

III.1. Introduction

Le fonctionnement du transistor HEMT (High Electron Mobility Transistor) repose sur deux éléments clés : l'empilement vertical communément appelé capacité hétérojonction auquel on ajoute une zone de source et de drain dans la découpe horizontale afin de faire circuler un courant dans le dispositif. Ainsi, avant tout développement technologique avancé, il est important de comprendre dans un premier temps les mécanismes qui régissent le fonctionnement de l'hétérojonction avant de pouvoir étudier le transistor. Dans cette partie, nous nous proposons donc d'étudier les phénomènes mis en jeu dans l'hétérojonction de type AlGaAs/GaAs

III.2. - Modélisation des hétérostructures

III.2.1 - Réaction de charge d'espace[20]

Une hétérostructure créée par juxtaposition d'un matériau à grand gap dopé et d'un matériau à plus faible gap, également dopé ou non intentionnellement dopé (n. i. d.), donne naissance à un échange électronique entre les matériaux, qui se produit de façon à atteindre un équilibre thermodynamique. Ce dernier, caractérisé par un niveau de Fermi constant à travers la structure, provoque une désertion des porteurs du matériau à grand gap et, par voie de conséquence, un enrichissement du matériau à petit gap : c'est la réaction de charge d'espace.

La (figure III.1) représente l'évolution schématique du bas de bande de conduction d'une hétérostructure tenant compte de la réaction de charge d'espace. Ainsi, l'existence d'un puits de potentiel à droite de l'interface de dimension caractéristique inférieure à la longueur de de Broglie de l'électron conduit localement à la discrétisation du domaine d'énergie. La détermination des densités de charges nécessite alors la prise en compte du confinement et l'utilisation d'un calcul quantique. Les variations des potentiels électrostatique et cristallin à l'échelle macroscopique impliquent la résolution de l'équation de Schrödinger pour déterminer les états propres et les densités de probabilité électronique sur l'espace.

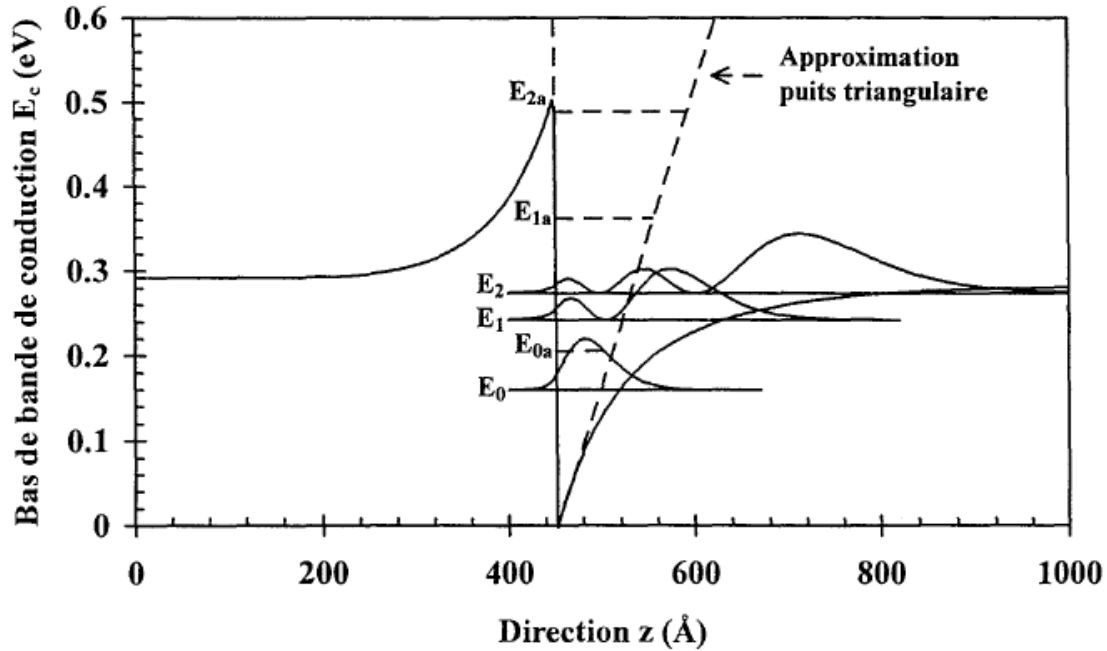


figure III.1: Profil de bas de bande de conduction d'une hétérojonction AlGaAs/GaAs (trait plein), et approximation à un puits triangulaire (trait pointillé) [20].

