

N° d'ordre: 272

50376
1988
217



50376
1988
217

THESE

PRESENTEE A

L'UNIVERSITE DES SCIENCES ET TECHNIQUES DE LILLE FLANDRES ARTOIS

POUR OBTENIR LE TITRE DE

DOCTEUR EN ELECTRONIQUE

par

WU YEN

ETUDE DES PHENOMENES DE TRANSPORT DANS LES GAZ D'ELECTRONS
A DEUX DIMENSIONS DANS LES HETEROJONCTIONS
PAR LA METHODE DE MONTE CARLO

Soutenu le 17 Novembre 1988 devant la Commission d'Examen

Membres du Jury

MM.E.CONSTANT
J.ZIMMERMANN
J.P.NOUGIER
R.FAUQUEMBERGUE
G.ALLAN
G.SALMER

Président
Directeur de thèse
Rapporteur
Rapporteur
Examineur
Examineur

Ce travail a été effectué au Centre Hyperfréquences et Semiconducteurs à l'Université des Sciences et Techniques de Lille Flandres Artois, dirigé par Monsieur le Professeur G.Salmer, qui me fait l'honneur de participer à la commission d'examen.

Monsieur le Professeur E.Constant me fait l'honneur de présider la commission d'examen et je l'en remercie vivement.

Je remercie sincèrement Monsieur le Professeur J.P.Nougier et Monsieur le Professeur R.Fauquemberg qui me font l'honneur de juger ce travail et d'en être les rapporteurs.

J'exprime également mes plus vifs remerciements à Monsieur le Professeur G.Allan qui me fait l'honneur de participer à la commission d'examen.

Je tiens à exprimer ici ma reconnaissance envers Monsieur J.Zimmermann, Directeur de recherches au C.N.R.S, qui a dirigé ce travail et m'a fait profité de ses expériences.

Mes remerciements s'adressent également au personnel du Centre de Traitement de l'Information de Lille, en particulier à M.Tinel.

Mesdames S.Vandrome, C.Bouly, Guo Changhui ont assuré la dactylographie de ce mémoire. Je tiens à les remercier vivement pour la compétence, le soin et la patience avec lesquels cette tâche a été accomplie.

Enfin J.P.Dehorter a assuré la réalisation finale de ce mémoire: impression et brochage, je l'en remercie sincèrement.

A tous ceux qui me sont chers

Je ne t'ai donné ni visage, ni place qui te soit propre, ni aucun don qui te soit particulier, ô Adam, afin que ton visage, ta place, et tes dons, tu les veuilles, les conquières et les possèdes par toi-même. Nature enferme d'autres espèces en des lois par moi établies. Mais toi, que ne limite aucune borne, par ton propre arbitre, entre les mains duquel je t'ai placé, tu te définis toi-même. Je t'ai placé au milieu du monde, afin que tu puisses mieux contempler ce que contient le monde. Je ne t'ai fait ni céleste ni terrestre, mortel ou immortel, afin que de toi-même, librement, à la façon d'un bon peintre ou d'un sculpteur habile, tu achèves ta propre forme.

PIC DE LA MIRANDOLE

TABLE DES MATIERES

TABLE DES MATIERES

<u>INTRODUCTION</u>	5
<u>CHAPITRE I</u> : <u>HISTORIQUE ET PRESENTATION QUALITATIVE DU MODELE..</u>	7
I.1 Introduction.....	7
I.2 La modélisation de la structure grille- hétérojonction GaAs/GaAlAs et ses aspects qualitatifs.....	9
I.2.1 Structure de base d'un TEGFET.....	9
I.2.2 Aspects qualitatifs de la structure grille-hétérojonction GaAs/GaAlAs.....	9
a) Sous-bandes d'énergie.....	10
b) Bidimensionalité.....	10
c) Transfert intersous-bande.....	10
d) Densité d'états.....	11
e) Modulation de la charge accumulée et de la géométrie du puits.....	11
<u>CHAPITRE II</u> : <u>PRESENTATION DE LA SIMULATION.....</u>	12
II.1 Introduction.....	12
II.2 Rappel du principe de la méthode de Monté- Carlo à trois dimensions.....	12
II.3 Le modèle de Monté-Carlo pour une hétéro- structure.....	14
II.3.1 Le modèle de Monté-Carlo pour les électrons qui sont à deux dimensions..	15
II.3.2 Couplage entre un système électroni- que à deux dimensions et un système à trois dimensions.....	16
II.3.3 Transfert spatial dans l'espace réel..	17
II.4 La mise en oeuvre de la simulation.....	19
II.4.1 Généralités.....	19
II.4.2 Initialisation de la simulation.....	20

<u>CHAPITRE III</u>	:	<u>STRUCTURE DE BANDES.....</u>	22
III.1		Structure de bandes de l'AsGa et de l'AlGaAs en volume.....	22
III.2		Les bandes d'énergie dans les hétéro-jonctions.....	23
III.2.1		Diagramme de bandes.....	23
III.2.2		Détermination des états électro-niques dans le puits de potentiel	
<u>CHAPITRE IV</u>	:	<u>CALCULS DES PROBABILITES DE COLLISION.....</u>	30
IV.1		Généralités.....	30
IV.2		Cas du système à trois dimensions.....	31
IV.3		Cas du système à deux dimensions.....	31
IV.3.1		Collisions sur les phonons.....	32
IV.3.2		Collisions les impuretés ionisées.....	35
IV.4		Couplage entre un système à deux dimen-sions et un système à trois dimensions...	36
<u>CHAPITRE V</u>	:	<u>CONTRIBUTION A L'ETUDE DE LA MOBILITE ET DE LA VITESSE DE DERIVE ELECTRONIQUES DANS L'HETERO-JONCTION GaAs/GaAlAs EN REGIME STATIONNAIRE.....</u>	38
<u>CHAPITRE VI</u>	:	<u>CONTRIBUTION A L'ETUDE DE LA DIFFUSION DANS L'HETEROJONCTION GaAs/GaAlAs EN REGIME STATIONNAIRE.....</u>	42
VI.1		Introduction.....	42
VI.2		Rappels des définitions.....	42
VI.2.1		Coefficient de diffusion par étalement d'un paquet.....	42
VI.2.2		Coefficient de diffusion bruit....	44
VI.3		Résultats et interprétations.....	46
VI.3.1		Fonctions de corrélation.....	46
VI.3.2		Densités spectrales de bruit.....	49
VI.3.3		Coefficients de diffusion	50
<u>CONCLUSION GENERALE.....</u>			51
<u>BIBLIOGRAPHIE.....</u>			53
<u>ANNEXES.....</u>			62.

NOMENCLATURE DES NOTATIONS UTILISEES

- e : charge de l'électron
 \hbar : constante de Planck
 m^* : masse effective de l'électron
 k_B : constante de Boltzmann
 $\hbar\omega_0$: énergie du phonon optique polaire
 T : température du réseau
 X : pourcentage d'aluminium dans $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$
 ϵ_s : permittivité statique
 $N_d^+(z)$: concentration d'impuretés type "donneur"
 $N_a^-(z)$: concentration d'impuretés type "accepteur"
 ϵ_F : niveau de Fermi
 $N(z)$: densité volumique d'électrons
 N_s : densité surfacique d'électrons
 N_n : densité d'électrons de la sous-bande n
 S_p : espaceur
 β : angle de déviation
 \vec{k} : vecteur d'onde de l'électron à trois dimensions
 \vec{k}' : vecteur d'onde de l'électron à trois dimensions après collision
 $\vec{k}_{||}$: vecteur d'onde de l'électron à deux dimensions
 $\vec{k}'_{||}$: vecteur d'onde de l'électron à deux dimensions après collision
 k_x, k_y, k_z : composantes du vecteur d'onde de l'électron
 $Q = k' - k$
 $q = k' - k$
 q_x, q_y, q_z : composantes de q
 ϵ : énergie totale de l'électron
 ϵ' : énergie totale de l'électron après collision
 $\epsilon_{||}$: énergie de l'électron dans le plan parallèle à l'interface
 $\epsilon'_{||}$: énergie de l'électron dans le plan parallèle à l'interface après collision
 ϵ_n : énergie de la sous-bande n
 $V(z)$: énergie potentielle de l'électron
 ΔE : discontinuité à l'interface de l'hétérojonction
 \vec{E} : champ électrique

- $F_n(z)$: fonction d'onde enveloppe de la sous-bande n
 $\psi_{n, \vec{k}_{||}}(x, y, z)$: fonction d'onde de l'électron à deux dimensions
 $\psi_{\vec{r}}(\vec{r})$: fonction d'onde de l'électron à trois dimensions
 $b_{mn}^{\vec{k}}$: largeur effective
 $I_{mn}(q_z)$: intégrale de chevauchement
 $H_{mn}(Q)$: facteur de forme
 $M(\vec{k}', \vec{k})$: élément de matrice à trois dimensions
 $M_2^{mn}(\vec{k}'_{||}, \vec{k}_{||})$: élément de matrice à deux dimensions
 $S(\vec{k}', \vec{k})$: densité de probabilité à trois dimensions
 $S_2^{mn}(\vec{k}'_{||}, \vec{k}_{||})$: densité de probabilité à deux dimensions
 $\lambda(\epsilon)$: probabilité de collision par unité de temps à trois dimensions
 $\lambda_2^{mn}(\epsilon_{||})$: probabilité de collision par unité de temps à deux dimensions
 $P(\vec{k})$: probabilité de collision
 $\lambda_{S_{3d} \rightarrow \Gamma_{2d}}^n(\epsilon, z)$: probabilité de transition par unité de temps d'une vallée satellite à trois dimensions vers la vallée centrale à deux dimensions
 $\lambda_{\Gamma_{2d} \rightarrow S_{3d}}^n(\epsilon_{||}, z)$: probabilité de transition par unité de temps de la vallée centrale à deux dimensions vers une vallée satellite à trois dimensions
 $D_{||}(E)$: coefficient de diffusion longitudinal
 $D_{\perp}(E)$: coefficient de diffusion transverse
 $\text{Var } x(t), \text{Var } y(t)$: variances de déplacements
 $S(\omega)$: densité spectrale de puissance
 $\tau_{||}(E)$: temps de corrélation longitudinal
 $\tau_{\perp}(E)$: temps de corrélation transverse
 $\text{Var } V_x(E)$: variance de vitesse
 $\text{Var } V_y(E)$: variance de vitesse

INTRODUCTION

Le développement accru des systèmes de télécommunication opérant dans des zones de fréquences de plus en plus élevées exige que l'on dispose de composants amplificateurs microondes performants tant en puissance qu'en faible bruit afin d'augmenter leurs capacités de transmission et les distances qu'ils sont susceptibles de couvrir. D'autre part, l'augmentation des vitesses de traitement de l'information demande la réalisation de circuits intégrés alliant les critères de rapidité et de faible consommation.

Pour répondre à tous ces besoins, on s'efforçait, dans un premier temps, d'améliorer les performances du TEC GaAs, composant susceptible d'assumer ces fonctions. Or cette amélioration passe d'abord par une réduction des dimensions de la zone active, qui malheureusement se trouve limitée par les possibilités technologiques. Une modification de la structure même de la zone active est devenue une nécessité pour pallier à cet inconvénient.

C'est dans ce contexte qu'est née, voilà une dizaine d'années, grâce aux progrès considérables dans le domaine de la technologie épitaxiale (MBE, MOCVD), une nouvelle famille de composants baptisée du nom de TEGFET et dont la caractéristique principale est d'utiliser comme zone active le gaz d'électrons à deux dimensions formé à l'interface d'une hétérojonction, ce dernier possédant un certain nombre de propriétés physiques très attrayantes, par exemple, une mobilité élevée, notamment à basse température.

Très rapidement, les performances du TEGFET se sont montrées supérieures à celles du TEC GaAs conventionnel. L'étude de la dynamique électronique à deux dimensions est alors devenue un besoin pressant afin de mieux comprendre et d'optimiser le fonctionnement de ces nouveaux dispositifs très prometteurs.

Le but du présent travail est de mettre au point par la méthode de Monté-Carlo un modèle permettant d'étudier les propriétés de transport du gaz d'électrons à deux dimensions formé à l'interface de l'hétérojonction GaAs/GaAlAs.

L'hétérojonction forme un milieu assez complexe où peuvent intervenir de nombreux phénomènes physiques. Nous nous sommes bornés ici à en étudier quelques uns. Le TEGFET présente des vitesses de dérive et des mobilités élevées ainsi que de bonnes propriétés de bruit de fond. Nous nous sommes penchés sur la détermination de la vitesse d'électrons chauds et des coefficients de diffusion. Ces deux paramètres sont certainement parmi les plus importants à connaître lorsque l'on veut mettre au point des logiciels de simulation simplifiée utiles à la conception assistée par ordinateur. Le modèle développé dans ce mémoire vise, outre son intérêt propre du point de vue de la physique, à fournir des informations obtenues à partir de bases physiques sérieuses.

Dans le premier chapitre, nous aborderons les aspects qualitatifs du modèle établi ici. Le second chapitre donnera une présentation générale de la simulation mise en oeuvre au cours de ce travail. Le troisième chapitre sera consacré à la description des structures de bandes et de la méthode de résolution autocohérente de l'équation de Schrödinger permettant la détermination des états électroniques à deux dimensions dans le puits de potentiel. Le quatrième chapitre étudiera les différents types de collision mis en jeu dans la simulation et proposera un modèle qui décrit le couplage d'un système électronique à deux dimensions avec un système à trois dimensions. Dans le cinquième chapitre, nous reporterons les résultats relatifs à la mobilité et à la vitesse de dérive. Le sixième chapitre résumera les divers aspects de la diffusion mis en évidence par la simulation. Les détails des calculs effectués lors de la mise au point du programme de simulation seront donnés dans les annexes placées à la fin de ce mémoire.

CHAPITRE I

HISTORIQUE ET PRESENTATION QUALITATIVE DU MODELE

I.1. INTRODUCTION

En 1960, R.L. Anderson [1] a prédit la présence d'une couche d'accumulation d'électron à l'interface de certaines hétérojonctions, du côté du semi-conducteur à faible bande interdite. En effet, selon l'auteur, lors de la jonction de deux semiconducteurs à bandes interdites différentes, les niveaux de Fermi s'alignent, la conservation des paramètres physiques de part et d'autre de l'interface entraîne des courbures des bandes de conduction et de valence, ainsi que des discontinuités à l'interface pour ces deux bandes (Fig.I.1), et les électrons sont attirés vers le semiconducteur à faible bande interdite et s'accumulent à l'interface.

En 1969, L. Esaki et R. Tsu [2] ont suggéré qu'une telle structure présenterait une faible interaction entre électrons et impuretés ionisées, grâce à la technique dite de la modulation de dopage. Celle-ci consiste à doper uniquement la couche (ou les couches selon que l'on a affaire à une simple hétérojonction ou un super-réseau) à bande interdite plus élevée, réalisant ainsi la séparation spatiale des électrons accumulés dans la couche à bande interdite plus faible avec les impuretés.

En 1978, R. Dingle et Coll. [3] ont appliqué cette technique à un super-réseau de GaAs non dopé / GaAlAs dopé de type n+. Ils ont observé un transfert d'électrons de GaAlAs vers GaAs, confirmant ainsi les prévisions d'Anderson. De plus, ils ont obtenu de hautes mobilités électroniques. Ce fait a été interprété comme dû à la modulation de dopage.

T.J. Drummond, P. Deslescluse et coll. [4, 5, 9] ont montré, expérimentalement, que pour rendre plus efficace la séparation des électrons et des impuretés, on peut intercaler, entre les couches de GaAs et de GaAlAs, une fine couche non dopée appelée "espaceur"*. La réduction de l'interaction est d'autant plus importante que l'épaisseur de celle-ci est grande (Fig.I.2).

* Ce néologisme est directement inspiré du terme anglais spacer.

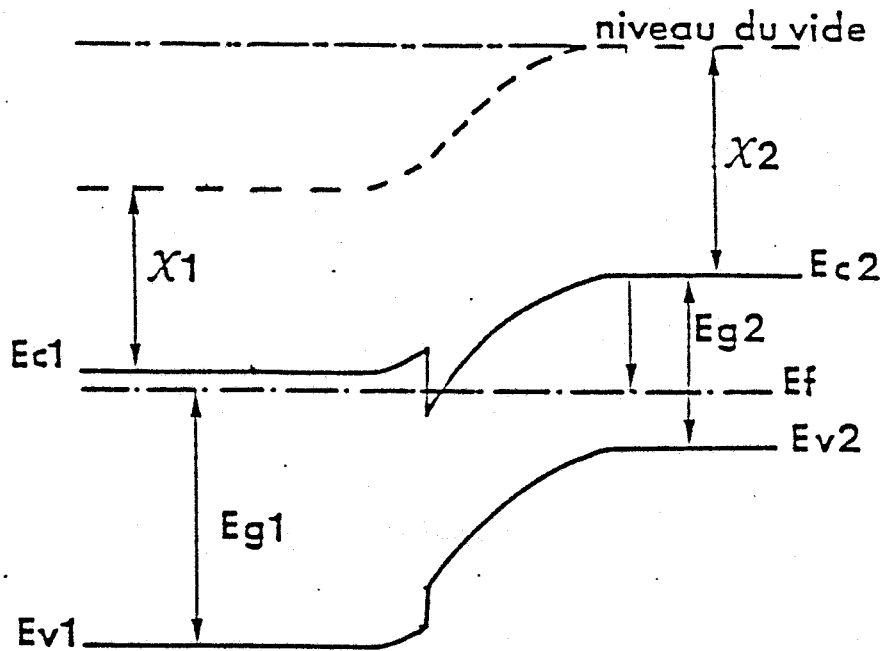
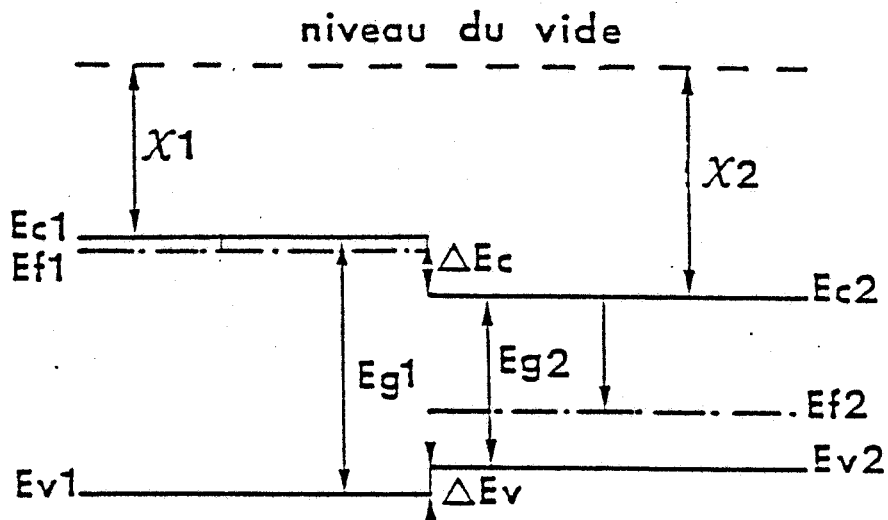


FIGURE I.1 Modèle d'Anderson d'une hétérojonction
GaAlAs (n^+)/GaAs (p^-)

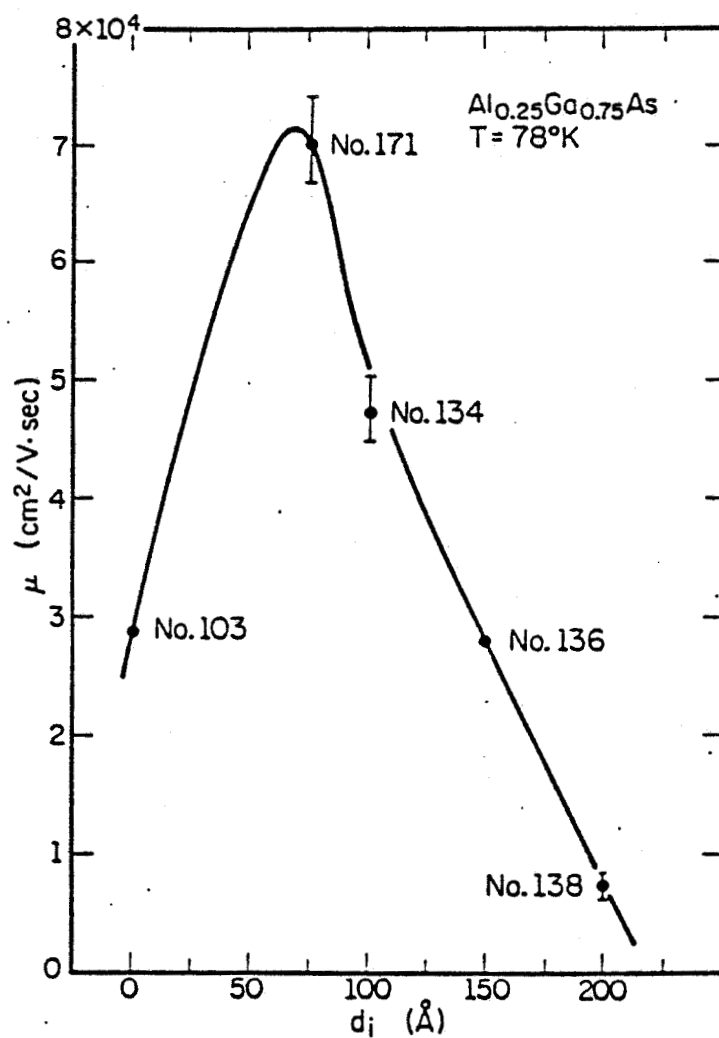


FIGURE I.2 Evolution de la mobilité électronique en fonction de l'espaceur [4].

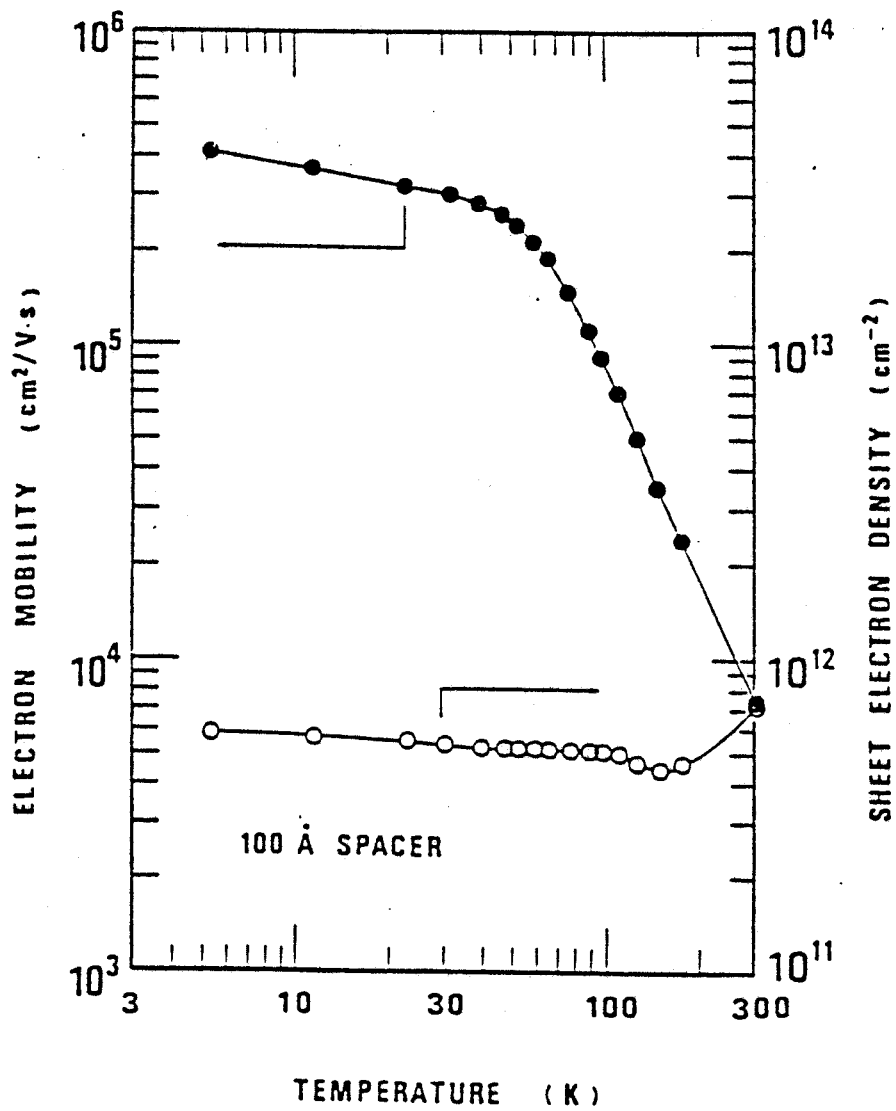


FIGURE I.3 Evolution de la mobilité électronique en fonction de la température dans une hétérojonction GaAlAs/GaAs réalisée par la MOCVD [12].

Depuis ces premiers travaux, des mobilités encore plus élevées ont été obtenues [6, 12] (Fig.I.3 ,4). Ces hautes mobilités témoignent la validité des considérations présentées ci-dessus et la grande qualité des couches épitaxiales grâce à la MBE (molecular beam epitaxy) et à la MOCVD (metalorganic chemical vapor deposition). La figure I.5 présente l'évolution de la mobilité la plus élevée mesurée expérimentalement dans l'hétérojonction GaAs/GaAlAs au cours de ces dernières années [20].

En plus de la haute mobilité, H.L. Stormer [21] a montré le caractère bidimensionnel du gaz d'électrons accumulés à l'interface de l'hétérojonction grâce à l'observation des oscillations de la magnétorésistance en fonction du champ magnétique appliqué suivant la direction perpendiculaire à l'interface.

La mise en évidence de la haute mobilité a très vite suggéré à différentes équipes l'idée d'utiliser ce gaz d'électrons comme couche active d'un transistor à effet de champ et un tel composant a été conçu et réalisé, en 1980, simultanément à Thomson-CSF [22] et à Fujitsu [23].

Très rapidement, la supériorité des performances du TEGFET (Two dimensional Electron Gas Field Effect Transistor) par rapport au TEC conventionnel a été mise en évidence tant en amplification hyperfréquence faible bruit qu'en logique ultra rapide [24 - 26] (Fig.I.6).

Pour estimer plus précisément les performances que l'on peut attendre de ce nouveau dispositif, par exemple, en amplification faible bruit, et optimiser le fonctionnement, une étude plus poussée semble nécessaire.

Or, l'étude d'un tel composant ne peut être menée à bien que si l'on possède une bonne connaissance des propriétés de transport du gaz d'électrons qui siègent dans la couche active du dispositif. Bien que ces travaux dirigés dans ce sens soient déjà nombreux, [10 - 19], rares sont ceux qui portent sur la dynamique des électrons en présence d'un champ électrique parallèle à l'interface de l'hétérojonction et d'une tension de polarisation appliquée à la grille. Compte tenu de ce fait, le présent travail se propose d'étudier les propriétés de transport du gaz d'électrons quasi bidimensionnel dans ces conditions par la méthode de Monté-Carlo.

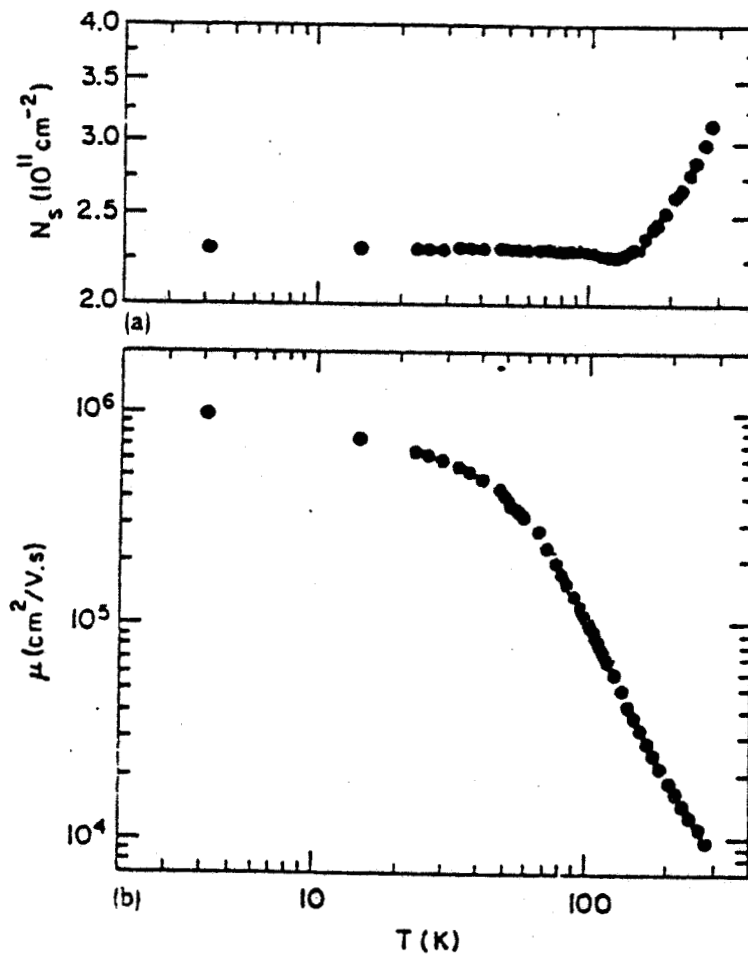


FIGURE I.4 Evolution de la mobilité électronique en fonction de la température dans une hétéro-jonction GaAlAs/GaAs réalisée par la MBE [6].

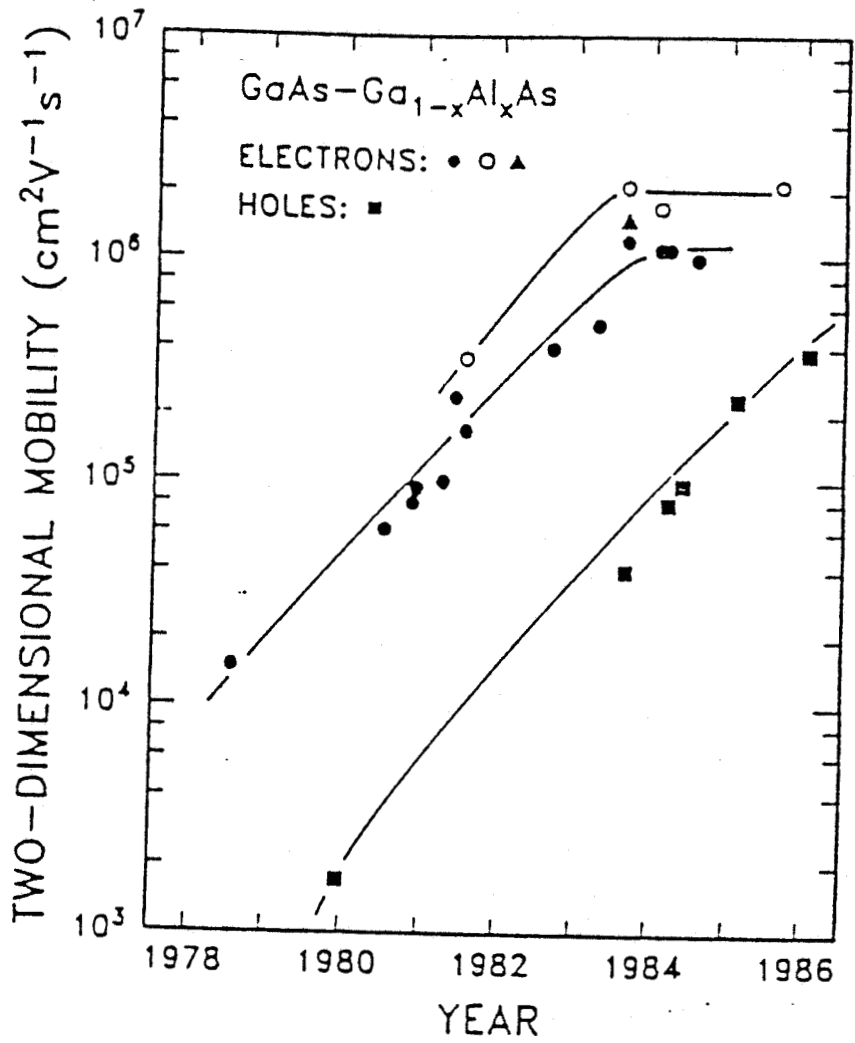


FIGURE I.5 Evolution de la mobilité électronique la plus élevée mesurée expérimentalement au cours de ces dernières années [20].

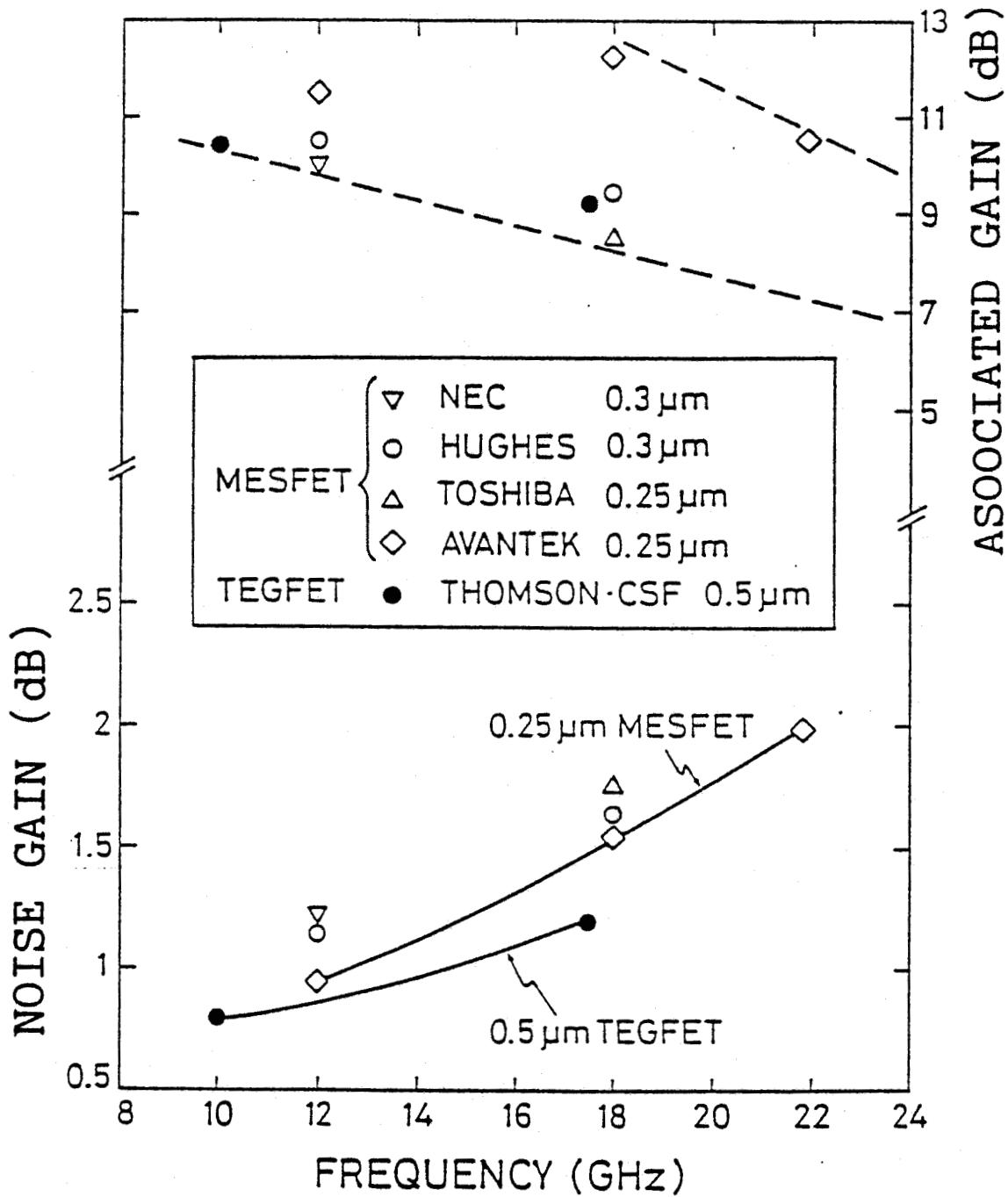


FIGURE I.6 Performances comparées des TEGFET et MESFET GaAs. Le TEGFET présente un facteur de bruit plus faible que le MESFET GaAs [24] .

I.2. LA MODELISATION DE LA STRUCTURE GRILLE-HETEROJONCTION GaAlAs/GaAs ET SES ASPECTS QUALITATIFS

I.2.1. Structure de base d'un TEGFET

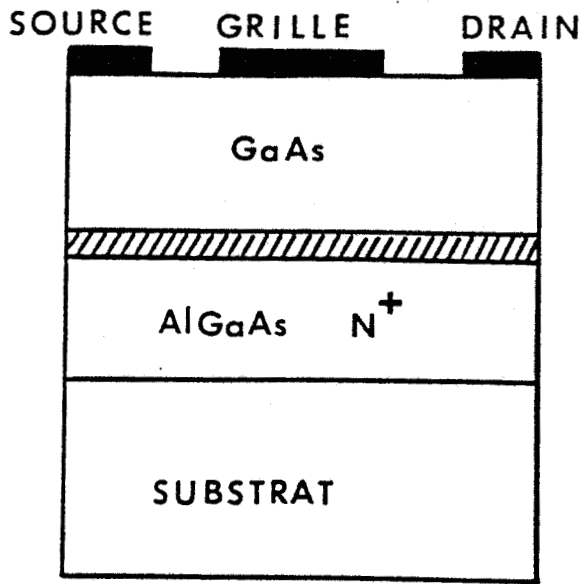
La réalisation d'un transistor à effet de champ à hétérojonction GaAs/GaAlAs nécessite que l'on puisse moduler la charge dans le canal par la tension appliquée à la grille du composant. A cet effet, on peut, par exemple, commander le gaz d'électrons par un contact à barrière de Schottky et il est possible d'envisager deux types de réalisation selon que l'on dépose le contact sur l'AsGa ou sur l'AlGaAs (Fig.I.7). Toutefois, les composants réalisés à partir de la première structure présente une conduction parallèle au canal importante due principalement au transfert des électrons accumulés vers l'AlGaAs fortement dopé, par dessus la barrière ΔE_c [28], ce qui diminue nettement les propriétés dynamiques [27].

Dans le second dispositif, l'AlGaAs est totalement déserté, freinant ainsi le transfert des électrons par dessus la barrière de potentiel. Il présente donc un caractère plus attractif que le précédent et constitue en quelque sorte la structure "de base" d'un TEGFET. Dans le cadre de ce travail, nous nous proposons donc d'étudier les principales propriétés de transport du gaz d'électrons relatif à ce dispositif.

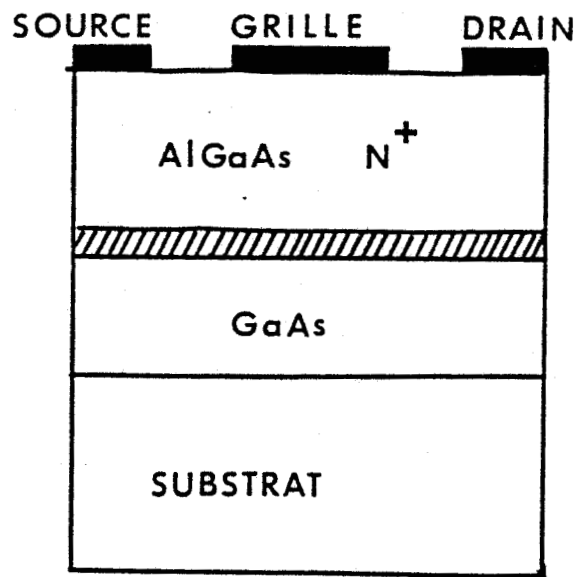
I.2.2. Aspects qualitatifs de la structure grille/hétérojonction GaAs/GaAlAs

Le modèle qui fait l'objet du travail que nous présentons dans le présent mémoire est donc constitué d'une hétérojonction GaAlAs(n+)/GaAs et d'une grille placée du côté de l'AlGaAs (Fig. I.8).

Nous essayons dans ce paragraphe de décrire, de façon qualitative, les aspects essentiels de cette structure.



a)



b)

FIGURE I.7 Les deux structures du TEGFET. Celle ayant GaAlAs en couche supérieure présente des avantages.

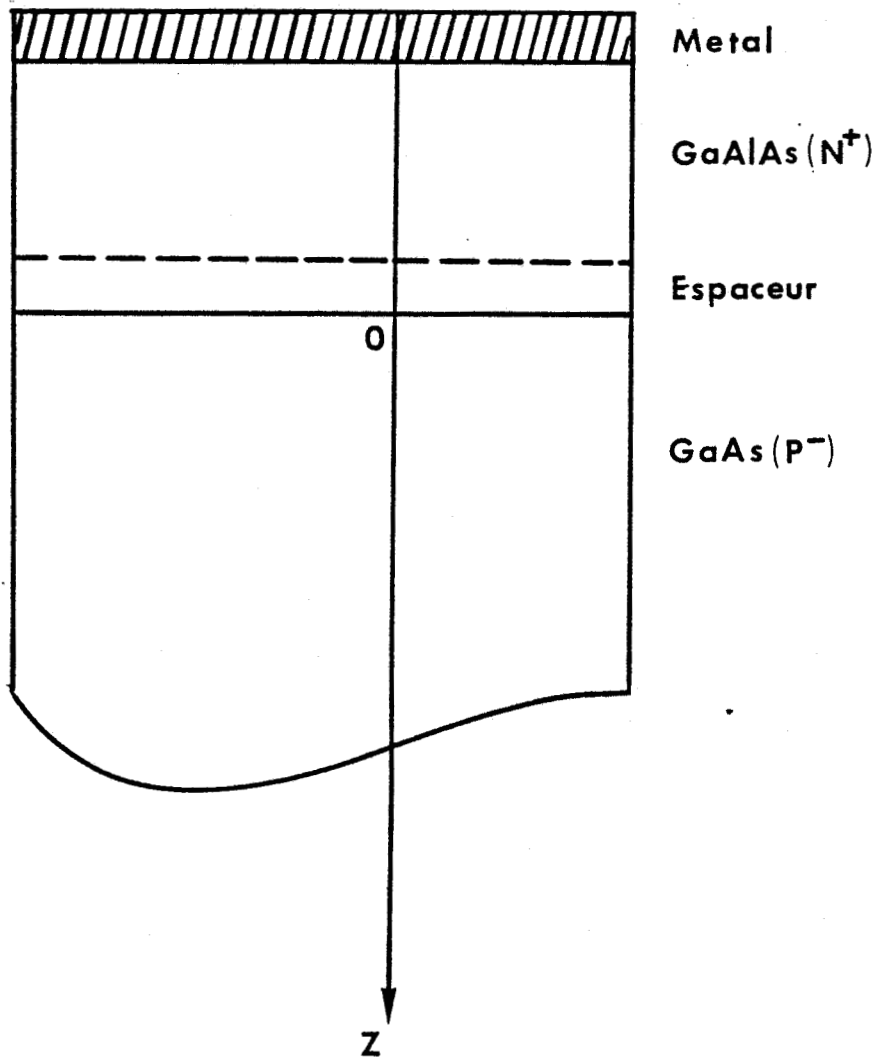


FIGURE I.8 Représentation schématique de la structure étudiée.

