

IV .1.Introduction

Dans ce chapitre, nous exposons les résultats de simulation numérique unidimensionnels de L'hétérojonction AlGaAs/GaAs. Dans la structure que nous étudions, les électrons minimisent leur énergie potentielle en s'accumulant dans le puits d'énergie que constitue l'interface de l'hétérojonction. En prenant une masse effective m pour un électron libre dans le puits, nous obtenons la longueur d'onde de Broglie, nous devons donc décrire les électrons du puits dans le cadre de la mécanique quantique. Ainsi, les électrons du canal constituent un gaz bidimensionnel dont 1 l'énergie est quantifiée dans la direction de croissance de la jonction.

IV .2.Structure simulée

La structure à étudier est l'hétérojonction de type $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}/\text{GaAs}$. C'est une structure dont les paramètres des matériaux constituant le dispositif sont définis par les équations précédemment données et calculé comme représenter sur le tableau IV.1 et présenté par la figure (IV.1)



Figure (IV.1) : hétérostructure $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}/\text{GaAs}$ simulée [26]

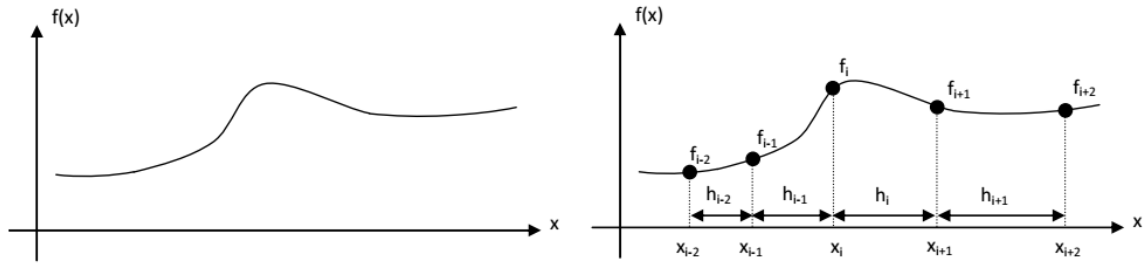
Paramètres	$\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$	spacer $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$	GaAs
Epaisseur	20nm	5nm	500nm
E_g	1.42eV	1.42eV	1.70eV
E_r	10.49	10.49	13
Dopage	2.5×10^{18}	0	3×10^{12}

Tableau (IV.1) : Les propriétés des semiconducteurs utilisés

IV .3.Discrétisation 1D des équations par la méthode des différences finies

Les principales équations (équations de Poisson, de Schrödinger) de notre programme de simulation numérique sont des équations aux dérivées partielles du second ordre appliquées sur un maillage unidimensionnel 1D. Afin de résoudre ces différents calculs, le système doit être discrétisé et parmi les nombreuses méthodes de résolution/discrétisation numériques des dérivées, nous avons choisi la méthode des différences finies car elle a le principal avantage d'être simple à mettre en œuvre.

IV .3.1.Maillage 1D [25]



Figure(IV.2) (a) Représentation d'une fonction $f(x)$ quelconque et (b) la même fonction numérisée sur un maillage non-uniforme 1D.

Il s'agit maintenant de déterminer les dérivées premières et secondes au point i . A l'aide des formules des développements limités au deuxième ordre, nous pouvons décrire la fonction f à l'aide d'un maillage non-uniforme en différents points :

$$\begin{aligned}
 f_{i+2} &\cong f_i + \frac{(x_{i+2} - x_i)}{1!} f'_i + \frac{(x_{i+2} - x_i)^2}{2!} f''_i + \varepsilon = f_i + [h_{i+1} + h_i] f'_i + \left[\frac{(h_{i+1} + h_i)^2}{2} \right] f''_i \\
 f_{i+1} &\cong f_i + \frac{(x_{i+1} - x_i)}{1!} f'_i + \frac{(x_{i+1} - x_i)^2}{2!} f''_i + \varepsilon = f_i + [h_i] f'_i + \left[\frac{h_i^2}{2} \right] f''_i \\
 f_{i-1} &\cong f_i + \frac{(x_{i-1} - x_i)}{1!} f'_i + \frac{(x_{i-1} - x_i)^2}{2!} f''_i + \varepsilon = f_i - [h_{i-1}] f'_i + \left[\frac{h_{i-1}^2}{2} \right] f''_i \\
 f_{i-2} &\cong f_i + \frac{(x_{i-2} - x_i)}{1!} f'_i + \frac{(x_{i-2} - x_i)^2}{2!} f''_i + \varepsilon = f_i - [h_{i-2} + h_{i-1}] f'_i + \left[\frac{(h_{i-2} + h_{i-1})^2}{2} \right] f''_i
 \end{aligned} \tag{IV.1}$$

où f'_i et f''_i sont respectivement les dérivées première et seconde de la fonction f au point i , et, ε représente les termes d'ordres plus élevés (partie infinitésimale et donc négligeable dans cette approximation).

