

N° d'ordre :

THESE

Présentée à l'Université des Sciences et Technologies de Lille 1

École Doctorale Sciences pour l'Ingénieur

pour obtenir le grade de

DOCTEUR DE L'UNIVERSITE

Spécialité : MICRO ET NANO TECHNOLOGIES, ACOUSTIQUE ET
TELECOMMUNICATIONS

par

Mohamed BOUCHERIT

Etude et réalisation de dispositifs hyperfréquences sur matériaux grand gap :

- Diode a effet tunnel résonant $Al_xGa_{1-x}N/GaN$
- Transistor HEMT boré à base de nitrure de gallium

Soutenance le 13 Avril 2012 devant la commission d'examen

Membres du jury :

Mr. Frédéric ANIEL	Rapporteur
Mr. Hassan MAHER	Rapporteur
Mr. Abdallah OUGAZZADEN	Examineur
Mr. Tuami LASRI	Examineur
Mr. Jean-Claude DE JAEGER	Directeur de thèse
Mr. Ali SOLTANI	Co-directeur de thèse

REMERCIEMENTS

Ce travail de thèse de doctorat a été effectué au sein de l'équipe "Composants et Dispositifs Microondes de Puissance" de l'Institut d'Electronique, de Microélectronique et de Nanotechnologie (IEMN) de Lille.

Je tiens tout d'abord à exprimer mes remerciements et ma reconnaissance à Monsieur Lionel BUCHAILLOT, directeur du laboratoire, pour m'y avoir accueilli.

Je remercie Monsieur Tuami LASRI, professeur à l'Université des Sciences et Technologie de Lille d'avoir accepté de faire partie des membres du jury de soutenance.

Je tiens à exprimer toute ma reconnaissance à Monsieur Frédéric ANIEL, Professeur à l'Institut d'Electronique Fondamentale et à Monsieur Hassan MAHER, responsable scientifique habilité de la division procédés et développements chez OMMIC pour m'avoir fait l'honneur de rapporter ce travail.

Je remercie également Monsieur Abdallah OUGAZZADEN, Professeur et Directeur de l'Unité Mixte international à Georgia Tech Lorraine pour avoir accepté d'examiner ce travail.

Je tiens à exprimer ma profonde gratitude, ainsi que mes plus vifs remerciements, à Monsieur Jean-Claude DE JAEGER, Professeur à l'Université des Sciences et de Technologie de Lille, pour la confiance qu'il m'a accordée en m'accueillant dans son équipe, pour son soutien, ses précieux conseils, son réconfort et ses encouragements.

Ce travail a été mené sous la co-direction scientifique de Monsieur Ali SOLTANI, Maître de Conférences à l'Université des Sciences et de Technologie de Lille (IEMN). Je lui exprime toute ma gratitude pour son investissement, sa disponibilité, son attention et sa patience et ses encouragements sans faille. Je lui suis d'autant plus reconnaissant pour ses qualités et sa rigueur scientifique. Son expérience m'a permis de donner à cette thèse l'homogénéité nécessaire, et a été pour moi une aide précieuse.

Je tiens à remercier particulièrement les partenaires en particulier, A. OUGAZZADEN et E. MONROY qui ont effectué la croissance des épitaxies sans lesquelles je n'aurai pas pu réaliser ce travail.

Une attention particulière à M. ROUSSEAU pour son aide précieuse pour les simulations et les nombreuses discussions scientifiques que nous avons eues.

Je tiens à remercier particulièrement D. TROADEC pour les mesures I(V) et les coupes au FIB ainsi que D. DERESMES et M. BERTHE pour les mesures au Nanoprobe.

Ce travail a été réalisé avec l'aide précieuse de J-C. GERBEDOEN pour les travaux en salle blanche. Mes remerciements vont également à mes collègues et amis Nicolas, Marie, Kamel, Farid, Yannick, François, Samira, Florant, Valéria, Mingdong et toutes celles et ceux que j'ai certainement oubliés, pour leur amitié et pour tous les bons moments passés en leur compagnie.

REMERCIEMENTS

Mes derniers remerciements s'adressent à toute ma famille en Algérie et plus particulièrement à ma mère Meriem et mon père Naceur, mes deux petits frères Lyes et Yacine.

SOMMAIRE

Introduction Générale.....	1
----------------------------	---

CHAPITRE 1 :

PROPRIETES DES MATERIAUX NITRURE A BASE DE GAN

1	Introduction	9
2	Propriétés structurales	11
2.1	Structure cristallographique.....	11
2.2	Substrat hôtes	12
2.2.1	Substrat GaN	12
2.2.2	Substrat Al ₂ O ₃	13
2.2.3	Substrat SiC	13
2.2.4	Substrat Si	14
2.3	Technique de croissance	15
2.3.1	(MO,H)VPE	15
2.3.2	MBE	16
2.4	Défauts structuraux.....	17
2.4.1	Défauts ponctuels	17
2.4.2	Défauts étendus	18
2.5	Couche de nucléation.....	19
3	Propriétés thermiques.....	20
4	Propriétés électriques	21
4.1	Polarisation spontanée	21
4.2	Polarisation piézoélectrique.....	23
5	Propriétés électroniques	24
5.1	Structure de Bandes.....	24
5.2	Transport électronique	25
5.2.1	Régime stationnaire	25
5.2.2	Régime transitoire.....	27
6	Conclusion	30
7	Références bibliographiques	31

CHAPITRE 2 :

ÉTUDE THEORIQUE DE L'EFFET TUNNEL RESONANT AU TRAVERS D'UNE DIODE RTD A BASE ALGAN/GAN

1	Introduction	37
2	Principe de fonctionnement	38
3	Formalisme NEGF	39
3.1	Système isolé.....	40
3.1.1	Fonctions de Green G^R, G^A	41
3.1.2	Fonction spectrale $A(r,r',E)$	42
3.2	Système ouvert	43
3.2.1	Fonctions de Green G^R, G^A	44
3.2.2	Fonction spectrale $A(r,r',E)$	45
3.2.3	Densité électronique $\rho(r,E)$	49
3.2.4	Densité de courant.....	50
4	Application à la RTD	52

4.1	Hamiltonien du système	52
4.2	Equation de Poisson	55
4.3	Présentation du programme	57
4.3.1	Structure du code	57
4.3.2	Temps de calculs	58
4.4	Analyses et discussions	60
4.4.1	Influence de l'épaisseur des espaceurs GaN nid	61
4.4.2	Influence de la largeur du puits GaN	63
4.4.3	Influence de l'épaisseur des couches barrière AlN	67
4.4.4	Influence du taux d'aluminium des couches barrières AlGaN	68
5	Conclusion	70
6	Références bibliographiques	71

CHAPITRE 3 :

ETUDE EXPERIMENTALE DU TRANSPORT VERTICAL AU TRAVERS D'UNE STRUCTURE A DOUBLE BARRIERES ALGAN/GAN

1	Introduction	77
2	Approche ascendante	79
2.1	Croissance sélective	79
2.2	Reprise de croissance	83
3	Approche descendante	87
3.1	Contrainte résiduelle	87
3.2	Technologie des composants RTDs	93
3.2.1	Moule en PDMS	93
3.2.2	Définition des marques d'alignements	93
3.2.3	Définition des nano-diodes	94
3.2.3.1	Lithographie des nano-diodes	94
3.2.3.2	Gravure de l'hétérostructure	95
3.2.3.2.1	Techniques de Gravure	95
3.2.3.2.1.1	Gravure RIE	Erreur ! Signet non défini.
3.2.3.2.1.2	Gravure ICP-RIE	Erreur ! Signet non défini.
3.2.3.2.2	Définition des mésas par gravure ICP-RIE	Erreur ! Signet non défini.
3.2.3.2.3	Définition des mésas par gravure FIB	Erreur ! Signet non défini.
3.2.4	Définition des contacts ohmiques du bottom	99
3.2.4.1	Choix de la métallisation	99
3.2.4.2	Ré-optimisation des contacts ohmiques	101
3.2.4.3	Lithographie des contacts ohmiques du <i>bottom</i>	102
3.2.5	Aplanissement de la structure	103
3.2.6	Définition du pont soutenu «contact ohmique du top»	105
3.3	Caractérisation électrique des RTDs	106
3.3.1	Structure des échantillons étudiés	106
3.3.2	Caractérisation sous pointes RF	108
3.3.3	Caractérisation sous pointes FIB	109
3.3.4	Caractérisation sous pointes Nanoprobe	111
3.3.4.1	Présentation du nanoprobe	111
3.3.4.2	Choix de la pointe	112
3.3.4.3	Mode opératoire	113
3.3.4.4	Analyses et discussions	114
3.3.5	Confrontation théorie-expérience	119
4	Conclusion	121
5	Références bibliographiques	123

CHAPITRE 4 : DEVELOPPEMENT DE TRANSISTORS HEMT ALGAN/GAN BORE

1	Introduction	131
2	Principe de base du fonctionnement	131
2.1	Généralités	131
2.2	Impact des paramètres de la structure	132
2.3	Limitations des performances du composant.....	135
2.3.1	Effet de l'auto-échauffement.....	135
2.3.2	Contrainte technologique liée à la grille Schottky.....	135
2.3.3	Ionisation par impact.....	135
3	Technologie des composants.....	136
3.1	Marques d'alignement	136
3.2	Contacts ohmiques.....	137
3.3	Isolation par Implantation.....	138
3.4	Contacts Schottky.....	140
3.4.1	Choix de la métallisation.....	140
3.4.2	Technologie de Grille.....	141
3.4.2.1	Grille en Té	141
3.4.2.1.1	Généralités	141
3.4.2.1.2	Technologie "multicouches de résines"	142
3.5	Passivation Nitrure.....	144
3.6	Plots d'épaississements.....	145
4	Etude des propriétés de transport.....	146
4.1	Etude de la résistance de la couche tampon	146
4.1.1	Couche tampon « type » AlGaN	146
4.1.2	Couche tampon « type » B GaN.....	149
4.2	Etude des premières structures de transistors	152
4.2.1	Structures « type » BAlGaN/GaN/BGaN.....	153
4.2.2	Structures « type » AlGaN/BGaN/GaN et AlGaN/GaN/BGaN	156
4.2.2.1	Etude morphologique de la surface	157
4.2.2.2	Etude électrique des structures	158
4.3	Etude des séries successives de transistors	160
4.3.1	Description des structures de couches.....	160
4.3.2	Caractérisation électrique de la couche active.....	162
5	Caractérisation électrique du composant	167
5.1	Caractérisation en régime continu.....	167
5.1.1	Caractérisation des contacts ohmiques.....	167
5.1.2	Caractérisation du contact Schottky	172
5.1.3	Mesure de l'isolation par implantation.....	177
5.1.4	Caractéristiques de sortie du transistor.....	179
5.1.5	Mesure Capacité-Tension.....	186
5.1.6	Caractéristiques en DC pulsé	188
5.2	Caractéristiques hyperfréquence du composant.....	190
6	Conclusion.....	198
7	Références bibliographiques	201
	Conclusion Générale.....	203
	Perspectives.....	207
	Annexes.....	209

INTRODUCTION GENERALE

Les applications hyperfréquences actuelles dans les domaines militaire et télécommunication nécessitent toujours davantage de puissance en haute fréquence et même quelque fois la possibilité de travailler en environnement hostile. Il s'agit là d'enjeux stratégique et économique cruciaux pour le développement des systèmes électroniques du futur. Pour répondre à ces nouvelles exigences avec succès, il est impératif d'associer à la fois la disponibilité de nouveaux matériaux et un savoir faire technologique aussi bien du côté des hétéroépitaxies que de la technologie des composants.

L'émergence depuis plus de vingt ans des matériaux nitrures III-N à large bande interdite a été à l'origine de nombreux développements par la communauté internationale : au Japon, aux USA et en Europe. Cependant, ces nouvelles filières associées ont souffert pendant très longtemps d'un manque de maturité. Aujourd'hui il est possible de synthétiser des dispositifs commerciaux sur la base de ces matériaux mais la route est encore longue et l'exploration continue.

Dans ce cadre de nos activités de recherche, nous nous sommes intéressé à améliorer quelques dispositifs passif et actif pour repousser toujours davantage la limite des composants existants. Le premier concerne les oscillateurs de puissance HF et le second les amplificateurs de puissance en hyperfréquence. Les briques technologiques pour réaliser ces deux dispositifs sont les diodes à effets tunnel résonant et les transistors à haute mobilité à base de nitrure de gallium.

Ce travail de thèse est donc scindé en deux parties distinctes. L'une correspond à l'étude du transport vertical dans le GaN au travers d'une double barrière $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ et la seconde à l'amélioration de l'isolation de la couche tampon et du confinement des porteurs dans le puits d'un transistor HEMT GaN boré. Notons, en particulier, que pour mener à bien la première étude, il a fallu développer de nouveaux outils de simulation physique valides à l'échelle mésoscopique voire nanométrique lesquels constituent un moyen de prédiction efficace des performances de dispositifs innovants.

Ce manuscrit de thèse est composé de quatre chapitres. Le premier chapitre est destiné à rappeler les principales propriétés des matériaux semiconducteurs III-N à large bande interdite établies par des techniques ab-initiales ainsi que des propriétés de transport obtenues par des méthodes de type Monte Carlo. Cela concerne également les techniques de croissance utilisées dans le cadre de ce travail avec un bref récapitulatif de quelques défauts structuraux présents dans les hétérostructures. Enfin, les notions de polarisations spontanée et piézoélectrique dans ces matériaux y sont aussi décrites brièvement.

Le second chapitre est consacré à l'étude théorique du transport vertical au travers de structures à double-barrières AlGa_N/Ga_N. Dans la première partie, nous abordons le formalisme des fonctions de Green hors équilibre. Nous insisterons particulièrement sur l'apport des contacts ohmiques dans la modélisation de nano-objets ou de nano-composants. Un modèle unidimensionnel basé sur ce formalisme est développé en vue de calculer la densité de courant d'une diode à effet tunnel résonant sur ces structures dans l'approximation de la masse effective et d'un transport balistique. Le domaine de validité de notre modèle y est bien évidemment discuté. Cet outil a permis d'optimiser l'hétérostructure à partir de ses paramètres géométriques (longueur des espaceurs nid Ga_N, largeur du puits central Ga_N et pourcentage d'aluminium dans les couches barrières AlGa_N) de manière à maximaliser les performances de la diode, trouver des compromis lorsque cela s'avère nécessaire, mais aussi de mieux appréhender son fonctionnement (apparition d'une zone de charge d'espace, d'un double puits, des niveaux quasi-liés dans le puits central...).

Le troisième chapitre est consacré à la fabrication, la réalisation et la caractérisation de diodes à effet tunnel résonant AlGa_N/Ga_N. Deux stratégies ont été adoptées : les approches *bottom-up* et *top-down*. Pour réaliser ce dispositif avec la première approche, des études préalables de la préparation de la surface sont investiguées. La première piste concerne la mise en œuvre de l'épitaxie sélective au travers d'ouvertures de marques diélectriques de dimensions micro et nanométriques. La deuxième voie traite de la reprise de croissance sur des micro et nano-piliers de Ga_N. Dans le cadre de l'approche *top-down*, une attention particulière est tout d'abord portée sur la distribution de la contrainte dans les nano/micro-édifices fonctionnels. La partie suivante est dédiée au développement d'un procédé technologique pour la réalisation de nano-diodes dans une architecture planaire intégrée. La dernière partie présente les résultats expérimentaux obtenus sur les échantillons étudiés, et ce

au moyen de différentes techniques de caractérisation (micro-nano-manipulateurs ou analyseur de réseau). Les résultats expérimentaux sont exposés et discutés en relation avec les données théoriques établies dans le second chapitre.

Le quatrième chapitre est consacré à l'étude des transistors HEMT AlGa_n/Ga_n. Ce dernier comporte six parties. La première partie aborde les principaux paramètres clefs régissant le fonctionnement du transistor HEMT à base de Ga_n. La deuxième partie décrit les principales étapes technologiques relatives à la réalisation de composants HEMTs Borés. La troisième partie est dédiée à l'étude de la résistivité de la couche tampon Ga_n en y incorporant soit de l'aluminium ou du bore. La quatrième partie relate les résultats expérimentaux obtenus sur les premières séries de transistors borés. La cinquième partie comporte les résultats électriques en régime DC des différentes topologies de transistors avec une couche tampon avec ou sans contre-barrière BGa_n. Enfin, la dernière partie présente les performances fréquentielles des structures étudiées les plus adéquates susceptibles de faire état du savoir-faire développé jusqu'alors dans le domaine.

Chapitre 1

Propriétés des matériaux nitrures à base de GaN

Table des matières

1	INTRODUCTION	9
2	PROPRIETES STRUCTURALES	11
2.1	STRUCTURE CRISTALLOGRAPHIQUE	11
2.2	SUBSTRAT HOTES.....	12
2.2.1	<i>Substrat GaN</i>	12
2.2.2	<i>Substrat Al₂O₃</i>	13
2.2.3	<i>Substrat SiC</i>	13
2.2.4	<i>Substrat Si</i>	14
2.3	TECHNIQUE DE CROISSANCE	15
2.3.1	<i>(MO,H)VPE</i>	15
2.3.2	<i>MBE</i>	16
2.4	DEFAUTS STRUCTURAUX	17
2.4.1	<i>Défauts ponctuels</i>	17
2.4.2	<i>Défauts étendus</i>	18
2.5	COUCHE DE NUCLEATION	19
3	PROPRIETES THERMIQUES	20
4	PROPRIETES ELECTRIQUES	21
4.1	POLARISATION SPONTANEE	21
4.2	POLARISATION PIEZOELECTRIQUE	23
5	PROPRIETES ELECTRONIQUES	24
5.1	STRUCTURE DE BANDES	24
5.2	TRANSPORT ELECTRONIQUE	25
5.2.1	<i>Régime stationnaire</i>	25
5.2.2	<i>Régime transitoire</i>	27
6	CONCLUSION DU CHAPITRE	30
7	REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES	31

1 Introduction

Dans l'industrie, l'Arsenic de Gallium et Phosphore d'Indium constituent les principales filières de choix pour la réalisation de composants de puissance en hyperfréquence. Néanmoins, une nouvelle filière est apparue au début des années 1990 et concurrencent directement ces dernières. De part sa large bande interdite, le Nitrure de Gallium se positionne en tant que candidat très prometteur pour ces mêmes applications. En effet, celui-ci possède des propriétés intrinsèques remarquables, tels que: une grande vitesse de saturation des porteurs, une masse effective des électrons élevée, champ de claquage important, etc...

Contrairement à d'autres semiconducteurs à grand gap tel que le Carbure de Silicium ou le Diamant, le Nitrure de Gallium offre la possibilité de réaliser des alliages ternaires du type $(B_x, Al_x)Ga_{1-x}N$ par substitution partielle du Gallium par un autre élément III de la même colonne (Figure I.1). La fabrication de ces alliages permet de moduler les largeurs de bandes interdites entre 3,4eV (GaN) et 6eV (AlN) et permet ainsi de balayer une large gamme spectrale allant du Visible jusqu'à l'UV profond. Les paramètres de mailles de ces alliages varient significativement avec leur composition. Le diagramme ci-dessous représente l'évolution de la largeur de bande en fonction du paramètre de maille du ternaire possible et permet de concevoir les hétérostructures possibles.

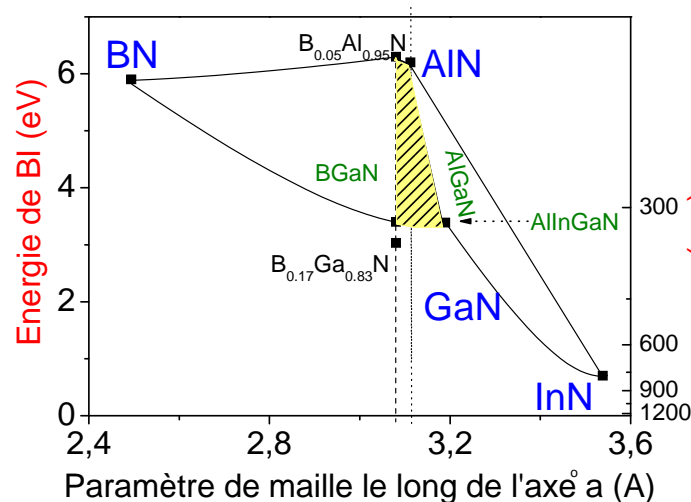


Figure I.1: Largeur de bande interdite en fonction du paramètre cristallin pour les alliages à base de nitrures III-N de type $(Al_x, In_x, B_x)Ga_{1-x}N$.

L'ingénierie de bande des semiconducteurs III-N à large bande interdite a permis le développement de nombreuses applications, que ce soit en microélectronique tels les transistors HEMTs AlGa_N/Ga_N, ou en optoélectronique tels que les LEDs bleu, les lasers bleu et les photodétecteurs UV. Ces matériaux III-N ont également permis l'essor d'un nouveau genre de capteurs MEMS pouvant fonctionner dans des environnements hostiles.

Jusqu'à ce jour, il existe très peu de disponibilité commerciale de substrat Ga_N massifs monocristallin de grande surface, ce qui fait que leur émergence au plan industriel à grande échelle demeure encore prématurée. On peut citer les sociétés AMONO en Pologne et LUMILOG (Saint-Gobain) en France qui commencent à délivrer des substrats semi-isolants autosupportés. Cependant, des progrès considérables ont été réalisés au cours de ces quinze dernières années en matière de croissance hétéroépitaxiale des matériaux nitrures sur différents substrats (silicium, saphir, carbure de silicium, diamant, composites...).

L'un des inconvénients de ces matériaux est l'importante densité de défauts structuraux au regard des semiconducteurs III-V à petit gap lesquels perturbent le transport vertical. Par ailleurs, il y a lieu de relever que ces défauts induisent des courants de fuites et la recrudescence de nouveaux défauts en cours de fonctionnement lesquels dégradent la fiabilité et le bon fonctionnement des dispositifs. Notons par ailleurs que les effets thermiques apparaissant en cours de fonctionnement dégradent fortement les propriétés de transport horizontal.

Ce premier chapitre est consacré aux rappels des propriétés structurales, thermiques, électriques et électroniques des matériaux nitrures à large bande interdite. Les notions de polarisation piézoélectrique et spontanée seront définies en montrant l'importance du rôle joué par le sens de la polarité dans les hétérostructures AlGa_N/Ga_N. Nous effectuerons dans un premier temps un rappel général des différentes techniques de croissances utilisées à ce jour pour la synthèse de matériaux III-N. Les différents types de défauts présents dans les semiconducteurs III-N seront ensuite décrits brièvement afin de mieux mettre en valeur le lien établi entre ces défauts et la fiabilité des composants à base de nitrure de gallium. Dans un deuxième temps, nous monterons quelques unes des propriétés fondamentales des nitrures III-N à large bande interdite obtenues par simulation Monte Carlo.

2 Propriétés structurales

2.1 Structure cristallographique

Les matériaux nitrures d'éléments III-N peuvent être synthétisés principalement selon deux phases cristallines dont l'une est stable et l'autre métastable. La phase stable est de phase wurtzite, de structure hexagonale et de groupe d'espace P63mc (Figure I.2). Elle est constituée de 2 réseaux hexagonaux compacts, l'un avec des atomes de Ga, l'autre avec des atomes de N, interpénétrés et décalés de $(0; 0; 3/8c)$. De plus, elle est formée par la séquence d'empilement ABAB suivant l'axe $[0001]$.

La phase métastable est de phase zinc blende, de structure cubique et de groupe d'espace $F\bar{4}3m$. Celle-ci est composée de 2 réseaux cubique à faces centrées décalés de $(1/4; 1/4; 1/4)$, puis présentée par la séquence d'empilement ABCABC suivant l'axe $[001]$. Les arrangements des atomes dans la maille élémentaire des phases wurtzite et zinc blende sont schématisés sur la Figure I.2. Les échantillons étudiés au cours de cette thèse ont été synthétisés exclusivement dans la phase wurtzite. Par conséquent, les propriétés physiques de la phase zinc blende ne seront pas décrites dans la suite de ce manuscrit.

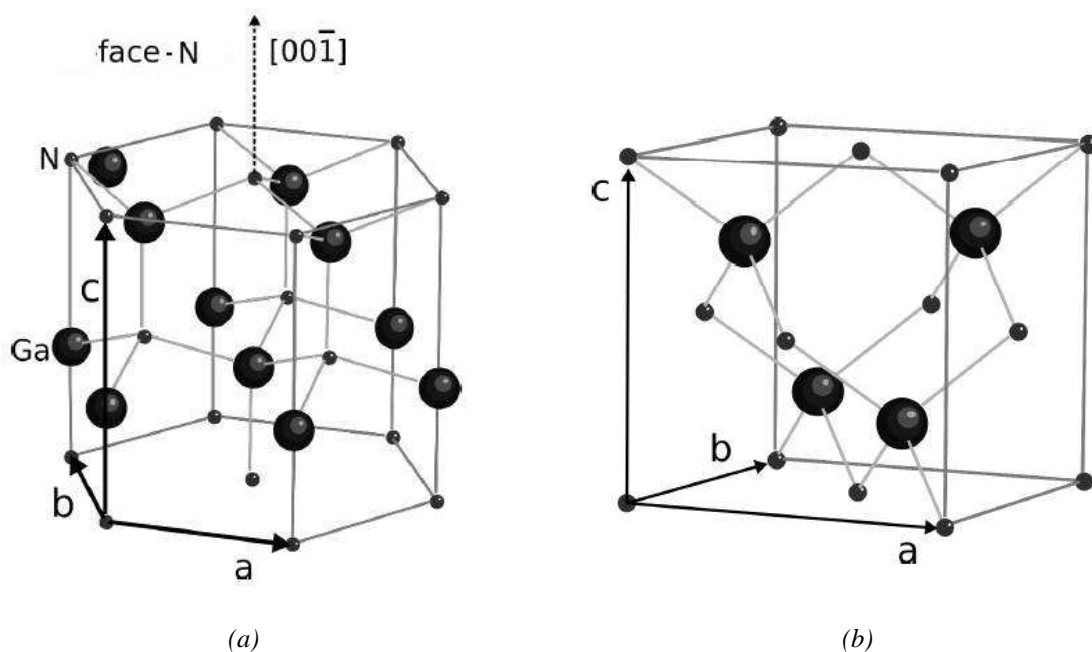


Figure I.2: Structure cristalline du GaN dans sa phase a) wurtzite et b) blende de zinc [1].

2.2 Substrat hôtes

En raison de la disponibilité de peu de substrats adaptés en paramètre de maille, la plupart des chercheurs ont recouru à l'hétéroépitaxie qui consiste à faire croître un matériau donné sur un autre matériau. La faible disponibilité de substrat GaN de taille raisonnable, fait de l'hétéroépitaxie, une solution alternative adaptée à la croissance de couches minces de nitrures à large bande interdite (MOVPE, HVPE, MBE...). Les propriétés et la qualité des couches GaN dépendent du substrat sur lequel il est déposé. De ce fait, une attention particulière sera portée sur le choix du substrat (Al_2O_3 , 6H-SiC, Si...) et en particulier au pourcentage de désaccord en paramètre de maille avec le GaN.

2.2.1 Substrat GaN

Les méthodes classiques de croissance de semiconducteurs massifs de type Czochralski (Si) ou Bridgman (GaAs) ne peuvent être transposables au cas du GaN en raison de ses conditions extrêmes de synthèse en température et en pression (2500°C et 45kbar). Bien que ces conditions soient difficilement atteignables expérimentalement, des monocristaux GaN massifs ont pu être néanmoins synthétisés à des températures de 1600°C et des pressions de 20kbar [2]. A ce jour, la croissance de ces monocristaux massifs nécessitent plus de 200h de croissance et sont limités à des surfaces de $1,5 \times 1,5 \text{cm}^2$ (Figure I.3). Il n'existe pas encore à l'heure actuelle une commercialisation à grand échelle de substrats GaN pour l'épitaxie de couches nitrures à large bande interdite.

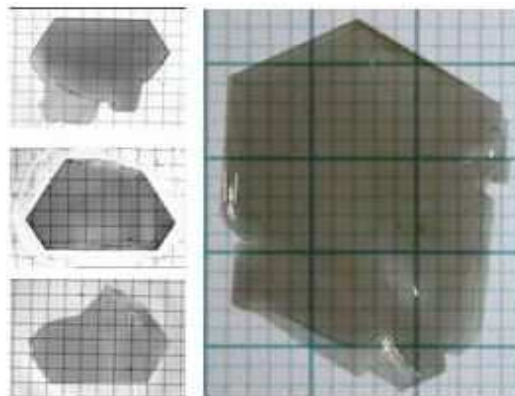


Figure I.3 : Cristaux de GaN massif obtenus par HNPS (1carreau =1mm) [2].

2.2.2 Substrat Al_2O_3

Pour des considérations de coût, le saphir fut longtemps utilisé en tant que substrat hôte et cela, malgré son fort désaccord de maille avec le GaN de 16% ($\delta a/a$) (Figure I.4). Le taux de dislocations est au mieux de l'ordre de 10^7 - 10^8cm^{-2} . Sa médiocre conductivité thermique le destine en priorité pour les applications optoélectroniques et non pas pour les applications de puissance. Son prix bon marché et sa disponibilité en wafer 2 pouces font du saphir un matériau très attractif notamment pour faire du développement [3].

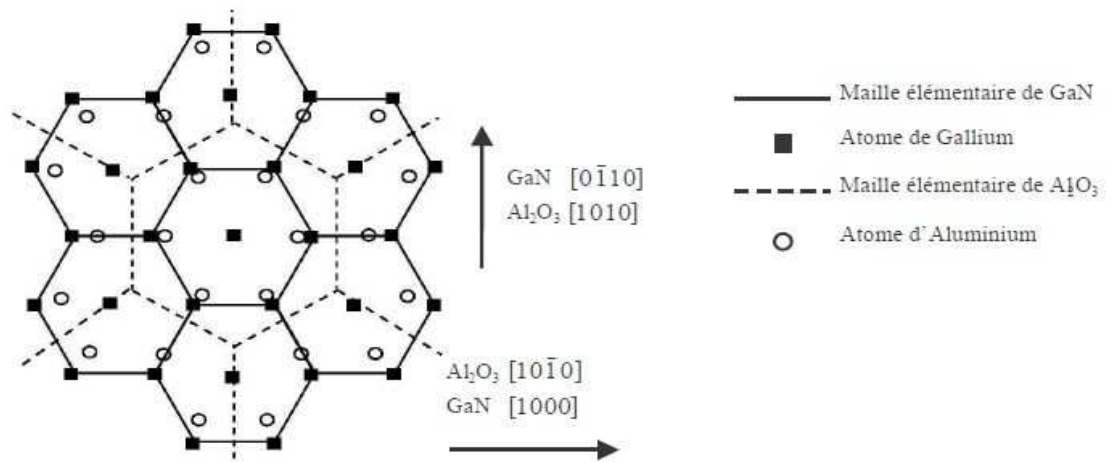


Figure I.4: Projection des plans atomiques des cations du saphir et du w-GaN dans le plan de croissance \bar{c} .

2.2.3 Substrat SiC

A l'heure actuelle, le carbure de Silicium est le substrat qui s'apprête le mieux pour faire croître du GaN avec de faibles taux de dislocation de l'ordre de $<10^7 \text{cm}^{-2}$. En effet, ce matériau présente l'avantage de posséder le plus petit désaccord de maille avec 3,5% ($\delta a/a$) et la conductivité thermique la plus élevée de tous les substrats utilisés jusqu'alors. En effet, la plupart des performances à l'état de l'art des composants de puissance hyperfréquence a été obtenue avec ce substrat. Néanmoins, son prix excessif constitue toujours un frein majeur pour son intégration dans des dispositifs à faible coût [3].

Pour remédier à ce problème, une approche innovante a été développée par la société SOITEC au moyen de la technologie *Smart-CutTM*. Les substrats dits "composites", sont

constitués d'un socle en SiC polycristallin (donc à moindre coût) auquel est reporté une fine couche de SiC monocristallin [4]. Toutefois, cette technique n'est possible que par l'accroche de ces 2 matériaux via une fine couche de SiO₂ à l'interface SiC_{mono}/SiC_{poly}, (SiCopSiC) ce qui limite la dissipation thermique dans le substrat (*Figure I.5*). Il existe aussi son homologue avec du Si monocristallin à la place du SiC monocristallin sous la désignation de SopSiC.



Figure I.5 : Schéma illustratif d'un substrat composite type SiCopSiC.

2.2.4 Substrat Si

La croissance de couches minces par hétéroépitaxie est faite dans le cas idéal à partir d'un substrat de même structure cristallographique. A titre d'exemple, la croissance du GaN wurtzite est synthétisé à partir d'un substrat hôte de structure hexagonale, qui peut être soit: AsGa, SiC ou GaN. Le choix porté sur l'orientation du substrat hôte se révèle être également un paramètre clef dans l'obtention de cette phase.

La croissance de GaN est également possible à partir d'un substrat hôte de structure cubique comme avec Si (111). Cela s'explique en partie par le fait que si l'on regarde un substrat cubique suivant son orientation (111), ce dernier s'apparente à celui d'une structure hexagonale (*Figure I.6*). Vis-à-vis des autres substrats, le silicium possède l'avantage de présenter un coût de revient très compétitif et à terme, une intégration possible des dispositifs GaN avec la technologie Si standard.

Encore plus élevé que le saphir, son désaccord de maille avec le GaN est de l'ordre de 17%, ce qui lui prévaut la particularité d'exhiber de forts taux de dislocations supérieurs à 10⁹cm⁻². Irrémédiablement, cette grande différence de paramètres de maille entraîne la présence d'une contrainte résiduelle élevée qui a tendance à former une mosaïque de

craquelles en surface. Malgré ces inconvénients, des résultats à l'état de l'art ont été obtenus en puissance hyperfréquence avec ce substrat.

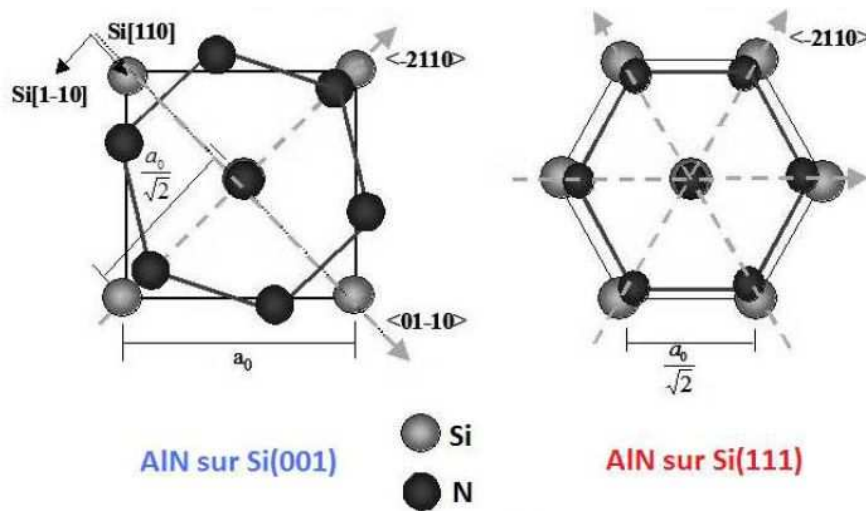


Figure 1.6 : Relation d'épitaxie entre l'AlN et le silicium (001) et (111) dans l'orientation prise lors de la croissance.

2.3 Technique de croissance

2.3.1 (MO,H)VPE

L'épitaxie en phase vapeur aux organométalliques est une technique de croissance chimique utilisant les composés organiques comme précurseurs des éléments métalliques. Dans le cas du GaN, le composé fréquemment utilisé est le triéthylgallium ou le triméthylgallium. Il en est de même pour l'indium ou l'aluminium. L'utilisation du TMGa comme précurseur est en général délaissée au détriment du TEGa. Les couches GaN déposées à partir du TMGa semble être contaminées par le carbone.

La pollution au carbone provient en majorité des radicaux méthyl très réactifs durant la croissance du GaN. Ce phénomène de contamination a été mis en évidence par les mesures DLTS de Lee *et al.* [5]. Le TEGa est souvent disponible sous forme liquide à température ambiante. L'hydrogène purifié est employé comme gaz vecteur pour entrainer les espèces dans le réacteur. L'azote est extrait de l'ammoniac qui se désagrège thermiquement au contact de la surface du substrat. La cinétique de décomposition du NH_3 reste tout de même très lente.

La molécule de diazote ne peut être utilisée en raison de sa haute stabilité. La croissance du GaN s'amorce généralement sous pression réduite à une température de 1000°C voire au-delà. La vitesse de croissance est de l'ordre de quelques $\mu\text{m/h}$ ce qui permet de réaliser aisément des couches de quelques microns d'épaisseur. La bonne reproductibilité d'une croissance à l'autre fait de ce procédé une technique de choix pour une production de masse. De plus, les couches GaN épitaxiées par cette technique semblent posséder des propriétés optiques et électriques supérieures à celles de la MBE.

L'épitaxie en phase vapeur à partir d'hydrures est une technique de croissance par voie chimique du même type que la MOVPE. Historiquement, cette technique a été empruntée par Maruska *et al.* en 1969 pour faire croître la première couche monocristalline de GaN de grande surface [6]. La différence entre ces deux techniques provient sans doute des précurseurs métalliques utilisés. Les composés organiques habituellement employés par la MOVPE sont tout simplement remplacés par le monochlorure de gallium.

La synthèse de ce dernier, s'effectue *in-situ* dans le réacteur, par écoulement de vapeurs d'HCl au-dessus d'une source métallique en gallium à 900°C. Le GaCl est ensuite acheminé vers le substrat d'accueil où il réagit avec l'ammoniac autour de 1000°C pour former le GaN. Cette technique de croissance a pour avantage de posséder des vitesses de croissance remarquables, typiquement de l'ordre de quelques dizaines $\mu\text{m/h}$. Bien souvent, elle permet de déposer des couches épaisses comprises entre 50 et 150 μm [7].

2.3.2 MBE

L'épitaxie par jet moléculaire est une technique de croissance cristalline sous ultravide (10^{-10} torr). Les éléments gallium, aluminium et indium sont évaporés ou sublimés à partir de sources solides portées à haute température. La température d'évaporation permet de contrôler le flux atomique arrivant sur l'échantillon. Les "faibles" températures de croissance (500°C-900°C) autorisées par la MBE nécessitent l'introduction d'une source plasma RF pour dissocier les précurseurs azotés, soit NH_3 ou soit N_2 .

L'épitaxie du GaN est amorcée par injection de sources solides (évaporées ou sublimées) dans un plasma d'azote sur un substrat porté à 800-850°C. Spécifique à la MBE, les vitesses de croissance sont relativement lentes ($<1\mu\text{m/h}$). Elles permettent notamment d'obtenir des interfaces particulièrement abruptes. L'épaisseur des couches déposées est contrôlée *in-situ*

par diffraction d'électrons à incidence rasante (RHEED). Cette technique présente l'avantage de synthétiser des couches GaN face gallium ou azote contrairement à la (MO,H)VPE avec laquelle seule la face gallium peut être obtenue.

Le mode de croissance du GaN sur l'AlN en MBE dépend fortement de la température de croissance, ce qui n'est pas le cas de l'AlN sur le GaN (toujours bidimensionnel). A haute température $T \geq 680^\circ\text{C}$, on observe une formation d'îlots après dépôt de 2 monocouches bidimensionnelles: c'est le mode de croissance Stranski-Krastanov. A basse température $T = 640-660^\circ\text{C}$ en revanche, la croissance est pratiquement bidimensionnelle: c'est le mode de croissance Frank-Vander Merwe. Ainsi, en jouant sur la température de croissance, il devient possible de réaliser soit des boîtes quantiques de GaN, soit des super-réseaux d'AlN/GaN [8].

2.4 Défauts structuraux

L'énorme désaccord en paramètre de maille entre le GaN et la totalité des substrats disponibles, entraîne la formation de fortes densités de défauts dans le matériau. Ces défauts sont à l'origine du dopage résiduel de type n dans les couches GaN. Par ailleurs, des défauts de nature ponctuelle ou étendue sont susceptibles d'être formés dans le GaN.

2.4.1 Défauts ponctuels

- Les lacunes d'azote et de gallium:

L'énergie de formation des lacunes dépend des conditions de croissance. Les lacunes d'azote se forment préférentiellement sous conditions de croissance riches en gallium et lorsque les couches sont dopées type N. Quant aux lacunes de gallium, elles sont plutôt favorisées par une croissance riche en azote et se créent plus aisément dans les couches dopées P [9]. Bien qu'en principe la lacune d'azote devrait jouer le rôle d'un dopant de type P, elle semble former un complexe agissant comme un dopant de type N. De la même façon, la lacune de gallium semble agir en tant qu'accepteur dans le nitrure de gallium et par conséquent, peut être à l'origine de phénomènes de compensation.

- Atomes d'impuretés involontaires en sites substitutionnel:

La plupart des impuretés que l'on rencontre dans les couches nitrures à large bande interdite sont le silicium, l'oxygène et le carbone. Les sources de contamination sont nombreuses et peuvent avoir plusieurs origines. Elles peuvent provenir essentiellement des fuites du réacteur ou de polluants sur les parois métalliques de ce dernier ; c'est le cas notamment de l'oxygène. Elles peuvent aussi provenir des précurseurs organométalliques utilisés lorsqu'il s'agit des impuretés carbonées. En fonction de leurs rayons atomiques respectifs, l'oxygène et le carbone se positionnent en priorité en site substitutionnel d'azote. Les résultats expérimentaux montrent que les impuretés oxygène agissent comme des donneurs. Seules les impuretés carbonées semblent jouer le rôle de dopants accepteurs.

- Atomes en interstices:

Les atomes interstitiels d'azote ou de gallium nécessitent une énergie de formation très élevée, c'est pourquoi leur formation est peu probable.

2.4.2 Défauts étendus

L'épaisseur critique de GaN est atteinte dès les premières couches épitaxiées. La relaxation du matériau induit une forte concentration de dislocations et de fautes d'empilement dans la couche. La descente en température lors du refroidissement entraîne une contrainte résiduelle importante. Celle-ci résulte de l'écart entre les coefficients de dilation thermique du substrat et de la couche tampon de GaN. Cette contrainte est relaxée en partie par la formation et la propagation des dislocations existantes à travers la couche. Notons que dans le w-GaN, certaines dislocations ont tendance à se propager parallèlement à la direction de croissance \vec{c} (*Figure I.7*). A ce jour, la concentration de ces dislocations traversantes reste largement supérieure à celle des autres semiconducteurs III-V comme avec GaAs ou InP.

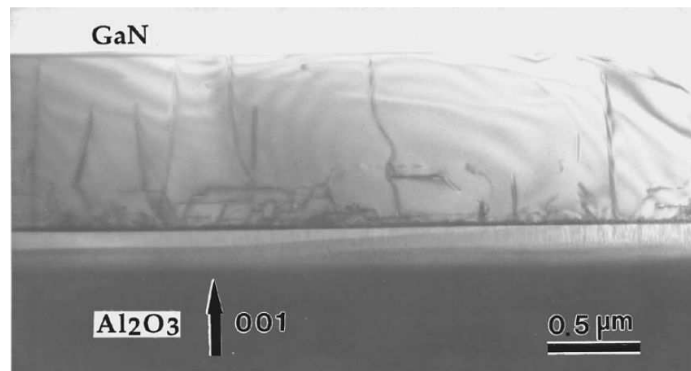


Figure I.7 : Image de défauts étendus pris à l'aide d'un microscope à transmission électronique [10].

2.5 Couche de nucléation

En raison de la forte désadaptation en paramètre de maille et de l'important écart des coefficients thermiques entre la couche épitaxiée et le substrat, il est difficile de faire croître des couches monocristallines en GaN de haute qualité contenant peu de défauts structuraux (fautes d'empilements, dislocations, V-shapes, centre d'inversion...). L'introduction d'une couche de nucléation débutant avec AlN entre le substrat (Al₂O₃, Si, SiC) et la couche tampon GaN permet une amélioration considérable des propriétés électrique et optique des couches synthétisées (Figure I.8).

Cette technique fut en premier utilisée par Yoshida et *al.* en 1983 pour la croissance de couches GaN par MBE et fut ensuite adaptée par Amano et *al.* en 1985 pour la croissance de couches GaN par MOVPE [11-12]. Notons qu'il existe une forte corrélation entre les défauts structuraux des couches épitaxiées et le choix porté sur la technique de croissance employée: (MO,H)VPE, MBE....

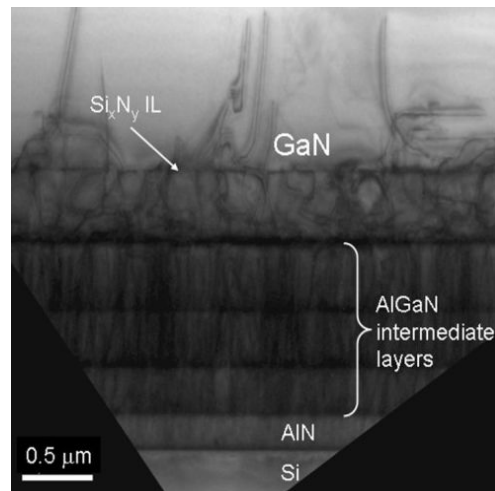


Figure 1.8 : Exemple d'image prise à l'aide d'un microscope à transmission électronique d'une couche GaN épitaxiée sur un substrat de silicium (111) [13].

3 Propriétés thermiques

Les paramètres de maille a et c des nitrures dépendent de la température dont l'évolution peut être décrite par les coefficients de dilatation thermique $\Delta a/a$ et $\Delta c/c$. On rappelle que le paramètre a représente le paramètre de maille selon la direction [1120], tandis que c est le paramètre de maille selon la direction [0001]. Le *Tableau 1.1* présente les coefficients de dilatation thermiques (α_a , α_c) et de conductivité thermique (λ) du w-GaN, w-AlN et w-BN.

Matériaux	w-GaN	w-AlN	w-BN
α_a (10^{-6}K^{-1})	5,6	4,2	2,7
α_c (10^{-6}K^{-1})	3,2	5,3	2,3
λ ($\text{W.cm}^{-1}.\text{K}^{-1}$)	1,3	2,9	0,6

Tableau 1.1 : Coefficients de dilatation thermique α et à 300K du w-GaN, w-AlN et w-BN.

L'écart de dilatation thermique entre les matériaux nitrures et leur substrat hôte introduit des contraintes mécaniques ayant un impact important sur la densité de dislocations du réseau ainsi que sur les polarisations du matériau. L'ensemble des structures étudiées dans cette thèse est épitaxié sur substrat saphir pour des questions évidentes de coûts. L'écart entre ces

coefficients de dilatation thermique avec ceux du saphir est par conséquent important pour la croissance. A titre comparatif, la conductivité thermique du saphir se situe approximativement autour de $0,4 \text{ W.cm}^{-1}.\text{K}^{-1}$, soit trois fois celle du w-GaN, sept fois celle de w-AlN et dix-huit fois celle du w-BN.

Autre caractéristique, il apparaît que la largeur de bande interdite soit également liée aux paramètres cristallins a et c . La dépendance en température de la bande interdite du w-GaN et w-AlN est tracée sur la *Figure I.9*, celle-ci est décrite par la loi de Varshni:

$$E_g(T) = E_g(0) - \alpha T^2 / (T + \beta)$$

Où $E_g(0)$ est l'énergie du gap à 0K, α et β sont des constantes déterminées à partir de mesures de photoluminescence et d'absorption.

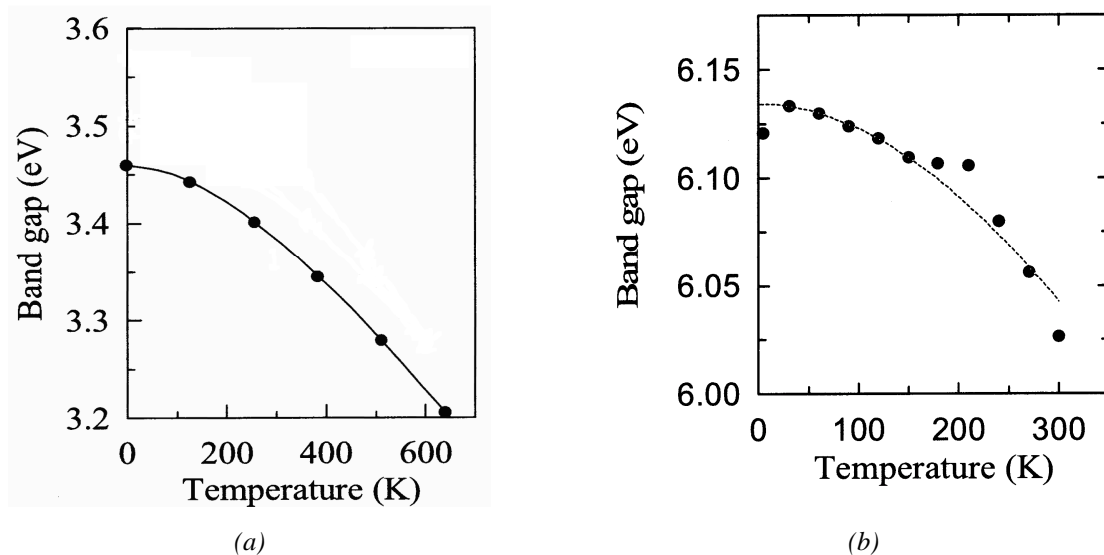


Figure I.9 : Largeur de la bande interdite en fonction de la température a) w-GaN [14] b) w-AlN [15].

4 Propriétés électriques

4.1 Polarisation spontanée

Dans les matériaux III-N, l'élément N (azote) possède une électronégativité plus importante que celle de l'élément III métallique (gallium, aluminium, bore). La répartition des électrons de valence le long de la liaison métal-azote se concentre essentiellement autour de l'atome d'azote. Il en résulte un fort moment dipolaire lié à cette asymétrie de charges. La

contribution des moments dipolaires propre à chaque tétraèdre du réseau forme au niveau microscopique un moment dipolaire parallèle à l'axe \vec{c} (Figure 1.10). Ceci a été vérifié pour w-GaN et w-AlN, cependant nous supposons que cela reste vrai pour w-BN.

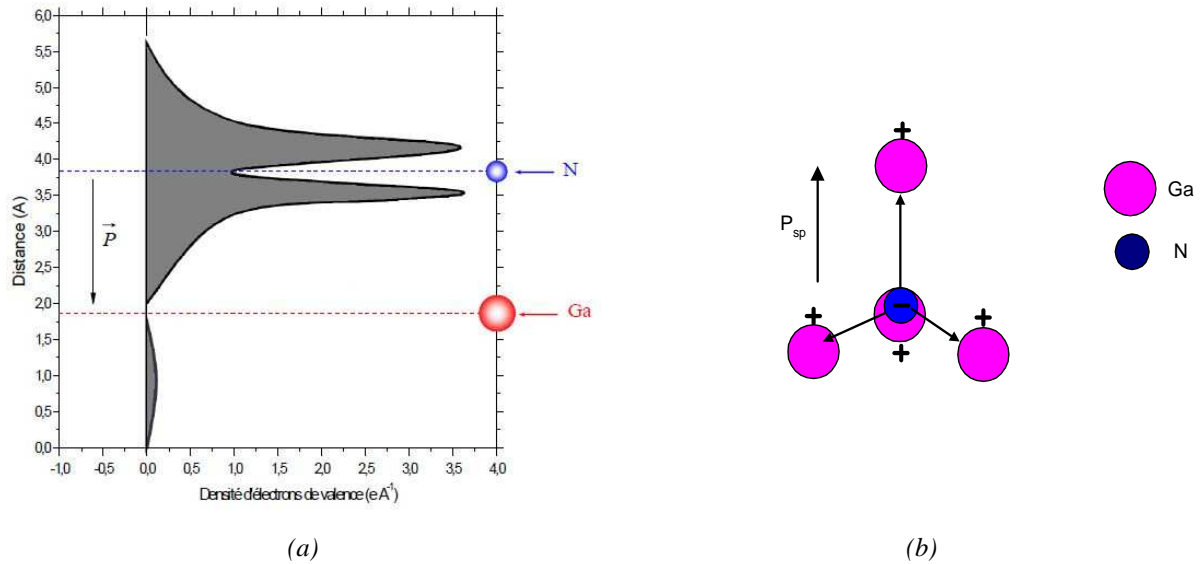


Figure 1.10 : (a) Répartition des électrons de la bande de valence dans une liaison Ga-N. (b) Résultante des moments dipolaires pour un tétraèdre w-GaN. Il en est de même pour w-AlN et w-BN.

La somme vectorielle de tous ces dipôles élémentaires génère en volume une polarisation macroscopique dite "spontanée" [16] (Figure 1.5). En l'absence d'un champ extérieur, celle-ci induit un champ électrique interne de signe contraire à la polarisation spontanée. Selon les cas, d'un cristal est fini face (Ga,Al,B) ou N, la polarisation spontanée sera orientée soit de sens direct soit de sens opposé à l'axe de croissance \vec{c} du matériau. Les valeurs de la polarisation spontanée (P^{sp}) pour GaN, AlN et $Al_xGa_{1-x}N$ sont regroupées dans le Tableau 1.2 [17].

Matériaux	GaN	AlN	BN	$Al_xGa_{1-x}N$
c/a	1,6259	1,6010	1,6557	$1,6259-0,0249x$
P_{sp} (C/m ²)	-0,029	-0,081	-	$-0,029-0,052x$

Tableau 1.2: Polarisation spontanée dans GaN, AlN et $Al_xGa_{1-x}N$.

4.2 Polarisation piézoélectrique

Le désaccord en paramètre de maille entre le substrat et le GaN génère une contrainte mécanique dans le plan perpendiculaire à la direction de croissance du matériau. Cette contrainte biaxiale entraîne une déformation structurale du cristal tétraédrique qui modifie le rapport de paramètre de maille (c/a) de la structure. Il en résulte une non-superposition des barycentres de charges positives (gallium, aluminium ou bore) et négatives (azote) qui donne lieu à une polarisation piézoélectrique suivant la direction de l'axe \vec{c} (Figure I.11).

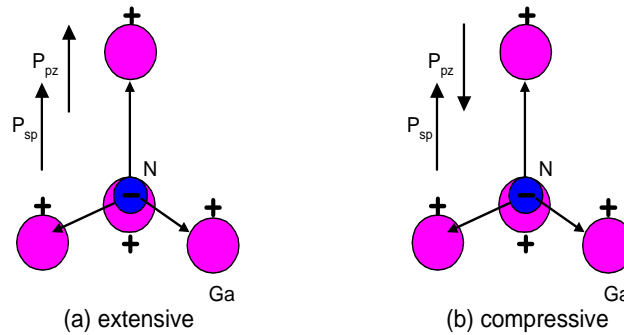


Figure I.11 : Sens de la polarisation piézoélectrique dans w-GaN. Il en est de même pour w-AlN et w-BN.

La polarisation piézoélectrique peut être calculée à partir des coefficients piézoélectriques e_{33} et e_{31} suivant l'équation [18]:

$$P_{PE} = e_{33}E_z + e_{31}(E_x + E_y) \quad (1)$$

où $E_z = (c - c_0)/c_0$ est la contrainte selon l'axe \vec{c} , $E_x = E_y = (a - a_0)/a_0$ est la contrainte dans le plan ab et où a_0 et c_0 sont les paramètres de maille à l'équilibre c.-à-d. sans contrainte.

La relation entre les paramètres de maille a et c du w-GaN est donnée par:

$$(c - c_0)/c_0 = -2C_{13}/C_{33} (a - a_0)/a_0 \quad (2)$$

Où C_{13} et C_{33} sont les constantes élastiques (Tableau I.3).

Utilisant les relations (1) et (2), l'expression de la polarisation piézoélectrique dans la direction de l'axe \vec{c} s'exprime par:

$$P_{PE} = 2(a - a_0)/a_0 (e_{31} - e_{33}(C_{13}/C_{33}))$$

Or, on sait que la quantité $(e_{31} - e_{33}(C_{13}/C_{33}))$ est négative dans l'ensemble des alliages AlGaIn. Ainsi, la polarisation piézoélectrique sera de signe négatif dans le cas d'une contrainte en tension [19] et de signe positif dans le cas d'une contrainte en compression. Par

convention, on rappelle que le signe de la polarisation piézoélectrique est confondu avec celui de l'axe de croissance \vec{c} .

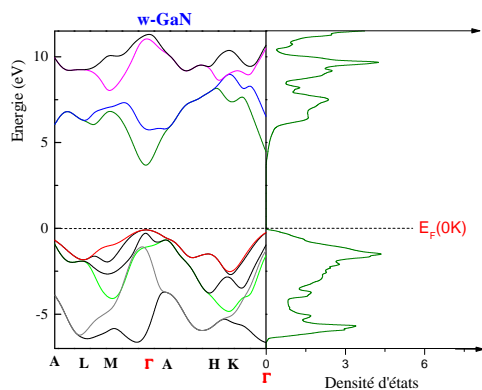
Matériaux	AlN	GaN	Al _x Ga _{1-x} N	BN
e_{31} (C/m ²)	-0,60	-0,49	-0,49-0,11x	0,31
e_{33} (C/m ²)	1,46	0,73	0,73+0,73x	-0,94
C_{13} (C/m ²)	108	103	103+5x	61
C_{33} (C/m ²)	373	405	405-32x	1061

Tableau I.3 : Paramètres de polarisation piézoélectrique pour des matériaux à base de nitrure de gallium.

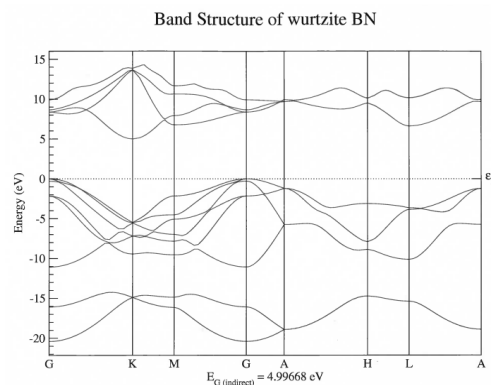
5 Propriétés électroniques

5.1 Structure de Bandes

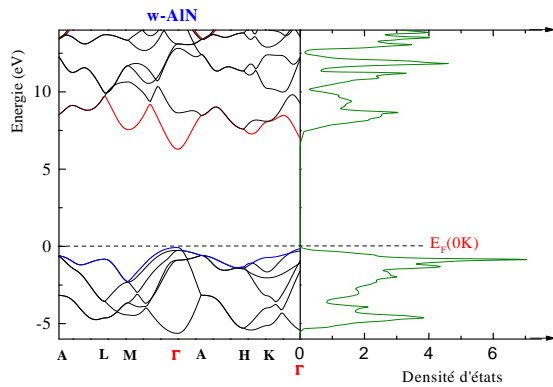
Le code de calcul *ab-initio* développé au sein de notre équipe nous a permis d'extraire la structure de bandes de tous les composés III-N considérés dans le cadre de ce travail [20]. Les bandes interdites des binaires w-GaN, w-BN et w-AlN apparaissent au niveau de la vallée Γ située au centre de la zone de Brillouin ($k=0$) (Figure I.12). La largeur de bande interdite à température ambiante est évaluée à 3,4eV pour le w-GaN, à 5,8eV pour le w-BN et à 6eV pour le w-AlN.



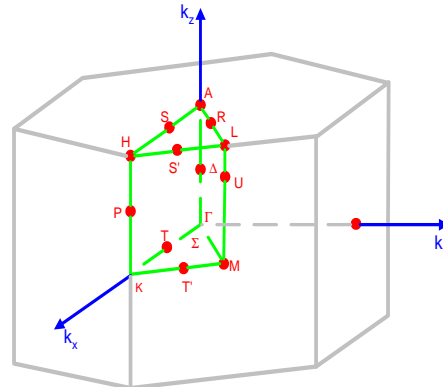
(a) Structure de bande et densité d'états du w-GaN



(b) Structure de bande et densité d'états du w-BN



(c) Structure de bande et densité d'états de w-AlN



(d) Schématisation de la première zone de Brillouin dans un cristal de w-(GaN,AlN,BN)

Figure I.12 : Structure de bandes de w-GaN, w-AlN) et w-BN avec leur densité d'états associée ainsi que les directions de plus hautes symétries en relation avec leur structure cristalline respective.

Contrairement au GaAs où les vallées supérieures sont restreintes à quelques centaines de meV de la vallée centrale Γ , celles-ci sont distantes de l'ordre de quelques eV dans les nitrures. Compte tenu de leurs courbures de bandes plus plates en centre de zone de Brillouin, les électrons des matériaux III-N disposent d'une masse effective plus grande qu'avec GaAs. A titre comparatif, la masse effective au niveau de la vallée Γ est estimée à $0,2m_0$ pour w-GaN, à $0,35m_0$ pour le w-BN et à $0,4m_0$ pour w-AlN, alors qu'elle est seulement de $0,066m_0$ pour GaAs. Cette différence notable n'est pas sans conséquence puisque la mobilité est plus faible pour les éléments w-GaN ($1000\text{cm}^2/\text{Vs}$) et w-AlN ($300\text{cm}^2/\text{Vs}$), comparativement au GaAs ($8600\text{cm}^2/\text{Vs}$).

5.2 Transport électronique

5.2.1 Régime stationnaire

La plupart des matériaux nitrures présente un dopage résiduel de type N. Ces semiconducteurs à grand gap disposent de ce fait d'un réservoir en électrons dans la bande de conduction. Sous l'action d'un champ électrique, ces porteurs sont accélérés et voient leur énergie augmenter. Le régime de transport stationnaire est atteint quand il y a équilibre entre l'accélération communiquée par le champ électrique et le "freinage" par les collisions avec le réseau (phonons) et avec les impuretés. La vitesse stationnaire est par conséquent la vitesse

d'équilibre atteinte par une population de porteurs placée dans un champ donné. Les variations de la vitesse électronique dans GaN et AlN en fonction du champ électrique appliqué ont été calculées par la méthode *Monte-Carlo*. L'ensemble de ces caractéristiques sont représentées sur la **Figure I.13**.

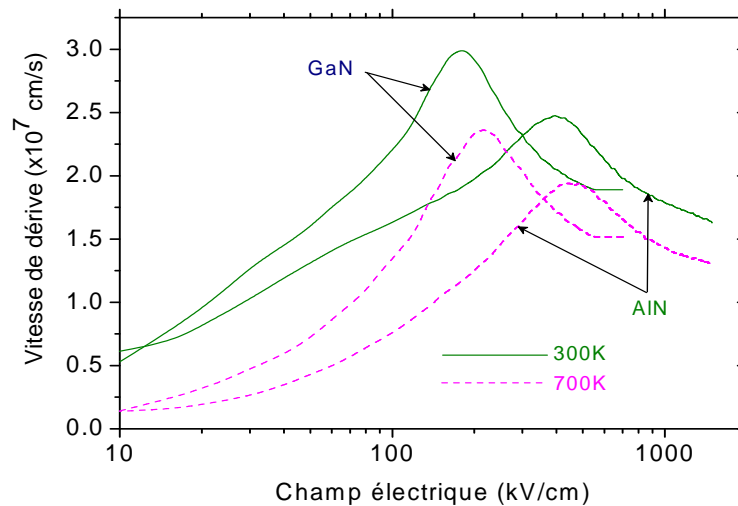


Figure I.13 : Caractéristiques vitesse - champ électrique en régime de transport stationnaire pour deux températures de réseau 300K et 700K calculées par la méthode Monte Carlo (au laboratoire IEMN). Les deux semiconducteurs de structure wurtzite sont n.i.d à 10^{15} cm^{-3} et correspondent à n-GaN et n-AlN.

A bas champ, nous retrouvons la définition habituelle de la mobilité comme étant le rapport entre la vitesse électronique et le champ électrique appliqué: $\vec{v} = \mu \vec{E}$. Cette relation n'est plus valable à fort champ, où la mobilité n'est plus constante et varie fortement avec le champ électrique. Au-delà d'un certain champ critique, les électrons acquièrent assez d'énergie pour transférer vers les vallées latérales, ce qui conduit à une chute de la mobilité, puis à une saturation de la vitesse de l'ensemble des porteurs à v_{sat} .

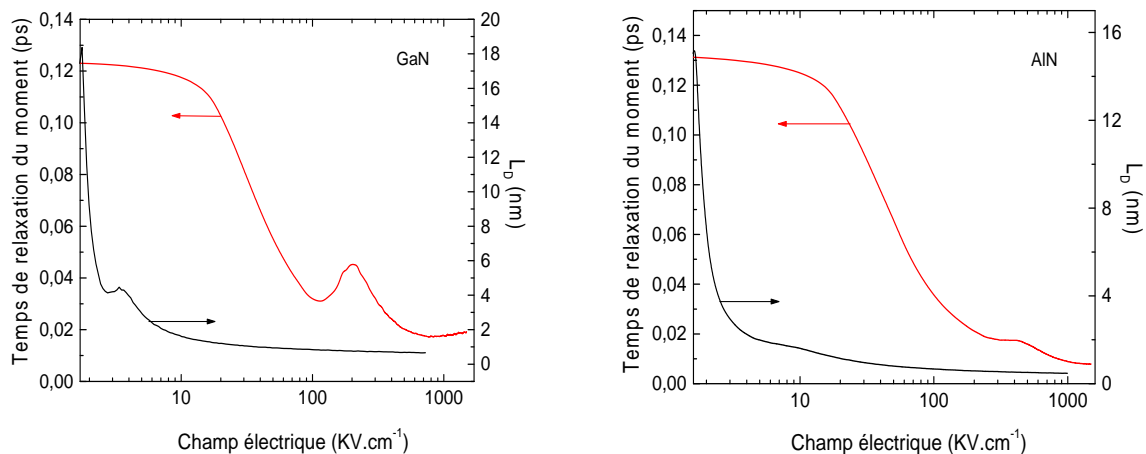
Ce champ critique est plus grand dans le matériau GaN que dans l'AlN dans la mesure où l'écart en énergie $\Delta\epsilon_{\Gamma_1}$ est plus important et les probabilités d'interaction avec les phonons optiques polaires sont plus élevées. A température ambiante, de nombreux électrons possèdent d'emblée une énergie supérieure à l'énergie des phonons optiques polaires. L'augmentation du dopage produit une diminution de la mobilité par interactions avec les impuretés. Il en est de même lorsque l'on augmente la température du réseau.

5.2.2 Régime transitoire

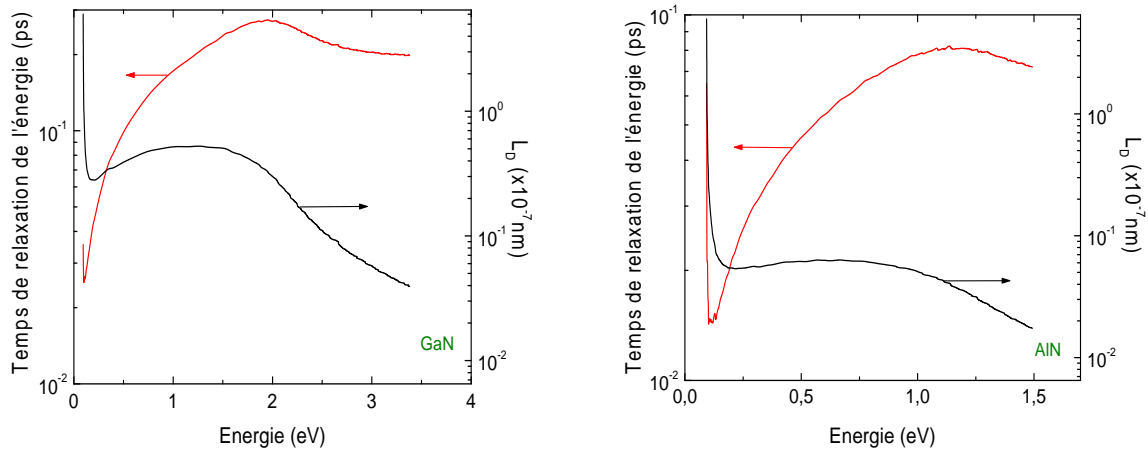
Aux tous premiers instants, les électrons subissent très peu d'interactions lorsqu'ils sont brusquement soumis à un échelon de champ électrique, qu'il soit temporel ou spatial. Il en résulte que la vitesse électronique peut transitoirement être plus importante que la vitesse en transport stationnaire: il s'agit du phénomène de survitesse.