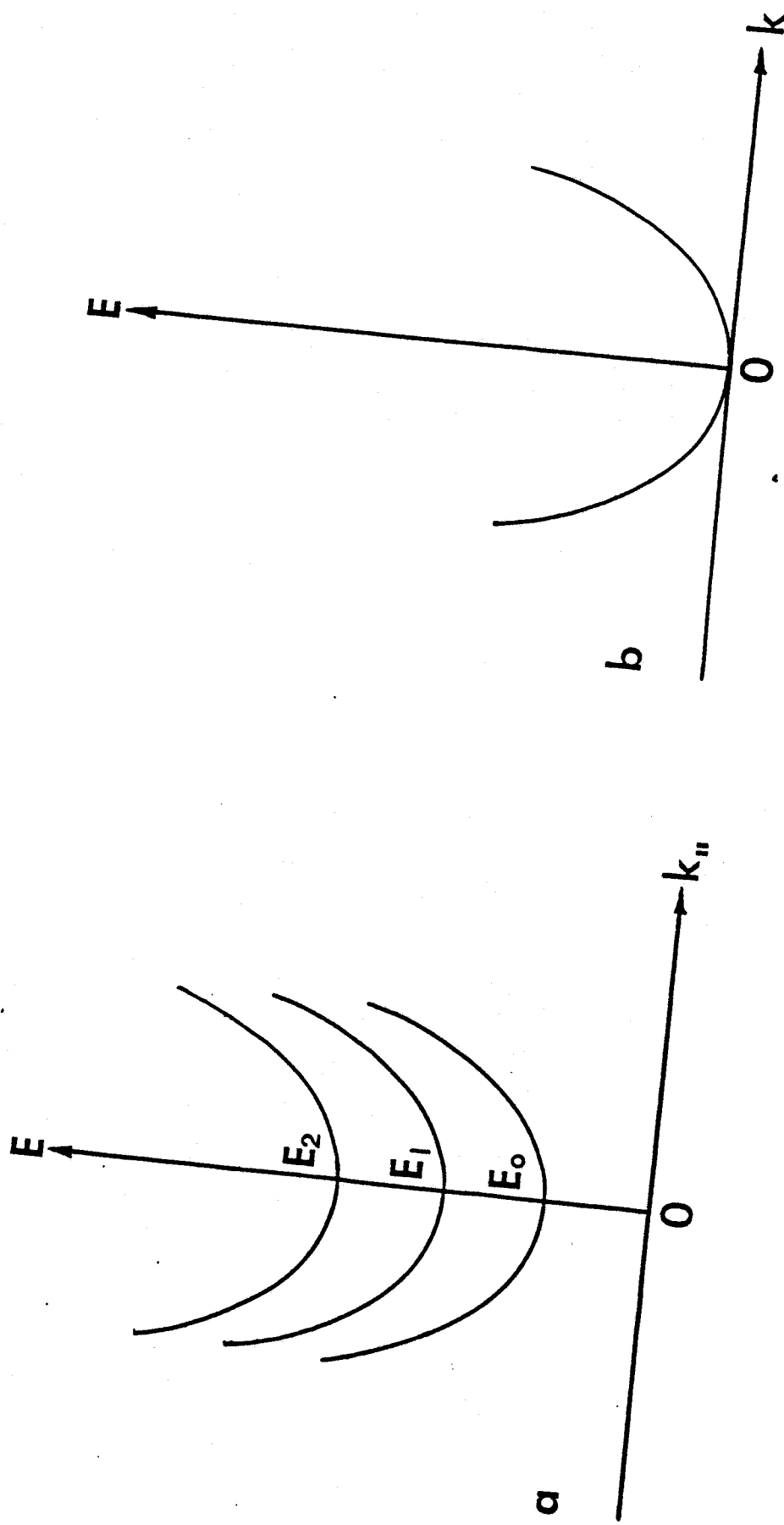


FIGURE I.9 Spectres énergétiques d'un électron quasi bidimensionnel (a) et d'un électron tridimensionnel (b).

a) Sous-bandes d'énergie

Comme nous l'avons vu au début de ce chapitre, l'alignement des niveaux de Fermi impose un transfert d'électrons de GaAlAs (n+) vers GaAs. La courbure qui en résulte du côté de GaAs crée un puits de potentiel de faible largeur (typiquement de l'ordre de 100 à 200 Å). Or, lorsque la largeur d'un puits de potentiel est de l'ordre de grandeur de la longueur d'onde de De Broglie $\lambda = h/p$ ($\lambda = 250$ Å GaAs), les effets quantiques donnent naissance à une suite de niveaux d'énergie discrets à l'intérieur du puits en général seulement le long de la direction perpendiculaire à l'hétérojonction. La détermination de ceux-ci n'est pas toujours aisée, car elle nécessite la résolution des équations de Schrodinger et de Poisson, qui analytiquement n'est pas possible dans le cas de la structure étudiée. La mise en oeuvre d'une procédure numérique sera inévitable, comme nous le verrons dans le chapitre III. Les effets quantiques ne concernant que le degré de liberté perpendiculaire à l'interface, à chaque niveau d'énergie correspond donc une sous-bande d'énergie bidimensionnelle (Fig. I.9).

b) Bidimensionnalité

Le degré de liberté perpendiculaire à l'interface étant réduit, les électrons ne sont libres de se déplacer que dans les deux autres dimensions et se comportent de ce fait comme un gaz d'électrons bidimensionnel [9]. Ce caractère bidimensionnel a été mis en évidence expérimentalement grâce à la technique de Shubnikov-de-Hass [21, 28]. Cependant, les électrons ne sont bidimensionnels que dynamiquement et non au sens strict du terme, car leurs fonctions d'onde possèdent une étendue spatiale non nulle dans la troisième dimension, quoique réduite. C'est pourquoi l'on parle plutôt du gaz d'électrons quasi bidimensionnel dans la littérature.

c) Transfert intersous-bande

L'existence des sous-bandes d'énergie donne aux électrons la possibilité de transférer entre ces sous-bandes par l'intermédiaire des collisions avec le réseau cristallin. Ce transfert intersous-bande est d'autant plus favorisé que les électrons sont soumis à un champ électrique extérieur fort

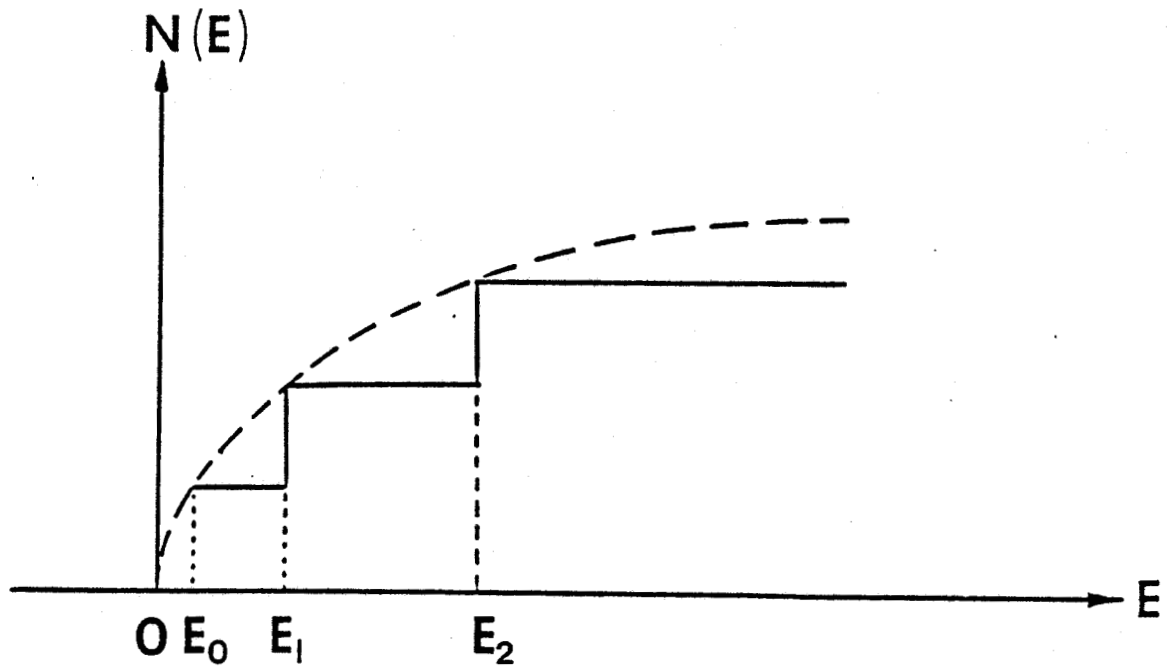


FIGURE I.10 Densités d'états d'une bande de conduction à deux dimensions (trait plein) et d'une bande de conduction à trois dimensions (trait interrompu).

et que la température du réseau est élevée. Ayant plus d'énergie dans ces conditions, les électrons peuvent franchir plus aisément l'écart d'énergie qui sépare les sous-bandes.

d) Densité d'états

Dans les hypothèses où l'approximation de la masse effective reste valable et les sous-bandes sont paraboliques, la densité d'états dans chaque sous-bande est constante, ce qui n'est pas le cas d'une bande de conduction tridimensionnelle où la densité d'états varie comme la racine carrée de l'énergie (Fig. I.10).

e) Modulation de la charge accumulée et de la géométrie du puits de potentiel

La figure 11 montre schématiquement comment la densité de la charge accumulée à l'interface peut être contrôlée par la tension de grille. En fait, ce contrôle de densité se réalise par l'intermédiaire d'une variation de la position du puits de potentiel par rapport au niveau de Fermi dans l'échelle des énergies.

La variation de la concentration d'électrons à l'interface entraîne à son tour une modification de la forme du puits de potentiel donc une modification de la position des sous-bandes, ce qui implique un changement des conditions de transport dans le puits.

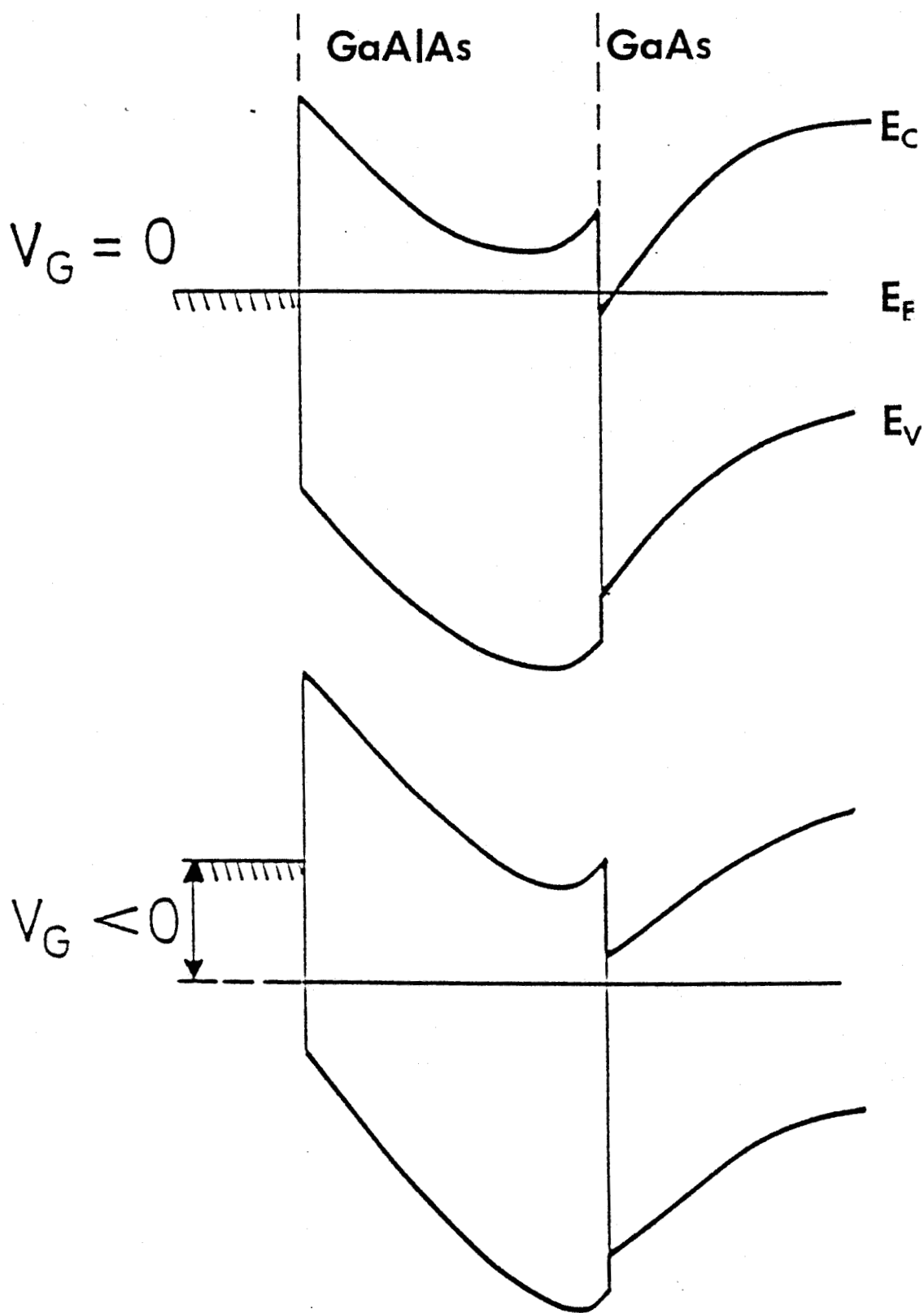


FIGURE I.11 Schéma de bandes du TEGFET à l'équilibre et sous polarisation négative de la grille Schottky.

CHAPITRE II

PRESENTATION DE LA SIMULATION

II.1. INTRODUCTION

Le comportement au cours du temps des électrons de la bande de conduction résulte à la fois de l'action extérieure du champ électrique appliqué et de l'effet des collisions relatives à la présence du réseau cristallin. Sa description nécessite la résolution de l'Equation de Transport de Boltzmann (ETB). A cause de sa complexité, cette équation aux dérivées partielles n'admet pas de solution analytique sauf dans un nombre limité de cas moyennant des hypothèses simplificatrices mettant en jeu la validité des solutions obtenues. C'est pourquoi l'on fait appel en général à des méthodes numériques à l'aide du calculateur. Parmi celles-ci, la méthode de Monté-Carlo figure en bonne place.

La raison du succès de cette méthode tient en grande partie à sa simplicité et à sa souplesse d'utilisation, car elle peut être mise en oeuvre quelles que soient les conditions imposées et peut en particulier rendre aussi bien compte des phénomènes stationnaires que non stationnaires. Elle permet d'avoir accès directement à des grandeurs importantes en dynamique électronique telles la vitesse et l'énergie des électrons.

II.2. RAPPEL DU PRINCIPE DE LA METHODE DE MONTE-CARLO A TROIS DIMENSIONS

Le principe de cette méthode [29, 30] consiste à simuler numériquement et suivre le mouvement stochastique du vecteur onde \vec{k} représentatif de l'état du porteur dans l'espace réciproque, tenant compte à chaque instant d'une part de l'effet déterministe du champ électrique qui peut dépendre aussi bien de la position que du temps

$$\frac{d\vec{k}}{dt} = \frac{e}{\hbar} \vec{E}(\vec{r}, t), \quad (2.1)$$

et d'autre part de l'effet des collisions.

La connaissance de la structure de bande $\epsilon(\vec{k})$ permet de connaître à chaque instant la vitesse et la position du porteur dans l'espace direct, car :

$$\vec{v} = \frac{1}{\hbar} \frac{d\epsilon}{d\vec{k}} \quad (2.2)$$

et

$$\vec{r} = \vec{r}_0 + \int_0^t \vec{v}(t') dt' \quad (2.3)$$

si le porteur a une position initiale \vec{r}_0 . Par ailleurs, la vitesse moyenne dans la direction du champ électrique se calcule aisément comme la valeur moyenne de la projection de v donnée par (2.2) dans la direction du champ électrique.

Les collisions subies par le ou les porteurs se caractérisent par des densités de probabilités par unité de temps $S(\vec{k}, \vec{k}')$. L'intégration de $S(\vec{k}, \vec{k}')$ sur tous les états k' possibles donne $\lambda(\vec{k})$, la probabilité par unité de temps qu'un porteur dans un état k subisse une collision qui l'amène dans un état quelconque autre que \vec{k} . $S(\vec{k}, \vec{k}')$, défini pour chaque type de collision, contient toute l'information nécessaire pour déterminer l'état final après l'interaction.

En pratique, l'échelle de temps est discrétisée en pas temporels élémentaires Δt tels que :

$$P(\vec{k}) = \sum_m \lambda_m(\vec{k}) \Delta t < 1 \quad (2.4)$$

où l'entier m porte sur toutes les collisions susceptibles de produire quand le porteur est dans l'état k . Avec un tel concept, $1-P(\vec{k})$ représente la probabilité qu'une accélération de durée Δt (eq. 2.1) n'est suivie d'aucune collision. C'est un nombre pseudo-aléatoire tiré entre 0 et 1 qui décide de l'éventualité et de la qualité de la collision qui aura effectivement lieu.

Une collision a été choisie. Elle est supposée instantanée et son effet provoque une discontinuité dans l'évolution de l'état du porteur. Cet effet se manifeste à la fois par un éventuel échange d'énergie et par un brusque changement d'orientation de la vitesse du porteur. Il se traduit dans l'espace réciproque par une variation instantanée du vecteur d'onde en module et en direction.

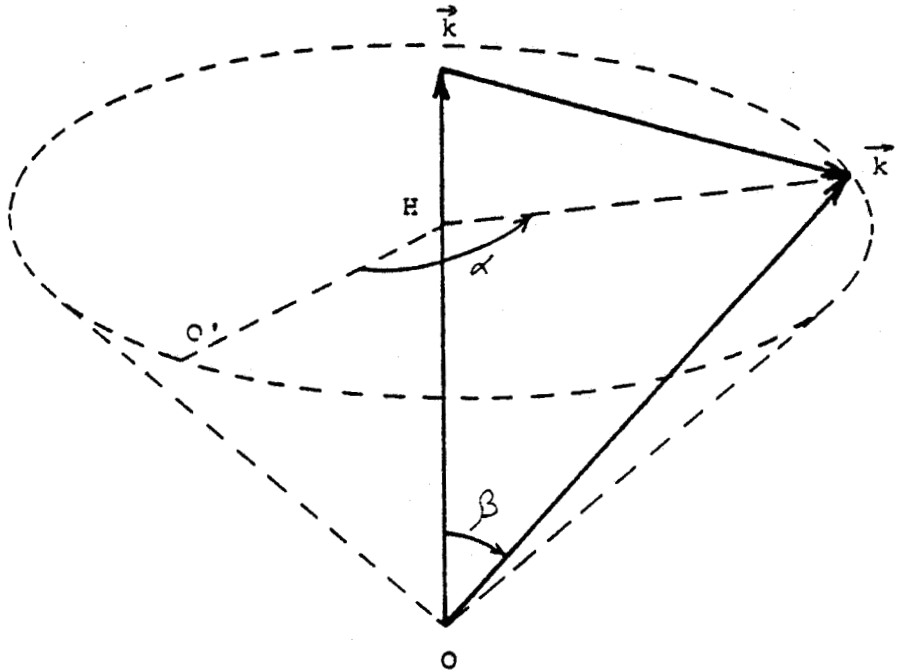


FIGURE II.1 Evolution du vecteur d'onde au moment de la collision dans le cas d'un système à trois dimensions. le lieu de \vec{k}' est un cône de demi-angle au sommet β , le lieu de l'extrémité de \vec{k}' un cercle ayant pour axe la direction de \vec{k} . L'angle azimutal α est aléatoire et à distribution uniforme entre 0 et 2π .

En effet, si l'on suppose que la bande de conduction est parabolique, le module du vecteur d'onde est alors relié de façon biunivoque à l'énergie par la relation suivante :

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} = \epsilon \quad (2.5)$$

où m^* est la masse effective du porteur. Tout échange éventuel d'énergie au cours de la collision se traduit donc au niveau du vecteur d'onde par une variation brutale de son module qui ne dépend que des énergies initiales et finales ϵ et ϵ' .

C'est un changement d'orientation du vecteur d'onde qui décrit la déviation subie par l'électron. Le vecteur d'onde \vec{k} est repéré par rapport au vecteur d'onde initial par un angle de déviation β (Fig. II.1.), qui est déterminé par la fonction de distribution relative à la collision choisie. Dans le cas d'un système à trois dimensions, les valeurs de β et du module de \vec{k}' étant définies, il existe encore une infinité d'états possibles et équivalents \vec{k}' décrivant uniformément un cône d'axe \vec{k} d'angle β .

L'effet d'une collision sur le parcours de l'électron est maintenant entièrement déterminé.

II.3. LE MODELE DE MONTE-CARLO POUR UNE HETERO-STRUCTURE

La mise en pratique de la simulation par la méthode de Monté-Carlo est sensiblement alourdie dans le cas du système que nous étudions ici, par comparaison avec celui d'un système tridimensionnel habituel.

Dans ce qui suit, le repère choisi est tel que l'axe z est perpendiculaire à l'interface et que l'origine de z se situe à l'hétérojonction.

Dans notre modèle, le champ électrique est supposé uniforme et appliqué parallèlement à l'interface de l'hétérojonction (dans la direction x).

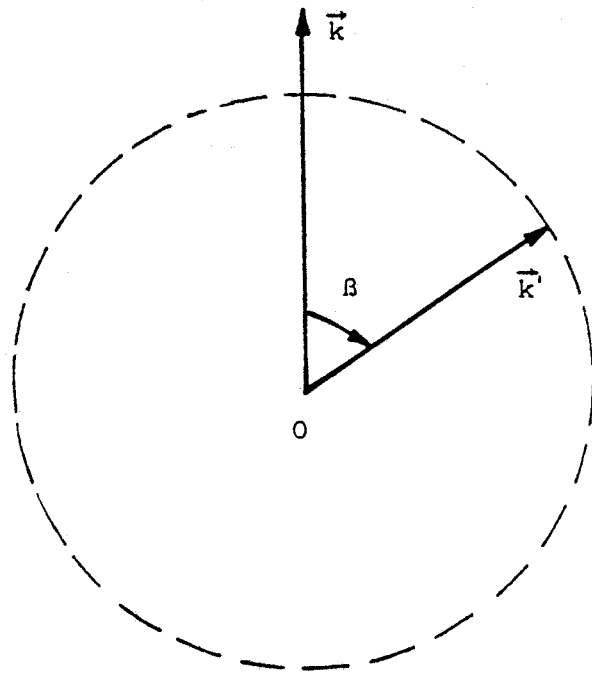


FIGURE II.2 Evolution du vecteur d'onde \vec{k}' au moment de la collision dans le cas d'un système à deux dimensions. Le lieu de l'extrémité de \vec{k}' est un cercle (B entre 0 et 2π).

II.3.1. Le modèle de Monté-Carlo pour les électrons qui sont à deux dimensions

Comme nous l'avons vu dans le chapitre I, l'existence d'un puits de potentiel de faible largeur à l'interface de l'hétérojonction introduit à l'intérieur de celui-ci des niveaux d'énergie discrets et à chacun de ceux-ci est attachée une sous-bande d'énergie dans laquelle le mouvement d'un électron est bidimensionnel. L'ensemble des états dans le puits de potentiel forme donc un système à deux dimensions ; ce qui nous conduit à mettre en place une procédure permettant de simuler ces électrons à deux dimensions.

En effet, la structure de bandes et les probabilités de collision ne sont pas les mêmes dans un système à trois dimensions et dans un système à deux dimensions. La procédure de simulation à trois dimensions que nous avons décrite dans le paragraphe II.2 ne peut être directement appliquée qu'à un système à trois dimensions.

Dans le cas d'un système à deux dimensions, à la place des relations (2.2), (2.3) et (2.5), nous avons :

$$\vec{v}_{||} = \frac{1}{\hbar} \frac{d\varepsilon_{||}}{dk_{||}} \quad (2.6)$$

$$\vec{r}_{||} = \vec{r}_{0||} + \int_0^t \vec{v}_{||}(t') dt' \quad (2.7)$$

et

$$\frac{\hbar^2 k_{||}^2}{2m^*} = \varepsilon_{||} \quad (2.8)$$

Quant à la position z d'un électron dans une sous-bande, elle peut être déterminée en appliquant la méthode de Von Neumann (Voir annexe IV) au carré de la fonction d'onde relative à la sous-bande, c'est-à-dire à la densité de probabilité de présence.

En ce qui concerne les collisions, leur mise en oeuvre est tout à fait similaire à celle dans le cas d'un système à trois dimensions sauf que l'on a un seul angle de déviation (Fig. II.2) au lieu de deux (Fig. II.1). A l'angle

manquant se substitue l'indice de sous-bande qui constitue une variable aléatoire dans la simulation. A cause du nombre de sous-bandes considérées, il y a multiplication du nombre de probabilités de collision à évaluer et tester en cours de simulation.

En effet, supposons que notre modèle tienne compte des n premières sous-bandes dans le puits de potentiel. Pour un électron se trouvant dans une de ces sous-bandes, les mécanismes de collision sont de n catégories possibles selon l'état final que l'électron va occuper après une collision effective : dans la même sous-bande ou dans l'une des $(n-1)$ autres sous-bandes. Si m types de collision sont mis en jeu dans le modèle (optique polaire, acoustique, etc...), à chaque catégorie correspondent $2m$ types de collision différents*, ce qui signifie que l'électron peut passer d'un état à un autre par $2mn$ "voies" distinctes. Par conséquent, il existe dans ce système à n sous-bandes, $2mn^2$ processus de collision possibles et différents, ce qui rend son étude assez lourde par rapport à ce qui est pour un système à trois dimensions.

II.3.2. Couplage d'un système électronique à deux dimensions avec un système à trois dimensions

En présence d'un champ électrique fort, l'électron peut sortir du puits de potentiel et devient de ce fait tridimensionnel. Nous allons maintenant illustrer cet aspect du modèle en décrivant ce qui pourra survenir ultérieurement à un électron supposé placé à $t = 0$, sur une des sous-bandes. Nous supposons dans un premier temps que l'électron se trouve dans la couche GaAs.

Au cours de son itinéraire, l'électron sera constamment soumis à l'action accélératrice du champ électrique. Son voyage commence par un vol libre pendant un temps égal à Δt . Après ce temps, il entrera éventuellement en collision avec le réseau cristallin par suite de son échauffement par le

* En général, à chaque type de collision correspondent un processus d'émission et un processus d'absorption.

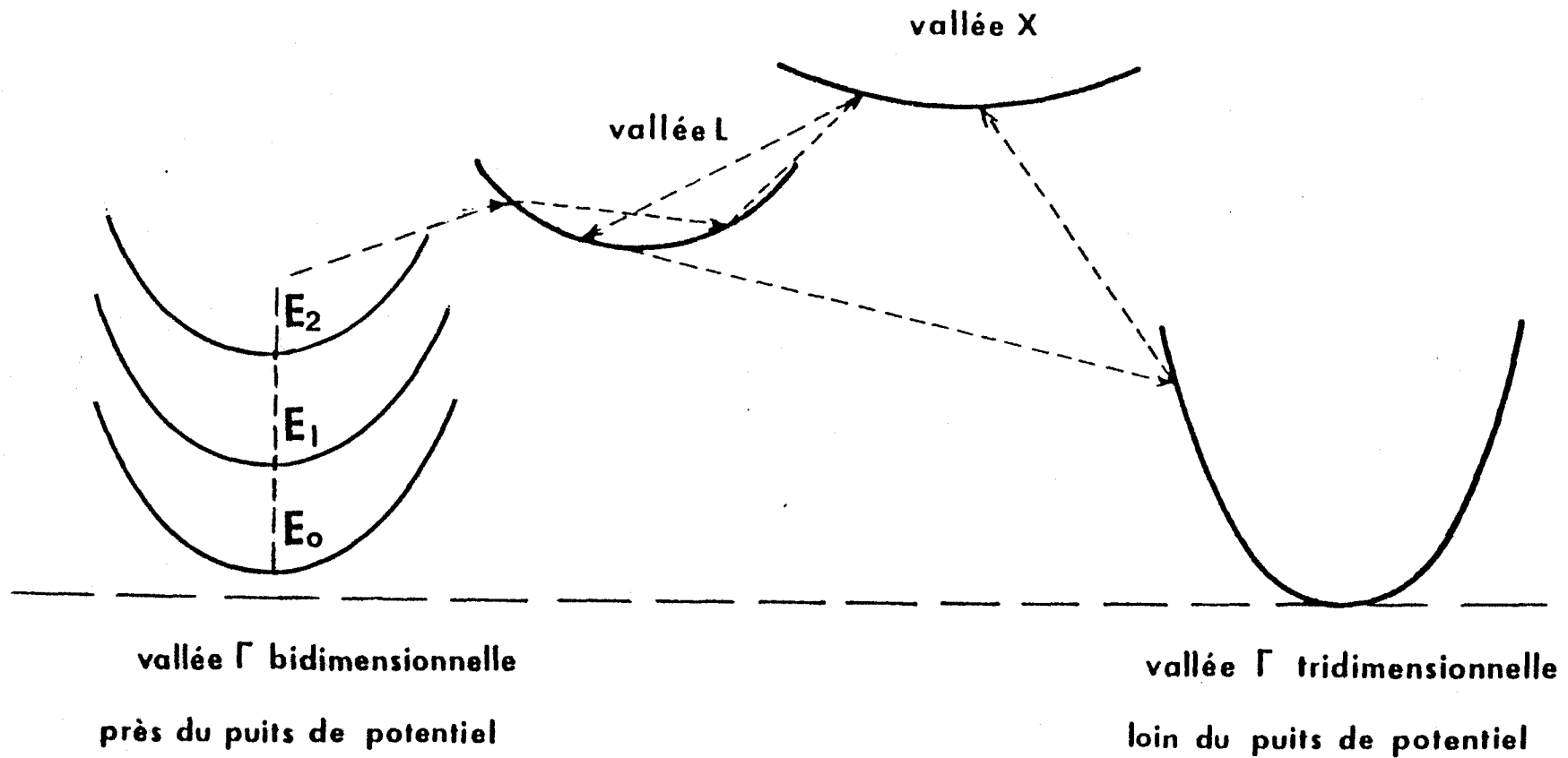


FIGURE II.3 Trajectoire typique d'un électron qui étant défini à deux dimensions dans la vallée Γ au départ passe dans une des vallées satellites où son mouvement devient tridimensionnel au cours d'un choc suivi d'un retour éventuel dans la vallée Γ à trois dimensions. Le retour vers la vallée Γ à deux dimensions ne pouvant s'effectuer que par l'intermédiaire d'une vallée satellite et à condition que l'électron se trouve réellement au dessus du puits de potentiel comme précisé dans le texte.

champ électrique, l'électron ainsi parvenu à une énergie suffisamment élevée verra apparaître la possibilité de "monter" dans une vallée satellite (L ou X), où les effets quantiques dus à l'hétérojonction sont supposés négligeables (voir chapitre III). Ainsi si un tel transfert a effectivement lieu, son mouvement deviendra tridimensionnel et identique à ce qui existe dans l'AsGa en volume. Dès lors il sera soumis à l'action du champ électrique dérivé du potentiel interne qui résulte de la courbure de la bande de conduction dans la direction z . Ce dernier aura tendance à le pousser vers l'interface. L'électron ne sera pas cependant contraint de rester près de l'interface. Par effet de diffusion il pourra s'en éloigner. Ceci autorise le passage ultérieur vers une vallée centrale à trois dimensions dans GaAs cette fois-ci, avec la condition que cette transition ne pourra se faire qu'en un point situé suffisamment loin de l'hétérojonction. Cette situation est résumée dans la figure II.3. Dans le modèle, cette condition est simplement exprimée en termes de fonctions d'onde et de largeurs effectives (voir chapitre IV). Si, au contraire, l'électron tridimensionnel reste au niveau du puits de potentiel, seul un transfert vers une des sous-bandes de la vallée centrale à deux dimensions pourra avoir lieu. On voit donc que, globalement, l'histoire de l'électron sera composée de phases successives durant lesquelles son mouvement sera soit purement bidimensionnel soit purement tridimensionnel. Dans le cas du champ électrique faible, près de l'équilibre thermodynamique, l'électron restera piégé dans la vallée Γ à deux dimensions et son mouvement sera purement bidimensionnel. On voit par ailleurs qu'un couplage entre la vallée Γ à deux dimensions et la vallée Γ à trois dimensions n'est pas possible dans la mesure où ces deux vallées ne coexistent pas dans la même région de l'espace. Pour résumer il est important de se souvenir du rôle primordial que joue la position z de l'électron dans l'espace pour la détermination de la nature de son mouvement.

Parmi toutes les positions z possibles, celles qui situent l'électron près de l'interface sont toutes particulières, car l'électron pourra alors être le témoin d'un événement dont nous n'avons pas parlé jusqu'ici, à savoir le passage d'un côté de l'interface à l'autre.

II.3.3. Transfert spatial dans l'espace réel

En effet, l'électron, arrivé à l'interface, pourra effectuer une transition l'amenant dans la couche GaAlAs. Mais ce transfert spatial dans l'espace réel est étroitement conditionné par l'énergie de l'électron, dans la mesure où il existe une barrière de potentiel à franchir pour aller dans la couche GaAlAs.

Arrivé dans la couche GaAlAs, l'électron sera alors soumis aux conditions de transport relatifs à ce matériau, qui sont supposées identiques à celles que l'on peut trouver dans le même matériau en volume à ceci près que dans la direction z il existe également un champ électrique interne E_z qui a son origine dans la courbure de la bande de conduction due d'une part à l'hétérojonction et d'autre part à la présence d'une tension de polarisation à la grille.

Tant que l'électron reste dans la couche GaAlAs, son mouvement est tridimensionnel.

Mais il pourra éventuellement retourner dans la couche GaAs, c'est-à-dire effectuer un transfert spatial inverse, d'autant plus que ce dernier n'exige aucune condition concernant son énergie, à la différence du précédent.

On voit donc que l'histoire de l'électron pourra comporter aussi quelques phases durant lesquelles il se mouvra dans la couche GaAlAs.

Lors du passage d'un côté de l'interface à l'autre, l'énergie cinétique d'un électron change d'une quantité égale à la hauteur de la barrière de potentiel $\Delta\varepsilon_s$ (s peut être L ou X selon que le transfert se fait entre deux vallées L ou X). L'énergie après le transfert s'écrit donc :

$$\varepsilon' = \varepsilon \pm \Delta\varepsilon_s \quad (2.9)$$

où le signe plus se rapporte au cas d'une transition de l'AlGaAs vers l'AsGa, le signe moins, au cas d'une transition inverse.

Or, seul le degré de liberté suivant l'axe z est en réalité concerné par un transfert de ce genre. Toutes les grandeurs physiques relatives aux deux autres degrés de liberté étant conservées on peut donc, à la place de l'équation (2.9), écrire :

$$\varepsilon'_z = \varepsilon_z \pm \Delta\varepsilon_s \quad (2.10)$$

ce qui équivaut à :

$$K'_z = K_z \pm \sqrt{\frac{2m^*}{\hbar^2} \Delta\varepsilon_s} \quad (2.11)$$

On voit donc que dans le cas d'un transfert de l'AlGaAs vers l'AsGa, aucune condition n'est exigée ; par contre, dans le cas d'un transfert inverse, un électron ne peut franchir la barrière de potentiel que si son énergie cinétique associée à son mouvement selon l'axe z est supérieure à la hauteur de la barrière ; sinon il est simplement réfléchi spéculairement par le mur que constitue la barrière et rebrousse chemin.

II.4. LA MISE EN OEUVRE DE LA SIMULATION

II.4.1. Généralités

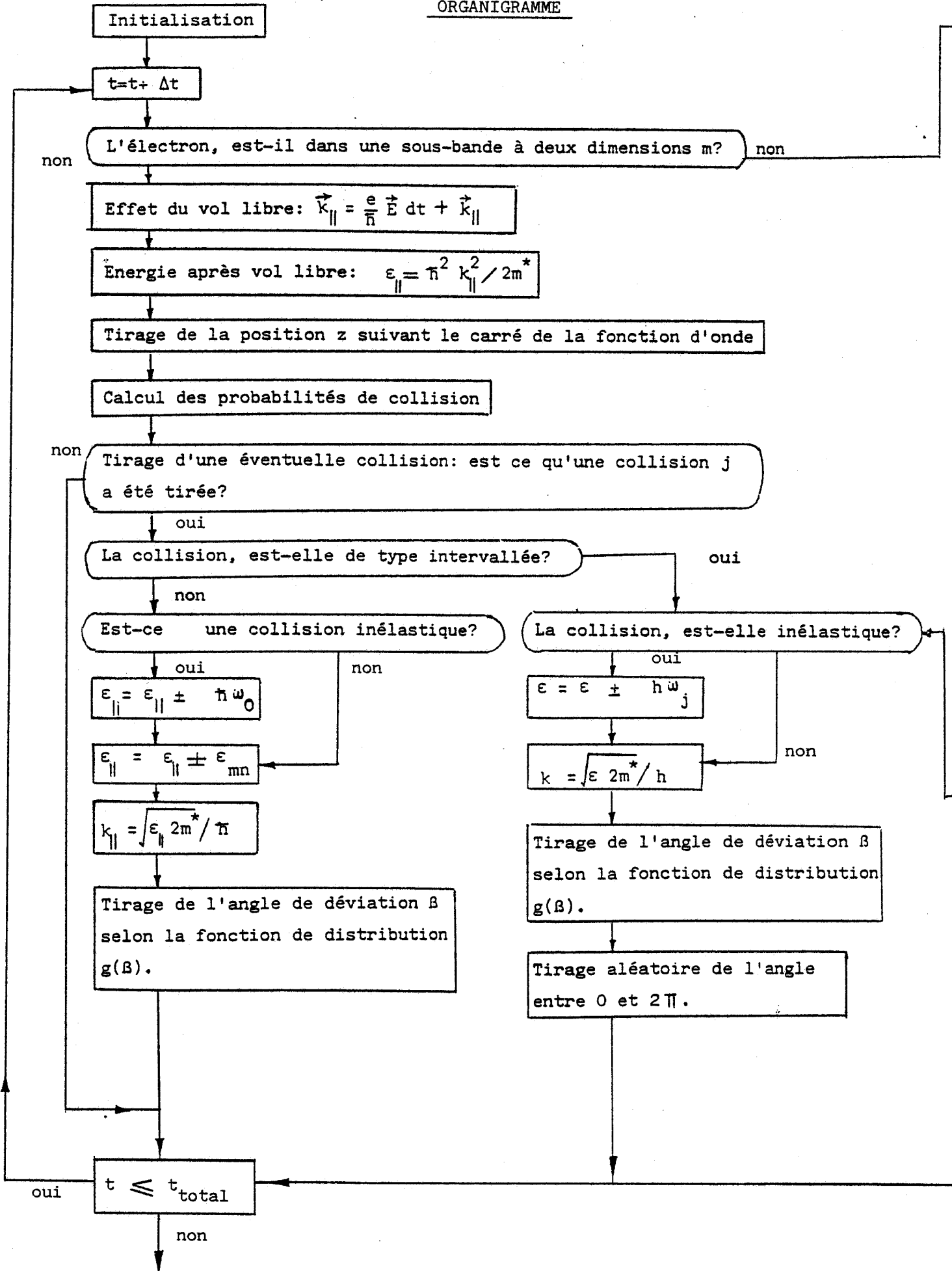
Le traitement élémentaire par la méthode de Monté-Carlo que nous venons de présenter a lieu pour chaque électron à chaque pas Δt (voir organigramme). Par ce procédé répétitif dans le temps, nous pouvons connaître précisément l'histoire de chaque électron dans l'espace réciproque et donc celle dans l'espace réel grâce aux équations analogues à (2.2), (2.3) (2.6) et (2.7).

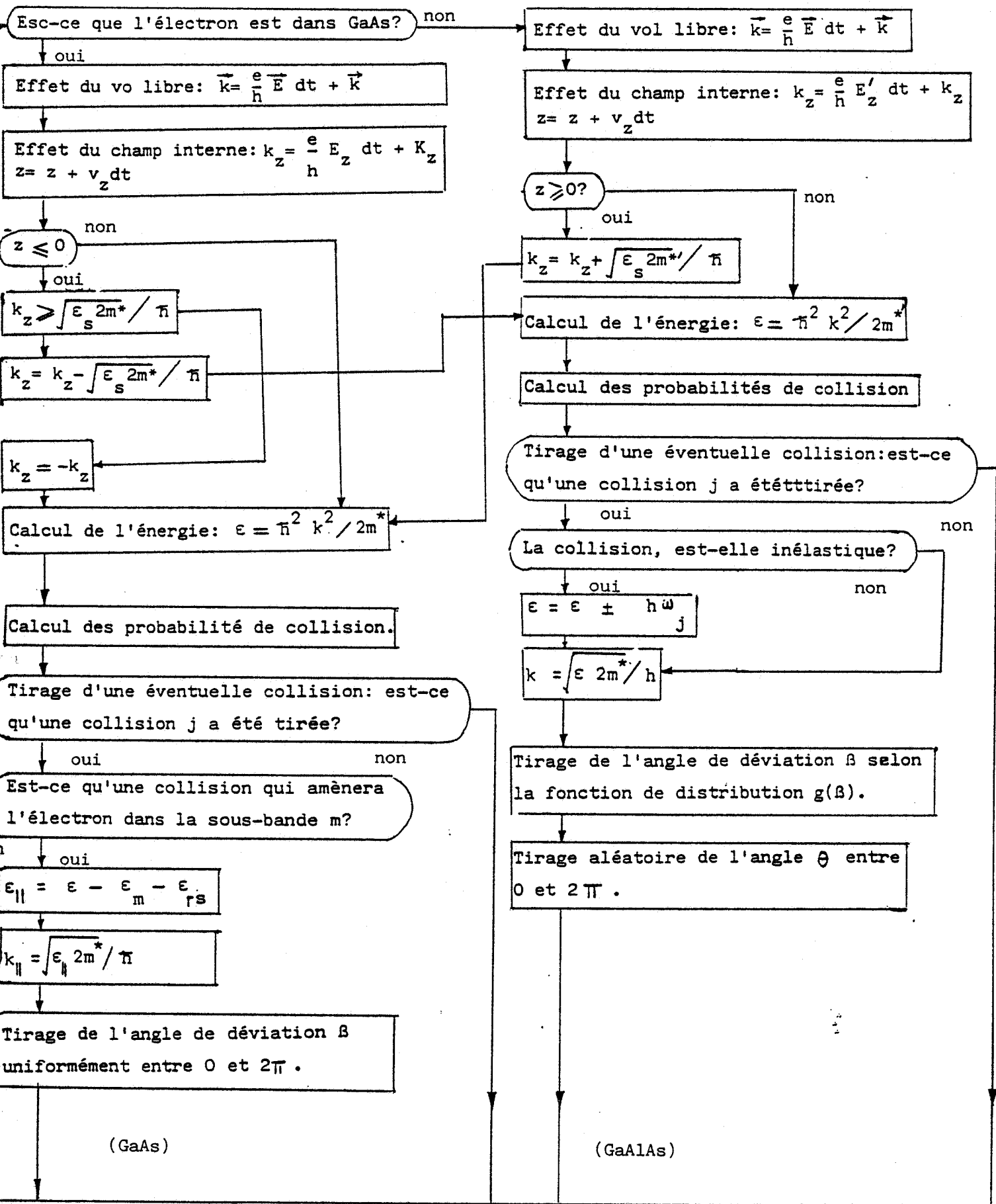
Dès lors il est possible d'accéder à toutes les grandeurs moyennes que nous souhaitons déterminer dans le cadre de ce travail : énergie moyenne, vitesse de dérive, mobilité ohmique, taux d'occupation de chaque vallée et de chaque sous-bande, coefficients de diffusion,...