En réalisant des combinaisons entre les différentes expressions données en (IV.1) afin d'éliminer les termes dépendant de la dérivée seconde, la dérivée première de la fonction peut

s'écrire

$$f'_i = \frac{-h_i^2 f_{i-1} - (h_{i-1}^2 - h_i^2) f_i + h_{i-1}^2 f_{i+1}}{h_{i-1} h_i (h_{i-1} + h_i)} . \quad (\text{IV.2})$$

Ainsi, la dérivée première de la fonction f au point i dépend de la valeur de f aux points $i-1$, i et $i+1$. En revanche, pour résoudre les équations au bord du domaine, c'est-à-dire résoudre les équations avec des conditions aux limites, les expressions des dérivées ne doivent pas dépendre du point $i-1$ à gauche du domaine ou du point $i+1$ à droite du domaine car la fonction n'est pas définie en dehors du domaine. Dans ce cas, la valeur de la fonction aux points $i-2$ et $i+2$ est nécessaire. En combinant f_i , f_{i+1} et f_{i+2} , la dérivée première peut s'écrire sous la forme :

$$f'_i = \frac{-[h_{i+1}(2h_i + h_{i+1})]f_i + [h_i + h_{i+1}]^2 f_{i+1} - h_i^2 f_{i+2}}{h_i h_{i+1} (h_i + h_{i+1})} . \quad (\text{IV.3.a})$$

En utilisant cette fois f_i , f_{i-1} et f_{i-2} , la dérivée première est donnée par :

$$f'_i = \frac{h_{i-1}^2 f_{i-2} - [h_{i-2} + h_{i-1}]^2 f_{i-1} - [h_{i+1}(2h_i + h_{i+1})]f_i}{h_{i-2} h_{i-1} (h_{i-2} + h_{i-1})} . \quad (\text{IV.3.b})$$

Pour calculer la dérivée seconde de f_i , les expressions de (IV.1) sont de nouveaux combinées pour obtenir l'équation finale :

$$f''_i = \frac{h_i f_{i-1} - (h_{i-1} + h_i) f_i + h_{i-1} f_{i+1}}{\frac{h_{i-1} h_i}{2} (h_{i-1} + h_i)} . \quad (\text{IV.4.a})$$

$$f''_i = \frac{2}{h_{i-1} (h_{i-1} + h_i)} f_{i-1} - \left[\frac{2}{h_{i-1} (h_{i-1} + h_i)} + \frac{2}{h_i (h_{i-1} + h_i)} \right] f_i + \frac{2}{h_i (h_{i-1} + h_i)} f_{i+1} . \quad (\text{IV.4.b})$$

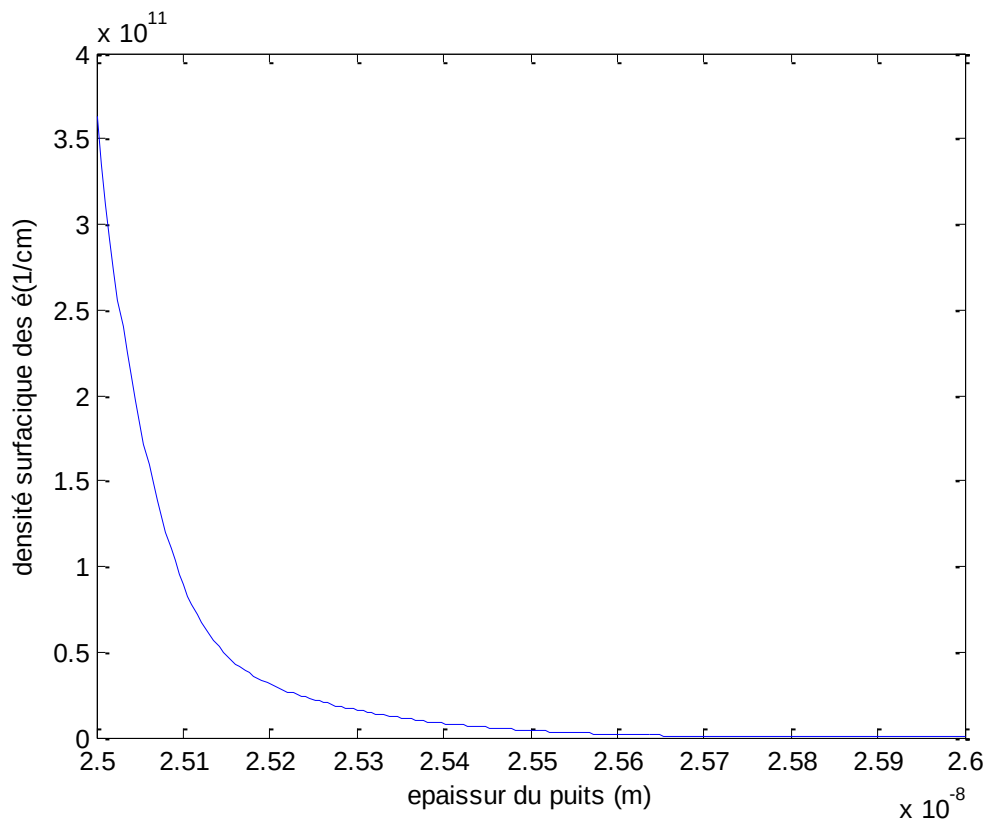
Les principales conditions aux limites utilisées dans les codes de simulation