La courte période avant toute collision correspond au régime de transport balistique. Ces phénomènes sont régis par deux constantes de temps caractéristiques: le temps de relaxation du moment τ_m qui caractérise la rapidité avec laquelle l'orientation du vecteur vitesse relaxe et le temps de relaxation de l'énergie des électrons τ_e . Ces temps de relaxation dépendent de l'énergie des porteurs.

D'après le modèle de Drude, la longueur de diffusion L_D est une fonction du temps de relaxation τ des porteurs et de leur mobilité μ tel que: $L_D=(D\tau)^{1/2}$ et $D/\mu=k_B T/q$ où D est le coefficient de diffusion des porteurs. L'évolution du temps de relaxation et de la longueur de diffusion en fonction du champ électrique pour GaN et AlN à 300K sont représentés sur les **Figures I.14** et **I.15**. Les résultats de ces calculs indiquent clairement qu'à forts champs électriques appliqués, τ diminue, ce qui a pour conséquence d'entraîner une diminution de L_D .



Figures I.14 : Evolution du temps de relaxation du moment et de la longueur de diffusion en fonction du champ électrique pour GaN et AlN à 300K.



Figures I.15 : Evolution du temps de relaxation du moment et de la longueur de diffusion en fonction du champ électrique pour GaN et AlN à 300K.

Les masses effectives des électrons et des trous dans un semiconducteur sont directement liées à la structure de bande de celui-ci. Elles sont proportionnelles à l'inverse de la courbure de la structure de bande respectivement au voisinage du minimum et du maximum des bandes de conduction et de valence. La masse effective des électrons dans le GaN non dopé est plus petite que celle de l'AlN (Figure I.16)

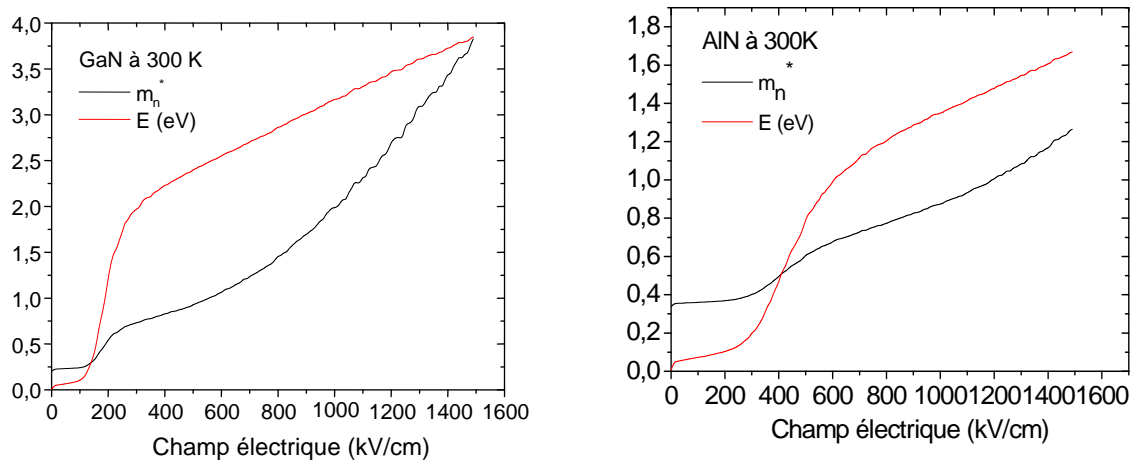


Figure I.16 : Variation de la masse effective m_n^* et de l'énergie E des électrons dans GaN et AlN en fonction du champ électrique.

La variation de la mobilité des électrons dans GaN et AlN en fonction de la température est représentée dans la Figure I.17. Différents mécanismes limitent la mobilité et, suivant la température, chacun d'eux peut jouer un rôle déterminant. A basse température, la diffusion

par les impuretés neutres ou chargées est le phénomène dominant. La mobilité dépend alors de la qualité du matériau qui est importante car les électrons sont piégés par les impuretés [21].

A température moyenne, ce sont les phonons acoustiques via le potentiel de déformation et le champ piézoélectrique, particulièrement important dans le cas du GaN en raison du caractère fortement ionique des liaisons, qui constituent le phénomène dominant. Enfin, au-delà de la température ambiante, ce sont les phonons optiques qui limitent le plus la mobilité. La Figure I.18 représente la mobilité des électrons dans GaN nid (10^{15}cm^{-3}) déterminée en fonction de la température par la méthode Monte Carlo. Ces résultats ont été confirmés par l'expérience.

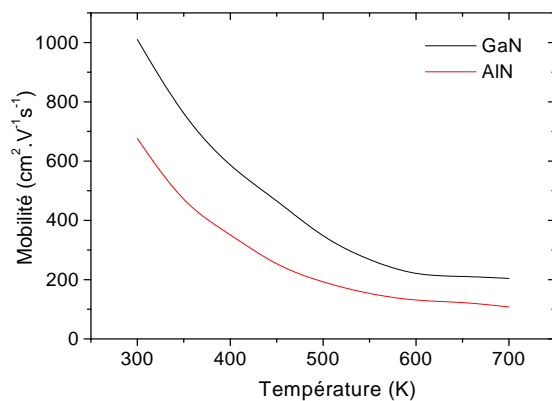


Figure I.17 : Variation de la mobilité des électrons dans GaN et AlN en fonction de la température.

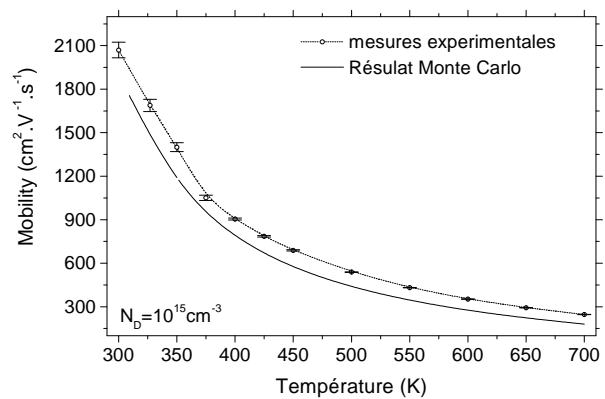


Figure I.18 : Détermination de la mobilité théorique (Monte-Carlo) des électrons dans le GaN et expérimentales en fonction de la température.

6 Conclusion du chapitre

Dans ce chapitre, nous avons rappelé les propriétés physiques remarquables des matériaux III-N à large bande interdite et montré le caractère polaire particulier de ces semiconducteurs. Les notions de polarisations piézoélectrique et spontanée ont été définies en vu de mieux comprendre et de maîtriser les différents mécanismes de transport dans les hétérostructures ainsi que l'origine des électrons dans les dispositifs étudiés.

Nous avons tenté ensuite d'exposer les principaux facteurs limitatifs qui dégradent les performances des dispositifs lors de leur fonctionnement. Comme nous avons essayé de le montrer, ces limitations sont essentiellement dues à deux phénomènes physiques couplés. Le premier correspond à l'auto-échauffement du composant notamment lié au choix du substrat. C'est la raison pour laquelle, nous avons établi une brève revue des substrats employés dans la croissance de couches nitrures, afin de comparer leur pouvoir de dissipation thermique respectif.

Le second facteur provient de la présence de pièges liés aux défauts en surface, aux interfaces et en volume du matériau. Ainsi, différentes solutions ont été proposées pour minimiser l'effet de ces pièges. En effet, l'utilisation d'une couche de nucléation en (Al,Ga)N a permis de réduire le taux de dislocations de plusieurs ordres de grandeurs et de minimiser le dopage résiduel dans la couche tampon.

Nous avons terminé ce chapitre en décrivant la simulation,, aux moyens de calculs *Monte-Carlo*, des propriétés de transport des matériaux nitrures afin d'établir l'évolution de la mobilité électronique en fonction du champ électrique et de la température. Cette étude a pour objet de décrire et de déterminer les paramètres clés intervenant et limitant les performances des dispositifs élaborés.

7 Références bibliographiques

- [1] A. P. Grzegorzczak, PhD, University of Nijmegen.
- [2] S. Porowski, *Journal of Crystal Growth* 166 (1996) 583-589.
- [3] S.J. Heikman, PhD, University of California, Santa Barbara.
- [4] M.-A. di Forte Poisson, M. Magis, M. Tordjman, J. Di Persio, R. Langer, L. Toth, B. Pecz, M. Guziewicz, J. Thorpe, R. Aubry, E. Morvan, N. Sarazin, C. Gaquiere, G. Meneghesso, V. Hoel, J.-C. Jacquet and S. Delage, *Journal of Crystal Growth*, **310** 23 (2008) 5232-5236.
- [5] W. I. Lee, T. C. Huang, J. D. Guo, and M. S. Feng, *Appl. Phys. Lett.* **67** (1995) 1721.
- [6] H. P. Maruska and J. J. Tietjen, *Appl. Phys. Lett.* 15 327 (1969).
- [7] M. K. Kelly, R.P. Vaudo, V. M. Phanse, L. Gorgens, O. Ambacher and M. Stutzmann, *Jpn. J. Appl.Phys.* **38** (1999) L217-L219.
- [8] B. Daudin, F. Widmann, G. Feuillet, Y. Samson, M. Arlery, and J. L. Rouvière, *Phys. Rev. B* **56** (1997) R7069–R7072.
- [9] J. Neugebauer, C.G. Van de Walle, *Phys. Rev. B* **50** (1994) 8067.
- [10] D. Kapolnek, X. H. Wu, B. Heying, S. Keller, B. P. Keller, B. P. Keller, U. K. Mishra, S. P. DenBaars and J. S. Speck, *Appl. Phys. Lett.* **67** (1995) 1541.
- [11] S. Yoshida, S. Misawa, and S. Gonda, *Appl. Phys. Lett.* **42** (1983).
- [12] H. Amano, N. Sawaki, I. Akasaki and Y. Toyoda, *Appl. Phys. Lett.* **48** (1986).
- [13] <http://www.imec.be/ScientificReport/SR2008/HTML/1225014.html>
- [14] V. Bougrov, M.E. Levinshtein, S.L. Rumyantsev, A. Zubrilov, Eds. Levinshtein M.E.
- [15] Guo, Q, Yoshida A., *Jpn. J. Appl. Phys.* **33** (1, 5A) (1994) 2453-2456.
- [16] F. Bernardini, V. Fiorentini, D. Vanderbilt, *Phys. Rev. B* **56** (1997) R10024.
- [17] O. Ambacher, J. Smart, J.R. Shealy, N.G. Weimann, K. Chu, M. Murphy, W.J. Schaff, L.F. Eastman, R. Dimitrov, L. Wittmer, M. Stutzmann, W. Rieger, J. Hilsenbeck, J. *Appl. Phys.* **85** (1999) 3222.
- [18] O. Ambacher, B. Foutz, J. Smart, J.R. Shealy, N.G. Weimann, K. Chu, M. Murphy, A.J. Sierakowski, W.J. Schaff, L.F. Eastman, R. Dimitrov, A. Mitchell, M. Stutzmann, J. *Appl. Phys.* 87 (2000) 334.

- [19] E.T. Yu, G.J. Sullivan, P.M. Asbeck, C.D. Wang, D. Qiao, S.S. Lau, Appl. Phys. Lett. **71** (1997) 2794.
- [20] M. Rousseau, communication interne (IEMN).
- [21] A.F.M. Anwar, S. Wu, R.T. Webster, IEEE Transactions on Electron Devices **48** (2001) 567.

Chapitre 2

**Etude théorique du transport vertical au travers
d'une diode RTD AlGaN/GaN**

Table des matières

1	INTRODUCTION	37
2	PRINCIPE DE FONCTIONNEMENT	38
3	FORMALISME NEGF	39
3.1	SYSTEME ISOLE	40
3.1.1	<i>Fonctions de Green G^R, G^A</i>	41
3.1.2	<i>Fonction spectrale $A(r,r',E)$</i>	42
3.2	SYSTEME OUVERT	43
3.2.1	<i>Fonctions de Green G^R, G^A</i>	44
3.2.2	<i>Fonction spectrale $A(r,r',E)$</i>	45
3.2.3	<i>Densité électronique $\rho(r,E)$</i>	49
3.2.4	<i>Densité de courant</i>	50
4	APPLICATION A LA RTD	52
4.1	HAMILTONIEN DU SYSTEME.....	52
4.2	EQUATION DE POISSON	55
4.3	PRESENTATION DU PROGRAMME	57
4.3.1	<i>Structure du code</i>	57
4.3.2	<i>Temps de calculs</i>	58
4.4	ANALYSES ET DISCUSSIONS.....	60
4.4.1	<i>Influence de l'épaisseur des espaceurs GaN nid</i>	61
4.4.2	<i>Influence de la largeur du puits GaN</i>	63
4.4.3	<i>Influence de l'épaisseur des couches barrière AlN</i>	67
4.4.4	<i>Influence du taux d'aluminium des couches barrières AlGaN</i>	68
5	CONCLUSION	70
6	REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES	71

1 Introduction

De part leur large bande interdite de nature directe et insensible au rayonnement du visible, les matériaux nitrures sont des candidats prometteurs pour des applications en optoélectronique, tels que les diodes électroluminescentes ou les photodétecteurs X-UV entre autres. De plus, les énergies relativement élevées des phonons optiques longitudinaux (92 meV dans GaN) les rendent également attractifs pour des dispositifs optiques à transitions inter sous-bandes fonctionnant à haute température tels que les photodétecteurs à puits quantiques et les lasers à cascade quantique terra-Hertz [1-2].

Cependant, en vue de fabriquer de tels dispositifs, un contrôle précis du transport vertical dans les hétérostructures à base de semiconducteurs III-N à large bande interdite s'avère être impératif pour minimiser les résultats empiriques et surtout cibler les hétérostructures les plus adéquates. Par ailleurs, les diodes à effet tunnel résonant constituent les composants de base pour la compréhension des mécanismes de transport par effet tunnel dans les hétérostructures à multi-puits. En effet, grâce à l'effet de leur résistance différentielle négative, les diodes à effet tunnel résonant sont des composants quantiques très prometteurs pour des applications de commutation haute fréquence et pour la réduction de la complexité des circuits intégrés.

Comparés aux autres dispositifs à résistance différentielle négative telles que les diodes GUNN [3], les RTDs présentent la particularité de posséder une capacité de jonction relativement faible, les destinant ainsi à des applications en haute fréquence. Durant ces dernières décennies, différentes hétérojonctions (GaAs/AlAs [4], InAs/AlSb [5]) ont été utilisées pour la fabrication de RTDs. Contrairement aux matériaux standards, les semiconducteurs III-N permettent d'obtenir des rapports en courant pic/vallée ($J_{pic}/J_{vallé}$) plus importants à température ambiante de part la grande discontinuité de bande de conduction entre l'AlN et le GaN ($\Delta E_C = 1,75\text{eV}$) [6].

La finalité envisagée quant à cette étude consiste à déterminer la faisabilité pratique de la fabrication d'oscillateurs de puissance fonctionnant à haute fréquence. Ceci constitue un challenge car les difficultés rencontrées sont énormes pour plusieurs raisons : manque de disponibilité matériau de bonne qualité ainsi que les hétérostructures désirées, problème de la maturité du matériau et incertitudes quant aux mécanismes de transport vertical dans ces nano-micro-objets. Les outils de simulations rigoureuses n'existent pas ou ne sont pas

accessibles en Europe (seul les Etats-Unis se sont dotés d'un outil nommé NEMO). Il nous a donc fallu concevoir un logiciel de simulation pour analyser et optimiser les dispositifs et aider à la conception.

Ce second chapitre débute par une description théorique du formalisme des fonctions de Green hors équilibre lequel est appliqué aux diodes à effet tunnel résonant à double barrière symétrique à large bande interdite de type AlGa_N/Ga_N. Après une brève description des limites du modèle utilisé, l'influence des différents paramètres de la structure tels que la longueur des zones d'accès (espaceur), la largeur du puits central Ga_N, la hauteur et l'épaisseur des barrières AlGa_N, sont traités indépendamment pour établir leur impact sur les caractéristiques courant-tension de la diode et définir les paramètres clés quant à l'optimisation d'une hétérostructure en fonction du cahier des charges et de la validité du modèle utilisé.

2 Principe de fonctionnement

Les travaux pionniers de Tsu et Esaki (1970-80) ont permis de mettre en évidence l'effet tunnel résonnant dans les hétérostructures à double barrière [7] (Figure II.1). A certaines tensions bien déterminées, cet effet purement quantique génère une résistance différentielle négative aboutissant à une chute brutale du courant. La particularité de cette résistance différentielle négative comparée à d'autres phénomènes résonants (cas de la diode GUNN) provient sans doute de sa survie à haute température. Le principe de fonctionnement consiste à laisser passer un courant électrique par effet tunnel à chaque fois que les énergies des porteurs injectés sont alignées à un des niveaux quantiques du puits de manière à faire apparaître un pic de courant sur la caractéristique courant-tension [8].

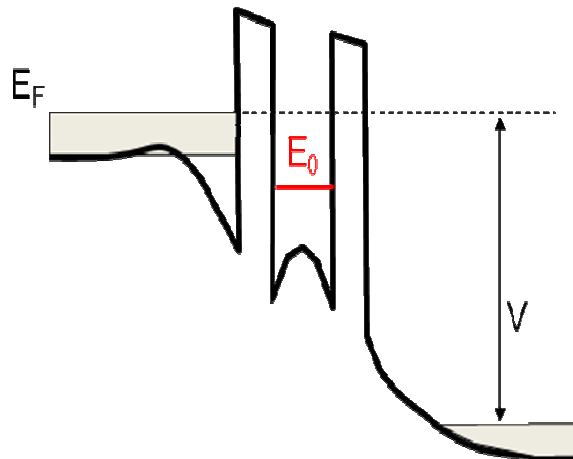


Figure II.1: Schéma illustratif du profil de bande de conduction d'une RTD à laquelle est appliquée une différence de tension V .

3 Formalisme NEGF

Au cours de ces dernières années, l'évolution des techniques de fabrication a permis d'élaborer des composants nanométriques. Certaines expériences ont permis de mesurer le courant à travers des nano-objets tels que les molécules [9-11] ou les nanotubes de carbone [12-14]. A cette échelle, les effets quantiques qui jusque là étaient négligeables, deviennent prépondérants. Par conséquent, les approches semi-classiques ne permettent plus de modéliser avec précision les propriétés de transport dans de tels systèmes et les outils disponibles tels que NEXTNANO ne correspondent pas actuellement, par leur approche à la notre problématique.

De nouvelles approches ont dues être développées, à titre d'exemple, nous pouvons citer l'émergence de modèles quantiques de types hydrodynamique et Monte-Carlo. A l'heure actuelle, le formalisme des fonctions de Green hors équilibre paraît comme étant le plus adéquat et le plus rigoureux pour répondre à notre problématique. C'est la raison pour laquelle ce formalisme est développé en détail dans la suite de ce chapitre.

Dans les composants de très petite taille, nous pouvons imaginer qu'il n'existe pas de centres diffuseurs et que le temps passé par un électron pour aller d'un contact à un autre ne suffit pas pour que celui-ci puisse émettre ou absorber un phonon. Dans ce cas, on néglige la

présence des centres diffuseurs et on se trouve dans un régime de conduction purement balistique.

Dans un tel régime, la densité d'états ne dépend que de la présence des contacts et se décompose en différents termes associés respectivement à l'injection de porteurs via chacun des contacts. On peut supposer que les contacts sont à l'équilibre thermodynamique et qu'un état d'énergie E dans ces contacts soit caractérisé par les taux d'occupation suivant la statistique de Fermi-Dirac $f_1(E)$ et $f_2(E-eV)$ (où V est la tension appliquée entre les contacts) [15].

Une procédure est proposée pour calculer ces mêmes grandeurs dans le cas d'interactions inélastiques en [Annexe \[A\]](#) [16]. En effet, la projection des mécanismes 3D appliquée à notre code de calcul 1D n'a pas aboutie.

3.1 Système isolé

Un système isolé, par opposition à un système ouvert, est un système physique qui n'interagit pas avec son environnement. Les systèmes véritablement isolés ne sont qu'une vue de l'esprit pour simplifier le problème à résoudre car il y a toujours des interactions avec l'environnement. Cependant, un système réel peut se comporter comme un système isolé avec une bonne approximation.

Ce concept est une idéalisation acceptable utilisée dans la plupart des approches quantiques pour décrire les propriétés de transport à l'échelle mésoscopique. Par conséquent, la zone active est considérée comme un système isolé n'échangeant ni énergie et ni particules avec les contacts métalliques ([Figure II.2](#)).

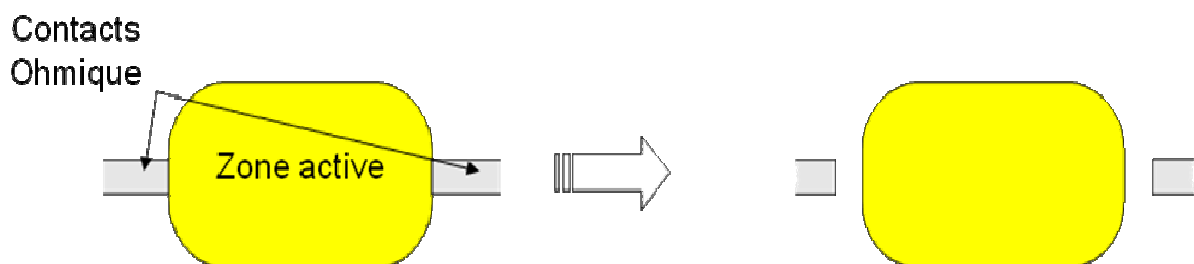


Figure II.2 : Illustration d'un système réel (gauche) et d'un système isolé (droite).

3.1.1 Fonctions de Green G^R , G^A

Les fonctions de Green correspondent à une méthode mathématique souvent utilisée dans la résolution de certaines équations différentielles linéaires. Nous considérons ici le cas, particulièrement important pour la physique quantique, de l'équation aux valeurs propres indépendante du temps :

$$H_0\Psi(r) = E\Psi(r),$$

qui peut aussi s'écrire sous la forme :

$$(E-H_0)\Psi(r)=0,$$

Où l'Hamiltonien H_0 est un opérateur différentiel linéaire propre à un système quantique isolé.

Dans ce qui suit, cet opérateur est supposé être Hermitien et par conséquent, il possède des valeurs propres E_n réelles et des vecteurs propres Ψ_n qui forment une base orthonormée complète, telle que:

$$\int \Psi_n(r)\Psi_m^*(r')dr = \delta_{n,m} \quad (1)$$

La méthode basée sur les fonctions de Green consiste à résoudre en chaque point r' l'équation différentielle :

$$[E-H_0]G(r,r') = \delta(r-r') \quad (2)$$

Les fonctions de Green G peuvent être assimilées en tous points r autre que r' aux fonctions d'ondes de H résultant d'une perturbation localisée en r' [17]. Les solutions possibles de ces fonctions d'ondes ne correspondent pas aux mêmes conditions limites :

- les fonctions de Green G^R retardées représentant les ondes issues du point d'excitation r' .
- les fonctions de Green G^A avancées représentant les ondes se dirigeant vers le point d'excitation r' .

L'incorporation de ces deux conditions limites dans l'équation (2) peut être accomplie en ajoutant un nombre imaginaire $\pm i\varepsilon$ infiniment petit à l'énergie E :

$$[E-H_0 + i\varepsilon]G^R(r,r') = \delta(r-r') \quad (3)$$

$$[E-H_0 - i\varepsilon]G^A(r,r') = \delta(r-r') \quad (4)$$

La connaissance des valeurs propres E_n de H permet de décomposer les fonctions de Green G^R retardées en une combinaison linéaire des vecteurs propres Ψ_n correspondants :

$$G^R(r, r') = \sum_n C_n(r') \psi_n(r) \quad (5)$$

Où les coefficients C_n sont des constantes complexes qui doivent être déterminées.

Ainsi, en remplaçant (5) dans (3):

$$\sum_n [E - E_n + i\varepsilon] C_n(r') \psi_n(r) = \delta(r - r')$$

En multipliant par $\Psi_n^*(r')$ et en intégrant sur r :

$$\sum_n [E - E_n + i\varepsilon] C_n(r') \int \psi_n(r) \psi_n^*(r') dr = \psi_n^*(r')$$

Enfin, en utilisant la relation (1), nous aboutissons au résultat suivant :

$$C_n(r') = \frac{\Psi_n^*(r')}{E - E_n + i\varepsilon} \quad (6)$$

Finalement, en substituant (6) dans (5), nous trouvons :

$$G^R(r, r', E) = \sum_n \frac{\psi_n(r) \psi_n^*(r')}{E - E_n + i\varepsilon} \quad (7)$$

De la même façon, nous pouvons aussi montrer que :

$$G^A(r, r', E) = \sum_n \frac{\psi_n(r) \psi_n^*(r')}{E - E_n - i\varepsilon} \quad (8)$$

A partir des relations (7) et (8), il devient évident de remarquer que les fonctions de Green G^A avancé ne sont rien d'autre que les conjuguées hermétiques des fonctions de Green G^R retardées :

$$G^A(r, r', E) = [G^R(r', r, E)]^* \quad (9)$$

Autrement dit, l'opérateur de Green avancé n'est rien d'autre que l'adjoint de l'opérateur de Green retardé :

$$G^A = G^{R\dagger} \quad (10)$$

3.1.2 Fonction spectrale $A(r, r', E)$

L'utilisation des fonctions de Green en mécanique quantique permet de généraliser le concept de densité d'états non-locale à l'intérieur d'un système isolé par le biais de la fonction spectrale A :

$$A(r, r', E) = i[G^R(r, r', E) - G^A(r, r', E)] \quad (11)$$

De ce fait, en remplaçant les expressions (7) et (8) dans la relation (11), nous obtenons :

$$A(r, r', E) = \sum_n \psi_n(r) \psi_n^*(r') \frac{2\varepsilon}{(E - E_n)^2 + \varepsilon^2}$$

En faisant tendre ε vers zéro, la quantité $\frac{2\varepsilon}{(E - E_n)^2 + \varepsilon^2}$ est constituée d'une somme de fonctions de Dirac centrées sur chaque valeur propre E_n (Figure II.3).

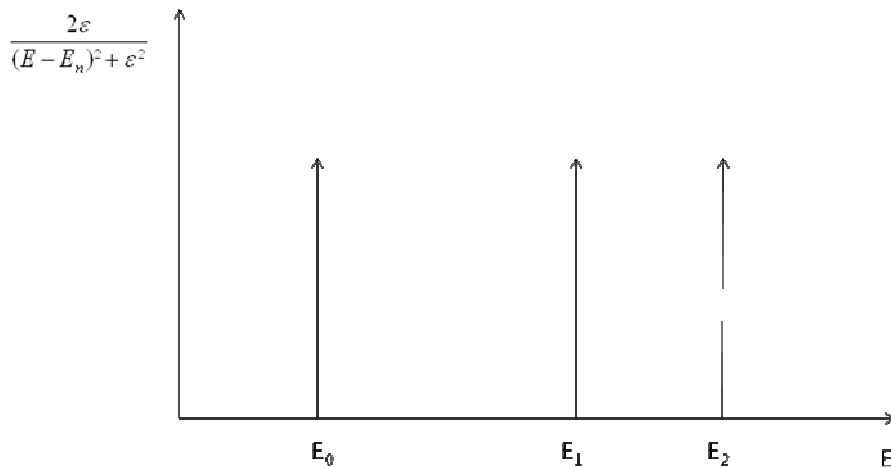


Figure II.3 : Distribution de la densité d'états $A(E)$ disponibles autour des niveaux d'énergies E_n d'un système isolé.

3.2 Système ouvert

A l'échelle mésoscopique, le rôle des différents contacts auxquels sont soumis les composants n'est plus négligeable. La zone active ne peut plus être considérée seule, les composants sont de ce fait des systèmes ouverts échangeant de l'énergie et des particules avec les contacts métalliques qui jouent le rôle de réservoirs (Figure II.4) [18].

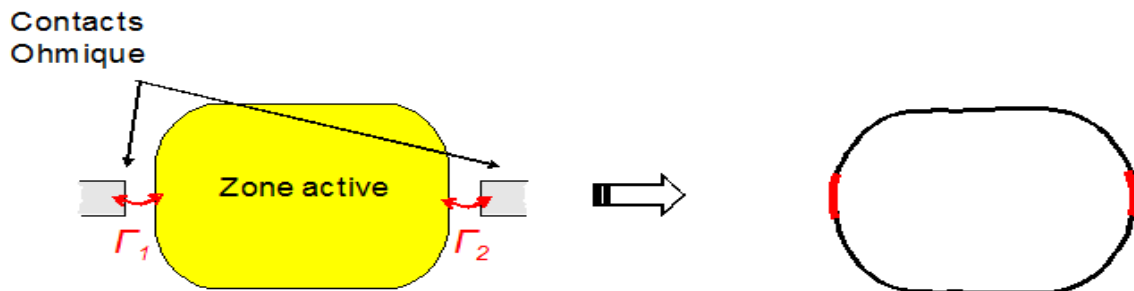


Figure II.4 : Schéma illustrant l'interaction de la zone active avec les contacts métalliques via les termes de couplages Γ_1 et Γ_2 .

3.2.1 Fonctions de Green G^R , G^A

De part la taille nanométrique de la zone active, les régions des contacts sont assimilées à des conducteurs semi-infinis. Par conséquent, la matrice H d'un système ouvert sera infinie, ce qui constitue un problème numérique.

Un moyen simple de rendre la matrice H finie consiste à introduire le concept de *self-énergies* Σ , qui a pour principe de coupler chaque extrémité de la zone active à un terme dit de “self-énergies” afin d'assurer l'élargissement des niveaux discrets du puits. De ce fait, ce concept nous permet de travailler directement dans l'espace associé à la zone active dont les dimensions sont désormais numériquement traitables et de répondre à une préoccupation majeure des données expérimentales.

Par ailleurs, ces termes de self-énergies Σ^R sont de nature complexe (Σ^R correspond à la self-énergie retardée et son expression est donnée dans le [Paragraphe 4.1](#)), ce qui a pour effet de transformer l'opérateur H du système en un opérateur non hermitique :

$$H\Psi=(H_0+\Sigma^R)\Psi=E\Psi$$

Dans un tel cas, les énergies propres E_n deviennent également complexes, ainsi, il convient de distinguer entre les fonctions propres “droite” φ_n et “gauche” ϕ_n :

$$H(r)\varphi_n(r)=E_n\varphi_n(r)$$

$$H(r)\phi_n(r)=E_n^*\phi_n(r)$$

Supposons que les vecteurs propres de H forment une base “bi-orthogonale” dans l'espace des états, telle que [\[19\]](#) :

$$\int \phi_n(r)\varphi_m(r)^* dr=\delta_{nm}$$

Puisque, les valeurs propres sont complexes, alors il ne devient plus nécessaire d'introduire le nombre infiniment petit $i\epsilon$ dans la définition de la fonction Green G^R :

$$G^R(r,r',E)=\sum_n \frac{\varphi_n(r)\phi_n^*(r')}{E-E_n} \quad (12)$$

3.2.2 Fonction spectrale $A(r,r',E)$

Afin de mettre en évidence les effets quantiques des selfs-énergies sur la densité d'états d'un système électronique ouvert, la relation (11) peut être écrite à nouveau en termes d'opérateurs :

$$A(E)=i[G^R(E)-G^A(E)] \quad (13)$$

Avec ce choix de notation, il est possible de séparer la partie réelle et la partie imaginaire des opérateurs de Green.

$$\text{Ainsi, en posant } G^R = \text{Re}G^R(E) + i\text{Im}G^R(E) \quad (14)$$

et en utilisant la propriété (10), il advient que :

$$G^A = \text{Re}G^R(E) - i\text{Im}G^R(E) \quad (15)$$

Et donc, en injectant ce dernier résultat (15) dans la relation (13), on obtient alors :

$$A(E)=i[(\text{Re}G^R(E)+i\text{Im}G^R(E)) - (\text{Re}G^R(E)-i\text{Im}G^R(E))]$$

Soit encore

$$A(E)=-2\text{Im}G^R(E)$$

A l'aide de la définition de G^R nouvellement introduite dans (12), la fonction spectrale A vaut donc :

$$A(r,r',E)=\langle r | A(E) | r' \rangle = -2\text{Im} \sum_n \frac{\varphi_n(r)\varphi_n^*(r')}{E - E_n}$$

De plus, si l'on suppose que les valeurs propres E_n de H soient simplement données par :

$$E_n = E_{n0} - \Delta_n - i\frac{\gamma}{2}$$

Où E_{n0} seraient les valeurs réelles propres au système électronique fermé décrit par l'Hamiltonien H_0 .

Dans un tel cas, on trouve que :

$$A(r, r', E) = -2 \text{Im} \sum_n \varphi_n(r)\varphi_n^*(r') \frac{1}{(E - E_{n0} + \Delta_n) + i\frac{\gamma}{2}}$$

D'autre part, en multipliant le numérateur et le dénominateur par le complexe conjugué

$$(E - E_{n0} + \Delta_n) - i\frac{\gamma}{2}, \text{ on aboutit à :}$$

$$A(r, r', E) = -2 \operatorname{Im} \sum_n \varphi_n(r) \varphi_n^*(r') \frac{(E - E_{n0} + \Delta_n) - i \frac{\gamma}{2}}{(E - E_{n0} + \Delta_n)^2 + (\frac{\gamma}{2})^2}$$

En identifiant les parties réelles et les parties imaginaires, on arrive enfin à :

$$A(r, r', E) = \sum_n \varphi_n(r) \varphi_n^*(r') \frac{\gamma}{(E - E_{n0} + \Delta_n)^2 + (\frac{\gamma}{2})^2}$$

Si les quantités γ et Δ_n tendaient vers zéro, on retrouverait bien une somme de fonctions de Dirac centrées sur chaque valeur de E_{n0} . Cependant, pour toutes autres valeurs finies de γ et Δ_n , on trouve que la fonction spectrale A est constituée d'une somme de fonctions de type Lorentziennes centrée sur $E_{n0} + \Delta_n$ et dont la largeur à mi-hauteur est donnée par γ (Figure II.5). Autrement dit, l'introduction des self-énergies dans l'Hamiltonien H_0 aura pour effets, d'élargir de γ et de décaler de Δ_n chaque pic de Dirac obtenu dans le cadre d'un système isolé.

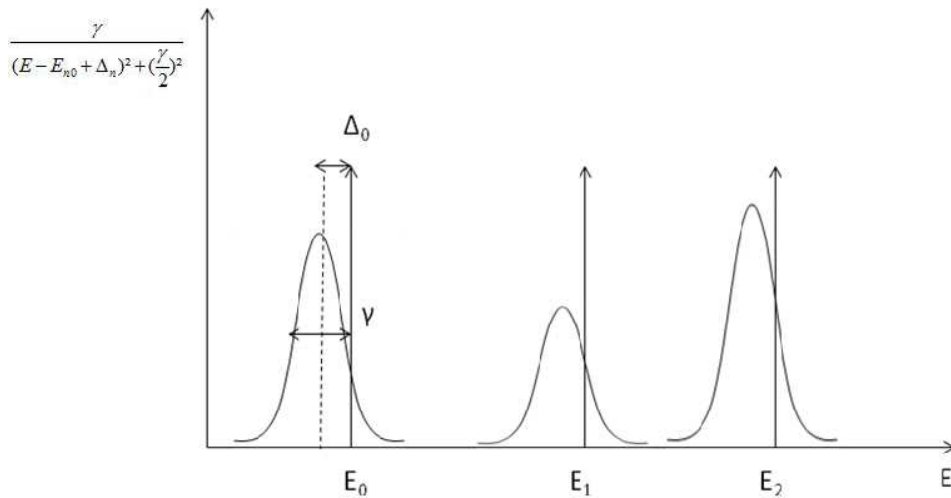


Figure II.5 : Distribution de la fonction spectrale $A(E)$ autour des niveaux d'énergies E_n d'un système isolé.

Dans la partie suivante, nous démontrons rigoureusement que la partie imaginaire des self-énergies conditionne la densité d'états du système électronique et que son rôle sera d'autant plus important que le système est petit, puisque dans de tels cas, les conditions limites deviennent de plus en plus prépondérantes [20].

Pour illustrer ce conditionnement, considérons que la densité d'états locale soit donnée

$$\text{par : } A(r,E) = \frac{1}{\pi} \text{Im } G^R(r,E) \quad (16)$$

$$\text{et donc par } A(r,E) = \frac{1}{\pi} \text{Im} \sum_{\alpha} \frac{\varphi_{\alpha}(r)\phi_{\alpha}^*(r)}{E - \varepsilon_{\alpha}}$$

Puisque, les opérateurs de Green sont des opérateurs complexes $G^R=C+iB$,

$$\text{alors } A(r,E) = \frac{B}{\pi}$$

$$\text{on obtient alors } A(r,E) = -\frac{1}{\pi} \text{Im } G^A(r,E) \quad (17)$$

$$\text{et donc } A(r,E) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} \sum_{\alpha} \frac{\varphi_{\alpha}^*(r)\phi_{\alpha}(r)}{E - \varepsilon_{\alpha}^*}$$

En définitive, en additionnant (16) et (17) et en divisant le tout par 2

$$A(r,E) = \frac{1}{2\pi} \text{Im}[G^R(r,E) - G^A(r,E)]$$

$$A(r,E) = \frac{1}{2\pi} \text{Im} \left[\sum_{\alpha} \frac{\varphi_{\alpha}(r)\phi_{\alpha}^*(r)}{E - \varepsilon_{\alpha}} - \sum_{\alpha} \frac{\varphi_{\alpha}^*(r)\phi_{\alpha}(r)}{E - \varepsilon_{\alpha}^*} \right]$$

$$\text{Posons } \varphi_{\alpha}(r)\phi_{\alpha}^*(r) = a+ib \quad \text{avec } \varepsilon_{\alpha} = \varepsilon_{\alpha,r} + i\varepsilon_{\alpha,i}$$

Avec ces notations, la densité d'états est donnée par

$$A(r,E) = \frac{1}{2\pi} \text{Im} \left[\sum_{\alpha} \frac{a+ib}{E - \varepsilon_{\alpha,r} - i\varepsilon_{\alpha,i}} - \frac{a-ib}{E - \varepsilon_{\alpha,r} + i\varepsilon_{\alpha,i}} \right]$$

Soit encore

$$A(r,E) = \frac{1}{2\pi} \text{Im} \left[\sum_{\alpha} a \left(\frac{1}{E - \varepsilon_{\alpha,r} - i\varepsilon_{\alpha,i}} - \frac{1}{E - \varepsilon_{\alpha,r} + i\varepsilon_{\alpha,i}} \right) + ib \left(\frac{1}{E - \varepsilon_{\alpha,r} - i\varepsilon_{\alpha,i}} - \frac{1}{E - \varepsilon_{\alpha,r} + i\varepsilon_{\alpha,i}} \right) \right]$$

$$\text{c'est-à-dire, } A(r,E) = \frac{1}{2\pi} \text{Im} \left[\sum_{\alpha} 2a \left(\frac{+i\varepsilon_{\alpha,i}^2}{(E - \varepsilon_{\alpha,r})^2 - \varepsilon_{\alpha,i}^2} \right) + 2ib \left(\frac{E - \varepsilon_{\alpha,i}}{(E - \varepsilon_{\alpha,r})^2 - \varepsilon_{\alpha,i}^2} \right) \right]$$

On trouve bien que $G^R - G^A$ est un imaginaire pur. Mais, puisque $G^R - G^A$ est un imaginaire pur, la densité d'états locale peut également s'écrire :

$$A(r,E) = \frac{1}{2\pi i} \text{Im}[G^R(r,E) - G^A(r,E)]$$

$$A(r,E) = \frac{1}{2\pi i} \text{Im} \left[\sum_{\alpha} \frac{\varphi_{\alpha}(r)\phi_{\alpha}^*(r)}{E - \varepsilon_{\alpha}} - \sum_{\alpha} \frac{\varphi_{\alpha}^*(r)\phi_{\alpha}(r)}{E - \varepsilon_{\alpha}^*} \right]$$

$$\text{Soit encore, } A(r,E) = \frac{1}{2\pi i} \langle r | G^R(E) - G^A(E) | r \rangle \quad (18)$$

$$\text{Considérons alors } G^{A-1} - G^{R-1} = (E - H - \Sigma^A) - (E - H - \Sigma^R) = \Sigma^R - \Sigma^A$$

$$\text{En posons } \Sigma^R = \Delta - i\Gamma, \text{ il vient : } G^{A-1} - G^{R-1} = -2i\Gamma$$

$$\text{Multiplions à gauche par } G^R \text{ et à droite par } G^{R+} \text{ alors } G^R - G^A = -2iG^R\Gamma G^A \equiv -2iG^A\Gamma G^R$$

$$\text{En introduisant cette expression dans (18), on trouve alors : } A(r,E) = -\frac{1}{\pi} \langle r | G^R\Gamma G^A | r \rangle$$

Soit en introduisant les relations de fermeture :

$$A(r,E) = -\frac{1}{\pi} \iint \langle r | G^R | r' \rangle \langle r' | \Gamma | r'' \rangle \langle r'' | G^A | r \rangle dr' dr''$$

$$\text{C'est-à-dire } A(r,E) = -\frac{1}{\pi} \iint \langle r | G^R | r' \rangle \Gamma(r', r'', E) \langle r'' | G^A | r \rangle dr' dr''$$

Puisqu'il y a deux self-énergies, la densité d'états locale se sépare en deux termes :

$$A(r,E) = -\frac{1}{\pi} \iint \langle r | G^R | r' \rangle \Gamma_1(r', r'', E) \langle r'' | G^A | r \rangle dr' dr'' \quad (19)$$

$$- \frac{1}{\pi} \iint \langle r | G^R | r' \rangle \Gamma_2(r', r'', E) \langle r'' | G^A | r \rangle dr' dr''$$

Les self-énergies ne diffèrent de zéro qu'au niveau des contacts. Supposons que les contacts de gauche soient situés aux points r_1 et ceux de droite aux points r_2 , il vient alors :

$$\Sigma_1(r', r'') = \Sigma_1(E) \delta(r' - r_1) \delta(r'' - r_1)$$

$$\Sigma_2(r', r'') = \Sigma_2(E) \delta(r' - r_2) \delta(r'' - r_2)$$

En introduisant ces relations dans (24), on obtient $A(r,E) = A_1(r,E) + A_2(r,E)$

$$A(r,E) = -\frac{1}{\pi} \sum_j \langle r | G^R(E) | r_{1,j} \rangle \Gamma_{1,j}(E) \langle r_{1,j} | G^A(E) | r \rangle - \frac{1}{\pi} \sum_j \langle r | G^R(E) | r_{2,j} \rangle \Gamma_{2,j}(E) \langle r_{2,j} | G^A(E) | r \rangle$$

Où la somme sur j correspond à l'intégrale sur tous les points de contact.

Les éléments de matrice des fonctions de Green sont alors donnés par :

$$\langle r | G^R | r_1 \rangle = \langle r | \sum_{\alpha} \frac{|\alpha, R\rangle \langle \alpha, L|}{E - \varepsilon_{\alpha}} | r_1 \rangle = \sum_{\alpha} \frac{\varphi_{\alpha}(r) \phi_{\alpha}^*(r_1)}{E - \varepsilon_{\alpha}^*}$$

$$\langle r_1 | G^R | r \rangle = \langle r_1 | \sum_{\alpha} \frac{|\alpha, R\rangle \langle \alpha, L|}{E - \varepsilon_{\alpha}} | r \rangle = \sum_{\alpha} \frac{\varphi_{\alpha}^*(r) \phi_{\alpha}(r_1)}{E - \varepsilon_{\alpha}^*}$$

Les densités sont données par des expressions du type :

$$A_1(r, E) = -\frac{1}{\pi} \sum_j \Gamma_{1,j} \left(\sum_{\alpha} \frac{\varphi_{\alpha}(r) \phi_{\alpha}^*(r_1)}{E - \varepsilon_{\alpha}} \right) \left(\sum_{\alpha} \frac{\varphi_{\alpha}^*(r_1) \phi_{\alpha}(r)}{E - \varepsilon_{\alpha}^*} \right)$$

$$A_1(r, E) = -\frac{1}{\pi} \sum_j \Gamma_{1,j} \left| \sum_{\alpha} \frac{\varphi_{\alpha}(r) \phi_{\alpha}^*(r_1)}{E - \varepsilon_{\alpha}} \right|^2$$

Ce résultat montre que la densité d'états dépend des sources de contact 1 et 2 (anode et cathode) avec lesquelles le système d'électrons est en interaction. La densité d'états d'un système ouvert n'est donc pas identique à celle d'un système isolé. Il en est de même pour la densité électronique. Ce résultat montre bien que toutes les théories de transport développées en négligeant l'influence des contacts sont nécessairement approchées.

3.2.3 Densité électronique $\rho(r, E)$

Tout électron injecté au niveau d'énergie E par chacun des contacts 1 et 2 à l'intérieur du système balistique ne subit aucune collision. De ce fait, chaque état d'énergie E conserve le taux d'occupation qu'il avait dans le contact dont il est issu. Ainsi, la densité d'état locale au point r est la conséquence des ondes entrantes dans le contact 1 et des ondes entrantes dans le contact 2 : $A(r, E) = A_1(r, E) + A_2(r, E)$

De manière générale, ces deux densités $A_1(r, E)$ et $A_2(r, E)$ seront en équilibre thermodynamique avec les contacts de sorte que la densité électronique au point r sera donnée par : $\rho(r) = \rho_1(r) + \rho_2(r)$.

Les contacts 1 et 2 sont modélisés par des conducteurs parfaits à l'équilibre thermodynamique, dont les niveaux de Fermi respectifs diffèrent de $-eV$.

Avec f_1 et f_2 les fonctions de distribution des électrons dans les contacts 1 et 2

$$\rho(r) = 2 \int [A_1(r, E) f_1(E) + A_2(r, E) f_2(E)] dE$$

Si les deux contacts sont polarisés, il vient :

$$\rho(r) = 2 \int [A_1(r, E) f_1(E) + A_2(r, E) f_2(E - eV)] dE$$

3.2.4 Densité de courant

Formellement, l'expression quantique du courant a été établie depuis longtemps (travaux de Kubo [21]). Elle est donnée par :

$$\vec{J} = Tr(\rho \vec{j})$$

où $\rho = \sum_{\alpha} f_{\alpha} |\alpha\rangle\langle\alpha|$ est l'opérateur de densité et où $\vec{j} = e\vec{p}/m^*$ est l'opérateur représentant la densité de courant. Le symbole « Tr » représente la trace de l'opérateur dans la base des états propres du système global incluant, de ce fait, la présence des contacts et les phénomènes d'interférence quantiques ainsi que le champ extérieur.

Pour obtenir une expression de l'opérateur de densité de courant, nous partons de l'équation d'évolution obtenue en utilisant l'identité des opérateurs :

$$i\hbar \frac{\partial \varphi_{\alpha}(r)}{\partial t} = H \varphi_{\alpha}(r)$$

Cette équation peut tout aussi bien s'appliquer aux vecteurs propres de gauche

$$i\hbar \frac{\partial \phi_{\alpha}(r)}{\partial t} = H \phi_{\alpha}(r)$$

Multipliant ces deux équations respectivement par ϕ_{α}^* et φ_{α}^* , on trouve

$$i\hbar \phi_{\alpha}^*(r) \frac{\partial \varphi_{\alpha}(r)}{\partial t} = \phi_{\alpha}^*(r) H \varphi_{\alpha}(r) \quad (20)$$

$$i\hbar \varphi_{\alpha}^*(r) \frac{\partial \phi_{\alpha}(r)}{\partial t} = \varphi_{\alpha}^*(r) H \phi_{\alpha}(r) \quad \text{alias} \quad -i\hbar \phi_{\alpha}(r) \frac{\partial \phi_{\alpha}^*(r)}{\partial t} = \phi_{\alpha}^*(r) H^* \varphi_{\alpha}(r) \quad (21)$$

En soustrayant (20) de (21), on obtient $i\hbar \frac{\partial \phi_{\alpha}^*(r) \varphi_{\alpha}(r)}{\partial t} = \phi_{\alpha}^*(r) (H - H^*) \varphi_{\alpha}(r)$

$$i\hbar \frac{\partial \phi_{\alpha}^*(r) \varphi_{\alpha}(r)}{\partial t} = 2i \phi_{\alpha}^*(r) (\Gamma_1 + \Gamma_2) \varphi_{\alpha}(r)$$

$$\text{Ainsi } \frac{\partial \phi_{\alpha}^*(r) \varphi_{\alpha}(r)}{\partial t} = \frac{2}{\hbar} \phi_{\alpha}^*(r) (\Gamma_1 + \Gamma_2) \varphi_{\alpha}(r)$$

$$\frac{\partial \phi_{\alpha}^*(r) \varphi_{\alpha}(r)}{\partial t} = -\text{div}(\vec{J}_{\alpha})$$

Si l'état α est occupé, la relation (20) fournit l'expression de la divergence de la densité de courant. En intégrant sur l'espace de la zone active du composant, il vient :

$$\iiint_V \text{div}(\vec{J}_{\alpha}) dr^3 = \frac{2}{\hbar} \iiint_V \phi_{\alpha}^*(r) (\Gamma_1 + \Gamma_2) \varphi_{\alpha}(r) dr^3$$

$$\iiint_V \text{div}(\vec{J}_{\alpha}) dr^3 = I_{1,\alpha} + I_{2,\alpha}$$

Soit également, puisque $\Sigma_1(r, r) = \Gamma_1 \delta(r - r_1)$

$$I_{1,\alpha} + I_{2,\alpha} = -\frac{2}{\hbar} \phi_{\alpha}^*(r_1) (\Gamma_1) \varphi_{\alpha}(r_1) - \frac{2}{\hbar} \phi_{\alpha}^*(r_2) (\Gamma_2) \varphi_{\alpha}(r_2) \quad (22)$$

Puisque $I_{2,\alpha} = -I_{1,\alpha}$, en sommant sur tous les états, on trouve :

$$I(E) = -\frac{2}{\hbar} \Gamma_1(E) \sum_{\alpha} \phi_{\alpha}^*(r_1) \varphi_{\alpha}(r_1)$$

$$I(E) = -\frac{2}{\hbar} \Gamma_1(E) \equiv +\frac{2}{\hbar} \Gamma_2(E)$$

Le courant est enfin donné par $I = \int \text{Tr}(\rho \vec{j}) dE$

$$I = -\frac{2}{\hbar \pi} \int \text{Tr}[f_1(E) A_1 \Gamma_1(E) + f_2(E) A_2 \Gamma_1(E)] dE$$

$$I \equiv +\frac{2}{\hbar \pi} \int \text{Tr}[f_1(E) A_1 \Gamma_2(E) + f_2(E) A_2 \Gamma_2(E)] dE$$

En exprimant l'opérateur spectral à l'aide des fonctions de Green, on trouve :

$$I = -\frac{2}{\hbar \pi} \int \text{Tr}[f_1(E) G^A \Gamma_1 G^R \Gamma_1(E) + f_2(E) G^A \Gamma_2 G^R \Gamma_1(E)] dE \quad (23)$$

$$I = \frac{2}{\hbar \pi} \int \text{Tr}[f_1(E) G^A \Gamma_1 G^R \Gamma_2(E) + f_2(E) G^A \Gamma_2 G^R \Gamma_2(E)] dE \quad (24)$$

Et également, en prenant la demi-somme de ces équations : $\frac{(23) + (24)}{2}$

$$I = \frac{1}{\hbar \pi} \int \text{Tr} \left[\begin{aligned} & f_1(E) (G^A \Gamma_1 G^R \Gamma_2(E) - G^A \Gamma_1 G^R \Gamma_1(E)) \\ & + f_2(E) (G^A \Gamma_2 G^R \Gamma_2(E) - G^A \Gamma_2 G^R \Gamma_1(E)) \end{aligned} \right] dE \quad (25)$$

En comparant (23) et (24), on en déduit que

$$-G^A \Gamma_1 G^R \Gamma_1(E) \equiv G^A \Gamma_1 G^R \Gamma_2(E)$$

$$-G^A \Gamma_2 G^R \Gamma_1(E) \equiv G^A \Gamma_2 G^R \Gamma_2(E)$$

En remplaçant dans (25), il vient

$$I = \frac{2}{\hbar\pi} \int Tr [f_1(E)G^A \Gamma_1 G^R \Gamma_2(E) - f_2(E)G^A \Gamma_2 G^R \Gamma_1(E)] dE$$

En définitive, le courant est donné par :

$$I = \frac{2}{\hbar\pi} \int Tr [G^A \Gamma_1 G^R \Gamma_2(E)] [f_1(E) - f_2(E)] dE$$

4 Application à la RTD

4.1 Hamiltonien du système

L'Hamiltonien du système (contact1, zone active, contact2) est résolu numériquement en utilisant la méthode des différences finies. Nous considérons dans la suite la zone active comme un système unidimensionnel de longueur L que nous découpons en N intervalles de longueur élémentaire $a=L/N$ (Figure II.6).

L'équation de Schrödinger au point i s'exprime en différence finie par :

$$t \left(\frac{1}{m_{i-1}} \right) \psi_{i-1} + t \left(\left(\frac{1}{m_{i-1}} + \frac{1}{m_i} \right) + V_i \right) \psi_i - t \left(\frac{1}{m_i} \right) \psi_{i+1} = \epsilon \psi_i$$

Où, $t = \frac{\hbar^2}{2a^2}$

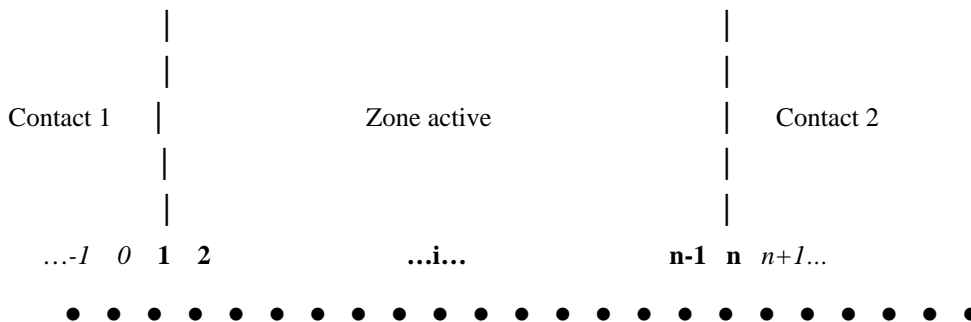


Figure II.6 : Schéma illustrant le maillage du système utilisé dans la résolution de l'équation de Schrödinger.

Cependant, les conditions limites $\psi_0=0$ et $\psi_{N+1}=0$ ne permettent pas de décrire un système ouvert. En réalité, si le système est limité par des contacts permettant le passage du courant, il faut permettre aux fonctions d'onde de ne plus s'annuler en dehors du composant. Ceci peut se faire en supposant que les ondes électroniques sont planes dans les contacts ohmiques.

Les fonctions d'onde aux points 0 et N+1 appartiennent aussi bien au composant qu'aux contacts. Ainsi, si l'on imagine les contacts comme des réservoirs métalliques semi-infinis, les ondes entrantes et sortantes du composant se répercutent dans les contacts sous la forme :

$$\begin{cases} \Psi_0 = \exp^{-ika} \Psi_1 & (3) \\ \Psi_{n+1} = \exp^{-ika} \Psi_n & (4) \end{cases}$$

Cette approche, qui sacrifie un traitement rigoureux des contacts, constitue néanmoins une méthode efficace capable d'étudier le transport électronique dans la zone active [22].

En introduisant ces résultats dans les équations (1) et (2), on obtient alors :

$$(1) \Leftrightarrow \left(t \left(\frac{1}{m_0} + \frac{1}{m_1} \right) + V_1 - t \left(\frac{1}{m_0} \right) \exp^{-ika} \right) \psi_1 - t \left(\frac{1}{m_1} \right) \psi_2 = E \psi_1$$

$$(2) \Leftrightarrow -t \left(\frac{1}{m_{n-1}} \right) \psi_{n-1} + \left(t \left(\frac{1}{m_{n-1}} + \frac{1}{m_n} \right) + V_n - t \left(\frac{1}{m_n} \right) \exp^{-ika} \right) \psi_n = E \psi_n$$

Les termes de *self-énergies*, rendant compte des conditions limites, sont alors donnés par

$$\Sigma^R_G = -t \left(\frac{1}{m_0} \right) \exp^{-ika} \text{ et } \Sigma^R_D = -t \left(\frac{1}{m_n} \right) \exp^{-ika} .$$
 Ces termes supplémentaires permettent de

tenir compte de la présence des contacts. Ces quantités sont cependant des fonctions complexes. Elles transforment la matrice représentant l'Hamiltonien ouvert en une matrice non hermitique.

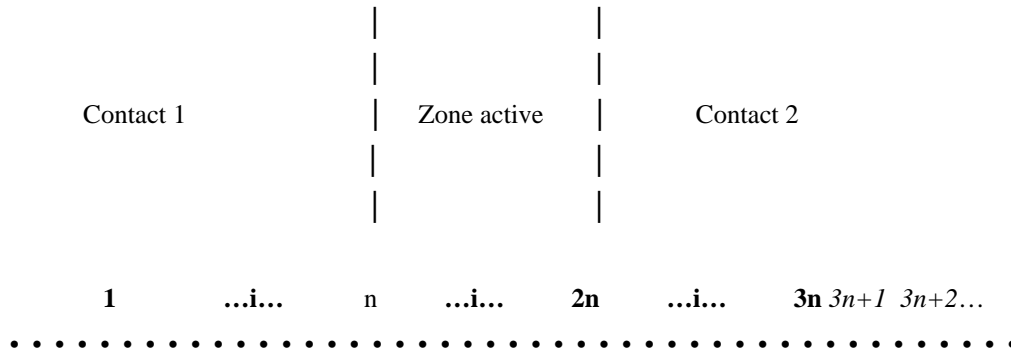


Figure II.7 : Schéma illustrant le maillage du système utilisé dans la résolution de l'équation de Poisson.

L'équation de Poisson au point i est donné par :

$$\frac{d\left(-\varepsilon_i \frac{dV_i}{dx}\right)}{dx} = \rho_i$$

La discrétisation en différences finis donne:

$$(-\varepsilon_{i-1})V_{i-1} + (\varepsilon_{i-1} + \varepsilon_i)V_i + (-\varepsilon_i)V_{i+1} = a^2\rho_i$$

Si l'on suppose que chaque point i du maillage interagit seulement avec ses plus proches voisins, on obtient alors un système à $3n$ équations:

$$(-\varepsilon_0)V_0 + (\varepsilon_0 + \varepsilon_1)V_1 + (-\varepsilon_1)V_2 = a^2\rho_1$$

-
-
-

$$(-\varepsilon_{i-1})V_{i-1} + (\varepsilon_{i-1} + \varepsilon_i)V_i + (-\varepsilon_i)V_{i+1} = a^2\rho_i$$

-
-
-

$$(-\varepsilon_{3n-1})V_{i-1} + (\varepsilon_{3n-1} + \varepsilon_{3n})V_{3n} + (-\varepsilon_{3n})V_{3n+1} = a^2\rho_{3n}$$

On réécrit notre système à $3N$ équations sous forme matricielle :

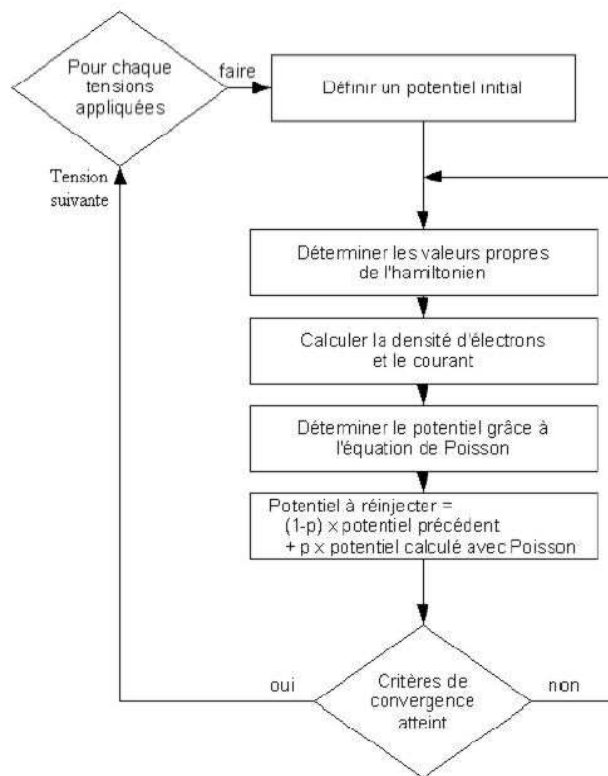


Figure II.8 : Organigramme du code numérique de la méthode de résolution auto-cohérente du potentiel électrique dans la structure.

4.3.2 Temps de calculs

Le temps de calcul est un paramètre important dans la conception d'un programme de simulation numérique. Les choix du langage de programmation et de l'algorithme général entre autres ont une importance capitale pour l'optimisation des ressources. L'écriture du code en programmation séquentielle et sous Fortran 95 apparaît au premier abord comme le choix le plus simple et le plus rapide.

La résolution de l'équation de Schrödinger se fait pour toutes les valeurs de l'énergie se trouvant entre 0eV et E_{Max} . En polarisant le composant, le contact de droite est surélevé d'une tension U . Le calcul doit se faire alors entre 0eV et $E_{\text{Max}} + U$. Pour avoir une bonne description des états d'énergie, la discrétisation doit être la plus petite possible. Pour des grandes tensions de polarisation, cela revient à calculer des milliers de niveaux d'énergies, ce qui implique la résolution de milliers d'équations de Schrödinger.

Au-delà de l'énergie E_{Max} , les niveaux d'énergies ne sont quasiment plus occupés. Or, le calcul du courant dépend directement des taux d'occupation des états. En faisant le calcul complet de 0 à $E_{\text{Max}}+U$, le programme calcule des contributions de courant négligeables. Ainsi, la première amélioration du programme a consisté en la réduction du nombre d'Hamiltoniens à résoudre au nombre d'états d'énergies notablement occupés. La discrétisation du domaine de l'énergie est effectuée sur deux intervalles allant respectivement de 0eV à E_{Max} et de U à E_{Max} , chacun d'entre eux étant découpé en N_A fractions. En définitive, la résolution de l'équation de Schrödinger ne se fait que pour $2 \times N_A$ états d'énergie [23].

L'évaluation des densités d'états et du courant se fait par la résolution de l'équation de Schrödinger pour $2N_A$ valeurs de l'énergie. Bien qu'ayant été optimisée une première fois en limitant le nombre de calculs à $2N_A$ valeurs de l'énergie, cette opération reste encore trop coûteuse en temps de calcul. L'écriture de cette partie de code en programmation parallèle via *OpenMp* devrait permettre de réduire considérablement le temps de calcul en l'effectuant sur des ordinateurs *multi-threads*. Nos premières tentatives sur les ordinateurs du CRI sont cependant restées infructueuses à cause de la présence de bugs dans les algorithmes de la librairie Lapack actuellement implantée au CRI [24].

Pour cette raison, une deuxième voie a été entreprise en adaptant le coefficient de Pratt en fonction de la rapidité de convergence : une faible rapidité de convergence entraîne l'augmentation du coefficient de Pratt, tandis qu'au contraire, une forte rapidité de convergence diminue la valeur de ce coefficient pour éviter un passage au dessus de la solution [25]. Cette amélioration a permis de réduire considérablement le temps de calcul et d'offrir une meilleure gestion des calculs matriciels. Les variations du coefficient de Pratt orientent les résultats vers une convergence exponentielle et le nombre d'itération nécessaire pour valider les tests de convergence se voit généralement divisé par 2.

Cependant, le système Green-Poisson étant non-linéaire, il est très sensible au voisinage de la solution, surtout lorsque la polarisation correspond à une énergie de résonance du composant. En outre, si la solution se trouve au voisinage d'un pic de courant, elle risque de ne pas converger si celle-ci change de direction de convergence (à droite ou à gauche). Si ce cas se produit, le programme diminue significativement le coefficient de Pratt pour éviter ce changement de direction.

D'une manière générale, le temps nécessaire pour le calcul d'un nouveau potentiel avec Green-Poisson est de l'ordre de 30 secondes pour un maillage à 100 points. Le nombre d'itérations nécessaires pour atteindre la condition de convergence est de l'ordre de la cinquantaine en moyenne. Soit plus de 25 minutes pour déterminer le courant pour une seule tension appliquée, et donc au moins 24h pour établir une caractéristique I(V) complète en direct jusqu'à 4V.

4.4 Analyses et discussions

L'objectif de cette partie consiste à étudier l'évolution du courant tunnel dans une RTD en fonction de la taille du puits GaN, de l'épaisseur des barrières AlN et du pourcentage d'aluminium si ces dernières sont constituées de $Al_xGa_{1-x}N$. De part la nature 3D des interactions phonons-électrons et comme mentionné précédemment, le modèle unidimensionnel utilisé dans le programme ne permet pas le traitement des diffusions inélastiques. Par conséquent, la détermination de la caractéristique densité de courant-tension J-V au travers de la structure est supposée balistique.

Les dimensions du puits et des barrières sont choisies dans une gamme d'épaisseurs comprises entre 4 à 8 monocouches. Les caractéristiques J-V simulées pour des épaisseurs inférieures à 4MC (soit 1nm) n'ont pas permises d'obtenir des résultats probants dans le sens physique du terme. Par exemple, la position des niveaux dans le puits n'était pas cohérente pour des épaisseurs inférieures à 1nm. Cette limite basse de l'épaisseur peut être attribuée à la limite de l'approximation de la masse effective utilisée dans notre modèle.

Aussi, le critère de convergence imposée sur le potentiel électrique (fixé à 1%) est difficilement atteignable pour des épaisseurs supérieures à 8MC. Par conséquent, l'ensemble des simulations réalisées présentent une épaisseur respective des couches de la zone active comprise entre 1nm et 2nm soit une zone active de 8nm maximum si l'on tient compte en plus des 2nm correspondant aux espaceurs GaN de part et d'autres des couches barrières.

Les paramètres suivants ont été utilisés dans nos simulations numériques: la discontinuité de bande de conduction entre l'AlN et GaN est de 1,75 eV, le dopage N dans les contacts est de $5 \times 10^{18} \text{cm}^{-3}$, la masse effective et la constante diélectrique du GaN sont respectivement de $0,22m_0$ et $8,9\epsilon_0$. Au vu des faibles épaisseurs des couches barrières (<2nm) de AlN, la

croissance de ces dernières est supposée pseudo-morphique et sur GaN, par conséquent les valeurs utilisées et présentées dans ce manuscrit, relatives à la masse effective et à la constante diélectrique sont celles de GaN. Cependant, une étude similaire a été réalisée en prenant la valeur de la masse effective et de la constante diélectrique de AlN et a montré que seule la valeur du courant pic venait à diminuer.

Les champs internes produits par les polarisations spontanées et piézoélectriques sont pris en compte dans le contexte d'une approche macroscopique, en alternant aux interfaces AlN/GaN des charges surfaciques de $\sigma = \pm 6,5 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$ selon le cas d'une structure à polarité Gallium (top).

4.4.1 Influence de l'épaisseur des espaceurs GaN nid

L'étude de la répartition des charges (à l'équilibre thermodynamique) dans des hétérostructures à simple barrière AlN permet de montrer que le champ électrique interne est responsable de la formation d'un gaz d'électrons à 2 dimensions côté cathode et de l'apparition d'une zone de charge d'espace côté anode (Figure II.9). Les charges de polarisation de la couche barrière AlN induisent une densité d'électrons dans ce puits laquelle est alimentée via les couches dopées n^{++} -GaN ce qui explique le déficit en porteurs dans ces caissons de contacts ohmiques. Les résultats obtenus montrent que ces électrons sont confinés pour plus de 99% dans la couche espaceur GaN nid sur 5.1nm.