III.2.1.1. - Fonction enveloppe[20]

Dans le cas général, l'étude de la quantification en énergie revient à déterminer les solutions stationnaires de l'équation de Schrödinger, qui dans l'espace réel tridimensionnel s'écrit:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0} \Delta^2 \Psi + V(r) = E \Psi \quad (\text{III.1})$$

Dans laquelle m_0 est la masse de l'électron libre, $V(r)$ le potentiel cristallin à l'échelle atomique, E l'énergie de l'électron, et Ψ la fonction d'onde qui lui est associée.

Dans le cas d'un matériau volumique, les solutions de cette équation aboutissent aux relations de dispersions générant la structure de bandes du matériau.

III.2.1.2 - Définition

Considérons la structure composée d'un matériau à faible gap intercalé entre deux matériaux à grand gap dont l'évolution schématisée du bas de bande de conduction, qui ne prend pas en compte la réaction de charge d'espace, est représentée par la figure III.2.

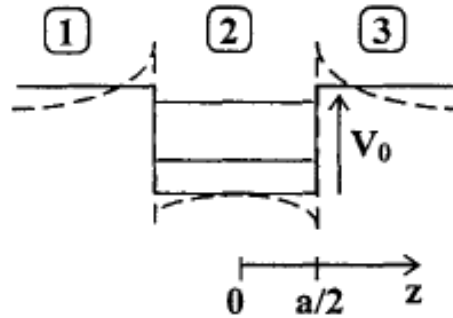


figure III.2: Profil de bas de bande de conduction d'une double hétérostructure avec prise en compte de la réaction de charge d'espace (trait pointillé), ou dans l'approximation du puits rectangulaire (trait plein) [20].

Les électrons se trouvant dans le puits de potentiel se déplacent librement dans les directions parallèles aux couches semiconductrices, mais ne peuvent s'échapper du puits par effet tunnel à travers les barrières de potentiel formées par les bandes d'énergie interdite latérales de largeurs supposées infinies. On parle alors d'un confinement strict et nous avons l'apparition de niveaux d'énergie discrets correspondant à des états quantiques liés. Cette restriction du transport électronique à deux dimensions est à la base de très nombreuses applications dans le domaine de la microélectronique.

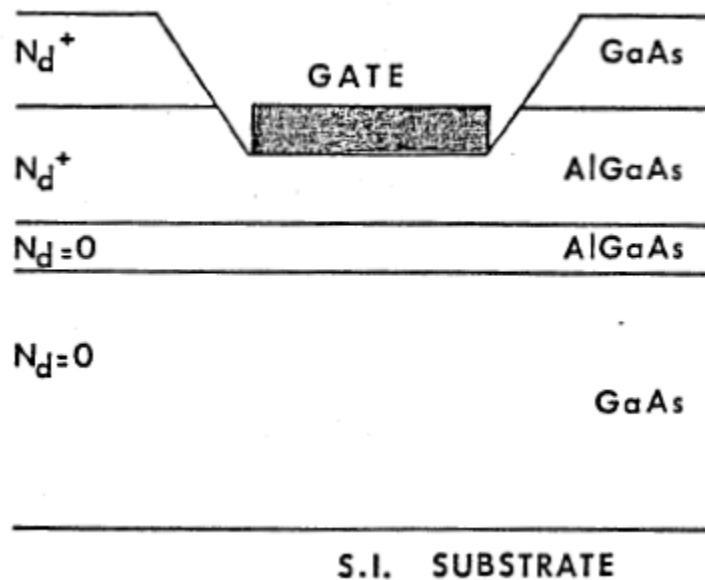
III.2.2 Structure HEMT

Les transistors HEMT comme il a été cité plus haut ont pour principe, d'utiliser le confinement des électrons dans un puits de potentiel afin de créer, par accumulation de porteurs, un gaz bidimensionnel (gaz 2D). Deux principales caractéristiques sont recherchées :