(Dirichlet* et Neumann†) ne nécessitent pas de connaître la dérivée seconde en fonction des autres points de maillage. Ainsi, les formules (IV.2) et (IV.3) permettent de déterminer la dérivée première de la fonction f au point i alors que l'expression (IV.4) donne la dérivée seconde, le tout sur un maillage non-uniforme 1D

IV .4.Résultats de la simulation

IV .4.1.Densité surfacique des électrons dans le puits

La figure (IV.3) montre que la concentration surfacique maximale des électrons est située à l'interface spacer/GaAs. Cette charge est liée par l'équation de Poisson à une forte variation de potentiel près de l'interface oxyde/semi-conducteurs, ce qui se traduit d'un point de vue énergétique par la création d'un puits de potentiel dans les Semi-conducteurs.

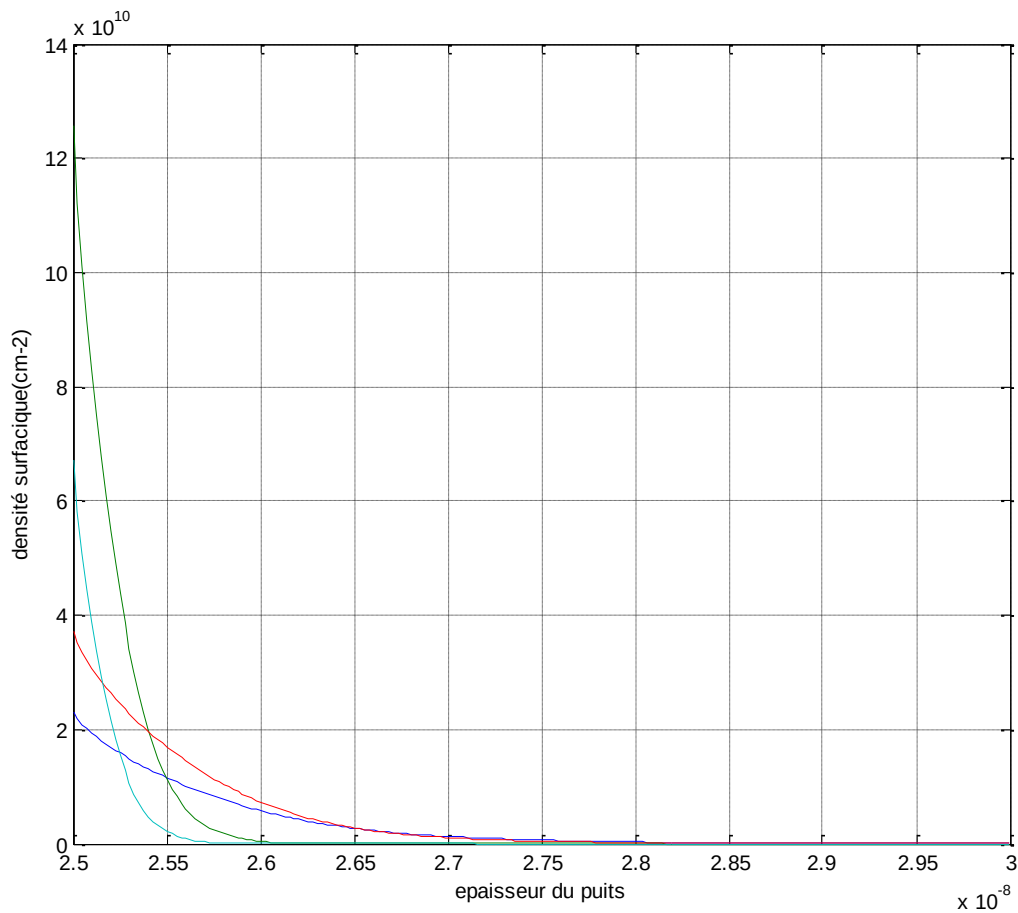


figure(IV.3). *densité surfacique des électrons dans le puits de potentiel*

IV .4.2.Contribution des électrons par vallée

Dans la résolution de l'équation de schrodinger nous avons pris en considération les différents types de vallée existants dans le GaAs pour le calcul de la masse effective de confinement.