Toutes ces quantités peuvent être calculées de deux façons différentes : soit par l'observation d'un grand nombre d'électrons permettant le calcul de moyennes d'ensemble (cette définition est utile quand les conditions d'étude changent dans le temps), soit par l'observation d'un seul électron pendant une durée suffisamment longue. En effet, d'après le principe d'ergodisme, pour un système en état stationnaire les deux manières de calculer les moyennes doivent aboutir aux mêmes résultats.

Par suite, nous mettrons dans notre programme de simulation un seul électron dans le cas du régime permanent et un ensemble de 1000 électrons pour le calcul de la diffusion. Mais dans les deux cas, il faut préciser l'état de chaque électron à l'instant $t = 0$, ce qui nous amène à aborder maintenant le problème de l'initialisation de la simulation par la méthode de Monté-Carlo.

ORGANIGRAMME





II.4.2. Initialisation de la simulation

a) Cas d'un ensemble de n électrons

A l'instant $t=0$, l'état initial $\vec{K}_{||}(0)$ de chaque électron correspond à une énergie tirée au hasard suivant la distribution dérivée par la méthode de Von Neumann. Par exemple, de plus, nous supposons que les électrons entre les m sous-bandes suivent la structure de bande calculée et qu'ils se trouvent au même point ($x=0$ et $y=0$). Quant à leur position suivant l'axe Z , elle est déterminée suivant la densité de probabilité de présence relative à chaque sous-bande par la méthode de Von Neumann.

b) Cas d'un seul électron

Dans ce cas, la position de l'électron peut être initialisée de la même façon que dans le cas précédent. Et nous supposons également que l'électron se situe à l'instant $t=0$ dans une des sous-bandes.

Quant à l'énergie de l'électron, elle doit être initialisée à la valeur ϵ_0 donnée par la relation suivante :

$$\epsilon_0 = K_B T - \frac{\hbar \omega_0}{\frac{K_B T}{e} - 1} \quad (2.12)$$

En effet, si à l'équilibre, c'est-à-dire à champ nul et à l'instant $t=0$ l'énergie de l'électron est égale à ϵ_0 , alors l'énergie de l'électron à un instant ultérieur s'écrit sous la forme :

$$\epsilon = \epsilon_0 + n \hbar \omega_0 \quad (2.13)$$

où l'entier n est positif ou nul et $\hbar \omega_0$ est l'énergie d'un phonon. En effet, en l'absence de champ électrique, l'échange d'énergie ne se fait que par l'émission ou l'absorption de phonons d'énergie $\hbar \omega_0$.

En outre, le taux d'occupation des états d'énergie à l'équilibre thermodynamique est régi par la distribution de Maxwell-Boltzmann, ce qui implique que, si l'on a affaire à un seul électron, l'énergie moyenne soit donnée par la relation :

$$\langle \epsilon \rangle = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} (\epsilon_0 + n \hbar \omega_0) e^{-\frac{(\epsilon_0 + n \hbar \omega_0)}{K_B T}}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\frac{(\epsilon_0 + n \hbar \omega_0)}{K_B T}}} \quad (2.14)$$

On peut montrer que cette valeur se simplifie sous la forme :

$$\langle \epsilon \rangle = \epsilon_0 + \frac{\hbar \omega_0}{e^{\frac{\hbar \omega_0}{K_B T}} - 1} \quad (2.15)$$

Or, pour un système bidimensionnel, à l'équilibre thermodynamique, la moyenne statistique d'ensemble de l'énergie vaut en principe $K_B T$. A priori, la moyenne statistique de l'énergie (2.15) ne conduit pas forcément à cette valeur sauf pour une valeur particulière de l'énergie initiale ϵ_0 de l'électron définie par la relation (2.12).

Il faut que cette condition soit réalisée, si l'on veut qu'un seul électron soit représentatif d'un ensemble d'électrons et donne des valeurs moyennes significatives pour un ensemble.

Après cette présentation générale de la simulation par la méthode de Monté-Carlo, nous devons à présent décrire de façon plus précise et quantitative les conditions de transport dans le système que nous étudions, à savoir la structure de bandes et les collisions mises en jeu dans notre simulation.

CHAPITRE III

STRUCTURE DE BANDES

Nous commencerons ce chapitre par un bref rappel de la structure de bandes de l'AsGa et de l' $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ en volume. Puis après la présentation du diagramme de bandes de l'hétérojonction formée par ces deux matériaux, nous déterminerons, par une méthode numérique auto cohérente, les états électroniques dans le puits de potentiel à l'interface de l'hétérojonction, à savoir les niveaux d'énergie discrets et les fonctions d'onde correspondantes.

III.1. STRUCTURE DE BANDES DE L'AsGa ET DE L' $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ EN VOLUME

Le modèle de structure de bandes de l'AsGa que nous utilisons dans notre programme de simulation est celui présenté par Littejohn en 1977 [31].

Les bandes d'énergie de conduction suivent l'ordre Γ -L-X, et sont supposées de la forme (Fig. III.1.) :

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} = \epsilon(1 + \alpha\epsilon) \quad (3.1)$$

où α est le coefficient de non-parabolicité.

La structure de bandes de l' $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ dépend du pourcentage d'aluminium x dans le semiconducteur (Fig. III.2.). Le modèle utilisé ici est celui présenté récemment par N. Chand et al. [32]. Dans la mesure où nous supposons que $x=0.3$ dans le cadre de ce travail, les bandes d'énergie de conduction sont tout à fait similaires à celles de l'AsGa, c'est-à-dire qu'elles suivent également l'ordre Γ -L-X, et peuvent être supposées de la forme (3.1).

Les paramètres utilisés pour les deux matériaux sont rassemblés dans l'annexe I.

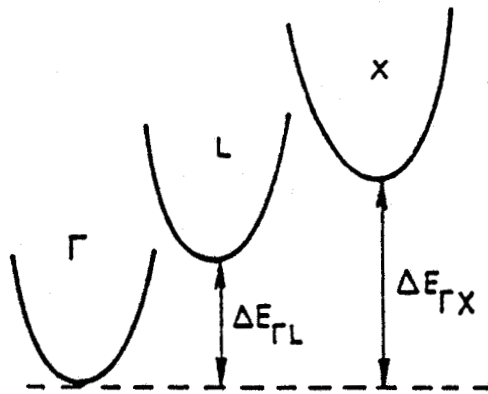


FIGURE III.1 Bandes d'énergie de conduction relatives à l'AsGa.

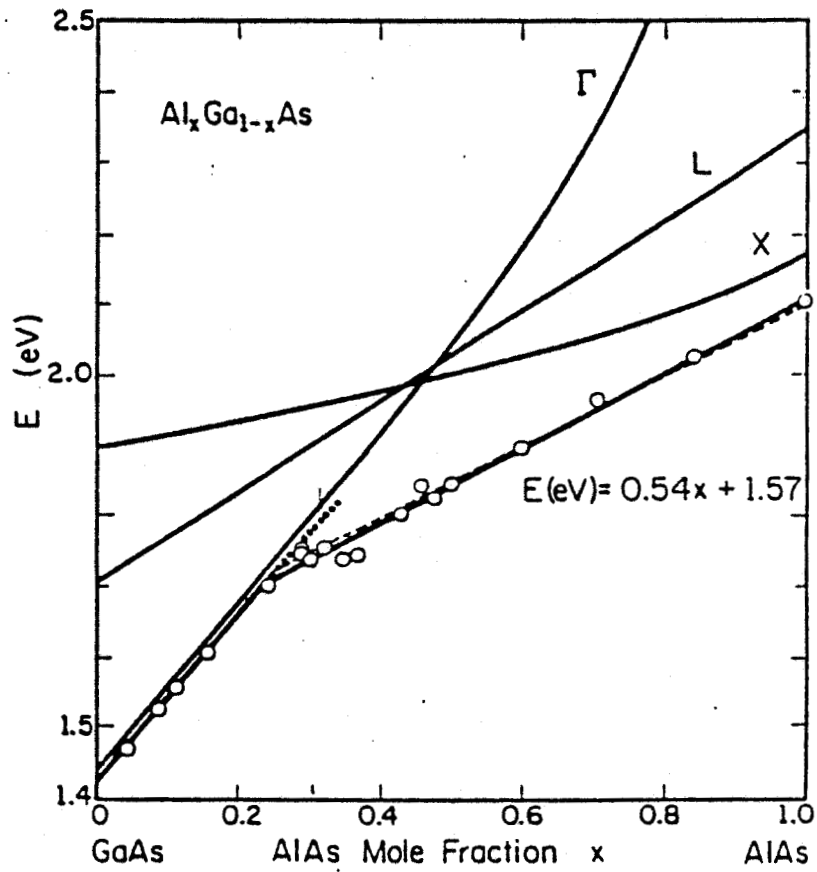


FIGURE III.2 Evolution des bandes de conduction de $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ avec le pourcentage d'aluminium x . D'après [32].

III.2. LES BANDES D'ENERGIE DANS LES HETEROJONCTIONS

III.2.1. Diagramme de bandes

Les caractéristiques géométriques de la structure étudiée sont indiquées sur la figure III.3.a. Le diagramme de bandes correspondant est représenté sur la figure III.3.b.

Outre la localisation d'électrons à l'interface de l'hétérojonction, du côté de l'AsGa, la présence d'une tension de polarisation V_b à la grille contribue également à la courbure de la bande de conduction de l' $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$.

Un paramètre fondamental des propriétés électroniques de l'hétérojonction est la valeur de la discontinuité ΔE_c . Cette valeur dépend du pourcentage de l'aluminium dans l' $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$. Elle peut être déterminée expérimentalement aussi bien par mesure optique en photoluminescence [33] que par mesure de capacité [34] pour des valeurs de x inférieures à 0.35. La figure III.4. montre l'évolution de ΔE_c avec x . Si $x = 0.3$, $\Delta E_c = 0.28$ ev.

III.2.2. Détermination des états électroniques dans le puits de potentiel

L'existence d'un puits de potentiel quasi triangulaire à l'interface de l'hétérojonction introduit des niveaux d'énergie discrets dans la bande de conduction de l'AsGa près de cette interface selon la direction perpendiculaire à celle-ci.

Or, nous savons que dans le cas d'un puits de potentiel quasi triangulaire, l'écart d'énergie entre deux niveaux est approximativement inversement proportionnel à la masse effective [36]. Cette dernière est beaucoup plus élevée dans les vallées satellites que dans la vallée centrale (Annexe I). En outre, la discontinuité à l'interface entre les vallées satellites correspondantes des deux matériaux est plus faible que celle existant entre les vallées centrales. Les effets quantiques dus à l'hétérojonction sont donc relativement moins marqués dans les vallées satellites que dans la vallée centrale et peuvent être supposés comme à peu près négligeables dans une première approche de l'hétérojonction que représente le présent travail.

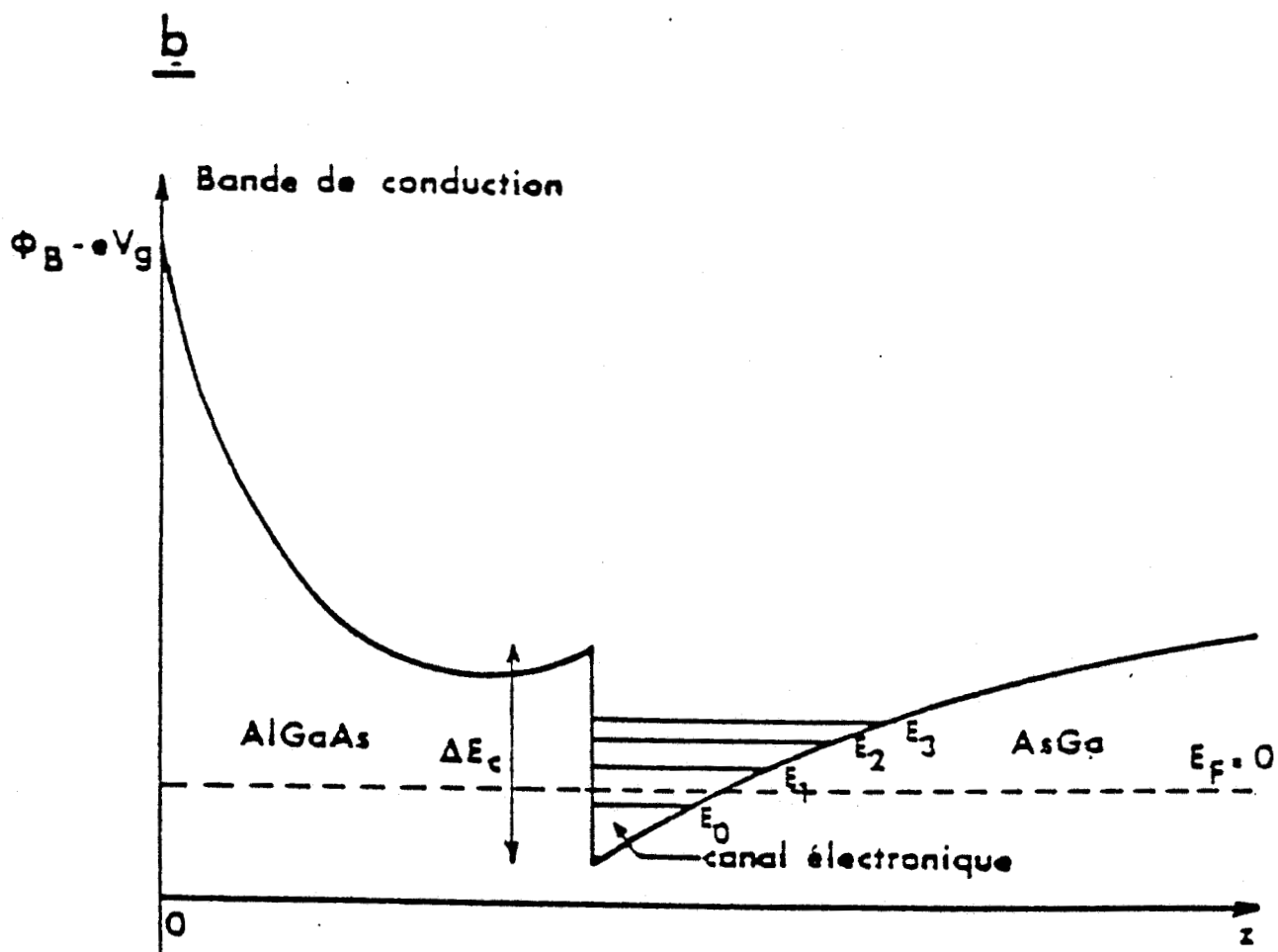
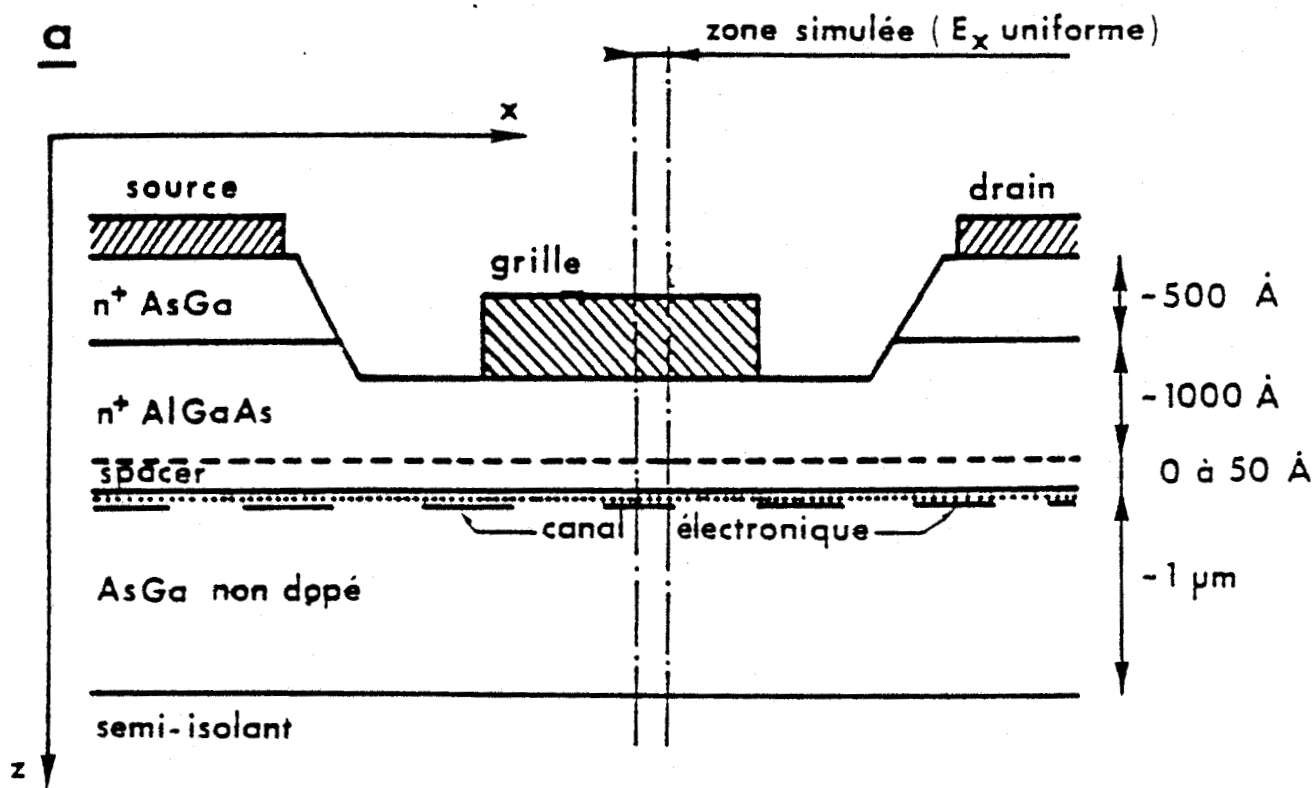


FIGURE III.3 Constitution générale du HEMT (a) et diagramme de bandes correspondant (b).

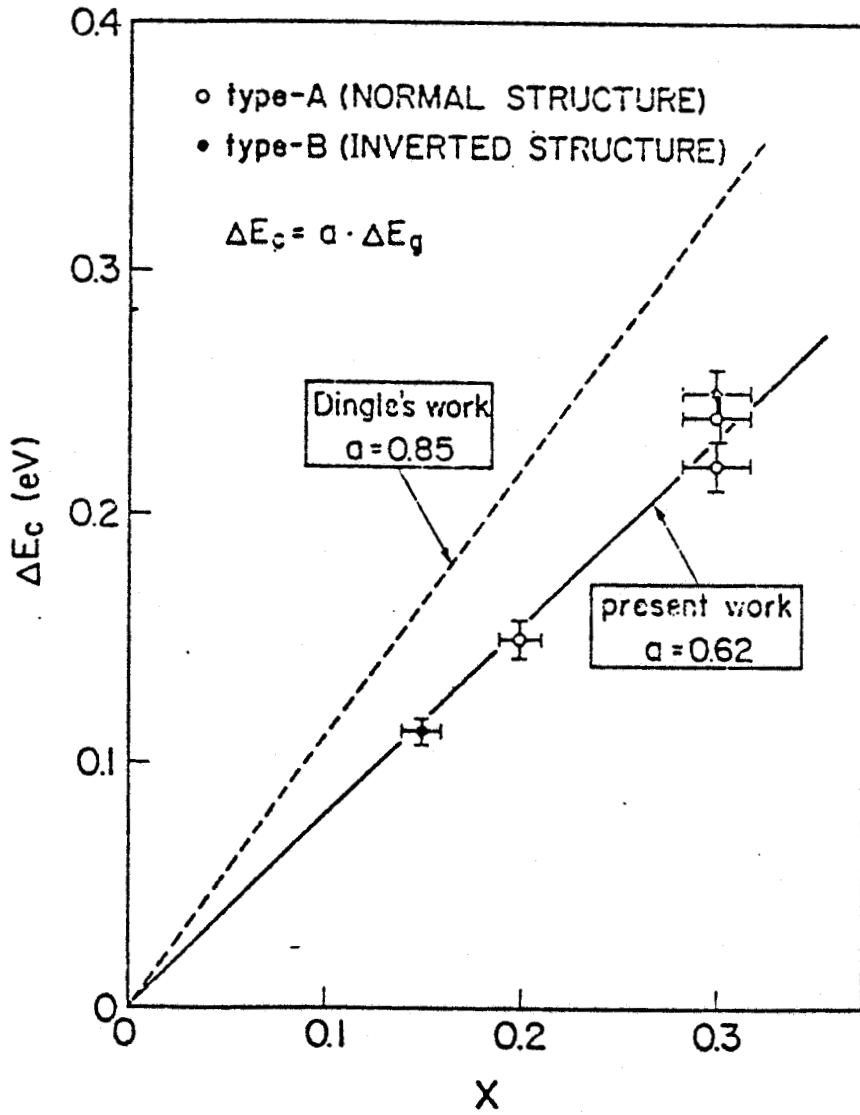


FIGURE III.4 Evolution de la discontinuité énergétique de bandes de conduction avec le pourcentage d'aluminium. D'après [34].

Seuls les états dans la vallée centrale sont donc "altérés" par les effets quantiques dus à la faible largeur du puits de potentiel. C'est de la détermination de ces états qu'il est maintenant question.

Pour déterminer les états électroniques dans le puits de potentiel, nous allons résoudre l'équation de Shrödinger dans l'approximation de la masse effective, qui reste valable pour une structure telle que nous étudions ici [39, 40]. Nous supposons par ailleurs que l'électron dans le puits de potentiel a la même masse effective que dans GaAs en volume*. Afin de réduire le problème pour les électrons multiples à celui de l'électron unique, nous utilisons l'approximation de Hartree [45].

L'énergie de l'électron suivant z étant quantifiée, la bande de conduction prend la forme :

$$\epsilon = \epsilon_n + \epsilon_{||} = \epsilon_n + \frac{\hbar^2}{2m^*} (k_x^2 + k_y^2) \quad (3.2)$$

où n est un indice de sous-bande (qui constitue un nombre quantique de chaque électron), et la particule elle-même est décrite par une fonction d'onde de la forme :

$$\psi_{n, \vec{k}_{||}}(x, y, z) = \frac{1}{\sqrt{A}} F_n(z) e^{i(k_x x + k_y y)} \quad (3.3)$$

où $F_n(z)$ est la fonction d'onde enveloppe normalisée de l'électron dans la direction z et $1/\sqrt{A}$ une constante de normalisation pour la fonction d'onde de l'électron dans le plan parallèle à l'interface de l'hétérojonction : A est l'aire de l'interface traitée.

$F_n(z)$ satisfait à l'équation de Shrödinger :

$$\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2 F_n(z)}{dz^2} + [\epsilon_n - V(z)] F_n(z) = 0 \quad (3.4)$$

* Il existe encore des controverses à ce sujet. Voir les références 41 et 42 par exemple.

où $V(z)$ représente l'énergie potentielle de l'électron, que nous précisons plus loin.

La barrière de potentiel à l'interface étant finie, la fonction d'onde $F_n(z)$ peut, a priori, pénétrer dans la couche GaAlAs où la masse effective de l'électron diffère de celle de GaAs. En principe, le premier terme du premier membre de l'équation (3.4) doit s'écrire sous la forme :

$$\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \left[\frac{1}{m^*(z)} \frac{dF_n(z)}{dz} \right]$$

Toutefois la différence des masses effectives dans les deux matériaux est suffisamment faible pour que l'on puisse admettre l'hypothèse que l'électron a la même masse effective (celle dans GaAs) dans les deux matériaux, ce qui nous a permis d'écrire l'équation de Shrödinger sous la forme (3.4).

L'énergie potentielle de l'électron $V(z)$ peut être décomposée en trois termes suivants :

$$V(z) = V_h(z) + V_{im}(z) + V_c(z) \quad (3.5)$$

où $V_h(z)$ est l'énergie potentielle associée à la discontinuité à l'interface, $V_{im}(z)$ l'énergie potentielle d'image [43, 44] qui résulte de la différence des permittivités diélectriques dans les deux matériaux, et enfin $V_c(z)$ l'énergie potentielle due à la charge d'espace dans la structure (potentiel de Hartree).

L'hétérojonction étant située à $z=0$, on a :

$$V_h(z) = - \Delta E_c U(z) \quad (3.6)$$

avec $U(z)$ fonction échelon.

L'énergie potentielle d'image s'écrit sous la forme [44] :

$$V_{im}(z) = \begin{cases} [(\epsilon_s - \epsilon_b)e^2]/[16\pi \epsilon_s (\epsilon_s + \epsilon_b)z], & z > 0 \\ [(\epsilon_s - \epsilon_b)e^2]/[16\pi \epsilon_b (\epsilon_s + \epsilon_b)z], & z < 0 \end{cases} \quad (3.7.a)$$

$$(3.7.b)$$

où ϵ_s et ϵ_b sont respectivement les permittivités diélectriques dans GaAs et dans GaAlAs.

La différence ($\epsilon_s - \epsilon_b$) étant faible (voir Annexe I), nous négligeons, pour simplifier les calculs, le potentiel d'image, dans ce qui suit.

L'énergie potentielle $V_c(z)$ due à la charge d'espace peut être déterminée à l'aide de l'équation de Poisson :

$$\frac{1}{e} \frac{d^2 V_c(z)}{dz^2} + \frac{e}{\epsilon_s} [N_d^+(z) - N_a^-(z) - N(z)] = 0 \quad (3.8)$$

où $N(z)$ représente la densité volumique d'électrons, soit :

$$N(z) = \sum N_n |F_n(z)|^2 \quad (3.9)$$

avec N_n la densité surfacique d'électrons de la sous-bande n .

Comme dans un système à deux dimensions la densité d'états est constante de valeur égale à $em^*/\pi\hbar^2$, nous avons :

$$N_n = \frac{em^*}{\pi\hbar^2} \int_{\epsilon_n}^{+\infty} \frac{d\epsilon}{1 + \exp\left[\frac{\epsilon - \epsilon_F}{k_B T}\right]} \quad (3.10)$$

ou encore après intégration :

$$N_n = \frac{em^* k_B T}{\pi\hbar^2} \ln \left[1 + \exp\left(\frac{\epsilon_F - \epsilon_n}{k_B T}\right) \right] \quad (3.11)$$

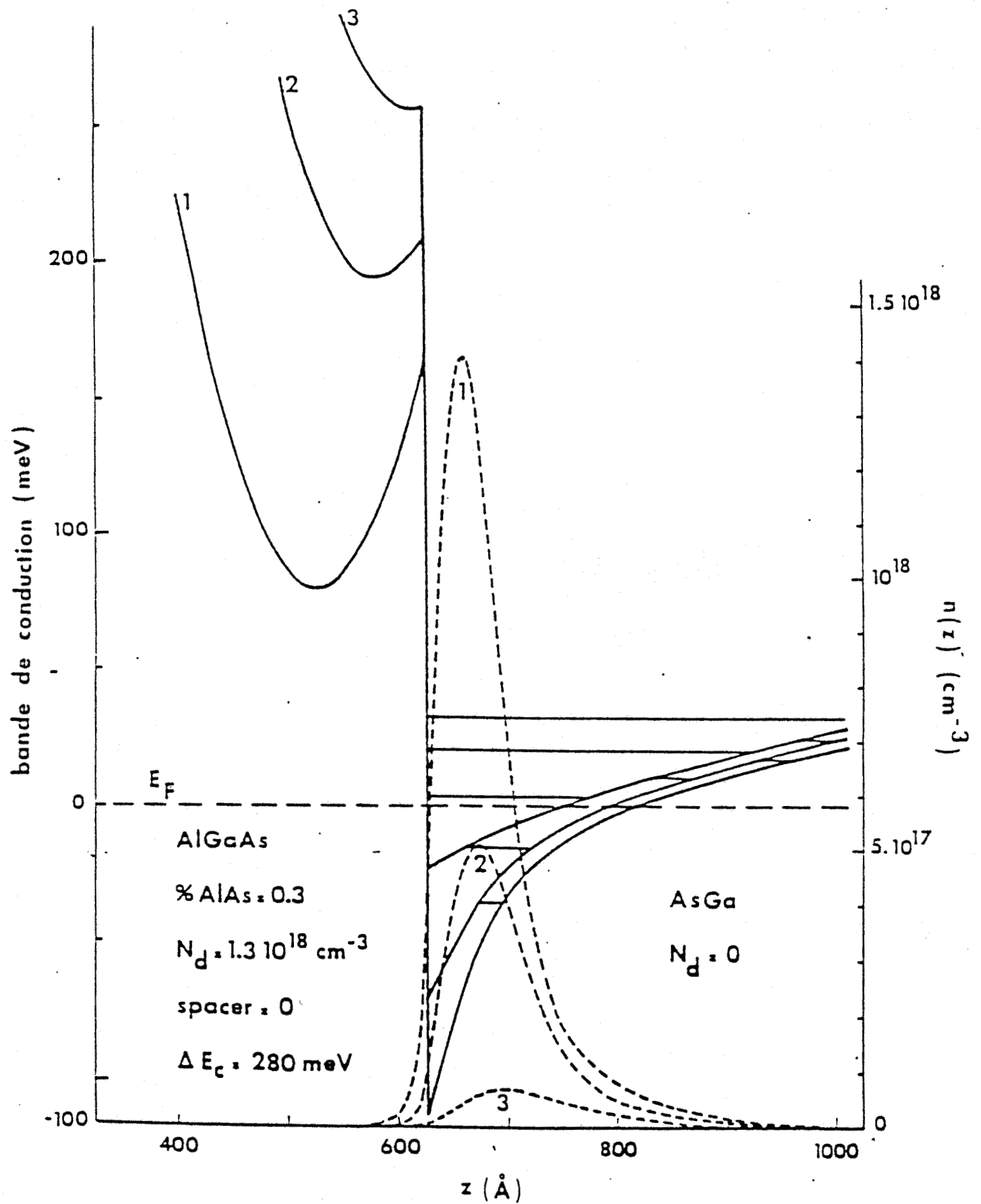


FIGURE III.5.a Allure du potentiel (bande de conduction) à l'hétéro-jonction (trait plein) et densité d'électrons (trait interrompu) dans la direction de quantification pour trois tensions de polarisation V_g : 1) $V_g = -1.6 \text{ v}$, $N_s = 1.15 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}$; 2) $V_g = -2.3 \text{ v}$, $N_s = 5.0 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$; 3) $V_g = 2.7 \text{ v}$, $N_s = 9. \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$. La température est de 77K. La barrière de Schottky ϕ_B est supposée égale à 1 Volt.

et pour M sous-bandes de masses effectives identiques on a :

$$N_S = \sum_{n=0}^M N_n = \frac{m^* k_B T}{\pi h^2} \lambda_n \left\{ \left[1 + \exp\left(\frac{\epsilon_F - \epsilon_0}{k_B T}\right) \right] \dots \left[1 + \exp\left(\frac{\epsilon_F - \epsilon_M}{k_B T}\right) \right] \right\} \quad (3.12)$$

L'approximation de Hartree conduisant à la mise en oeuvre d'un "champ self-consistent" inclus dans $V_c(z)$, l'équation de Shrödinger (3.4) ne peut être résolue de façon analytique. Nous avons été amenés à élaborer un programme spécial de résolution auto-consistante de cette équation intégral-différentielle. La méthode en question est présentée dans l'Annexe II.

En guise d'exemple, les figures III.5.a, III.5.b, et III.5.c montrent les résultats obtenus pour la structure dont les caractéristiques sont celles indiquées sur la figure III.5.a. La figure III.5.a montre l'évolution de la bande de conduction et de la densité d'électrons en fonction de l'abscisse z dans trois cas de polarisation à la grille. Quand la tension de polarisation V_g est faible, le bas de la bande de conduction se situe plus haut par rapport au niveau de Fermi. Il en est ainsi du puits de potentiel. Sur cette même figure, on peut constater l'importance des effets quantiques sur la distribution spatiale des électrons près de l'interface. En effet, classiquement, la densité d'électrons dépend, dans l'approximation de Thomas-Fermi [46], de l'écart local séparant le bas de la bande de conduction du niveau de Fermi :

$$n(z) = \frac{1}{3\pi^2} \left\{ \frac{2m^*}{h^2} [\epsilon_F - \epsilon_c(z)] \right\}^{3/2}$$

ce qui situe le pic à l'interface (Fig. III.6).

La figure III.5.b représente l'évolution des énergies de sous-bandes avec V_g , ainsi que la densité surfacique d'électrons. Quand la tension de polarisation V_g est inférieure à - 2.75 v, le dispositif est au pincement, et il n'y a pratiquement pas d'électrons près de l'interface. Quand la tension V_g augmente, la densité surfacique croît linéairement : la tension de polarisation commande directement la charge accumulée à l'interface. Par la suite la charge tend à se saturer, car quand V_g augmente, ses électrons tentent à se déplacer vers la couche GaAlAs [47].

La figure III.5.c montre l'évolution des énergies de sous-bandes et du niveau de Fermi en fonction de la densité surfacique, prenant comme référence le fond de la vallée Γ . Quand la densité N_s augmente, le champ électrique moyen dans le puits de potentiel devient plus fort. Il en résulte que les niveaux d'énergie montent par rapport au fond du puits. L'augmentation de la concentration d'électrons rend le système de plus en plus dégénéré, le niveau de Fermi tend à se situer au dessus du fond de la sous-bande fondamentale.

Au cours de notre investigation de la structure de bandes de l'hétérojonction GaAs/GaAlAs, nous avons constaté un fait tout à fait remarquable et très utile pour la conception de composants optimisés en CAO : les énergies de sous-bandes et le niveau de Fermi en fonction de N_s tels que nous les avons représentés sur la figure III.5.c constituent en fait des données universelles pourvu que la discontinuité ΔE_c soit plus grande que 0.2 eV ($\alpha > 0.2$) et la température la même, quelles que soient par ailleurs les caractéristiques du composant. En d'autres termes, les états électroniques dans le puits de potentiel sont essentiellement déterminés par la connaissance de la densité surfacique d'électrons N_s .

Influence des paramètres technologiques

Les paramètres technologiques qui caractérisent le dispositif que nous étudions ici sont essentiellement :

- la concentration de donneurs dans GaAlAs N_d ,
- l'épaisseur de l'espaceur S_p
- et le pourcentage d'aluminium x .

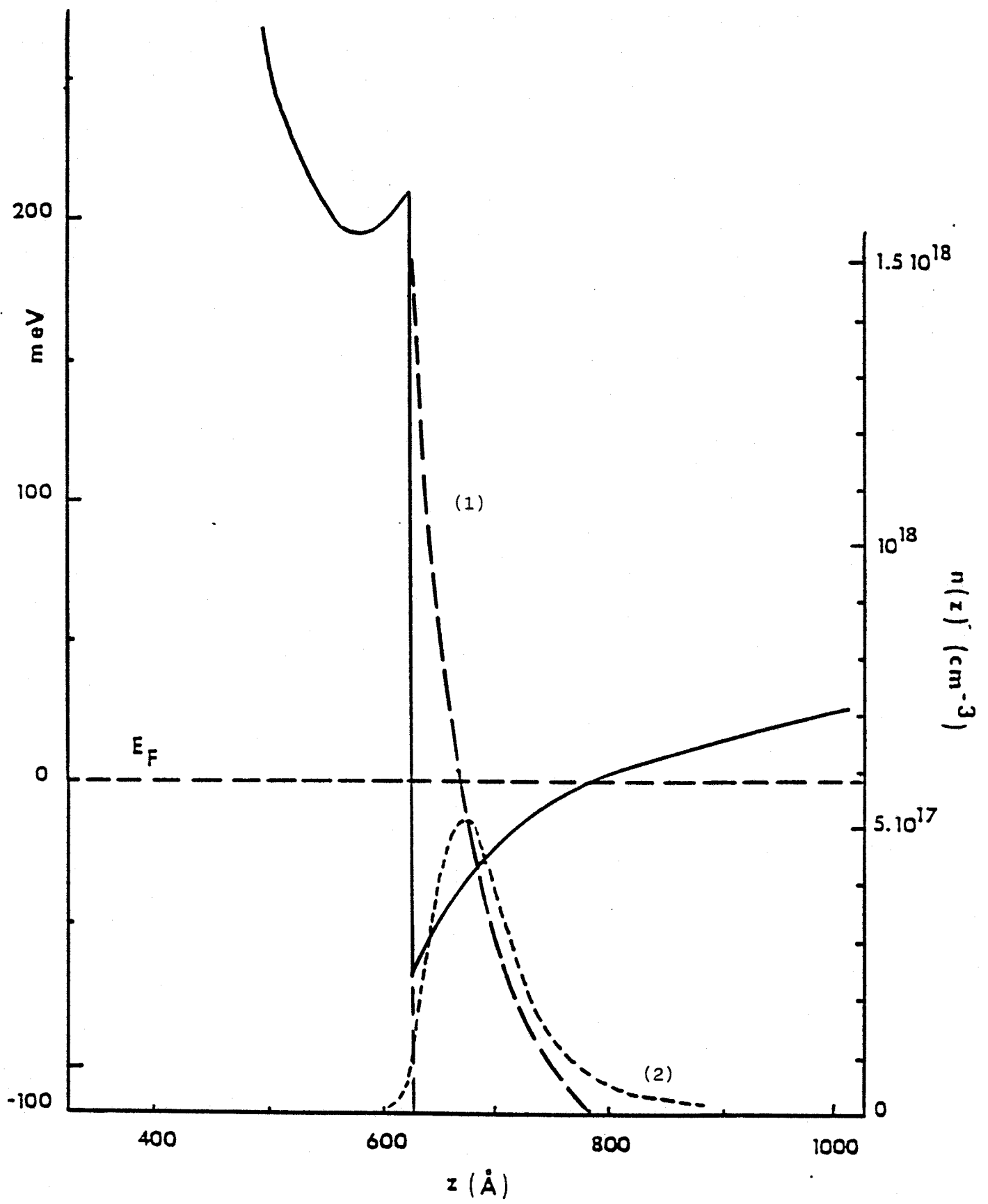


FIGURE III.6 Densités de charge classique (1) et quantique (2).

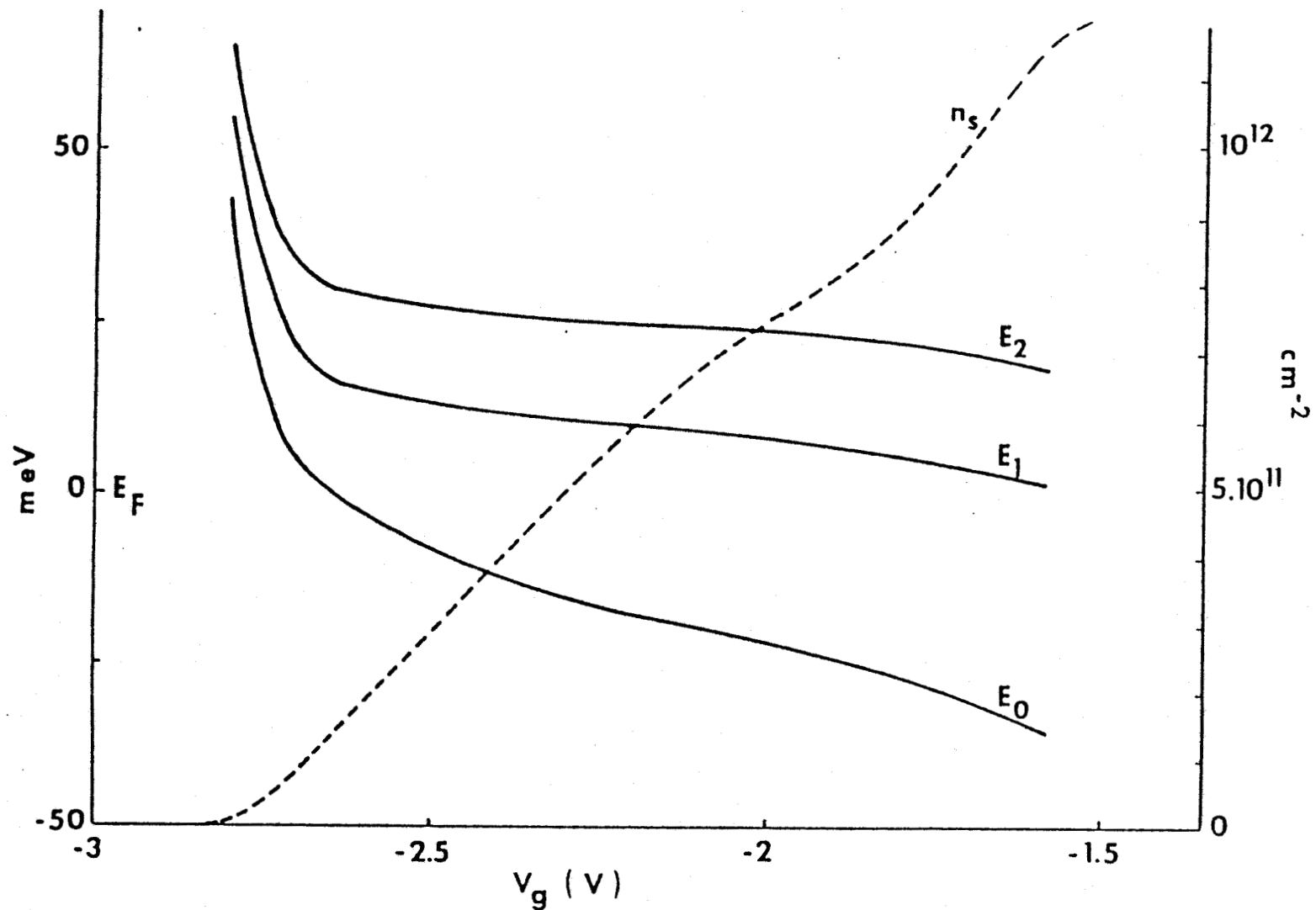


FIGURE III.5.b Evolution de N_s et de trois premières énergies de sous-bande avec V_g pour la structure de la figure III.5.a.

