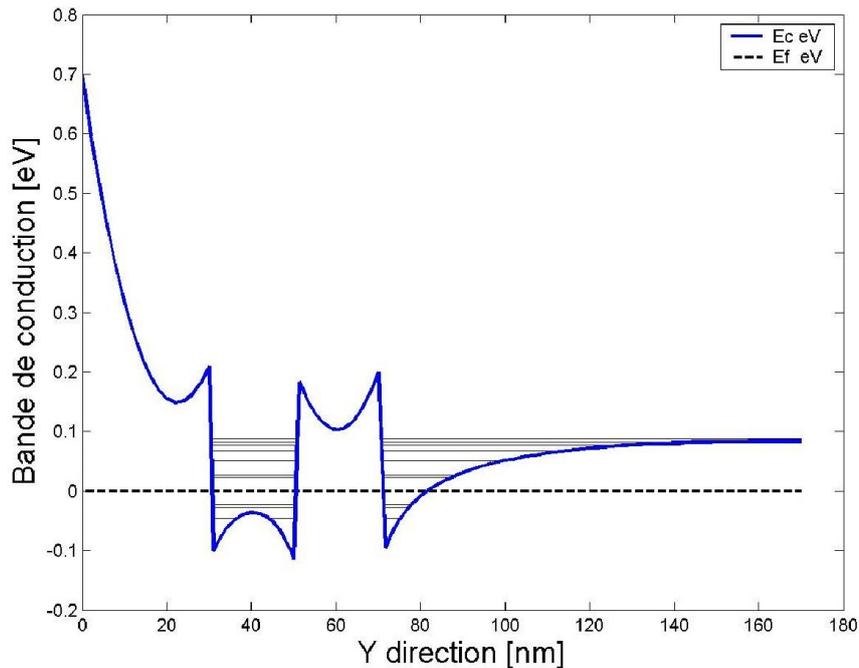


Figure 4-3 La bande de conduction pour un composant à quatre couches montrant les puits quantique et quelques niveaux énergiques quantifiés obtenus par notre code.

4.2.3 Densité d'électrons

La distribution spatiale des électrons est présentée dans les figures 4-4 et 4-5. Encore, il y a également bon accord entre les deux codes.

La figure 4-6 présente la densité d'électrons et la bande de conduction dans une seule figure afin de montrer que les pics de la densité se situent à une distance de la frontière de puits de potentiels, c'est une caractéristique particulière de la simulation quantique.

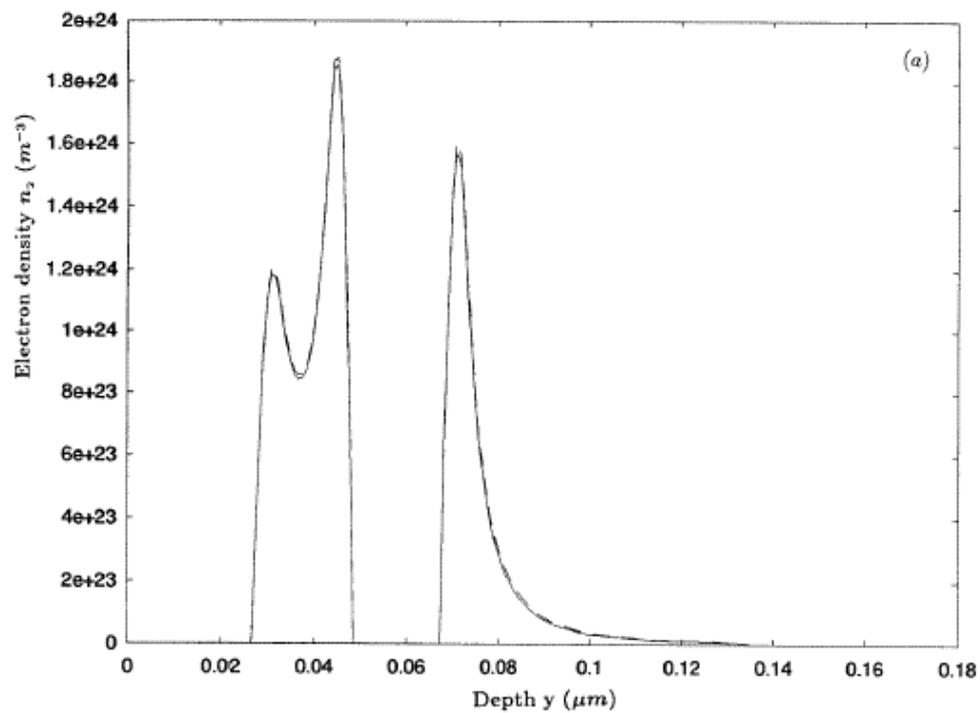


Figure 4-4 La distribution spatiale des électrons pour un composant à quatre couches obtenue par Snowden [53].

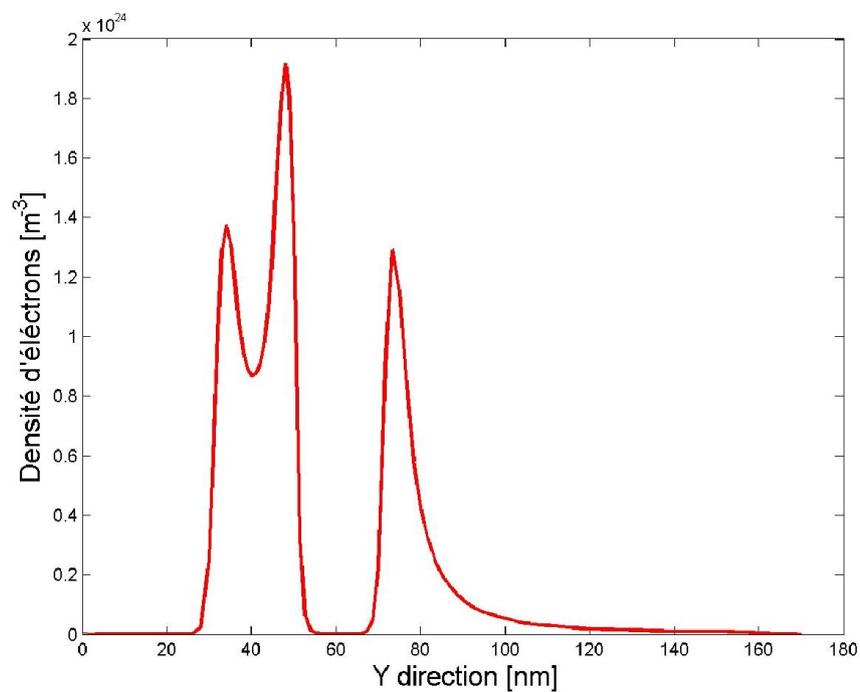


Figure 4-5 La distribution spatiale des électrons pour un composant à quatre couches obtenue par notre code.

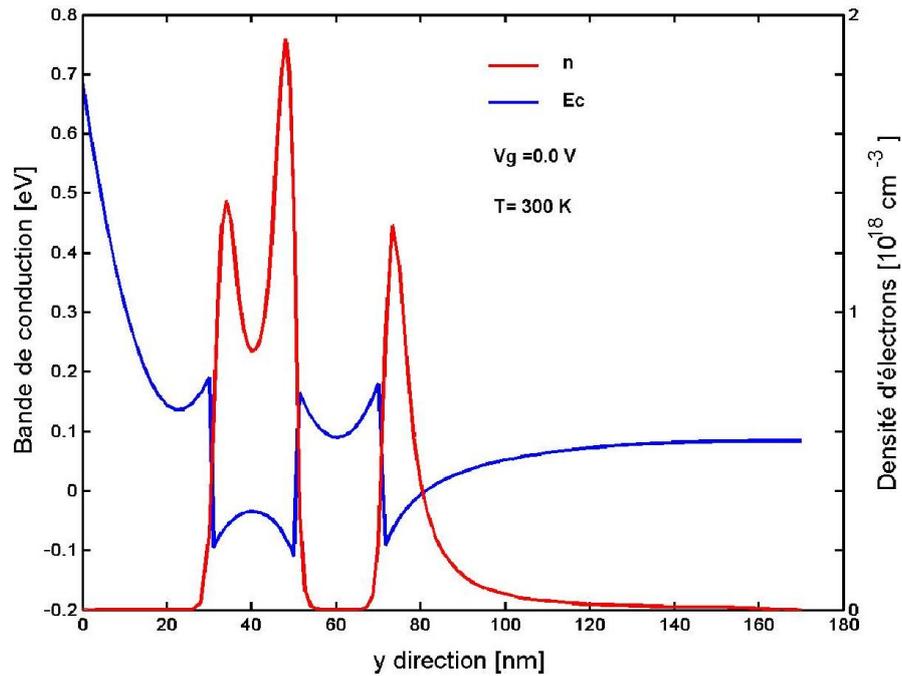


Figure 4-6 La bande de conduction et la distribution spatiale des électrons correspondante dans un composant à quatre couches prédit par notre code.

4.2.4 Fonctions d'onde

La figure 4.7 représente l'évolution de la bande de conduction dans la structure, ainsi que les fonctions d'ondes, à polarisation de grille nulle ($V_g = 0$ V).

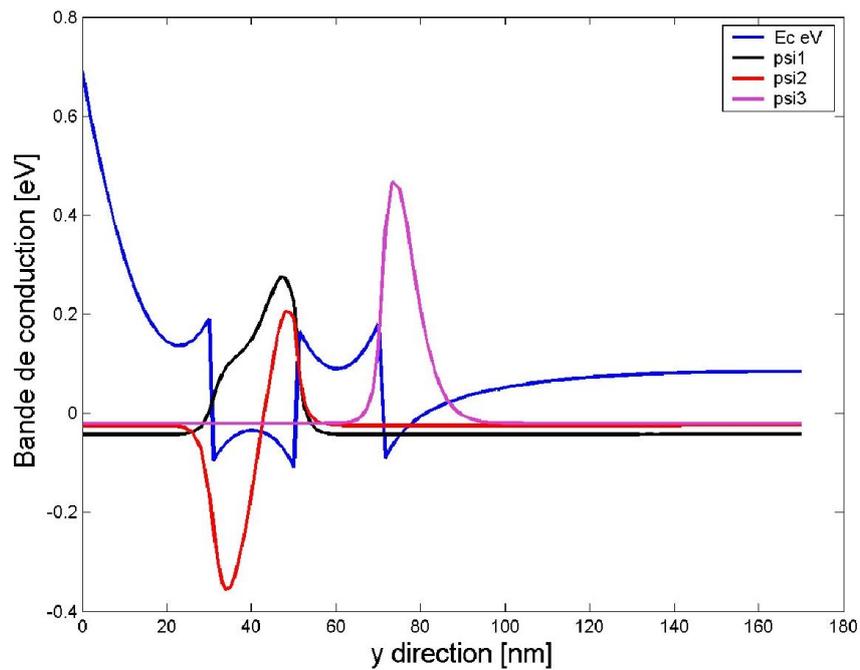


Figure 4-7 Evolution de la bande de conduction et des fonctions d'ondes des trois premiers niveaux d'énergie associés à la structure prédite par notre code.

Cette comparaison prouve très bien que les deux codes, Snowden et notre code mènent aux mêmes résultats. Cependant, il y a des différences minuscules qui ne sont pas trop surprise car le profil de bande de conduction n'est pas complètement identique. A cause des effets d'ex-change et corrélation qui ne sont pas pris en considération par notre code.

4.3 Deuxième application : model de commande de charge

Dans cette application on s'intéresse à analyser la commande de charge d'une structure HEMT, basée sur la résolution auto-cohérente des équations de Schrödinger et de Poisson. Deux structures HEMT ont été proposées pour l'étude : conventionnel et pseudomorphique à base de matériaux AlGaAs/GaAs et AlGaAs/InGaAs/GaAs respectivement. Nous allons établir numériquement la relation qui lie la densité superficielle d'électrons dans le canal du HEMT à la tension de commande V_g appliquée à la grille.

4.3.1 Modèle utilisé

La séquence des couches des deux structures HEMT utilisées est montrée schématiquement dans la figure 4-8. Le canal de conduction est formé aux hétérointerfaces AlGaAs/GaAs et AlGaAs/InGaAs dû à la discontinuité de la bande d'énergie entre les matériaux constituant l'hétérointerface.

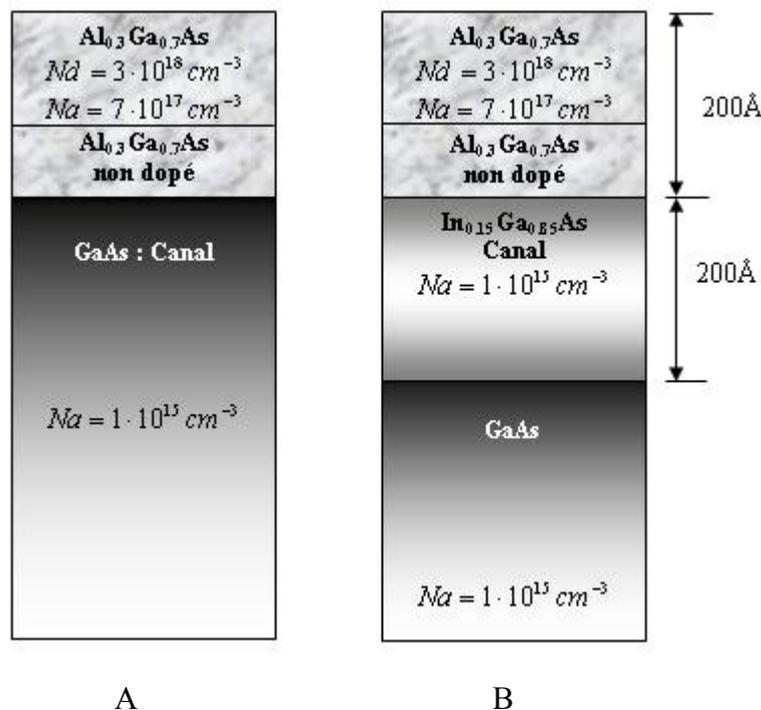


Figure 4-8 : Coup schématiquement d'une structure A) conventionnel et B) pseudomorphique, les dimensions entre A et B ne sont pas respectés.

La structure conventionnel consiste en une couche GaAs résiduellement p⁻ d'épaisseur 1 μm déposée sur un substrat semi-isolant de GaAs, suivie d'une couche intrinsèque très mince de 20 Å de Al_{0,3}Ga_{0,7}As. La couche dopée de type nAl_{0,3}Ga_{0,7}As est de 180 Å d'épaisseur avec une concentration homogène du dopage Nd=3.10¹⁸ cm⁻³ et Na=7.10¹⁷ cm⁻³. Une barrière de Schottky de 1.0 eV est supposée pour le contact entre la grille et l'AlGaAs, et une concentration uniforme d'Aluminium (Al) de 30% à travers la couche AlGaAs. Pour la discontinuité de bande de conduction à l'interface AlGaAs/GaAs on a choisi 60% de différence de gaps de deux matériaux massifs (bulk). Ceci correspond à une discontinuité de la bande de conduction de 0.22 eV entre GaAs et AlGaAs.

La seule différence entre la structure conventionnel et pseudomorphique réside dans une couche mince d'In_{0,15}Ga_{0,75}As résiduellement p⁻ de 200 Å d'épaisseur introduite entre la couche barrière Al_{0,3}Ga_{0,7}As et le bafer GaAs. La discontinuité de la bande de conduction ΔEc à l'interface In_{0,15}Ga_{0,75}As/GaAs est supposée 0.098 eV. La densité des accepteurs résiduelle dans le GaAs est supposée 1 x 10¹⁵ cm⁻³. ΔEc à l'interface Al_{0,3}Ga_{0,7}As/In_{0,15}Ga_{0,75}As égale à la somme de discontinuités aux interfaces In_{0,15}Ga_{0,75}As/GaAs et Al_{0,3}Ga_{0,7}As/GaAs. Les détails de chaque structure sont donnés dans le tableau 4-1. La résolution a été faite à la température T=300 K.