La contribution des électrons dans les vallées considérées dans la densité surfacique des électrons est donnée dans la figure(IV.4).

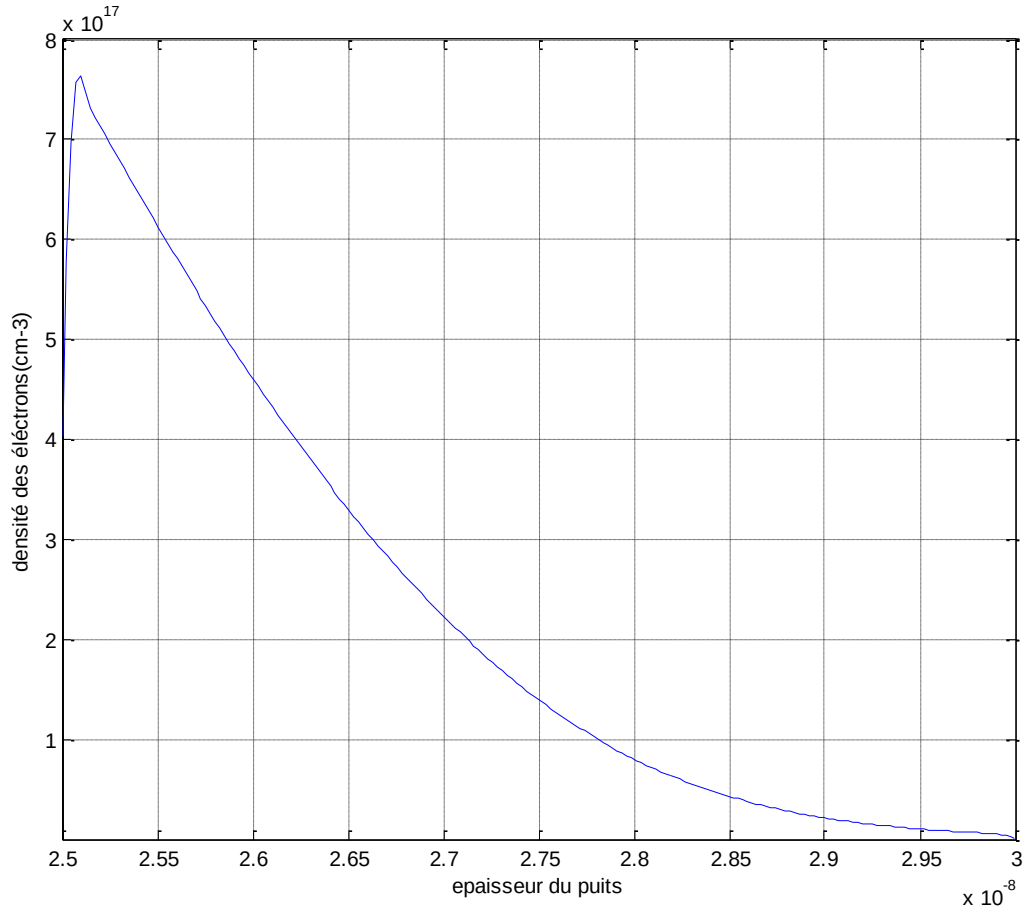


figure(IV.4) : *contribution des différent types d'électron*

IV .4.3.Densité des électrons dans le puits de potentiel

Les électrons dans la structure se comportent comme un *gaz de porteurs bidimensionnel (2D)* et la densité de porteurs libres selon la direction y sera déterminée à partir du calcul des niveaux d'énergie dans le puits de potentiel et de la probabilité de présence des porteurs (fonctions d'onde) à ces niveaux.

La figure(IV.5). montre la densité quantique totale d'électrons en fonction de la position dans le puits de potentiel est calculée en sommant la contribution de la concentration des électrons de chaque type.