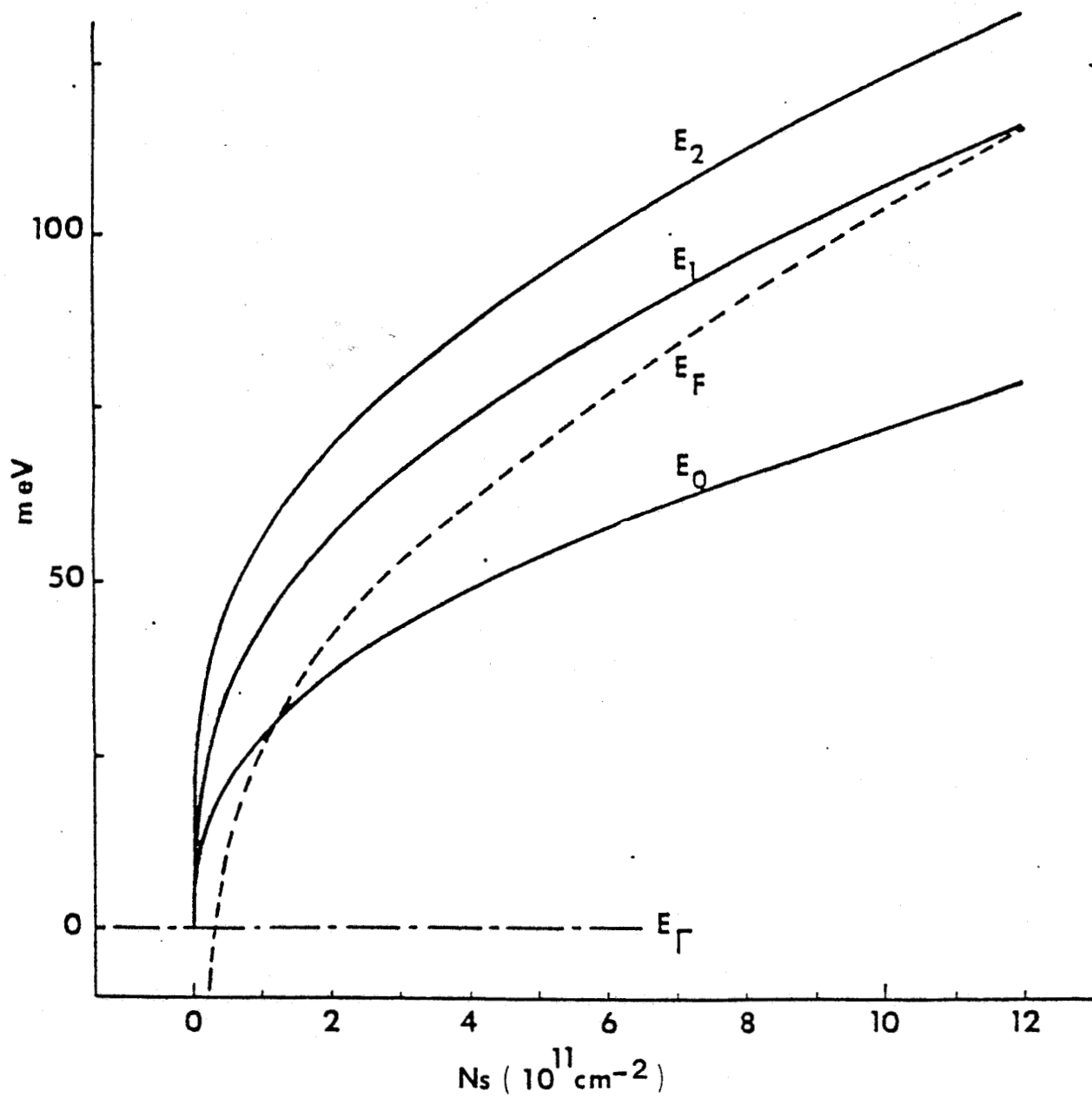


FIGURE III.5.c Evolution des premières énergies de sous-bande et du niveau de Fermi en fonction de N_s pour la structure de la figure III.5.a.

Toutes choses égales, l'augmentation de S_p ou la diminution de N_d a pour effet de réduire la densité d'électrons dans le puits de potentiel. C'est un fait bien connu. Il semble cependant que ces deux paramètres n'ont que peu d'influence sur les états électroniques dans le puits de potentiel en ce sens que quelles que soient leurs valeurs, les énergies de sous-bandes restent inchangées tant que la densité surfacique N_s est maintenue constante au moyen de la commande de la tension de polarisation à la grille par exemple. Le fait que le dopage N_d dans GaAlAs n'a que peu d'effet sur les états électroniques à l'intérieur du puits de potentiel a été déjà montré par Bastard [48].

L'influence du pourcentage d'aluminium sur la structure de bandes du système a été discutée en détail récemment par plusieurs auteurs. Nous renvoyons le lecteur aux références 26 et 37 pour ces discussions. Pour ce qui nous intéresse ici, l'évaluation de la charge ionique dans GaAlAs a été faite dans la plupart des cas en admettant une énergie d'ionisation apparente dépendant de la fraction molaire de AlAs dans le matériau.

Une fois que la structure de bandes du système est connue, on peut se tourner vers le problème posé par les collisions avec les défauts du cristal. En effet, maintenant les états électroniques étant connus, tous les paramètres de la formule (3.2) sont précisés. De toute façon, nous avons étudié seulement quelques cas typiques, puisque les structures des hétérojonctions contiennent tant de paramètres, le nombre de cas de figure envisageables sont vraiment infinis. La petite étude présentée ici n'est sûrement pas exhaustive.

CHAPITRE IV

CALCULS DES PROBABILITES DE COLLISION

IV.1. GENERALITES

Dans la théorie du traitement de perturbations au premier ordre, les collisions qu'une particule est susceptible de subir au cours de son évolution dans un système physique sont caractérisées par leur densité de probabilité. A la base du calcul de celle-ci figure la règle d'or de Fermi : soit $V(\vec{r})$ le potentiel perturbateur responsable de la collision, la densité de probabilité par unité de temps qu'une particule subisse une collision l'amenant de l'état $|\psi_{\vec{k}}(\vec{r})\rangle$ dans un autre état $|\psi_{\vec{k}'}(\vec{r})\rangle$ s'écrit :

$$S(\vec{q}) = \frac{2\pi}{h} |M(\vec{q})|^2 \delta[\varepsilon(\vec{k}') - \varepsilon(\vec{k}) \pm \Delta\varepsilon] \quad (4.1)$$

où $\Delta\varepsilon$ est l'énergie échangée au cours de la collision et $M(\vec{q})$ l'élément de matrice défini par :

$$M(\vec{q}) = \langle \psi_{\vec{k}'}^*(\vec{r}) | V(\vec{r}) | \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) \rangle \quad (4.2)$$

avec $\vec{q} = \vec{k}' - \vec{k}$. La fonction de Dirac dans l'expression (4.1) traduit la conservation de l'énergie du système.

De toute évidence, pour un type de collision donnée, sa densité de probabilité dépend directement des états qu'une particule peut occuper dans un système physique.

Compte tenu du fait que notre modèle comporte à la fois un système à deux dimensions (l'ensemble des états dans les sous-bandes du puits de potentiel) et un système à trois dimensions (l'ensemble des états disponibles dans la structure étudiée qui se trouvent hors du puits de potentiel), il y a lieu de distinguer, lors de la détermination des densités de probabilité, trois cas suivants :

- cas du système à trois dimensions,
- cas du système à deux dimensions,
- et enfin celui du couplage entre les deux systèmes précédents.

Nous allons maintenant traiter successivement ces trois cas différents.

IV.2. CAS DU SYSTEME A TROIS DIMENSIONS

Il constitue l'aspect le plus connu de ce type de travail, dans la mesure où il correspond au cas de l'AsGa et de l'AlGaAs en volume.

Le modèle utilisé ici est celui présenté initialement par Littlejohn et al. [31] et déjà utilisé depuis de nombreuses années dans notre laboratoire [30]. Dans notre programme de simulation, sont prises en compte la collision optique polaire, la collision intervallée équivalente et non équivalente, les collisions avec les phonons acoustiques de grandes longueurs d'onde et piezo-électriques, et les collisions avec les impuretés ionisées des matériaux.

On utilise (4.1) où les $\psi_{\vec{k}}(\vec{r})$ sont des ondes planes :

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k}\vec{r}} \quad (4.3)$$

Les paramètres utilisés sont rassemblés dans l'Annexe I.

IV.3. CAS DU SYSTEME A DEUX DIMENSIONS

Dans le présent système, au lieu de (4.1), la densité de probabilité se met sous la forme :

$$S_2^{mn}(Q) = \frac{2\pi}{\hbar} |M_2^{mn}(Q)|^2 \delta[\epsilon_{||}(\vec{k}'_{||}) + \epsilon_n - \epsilon_{||}(\vec{k}_{||}) - \epsilon_m \pm \Delta\epsilon] \quad (4.4)$$

qui représente la probabilité de collision par unité de temps qu'un électron subisse une collision l'amenant de l'état $|\vec{k}_{||}, m\rangle$ à l'état $|\vec{k}'_{||}, n\rangle$ avec m, n indices de sous-bande.

Dans cette expression, $|M_2^{mn}(Q)|^2$ est le carré de l'élément de matrice avec $Q = |\vec{k}_{||} - \vec{k}'_{||}|$.

IV.3.1. Collision sur les phonons

Dans ce cas, le carré de l'élément de matrice peut se mettre sous la forme générale suivante (voir Annexe IV) :

$$|M_2^{mn}(Q)|^2 = \frac{V}{2\pi A} \int |M_3(Q, q_z)|^2 |I_{mn}(q_z)|^2 dq_z \quad (4.5)$$

où $M_3(Q, q_z)$ est l'élément de matrice à trois dimensions et $I_{mn}(q_z)$ l'intégrale de chevauchement définie par :

$$I_{mn}(Q_z) = \int_{-\infty}^{+\infty} F_m(z) F_n(z) \exp(iq_z z) dz \quad (4.6)$$

avec q_z la composante du vecteur d'onde du phonon selon la direction z . Les constantes V et A figurant dans (4.5) sont le volume et la surface du cristal considéré.

En écrivant (4.5), nous avons admis implicitement l'hypothèse de la tridimensionnalité des phonons en dépit de l'hétérojonction. Cette hypothèse peut être justifiée par le bon accord de maille entre les deux matériaux qui assure la continuité de la structure cristalline à travers l'hétérojonction.

De cette manière, nous traitons toutes les collisions autres que celles dues aux impuretés ionisées, c'est-à-dire les collisions avec les phonons optiques polaires, les phonons acoustiques et piézoélectriques dans la vallée Γ à deux dimensions.

Il faut voir que la difficulté essentielle et incontournable de ce genre de modèle est que les probabilités de collision changent suivant la configuration de la structure étudiée en accord avec les modifications induites au niveau des fonctions d'onde et des sous-bandes par la polarisation de grille, par exemple. Cet aspect du modèle rend la mise en pratique de la simulation d'autant plus difficile que les fonctions d'onde sont déterminées de façon numérique, ainsi que nous l'avons vu au Chapitre III. A ce stade de l'exposé, il est intéressant d'introduire la notion de la largeur effective due à Price [50] :

$$b_{mn} = \frac{1}{2} \left[\int_{-\infty}^{+\infty} F_m^2(z) F_n^2(z) dz \right]^{-1} \quad (4.7)$$

avec $F_m(z)$ et $F_n(z)$ fonctions d'onde, car cela permet de pallier partiellement à cet inconvénient d'ordre pratique. En effet, il est possible d'exprimer, grâce à un certain nombre d'approximations simplificatrices développées en Annexe V, les densités de probabilité sous forme analytique en fonction de la largeur effective.

Pour illustrer ce point, citons l'exemple de l'interaction optique polaire. La densité de probabilité s'écrit (voir Annexe V) :

$$S_2^{mn}(Q) = C \frac{H_{mn}(Q)}{Q} \quad (4.8)$$

où C est une constante et $H_{mn}(Q)$ le facteur de forme :

$$H_{mn}(Q) = \iint F_m(z) F_n(z) F_m(z') F_n(z') \exp(-Q |z - z'|) dz dz' \quad (4.9)$$

Ce dernier peut être exprimé sous forme approchée (voir Annexe III) :

$$H_{mn}(Q) \approx \begin{cases} \frac{1}{1 + b_{mn} Q}, & \text{si } m = n \\ \frac{Q}{b_{mn} Q^2 + \frac{\pi^2 (m^2 - n^2)^2}{4 b_{mn} (m^2 + n^2)}}, & \text{si } m \neq n \end{cases} \quad (4.10)$$

E_n portant ces expressions dans (4.8), on peut réécrire la densité de probabilité sous forme simplifiée.

Comme nous l'avons vu au Chapitre III, la concentration électronique N_s à l'interface est en général très élevée (de 10^{11} à 10^{12} cm^{-2}). Ce fait nous amène à considérer à présent le phénomène d'écrantage. La prise en compte de l'effet d'écran nécessite une étude soignée de la fonction diélectrique du système électronique envisagé puisque l'élément de matrice écranté est obtenu par le rapport de l'élément de matrice non écranté par la fonction diélectrique. Cette dernière a été évaluée exactement par la théorie de la réponse linéaire [56] connaissant la structure de sous-bandes et les fonctions d'onde dans le puits de potentiel pour être non pas intégrée directement dans la simulation, ce qui est prohibitif, mais pour servir de base à des approximations correctes. Nous renvoyons le lecteur à l'Annexe VI pour les calculs et les approximations utilisées. Il est à noter que l'approche utilisée ici est tout-à-fait générale et applicable à tous les types de collision. Mais pour les collisions inélastiques, le problème est un peu compliqué dans la mesure où la fonction diélectrique dépendrait de la fréquence du potentiel de perturbation. Faute d'un modèle simple, l'effet d'écran n'a pas été pris en compte dans le cas de la collision optique polaire.

En pratique dans la simulation, nous avons besoin de :

$$\lambda_2^{mn}(\epsilon_{||}) = \lambda_2^{mn}(\vec{k}_{||}) = \int S_{2e}^{mn}(\vec{k}_{||}, \vec{k}'_{||}) d^2 \vec{k}'_{||} \quad (4.11)$$

qui représente la probabilité par unité de temps qu'un porteur situé dans l'état $|\vec{k}_{||}, m\rangle$ effectue une transition vers un état quelconque dans la sous-bande n . Dans cette expression, $S_{2e}^{mn}(\vec{k}_{||}, \vec{k}'_{||})$ est la densité de probabilité écrantée obtenue en remplaçant dans (4.4) l'élément de matrice non écranté par l'élément de matrice écranté.

A titre d'illustration, les probabilités de collision par unité de temps dans chaque sous-bande (les deux premières) en fonction de l'énergie mesurée par rapport au fond de celle-ci sont respectivement présentées sur les figures IV.1.a, IV.1.b. Dans chaque sous-bande, la collision optique polaire prédomine, dès que l'énergie de l'électron est supérieure à celle du phonon optique polaire $\hbar\omega_0$. Elle est très anisotrope, comme le montre la Figure IV.2

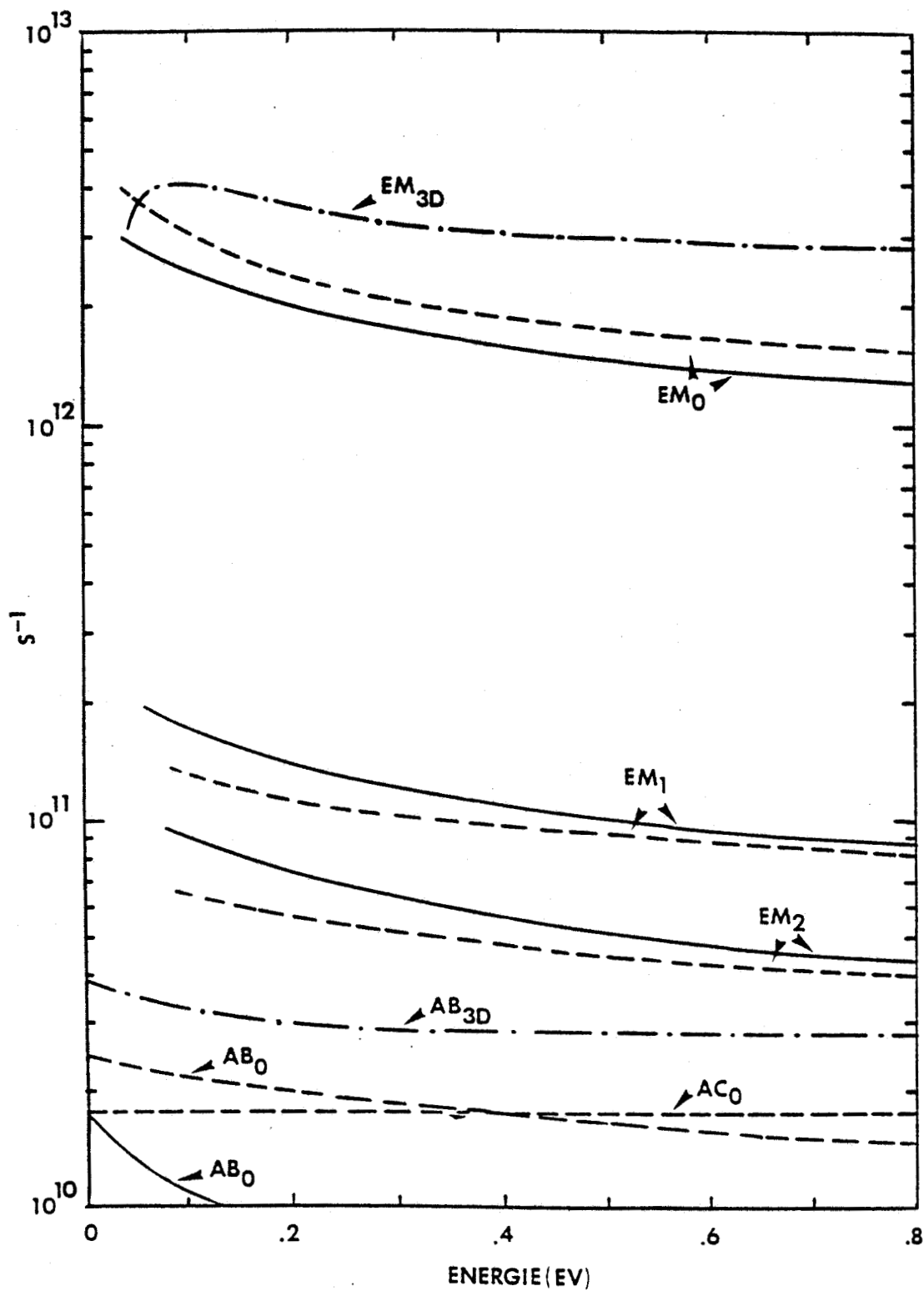


FIGURE IV.1a Evolution des probabilités de collision optique polaire par unité de temps avec l'énergie dans la sous-bande fondamentale 0.
 — structure 1 de la figure III.5a
 - - - structure 3 de la figure III.5a
 EM: émission, AB: absorption.
 Les indices indiquent la sous-bande qu'occupera l'électron après une collision effective.

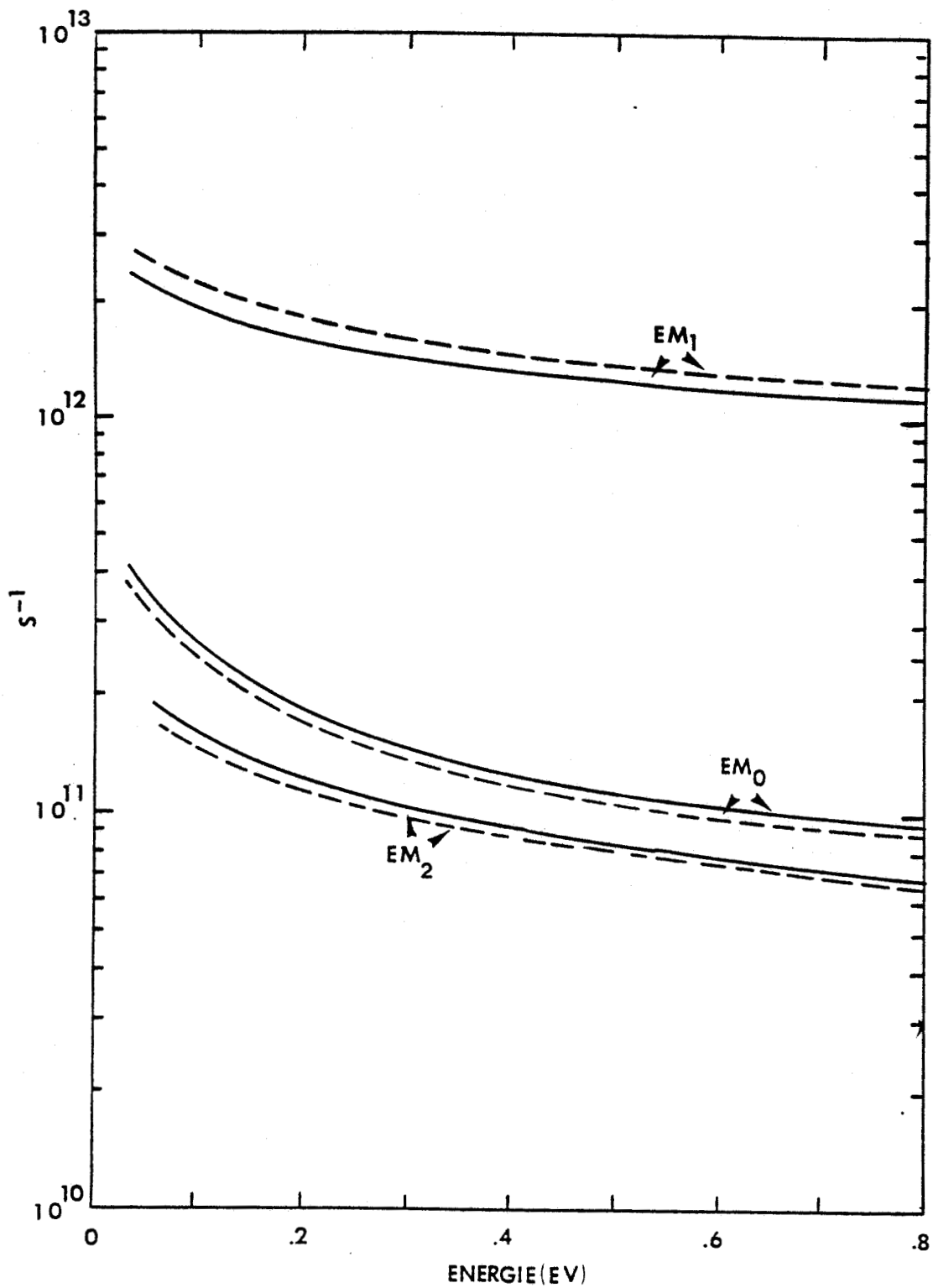


FIGURE IV.1b Meme que la figure IV.1a. Dans la premiere sous-bande excitee.

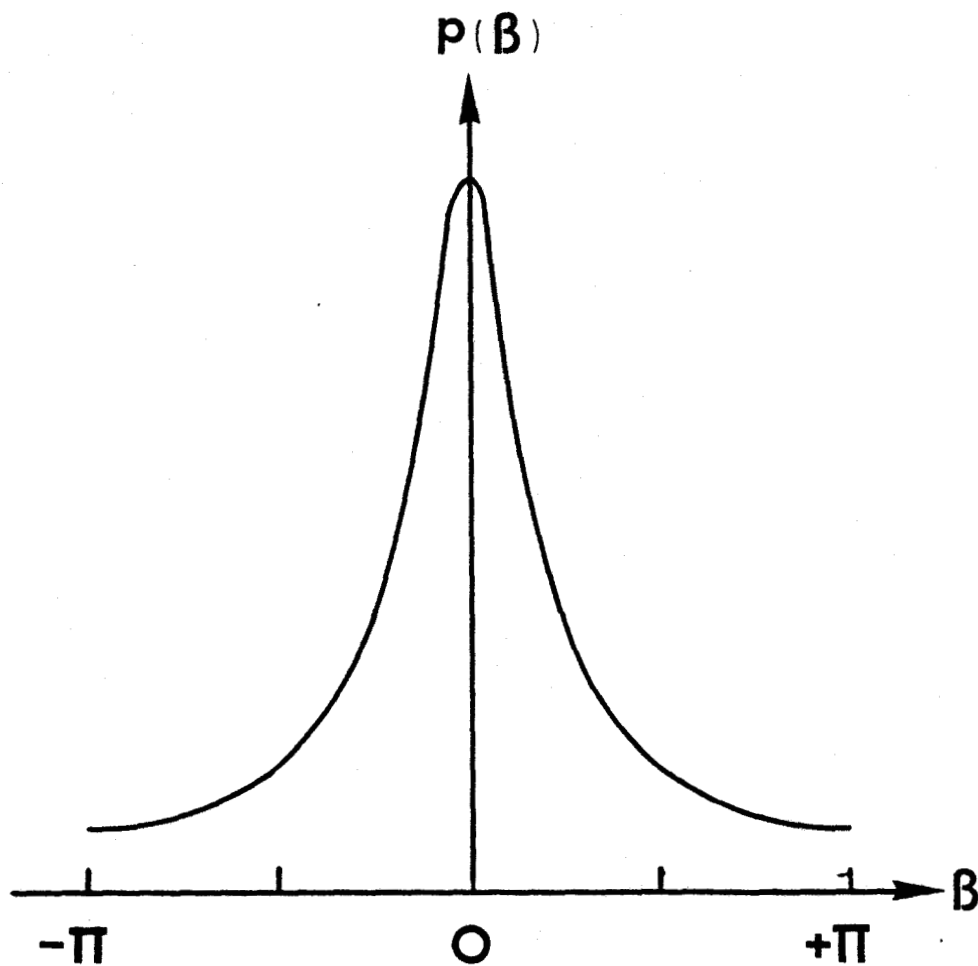


FIGURE IV.2 Allure de la fonction de distribution de l'angle de déviation relative à la collision optique polaire. Les angles de déviation faibles sont favorisés.

qui présente l'allure de la fonction de distribution pour l'angle de déviation après une collision intrasous-bande. Sa probabilité de collision pour la transition intrasous-bande est plus faible dans le cas d'un puits de potentiel plus large (qui correspond à N_s plus faible).

Par contre, sa probabilité de collision pour la transition intersous-bande est plus faible dans le cas d'un puits de potentiel plus étroit (qui correspond à N_s plus élevée) où les sous-bandes s'écartent davantage les unes des autres, ce qui rend le transfert intersous-bande plus difficile.

Les collisions sur les phonons acoustiques jouent un rôle assez secondaire, surtout en présence d'un champ électrique qui, en augmentant l'énergie des électrons, rend prédominantes les collisions sur les phonons optiques polaires. A champ faible, elles peuvent avoir des effets non négligeables, en particulier quand la température du réseau est basse, c'est-à-dire quand les collisions optiques polaires sont quasi inexistantes, l'énergie des électrons étant très faible devant celle du phonon optique polaire.

IV.3.2. Collisions sur les impuretés ionisées

Concernant l'interaction due aux impuretés ionisées, nous avons utilisé la méthode de Lee [61] que nous avons généralisée au cas d'un nombre quelconque de sous-bandes (voir Annexe V). On doit distinguer les collisions sur "impuretés éloignées" (les ions de la couche AlGaAs) de celles sur "impuretés locales" (les ions résiduels de la couche GaAs non dopée). Les résultats numériques pour les collisions dans les deux premières sous-bandes sont présentées dans la Figure IV.3. Dans le matériau en volume, l'interaction due aux impuretés ionisées est l'un des mécanismes de collision les plus importants limitant la mobilité des électrons. Grâce à la modulation de dopage dans la structure étudiée, les probabilités de collision sont très faibles, comme montrées sur la figure indiquée ci-dessus. Dans la mesure où les électrons des sous-bandes élevées peuvent se grouper plus loin de l'interface, donc des "impuretés éloignées", que ceux des sous-bandes inférieures, la probabilité de collision associée diminue, toutes choses égales, quand l'indice de sous-bande augmente. L'interaction intersous-bande due aux impuretés ionisées

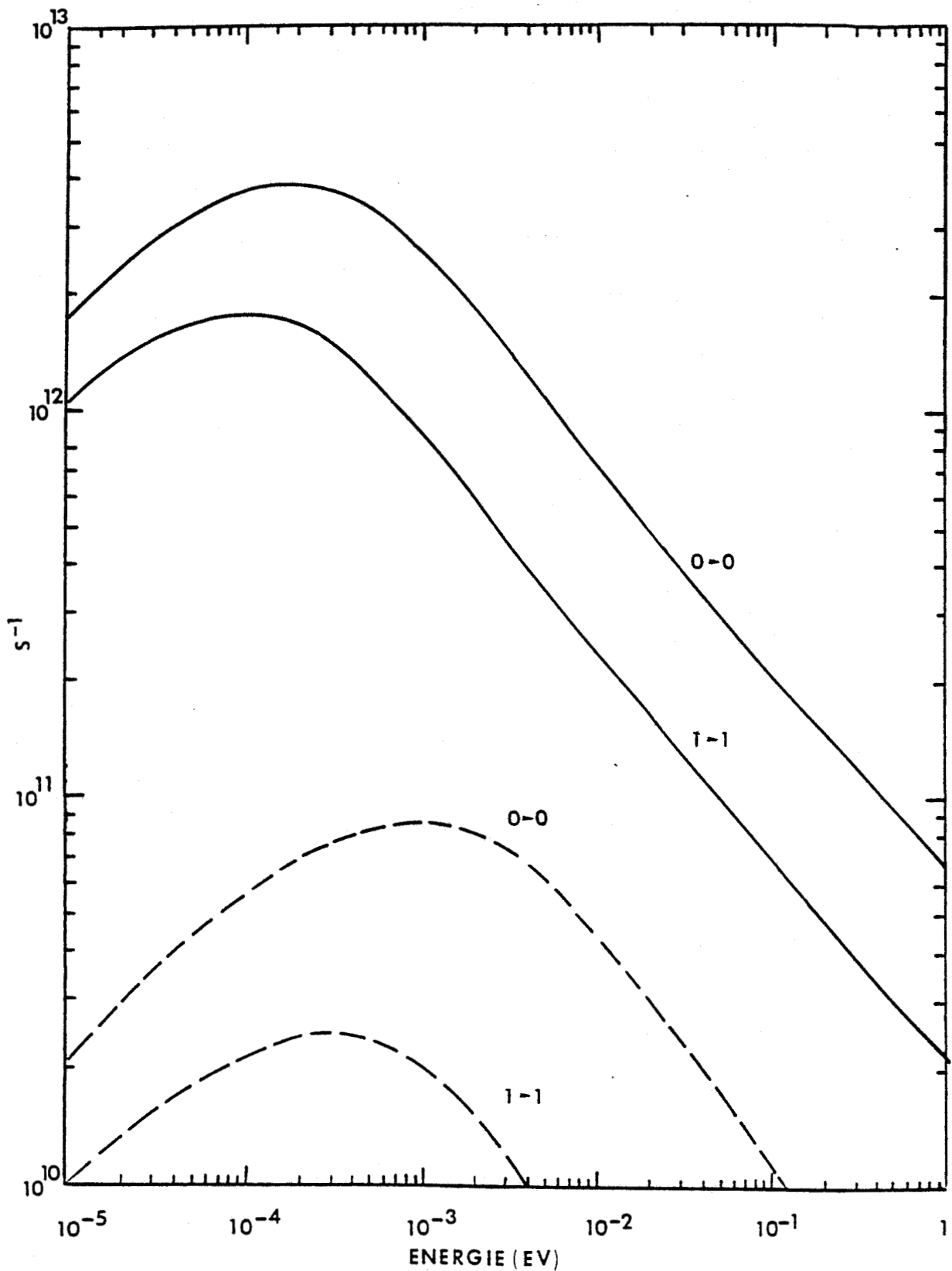


FIGURE IV.3 Evolution des probabilités de collision par unité de temps avec l'énergie pour l'interaction avec les "impuretés éloignées".

- structure 1 de la figure III.5a.
- - - structure 3 de la figure III.5b.

est très faible[16]. Les collisions intersous-bandes ne jouent un rôle appréciable que lorsque l'énergie moyenne des électrons est élevée par rapport à l'écart énergétique séparant les sous-bandes. Or dans ces conditions, les collisions sur les phonons optiques polaires sont de loin prédominantes. Aussi dans la simulation, nous n'avons pas inclus l'interaction intersous-bande due aux impuretés ionisées. Les probabilités de collision diminuent sensiblement quand la concentration électronique N_s à l'interface augmente. Cette diminution est due à l'effet d'écran qui est d'autant plus fort que N_s est élevée.

IV.4. COUPLAGE ENTRE UN SYSTEME A DEUX DIMENSIONS ET UN SYSTEME A TROIS DIMENSIONS

A tous points de vue, cet aspect constitue la pierre de touche du modèle. Tant que le champ électrique accélérateur est faible, le système électronique reste au voisinage de l'équilibre ; les électrons restent dans la vallée Γ à deux dimensions, leur mouvement est strictement bidimensionnel. Ce qui caractérise les électrons dans cet état est que leur abscisse z ne peut prendre que des valeurs proches de celles occupées par les lobes de la fonction d'onde électronique de la sous-bande où ils se trouvent. Là où la fonction d'onde est faible, un électron n'a que peu de chances de se trouver. Il est donc naturel de supposer qu'un électron accéléré et échauffé par le champ électrique et ainsi parvenu en vallée satellite ne peut revenir dans la vallée Γ à deux dimensions que si sa position selon z le situe au dessous d'un lobe d'une des fonctions d'onde existant dans le puits. En d'autres termes, l'électron doit être relativement près de l'hétérojonction. Si ce n'est pas le cas, une transition d'une vallée satellite vers une vallée Γ à trois dimensions reste toujours possible. En fait en vallée satellite, l'électron connaît un mouvement de diffusion à trois dimensions identique à celui qui existe dans le matériau en volume, ce qui peut résulter en un échappement de l'électron vers le substrat ou vers la couche AlGaAs. Mais la courbure de la bande de conduction dans ce cas (équivalente à un champ dans la direction z) repoussera plus ou moins fortement cet électron vers l'interface et vers le puits. Il en résulte que hors de l'équilibre en champ accélérateur fort - le système d'électrons sera constitué pour parties de porteurs strictement bidimensionnels (dans la vallée Γ), de porteurs strictement tridimensionnels répartis entre les deux vallées satellites et la vallée Γ à trois dimensions. Dans de telles conditions nous avons choisi de caractériser les probabilités de collisions intervallées de la façon sui-

vante. Nous disons que la probabilité de collision par unité de temps qu'un électron à deux dimensions transfère vers une vallée satellite dépend de son énergie et de sa position z , et vaut (pour un porteur de la sous-bande n) :

$$\lambda_{\Gamma_{2d} \rightarrow S_{3d}}^n(\epsilon_{||}, z) = \lambda_{\Gamma_{3d} \rightarrow S_{3d}}(\epsilon_n + \epsilon_{||}) \cdot 3b_{nn} |F_n(z)|^2, \quad (4.12)$$

où $\lambda_{\Gamma_{3d} \rightarrow S_{3d}}(\epsilon)$ sont les expressions habituelles pour le cas à trois dimensions [30, 31] $|F_n(z)|^2$ est la densité de probabilité de présence de l'électron en z , et b_{nn} est la largeur effective de la sous-bande n définie par l'équation (4.7).

Enfin, dans (4.12) $\epsilon = \epsilon_n + \epsilon_{||}$ est l'énergie totale de la particule à l'instant de la collision. Quand le porteur est à deux dimensions, z peut être obtenue par une méthode de Von Neumann appliquée à $|F_n(z)|^2$. Pour la transition inverse, nous utilisons (ϵ étant l'énergie cinétique à trois dimensions) :

$$\lambda_{S_{3d} \rightarrow \Gamma_{2d}}^n(\epsilon, z) = \lambda_{S_{3d} \rightarrow \Gamma_{3d}}(\epsilon - \epsilon_n) \cdot 3b_{nn} |F_n(z)|^2. \quad (4.13)$$

Dans ce dernier cas, z est connue puisque l'état de départ est à trois dimensions, et l'abscisse z est donnée par la simulation elle-même. On voit que, ce faisant, on introduit une simple modulation dans l'espace des probabilités de collision ordinaires à trois dimensions telles qu'on peut les trouver dans [30, 31].

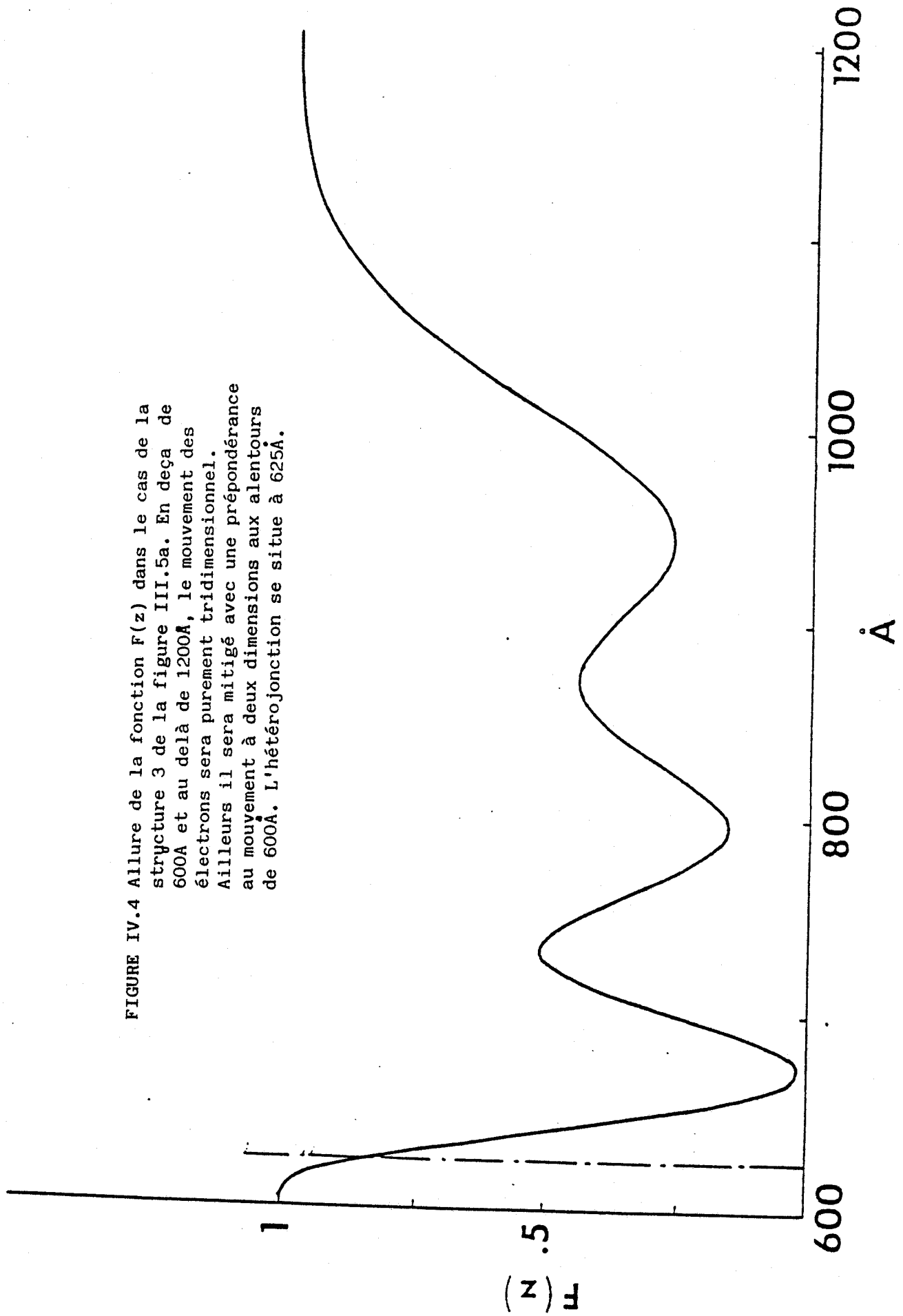
Quand l'électron est assez loin dans le substrat, les $F_n(z)$ sont amorties et tendent vers zéro, les transitions représentées par (4.12) et (4.13) ne sont plus possibles. Par contre, les électrons restent toujours en communication avec la vallée Γ à trois dimensions. En accord avec (4.13) et (4.17) nous écrivons que les probabilités de transfert associées sont :

$$\lambda_{\Gamma \rightarrow S} = \lambda_{\Gamma_{3d} \rightarrow S_{3d}} \cdot F(z) ; \lambda_{S \rightarrow \Gamma} = \lambda_{S_{3d} \rightarrow \Gamma_{3d}} \cdot F(z) \quad (4.14)$$

$$F(z) = 1 - \sum_n 3 b_{nn} |F_n(z)|^2 \quad (4.15)$$

qui sont les valeurs complémentaires des expressions (4.12) et (4.13) sommées sur le nombre total de sous-bandes considérées dans le puits. Un exemple de fonction $F(z)$ est montré sur la Figure IV.4. Là où $F(z) \approx 1$, le transfert en vallée Γ ne peut être que purement tridimensionnel. Au voisinage du puits de potentiel, $F(z)$ présente une diminution très marquée qui montre que le transfert vers la vallée Γ à deux dimensions est pratiquement seul autorisé.

FIGURE IV.4 Allure de la fonction $F(z)$ dans le cas de la structure 3 de la figure III.5a. En deça de 600Å et au delà de 1200Å, le mouvement des électrons sera purement tridimensionnel. Ailleurs il sera mitigé avec une prépondérance au mouvement à deux dimensions aux alentours de 600Å. L'hétérojonction se situe à 625Å.



CHAPITRE V

CONTRIBUTION A L'ETUDE DE LA MOBILITE ET
DE LA VITESSE DE DERIVE ELECTRONIQUES
DANS L'HETEROJONCTION GaAs/GaAlAs EN REGIME STATIONNAIRE

Pour les personnes qui travaillent à la conception de composants, certains paramètres sont nécessaires pour permettre une optimisation des conditions de fonctionnement. Au premier chef figure la mobilité électronique et ses variations avec les polarisations appliquées au composant. Viennent ensuite la vitesse de dérive en fonction du champ électrique et le coefficient de diffusion. Ce chapitre est consacré à la présentation des résultats concernant les deux premiers paramètres. Le coefficient de diffusion fera l'objet du chapitre suivant.

Nous avons tracé sur la figure V.1 l'évolution de la mobilité électronique avec la densité surfacique N_s dans la structure décrite dans la figure III 5.a. On note que la mobilité augmente quand la densité N_s croît. Deux phénomènes contribuent à faire varier la mobilité quand N_s change. D'une part, l'effet des largeurs effectives b_{mn} des sous-bandes telles que celles définies par (4.7): ces quantités interviennent dans le calcul des probabilités de collision $\lambda_2^{mn}(\epsilon_{||})$ ainsi que nous l'avons vu au IV.3; lorsque N_s augmente, les b_{mn} diminuent et les probabilités de collision augmentent, ce qui entraîne une augmentation du nombre de collisions donc une diminution de la mobilité électronique. D'autre part, il y a l'effet d'écran dû aux électrons, qui est d'autant plus actif que la concentration électronique est élevée. Il en résulte qu'une augmentation de N_s implique une diminution du nombre de collisions et partant une augmentation de la mobilité électronique. On note que dans tous les cas considérés jusqu'à présent, l'effet d'écran l'emporte sur l'effet des largeurs effectives, ce qui conduit à une augmentation de la mobilité électronique quand N_s croît. La figure V.1 montre par ailleurs que la variation de la mobilité électronique avec la densité surfacique N_s est plus faible à $T=300$ K qu'à $T=77$ K. Ceci s'explique par le fait que l'effet d'écran diminue quand la température s'élève (voir ANNEXE VI).