Les paramètres et les constantes physiques utilisés pour le calcul de ce modèle sont énumérés dans le tableau 4-2.

Matériau	Na (cm ⁻³)	Nd (cm ⁻³)	épaisseurs (Å)	x _{Al}	y _{In}	Ed (eV)	Ea (eV)
GaAs	1.0 x 10 ¹⁵	0	10000	0	0	--	0.027
Al _x Ga _{1-x} As	7.5 x 10 ¹⁷	3.0 x 10 ¹⁸	180	0.3	0	0.032	0.027
Al _x Ga _{1-x} As spacer	1.0 x 10 ¹⁴	0	20	0.3	0	--	--
In _y Ga _{1-y} As	1.0 x 10 ¹⁵	0	200	0	0.15	--	0.027

Table 4-1 Paramètres de structures analysées dans la deuxième application.

Paramètre	symbole	matériau		
		GaAs	Al _x Ga _{1-x} As	In _y Ga _{1-y} As
Permittivité relative	ϵ / ϵ_0	13.1	13.18 - 3.12x	13.1 + 1.44y
Masse effective d'électron	m / m_0	0.067	0.067 + 0.083x	0.067 - 0.044y
Gap d'énergie eV	E_g	1.42	1.42 + 1.087x - 0.438x ²	1.523 - 1.583y + 0.475y ²

Table 4-2 Paramètres matériels utilisés pour le calcul de la deuxième application, ϵ_0 est la permittivité du vide et m_0 est la masse d'électron libre.

L'équation de Poisson pour ce modèle a été résolue dans les conditions aux limites suivantes. À l'électrode de grille la bande de conduction dans l'AlGaAs est fixée pour être la valeur correspondant à la hauteur de barrière de Schottky et à la tension appliquée. La bande de conduction à un point loin du canal est contrôlée par les conditions aux limites de type Newman. Les mêmes conditions aux limites énoncées dans le chapitre 2 sont adoptées pour l'équation de Schrödinger.

La solution auto-cohérente est effectuée entièrement quantique [54] c.-à-d. que la densité 3D d'électrons dans la barrière AlGaAs est calculée à partir de l'équation de Schrödinger.

4.3.2 Résultats et discussion

4.3.2.1 La commande de charge

La figure 4-8 montre le profil calculé de la bande de conduction et la distribution d'électrons 2DEG dans la structure conventionnel à $V_g=0.8$ V et $T=300$ K. La cinquième sous-bande correspond à l'état fondamental dans la couche d'AlGaAs. Quarante-vingt-dix pour cent des électrons sont dans les trois plus basses sous-bandes, et ainsi dans le canal comme le montre la figure 4-9.

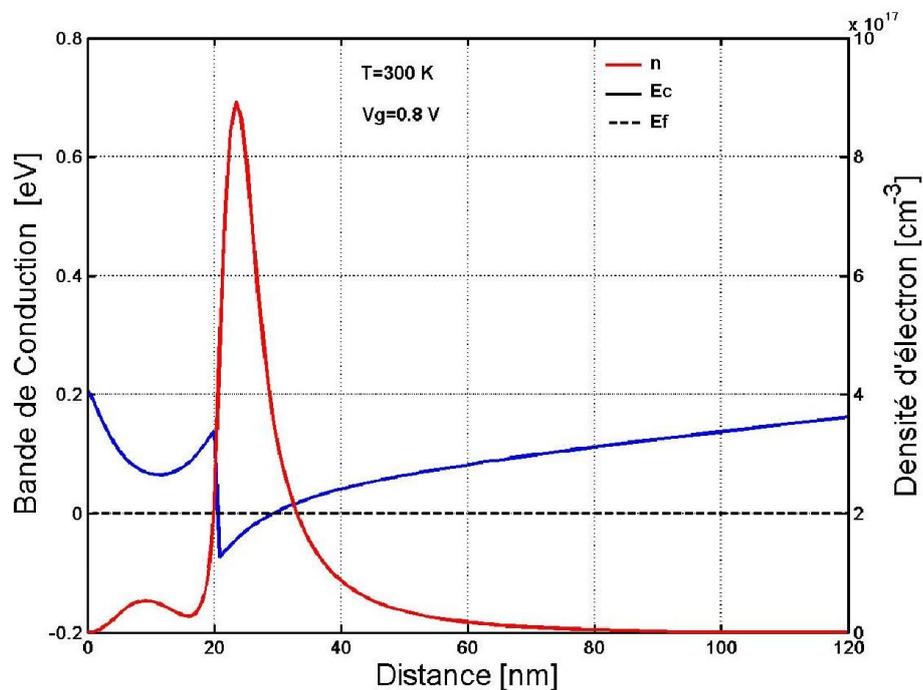


Figure 4-8 Potentiel énergétique auto-cohérent et la distribution spatiale des électrons 2DEG correspondante pour la structure conventionnel.

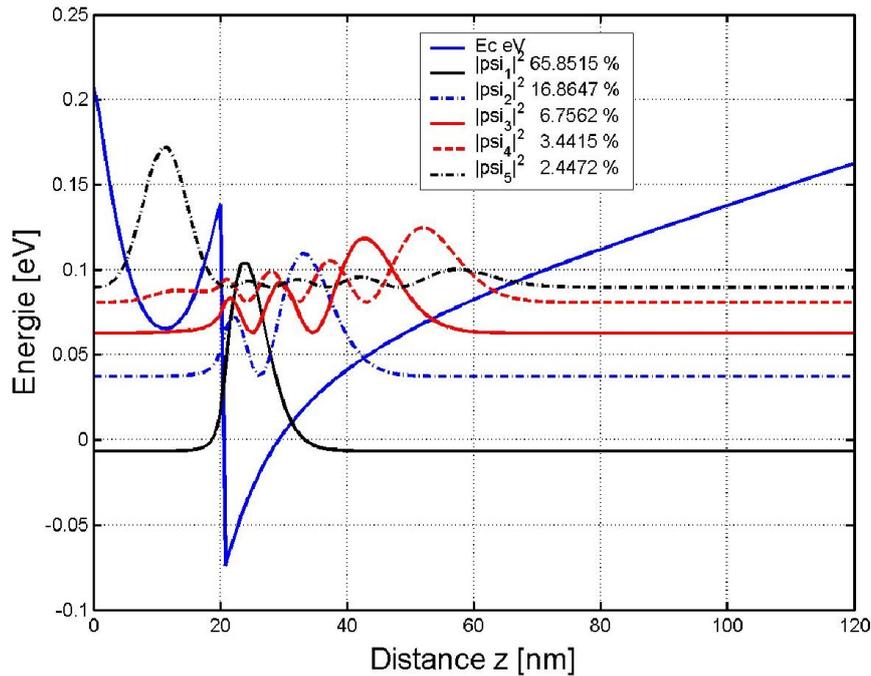


Figure 4-9 La distribution de la densité de probabilité d'électrons 2DEG pour la structure conventionnel, La cinquième sous-bande correspond à l'état fondamental dans la couche d'AlGaAs.

La figure 4-10 montre le profil calculé de la bande de conduction et la distribution d'électrons 2DEG dans la structure pseudomorphique à $V_g=0.8$ V et $T=300$ K.

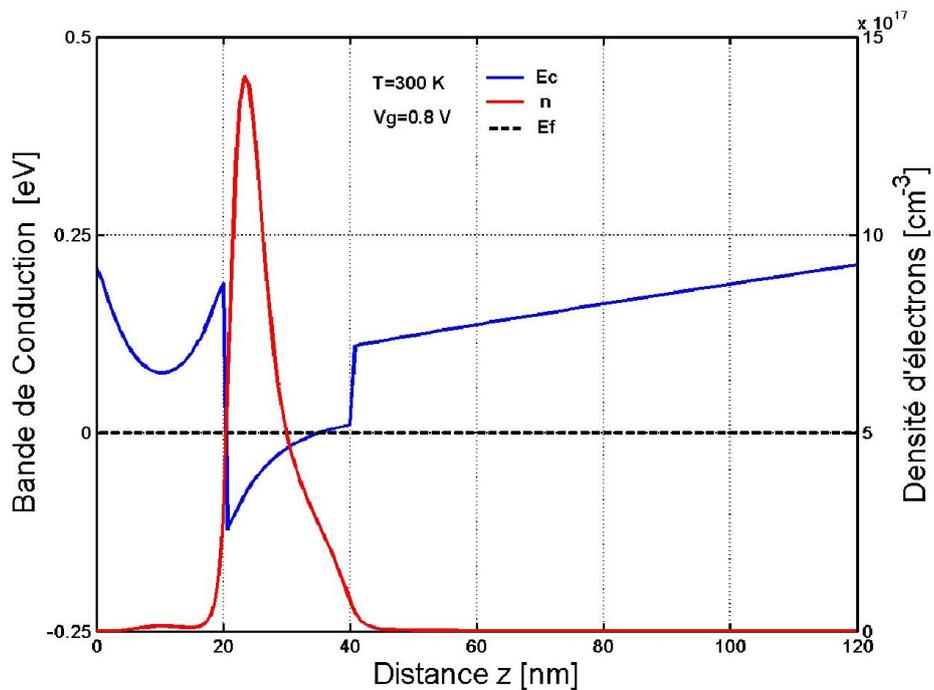


Figure 4-10 Potentiel énergétique auto-cohérent et la distribution spatiale des électrons 2DEG correspondante pour la structure pseudomorphique.

Les densités de probabilité $|\psi|^2$ et les sous-bandes correspondantes sont montrées dans la figure 4-11. Les trois plus basses sous-bandes et la cinquième, sixième et septième sous-bande sont des sous-bandes formées dans le canal d'InGaAs. La quatrième et la huitième sont des sous-bandes formées dans la couche d'AlGaAs.

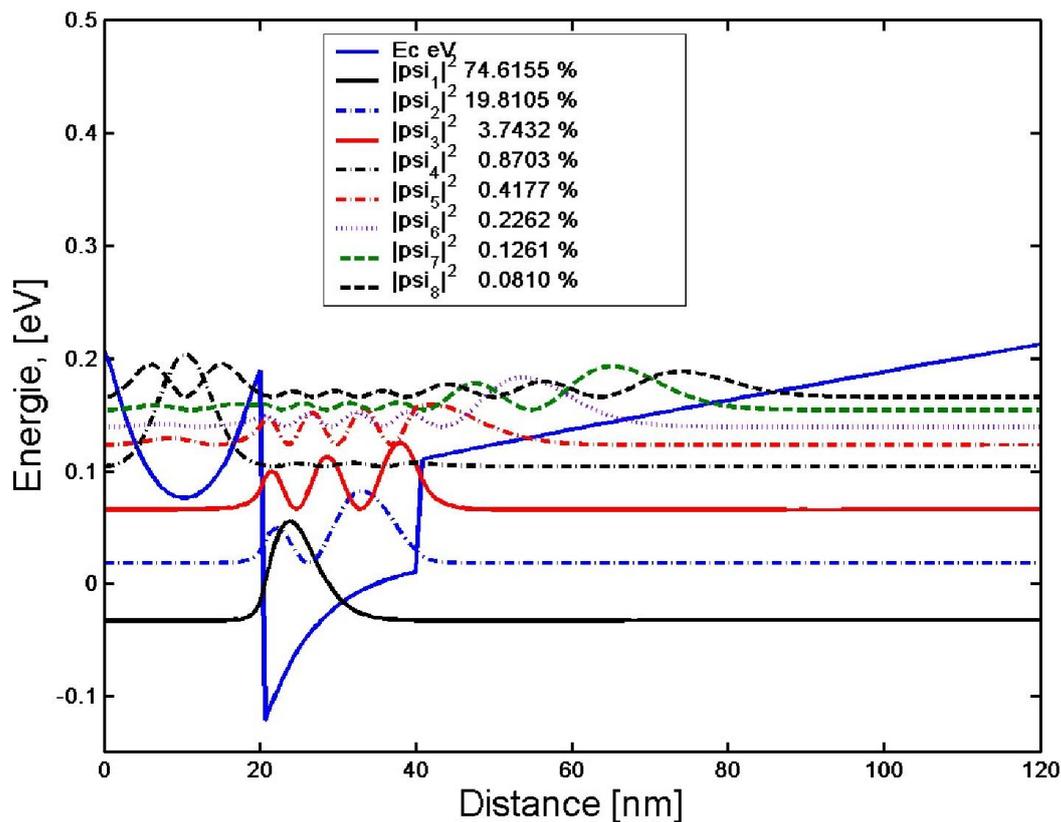


Figure 4-11 Bande de conduction et densités de probabilité d'électrons dans les sous-bandes pour la structure pseudomorphique.

Puisque la séparation d'énergie entre les sous-bandes est étendue dans le puit quantique d'InGaAs, plus que 98 pour cent des électrons sont dans les trois plus basses sous-bandes, ayant pour résultat la distribution localisée de concentration 2DEG, comme le montre la figure 4-10 et 4-12.

Le rapport de transition entre sous-bandes est autant réduit que la séparation entre les niveaux de sous-bandes est large.

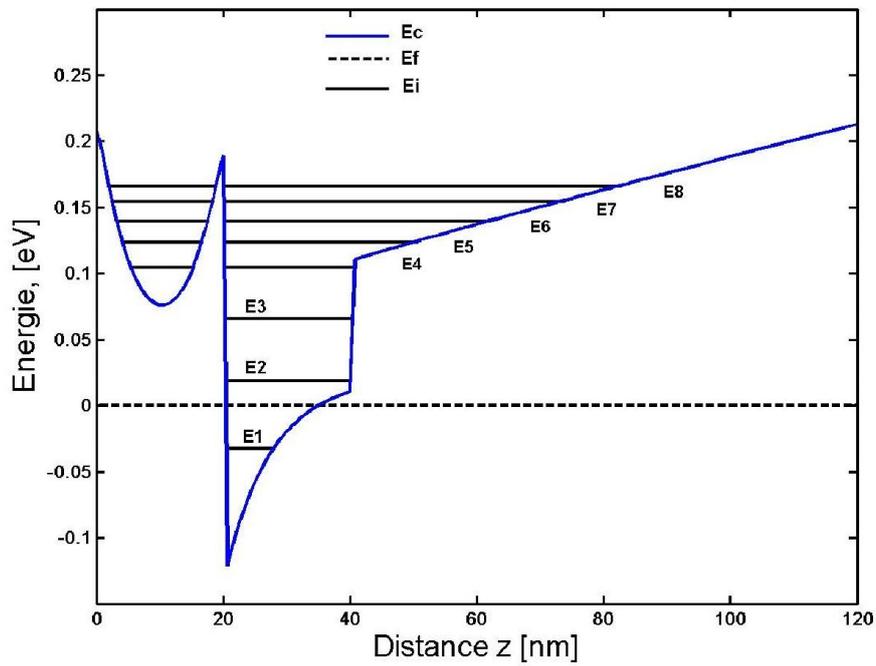


Figure 4-12 Bande de conduction et énergies de sous-bandes associées à la structure pseudomorphique.