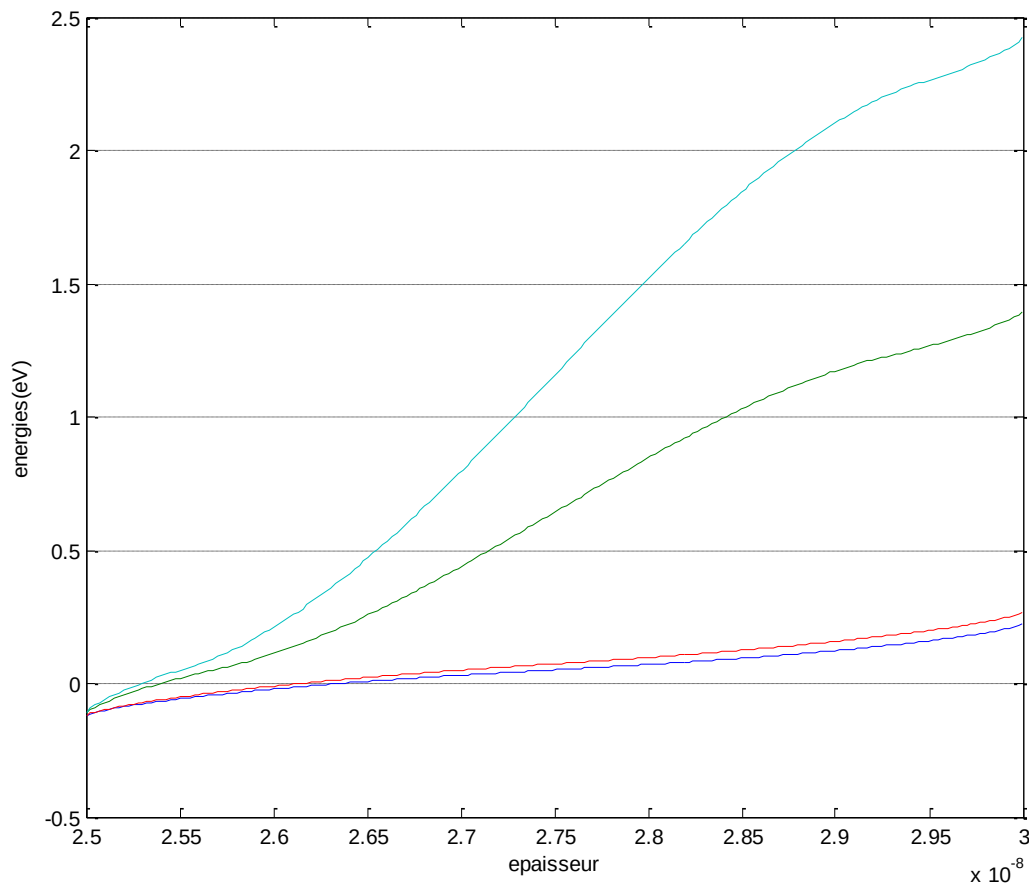
figure(IV.5): *densité des électrons 2D dans le puits de potentiel*

La figure 4 met en avant les principaux effets du confinement quantique des porteurs [26] :

- une réduction très importante de la densité de charges dans le semiconducteur par rapport au calcul classique,
- un déplacement du maximum de charges à l'intérieur du substrat, par rapport à l'interface.

IV .4.4.Niveaux d'énergies dans le puits de potentiel

Les porteurs de charge (électrons) loin de l'interface AlGaAs/GaAs sont libres de se déplacer dans toutes les directions de l'espace dans leur bande permise (bande de conduction), on parle alors de *gaz de porteurs tridimensionnelle (3D)*. Par contre ces porteurs se retrouvent dans le puits confinés dans des niveaux énergétique E. la figure(IV.6).montre les niveaux énergétiques existants dans le puits de potentiels de tous les électrons pris en considération dans notre programme. Les cinq niveaux les plus profond son regroupés dans le tableau(IV.2).



figure(IV.6): *niveaux énergétiques dans le puits*

E1 (eV)	E2 (eV)	E3 (eV)	E4 (eV)
-0.1191	-0.1107	-0.1184	-0.1073
-0.1132	-0.0985	-0.1119	-0.0925
-0.1084	-0.0886	-0.1067	-0.0805
-0.1042	-0.0798	-0.1021	-0.0698
-0.1003	-0.0717	-0.0979	-0.0601