La Figure II.9 montre que la densité de ce gaz 2D se réduit de deux ordres de grandeurs (passant de 10^{19} à 10^{17} cm^{-3}) lorsqu'on diminue les épaisseurs des zones d'accès de 5nm à 1nm (espaceurs). En effet, une description des fonctions d'ondes dans le puits montrerait une délocalisation des porteurs dans la cathode laquelle permet d'évacuer une très large contribution des électrons du puits rétréci. Du côté de l'anode, nous pouvons également observer une diminution de la zone de charge d'espace laquelle est associée à l'apparition d'une densité de porteurs libres non nulle afin de satisfaire la neutralité électrique des charges dans la structure.

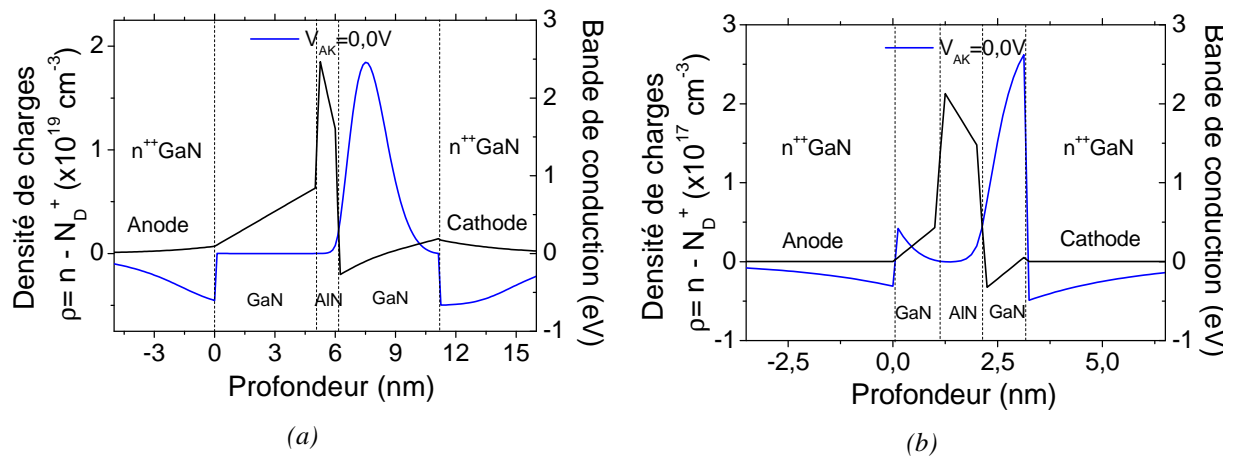


Figure II.9 : Profils de la bande de conduction dans une structure simple barrière (a) avec des épaisseurs d'espaces de 5nm (b) avec des épaisseurs d'espaces de 1nm.

Les résultats obtenus sur les structures précédentes présentent les mêmes tendances que celles observées sur des hétérostructures à doubles barrières AlN (Figure II.10). Par conséquent, on s'attend à ce que les propriétés de transport des RTDs soit fortement perturbées par la présence du gaz d'électrons dans le second puits 2D, notamment en ce concerne leurs caractéristiques J-V en polarisation inverse (accumulation de porteurs coté cathode). C'est la raison pour laquelle, nous avons poursuivi notre étude sur les RTDs en fixant l'épaisseur des espaceurs à 1nm afin de réduire au maximum le couplage des électrons du gaz 2D avec ceux des niveaux résonants du puits.

Aussi, la courbure de bande de la ZCE côté anode est fortement accentuée par la présence d'une double barrière à large bande interdite, ce qui va augmenter l'épaisseur effective de la couche barrière côté anode et donc nuire à l'effet tunnel résonant. Une solution possible pour réduire cette ZCE et cette courbure de bande est d'incorporer une couche à plus petit gap (comme InGaN) ou réduire le taux d'aluminium dans les couches barrières AlGaN pour réduire la largeur de bande interdite de ces dernières. Cependant, dans le second cas, l'effet thermoionique y sera plus conséquent. Un compromis pourrait être trouvé dans le cadre d'une autre étude.

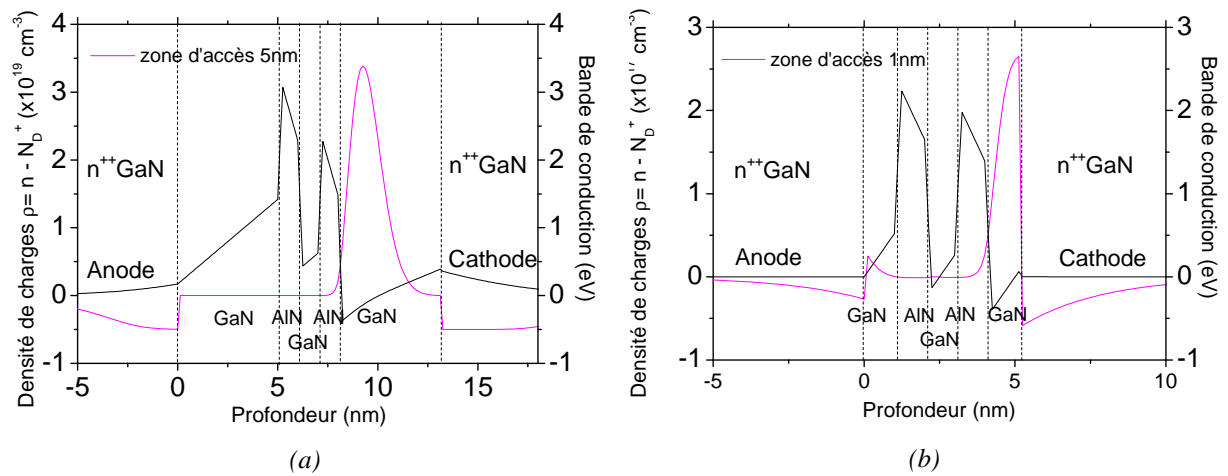
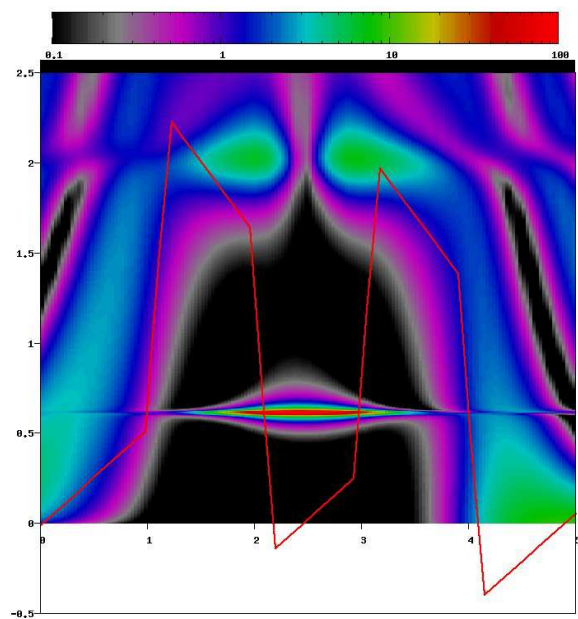


Figure II.10 : Profil de la bande de conduction calculé dans une structure double barrière a) avec des épaisseurs d'espaces de 5nm b) avec des épaisseurs d'espaces de 1nm.

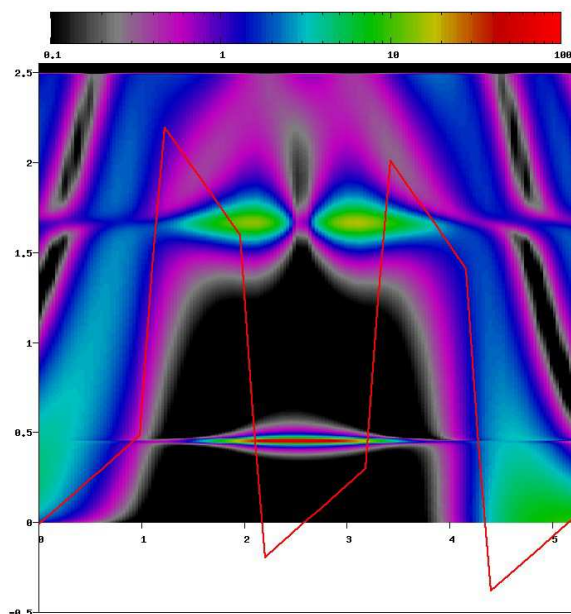
4.4.2 Influence de la largeur du puits GaN

L'évolution des caractéristiques courant-tension est discutée dans une première étape par rapport à la taille du puits GaN entre les couches barrières AlN. Des structures symétriques AlN/GaN variant de 4 à 8 monocouches pour le puits GaN ont été simulées en maintenant l'épaisseur de la barrière AlN à 4 MC. Le calcul de la densité d'états électroniques (à l'équilibre thermodynamique) pour chacune de ces structures a permis d'identifier deux types de niveaux résonants, certains sont confinés principalement dans le puits GaN (série S_1) et d'autres (Série S_2) dans la partie triangulaire des barrières AlN voire au-delà (Figure II.11).

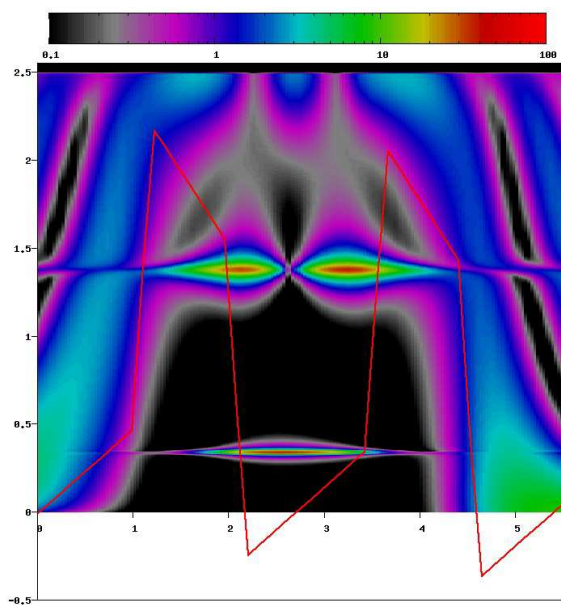
Les résultats obtenus nous permettent de constater que plus l'épaisseur du puits GaN augmente, plus les niveaux résonants s'enfoncent dans le puits. Au vu de la hauteur effective des barrières AlN, les structures simulées dans notre cas comprennent au mieux un seul niveau résonant de type S_2 . Au-delà d'une certaine épaisseur critique du puits GaN (5MC), ce dernier niveau s'abaisse jusqu'à se confiner davantage dans le puits et s'ajouter au niveau résonant de type S_1 déjà présent.



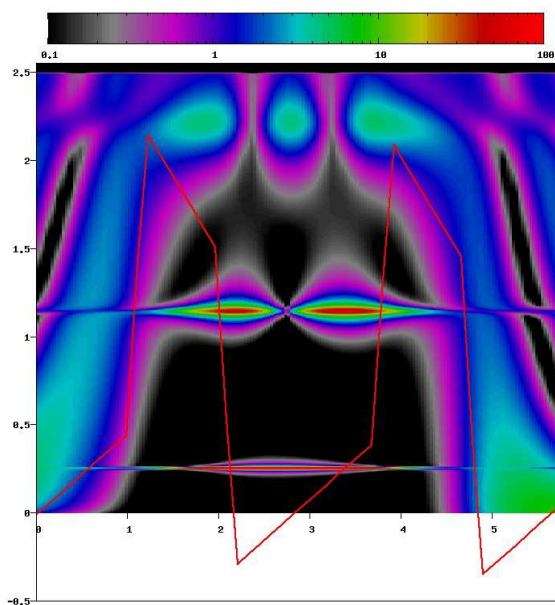
(a)



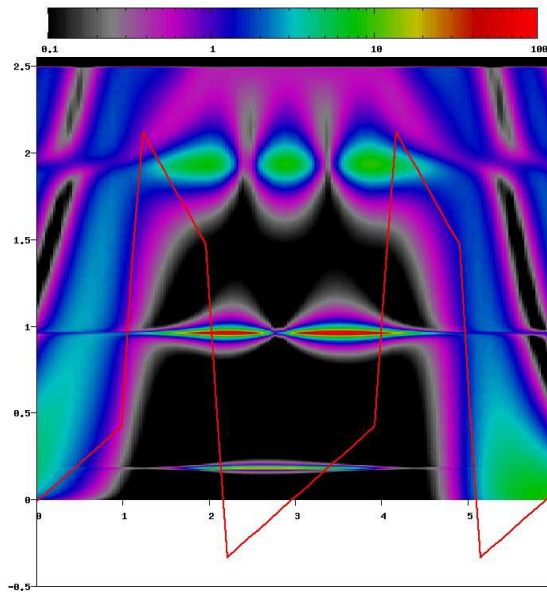
(b)



(c)



(d)



(e)

Figure II.11 : Densités d'états calculées dans une RTD avec une largeur de puits (a) 4MQWs, (b) 5MQWs, (c) 6MQWs, (d) 7MQWs, (e) 8MQWs.

Les résultats obtenus dans le paragraphe précédent à l'équilibre thermodynamique, sont en accord avec les caractéristiques J-V des hétérostructures simulées hors équilibre. La Figure II.12 montre un décalage des pics résonants vers les basses tensions au fur et à mesure que l'épaisseur du puits augmente. Aussi, nous pouvons constater qu'en polarisation inverse, cette évolution se réalise de paire avec une diminution quasi-linéaire de la densité de courant du premier niveau de résonance et une augmentation du second niveau de résonance dans le puits. Notons cependant qu'en polarisation directe, l'évolution de l'intensité de la densité de courant pour le premier et le second niveau de résonance dans le puits diminue quasi-linéairement avec une augmentation de l'épaisseur du puits de GaN et sont systématiquement plus élevées en polarisation directe qu'en polarisation inverse. Ces résultats sont étroitement liés à l'accroissement du couplage des électrons du gaz 2D en inverse (accumulation coté cathode) avec ceux des niveaux résonants du puits.

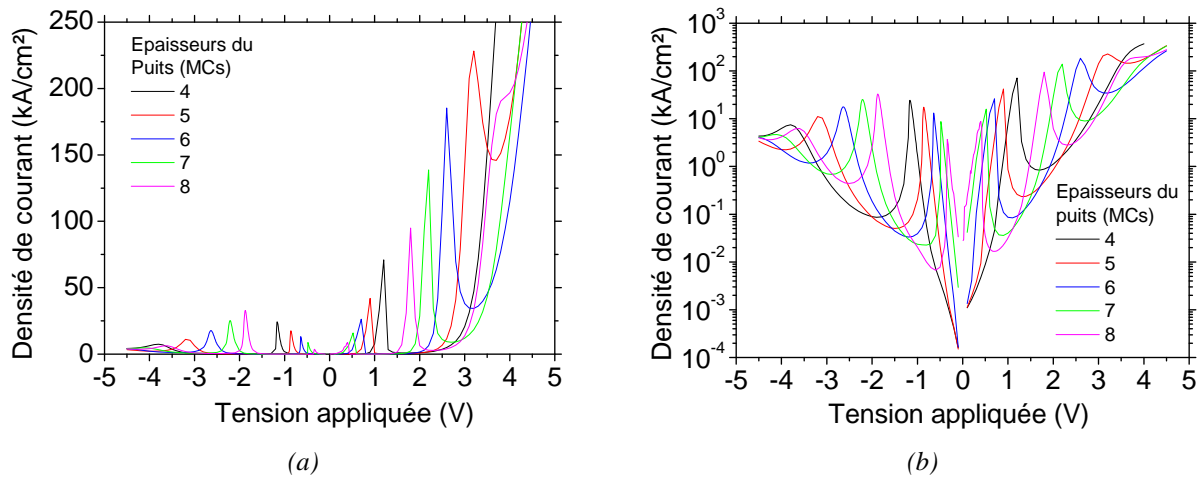


Figure II.12 : Caractéristiques J-V simulées en fonction de la largeur du puits GaN (4MCs à 8MCs) a) en échelle linéaire b) en échelle logarithmique.

Une comparaison de ces caractéristiques entre les deux modes de polarisation (en inverse et en direct) permet de révéler une légère asymétrie de la position des pics. Le diagramme de bande de conduction, propre à chaque structure simulée, permet d'attribuer cette asymétrie (valeur de la tension pic) aux champs de polarisations internes très intenses (piézoélectrique et spontané) et orientés vers la surface dans les nanostructures (Figure II.11).

Les intensités des pics de résonance en polarisation directe sont plus intenses qu'en inverse, cela peut s'expliquer par le fait que le champ de polarisation extérieur est opposé aux champs de polarisations internes à la diode. Dans ce cas, il en résulte une importante accumulation d'électrons dans le puits (Figure II.13). En polarisation inverse, les champs électrique interne et externe présentent le même sens ce qui implique une diminution de la densité d'électrons dans le puits. Une conséquence de cette réduction de la densité de porteurs dans le puits est une diminution spatiale de la ZCE côté anode. Ce phénomène existe aussi dans les transistors HEMT GaN et a aussi été observé par Grindev sur les RTDs AlGaIn/GaN [26].

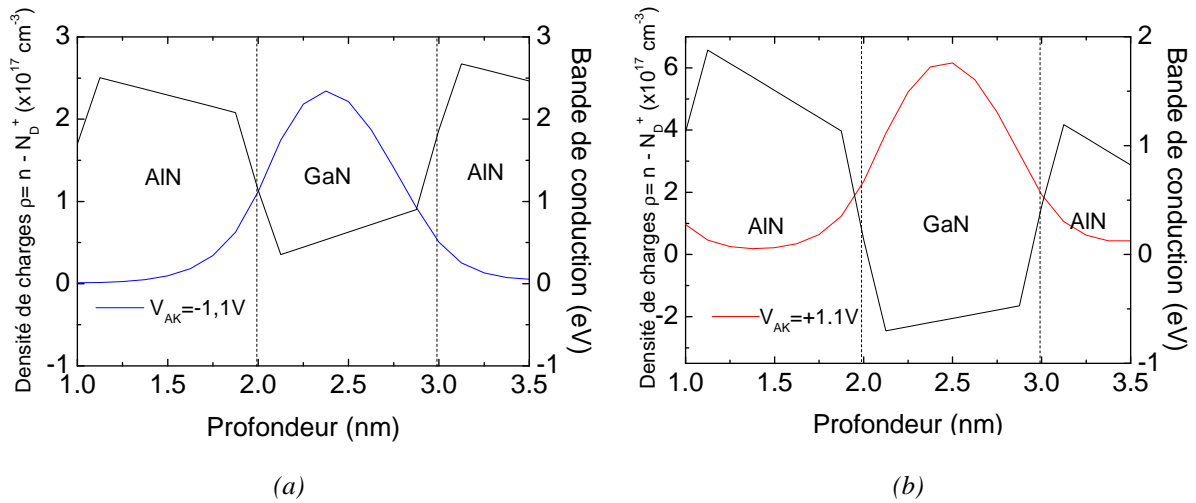


Figure II.13 : Densité des électrons accumulés dans un puits GaN de largeur 4MCs a) en polarisation directe $V=+1,1V$ b) en polarisation inverse $V=-1,1V$.

4.4.3 Influence de l'épaisseur des couches barrière AlN

Afin de déterminer l'impact de l'épaisseur des couches barrières AlN sur les caractéristiques J-V des RTDs, l'épaisseur de ces dernières varient de 4 à 8 MC et la largeur du puits est maintenue à 4MC (Figure II.14). Les courbes J-V montrent une forte diminution de l'intensité des pics avec l'augmentation de l'épaisseur de la couche barrière AlN. Ce phénomène peut s'expliquer aisément du fait de la décroissance de la probabilité de transmission des électrons par effet tunnel au travers d'une barrière de potentiel de plus en plus épaisse.

Ces simulations indiquent également que, contrairement à la première série de pics, la position des pics de résonance de la seconde série est fortement dépendante de l'épaisseur des couches barrières AlN. En effet, ce résultat est directement lié au confinement des niveaux résonants ponctuels dans le puits GaN pour la série S_1 ou étalés dans la partie triangulaire des couches barrières AlN pour la série S_2 .

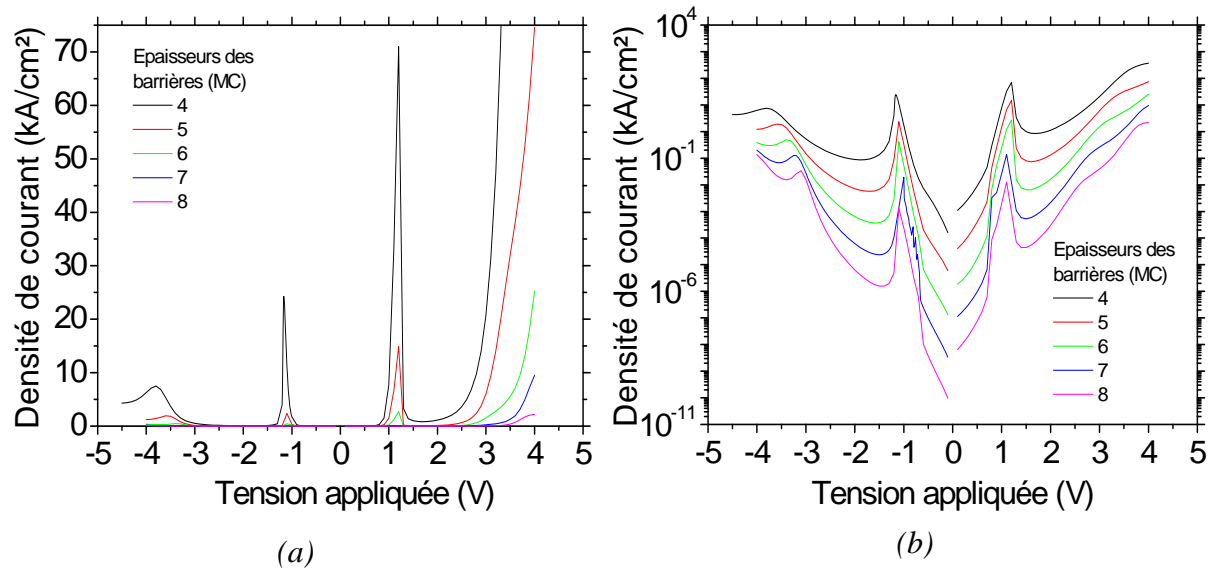


Figure II.14 : Caractéristiques J-V simulées en fonction des épaisseurs des barrières AlN (4MCs à 8MCs) a) en échelle linéaire b) en échelle logarithmique.

4.4.4 Influence du taux d'aluminium des couches barrières AlGaN

L'ingénierie de bandes des matériaux nitrures permet d'envisager la synthèse d'hétérostructures $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ avec des discontinuités de bande de conduction modulables en fonction du taux d'aluminium dans les couches barrières. Toutefois, il convient de rappeler que la discontinuité de bande de conduction ΔE_C entre l' $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ et le GaN présentent une dépendance croissante en fonction du pourcentage d'aluminium. Par conséquent, nous nous sommes intéressés à l'impact des hauteurs de barrières $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ sur les caractéristiques J-V, en faisant varier le pourcentage d'aluminium x entre 20% et 100% pour une structure donnée. La Figure II.15 montre les caractéristiques J-V simulées pour une structure présentant des épaisseurs de puits et de barrières de 4MC.

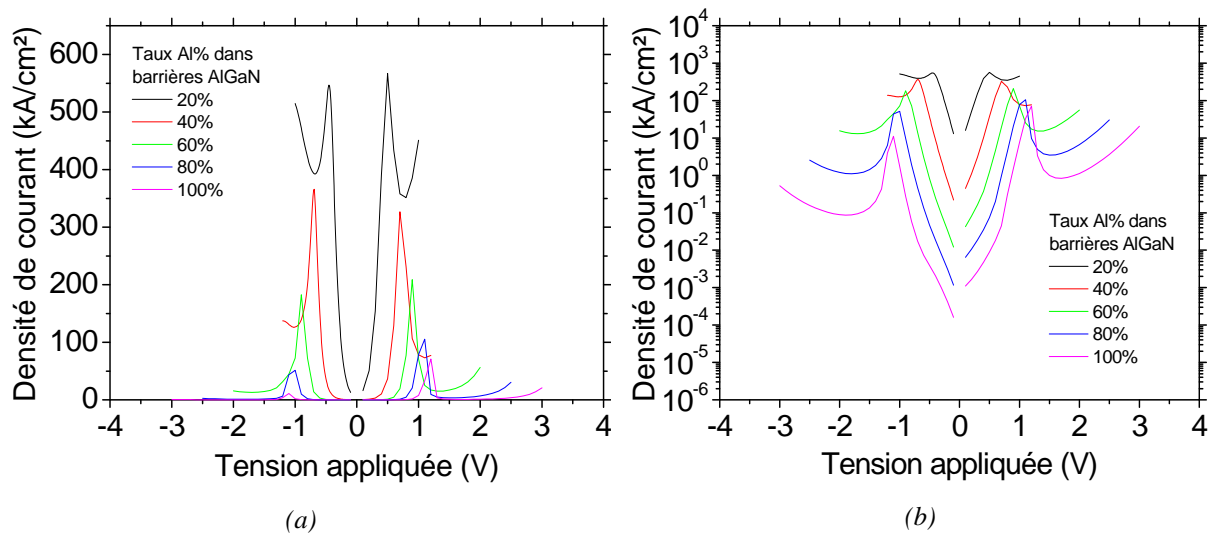


Figure II.15 : Caractéristiques J-V simulées en fonction du taux d'aluminium dans les barrières AlGaN (20% à 100%) (a) en échelle linéaire (b) en échelle logarithmique

Les résultats de ces simulations indiquent que l'augmentation de la hauteur de la barrière a pour effet de décaler la position des pics résonant vers les hautes tensions tout en réduisant leurs intensités de courant. En effet, plus les barrières sont hautes, plus les charges de polarisations sont élevées, plus la discontinuité de BC aux interfaces est importante. Ce qui va de paire avec un champ électrique interne plus intense. De ce fait, la zone de charge d'espace sera beaucoup plus réduite. La combinaison de ces deux phénomènes permet d'expliquer d'une part le décalage en tension des pics résonant (à corrélérer au champ électrique interne) et d'autre part l'augmentation de la densité de courant ou l'intensité des pics (à lier à la zone de charge d'espace).

Par ailleurs, les caractéristiques J-V permettent aussi d'observer une évolution décroissante du rapport $J_{\text{pic}}/J_{\text{vallée}}$ en fonction du pourcentage d'aluminium. Notons que la densité de courant vallée $J_{\text{vallée}}$ présente une décroissance beaucoup plus marquée que le courant pic J_{pic} lorsque la hauteur de la barrière augmente. Cette évolution peut être attribuée en majeure partie à l'augmentation du courant thermoïonique au travers des barrières lorsque le taux d'aluminium diminue.

5 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons commencé par effectuer un bref rappel du principe de fonctionnement d'une RTD. Dans un premier temps, nous avons consacré une grande partie à la description du formalisme des fonctions de Green hors équilibre. Une attention particulière a été portée au concept de self-énergie qui permet de modéliser les contacts métalliques dans un système ouvert. Dans un deuxième temps, ce formalisme a été ensuite appliqué pour simuler le transport électronique dans les RTDs. Le modèle développé à une dimension a été par la suite exposé en discutant la validité des approximations et hypothèses de calculs utilisées. A la fin de ce chapitre, nous avons tenté d'apporter une compréhension globale du transport électronique dans les RTDs et cela, en faisant varier les paramètres qui nous semblaient être les plus percutants, tels que la longueur des espaceurs, la largeur du puits central GaN, la hauteur et l'épaisseur des barrières AlGaIn.

6 Références bibliographiques

- [1] D. Hofstetter, J. D. Francesco, D. Martin, N. Grandjean, Y. Kotsar and E. Monroy, Appl. Phys. Lett. **98** (2011) 071104
- [2] E. Bellotti, K. Driscoll, T. D. Moustakas, and R. Paiella, J. Appl. Phys. **105** (2009) 113103
- [3] E. Valcheva, K. Kirilov, B. Monemar, H. Amano, and I. Akasaki, Phys. Status Solidi C **6 (S751)** (2009).
- [4] E. R. Brown, T. C. L. G. Sollner, C. D. Parker, W. D. Goodhue, and C. L. Chen, Appl. Phys. Lett. **55** (1989) 1777
- [5] E. R. Brown, J. R. Soderstrom, C.D. Parker, L. J. Mahoney, and K. M. Molvar, App. Phys. Lett. **58** (1991) 2291
- [6] M. Tchernycheva, L. Nevou, L. Doyenette, F. H. Julien, E. Warde, F. Guillot, E. Monroy, E. Bellet-Amalric, T. Remmele, and M. Albrecht, Phys. Rev. B **73** (2006) 125347
- [7] R. Tsu and L. Esaki, Appl. Phys. Lett. **22 (11)** (1973)
- [8] T.J. Shewchuk, P. C. Chapin, P.D. Coleman, W. Kopp, R. Fischer and H. Morkoç, Appl. Phys. Lett. **46 (5)** (1985)
- [9] W. Tian, S. Datta, S. Hong, R. Riefenberger, J. I. Henderson, and C. P. Kubiak, J. Chem. Phys. **109** (1998) 2874.
- [10] P. Damle, A.W. Ghosh, and S. Datta, *Chem. Phys.* **281** (2002) 171.
- [11] M. Paulsson, F. Zahid, and S. Datta, Tech.Rep., www.arxiv.org/abs/cond-mat/0208183, 2002.
- [12] A. Bachtold, P. Hadley, and C. Dekker, *Science*, **294** (2001)1317.
- [13] V. Derycke, R. Martel, J. Appenzeller, and Ph. Avouris, *Nano Lett.*, **1** (2001) 453.
- [14] P. L. McEuen, M. S. Fuhrer, and H. Park, *IEEE Trans. Nanotechnol.*, **1** (2002) 78
- [15] L.P. Kadanoff and G. Baym, “*Quantum Statistical Mechanics*”, Addison-Wesley Publishing Company, Inc (1962)
- [16] S. Datta, “*Quantum Transport, Atom to Transistor*”, Cambridge University Press (2005)

- [17] S. Datta, “*Electronic Transport in Mesoscopic Systems*”, Cambridge University Press (1995)
- [18] J. L. Farvaque, “*Initiation à la théorie quantique des solides*”, Ellipses 2010
- [19] P.M. Morse and H. Feshbach, “*Methodes of Theoretical Physics*”, McGraw-Hill Book Compagny (1953)
- [20] E.N. Economou, “*Green’s functions in Quantum Physics*”, Springer Series in Solid-Stat Sciences 7, Springer-Verlag Berlin Heidelberg (1979)
- [21] R. Kubo & S.J. Miyake, Solid State Phys. **17 (269)** (1965)
- [22] M. P. Anantram, M. S. Lundstrom and D. E. Nikonov, Proceedings of the IEEE, **96, 9** (2008)
- [23] Benali, rapport DEA, interne (IEMN)
- [24] <http://www.netlib.org/lapack/>
- [25] Douvry, rapport DEA, interne (IEMN)
- [26] S. N. Grinyaev and A. N. Razzhuvalov, ISSN 1063-7826, Semiconductors, **40 (6)** (2006) 675–680.

Chapitre 3

**Etude expérimentale de l'effet tunnel résonant au travers
de structures à double barrière AlGa_N/Ga_N**

Table des matières

1	INTRODUCTION.....	77
2	APPROCHE ASCENDANTE	79
2.1	CROISSANCE SELECTIVE	79
2.2	REPRISE DE CROISSANCE.....	83
3	APPROCHE DESCENDANTE	87
3.1	CONTRAINTE RESIDUELLE.....	87
3.2	TECHNOLOGIE DES COMPOSANTS RTDS	93
3.2.1	<i>Moule en PDMS.....</i>	<i>93</i>
3.2.2	<i>Définition des marques d'alignements.....</i>	<i>93</i>
3.2.3	<i>Définition des nano-diodes.....</i>	<i>94</i>
3.2.3.1	Lithographie des nano-diodes.....	94
3.2.3.2	Gravure de l'hétérostructure	95
3.2.3.2.1	Techniques de Gravure	95
3.2.3.2.1.1	Gravure RIE.....	95
3.2.3.2.1.2	Gravure ICP-RIE	96
3.2.3.2.2	Définition des mésas par gravure ICP-RIE	97
3.2.3.2.3	Définition des mésas par gravure FIB.....	98
3.2.4	<i>Définition des contacts ohmiques du bottom.....</i>	<i>99</i>
3.2.4.1	Choix de la métallisation.....	99
3.2.4.2	Ré-optimisation des contacts ohmiques.....	101
3.2.4.3	Lithographie des contacts ohmiques du <i>bottom</i>	102
3.2.5	<i>Aplanissement de la structure.....</i>	<i>103</i>
3.2.6	<i>Définition du pont soutenu «contact ohmique du top»</i>	<i>105</i>
3.3	CARACTERISATION ELECTRIQUE DES RTDS.....	106
3.3.1	<i>Structure des échantillons étudiés.....</i>	<i>106</i>
3.3.2	<i>Caractérisation sous pointes RF.....</i>	<i>108</i>
3.3.3	<i>Caractérisation sous pointes FIB.....</i>	<i>109</i>
3.3.4	<i>Caractérisation sous pointes nanoprobe.....</i>	<i>111</i>
3.3.4.1	Présentation du <i>nanoprobe</i>	111
3.3.4.2	Choix de la pointe	112
3.3.4.3	Mode opératoire.....	113
3.3.4.4	Analyses et discussions.....	114

3.3.5	<i>Confrontation théorie-expérience</i>	119
4	CONCLUSION	121
5	REFERENCES BIBLIOGRAPHIQUES	123

1 Introduction

Les études expérimentales sur le transport vertical dans les hétérostructures nitrures à large bande interdite ne sont pas nombreuses. L'essentiel des actions a été mené après les années 2000. Kishino *et al.* [1] a observé pour la première fois un effet tunnel résonant dans des hétérostructures à double barrière AlN/GaN synthétisées par MBE avec un rapport $J_{\text{pic}}/J_{\text{vallé}}$ autour de 3,1. Sur cette même structure, Kikuchi *et al.* [2] ont présenté des résultats améliorés en mesurant un rapport $J_{\text{pic}}/J_{\text{vallé}}$ de plus de 32. Une année plus tard, Foxon *et al.* [3] ont observé des instabilités de courant dans les RTDs, qu'ils ont attribuées aux processus de résonance par effet tunnel. Par la suite, en 2006, Golka *et al.* [4] ont fabriqué des RTDs AlGaIn/GaN sur un substrat de GaN massif. Ces derniers ont montré qu'il était possible de restaurer partiellement le courant J_{pic} à l'aide d'un recuit thermique.

Bien que toutes les structures étudiées par chacun de ces groupes soit différentes, ils ont tous été confrontés à l'observation de caractéristiques assez similaires :

1. La résistance négative n'est visible que dans un sens de balayage en tension, celle-ci apparaît dans le sens croissant mais disparaît dans le sens décroissant.
2. Lors de mesures consécutives, la mesure n'est pas reproductible, le pic de résonance décroît en intensité et se décale vers les basses tensions.
3. Les mesures $J(V)$ présentent des instabilités de courant et un phénomène d'hystérésis sur la caractéristique $J(V)$.

Une étude plus récente, menée par Bayram *et al.* [5] a permis d'observer la NDR dans les deux sens de balayage en tension. Ce résultat a été rendu possible en conjuguant deux aspects : la réduction de la densité de dislocations dans la zone active en adoptant un substrat GaN synthétisé par la technique LEO et, en réduisant drastiquement le pourcentage d'aluminium dans les couches barrières ($\text{Al}_{0,2}\text{Ga}_{0,8}\text{N}$) au détriment de la discontinuité de bande de conduction. La même équipe a réussi à rendre plus reproductible l'effet tunnel résonant en utilisant des matériaux nitrures à large bande interdite non-polaires [6].

Au cours de la même année, Monroy *et al.* [7] ont été les premiers à réussir à surmonter les problèmes de reproductibilité de la mesure en synthétisant des nano-fils à hétérostructure à doubles barrières AlN/GaN. En effet, grâce à leur section relativement faible, ces nano-fils

sont susceptibles de s'accommoder en paramètre de maille avec leur substrat, ce qui permet ainsi d'éviter la formation de dislocations traversantes. Les caractéristiques $J(V)$ mesurées sur ces nano-fils ont révélé un pic de résonance reproductible à des températures cryogéniques et ce jusqu'à 150K. Cette récente percée a offert de nouvelles perspectives pour l'étude du transport vertical dans les dispositifs III-N.

Dans le premier chapitre, nous avons vu que le désaccord en paramètre de maille et la différence de coefficient d'expansion thermique entre le GaN et le substrat génèrent des défauts structuraux comme les dislocations traversantes. Ces dernières génèrent des pièges pour les porteurs mais aussi des court-circuits à travers les hétérostructures à double barrière AlGaIn/GaN. La conduction supposée au travers des dislocations est dépendante de leur densité qui varie avec la nature du substrat. Sur saphir, elle est avoisine les 10^8 - 10^9 cm⁻² soit une dislocation toutes les 450nm. L'objectif est alors de synthétiser une zone active dont les dimensions sont plus petites que cette dernière de manière à obtenir un certain nombre d'hétérostructures libres de dislocations.

La stratégie employée dans ce troisième chapitre consiste en deux approches totalement distinctes lesquelles peuvent espérer des résultats différents : l'approche ascendante dite « *bottom-up* », et l'approche descendante dite « *top-down* ».

Dans l'approche ascendante, une première voie basée sur l'épitaxie sélective est tout d'abord considérée. Le contrôle de cette technique est mise en œuvre dans un premier temps à l'échelle micrométrique et dans un deuxième temps, étendu à l'échelle nanométrique. Pour ce faire, des ouvertures de géométries et de tailles variables sont réalisées par lithographie optique et/ou électronique dans des masques de diélectriques type Si₃N₄ ou SiO₂.

Une seconde voie est ensuite explorée, à savoir la reprise de croissance sur des micro-nano-piliers GaN servant de couches tampon dopé N. La technique de gravure par faisceau d'ions focalisés est mise en œuvre pour la fabrication de micro et nano-piliers avec des hauteurs pouvant dépasser le micromètre. Les résultats obtenus par épitaxie sélective et reprise de croissance sont essentiellement caractérisés au MEB et analysés en fonction de la taille et de la géométrie des motifs.

Dans l'approche descendante, la technique micro-Raman est mise en œuvre pour étudier la distribution de la contrainte dans les nano/micro-édifices fonctionnels. En ce sens, une structure suspendue (5×15μm²) est réalisée par gravure FIB sur un bord clivé de l'échantillon

afin de disposer d'une référence en contrainte. Par la suite, un procédé de fabrication est développé pour la réalisation technologique de nano-diodes à effet tunnel résonant dans une architecture planaire intégrée. Les contacts ohmiques du *top* et du *bottom* sont pourvus de lignes d'accès adaptées en impédance pour réaliser des mesures électriques coplanaires en régime RF. Une technologie plus simple et plus rapide est aussi utilisée pour réaliser ces mêmes diodes lorsqu'elles sont non-passivées et sans plots d'épaississements, pour une étude physique des contacts ou des micro-nano-diodes sous micro-pointes au nano-probe ou directement au FIB.

2 Approche ascendante

2.1 Croissance sélective

La croissance sélective a pour but de faire croître par MBE des hétérostructures à travers des ouvertures formées dans un masque diélectrique (Figure III.1). Avec des conditions appropriées, la croissance se fait uniquement dans les ouvertures du masque et non sur ce dernier. Le principe de cette épitaxie est connu sous le nom de croissance sélective. Il s'agit là d'une technique de croissance qui permet une importante réduction de la densité de dislocations dans le matériau.

En effet, celle-ci a déjà prouvé son efficacité dans l'épitaxie latérale de pseudo-substrat GaN. Par ailleurs, la croissance sélective met en jeu des mécanismes singuliers de relaxation des contraintes présents dans les couches épitaxiées qui réduisent considérablement l'énergie de contrainte emmagasinée et permettent ainsi de diminuer le nombre de dislocations formées.

L'idée de base consiste à utiliser un masque diélectrique permettant de localiser la croissance du matériau à large bande interdite (GaN notamment) à haute température (>800°C). Notre choix s'est donc naturellement portée sur SiO₂ et Si₃N₄ réalisé soit par PECVD à basse température (<300°C) ou par LPCVD (1100 et 800°C respectivement). Finalement pour des questions de coût et de temps de réalisation, nous avons opté dans la majorité des cas pour un masque de Si₃N₄ réalisé en PECVD.

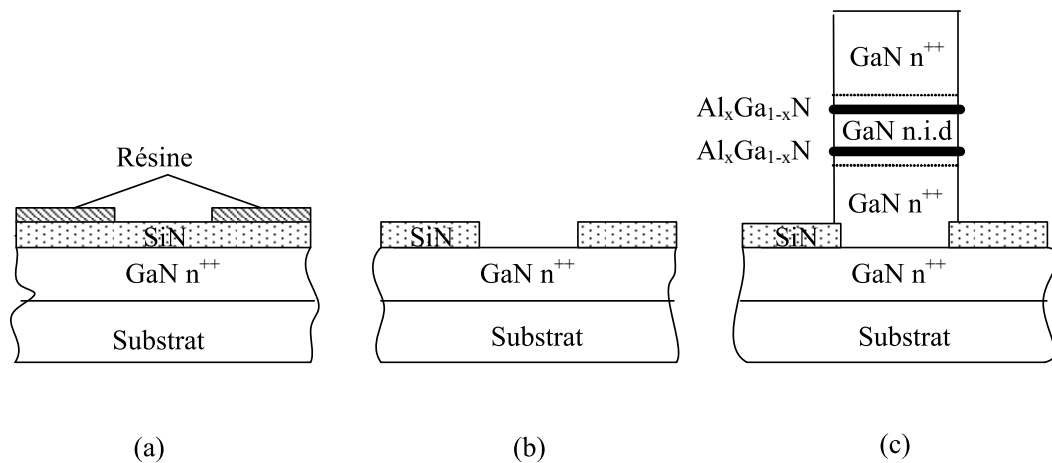
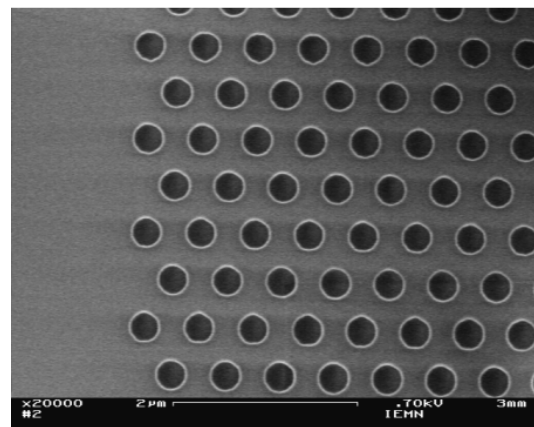
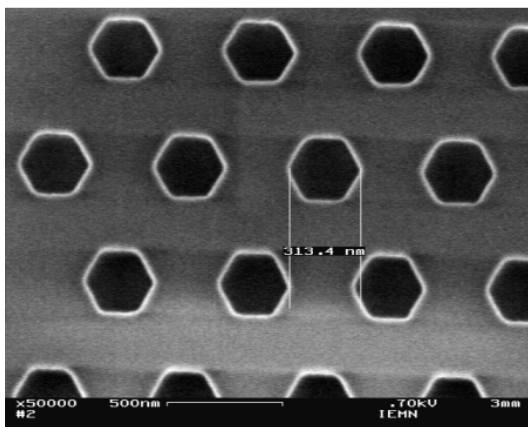


Figure III.1 : Schéma illustrant les différentes étapes de la croissance sélective : a) dépôt du masque diélectrique et lithographie électronique des motifs, b) ouverture par gravure RIE du masque diélectrique c) reprise de croissance à travers les ouvertures.

De ce fait, un masque en nitrure de silicium a été tout d’abord déposé sur toute la surface d’un pseudo-substrat GaN. Plusieurs épaisseurs de Si₃N₄ allant de 10nm à 650nm ont été testées afin d’obtenir le rapport d’aspect (diamètre de l’ouverture sur l’épaisseur du masque de diélectrique) le plus grand techniquement possible (avec des flancs droits) pour arriver à faire croître sélectivement une hétérostructure de 1µm de hauteur au maximum. Sur ce masque Si₃N₄ a été ensuite formé par lithographie et gravure RIE, un réseau d’ouvertures de formes (cercles, hexagones, lignes) et de dimensions variées (de 100nm à 5µm) (Figure III.2).



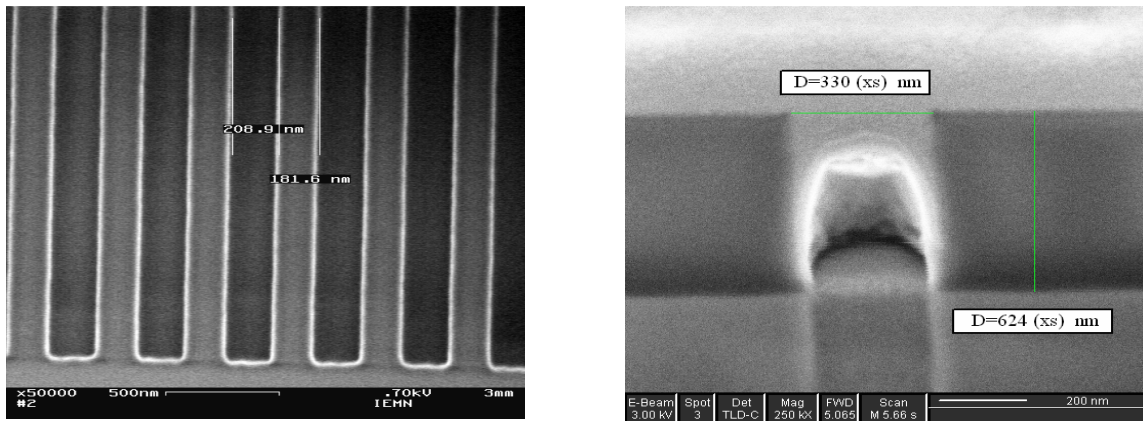


Figure III.2: Images MEB des motifs après écriture et révélation de la résine électronique de type PMMA.

Ces motifs ont été orientés suivant différentes orientations cristallographiques afin d’étudier leur impact sur la croissance sélective. La Figure III.3 montre un aperçu de deux masques utilisés à cet effet. Sur ces masques a été prévue une large zone (carré 500×500µm) destinée aux analyses RHEED lors de la croissance matériau.

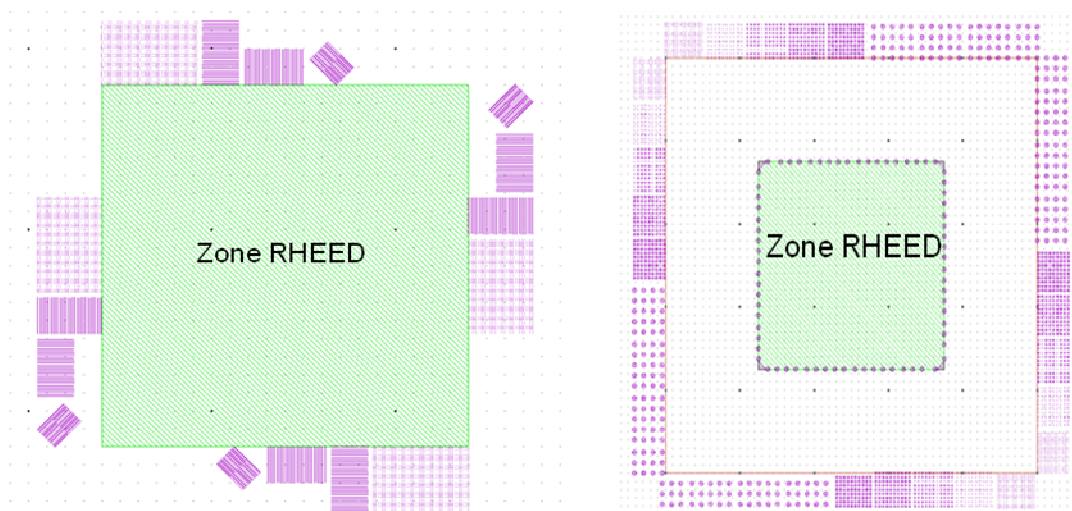


Figure III.3: Dessins des deux masques électroniques utilisés pour l’étude de la croissance sélective.

La sélectivité dépend principalement des conditions de croissance : pression [8], température [9], fraction molaire des espèces réactives [10]. Dans un premier temps, nous nous sommes fixé pour objectif d’obtenir et d’optimiser l’épitaxie sélective par MBE à grande échelle (quelques dizaines de microns). Après épitaxie par MBE réalisé au CRHEA, des images ont été prises au MEB pour analyser cette sélectivité de croissance. La Figure III.4

montre un exemple de reprise de croissance de GaN au travers d'un masque de 80nm de Si_3N_4 dans une ouverture rectangulaire ($50 \times 100 \mu\text{m}^2$) où l'on perçoit parfaitement le rôle du masque Si_3N_4 lequel empêche la croissance de GaN. Notons également que les flancs de la reprise de croissance en bord de masque ne sont pas parfaitement verticaux.

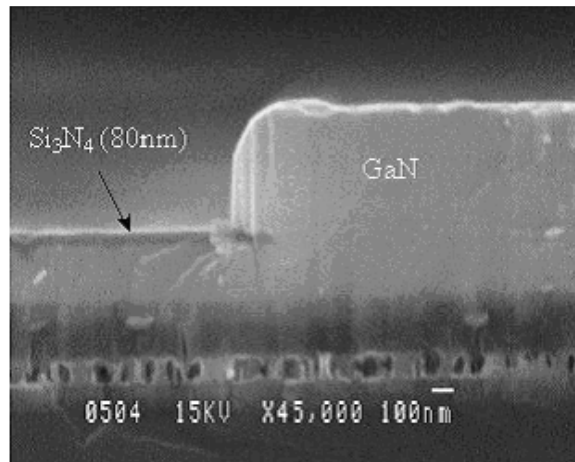


Figure III.4: Image MEB d'un exemple de reprise de croissance de GaN au travers d'un masque Si_3N_4 dans une ouverture rectangulaire ($50 \times 100 \mu\text{m}$).

Néanmoins, cette réussite nous a encouragée à étendre notre étude à la mise en œuvre de l'épitaxie sélective du GaN à l'échelle submicrométrique (et $>100\text{nm}$). Les images prises au MEB après épitaxie montrent clairement que les designs circulaires inférieurs au micron deviennent hexagonaux après reprise de croissance et s'accompagnent d'une croissance préférentielle sur les bords du masque au détriment du centre (**Figure III.5**). De plus, nous constatons que le matériau semble présenter une forte porosité au centre des motifs.

D'après la loi de Fick, le manque de sélectivité dans notre cas est directement lié à la longueur de diffusion des espèces sur le masque. De ce fait, la gamme de températures habituellement utilisées par MBE s'apprête difficilement à la réalisation de ce type de croissance sélective. Ainsi, nous avons fait varier la densité des motifs sur le masque afin de tenter d'améliorer l'épitaxie sélective. Cependant, les résultats obtenus demeurent inchangés (**Figure III.5**).

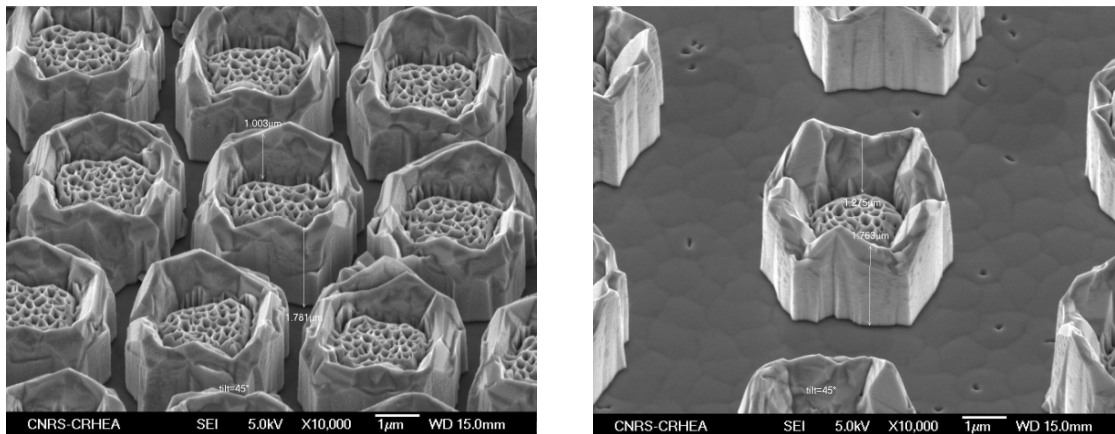


Figure III.5: Images MEB d'un exemple de reprise de croissance de GaN au travers d'un masque Si_3N_4 dans des ouvertures circulaires ($1\mu\text{m}$ diamètre) avec des densités variables sur le masque Si_3N_4 (80nm).

2.2 Reprise de croissance

Le FIB est un outil puissant permettant de définir les motifs à l'échelle nanométrique dans les couches minces avec un minimum de tests technologiques et un rapport d'aspect bien meilleur qu'en gravure sèche. Une solution alternative à cette épitaxie sélective dans des nano-micro-ouvertures dans un masque diélectrique, consiste alors à effectuer une reprise de croissance sur des micro-nano-piliers réalisés par gravure au FIB sur des templates GaN de $3\mu\text{m}$ d'épaisseur sur substrat saphir. Dans cette étude, nous montrons qu'il est possible de fabriquer des motifs de différentes formes, compatibles avec la reprise de croissance d'hétérostructures à base de GaN (Figure III.6). Pour ce faire, la gravure au FIB a été réalisée in-situ dans un bâti FEI au moyen d'un faisceau d'ions de Gallium (Ga^+), focalisés et accélérés à des énergies de l'ordre de 30keV .

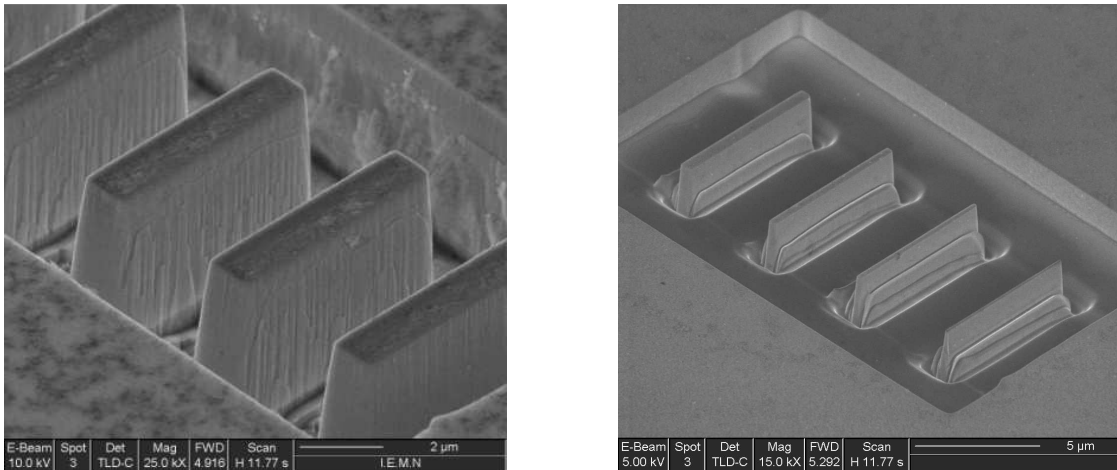
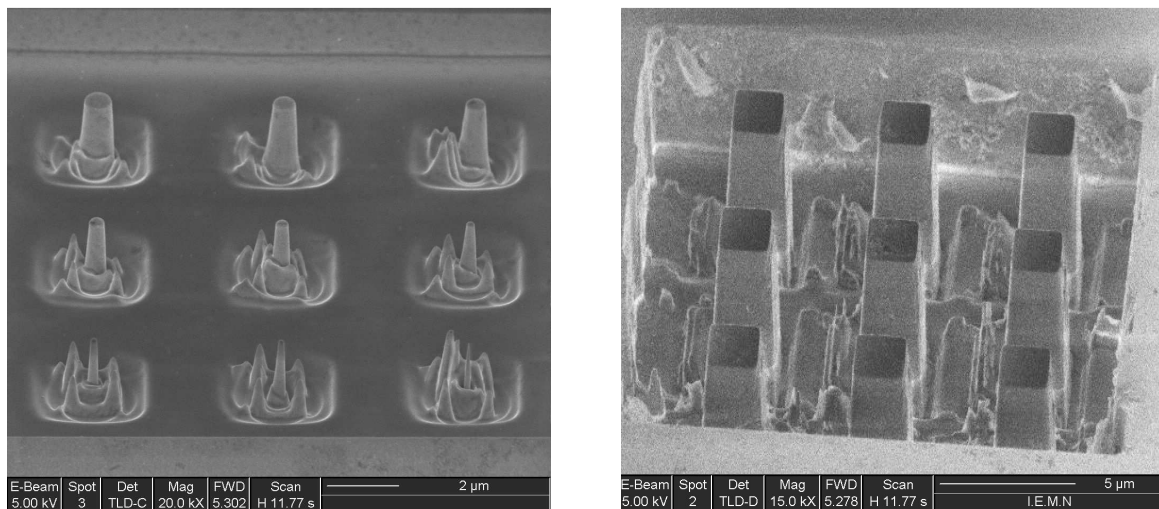


Figure III.6: Images MEB de motifs micro et nanométriques fabriqués par gravure FIB avec une couche sacrificielle en Chrome.

Afin de protéger la surface des re-dépositions de matière durant la gravure et améliorer la définition des motifs, une fine couche sacrificielle en chrome a été préalablement déposée sur pleine plaque par pulvérisation cathodique. Lié à des problèmes de propreté de la surface, ce métal (Cr) a du être remplacé par la suite par du titane (Figure III.7). Des motifs avec des rapports d'aspects très élevés (>20) ont pu être ainsi réalisés avec des profondeurs de gravure avoisinant les 2µm et des dimensions à la base variant de 50nm à plusieurs microns.



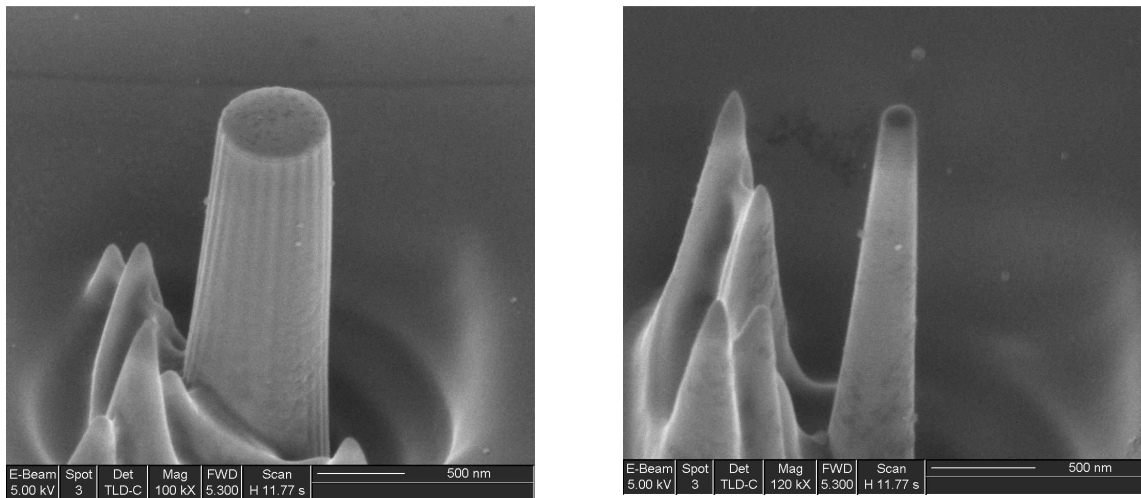


Figure III.7: Images MEB de motifs micro et nanométriques fabriqués par gravure au FIB avec une couche sacrificielle en Titane.

La reprise de croissance de l'hétérostructure AlN/GaN a ensuite été effectuée dans un réacteur MBE en utilisant l'ammoniac comme source d'azote. Après un dégazage à 400°C, l'échantillon est chauffé jusqu'à la température de croissance (800°C) sous un flux d'ammoniac de 200sccm. Ces conditions de croissance ont fait l'objet de nombreuses études d'optimisation sur des surfaces planes pour l'épitaxie bidimensionnelle d'hétérostructures de haute qualité [11]. L'échantillon épitaxié est constitué d'une structure simple barrière AlN de 2nm, entourée de part et d'autre, par une matrice GaN de 300nm d'épaisseur.

Après croissance, l'influence de la taille et de la géométrie des motifs sur la reprise de croissance ont été analysés au MEB. Les images prises sur les motifs micrométriques carrés (>1µm) semblent montrer que la reprise de croissance s'effectue sur les facettes supérieures et latérales des motifs. Cela n'affecte pas leur forme et leur hauteur initiale (Figure III.8.a). Cependant, ce mode de croissance nuit gravement à l'obtention de barrières AlN perpendiculaire aux flancs (Figures III-8 (a) et (c)) et ceci est d'autant plus vérifié que le diamètre de l'hétérostructure est petit.

En dépit des dommages causés par le bombardement ionique au FIB, cette croissance semble également se produire sur le fond de gravure. Néanmoins, cette région présente une surface très rugueuse en comparaison avec les facettes supérieures et latérales des motifs, qui quant à elles, sont « lisses ».

Les observations faites sur les motifs de forme circulaires et de dimension plus petite (<1µm), ont permis de constater une tournure de ces motifs vers des structures hexagonales,

notamment avec le développement de facettes m-plane (1-100) (Figure III.8.b). Malgré un dépôt de $0,6\mu\text{m}$ au dessus de ces structures (0001), des motifs avec des diamètres inférieurs à $0,5\mu\text{m}$ ont pu être ainsi obtenu. Ce résultat peut être expliqué d'une part, par des effets purement géométriques affectant le flux d'éléments III et N dans le réacteur MBE [12], et d'autre part, par une diminution de la vitesse de croissance sur les facettes supérieures (0001). Au dessus des structures de plus petits diamètres, des facettes semi-polaires se sont formées. Elles sont beaucoup plus prononcées en comparaison avec les grosses structures (Figure III.8.b.inset). Ces facettes semi-polaires possèdent des plans intermédiaires compris entre les plans (0001) et (1-100).

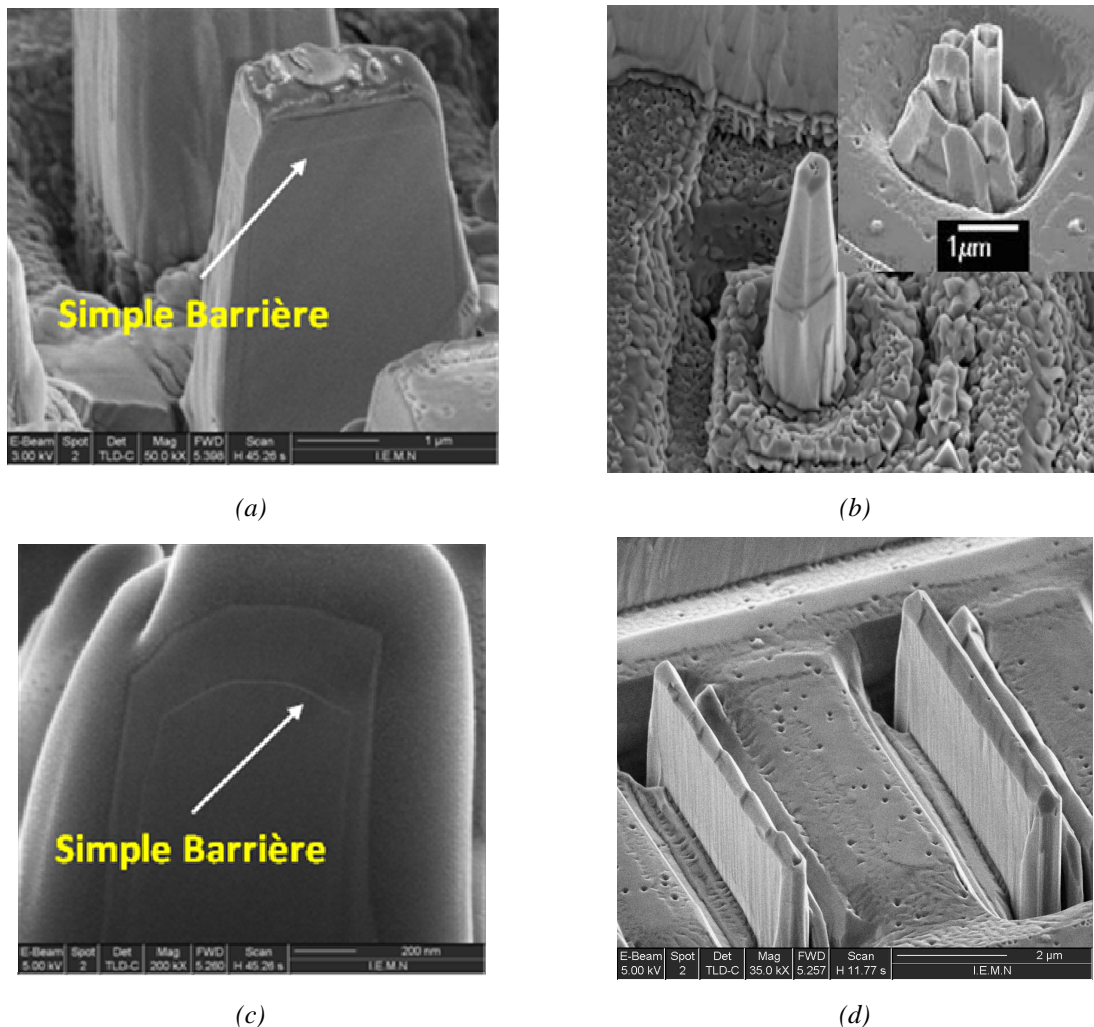


Figure III.8: Images MEB prise après reprise de croissance de la PTC507 sur : (a) des motifs micrométriques rectangulaires ($< 2\mu\text{m}$) après coupe FIB de la tranche, (c) idem pour une section $< 0,5\mu\text{m}$ (b) des motifs circulaires avec des diamètres inférieurs à $0,5\mu\text{m}$. ; (d) Vue en perspective d'une croissance 3D le long d'une colonne de largeur sub-100nm.

Sur les motifs de plus grand diamètre ($0,5\mu\text{m} < d < 1\mu\text{m}$), il advient de remarquer le développement de 6 facettes latérales supplémentaires (a-plane) aboutissant à des structures dodécagonales (12 facettes) **Figure III.9**). Les résultats de ces travaux ont fait récemment l'objet d'une publication en collaboration avec le CHREA [13]. En raison de problèmes techniques temporaires (panne de la cellule de dopage Silicium), les hétérostructures épitaxiées n'ont malheureusement pas pu être caractérisées électriquement.