- une densité de charges accumulées dans le puits élevée de manière entre autre à augmenter la puissance d'utilisation du composant.
- une mobilité électronique importante et bien supérieure à celle observée dans un matériau volumique. Ici il s'agit d'augmenter la vitesse des porteurs et donc la fréquence d'utilisation.

La première étude expérimentale de ces composants date de 1980, où Delagebeaudeuf et al ont obtenu des caractéristiques prometteuses en vue de l'utilisation de ces transistors en micro-onde ou logique très rapide. La structure comportait une hétérostructure simple AlGaAs(dopée N_n^{++})/GaAs (non dopée) dont le profil de bas de bande de conduction peut correspondre à celui précédemment représenté.

La figure III.3 présente la structure »de base" d'un TEGFET. La couche active est constituée d'une couche superficielle de GaAs très dopée, d'une couche de AlGaAs très dopée, d'une couche de non dopée (Le Spacer") et enfin de la couche de GaAs non intentionnellement dopée.



Figure(III-3) : structure d'un TEGFET[21]

Un point très important de cette structure consiste donc en l'utilisation d'une hétérojonction pour effectuer un transfert d'électrons d'un matériau fortement dopé vers un matériau non intentionnellement dopé de plus grande affinité électronique.

III.2.3. Modélisation

Avant de présenter le modèle numérique général, nous allons envisager les divers degrés d'approximation que l'on peut envisager pour prendre en compte les effets de quantification et dégager ainsi les principaux phénomènes physiques à la base du transport quantique.

III.2.3.1 Approximation de l'hétérojonction simple

En ce qui concerne l'accumulation de porteurs à l'interface d'une hétérojonction simple, l'approximation la plus couramment rencontrée est celle du puits triangulaire [22]. Elle est à la base de relations phénoménologiques intervenant dans l'étude du transport électronique dans les TEGFET [23].

Comme le montre la figure III.1 (pointillés), au matériau à grand gap correspond, à gauche de l'interface, un mur de potentiel infini. Dans le second matériau, la réaction de charge d'espace est approximée par une droite dont la pente correspond au champ électrique maximal de l'hétérojonction situé à l'interface. La résolution analytique de l'équation de Schrödinger mène à une fonction enveloppe de la forme :

$$\varphi_i(z) = A_i \left\{ \left(\frac{2m_{e\perp}^* qF}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{3}} \left(z - \frac{E_i}{qF} \right) \right\} \quad (\text{III.2})$$

pour le niveau quantique i d'énergie référencée par rapport au fond du puits :

$$E_i \approx \left(\frac{\hbar^2}{2m_{e\perp}^*} \right)^{\frac{1}{3}} \left\{ \frac{3}{2} \left(i + \frac{3}{4} \right) \pi qF \right\}^{\frac{2}{3}} \quad (\text{III.3})$$

Où A_i est la fonction d'Airy d'ordre i et F est le champ électrique considéré.

D'autres modèles utilisent des méthodes variationnelles [22] ou introduisent des évolutions paraboliques du puits de potentiel [24]. Brièvement rappelons que l'approximation du puits triangulaire sous-évalue la charge accumulée dans le puits. Ceci s'explique par le décalage vers des énergies supérieures des niveaux quantiques (figure III.1) qui est induit non seulement par la croissance du potentiel à droite de l'interface plus rapide que celle du puits réel, mais aussi par la

Considération d'un mur de potentiel infini à gauche de celle-ci. Il peut être alors nécessaire de considérer une variation parabolique du potentiel qui montre un meilleur accord en comparaison avec les résultats d'un calcul plus rigoureux [24].