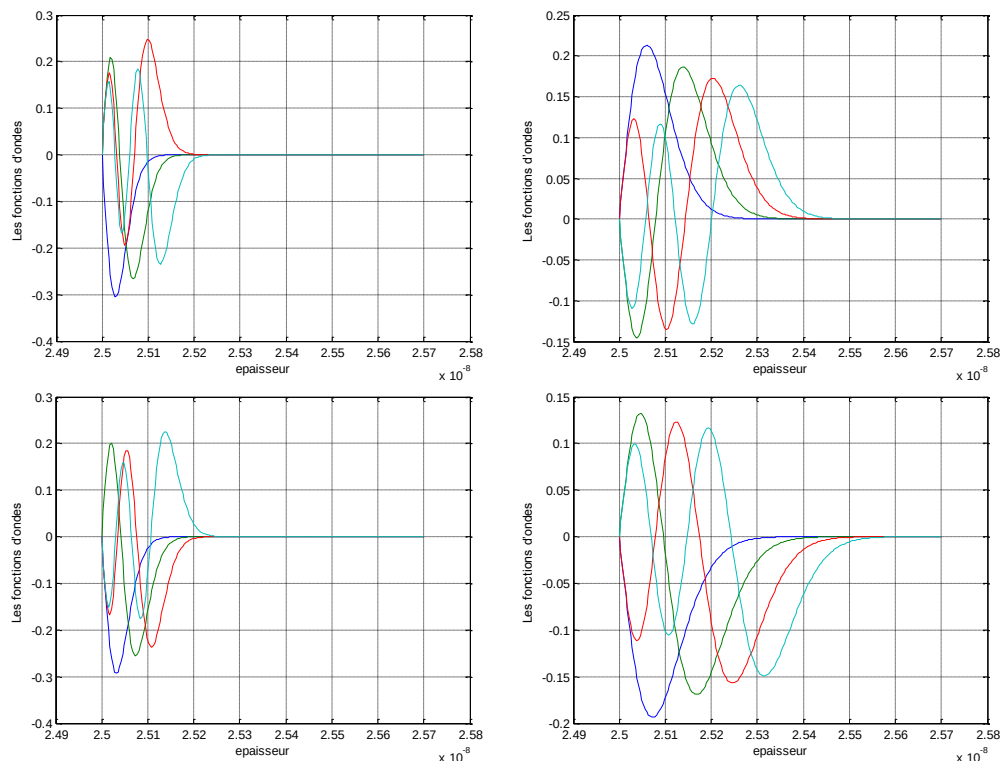
Tableau (IV.4). les cinq niveaux énergétique des électrons les plus profond

A partir du tableau et de la figure(IV.6), on remarque que les énergies les plus profondes sont les énergies E1, ce sont le type d'électrons qui est le plus piégé dans le puits.

IV .4.5.Les fonctions d'ondes

La figure(IV.7).représente les fonctions d'ondes associées aux niveaux énergétiques calculés précédemment : sur cette figure on a porter les quatre fonction des énergies les plus bas contribuant dans la densité des électrons dans la région quantique et ce pour les quatre types d'électrons pris en considération dans notre calcul.

