

Introduction Générale

Dans les années 60, Richard Feynman a donné un séminaire intitulé "*There is always room at the bottom*" [52] durant lequel il a tracé une "nouvelle" frontière de la science, à savoir la miniaturisation des structures réalisées par l'homme jusqu'à des dimensions de quelques atomes. De nos jours, nous sommes proches d'atteindre cette limite : des atomes uniques ont été observés et manipulés individuellement. Loin d'être seulement une course à la miniaturisation, ce voyage vers les basses dimensions a conduit à d'importantes découvertes pour la physique, en plus des nombreuses avancées technologiques, tout au long des dernières décennies.

A l'origine de ce voyage, la conception, la fabrication (1948) et les applications toujours grandissantes du transistor ont mis en avant la possibilité de contrôler des électrons confinés dans des couches très fines. Ainsi, dans un transistor MOSFET (Metal-Oxide-Semiconductor Field-Effect Transistor) à base de silicium, les électrons sont confinés dans le silicium, à l'interface avec l'oxyde. La possibilité de contrôler la densité d'électrons à l'interface par une électrode métallique fait de cette structure un transistor idéal, à la base de toute l'industrie de la microélectronique.

Dans un MOSFET, les électrons sont libres de se déplacer dans le plan de l'interface mais sont "bloqués" dans la direction perpendiculaire : les électrons sont confinés le long de cette direction. Cette structure représente un cas quasi-idéal d'un système d'électrons bidimensionnel. Cependant ce système possède aussi des limitations. Résidant à l'interface entre un semiconducteur cristallin et un oxyde amorphe, les électrons peuvent être diffusés par les rugosités d'interface ou par les impuretés présentes dans l'oxyde. Cette diffusion perturbe l'observation du comportement intrinsèque des électrons, gouverné seulement par les interactions entre électrons. Les électrons, confinés à l'interface de deux différents semiconducteurs cristallins, devraient constituer un meilleur système. Les hétérostructures semiconductrices à dopage par modulation sont un exemple d'un tel système amélioré.

Les semiconducteurs purs ne conduisent pas l'électricité à basses températures, car tous les électrons sont impliqués dans les liaisons du solide. Pour conduire l'électricité, il faut la présence d'électrons libres dit de conduction. Cela nécessite l'addition d'un nombre restreint d'impuretés (dopage) qui vont donner des électrons au solide. L'introduction d'impuretés de dopage pose néanmoins un problème. Ces impuretés, après avoir libéré leurs électrons, constituent des centres chargés qui diffusent les électrons libres introduits. Dans un semiconducteur 3D, ce problème reste insoluble, mais pour un système bidimensionnel, on peut séparer les électrons mobiles des impuretés ionisées en les confinant dans des régions différentes, mais voisines. En effet, ces régions doivent être proches l'une de l'autre pour permettre le transfert des électrons, mais suffisamment éloignées pour limiter fortement la diffusion induite par les centres chargés. L'épitaxie par jets moléculaires (EJM) fournit les outils pour réaliser une telle structure.

L'EJM est une technique d'évaporation sous ultravide permettant le dépôt de couches minces de semiconducteurs de très bonne qualité. Inventée vers la fin des années 60 par Alfred Cho des laboratoires Bell, cette technique constitue actuellement la base d'une large industrie de dispositifs électroniques et photoniques de haute performance.

Le principe du dopage par modulation a été développé pour les structures à base d'arséniure de gallium (GaAs) en 1977 par quatre chercheurs travaillant aux laboratoires Bell (figure 1) : une fine couche de GaAs est déposée par EJM entre deux couches plus épaisses d'Al-GaAs. Dans la couche barrière d'AlGaAs, des dopants silicium sont introduits durant la croissance à une distance de l'ordre de 100 nm de l'interface GaAs/AlGaAs. Chaque atome de silicium possède un électron de plus que l'atome de gallium auquel il se substitue dans le solide. Il perd alors facilement cet électron supplémentaire qui devient libre de se déplacer dans le solide.



Figure 1 : Les inventeurs du procédé de dopage par modulation, réunis en 1978 autour d'un prototype de bâti d'épitaxie par jets moléculaires, dans les laboratoires Bell. De gauche à droite : Willy Wiegmann, Art Gossard, Horst Stormer and Ray Dingle.

On obtient alors un confinement des électrons dans la couche de GaAs, à l'interface Al-GaAs/GaAs, comme le confinement des électrons à l'interface semiconducteur-oxyde d'un transistor MOSFET. Par contre, on a ainsi réalisé une séparation spatiale des électrons libres et des impuretés ionisées fixes localisées dans la barrière. Ces hétérostructures possèdent l'avantage (par rapport aux transistors MOSFET à base de silicium) d'avoir une interface entre deux semiconducteurs de grande pureté, contrôlée à l'échelle atomique. Les transistors basés sur le dopage par modulation (transistors HEMT pour High Electron Mobility Transistor) sont aujourd'hui les transistors dont le bruit est le plus faible, et qui présentent les plus hautes fréquences et sont utilisés notamment dans la téléphonie mobile. En fait, une partie importante de la physique sur les gaz d'électrons bidimensionnels pourrait être réalisée sur des transistors de téléphones portables, s'ils étaient refroidis à basse température ($\sim 2\text{K}$) et placés sous champ magnétique.