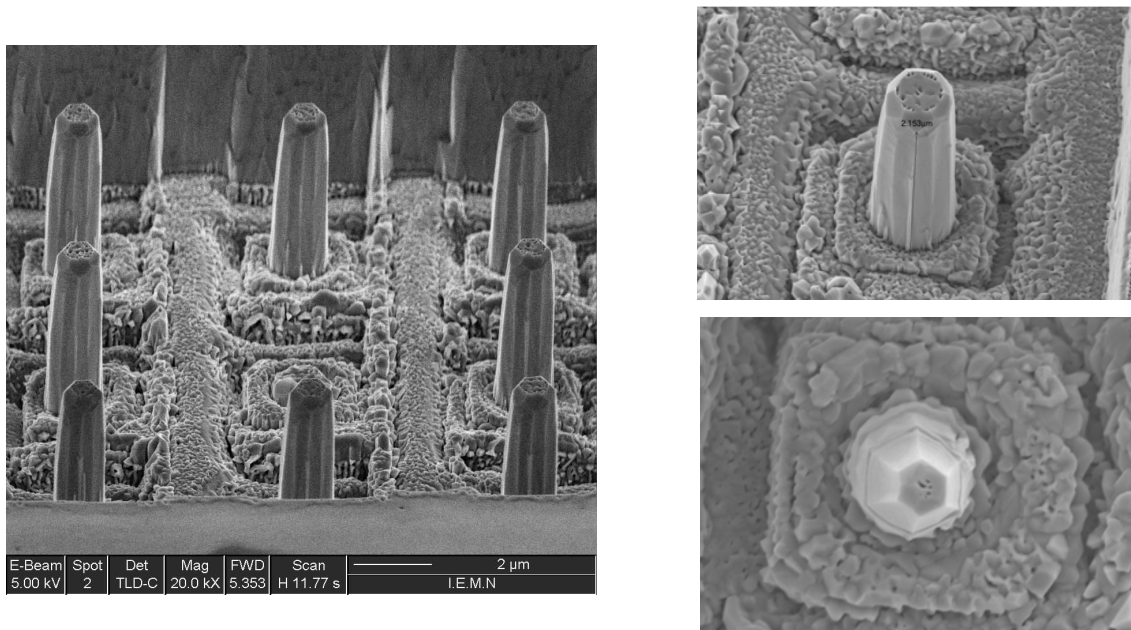


Figure III.9: Image MEB prise après reprise de croissance sur des motifs circulaire avec de diamètres compris entre $0,5\mu\text{m}$ et $1\mu\text{m}$ (PTC509).

3 Approche descendante

3.1 Contrainte résiduelle

La méthode conventionnelle type DRX n'est pas ou alors difficilement adaptée pour mesurer la contrainte dans des microstructures ou des nano/micro-objets. La technique de micro-Raman constitue une alternative offrant la possibilité de sonder la matière à l'échelle micrométrique au moyen d'un faisceau laser avec une dimension du spot de l'ordre du micron. Dans le cadre de notre étude, cette approche est utilisée pour mesurer la possible distribution spatiale de la contrainte résiduelle dans les micro-diodes à base de GaN et son

impact sur le fonctionnement de ce dernier. L'impact du motif et de la taille de ces microstructures sur la contrainte résiduelle est analysé en relevant le décalage en fréquence des phonons optiques du mode E_2 du GaN. Ce mode présente l'avantage d'être non polaire et par conséquent plus sensible aux contraintes mécaniques de la zone active.

Des microstructures cylindriques de $1\mu\text{m}$ à $100\mu\text{m}$ de diamètre ont été fabriquées par FIB sur un échantillon GaN/ Al_2O_3 épitaxié par MOCVD (couche commerciale) (Figure III.10). Un laser He-Ne de longueur d'onde 633 nm est employé dans cette étude. En raison de la médiocre dissipation thermique du substrat saphir d'un côté et de l'air tout autour des micropiliers de l'autre côté, les mesures obtenues se sont avérées très instables dans le temps et dans l'espace. C'est pourquoi, pour éviter toute évolution temporelle des grandeurs mesurées, il a fallu fixer la puissance au niveau de la source à $0,3\text{ mW}/\mu\text{m}^2$ au maximum.

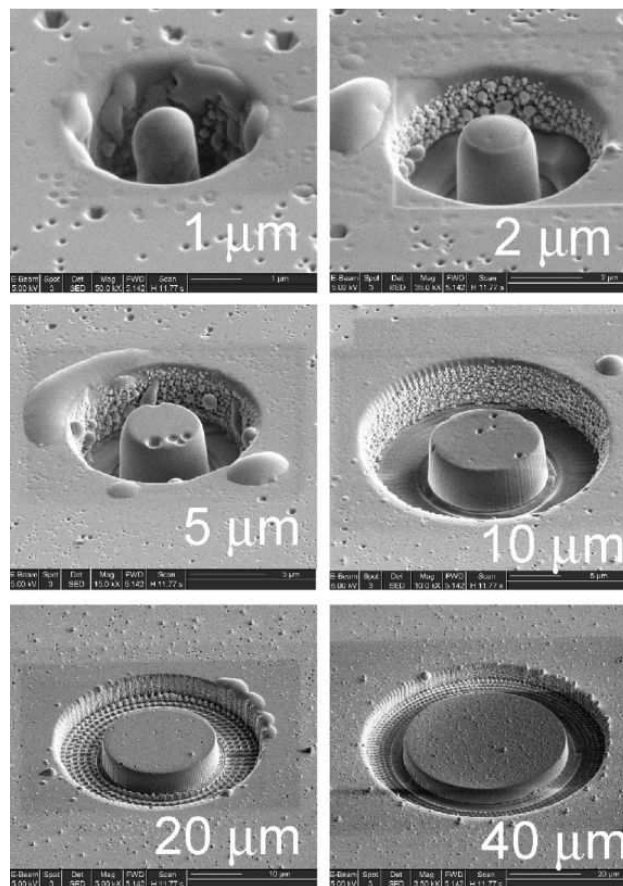


Figure III.10: Images MEB de micro-structures cylindriques fabriquées au FIB, avec des diamètres variables allant de $1\mu\text{m}$ à $100\mu\text{m}$.

L'approche décrite par Briggs-Ramdas [14] permet de décrire le décalage en fréquence du mode E_2 dans un cristal de type wurtzite en fonction de la contrainte résiduelle du matériau par la relation :

$$\Delta v_{E2} = a_{E2}(\sigma_{xx} + \sigma_{yy}) + b_{E2}\sigma_{zz} \pm c_{E2}\sqrt{(\sigma_{xx} - \sigma_{yy})^2 - 4(\sigma_{xy})^2} \quad (1)$$

Où σ_{ij} est le tenseur de contrainte et a_{E2} , b_{E2} , c_{E2} correspondent aux potentiels de déformation. Les valeurs de a_{E2} proviennent de la littérature et varient entre $-2,4\text{cm}^{-1}/\text{GPa}$ à $-2,8\text{cm}^{-1}/\text{GPa}$ [15-18]. Cette disparité est directement liée à la nature du GaN (type de substrat, technique de croissance, densité de défauts structuraux...) sur lequel ont été effectuées les mesures expérimentales du module d'élasticité. Notre choix s'est finalement porté sur une constante a_{E2} égale à $-2,4\text{cm}^{-1}/\text{GPa}$, et ceci, en raison de la concordance de cette valeur avec nos données expérimentales.

Récemment, la composante de cisaillement c_{E2} a été estimée inférieure à $0,3\text{cm}^{-1}/\text{GPa}$ [19]. Par conséquent, celle-ci sera négligée dans la suite de notre étude. De plus, en partant de l'hypothèse que l'épaisseur h_{GaN} des micropiliers de GaN est plus petite que leur rayon R_1 , la composante de contrainte suivant l'axe z peut être également négligée $\sigma_{zz}=0$ (Figure III.11).

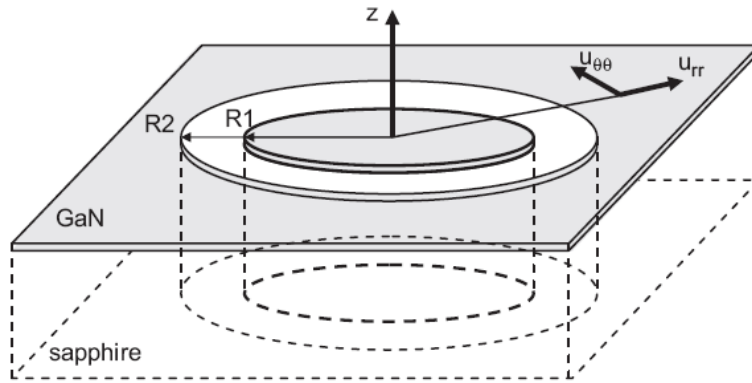


Figure III.11: Schéma illustrant la géométrie des micro-piliers GaN en coordonnées polaires (U_{rr} , $U_{\theta\theta}$)

La géométrie cylindrique des structures nous permet de simplifier ces calculs et de remplacer en coordonnées polaires (σ_{xx} , σ_{yy}) par (σ_{rr} , $\sigma_{\theta\theta}$). Ainsi, l'expression (1) précédente se réduit à :

$$\Delta v_{E2} = a_{E2}(\sigma_{rr} + \sigma_{\theta\theta}) \quad (2)$$

Où σ_{rr} et $\sigma_{\theta\theta}$ sont les composantes radiale et tangentielle de la contrainte biaxiale dans le plan parallèle à la surface de l'échantillon. Le décalage en fréquence $\Delta\nu_{E_2}$ est déterminé par la différence fréquentielle des phonons E_2 dans un matériau contraint et totalement relaxé :

$$\Delta\nu_{E_2} = \nu_{E_2}(r, \theta) - \nu_{E_2}^0$$

Où (r, θ) est la position de la mesure sur le micropilier et $\nu_{E_2}^0$ est la fréquence de référence du mode E_2 dans un matériau non contraint.

En vue d'obtenir $\nu_{E_2}^0$, nous avons fabriqué sur ce même échantillon une structure suspendue de dimension $(5 \times 15 \mu\text{m}^2)$ de référence en contrainte. Pour se faire, cette structure a été réalisée sur un bord clivé de l'échantillon, et puis libérée du reste du substrat Al_2O_3 au moyen d'une gravure FIB (Figure III.12). Les mesures Raman effectuées sur cette même structure, ont permis de relever une valeur $\nu_{E_2}^0$ de $567,2 \text{cm}^{-1}$. Le déplacement Raman le long des microstructures GaN est présenté sur la Figure III.13. Comme nous pouvons l'observer sur la Figure III.14, la valeur de la contrainte résiduelle au centre de ces structures diminue au fur à mesure que le diamètre de la structure diminue, jusqu'à « totalement » se relaxer pour des piliers sub-micronique (limite de la mesure en micro-Raman).

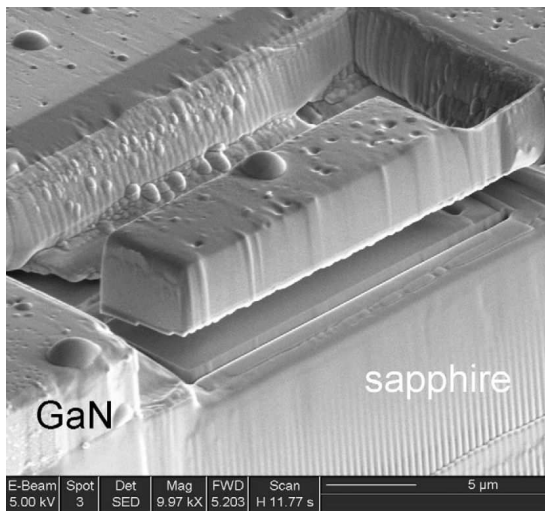


Figure III.12: Image MEB d'une structure suspendue fabriqué par gravure FIB.

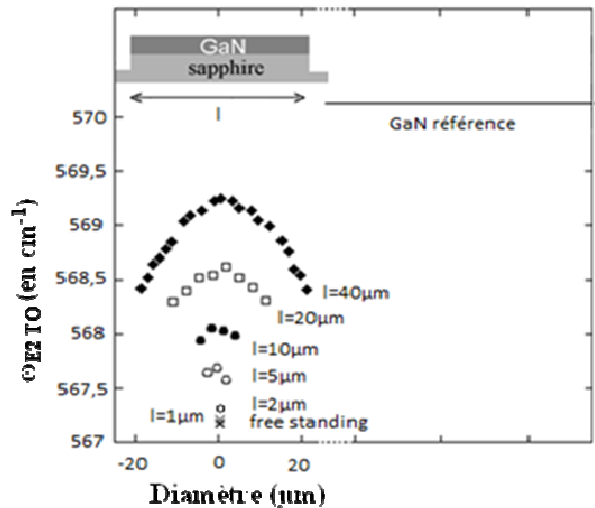


Figure III.13: Evolution du déplacement Raman du mode E_2 (TO) (en cm^{-1}) en fonction du diamètre du micro-pilier

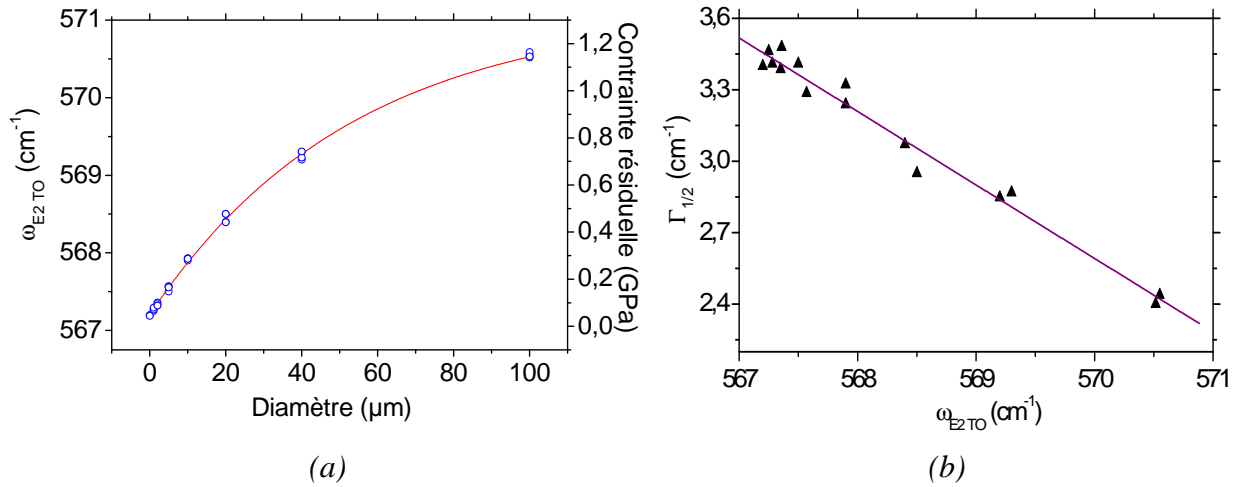


Figure III.14: Evolution du déplacement Raman du mode E_2 (TO) (en cm^{-1}) en fonction du diamètre du micropilier (a), (la sonde étant fixée au centre de ce dernier), associé à l'évolution de la largeur à mi-hauteur du mode E_2 en fonction du déplacement Raman (b).

Le décalage en fréquence $\Delta\nu_{E_2}$ entre les petites ($1\mu m$) et les grosses ($40\mu m$) structures est estimé à $2,85cm^{-1}$, ce qui correspond d'après la relation (2) à une contrainte biaxiale de $1,2GPa$. Cette contrainte provient de la différence d'expansion thermique entre la couche épitaxiée GaN et le substrat saphir après croissance, lors de la descente en température de l'échantillon à l'ambiante. Ce résultat a pu être vérifié en calculant la contrainte thermique $\sigma_{GaN,th}$ emmagasinée dans un film GaN suivant l'expression :

$$\sigma_{GaN,th} = \frac{E_{GaN}}{1-\nu_{GaN}} (\alpha_{GaN} - \alpha_{Saph}) \Delta T$$

Où ΔT est la différence entre la température de dépôt $1000^\circ C$ et la température à l'ambiante $25^\circ C$. Les constantes α_{GaN} et α_{Saph} correspondent aux coefficients d'expansion thermique du GaN : $5 \times 10^{-6} K^{-1}$ et du Saphir : $8 \times 10^{-6} K^{-1}$. Ainsi, nous avons pu estimer la contrainte thermique en compression à $1,1GPa$.

En raison de la taille du faisceau laser ($1\mu m$), seuls les piliers de diamètre supérieur à $10\mu m$ ont permis d'obtenir un profil plus ou moins précis de la contrainte. Celle-ci présente une évolution parabolique en fonction du rayon dont le maximum est situé au centre de la structure. Une modélisation assez fine de cette dernière a pu être réalisée en utilisant le formalisme d'élasticité de Winkler. D'après l'approche proposée par Peng *et. al* [20], le champ de déformation radial $u(r)$ à l'intérieur des diodes peut être obtenu en résolvant l'équation différentielle suivante :

$$\frac{\partial^2 u(r)}{\partial^2 r} + \frac{1}{r} \frac{\partial u}{\partial r} - \left(\frac{1}{r^2} + \frac{1}{r_0^2} \right) u(r) = 0 \quad (1)$$

Où r_0 est un paramètre déterminé par la géométrie et les propriétés mécaniques du système tel que défini par :

$$\frac{1}{r_0} = \sqrt{\frac{E_{saph}(1-\nu_{GaN}^2)}{2(1+\nu_{saph})E_{GaN}h_{GaN}H}} \quad (2)$$

Les paramètres utilisés dans l'équation ci-dessus, correspondent respectivement, au module de Young ($E_{saph/GaN}$), au coefficient de Poisson ($\nu_{saph/GaN}$), à l'épaisseur du film GaN (h_{GaN}) et à l'étendue de la déformation de cisaillement dans le substrat saphir (H). Les composantes du champ de contrainte sont données par :

$$\sigma_{rr}(r) = \sigma_0 + \frac{E_{GaN}}{(1-\nu_{GaN}^2)} \left[\frac{\partial u(r)}{\partial r} + \nu_{GaN} \frac{u(r)}{r} \right] \quad (3)$$

$$\sigma_{\theta\theta}(r) = \sigma_0 + \frac{E_{GaN}}{(1-\nu_{GaN}^2)} \left[\frac{u(r)}{r} + \nu_{GaN} \frac{\partial u(r)}{\partial r} \right] \quad (4)$$

Les conditions aux limites $u(r=0)=0$ et $\sigma_{rr}(r=R_1)=0$ sont utilisées ici pour résoudre ce système d'équation (1)-(5). Cela permet de montrer, qu'une solution du champ de déformation $u(r)$ possible est donnée par :

$$u(r) = CR \frac{(1-\nu^2)\sigma_0}{E_{0x}} I_1\left(\frac{r}{r_0}\right)$$

Où I_1 est la fonction de Bessel du second ordre, σ_0 est la contrainte au centre du pilier ($R=0$) et C est une constante définie par :

$$C = \frac{-1}{\left[\frac{R}{r_0 I_0\left(\frac{R}{r_0}\right)} + (\nu-1) I_1\left(\frac{R}{r_0}\right) \right]}$$

Par conséquent, les composantes radiale et tangentielle du champ de contraintes seront données par les fonctions suivantes :

$$\sigma_{rr}(r) = \sigma_0 \left(1 + CR \left[\frac{1}{r_0 I_0\left(\frac{r}{r_0}\right)} + (\nu - 1) \frac{I_1\left(\frac{r}{r_0}\right)}{r} \right] \right) \text{ et } \sigma_{\theta\theta}(r) = \sigma_0 \left(1 + CR \left[\frac{\nu}{r_0 I_0\left(\frac{r}{r_0}\right)} + (1 - \nu) \frac{I_1\left(\frac{r}{r_0}\right)}{r} \right] \right)$$

Ces deux expressions sont utilisées pour fitter la contrainte dans les micro-piliers.

3.2 Technologie des composants RTDs

Dans le cadre de cette approche plus conventionnelle, nous avons opté pour une technologie mixte alliant lithographies optique et électronique pour la définition de la zone active. Un procédé technologique a été développé pour mener à bien la fabrication de nano-diodes allant de 150nm à 2µm de diamètre. L'ensemble des séquences technologiques est détaillé dans les paragraphes suivant :

- Moule en PDMS
- Définition des marques d'alignements
- Définition des nano-diodes
- Définition des contacts ohmiques
- Aplanissement de la structure (structure planaire)
- Définition du pont soutenu

3.2.1 Moule en PDMS

L'étalement des résines sur les échantillons de petites surface a pour effet d'engendrer des bourrelets sur les bords. Ceux-ci provoquent des problèmes d'alignement des niveaux de masquage. Cette difficulté a pu être surmontée après aplanissement de la surface de l'échantillon dans un moule de PDMS.

3.2.2 Définition des marques d'alignements

Cette étape consiste à déposer des motifs métalliques (Mo/Ni/Mo) sous forme de carrés (8µm de coté) lesquels servent de repères d'alignement au masqueur électronique et des motifs sous forme de croix (de 200µm) pour les marques d'alignement en photolithographie.

3.2.3 Définition des nano-diodes

3.2.3.1 Lithographie des nano-diodes

L'oxyde de silicium est utilisé comme masque diélectrique pour la gravure des diodes. Une épaisseur de 200nm est préalablement déposée par PECVD à 300°C. La définition des motifs est ensuite réalisée en utilisant une résine électronique (Znlof2020). Cette résine est choisie en raison de sa haute résolution (<10nm), ce qui permet de fabriquer aisément des motifs de taille sub-micrométrique. Une épaisseur suffisante de 500nm est déposée afin de s'assurer de la bonne tenue du masque de résine lors de l'étape de gravure du SiO₂. Les doses optimales d'écriture ont été déterminées au masqueur électronique en effectuant plusieurs tests de variations de doses (Figure III.15).

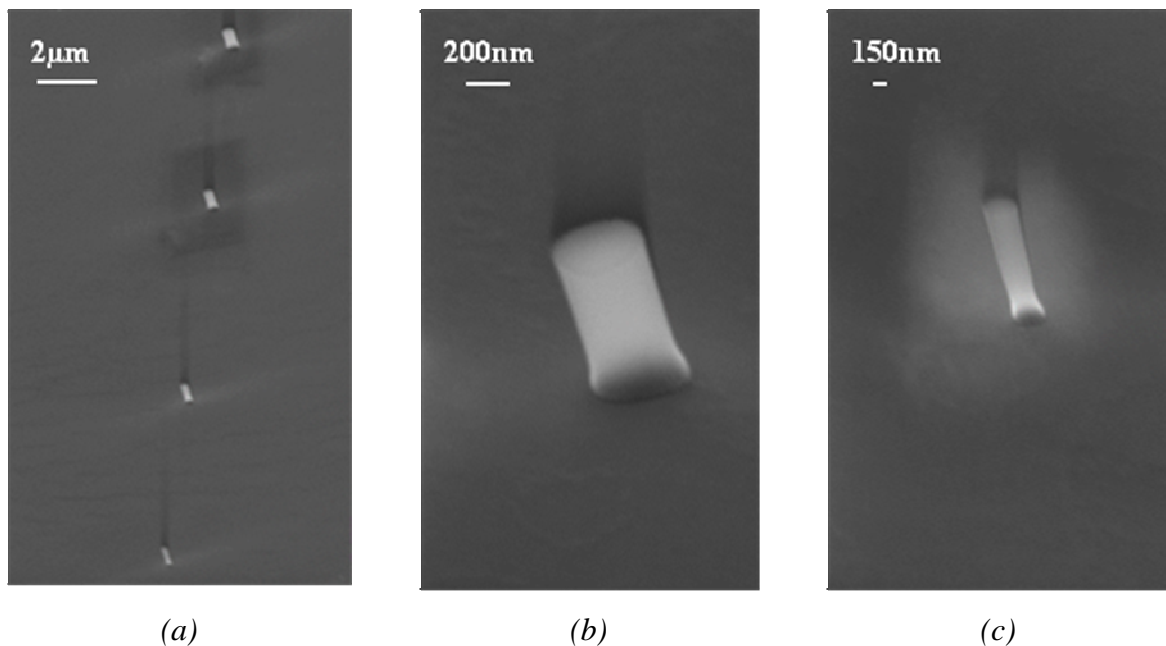


Figure III.15 : Doses optimales obtenues sur la résine Znlof2020 (négative) (a) Vue d'ensemble au MEB de motifs allant de 150nm à 500nm (b) Image MEB d'un motif de 500nm de diamètre (c) Image MEB d'un motif de 150nm de diamètre.

Les motifs de résine définis précédemment sont transférés sur le masque SiO₂ par gravure RIE à l'aide d'un plasma fluoré CF₄/CHF₃. La fin d'attaque est détectée in situ dans le bâti RIE par interférométrie à l'aide d'un faisceau laser. La propreté de la surface après gravure a pu être vérifiée en prenant une image de ces motifs au MEB (Figure III.16).

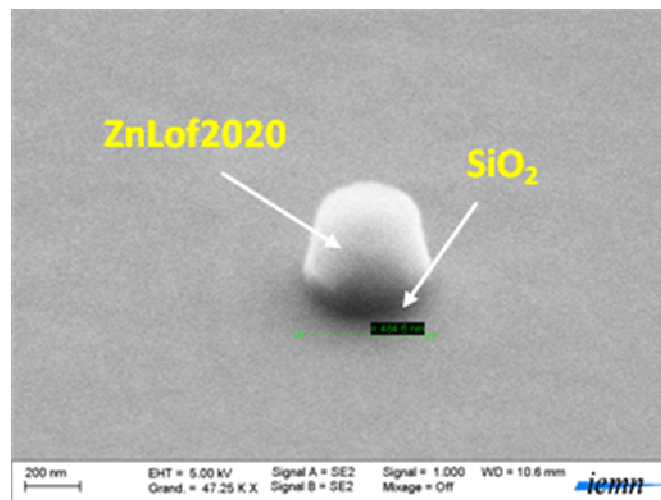


Figure III.16: Image MEB prise d'un motif de 500nm de diamètre après une gravure de 50nm du masque SiO₂.

3.2.3.2 Gravure de l'hétérostructure

3.2.3.2.1 Techniques de Gravure

Les deux principales techniques de gravure des matériaux nitrures à large bande interdite sont soit des gravures humides ou des gravures sèches. La gravure humide nécessite une attention particulière, notamment en ce qui concerne l'orientation de la couche et la rugosité de la surface. Dans ce cas, la gravure s'effectue suivant les plans réticulaires, assistée soit d'une excitation sous UV ou thermiquement, ce qui limite l'utilisation de cette technique. La gravure sèche est plutôt anisotrope en fonction des conditions plasmas. Il existe de nombreux types de gravure plasmas dont les plus utilisés sont : par bombardement ionique (IBE, RIE), ou assisté chimiquement (ICP, ECR, CAIBE...).

3.2.3.2.1.1 Gravure RIE

De nombreux procédés de gravure de matériaux nitrures (Al,Ga)N utilisant ce procédé sont détaillés dans la littérature. Les conditions de gravure RIE entraînent des dommages de surface souvent importants, diminuant par conséquent les performances électrique ou optique du composant réalisé. Diminuer l'énergie des ions ou augmenter l'activité chimique du plasma pour réduire les dommages conduit souvent à une diminution des vitesses de gravure ou

encore à des profils moins anisotropes. Les gaz chlorés constituent les chimies les plus couramment utilisées permettant de graver efficacement le matériau GaN. En effet, cette chimie est très efficace pour casser la liaison III-N et facilite la désorption des éléments gravés.

3.2.3.2.1.2 Gravure ICP-RIE

Les plasmas ICP-RIE ont permis d'améliorer les caractéristiques de gravure des matériaux III-N comparées aux réacteurs RIE [21-22]. Dans ces plasmas, la densité est entre 2 à 4 fois supérieure à celle d'un plasma RIE, améliorant ainsi l'efficacité pour briser les liaisons III-N et désorber les produits de gravure. De plus, puisque l'énergie et la densité ionique sont découplées, les dommages liés au plasma sont plus facilement contrôlable. On peut trouver dans la littérature une multitude de techniques de gravure du GaN. La chimie usuellement utilisée est une chimie chlorée de type Cl_2/Ar , $\text{Cl}_2/\text{H}_2/\text{Ar}$ et $\text{Cl}_2/\text{CH}_4/\text{Ar}$ [23-24]. Les motifs gravés sont anisotropes et la surface reste stœchiométrique dans une large gamme de conditions de gravure et peu rugueuse. La Figure III.17 montre un exemple de test réalisé.

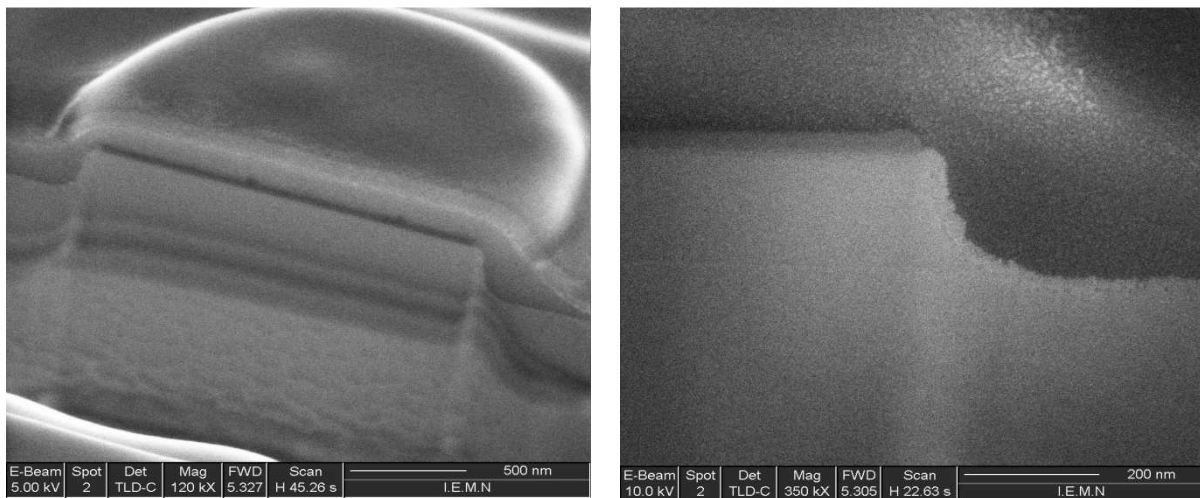


Figure III.17: Vue en coupe au MEB d'une structure double-barrières gravée par ICP-RIE avec une chimie chlorée de type Cl_2/Ar .

3.2.3.2.2 Définition des mésas par gravure ICP-RIE

La gravure anisotropique de l'hétérostructure (diode) est réalisée dans un bâti ICP-RIE au moyen d'une chimie chlorée Cl_2/Ar . La vitesse de gravure est été déterminée au préalable grâce à des motifs tests, en faisant varier la puissance ICP et en maintenant les autres paramètres constants : la puissance RIE du bâti à 50W, la pression à 5mT, les débits des gaz à 10/10sccm. Les profondeurs de gravure ont été mesurées au profilomètre, ce qui nous a permis de tracer la vitesse de gravure en fonction de la puissance ICP du bâti (Figure III.18).

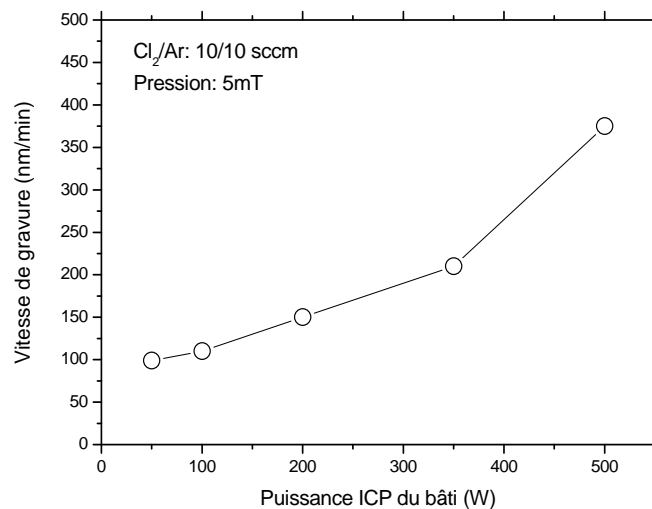


Figure III.18 : Vitesse de gravure du GaN en fonction de la puissance ICP du bâti.

Durant cette attaque plasma, les espèces Cl ont pour rôle d'exercer une réaction chimique sur le nitrure de gallium et former une espèce extrêmement volatile, tandis que les espèces Ar^+ d'apporter un bombardement ionique destiné à réduire la rugosité de la surface de l'échantillon [25]. Après gravure de la zone active, le masque SiO_2 est retiré au moyen d'une gravure humide dans un bain d'acide fluoridrique HF dilué à 50% (Figure III.19). Nous pouvons observer sur ces images MEB que les flancs sont relativement droits et la surface peu rugueuse ($25\text{nm} < \text{RMS} < 75\text{nm}$). En effet, la verticalité des flancs est fonction de la puissance RIE, laquelle a moins d'impact avec l'épaisseur de la couche à graver.

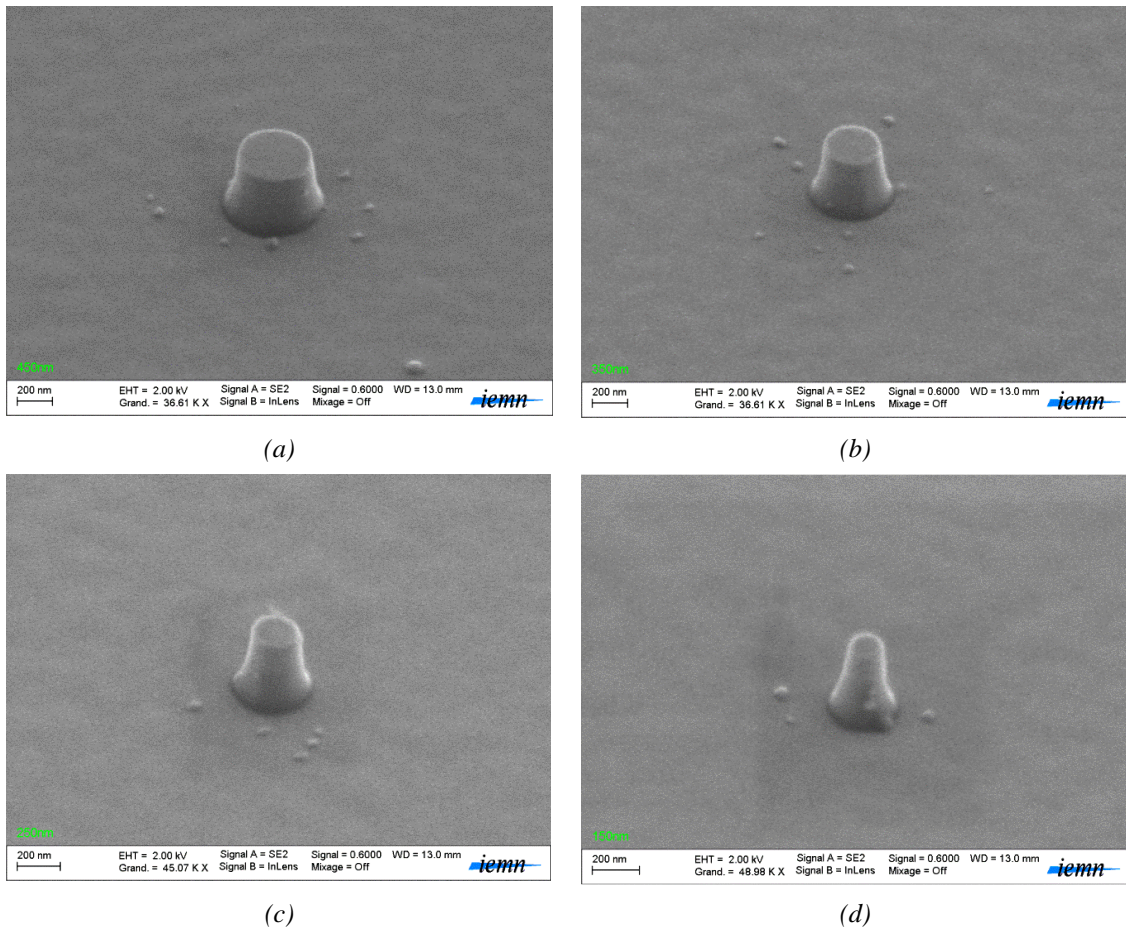


Figure III.19: Images MEB prise après gravure ICP-RIE de diodes RTDs avec des diamètres à la base de (a) 450nm (b) 350 (c) 250nm (d) 150nm.

3.2.3.2.3 Définition des mésas par gravure FIB

Un autre procédé a été utilisé pour réaliser les nano-micro-mésas des RTDs lorsque le substrat d'étude est trop petit (<qqz mm). Ce dernier présente l'avantage d'être rapide et peu coûteux. La nano-fabrication par gravure FIB a été mise en œuvre au moyen d'un bâti commercialisé par la société FEI. Celui-ci est équipé d'un faisceau d'ions focalisés et d'un microscope électronique à balayage [26].

Des espèces ioniques Ga^+ sont utilisées pour graver en profondeur le GaN et les couches barrières $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$. Une couche sacrificielle de titane de 100nm d'épaisseur est préalablement déposée *ex-situ* par pulvérisation magnétron afin de protéger le reste de la surface de l'échantillon. Durant la gravure, la dimension et la position des mésas sont contrôlées par le microscope électronique à balayage. Nous avons pu réaliser avec succès des

diodes RTDs de taille micrométrique et sub-micrométrique jusqu'à 100nm de diamètre (Figure III.20).

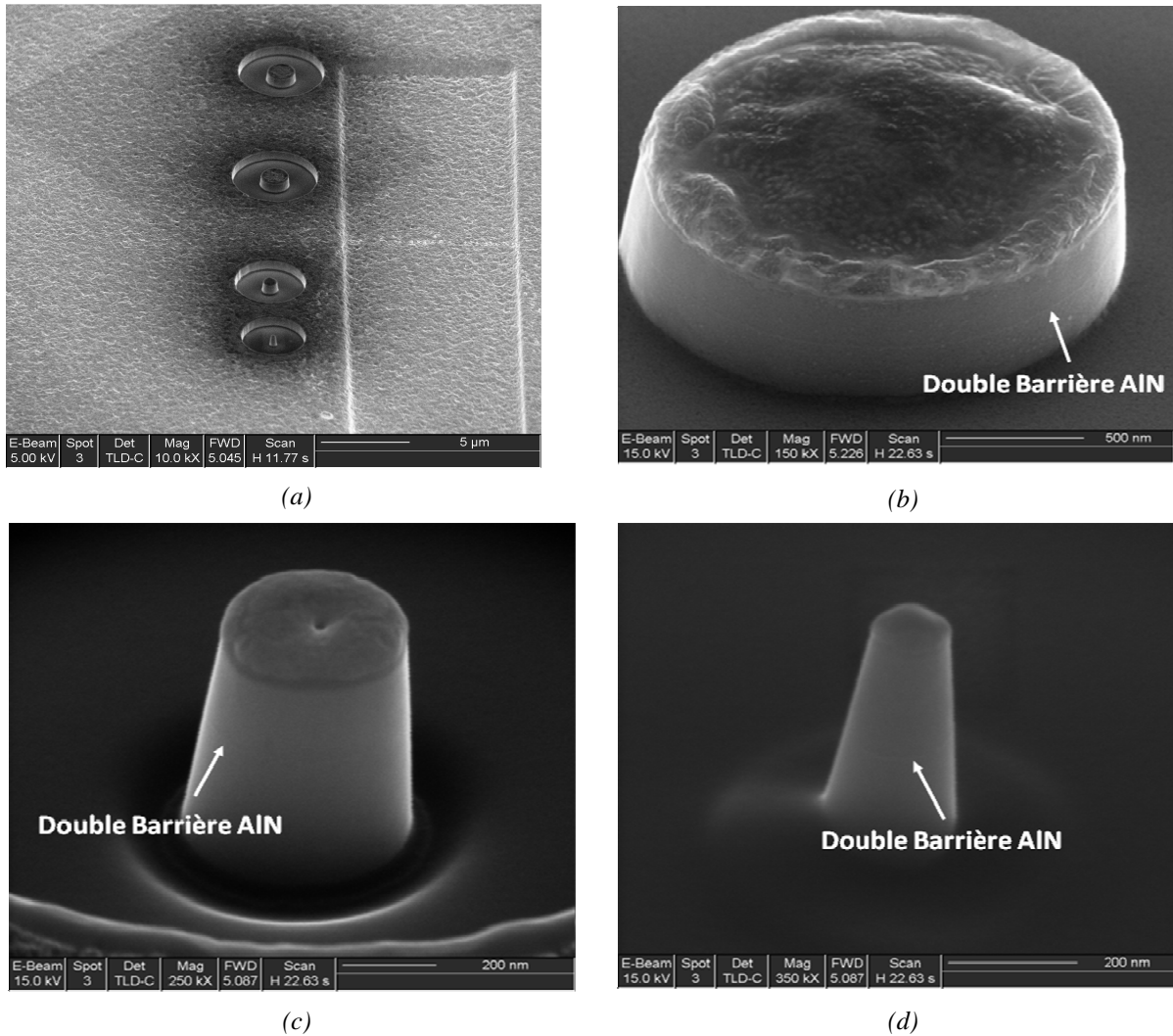


Figure III.20 : (a) Image MEB d'une vue d'ensemble de diodes RTDs avec des diamètres à la base compris entre 150nm et 2μm; Zoom au MEB sur une diode RTD de diamètre à la base (b) 2μm (c) 500nm (d) 150nm

3.2.4 Définition des contacts ohmiques du *bottom*

3.2.4.1 Choix de la métallisation

La résistance des contacts ohmique doit être la plus faible possible car elle permet de maximiser la densité de courant et de favoriser une amélioration globale des performances électriques des RTDs. La rugosité de surface des contacts doit être, elle aussi, la plus lisse

possible afin de s'affranchir des problèmes d'alignement durant les étapes de lithographie. Le contact ohmique doit être en mesure de tenir dans le temps avec une très bonne reproductibilité, et surtout ne pas présenter de caractère friable lors de la pause des pointes.

Théoriquement, un contact ohmique sur un semiconducteur dopé N est réalisable lorsque le travail de sortie du métal Φ_m est inférieur à l'affinité électronique du semiconducteur χ . Malheureusement, il est difficile de trouver dans la nature des métaux avec un faible travail de sortie. Le **Tableau III.1** présente les travaux de sorties de quelques métaux. A priori, notre choix devrait se porter sur des métaux tels que le Lithium (Li), le Néodyme (Nd), voir le Tantale (Ta) ou le Plomb (Pb). Cependant, le Néodyme est une terre rare et par conséquent chère. De plus, le Lithium réagit violemment avec l'air et le Plomb est toxique. Enfin, le Tantale ne se dépose que par pulvérisation cathodique, ce qui n'est pas adapté à la technique du lift-off.

Métal	Li	Nd	Ta	Pb	Al	Ti	Au	Pd	Ni	Pt
Φ_m (eV)	2,9	3,2	4,25	4,25	4,28	4,33	5,1	5,12	5,15	5,65

Tableau III.1 : Travail de sortie des métaux.

De nombreux schémas métalliques ont été testés dans la littérature dans le but d'améliorer le caractère ohmique des contacts. Parmi toutes ces études, la métallisation à base Ti/Al/Ni/Au est celle qui est actuellement utilisée en tant que schéma standard par de nombreux auteurs [27]. Ce contact est souvent fini par une couche en Or afin de le protéger contre l'oxydation à l'air, et de lui assurer une bonne conductivité électrique avec les plots d'épaissement également en Or. Une barrière métallique entre l'Or et l'Al est déposée au préalable en vue d'éviter la formation d'un alliage friable après recuit. Les métaux réfractaires comme le Ni sont souvent choisis pour jouer ce rôle de couche barrière en raison de leur température de fusion très élevée [28].

Le rapport d'épaisseurs Au/Al présente également un impact important sur la rugosité et la définition des contacts ohmiques. D'après l'étude menée par Hilsenbeck et al, ce rapport a été établi autour de 0,55 [29]. Ce résultat est en accord avec le nôtre puisque l'on obtient un rapport égal à 0,5.

3.2.4.2 Optimisation des contacts ohmiques

En pratique, un bon contact ohmique se caractérise par une résistance de contact au moins égale ou inférieure à $1\Omega/\text{mm}$ nécessaire pour obtenir de bonnes performances électriques des composants. Les caractéristiques des contacts ohmiques peuvent être améliorées au moyen de plusieurs approches : en réoptimisant les épaisseurs du bicouche Ti/Al, en modifiant les conditions de recuit, ou en remplaçant le Ni par un métal plus réfractaire tel que le Mo, Pt ou Ta. Le schéma métallique standard Ti/Al/Ni/Au sur (Al,Ga)N a fait l'objet de nombreuses études et optimisations au sein de notre équipe : les épaisseurs ont été ramenées de (150/2200/400/500Å) à (120/2000/400/1000Å) et la rampe en montée de la température revue à $45^\circ\text{C}/\text{s}$ au lieu de $10^\circ\text{C}/\text{s}$ [30].

Notre contribution a porté sur la ré-optimisation de la température de recuit des contacts ohmique entre 700°C et 900°C sur une hétérostructure à double barrière dont l'émetteur de GaN est dopée N^{++} . Les meilleurs résultats ont été obtenus pour une température de 750°C pendant 30s sous atmosphère azote avec une montée en température au préalable de 10s entre 450°C et 750°C . La Figure III.21.a montre qu'un point d'inflexion subsiste pour des températures de recuits inférieures ou égales à 700°C .

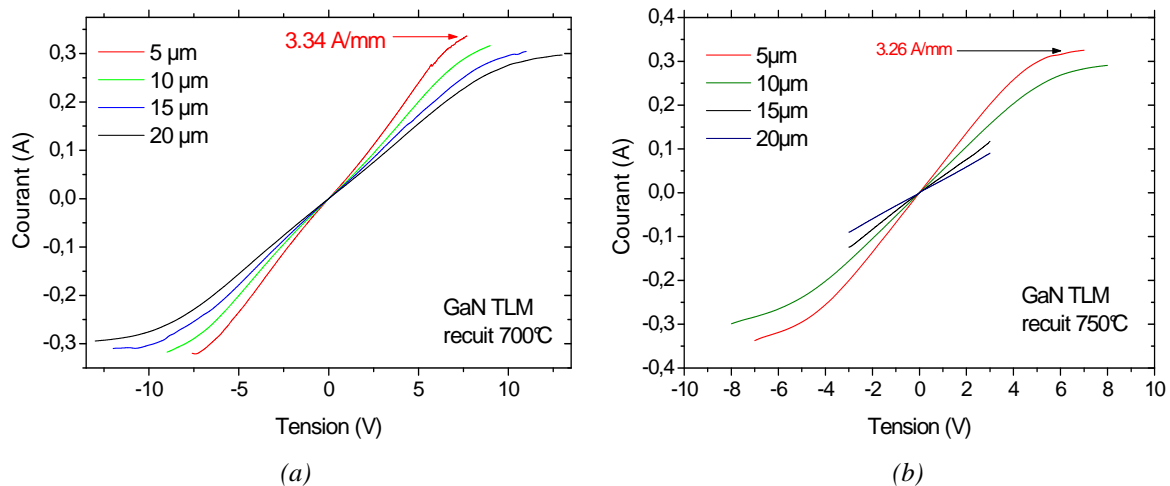


Figure III.21 : Caractéristique I(V) des échelles TLM en fonction de la température de recuit (a) 700°C (b) 750°C .

Les mesures TLM (Figure III.21.b) ont permis de déterminer une résistance de contact inférieure à $0.1\Omega\cdot\text{mm}$ à 750°C associée à une résistance de contact spécifiques ρ_c de $1\times 10^{-6}\Omega\cdot\text{cm}^2$ et une résistance carré $R_{\square}=85\Omega$. Les mesures de Hall présentent une résistance carrée R_{\square} de $30-75\Omega$ et une mobilité μ_n de 5 à $32\text{cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$ pour une concentration d'électrons $n=0,98-4\times 10^{20}\text{cm}^{-3}$. Cette variation des propriétés de transport est due à l'inhomogénéité de la plaque. La couche N^{++} a permis d'exhiber des courants à saturation proche du claquage de $3.26\text{A}/\text{mm}$. La Figure III.22 montre une image MEB des échelles TLM avant et après claquage thermique.

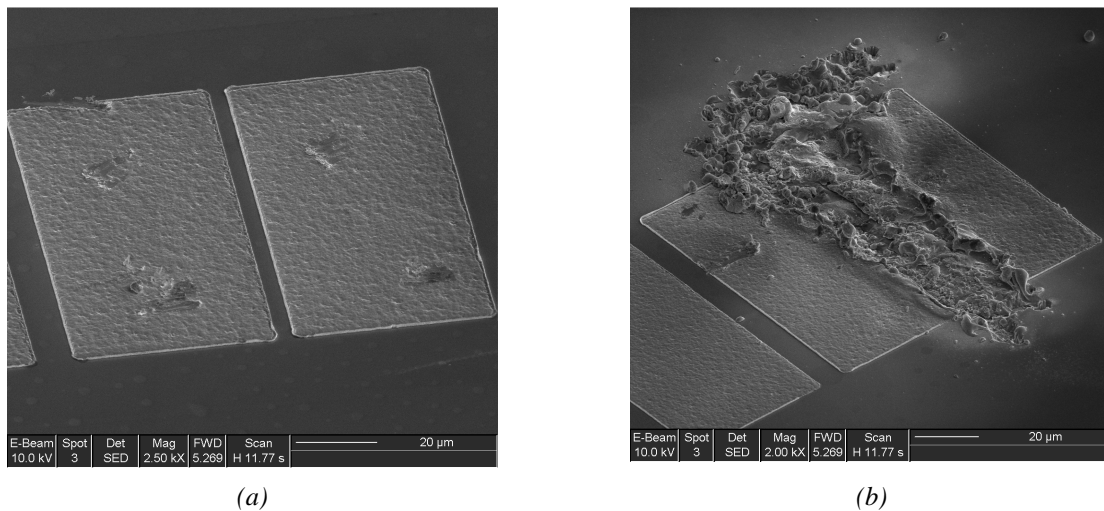


Figure III.22 : Image MEB d'une échelle TLM (a) avant et (b) après claquage thermique.

3.2.4.3 Lithographie des contacts ohmiques du *bottom*

La définition des contacts ohmiques du *bottom* (sous forme de U) est réalisée par lithographie optique au moyen de la résine positive AZ1518. Le profil en casquette est obtenu par un traitement de surface dans une solution basique MIF726 (25s). Une épaisseur de $1,2\mu\text{m}$ est étalée en couche mince à la surface de l'échantillon. Les solvants sont évaporés au moyen d'un recuit thermique à 120°C sur plaque chauffante. L'exposition du masque est effectuée sous rayonnement UV à 360nm de longueur d'onde. Les motifs insolés (à $12\text{W}/\text{cm}^2$) sont développés en plongeant la résine dans une solution révélatrice AZ400.

L'étape de métallisation est précédée d'une désoxydation dans de l'acide chloridrique HCl (90s), et d'une gravure IBE à l'Argon ($200\text{eV}/90\text{s}$). Cette gravure a pour but de retirer les

dernières traces de résine. Le multicouche Ti/Al/Ni/Au est ensuite déposé par évaporation au canon à électrons. Le lift-off de la métallisation est effectué dans un bain de Remover PG chauffé à 70°C. Une agitation magnétique est utilisée en sus afin d'accélérer l'opération et d'homogénéiser la température dans la solution. Le contact est recuit à 750°C pendant 30s sous atmosphère azote. La **Figure III.23** présente des images prises au MEB des contacts ohmiques en forme de U (du *bottom*) et la nano-structure méssa de la diode.

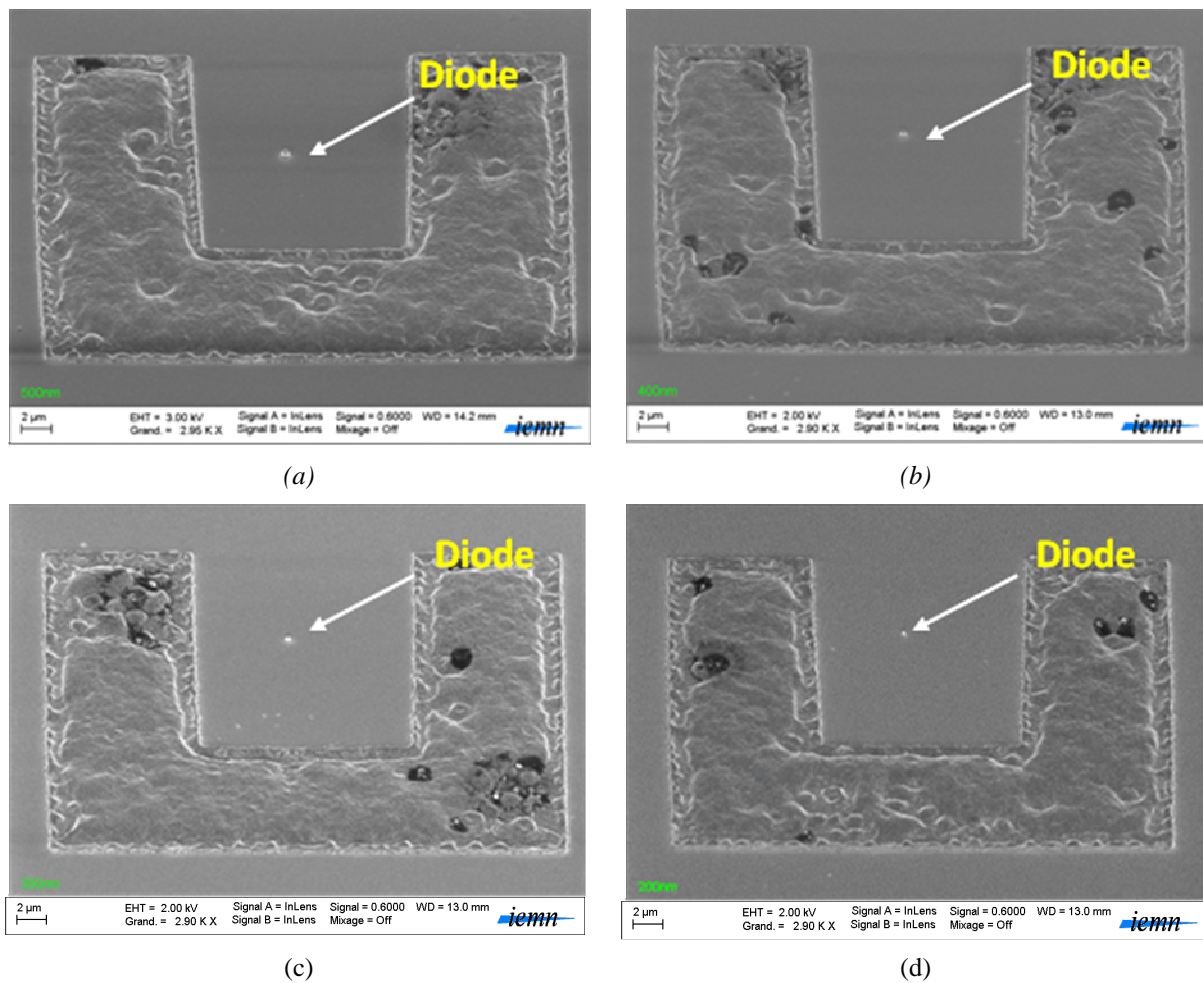


Figure III.23 : Images MEB du contact ohmique du *bottom* sous forme de U entourant des diodes de diamètre (a) 500nm (b) 400nm (c) 300nm (d) 200nm.

3.2.5 Aplanissement de la structure

L'Hydrogène Silses-Quioxane (HSQ) est une résine négative qui sous l'action combinée d'un recuit thermique et d'un plasma O_2 , se densifie et forme un diélectrique de type Si_xO_y .

Cette étape a une double fonction : aplanir la structure et passiver en même temps le composant. L'aplanissement est une étape critique qui permet de récupérer le contact du dessus de la diode et de former ainsi un pont soutenu par ce diélectrique. En vue de protéger les contacts ohmiques du *bottom* lors de l'aplanissement de la structure, des plots d'épaissement sont déposés par (Ti/Au) par pulvérisation cathodique.

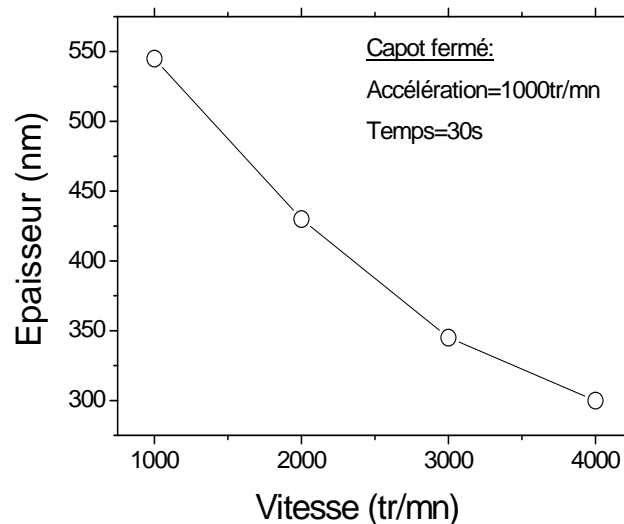


Figure III.24: Mesures au réflectomètre de l'épaisseur de la résine HSQ en fonction de la vitesse de la tournette pour une accélération donnée.

L'étape d'aplanissement consiste à ensevelir les diodes sous une matrice d'HSQ de 550nm d'épaisseur dont l'épaisseur est supérieure de celle du méssa de la diode de plus de 200nm (Figure III.24). L'aplanissement des composants est obtenu par gravure plasma (RIE) de la HSQ. La fin d'attaque est détectée par interférométrie laser au dessus des mesas de calibration se situant au même niveau que les contacts du dessus des diodes (Figure III.25). L'étape de planarisation est le plus souvent précédée par l'étape de transformation de la HSQ en diélectrique Si_xO_y afin de réduire la rugosité de cette dernière au cours de l'étape de gravure RIE.

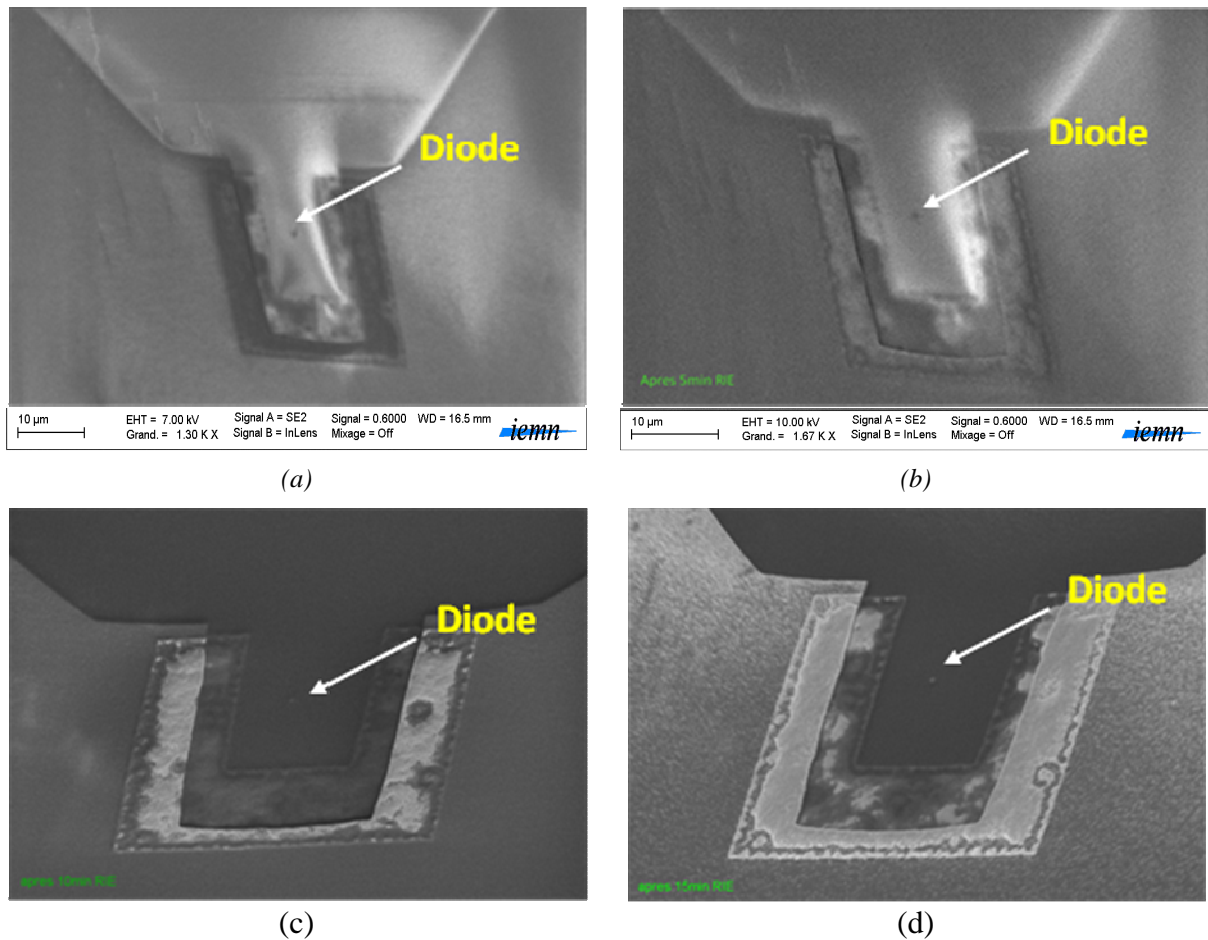


Figure III.25: Images MEB d'une diode RTD de diamètre 500nm prises en fonction du temps de gravure RIE de la HSQ (a) 0min (b) 5min (c) 10min (d) 15min.

3.2.6 Définition du pont soutenu «contact ohmique du top»

Les différents tests destinés à vérifier la tenue en température de la HSQ (à 750°C) nous ont permis de s'affranchir de l'étape de lithographie électronique du contact *top*. Ainsi, la définition du pont soutenu permettant de récupérer l'électrode du dessus est réalisée au moyen d'une lithographie optique (AZ1518) et suivie d'un dépôt de contact ohmique (Ti/Al/Ni/Au) par évaporation au canon à électrons (Figure III.26). Le contact ohmique du *bottom* est ouvert grâce à un masque en résine optique (AZ1512) et à une gravure plasma RIE du diélectrique Si_xO_y formé par la HSQ.

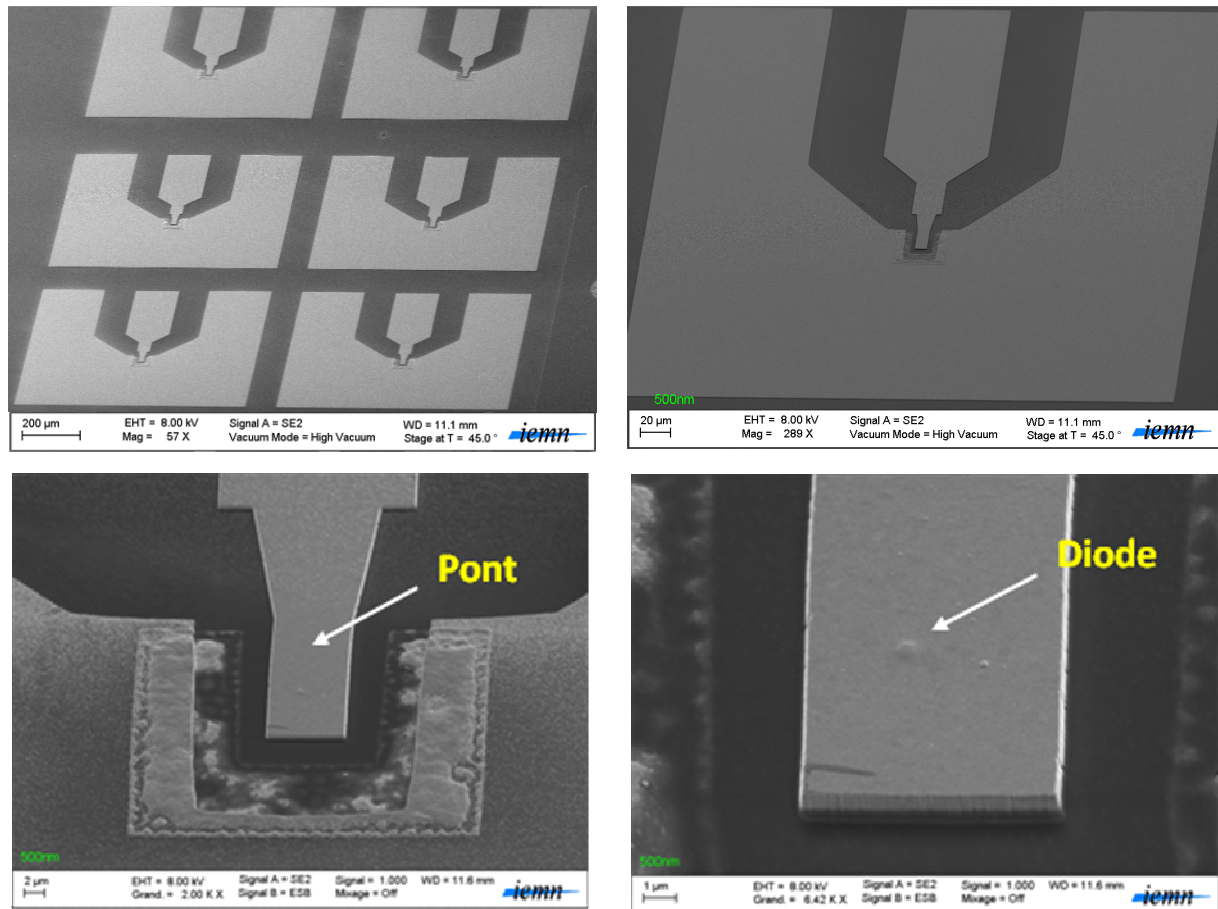


Figure III.26: Images prises au MEB des composants finalisés.

3.3 Caractérisation électrique des RTDs

3.3.1 Structure des échantillons étudiés

Les échantillons étudiés ont tous été synthétisés au CEA-Grenoble par épitaxie par jet moléculaire (MBE) assistée par une source de plasma d'azote. La structure double-barrières $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ a été épitaxiée sur une couche tampon GaN de $10\mu\text{m}$, déposée par MOVPE sur un substrat en Saphir. Sur cette couche tampon, on fait tout d'abord croître une couche n-GaN de dopage $5 \times 10^{19}\text{cm}^{-3}$ afin d'améliorer le contact ohmique du *bottom* (Figure III.27). En vue d'éviter la diffusion de ses dopants de type N dans la zone active, un espaceur de GaN n.i.d a été déposé de part et d'autre des couches barrières $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$. Par dessus cette zone active, est synthétisée une autre couche n-GaN afin de réduire la résistance d'accès du contact

ohmique du *top*. La densité de dislocations sur ces échantillons est estimée à $5 \times 10^8 \text{cm}^{-2}$. L'épaisseur de la barrière est maintenue en dessous de l'épaisseur critique de l'AlN ($< 2\text{-}3 \text{nm}$) afin de réduire les défauts de la structure [31-32]. La séquence de dépôt de la zone active est donnée pour chacun de ces échantillons dans le **Tableau III.2**.



Figure III.27: Schéma illustratif d'une structure double-barrière symétrique typique.

Echantillon E1349	Barrière $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$	Puits GaN	Espaceur GaN	n-GaN (<i>bottom</i>)	n-GaN (<i>top</i>)
Dopage (cm^{-3})	n.i.d	n.i.d	n.i.d	5×10^{19}	5×10^{19}
Epaisseur (nm)	1	1,5	5	570	250
Taux d'Al (%)	25	0	0	0	0
Echantillon E1350	Barrière $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$	Puits GaN	Espaceur GaN	n-GaN (<i>bottom</i>)	n-GaN (<i>top</i>)
Dopage (cm^{-3})	n.i.d	n.i.d	n.i.d	5×10^{19}	5×10^{19}
Epaisseur (nm)	1	1,5	5	570	250
Taux d'Al (%)	50	0	0	0	0
Echantillon E1351	Barrière $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$	Puits GaN	Espaceur GaN	n-GaN (<i>bottom</i>)	n-GaN (<i>top</i>)
Dopage (cm^{-3})	n.i.d	n.i.d	n.i.d	5×10^{19}	5×10^{19}
Epaisseur (nm)	1	1,5	5	570	250
Taux d'Al (%)	75	0	0	0	0
Echantillon E1502	Barrière $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$	Puits GaN	Espaceur GaN	n-GaN (<i>bottom</i>)	n-GaN (<i>top</i>)
Dopage (cm^{-3})	n.i.d	n.i.d	n.i.d	5×10^{19}	5×10^{19}
Epaisseur (nm)	1	1	1	250	200
Taux d'Al (%)	100	0	0	0	0

Echantillon E1503	Barrière $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$	Puits GaN	Espaceur GaN	n-GaN (<i>bottom</i>)	n-GaN (<i>top</i>)
Dopage (cm^{-3})	n.i.d	n.i.d	n.i.d	5×10^{19}	5×10^{19}
Epaisseur (nm)	0,5	1	1	250	200
Taux d'Al (%)	100	0	0	0	0

Tableau III.2 : Séquence de dépôt des échantillons RTDs étudiés.