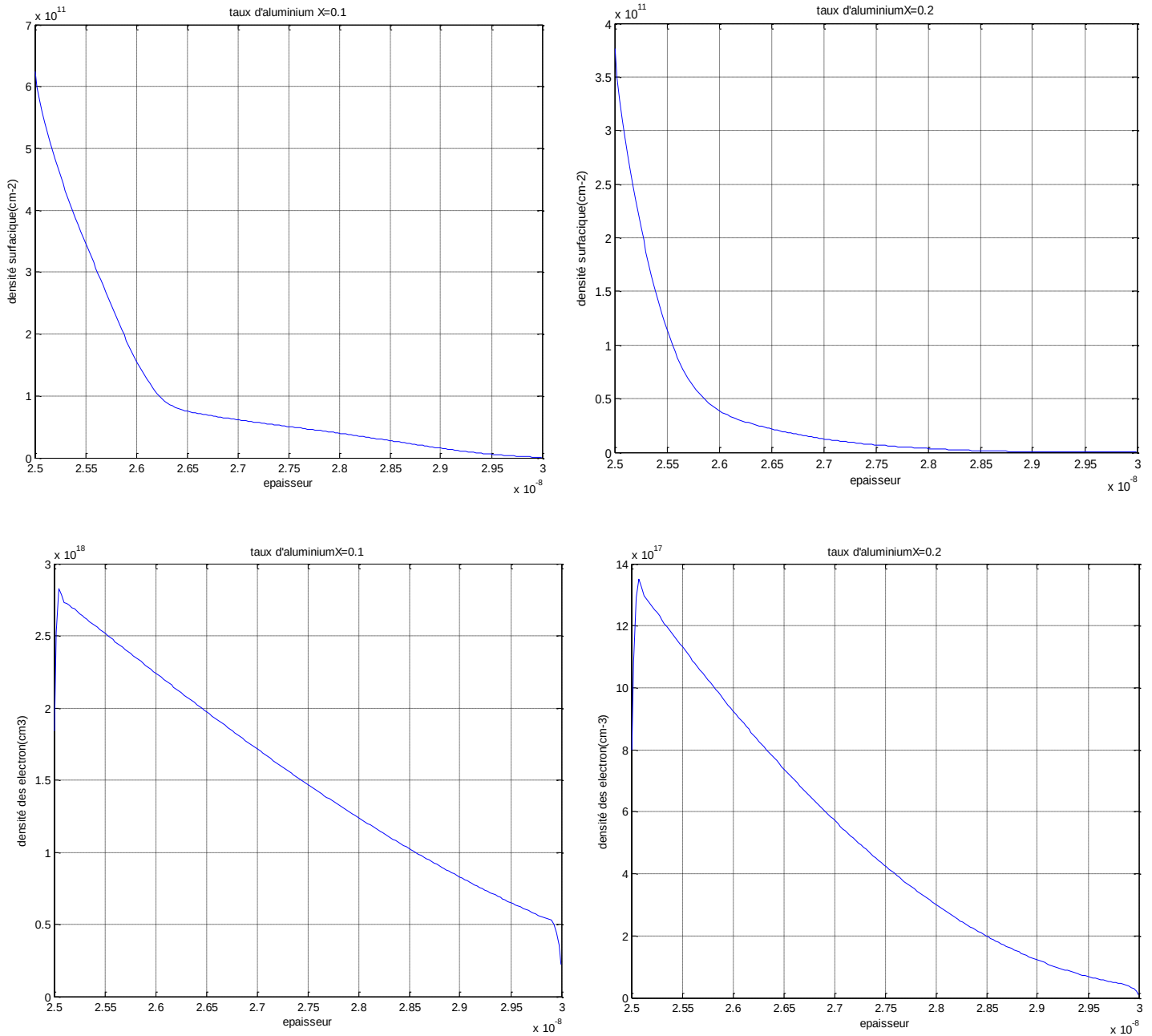
Il est évident que ces sous bandes sont les plus contribuable dans la densité des électrons dans le puits.



Figure(IV.7). : Les fonctions d'onde associées aux énergies dans le puits

IV .4.5.Influence du taux d'aluminium sur la densité des porteurs

La figure(IV.8).présente la densité des électrons dans la région quantique ainsi que la densité surfacique et ce pour deux valeur différentes du taux X de l'aluminium dans l'hétérojonction AlGaAs/GaAs.