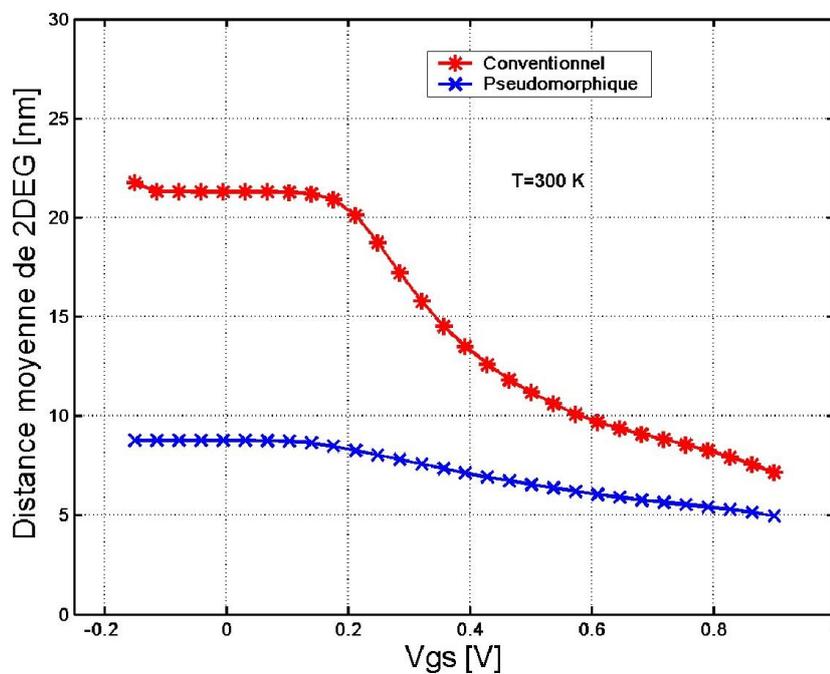


Figure 4-13 Distance moyenne de la distribution 2DEG en fonction de polarisation V_{gs} de Grille dans les structures analysées.

La distance moyenne X_c de la densité 2DEG de l'hétérointerface est donnée par l'intégrale suivante :

$$X_c = \int_{\text{Canal}} n(z) \cdot z \cdot dz / ns \quad (4-1)$$

où ns est la densité superficielle dans le canal. La distance X_c pour la structure conventionnel est montrée dans la figure 4-13 en fonction de tension V_g appliquée. X_c , est conservée d'environ 90 Å pour les structures pseudomorphique pour n'importe quelle polarisation, alors que X_c , tend à diverger pour les structures conventionnelles à polarisation inverse. Afin de justifier la simulation quantique du HEMT, considérons tous d'abord la représentation corpusculaire des électrons dans le semiconducteur. Ces électrons sont des particules libres de masse effective m_e , animées d'un mouvement Brownien caractérisé par un libre parcourt moyen $\ell = v_{th} t_c$ où v_{th} est la vitesse thermique des porteurs et t_c , leur temps de collision. A la température ambiante $v_{th} = 10^7 \text{ cm/s}$ et $t_c = 10^{-13}$ à 10^{-12} s , ce qui donne $\ell = 100$ à 1000 Å. Comparons X_c et ℓ . la largeur moyenne X_c du puit de potentiel est inférieure au libre parcourt moyen des électrons. Ces électrons se comportent alors comme des particules libres dans un puit de potentiel, leur mouvement est conditionné par mes réflexions sur les faces du puits, leurs états d'énergie sont quantifiés. Considérons maintenant la représentation ondulatoire. La longueur d'onde de Broglie associée aux électrons dans le semiconducteur est donnée par [37] :

$$\lambda = \frac{2\pi}{k} = \frac{h}{\sqrt{2m_e(E - E_c)}} \quad (4-2)$$

La longueur d'onde associée aux électrons du niveau de Fermi et des trois premières sous-bandes pour différent V_g s est tracée sur la figure 4-14. Comparons X_c et λ_F . On constate que les électrons sont confinés dans un puit de potentiel dont la largeur est du même ordre de grandeur que leur longueur d'onde. En d'autres termes, la longueur de l'onde associée à l'électron est du même ordre de grandeur que la cavité dans laquelle est enfermée cette onde. Il en résulte en termes d'interférence optique l'existence d'ondes stationnaires, données par $2X_c = k\lambda$. Dans la mesure où λ est du même ordre de grandeur que X_c l'ordre d'interférence k est petit, et par suite la différence $\delta\lambda$ entre deux ondes stationnaires, c'est-à-

dire la différence d'énergie entre les états correspondants, est grande. Au contraire, si X_c devient beaucoup plus grand que λ , $\delta\lambda$ devient petit est la quantification disparaît.

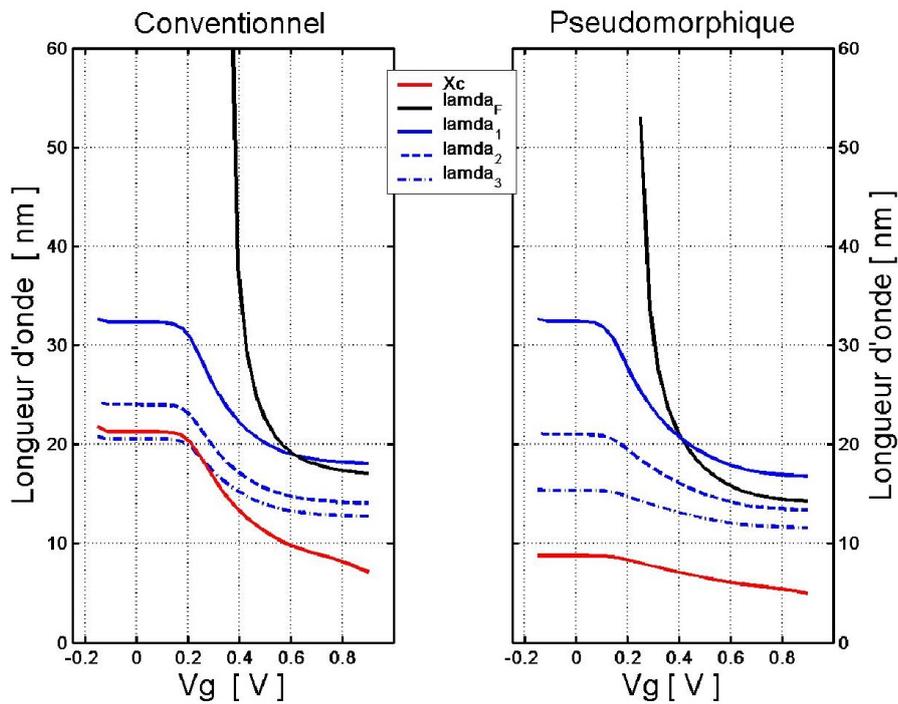


Figure 4-14 La longueur d'onde associée aux électrons dans le canal comparé à la largeur moyenne de la distribution 2DEG en fonction de polarisation V_g de Grille.

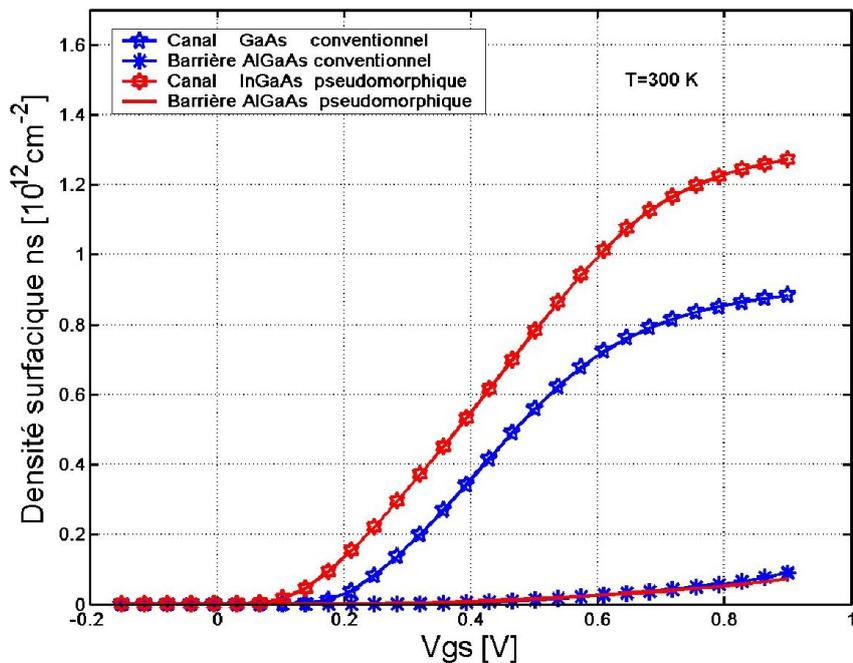


Figure 4-15 La densité surfacique des électrons dans le canal et dans la barrière en fonction de polarisation V_g de Grille.

La figure 4-15 présente la concentration superficielle des électrons dans le canal et dans la barrière AlGaAs en fonction de voltage appliqué sur la grille. Sous l'action de la tension de polarisation V_{gs} du métal, la jonction Schottky métal/AlGaAs et l'hétérojonction AlGaAs/GaAs ou AlGaAs/InGaAs sont polarisées. L'allure de la structure de bande et la distribution spatiale des électrons correspondante pour différentes valeurs de V_{gs} sont représentées sur la figure 4-16 et 4-17.

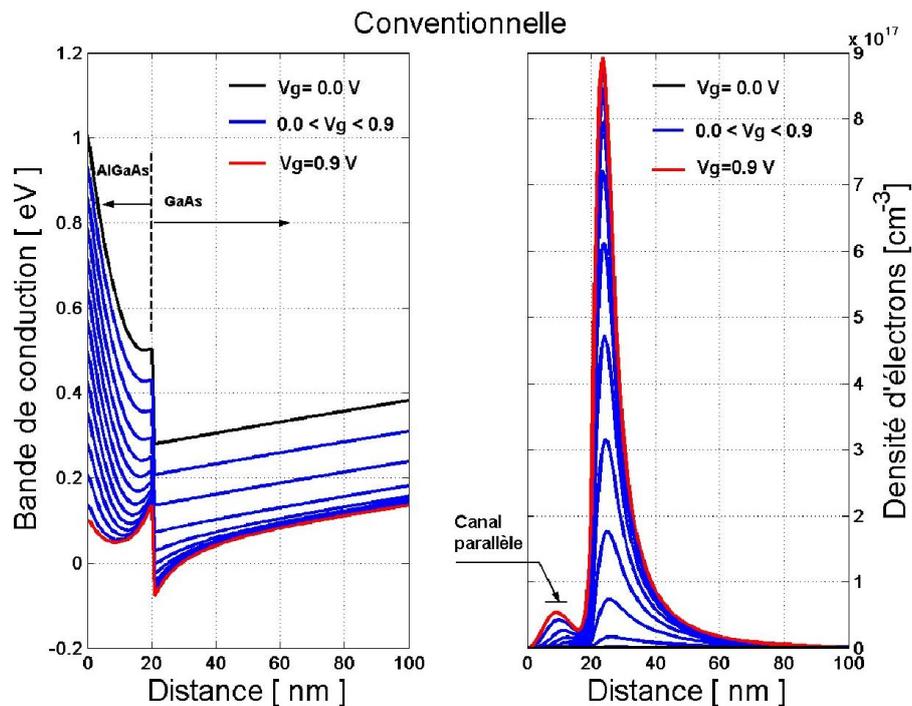


Figure 4-16 L'allure de la bande de conduction et la distribution spatiale d'électrons dans la structure conventionnelle en fonction de polarisation V_{gs} de Grille.

Les électrons libérés par les donneurs de AlGaAs sont transférés dans GaAs ou InGaAs à l'interface de l'hétérojonction. La charge d'espace développée dans AlGaAs correspond à un régime de déplétion, la charge d'espace développée dans le canal GaAs ou InGaAs correspond à un régime d'inversion. En régime normal de polarisation V_g moyenne, les zones de déplétions de la jonction Schottky métal/AlGaAs et l'hétérojonction AlGaAs/GaAs ou AlGaAs/InGaAs se recouvrent, l'AlGaAs est donc en déplétion totale. La figure 4-18 présente la distribution des donneurs ionisés dans l'AlGaAs en fonction de V_g . La tension de polarisation de la grille commande alors la densité d'électrons dans le canal conducteur situé dans le GaAs ou l'InGaAs comme le montre la figure 4-15. Mais lorsque la tension de polarisation de la grille V_{gs} augmente positivement la zone de déplétion de la jonction Schottky diminue. Lorsque V_{gs} atteint et dépasse une valeur de seuil (~ 0.8 V), les deux zones

de charge d'espace ne se recouvrent plus et un canal conducteur parallèle peuplé d'une densité d'électron apparaît dans l'AlGaAs comme le montre les figures 4-16 et 4-17.

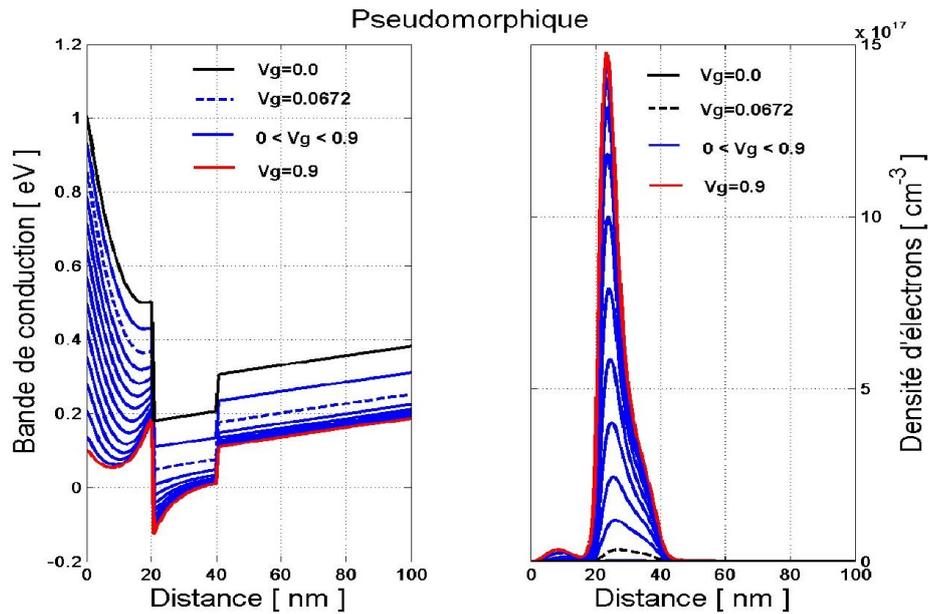


Figure 4-17 L'allure de la bande de conduction et la distribution spatiale d'électrons dans la structure pseudomorphique pour différentes valeurs de tension de polarisation V_g s.

Dans ces conditions la tension de polarisation V_g s ne commande plus la conductivité du canal du HEMT, dont la densité électronique sature à une valeur n_{max} , mais commande la densité du canal conducteur qui se manifeste dans AlGaAs.