III.3.1.2. Approximation de la double hétérojonction

Dans le cas de la double hétérojonction, le confinement électronique peut être étudié en considérant un puits de potentiel carré. Comme le montre la figure III.2, cette approximation est valable si la réaction de charge d'espace est moindre, en particulier pour des puits de faibles dimensions.

L'expression de la fonction enveloppe est alors donnée dans chaque zone distincte par :

$$\begin{aligned}\varphi_1(z) &= B_1 \exp(\alpha z) \\ \varphi_2(z) &= A_2 \exp(ikz) + B_2 \exp(-ikz) \\ \varphi_3(z) &= B_3 \exp(-\alpha z)\end{aligned}\tag{III.4}$$

$$\text{avec } \alpha = \sqrt{\frac{2m_{e\perp}^* (V_0 - E)}{\hbar^2}} \quad \text{et} \quad k = \sqrt{\frac{2m_{e\perp}^* E}{\hbar^2}}$$

Les niveaux quantiques sont alors déterminés graphiquement ou numériquement pour les énergies vérifiant les relations :

$$\begin{aligned}\left| \cos\left(\frac{ka}{2}\right) \right| &= \frac{k}{k_0} \quad \text{pour} \quad \tan\left(\frac{ka}{2}\right) > 0 \\ \text{ou} \quad \left| \sin\left(\frac{ka}{2}\right) \right| &= \frac{k}{k_0} \quad \text{pour} \quad \tan\left(\frac{ka}{2}\right) < 0\end{aligned}\tag{III.5}$$

$$\text{avec } k_0 = \sqrt{\frac{2m_{e\perp}^* V_0}{\hbar^2}}$$

Rappelons qualitativement qu'une diminution de la largeur du puits (a), ou l'augmentation de la hauteur des barrières (V_0), a pour conséquence un décalage des niveaux quantiques vers des énergies supérieures ainsi qu'une séparation des niveaux plus prononcée.

D'après ces différentes relations analytiques et suivant la structure étudiée, la densité de charges libres $n(z)$ peut être approximée à partir des fonctions d'ondes et des niveaux quantiques ainsi calculés. Les approximations énoncées ci-dessus sont très utiles pour les études préliminaires des phénomènes quantiques dans les structures semiconductrices, et donnent souvent des évolutions qualitatives intéressantes sur les ordres de grandeurs des paramètres caractéristiques des systèmes étudiés. Cependant, elles échouent dès que le confinement intervient dans des systèmes plus complexes, dans lesquels par exemple la réaction de charge d'espace est prépondérante. Il est alors nécessaire d'envisager une modélisation numérique de l'équation de Schrödinger.

III.3.2. - Modèle numérique de l'hétérojonction AlGaAs/GaAs[25]

III.3.2.1Présentation du code

Le code de simulation numérique est basé sur la résolution numérique auto-cohérente des équations de Poisson et de Schrödinger.

Dans cette étude, nous allons considérer que la variation du potentiel électrostatique de notre structure varie en fonction de la seule dimension y (1D). Le dispositif AlGaAs/ GaAs sera donc, d'un point de vue numérique, réduit à une seule ligne de points et toutes les équations seront résolues en 1D dans cette direction. Après avoir défini la structure, c'est-à-dire le choix du semiconducteur, son niveau de dopage et son type, le choix du type de calcul (classique ou quantique)..., les initialisations des différentes variables et les calculs préliminaires nécessaires à la résolution des équations sont effectuées. Cette étape permet entre autres de définir les données intrinsèques de la structure telles que la tension de le niveau de Fermi dans le semiconducteur Φ_F , les différentes masses effectives selon la direction et les matériaux choisis. Ensuite, dans le cas classique, seule l'équation de Poisson est résolue numériquement selon la méthode de Newton-Raphson alors que dans le cas quantique, nous procédons à la résolution auto-cohérente des équations de Poisson et de Schrödinger. Une fois le critère de convergence atteint, le code calcule et écrit les différents résultats obtenus tels que le potentiel électrique, le diagramme de bande, les niveaux d'énergie, la concentration de porteurs.