Sur la figure V.1, nous avons également reporté quelques résultats expérimentaux [69]. Les courbes expérimentales montrent une croissance plus rapide des mobilités avec la densité d'électrons. Cela est peut-être dû à l'effet d'écran sur la collision optique polaire, qui n'a pas été pris en compte dans ce travail.

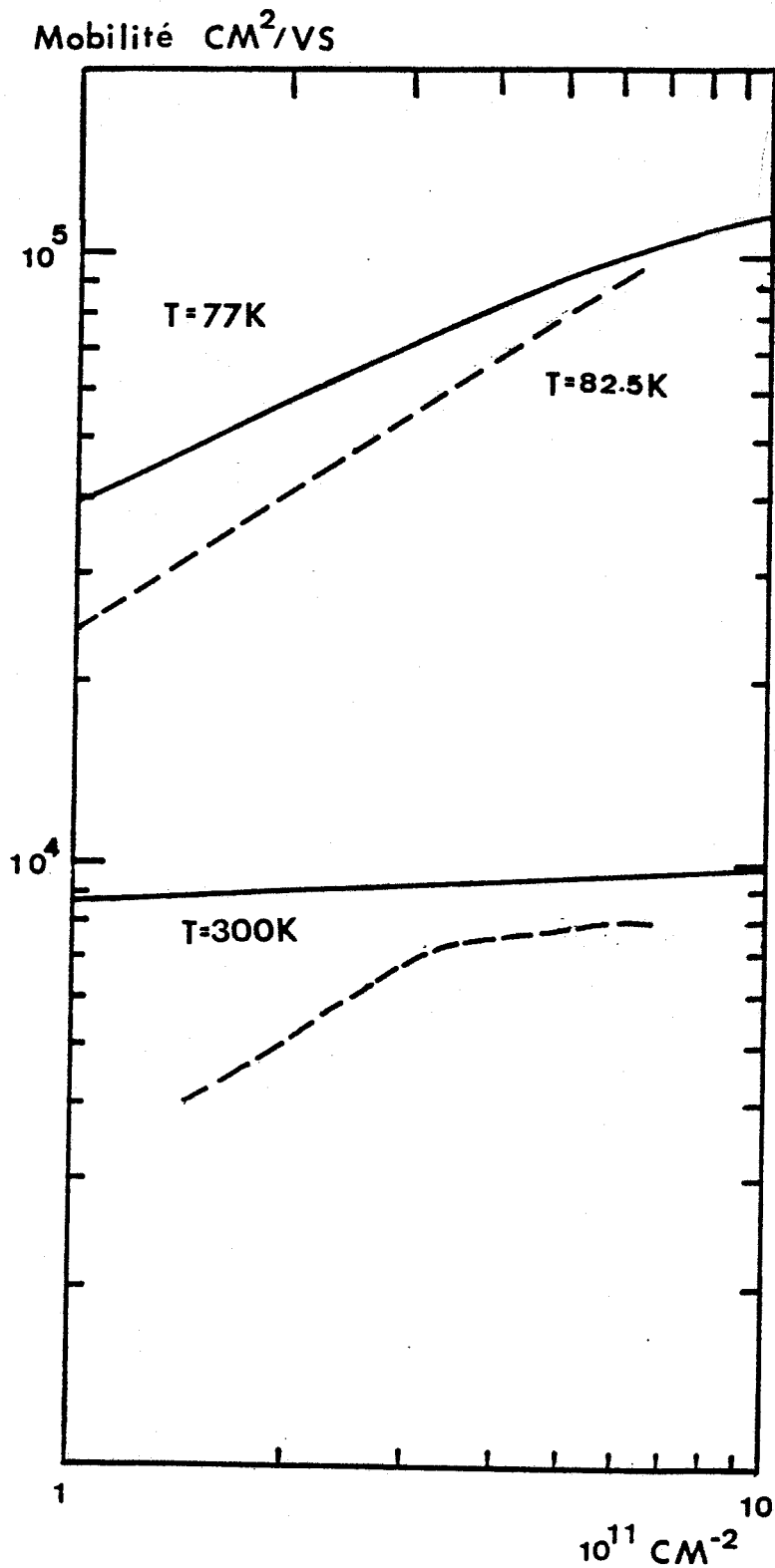


FIGURE V.1 Evolution des mobilités électroniques avec la densité d'électrons à deux dimensions.

- simulation. Structure définie dans la figure III.a; $S_p=50\text{\AA}$.
- - - expérimentale, $S_p=45\text{\AA}$, $N_d=5.4 \cdot 10^{17}\text{cm}^{-3}$, $X=0.3$. D'après [69].

Les figures V.2 et V.3 présentent l'évolution des vitesses de dérive électroniques (et des énergies moyennes des porteurs) en fonction du champ électrique accélérateur. On note que l'allure est celle habituelle connue pour l'AsGa en volume, toutefois les vitesses pic (de l'ordre de $2.8 \cdot 10^7$ et de $1.85 \cdot 10^7$ cm/s à $T=77$ K et 300 K) sont obtenues à des champs plus faibles (ici de l'ordre de 2100 et de 2200 V/cm à $T=77$ et 300 K) que ceux obtenus dans le cas à trois dimensions (de l'ordre de 4000 et 4300 V/cm à $T=77$ et 300 K). D'une part, ce phénomène peut être lié au fait que dans notre modèle la non-parabolicité de la bande de conduction n'a pas été prise en compte dans la vallée Γ à deux dimensions; d'autre part, ce phénomène peut se corrélérer à une diminution de la hauteur effective de la barrière séparant la vallée Γ des vallées satellites. Le passage des électrons en vallées satellites est d'autant plus aisé que cette hauteur de barrière est faible. En l'occurrence, cette barrière est abaissée d'une quantité égale à l'énergie de la sous-bande où se situe l'électron par rapport au fond de la vallée Γ comme il a été montré en figure III.a. Néanmoins la précision du calcul ne nous a pas permis jusqu'à présent de savoir si la position des sous-bandes (donc la valeur de N_g) a un effet sensible sur la vitesse pic et sur le champ de seuil. En réalité, cette partie de la courbe est de loin la plus difficile à déterminer avec précision. Au delà du champ de seuil, toutefois, l'allure des courbes restent très similaire à ce que l'on obtient dans le cas de l'AsGa peu dopé à trois dimensions.

Les résultats obtenus ici sont assez similaires à ceux obtenus par d'autres auteurs [16,19,62]. Une comparaison systématique de nos résultats avec ces derniers est cependant pratiquement impossible dans la mesure où les structures simulées sont différentes dans chaque cas et conduisent donc à des résultats différents. D'une façon générale, néanmoins, on trouve qu'une mobilité différentielle négative dans la courbe de vitesse de dérive en fonction du champ électrique se manifeste à des champs nettement moins élevés que dans le cas purement tridimensionnel [62]. Un aspect intéressant de la référence 66 est la prise en compte de la rétroaction du phénomène d'électrons chauds sur la structure des sous-bandes du système lui-même. En effet, du fait de la présence du champ électrique accélérateur, il y a modification de la population des sous-bandes, ce qui dans l'hypothèse d'une statistique de Fermi considérée comme encore valable dans ce cas, permet de spécifier la nouvelle position

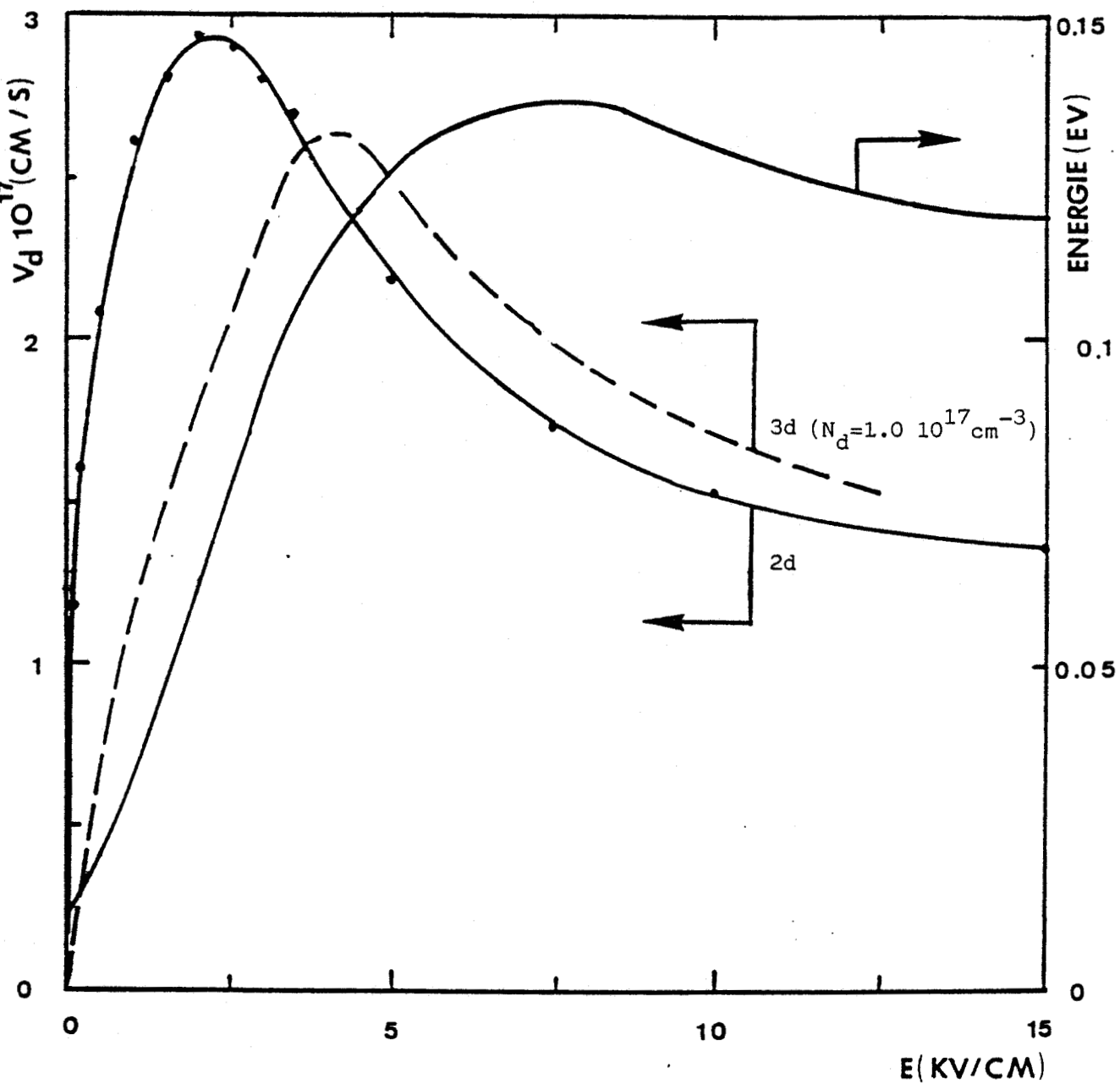


FIGURE V.2 Evolution de la vitesse de dérive et de l'énergie moyenne avec le champ électrique appliqué. Structure définie dans la figure III.a, avec $N_s = 1.0 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ et $T = 77\text{K}$.

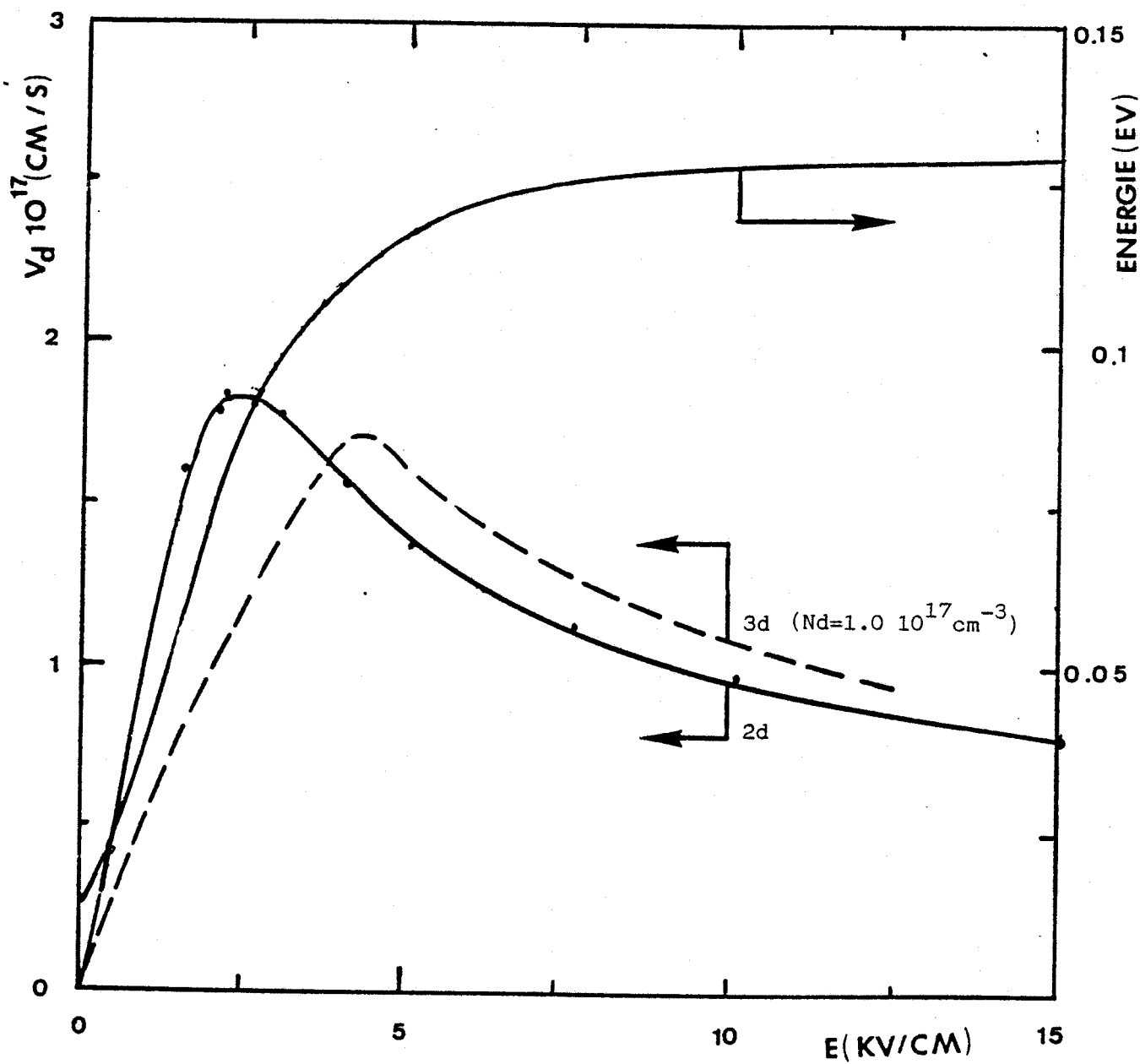


FIGURE V.3 Evolution de la vitesse de dérive et de l'énergie moyenne avec le champ électrique appliqué. Structure définie dans la figure III.a, avec $N_s = 1.0 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ et $T = 300\text{K}$.

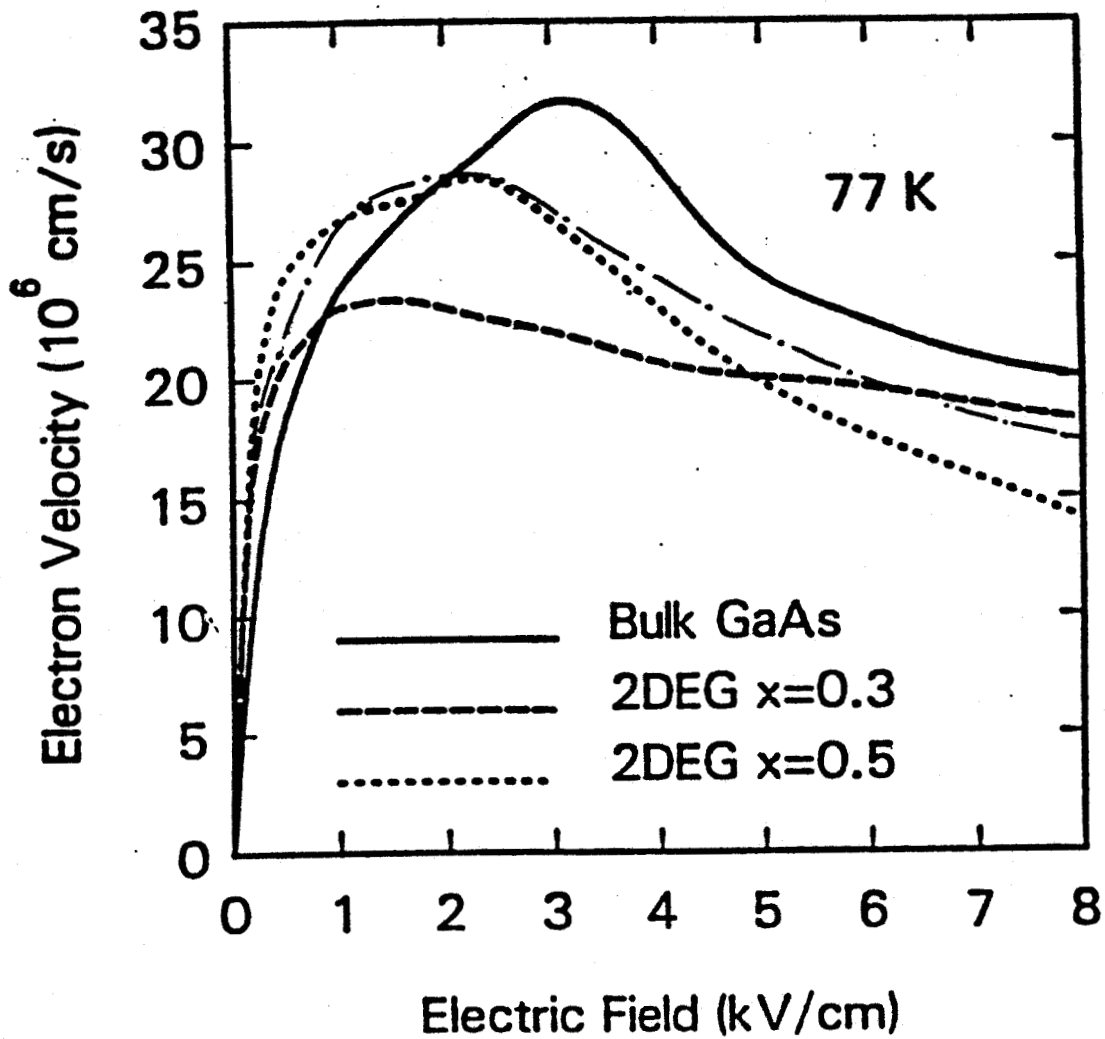


FIGURE V.4 Evolution de la vitesse mesurée en fonction du champ électrique. $N_d = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ dans l'AsGa en volume.
 - - - - - résultats du présent travail.
 Même cas que la figure V.2.

des sous-bandes par l'intermédiaire de la relation (3.12). La résolution de l'équation de Schrödinger tenant compte de ces nouveaux niveaux d'énergie propres permet d'obtenir la nouvelle allure des fonctions d'onde, de la charge électronique et par suite la nouvelle forme du puits de potentiel. L'ensemble des équations est résolu régulièrement au cours de la simulation. On note toutefois que les résultats acquis, bien que plus rigoureux en principe, sont assez peu différents de ceux obtenus en supposant une structure qui reste en permanence à l'équilibre [16].

Récemment W.T.Masselink et ses collaborateurs ont étudié expérimentalement la caractéristique vitesse-champ électrique [66]. La méthode qu'ils ont utilisée consiste à mesurer la conductivité entre les deux contacts ohmiques de l'échantillon placé dans un guide d'onde soumis à un signal hyperfréquence à 35 GHz en fonction de la puissance de celui-ci. Les données expérimentales ainsi obtenues sont ensuite converties par calcul en celles qui expriment l'évolution de la conductivité avec l'amplitude du champ électrique hyperfréquence. Connaissant le rapport de la conductivité mesurée sur celle relative au régime ohmique, on peut alors calculer la mobilité différentielle et partant la vitesse en fonction du champ électrique [68] .

Nous avons reporté sur les figures V.4 et V.5 leurs résultats obtenus à $T=77$ et $300K$. Nous y avons également représenté nos résultats de simulation. Les résultats expérimentaux confirment le fait théorique mentionné ci-dessus, à savoir qu'une mobilité différentielle négative se manifeste à des champs électriques nettement moins élevés dans le cas à deux dimensions que dans celui à trois dimensions. Il est cependant difficile de comparer directement les résultats expérimentaux avec ceux de la simulation dans la mesure où les structures simulées ne sont pas les mêmes que celles utilisées pour l'étude expérimentale; d'autre part, la précision des mesures expérimentales n'est pas indiquée dans la référence 66.

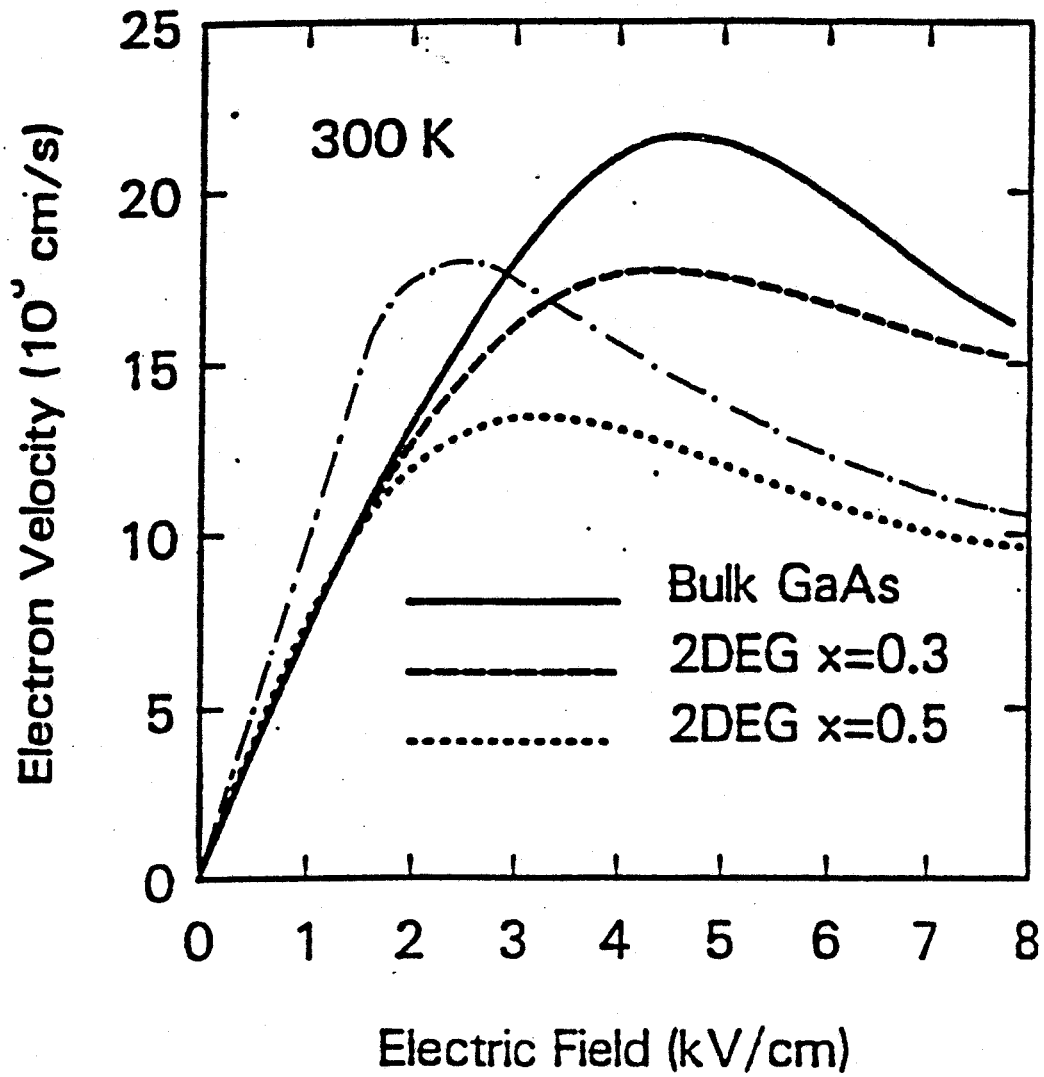


FIGURE V.5 Evolution de la vitesse mesurée en fonction du champ électrique. $N_d=10^{15}\text{cm}^{-3}$ dans l'AsGa en volume.
 - - - - - résultats du présent travail.
 Même cas que la figure V.3.

En relation directe avec la figure V.2, nous avons présenté sur la figure V.6 l'évolution des différentes populations des vallées en fonction du champ électrique. On note que dès que le champ augmente, la sous-bande fondamentale (0) commence à se vider dans la sous-bande (1) puis la sous-bande (2). Aux alentours du champ de seuil, vers 2000 V/cm, la population de ces deux dernières a considérablement augmenté alors que les vallées satellites restent encore relativement peu peuplées. Ces dernières commencent à se peupler au delà de 4000 V/cm; dans le même temps, les trois sous-bandes voient leurs populations diminuer régulièrement. On note toutefois que celles-ci restent relativement élevées même en champ fort. Il existe donc un transfert des vallées satellites vers les vallées à deux dimensions. On note également que le transfert des vallées satellites vers la vallée à trois dimensions reste tout à fait négligeable.

La figure V.7, qui est également en rapport direct avec la figure V.2, montre l'évolution spatiale, avec z , de la densité des électrons à deux dimensions dans le système. On note que l'étalement de la charge d'espace n'est pas fortement modifié par les conditions de champ électrique; seule l'aire sous la courbe (voir figure V.6) diminue quand le champ augmente. Ceci est dû à la rigidité des fonctions d'onde du puits qui, dans le présent modèle, restent celles de l'équilibre (champ faible), même en champ fort, la rétroaction des électrons chauds sur la structure des sous-bandes n'étant pas prise en compte. Un modèle plus rigoureux, recalculant les fonctions d'onde d'après la température effective des électrons dans la structure toute entière, montrerait également un étalement de la charge d'espace à deux dimensions vers le substrat, éventuellement jusqu'à disparition du puits et du caractère bidimensionnel des électrons.

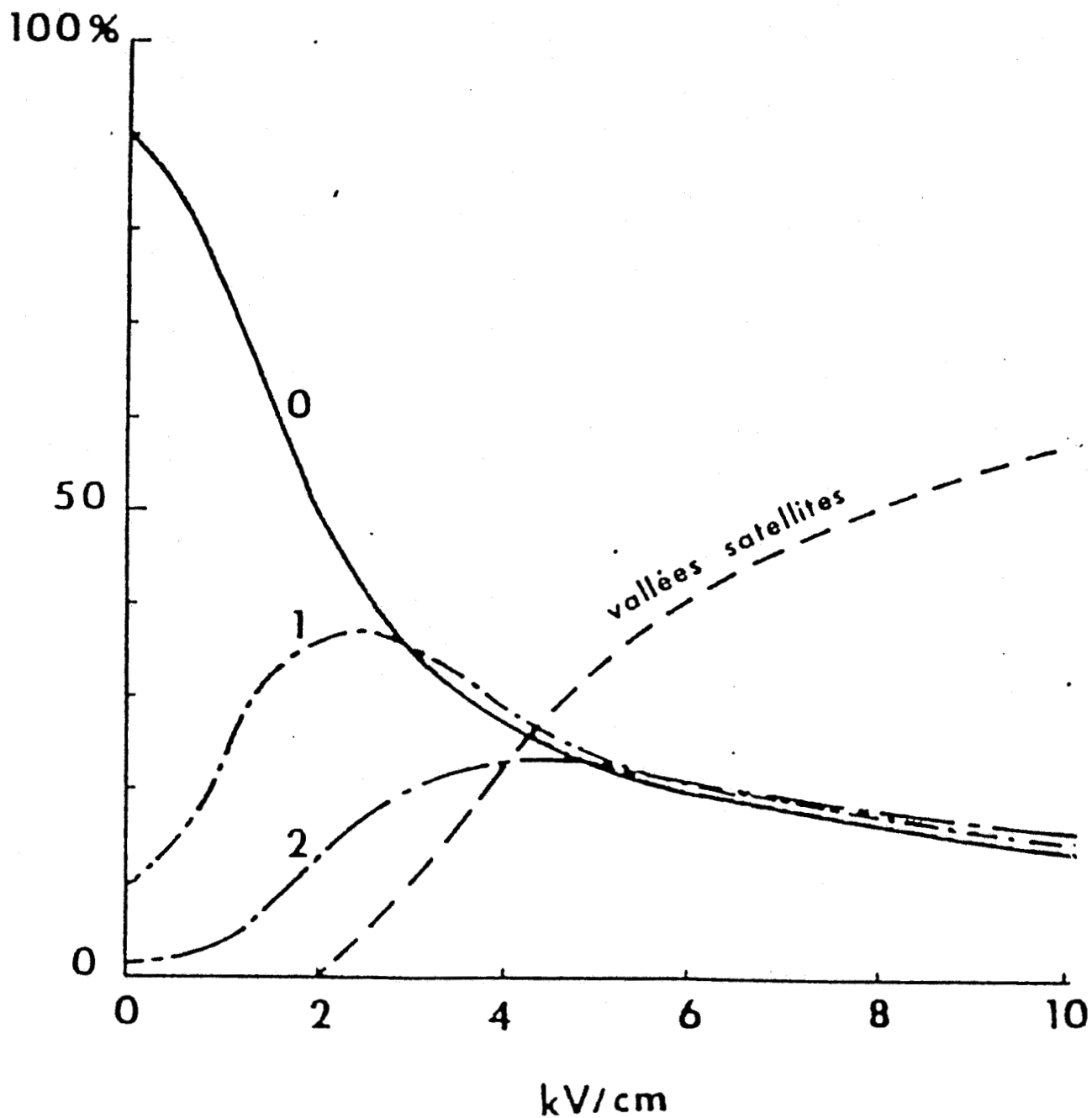


FIGURE V.6 Evolution des populations électroniques en pour-cent dans les trois premières sous-bandes et dans les vallées satellites avec le champ électrique. Cas de la figure V.2.

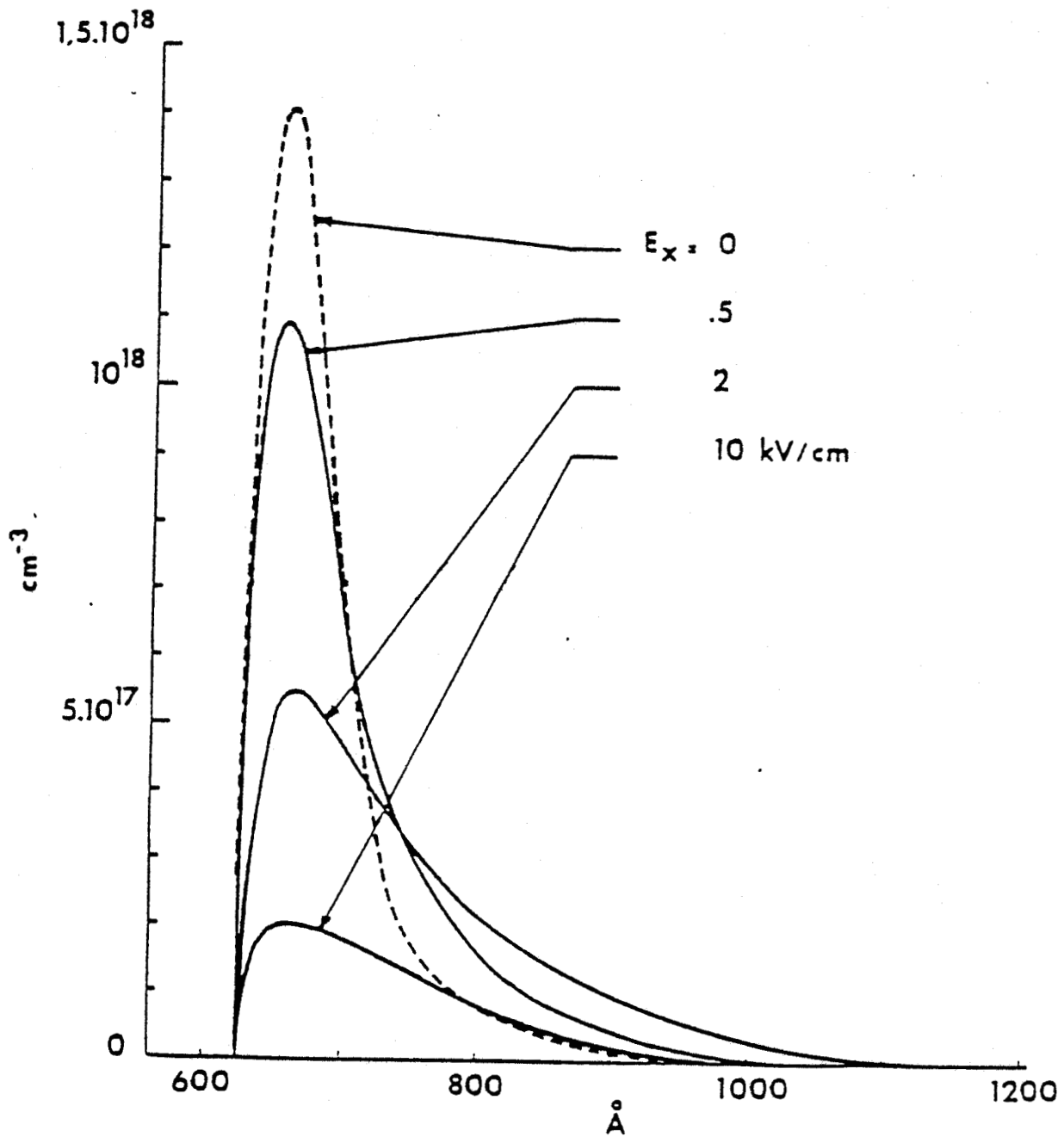


FIGURE V.7 Evolution spatiale des densités d'électrons à $E=0, 0.5, 2$ et 10 V/cm. Même cas que la figure V.4.

CHAPITRE VI

CONTRIBUTION A L'ETUDE DE LA DIFFUSION
DANS L'HETEROJONCTION GaAs/GaAlAs EN REGIME STATIONNAIRE

VI.1. INTRODUCTION

Dans ce chapitre, nous abordons le phénomène de diffusion. Ce phénomène qui est la source du bruit de diffusion dans les composants trouve son importance dans le fait qu'il est le phénomène le plus fondamental qui limite leur fonctionnement. En effet, aux fréquences supérieures à 10 GHz, par exemple, les bruits de grenaille ou de génération-recombinaison sont totalement éliminés, et reste seulement le plus souvent le bruit de diffusion qui existe toujours du fait que le composant et les porteurs sont toujours à une température non nulle. Ce bruit de diffusion est dû aux fluctuations microscopiques de la vitesse des porteurs à l'intérieur du système. Il se caractérise en termes de coefficients de diffusion. Nous calculons le coefficient de diffusion par les mêmes moyens que ceux utilisés en général pour le système à trois dimensions. Nous renvoyons le lecteur aux références 29 et 30 pour une étude approfondie du phénomène en question. Nous nous contenterons de rappeler les relations fondamentales dans la suite de cette présentation.

VI.2. RAPPELS DES DEFINITIONS

De façon conventionnelle, il existe deux définitions possibles du coefficient de diffusion qui traduisent deux aspects de la diffusion. En effet, la diffusion qui est liée au phénomène de dérive de chaque porteur par rapport à un comportement moyen peut se traduire soit par la rapidité d'étalement d'un paquet de porteurs en excès, soit par le désordre lié aux fluctuations de la vitesse des porteurs.

VI.2.1. Coefficient de diffusion par étalement d'un paquet

Lorsqu'un paquet d'électrons est injecté dans un semi-conducteur, il s'étale au cours du temps du fait des fluctuations aléatoires de la vitesse des porteurs provoquées par les collisions. Si le semi-conducteur est soumis à un champ électrique, le paquet se déplace dans l'ensemble suivant

la direction du champ. Cette dispersion spatiale des porteurs d'un paquet entraîné ou non par un champ électrique peut s'évaluer par la variance des distances parcourues par les porteurs à partir d'un instant de référence t_0 . Il est alors équivalent d'assigner à tous ces porteurs indépendants les uns des autres la même référence de position à l'instant t_0 , c'est-à-dire de considérer un paquet de porteurs de variance nulle dit "Dirac de porteurs" et d'étudier l'étalement de ce paquet au cours du temps. Les coefficients de diffusion longitudinal et transversal $D_{||}(E)$ et $D_{\perp}(E)$ qui mesurent la rapidité moyenne d'étalement du paquet au cours du temps sont alors définis par :

$$D_{||}(E) = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\text{Var } x(t)}{2t} \quad (6.1.a)$$

et

$$D_{\perp}(E) = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\text{Var } y(t)}{2t} \quad (6.1.b)$$

où $\text{Var } x(t)$ et $\text{Var } y(t)$ sont les variances des distances parcourues dans les directions parallèle et perpendiculaire au champ électrique appliqué à partir d'un instant t_0 pour lequel le régime stationnaire est atteint. La position des porteurs $x(t)$ et $y(t)$ sont calculées en cours de simulation, les variances correspondantes peuvent être alors déterminées par :

$$\text{Var } x(t) = \overline{[x(t) - \overline{x(t)}]^2} \quad (6.2.a)$$

et

$$\text{Var } y(t) = \overline{[y(t) - \overline{y(t)}]^2}$$

où les moyennes représentées par une barre sont effectuées à chaque instant sur l'ensemble des électrons simulés (500 dans la pratique).

La méthode de Monté-Carlo ne pouvant faire intervenir qu'un nombre restreint de processus élémentaires, le temps d'observation t ne pourra pas tendre vers l'infini, et les coefficients de diffusion seront alors donnés d'après par les expressions approchées :

$$D_{||}(E) = \frac{\text{Var } x(t)}{2t} \quad (6.3.a)$$

et

$$D_{\perp}(E) = \frac{\text{Var } y(t)}{2t} \quad (6.3.b)$$

où le temps d'observation t doit être suffisamment long tel que les variances n'évoluent plus que linéairement en fonction du temps.

VI.2.2. Coefficient de diffusion bruit

Un autre aspect de la diffusion se traduit par le bruit lié aux fluctuations des vitesses des porteurs. Ce bruit de diffusion est caractérisé par sa densité spectrale puissance $S(\omega)$ qui est, d'après le Théorème de Wiener-Kinchine, la transformée de Fourier de la fonction de corrélation des fluctuations de vitesse $S(\theta)$:

$$S(\omega) = 2 \int_{-\infty}^{+\infty} S(\theta) e^{-i\omega\theta} d\theta \quad (6.4)$$

avec

$$S(\theta) = \langle (V(t) - V_d)(V(t+\theta) - V_d) \rangle_t \quad (6.5)$$

Dans ces expressions, V_d est la vitesse de dérive stationnaire et le symbole $\langle \rangle_t$ indique la prise d'une moyenne sur le temps.

Le coefficient de diffusion "dynamique" défini par $D(\omega) = S(\omega)/4$ peut s'écrire compte tenu de la parité de la fonction de corrélation :

$$D(\omega) = \int_0^{\infty} S(\theta) \cos(\omega\theta) d\theta \quad (6.6)$$

Le coefficient de diffusion statique est alors donné par :

$$D(0) = \lim_{\omega \rightarrow 0} D(\omega) = \int_0^{+\infty} S(\theta) d\theta \quad (6.7)$$

Si l'on définit un temps de corrélation τ par :

$$\tau = \int_0^{+\infty} \frac{S(\theta)}{S(0)} d\theta \quad (6.8)$$

les coefficients de diffusion seront donnés par les expressions suivantes :

$$D_{||}(E) = \text{Var } V_x(E) \cdot \tau_{||}(E) \quad (6.9.a)$$

et

$$D_{\perp}(E) = \text{Var } V_y(E) \cdot \tau_{\perp}(E) \quad (6.9.b)$$

Nous venons de rappeler les deux définitions possibles du coefficient de diffusion qui traduisent deux aspects différents du phénomène de diffusion. Ces deux définitions (6.1) et (6.9) reposent en fait sur l'analyse de deux conséquences d'un même phénomène physique qui est celui de la fluctuation stochastique de la ou des vitesses d'un ou plusieurs porteurs soumis aux collisions aléatoires avec le milieu dans lequel ils évoluent. L'équivalence numérique et formelle des deux définitions du coefficient de diffusion, ainsi que les conditions requises pour qu'elle se réalise ont été montrés en détail par plusieurs auteurs [29], [30].

Nous rappelons qu'il y a égalité du coefficient de diffusion de bruit en basse fréquence avec le coefficient de diffusion d'étalement de paquet aux temps très longs.

Après ce bref rappel des définitions fondamentales, nous allons maintenant présenter les résultats de la simulation par la méthode de Monté-Carlo, dont nous essayerons de donner des interprétations physiques.

VI.3. RESULTATS ET INTERPRETATIONS

VI.3.1. Fonctions de corrélation

La quantité mathématique qui décrit l'origine commune de la diffusion (étalement d'un paquet de porteurs) et du bruit de diffusion est la fonction de corrélation des fluctuations de vitesse. La connaissance de cette fonction permet de déterminer d'une part le coefficient de diffusion (6.6) et d'autre part la densité spectrale de bruit (6.4). En outre, l'étude de la fonction de corrélation peut nous aider à mieux comprendre les mécanismes de collision intervenant dans l'évolution des porteurs. C'est pourquoi nous avons choisi de présenter en premier lieu les résultats relatifs à la fonction de corrélation.

Nous nous limitons dans un premier temps au domaine du champ électrique faible et moyen où ni le transfert spatial ni le transfert intervallé n'intervient, c'est-à-dire où le gaz électronique est purement bidimensionnel.

Nous avons présenté sur les Figures VI.1 et VI.2 les résultats de la simulation obtenus avec $N_s = 1.1 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, à $T = 77 \text{ K}$ et à $E = 200$ et 600 V/cm . L'aspect le plus intéressant qui ressort sur ces courbes est le suivant. Tandis que les fonctions de corrélation transverses décroissent quasi exponentiellement avec le temps, les fonctions de corrélation longitudinales manifestent de fortes oscillations dont les amplitudes diminuent dans le temps et dont la pseudo-période est inversement proportionnelle au champ électrique appliqué.

Ces oscillations se trouvent amorties lorsque la concentration électronique N_s diminue, comme le montre la Figure VI.3 où sont présentées les fonctions de corrélation obtenues avec $N_s = 0.9 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$. En outre, nous avons constaté que l'aspect oscillatoire tend à disparaître pour des valeurs du champ électrique très faibles ou supérieures à 1000 V/cm .