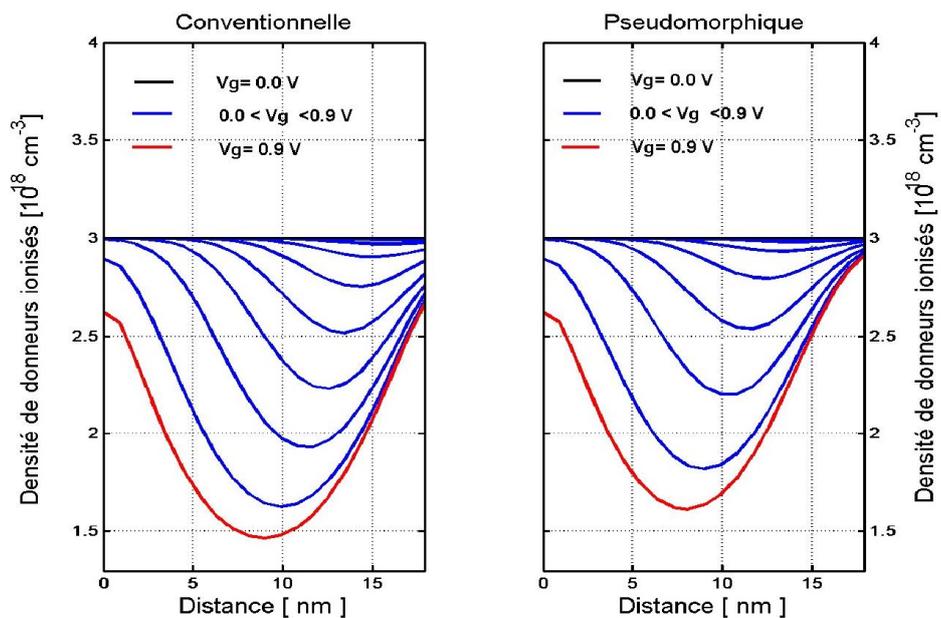


Figure 4-18 Distribution spatiale de donneurs ionisés dans la barrière AlGaAs pour différentes valeurs de tension de polarisation V_g s.

Dans la même figure 4-15 est montré l'évolution de la densité superficielle dans la barrière AlGaAs en fonction de V_g , la réponse du canal parallèle au variation de V_{gs} est marqué dans la gamme du saturation de canal principal du HEMT. Pour des valeurs de V_{gs} importantes la densité n_s de 2DEG dans le canal dans les deux structures amorce une saturation. Le maximum de la densité superficielle atteint et dépasse $1.2 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ pour la structure pseudomorphique et $0.8 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ pour la structure conventionnelle. Comme décrit ci-dessus, la structure pseudomorphique accomplit un plus grand confinement de porteur, qui permet d'améliorer la commande de charge.

La figure 4-19 présente l'évolution de la densité superficielle d'électrons en fonction de niveau de Fermi mesuré par rapport au bas de la bande de conduction dans le canal à l'hétérointerface.

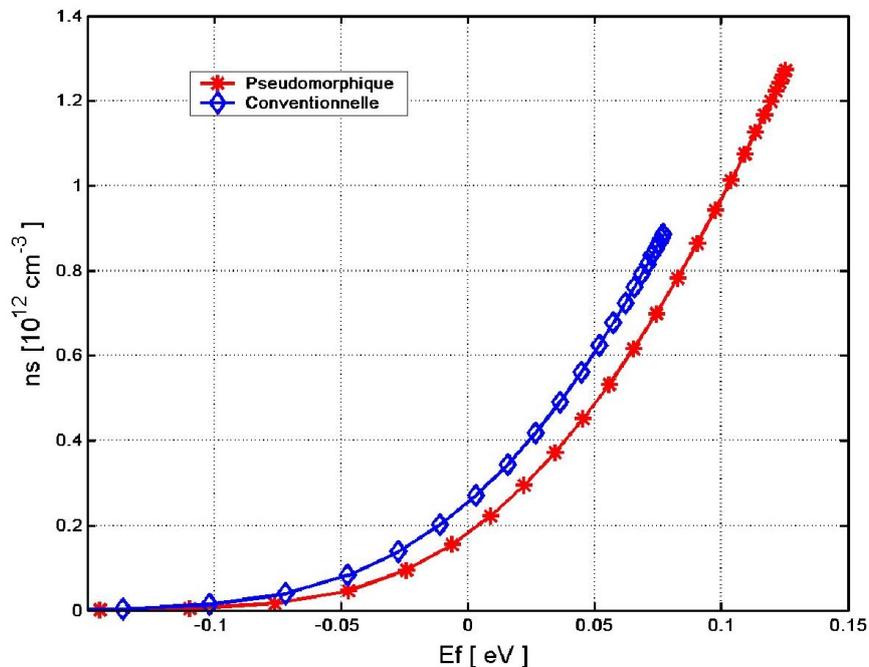


Figure 4-19 Densité surfacique d'électrons dans le canal en fonction de niveau de Fermi E_f .

Avec les polarisations croissantes de Grille les énergies de sous bandes diminue et par suite le niveau de Fermi augmente pour remplir des niveaux d'énergie occupés supérieure, ce qui traduit l'allure obtenue de n_s en fonction de E_f dans la figure 4-19. La figure 4-20 présentes l'évolution de cinq premières énergies de sous bandes en fonction de polarisation de Grille et la commande de charge correspondante dans chaque sous-bande. Dans la structure conventionnelle, les niveaux de sous-bandes sont décalés vers le haut, ayant pour effet la

réduction de ns. Le taux de remplissage de sous-bandes pour différentes valeurs de V_{gs} est présenté sur la figure 4-21.

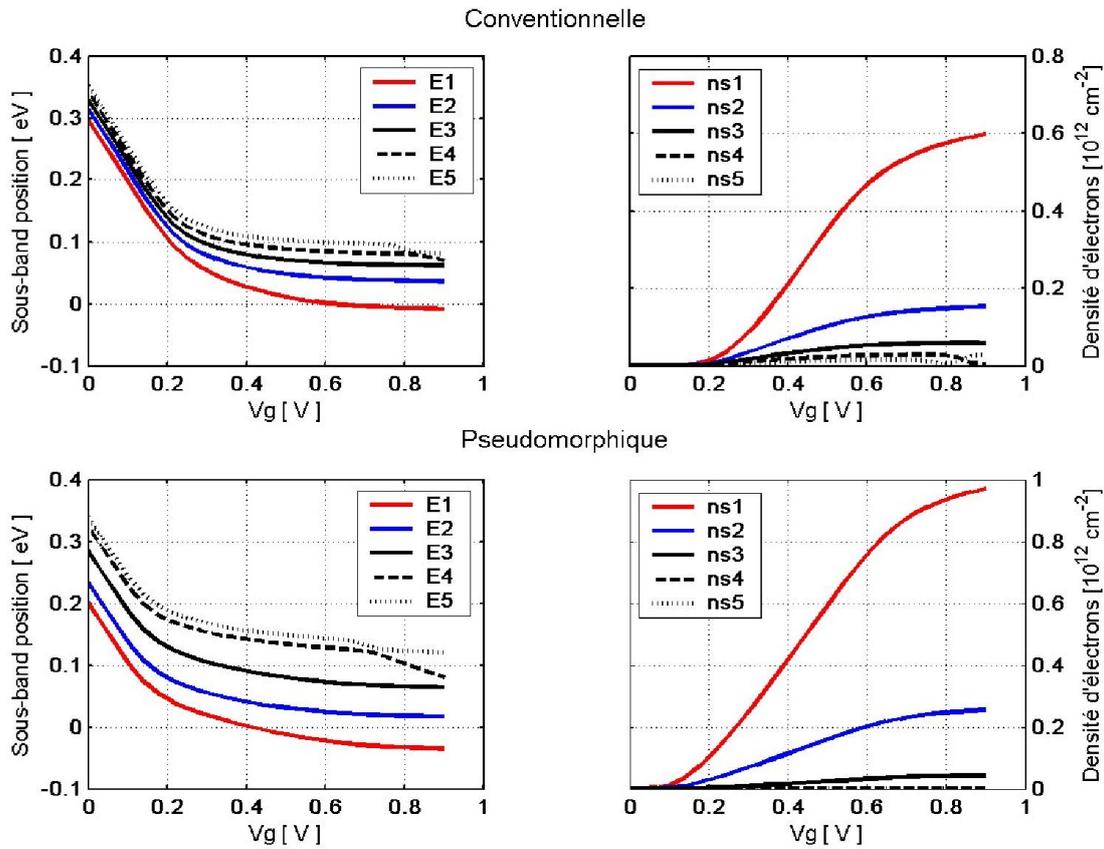


Figure 4-20 cinq premières énergies de sous-bande en fonction de V_{gs} et la commande de charge correspondante pour chaque structure.

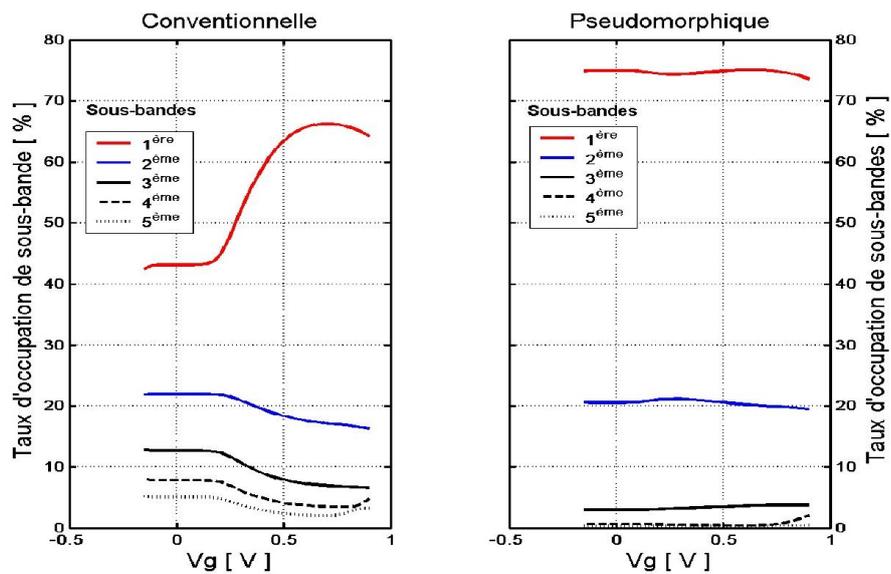


Figure 4-20 Taux d'occupation de cinq premières sous-bandes en fonction de V_{gs} .

Le rapport de transition entre sous-bandes est faible dans la structure pseudomorphique que dans la conventionnelle.

4.3.2.2 La tension de seuil

La définition de la tension de seuil est quelque peu arbitraire puisqu'elle représente le début de la conduction dans un composant, une condition non définie avec précision en tant qu'elle est déterminée par la sensibilité des instruments de mesure. De ce point de vue, une définition pour la tension de seuil a été présentée par Tiwari [55] en plaçant une quantité minimum de conduction, c.-à-d., un nombre minimum d'électrons dans le canal. Une valeur arbitraire de $5 \times 10^{10} \text{ cm}^{-3}$ des porteurs a été choisie dans [55]. Une définition généralement plus utilisée, adopté par des concepteurs de circuit et des physiciens de composant, cependant, doit extrapoler la valeur de la tension de seuil d'une graphe de racine carrée du courant de drain $\sqrt{I_d}$ contre la tension V_g de grille à une tension donnée V_d de drain. Notez que cette définition de tension de seuil ne représente pas vraiment l'état du début de la conduction pendant qu'elle a souvent comme conséquence le courant dans un composant aux tensions de grille au-dessous de la tension de seuil [56]. Cependant, c'est une définition très utile et pratique, du point de vue de modélisation de composant.

La tension V_{th} de seuil pour la structure pseudomorphique égale 0.17 V, calculé par extrapolation de courbes de la figure 4-15 vers zéro [57], décalée par 0.07 eV dans le sens des tensions négatives du celle de la structure conventionnel. La valeur de décalage de tension correspond à la discontinuité de bande de conduction entre InGaAs et GaAs, qui est 98 meV. Le résultat est conforme bien au concept que V_{th} , est approximé comme suit [56,37]:

$$V_{th} \cong V_b - \frac{\Delta Ec}{q} - q \frac{N_d d^2}{2\epsilon} \quad (4-2)$$

où V_b est la hauteur de barrière de Schottky.

4.3.2.3 La capacité de grille

La capacité de grille est calculée en différenciant la densité de charge sous la grille par rapport à la tension appliquée. La capacité C_{gs} par unité de surface de la structure conventionnelle en fonction de V_g est montrée sur la figure 4-21-A. La courbe indiquée par 2DEG est la capacité due aux électrons dans le canal, libre est due aux électrons dans l'AlGaAs, et donneur est due aux donateurs occupés dans l'AlGaAs. La courbe indiquée par trous représente la capacité due aux trous dans l'amortisseur GaAs.

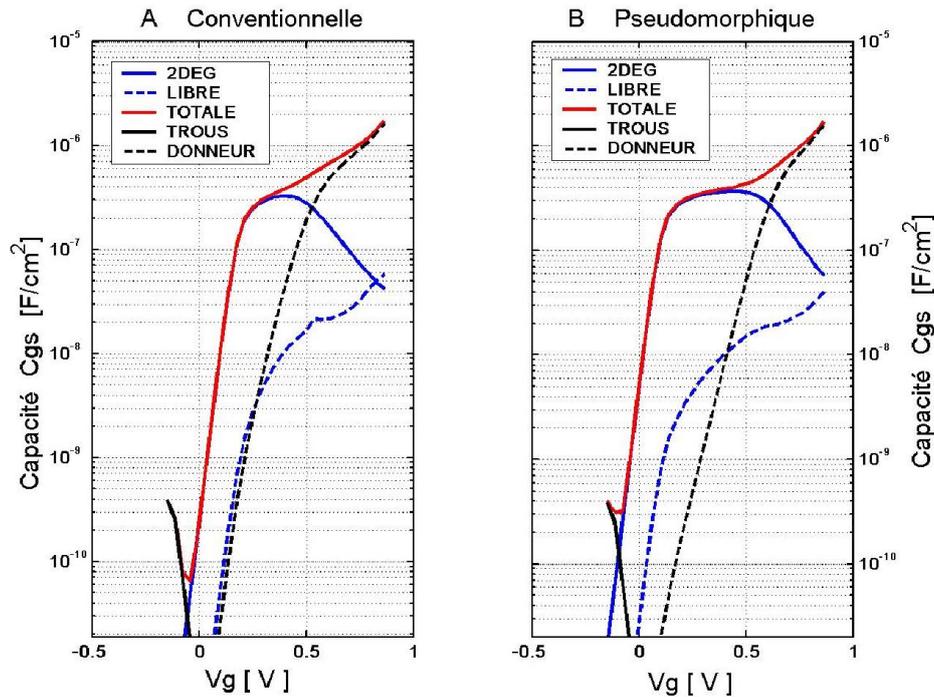


Figure 4-21 La capacité de grille en fonction de polarisation de grille à $T=300$ K.

Ici, les électrons dans le canal et dans l'AlGaAs sont calculés par la somme simple de la densité $n(z)$ d'électrons pour le canal et pour l'AlGaAs, respectivement. La courbe en rouge représente la capacité totale. Près de la tension de seuil, les donneurs dans la couche d'AlGaAs sont totalement ionisés, la couche barrière AlGaAs(isolant) est vide d'électrons libres, et des électrons considérables sont distribués profondément dans l'amortisseur (buffer) GaAs, ce qui provoque une petite capacité. Cependant, dans la région au-dessous de seuil, la poussée de polarisation en inverse mène à une réduction de la couche de déplétion dans l'amortisseur GaAs; ainsi, la capacité augmente graduellement. Dans ce cas-ci, le niveau de Fermi se trouve considérablement au-dessus du niveau d'accepteur résiduel dans tout l'amortisseur avec des accepteurs totalement ionisés; ainsi, la réponse de l'accepteur résiduelle est très petite. Une augmentation de la tension de grille près du seuil force la bande à se plier au canal et confine les électrons; ainsi, la capacité augmente rapidement. Une fois que le 2DEG est formé, la position efficace du 2DEG de l'hétérointerface n'est plus sensiblement influencée. Ainsi, la capacité demeure presque constante. Quand la grille est encore plus polarisée en direct, la neutralisation de donneurs et la conduction parallèle deviennent marquées, avec la bande de conduction se trouvant près du niveau de Fermi dans l'AlGaAs. Par conséquent, la capacité C_{2DEG} due à 2DEG dans le canal par unité de surface est faible, alors que la capacité totale augmente encore rapidement. Dans cette figure, la

tension $V_{gs}=0.8$ V correspond à l'état de niveau de Fermi approximativement situé 60 meV sous la bande de conduction dans l'AlGaAs. Il faut noter qu'une diminution de la réponse de porteur due aux effets parallèles de conduction est causée sans passage de niveau de Fermi à la bande de conduction dans l'AlGaAs. Pour un cas à haute fréquence, une augmentation de la capacité due aux donneurs et des électrons dans l'AlGaAs est réduite en raison de la résistance série due à la conduction parallèle. La figure 4-21-B montre la capacité calculée de grille à 300 K en fonction de la tension V_{gs} pour la structure pseudomorphique. Une grande discontinuité de bande de conduction fait le décalage de la réponse 2DEG vers la polarisation inverse, tandis que la neutralisation de donneurs surgit dans la même région de tension que dans la structure conventionnelle. Ainsi, la valeur de C_{2DEG} dans la structure pseudomorphique est grande dans une large gamme de tensions. Un autre caractère remarquable du comportement de capacité dans cette structure est le fait que le maximum C_{2DEG} devient plus grand que la structure conventionnelle. Comme le montre la figure 4-11, la pente dn_s/dE_f croît en augmentant n_s . Par conséquent, une augmentation du maximum C_{2DEG} est liée à un grand $n_{s_{max}}$ pour cette structure. En d'autres termes, un grand n_s mène à un plus grand confinement de porteur ayant pour résultat une augmentation de la capacité.