III.3.2. Equation de Poisson 1D[25]

Les lois de l'électrostatique permettent d'étudier l'effet des charges électriques dans un système où un potentiel électrique est appliqué. En particulier, l'équation de Poisson relie la distribution de charges locales au potentiel électrostatique par la formule suivante (en 1D) :

$$\frac{d}{dy} \left[\epsilon_r(y) \frac{d}{dy} \right] \Phi(y) = - \frac{q}{\epsilon_0} \rho(y), \quad (\text{III.6})$$

où ϵ_0 est la permittivité du vide, q est la charge élémentaire de l'électron, ϵ_r est la permittivité relative (ou constante diélectrique) du matériau, Φ est le potentiel électrique et ρ est la distribution de charge d'espace. Pour traiter de manière exacte la structure dans son intégralité, chaque variable dépendante de la position est identifiée, en particulier la constante diélectrique qui dépend bien évidemment du matériau donc de la position.

Les charges dans le semiconducteur sont calculées en prenant en compte les charges mobiles (électrons et les trous) et les charges fixes localisées sur les dopants (accepteurs et donneurs) tous ionisés ; Pour respecter la condition d'électro neutralité du matériau, le total des charges, positives (p et N_D) et négatives (n et N_A), doit être nul et est donné par l'équation :

$$\rho(y) = p(y) + N_D(y) - n(y) - N_A(y) \quad (\text{III.7})$$

Où $p(y)$ et $n(y)$ correspondent, respectivement, à la densité de trous dans la bande de valence et à la densité d'électrons dans la bande de conduction. $N_D(y)$ et $N_A(y)$ sont les concentrations d'impuretés de type donneurs ionisés et accepteurs ionisés et correspondent aux profils de dopage dans le semiconducteur selon la direction y . L'équation (3.7) peut être simplifiée selon deux critères :

- le profil du dopage dans le semiconducteur est constant dans la direction y : $N_D(y) = N_D$ et $N_A(y) = N_A$.
- selon le type dopage, l'une des deux concentrations d'impuretés (N_A ou N_D) peut être négligée devant l'autre:

- semiconducteur dopé de type p : $N_A \gg N_D$
- semiconducteur dopé de type n : $N_D \gg N_A$

III.3.2.3. Le cas classique[25]

Dans le cas du calcul classique, les porteurs de charge (électrons et trous) sont libres de se déplacer dans toutes les directions de l'espace dans leur bande permise (bande de conduction et bande de valence, respectivement), on parle alors de *gaz de porteurs tridimensionnelle (3D)*. Dans la statistique de Fermi-Dirac, valable pour tous les régimes de fonctionnement de la capacité MIS[†], le calcul de la concentration des porteurs de charge dans un gaz 3D est évalué en intégrant sur toute la bande permise le produit du nombre d'états disponibles par la probabilité d'y trouver un porteur:

$$n = \int N_C(E) f(E) dE \quad (III.8.a)$$

$$p = \int N_V(E) [1 - f(E)] dE \quad (III.8.b)$$

où $N_C(E)$ et $N_V(E)$ sont les densités d'états 3D dans la bande conduction et de valence respectivement, $E_{C,min}$ est le bas de la bande de conduction, $E_{V,max}$ est le haut de la bande de valence et $f(E) = 1 / (1 + e^{(E - E_f) / kT})$ est la fonction de Fermi et représente la probabilité d'occupation d'un électron au niveau d'énergie E .