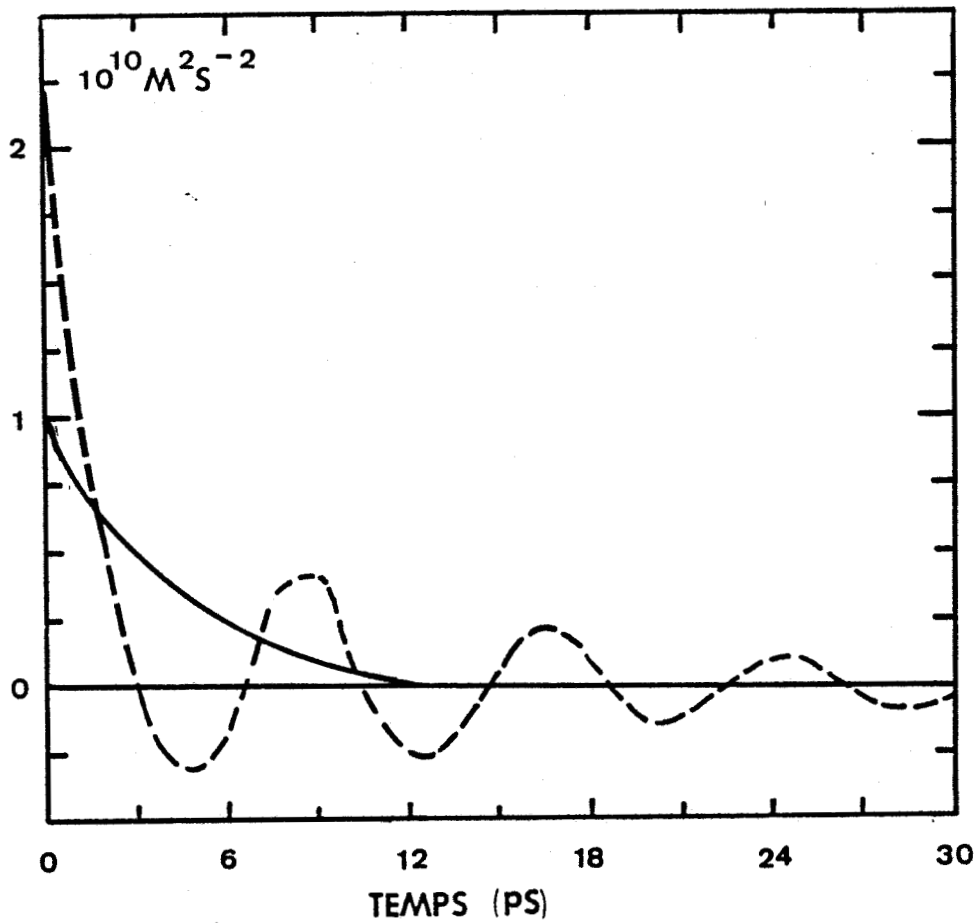


FIGURE VI.1 Fonctions de corrélation des vitesses longitudinale (trait interrompu) et transverse (trait plein), avec $T=77K$, $N_s=1.0 \cdot 10^{12} \text{cm}^{-2}$ et à $E=200 \text{ V/cm}$.

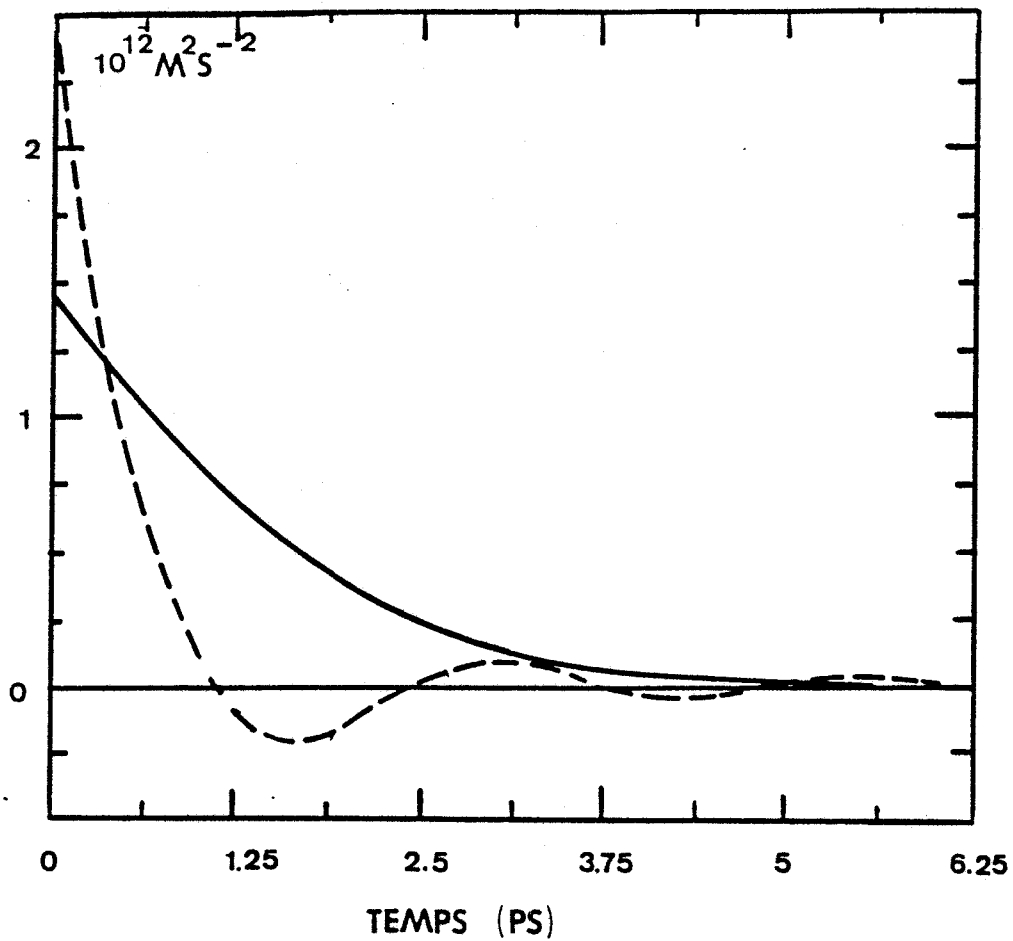


FIGURE VI.2 Môme structure que la figure VI.1, avec $N_s=1.010^{12} \text{ cm}^{-2}$ $T=77\text{K}$ et à $E=600\text{V/cm}$. Fonctions de corrélation des vitesses longitudinale (trait interrompu) et transverse (trait plein).

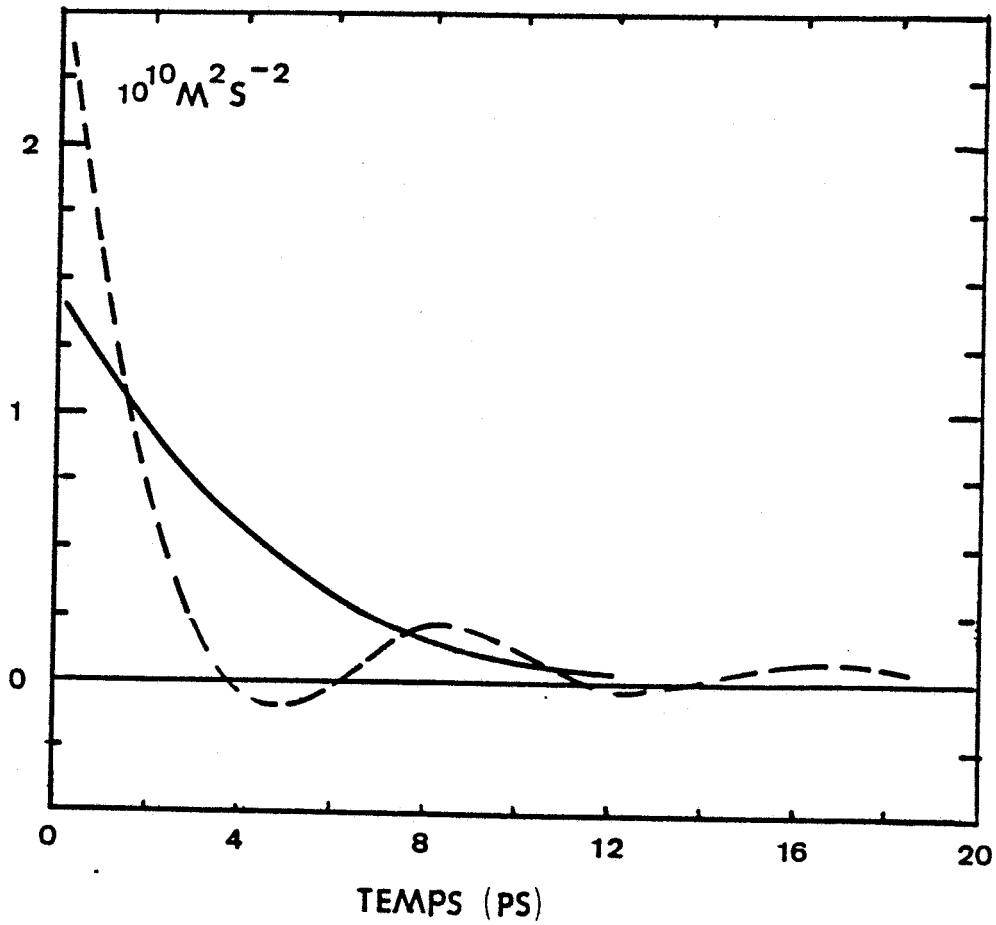


FIGURE VI.3 Môme structure que la figure VI.1, avec $N_s=0.9 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, $T=77\text{K}$ et à $E=200\text{V/cm}$. Fonctions de corrélation des vitesses longitudinale (trait interrompu) et transverse (trait plein).

Le fait que la fonction de corrélation des vitesses puisse avoir un comportement oscillatoire a été anticipé par Brunetti et al. et par Ferry et al., en s'appuyant sur le modèle mathématique de Shockley [65]. Pour comprendre les faits mentionnés ci-dessus, qui relèvent du modèle étudié ici, essayons de suivre l'évolution d'un électron au cours du temps sous l'effet combiné du champ électrique et des collisions mises en jeu dans notre modèle. Nous savons que parmi celles-ci, les collisions accompagnées de l'émission de phonons optiques polaires sont de loin prédominantes, dès que l'énergie de l'électron est supérieure à celle du phonon $\hbar\omega_0$ (voir Chapitre IV). Si l'interaction optique polaire agissait seule, un électron serait accéléré par le champ électrique jusqu'à ce que son énergie atteigne la valeur $\hbar\omega_0$ pour émettre probablement un phonon, et retomberait après la collision au fond de la sous-bande qu'il occupe pour être accéléré de nouveau. La Figure 6.4 illustre schématiquement ce qui vient d'être dit. Le temps nécessaire à ce processus est donné par :

$$T_c = 1/qE (2m^* \hbar\omega_0)^{1/2} \quad (6.10)$$

Dans ce cas, la fonction de corrélation longitudinale manifeste des oscillations dont la pseudo-période est égale à T_c et dont les amplitudes diminuent très lentement. Mais, à l'interaction optique polaire viennent s'ajouter les autres types d'interactions qui perturbent également le mouvement de l'électron. Parmi ceux-ci, l'interaction piézoélectrique est presque négligeable ; l'interaction avec les impuretés ionisées est assez faible en raison de l'éloignement spatial des ions et de l'existence de l'espaceur ; mais l'interaction acoustique peut jouer un rôle relativement important. Cette interaction caractérisée par son isotropie et son élasticité et dont la probabilité de collision est quasi indépendante de l'énergie de l'électron a pour effet de "randomiser" la vitesse de l'électron durant les périodes d'accélération. Il en résulte qu'en présence de ces collisions extra-optiques-polaires, les oscillations se trouvent amorties, mais subsistent. C'est ce que nous avons observé en pratique dans la simulation. Revenons en maintenant à la formule (6.10).

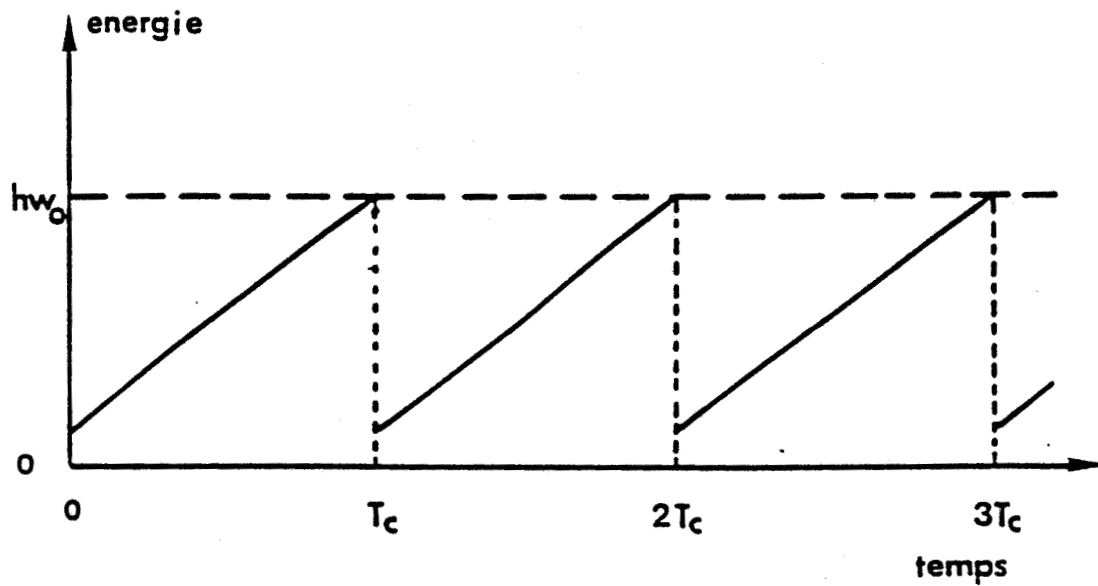


FIGURE VI.4 Représentation schématique de l'évolution de l'énergie d'un électron sous l'effet combiné du champ électrique accélérateur et de la collision par émission de phonons optiques polaires.

Les valeurs qu'elle fournit s'accordent assez bien avec les pseudo-périodes données par la simulation. Par exemple, dans les mêmes conditions que celles indiquées sur la Figure 6.1, à $E = 100, 200, 400$ et 600 V/cm, les valeurs de T_c données par la formule (6.10) sont 16.4, 8.2, 4.1 et 2.7 ps, les pseudo-périodes calculées par la simulation sont respectivement 15.8, 8.0, 3.6 et 2.2 ps.

Quant aux amplitudes, elles sont plus faibles quand le champ électrique est plus élevé. C'est parce que l'augmentation du champ accroît le nombre de collisions.

La diminution des amplitudes avec N_s trouve son explication dans le fait suivant. L'écart énergétique entre les deux premières sous-bandes est égal à 16 meV à $N_s = 0.9 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, mais à 37 meV à $N_s = 1.1 \cdot 10^{12} \text{ cm}^{-2}$, ce qui a pour conséquence que dans le cas où N_s est plus faible, sont beaucoup plus nombreuses les collisions intersous-bandes (voir Chapitre IV), qui, en transformant l'énergie cinétique dans le plan oxy en énergie suivant le degré de liberté oz ou inversement, augmentent les fluctuations de la vitesse.

Le comportement oscillatoire de la fonction de corrélation est-il propre au système bidimensionnel ? Cette question nous a amené à calculer, par la méthode de Monté-Carlo, la fonction de corrélation dans l'AsGa en volume à $T = 77$ K pour des valeurs du champ électrique inférieures à 1000 V/cm. Les résultats de la simulation ont révélé que dans ce cas, le phénomène oscillatoire n'existe pas (Fig.VI.5). Ceci résulte du fait que pour les collisions sur phonons acoustiques, leur probabilité de collision augmente avec l'énergie de l'électron dans un système à trois dimensions, au lieu d'être une constante comme c'est le cas dans un système à deux dimensions.

Nous avons étudié également la fonction de corrélation en température élevée. La Figure VI.6 montre les fonctions de corrélation à $T = 300$ K. Comme l'on peut le constater sur ces courbes, l'aspect oscillatoire observé en température basse n'existe pas dans ce cas. Cette différence dans le comportement des fonctions de corrélation à des températures différentes découle du fait que les probabilités de collision augmentent avec la température.

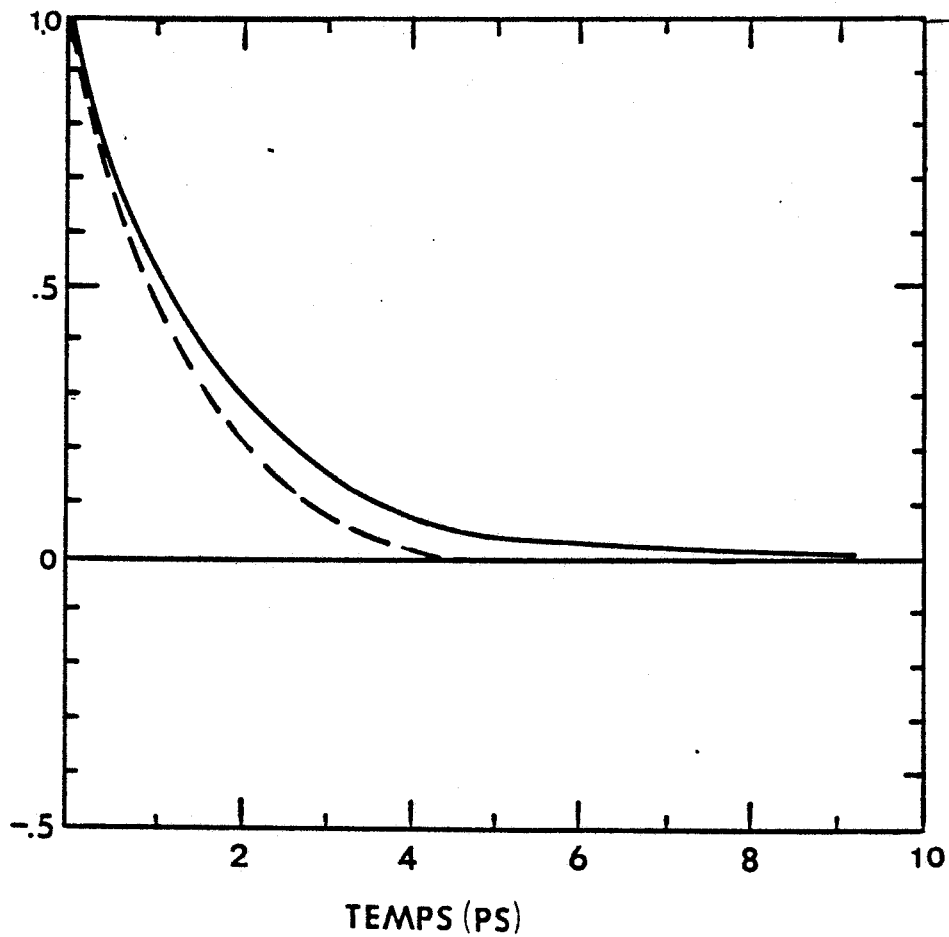


FIGURE VI.5 Fonctions de corrélations des vitesses longitudinale (trait interrompu) et transverse (trait plein) pour l'AsGa intrinsèque en volume à $T=300K$ et à $E=200V/cm$.

TEMPS (PS)

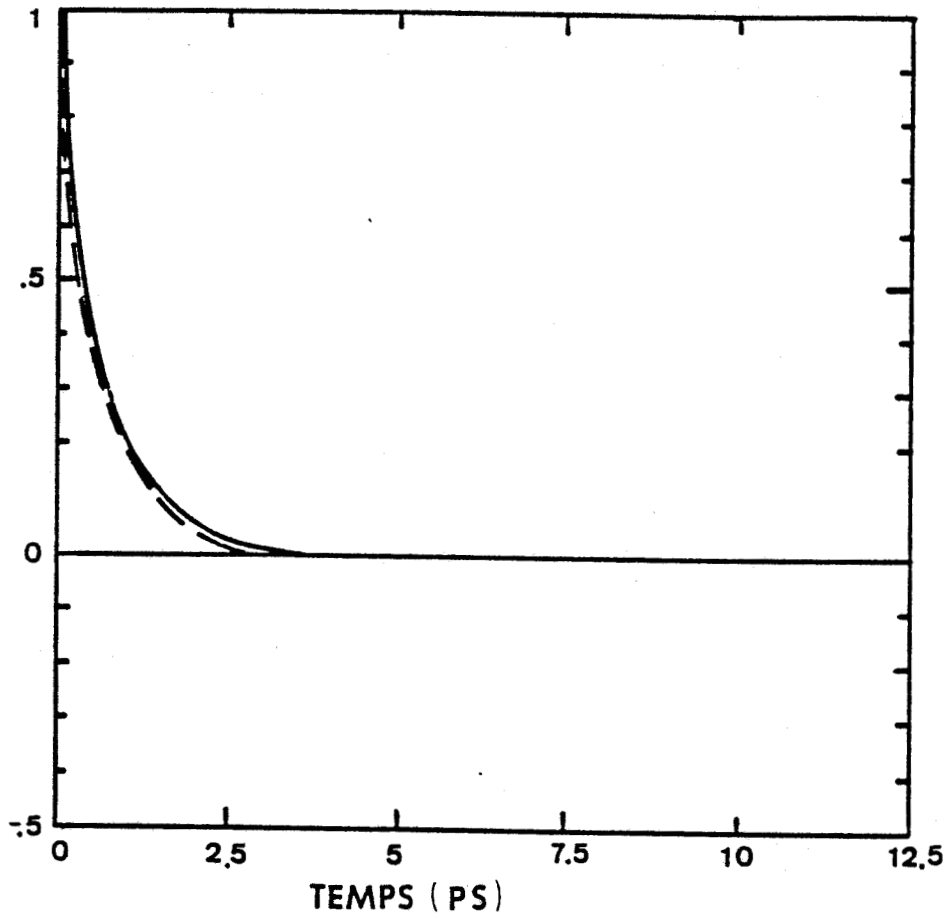


FIGURE VI.6 Môme structure que la figure VI.1, avec $T=300K$ et $E=200V/cm$. Fonctions de corrélation longitudinale (trait interrompu) et transverse (trait plein).

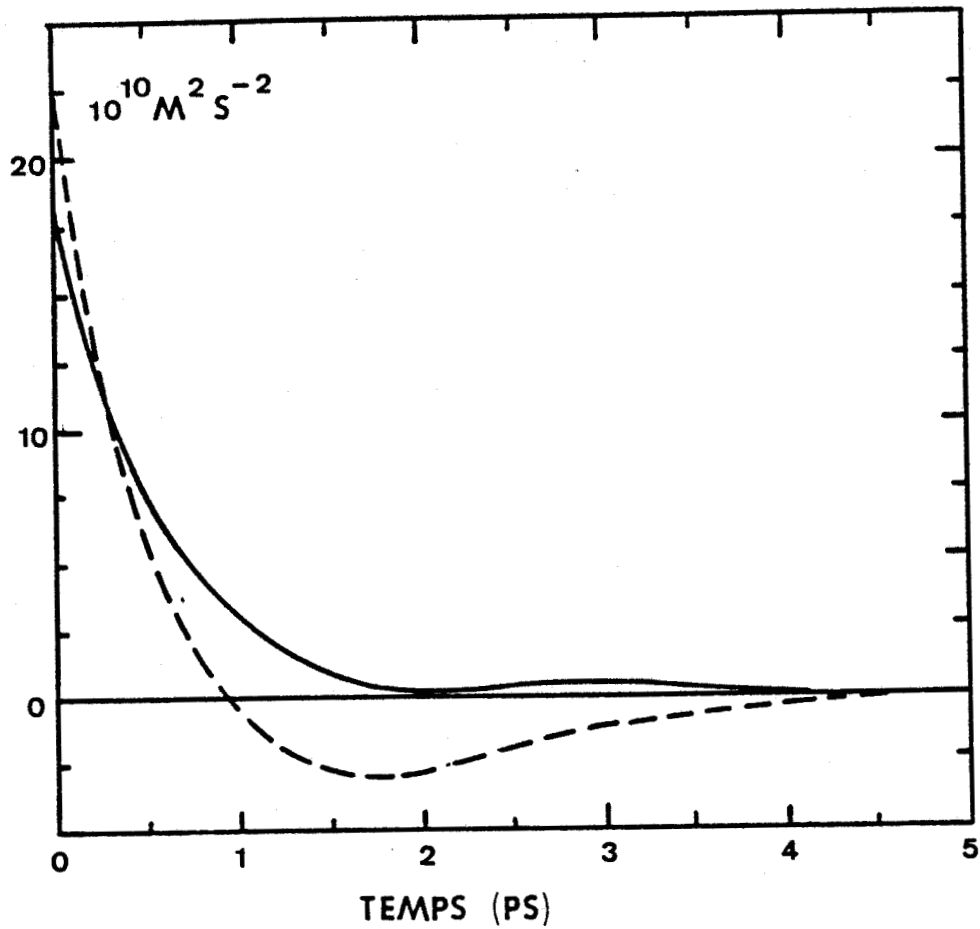


FIGURE VI.7 Môme structure que la figure VI.1, avec $N_s=1.0^{12}cm^{-2}$, $T=77K$ et à $E=3000V/cm$. Fonctions de corrélation des vitesses longitudinale (trait interrompu) et transverse (trait plein).

En champ fort, les fonctions de corrélation ont la même allure que celles habituellement connues dans l'AsGa en volume comme le montre la Figure VI.7 où nous avons présenté les fonctions de corrélation à $E = 3000 \text{ V/cm}$. Ce résultat paraît naturel dans la mesure où en champ fort, une fraction importante d'électrons se trouvent en vallées satellite à trois dimensions. L'existence de la partie négative présentée par la fonction de corrélation longitudinale est due au transfert intervallée.

VI.3.2. Densités spectrales de bruit

Le comportement oscillatoire de la fonction de corrélation en champ faible et en température assez basse se traduit au niveau de la densité spectrale de bruit par l'existence d'une fréquence de résonance $1/T_c$ proportionnelle au champ électrique. Ceci apparaît clairement sur les Figures VI.8 et VI.9 où sont présentées les densités spectrales de bruit en relation directe avec les Figures VI.1 et VI.2. La fréquence de résonance est de l'ordre de 120 GHz à $E = 200 \text{ V/cm}$. D'une façon générale, lorsque la fréquence augmente, la puissance de bruit dans la direction du champ électrique décroît dans un premier temps, puis augmente plus ou moins brutalement à la fréquence de résonance, et enfin décroît à nouveau jusqu'à zéro. Quant à la puissance de bruit dans la direction perpendiculaire au champ, elle décroît monotonement quand la fréquence augmente.

Dans la mesure où le comportement oscillatoire de la fonction ^{de} corrélation en champ faible et en température suffisamment basse est propre au système bidimensionnel (tel qu'il est représenté par notre modèle) comme nous l'avons vu précédemment, une étude expérimentale du coefficient de diffusion présente sans doute un grand intérêt. Le cadre restreint du présent travail ne nous a pas permis d'entreprendre une telle étude.

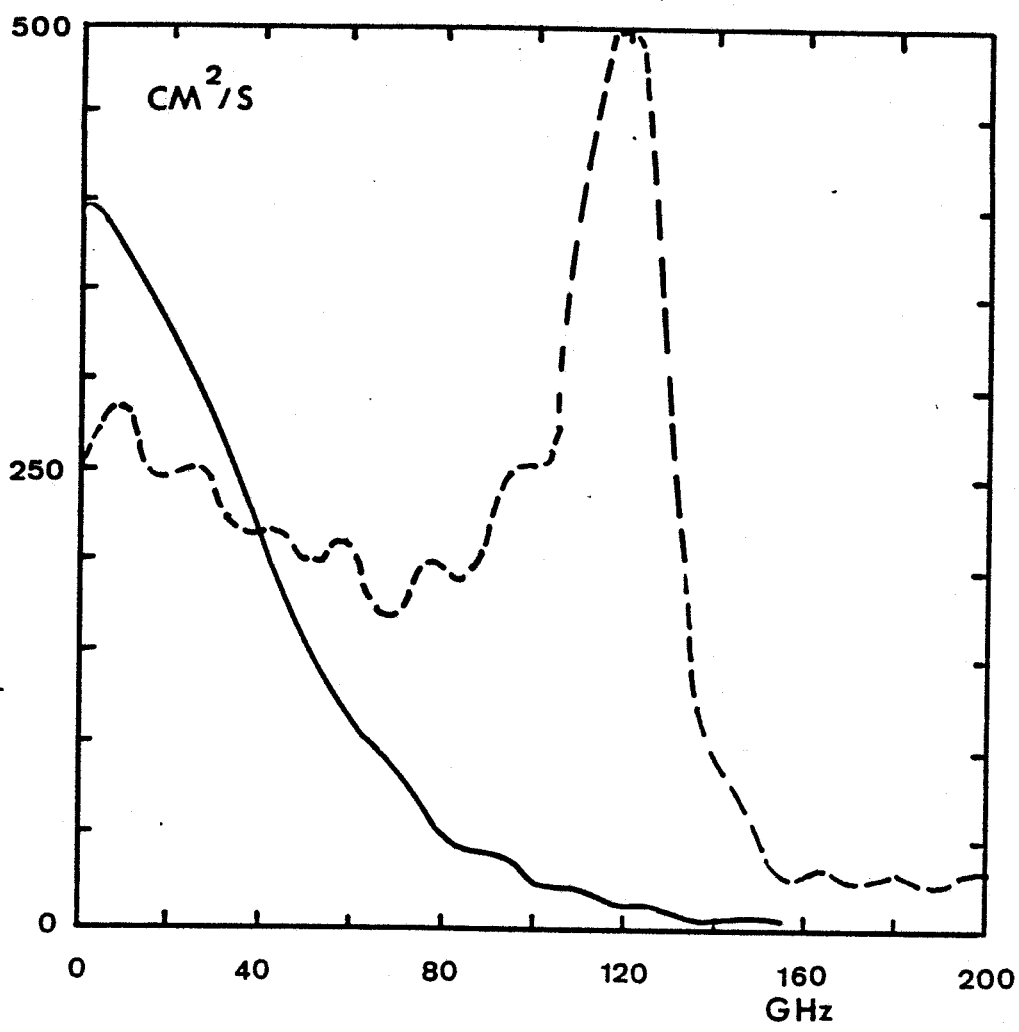


FIGURE VI.8 Mêmes conditions que la figure VI.1.
Densités spectrales de bruit
longitudinale (trait interrompu)
et transverse (trait plein).

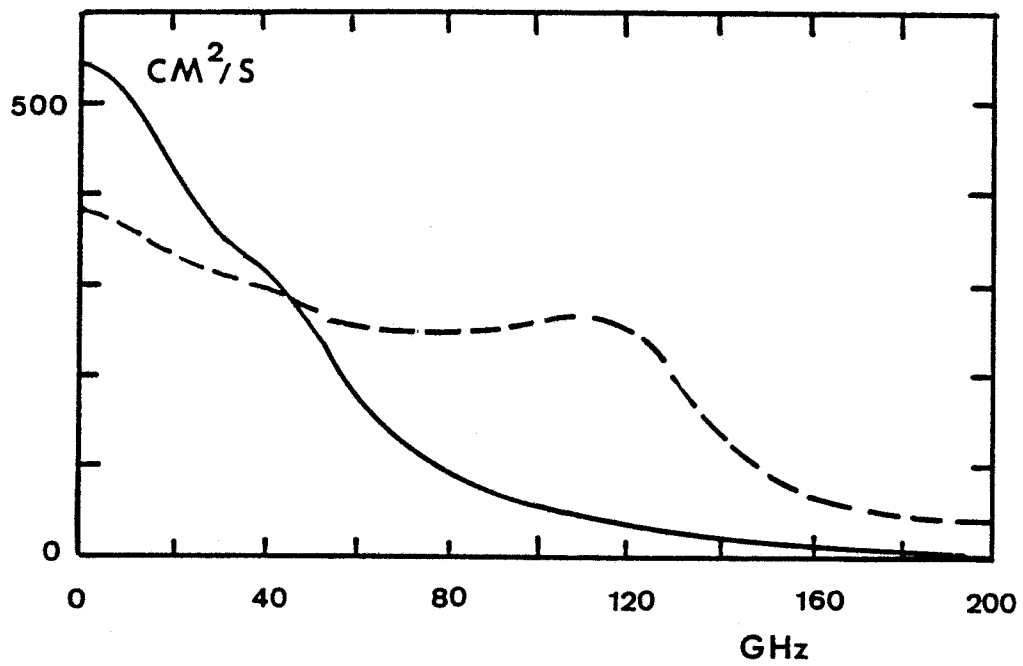


FIGURE VI.9 Mêmes conditions que la figure VI.2.
 Densités spectrales de bruit
 longitudinale (trait interrompu)
 et tranverse (trait plein).

VI.3.3 Coefficient de diffusion

Nous avons représenté sur les figures VI.10 et VI.11 l'évolution temporelle des variances de déplacement des électrons selon x et y pour deux valeurs au champ électrique. On note que la linéarité est assez bien obtenue dans le domaine temporel considéré. On remarque aussi que la variance de déplacement est plus faible dans la direction du champ que dans celle perpendiculaire du champ. Il en résultera que le coefficient de diffusion longitudinal sera plus petit que le coefficient de diffusion transverse. Ceci est conforme à ce qui est habituellement connu dans l'AsGa en volume [30] .

Concernant la détermination des coefficients de diffusion par le bruit, nous avons utilisé les relations (6.9a) et (6.9b); les variances de vitesse et les temps de corrélation sont obtenus directement par le calcul de la fonction de corrélation.

Les figures VI.12 et VI.13 montrent respectivement les évolutions des variances de vitesse et des temps de corrélation en fonction du champ électrique. On peut remarquer que comme dans le cas à trois dimensions, les variances longitudinale et transverse restent très voisines, alors que les temps de corrélation sont très différents ($\tau_{\perp} > \tau_{\parallel}$). Il en résultera que l'on aura toujours ($D_{\perp} > D_{\parallel}$), et c'est bien ce que l'on constate sur la figure VI.14 où nous avons reporté les variations des coefficients de diffusion D_{\perp} et D_{\parallel} en fonction du champ électrique. On y remarquera le bon accord entre les résultats acquis par les deux méthodes:

-par l'observation de l'étalement d'un paquet d'électrons et l'utilisation des relations (6.3 a), (6.3 b).

-par le calcul de la fonction de corrélation des variances de vitesse

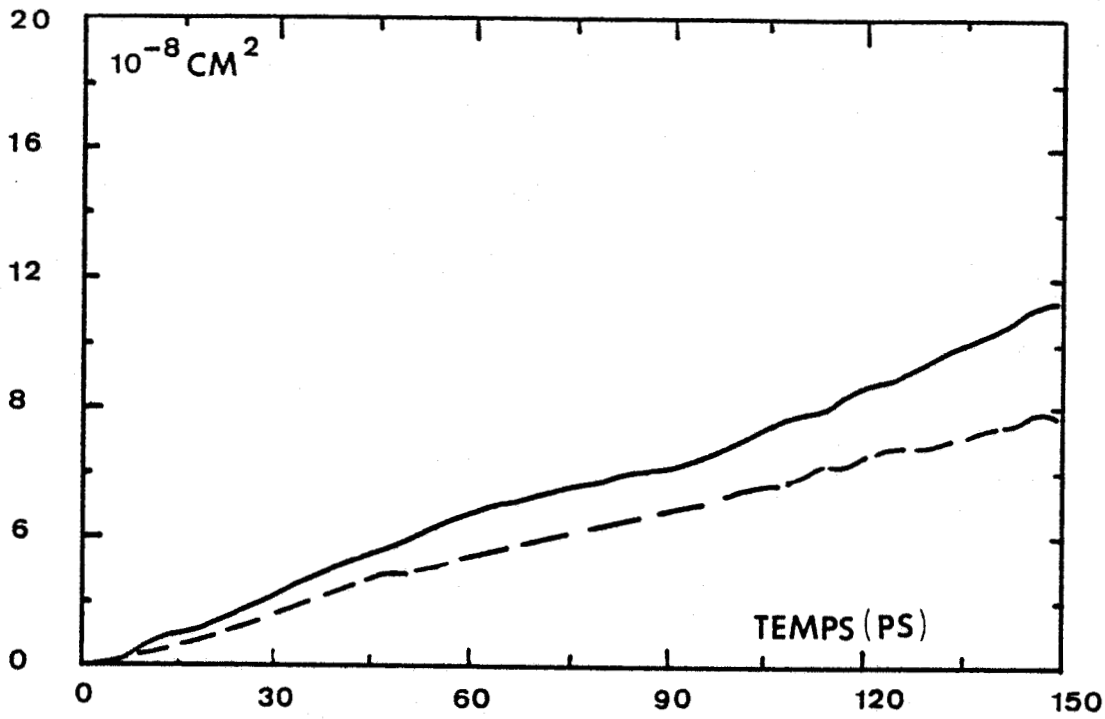


FIGURE VI.10 Evolution des variances de déplacements longitudinal (trait interrompu) et transverse (trait plein). Cas de la figure VI.1

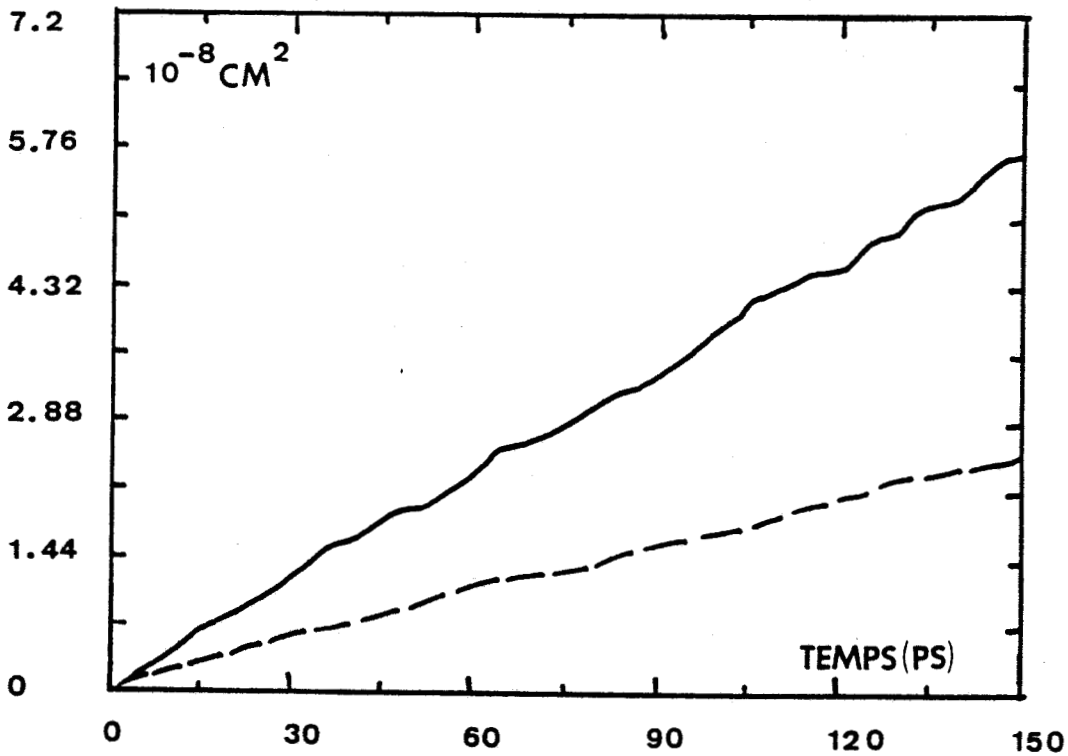


FIGURE VI.11 Evolution des variances de déplacements longitudinal (trait interrompu) et transverse (trait plein). Cas de la figure VI.2.

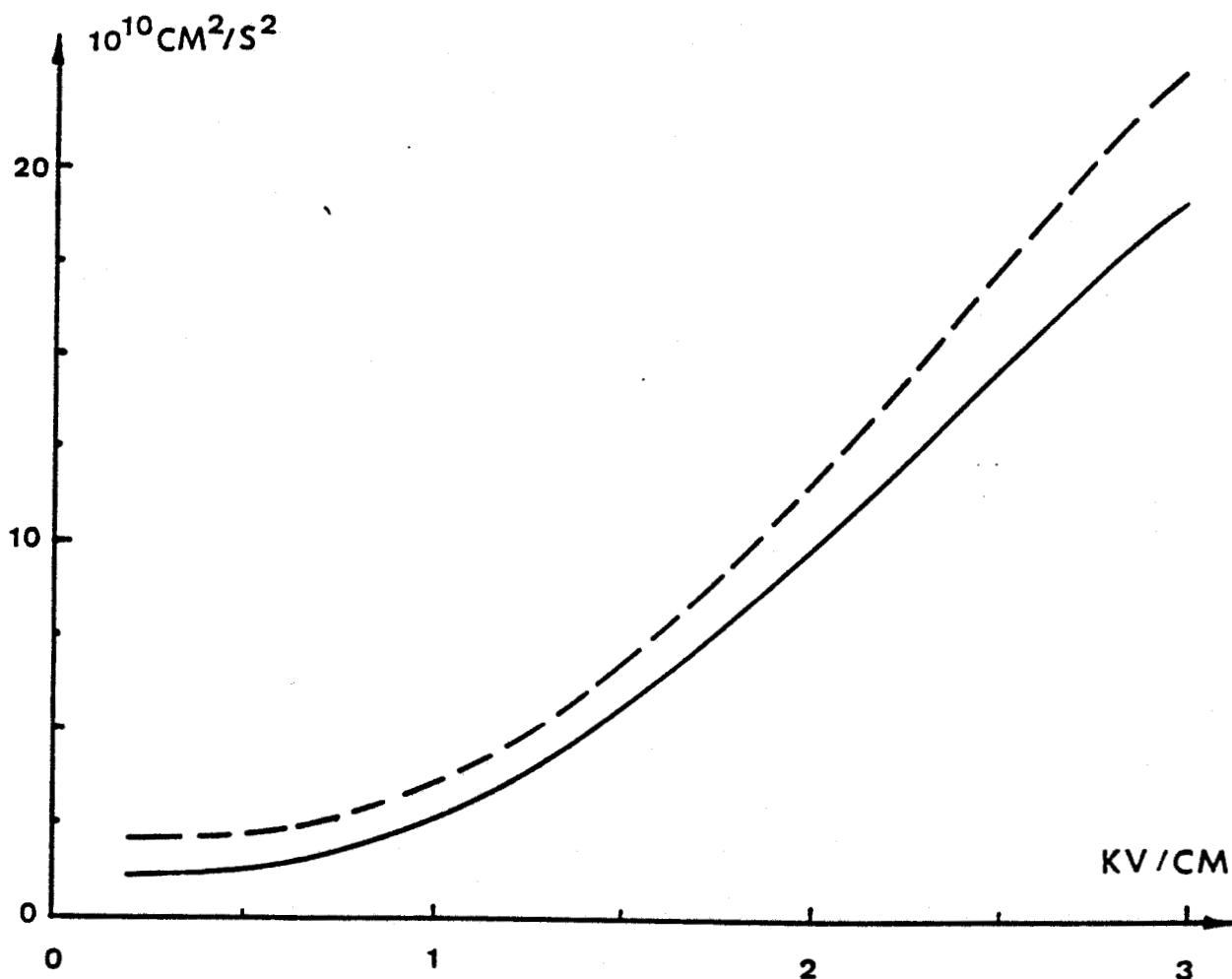


FIGURE VI.12 Mêmes structure que la figure VI.1. Evolution des variances de vitesse longitudinale (trait interrompu) et transverse (trait plein) en fonction du champ électrique.