4.3.2.4 Transconductance et fréquence de coupure

Sous l'approximation de canal-court, la transconductance intrinsèque g_{m0} par unité de largeur de grille est estimé par l'équation suivante [54]:

$$g_{m0} = C_{2DEG} \cdot v_s \quad (4-3)$$

où v_s est la vitesse de saturation d'électron. On assume que les trous dans l'amortisseur GaAs ne contribuent pas au courant de drain, puisque la région n^+ de contact source forme une barrière de potentielle dans la bande de valence. Les caractéristiques g_{m0} - V_g à 300 K sont montrées dans la figure 4-22. Plus de 3×10^7 cm/s ont été rapportés pour la structure pseudomorphique [58,59]. Dans ce calcul, cependant, on a assumé que la vitesse de saturation est 2×10^7 cm/s pour chaque structure, afin de se concentrer principalement sur la dépendance des performances de FET à l'égard des structures de composant. La transconductance g_{m0} pour la structure pseudomorphique prend une valeur élevée par un éventail de tensions et le maximum de g_{m0} est plus grand qu'en structure conventionnelle. Il est à noter que g_{m0} dépend fortement de la discontinuité de la bande de conduction, même

avec l'épaisseur d'AlGaAs et la vitesse de porteur supposés d'être commun sous l'approximation de canal court.

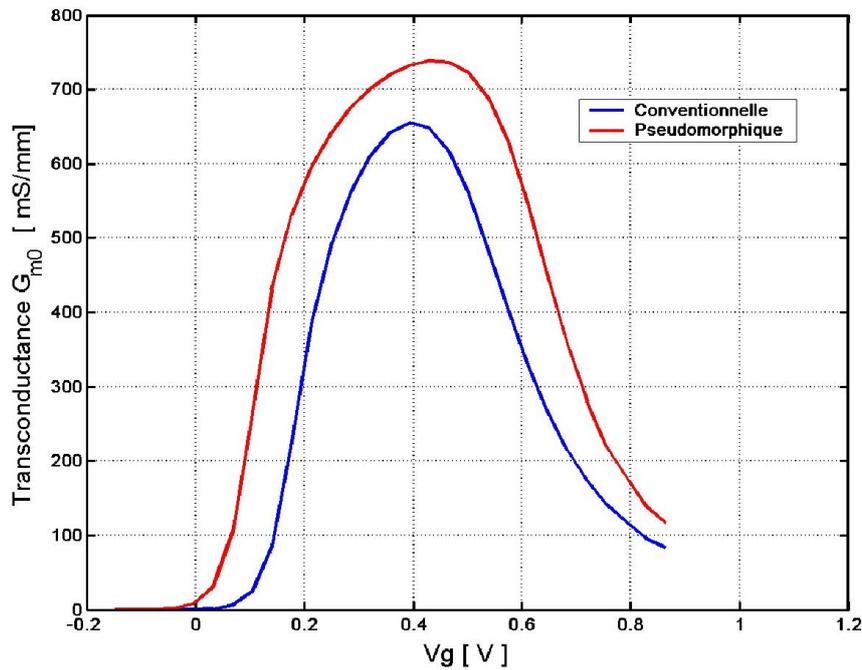


Figure 4-22 La transconductance intrinsèque en fonction de polarisation de grille à T=300 K

Le transistor HEMT étant un composant haute fréquence, la fréquence de coupure est un paramètre caractéristique important. Cette fréquence est calculée par la relation [59] :

$$f_T = \frac{g_{m0}}{2\pi C_{gs} L_g} \quad (4-4)$$

où L_g est la longueur de grille. La figure 4-23 présente la dépendance de fréquence de coupure aux tensions V_g de grille pour les HEMTs analysés avec $0.25 \mu\text{m}$ de longueur de grille. Quand la grille est entièrement polarisée en direct et la conduction parallèle et la neutralisation de donateurs sont présents, g_{m0} devient inférieure avec l'augmentation de C_{gs} ; ainsi, entraînent la diminutions de f_T . Près du seuil, une diminution énergétique de f_T est due à la réponse des trous dans l'amortisseur. Pour la structure pseudomorphique avec une plus grande discontinuité de bande, le haut de f_T , est gardé par un éventail de tensions de grille.

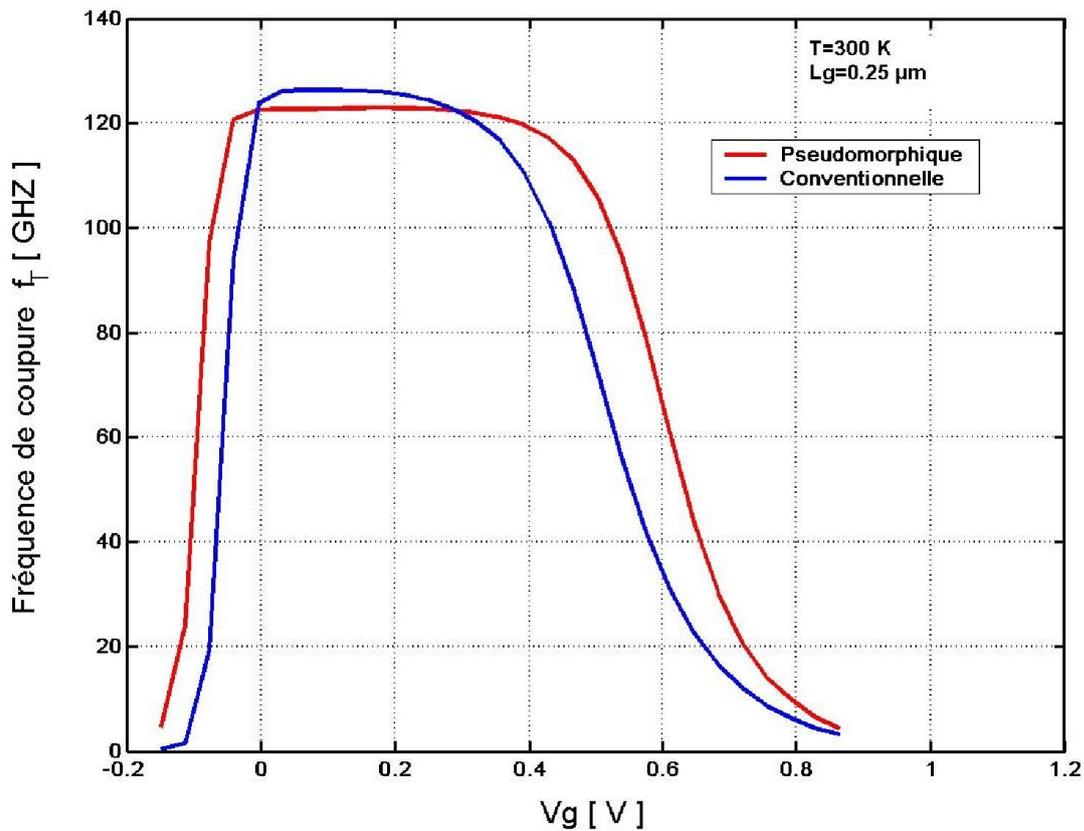


Figure 4-23 La fréquence de coupure de HEMT en fonction de polarisation de grille à $L_g=0.25\mu\text{m}$.

4.3.2.4 Effet des accepteurs résiduels dans le canal sur la commande de charge :

L'influence des paramètres de couche physique (concentration de dopage, composition en aluminium, épaisseur de couche etc.) sur les performances de composant a été exploitée théoriquement et expérimentalement. Cependant, une observation qui a été en grande partie négligée dans la modélisation des composant est le rôle de la densité d'accepteurs à l'intérieur du canal, qui est d'importance primordiale dans la description précise du HEMT [57].

Les figures 4-24 et 4-25 présentent les résultats numériques de la commande de charge dans la structure conventionnelle et pseudomorphique respectivement, pour différentes densités d'accepteurs dans le canal du HEMT.

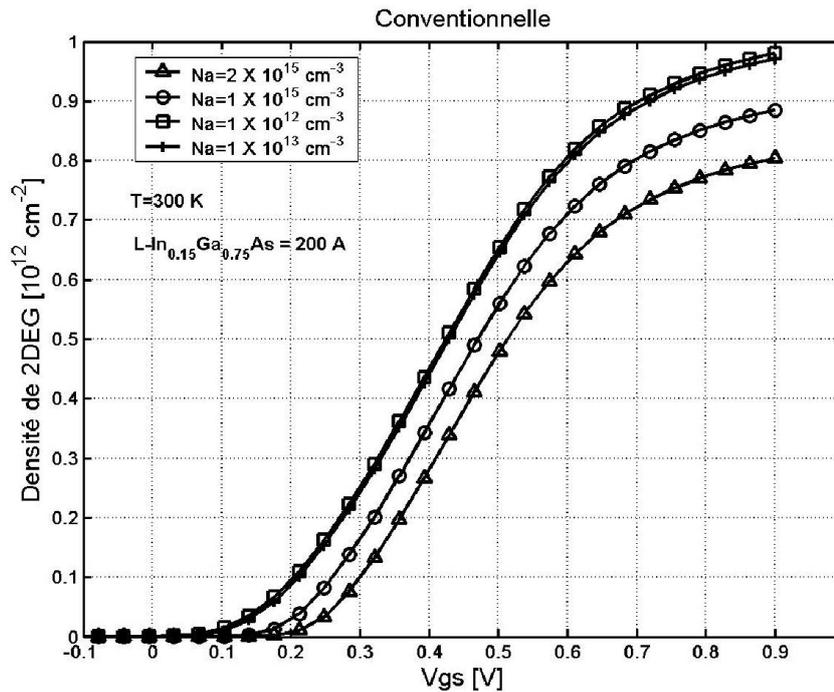


Figure 4-24 La commande de charge pour différentes concentrations d’accepteurs dans le canal du HEMT conventionnel.

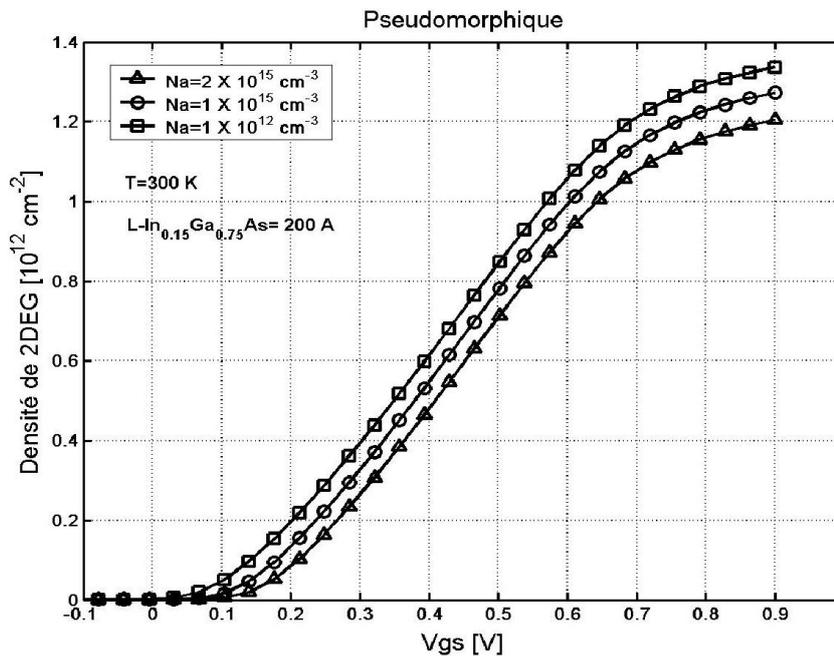


Figure 4-25 La commande de charge pour différentes concentrations d’accepteurs dans le canal du HEMT pseudomorphique.

Pour une polarisation donnée de grille, une augmentation de la concentration d'accepteurs diminue la densité totale de charge de canal. Ceci est expliqué par la dépendance de la concentration d'accepteur sur les énergies de sous-bande. L'Augmentation de la

concentration d'accepteurs pour une polarisation donnée, augmente les énergies de sous-bandes. La séparation de sous-bande augmente et la densité totale de canal diminue. De plus, les sous-bandes commencent à se peupler à des tensions plus élevées de grille avec l'augmentation de la concentration d'accepteurs. La séparation entre les deux premiers niveaux de sous-bandes pour différentes valeurs de polarisation correspondant à un changement dans la densité d'accepteurs de 10^{11} cm^{-3} à $2 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ est tracé sur la figure 4-26.

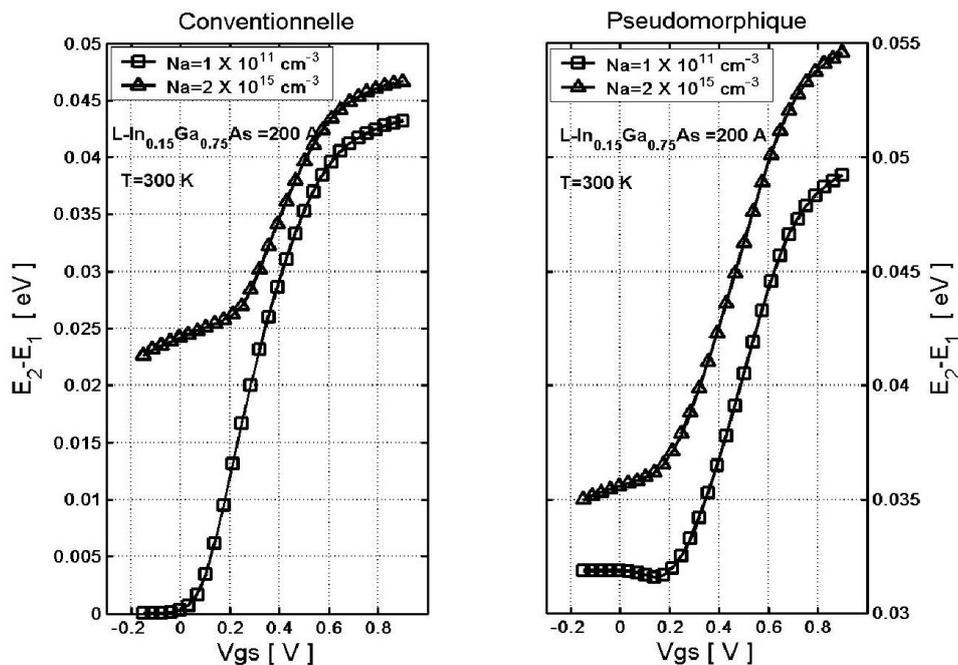


Figure 4-26 La séparation énergétique E_2-E_1 pour différentes V_{gs} à deux valeurs de densité d'accepteurs dans le canal du HEMT.