les concentrations d'électrons dans la bande de conduction et de trous dans la bande de valence sont données par:

$$n(y) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} N_C \mathfrak{I}_{1/2} [\eta_e(y)], \quad (III.9.a)$$

$$p(y) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} N_V \mathfrak{I}_{1/2} [\eta_h(y)], \quad (III.9.b)$$

où N_C et N_V sont les densités d'états intégrées sur toute la gamme d'énergie de la bande de conduction et de la bande de valence, respectivement. Dans le cadre de l'approximation des bandes paraboliques, N_C et N_V sont égales à :

$$N_C = 2 \left(\frac{2\pi k T m_e^{3D}}{h^2} \right)^{3/2}, \quad (\text{III.10.a})$$

$$N_V = 2 \left(\frac{2\pi k T m_h^{3D}}{h^2} \right)^{3/2}, \quad (\text{III.10.b})$$

avec k : la constante de Boltzmann ; T : la température du réseau ; h : la constante de Planck
 m_e^{3D} : la masse effective de densité d'états 3D des électrons de la bande de conduction ; m_h^{3D} :
la masse effective de densité d'états 3D des trous de la bande de valence. Dans les équations
(III.9), $\mathfrak{F}_{1/2}$ est l'intégrale de Fermi d'ordre $1/2$.

$$\mathfrak{F}_{1/2}(x) = \int_0^\infty \frac{e^{1/2}}{1 + e^{\varepsilon - x}}. \quad (\text{III.11})$$

Dans l'approximation des bandes paraboliques, le potentiel électrique 1D $\Phi(y)$ est
relié à l'énergie potentielle des électrons $E_C(y)$ et des trous $E_V(y)$ par les équations

$$E_C(y) = [-q\Phi(y) + \Delta E_C], \quad (\text{III.12.a})$$

$$E_V(y) = [-q\Phi(y) - \Delta E_V], \quad (\text{III.12.b})$$

Où ΔE_C et ΔE_V sont les décalages de bande entre les bandes de conduction et de valence
des semiconducteurs en contact

III.3.2.4. Équation de Schrödinger 1D[25]

Dans l'approximation de la masse effective et en traitant le problème indépendamment du temps,
l'équation de Schrödinger 1D est alors résolu dans toute la structure grâce à :

$$-\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dy} \left[\frac{1}{m^{\text{conf}}(y)} \frac{d}{dy} \right] \Psi(y) + V(y)\Psi(y) = E\Psi(y), \quad (\text{III.13})$$

où m^{conf} est la masse effective de confinement, Ψ est l'enveloppe de la fonction d'onde, V est
l'énergie potentielle et E correspond au niveau d'énergie. Toutes ces variables sont dépendantes
de la position y , direction perpendiculaire à l'interface GaAlAs/GaAs.

Pour la bande de conduction, l'équation à résoudre est :

$$-\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dy} \left[\frac{1}{m_{v,el}^{conf}(y)} \frac{d}{dy} \right] \Psi_{v,el}(y) + E_C(y) \Psi_{v,el}(y) = E_{v,el} \Psi_{v,el}(y), \quad (III.14.a)$$

où l'indice v correspond à la vallée de la bande de conduction à prendre en compte selon le matériau (Δ , Λ , ou Γ) ; el est l'indice du type d'électron [longitudinal (l) ou transversal (t) pour la vallée Δ , et sans indice pour les vallées Λ et Γ] ; E_C est le profil du bas de la bande de conduction dans toute la structure, profil défini par l'équation(III.12.a).

Dans le cas de la bande de valence, l'équation (III.13) est remplacée par :

$$-\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dy} \left[\frac{1}{m_h^{conf}(y)} \frac{d}{dy} \right] \Psi_h(y) + E_V(y) \Psi_h(y) = E_h \Psi_h(y), \quad (III.14.b)$$

où l'indice h correspond à la bande de trous considérée [trou léger (lh), trou lourd (hh) ou trou dû au décalage spin-orbite (so)] et E_V est le profil du haut de la bande de valence dans toute la structure, profil défini par l'équation (III.12.b).