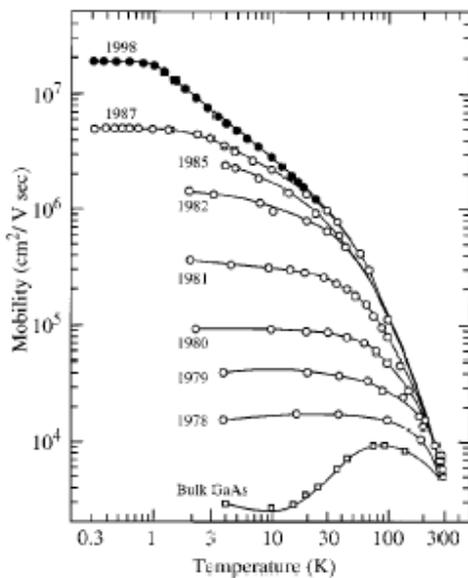


Figure 2 - Mobilité des électrons bidimensionnels dans une hétérostructure GaAs/AlGaAs dopée par modulation, en fonction de la température. A basses températures, la mobilité est limitée par la diffusion par les impuretés et les défauts dans le matériau. Une mobilité de $2 \cdot 10^7 \text{ cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$ correspond à peu près à 0.2 mm de "vol" balistique pour les électrons [51].

La mobilité électronique est communément considérée comme la mesure de la qualité d'un système bidimensionnel. A haute température, la mobilité est limitée essentiellement par les vibrations des atomes (phonons). A basse température, où la diffusion due aux phonons est négligeable, la mobilité des hétérostructures GaAs/AlGaAs actuelles dépasse d'un facteur 1 000 celle des structures MOSFET à base de silicium ! De tels systèmes représentent le meilleur exemple d'un système métallique bidimensionnel pratiquement libre de toutes les diffusions induites par le matériau hôte (figure 2). Ceci est mesuré par le libre parcours moyen de l'électron avant qu'il ne diffuse. Dans ces

hétérostructures, il atteint 0.2 mm, ce qui signifie que l'électron de conduction "survole" un million d'atomes du semiconducteur avant de diffuser.

Enfin, à partir de la structure 2D, des systèmes de géométrie plus complexe sont obtenus par diverses méthodes de lithographies (électroniques ou optiques). Cette fois-ci, les électrons sont confinés latéralement, dans une ou plusieurs directions: on parle alors de système 1D ou 0D selon les cas.

L'objet de ce travail est d'étudier numériquement les propriétés électroniques d'un gaz d'électrons bidimensionnels (l'énergie potentielle et d'autres propriétés) confiné par un puits de potentiel dans un transistor à effet de champ à grande mobilité. Pour comprendre le mode de confinement, on est amené à résoudre l'équation de Poisson et de Schrödinger couplées d'une manière auto-cohérente.

Notre travail est organisé comme suit:

Le premier chapitre, présente une généralité sur l'hétérostructure semiconductrice à l'échelle nanométrique. Ensuite on décrit quelques notions de base sur les propriétés électroniques particulières des puits, fils et boîtes quantiques et on termine par présenter quelques applications des hétérostructures à savoir les transistors à effet de champ à grande mobilité et les diodes tunnels résonantes en citant leurs principes de fonctionnement.

Dans le deuxième chapitre, on décrit les modèles mathématiques des équations gouvernant les comportements des porteurs de charge en terme de confinement quantique. Ces modèles sont représentés principalement par l'équation de Poisson et l'équation de Schrödinger. Ce chapitre sera terminé par quelques idées de base sur le transport électronique quantique dans la structure de basse dimensionnalité en terme de fonction d'onde et probabilité de transmission.

Les équations différentielles du chapitre précédent ne présente pas des solutions analytiques que dans des cas plus simples, alors on doit faire recours à des méthodes d'analyse numérique à savoir en particulier la méthode des Volume Fini pour la résolution des ces équations aux dérivés partielles, l'équation de Poisson et l'équation de Schrödinger compte tenu des conditions aux limites appropriés. C'est l'objectif du troisième chapitre.

Enfin, l'objet de quatrième chapitre est de présenter quelques applications du modèle élaboré dans les chapitres précédemment. La structure nanométrique qu'on va présenter est la structure à puit quantique. En tenant compte des conditions aux limites et des hypothèses énoncées dans le chapitre 2 et 3, nous allons faire plusieurs développements qui vont permettre d'évaluer la densité des porteurs libres, l'énergie potentielle et les fonctions d'onde sur l'application de ces concepts pour l'investigation des hétérostructures présentant un gaz bidimensionnel des électrons sous plusieurs conditions. Et enfin nous tirons une conclusion générale.