Le taux d'augmentation de la séparation de sous-bande est grand aux tensions faibles de grille. En fonction de polarisation V_{gs} , le taux de diminution de la densité totale du canal pour un changement dans la densité d'accepteurs est présenté sur la figure 4-27. A partir du taux de diminution, la structure conventionnelle est plus influencée par la densité d'accepteurs que la structure pseudomorphique. Comme il est évident l'influence de la concentration d'accepteurs est dominante au voisinage de tension de seuil et au-dessous de seuil. Pour des densités d'accepteurs inférieur à 10^{12} cm^{-3} , la densité de canal reste approximativement constante sur la gamme entière de polarisation de grille. Un décalage de 80 meV de tension de seuil est obtenu lorsque la densité d'accepteurs varie de 10^{11} cm^{-3} à $2 \cdot 10^{15} \text{ cm}^{-3}$.

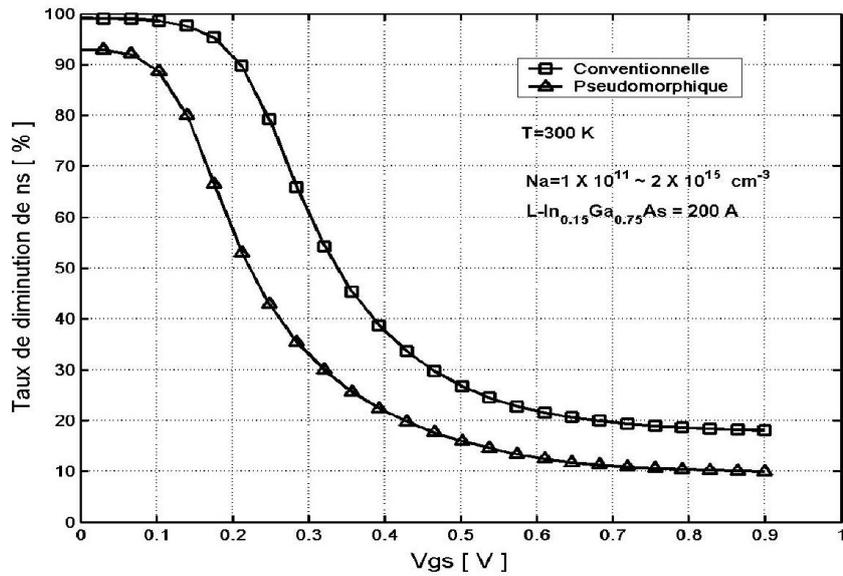


Figure 4-27 Le taux de diminution de la densité 2DEG pour différentes Vgs à deux valeurs de densité d’accepteurs dans le canal du HEMT.

La figure 4-28 présente le décalage de tension de seuil suivant la variation de la densité d’accepteurs. Encore la structure conventionnelle est plus influencée par la densité d’accepteurs.

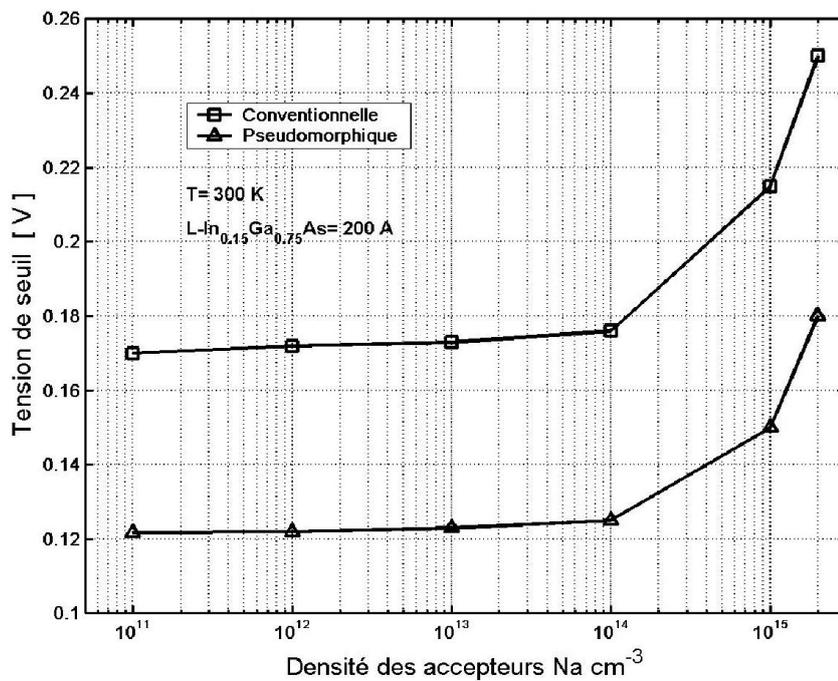


Figure 4-28 Tension de seuil pour différentes densités d’accepteurs.

4.3.2.5 Effet de l'épaisseur de la couche InGaAs sur la commande de charge

La figure 4-29 présente la densité total du canal dans le puit quantique $\text{In}_{0.15}\text{Ga}_{0.75}\text{As}$ en fonction de polarisation V_{gs} de grille pour différentes largeurs de puit. La concentration de dopage et la couche spacer sont gardées fixe. Notre simulation indique que la densité total du canal est très affectée par la largeur de puit InGaAs. Ce comportement est confirmé expérimentalement dans un HEMT à puit quantique par le travail de Sasa et al [60]. Le nombre de sous-bandes occupées est trouvé être changé de un à trois quand la largeur de puit InGaAs accrue de 50 à 700 Å. L'extrapolation de la densité du canal en fonction de V_{gs} vers zéro, donne la tension de seuil de la structure. L'augmentation de la largeur de puit quantique décale la tension de seuil dans le sens négatif comme il est montré dans la figure 4-30. C'est parce que l'hétérojonction inférieure du puits s'éloigne de la grille avec l'augmentation de la largeur de puit. Néanmoins ce décalage est faible dans la mesure où la densité d'accepteurs dans l' InGaAs et GaAs est grande comme il est montré dans la figure 4-25, dans ce cas la densité électronique à l'hétérointerface inférieure InGaAs/GaAs devient faible et augmente considérablement avec la diminution des densités d'accepteurs. La variation dans la tension de seuil est quasi linéaire pour les largeurs de puit inférieur à 200 Å. Pour les largeurs de puit moins que 100 Å, la tension de seuil est à peine affectée.

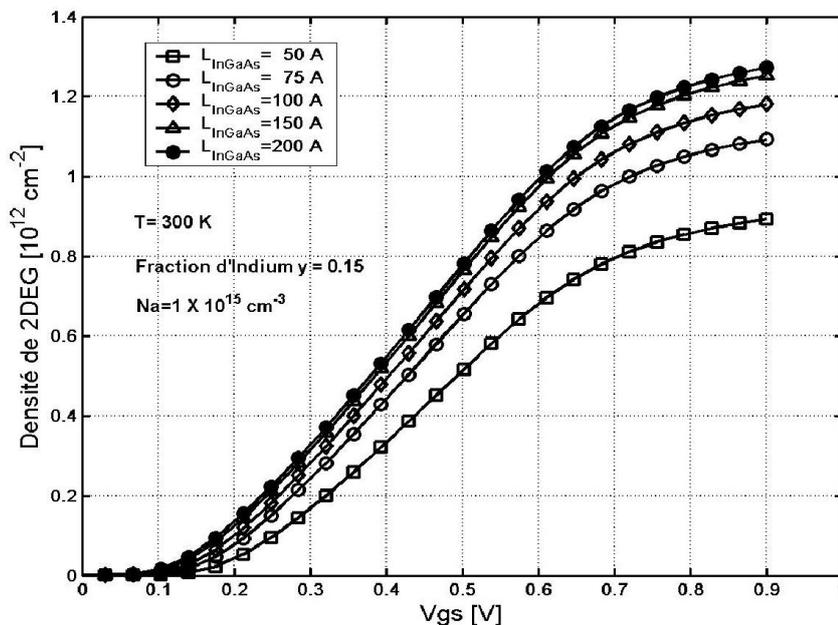


Figure 4-29 La commande de charge pour différentes épaisseurs d' $\text{In}_{0.15}\text{Ga}_{0.75}\text{As}$ du HEMT pseudomorphique.

C'est parce que les deux densités indépendantes de charge de canal situées aux interfaces du fond et de dessus se fusionnent et forment un canal simple, qui apparaît comme une hétérojonction simple conventionnelle [61]. Cependant dans notre cas la densité dans le canal ne présente pas deux pics de densités indépendantes de charge aux interfaces supérieure AlGaAs/InGaAs et inférieures InGaAs/GaAs à cause de la discontinuité faible de cette dernière. Une telle situation est bien claire dans la première application sur la figure 4-6. La densité du canal reste approximativement constante pour des largeurs de puit supérieures à 200 Å.

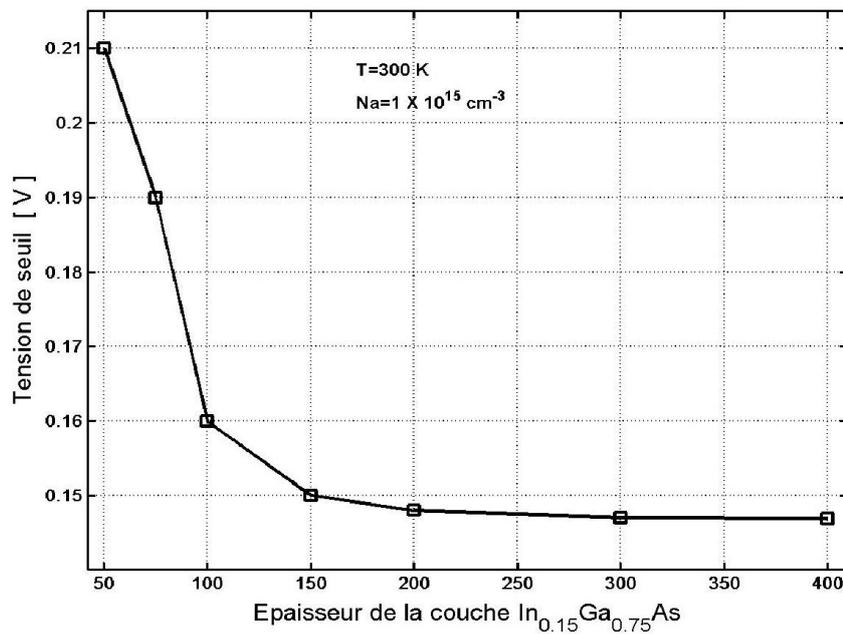


Figure 4-30 Tension de seuil pour différentes épaisseurs de l'In_{0.15}Ga_{0.75}As.

4.3.2.6 Effet de la fraction d'Indium dans l'In_yGa_{1-y}As sur la commande de charge

L'effet de la fraction d'Indium sur la commande de charge est montré sur la figure 4-31 pour une densité d'accepteurs de 10^{15} cm^{-3} et une épaisseur de 200 Å à travers la couche d'InGaAs. La commande de charge est bien améliorée pour les fractions d'Indium supérieures. Ceci est dû au fait que la fraction d'Indium modifie la profondeur de puit via la formule de discontinuité à l'interface AlGaAs/In_yGa_{1-y}As et par suite le nombre des niveaux occupés augmente. L'effet de fraction d'Indium sur la densité total de charge de canal est grand dans la gamme de polarisation supérieure.

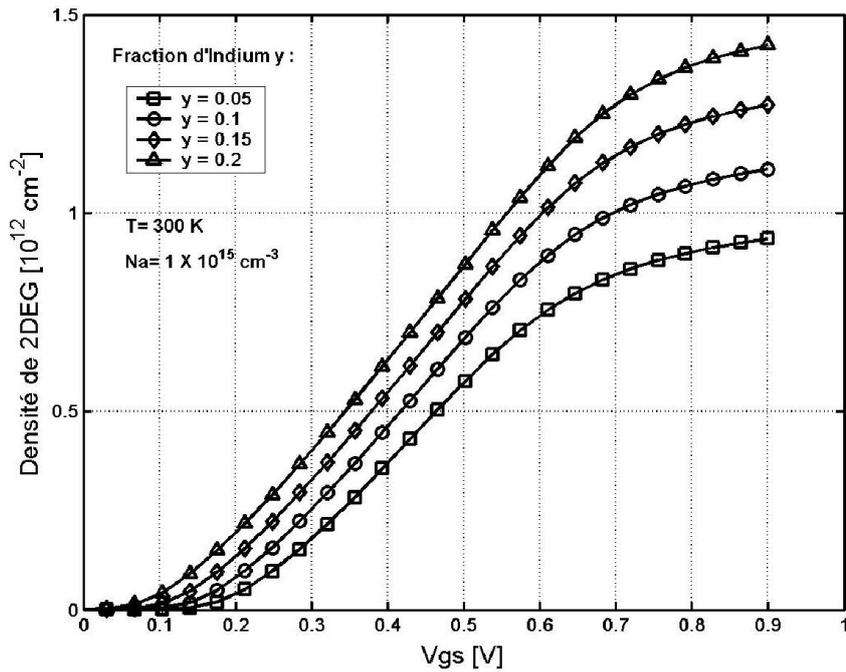


Figure 4-31 La commande de charge pour différentes fractions d'Indium dans l'InGaAs.

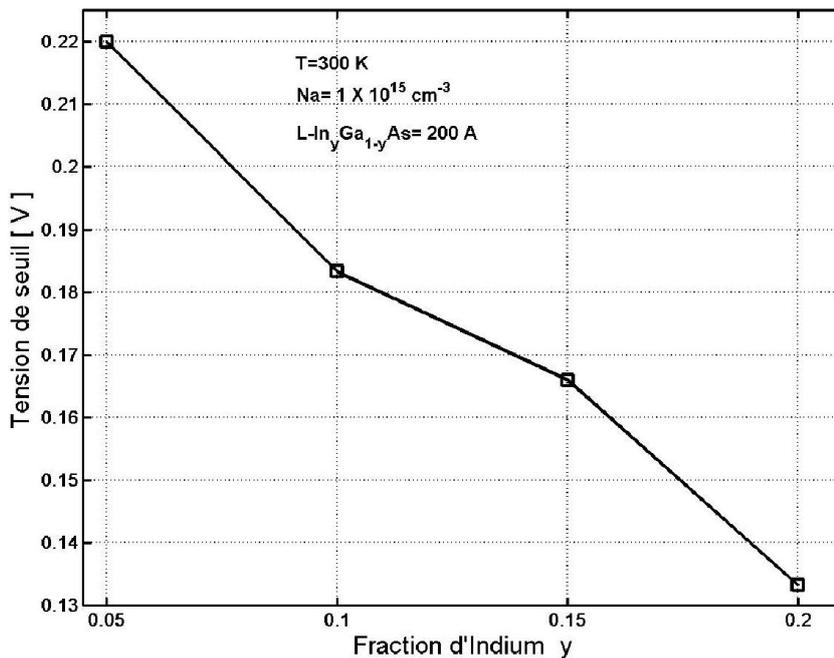


Figure 4-32 Tension de seuil pour différentes fractions molaires d'Indium dans l' $\text{In}_y\text{Ga}_{1-y}\text{As}$.