Grâce à la résolution numérique des équations (III.14) dans tout le dispositif, l'enveloppe des fonctions d'ondes Ψ et les niveaux d'énergie E permettent de déterminer la densité d'électrons et de trous dans tout le dispositif. Dans l'approximation d'un gaz 2D, la population totale d'électrons pour un niveau d'énergie $E_{v,el}$ donné s'écrit [sous la même forme que l'équation (III.8)]:

$$n_{v,el} = \int g_{v,el}(E) f(E) dE \quad (III.15)$$

où $g_{v,el}(E)$ est la densité d'états 2D des électrons au niveau d'énergie $E_{v,el}$ et $f(E)$ est la fonction de Fermi. Dans le cas d'un gaz de porteurs 2D, la densité d'états ne dépend pas de l'énergie et l'équation (III.15) s'écrit finalement:

$$n_{v,el} = \frac{m_{v,el}^{2D}}{\pi \hbar^2} kT \ln \left(1 + e^{\frac{E_F - E_{v,el}}{kT}} \right), \quad (III.16)$$

où m_{2D} est la masse effective de densité d'états 2D des électrons de la vallée v et de chaque type de porteurs (l ou t). Cette masse dépend encore une fois du semiconducteur considéré dont le calcul.

La concentration d'électrons selon la position est ensuite calculée grâce à la probabilité de présence des porteurs à chaque niveau:

$$n_{v,el}(y) = n_{v,el} \left| \Psi_{v,el}(y) \right|^2. \quad (III.17)$$

Enfin, la densité quantique totale d'électrons n_q en fonction de la position est calculée en sommant la contribution de la concentration des électrons de chaque type (indice el) et de chaque vallée (indice v) sur un nombre prédéfini de niveaux (indice i) :

$$n_q(y) = \frac{kT}{\pi \hbar^2} \sum_i \sum_v \sum_{el} \mu_{v,el} m_{v,el}^{2D} \ln \left(1 + e^{\frac{E_F - (E_{v,el}^i + \Delta E_v)}{kT}} \right) \left| \Psi_{v,el}^i \right|^2, \quad (III.18)$$

où μ_v est le facteur de dégénérescence des électrons de la vallée et l'indice i correspond au nombre de niveaux quantiques pris en compte dans la simulation et qui dépend du régime de fonctionnement.

Pour calculer la concentration quantique de trous libres dans la structure, nous nous plaçons toujours dans l'approximation des bandes paraboliques. Le raisonnement et les équations (III.15) à (III.18) développées pour les électrons sont alors applicables aux trous et après la résolution numérique des équations ; la population totale de trous dans la structure p_q est obtenue en sommant la contribution de chaque bande de trous (indice h) sur un nombre de niveaux prédéfinis dans le code (indice j)

$$p_q(y) = \frac{kT}{\pi \hbar^2} \sum_j \sum_v \sum_{el} \mu_{v,el} m_{v,el}^{2D} \ln \left(1 + e^{\frac{E_F - (E_{v,el}^j + \Delta E_v)}{kT}} \right) \left| \Psi_{v,el}^j \right|^2, \quad (III.19)$$

Les équations (III.18) et (III.19) montrent que les concentrations de porteurs quantiques, nécessaires au calcul de la densité de charge dans toute la structure (équation (III.7)), dépendent directement des solutions des équations de Schrödinger 1D des électrons et des trous. Or, les équations de Schrödinger (III.14.a) et (III.14.b) dépendent de la courbure des bandes de conduction et de valence donc du potentiel électrostatique [équations (III.12.a) et (III.12.b)] qui lui-même permet de calculer la densité de charges par l'équation de Poisson. Les

équations de Poisson et de Schrödinger sont donc indissociables et le système d'équations Poisson-Schrödinger 1D doit être résolu de manière auto-cohérente.

Conclusion

L'étude théorique de l'hétérojonction a été développée dans cette partie par une modélisation de la couche d'accumulation à l'interface entre le AlGaAs et le GaAs. Cette modélisation, qui repose sur une résolution autocohérente de l'équation de Schrödinger et de l'équation de Poisson, permet de calculer la valeur de la quantité de charge transférée en fonction des paramètres de la couche de AlGaAs tels que le dopage, le pourcentage d'aluminium, ou la largeur du spacer.