3.3.2 Caractérisation sous pointes RF

Les diodes fabriquées sur l'échantillon E1502 comportent un contact ohmique Ti/Al/Ni/Au à l'anode et à la cathode (de part et d'autre de la structure active). Des accès coplanaires ont été déposés sur ces composants afin de caractériser électriquement ces derniers sur une station cryogénique (de marque JANIS). Les mesures $J(V)$ faites à température ambiante ne nous ont pas permis d'observer une résistance différentielle négative (Figure III.28.a), et cela quelques soit la taille de la diode (entre 150nm à 500nm de diamètre). De plus, nous avons pu relever de nombreuses instabilités de courant sur ces caractéristiques électriques. Ces instabilités peuvent être attribuées aux pièges intrinsèques au matériau (défauts structuraux) mais aussi aux états d'interfaces qui empêchent les électrons de transiter par les niveaux du puits entre les barrières AlN.

Afin de vérifier cette hypothèse, nous avons poursuivi notre étude à basse température (77K) en vue de « geler » ces pièges c'est-à-dire les désactiver ou les vider partiellement voire totalement. Ainsi, nous avons pu enregistrer (Figure III.28.b) un pic résonant autour de 4V sur la diode de 200nm de diamètre. Cette résistance différentielle négative n'est cependant pas reproductible. En effet, celle-ci apparaît qu'une seule fois à "l'aller" lorsqu'on balaie la tension des valeurs négatives (-5V) vers les valeurs positives (+5V). En effectuant le balayage inverse, cette dernière disparaît au "retour" et n'apparaît plus pour les mesures consécutives suivantes. Ce comportement est en accord avec les résultats obtenus dans la littérature [33-34].

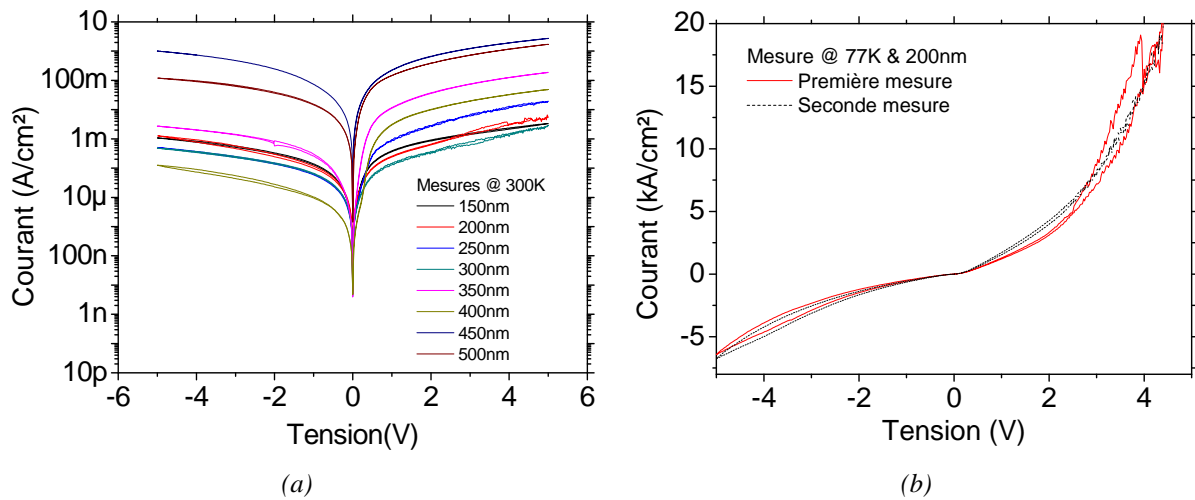


Figure III.28: (a) Caractéristiques $J(V)$ à $300K$ prises successivement sur des diodes de diamètres allant de $150nm$ à $500nm$. (b) Caractéristique $J(V)$ à $77K$ prises successivement sur une diode de diamètre $200nm$.

3.3.3 Caractérisation sous pointes FIB

Les caractéristiques électriques des diodes des échantillons E1349, E1350, E1351 ont pu être mesurées sous pointes *in-situ* dans le bâti du FIB. Ce dernier est composé de 6 bras micromanipulateur dont 2 sont utilisés via les contacts ohmiques du *bottom* et du *top* de la RTD (Figure III.29). Leur rayon de courbure est estimé à $50nm$, ce qui nous permet de caractériser aisément nos composants les plus petits ($250nm$). Le positionnement de ces pointes est effectué sous le contrôle du SEM donc sous bombardement électronique. Ce mode opératoire a bien évidemment une conséquence sur la mesure étant donné qu'il va exciter les pièges, voire les activer. Les mesures ont été réalisées à température ambiante et dans un environnement sous vide ($10^{-7}Torr$). Nous avons volontairement relié la pointe du dessous à la masse du bâti afin que le sens du courant soit fixé par le signe de la tension appliquée sur la pointe du contact du dessus (*top*).

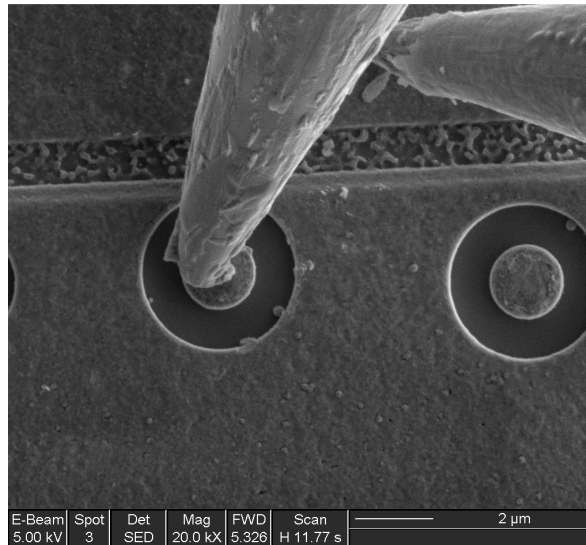


Figure III.29 : Image MEB prise pendant de la caractérisation d'une RTD sous micro-pointes au FIB.

Le software développé localement pour cette étude ne permettait pas d'entrevoir des balayages en hystérésis. En effectuant un balayage en tension de -3V à +3V, un pic de résonance apparaît seulement pour les diodes contenant un faible taux d'aluminium dans les barrières $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ (E1349) et dont le diamètre est inférieur à $5\mu\text{m}$ (Figure III.30). Ce comportement suggère l'existence de défauts profonds dans les barrières qui peuvent être réduits en diminuant leurs taux d'aluminium. Notons que, ce pic de résonance apparaît systématiquement au voisinage de la même tension autour de 2,5V. La NDR n'est reproductible qu'une seule fois de manière évidente et est suivie au cours des mesures successives d'instabilités de courant qui s'estompent mesure après mesure. Plus le diamètre de la diode RTD est petit et plus les instabilités du courant s'amointrissent.

Cette tendance semble conforter l'hypothèse d'une réduction drastique de la densité de pièges structuraux notamment avec la diminution de la taille de la diode. En d'autres termes, il existe statistiquement des cas favorables pour lesquels certaines diodes sont libres de dislocations traversantes avec l'approche utilisée. Le décalage de la tension pic sur les RTDs les plus petites pourrait s'expliquer par une distribution de la contrainte dans la zone active de la double barrière en comparaison avec le matériau en volume et des états de surface tout autour de la diode cylindrique.

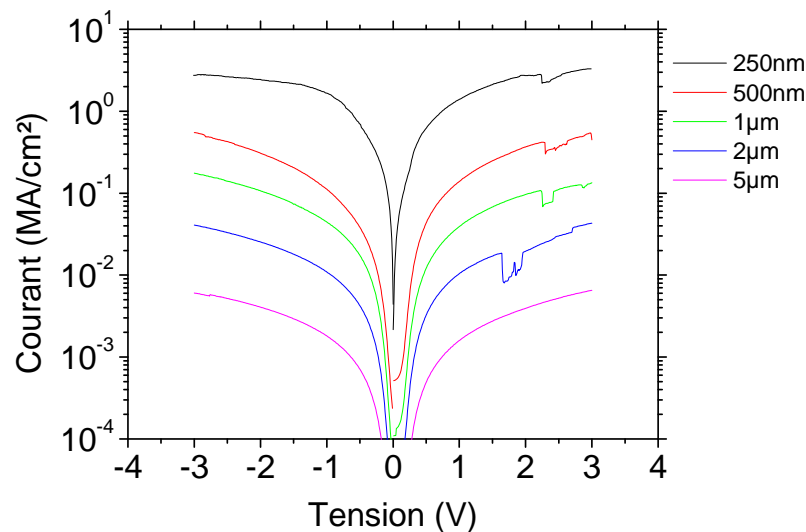


Figure III.30: Caractéristique $J(V)$ à 300K en fonction du diamètre des diodes de l'échantillon E1349.

La diminution de la taille des RTDs a également pour effet d'augmenter drastiquement la densité de courant J_{pic} . Ce comportement va à contre sens avec la physique. En effet, une réduction du diamètre du méssa doit forcément s'accompagner d'une diminution des courants de fuites à travers la zone active de la RTD et par conséquent, amener à des courants J_{pic} plus faibles. Plusieurs pistes peuvent être établies pour nous apporter un élément de réponse à cette incohérence, entre autre : l'allumage du SEM entre deux mesures, la variation de la contrainte en fonction de la taille des mésas, ou bien les mécanismes de conduction en surface à travers les défauts générés par la gravure au FIB.

3.3.4 Caractérisation sous pointes *nanoprobe*

3.3.4.1 Présentation du *nanoprobe*

Les progrès récents des nanotechnologies sont notamment fortement liés au développement instrumental des microscopes à champ proche. La caractérisation électrique des RTDs fabriquées sur l'échantillon E1503 a été réalisée au moyen d'un "*nanoprobe*" fonctionnant dans un environnement ultravide (10^{-10} mbar). Cet instrument est constitué de quatre têtes indépendantes de microscope à effet tunnel, dont chacune est montée individuellement sur un système piézo-électrique tridimensionnel (Figure III.31). Cet outil autorise le maniement simultané des 4 points STM sous le contrôle d'un microscope électronique à balayage

permettant ainsi, un positionnement très fin (qqs dizaines de nm) et une localisation rapide des mesas. La descente en température jusqu'à 120K (au niveau de l'échantillon) a été accomplie à l'aide d'un cryostat à flux d'azote, lequel est thermiquement relié par le dessous du porte échantillon via une tresse métallique en fils de cuivre [35].

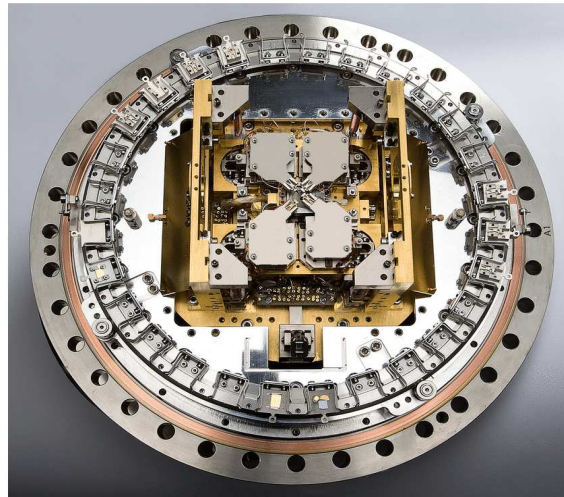


Figure III.31: Photographie du dispositif sur lequel sont montées les quatre têtes STM.

3.3.4.2 Choix de la pointe

Les pointes métalliques utilisées doivent être les plus effilées possibles. Nous avons opté pour une méthode de fabrication *ex situ* par attaque chimique dans le laboratoire. Cette méthode permet d'affiner l'extrémité d'un fil métallique par oxydoréduction en solution et d'obtenir des rayons de courbure à l'extrémité de l'ordre de quelques dizaines de nanomètres. Les pointes en tungstène sont très couramment utilisées en STM. Elles présentent l'avantage d'être particulièrement robustes et de résister à de fortes densités de courant. Notre choix s'est donc naturellement porté sur l'utilisation d'un fil métallique en tungstène de 150 μ m de diamètre. L'extrémité de ce fil est plongée dans un mélange de soude (NaOH) et de glycérol. L'attaque chimique est générée par pulses de tensions de 10 V appliqués entre la pointe et la solution. L'affinage dure environ 45 min.

3.3.4.3 Mode opératoire

La surface du *top* des diodes fabriquées sur l'échantillon E1503 n'est pas métallisée, seuls les contacts ohmiques du *bottom* sont déposés. La mise contact de la pointe avec la surface du *top* est établie en plusieurs étapes en vue de ne pas abîmer les nano-diodes et de s'assurer d'un réel contact mécanique pour éviter de la sorte des instabilités de contacts électriques (Figure III.32). Une première approche tunnel de la pointe est opérée sur le haut de la diode afin de se rapprocher au plus prêt de la surface. Une fois que le courant tunnel est établi, la boucle de contre-réaction en courant peut être enfin désactivée.

La pointe est ensuite manuellement mise en contact avec la surface du composant non-métallisé au *top* de la RTD grâce au système piézo-électrique. Une fois le système de mesure stabilisé, la source MEB est systématiquement éteinte tout au long des mesures ponctuelles et/ou successives. Le contact ohmique du *bottom* est directement connecté à la masse via le porte échantillon, le sens du courant est donc fixé par la tension appliquée sur cette pointe. Ainsi, pour des tensions positives, les électrons sont injectés du bas vers le haut de l'échantillon, et dans le sens contraire, pour des tensions négatives.

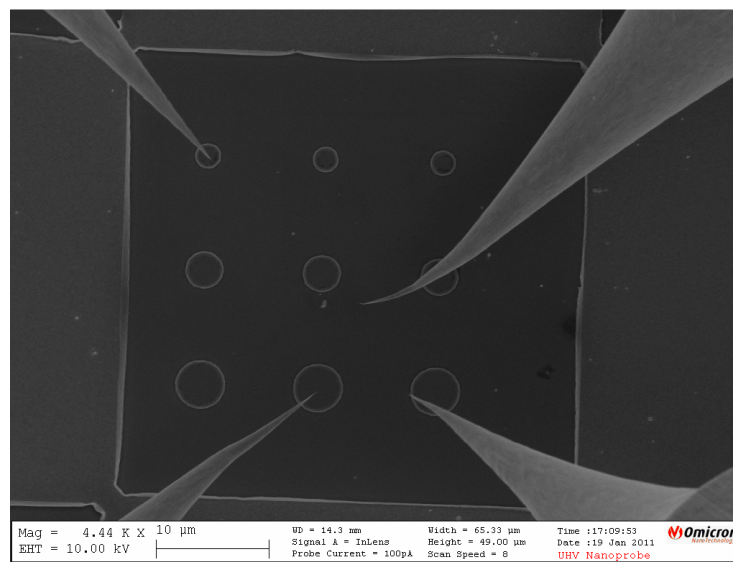


Figure III.32: Image MEB prise pendant la caractérisation d'une RTD sous nano-pointes au nanoprobe.

Le travail de sortie du tungstène est de 4,5eV. Par conséquent, sur du n-GaN, le comportement électrique de la pointe devrait être de type redresseur. Ce type de contact en

surface de l'échantillon a donc tendance à favoriser le passage du courant dans le sens direct. Par conséquent, nous nous attendons à ce que la NDR apparaisse uniquement pour des tensions positives. Ce comportement a pu être vérifié en effectuant une mesure courant-tension entre le fond du méssa non métallisé et le contact ohmique du *bottom*. La **Figure III.33** montre cette caractéristique en échelles linéaire et logarithmique.

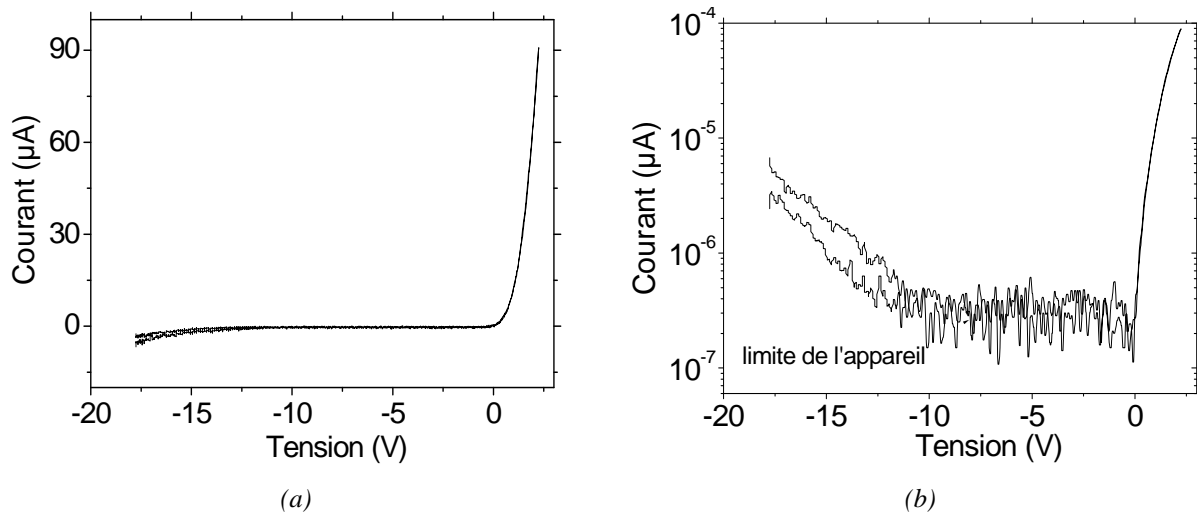


Figure III.33: Caractéristique $J(V)$ à 120K d'une nano-pointe STM contactée sur la surface n-GaN de l'échantillon.

3.3.4.4 Analyses et discussions

A température ambiante, les caractéristiques $J(V)$ des RTDs présentent de nombreuses instabilités de courant ne permettant pas d'observer avec netteté une NDR, contrairement à la température de 120K où un pic de résonance apparaît clairement pour les diodes présentant des diamètres inférieurs à $4\mu\text{m}$. En effectuant un balayage en tension pour des valeurs positives, en commençant à l'équilibre (0V), ce pic n'apparaît que lors de la première mesure et disparaît aussitôt pour les mesures successives. Ce comportement est similaire à celui observé pour les RTDs où les contacts du *top* et du *bottom* sont tous les deux de nature ohmique.

Les diodes de $2\mu\text{m}$ de diamètre ont présenté pour la plupart un PVR d'environ 3,5 (**Figure III.34.a**), tandis que celles de $3\mu\text{m}$, un PVR approximativement de 2,5 (**Figure III.34.b**). Ces mesures semblent indiquer une dépendance des performances statiques des diodes vis-à-vis de leurs tailles. En accord avec les résultats exhibés dans la littérature, la

NDR apparaît uniquement dans le sens croissant du balayage en tension et disparaît lors du retour à l'équilibre [36].

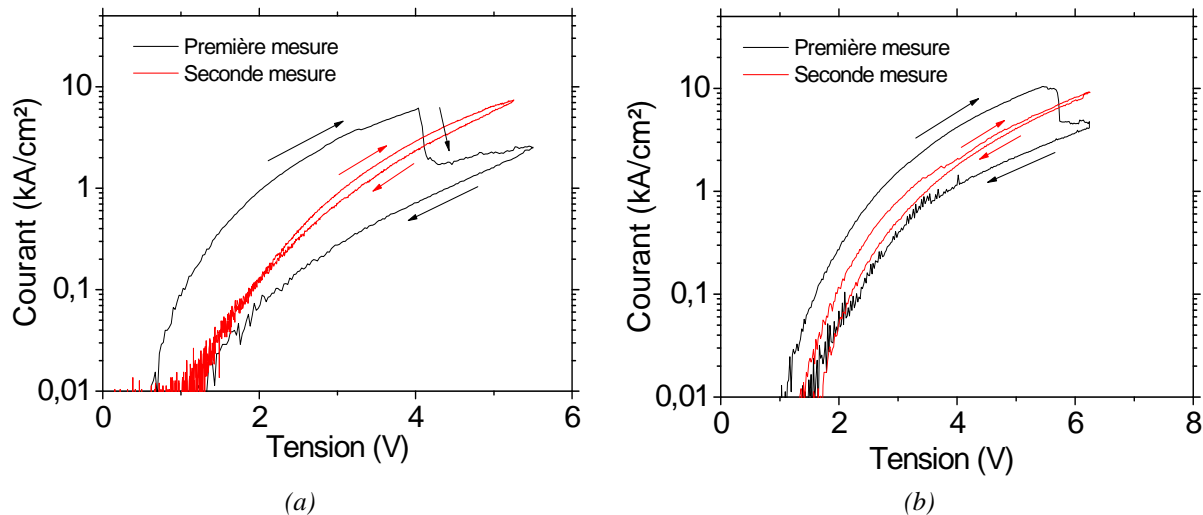


Figure III.34: Caractéristiques $J(V)$ à 120K prises successivement sur des diodes de diamètres (a) $2\mu\text{m}$ et (b) $3\mu\text{m}$. Le balayage en tension s'effectue pour des valeurs positives en commençant à l'équilibre (0V).

Le phénomène d'hystérésis du courant est associé aux piégeages des porteurs liés aux défauts profonds dans les barrières AlN s'activant électriquement au cours de la montée en tension [37]. La Figure III.34 permet de voir avec précision ce comportement dans le cas de deux RTDs de diamètres $2\mu\text{m}$ et $3\mu\text{m}$. On y perçoit le sens de rotation sur la caractéristique $J(V)$ et l'équilibre en courant pour la seconde mesure où le phénomène d'hystérésis observé y est très largement atténué.

Un autre phénomène peut être remarqué : plus le diamètre de la diode est élevé, plus la tension V_p augmente et plus la densité de courant J_p augmente et ceci pour la même hétérostructure. Ces évolutions vont de paires avec un écart moins marqué sur l'hystérésis entre les deux sens de balayage en tension. Une partie de ces phénomènes peut être attribuée aux pièges (voire paragraphe précédent) mais aussi à la contrainte dans la diode.

Pour cette seconde partie de l'étude, nous débutons la mesure non pas de l'équilibre mais d'une tension négative pour ensuite réaliser le balayage en tension. C'est ainsi que pour des tensions d'origine d'au moins -13V pour les diodes de $2\mu\text{m}$ et autour de -19V pour les diodes de $3\mu\text{m}$, les mesures $J(V)$ montrent une certaine stabilité et une reproductibilité de la NDR jamais égalée dans la littérature. Sous ces conditions, la NDR est reproductible plus de cinquante fois pour les diodes $2\mu\text{m}$ et plus de vingt fois pour les diodes $3\mu\text{m}$ (Figure III.35).

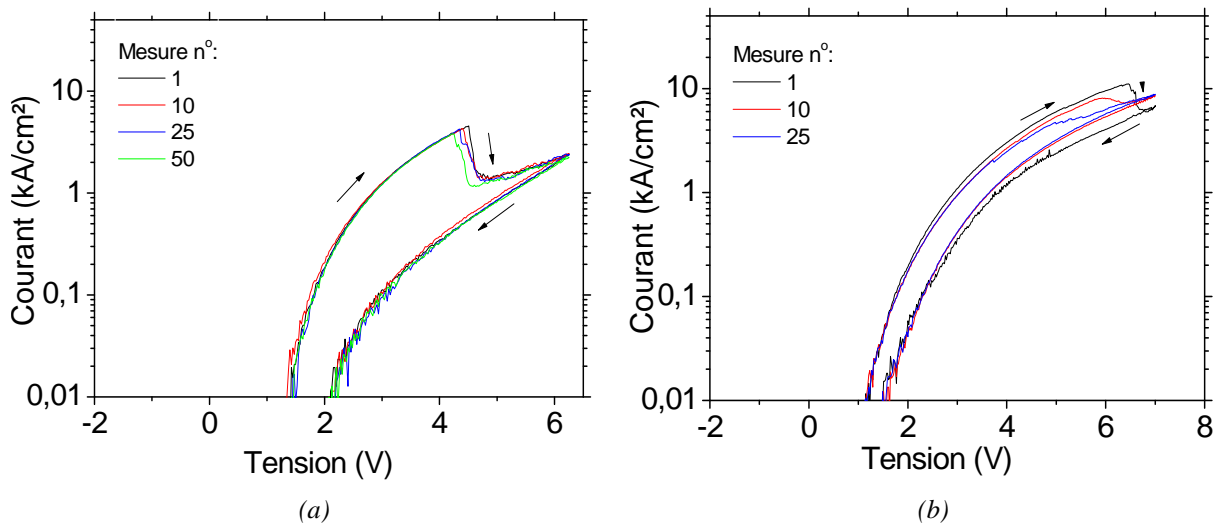


Figure III.35: Caractéristiques $J(V)$ à 120K prises successivement sur des diodes de diamètres $2\mu\text{m}$ en commençant le balayage par -13V (a) et $3\mu\text{m}$ en commençant le balayage par -19V (b).

Ces résultats sont en accord avec ceux de Belyaev [38] et Leconte [33] qui ont également observé un comportement électrique similaire des RTDs, nécessitant l'application d'une tension inverse suffisamment importante pour pouvoir observer à nouveau un pic de résonance sans pour autant assurer la reproductibilité observée. Une telle reproductibilité élevée semble donc être liée au fort champ électrique des barrières AlN, qui modifient fortement le niveau d'énergie des pièges et la courbure de la bande des barrières (sous forme triangulaire), permettant ainsi, de vider efficacement les pièges par effet tunnel assisté par effet de champ (effet Poole-Frenkel) (Figure III.36) [39].

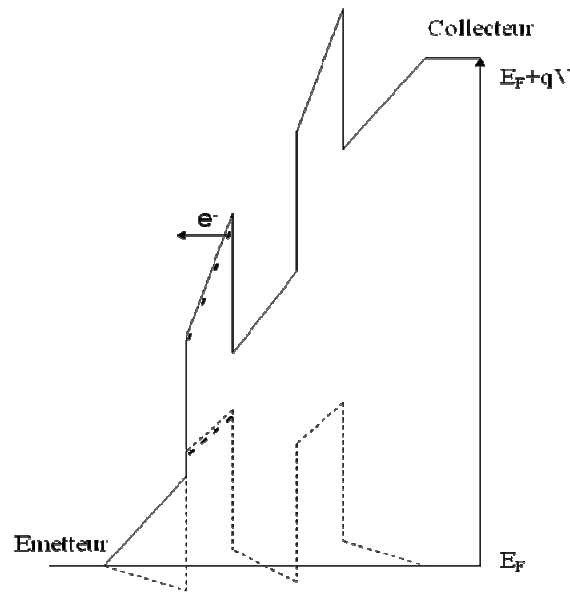


Figure III.36: Schéma illustrant le vidage des pièges dans les barrières AlN par effet Poole-Frenkel.

La Figure III.35.a montre un exemple de la reproductibilité obtenue sur une diode de $2\mu\text{m}$ de diamètre avec une légère évolution des densités de courant J_p et de la tension d'amorçage V_p , ainsi que la caractéristique J-V (Figure III.35.b) réalisée dans les mêmes conditions pour la diode de $3\mu\text{m}$ de diamètre. Dans ce dernier cas, la dégradation de la NDR peut être observée étape par étape au fil des mesures successives avant d'exhiber une caractéristique similaire à celle obtenue lors de la seconde mesure lorsqu'on débute cette dernière à partir de l'équilibre ($V=0V$). Cette dégradation ne peut être corrélée qu'au remplissage des pièges aux interfaces suite aux effets thermiques lors de la montée en tension de la RTD.

Un comportement déjà observé peut être souligné : plus le diamètre de la diode est élevé, plus la tension V_p augmente et plus la densité de courant J_p augmente et ce, pour la même hétérostructure. Cependant, lors des mesures consécutives sur la diode de $3\mu\text{m}$, le pic résonnant se décale à l'aller vers les basses tensions, et au retour, celui-ci est suivi par des instabilités de courant [6]. Ce comportement peut être qualitativement expliqué par le chargement des pièges situés dans la zone de charge d'espace, qui masquent de la sorte les niveaux quantiques du puits et qui décale en conséquence la position du pic V_p .

Après des mesures répétitives, la NDR décroît plus lentement pour la diode de $2\mu\text{m}$ que pour la diode $3\mu\text{m}$ puisque dans le cas d'une diode de $2\mu\text{m}$, le rapport J_p/J_v ne change guère ainsi que V_p et J_p , alors que dans le cas de la diode de $3\mu\text{m}$ de diamètre, ces mêmes

caractéristiques se dégradent fortement. Cette caractéristique confirme une fois de plus la dépendance du nombre de pièges par mesas en fonction de la taille des RTDs.

Compte tenu de l'effet de recouvrement du pic de résonance par effet de champ en polarisation inverse, nous avons tenté d'améliorer encore les performances statiques des RTDs en appliquant au préalable à toute mesure $J(V)$ en partant de l'équilibre, un traitement électrique similaire. Ainsi, après un traitement électrique de -6 V pendant 2min sur la diode précédente de $2\mu\text{m}$, la NDR est apparue dans les deux sens de balayage en tension, avec respectivement (à l'aller et au retour) : des tensions pics de $3,7$ et $3,9$ V, des courants pics de $5,8$ et $6,8$ kA/cm^2 , et des RVP de l'ordre de $1,2$ et $1,5$ (Figure III.37). Lors du balayage retour, la tension pic se décale vers les basses tensions et le courant pic diminue légèrement. Pour les mesures successives, le pic de résonance disparaît complètement. Ce comportement est attribué à la distribution du champ électrique (barrière non-triangulaire) dans la structure et à la cinétique des pièges à fort champ.

Par la suite, nous avons tenté d'appliquer le même traitement électrique sur la diode de $3\mu\text{m}$, mais sans succès, la NDR n'était apparente que dans un sens de balayage (dans le sens des tensions croissantes). Si l'on compare les mesures faites sur ces deux mesas, on remarque que les caractéristiques $J(V)$ ne sont pas reproductible lors des mesures suivantes.

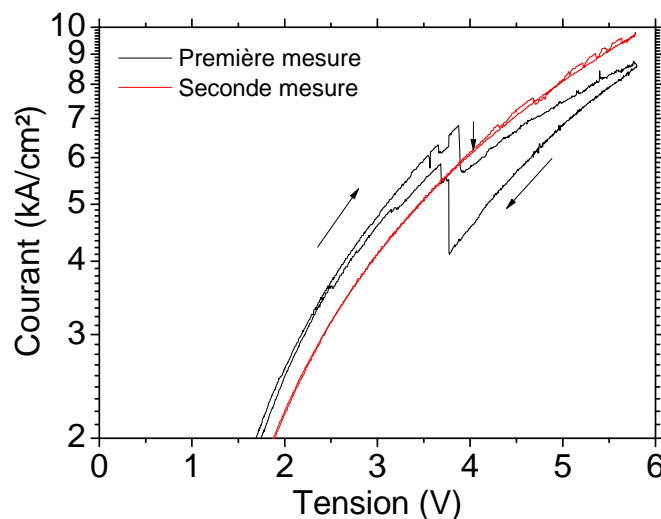


Figure III.37: Caractéristiques $J(V)$ à 120K prises successivement sur la diode de diamètre $2\mu\text{m}$ après un traitement électrique de -6 V pendant 2min. Le balayage en tension s'effectue pour des valeurs positives en commençant à l'équilibre (0V).

3.3.5 Confrontation théorie-expérience

L'écart entre les résultats simulés et les résultats expérimentaux peut être relativement important. A ce jour, il n'existe pas d'outil de simulation assez précis qui soit adapté aux spécificités des nitrures. En effet, l'incertitude sur les valeurs de certains paramètres physiques rend particulièrement difficile la simulation du transport vertical au travers les hétéro-structures III-N. A titre d'exemple, nous pouvons rencontrer dans la littérature plusieurs valeurs de la discontinuité de bande de conduction entre AlN/GaN: 1,7eV [40], 1,75eV [41], 1,8eV [42], 1,95eV [2] et 2,1eV [36]. L'origine de cette variation provient de la méconnaissance de la discontinuité de bande entre 2 semiconducteurs ayant des épaisseurs nanométriques. Le problème est comparable à celui de l'approximation de la masse effective.

La disparité de ces valeurs se répercute sur les caractéristiques J-V simulées (cf. figure II.15a). La Figure III.38 permet d'observer un comportement similaire à ceux simulés lorsqu'on faisait varier le taux d'aluminium dans les couches barrières AlGaN (Chapitre II.4.4.4).

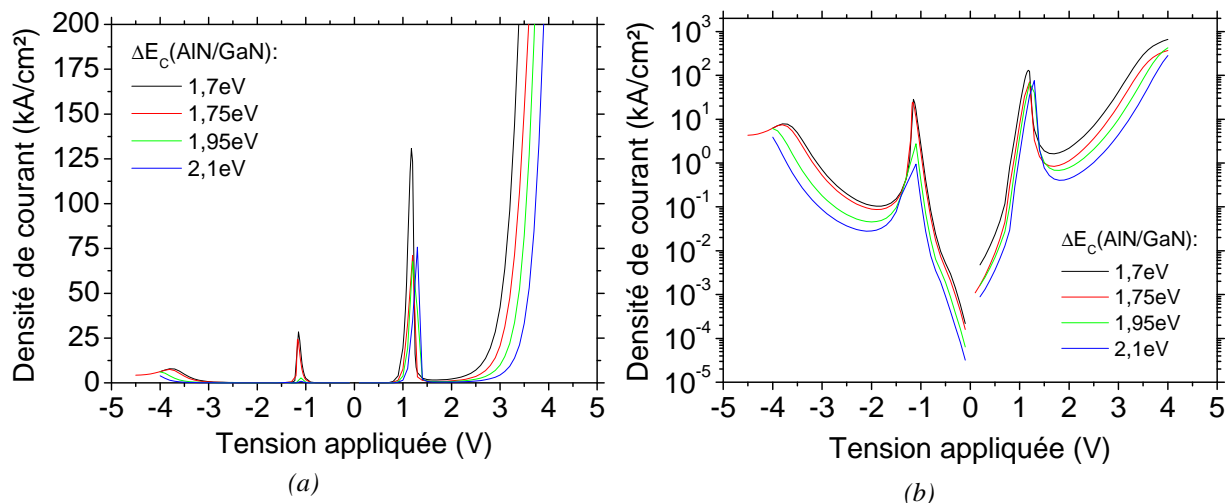


Figure III.38 : Caractéristiques J-V simulées en fonction de la discontinuité de la bande de conduction ΔE_c (1,7eV à 2,1eV) a) en échelle linéaire b) en échelle logarithmique.

La valeur des charges de polarisation aux interfaces $\sigma = \pm 6,5 \times 10^{13} \text{cm}^{-2}$ [40] utilisée dans nos simulations, peut paraître excessivement grande mais il n'existe pas à notre connaissance de travaux qui donnent la valeur de la charge pour des épaisseurs nanométriques de AlN. Une valeur plus proche des résultats expérimentaux serait de $3-4 \times 10^{13} \text{cm}^{-2}$ [43]. Ceci a pour effet

de surestimer les courants pics et pourrait être corrigé dans un travail ultérieur. De telles simulations en tenant compte des charges de polarisations ne sont pas communes. Les premiers travaux concernant leur impact sur la caractéristique J-V d'une structure polaire datent de 2002 et ne sont pas nombreux.

Beaucoup d'autres incertitudes règnent sur les conditions opératoires et les grandeurs utilisées, à ce titre nous pouvons citer : l'effet de la distribution de la contrainte dans les nano-diodes, l'effet de la déplétion des charges en surface, l'effet des pièges en quantité importante dans l'hétérostructure aux interfaces et en volume, l'effet des diffusions inélastiques, les effets de fluctuations électriques aux interfaces ou encore les effets d'auto-échauffement étant donné les densités de courant délivrées.

4 Conclusion

Dans ce troisième chapitre, nous avons présenté les résultats expérimentaux relatifs aux deux approches utilisées afin d'obtenir des diodes libres de dislocations. La première approche ascendante est consacrée d'une part à l'étude expérimentale de l'épitaxie sélective à travers des ouvertures dans des masques diélectriques (SiO_2 , SiN_x) et d'autre part à l'étude de la reprise de croissance sur des piliers GaN servants de socles.

L'étude expérimentale de l'épitaxie sélective du GaN par MBE a été menée dans un premier temps à l'échelle micrométrique et puis étendue dans un deuxième temps à l'échelle nanométrique. La croissance sélective du GaN au travers des ouvertures micrométriques a permis d'obtenir des résultats très prometteurs. Pour ce faire, des ouvertures de dimensions nanométriques ont été réalisées par lithographie électronique. L'extension de cette étude au domaine nanométrique n'a pas permis d'obtenir les résultats escomptés. En effet, les résultats obtenus ont montré d'importants effets de bord rendant impossible l'épitaxie sélective de nanostructures GaN à travers une ouverture d'un masque diélectrique par MBE.

L'étude de la reprise de croissance sur des piliers GaN a été rendue possible grâce à la maîtrise de la gravure du GaN par FIB. Cette technique a permis la fabrication de piliers GaN avec des hauteurs allant jusqu'à $2\mu\text{m}$ et des diamètres compris entre 50nm et $5\mu\text{m}$. Les analyses au MEB ont montré une croissance latérale sur les facettes des piliers qui rendait impossible la réalisation d'hétérostructures verticales. Nous avons pu notamment observer le développement de nouvelles facettes polaires et semi-polaires en fonction des dimensions des piliers.

Concernant l'approche descendante, une étude préliminaire a été menée par spectroscopie micro-Raman afin de déterminer la distribution de la contrainte le long des micro-colonnes de GaN. Une structure suspendue ($5 \times 15\mu\text{m}^2$) a été fabriquée au FIB sur un bord clivé de l'échantillon afin d'annihiler la contrainte mécanique. Ainsi, nous avons pu décorrélérer la contrainte thermique de la contrainte mécanique. Le résultat de ce travail nous a permis de montrer que la contrainte mécanique présentait une évolution parabolique dont le maximum est situé au centre de la structure isotrope et que cette dernière diminuait en fonction de son diamètre jusqu'à quasiment se relaxer totalement pour des diamètres inférieurs à $1\mu\text{m}$. Par conséquent les champs de polarisation dans une diode à double barrière micrométrique

présentent une distribution inhomogène à l'interface des doubles barrières laquelle va forcément affecter le fonctionnement de la RTD.

Par la suite, nous avons dû apporter notre contribution à la réalisation des premières briques élémentaires nécessaires à la fabrication des nano-diodes. Dans ce cadre, un procédé technologique complet (du contact ohmique, méso, aplanissement...) a été développé en vue de réaliser des structures coplanaires adaptées en impédance pour des mesures en hyperfréquence. Les composants RTDs ont été caractérisés par une multitude de techniques : avec des micro-manipulateurs au FIB, des nano-pointes au *nanoprobe* et sous pointes RF d'un analyseur. Les caractéristiques $J(V)$ des diodes ont permis d'observer la NDR à basse température ($\leq 120K$) pour les échantillons comportant des barrières AlN (*nanoprobe*, station sous pointes) et à température ambiante (300K) pour ceux comportant des barrières avec de faibles taux d'aluminium $Al_{0,25}Ga_{0,75}N$ (au FIB). Ce comportement suggère l'existence de défauts profonds dans les barrières $Al_xGa_{1-x}N$, dont l'influence doit être réduite soit en réduisant le taux d'aluminium, soit en diminuant l'épaisseur de la barrière.

Nous avons montré qu'il existait une dépendance des performances électriques des RTDs vis-vis de leur diamètre. Cette observation a été associée en partie au nombre de dislocations traversantes par méso présentes dans la structure et qui jouent le rôle de court-circuit. Le résultat majeur de ce travail a été obtenu sur les composants qui ne présentaient pas de métallisation sur la surface du dessus (*top*). Nous avons montré qu'il était possible d'améliorer drastiquement la reproductibilité de la NDR grâce au comportement redresseur du contact pointe métallique sur le semiconducteur, en appliquant un fort champ électrique en polarisation inverse afin de vider efficacement les pièges par effet de champ.

5 Références bibliographiques

- [1] A. Kikuchi, R. Bannai and K. Kishino, *phys. stat. sol. (a)* **188** (1) (2001) 187–190.
- [2] A. Kikuchi, R. Bannai, K. Kishino, C. M. Lee and J. I. Chyi, *Appl. Phys. Lett.* **81** (9) (2002) 1729-1731.
- [3] C. T. Foxon, S. V. Novikov, A. E. Belyaev, L. X. Zhao, O. Makarovskiy, D. J. Walker, L. Eaves, R. I. Dykeman, S. V. Danylyuk, S. A. Vitusevich, M. J. Kappers, J. S. Barnard and C. J. Humphreys *phys. stat. sol. (c)* **0** (7) (2003) 2389–2392.
- [4] S. Golka, C. Pflügl, W. Schrenk, G. Strasser, C. Skierbiszewski, M. Siekacz, I. Grzegory, and S. Porowski, *Appl. Phys. Lett.* Vol. **88** (2006) 172106.
- [5] C. Bayram, Z. Vashaei, and M. Razeghi, *Appl. Phys. Lett.* **97** (2010) 092104.
- [6] C. Bayram, Z. Vashaei, and M. Razeghi, *Appl. Phys. Lett.* **97** (2010) 181109.
- [7] R. Songmuang, G. Katsaros, E. Monroy, P. Spathis, C. Bougerol, M. Mongillo and S. De Franceschi, *Nano Lett.* **10** (2010) 3545–3550.
- [8] Hideto Miyake, Keisuke Nakao, Kazumasa Hiramatsu, *Superlattices and Microstructures* **41** (2007) 341–346.
- [9] S. Kitamura, K. Hiramatsu, N. Sawaki, *Jpn. J. Appl. Phys.* **34** (1995) L1184.
- [10] Akasaka, Y. Kobayashi, S. Ando, N. Kobayashi, M. Kumagai, *J. Cryst. Growth* **72** (1998) 189–190.
- [11] Y. Cordier, F. Pruvost, F. Semond, J. Massies, M. Leroux, P. Lorenzini, and C. Chaix, *Phys. Status Solidi C* **3** (2006) 2325-2328.
- [12] C. T. Foxon, S. V. Novikov, J. L. Hall, R. P. Champion, D. Cherns, I. Griffiths, and S. Khongphetsak, *J. Cryst. Growth* **13** (311) (2009) 3423-3427.
- [13] Y. Cordier, O. Tottereau, L. Nguyen, M. Ramdani, A. Soltani, M. Boucherit, D. Troadec, F.-Y. Lo, Y. Y. Hu, A. Ludwig, and A. D. Wieck *Phys. Status Solidi C* **8** (5) (2011) 1516–1519.
- [14] R.J. Briggs, A.K. Ramdas, *Phys. Rev. B* **13** (1976) 5518.
- [15] J.W. Ager III, G. Conti, L.T. Romano, C. Kieselowski, *MRS Symposium Proceedings* **482** (1998) 769.
- [16] J.-M. Wagner, F. Bechstedt, *Phys. Status Solidi (b)* **234** (2002) 965.

- [17] P. Perlin, C. Jauberthie-Carillon, J.-P. Itie, A. San Miguel, I. Gorczyca, A. Polian, *Phys. Rev. B* **45** (1992) 83.
- [18] F. Demangeot, J. Frandon, M.A. Renucci, O. Briot, B. Gil, R.L. Aulombard, *Solid State Commun.* **100** (1996) 207.
- [19] V. Darakchieva, T. Paskova, M. Schubert, H. Arwin, P.P. Paskov, B. Monemar, D. Hommel, M. Heuken, J. Off, F. Scholz, B.A. Haskell, P.T. Fini, J.S. Speck, S. Nakamura, *Phys. Rev. B* **75** (2007) 195217.
- [20] X. Peng, N. Sridhar, D.R. Clarke, *Mater. Sci. Eng. A* **380** (2004) 208.
- [21] S.J. Pearton, C.R. Abernathy, F. Ren, J.R. Lothian, P.W. Wisk, A. Katz and C. Constantine, *Semicond. Sci. Technol.* **8** (1993) 310.
- [22] S. J. Pearton, C. R. Abernathy and F. Ren, *Appl. Phys. Lett.* **64** (1994) 2294.
- [23] R.J. Shul, G.B. McClellan, S.A. Casalnuovo, D.J. Rieger, S.L. Pearton, C. Constantine, C. Baratt, R. F. Karlicek, C. Tran and M. Schurman, *Appl. Phys. Lett.* (1996) **69**.
- [24] R.J. Shul, G.B. McClellan, S.L. Pearton, C.R. Abernathy, C. Constantine, C. Baratt, *Electron. Lett.* **32** (1996) 1408.
- [25] D. Basak, K. Yamashita, T. Sugahara, Q. Fareed, D. Nakagawa, K. Nishino and S. Sakai, *Jpn. J. Appl. Phys.* **38** (1999) 2646-2651.
- [26] <http://www.fei.com/products/dualbeams/>
- [27] Z. Fan, S.N Mohammad, W. Kim, O. G. Aktas, A. E. Botcharev, *Appl. Phys. Lett.* **68** (12) (1996) 1672.
- [28] Q. Z. Liu and S. S. Lau, *Solid State Electronics* **42** (5) (1998) 677–691.
- [29] J. Hilsenbeck, E. Nebauer, J. Würfl, G. Tränkle, and H. Obloh, *Electron. Lett.* **36** (11) (2000) 980–981.
- [30] A. Soltani, A. BenMoussa, S. Touati, V. Hoel, J.C. DeJaeger, J. Laureyns, Y. Cordier, C. Marhic, M. A. Djouadi, and C. Dua, *Diamond & Related Materials* **16**, Elsevier, pp., (2007) 262-266.
- [31] A. D. Bykhovski, B. L. Gelmont, and M. S. Shur, *J. Appl. Phys.*, **81** (1997) 6332.
- [32] S Leconte, F Guillot, E Sarigiannidou and E Monroy, *Semicond. Sci. Technol.* **22** (2007) 107-112.
- [33] S. Leconte, S. Golka, G. Pozzovivo, G. Strasser, T. Remmele, M. Albrecht and E. Monroy, *Phys. Stat. Sol. C* **5** (2008) 431-434.

- [34] C.T. Foxon, S.V. Novikov, A.E. Belyaev, L.X. Zhao, O. Makarovsky, D.J. Walker1, L. Eaves, R.I. Dykeman, S.V. Danylyuk, S.A. Vitusevich, M.J. Kappers, J.S. Barnard, and C.J. Humphreys, *Phys. Status Solidi C* **0** (2003) 2389.
- [35] <http://www.omicron.de/en/products/lt-nanoprobe/instrument-concept>.
- [36] C. Bayram, Z. Vashaei, and M. Razeghi, *Appl. Phys. Lett.* **96** (2010) 042103.
- [37] A. M. Kurakin, S. A. Vitusevich, S. V. Danylyuk, A. V. Naumov, C. T. Foxon, S. V. Novikov, N. Klein, H. Lüth, and A. E. Belyaev, *Phys. Status Solidi C* **3** (2006) 2265.
- [38] A. E. Belyaev, C. T. Foxon, S. V. Novikov, O. Makarovsky, L. Eaves, M. J. Kappers and C. J. Humphreys, *Appl. Phys. Lett.*, **83** (2003) 3627.
- [39] M. V. Petrychuk, A. E. Belyaev, A. M. Kurakin, S. V. Danylyuk, N. Klein, and S. A. Vitusevicha, *Appl. Phys. Lett.*, **91** (2007) 222112.
- [40] F. Sacconi, A. Di Carlo and P. Lugli, *phys. stat. sol. (a)* **190** (1) (2002) 295–299
- [41] S. Sakr, E. Warde, M. Tchernycheva, and F. H. Julien, *J. Appl. Phys. Lett.*, **109** (2011) 023717
- [42] D. Cociorva, W. G. Aulbur and J. W. Willkins, *Solide State Communication* 124 (2002) 63-66
- [43] K. M. Indlekofer , E. Dona, J. Malindretos, M. Bertelli, M. Kocan, A. Rizzi and H. Luth, *phys. stat. sol. (b)* **234** (3) (2002) 769-772

Chapitre 4

Transistor HEMT boré à base de nitrure de gallium

Table des matières

1	INTRODUCTION.....	131
2	PRINCIPE DE BASE DU FONCTIONNEMENT	131
2.1	GENERALITES.....	131
2.2	IMPACT DES PARAMETRES DE LA STRUCTURE	132
2.3	LIMITATIONS DES PERFORMANCES DU COMPOSANT	135
2.3.1	<i>Effet de l'auto-échauffement</i>	<i>135</i>
2.3.2	<i>Contrainte technologique liée à la grille Schottky</i>	<i>135</i>
2.3.3	<i>Ionisation par impact</i>	<i>135</i>
3	TECHNOLOGIE DES COMPOSANTS	136
3.1	MARQUES D'ALIGNEMENT.....	136
3.2	CONTACTS OHMIQUES	137
3.3	ISOLATION PAR IMPLANTATION	138
3.4	CONTACTS SCHOTTKY	140
3.4.1	<i>Choix de la métallisation</i>	<i>140</i>
3.4.2	<i>Technologie de Grille.....</i>	<i>141</i>
3.4.2.1	<i>Grille en Té.....</i>	<i>141</i>
3.4.2.1.1	<i>Généralités</i>	<i>141</i>
3.4.2.1.2	<i>Technologie "multicouches de résines"</i>	<i>142</i>
3.5	PASSIVATION NITRURE	144
3.6	PLOTS D'ÉPAISSISSEMENTS	145
4	ETUDE DES PROPRIETES DE TRANSPORT.....	146
4.1	ETUDE DE LA RESISTANCE DE LA COUCHE TAMPON.....	146
4.1.1	<i>Couche tampon « type » AlGaN</i>	<i>146</i>
4.1.2	<i>Couche tampon « type » B GaN</i>	<i>149</i>
4.2	ETUDE DES PREMIERES STRUCTURES DE TRANSISTORS	152
4.2.1	<i>Structures « type » BAlGaN/GaN/BGaN.....</i>	<i>153</i>
4.2.2	<i>Structures « type » AlGaN/BGaN/GaN et AlGaN/GaN/BGaN</i>	<i>156</i>
4.2.2.1	<i>Etude morphologique de la surface</i>	<i>157</i>
4.2.2.2	<i>Etude électrique des structures</i>	<i>158</i>
4.3	ETUDE DES SERIES SUCCESSIVES DE TRANSISTORS	160
4.3.1	<i>Description des structures de couches.....</i>	<i>160</i>

4.3.2	<i>Caractérisation électrique de la couche active</i>	162
5	CARACTERISATION ELECTRIQUE DU COMPOSANT	167
5.1	CARACTERISATION EN REGIME CONTINU	167
5.1.1	<i>Caractérisation des contacts ohmiques</i>	167
5.1.2	<i>Caractérisation du contact Schottky</i>	172
5.1.3	<i>Mesure de l'isolation par implantation</i>	177
5.1.4	<i>Caractéristiques de sortie du transistor</i>	179
5.1.5	<i>Mesure Capacité-Tension</i>	186
5.1.6	<i>Caractéristiques en DC pulsé</i>	188
5.2	CARACTERISTIQUES HYPERFREQUENCE DU COMPOSANT	190
6	CONCLUSION	198
7	RÉFÉRENCES BIBLIOGRAPHIQUES	201

1 Introduction

Les transistors à effet de champ réalisés à partir de matériaux semiconducteurs III-N à grands gaps sont à l'heure actuelle les candidats les plus prometteurs pour des applications nécessitant de la puissance en hyperfréquence. Ils peuvent intervenir aussi bien dans les applications militaires ou grand public, comme les systèmes radars, les communications satellites ou les stations de base pour les réseaux de communication sans fils.

Les transistors de type HEMT basés sur l'hétérostructure AlGa_N/Ga_N ont permis d'obtenir des résultats suffisamment prometteurs pour réaliser une petite production de masse pour des applications très spécifiques. Les problèmes techniques majeurs sont la fiabilité et la réalisation de ces transistors sur substrats bas coûts (essentiellement Silicium). Pour repousser toujours davantage les limites de ces composants, plusieurs solutions ont été envisagées pour améliorer le confinement des porteurs et augmenter la densité électronique du canal 2D.

Dans le premier cas, les chercheurs ont eu recours notamment à l'incorporation d'éléments comme l'aluminium [1] ou l'indium dans la couche tampon Ga_N [2] et dans le second cas, en augmentant la discontinuité de bandes en utilisant des couches barrières à très large bande interdite (AlN) [3]. Nous proposons une approche relativement similaire mais avec un élément nouveau qu'est le Bore. En effet, cet élément permet d'augmenter la résistivité de la couche tampon Ga_N lorsqu'il y est incorporé mais permet aussi d'améliorer le confinement et donc les propriétés de transport dans le gaz d'électrons 2D [4]. Cette dernière constitue le socle de cette étude. De la même manière, le ternaire BAlN permet de satisfaire à la seconde approche et est une voie à envisager à plus long terme. Notons cependant qu'il existe d'autres approches pour améliorer les propriétés d'isolation de la couche tampon comme la compensation (Fe, C, ... voire Mg...) ou son épaisseur.

2 Principe de base du fonctionnement

2.1 Généralités

Le fonctionnement d'une hétérostructure à base de Ga_N reste très atypique en termes de fonctionnement. L'idée originale d'une hétérostructure à semiconducteurs a permis de

fabriquer dans les années 80 une nouvelle filière de transistor appelée *High Electron Mobility Transistor* (HEMT) déjà atypique par rapport au MOSFET. Ces derniers ont permis de repousser les limites des performances des transistors de l'époque. Elle nécessite néanmoins une grande maîtrise de la croissance épitaxiale afin de former des puits aux jonctions mais aussi du dopage lequel va permettre d'alimenter les puits en porteurs de charges.

Une fois la maîtrise acquise du matériau GaN à la fin des années 90, il n'a fallu que quelques années pour réitérer cette prouesse avec dans un premier temps le MESFET GaN puis très rapidement de nouvelles hétérostructures à base de GaN [5] sont apparues. Cependant, le fonctionnement du HEMT GaN n'a réellement été compris qu'au cours des années 2000. En effet, ces hétérostructures ne nécessitent pas de dopage et pourtant la densité électronique obtenue est dix fois plus élevée que les transistors III-V à petits gaps. L'origine du gaz a été attribuée aux charges de surface (et plus particulièrement de l'environnement) lesquelles alimentent le puits suite aux effets de polarisations internes à l'hétérostructure [6].

Côté technologique, la singularité de ce composant est tout aussi étonnante. Elle sera décrite avec plus de précision dans la suite de ce chapitre. Notons juste que les électrons confinés dans le puits de potentiel à l'interface AlGa_N/Ga_N se comportent comme un gaz bidimensionnel commandé en tension par un contact redresseur constitué par la grille métallique.

2.2 Impact des paramètres de la structure

L'hétérostructure comporte un substrat en fonction du coût envisagé (SiC, Si, substrat composite, diamant, template GaN), une couche tampon de GaN nid et une couche barrière d'AlGa_N d'épaisseur variable. La **Figure IV.1** montre l'épaisseur critique à partir de laquelle un gaz 2D est formé en partant d'une couche minimale de 1nm pour AlGa_N et pour deux niveaux de dopage extrême (résiduel ou nid à 10^{15}cm^{-3} et $5\times 10^{18}\text{cm}^{-3}$).

Cette épaisseur critique peut être exprimée sous la forme suivante :

$$t_{\text{crit}} = (\varphi_B - \Delta E_C) \varepsilon_{\text{AlGa}_N} / q\sigma_{p,\text{AlGa}_N}$$

où φ_B est la hauteur de barrière de potentiel ou de la jonction MS ($=\varphi_{\text{MS}}$). La hauteur de barrière φ_B utilisée pour cette étude comparative est de 1,6eV.

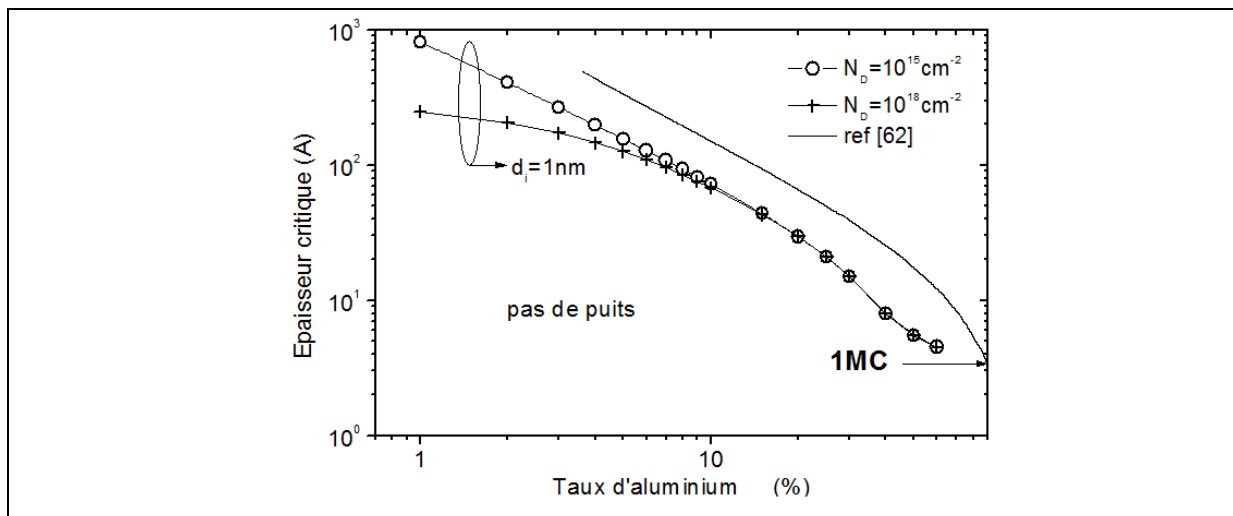


Figure IV.1 : Epaisseur minimale de barrière $Al_xGa_{1-x}N$ en fonction du taux d'aluminium pour une structure nid et dopée $10^{18} cm^{-3}$, permettant l'apparition d'un gaz d'électrons 2D dans le puits [7].

La Figure IV.2 représente la densité d'électrons n_s dans le 2DEG en fonction de l'épaisseur de la couche barrière AlGaN nid ($+d_1=1nm$) et pour différents taux d'aluminium. On remarque que plus le taux d'aluminium est élevé, plus la densité d'électrons dans le puits l'est également et finit par saturer dans tous les cas. Il en est de même pour l'épaisseur de la couche barrière. Par conséquent, les charges de surfaces sont d'autant plus écrantées que l'épaisseur de la couche barrière est épaisse. Dans ces calculs, on ne tient pas compte de la relaxation de la couche barrière lorsque le taux d'aluminium augmente.

Ambacher *et al.* [8] proposent de façon empirique deux niveaux de taux d'aluminium correspondant à des valeurs limites de la couche barrière AlGaN en fonction de l'état de sa relaxation. Jusqu'à 37%, la couche barrière est totalement tendue, puis se relaxe partiellement jusqu'à 67% pour ensuite finir par être totalement relaxée au-delà.

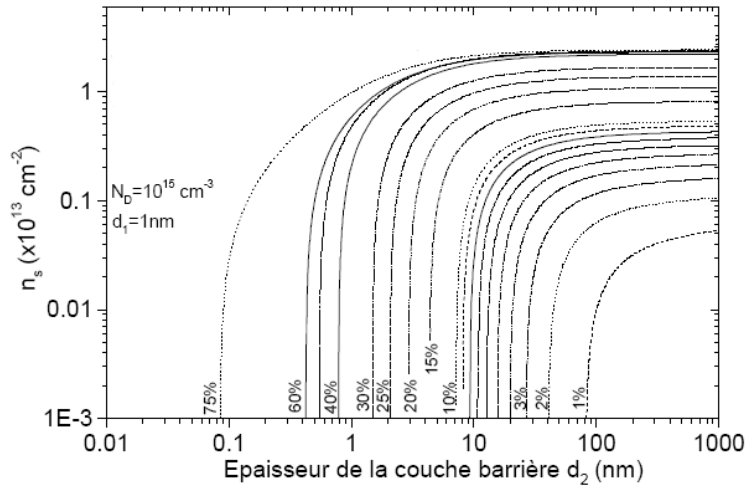


Figure IV.2 : Variation de la densité de charge du 2DEG en fonction de l'épaisseur de la barrière pour une structure $Al_xGa_{1-x}N/GaN$ nid pour différents taux d'aluminium et sans tenir compte des effets de relaxation ($N_D=10^{15}cm^{-3}$) [7].

La Figure IV.3 montre la dépendance de la densité d'électrons du gaz bidimensionnel en fonction du taux d'aluminium pour deux épaisseurs de la couche $Al_xGa_{1-x}N$ d_d (20nm et 35nm), un espaceur d_1 de 1nm et un dopage N_D de $2 \times 10^{18}cm^{-3}$ en tenant compte des effets des polarisations spontanée et piézoélectrique ainsi que la relaxation partielle du réseau cristallin. En conséquence, il n'est pas utile de réaliser des hétérostructures à plus de 37% d'aluminium dans la couche barrière.

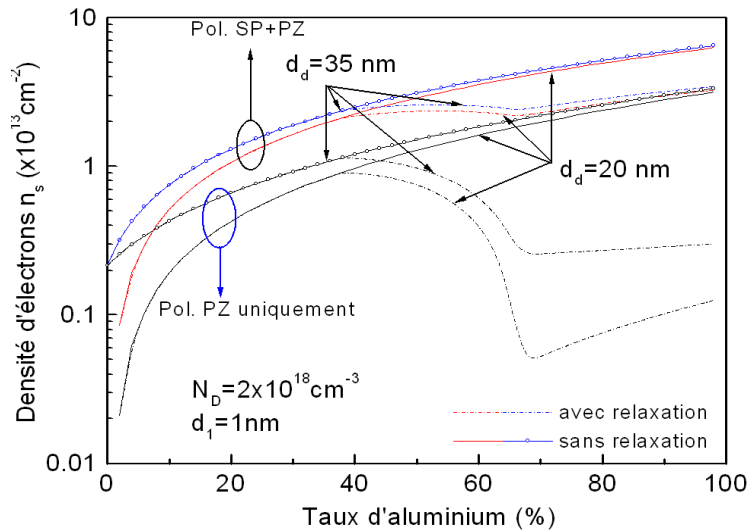


Figure IV.3 : Variation de la densité de charge du 2DEG pour une structure $Al_mGa_{1-m}N/GaN$ dopée en tenant compte des effets de la relaxation et des polarisations [7].

2.3 Limitations des performances du composant

2.3.1 Effet de l'auto-échauffement

Le critère majeur limitant les performances de ce type de transistor est l'auto-échauffement sous polarisation électrique. En effet, les densités de charges étant très élevées au-delà d'une dizaine de volts en V_{DS} , la caractéristique $I_{DS}(V_{DS})$ en régime DC continu, présente une décroissance due à la dégradation des propriétés de transport (la résistance carré augmente et la mobilité chute drastiquement) suite à une élévation de la température dans le canal. Cette élévation en température se réalise en fonctionnement transistor, à la sortie de la grille côté drain et s'accompagne par conséquent souvent d'un claquage de grille. Le choix du substrat et de la couche de passivation sont alors fondamentaux pour dissiper au mieux cette chaleur. Notons par ailleurs que c'est cet effet qui est la cause de la saturation du courant à bas champ dans les transistors [9].

2.3.2 Contrainte technologique liée à la grille Schottky

La position du contact Schottky n'est pas anodine. Elle est judicieusement choisie à proximité du contact de source, de manière à l'éloigner du contact de drain pour pouvoir polariser à fort champ électrique et maximaliser la tension de claquage. Cependant, si cette distance est trop grande, la structure est pénalisée pour la montée en fréquence.

2.3.3 Ionisation par impact

L'ionisation par impact ou par choc apparaît dans un matériau où règne un champ électrique intense. En effet, un électron qui dérive dans un solide sous l'effet d'un champ électrique, gagne de l'énergie sous forme cinétique et en transmet une partie au cristal par le biais des collisions. Ce processus assure la dissipation thermique de l'énergie potentielle perdue par les électrons.

Si le champ électrique est suffisamment intense, certains électrons peuvent acquérir une énergie telle que leur impact sur un atome du réseau conduit à la rupture d'une liaison et à la

création d'une paire électron-trou. Ce processus peut devenir cumulatif et conduire au phénomène d'avalanche. Ce phénomène se produit dans le canal du transistor, en sortie de grille côté drain où le champ électrique est maximum et peut aboutir si la densité électronique est très grande, au claquage du canal.

Une des possibilités pour minimiser le champ électrique en sortie de la grille et par conséquent l'autoéchauffement et à moindre mesure les effets d'avalanche, est de réduire l'énergie des porteurs dans le canal en sortie de grille par une redistribution côté drain de ce même champ électrique au moyen d'une plaque de champ (*Fieldplate*). Cela permet aussi à bas champ électrique, de réduire les effets de dispersion.

3 Technologie des composants

Les différentes étapes technologiques nécessaires à la réalisation d'un transistor $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}/\text{GaN}$ HEMT se présentent comme suit, dans l'ordre chronologique de sa réalisation :

- Dépôt des marques d'alignement
- Dépôt des contacts ohmiques et recuit
- Isolation par implantation He^+
- Dépôt de la grille (et recuit en option)
- Passivation de la surface avec un diélectrique isolant
- Dépôt des plots d'épaississement

La lithographie électronique est utilisée pour les étapes qui demandent une précision inférieure au micromètre, à savoir la définition des contacts ohmiques, des marques d'alignement et la grille. Les autres étapes sont réalisées en photolithographie.

3.1 Marques d'alignement

Le processus de fabrication des transistors commence par le dépôt des marques d'alignements. Ces marques sont nécessaires au masqueur électronique pour se repérer sur l'échantillon (wafer). C'est pourquoi, des motifs métalliques sont déposés sur chaque champ d'écriture du masqueur électronique par évaporation au canon d'électrons sous ultravide. Ces

motifs sont en général de formes carrés de $8\mu\text{m}$ de côté. Le séquentiel métallique Mo/Ni/Mo (20/40/70nm) a été choisi pour résister aux hautes températures de recuit des contacts ohmiques.

Le Molybdène (Mo) est un métal réfractaire, mais très contraint. C'est la raison pour laquelle, une couche de Nickel (Ni) est insérée entre deux couches de Mo afin de compenser la contrainte en étant suffisamment épais pour être réfléchissant et donc détectable par le masqueur électronique. La **Figure IV.4** montre une image MEB des masques d'alignements optique (a) et électronique (b).

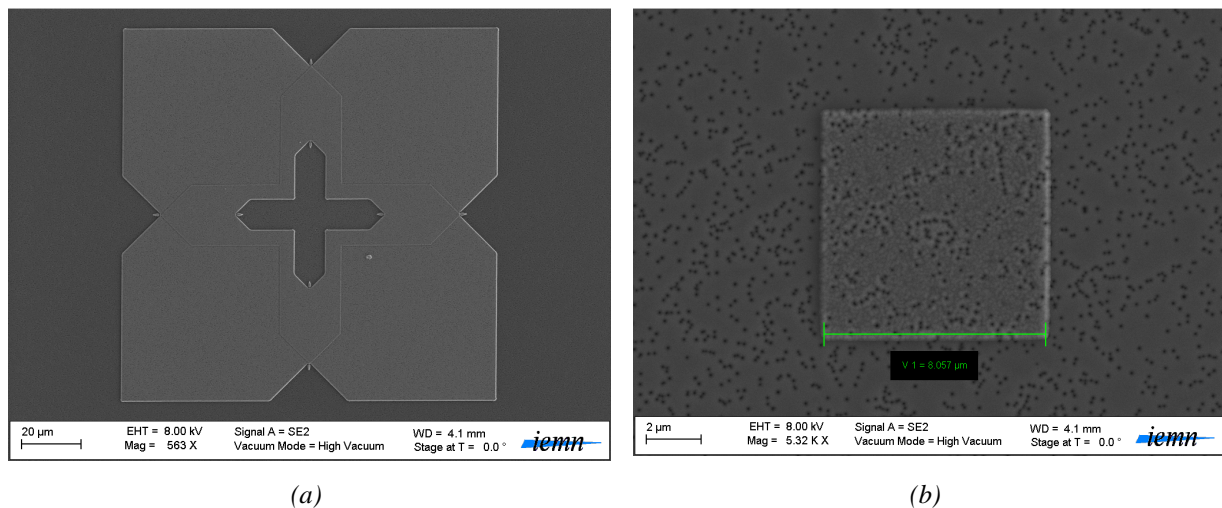


Figure IV.4 : Vue de dessus au MEB d'un motif d'alignement (a) optique et (b) électronique.