La figure 4-32 montre l'écart de tension de seuil en fonction de fraction molaire d'Indium à travers la couche $\text{In}_y\text{Ga}_{1-y}\text{As}$. L'écart de tension de seuil varie presque linéairement dans la gamme de fraction d'Indium de 0.05 à 0.2. A $y=0.05$ la tension de seuil est très affectée que pour $y=0.2$, correspondant à un changement dans la bande de conduction de 98.7 meV.

Pratiquement, on ne peut pas dépasser une fraction d'Indium critique, à partir duquel des défauts structuraux (dislocations ...) sont présentes lors de déposition de la couche $\text{In}_y\text{Ga}_{1-y}\text{As}$ sur l' AlGaAs , vient à déformer l'affinité de l'interface. Ces défauts génèrent des contraintes bi-axiales et modifie la distribution énergétique à l'interface par un terme de potentiel. Un tel cas est analysé par José Eduardo et al [54] avec l'introduction de ce terme dans l'équations de Schrödinger.

4.3.2.7 Effet de la Température sur la commande de charge

La température du réseau cristallin affect la densité dans le canal à partir de l'ionisation des donneurs et le remplissage de sous-bande par le niveau de Fermi. La figure (4-33) présente la commande de charge dans le canal pour deux valeurs de température, $T=77$ K et $T=300$ K. Pour la valeur de polarisations de V_{gs} inférieures à 0.55 V, la densité dans le canal est grande à $T=300$ K qu'en $T=77$ K et vis versa dans la gamme restante. La température force la tension de seuil de décaler par 0.06 V dans la structure conventionnelle et 0.04 V pour la structure pseudomorphique quand la température diminue de 300 K à 77 K.

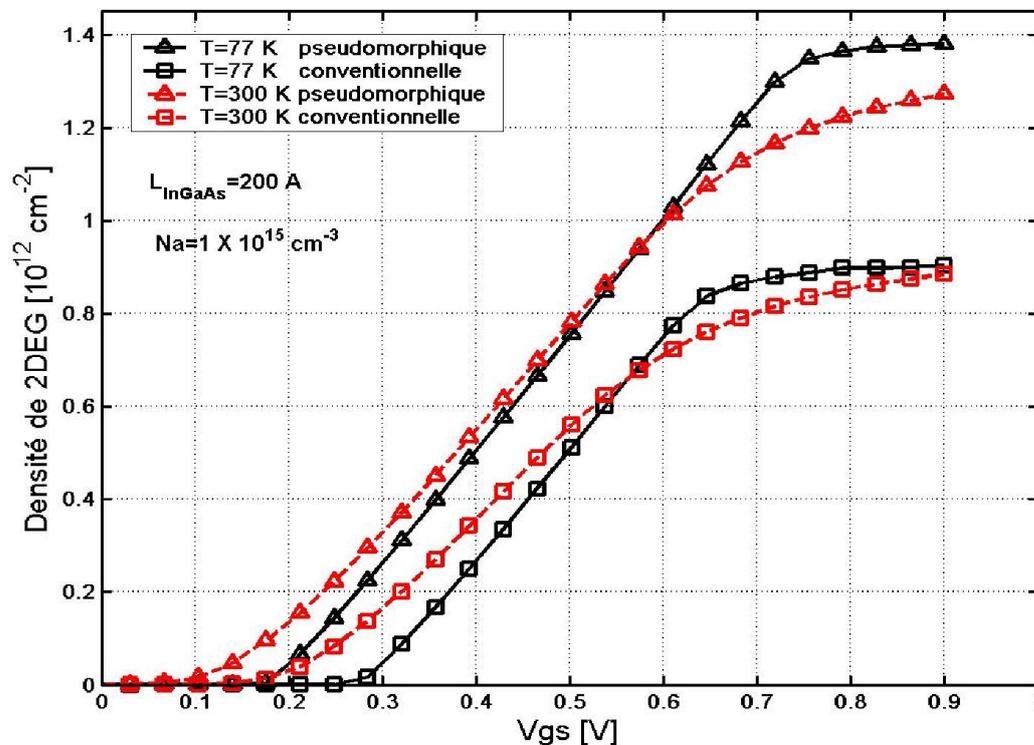


Figure 4-33 La commande de charge pour deux valeurs différentes de température de substrat.

Les résultats numériques précédents de la commande de charge $n_s(V_{gs})$ ou $n_s(E_f)$ pour différents paramètres (densité d'accepteurs, fraction d'Indium etc) peuvent être utilisés dans des modèles analytiques simples [62] puis intégrés dans un logiciel de modélisation de composants comme SPICE [57]. Ce se fait par l'utilisation de l'interpolation des résultats numériques dans des gammes de paramètres où ils demeurent approximativement constants.

4.3.3 Conclusion

Nous avons développé un modèle pour la commande de charge dans des HEMTs basé sur une résolution auto-cohérente des équations de Poisson et de Schrödinger. Basé sur ce modèle, la commande de charge dans le HEMT AlGaAs/InGaAs/GaAs pseudomorphique a été analysée et comparée à celle dans le HEMT AlGaAs/GaAs conventionnel. Nous avons prouvé que la présence d'un canal de puits quantique dans le HEMT pseudomorphique peut réaliser un grand confinement de porteur aussi bien qu'une concentration en porteur élevée. Du comportement calculé de la capacité en fonction de V_{gs} , une évaluation simple des performances de composant a été présentée. Les résultats indiquent le fait que le HEMT avec une grande discontinuité de bande de conduction à l'interface de canal peut améliorer la transconductance, le max de g_m et la fréquence de coupure. Une grande fraction molaire d'Indium est souhaitée afin d'obtenir une grande discontinuité de bande de conduction. Cependant, un canal mince d'InGaAs mène à une diminution de la concentration surfacique en électrons, résultant de la montée de niveau de sous-bande et la commande de charge se rapproche au cas conventionnel. En général, l'épaisseur de couche d'InGaAs doit être plus que 50 Å. L'épaisseur d'InGaAs limite la fraction molaire d'Indium due à l'épaisseur critique pour éviter la formation de dislocation. La commande de charge est sensible pour le niveau de densité d'accepteur dans le canal, nous avons observé que la densité dans le canal pour les deux types de structures est bien améliorée pour les niveaux faibles en accepteurs.

4.4 Troisième application : diode tunnel résonante

Dans cette application on va analyser l'effet tunnel résonant et la caractéristique courant tension dans une diode tunnel résonante en supposant un régime de transport quantique balistique.

4.4.1 Modèle utilisé :

La séquence de couche est représentée dans la figure 4-34. Un niveau de dopage de 10^{18} cm^{-3} est supposé pour les contacts GaAs correspondant à un niveau de Fermi de 0.0418 eV. Les barrières de potentielles sont créés à l'aide de deux matériaux barrières $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$ entourent un matériaux puits à base de l'GaAs. Les paramètres physiques utilisés pour la simulation à savoir les masses effectives et les constants diélectriques ayant les mêmes valeurs adoptées pour la deuxième application. Les conditions aux limites pour l'équation de Poisson sont choisies de types Dirichlet correspond au potentiel appliqué. Pour l'équation de Schrödinger, des électrons sous forme de ondes planes sont injectés des deux contacts (gauche et droit). La température est fixée à 300 K.

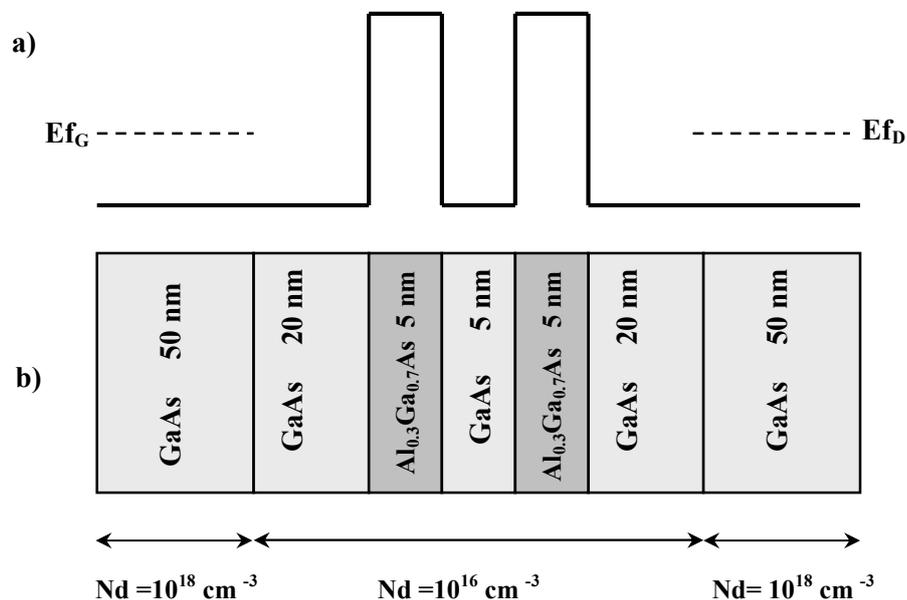


Figure 4-34 : a) Coupe schématique d'une diode tunnel résonante ; b) Bande de conduction sans dopage correspondant

4.4.2 Résultats et discussions

La figure 4-35 montre la bande de conduction en l'absence de polarisation avec la distribution d'électrons correspondante.

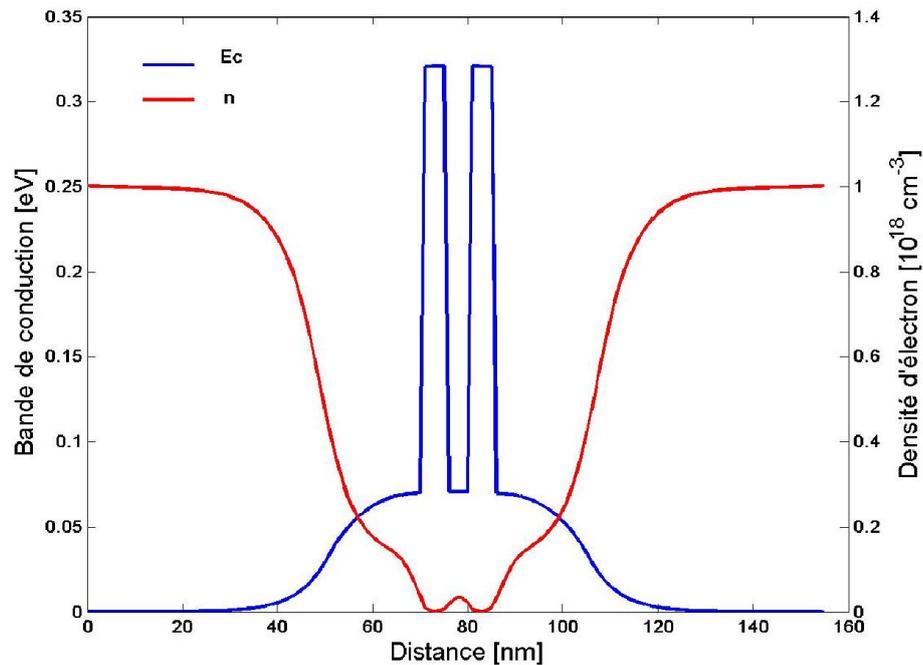


Figure 4-35 Bande de conduction et distribution de charge correspondante dans une diode tunnel résonante à l'équilibre thermodynamique.

De la théorie de De Broglie les ondes électroniques injectées de gauche ou de droite entre en réaction avec les barrières de potentiel et donne naissance à un phénomène d'interférence quantique similaire au phénomène d'interférence optique. La figure (4-36) et (4-37) présente la densité d'états exprimée en terme d'énergie des électrons incidents et de la distance suivant la direction z , respectivement. Sur ces deux figures les taches d'interférence quantique sont bien claires et correspondent à une grande densité d'états (figure 4-36) et grande densité d'électrons (figure 4-37). Cette structure admet un état quasi lié à l'équilibre, il est présenté sur les deux figures précédentes par une tache claire dans le puit quantique entre les deux barrières de potentiel. L'énergie de cet état est de 0.1491 eV. La fonction d'onde d'électrons injectés avec cette énergie traverse les barrières de potentiel sans atténuation ce qui se traduit par des pics dans le facteur de transmission $T(E)$ (figure 4-38). La figure 4-39 montre la fonction d'onde d'un électron injecté d'une énergie très proche de l'énergie de confinement avec deux fonctions d'onde électronique proches de celle-ci, la fonction d'onde électronique tracée en rouge passe par effet tunnel presque sans atténuation avec une énergie de 0.1491 eV, tandis que les deux autres fonctions tracées en bleu subissent une grande atténuation.

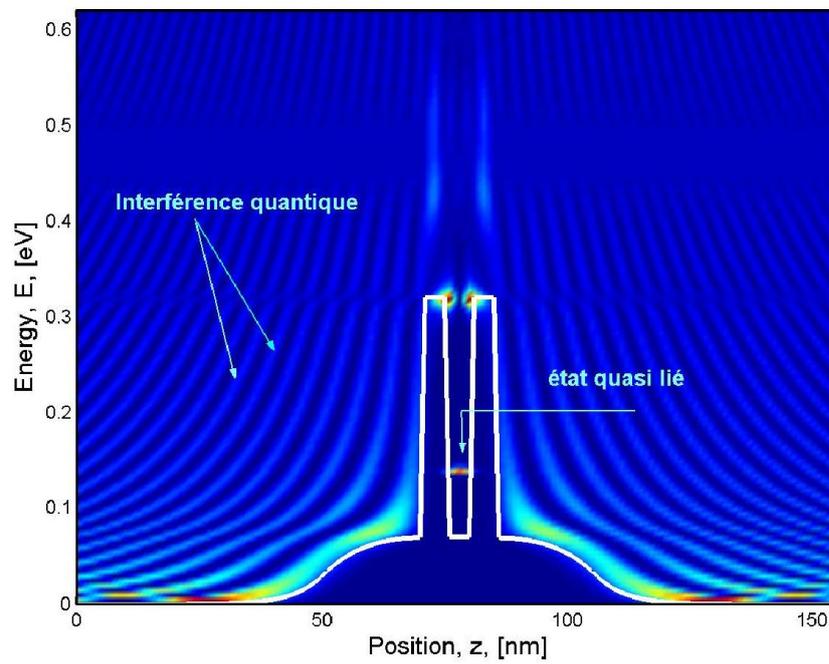


Figure 4-36 Densité d'états tracées en terme de l'énergie d'injection et la distance z dans une diode tunnel résonante à l'équilibre thermodynamique.

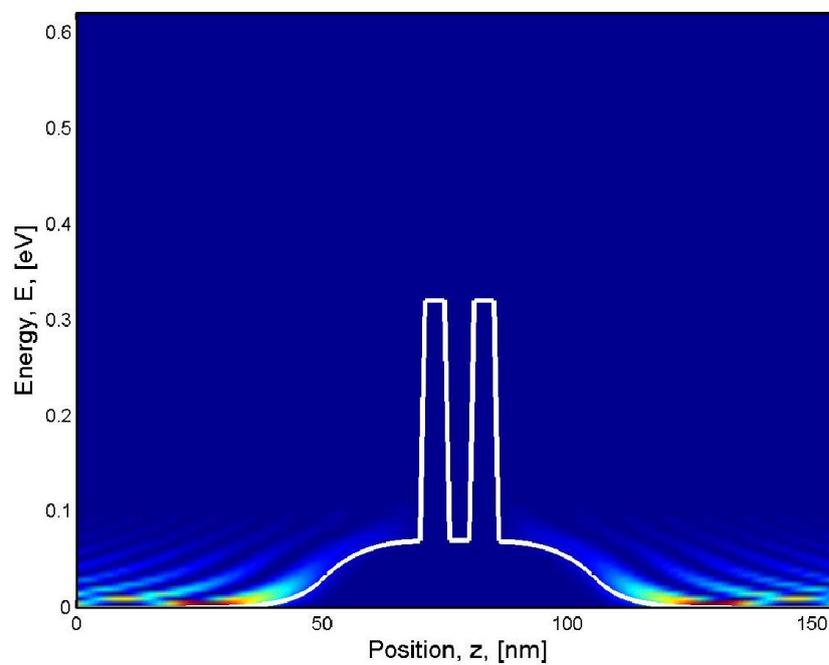


Figure 4-37 Densité d'électrons tracées en terme de l'énergie d'injection et la distance z dans une diode tunnel résonante à l'équilibre thermodynamique.