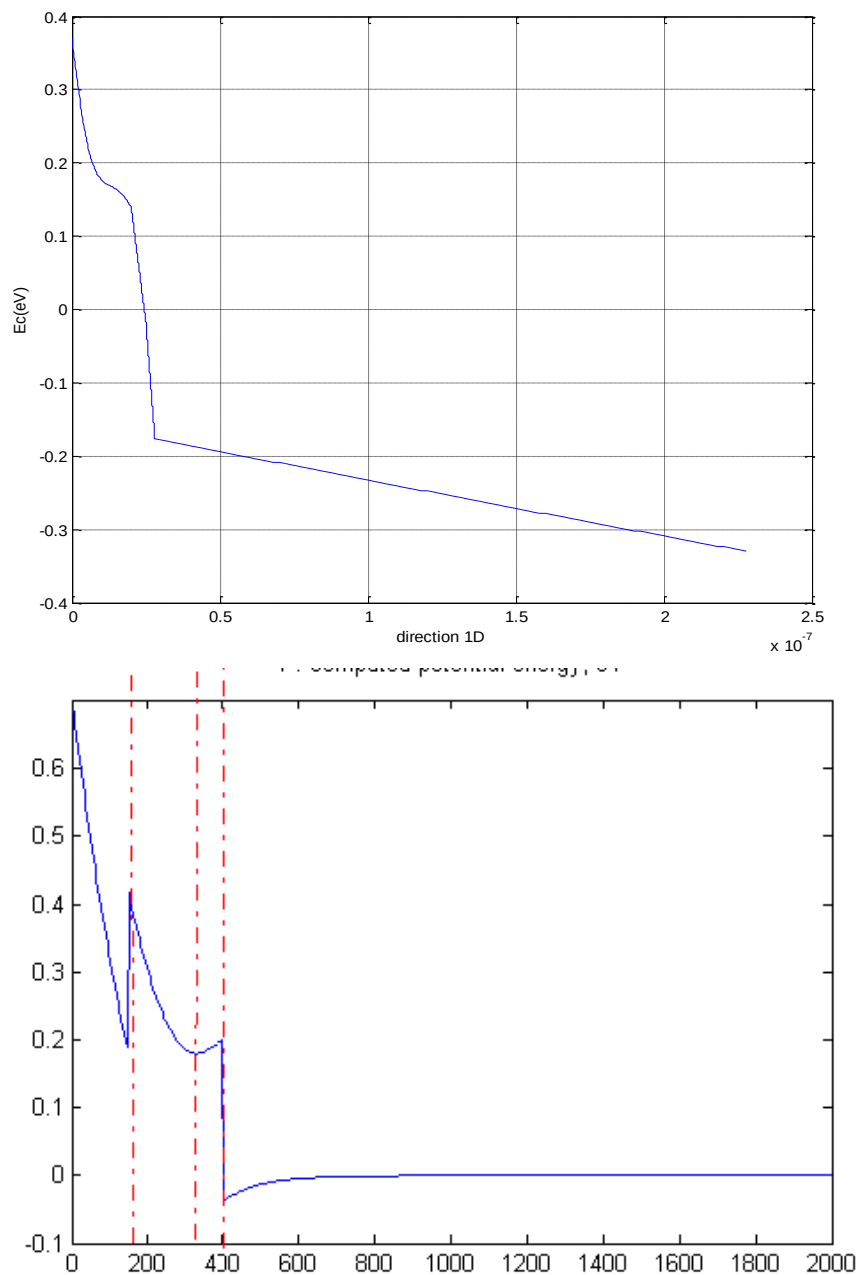


Figure(IV.8). influence de X sur la densité des électrons dans le puits

On peut remarquer clairement que plus le taux d'aluminium X est petit plus la densité des électrons dans le puits est importante à cause de la dépendance de la barrière ΔE_c à l'interface AlGaAs/GaAs de X .

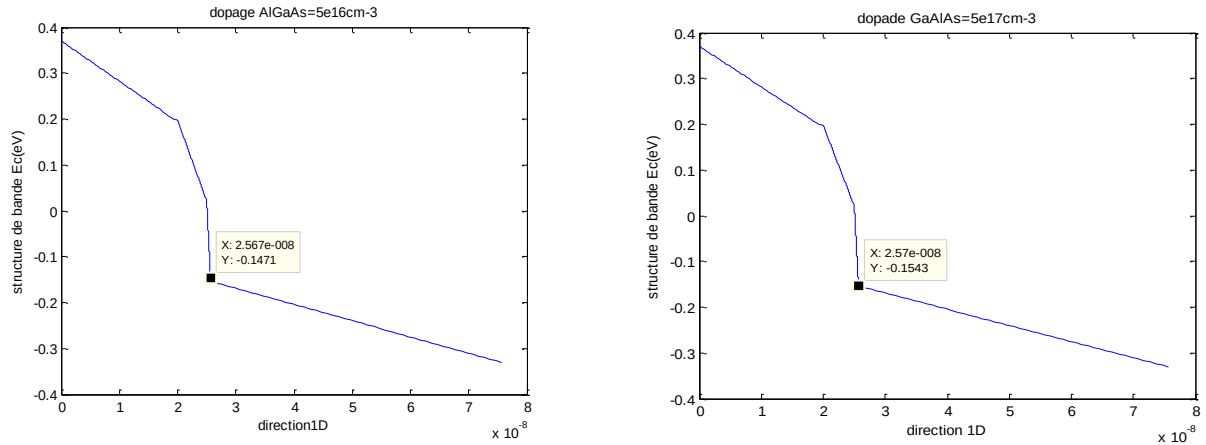
IV .5.6. Structure de la bande de conduction

Les premiers résultats recherchés par notre étude est la structure de la bande de conduction E_c . Notre programme a bien calculé dans le puit mais en dehors du puit nos resultats sont probablement fausse. La figure(IV.9). présente notre structure de bande trouvée et en dessous la structure de bande désirée [26].



Figure(IV.9). Structure de bande E_c [26]

On peut remarquer sur les deux figure une nette différence, quoique comme on vient de le dire notre programme fait de calcul juste dans la zone quantique la plus importante de la structure, on peut le remarquer sur la figure 9 qui représente l'influence du dopage du AlGaAs Sur la structure.



Figure(IV.10) : influence du dopage du AlGaAs sur la sur E_c

Conclusion

Dans ce chapitre nous avons présenté les résultats de simulation 1D de la structure à hétérojonction GaAlAs/GaAs. Nous avons commencé par la description de la méthode de discrétisation des équations de Schrödinger et de Poisson qui est basée sur les différences finies.

Les résultats présentés dans ce chapitre concernent essentiellement le puit de potentiel qui reflète l'état quantique à l'interface de l'hétérojonction.