3.2 Contacts ohmiques

Dans le cas des transistors, les contacts ohmiques nécessitent des flancs nets permettant d'éviter tout risque de court-circuit entre les contacts de source et de grille. C'est pourquoi, ces contacts sont généralement définis par lithographie électronique. Cette lithographie est réalisée au moyen d'un procédé technologique utilisant un empilement de deux résines électroniques positives.

La première est une résine PMMA 950K dont l'épaisseur a été fixée à 150nm, la seconde est un copolymère P(MMA-8.5% MAA) dont l'épaisseur a été fixée à 680nm. L'écriture est réalisée au masqueur électronique sous une tension d'accélération de 100kV avec une

résolution de 10nm. La révélation est effectuée dans un mélange MIBK:IPA (1:2) durant 1mn30s avec une agitation constante de 110tr/min suivie d'un rinçage à l'alcool isopropylique pur pendant 30s. La **Figure IV.5** montre l'image MEB d'une échelle TLM de contacts ohmiques espacés avec des distances variables allant de 2 μ m à 20 μ m.

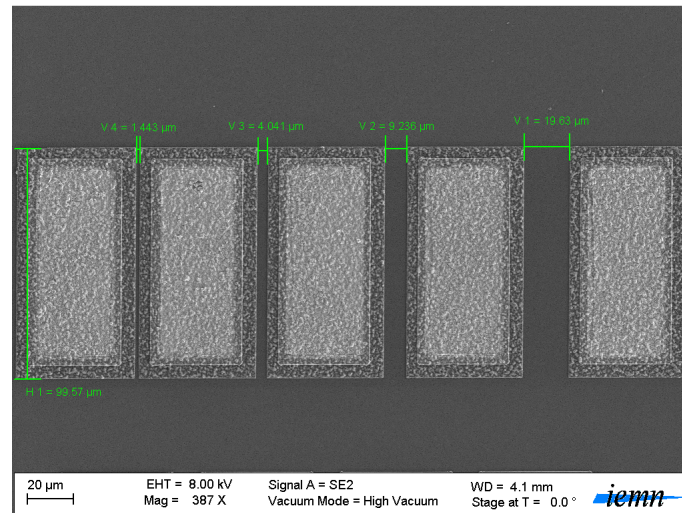


Figure IV.5 : Vue de dessus au MEB d'une échelle TLM.

3.3 Isolation par Implantation

L'isolation est une étape technologique très importante dans la fabrication des composants de puissance, qui permet d'une part, d'isoler électriquement les transistors d'un même substrat entre eux afin que la commande de charge de la grille se fasse correctement, et d'autre part, de limiter les connexions parasites entre les contacts qui pourraient éventuellement perturber le fonctionnement des composants. Dans le cas des HEMTs AlGa_N/Ga_N, l'étape d'isolation peut être réalisée soit au moyen d'une gravure sèche de type (ICP)-RIE ou bien par implantation ionique à haute énergie.

La première méthode d'isolation a l'avantage d'être facile et rapide d'utilisation et nécessite un équipement moins onéreux et sophistiqué qu'est un implanteur. Cependant, cette technique présente l'inconvénient d'engendrer une topologie non plane des composants pouvant induire des courants de fuites entre la grille et la zone active (2DEG) sur les flancs des mésas. Aussi, il a été observé pratiquement systématiquement que ce procédé engendre

des courants de fuites de surface non négligeables, qu'il est possible de réparer partiellement au moyen d'une passivation ou d'un recuit.

L'isolation par implantation constitue une alternative à cette méthode dans la mesure où elle permet de conserver une technologie planaire compatible avec les autres étapes technologiques et évite la rupture et les court-circuits de la grille lors de la descente du méso. Cette étape fondamentale va contribuer à augmenter le champ de claquage du composant. La profondeur d'implantation et la tenue en température de cette isolation constituent les paramètres à optimiser (Figure IV.6) au même titre que la nature de la couche tampon et de son épaisseur.

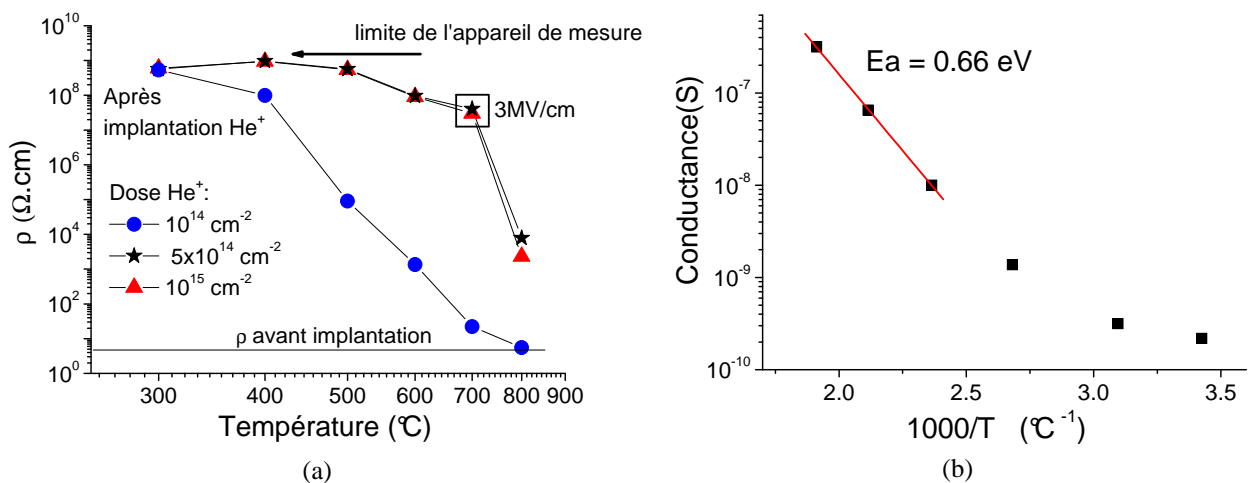


Figure IV.6 : (a) Résistivité d'une barre d'isolation (espacement de $10\mu\text{m}$) en fonction de la température pour plusieurs doses d'implantation et (b) plot d'Arrhénius correspondant à (a).

Au cours de cette thèse, nous avons réalisé des isolations par implantation d'ions Hélium. Cet élément a donné de bons résultats sur des structures MESFETs SiC et a ensuite été appliqué au HEMT $\text{Al}_{1-x}\text{Ga}_x\text{N}/\text{GaN}$. La Figure IV.6 montre que l'isolation par implantation hélium à simple dose est capable de tenir en température jusqu'à 700°C à partir de laquelle une fuite de courant est observée via un piège profond situé à $0,66\text{eV}$ sous la BC. Pour les fortes doses, il est possible d'atteindre des champs de $3\text{MV}/\text{cm}$ à température ambiante et des courants de fuites de $0.2\text{A}/\text{mm}$ à 100V à 250°C . Ces résultats sont obtenus sur des dispositifs à doigts inter-digités espacés de $10\mu\text{m}$.

La technologie développée est basée sur une implantation multiple avec des énergies et des doses variant de 20 à 180eV et de 10^{14} à 10^{15} cm⁻² respectivement [10]. Ces énergies ont été déterminées par simulation au moyen du logiciel commercial STRIM. La distribution des ions He⁺ sur la totalité de la zone à isoler a été optimisée pour des couches actives AlGa_N de 30nm d'épaisseur et pour laquelle l'isolation est effective au-delà de 200nm sous la surface.

Notons que l'isolation par ions Ar⁺ est aussi envisageable mais pour une meilleure isolation de la couche tampon, nous avons opté pour un élément plus léger.

Un masque de résines optiques est utilisé pour protéger les zones actives des transistors. Ce masque est constitué d'un bicouche de résines positives à base de LOR10A/S1828. La résine (S1828) supérieure du masque est dégradée par l'implantation. Celle-ci polymérise et devient difficile à retirer. Non endommagée, la résine inférieure (S1828) est dissoute par la suite dans un bain de Remover PG chauffé à 70°C. Le profil en casquette obtenu permet de faciliter le *lift-off* et obtenir des surfaces propres après l'implantation.

3.4 Contacts Schottky

3.4.1 Choix de la métallisation

L'électrode de grille d'un transistor à effet de champ est un contact de type Schottky. Ce contact doit respecter un certain nombre de critères pour assurer une bonne commande du transistor. En effet, celui-ci doit posséder en polarisation directe, une hauteur de barrière la plus élevée possible associée à un coefficient d'idéalité proche de l'unité, et en polarisation inverse, un courant de fuite très faible et une tension de claquage élevée.

De plus, il doit disposer d'une bonne adhérence métallique avec la surface de la couche barrière Al_xGa_{1-x}N pour éviter un décollement indésirable de la grille lors de l'étape du *lift-off*. Mais encore, il doit présenter une bonne stabilité thermique en raison des températures très élevées que peut atteindre le canal 2D en fonctionnement. Et enfin, il doit présenter une faible résistance métallique R_G en vue de réduire l'impédance d'entrée, maximiser le gain MAG, minimiser le bruit NF_{min} et augmenter les fréquences F_T et F_{max}.

La hauteur de barrière du contact Schottky est fortement dépendante du choix de la métallisation de grille lorsque l'interface Métal-Semiconducteur est dépourvue de pièges. En

conséquence, notre choix s'est porté sur les métaux à grand travail de sortie destinés à être déposé sur un matériau nitrure à large bande interdite à résiduel type N. Des métaux comme le Pt, Ni, Pd et Au sont couramment utilisés pour la réalisation du contact redresseur.

En fonction de la nature du substrat et de la tension appliquée, le canal d'un transistor AlGa_xN/GaN peut être amené à chauffer dans une gamme de températures comprises entre 180°C et 400°C. C'est la raison fondamentale pour laquelle le contact de grille doit être en mesure de présenter une stabilité thermique au-delà de 400°C.

La stabilité thermique des contacts est réalisée en limitant la miscibilité des métaux entre eux, et est obtenu par l'ajout d'une couche intermédiaire constituée d'un métal réfractaire comme le Molybdène ou le Platine. Cependant, ces derniers sont très contraints et pour améliorer le mouillage entre l'Or et ces métaux, on y intercale une couche de Titane. En s'inspirant de la littérature, plusieurs schémas de métallisations ont été testés dans le cadre de la thèse de J-C Gerbedoen [7], tels que Pt/Au, Pt/Ti/Au, Ni/Au, Ni/Mo/Au, Mo/Au etc... par évaporation au canon à électrons et TiN/Au, TiW/Au, etc... par pulvérisation cathodique.

Les résultats obtenus sont foncièrement différents en fonction de la technique de dépôt, du prétraitement de la surface, des épaisseurs du schéma de métallisation, des conditions de recuit et de la qualité de la couche.

Les contacts constitués par le Ni comme couche d'accroche sont celles, parmi toutes les métallisations expérimentées, qui ont offert statistiquement la meilleure adhérence avec la couche barrière Al_xGa_{1-x}N.

3.4.2 Technologie de Grille

3.4.2.1 Grille en Té

3.4.2.1.1 Généralités

L'amélioration des performances fréquentielles des transistors nécessite une réduction permanente de la taille des composants, requérant la réalisation de grilles submicroniques (<1µm). Irrémédiablement, ce passage obligatoire engage une diminution des longueurs de grilles qui s'accompagne d'une augmentation significative de la résistance de grille R_G et qui limite la montée en fréquence (F_T et F_{max}) des transistors.

La réalisation de grilles sous forme de T  permet de palier   ce probl me, en offrant   sa base, un pied de grille de longueur submicronique L_G et   sa hauteur, un chapeau de grille assez large pour maintenir la r sistance R_G faible. Cette  tape est r alis e par lithographie  lectronique. Cette forme si particuli re en T  des grilles peut  tre r alis e au moyen de deux technologies : la technologie ‘‘nitruress’’ et les technologies ‘‘ bicouches ’’ou ‘‘ tricouches ’’ de r sines. La grille   t te d coll e constitue une variante de ces deux technologies.

3.4.2.1.2 Technologie ‘‘multicouches de r sines’’

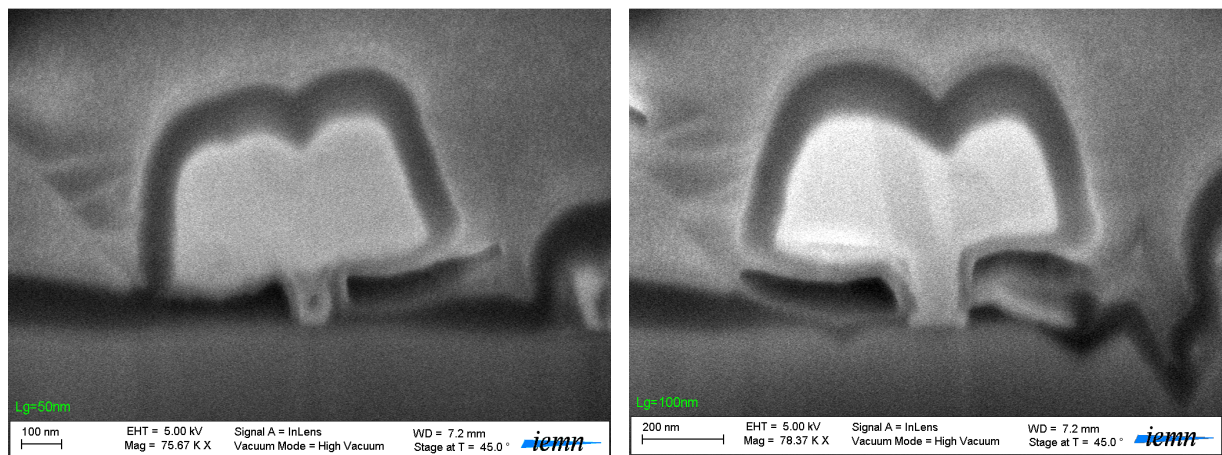
Les syst mes multicouches de r sines ont connu un engouement particulier depuis le d but des ann es 80 avec le d veloppement des grilles en T  [11]. En plus de pr senter de tr s faibles capacit s parasites, cette technologie a pour avantage d’ tre tr s rapide   mettre en  uvre, du fait qu’elle n cessite un seul passage au masqueur  lectronique. L’empilement utilis  durant cette th se est bas  sur un tricouche de r sines  lectroniques positives PMMA950K/COPO33%/PMMA495K [12]. Il existe n anmoins d’autres empilements de r sines dans la litt rature permettant de r aliser aussi des grilles en T  submicroniques. Citons par exemple le tricouche ZEP/PMGI/ZEP [13]. Chacune de ces r sines poss de une sensibilit  diff rente au faisceau d’ lectrons.

Parmi les trois r sines utilis es, la r sine PMMA950K est la moins sensible d’entre toutes et donc, poss de la plus haute r solution. Ainsi, elle a  t  choisie pour d finir le pied de grille. A l’oppos  de celle-ci, la r sine COPO33% est la plus sensible du tricouche, et par cons quent, celle-ci permet de r aliser des motifs de plus grosses tailles n cessitant une moins bonne r solution. De ce fait, elle a  t  utilis e pour d finir le chapeau de grille. De sensibilit  interm diaire, la derni re couche PMMA495K de l’empilement de r sine permet d’obtenir un profil casquette et ainsi parvenir   une meilleure d finition de la t te de grille afin de faciliter le *lift-off* du m tal.

Deux doses diff rentes sont utilis es pour r aliser le profil en T  souhait , l’une pour d finir le pied de grille et l’autre pour d finir les lat raux de grille. Exp rimentalement, la r gion du pied de grille est expos e en premier lieu avec une dose d’ criture relativement  lev e suivi des lat raux de grille avec une dose moindre. Ces deux r gions sont disjointes et s par es par un espaceur de 10nm pour limiter les effets de proximit . Chacune des trois

résines utilisées ci-dessus est ensuite révélée successivement et sélectivement au moyen des trois solutions suivantes : le toluène pour la couche PMMA495K, le Méthanol/IPA (1:3) pour la couche COPO33%, et le MIBK/IPA (1:2) pour la couche PMMA950K. Cette dernière étape est cruciale pour l'obtention du profil casquette.

Toutefois, il convient de noter que l'écriture électronique sur une hétérostructure à large bande interdite sur substrat isolant s'accompagne d'une accumulation de charges en surface de l'échantillon, ce qui a pour effet de dévier électrostatiquement le faisceau d'électrons pendant le processus d'écriture. Ce problème est résolu suite au dépôt d'un film mince de germanium de 5 nm d'épaisseur sur le tricouche de résines PMMA950K/COPO33%/PMMA495K. Ceci permet d'évacuer l'excès d'électrons via une électrode à la masse. La **Figure IV.7** montre une vue en coupe au FIB des grilles en Té fabriquées après métallisation avec des longueurs de pieds de grille L_G allant de 50nm à 500nm.



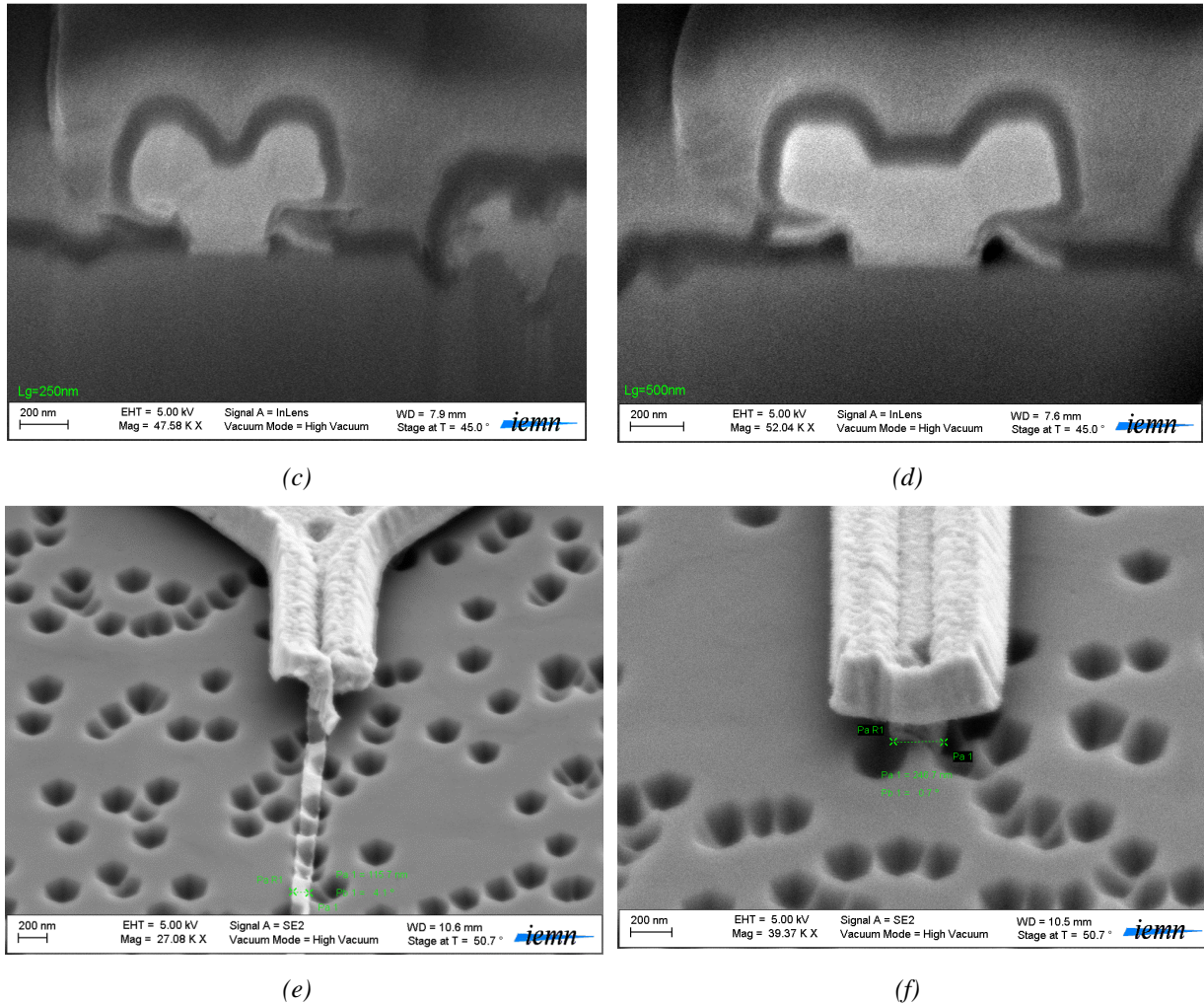


Figure IV.7 : Vues en coupe au FIB des grilles en Té avec des longueurs de pieds L_G variables (a) 50nm (b) 100nm (c) 250nm (d) 500nm (e) 100nm bis (f) 250nm bis.

3.5 Passivation Nitrure

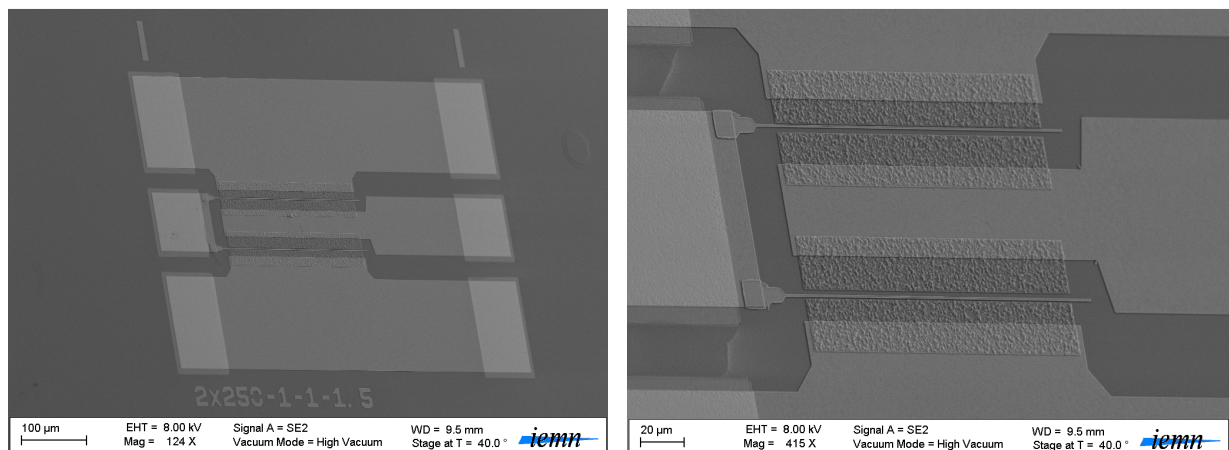
A haute fréquence et sous des tensions de fonctionnement élevées, les performances des transistors se dégradent drastiquement. En conséquence, la densité de puissance maximale obtenue est beaucoup plus faible que ce que prévoient les caractéristiques I(V) en régime statique. La dispersion du courant en hyperfréquence est généralement associée aux défauts dans l'hétérostructure, tels que le piégeage des électrons par les états de surface ou sub-surface de la couche barrière $Al_xGa_{1-x}N$, ou encore des pièges situés aux interfaces ou dans la la couche tampon GaN. Il n'en demeure pas moins que les performances des transistors en

régime dynamique peuvent être drastiquement améliorées par un traitement de surface adéquat et/ou une passivation de cette dernière avec le choix d'un diélectrique approprié.

Le plus souvent, il a été constaté que l'étape de passivation s'accompagne d'une dégradation du contact de grille, ce qui réduit inévitablement la tension de claquage et limite fortement le fonctionnement du transistor en puissance. En d'autres termes, la couche de passivation doit être en mesure d'atténuer à la fois les effets de dispersion (*drain lag et gap lag*) et les courants de fuites de la grille. Le dépôt d'un bicouche de diélectriques $\text{SiO}_2/\text{Si}_3\text{N}_4$ (100/50nm) est une technique standard usuellement utilisée par l'équipe Puissance pour réaliser cette étape [14]. La plupart des couches déposées au cours de cette thèse sont effectuées par PECVD à 340°C dans un bâti *Oxford Plasmalab 80*.

3.6 Plots d'épaississements

Cette étape est généralement la dernière pour la fabrication du composant (*Figure IV.8*). Elle consiste à recouvrir les plots d'accès de grilles et les contacts ohmiques par des plots métalliques élargis, lesquels s'étalent sur les zones isolées du composant. Les dimensions et les espacements de ces plots sont définis de façon à présenter une impédance adaptée à 50Ω pour pouvoir réaliser des mesures adaptées sous pointes en hyperfréquence. Ces plots sont composés d'un bicouche Ti/Au (100/400nm) et sont généralement déposés par évaporation au canon à électrons.



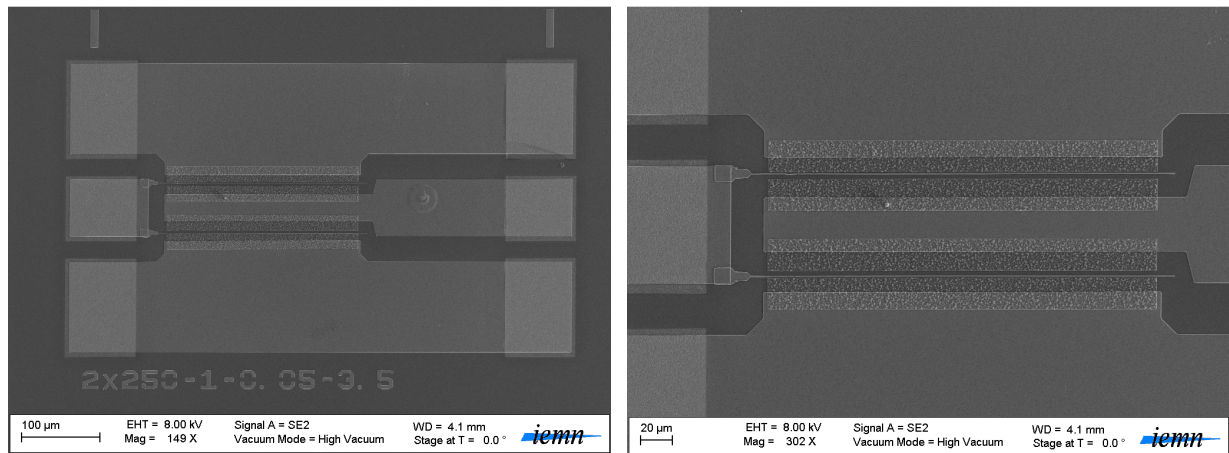


Figure IV.8 : Images MEB des composants finalisés.

4 Etude des propriétés de transport

4.1 Etude de la résistance de la couche tampon

Nous avons établi au tout début de ce chapitre les paramètres permettant de comprendre le fonctionnement du transistor et leur impact sur les performances de ce dernier. Plusieurs études ont montré une amélioration des propriétés de transport avec l'ajout d'une couche d'exclusion AlN dans la couche barrière juste en amont du puits. Cependant, pour améliorer nos structures, nous avons opté pour différentes solutions dont celle qui consiste à augmenter la résistance de la couche tampon soit avec un matériau à plus grand gap (AlGaN) soit en y incorporant un nouvel élément : le bore. Ce dernier permet aussi d'améliorer le confinement des porteurs dans le puits [15] et c'est ce que nous tâcherons de confirmer dans le cadre de ce travail.

4.1.1 Couche tampon « type » AlGaN

Le GaN est un semiconducteur à large bande interdite et est par conséquent un excellent isolant électrique lorsqu'il n'est pas dopé. Cependant, l'oxygène en site substitutionnel d'azote est un dopant type N pour le GaN lequel est d'autant plus marqué que l'épaisseur de la couche est faible. La solution la plus commune consiste à faire croître des couches épaisses nid mais celle-ci n'est pas toujours aisée, il faut donc envisager une autre solution. Incorporer

de l'aluminium dans la couche tampon présente un double avantage, celui d'augmenter le gap du matériau donc son caractère isolant électrique et aussi de consommer certainement tout ou partie l'oxygène résiduel en formant un oxyde.

L'ensemble des échantillons étudiés a été épitaxié par l'équipe de A. Ougazzaden du laboratoire Georgia Tech Loraine dans le cadre d'un projet ANR (intitulé GABORE). Cette première étude porte sur les propriétés électriques de la couche tampon AlGaN en fonction de son pourcentage d'aluminium laquelle est réalisée sur des *templates* GaN sur substrat saphir commerciaux. La composition des échantillons étudiés est présentée dans le **Tableau IV.1**.

Echantillons Série 4	1 ^{ère} couche tampon	2 ^{ième} couche tampon	Ep. 2 ^{nde} couche
T451	GaN (3.5µm)	AlGaN (25%)	300nm
T452		AlGaN (7%)	
T453		GaN	
T455		AlGaN (25%)	

Tableau IV.1 : Structure des échantillons épitaxiés dans le cadre de l'étude de la couche tampon AlGaN.

La résistance carrée de ces couches a pu être déterminée en premier lieu, en effectuant des mesures sans contact et à l'obscurité (**Tableau IV.2**). La surface d'étude est de 1cm². Les résultats obtenus montrent que l'accroissement du pourcentage d'aluminium dans la couche tampon GaN a pour effet d'augmenter son caractère d'isolation électrique. Cependant, les résultats ne sont pas reproductibles (cf. entre T451 et T455) et l'évolution n'est pas percutante. L'inhomogénéité est de l'ordre de 20% pour ces échelles de surface sur un échantillon de ¼ de 2 pouces.

Résistance carrée (Ω/\square)	T451	T452	T453	T455
mesure 1	4110	3550	1640	5650
mesure 2	4380	3450	1820	7820
mesure 3	4690	4310	1655	7710
mesure 4	5000	3700	1548	6060
mesure 5	4160	4200	1527	6850
mesure 6	4200	4040	1651	
mesure 7		3580		
Moyenne	4438	3833	1640	6818

Tableau IV.2 : Mesures sans contact des couches tampons AlGaIn.

Afin de quantifier l'inhomogénéité de la résistance carrée sur de petites surfaces, nous avons réalisé des mesures à effet Hall sur une zone active de $50 \times 50 \mu\text{m}^2$ en différents points de l'échantillon, et établi une cartographie entre le bord et le centre. En effet, le substrat de saphir utilisé est un très mauvais conducteur thermique et le bilan thermique vu par les contacts électriques situés au centre ou au bord de la plaque n'est pas le même après recuit des contacts ohmiques. Les résultats obtenus montrent que les couches sont d'autant plus inhomogènes que la surface active est petite. Les valeurs du **Tableau IV.3** sont moyennées sur l'ensemble de la couche.

Echantillons Série 4 (1)	Taux Al (%)	Résistance carrée (Ω/\square)	Coef. Hall (m^2/C)	Mobilité ($\text{cm}^2/\text{V.s}$)	Densité Electrons (cm^{-3})
T451	25	2991	-1,28	3,05	$4,86 \times 10^{14}$
T452	7	916	-0,17	2,55	$3,66 \times 10^{15}$
T453	0	310	-0,063	1,79	$1,11 \times 10^{16}$
T455	25	5031	-4,43	4,71	$1,41 \times 10^{14}$

Tableau IV.3 : Mesures sans contact des couches tampon AlGaIn.

A titre comparatif, nous avons présenté sur une même figure, les caractéristiques I-V mesurées sur chacun des échantillons entre deux contacts ohmiques distants de $32\mu\text{m}$ (Figure IV.9). Ces mesures ont permis de retrouver une évolution assez similaire de la résistance des échantillons en fonction du taux d'aluminium. La Figure IV.9 montre une différence de 2 ordres de grandeur entre la couche de référence et les échantillons AlGa_xN.

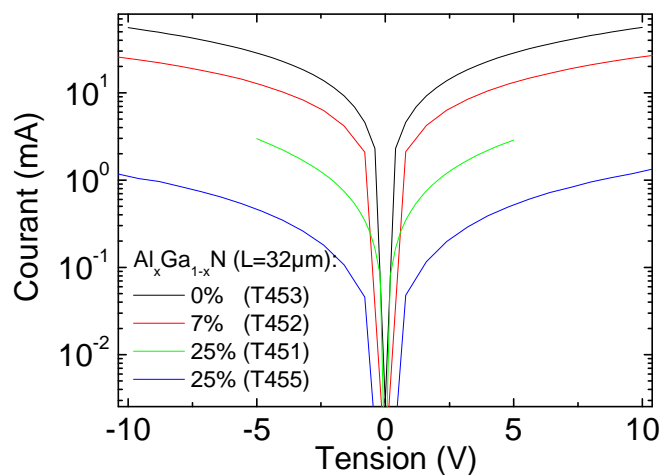


Figure IV.9 : Evolution des caractéristiques I(V) en fonction du taux d'aluminium incorporé dans la couche tampon GaN.

4.1.2 Couche tampon « type » B GaN

La seconde solution pour améliorer le caractère isolant de la couche tampon consiste à y introduire du bore afin de la remplacer entièrement ou en partie. L'alliage B GaN est un nouveau matériau très peu étudié par la communauté scientifique. La difficulté dans ce genre de croissance est d'éviter la séparation de phase GaN-BN laquelle apparaît à partir d'un taux d'incorporation de 1% de bore [16]. En effet, comme observé sur la Figure IV.10 avec une matrice de 3% de bore dans du GaN wurtzite, il se forme des clusters et/ou des nano-précipités de $\text{B}_{0,4}\text{Ga}_{0,6}\text{N}$ cubique. Généralement, ces nano-objets s'accompagnent de joints de grains et autres défauts structuraux lesquels dégradent la qualité cristallographique du matériau et engendre une croissance quasi-3D.

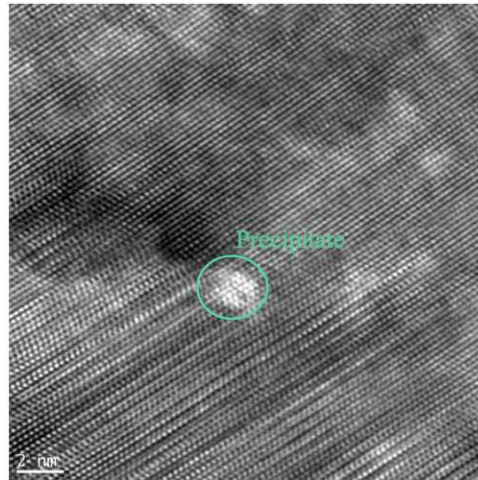


Figure IV.10 : Image TEM haute résolution de nanoprécipités de $B_{0,4}Ga_{0,6}N$ cubique dans une matrice de $BGaN$ wurtzite contenant 3% de Bore.

Dans ce travail, nous nous sommes limités à des couches comportant une faible composition de bore en volume (jusqu'à 1%) afin de minimiser la rugosité de surface laquelle est incompatible avec l'amélioration des propriétés de transport dans le 2DEG. Le **Tableau IV.4** permet de récapituler la composition des échantillons étudiés.

Echantillons	Couche B GaN	
	Taux B (%)	Epaisseur (nm)
T478 (réf.)	0	450
T479	0,65	400
T480	0,95	400
T481	0,86	400

Tableau IV.4 : Structure des échantillons épitaxiés dans le cadre de l'étude de la couche tampon B GaN.

En raison du caractère très résistif de ces couches borées, les mesures à effet Hall ne nous ont pas permis d'estimer la résistance carrée de ces échantillons. Seule la couche témoin T478 a pu être mesurée. L'ensemble des mesures effectuées sur cette couche sont résumés dans le **Tableau IV.5**. La disparité des mesures sur cet échantillon est liée au caractère non ohmique de nos contacts plutôt qu'à une inhomogénéité de la plaque. En effet, il est physiquement

impossible d'obtenir des contacts ohmiques sur un matériau non dopé. Toutefois, la limite de l'appareillage nous laisse présager des résistances bien au-delà de $100\text{k}\Omega$

Echantillon T478 (réf)	Résistance carrée ($\text{k}\Omega/\square$)	Coef. Hall (m^2/C)	Mobilité ($\text{cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$)	Densité Electrons (cm^{-3})
Mesure 1	30	3,63	1,85	$1,7 \times 10^{14}$
Mesure 2	24	1,93	1,15	$3,2 \times 10^{14}$
Mesure 3	29	3,48	1,20	$1,8 \times 10^{14}$
Mesures n	Non-mesurables			

Tableau IV.5 : Mesures à effet Hall des couches tampons B GaN.

De la même façon que dans l'étude précédente de la couche tampon AlGaIn, nous avons effectués des mesures I-V entre deux contacts ohmique espacés de $32\mu\text{m}$ afin d'établir une étude comparative entre ces couches (Figure IV.11). Le résultat de ces mesures nous indique clairement que plus le pourcentage de bore augmente et plus la couche est résistive. La couche T480 avec 0,95% de Bore a permis d'obtenir le meilleur résultat. Une résistance carrée de l'ordre de $304\text{M}\Omega$ a été déterminée.

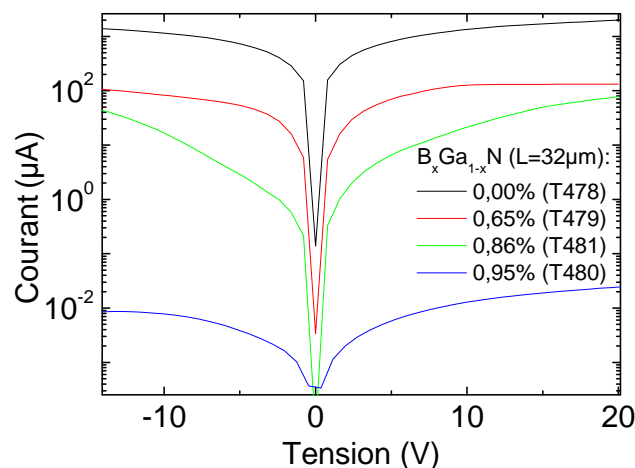


Figure IV.11 : Evolution des caractéristiques I(V) en fonction du taux de bore incorporé dans la couche tampon GaN.

Le **Figure IV.12** montre une différence de 5 ordres de grandeur entre la couche de référence et les échantillons B GaN. La conclusion évidente de cette étude est que l'isolation est bien plus efficace après incorporation du bore dans une matrice de GaN que ne l'est l'aluminium comme le montre cette même figure.

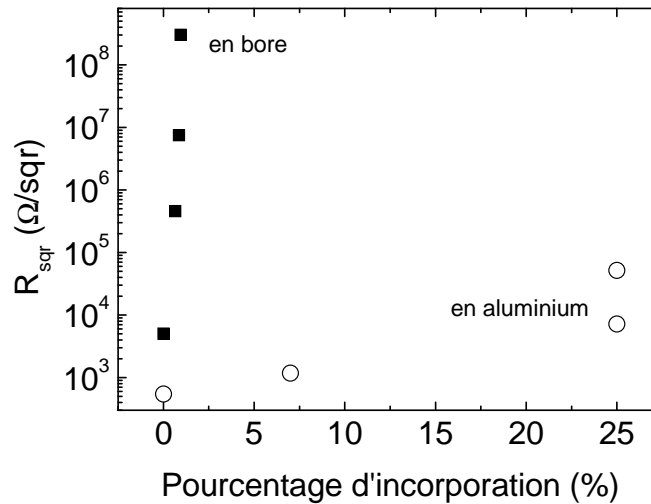


Figure IV.12 : Evolution de la résistance carrée des échantillons en fonction du taux d'incorporation d'aluminium ou de bore.

Remarquons que le bore à faible concentration dans une matrice de GaN présente un bowing et le gap du matériau résultant est réduit de 0,15eV pour 1,8% de bore par rapport au GaN [17]. L'augmentation du caractère isolant suite à l'incorporation du bore peut être attribuée soit à la dégradation cristallographique du matériau ou à un éventuel effet de compensation par le bore lui-même ou par la formation d'un complexe qui lui est associé. Etant donné les concentrations de bore utilisées, nous n'avons pas de certitude sur son réel rôle [4].

4.2 Etude des premières structures de transistors

L'équipe partenaire du laboratoire Georgia Tech Loraine a débuté la réalisation de transistors à hétérostructure AlGaN/GaN sans expérience dans le domaine au préalable. Les premières séries d'échantillons ont été consacrées à la maîtrise d'une épitaxie de référence « AlGaN/GaN » dont l'objectif premier fut l'obtention d'un gaz d'électrons bidimensionnel.

4.2.1 Structures « type » BAlGaN/GaN/BGaN

Au tout début de ce projet, deux structures d'essais contenant du bore ont été réalisées sur substrat SiC (série 1). Notons que ces premières couches ne tiennent pas compte de l'étude présentée préalablement. Nous avons introduit des couches BGaN de compositions et d'épaisseurs différentes dans la couche tampon GaN. Nous avons également choisi d'incorporer 3% de bore dans la couche barrière AlGaN, avec une épaisseur de 18nm et un taux d'aluminium de 27%. La composition exacte des structures épitaxiées est résumée dans le **Tableau IV.6**, ci-dessous :

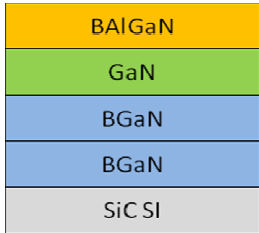
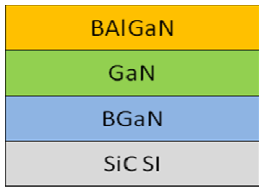
Série 1	Structure	Remarques
T162		BAlGaN (B : 3%, Al : 27%, e ~ 18nm) GaN (e~20nm) BGaN (B : 2,4%, e~50nm) BGaN (B : 1,6%, e~470nm) Substrat SiC
T169		BAlGaN (B : 3%, Al : 27%, e ~ 18nm) GaN (e~20nm) BGaN (B : 1,6%, e~600nm) Substrat SiC

Tableau IV.6 : Hétérostructure des transistors épitaxiés de la série d'échantillon n°1.

Les mesures TLM effectués sur ces échantillons concluent à l'inexistence d'un gaz 2D d'électrons à l'interface de l'hétérostructure (**Figure IV.13**). En effet, la présence d'un gaz à l'interface à quelques dizaines de nanomètre de la surface aurait dû faciliter la formation des contacts ohmiques après un recuit à haute température. Nous constatons que l'effet du recuit est insuffisant au centre de l'échantillon T169. Ce comportement est typique d'un isolant « n.i.d ». Ce qui n'est pas le cas en bord d'échantillon où nous pouvons observer la formation d'un contact plus ohmique entre deux contacts électriques sur une échelle TLM. Le courant à saturation devrait augmenter avec les distances inter-électrodes les plus petites ce qui prouve l'inhomogénéité de la couche sur de très courtes portées.

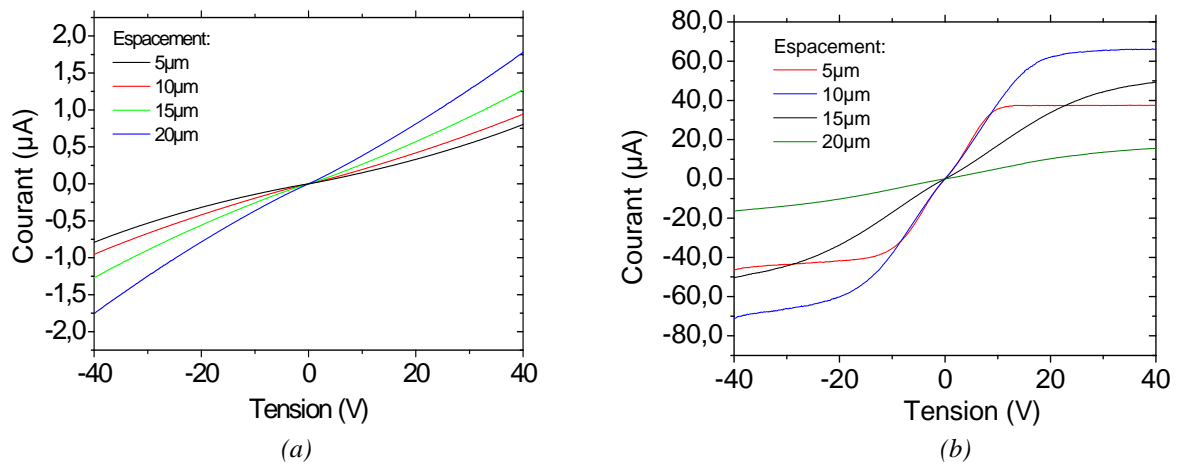


Figure IV.13 : Mesures $I(V)$ réalisées sur des échelles TLM situées (a) au centre et (b) au bord de l'échantillon.

Les mesures TLM effectuées sur l'échantillon T162 diffèrent peu des derniers résultats. La Figure IV.14 donne un exemple de contacts ohmiques mesurés sur le bord de la couche. Cette fois, la loi d'échelle est bien respectée et ceci pour les 4 contacts électriques d'une même échelle TLM. Cette constatation va dans le sens d'une couche plus homogène. Cependant, nous retrouvons le comportement d'un isolant électrique avec des courants à saturation de l'ordre de quelques dizaines de micro-ampères. Par conséquent, il se pourrait que le recuit à haute température ait activé des dopants et formé un MESFET. Ces couches restent trop résistives pour pouvoir y faire des mesures à effet Hall (limite de l'appareil $<50-100k\Omega$).

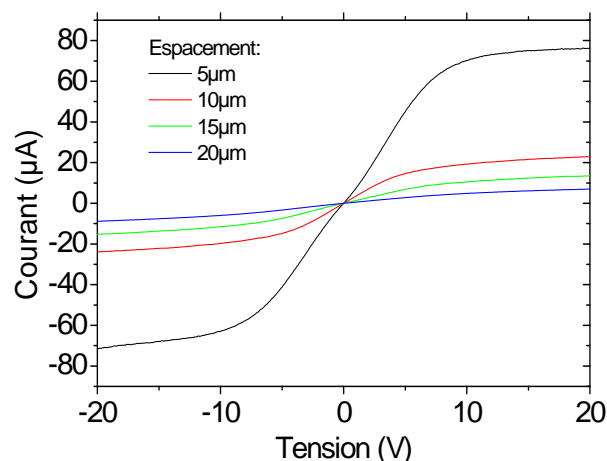


Figure IV.14 : Mesures $I(V)$ réalisées sur des échelles TLM situées au bord de l'échantillon.

Au vu des résultats TLM obtenus sur la couche T162, des grilles de $2\mu\text{m}$ (Mo/Au) ont été déposées. Ces grilles n’ont pas tenu sur les bords mais uniquement au centre de l’échantillon, là où il n’y a pas de courant. Ces grilles présentent bien un comportement redresseur, avec une tension de pincement (V_p) relativement très petite. La mesure de la transconductance g_m ($75\mu\text{S}/\text{mm}$) en fonction de V_{GS} nous a permis d’estimer V_p à $-0,7\text{V}$. La présence d’un gaz 2D à 20nm sous la surface, aurait dû donner une tension de pincement autour de -3V et -5V . Dans notre cas, nous pouvons constater que le courant I_{DS} en fonction de V_{GS} n’est pas homogène sur toute la plaque (Figure IV.15).

Nous pouvons aussi constater la bonne tenue en tension de la Schottky (I_{GS} en fonction de V_{GS}), avec un courant de fuite qui varie en fonction de la distance drain-source. La Figure IV.15 montre un courant de fuite en polarisation inverse de $5\text{-}6\mu\text{A}$ à -15V et un courant de saturation d’un peu moins de $100\mu\text{A}$. Les mesures $I_{GS}(V_{DS})$ en direct, nous ont permis d’extraire des hauteurs de barrière comprises entre $0,61$ et $0,69\text{eV}$ associées à des coefficients d’idéalité autour de $2,25$.

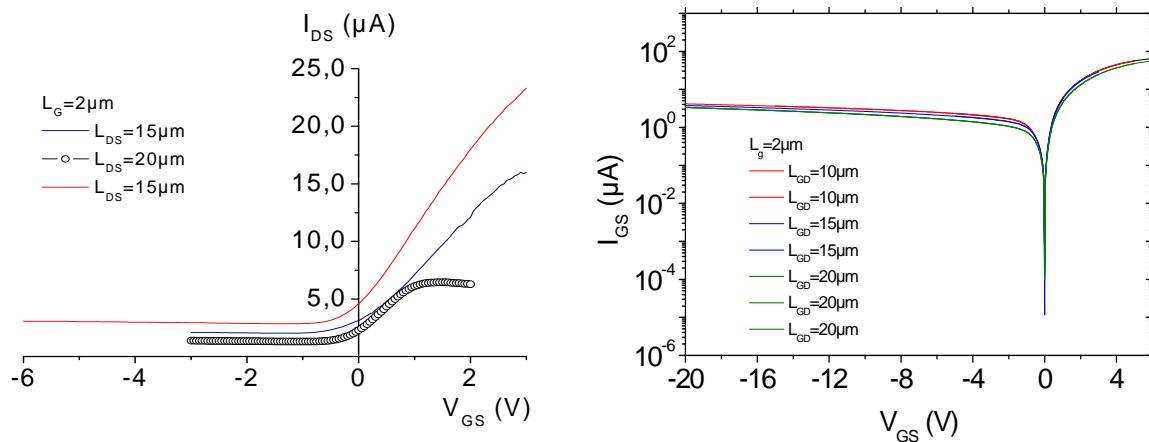


Figure IV.15 : Mesures $I_{GS}(V_{GS})$ sur des grilles de $2\mu\text{m}$, pour une tension appliquée $V_{DS}=10\text{V}$ (sur le bord de l’échantillon T162).

La Figure IV.16 présente une caractéristique de sortie $I_{DS}(V_{DS})$ du transistor. En présence de courants de fuites de grille aussi importants, le pincement du transistor est difficile à obtenir. La commande n’est pas parfaite mais l’effet transistor y est présent. Etant donné la tenue de la grille en polarisation directe, nous avons représenté la caractéristique de sortie du

transistor en régime d'accumulation jusqu'à +6V. Remarquons que le courant de saturation pour une distance source-drain de $10\mu\text{m}$ est un peu moins de $100\mu\text{A}$. Vu le pseudo-pincement de ces transistors, le composant s'apparente davantage à un MESFET qu'à un HEMT.

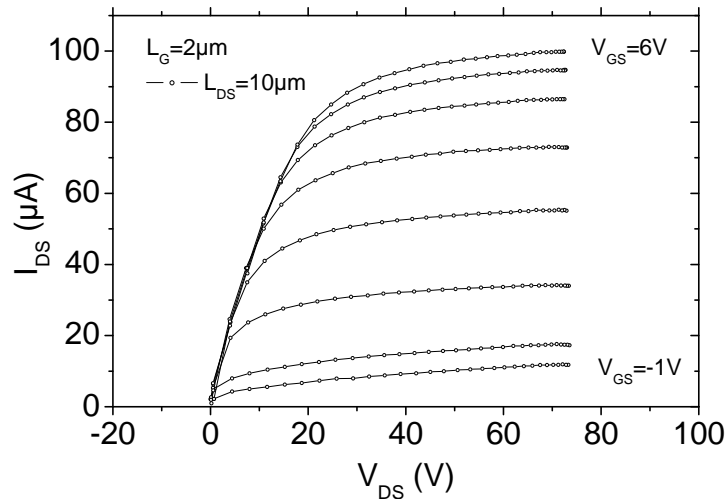


Figure IV.16 : Caractéristique de sortie d'un transistor en régime d'accumulation avec pas de 1V ($L_G=2\mu\text{m}$, $W=100\mu\text{m}$, $L_{DS}=10\mu\text{m}$).

4.2.2 Structures « type » AlGaN/BGaN/GaN et AlGaN/GaN/BGaN

Suite à ces résultats, l'étude sur l'effet de l'incorporation du bore dans la couche barrière d'un transistor a été abandonnée et l'on s'est consacré exclusivement à l'étude de l'isolation de la couche tampon. Dans ce cadre, d'autres structures contenant du bore ont également été réalisées sur substrat GaN (série 3). Ces structures présentent différents taux d'aluminium dans la couche barrière AlGaN et des couches BGaN de différentes compositions. Le **Tableau IV.7** ci-dessous regroupe l'ensemble des structures épitaxiées:



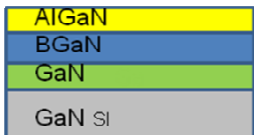
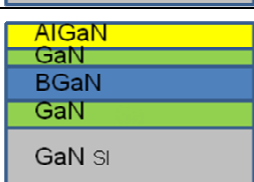

Série 3	Structure	Remarques
T334		AlGaN (Al : 20.5%, e~30nm) GaN (e~300nm) Substrat template GaN /Al ₂ O ₃
T335		AlGaN (Al : 17%, e~30nm) GaN (e~150nm) Substrat template GaN /Al ₂ O ₃
T336		AlGaN (Al : 16%, e~30nm) B GaN (B : 0,6%, e~90nm) GaN (e ~50nm) Substrat template GaN /Al ₂ O ₃
T337		AlGaN (Al : 16%, e~30nm) GaN (e ~10nm) B GaN (B : 0,6%, e~90nm) GaN (e ~ 50nm) Substrat template GaN /Al ₂ O ₃
T344		AlGaN (Al : 17%, e ~30nm) GaN (e ~10nm) B GaN (B : 1,18%, e~90nm) GaN (e ~50nm) Substrat template GaN /Al ₂ O ₃

Tableau IV.7: Hétérostructure des transistors épitaxiés de la série d'échantillons n°3.

4.2.2.1 Etude morphologique de la surface

Les résultats des caractérisations morphologiques menées systématiquement sur toutes les hétérostructures ont montré qu'elles présentent toutes des *V-shaped* en surface et celles comportant plus de 1% de bore admettent une morphologie de type tridimensionnelle. Par conséquent, toutes ces structures ont des interfaces très rugueuses et plus encore pour les hétérostructures comportant des couches avec plus de 1% de bore. Un exemple de morphologie de surface relative à l'échantillon T337, a été observé par microscopie à force atomique (Figure IV.17) ainsi qu'au microscope électronique à balayage (Figure IV.18). Les rugosités mesurées sur des surfaces de $5 \times 5 \mu\text{m}^2$ sont de l'ordre de 0,35nm, en accord avec celles données dans la littérature. Les clichés obtenus sur de plus larges surfaces permettent de déterminer la densité de dislocations émergentes et de « *V-defects* » de l'ordre de quelques

10^9cm^{-2} .

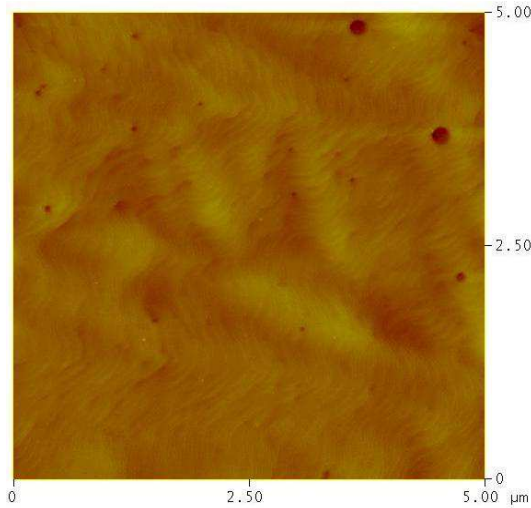


Figure IV.17 : Image AFM de la surface de l'échantillon T337.

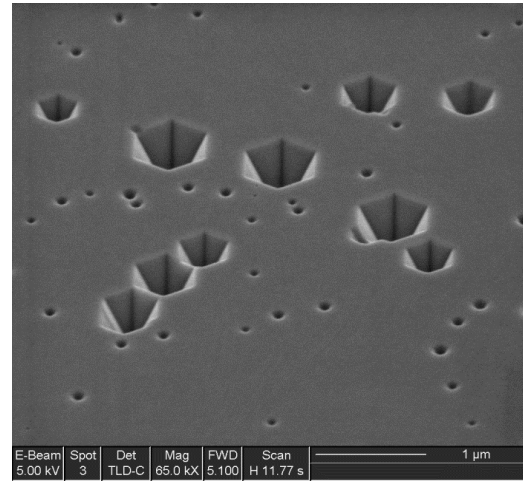


Figure IV.18 : Image MEB de la surface de l'échantillon T337.

4.2.2.2 Etude électrique des structures

Les mesures de Hall montrent pour l'ensemble des structures réalisées de la série 3, un comportement similaire à savoir : une résistance carrée qui varie en fonction des hétérostructures de 250 à 700Ω, une densité d'électrons variant de $1,5 \times 10^{15} \text{cm}^{-2}$ à $2 \times 10^{16} \text{cm}^{-2}$ et une mobilité comprise entre 0,4 et $37 \text{cm}^2/\text{V.s}$. Seule la couche T344 (90nm de $\text{B}_{1,18}\text{Ga}_{0,9882}\text{N}$) a donné des résultats différents à savoir : une résistance carrée non-homogène 950-2200Ω, une densité d'électrons variable $0,4\text{-}5 \times 10^{14} \text{cm}^{-2}$ et une mobilité de $13\text{-}39 \text{cm}^2/\text{V.s}$ (Tableau IV.8).

Echantillons Série 3	R_{\square} (Ω)	n_s (cm^{-2})	μ_n ($\text{cm}^2/\text{V.s}$)	Coef. Hall (C/m^2)
T334	603	$1,16 \times 10^{16}$	2,8	1,21
T335	239	$1,83 \times 10^{15}$	14,3	1,17
T336	438	$7,70 \times 10^{14}$	20,2	1,10
T337	484	$3,88 \times 10^{15}$	16,2	1,04
T344	542	$2,05 \times 10^{14}$	28,9	1,52

Tableau IV.8 : Mesures à effet Hall de la série d'échantillons n°3.

Au vu de ces résultats, on pourrait conclure que la présence d'un gaz d'électrons à 2D est quasi-inexistante, voire improbable. Il s'agirait davantage d'une conduction 3D dans le canal ou dans la couche barrière AlGaN. Cela ne veut pas dire forcément qu'il n'y a pas de puits à l'interface entre la barrière et la couche tampon mais que le courant mesuré se fait préférentiellement en volume. Les valeurs des mobilités mesurées en est la preuve. Il pourrait s'agir d'un dopage non intentionnel important (10^{19} à 10^{21} cm⁻³). Afin de s'affranchir de cette dernière hypothèse, des mesures $C(V)$ ont été réalisés sur ces hétérostructures (Figure IV.19).

Cependant, les contacts de grille présentent un courant de fuite très important sur toutes les structures étudiées. L'échantillon T334 est le seul à avoir pu donner des résultats quantifiables. Ces mesures ont permis de révéler la présence d'un dopage surfacique sur la première centaine de nanomètre et une densité 2DEG situé à 35nm sous la surface de quelques 10^{12} cm⁻² (Figure IV.20). De ce fait, cette densité d'électrons ne correspond pas aux valeurs obtenues par effet Hall. En effet, toutes ces conclusions peuvent être remises en cause étant donné que les *V-shaped* imposent un court-circuit entre le 2DEG et le contact de grille. Finalement, le bilan de cette étude prouve que la densité d'électrons 2DEG est relativement faible et que le bore incorporé sur une large épaisseur ne constitue pas une solution en soit.

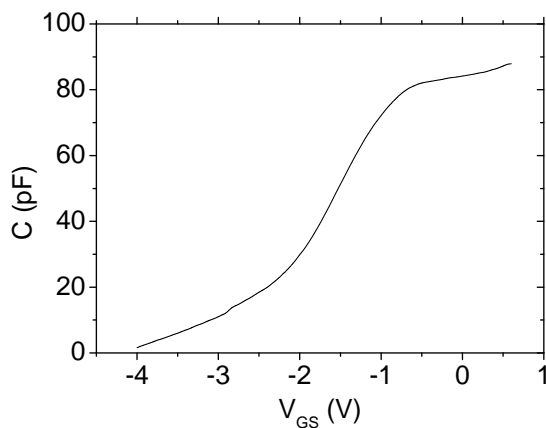


Figure IV.19 : Caractéristique $C_{GS}(V_{GS})$ mesurée sur des contacts Schottky circulaire de diamètre $200\mu\text{m}$ (échantillon T334).

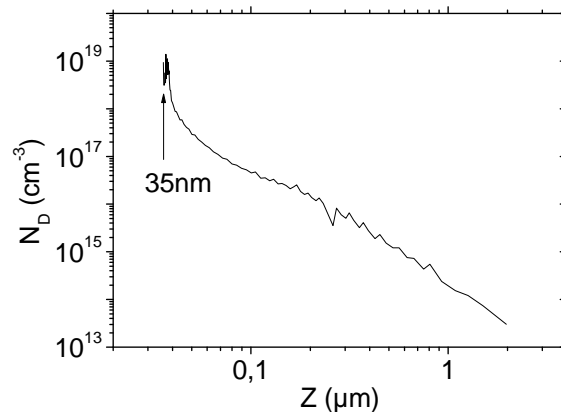


Figure IV.20 : Profil des donneurs N_D en fonction de la profondeur z de la structure (échantillon T334).

4.3 Etude des séries successives de transistors

4.3.1 Description des structures de couches

Les premiers résultats obtenus sur ces premières séries d'échantillons ont permis de conclure que la série 1 ne comportait pas de gaz d'électrons et que la série 3 ne présentait pas les résultats escomptés. Ces insuffisances ont été attribuées à un taux d'aluminium trop faible dans la couche barrière AlGa_N ainsi qu'à une épaisseur trop fine de la couche tampon GaN (quelques centaines de nm) (et à la présence de *V-shaped* dans une moindre mesure). Au vu de ces résultats, nous avons décidé de poursuivre notre étude en utilisant une contre-barrière B_{Ga}N. Les trois séries d'échantillons consacrées à cette étude (séries 5 à 7) sont composées d'un canal GaN et d'une couche barrière Al_xGa_{1-x}N. Ces deux matériaux sont non intentionnellement dopés. La couche tampon est constituée d'une épaisse couche GaN contenant une fine couche B_{Ga}N avec une épaisseur variable sur quelques nm et située à proximité du puits 2DEG.

La série d'échantillons n°5 a initialement un double objectif : d'une part, améliorer le confinement des porteurs dans le puits à l'aide d'une couche contre-barrière B_{Ga}N en diminuant progressivement l'épaisseur du canal GaN, et d'autre part, améliorer la morphologie de l'hétérostructure avec l'utilisation d'une fine épaisseur de contre-barrière B_{Ga}N allant de 2nm à 1nm. La série d'échantillons n°6 a pour but d'améliorer les performances du transistor en augmentant le taux d'aluminium dans la couche barrière AlGa_N. La série 7 permet d'étudier l'effet d'une couche de cap de GaN (de 2nm) en surface de l'hétérostructure. Les [Tableaux IV.9](#), [IV.10](#) et [IV.11](#) regroupent l'ensemble des structures réalisées dans le cadre des séries 5, 6 et 7.





Série 5	Structure	Remarques
T574		AlGaN (Al: 26%, 21nm) Canal GaN (20nm) B GaN (B: 1,0%, 2nm) Couche tampon GaN Substrat Al ₂ O ₃
T575		AlGaN (Al: 26%, 21nm) Canal GaN (10nm) B GaN (B: 1,0%, 1nm) Couche tampon GaN Substrat Al ₂ O ₃
T576		AlGaN (Al: 26%, 21nm) Canal GaN (20nm) B GaN (B: 1,0%, 1nm) Couche tampon GaN Substrat Al ₂ O ₃
T577		AlGaN (Al: 26%, 21nm) Canal GaN (40nm) B GaN (B: 1,0%, 1nm) Couche tampon GaN Substrat Al ₂ O ₃

Tableau IV.9 : Hétérostructure des transistors épitaxiés de la série d'échantillon n°5.

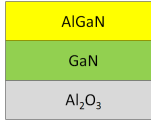



Série 6	Structure	Remarques
T602		AlGaN (Al: 26%, 21nm) Couche tampon GaN Substrat Al ₂ O ₃
T603		AlGaN (Al: 30%, 21nm) Couche tampon GaN Substrat Al ₂ O ₃
T604		AlGaN (Al: 30%, 21nm) Canal GaN (40nm) B GaN (B: 1,0%, 1nm) Couche tampon GaN Substrat Al ₂ O ₃
T605		AlGaN (Al: 30%, 21nm) Canal GaN (40nm) B GaN (B: 1,0%, 2nm) Couche tampon GaN Substrat Al ₂ O ₃

Tableau IV.10 : Hétérostructure des transistors épitaxiés de la série d'échantillon n°6.

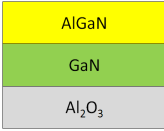



Série 7	Structure	Remarques
T745		AlGaN (Al: 30%, 21nm) Couche tampon GaN Substrat Al ₂ O ₃
T746		Couche Cap GaN (2nm) AlGaN (Al: 30%, 21nm) Couche tampon GaN Substrat Al ₂ O ₃
T747		AlGaN (Al: 30%, 21nm) Canal GaN (40nm) BGaN (B: 1,0%, 1nm) Couche tampon GaN Substrat Al ₂ O ₃
T748		Couche Cap GaN (2nm) AlGaN (Al: 30%, 21nm) Canal GaN (40nm) BGaN (B: 1,0%, 1nm) Couche tampon GaN Substrat Al ₂ O ₃

Tableau IV.11: Hétérostructure des transistors épitaxiés de la série d'échantillon n°7.

4.3.2 Caractérisation électrique de la couche active

Les propriétés de transport de ces couches ont ainsi pu être déterminées par des mesures à Effet Hall. L'ensemble des données obtenues sous illumination à la lumière blanche, (et moyennées sur plusieurs régions de l'échantillon) relative à la série 5 est résumé dans le **Tableau IV.12**. Une étude comparative entre les structures T575, T576 et T577 a permis d'obtenir une baisse conséquente de la résistance carrée lorsque l'on réduit l'épaisseur du canal GaN et dans le cas où l'épaisseur de la couche de contre-barrière BGaN est de 1nm.

L'interprétation de ces résultats peut se comprendre comme suit. La proximité de la couche B GaN avec l'interface AlGa N/GaN accentue le puits triangulaire de manière à améliorer le transport des électrons dans ce dernier et par conséquent la mobilité et la densité d'électrons s'en trouvent augmentés. Cependant, lorsque l'épaisseur de la couche de B GaN est doublée à 2nm (T574), la qualité cristallographique du GaN s'en trouve détériorée avec une croissance 2D-3D laquelle dégrade l'interface AlGa N/GaN et par conséquent les propriétés de transport de l'hétérostructure.

Echantillons Série 5	R_{\square} (Ω)	μ_n ($\text{cm}^2/\text{V.s}$)	n_s ($\text{cm}^{-2} \times 10^{12}$)	Coef. Hall (m^2/C)
T574	1805	590	5,90	107
T575	1076	973	6,03	104
T576	1794	632	5,58	112
T577	2964	519	4,23	149

Tableaux IV.12 : Mesures à effet Hall de la série d'échantillon n°5 (sous illumination).