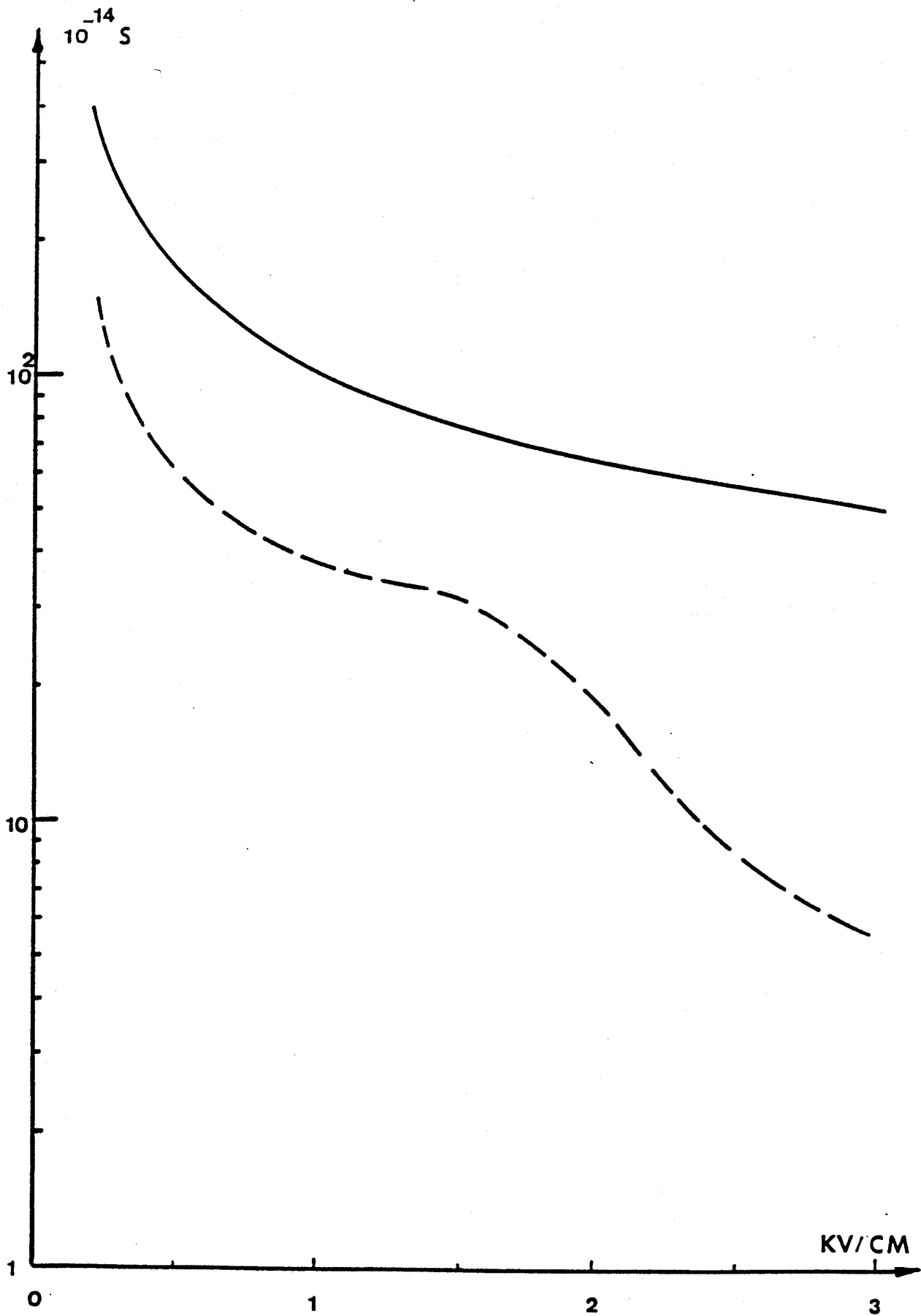


FIGURE VI.13 Môme structure que la figure VI.1. Evolution des temps de corrélation longitudinal (trait interrompu) et transverse (trait plein) en fonction du champ électrique.

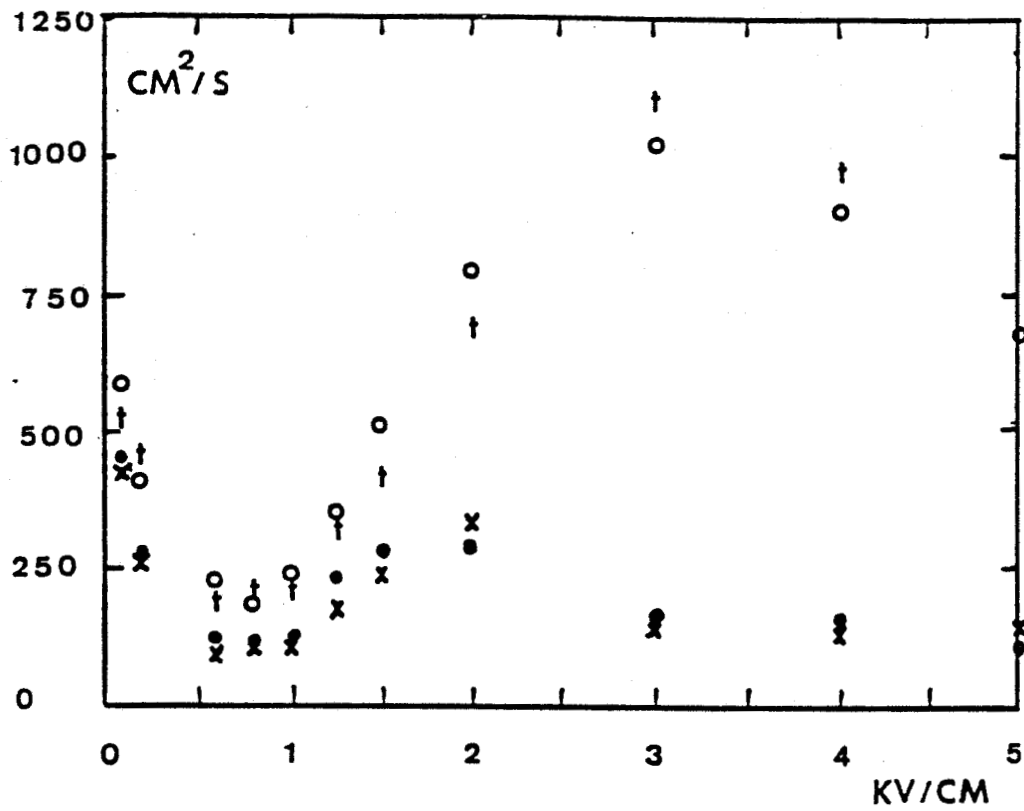


FIGURE VI.14 Même structure que la figure VI.1. Evolution des coefficients de diffusion avec le champ électrique.

●(○) longitudinal (transverse) par fonctions de corrélation.

x(†) longitudinal (transverse) par variances de déplacement.

CONCLUSION

Au cours de ce travail, nous avons élaboré un modèle de la dynamique d'électrons à deux dimensions qui tient compte des effets très particuliers régissant le transport de charge dans les hétérojonctions. Le modèle a ensuite été étudié grâce à une méthode de Monté-Carlo. Les fonctions d'onde et énergies de sous-bandes obtenues par la résolution auto-consistante de l'équation de Schrödinger ont été utilisées pour évaluer les probabilités de collision des électrons à deux dimensions avec les phonons du réseau cristallin et les impuretés ionisées. Nous avons reporté les résultats relatifs à la mobilité, à la vitesse de dérive, ainsi qu'à la diffusion. Les résultats obtenus ici sont assez similaires à ceux que l'on trouve généralement dans la bibliographie existante. Nous avons présenté quelques résultats de notre première approche du phénomène de diffusion, qui pratiquement n'a encore jamais été abordé. Les études que nous avons menées ont montré que la fonction de corrélation longitudinale du gaz d'électrons à deux dimensions tel qu'il est présenté par notre modèle a un comportement oscillatoire qui dépend directement du champ électrique.

Il existe encore à l'heure actuelle un manque de données expérimentales dans le domaine qui nous intéresse ici. Des mesures visant à déterminer la vitesse de dérive en champ fort ou les coefficients de diffusion, quelle que soit la technique utilisée, ne sont ni aisément réalisables ni facilement interprétables. En regard de cela, les modélisations fondées sur la dynamique microscopique trouvent leur pleine utilité. Une difficulté réside toutefois dans l'interaction des structures simulées et des polarisations de celles-ci sur la dynamique microscopique elle-même. Cela rend difficilement comparables les résultats acquis par les auteurs différents et oblige à considérer chaque structure ou chaque type de composant comme un cas particulier. Les modèles physiques de conception de composants assistée par ordinateur (nous entendons par là les modèles n'utilisant pas de schémas électriques équivalents) trouvent leur utilité s'ils sont suffisamment simples pour donner des résultats probants en peu de temps de calculs. Ils doivent donc s'appuyer sur des descriptions de paramètres

physiques qui ne peuvent être obtenus que par des modèles plus élaborés dont celui présenté ici est un exemple.

Mais le travail présenté ici ne constitue en réalité qu'une première approche de la dynamique d'électrons à deux dimensions dans les hétérojonctions. Un certain nombre d'effets physiques (dégénérescence, inélasticité de certaines collisions à basse température, non-parabolicité des sous-bandes à deux dimensions, transfert en espace réel par courant tunnel, etc...) a été volontairement ignoré par souci de simplicité. Le modèle pour décrire le couplage d'un système à deux dimensions avec un système à trois dimensions reste à améliorer à partir de considérations physiques plus fondamentales. Tels sont quelques aspects à prendre en compte dans une étape ultérieure afin de donner une représentation plus réaliste du gaz d'électrons à deux dimensions dans les hétérojonctions.

BIBLIOGRAPHIE

- [1] R.L. ANDERSON.
IBM. J. Res. and Dev. 4. p. 283. 1960.

- [2] L. ESAKI, R. TSU.
IBM. Res. Intern. Report. RC2418. 26 mars 1969.

- [3] R. DINGLE, H.L. STORMER, A.C. GOSSARD and W. WIEGMANN.
Electron mobilities in modulation-doped semiconductor heterojunction superlattices.
Appl. Phys. Lett. 33. p. 665. 1978.

- [4] T.J. DRUMMOND, H. MORKOC and A.Y. CHO.
Dependence of electron mobility on spatial separation of electrons and donors in AlGaAs/GaAs heterostructures.
J. Appl. Phys. 52. p. 1380. 1981.

- [5] P. DECLESCLUSE, M. LAVIRON, J. CHAPLART, D. DELAGEBEAUDEUF and N.T. LINH.
Transport properties in GaAs/GaAlAs heterojunctions and MESFET application.
Electron Lett. 17. P. 342. 1981.

- [6] N. SANO, H. KATO and S. CHIKA.
Temperature dependence of transport properties in selectively doped GaAs/GaAlAs heterostructures grown by molecular beam epitaxy.
Solid State Commun. Vol. 49. pp. 123-125. 1984.

- [7] J.C. HWANG, A. KASTALSKY, H.L. STORMER and V.G. KERAMIDAS.
Transport properties of selectively doped GaAs/GaAlAs heterostructures grown by molecular beam epitaxy.
Appl. Phys. Lett. Vol. 44. pp. 802-804. 1984.

- [8] M. HEIBLUM, E.E. MENDEZ and F. STERN.
High mobility electron gas in selectively doped n : AlGaAs/GaAs heterojunctions.
Appl. Phys. Lett. Vol. 44. pp. 1064-1066. 1984.

- [9] E.E. MENDEZ, P.J. PRICE and M. HEIBLIUM.
Temperature dependence of the electron mobility in GaAs/GaAlAs heterostructures.
Appl. Phys. Lett. 45(3). p. 294. 1 August 1984.
- [10] Y. MORI, F. NAKAMURA and N. WATANABE.
High electron mobility in the selectively doped heterostructures grown by normal pressure metalorganic chemical vapor deposition.
J. Appl. Phys. 60(1). p. 334. 1 July 1986.
- [11] K. HIRAKAWA and H. SAKAKI.
Mobility of the two-dimensional electron gas at selectively doped n-type $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ heterojunctions with controlled electron concentrations.
Phys. Rev. B. Vol. 33. n° 12. p. 8291. 1986.
- [12] G. WEIMANN and W. SCHLAPP.
Appl. Phys. Lett. 46. p. 411. 1985.
- [13] J. ZIMMERMANN, Y. WU and F. PERRI.
Study of two-dimensional gas transport properties : an approach to electron transport in TEGFETs.
Physica 129B. p. 385. 1985.
- [14] W.T. MASSELINK, W. KOPP, T. HENDERSON and H. MORKOC.
Measurement of the electron velocity-field characteristic in modulation-doped structures using the geometrical magneto resistance method.
IEEE Electron Device Letters. Vol. EDL-6. n° 10. p. 539. 1985.
- [15] R. DINGLE.
New high-speed III-V devices for integrated circuits.
IEEE Transactions ED-31. p. 1662. 1984.
- [16] K. YOKOYAMA and K. HESS.
Monte Carlo study of electronic transport in $\text{Al}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}/\text{GaAs}$.
Phys. Rev. B. Vol. 33. n° 8. p. 5595. 1985.

- [17] U. RAVAIOLI and K.K. FERRY.
Electron transport in the conduction channel of the HEMT.
Supelattices and Microstructures. Vol. 2. n° 4. p. 377. 1986.
- [18] W. WALUKIEWCZ, H.E. RUDA, J. LAGOWSKI and H.C. GATOS.
Electron mobility in modulation-doped heterostructures.
Phys. Rev. B. Vol. 30. n° 8. p. 4571. 1984.
- [19] M. AL-MUDARES and B.K. RIDDLEY.
Monte Carlo simulation of scattering-induced negative differential
resistance in AlGaAs/GaAs quantum wells.
J. Phys. C : Solid State Phys. 19. p. 3179. 1986.
- [20] E.E. MENDEZ.
Electronic mobility in semiconductor heterostructures.
IEEE J. of Quantum Electronics. Vol. QE-22. n° 9. September 1986.
- [21] H.L. STORMER et al.
Two dimensional electron gas at a semiconductor interface.
Solid State Communication. Vol. 29. pp. 705-709. 1979.
- [22] DELAGEBEAUDEUF, P. DELESCLUSE, P. ETIENNE, J. CHAPLART and N.P. LINH.
Electron. Lett. 16. p. 667. 1980.
- [23] T. MIMURA, S. HIAMIZU, T. FUJI, K. NANBU.
Jpn J. Appl. Phys. 19. 1-225. 1980.
- [24] N.T. LINH.
Le transistor à gaz d'électrons bi-dimensionnel : application en
hyperfréquences et en logique rapide.
dans "Application des transistors à effet de champ en arséniure de
gallium". Chap. 10. Editions Eyrolles.
- [25] N.T. LINH.
Two-dimensional electron gas FETs : microwaves applications.
Communication privée. 1984.
- [26] A. CAPPY.
Thèse de Doctorat d'Etat. Université de Lille I. Décembre 198 .

- [27] H. MORKOC, T.J. DRUMMOND, R.E. THORNER and W. KOPP.
Mobility enhancement in inverted AlGaAs/GaAs modulation doped structures and its dependance on donor - electron separation.
J.J.A.P. Vol. 20. n° 12. 1981.
- [28] D. DELAGEBEAUEUF and N.T. LINH.
Charge control of the heterojunction two-dimensional electron gas for MESFET application..
IEEE ED-28. n° 7. 1981.
- [29] J. ZIMMERMANN.
Thèse de Doctorat d'Etat. Université de Lille I. 1980.
- [30] A. KASZYNSKI.
Thèse de Docteur Ingénieur. Université de Lille I. 1979.
- [31] M.A. LITTLEJOHN. J.R. HAUSER and T.H. GLISSON.
J. Appl. Phys. 48. p. 4587. 1977.
- [32] N. CHAND and al.
Comprehensive analysis of Si-doped $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ ($x = 0$ to 1): theory and experiments.
Phys. Rev. B. Vol. 30. n° 8. pp. 4481-4492. 1984.
- [33] R. DINGLE, A.C. GOSSARD and W. WIEGMANN.
Phys. Rev. Lett. 34. p. 1327. 1975.
- [34] M. WATANABE and al.
Band discontinuity for GaAs/AlGaAs heterojunction determined by C-V profiting technique.
J. Appl. Phys. 57(12). p. 5340. 1985.
- [35] S. ADACHI.
 GaAs/AlAs and $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$: material parameters for use in research and device applications.
J. Appl. Phys. 58(3). R1-R29. 1985.

- [36] A.K. SAXENA and K.S. GURUMURTHY.
Scattering parameters from an analysis of the hall electron mobility
in $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ alloys.
J. Phys. Chem. Solids. Vol. 43. n° 9. pp. 801-808. 1982.
- [37] E.F. SCHUBERT and K. PLOOG.
Shallow and deep donors in direct gap n type $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$:
 S_i grown by molecular beam epitaxie.
Phys. Rev. B. Vol. 30. n° 12. pp. 7021-7029. 1984.
- [38] J. ZIMMERMANN and Y. WU.
Etude de la dynamique des électrons à deux dimensions dans les
hétérojonctions.
A paraître. Revue de Physique Appliquée.
- [39] P.J. PRICE.
Transmission of bloch waves through crytal interfaces.
Proceeding of the 6th International Conference on the Physics of
Semiconductors. Exeter (Institute of Physics, London). pp. 99-103.
- [40] T. ANDO, A.B. FOWLER and F. STERN.
Electronic properties of two-dimensional systems.
Revew of Modern Physics. 54. p. 608. 1982.
- [41] A.C. MARSH and J.C. INKSON.
Electron scattering forom heterojunction.
J. Phys. C : Solid State Phys. Vol. 17. pp. 6561-6571. 1984.
- [42] S. COLLINS, D. LOWE and J.R. BARKER.
On the accuracy of the effective approximation for electron scattering
at heterojunction.
J. Phys. C : Solid State Phys. Vol. 18. L637-L640. 1985.

- [43] L.D. LANDAU and E.M. LIFSHITZ.
Electrodynamics of continuous media.
Pergamon. Oxyford. p. 40. 1960.
- [44] F. STERN and S. DAS SARMA.
Electron energy levels in GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs heterojunctions.
Phys. Rev. B. Vol. 30. D° 2. p. 840. 1984.
- [45] C. KITTEL.
Quantum theory of solids.
John Wiley and Sons, Inc. New-York. London. p. 86.
- [46] C. KITTEL.
Physique de l'état solide.
5^{ème} édition. Dunod. p. 297.
- [47] B. VINTER.
Subbands and charge control in a two-dimensional electron gas field-effect.
Appl. Phys. Lett. 44(3). p. 307. 1984.
- [48] G. BASTARD.
Appl. Phys. Lett. 43. p. 591. 1983.
- [49] J.P. LEBURTON.
Size effects on polar optical scattering of 1-D and 2-D electron gas in synthetic semiconductors.
J. Appl. Phys. 56(10). p. 2850. 1984.
- [50] P. PRICE.
Two-dimensional electron transport in semiconductor layers.
Annals of Physics. Vol. 133. pp. 217-239. 1981.
- [51] O. MADELUNG.
Introduction to solid-state theory.
Springer Series in Solid-state Sciences. 2. p. 114.
- [52] J.M. ZIMAN.
Electrons and phonons.
Oxford University Press. London and New-York. pp. 210-211. 1960.

- [53] K. YOKOYAMA and K. HESS.
Intersubband phonon overlap integrals for AlGaAs/GaAs single-well heterostructures.
Phys. Rev. B. Vol. 31. n° 10. p. 6872. 1985.
- [54] P. PRICE.
Electron transport in polar heterolayers.
Surface Sci. Vol. 113. pp. 199-220. 1982.
- [55] P. PRICE.
Semiconductors and semimetals.
R.K. Willardson et A.C. Beer Editeurs. A4. (Academic Press. New-York). p. 264.
- [56] E.D. SIGGIA and C. KWOK.
Properties of electrons in semiconductors inversion layers with many occupied electric subbands. I screening and impurity scattering.
Phys. Rev. B. Vol. 2. n° 4. pp. 1024-1036. 1970.
- [57] X.L. LEI.
Dynamical screening and electron self-energy in the presence of polar interaction in quasi-2D heterostructures.
J. Phys. C : Solid State Phys. 18. L731-L735. 1985.
- [58] S. DAS SARMA and B.A. MASON.
Screening of polar interaction in quasi-two-dimensional semiconductor microstructures.
Phys. Rev. B. Vol. 31. n° 8. p. 5536. 1985.
- [59] P. PRICE.
Two-dimensional electron transport in semiconductor layer II : screening.
J. Vac. Sci. Technol. 19(3), p. 599. 1981.
- [60] C.H. YANG and S.A. LYON.
Dynamical screening of the electron-optical phonon interaction in two dimensions.
Physica 134 B. pp. 309-313. 1985.

- [61] J.LEE, H.N.SPECTOR, and V.K.ARORA,
Impurity scattering in heterostructures.
J.Appl.Phys.54, 6995. 1983. .
- [62] K.YOKOYAMA and K.HESS.
Calculation of warm electron transport in GaAs/GaAlAs heterostructures
using a Monte Carlo method.
J.Appl.Phys. 59(11),P3798. June 1986.
- [63] W.FAWCETT, A.D.BOARDMAN and S.SWAIN.
Monte Carlo determination of electron transport propeties in
gallium arsenide.
J.Phys.Chem.Solids, 31,pp.1963-1990. 1970.
- [64] G.HILL, P.N.ROBSON and W.FAWCETT.
Diffusion and the power spectral density of velocity fluctuation for
electrons in InP by Monte Carlo methods.
J.Appl.Phys. 50 (1), p356. 1979.
- [65] D.K.FERRY, and R.BARKER.
J.Appl.Phys. 52 , pp.818-824. 1981.
- [66] W.T.MASSELINK and al.
Electron velocity at high electric fields in AlGaAs/GaAs modulation-
doped heterostructures.
Solid-State Electronics Vol. 31, No 3/4, PP.337-340, 1988.
- [67] J.ZIMMERMANN and WU YEN.
Diffusion coefficients of two-dimensional electron gas in
heterojunctions.
Solid-State Electronics Vol.31, No 3/4, PP.367-370, 1988.
- [68] N.BRASLAU and P.S.HAUGE.
Microwave measurements of the velocity-field characteritic of GaAs.
IEEE Trans.Electron Devices ED-17 , 616, 1970.

[69] K.HIRAKAWA and H.SAKAKI.

Mobility of the two-dimensional electron gas at selectively doped
n-type AlGaAs/GaAs heterojunctions with controlled electron concentration.
Phys. Rev. B. Vol 33, N°12 ,P.8291.1986.

ANNEXES

ANNEXE I

TABLEAU DES PARAMETRES UTILISES

paramètres relatifs au matériau

densité	5.36 g/cm ³	vitesse du son	5.24 10 ⁵ cm/s
constante piézoélectrique	0.052	permittivité diélectrique ϵ_{∞}	=10.92
phonon LO	0.03536 eV	permittivité diélectrique ϵ_s	=12.90

paramètres relatifs à la structure de bande

	$\Gamma(0,0,0)$	L(1,1,1)	X(1,0,0)
masse effective m_0^*/m_0	0.067	0.222	0.58
coefficient de non parabolicité	0.610 eV ⁻¹	0.461 eV ⁻¹	0.204 eV ⁻¹
gap par rapport à la bande de valence	1.439 eV	1.769 eV	1.961 eV
potentiel de déformation acoustique	7 eV	9.2 eV	9.27 eV
potentiel de déformation optique	0	3.10 ⁸ eV/cm	0
phonon optique	0	0.0343 eV	0
potentiel de déformation intervallée			
Γ	0	10 ⁹ eV/cm	10 ⁹ eV/cm
L	10 ⁹ eV/cm	10 ⁹ eV/cm	5.10 ⁸ eV/cm
X	10 ⁹ eV/cm	5.10 ⁸ eV/cm	7.10 ⁸ eV/cm
phonon intervallée			
Γ	0	0.0278 eV	0.0299 eV
L	0.0278 eV	0.0290 eV	0.0293 eV
X	0.0299 eV	0.0293 eV	0.0299 eV
nombre de vallées équivalentes	1	4	3

ANNEXE II

DESCRIPTION DE LA METHODE DE RESOLUTION

AUTO-CONSISTANTE DES EQUATIONS

DE SCHRODINGER ET DE POISSON

Cette annexe se propose de décrire la méthode numérique permettant la résolution auto-consistante des équations de Schrödinger (3.4) et de Poisson (3.8).

On commence par discrétiser la zone d'étude qui s'étend de la grille à un point W suffisamment éloigné de l'hétérojonction (Fig. A2.1) pour que l'on puisse imposer comme conditions aux limites :

$$F(0) = F(W) = 0 \quad (\text{A2.1})$$

Pour un potentiel initial donné $V_0(z)$ (Fig. A2.2), l'équation de Schrödinger discrétisée peut s'écrire :

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{F_{i+1} + F_{i-1} - 2F_i}{\Delta z^2} + V_{oi} F_i = \epsilon_n F_i \quad (\text{A2.2})$$

ou encore sous forme matricielle :

$$(S) (F) = \frac{-2m^* \Delta z^2}{\hbar^2} \epsilon_n (F) \quad (\text{A2.3})$$

où (S) est une matrice tridiagonale dont les éléments de la diagonale principale S_{ii} prennent la valeur :

$$S_{ii} = -2 - \frac{2m^* \Delta z^2}{\hbar^2} V_{oi}$$

et dont les éléments des deux diagonales secondaires valent un.

La détermination du spectre énergétique du système envisagé revient donc à calculer les valeurs propres de la matrice (S) . Bien entendu, seules nous intéressent les valeurs propres les plus faibles qui correspondent aux niveaux d'énergie des premières sous-bandes.

Les valeurs propres qui sont les racines du polynôme caractéristique de la matrice (S) sont calculées par la méthode de la bisection. Une fois connues les valeurs propres, on détermine d'une part, les vecteurs propres, c'est-à-dire les fonctions d'onde, en tenant compte des équations (A2.1) et

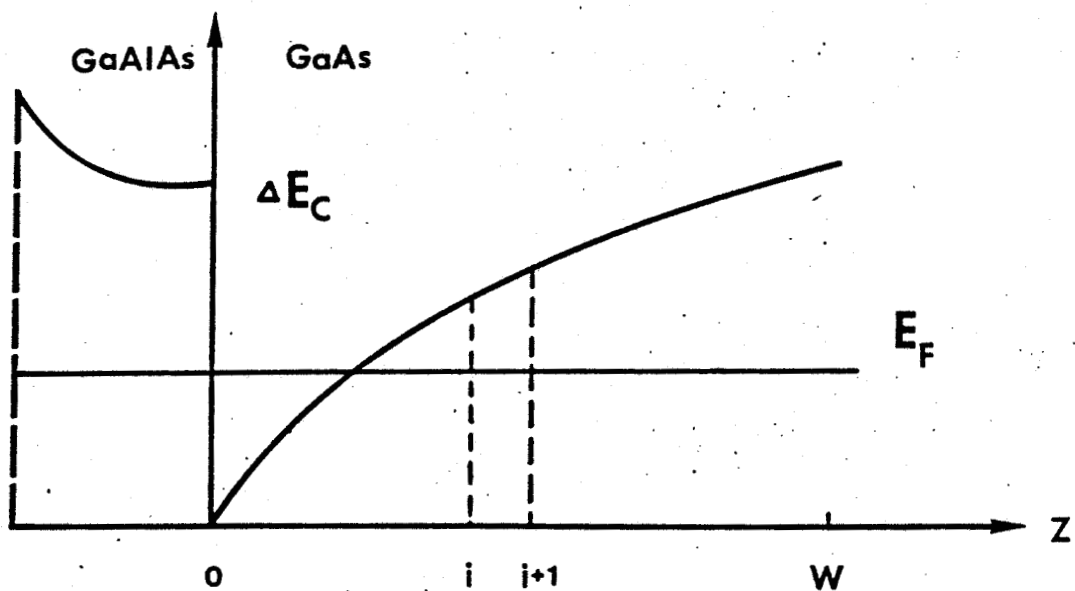


FIGURE A2.1 Représentation schématique de la structure simulée.

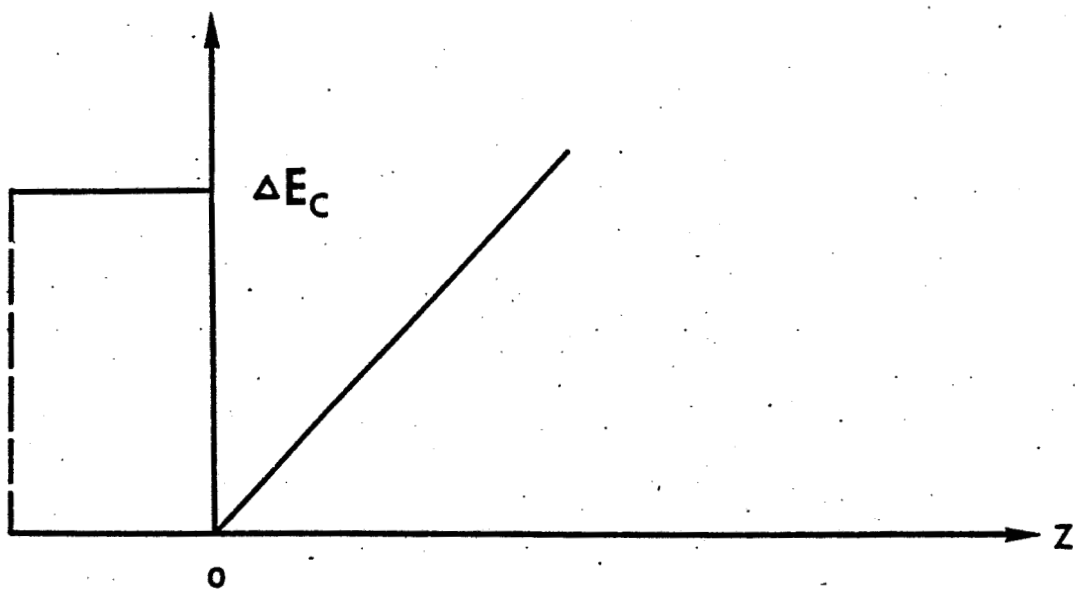


FIGURE A2.2 Allure du potentiel initial choisi.

$$\frac{N_{\ell}(z) - N_{\ell-1}(z)}{N_{\ell-1}(z)} \leq 5 \%$$

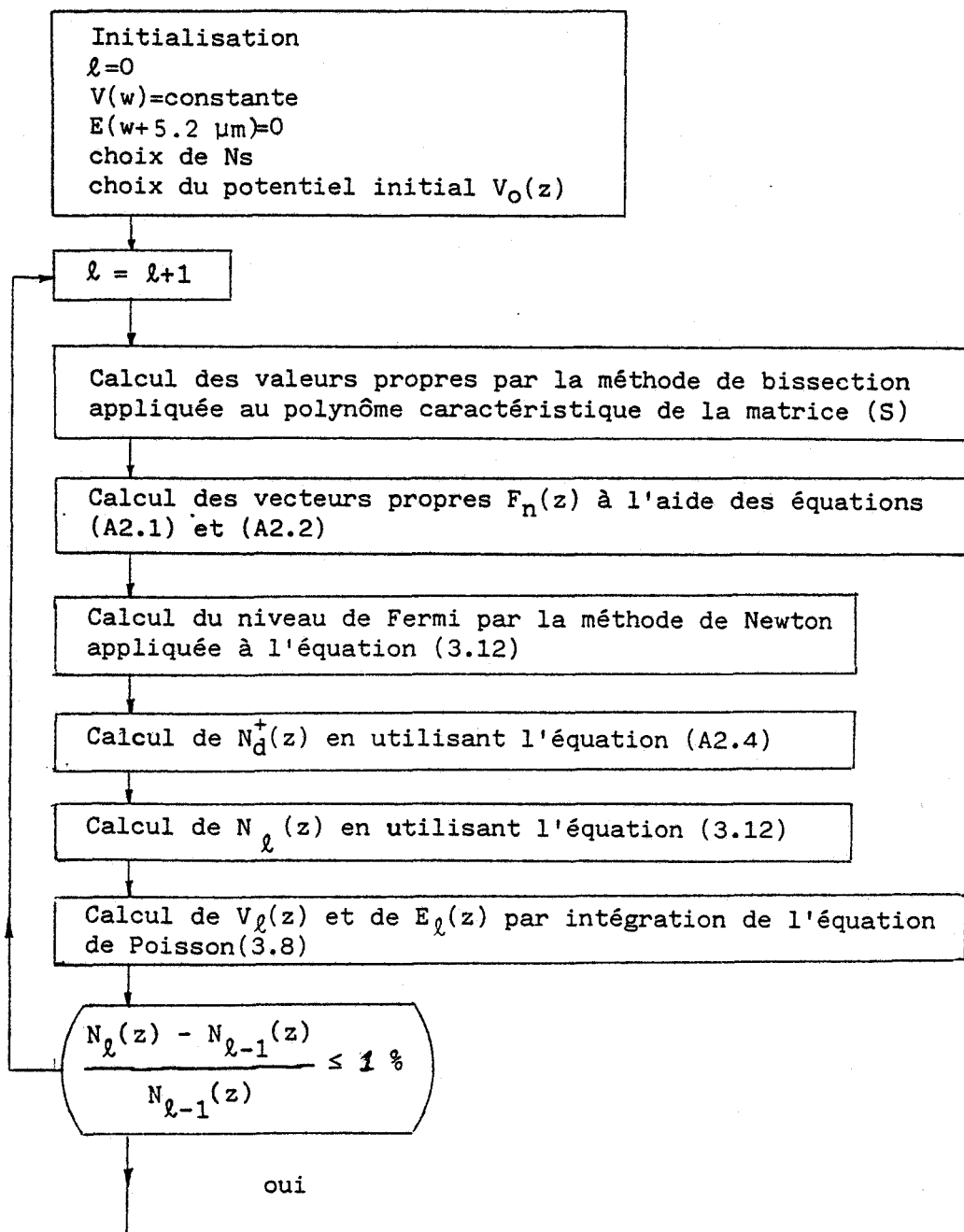


FIGURE A2.3 Organigramme de la procédure numérique

ANNEXE III

CALCULS RELATIFS AU FACTEUR DE FORME $H_{mn}(Q)$

Le facteur de forme $H_{mn}(Q)$ est, comme nous l'avons vu au chapitre IV, défini par :

$$H_{mn}(Q) = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} S_{mn}(z_1) S_{mn}(z_2) e^{-Q|z_1-z_2|} dz_1 dz_2 \quad (A3.1)$$

où $S_{mn}(z) = F_m(z) F_n(z)$ avec $F_m(z)$ et $F_n(z)$ fonctions d'onde associées aux niveaux m et n dans le puits de potentiel (Voir Chapitre III).

En général, il est possible d'exprimer le facteur de forme sous forme analytique. Ceci découle du fait que la détermination des fonctions d'onde $F_m(z)$ fait appel, la plupart du temps, à une méthode numérique comme dans le cas du modèle que nous étudions. Dans le cadre de cet annexe, nous proposons une approximation analytique pour le facteur de forme relatif au modèle étudié. A cet effet, nous commençons par calculer le facteur de forme associé au puits de potentiel rectangulaire de largeur égale à a et de profondeur infinie. Nous verrons que les résultats obtenus dans ce cas simple nous permettront de parvenir à approcher, par une expression analytique, le facteur de forme dans le cas d'un puits de potentiel quasi triangulaire à l'interface d'une hétérojonction.

Dans le cas du puits de potentiel rectangulaire profond, la fonction d'onde $F_m(z)$ s'écrit [50] :

$$F_m(z) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{m\pi z}{a}\right) \quad (A3.2)$$

où a est la largeur du puits.

Le facteur de forme se met alors sous la forme :

$$H_{mn}(Q) = \int_0^a \int_0^a \frac{4}{a^2} \sin\left(\frac{m\pi z_1}{a}\right) \sin\left(\frac{n\pi z_1}{a}\right) \sin\left(\frac{m\pi z_2}{a}\right) \sin\left(\frac{n\pi z_2}{a}\right) dz_1 dz_2 \quad (A3.3)$$

ce qui donne après développement :

$$\begin{aligned}
 H_{mn}(Q) &= \frac{1}{a^2} \int_0^a \int_0^a \left[\cos\left(\frac{m+n}{a} \pi z_1\right) \cos\left(\frac{m+n}{a} \pi z_2\right) \right. \\
 &+ \cos\left(\frac{m-n}{a} \pi z_1\right) \cos\left(\frac{m-n}{a} \pi z_2\right) \\
 &- \cos\left(\frac{m+n}{a} \pi z_1\right) \cos\left(\frac{m-n}{a} \pi z_2\right) \\
 &\left. - \cos\left(\frac{m-n}{a} \pi z_1\right) \cos\left(\frac{m+n}{a} \pi z_2\right) \right] e^{-Q|z_1-z_2|} dz_1 dz_2
 \end{aligned}$$

Nous allons maintenant calculer séparément les quatre intégrales qui figurent dans le second membre de l'expression ci-dessus. Pour simplifier l'écriture, nous posons $aQ = u$.

$$\begin{aligned}
 &\frac{1}{a^2} \int_0^a \int_0^a \cos\left(\frac{m+n}{a} \pi z_1\right) \cos\left(\frac{m+n}{a} \pi z_2\right) e^{-Q|z_1-z_2|} dz_1 dz_2 \\
 &= \frac{u}{(m+n)^2 \pi^2 + u^2} - \frac{2u^2}{[(m+n)^2 \pi^2 + u^2]^2} [1 - (-1)^{m+n} e^{-u}] \\
 &\frac{1}{a^2} \int_0^a \int_0^a \cos\left(\frac{m-n}{a} \pi z_1\right) \cos\left(\frac{m-n}{a} \pi z_2\right) e^{-Q|z_1-z_2|} dz_1 dz_2 \\
 &= \frac{u(\delta_{mn} + 1)}{(m-n)^2 \pi^2 + u^2} - \frac{2u^2 [1 - (-1)^{m+n} e^{-u}]}{[(m-n)^2 \pi^2 + u^2]^2}
 \end{aligned}$$

et

$$\begin{aligned}
 &\frac{1}{a^2} \int_0^a \int_0^a \cos\left(\frac{m+n}{a} \pi z_1\right) \cos\left(\frac{m-n}{a} \pi z_2\right) e^{-Q|z_1-z_2|} dz_1 dz_2 \\
 &= \frac{1}{a^2} \int_0^a \int_0^a \cos\left(\frac{m+n}{a} \pi z_2\right) \cos\left(\frac{m-n}{a} \pi z_1\right) e^{-Q|z_1-z_2|} dz_1 dz_2 \\
 &= \frac{-2u^2 [1 - (-1)^{m+n} e^{-u}]}{[(m+n)^2 \pi^2 + u^2]^2 [(m-n)^2 \pi^2 + u^2]}
 \end{aligned}$$

En regroupant les résultats précédents, nous avons finalement :

$$H_{mn}(Q) = u \left[\frac{1}{(m+n)^2 \pi^2 + u^2} + \frac{\delta_{m+n} + 1}{(m-n)^2 \pi^2 + u^2} \right] \times (1-\alpha)$$

$$\text{où } \alpha = \frac{32\pi^4 m^2 n^2 u}{[(m+n)^2 \pi^2 + u^2] [(m-n)^2 \pi^2 + u^2]} \times \left[\frac{1 - (-1)^{m+n} e^{-u}}{[(m+n)^2 \pi^2 + u^2] (\delta_{mn} + 1) + (m-n)^2 \pi^2 + u^2} \right]$$

(A3.4)

Price [50] propose d'approximer l'expression (A3.4) par interpolation pour la mettre sous une forme plus simple. A cet effet, deux cas sont à distinguer selon que m est égal ou non à n.

a) Cas où m=n

Dans ce cas, $H_{mn}(Q)$ s'écrit :

$$H_{mn}(Q) = u \left[\frac{1}{4\pi^2 m^2 + u^2} + \frac{2}{u^2} \right] (1-\alpha_m)$$

$$\text{où } \alpha_m = \frac{32\pi^4 m^4 (1-e^{-u})}{(4\pi^2 m^2 + u^2) (3u^2 + 8\pi^2 m^2) u}$$

Quand u est très faible, on a :

$$H_{mm_0}(Q) \approx 1.$$

Quand u est grand,

$$H_{mm_\infty}(Q) \neq \frac{3}{u}.$$

Par interpolation, on obtient :

$$\begin{aligned} H_{mn}(Q) &\approx \frac{H_{mn\infty} H_{mn0}}{H_{mn\infty} + H_{mn0}} \\ &= \frac{1}{1 + \frac{u}{3}} \\ &= \frac{1}{1 + \frac{a}{3} Q} \end{aligned}$$

Or, $\frac{a}{3}$ est égal à la largeur effective* b_{mn} dans le cas d'un puits de potentiel rectangulaire profond [50]. On a donc :

$$H_{mn}(Q) \approx \frac{1}{1 + b_{mn} Q} \quad (A3.5)$$

b) Cas où $m \neq n$

En partant de l'expression (A3.4), on a :

$$H_{mn}(Q) \approx \frac{2a}{\pi^2} \frac{m^2 + n^2}{(m^2 - n^2)^2} Q, \text{ quand } Q \text{ est faible ;}$$

et $H_{mn}(Q) \approx \frac{1}{b_{mn} Q}$, quand Q est grand, avec $b_{mn} = \frac{a}{2}$ la largeur effective.

Par interpolation, il vient :

$$H_{mn}(Q) \approx \frac{Q}{b_{mn} Q^2 + \frac{\pi^2 (m^2 - n^2)^2}{4b_{mn} (m^2 + n^2)}} \quad (A3.6)$$

* La largeur effective est définie au début du Chapitre IV.

Dans une publication parue en 1985, Yokoyama et Hess [51] ont suggéré l'idée d'utiliser les expressions (A3.5) et (A3.6) pour approcher le facteur de forme relatif au puits de potentiel quasi triangulaire à l'interface d'une hétérojonction.

Nous avons vérifié par nos propres calculs que ces approximations pouvaient également être utilisées dans le cas du modèle que nous étudions ici à condition de remplacer, dans le cas où $m \neq n$, les largeurs effectives exactes par des valeurs appropriées que l'on peut déterminer en fonction de la configuration du puits de potentiel.

En outre, il faut remplacer dans l'expression (A3.6) m et n par $(m+1)$ et $(n+1)$, compte tenu du fait que dans le cas d'un puits de potentiel quasi triangulaire fini, l'indice de la sous-bande fondamentale est 0 au lieu de 1 comme dans le cas d'un puits de potentiel rectangulaire profond [50].