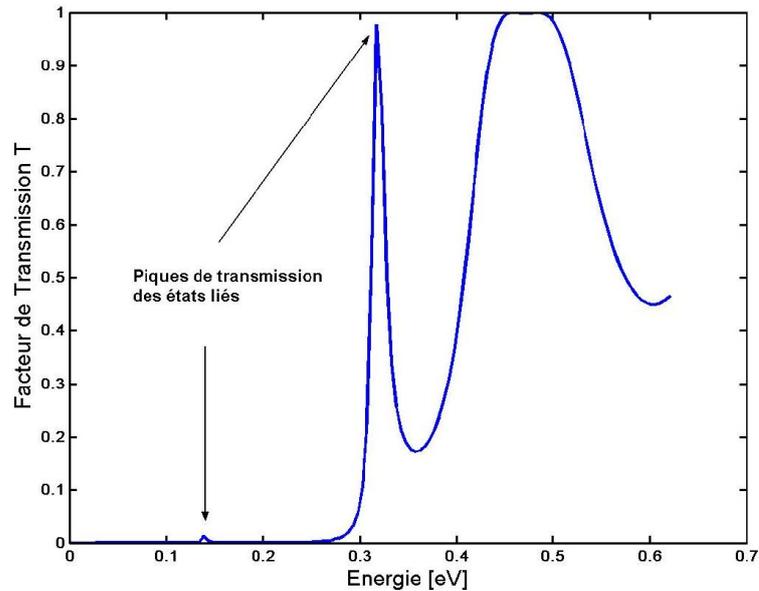


Figure 4-38 Facteur de transmission en fonction d'énergie d'injection dans une diode tunnel résonante à l'équilibre thermodynamique.

Si l'énergie des électrons incidents n'est pas celle d'un état confiné, la transmission $T(E)$ est très faible (figure 1.a). Par contre, si leur énergie correspond à un niveau du puits, ils vont osciller dans le puits jusqu'à finalement passer la seconde barrière. La probabilité de transmission est alors augmentée et proche de 1.

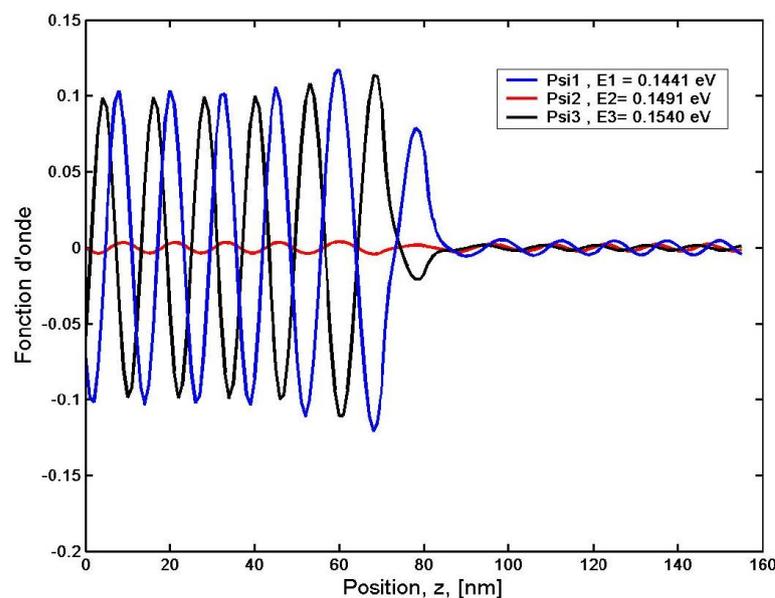


Figure 4-39 fonctions d'onde électronique, incidentes et transmises correspondant à trois énergies d'injection proche d'énergie de confinement montrant l'effet de passage sans d'atténuation.

A tension nulle, le courant tunnel total est nul, mais en présence d'une tension (figure 4-41), les états occupés d'un contact correspondent à des états libres de l'autre et il peut s'établir un courant tunnel. La figure 4-40 montre la caractéristique courant tension $I(V)$ de la diode, cette figure présente un pique de courant pour un tension de 0.2 V ,

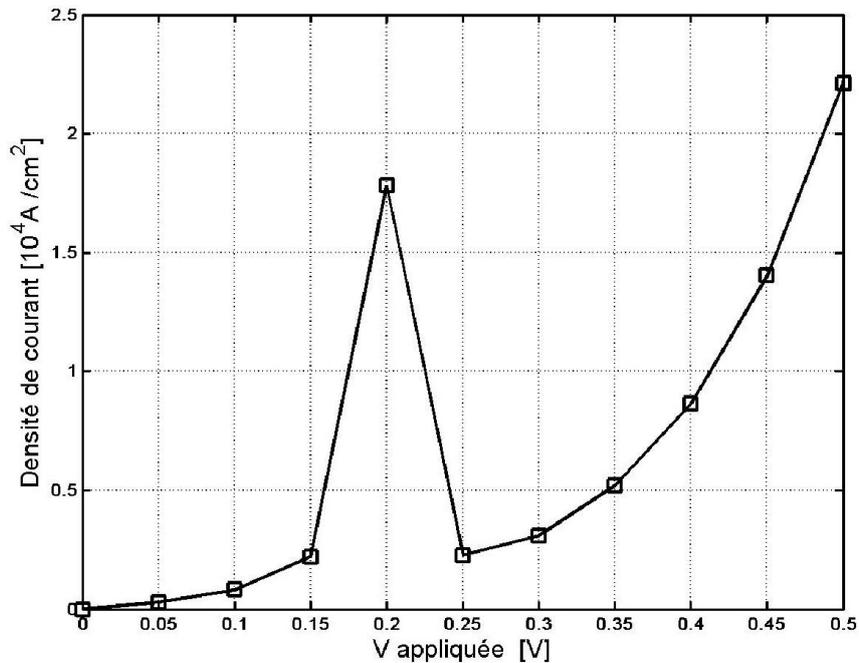


Figure 4-40 Caractéristique courant-tension dans une diode tunnel résonante.

Les figures 4-41 et 4-42 présente l'allure de l'énergie potentielle pour différente valeur de tension de polarisation V et de la distribution d'électrons correspondant.

Si le premier niveau confiné se situe au dessus du niveau de Fermi de contact de gauche, la densité de courant est faible. En augmentant la tension, les états occupés de l'électrode de gauche vont correspondre à l'énergie de confinement, ces états vont avoir une probabilité de transmission très élevée et le courant augmentera rapidement. Le courant maximum ou pic est atteint lorsque le niveau de Fermi correspond à l'énergie de l'état confiné. Au delà de cette valeur, le courant diminue du fait de la baisse du nombre d'états vérifiant la condition de résonance. Lorsque la tension continue d'augmenter, le courant augmente à nouveau par émission thermique au-dessus des barrières. La caractéristique $I(V)$ présente donc une région de résistance différentielle négative.

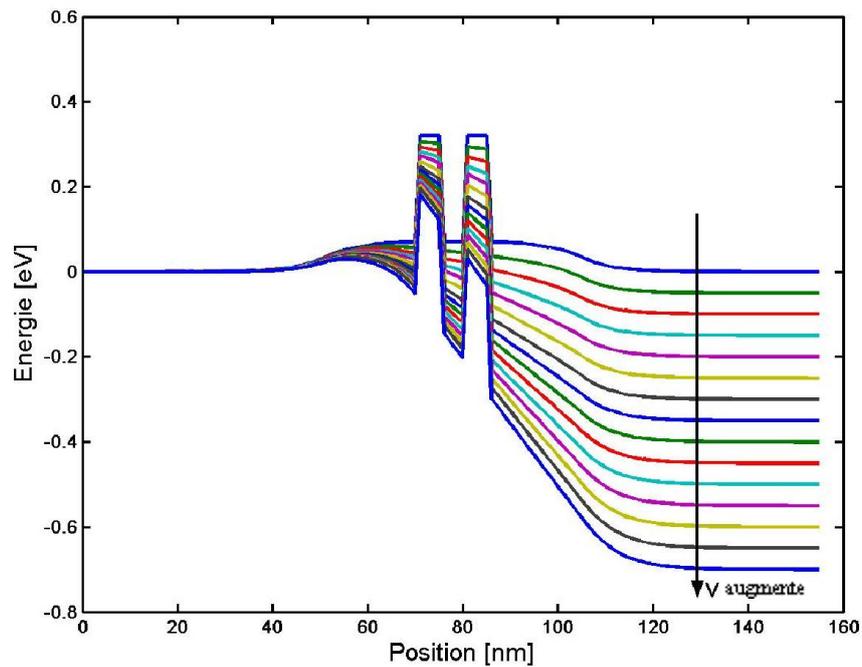


Figure 4-41 Bande de conduction pour différentes valeurs de tension de polarisation V .

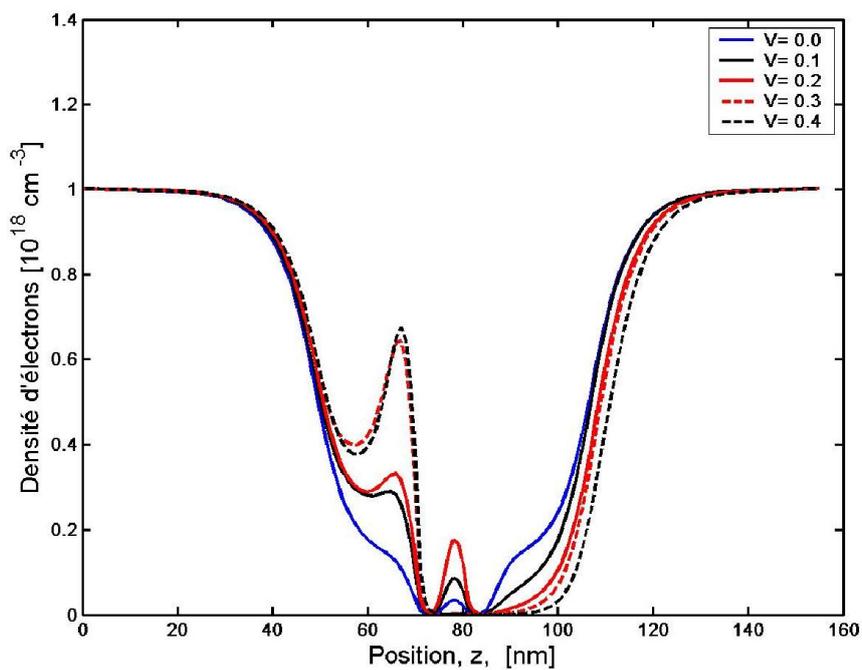


Figure 4-42 Distribution électronique pour différentes valeurs de tension de polarisation V .

La figure 4-43 présente la densité d'états tracée en fonction d'énergie d'injection et la position z à tension de polarisation $V=0.25$ [V].

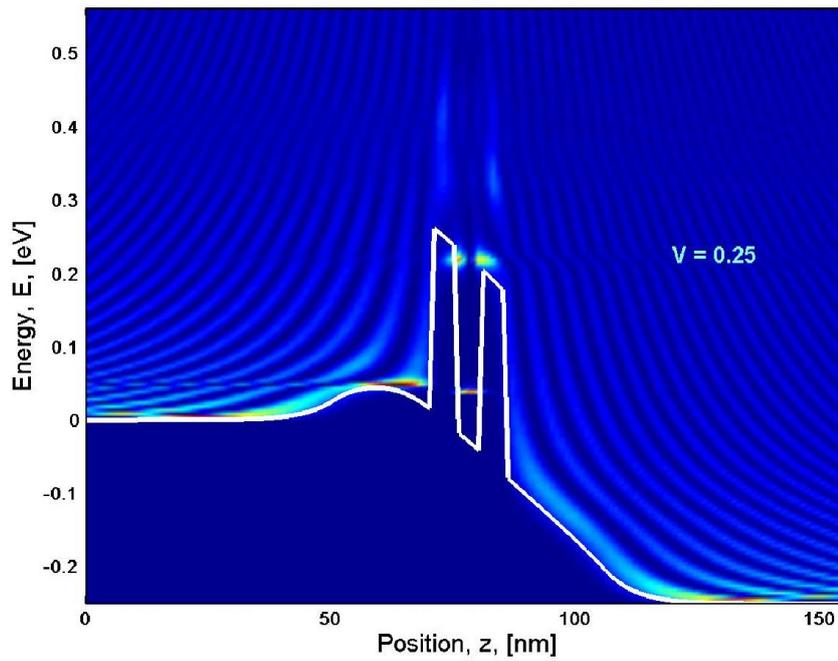


Figure 4-43 Densité d'états tracées en terme de l'énergie d'injection et la distance z dans une diode tunnel résonante sous polarisation de 0.25 V.

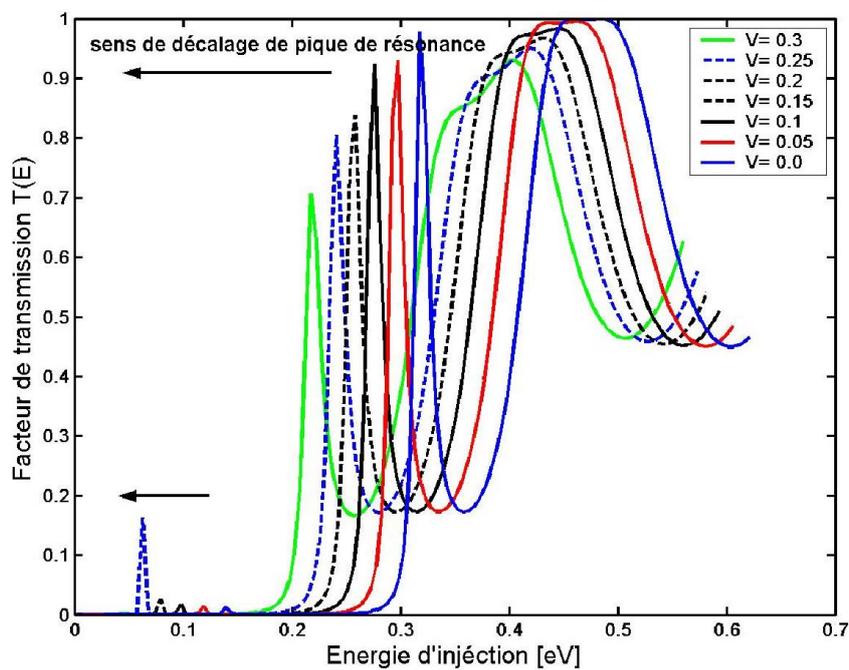


Figure 4-44 Facteur de transmission en terme de l'énergie d'injection pour différentes valeurs de tension de polarisation.

Sous l'effet de polarisation les intensités des pics de résonance diminuent et se décalent dans le sens des énergies décroissantes.

4.4.3 Conclusion

Dans cette application nous avons analysé la caractéristique courant- tension ainsi que l'allure d'énergie potentiel et la distribution de charge dans une diode tunnel résonante à base d'un calcul auto-cohérente de l'équation de Poisson et l'équation de Schrödinger dans un régime de transport quantique balistique. Nous avons montré que la caractéristique courant- tension présente une résistance négative différentielle à l'origine d'un pique de résonance des états quantiques.