La conclusion de cette étude est que la couche de B GaN doit être de 1nm au maximum et à proximité de l'interface AlGa N/GaN (10nm). Pour améliorer la densité de porteurs dans le canal et retrouver des densités d'électrons conventionnelles, une série a été consacrée avec des taux d'aluminium plus élevés dans la couche barrière (jusqu'à 30%). Le **Tableau IV.13** regroupe l'ensemble des structures HEMT synthétisées dans le cadre de la série 6, sous illumination à la lumière blanche et pour une moyenne faite sur 13 points de mesures :

Echantillons Série 6	R_{\square} (Ω)	μ_n ($\text{cm}^2/\text{V.s}$)	n_s ($\text{cm}^{-2} \times 10^{12}$)	Coef. Hall (m^2/C)
T602	2018	770	4,05	155
T603	1033	875	6,93	90
T604	816	1060	7,26	87
T605	966	843	7,71	40

Tableau IV.13 : Mesures à effet Hall de la série d'échantillons n°6 (sous illumination).

La première structure ayant présentée un comportement électrique similaire au HEMT AlGaIn/GaN standard est l'échantillon T406. Cette couche a ensuite été prise comme référence pour de nombreux essais tout comme la T602 avec un taux d'aluminium corrigé à 26%. Les résultats présentés sur le **Tableau IV.13** montrent une franche amélioration des propriétés de transport en augmentant la fraction molaire en aluminium dans la barrière AlGaIn. En accord avec nos attentes, la couche T603 a démontré une concentration N_s du gaz 2D plus élevée en comparaison à la couche référence T602.

L'insertion d'une fine couche borée B_{0.2}GaN dans couche tampon de la T604 nous a également permis d'obtenir un meilleur confinement des porteurs dans le canal lequel est associé à une nette amélioration de la mobilité des électrons. Nous avons essayé de réitérer ces résultats avec une couche B_{0.2}GaN plus épaisse (2nm - structure T605). Malheureusement, les résultats obtenus montrent une détérioration des propriétés de transport laquelle a été attribuée à une dégradation de la qualité matériau. Pour vérifier cette hypothèse, nous avons entrepris de refaire ces mêmes mesures mais à l'obscurité afin de mettre en évidence l'impact des pièges dans les structures.

Echantillons	R_{\square}	μ_n	n_s	Coef. Hall
Série 6	(Ω)	($\text{cm}^2/\text{V.s}$)	($\text{cm}^{-2} \times 10^{12}$)	(m^2/C)
T602	2260	700	3,99	157
T603	1156	824	6,60	95
T604	867	1027	7,05	89
T605	1058	790	7,51	84

Tableau IV.14 : Mesures à effet Hall de la série d'échantillon n°6 (dans le noir).

Le **Tableau IV.14** relève les résultats obtenus sous obscurité et montre que la résistance carrée augmente de près de 10% et évolue dans le temps. En effet, les électrons photo-générés sous illumination via des pièges profonds dans la bande interdite (jusqu'à 3.5eV) participent au courant de conduction et réduisent de ce fait la résistance carrée. Ce comportement a été relevé sur toutes les structures mais à des degrés différents. Concernant la série 7,

l'échantillon de référence est la T745 lequel montre des résultats relativement similaires à la meilleure couche de la série 6 (Figure IV.21).

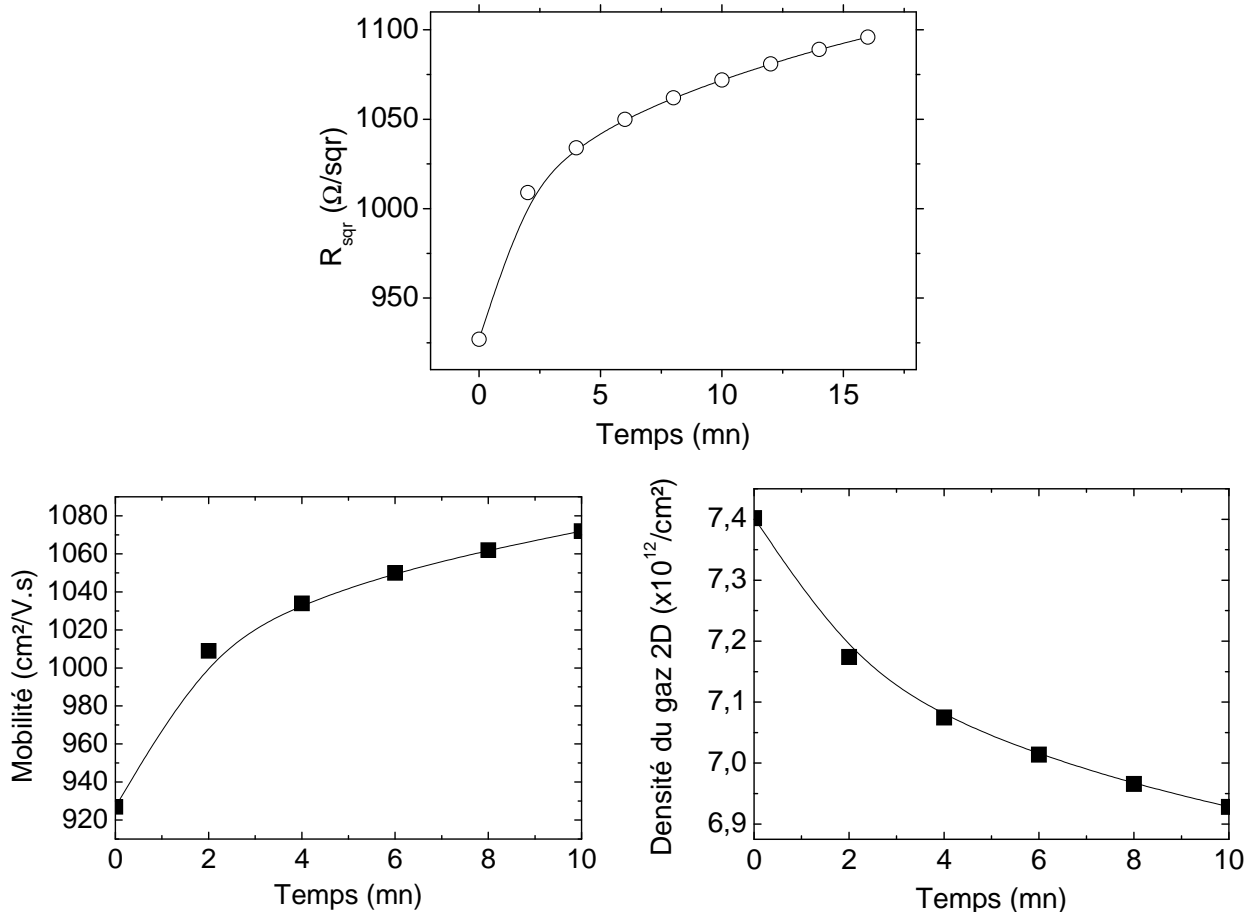


Figure IV.21 : Evolution dans le temps des mesures à effet Hall au centre de l'échantillon T745.

Les courbes de la Figure IV.21 montrent l'évolution temporelle des propriétés de transport sous obscurité de la couche test AlGaIn/GaN standard (T745). Nous pouvons constater que la résistance carrée et la mobilité augmentent dans le temps (de plus de 20%) alors que la densité d'électrons diminue en conséquence. Une interprétation possible à ce comportement est que les complexes de type donneur piègent les électrons sous obscurité alors que lorsqu'ils sont optiquement actifs sous illumination, ces derniers libèrent les électrons dans le canal avec une constante de temps de quelques minutes ($>3\text{mn}$). Ces derniers pourraient être assignés à de l'oxygène en site substitutionnel d'azote.

Pour limiter l'effet des pièges de surface, la couche T746 comporte en plus une couche de cap de GaN laquelle a pour objet de passiver ces états de surface (il en est de même pour la T748). Les résultats du **Tableau IV.15** montrent une nette amélioration des propriétés de transport stable ou avec une légère évolution temporelle de ces mêmes grandeurs de moins de 5% sur des constantes de temps de l'ordre de la dizaine de minutes. Cette expérience a permis de mettre en évidence l'impact des pièges de surface.

Pour estimer l'impact de la couche de contre barrière B GaN en volume de l'hétérostructure, la couche T747 est similaire à la couche test T745 avec une fine couche de B GaN en amont du canal. Là encore, les résultats obtenus montrent une nette amélioration des propriétés de transport avec une légère amélioration pour toutes les grandeurs en comparaison à celles obtenues avec la série 6. L'explication est la même que pour la série 6 à savoir une amélioration du confinement des porteurs dans le puits. Les pièges actifs dans le puits triangulaire de la T745 ne le sont plus sur le puits plus étroit de la T747.

Echantillons Série 7	R_{\square} (Ω)	μ_n ($\text{cm}^2/\text{V.s}$)	n_s ($\text{cm}^{-2} \times 10^{12}$)	Coef. Hall (m^2/C)
T745	851	906	7,50	76,7
T746	643	1034	8,98	70,3
T747	603	1097	10	63
T748	1024	843	7,34	86

Tableau IV.15 : Mesures à effet Hall de la série d'échantillons n°7.

5 Caractérisation électrique du composant

5.1 Caractérisation en régime continu

5.1.1 Caractérisation des contacts ohmiques

La métallisation de contact ohmique adoptée pour les série 5 et 6 est le séquentiel Ti/Al/Ni/Au standard. Les résultats obtenus avec cette métallisation sont fiables et reproductibles quel que soit la technique de synthèse de l'épitaxie (MBE, MOCVD) et la nature du substrat utilisé (Si, SiC, Al₂O₃, substrat composite...). L'extraction des paramètres du contact est réalisée au moyen de la méthode TLM sous 4 pointes et est détaillée en [Annexe B](#). Les [Figures IV.22](#) et [IV.23](#) présentent des exemples de caractéristiques courant-tension mesurées sur les échantillons des séries 5 et 6.

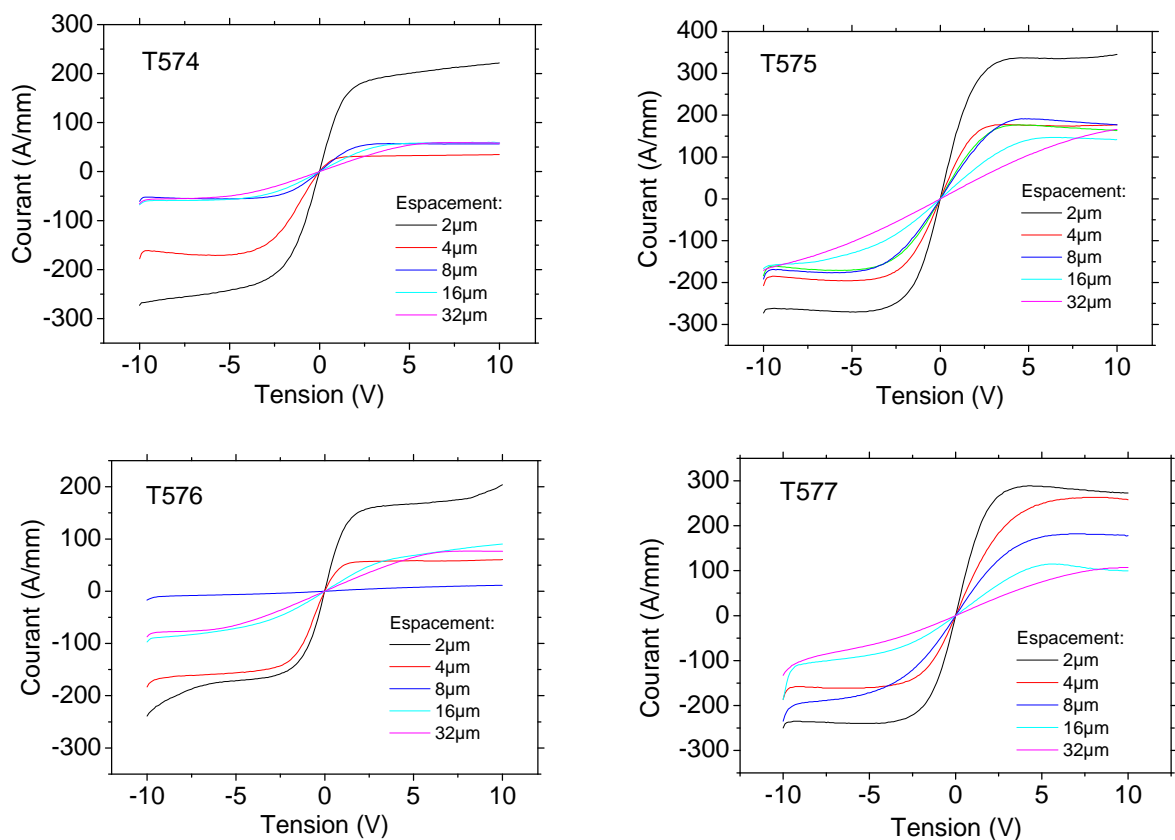


Figure IV.22 : Caractéristiques $I(V)$ des échelles TLM mesurées sur la série d'échantillons n°5.

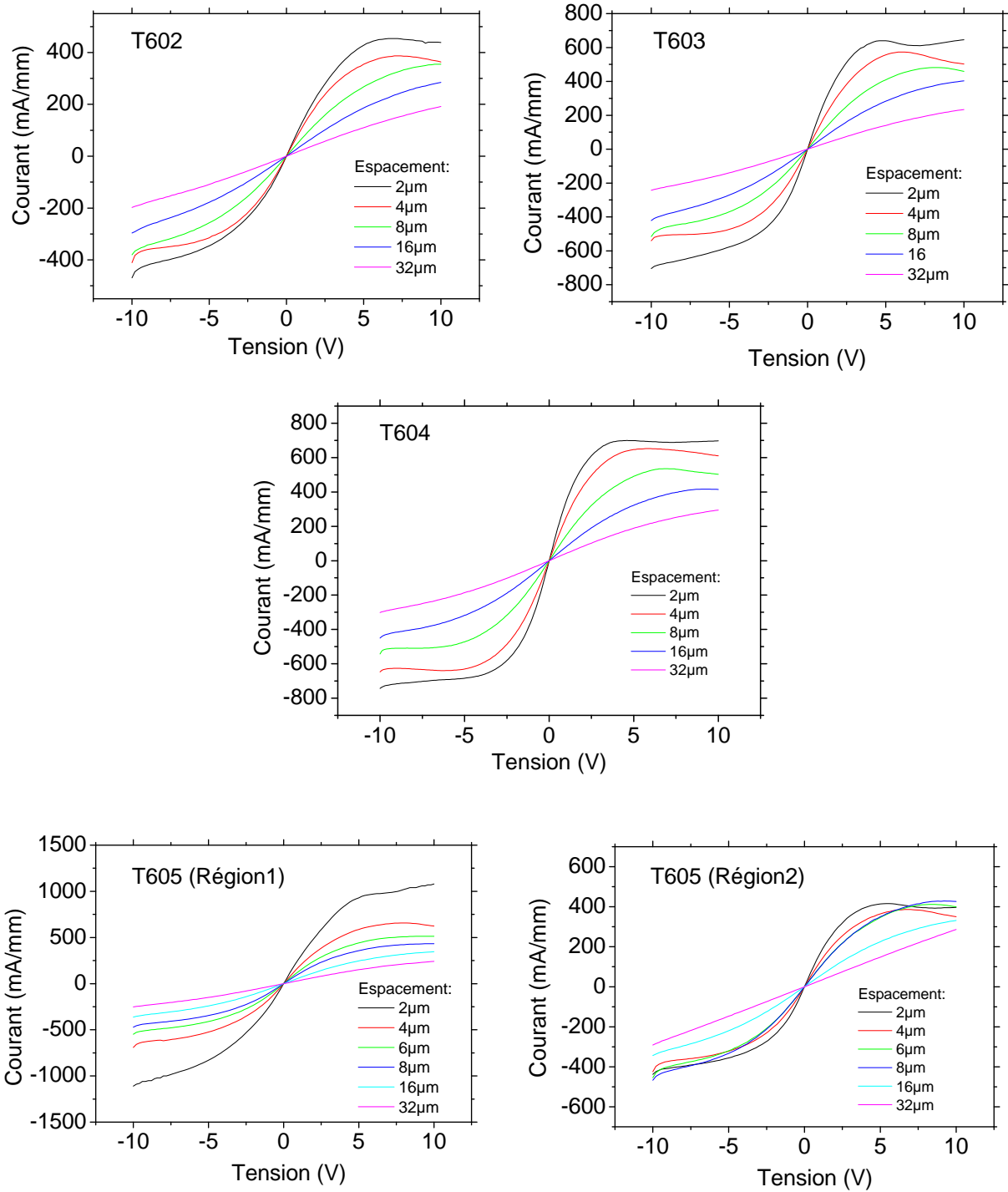


Figure IV.23 : Caractéristiques $I(V)$ des échelles TLM mesurées sur la série d'échantillons n°6.

Les bilans des résultats TLM relatifs aux séries 5 et 6 sont donnés respectivement dans les **Tableaux IV.16a** et **IV.16b**.

Echantillons Série 5	R_{\square} (Ω)		R_C (Ω .mm)		ρ_C (Ω .cm $^2 \times 10^{-6}$)		L_T (μm)	
	Min	Max	Min	Max	Min	Max	Min	Max
T574	1252	2303	0,66	4,6	3,44	93	0,52	2
T575	1028	1209	1,5	1,6	20	21,3	1,3	1,3
T576	1690	1702	3,7	5,2	15,4	80	2,8	3
T577	1710	2664	1,83	1,92	12,6	21,5	0,69	1,12

Tableau IV.16a : Bilan des mesures TLM de la série d'échantillons n° 5.

Echantillons Série 6	R_{\square} (Ω)	R_C (Ω .mm)	ρ_C (Ω .cm $^2 \times 10^{-5}$)	L_T (μm)
T602	1798	3,0	1,1	2,2
T603	977	1,3	1,9	1,4
T604	397	1,2	3,45	3,0
T605	1025	1,3	1,1	1,2

Tableau IV.16b : Bilan des mesures TLM de la série d'échantillons n° 6.

Les contacts ohmiques réalisés sur la série 5 sont assez médiocres et relativement disparates et la résistance carrée des différentes couches est toujours supérieures au k Ω . On en déduit que ces couches sont inhomogènes et que les résultats des mesures I(V) des TLM ne présagent pas de bons résultats pour ces transistors.

Les mesures TLM moyennées sur 13 points de la surface des différents échantillons de la série 6 sont montrées **Tableau IV.16b**. Cependant, ces grandeurs présentent une variation qui peut atteindre plus de 20% de la valeur entre 2 positions distinctes de la même plaque. Cette constatation prouve une fois de plus l'inhomogénéité des plaques et ceci reste vrai à des

points pris à moins de 200 μm d'intervalle l'un de l'autre. Cependant, cette disparité reste nettement plus petite que dans le cas de la série 5.

L'échantillon présentant la disparité la plus importante est la couche T605 et celle pour laquelle cette-dernière est négligeable est la couche T604 (Figure IV.23). Une fois de plus, c'est l'échantillon comportant une couche de contre-barrière de 1 nm d'épaisseur de B GaN avec moins de 1% de bore qui correspond au meilleur résultat TLM. Par conséquent, l'ajout d'une couche de GaN borée de 1nm maximum et avec 1% de bore correspond à la structure permettant d'améliorer les propriétés de transport. Cependant, dans ce dernier cas, l'épaisseur du canal n'a pas été optimisée.

Il apparaît que les conditions de recuit utilisées permettent d'obtenir de meilleurs résultats sur les couches comprenant de forts taux d'aluminium (cf. cas T603, T604 et T605). Ce résultat nous laisse donc supposer que la couche barrière AlGa_N contenant des taux d'aluminium plus faible (T602) ne permet pas de former suffisamment de lacunes d'azote (donneurs) en surface pour améliorer le contact ohmique sans pour autant le faire décoller [7].

Malgré l'inhomogénéité des couches, le caractère ohmique des contacts a pu être vérifié. La caractéristique I(V) des contacts obtenus est symétrique et ne présentent pas de point d'inflexion. Les zones très inhomogènes présentent en général des particularités avec des courants de saturation et des tensions coudes anormaux. L'hypothèse la plus probable consiste à avoir en ces points particuliers un gaz d'électrons très peu confiné et les caractéristiques obtenues sont en conséquence celle d'un barreau semiconducteur AlGa_N dopé type N.

Pour certaines plaques, une altération des contacts électriques est observée après la pose des micro-pointes. Le caractère friable de ces derniers nous laisse présager que la couche de Nickel ne joue pas son rôle de barrière réfractaire entre la couche d'aluminium et le plot d'épaissement en Or. C'est pourquoi ce métal a été remplacé par un autre plus réfractaire qu'est le molybdène. L'amélioration apportée par ce biais aux contacts ohmiques est vérifiée sur la série 7 avec le séquentiel Ti/Al/Mo/Au. La Figure IV. 24 présente des exemples de caractéristiques courant-tension mesurées sur les échantillons la série 7.

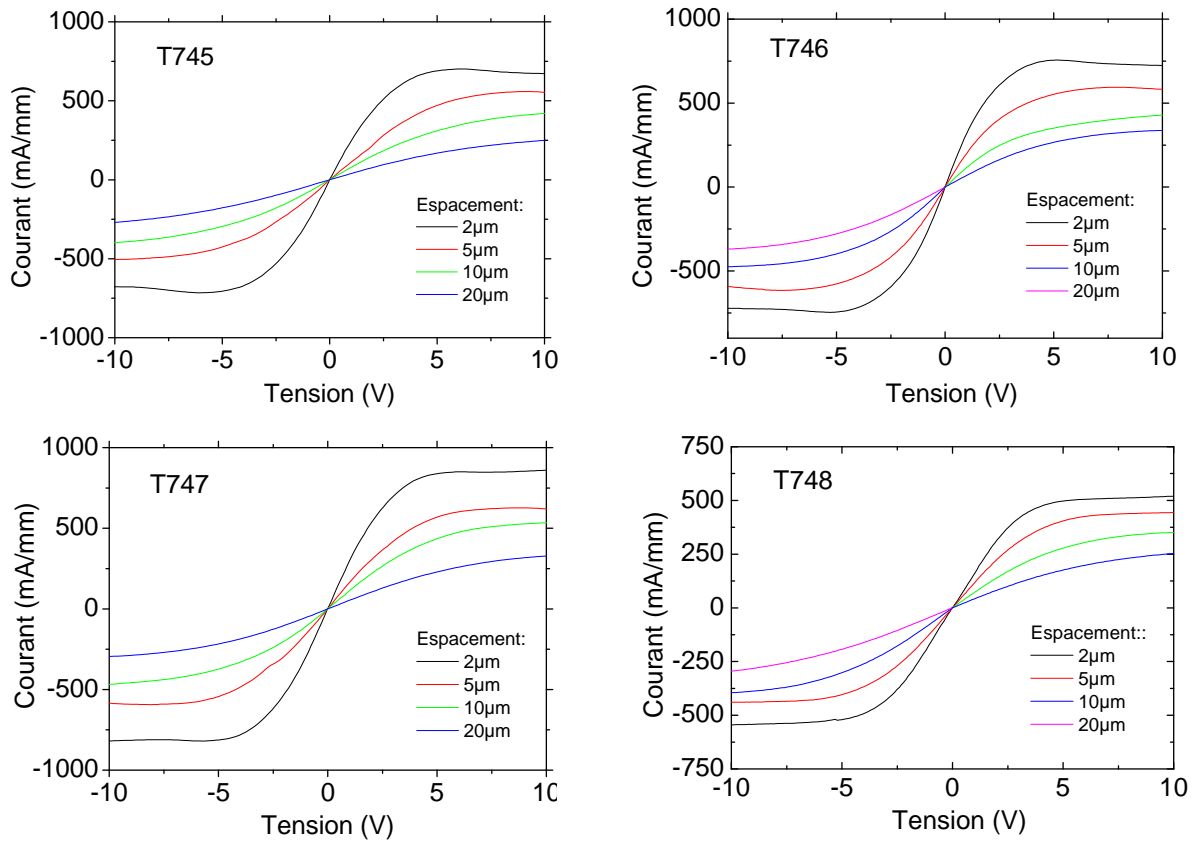


Figure IV.24 : Caractéristiques I(V) des échelles TLM mesurées sur la série d'échantillons n°7.

Le bilan des résultats TLM relatif à la série d'échantillons n°7 est donné dans le **Tableau IV.17** :

Echantillons	R_{\square}	R_C	ρ_C	L_T
Série 7	(Ω)	($\Omega \cdot \text{mm}$)	($\Omega \cdot \text{cm}^2$)	(μm)
T745	1003	0,38	$2,09 \times 10^{-6}$	0,45
T746	798	0,64	$6,80 \times 10^{-6}$	1,03
T747	635	0,56	$3,99 \times 10^{-6}$	0,72
T748	987	1,8	$3,66 \times 10^{-5}$	1,81

Tableau IV.17 : Mesures TLM de la série d'échantillons n°7.

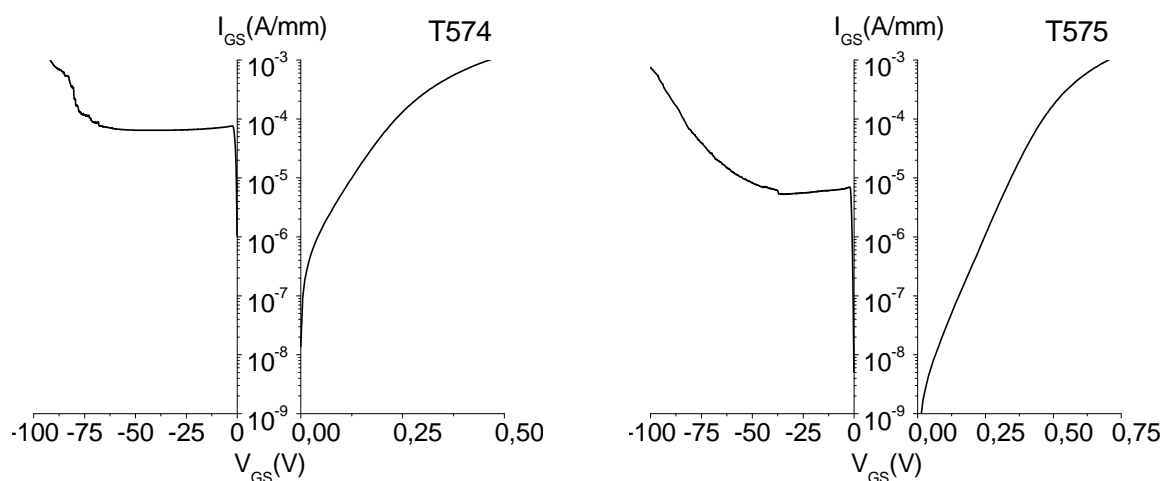
Les mesures TLM obtenus avec cette métallisation montrent des résistivités de contacts nettement améliorées, qu'il faut aussi relativiser avec une amélioration de la qualité matériau

au fur et à mesure des séries successives (Figure IV.24). Cependant, à la différence de la métallisation précédente, il convient de noter que les contacts ohmiques présentent des flancs métalliques moins bien définis et une morphologie granuleuse plus importante. Une comparaison des couches étudiées entre elles, permet de remarquer que la couche de cap GaN pourrait avoir pour effet d'altérer la formation du contact ohmique.

5.1.2 Caractérisation du contact Schottky

Des grilles circulaires de test de 200 μ m de diamètre ont été réalisées sur toutes les séries mais pas avec le même séquentiel de métallisation. La métallisation de ces contacts utilisée jusqu'alors est Mo/Au (série 5). Dans le cas de la série 6, elle est remplacée par Ni/Au pour améliorer son adhérence. La couche d'Or permet de réduire la résistance d'accès de grille. Ces contacts subissent systématiquement un recuit de stabilisation dans un four tubulaire à 400°C sous atmosphère N₂ pendant 20mn.

L'étude comparative des contacts Schottky concerne la hauteur de barrière Φ_B et le coefficient d'idéalité η obtenus en polarisation directe et la valeur de la tension en polarisation inverse pour laquelle le courant de fuite de grille est de 1mA/mm (Annexe C). Les Figures IV.25 et IV.26 présentent des exemples de caractéristiques $I_{GS}(V_{GS})$ des contacts Schottky obtenues sur les séries d'échantillons n°5 et n°6.



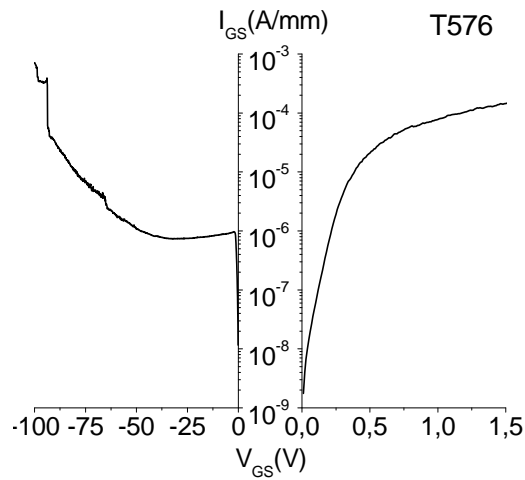


Figure IV.25 : Caractéristiques $I_{GS}(V_{GS})$ des contacts Schottky circulaires de la série d'échantillons n°5 ($D=200\mu\text{m}$).

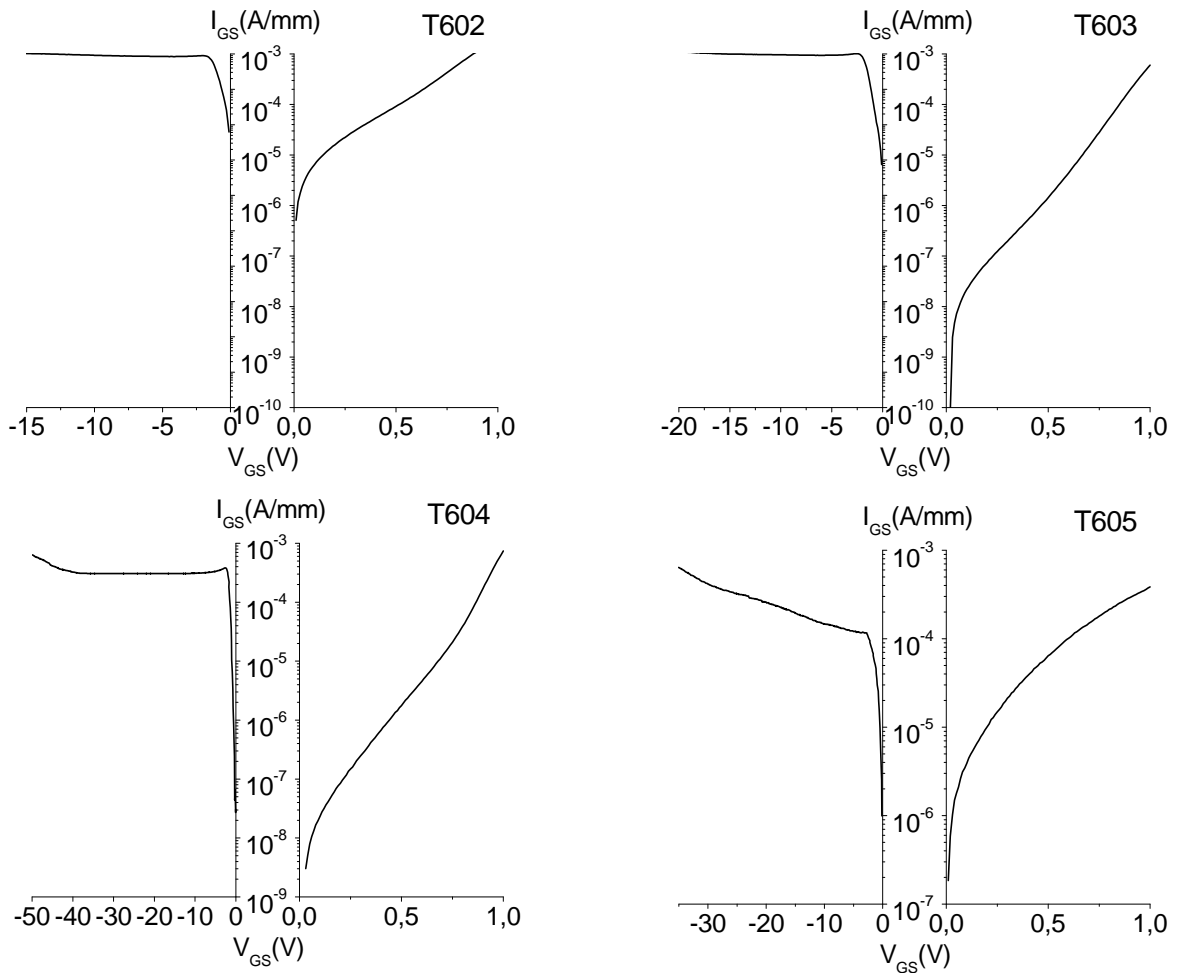


Figure IV.26 : Caractéristiques $I_{GS}(V_{GS})$ des contacts Schottky circulaires de la série d'échantillons n°6 ($D=200\mu\text{m}$).

Un récapitulatif des caractéristiques moyennées correspondantes est donné dans les Tableaux IV.18a et IV.18b.

Echantillons Série 5	Taux Alu (%)	Hauteur de barrière Φ_B (eV)	Coefficient d'idéalité η	Tension inverse (V) @ 1mA/mm
T574	26	0,53	30	-90
T575	26	0,66	16,1	-105
T576	26	0,65	16	-100
T577	26	Non-mesuré		

Tableau IV.18.a : Mesures des caractéristiques Schottky de la série d'échantillons n°5.

Echantillons Série 6	Taux Alu (%)	Hauteur de barrière Φ_B (eV)	Coefficient d'idéalité η	Tension inverse (V) @ 1mA/mm
T602	26	0,55	5	-15
T603	30	0,68	3,9	-20
T604	30	0,69	3,3	-50
T605	30	0,52	5,4	-35

Tableau IV.18.b : Mesures des caractéristiques Schottky de la série n°6.

Les résultats des contacts Schottky sur la série n°5 montrent un comportement assez similaire aux séries précédentes mais avec la particularité d'un courant de fuite en polarisation inverse très petit. Ceci peut être attribué à la faible densité de charges disponibles une fois la structure métallisée.

Dans le cadre de l'étude du contact redresseur relative aux échantillons de la série 6, une analyse comparative entre les couches témoins T602 et T603 semble suggérer que l'augmentation du taux d'aluminium a pour effet d'améliorer la hauteur de barrière et le coefficient d'idéalité. Au regard des résultats obtenus sur la couche T604, l'introduction d'une fine couche de contre-barrière BGaN de 1nm semble offrir une meilleure tenue en tension en polarisation inverse et diminuer drastiquement les courants de fuites. Toutefois, il convient de remarquer que la mauvaise qualité matériau de la couche T605 liée à la présence d'une

couche B_{GaN} épaisse de 2nm a pour effet de dégrader les caractéristiques du contact Schottky.

Une autre métallisation a été testée sur la série 7 en déposant des contacts de grille en Pt/Mo/Au. Le molybdène est utilisé en tant que barrière réfractaire afin d’empêcher davantage la diffusion de l’or dans le platine après recuit de stabilisation. Les caractéristiques $I_{GS}(V_{GS})$ des contacts Schottky obtenues sur la série 7 sont présentés dans la **Figure IV.27**.

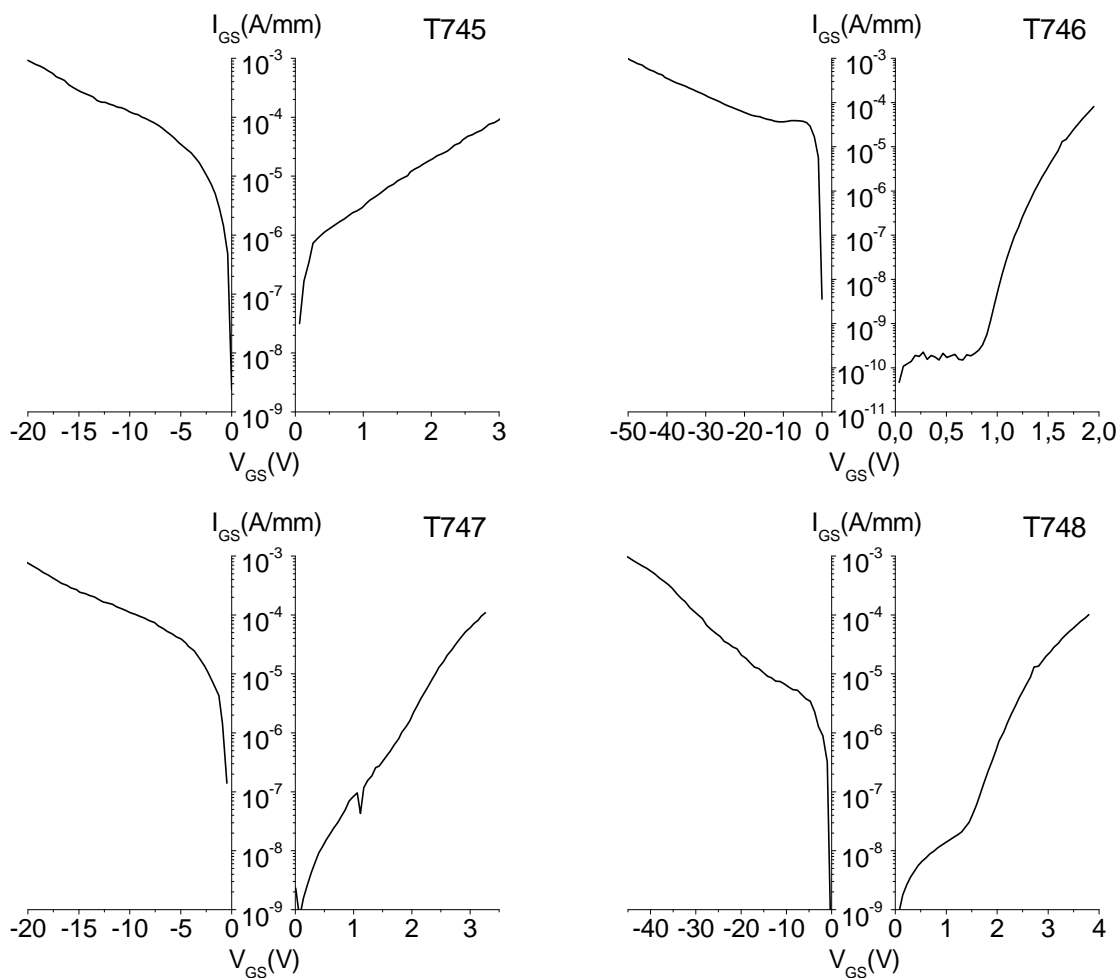


Figure IV.27 : Caractéristiques $I_{GS}(V_{GS})$ des contacts Schottky circulaires de la série d’échantillons n°7 ($D=200\mu\text{m}$).

Un récapitulatif des caractéristiques moyennées correspondantes est donné dans le **Tableau IV.19**.

Echantillons Série 7	Hauteur de barrière Φ_B (eV)	Coefficient d'idéalité η	Tension inverse (V) @ 1mA/mm
T745	0,57	5,12	-20
T746	0,96	2,27	-50
T747	0,61	4,88	-20
T748	0,78	3,57	-45

Tableau IV.19 : Mesures des caractéristiques Schottky de la série d'échantillons n°7.

Il est connu que la couche de cap a une certaine influence sur la hauteur de barrière du contact de grille. En effet, plus cette dernière est épaisse, plus la densité d'électrons dans le gaz diminue de part la courbure de bande induite, ce qui permet de le dépléter à plus bas champ électrique. Ainsi, la hauteur de barrière augmente avec l'épaisseur de la couche de cap jusqu'à se saturer lorsque le cap est très épais.

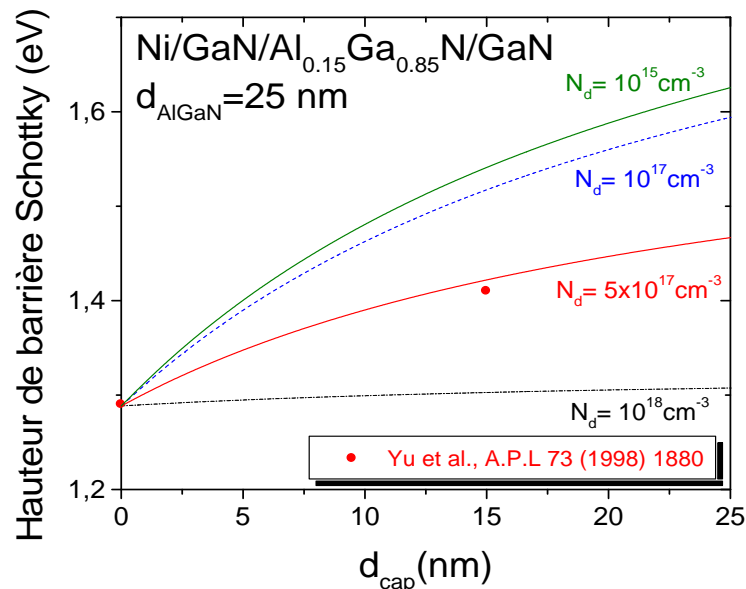


Figure IV.28 : Variation de la hauteur de barrière Schottky effective dans un HEMT Ni/GaN/AlGaN/GaN en fonction de l'épaisseur du cap GaN [18].

Aussi, cet effet s'estompe avec le dopage de la couche de cap (Figure IV.28). En effet, plus cette dernière est dopée, plus cette couche se comporte comme un contact quasi-métallique. Étant donné le procédé de nettoyage du contact de grille, lequel consiste uniquement à désoxyder mécaniquement la surface avec un faisceau d'argon à 200eV pendant 90s, ce dernier ne permet que de graver l'oxyde natif et la résine résiduelle (la vitesse de gravure du GaN à 200eV est égale à 0,4nm/min). En conséquence, lorsque la couche de cap GaN est très dopée ($>10^{18}\text{cm}^{-3}$), la hauteur de barrière ne varie pratiquement plus avec son épaisseur [18].

Une étude comparative entre ces structures montre le rôle joué par la couche de cap GaN qui permet d'améliorer nettement les caractéristiques en polarisation directe des contacts Schottky (T746 et T748). Dans le cas précis d'une structure avec cap, la métallisation Pt/Mo/Au présente de meilleurs résultats que ceux obtenus avec la métallisation Ni/Au (Tableau IV.19). Cependant, cette dernière remarque n'est plus valable lorsque la structure ne présente plus de couche de cap GaN (T745 et T747). Ce résultat peut être en partie interprété par la mauvaise adhérence du Platine par rapport au Nickel sur la couche barrière AlGaN.

5.1.3 Mesure de l'isolation par implantation

L'isolation par méso n'a pas été adoptée pour réaliser cette fonction pour de multiples raisons. La gravure engendre des défauts de surfaces sur le matériau polaire et par conséquent des courants de fuite en surface lesquels doivent alors être réparés par une passivation via un procédé plasma, chimique voire thermique. Mais cette technique induit aussi une capacité parasite supplémentaire avec le gaz d'électrons laquelle dégrade la montée en fréquence. Aussi, cette technologie impose une technologie quasi-3D laquelle ne facilite pas la suite du process technologique. C'est pourquoi, l'isolation par implantation est souhaitable. Cette procédure permet de casser les liaisons ioniques du GaN jusqu'à une profondeur de 200nm sous la surface et rend le matériau isolant électriquement (Paragraphe 3.3).

Ce procédé tient en température (jusqu'à 700°C) et pour de fort champs électriques. Le second point est vérifié sur les caractéristiques courant-tension en fonction de la distance entre les 2 électrodes isolées avec ou sans excitation lumineuse (c'est-à-dire une lumière blanche). Les caractéristiques obtenues sur la série 7 sont plus que satisfaisantes en termes de courant

d'isolation à faible et fort champ électrique. Cependant, cette dernière se dégrade de 2 à 3 ordres de grandeurs à champ constant lorsque la distance source-drain est réduite de quelques micromètres ($<5\mu\text{m}$ soit d_2 sur la [Figure IV.29](#)).

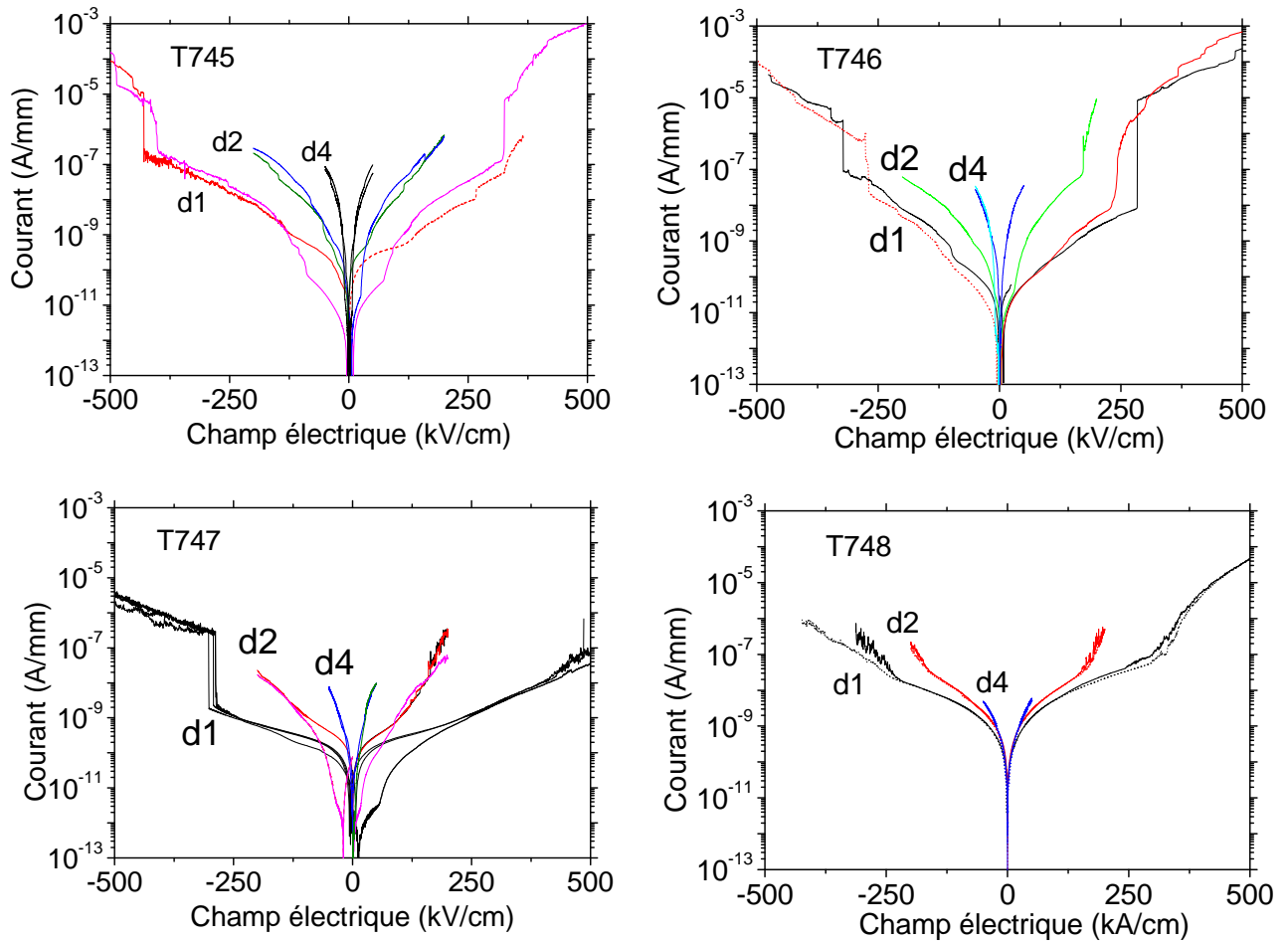


Figure IV.29: Mesure du courant d'isolation sur les échantillons de la série 7 entre deux plots de contact ohmique distants de $d_1=20\mu\text{m}$, $d_2=5\mu\text{m}$ et $d_4=2\mu\text{m}$,

Une seconde remarque importante est à souligner : il existe un champ critique pour lequel un saut de courant apparaît dans un sens uniquement ou dans les 2 sens de polarisation et peut atteindre 3 ordres de grandeurs. Sur les courbes de la [Figure IV.29](#), ce phénomène apparaît toujours pour la caractéristique $I(V)$ liée à la distance inter-électrodes la plus petite mais pourrait apparaître sur les autres caractéristiques à plus bas champ électrique. L'hypothétique mécanisme proposé ici est un courant par *hopping* assisté par effet de champ lié à des pièges présents soit dans la couche buffer du template GaN, soit au niveau de l'interface de reprise

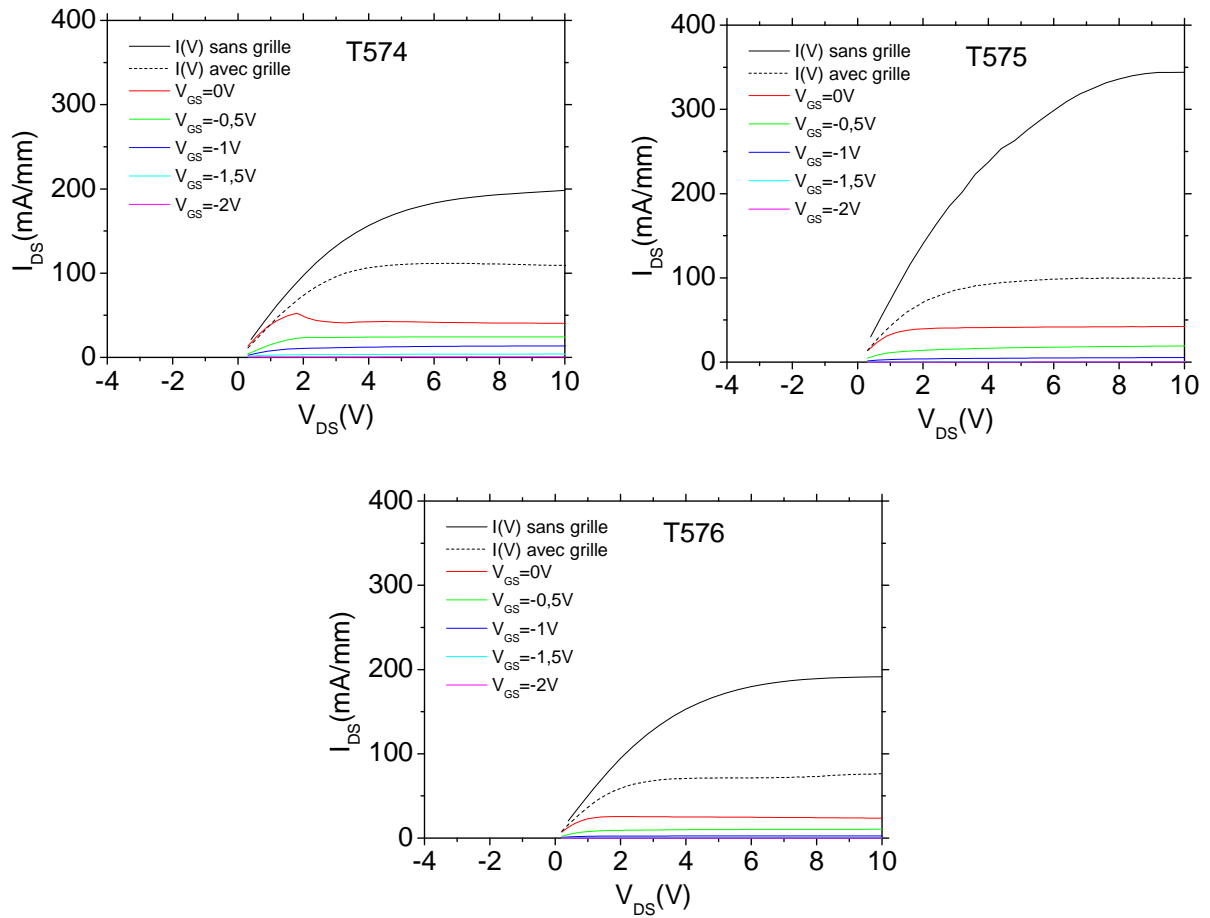
de croissance comme observé avec des *spikes* de Silicium à la reprise de croissance. D'autres auteurs attribuent ce comportement à des courants de conduction à partir de fortes concentrations de dislocations des couches à l'interface entre la couche de nucléation et le substrat, lesquelles sont activées par effet de champ. La différence avec nos observations est que nos caractéristiques sont toujours reproductibles ce qui n'est pas le cas du phénomène relaté par Beaula Rowena et *al.* [19].

Notons aussi que la couche T747 présente des fuites électriques 10 fois inférieures aux autres structures toutes confondues. La connaissance que l'on a de cette couche ne nous permet pas de conclure sur l'origine de cette amélioration si ce n'est qu'elle comporte une couche de contre-barrière B GaN implantée He^+ . Quant aux effets de l'excitation lumineuse, ils ne sont pas percutants et révèlent quelques fois un croisement dans les caractéristiques $I(V)$ lorsque la lumière est activée ou non. Ce comportement pourrait provenir de 2 types de charges différentes (un accepteur et un donneur activés se compensant simultanément pour un champ électrique donné). Le pseudo-champ de claquage mesuré entre 2 contacts distants de $2\mu\text{m}$ obtenu pour cette structure en polarisation directe est donc bien supérieur à $0,5\text{MV/cm}$.

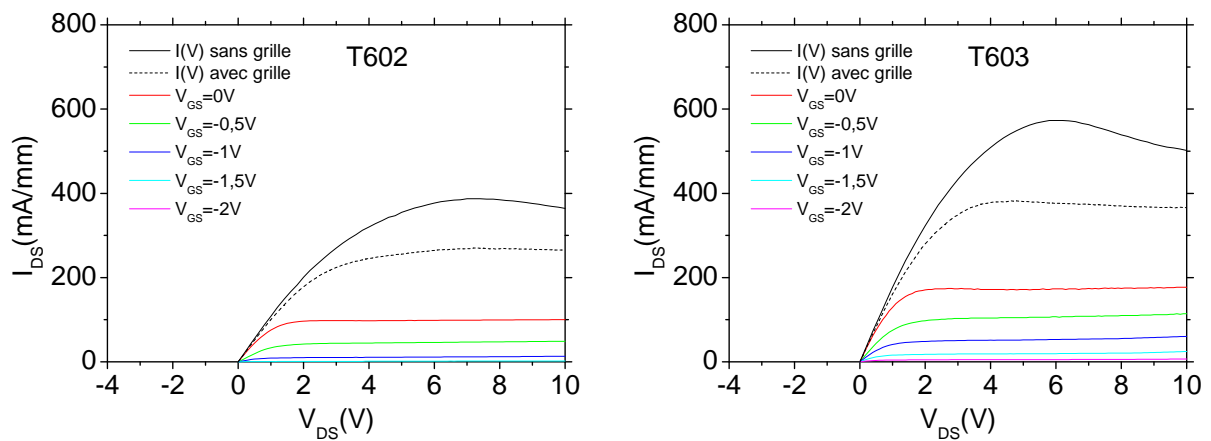
5.1.4 Caractéristiques de sortie du transistor

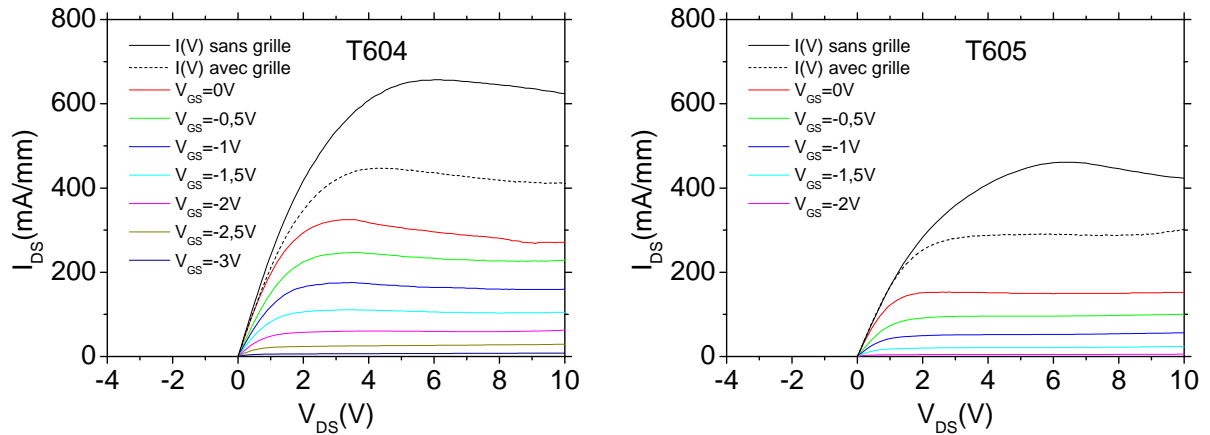
La caractérisation électrique des composants a pu être réalisée au moyen d'un banc de mesures sous pointes à disposition en salle blanche ou en centrale de caractérisation. Une des caractéristiques essentielle d'un transistor est sa capacité à contrôler la conductivité électrique dans le canal conducteur. Cette commande dont la limite est définie par la tension seuil (V_T) est obtenue par déplétion du canal via un contact redresseur d'une part et au travers d'un contact ohmique d'autre part.

Elle peut être obtenue via différents moyens de caractérisations (C_{GS}, g_m, I_{GS})- V_{GS} , $V_{DS \text{ sat}}$ sur la caractéristique de sortie, ou par bille de mercure etc... Ces mesures ont été faites sur des transistors avec différentes longueurs de grille ou sur des FATHEMT. Les résultats obtenus sur les séries de 5 à 7 sont présentés dans les **Figures IV.30, IV.31 et IV.32**.

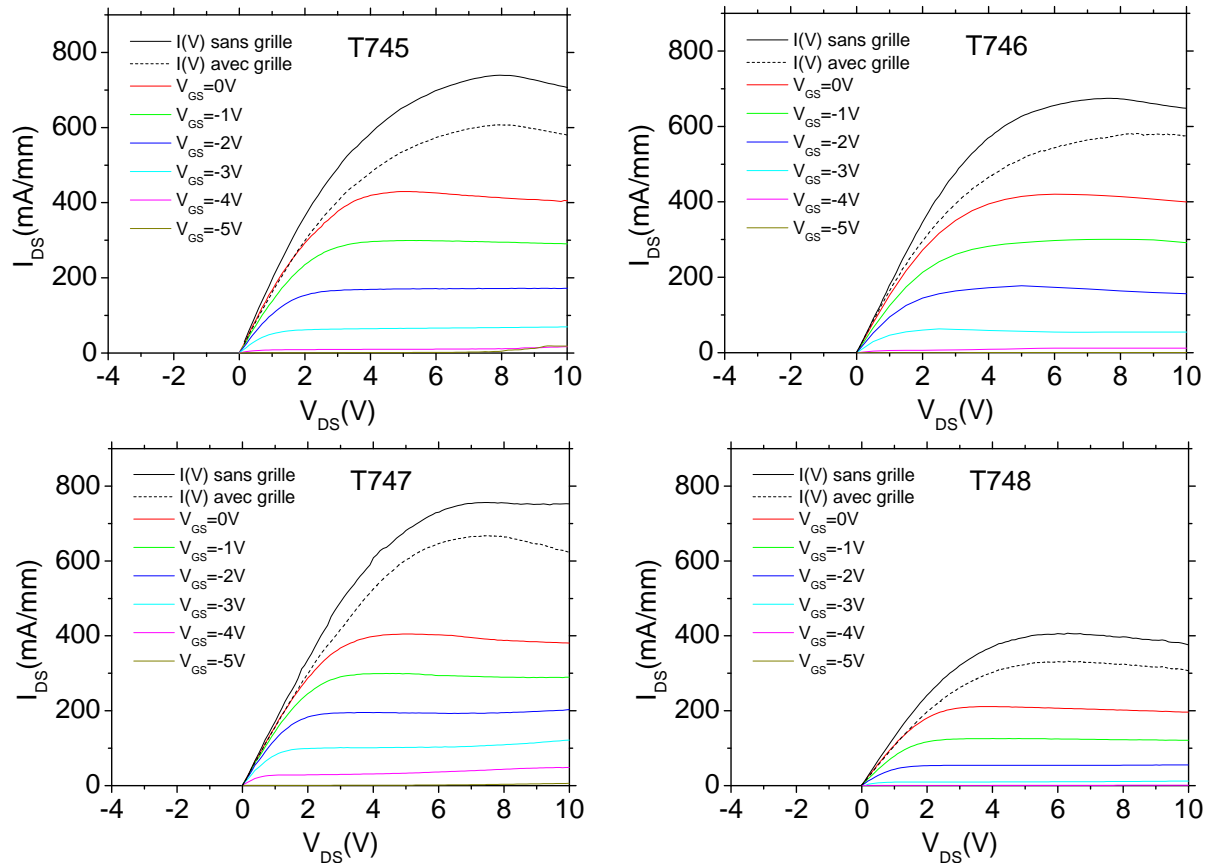


Figures IV.30: Caractéristiques de sortie des transistors de la série d'échantillons n°5 ($L_G=2\mu m$, $L_{DS}=4\mu m$, $W=100\mu m$).





Figures IV.31 : Caractéristiques de sortie des transistors de la série d'échantillons n°6 ($L_G=2\mu\text{m}$, $L_{DS}=4\mu\text{m}$, $W=100\mu\text{m}$).



Figures IV.32 : Caractéristiques de sortie des transistors de la série d'échantillons n°7 ($L_G=2\mu\text{m}$, $L_{DS}=4\mu\text{m}$, $W=100\mu\text{m}$).

Un récapitulatif des caractéristiques moyennées correspondantes est donné dans les Tableaux IV.20, IV.21 et IV.22.

Echantillons Série 5	I_{DS} sans grille (mA/mm)	$I_{DS\ sat}$ grille flottante (mA/mm)	$I_{DS\ sat}$ $V_{GS}=0V$ (mA/mm)
T568	200	100	40
T574	350	100	40
T575	200	70	25
T576	150	70	40

Tableaux IV.20 : Courant de saturation des transistors de la série d'échantillons n°5.

Echantillons Série 6	I_{DS} sans grille (mA/mm)	$I_{DS\ sat}$ grille flottante (mA/mm)	$I_{DS\ sat}$ $V_{GS}=0V$ (mA/mm)
T602	375	275	100
T603	575	375	175
T604	625	425	275
T605	475	225	150

Tableaux IV.21 : Courant de saturation des transistors de la série d'échantillons n°6.

Echantillons Série 7	I_{DS} sans grille (mA/mm)	$I_{DS\ sat}$ grille flottante (mA/mm)	$I_{DS\ sat}$ $V_{GS}=0V$ (mA/mm)
T745	700	575	400
T746	650	575	400
T747	750	600	425
T748	375	300	200

Tableaux IV.22 : Courant de saturation des transistors de la d'échantillons n°7.

Les mesures par effet Hall donnent les propriétés de transport d'une couche à bas champ électrique. La valeur de la densité d'électrons obtenue permet de donner une bonne estimation du courant de saturation dans la mesure où l'hétérostructure ne présente pas ou peu de défauts

actifs. Les mesures par effet Hall montrent que le courant de saturation attendu pour la série 5 devrait être autour de 600mA/mm or les mesures TLM donnent au mieux 350mA/mm soit une diminution du courant attendu de près de 40% (Tableau IV.20).

Ce comportement, observé sur des structures sans grille, est attribué à des pièges accepteurs ($V_S < 0$) en surface lesquels déplètent une grande partie du canal conducteur. Ce comportement est aussi observé sur les autres séries d'échantillons mais il est nettement moins marqué avec les améliorations successives apportées aux épitaxies. En effet, l'évolution de la qualité matériau sur les séries 6 et 7 a permis d'obtenir de bien meilleurs résultats avec notamment une réduction du courant I_{DS} à saturation de moins de 25% (Tableaux IV.21 et IV.22).

Lorsqu'une grille est déposée entre les contacts de source et de drain, cette dernière présente une polarisation flottante positive (Figures IV.33) dont la valeur varie quasi linéairement avec la tension de drain lequel est polarisé positivement. Cependant, il apparaît que cette valeur du potentiel de grille flottante diminue légèrement avec la longueur de grille et s'accompagne d'une réduction moindre du courant de drain et du courant de fuite au travers de la grille. Ce qui laisse à penser qu'il s'agit de pièges actifs situés sous le contact de grille.

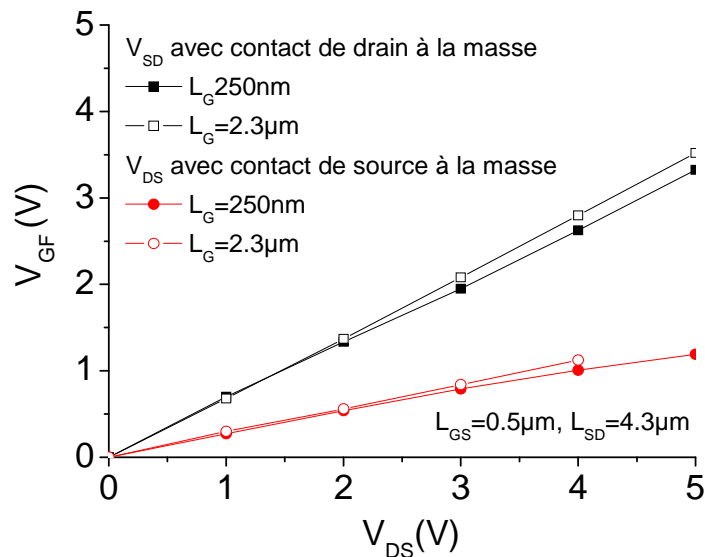


Figure IV.33 : Evolution du potentiel flottant V_{GF} de la grille en fonction de la tension du drain V_{DS} .

Ce comportement ne correspond pas à une résistance de fuite de surface à états de surface actifs répartis uniformément en surface et il en est de même si l'on considère une fuite au travers de la couche barrière à résistivité constante. C'est pourquoi, il doit y avoir une fuite de courant inhomogène au travers de la couche barrière AlGa_N que l'on pourrait attribuer à une distribution non-uniforme de donneurs O_N .

Ce phénomène (chute du courant de drain) est d'autant plus accentué lorsqu'on polarise le contact de grille à $V_{GS}=0V$. Cependant, il peut être mentionné en sus aux phénomènes explicités précédemment une explication supplémentaire. En effet, la grille étant polarisée à 0V engendre un champ électrique latéral entre les contacts de grille et de drain lequel permet aux électrons qui fuient vers la grille de passer par effet tunnel du métal de grille vers le drain. Ces derniers se recombinent avec les ions donneurs N_D^+ pour former une entité neutre qui par conséquent réduit la densité d'électrons dans le gaz 2D et donc le courant I_{DS} [20]. La **Figure IV.34** permet de comprendre ce mécanisme sur la structure de bande de l'hétérostructure AlGa_N/Ga_N en volume laquelle est corrélée à la distribution possible du dopage en surface et sub-surface.

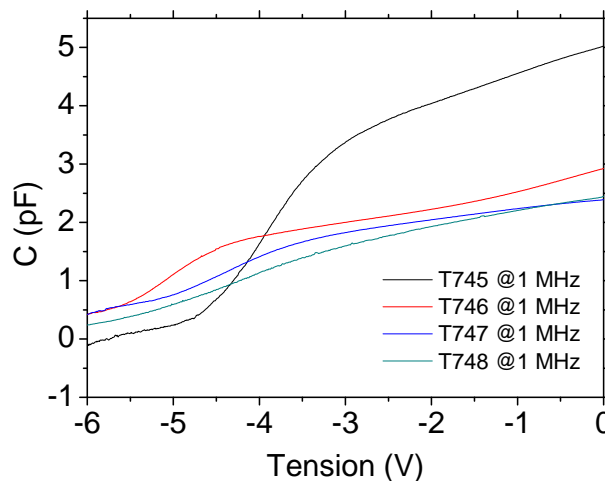
Le schéma de la **Figure IV.35** montre un mécanisme possible pour expliquer pourquoi les tensions seuils mesurées sont toujours plus grandes que celles prédites théoriquement. En effet, nous avons montré dans les discussions précédentes que les couches contiennent à l'origine un grand nombre de défauts de type donneur dans la couche barrière et en surface de l'hétérostructure.