A titre d'exemple, la figure A3.1 montre l'évolution des facteurs de forme en fonction de Q dans le cas de la structure définie sur la figure III.5.a avec $N_s = 8.03 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$. Nous y avons représenté à la fois les facteurs de forme exacts calculés à l'aide de la relation (A3.1) et ceux approchés déterminés avec les expressions (A3.5) et (A3.6). On peut y constater la validité des approximations adoptées. Dans tous les cas que nous avons été amenés à considérer jusqu'à présent, l'accord obtenu est toujours de la qualité constatée dans la Figure A3.1.

ANNEXE IV

DEMONSTRATION DE LA FORMULE (4.5)

Comme nous l'avons vu au chapitre IV, dans le cas des collisions entre électrons et phonons du réseau cristallin, l'élément de matrice quasi bidimensionnel peut être calculé à l'aide de la relation (4.5).

Dans cette expression, $M_3(Q, q_z)$ représente l'élément de matrice tridimensionnel et $I_{mn}(q_z)$ est l'intégrale de chevauchement définie par :

$$I_{mn} = \int_{-\infty}^{+\infty} F_m(z) F_n(z) e^{iq_z z} dz \quad (A4.1)$$

avec $F_m(z)$ et $F_n(z)$ fonctions d'onde relatives aux sous-bandes m et n.

Il est à noter que l'élément de matrice calculé par cette formule n'inclut pas l'effet d'écrantage.

Cette relation a été initialement donnée par Price [50, 54]. Nous nous proposons d'en donner une démonstration dans cet annexe. Sans perte de généralité, nous nous limitons au cas de la collision optique polaire.

L'hamiltonien ou tout simplement le potentiel responsable de la collision optique polaire s'écrit sous la forme [52] :

$$V = 4\pi i \left(\frac{e^2 \hbar}{2\gamma \omega_0 V} \right)^{1/2} \sum_q \frac{1}{q} (a_q^* e^{-i\vec{q} \cdot \vec{r}} - a_q e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}}) \quad (A4.2)$$

où a_q^* ou a_q est l'opérateur de création de phonons optiques polaires ou d'annihilation, et

$$\gamma = e^2 \left(\frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_0} \right) \left(\frac{m^*}{2\omega_0 \hbar^3} \right)^{1/2}$$

Compte tenu de l'indépendance du processus d'émission et du processus d'absorption, il est possible de traiter séparément les deux cas. Ici, nous traitons uniquement le cas de l'émission. Celui de l'absorption peut être abordé de la même façon.

En partant de l'expression (A4.2), l'élément de matrice relatif à la collision entre un électron décrit par la fonction d'onde (3.3) et un mode optique polaire q s'écrit sous la forme :

$$M_{2q}^{mn}(Q, q_z) = \langle \psi_{n, \vec{k}_{\parallel}}(r_{\parallel}, z), N_q + 1 | V_q | \psi_{m, \vec{k}_{\parallel}}(r_{\parallel}, z), N_q \rangle \quad (A4.3)$$

où \vec{Q} représente le vecteur d'onde parallèle à l'interface, q_z celui normal à l'interface, N_q est le nombre de phonons caractérisés par q , et

$$V_q = 4\pi i \left(\frac{e^2 \hbar}{2\gamma \omega_0 v} \right)^{1/2} \frac{1}{q} a_q^* e^{-i\vec{q} \cdot \vec{r}}. \quad (A4.4)$$

l'hamiltonien relatif au processeur d'émission.

L'opérateur a_q^* n'agissant que sur les phonons, on a :

$$\langle N_q + 1 | a_q^* | N_q \rangle = (N_q + 1)^{1/2} \quad (A4.5)$$

$$\text{avec } N_q = \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar \omega_0}{k_B T}\right) - 1} \quad (A4.6)$$

La fonction d'onde $\psi_{m, \vec{k}_{\parallel}}(\vec{r}_{\parallel}, z)$ se met sous la forme (éq. III.2) :

$$\psi_{m, \vec{k}_{\parallel}}(r_{\parallel}, z) = \frac{1}{\sqrt{A}} F_m(z) e^{i\vec{r}_{\parallel} \cdot \vec{k}_{\parallel}} \quad (A4.7)$$

En portant (A4.7) dans (A4.3), et compte tenu de la relation (A4.5), il vient :

$$M_{2q}^{mn}(Q, q_z) = \frac{4\pi i}{A} \left(\frac{e^2 \hbar}{2\gamma \omega_0 v} \right)^{1/2} (N_q + 1)^{1/2} \int_V \frac{1}{q} e^{i\vec{r}_{\parallel} \cdot (\vec{k}_{\parallel} - \vec{k}'_{\parallel})} e^{-i\vec{r} \cdot \vec{q}} F_m(z) F_n(z) d\vec{r} \quad (A4.8)$$

Nous calculons maintenant l'intégrale qui figure dans l'expression ci-dessus. Nous la désignons par y.

$$y = \int_A \frac{1}{q} e^{i\vec{r}_{||}[(\vec{k}_{||} - \vec{k}'_{||}) - \vec{q}_{||}]} d\vec{r}_{||} \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-iq_z z} F_m(z) F_n(z) dz$$

$$\int_A \frac{1}{q} e^{i\vec{r}_{||}[(\vec{k}_{||} - \vec{k}'_{||}) - \vec{q}_{||}]} d\vec{r}_{||}$$

$$= \begin{cases} 0, & \text{si } \vec{k}'_{||} - \vec{k}_{||} \neq \vec{q}_{||} \\ \frac{A}{q}, & \text{si } \vec{k}'_{||} - \vec{k}_{||} = \vec{q}_{||} \end{cases}$$

L'égalité $\vec{k}'_{||} - \vec{k}_{||} = \vec{q}_{||}$ représente la règle de sélection concernant le vecteur d'onde du phonon parallèle à l'interface et traduit en fait la conservation des moments dans le plan parallèle à l'interface.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-iq_z z} F_m(z) F_n(z) dz \text{ n'est pas autre chose que l'intégrale de}$$

chevauchement $I_{mn}(q_z)$ définie au début de cette annexe.

En regroupant les résultats précédents, on a :

$$M_{2q}^{mn}(Q, q_z) = 4\pi i \left(\frac{e^2 h}{2\gamma \omega_0 V} \right)^{1/2} \left(N_q + \frac{1}{2} \right)^{1/2} \cdot \frac{1}{\sqrt{q_z^2 + Q^2}} I_{mn}(q_z) \quad (\text{A4.9})$$

$$\text{où } Q = |\vec{k}'_{||} - \vec{k}_{||}|.$$

Or le terme devant $I_{mn}(q_z)$ dans (A4.9) est tout simplement l'élément de matrice tridimensionnel [52].

Il en résulte que :

$$M_{2q}^{mn}(Q, q_z) = M_3(Q, q_z) I_{mn}(q_z) \quad (\text{A4.10})$$

où $Q = |\vec{k}_{\parallel} - \vec{k}'_{\parallel}|$.

Etant donné qu'il n'y a pas de règle de sélection apparente concernant le vecteur d'onde [50, 54], toutes les valeurs de q_z contribuent au processus de collision ayant pour effet d'amener l'électron de l'état (m, \vec{k}_{\parallel}) à l'état $(n, \vec{k}'_{\parallel})$.

Par conséquent, l'élément de matrice relatif au processus de collision durant lequel l'électron passe l'état (m, \vec{k}_{\parallel}) à l'état $(n, \vec{k}'_{\parallel})$ s'obtient, compte tenu de l'additivité des probabilités de collision qui sont proportionnelles aux carrés des éléments de matrice, en intégrant $|M_{2q_z}^{mn}(Q, q_z)|^2$ sur toutes les valeurs possibles de q_z :

$$|M_2^{mn}(Q)|^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{V}{2\pi A} |M_3(Q, q_z)|^2 |I_{mn}(q_z)|^2 dq_z \quad (\text{A4.11})$$

où $\frac{V}{2\pi A}$ représente la densité d'état dans l'espace des vecteurs d'onde.

C'est précisément la formule que l'on voulait démontrer.

ANNEXE V

CALCUL DES PROBABILITES DE COLLISION
ET DETERMINATION DE L'ANGLE DE DEVIATION
APRES COLLISION POUR UN SYSTEME QUASI BIDIMENSIONNEL

La démarche de calcul qui va suivre est commune à tous les types de collision considérés ; dans un premier temps, on détermine $S_{mn}(\vec{k}_{||}, \vec{k}'_{||})$ la densité de probabilité de passage de l'état $\vec{k}_{||}$ de la sous-bande m à l'état $\vec{k}'_{||}$ de la sous-bande n (m peut être égal à n) ; puis, la probabilité par unité de temps qu'un électron dans l'état $\vec{k}_{||}$ de la sous-bande m subisse une collision et occupe, après celle-ci, un état de la sous-bande n, se calcule en intégrant la densité de probabilité $S_{mn}(\vec{k}_{||}, \vec{k}'_{||})$ sur tous les états $\vec{k}'_{||}$ existant dans la sous-bande n ; si β est l'angle entre $\vec{k}_{||}$ et $\vec{k}'_{||}$, cette probabilité s'écrit :

$$\lambda_{mn}(\vec{k}_{||}) = \int_{-\Pi}^{+\Pi} \left[\int_0^{+\infty} S_{mn}(\vec{k}_{||}, \vec{k}'_{||}) k'_{||} dk'_{||} \right] d\beta \quad (A5.1)$$

L'intégration se fait d'abord par rapport au module du vecteur d'onde $k'_{||}$; les vecteurs d'onde $\vec{k}_{||}$ et $\vec{k}'_{||}$ étant respectivement reliés aux énergies $\epsilon_{||}$ et $\epsilon'_{||}$ par les relations :

$$k_{||}^2 = \frac{2m^*}{h^2} \epsilon_{||} \quad (A5.2a)$$

$$k_{||}^1 = \frac{2m^*}{h^2} \epsilon'_{||} \quad (A5.2b)$$

il est possible de tout exprimer en fonction des énergies $\epsilon_{||}$ et $\epsilon'_{||}$; après l'intégration sur l'énergie $\epsilon'_{||}$, la probabilité de collision $\lambda_{mn}(\epsilon_{||})$ peut se mettre sous la forme :

$$\lambda_{mn}(\epsilon_{||}) = \int_{-\Pi}^{+\Pi} f_{\epsilon_{||}}(\beta') d\beta' \quad (A5.3)$$

laissant apparaître la fonction de distribution non normalisée de l'angle de déviation β .

Enfin, la dernière étape consiste à résoudre l'équation

$$r = \frac{\int_0^{\beta} f_{\epsilon_{||}}(\beta') d\beta'}{\int_{-\Pi}^{+\Pi} f_{\epsilon_{||}}(\beta') d\beta'} \quad (A5.4)$$

en fonction du paramètre r tiré au hasard entre 0 et 1, pour obtenir un angle de déviation β selon la fonction de distribution normalisée :

$$p(\beta) = \frac{f_{\varepsilon_{\parallel}}(\beta)}{\int_{-\pi}^{\pi} f_{\varepsilon_{\parallel}}(\beta') d\beta'} \quad (\text{A5.5})$$

Mais, analytiquement, la résolution de l'équation (A4.4) n'est pas toujours possible, en tel cas il faut faire appel à des procédures spécifiques pour déterminer l'angle β .

I. COLLISION ENTRE ELECTRONS ET PHONONS DU RESEAU CRISTALLIN

Dans le cas des collisions entre électrons et phonons du réseau cristallin, nous déterminons d'abord l'élément de matrice à l'aide de la relation démontrée en Annexe IV :

$$|M_2^{mn}(Q)|^2 = \frac{v}{A2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} |M_3(Q, q_z)|^2 \cdot |I_{mn}(q_z)|^2 dq_z \quad (\text{A5.6})$$

où $Q = |k'_{\parallel} - k_{\parallel}|$.

I.1. Collision optique polaire

L'élément de matrice tridimensionnel s'écrit [52] :

$$M_3(Q, q_z) = \frac{C_{op}^{1/2}}{\sqrt{V}} \left(N_0 + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right)^{1/2} \cdot \frac{1}{\sqrt{Q^2 + q_z^2}} \quad (\text{A5.7})$$

où $C_{op} = \frac{e^2 \hbar \omega_0}{2\varepsilon_0} \left(\frac{1}{\varepsilon_{\infty}} - \frac{1}{\varepsilon_0} \right)$ et

$$N_0 = \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar \omega_0}{K_B T}\right) - 1}$$

Dans l'expression (A5.7), le signe plus se rapporte au cas de l'émission et le moins au cas de l'absorption.

Dans ces expressions, ϵ_∞ et ϵ_0 sont les permittivités diélectriques relatives, T la température du réseau h la constante de Planck au facteur multiplicatif $1/2\pi$ près, et e la charge de l'électron.

En portant des expressions (A5.6) et (A5.7), on peut calculer l'élément de matrice bidimensionnel :

$$|M_2^{mn}(Q)| = c_{op} \left[N_0 + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right] \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{v}{2\pi A} \cdot \frac{|I_{mn}(q_z)|^2}{Q^2 + q_z^2} dq_z \quad (A5.8)$$

D'un point de vue mathématique, $1/(Q^2 + q_z^2)$ est la transformée de Fourier de la fonction $e^{-Q|H|/2Q}$:

$$\frac{1}{Q^2 + q_z^2} = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-Q|H|}}{2Q} e^{-iq_z t} dt$$

et $|I_{mn}(q_z)|^2 = I_{mn}(q_z) I_{mn}^*(q_z)$ la transformée de Fourier du produit de convolution entre $S_{mn}(z)$ et $S_{mn}^*(z)$ avec $S_{mn}(z)$ le produit des fonctions d'onde $F_m(z)$ et $F_n(z)$, car $I_{mn}(q_z)$ n'est pas autre chose que la transformée de Fourier de $S_{mn}(z)$ (voir Chapitre IV).

D'après une propriété de la transformée qui dit que l'intégration entre $-\infty$ et $+\infty$ du produit de deux fonctions est, au facteur multiplicatif 2π près, égale à l'intégration, entre $-\infty$ et $+\infty$, du produit de leurs transformées de Fourier, on peut écrire :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{|I_{mn}(q_z)|^2}{Q^2 + q_z^2} dq_z = 2\pi \int_{-\infty}^{+\infty} \left[\frac{e^{-Q|H|}}{2Q} \int_{-\infty}^{+\infty} S_{mn}(z_1) S_{mn}^*(t-z_1) dz_1 \right] dt,$$

en posant $t-z_1 = z_2$ et après arrangement, il vient :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{|I_{mn}(q_z)|^2}{Q^2 + q_z^2} dq_z = \frac{\Pi}{Q} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} S_{mn}(z_1) S_{mn}^*(z_2) e^{-Q|z_1-z_2|} dz_1 dz_2$$

le second membre de cette équation représente, au facteur multiplicatif Π/Q près, le facteur de forme $H_{mn}(Q)$ (voir Annexe III) qui peut être approximé par :

$$H_{mn}(Q) = \frac{1}{1 + b_{mn} Q}, \text{ si } m = n$$

$$\text{et } H_{mn}(Q) = \frac{0}{b_{mn} Q^2 + \frac{\Pi^2(m^2 + 2m - n^2 - 2n)^2}{4b_{mn}(m^2 + 2m + n^2 + 2n + 2)}}, \text{ si } m \neq n$$

où b_{mn} représente la largeur effective définie au Chapitre IV.

En groupant les résultats précédents et en appliquant la règle d'or de Fermi, la densité de probabilité s'écrit :

$$S_2^{mn}(Q) = \frac{2\Pi}{h} \cdot \frac{C_{op} \left(N_0 + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right)}{2A Q (Hb_{mn} Q)} \delta[\epsilon_{||}(\vec{k}'_{||}) - \epsilon_{||}(\vec{k}_{||}) \pm h\omega_0], \text{ si } m = n \quad (A5.9)$$

et

$$S_2^{mn}(Q) = \frac{2\Pi}{h} \cdot \frac{C_{op} \left(N_0 + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) \delta[\epsilon_{||}(\vec{k}'_{||}) - \epsilon_{||}(\vec{k}_{||}) \pm h\omega_0 - \epsilon_{mn}]}{2A \left[b_{mn} Q^2 + \frac{\Pi^2(m^2 + 2m - n^2 - 2n)^2}{4b_{mn}(m^2 + 2m + n^2 + 2n + 2)} \right]}, \text{ si } m \neq n \quad (A5.10)$$

où $\epsilon_{mn} = \epsilon_m - \epsilon_n$ avec ϵ_m et ϵ_n énergies de sous-bandes.

On en déduit la probabilité de collision par unité de temps :

$$\lambda_2^{mn}(\epsilon_{||}) = \frac{m^* C_{op}}{2h^3} \left(N_0 + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) \int_{-\Pi}^{\Pi} \left[\int_0^{+\infty} \frac{\delta(\epsilon'_{||} - \epsilon_{||} \pm h\omega_0)}{X(1 + b_{mn} X)} d\epsilon'_{||} \right] d\beta$$

dans le cas de la collision intra sous-bande ($m = n$), et

$$\lambda_2^{mn}(\epsilon_{||}) = \frac{m^* C_{op}}{2h^3} \left(N_0 + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) \int_{-\Pi}^{\Pi} \left[\int_0^{+\infty} \frac{\delta(\epsilon'_{||} - \epsilon_{||} \pm h\omega_0)}{b_{mn} X + \frac{\Pi^2(m^2 + 2m - n^2 - 2n)^2}{4b_{mn}(m^2 + 2m + n^2 + 2n + 2)}} d\epsilon'_{||} \right] d\beta$$

dans le cas de la collision inter sous-bande ($m \neq n$),

$$\text{où } X = \sqrt{\frac{2m^*}{h^2} (\epsilon_{||} + \epsilon'_{||} - 2\epsilon_{||} \epsilon'_{||} \cos\beta)}$$

Après intégration par rapport à l'énergie $\epsilon'_{||}$, on a :

$$\lambda_2^{mn}(\epsilon_{||}) = \int_{-\Pi}^{\Pi} f_{mn}(\beta) d\beta \quad (A5.11)$$

et

$$\lambda_2^{mn}(\epsilon_{||}) = \int_{-\Pi}^{\Pi} f_{mn}(\beta) d\beta, \text{ si } m \neq n \quad (A5.12)$$

où

$$f_{mm} = \frac{m^* C_{op}}{2h^3} \left(N_0 + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) \frac{1}{A_{mn}(1 + b_{mn} A_{mn})} \quad (A5.13)$$

et

$$f_{mn} = \frac{m^* C_{op}}{2h^3} \left(N_0 + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) \frac{1}{b_{mn} B_{mn}^2 + \frac{\Pi^2(m^2 + 2m - 2n - n^2)^2}{4b_{mn}(m^2 + 2m + n^2 + 2n + 2)}} \quad (A5.14)$$

$$\text{avec } A_{mn} = \sqrt{\frac{2m^*}{h^2} [2\epsilon_{||} \pm h\omega_0 - 2\epsilon_{||}(\epsilon_{||} \pm h\omega_0) \cos\beta]}$$

$$\text{et } B_{mn} = \sqrt{\frac{2m^*}{h^2} [2\epsilon_{||} \pm h\omega_0 - \epsilon_{mn} - 2\epsilon_{||}(\epsilon_{||} \pm h\omega_0 - \epsilon_{mn}) \cos\beta]}$$

L'intégrale (A5.12) se calcule analytiquement sans difficulté:

$$\lambda_2^{mn}(\varepsilon_{||}) = \frac{m^* C_{op} (N_o + \frac{1}{2} + \frac{1}{2})}{2\hbar^2 \left[C_{mn}^2 h + 4C_{mn} m^* (2\varepsilon_{||} - h\omega_0) + 4b_{mn}^2 \omega_0^2 m^{*2} \right]^{1/2}} \quad (A5.15)$$

$$\text{où } C_{mn} = \frac{\pi^2 (m^2 + 2m - 2n - n^2)^2}{4b_{mn} (m^2 + 2m + 2n + n^2 + 2)}$$

Par contre, l'intégration (A5.11) ne peut être menée de façon analytique. De ce fait, la valeur de $\lambda_2^{mn}(\varepsilon_{||})$ est préalablement calculée par une méthode numérique pour chaque valeur d'énergie discrète. Les résultats ainsi obtenus sont mis en mémoire dans un fichier. Dans le programme de simulation, les probabilités de collision se calculent par interpolation.

La détermination de l'angle de déviation β est assez simple dans le cas de la collision intersous-bandes, mais présente une difficulté technique due aux spécificités du modèle utilisé dans le cas de la collision intrasous-bande.

a) cas de la collision intrasous-bande

En effet, on sait qu'après une telle collision, l'angle est distribué selon la fonction normalisée (A5.5).

En général, pour déterminer β , on résoud l'équation (A5.4) en fonction du paramètre retiré au hasard entre 0 et 1.

Or, dans le cas présent, il ne nous a pas été possible d'intégrer analytiquement la fonction (A5.13).

Pour contourner ce genre de difficulté, on fait appel habituellement à la méthode de rejection de Von Neumann [55].

Dans cette méthode, deux nombres sont tirés au hasard, l'un X_1 entre $-\pi$ et $+\pi$ et l'autre X_2 entre 0 et le maximum de $P_{mm}(\beta)$, c'est-à-dire P en l'occurrence. Si X_2 est inférieur à $P_{mm}(X_1)$, X_1 est alors retenu comme valeur de l'angle β ; sinon un autre couple de nombres X_1 et X_2 est tiré au hasard. On peut donc déterminer par cette procédure l'angle β . Mais elle présente un inconvénient dans le cas présent par le fait que, comme le montre la figure A5.1 qui représente la fonction de distribution $P_{mm}(\beta)$, l'aire sous la courbe est très faible par rapport à l'aire sous la droite $y=P_{mm}(0)$ entre $-\pi$ et $+\pi$, ce qui signifie que la probabilité qu'un couple de valeurs (X_1, X_2) représente les coordonnées d'un point sous la courbe est très réduite et que l'obtention d'un angle β nécessiterait un grand nombre de tirages inutiles.

Pour surmonter cette difficulté, on introduit une modification qui permettra de diminuer le nombre de tirages. Cette modification consiste à remplacer la droite $Y = P_{mm}(0)$ entre 0 et π par une fonction $g(\beta)$ judicieusement choisie telle que $P(0) \gg g(\beta) \gg P(\beta)$ et qu'elle soit analytiquement intégrable.

On procédera de la façon suivante: on tire au hasard un nombre r entre 0 et 1, puis on calcule le nombre X_1 par la relation:

$$r = \frac{\int_0^{X_1} g(\beta) d\beta}{\int_0^{\pi} g(\beta) d\beta} \tag{A5.16}$$

X_1 étant connu, on calcule $g(X_1)$ et tire au hasard un nombre X_2 entre 0 et $g(X_1)$. Si $X_2 < P(X_1)$, X_1 est retenu comme valeur de β sinon une nouvelle valeur de r sera tiré au hasard.

Pour $g(\beta)$, nous avons choisi la fonction suivante:

$$g(\beta) = P(0) \left[\frac{P(\pi)}{P(0)} \right]^{\beta/\pi} \quad (\text{A5.17})$$

Dans ce cas, la relation (A5.14) peut alors se mettre sous la forme:

$$X_1 = \frac{\text{Ln} \left\{ 1+r \left(\frac{P(\beta)}{P(0)} - 1 \right) \right\}}{\text{Ln} \left[\frac{P(\pi)}{P(0)} \right]} \quad (\text{A5.18})$$

Une fois déterminée la valeur de β , on la multiplie au hasard par +1 ou -1, car β est en réalité compris entre $-\pi$ et $+\pi$. La parité de $P(\beta)$ nous autorise cette façon de faire.

b) cas de la collision intersous-bande

La fonction de distribution (éq. 5.13) étant analytiquement intégrable, on peut déterminer l'angle de déviation β en résolvant directement l'équation (A 5.4). Soit r un nombre tiré au hasard entre 0 et 1, le cosinus de l'angle de déviation β est donné par:

$$\cos\beta = \frac{1-t^2}{1+t^2} \quad (\text{A5.19})$$

où

$$t_{mn} = \left(\frac{X_{mn} + Y_{mn}}{X_{mn} - Y_{mn}} \right)^{1/2} \operatorname{tg}\left(\frac{\pi r}{2}\right)$$

avec

$$X_{mn} = \frac{\pi^2 (m^2 + n^2)^2}{2b_{mn} (m^2 + n^2)} + \frac{m^* b_{mn}}{\hbar^2} \left(2\varepsilon_{||} \pm h\omega_0 - \varepsilon_{mn} \right)$$

et

$$Y_{mn} = \frac{-2m^* b_{mn}}{\hbar^2} \varepsilon_{||} (\varepsilon_{||} \pm h\omega_0 - \varepsilon_{mn})$$

On en déduit que:

$$\sin\beta = \sqrt{1 - \cos^2\beta}$$

Mais il faut multiplier, au hasard, la valeur de $\sin \beta$ ainsi calculée par +1 ou -1, car l'angle de déviation β est en réalité entre $-\pi$ et $+\pi$

I.2 Collision acoustique

L'élément de matrice à trois dimensions s'écrit [30] :

$$M_3(Q, q_z) = \left(\frac{\int \mathbb{I}^2 a_{KB}^T}{v \rho_s^2} \right)^{1/2} \quad (A5.20)$$

où \mathbb{I} est le potentiel de déformation acoustique, s la vitesse du son et ρ la masse volumique du matériau.

En portant cette expression dans l'équation (A5.6), il vient:

$$|M_2^{mm}(Q)|^2 = \frac{\int \mathbb{I}^2 a_{KB}^T}{2A b_{mm} \rho_s^2} \quad (A5.21)$$

Pour tenir compte de l'effet d'écran, nous utilisons la méthode présentée en annexe VI (éq.A6.12). La densité de probabilité s'en déduit directement par la Règle d'or de Fermi (éq.4.4). On calcule enfin la probabilité de collision par unité de temps en fonction de l'énergie électronique à l'aide de la formule (A5.1). Mais il ne nous a pas été possible de mener cette intégration de façon analytique. Une procédure numérique a donc été mise en oeuvre pour évaluer la probabilité de collision par unité de temps.

I.3 Collision piézoélectrique

L'élément de matrice à trois dimensions s'écrit [30] :

$$M_3(Q, q_z) = C_{pie}^{1/2} \frac{1}{(Q^2 + q_z^2)^2} \quad (A5.22)$$

où

$$C_{pie} = \frac{e^2 P^2 K_B T}{8 \pi^3 v \epsilon \epsilon_s}$$

On en déduit à partir de l'équation (A5.6) le carré de l'élément de matrice bidimensionnel:

$$|M_2^{mm}(Q)|^2 = \frac{e^2 p^2 K_B T}{16 \pi^3 A \epsilon_0 \epsilon_s Q (1 + b_{mm} Q)} \quad (A5.23)$$

De nouveau, on applique la formule (A6.12) pour prendre en compte l'effet d'écran. Puis à l'aide de la Règle d'or de Fermi (éq.4.4) et de la relation (A5.1), on calcule la probabilité de collision par unité de temps en fonction de l'énergie de l'électron. Le calcul a été effectué de façon numérique, étant donné qu'il ne nous pas été possible de le faire analytiquement.

II. Collisions avec les impuretés ionisées

Au début de notre travail, nous avons utilisé le modèle de Lee et al. [65] pour décrire l'interaction avec les impuretés ionisées. Mais ce modèle présente l'inconvénient qu'il se limite au cas d'une seule sous-bande. Il nous a fallu donc le généraliser au cas d'un nombre de sous-bandes quelconque. A cet effet, nous avons repris le travail de Siggia et al. [56] pour adapter le formalisme général proposé par ces auteurs dans le cas de couche d'inversion en silicium au cas de l'hétérostructure.

En raison de la modulation de dopage dans la structure étudiée ici, on doit discerner les collisions sur les "impuretés éloignées" (les ions de la couche AlGaAs fortement dopée) de celles dues aux "impuretés locales" (les ions résiduelles de la couche AsGa non dopée). Les calculs qui vont suivre ne concernent que l'interaction intrasous-bande, l'interaction intersous-bande étant négligée (voir chapitre IV).

II.1 Cas des collisions sur les impuretés éloignées

L'élément de matrice non écranté relatif au potentiel coulombien dû à un ion placé en z s'écrit:

$$|M_{mn}(Q, z_0)| = \int \frac{e^2 \psi_{m, \vec{k}_{||}}(x, y, z) \psi_{n, \vec{k}_{||}}(x, y, z)}{\epsilon_0 \epsilon_s (x^2 + y^2 + z^2)^{1/2}} dx dy dz \quad (A5.24)$$

où $\psi_{m, \vec{k}_{||}}(x, y, z)$ et $\psi_{n, \vec{k}_{||}}(x, y, z)$ sont les fonctions d'onde (3.3).

Il est clair que $|M_{mn}(Q, z)|$ ne peut être évalué de façon analytique, étant donné que les fonctions d'onde sont déterminées numériquement. Il nous a paru intéressant de chercher une expression analytique approchée pour exprimer l'élément de matrice. A cet effet, nous avons essayé de remplacer dans (A5.24) la fonction d'onde exacte par celle du puits rectangulaire profond de largeur égale à $3b_{mn}$, b_{mn} étant la largeur effective de la sous-bande m du puits réel

(éq.4.7). Dans tous les cas considérés jusqu'à présent, cette approximation s'est avérée satisfaisante; l'erreur commise est en général inférieure à 15%. L'élément de matrice s'écrit alors approximativement:

$$|M_{mm}(Q, Z_0)| = \frac{2\pi^{2(m+1)^2} [\exp(3b_{mm}Q) - 1] \exp(-QZ_0)}{3\varepsilon_0 \varepsilon_s b_{mm} Q [(3b_{mm}Q)^2 + 4\pi^{2(m+1)^2}]}$$
 (A5.25)

Pour tenir compte de l'effet d'écran, nous avons utilisé le formalisme présenté en annexe VI. En portant l'élément de matrice non échanté (A5.25) dans l'équation(A6.12), on obtient directement l'élément de matrice échanté:

$$|M_{mm}^e(Q, Z_0)| = \frac{|M_{mm}(Q, Z_0)|}{1 + \frac{SH(Q)}{Q}}$$
 (A5.26)

On en déduit par la Règle d'or de Fermi la densité de probabilité relative à un ion placé en Z_0 :

$$S_{mm}(Q, Z_0) = \frac{2\pi}{h} |M_{mm}^e(Q, Z_0)|^2 \delta(\varepsilon'_{||} - \varepsilon_{||})$$
 (A5.27)

Pour obtenir la densité de probabilité relative à l'ensemble des ions, il faut sommer toutes les $S_{mm}(Q, Z_0)$:

$$S_{mm}(Q) = \int S_{mm}(Q, Z_0) N_d(Z_0) dZ_0$$
 (A5.28)

où

$$N_d(Z_0) = \begin{cases} N_d^+ & \text{si } L \geq Z_0 \geq S_p \\ 0 & \text{ailleurs.} \end{cases}$$

avec L la position de la grille et S_p l'espaceur. Après calcul, nous avons:

$$S_{mm}(Q) = \frac{N_d^+}{2} \left[\frac{2 \Pi^2 (m+1)^2 \exp(3b_{mm} Q)}{3 \epsilon_0 \epsilon_s b_{mm} Q (3b_{mm} Q)^2 + 4 \Pi^2 (m+1)^2} \right]^2 \times$$

$$\left[1 + \frac{SH(Q)}{Q} \right] \left[\exp(-2S_p Q) - \exp(2QL) \right] \delta(\epsilon_{11}' - \epsilon_{11}) \quad (A5.29)$$

II.2.Cas des collisions avec les impuretés locales

Les impuretés locales sont supposées être réparties uniformément entre l'interface et le substrat. En fait, seules celles situées dans la région du puits de potentiel exercent une action coulombienne efficace sur les électrons à deux dimensions; celles se trouvant hors de la région du puits n'ont, de par leur éloignement spatial et leur faible concentration supposée dans le modèle, qu'une influence négligeable sur la dynamique des électrons à deux dimensions. Aussi avons-nous supposé que la répartition des impuretés locales au regard des électrons confinés dans le puits est de la forme:

$$N_a^-(z_0) = \begin{cases} N_a^- & \text{si } 0 \leq z_0 \leq 3b_{mm} \\ 0 & \text{ailleurs} \end{cases}$$

au regard des électrons confinés dans la sous-bande m.

L'élément de matrice non écranté relatif au potentiel induit par un ion placé en Z_0 se met, bien entendu, également sous la forme (A5.19). De la même façon que dans le cas précédent, il nous a été possible d'obtenir une expression analytique approchée pour l'élément de matrice à l'aide des fonctions d'onde du puits rectangulaire profond de largeur égale à $3b_{mm}$:

$$|M_{mm}(Q, Z_0)| = \frac{2\pi^2(m+1)^2}{\epsilon_0 \epsilon_s [Q'^2 + 4\pi^2(m+1)^2] Q'} \left[2 - \exp(-Q'Z_0/3b_{mm}) - \right. \\ \left. \left[\exp -Q'(1 - Z_0/3b_{mm}) \right] + \frac{Q'^2}{\pi^2(m+1)^2} \sin [(m+1) Z_0/3b_{mm}] \right]$$

(A5.30)

avec $Q' = 3b_{mm} Q$

L'application de la formule (A6.12) permet d'en déduire l'élément de matrice écranté. Puis on calcule par la Règle d'or de Fermi (4.4) la densité de probabilité $S_{mm}(Q, z_0)$. La somme de toutes les $S_{mm}(Q, z_0)$ donne la densité de probabilité à l'ensemble des ions:

$$S_{mm}(Q) = \frac{6 \pi b_{mm} N_a^-}{h} \left[\frac{2 \pi (m+1)^2}{\epsilon_0 \epsilon_s Q' (Q'^2 + 4 \pi^2 (m+1)^2)} \right]^2 \left[4 + \frac{3}{8} \left(\frac{Q'}{\pi m} \right)^4 + \frac{8}{Q'} \exp(-Q') + \frac{(1 - \exp(-2Q'))}{Q'} + \frac{2Q'^2}{(m\pi)^2} \left[1 - \frac{4n^2 \pi^2 (1 - \exp(-Q'))}{Q'(Q'^2 + 4m^2 \pi^2)} \right] \right] \times \quad (A5.31)$$

$$\delta(\epsilon'_{||} - \epsilon_{||})$$

Connaissant les densités de probabilité (A529) et (A531), on peut calculer la probabilité de collision par unité de temps en fonction de l'énergie de l'électron par la relation (A5.1). L'intégration par rapport à l'énergie ne pose aucun problème; par contre, celle par rapport à l'angle de déviation, il ne nous a pas été possible de la mener de façon analytique. La probabilité de collision a donc été déterminée numériquement. Pour ce qui est de la détermination de l'angle de déviation, la méthode de rejet de Von Neumann a été utilisée.

ANNEXE VI

CONTRIBUTION A L'ETUDE DE L'EFFET D'ECRAN

En présence d'un potentiel de collision, le gaz électronique est déformé par l'effet combiné de celui-ci et du potentiel induit par la déformation du gaz électronique lui-même. La déformation du gaz électronique a pour effet d'écranter le potentiel de collision, si bien que le potentiel effectif vu par un électron est différent de celui auquel l'électron serait soumis, s'il n'était pas placé dans un nuage d'électrons.

Le comportement d'écrantage d'un gaz d'électrons peut être décrit par la fonction diélectrique dans la mesure où la réponse du gaz électronique à l'application d'un potentiel extérieur est linéaire, ce qui est le cas quand le potentiel appliqué est assez faible. Cette condition est en fait la même que celle qui assure la validité de la Règle d'or de Fermi.

Dans le cas d'un système à trois dimensions, la fonction diélectrique est donnée par la fameuse équation de Lindhard [51] :

$$\epsilon(\vec{q}, \omega) = 1 - \lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{e^2}{v\epsilon_0 q^2} \sum_{\vec{k}} \frac{f_0(\vec{k}+\vec{q}) - f_0(\vec{k})}{\epsilon(\vec{k}+\vec{q}) - \epsilon(\vec{k}) - \hbar\omega - i\hbar\alpha} \quad (\text{A6.1})$$

où ω est la fréquence du potentiel appliqué et $f(x)$ la fonction de distribution de Fermi-Dirac.

L'élément de matrice écranteré s'exprime alors sous la forme :

$$M_e(\vec{q}) = \frac{M(\vec{q})}{\epsilon(\vec{q}, \omega)} \quad (\text{A6.2})$$

où $M(\vec{q})$ est l'élément de matrice nu ou non écranteré.

A cause de la structure à multiples sous-bandes, la relation reliant l'élément de matrice écranté à celui non écranté est beaucoup plus compliqué dans le cas d'un système quasi bidimensionnel tel que nous étudions ici. En effet, dans ce cas, l'élément de matrice écranté $M_{2e}^{mn}(Q)$ est donné par [56].

$$M_{2e}^{mn}(Q) = M_2^{mn}(Q) + \frac{e^2}{2\epsilon\epsilon_0\epsilon_s Q} \sum_{MN} H_{MNmn}(Q) \Pi_{MN}(Q, \omega) M_{2e}^{MN}(Q) \quad (A6.3)$$

ce qui équivaut à :

$$\sum_{MN} \epsilon_{MNmn}(Q, \omega) M_{2e}^{MN}(Q) = M_2^{mn}(Q) \quad (A6.4)$$

où la fonction diélectrique $\epsilon_{MNmn}(Q, \omega)$ s'écrit :

$$\epsilon_{MNmn}(Q, \omega) = -\frac{e^2}{2\epsilon_0\epsilon_s} H_{MNmn}(Q) \Pi_{MN}(Q, \omega) + \delta_{Mm} \delta_{Nn} \quad (A6.5)$$

avec δ_{ij} symbole de Kronecker.

Dans les expressions (4.7) et (4.9), $H_{MNmn}(Q)$ est le facteur de forme :

$$H_{MNmn}(Q) = \int_{-\infty}^{+\infty} dz \int_{-\infty}^{+\infty} dz' F_M(z) F_N(z') F_m(z) F_n(z') e^{-Q|z-z'|} \quad (A6.6)$$

avec $F_i(z)$ ($i = M, N, m, n$) fonction d'onde enveloppe (3.3), et $\Pi_{MN}(Q, \omega)$ la polarisabilité :

$$\Pi_{MN}(Q, \omega) = 2 \sum_{\vec{k}} \frac{f[\epsilon_N + \epsilon(\vec{k})] - f[\epsilon_M + \epsilon(\vec{k} + \vec{Q})]}{\epsilon(\vec{k}) + \epsilon_M - \epsilon(\vec{k} + \vec{Q}) - \epsilon_M + \hbar\omega + i'\alpha} \quad (A6.7)$$

Etabli dans l'approximation de la phase aléatoire, le formalisme que nous venons de présenter est tout à fait général, mais difficile à intégrer dans le programme de simulation, ce qui est prohibitif. Il est introduit ici pour servir de base à des approximations simplificatrices. A cet effet, il convient de considérer séparément le cas de collisions inélastiques et le cas de collisions élastiques.

a. Cas des collisions élastiques

Comme dans le cas des couches d'inversion en silicium [44], nous admettons la validité de l'approximation de la grande longueur d'onde (Q très faible). Nous négligeons les collisions intersous-bandes qui sont en général très faibles. Dans ce qui suit, nous avons donc toujours $m=n$.

Q étant faible, si la condition $M=N=m$ n'est pas réalisée, le facteur de forme est voisin de 0 en raison de l'orthogonalité des fonctions d'onde. Ceci implique que les termes sous le signe somme dans l'équation (A6.3) tels que cette condition n'est pas satisfaite sont relativement faibles devant le terme qui satisfait cette condition. Dans le but de simplifier au maximum les calculs dans une première approche de l'hétérostructure, nous négligeons tous ces termes, ce qui nous conduit à la relation simplifiée suivante:

$$M_{2e}^{mm}(Q) = M_2^{mm}(Q) + \frac{e^2}{2\epsilon_0 \epsilon_s Q} H_{mm}(Q) M_{2e}^{mm}(Q) \Pi_{mm}(Q, 0) \quad (A6.8)$$

Par ailleurs, la polarisabilité $\Pi_{mm}(Q, 0)$ peut approximativement se mettre sous forme analytique. En effet, Q étant faible, on peut écrire:

$$\Pi_{mm}(Q, 0) = 2 \sum_k \frac{df [\epsilon_m + \epsilon(\vec{k})]}{d[\epsilon_m + \epsilon(\vec{k})]} \quad (A6.9)$$



ce qui donne:

$$\begin{aligned} \Pi_{mm}(Q, 0) &= \frac{2}{4\pi^2} \int \frac{d f[\epsilon_m + \epsilon(\vec{k})]}{d [\epsilon_m + \epsilon(\vec{k})]} d^2\vec{k} \\ &= \frac{m^*}{h^2} \frac{-1}{1 + \exp \frac{\epsilon_m - \epsilon_f}{K_B T}} \end{aligned} \quad (A6.10)$$

Posons:

$$S = \frac{e^2 m^*}{2\epsilon_0 \epsilon_s h^2} \frac{1}{1 + \exp \frac{\epsilon_m - \epsilon_f}{K_B T}} \quad (A6.11)$$

L'équation (A6.8) devient:

$$M_{2e}^{mm}(Q) = \frac{M_2^{mm}(Q)}{1 + \frac{S H_{mm}(Q)}{Q}} \quad (A6.12)$$

b. Cas des collisions inélastiques ($\omega = 0$)

Ce cas ne concerne dans le présent modèle que l'interaction optique polaire. Contrairement à ce qui se passe dans le cas de l'AsGa en volume où l'approximation de la grande longueur d'onde peut encore être utilisée [57], en l'occurrence, celle-ci n'est plus valable. Faute de pouvoir trouver un modèle simple, l'effet d'écran n'a pas été pris en compte dans l'évaluation des probabilités de collisions pour l'interaction optique polaire. Nous signalons cependant que un certain nombre d'études relatives à ce sujet a été déjà entreprise par plusieurs auteurs [58-60]. Mais leurs résultats paraissent quelque peu contradictoires et de fait ne nous permettent pas d'évaluer l'erreur commise en négligeant l'effet d'écran.



Résumé

Dans ce travail, nous proposons un modèle permettant d'étudier les phénomènes de transport dans les gaz d'électrons à deux dimensions dans les hétérojonctions par la méthode de Monté-Carlo.

Dans le premier chapitre, nous abordons les aspects qualitatifs du modèle établi ici. Le second chapitre donne une présentation générale de la simulation mise en oeuvre au cours de ce travail. Le troisième chapitre est consacré à la description des structures de bandes et de la méthode de résolution auto-consistante de l'équation de Schrödinger permettant la détermination des états électroniques à deux dimensions dans le puits de potentiel. Le quatrième chapitre étudie les différents types de collision mis en jeu dans la simulation. Dans le cinquième chapitre, nous reportons les résultats relatifs à la mobilité et à la vitesse de dérive. Le sixième chapitre résume les divers aspects de la diffusion mis en évidence par la simulation.

Mots-clés:

Composants électroniques
Transistor à effet de champ
Transport électronique
Méthode de Monté-Carlo
Hétérojonctions