Une fois le transistor polarisé en fonctionnement normal c'est-à-dire lorsque le drain est polarisé positivement et la grille en négatif. Cette dernière accumule des électrons qui « tunnelisent » sous l'effet du champ électrique entre la grille et le drain en surface de la couche barrière AlGa_N pour se recombiner avec les donneurs non encore compensés. Ceci a pour effet de réduire la densité de charges dans le puits.

Ces mêmes charges viennent ensuite s'accumuler côté drain pour former une grille virtuelle équivalente à une polarisation négative laquelle déplete davantage le gaz d'électrons. Ces deux effets cumulés aboutissent à augmenter la tension seuil (vers 0V). Ceci est observable sur les caractéristiques $C_{GS}(V_{GS})$ entre autres.

5.1.5 Mesure Capacité-Tension

La série 7 ayant permis de donner des couches opérationnelles pour obtenir de la puissance en hyperfréquence, nous avons finalisé le procédé technologique par une passivation $\text{SiO}_2/\text{Si}_3\text{N}_4$ standard afin de stabiliser les états de surface et pouvoir opérer des mesures hyperfréquences en régime sinusoïdal petit signal. Afin de mieux appréhender les résultats obtenus précédemment, nous avons réalisé des mesures capacité-tension sur les transistors passivés et recuit. La **Figure IV.36** donne un exemple de caractéristiques $C(V)$ des couches de la série 7 passivées.



Figures IV.36 : Mesures $C(V)$ sur les transistors de la série d'échantillons n°7 après passivation ($W=150\mu\text{m}$, $L_G=2\mu\text{m}$).

Le profil de dopage $N_D(z)$ dans l'hétérostructure peut être déterminé à partir de la caractéristique $C(V_{GS})$ en polarisation inverse selon la relation [21] :

$$N_D(z) = -2/e\epsilon_0\epsilon_{sc}S^2 \times (dC^{-2}/dV_{GS})^{-1}$$

Avec $z = \epsilon_0\epsilon_{sc}S/C$ et où S est la surface du contact Schottky.

Ce modèle à 1 couche est en fait valide pour une structure MIS sans défauts, cependant, il devrait donner un ordre d'idée des caractéristiques de la couche et d'éventuels pièges dans la structure. Les courbes $C-V$ obtenues avec passivation et recuit restent surprenantes. En effet, la diminution de la capacité en accumulation autre que la T745 prouverait une augmentation

de l'épaisseur de la couche barrière ou une diminution de la permittivité de cette dernière, ce qui serait douteux. Aussi, ces résultats montrent que la T745 correspondrait à l'hétérojonction ayant la plus forte densité de porteurs, ce qui est contraire aux résultats obtenus jusqu'alors. Malgré cela, nous avons tenté d'en tirer davantage en traitant ces données.

Les profils de dopage correspondants sont exposés **Figure IV.37**. La couche barrière AlGaN présente une épaisseur de 21nm. Les résultats obtenus montrent un profil de « dopage » résiduel de type donneur lequel n'est pas confiné à l'interface AlGaN/GaN et dont la valeur ne correspond pas à la densité d'électrons mesurée par effet Hall. En effet, cette constatation est aussi faite sur les caractéristiques de sortie des transistors.

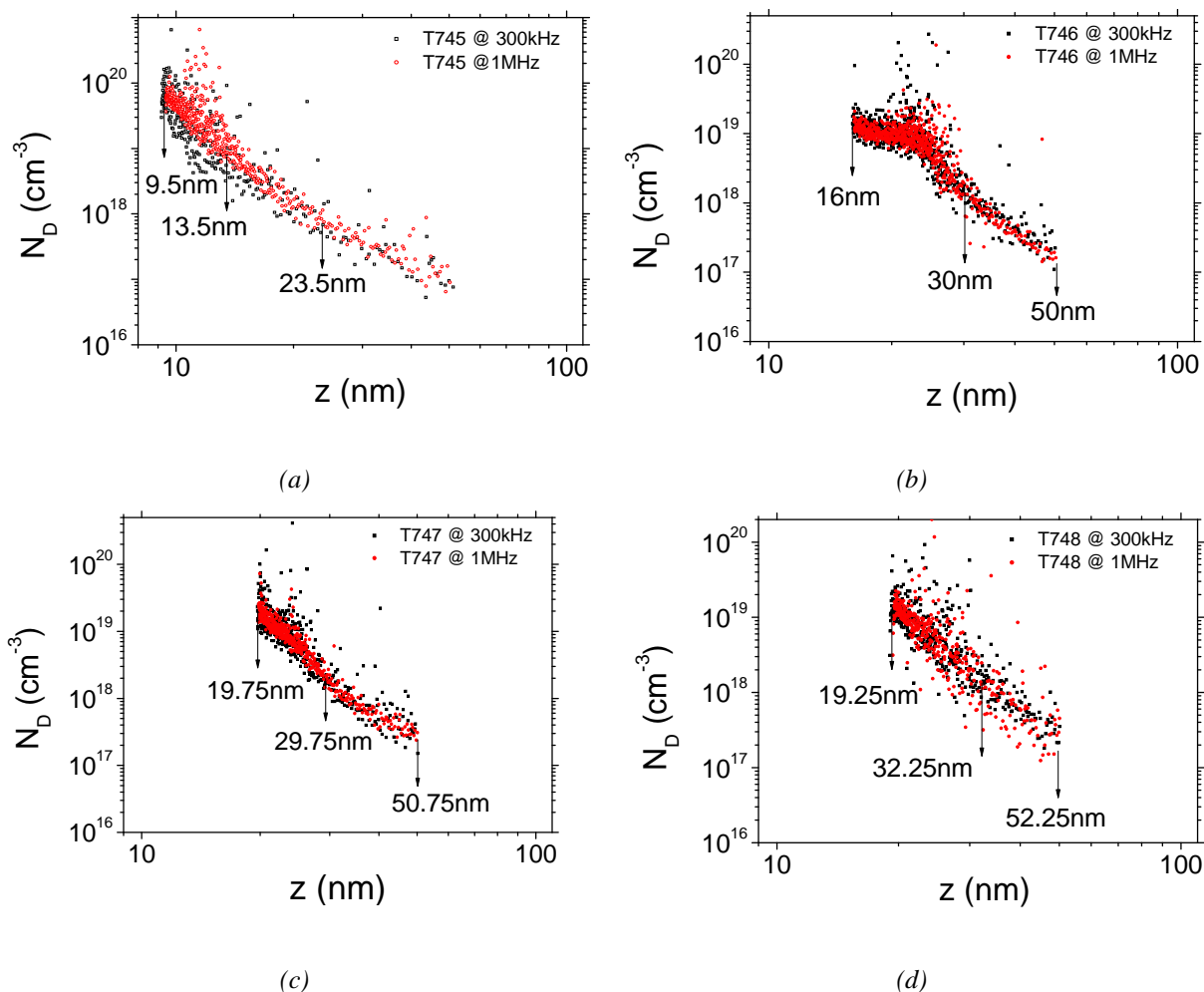


Figure IV.37 : Profil des donneurs N_D en fonction de la profondeur z de la structure (a) T745, (b) T746, (c) T747 et (d) T748.

Ces résultats montrent un confinement des électrons dans la structure mais les valeurs obtenues et la position du pseudo-gaz 2D restent incertains. Il est connu que les états de surface et en particulier ceux de l'interface Métal de grille -semiconducteur AlGa_N modifient considérablement la hauteur de barrière vue par les électrons. La présence d'une hétérojonction sub-surface, du dopage involontairement élevé de la couche barrière AlGa_N, du recuit du contact de grille et de la couche de passivation réduisent encore davantage cette grandeur.

Notons cependant que les couches contenant du bore permettent un meilleur confinement des porteurs à proximité immédiate de l'interface AlGa_N/Ga_N. Cependant, les résultats présentés montrent que la présence d'une couche de BGa_N ou non donne systématiquement des canaux conducteur épais ce qui est en contradiction avec l'ensemble de nos résultats précédents. Cela montre l'invalidité de la méthode utilisée à partir du C(V) dans le cas de nos échantillons. Par conséquent, les résultats obtenus ne peuvent être concluants.

5.1.6 Caractéristiques en DC pulsé

L'auto-échauffement des transistors AlGa_N/Ga_N altère de façon considérable les performances des transistors. En fonction de la nature du substrat et de la tension appliquée, la température dans le canal d'un transistor AlGa_N/Ga_N peut s'auto-échauffer au-delà de 250°C. Cette forte élévation de la température dans le canal entraîne une dégradation drastique de la mobilité des porteurs et par conséquent, engendre une chute du courant de drain. Côté fiabilité, cet auto-échauffement génère l'apparition de pièges supplémentaires lesquels dégradent encore davantage la reproductibilité des mesures et les performances du composant.

Les mesures électriques sous impulsions permettent de s'affranchir d'une grande part de ces effets d'auto-échauffement du composant si les pulses de ce dernier sont suffisamment courts et espacés. Ce mode de fonctionnement permet d'établir les performances du transistor comme s'il fonctionnait en hyperfréquence. Seul l'impact des pièges (défauts structuraux, impuretés...) est mis en évidence. Lors du fonctionnement transistor, ceux-ci se manifestent lorsqu'ils sont activés par la capture et/ou l'émission de porteurs avec des constantes de temps

variables selon leurs signatures (distribution continue ou discrète, densité, niveau énergétique dans la bande interdite, sections efficaces de capture ou d'émission...).

Les conditions de mesures en $I(V)$ pulsé permettent de discrétiser l'origine spatiale des défauts responsables de l'effondrement du courant. Il s'agit d'appliquer un champ électrique sous impulsion lequel repousse les électrons et met en évidence soit un phénomène de *gate-lag* (sous la grille) ou de *drain-lag* (sous la grille côté drain) correspondants principalement aux pièges en surface du composant ou ceux associés en volume (couche barrière, interface AlGaIn/GaN, canal GaN et couche tampon).

Les mesures pulsées ont été effectuées sur l'ensemble des échantillons de la série 7 avant et après passivation. Seule la couche T747 a permis d'obtenir des résultats satisfaisants après passivation (Figures IV.38 et IV.39). En effet, le dépôt d'une couche de passivation SiO_2/SiN permet de protéger/isoler la surface du transistor et d'en améliorer sa fiabilité. Un recuit après passivation permet dans certains cas de réparer une partie des défauts engendrés par la passivation. La Figure IV.38 permet de constater un gain de 20% du courant du aux effets de l'auto-échauffement sur la caractéristique de sortie du transistor en régime DC en comparaison avec celle obtenue sous impulsions. La Figure IV.39 met en évidence les effets de pièges sous la grille (V_{GS}, V_{DS}) à partir d'un point de polarisation fixé à $(-8\text{V}, 0\text{V})$ et de la surface côté drain à partir d'un point de polarisation fixé à $(-8\text{V}, 15\text{V})$. Cette étude a été faite avant et après passivation et recuit.

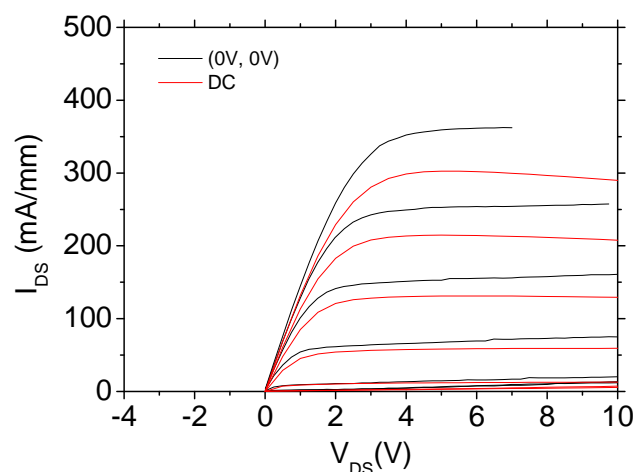


Figure IV.38 : Comparaison entre les caractéristiques de sortie du transistor en régime pulsé et DC ($L_G=2\mu\text{m}$, $L_{DS}=4\mu\text{m}$, $W=100\mu\text{m}$).

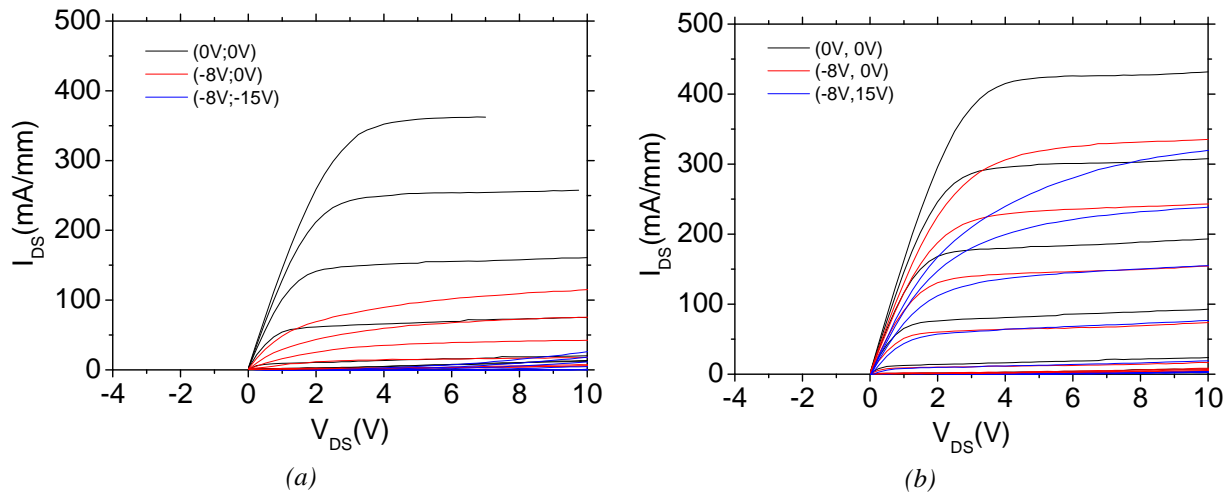


Figure IV.39 : Mesures $I(V)$ pulsées du gate-lag et du drain-lag (a) avant passivation et (b) après passivation ($L_G=2\mu\text{m}$, $L_{DS}=4\mu\text{m}$, $W=100\mu\text{m}$).

5.2 Caractéristiques hyperfréquence du composant

Les caractéristiques en hyperfréquence des composants de la série 7 ont été déterminées par extraction des paramètres S_{ij} en petit signal. La connaissance de ces paramètres permet de déterminer les performances fréquentielles des transistors en fonctionnement. Les Figures IV.40 et IV.41 établissent un bilan récapitulatif montrant l'évolution des fréquences F_t et F_{max} en fonction de la longueur de grille L_G .

Sur ces courbes, nous pouvons constater que la loi d'échelle est respectée pour des longueurs de grilles supérieures à 500nm. Au-delà, ces mêmes grandeurs ont tendance à saturer rapidement vers 10GHz et 40GHz respectivement pour F_t et F_{max} . Néanmoins, nous pouvons aussi remarquer que la montée en fréquence de ces composants ne semble pas limitée uniquement aux faibles valeurs de mobilités déterminées précédemment ($<1230\text{cm}^2/\text{Vs}$). Notons que toutes les grandeurs sont non *de-embedées*.

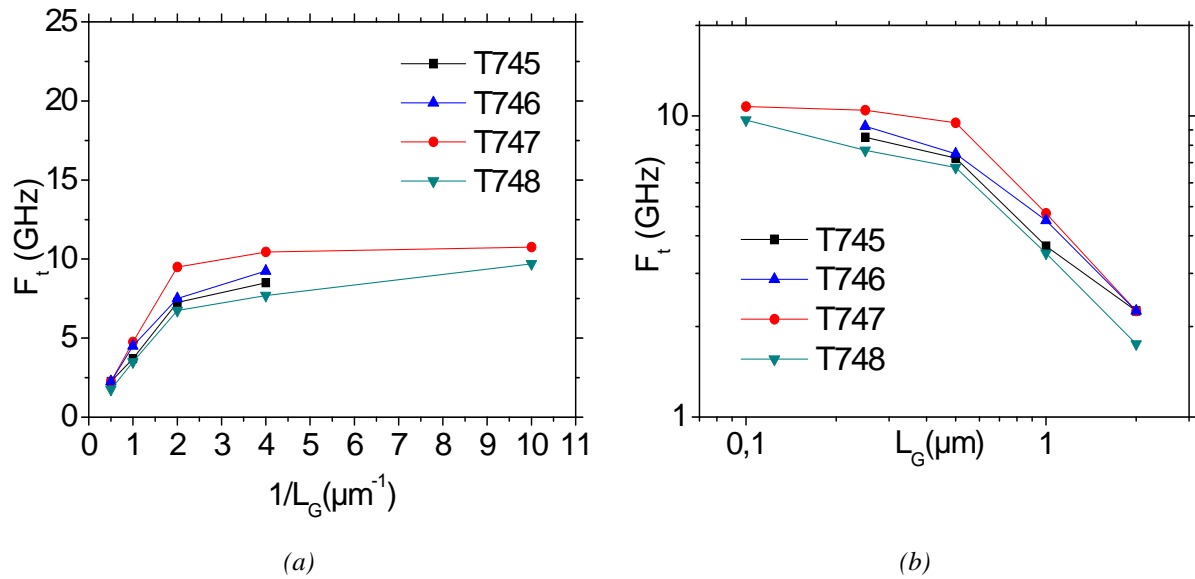


Figure IV.40 : Mesures avant passivation de la fréquence de coupure F_t en fonction de (a) $1/L_G$ et (b) L_G .

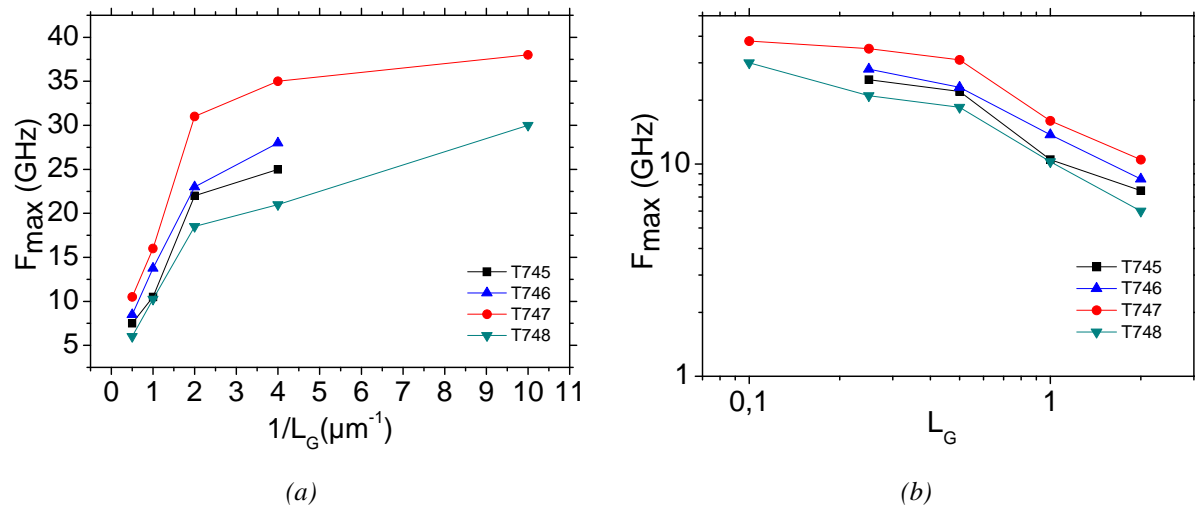


Figure IV.41 : Mesures avant passivation de la fréquence maximale d'oscillation F_{max} en fonction de $1/L_G$ (a) et L_G (b).

Les performances obtenues en hyperfréquence sur ses structures ne nous permettent pas d'observer de différences entre les échantillons présentant ou non une couche de cap. La croissance in-situ d'une fine couche de cap GaN ne nous a donc pas permis de passiver efficacement les états de surface des échantillons en hyperfréquence. Les résultats obtenus après passivation $\text{SiO}_2/\text{Si}_3\text{N}_4$ sur les échantillons T745, T746 et T748 permettent d'observer une légère amélioration des caractéristiques en hyperfréquence (Figure IV.42). Notons

cependant que les résultats de la couche T748 contenant une couche de cap et une couche de B GaN sont plus que décevants étant donné qu'ils sont encore plus mauvais que ceux de la couche de référence (T745).

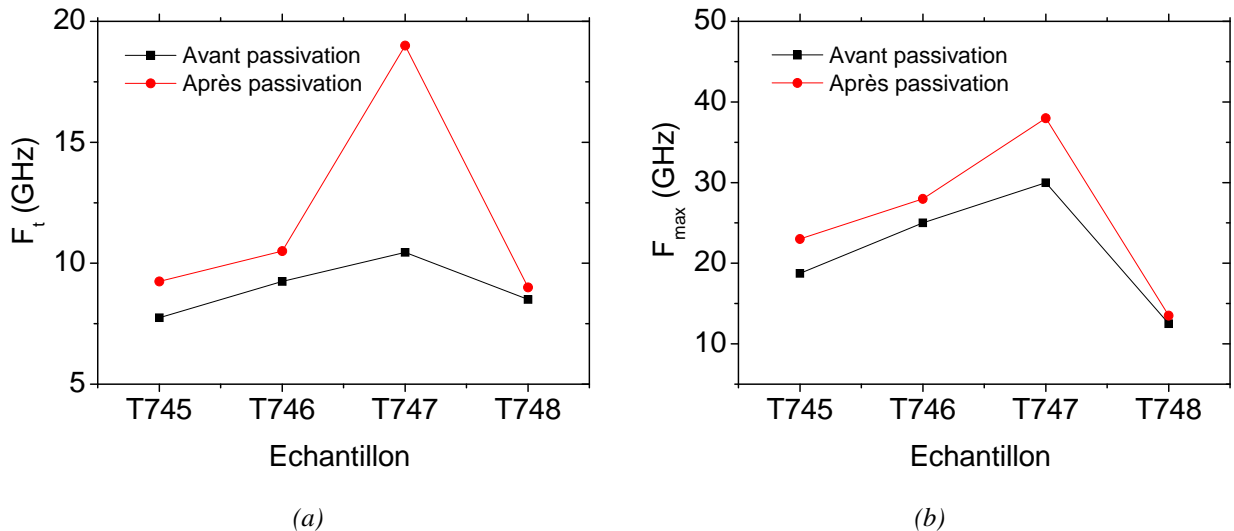


Figure IV.42: (a) Comparaison des mesures avant et après passivation de F_t sur des grilles de longueur 250nm. (b) Comparaison des mesures avant et après passivation de F_{max} sur des grilles de longueur 250nm.

Néanmoins, les effets les plus marquants de cette passivation ont été obtenus sur l'échantillon T747, où nous avons pu observer une amélioration très notable des performances des composants en hyperfréquence (Figures IV.43 et IV.44). A titre d'illustration, nous pouvons constater que sur les plus petites grilles (100nm), nous sommes passés après passivation d'une fréquence de coupure de 10,75GHz à 30GHz et d'une fréquence maximale d'oscillation de 35GHz à 52GHz (Les grilles de 50nm de longueur n'ayant pas adhéré étant donné la présence de large *V-shaped* de 100nm minimum).

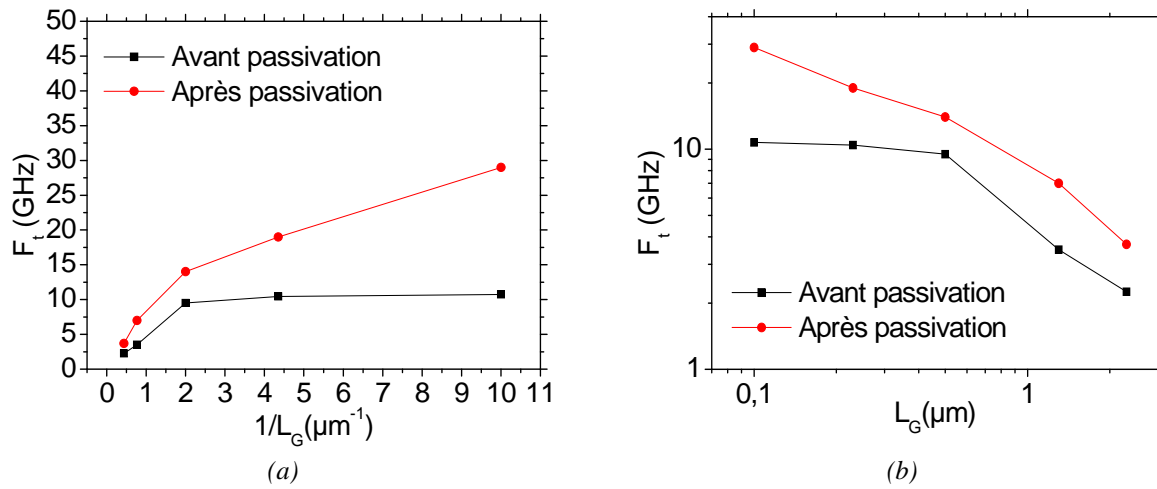


Figure IV.43 : Mesures après passivation (T747) de la fréquence de coupure F_t en fonction de (a) $1/L_G$ et (b) L_G .

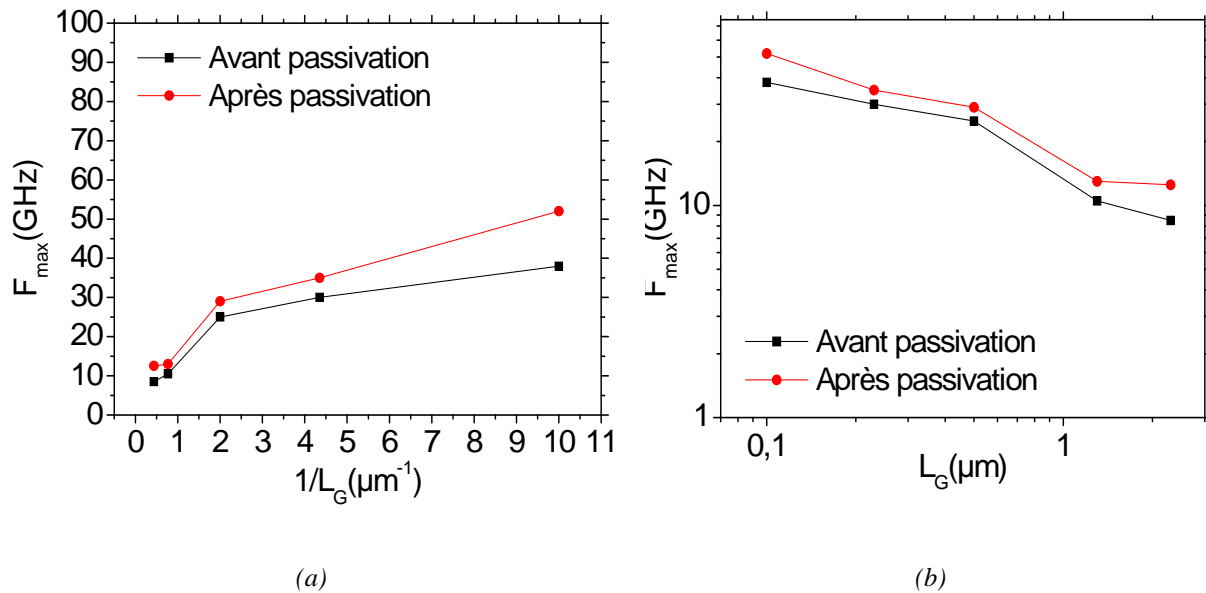


Figure IV.44 : Mesures après passivation (T747) de la fréquence de coupure F_{max} en fonction de (a) $1/L_G$ et (b) L_G .

La qualité du matériau et les performances potentielles des transistors peuvent être déduite à partir de la figure de mérite en traçant $F_t \times L_G$ en fonction de L_G/a_{AlGaN} (Figure IV.45). Ce choix est défini pour des applications correspondant à la montée en fréquence de nos composants. Deux régions distinctes peuvent être observées sur ce graphe : une région dans laquelle $F_t \times L_G$ augmente linéairement jusqu'à $L_G/a < 20$ et une seconde région pour laquelle

$F_t \times L_G$ n'évolue pratiquement plus pour $L_G/a > 20$. La valeur de L_G/a à 63% du maximum de $F_t \times L_G$ est trouvée autour de 10.

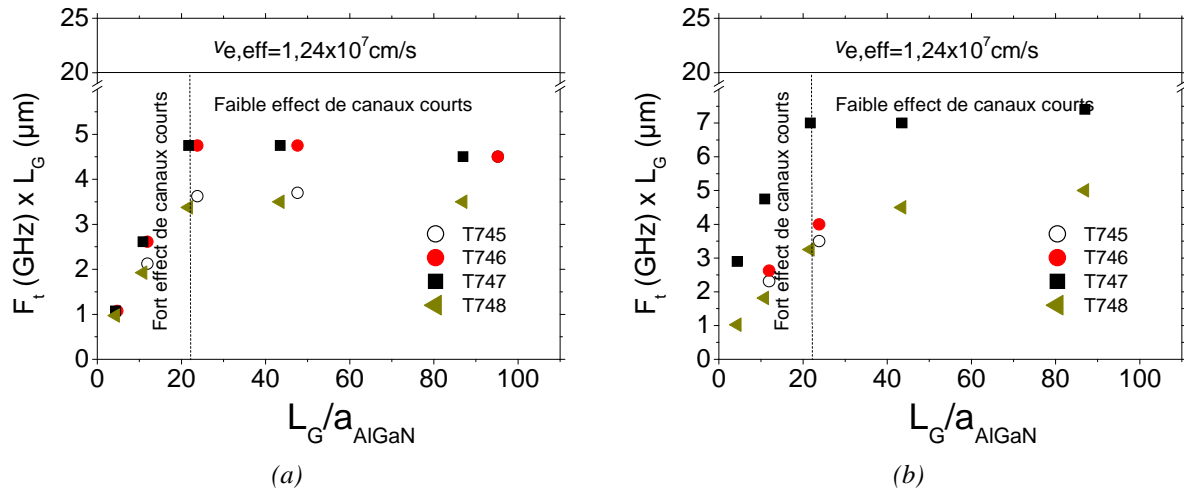


Figure IV.45: Figures de mérite déterminées expérimentalement en traçant $F_t \cdot L_G$ en fonction de L_G/a_{AlGaN} (a) avant passivation et (b) après passivation.

Le comportement lié à la première région est attribué aux effets de canaux courts fortement accentués et la seconde où ces mêmes effets sont fortement atténués. Ce comportement est en accord avec celui présenté classiquement dans la littérature avec une limite pour L_G/a 4 fois supérieure à celle observée sur les matériaux III-V à petits gaps et 25% plus élevée que celle trouvée pour AlGaN/GaN [22]. Cette limite n'est qu'empirique et la seule certitude est que ce critère est au moins 2 à 3 fois plus élevée pour les matériaux à large bande interdite que ses homologues à petits gaps.

Dans la première région, le produit $F_t \times L_G$ est associé aux paramètres géométriques du composant tels que : la longueur de grille L_G et l'épaisseur de la couche barrière a_{AlGaN} . C'est pourquoi, l'efficacité de la commande de grille est en général évaluée à partir du rapport d'aspect L_G/a_{AlGaN} . Par ailleurs, Dans la seconde région ($L_G/a > 20$), ce même produit est fortement corrélé à la vitesse de saturation des électrons dans le canal et par conséquent à la qualité du matériau constituant le canal conducteur.

La vitesse effective des électrons (v_{e-eff}) peut être déterminée expérimentalement en traçant $(F_t \times a_{AlGaN})^{-1}$ en fonction du rapport d'aspect L_G/a_{AlGaN} (Figure IV.46).

En effet, la fréquence de coupure F_t peut être déduite de l'expression suivante :

$$F_t = \frac{v_{e\text{-eff}}}{2\pi L_{\text{eff}}} \quad (\text{Eq. 1})$$

L'inverse de cette relation permet de définir le temps de transit τ des électrons dans le canal

$$\text{tel que : } \tau = \frac{1}{F_t} = \frac{2\pi(L_G + L_{GF})}{v_{e\text{-eff}}}$$

Où L_{eff} est la longueur effective de la grille, L_G est la longueur du pied de grille et L_{GF} est la différence entre les longueurs L_G et L_{eff} (ou extension du champ électrique en surface et en sortie de grille côté drain).

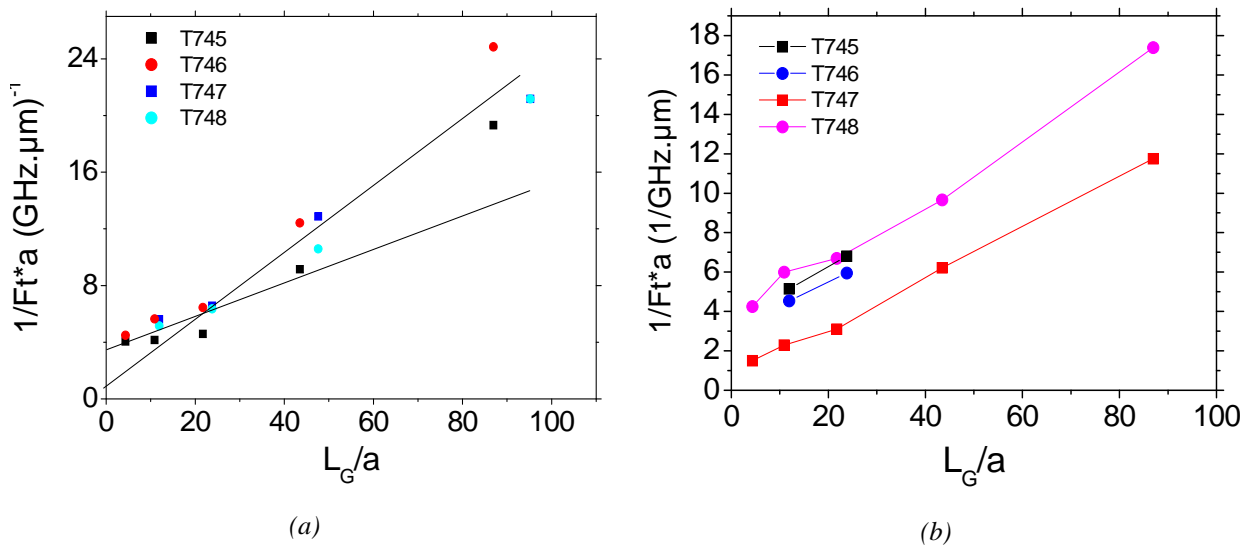


Figure IV.46 : Courbes expérimentales présentant $(F_t \times a_{\text{AlGaIn}})^{-1}$ en fonction du rapport d'aspect L_G/a_{AlGaIn} (a) avant passivation et (b) après passivation.

Ainsi, $(F_t \times a)^{-1}$ décrit une droite en fonction de L_G/a dont la pente est inversement proportionnelle à $v_{e\text{-eff}}$ et l'ordonnée à l'origine permet de remonter à L_{GF} . Les Tableaux IV.23 et IV.24 donnent les valeurs de $v_{e\text{-eff}}$ et L_{GF} pour les différentes couches de la série 7 avant et après passivation. Le Tableau IV.22 comporte deux valeurs pour $v_{e\text{-eff}}$ et pour L_{GF} relatives aux deux pentes obtenues sur la Figure IV.46.

Avant passivation	$v_{e\text{-eff}} (\times 10^7 \text{cm/s})$		$L_{GF} \text{ (nm)}$	
	$L_G < 500\text{nm}$	$L_G > 500\text{nm}$	$L_G < 500\text{nm}$	$L_G > 500\text{nm}$
T745	0,77	0,31	1200	254
T746	0,62	0,28	821	0
T747	2	0,27	2836	-
T748	0,57	0,22	886	19

Tableau IV.23 : Valeurs de $v_{e\text{-eff}}$ et L_{GF} déterminées avant passivation de la série d'échantillons n°7.

Après passivation	$v_{e\text{-eff}} (\times 10^7 \text{cm/s})$	$L_{GF} \text{ (nm)}$
T745	0,45	528
T746	0,53	550
T747	0,52	142
T748	0,45	539

Tableau IV.24 : Valeurs de $v_{e\text{-eff}}$ et L_{GF} déterminées après passivation de la série d'échantillons n°7.

On constate que certaines valeurs de $v_{e\text{-eff}}$ calculées avant passivation sont supérieures à celles obtenues après passivation ainsi qu'aux valeurs théoriques non-déembedées ($1,24 \times 10^7 \text{cm/s}$). Ceci peut s'expliquer par le fait que le modèle utilisé est valide pour une hétérostructure avec un gaz d'électrons parfaitement confinée et sans dopage résiduel qui viendrait modifier la vraie valeur de l'épaisseur de la couche barrière. Cette erreur est d'autant plus marquée que la longueur de grille est petite ($L_{GF} \gg L_G$). La vitesse effective des électrons obtenue après passivation correspond dans le meilleur des cas à près de 43% de celle de l'état de l'art ($v_{e\text{-eff, littérature}} < 1,24 \times 10^7 \text{cm/s}$). Par conséquent, cette grandeur contribue à expliquer les faibles de valeurs de F_t obtenues.

Cependant, l'équation (Eq. 1) montre que la fréquence de transition est aussi inversement proportionnelle à la longueur effective de la grille. Soit pour $L_G = 100\text{nm}$, $F_{t, théorique} = 1,24 \times 10^7 / (2\pi \times 100 \times 10^{-7}) = 197\text{GHz}$. Ainsi, si l'on tient compte de la vitesse des électrons expérimentale ($F_{t, th}$ passe à 88GHz) et de la longueur L_{eff} calculées pour la couche

T746, alors $F_{t,th}$ passe à 34GHz. Ce résultat théorique est conforme à celui obtenu par la mesure expérimentale ($F_{t,mesuré}=30GHz$). Par conséquent, la dégradation de la qualité matériau du canal est responsable de la diminution de 65% de la valeur de F_t et les 32% restants sont attribués aux états de surface (L_{GF}). La différence entre les 34GHz théorique et les 30GHz expérimentale est certainement due au dopage résiduel après passivation.

La **Figure IV.47** montre les valeurs de la tension seuil obtenues expérimentalement à partir de la caractéristique $I_{DS}(V_{GS})$, sur des échantillons de la série 7 après passivation. On retrouve les effets de canaux courts avec une diminution plus accentuée de la tension seuil pour les transistors à faible rapport d'aspect. La passivation aurait du permettre de réduire considérablement les tensions seuils ce qui n'a pas été observé. Ceci peut être expliqué par une dégradation des contacts de grilles après passivation.

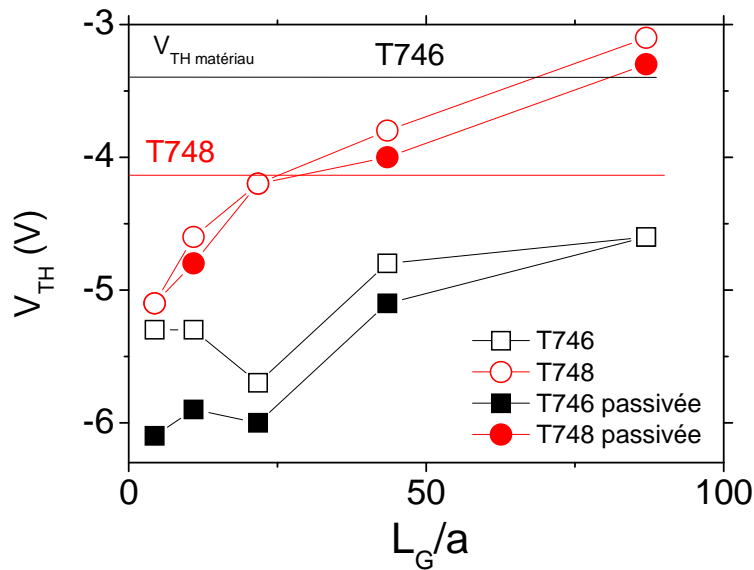


Figure IV.47 : Valeurs de la tension seuil en fonction de L_G/a_{AlGaN} de la série d'échantillon N°7.

6 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons présenté l'impact des paramètres de la structure sur le fonctionnement du transistor HEMT AlGa_xN/GaN. Ainsi, Nous avons déterminé l'épaisseur critique de barrière Al_xGa_{1-x}N à partir de laquelle un gaz 2D est formé pour différents taux d'aluminium. Ensuite, nous avons établi la variation de la densité de charge du 2DEG en fonction de l'épaisseur et du taux d'aluminium de la couche barrière Al_xGa_{1-x}N, avec et sans les effets de relaxation. Egalement, nous avons discuté des principales limitations des transistors HEMTs AlGa_xN/GaN, telles que l'effet de l'auto-échauffement, de la contrainte technologique liée à la grille et de l'ionisation par impact dans le canal. Par la suite, nous avons décrit les différences étapes technologiques nécessaires à la fabrication d'un transistor HEMT.

Par ailleurs, nous avons montré que l'incorporation du bore ou de l'aluminium dans une matrice de GaN permet d'améliorer le caractère isolant de la couche tampon. Une étude comparative entre ces deux alliages a permis de conclure que l'incorporation du bore dans une matrice de GaN était plus efficace que ne l'est l'aluminium. Les résultats obtenus sur les premières structures de transistors contenant du bore n'ont pas permis d'atteindre les résultats escomptés. Ces insuffisances ont été attribuées au faible taux d'aluminium dans la couche barrière AlGa_xN et à la faible épaisseur de la couche tampon GaN (quelques centaines de nm).

Cette étude a été poursuivie en utilisant la couche B_{0.01}GaN comme contre-barrière. Ainsi, nous avons obtenu une amélioration du confinement des porteurs dans le canal 2D. Les mesures par effet Hall nous ont permis de conclure que cette couche B_{0.01}GaN optimale doit être de 1nm au maximum, contenir pas plus de 1% de bore et être à proximité immédiate de l'interface AlGa_xN/GaN (10nm plus précisément). Au delà de cette épaisseur critique pour la couche B_{0.01}GaN, nous avons remarqué une détérioration des propriétés de transport laquelle a été attribuée à une dégradation de la qualité matériau. Par ailleurs, nous avons montré que l'ajout d'une couche de cap en GaN permet de passiver efficacement les états de surface et d'améliorer les caractéristiques du contact Schottky lorsque la structure fonctionne en DC continu. Néanmoins, nous avons aussi constaté que la couche de cap a pour effet d'altérer les contacts ohmiques.

Les caractéristiques de sortie du transistor (avec et sans grille flottante) ont permis de constater une grande différence avec les mesures effet Hall et les mesures I(V). Cet écart relativement important a été attribué aux pièges présents en grand nombre dans la couche barrière et en surface de l'hétérostructure. Les caractéristiques en hyperfréquence des composants de la série 7 ont été déterminées par extraction des paramètres S_{ij} en petit signal. De manière générale, nous avons pu constater que la passivation $\text{SiO}_2/\text{Si}_3\text{N}_4$ permettait d'améliorer les performances hyperfréquences des composants. La vitesse effective des électrons ($v_{e\text{-eff}}$) a été extraite en réalisant un "scaling" des composants.

Cependant, seule la structure comportant une couche de contre-barrière B GaN a permis de fonctionner efficacement en hyperfréquence. Ce comportement a été corrélé à une réduction des pièges dans l'hétérostructure après la croissance de cette couche et a été montré sur les caractéristiques de sortie du transistor en DC pulsé. Au final, nous sommes parvenus à montrer que la dégradation de la qualité matériau du canal est responsable de la diminution de 65% du F_t et que les états de surface l'étaient également à échelle de 32%.

7 Références bibliographiques

- [1] Z. Y. Fan, J. Li, M. L. Nakarmi, J. Y. Lin, and H. X. Jiang, *Appl. Phys. Lett.*, **88** (2006) 073513.
- [2] T. Palacios, A. Chakraborty, S. Heikman, S. Keller, S. P. DenBaars, and U. K. Mishra, *IEEE Electron Device Lett.*, **27**(1) (2006) 13-15.
- [3] A. M. Dabiran, A. M. Wowchak, A. Osinsky, J. Xie, B. Hertog, B. Cui, D. C. Look and P. P. Chow, *Appl. Phys. Lett.*, **93** (2008) 082111.
- [4] S. Ould Saad Hamady, T. Baghdadli, S. Gautier , M. Bouchaour , J. Martin and A. Ougazzaden, *phys. stat. sol. (c)* **5** (9) (2008) 3051–3053.
- [5] M. A. Khan, A. Bhattarai , J. N. Kuznia and D. T. Olson, *Appl. Phys. Lett.* **63** (1993) 1214
- [6] N. Zhang, Thesis, University of California, Santa Barbara, 2002.
- [7] J-C Gerbedoen, Thèse, Université Lille 1, 2009.
- [8] O. Ambacher, J. Smart, J.R. Shealy, N.G. Weimann, K. Chu, M. Murphy, W.J. Schaff, L.F. Eastman, R. Dimitrov, L. Wittmer, M. Stutzmann, W. Rieger, J. Hilsenbeck, *J. Appl. Phys.* **85** (6) (1999) 3222-3233.
- [9] B. Benbakhti, Thèse, Université Lille 1, 2009.
- [10] E. Morvan, communication interne, IEMN.
- [11] P. C. Chao, P. M. Smith, S. C. Palmater, and J. C. M. Hwang, *IEEE Transactions on Electron Devices* **32** (6) (1985).
- [12] P. Tilmant, communication interne, IEMN.
- [13] Wakita, A. S., Su, C.-Y., Rohdin, H., Liu, H.-Y., Lee A., Seeger J., Robbins and V. M., *Journal of Vacuum Science and Technology B: Microelectronics and Nanometer Structures* **13** (6) (1995) 2725-2728.
- [14] M. Mattalah, A. Soltani, J-C. Gerbedoen, Az. Ahaitouf, N. Defrance, Y. Cordier, J.-C. De Jaeger *Phys. Stat. Sol. C* (2012), en cours de publication.
- [15] R. Vinod, Thèse, Université de Metz, en cours de soutenance.

- [16] M. Kurimoto, T. Takano, J. Yamamoto, Y. Ishihara, M. Hoie, M. Tsubamoto and H. Kawanishi, *J. Cryst. Growth* **221** (2000) 378.
- [17] A. Ougazzaden, S. Gautier, T. Moudakir, Z. Djebbour, Z. Lochner, S. Choi, H. J. Kim, J.-H. Ryou, R. D. Dupuis and A. A. Sirenko, *Applied Physics Letters* **93** (2008) 083118.
- [18] M. Maghnia 2008, thèse, Sidi Bel Abbès (Algérie)
- [19] Beaula Rowena et *al*, *IEEE Electron Device Lett.* **32** (2011) 1534-1536.
- [20] R. Vetury, Thesis, University of California, Santa Barbara, 2002.
- [21] Xiao Tang, Thèse, Université Lille 1.
- [22] G.H.Jessen, R.C. Fitch, J.K. Gillespie, G. Via, A. Crespo, D. Langley, D.J. Denninghoff, M. Trejo, E.R. Heller, *IEEE Transactions on Electron Devices* **54** (10) (2007) 2589 – 2597.

CONCLUSION GENERALE

Les travaux menés dans le cadre de cette thèse et décrits dans ce manuscrit présentent un double objectif : la première tâche est destinée à comprendre et optimiser le transport électronique vertical au travers d'une double barrière AlGaN/GaN afin de concevoir et réaliser des diodes à effet tunnel résonant ; la seconde tâche est plus concrète et contribue au développement et à l'amélioration des performances des transistors HEMTs grâce à la présence d'une couche de contre-barrière B_{0.2}GaN située dans la couche tampon GaN.

Le premier chapitre a été consacré au rappel des propriétés générales des matériaux semiconducteurs III-N à large bande interdite. Une brève description des causes responsables de la limitation des performances des composants réalisés permet d'appréhender plus sereinement les solutions à envisager. Celles-ci sont étroitement liées essentiellement aux défauts structuraux, aux impuretés résiduelles et à l'auto-échauffement du dispositif. En conséquence, le choix de la technique de croissance et du substrat d'accueil y est fondamental. Les notions de polarisations piézoélectrique et spontanée sont définies afin de mettre l'accent sur l'aspect polaire des matériaux à base de GaN et des inconvénients que ces propriétés peuvent engendrer dans les mécanismes de transport électronique dans les hétérostructures III-N en général. Ce chapitre s'achève sur une présentation des résultats de structures de bandes des matériaux wurtzite GaN, AlN et BN déterminés par calculs ab-initio et des propriétés de transport de ces mêmes semiconducteurs obtenues suite à des simulations Monte-Carlo.

Le second chapitre débute par une description détaillée du formalisme des fonctions de Green hors équilibre laquelle permet une description plus rigoureuse du transport quantique vertical au travers d'hétérostructure mésoscopique ou nanométrique par l'introduction du concept de self-énergie liée aux contacts ohmiques. Dans ce cadre, nous montrons que la partie imaginaire des self-énergies conditionne la densité d'états par un élargissement et un décalage des niveaux d'énergies discrets de la zone active du composant. Ce formalisme est utilisé pour modéliser le transport électronique balistique à une dimension dans une diode à effet tunnel résonant à double barrière symétrique AlGaN/GaN. Le modèle est auto-cohérent

et basé sur l'approximation de la masse effective. L'étude de la répartition des porteurs dans l'hétérostructure montre que le champ électrique interne est responsable de la formation d'un gaz d'électrons à 2 dimensions côté cathode et de l'apparition d'une zone de charge d'espace côté anode. Le couplage de ces deux phénomènes explique pourquoi le transport électronique dans les hétérostructures III-N à large bande interdite présente un caractère imprévisible. Deux solutions sont proposées afin de limiter l'impact de ces derniers sur le transport. La première solution consiste à réduire l'épaisseur des couches espaceurs GaN nid en vue de délocaliser les fonctions d'ondes du gaz d'électrons à 2 dimensions côté cathode et ainsi contraindre l'évacuation des porteurs via les contacts ohmiques. La seconde solution proposée (et non simulée) consiste à réduire la zone de charge par l'ajout d'une couche de matériau semiconducteur à plus petit gap en amont de la couche barrière AlGaIn côté anode (exemple avec InGaIn). Ce chapitre s'achève sur une présentation des caractéristiques $J(V)$ simulées en fonction de la largeur du puits GaN, de l'épaisseur et du taux d'aluminium dans les couches barrières AlGaIn. L'évolution de la densité de courant et des résistances différentielles négatives des différents niveaux résonants permet alors d'estimer et/ou d'optimiser les performances de la RTD.

Dans le troisième chapitre, une double stratégie est employée quant à l'obtention des zones actives des RTDs libres de dislocations avec une approche ascendante (*bottom-up*) ou descendante (*top-down*). Dans le cas de la première approche, deux techniques de préparation de la surface sont utilisées : la croissance épitaxiale sélective au travers de micro et nano ouvertures d'un masque diélectrique et la reprise de croissance sur des nano et micro-piliers de GaN. Les résultats obtenus montrent que les gammes de températures usuellement utilisées en MBE induisent des longueurs de diffusion des espèces insuffisantes pour permettre une épitaxie sélective plane à l'échelle nanométrique dans le sens de la croissance. Cette approche par cette technique de croissance a par conséquent été abandonnée. L'approche descendante classique a donc été appliquée avec succès bien évidemment mais avec une faible statistique pour obtenir un nano-pilier à double barrières libre de dislocations.

Par la suite, la contrainte résiduelle dans ces micro-édifices a été étudiée et mesurée au moyen de la technique micro-Raman. Nous avons montré que la distribution mécanique sur le plan d'un micro-pilier de GaN présente une évolution parabolique à symétrie cylindrique avec un maximum à son centre et que cette dernière se relaxe totalement pour des structures de

diamètres inférieurs à $1\mu\text{m}$. Ce résultat permet de confirmer que la contrainte est homogène dans des hétérostructures à l'échelle nanométrique, ce qui n'est pas le cas lorsque le diamètre de ces dernières est supérieur au micromètre. En conséquence, c'est un paramètre important à introduire dans les simulations pour espérer confronter les données théoriques avec les résultats expérimentaux.

La seconde partie de ce chapitre est consacré au développement de procédés de fabrication pour réaliser des nano-diodes dans une architecture planaire intégrée (soit par gravure au moyen d'un faisceau d'ions gallium ou par plasma avec une chimie chlorée). Différents outils de caractérisation ont été utilisés pour mesurer les caractéristiques $J(V)$ de ces objets (micromanipulateurs au FIB, *nanoprobe* et à l'analyseur de réseau). Les résultats de cette étude montrent que les défauts profonds présents dans les couches barrières AlGaN (en volume et aux interfaces), sont majoritairement responsables de la non-reproductibilité des mesures. Plusieurs solutions ont été proposées pour améliorer la reproductibilité de la résistance différentielle négative : d'une part, en réduisant les épaisseurs et les taux d'aluminium dans les couches barrières AlGaN et d'autre part en déposant un contact redresseur en vue de dépléter par effet de champ les pièges dans la zone active de la RTD. Ceci a permis de rendre la résistance différentielle négative reproductible dans une hétérostructure à double barrières AlN/GaN (1nm/1nm) plus de 50 fois à 120K et celle de type $\text{Al}_{0.25}\text{Ga}_{0.75}\text{N}/\text{GaN}$ observable à température ambiante.

Le dernier chapitre de ce travail est consacré au développement des transistors HEMT à base de GaN « borés » et d'en améliorer notamment les propriétés de transport. Une étude comparative de la résistivité de la couche tampon GaN montre que l'incorporation d'un faible taux de bore ($<1\%$) dans une matrice de GaN rend cette dernière plus résistive qu'une couche épaisse AlGaN avec 25% d'aluminium. Ce résultat est mis à profit pour étudier l'impact d'une couche de contra-barrière B GaN dans la couche tampon d'une hétérostructure à transistor standard. En effet, suite à une série d'optimisations de la couche B GaN (épaisseur, taux de bore et position dans la couche tampon), il paraît que lorsque cette dernière présente moins de 1% de bore et moins de 1 nm à proximité directe de l'interface AlGaN/GaN ($<10\text{nm}$), alors le confinement des porteurs dans le canal 2DEG s'en trouve amélioré et le dopage résiduel de la zone active s'en trouve nettement réduit.

Ces conclusions sont déduites à partir de mesures en régime statique et en pulsé. Plusieurs hypothèses et explications ont été proposées pour tenter d'apporter des éléments de réponses quant à l'origine des mécanismes responsables de la baisse du courant drain dans les transistors lorsque la grille est flottante ou bien sous polarisation. D'autres mesures ont été également réalisées en régime hyperfréquence à petit signal (F_t , F_{max}). Les résultats les plus marquants ont été obtenus après passivation sur une structure HEMT avec back-barrière BGaN pour des longueurs de grille de 100nm. Ces composants ont permis d'atteindre des fréquences de transition et d'oscillation respectivement de l'ordre 30GHz et 52GHz. En dernière partie, nous avons réalisé un "scaling" sur les grilles afin de déterminer la vitesse effective des électrons dans le canal et la longueur effective de la grille.

PERSPECTIVES

Les perspectives de ce travail pour améliorer ces dispositifs sont multiples :

Côté diode à effet tunnel résonant, la reproductibilité et donc la possibilité de rendre fonctionnel un tel dispositif à température ambiante passe par une réduction des champs électriques internes et des défauts structuraux (dislocations traversantes), des états d'interfaces et des pièges en volume des couches barrières. En conséquence, les couches barrières ne doivent pas présenter un gap trop important et être les plus minces possibles (<1nm). Une autre solution nécessite à utiliser par exemple, un matériau accordé en paramètre de maille avec GaN comme $\text{In}_{0,17}\text{Al}_{0,83}\text{N}$. Le second point consiste à rendre possible l'effet tunnel résonant dans les 2 sens de balayage en tension en utilisant une hétérostructure à double barrières asymétrique composée d'un même matériau ou de deux matériaux différents (exemple avec AlGaN et InAlN). Une troisième solution consiste à utiliser des matériaux III-N à large bande interdite semi-polaires voire non polaires. Enfin, une solution possible pour réduire la zone de charge d'espace dans la zone active est d'y intercaler en amont de la couche barrière côté anode une couche à plus petit gap (exemple avec InGaN ou B GaN) et réduire l'épaisseur des couches espaceurs GaN afin d'atténuer la densité d'électrons dans le gaz 2D côté cathode.

Côté transistor, l'ajout d'un nouvel élément (le bore) a permis d'améliorer les performances des hétérostructures existantes en réduisant les impuretés résiduelles dans la zone active du transistor mais il s'est avéré que la couche B GaN optimisée ne joue pas son rôle réel de « contre-barrière ». Pour se faire, d'autres tentatives de synthèse de ce matériau sont nécessaires pour la rendre plus épaisse et améliorer le confinement des porteurs comme ceci a été montré dans le cas de l'InGaN. Il est possible aussi d'incorporer une faible concentration de bore dans la couche barrière et observer éventuellement des améliorations mais cette idée n'a pour objet que de satisfaire notre curiosité scientifique.

Annexe A :

Système électronique avec interactions inélastiques

1. Matrice de densité $\rho(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; \mathbf{t})$

Dans le modèle semi-classique, la probabilité d'occupation d'un état \mathbf{k} donné par les électrons est souvent décrite par sa fonction de distribution $\mathbf{f}(\mathbf{k}; \mathbf{t})$. Cela n'est plus vrai lorsque les dimensions du composant \mathbf{L} deviennent comparable à celle d'une longueur caractéristique \mathbf{L}_Φ dite longueur de cohérence.

Une information supplémentaire s'avère nécessaire en mécanique quantique pour pouvoir décrire l'intégralité des états \mathbf{k} des porteurs. La matrice de densité $\rho(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; \mathbf{t})$ permet en outre d'introduire cette information manquante qu'est la relation de phase entre deux états \mathbf{k} et \mathbf{k}' distincts à l'instant \mathbf{t} .

$$\mathbf{f}(\mathbf{k}, \mathbf{t}) = [\rho(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; \mathbf{t})]_{\mathbf{t}=\mathbf{t}'} \quad (1)$$

Le modèle semi-classique a pour habitude de négliger les éléments hors de la diagonale $\rho(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; \mathbf{t})$ et d'approximer les éléments diagonaux de la matrice densité $\rho(\mathbf{k}, \mathbf{k}; \mathbf{t})$ par la fonction de distribution $\mathbf{f}(\mathbf{k}; \mathbf{t})$. Cette approximation n'est plus valide pour des composants dits en cohérence de phase ($\mathbf{L} \leq \mathbf{L}_\Phi$). En conséquence, les éléments hors de la diagonale $\rho(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ ne peuvent plus être négligés.

2. Fonction de Corrélation \mathbf{G}^n des électrons

Nous avons vu dans le paragraphe précédent que le concept de matrice de densité $\rho(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; \mathbf{t})$ permettait d'apporter à la fonction de distribution $\mathbf{f}(\mathbf{k}, \mathbf{t})$ une information supplémentaire sur la cohérence de phase entre les états \mathbf{k} et \mathbf{k}' . Bien que ce concept soit souvent employé dans les systèmes d'énergies discrets, il n'en demeure pas général.

D'ordinaire, on étend le concept de matrice de densité $\rho(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; \mathbf{t})$ vers une fonction plus générale $\mathbf{G}^n(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; \mathbf{t}, \mathbf{t}')$ dite fonction de corrélation non-local. A l'instar de la matrice de densité $\rho(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; \mathbf{t})$ pour laquelle $\mathbf{t}=\mathbf{t}'$, la fonction $\mathbf{G}^n(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; \mathbf{t}, \mathbf{t}')$ permet d'établir une corrélation entre l'amplitude de l'état \mathbf{k} à l'instant \mathbf{t} avec celle de l'amplitude de l'état \mathbf{k}' à l'instant \mathbf{t}' :

$$\rho(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; \mathbf{t}) = [\mathbf{G}^n(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; \mathbf{t}, \mathbf{t}')]_{\mathbf{t}=\mathbf{t}'} \quad (2)$$

Aux états stationnaires, la fonction de corrélation \mathbf{G}^n a pour résultat particulier de dépendre de la différence de temps τ entre les variables \mathbf{t} et \mathbf{t}' : $\tau = \mathbf{t} - \mathbf{t}'$. Ainsi, en définissant $\mathbf{G}^n(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; \mathbf{E})$ comme étant la transformée de fourrier de $\mathbf{G}^n(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; \tau)$, il est possible de montrer que $[\mathbf{G}^n(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; \mathbf{t}, \mathbf{t}')]_{\mathbf{t}=\mathbf{t}'}$ peut être obtenu à partir de l'intégrale de $\mathbf{G}^n(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; \mathbf{E})$ sur l'énergie:

$$[\mathbf{G}^n(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; \mathbf{t}, \mathbf{t}')]_{\mathbf{t}=\mathbf{t}'} = \int 1/2\pi \mathbf{G}^n(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; \mathbf{E}) d\mathbf{E} \quad (3)$$

3. Fonction de Corrélation \mathbf{G}^p des trous

Nous avons d'établi dans la section précédente une généralisation de la fonction de distribution $\mathbf{f}(\mathbf{k})$ des électrons en une fonction non-local dite fonction de corrélation $\mathbf{G}^n(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; \mathbf{t}, \mathbf{t}')$. En s'appuyant sur ces mêmes arguments, on établit une analogie entre la fonction de distribution $(\mathbf{1} - \mathbf{f}(\mathbf{k}))$ des trous appartenant à la bande de conduction, et la fonction de corrélation $\mathbf{G}^p(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; \mathbf{t}, \mathbf{t}')$. La détermination des fonctions \mathbf{G}^n et \mathbf{G}^p nous permet de connaitre dans l'ordre le nombre d'états occupés et vides. La somme de ces deux quantités nous renseigne sur le nombre d'états permis, défini par la fonction spectral \mathbf{A} :

$$\mathbf{A} = \mathbf{G}^n + \mathbf{G}^p \quad (4)$$

4. Fonctions de diffusions Σ^{in} et Σ^{out}

Les fonctions de diffusions entrante $\mathbf{S}^{\text{in}}(\mathbf{k}, \mathbf{t})$ et $\mathbf{S}^{\text{out}}(\mathbf{k}, \mathbf{t})$ sortante employées dans le modèle semi-classique, nous permettent d'établir dans l'ordre : les taux de diffusions des électrons entrants et sortants de l'état \mathbf{k} à l'instant \mathbf{t} . Ce concept est généralisé en substituant les fonctions $\mathbf{S}^{\text{in}}(\mathbf{k}, \mathbf{t})$ par $\Sigma^{\text{in}}(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; \mathbf{t}, \mathbf{t}')$ et $\mathbf{S}^{\text{out}}(\mathbf{k}, \mathbf{t})$ par $\Sigma^{\text{out}}(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; \mathbf{t}, \mathbf{t}')$ pour tenir compte de la cohérence de phase. Par la suite, on associe aux états stationnaires : les transformées de Fourier $\Sigma^{\text{in}}(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; \mathbf{E})$ et $\Sigma^{\text{out}}(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; \mathbf{E})$ respectives de $\Sigma^{\text{in}}(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; \tau)$ et $\Sigma^{\text{out}}(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; \tau)$ de la même façon qu'il a été établie précédemment pour \mathbf{G}^n .

Annexe B :

Caractérisation du contact ohmique

La méthode TLM est une technique largement employée dans la caractérisation électrique des contacts ohmiques. Elle est fondée sur l'hypothèse que la résistance de contact R_c est déterminée par l'interface métal-SC et que la résistivité sous le contact est uniforme. Cette méthode nécessite la réalisation de contacts rectangulaires espacés d'une distance L variables. La mesure de la résistance R entre deux contacts est alors donnée par :

$$R = (R_{\square} / W) \times L + 2R_c + R_p$$

Où W est largeur des contacts, R_p la résistance des fils de connexion, R_c la résistance des contacts et R_{\square} la résistance carrée de la couche active (**Figure B**).

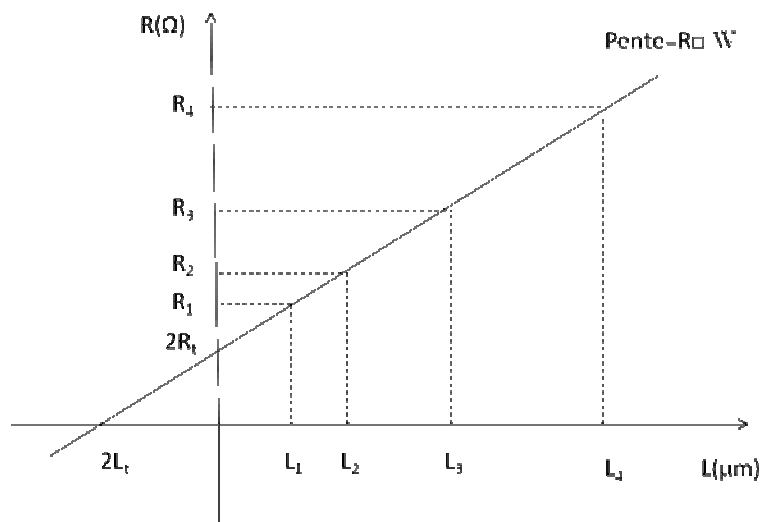


Figure B : Résistance R en fonction de la distance L entre deux contacts ohmiques.

La méthode des 4 pointes est utilisée pour s'affranchir de R_p . Une paire de pointes permet d'injecter le courant, et l'autre paire sert à mesurer de la tension. Ainsi, en traçant la variation de R en fonction de L , il devient possible de déterminer R_{\square} à partir de la pente et R_c à partir de l'ordonnée à l'origine. L'extrapolation linéaire de cette droite à $R=0$, permet de d'obtenir la longueur de transfert L_t . Dès lors, la résistance spécifique de contact ρ_c peut être enfin obtenue par la relation: $\rho_c = R_{\square} L_t^2$.

Annexe C :

Caractérisation du contact Schottky

Le caractéristique en direct de la grille permet de juger de la qualité du contact Schottky. D'un point de vue théorique, le courant de la grille en direct est le résultat de deux contributions:

- un courant thermoïonique dû à l'émission des électrons du métal vers le semiconducteur $I_S = AT^2S \exp^{(qV/\eta k_B T)}$
où A : constante de Richardson ($A/m^2.K^2$),
T : la température absolue (K),
S : surface de la grille (m^2)
- un courant dû à la diffusion des électrons du semiconducteur vers le métal $I_D = I_S \exp^{(qV/\eta k_B T)}$.
où I_S est le courant de saturation
et où, η est le coefficient d'idéalité. Ce dernier traduit la qualité de l'interface métal/semiconducteur. Il doit être le plus proche possible de 1 pour tendre vers un contact Schottky idéal.

Ainsi, le courant total traversant la grille est égal à : $I = I_D - I_S$

Soit $I = I_S [\exp^{(qV/\eta k_B T)} - 1]$.

De la mesure de ce courant, nous avons pu déterminer le coefficient d'idéalité η et la hauteur de barrière Φ_b .

Le coefficient d'idéalité η est déduit à partir de la pente de I en coordonnées semi-log:

$$\eta = q/kT \Delta V_g / \Delta(\log I_g)$$

Et la hauteur de barrière Φ_b est calculée à partir de la relation:

$$\Phi_B = \eta kT/q \ln(I_S/AT^2S)$$

Où I_S est obtenu par extrapolation de la caractéristique pour $V_g=0$.

Une valeur élevée de Φ_B autorise une excursion importante du signal appliqué sur la grille en direct. Cela limite l'apparition prématurée du courant de grille, ce qui favorise l'excursion complète du réseau de sortie lorsqu'un signal de puissance est appliqué sur la grille.

La tenue en inverse de la diode est déterminante puisqu'elle présage la capacité à pincer notre composant. En effet, il est impératif que cette tenue en tension soit supérieure à la tension de pincement du composant. Par conséquent, la tension de claquage en inverse de la grille conditionne les potentialités d'un transistor à générer de la puissance. D'autre part, il est important que la zone de blocage précédent l'avalanche soit la plus parfaite possible, c'est-à-dire que la diode laisse passer un minimum de courant.

En effet, un courant de fuite de grille est préjudiciable aux performances du transistor. Généralement, la tension de claquage de la diode en inverse est définie pour un courant de 1mA/mm. L'origine de ce courant est un effet tunnel pur, faisant que les électrons sont émis à travers la barrière de potentiel.

