

N° d'ordre : 504

50376  
1990  
55

70865

50376  
1990  
55

**THESE**

**Présentée à l'Université des Sciences et Techniques de Lille  
Flandres Artois**

pour obtenir le titre de

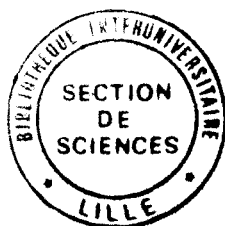
**DOCTEUR DE L'UNIVERSITE**

**Spécialité : ELECTRONIQUE**

par

**Loïc de SAINT POL**

**Modélisation de l'effet tunnel résonant dans les hétérostructures  
double barrière en vue d'applications analogiques très hautes fréquences**



Soutenue le 27 février 1990 devant la commission d'examen

Membres du jury :

MM. E. CONSTANT, Président  
D. LIPPENS, Directeur de thèse  
J.C. PORTAL, Rapporteur  
P.A. ROLLAND, Rapporteur  
B. VINTER, Examineur  
B. DEVEAUD, Examineur  
M. LANNOO, Examineur

**A mes parents,**

## Remerciements

Ce travail a été effectué au Centre Hyperfréquences et Semiconducteurs de l'Université des Sciences et Techniques de Lille Flandres Artois, dirigé par Monsieur le Professeur G. SALMER.

Monsieur le professeur E. CONSTANT me fait l'honneur de présider la Commission d'examen et je l'en remercie sincèrement.

Je tiens à exprimer toute ma reconnaissance envers Monsieur D. LIPPENS qui m'a proposé ce sujet de recherche et en a assuré la direction avec une patience et un dynamisme continus.

Je remercie vivement Monsieur le Professeur J.C. PORTAL de l'Université de Toulouse et Monsieur le Professeur P.A. ROLLAND de l'Université de Lille, qui me font l'honneur de juger ce travail et d'en être les rapporteurs.

Je suis particulièrement reconnaissant à Monsieur B. VINTER, ingénieur de recherches au L.C.R. de Thomson, et à Monsieur B. DEVEAUD, ingénieur de recherches au C.N.E.T Lannion, de s'être intéressés et de juger ce travail.

Je tiens à remercier Monsieur M. LANNOO, directeur de recherches à l'I.S.E.N de Lille, d'avoir accepté de faire partie de ce jury.

Je remercie également le personnel du Centre Interuniversitaire de Traitement de l'Information, en particulier Monsieur Y. TINEL.

Mes remerciements vont également à Madame DERUDDER qui a assuré la composition de ce mémoire réalisé au CITI à l'aide du logiciel de traitement de texte MINT, et à Monsieur J.P. DEHORTER qui en a assuré la reproduction.

La partie expérimentale de cette étude a bénéficié des collaborations tant extérieures qu'internes. Je tiens à exprimer ma reconnaissance à toutes les personnes ayant contribué à ce travail, notamment au CHS à Mesdames E. DELOS, A. FATTORINI, S. LEPILLIET et M. MIENS, à Messieurs J.L. LORRIAUX, E. PLAYEZ, L. RACZY, J. VANBREMEERSCH et D. VANDERMOERE, au CNET à Messieurs F. CLEROT, B. LAMBERT et B. SERMAGE, à l'INSA à Monsieur A. CELESTE.

J'aimerais enfin exprimer toute ma gratitude à tous mes amis du laboratoire pour la sympathie qu'ils m'ont témoignée pendant ces années passées au C.H.S.

# Table des Matières

<b>1. Outil numérique</b>	<b>5</b>
1.1 Position du problème	5
1.1.1 Spécificité : détermination de la transmission à toutes les énergies	5
1.1.2 Hypothèses	5
1.2 Approche analytique de la structure à double barrière à l'équilibre	7
1.2.1 Niveaux liés dans un puits rectangulaire encadré par des barrières de hauteurs quelconques	7
1.2.2 Courbe $T = f(E_z)$ d'une double barrière à l'équilibre	8
1.2.2.1 Construction interférentielle	8
1.2.2.2 Forme des pics de transmission : Approximation Lorentzienne	9
1.2.2.3 Transmission hors résonance, contraste de transmission	12
1.3 Formalismes pour l'obtention de la courbe de transmission	13
1.3.1 Présentation des formalismes des matrices de transfert	13
1.3.2 Matrices de Ando	14
1.3.3 Matrice de Ricco	17
1.3.4 Validité de l'approximation Marches Plates	19
1.4 Courant traversant la double barrière	20
1.4.1 Obtention des caractéristiques de conduction	20
1.4.1.1 Expression du courant	20
1.4.1.2 Nécessité d'une méthode d'intégration à pas variables	21
1.4.2 Approximation analytique du courant pic	22
1.4.3 Dépendance du courant vallée, contraste en courant	23
 <b>2. Caractéristiques statiques</b>	 <b>24</b>
2.1 Fonctions d'onde et transmission de la double barrière	24
2.1.1 Résultats à l'équilibre	24
2.1.1.1 Niveaux quasi-liés	24
2.1.1.2 Courbes enveloppes de la fonction de transmission	25
2.1.1.3 Fonctions d'onde	26
2.1.2 Résultats sous polarisation	26
2.1.2.1 Destruction de la symétrie	27
2.1.2.2 Abaissement de l'énergie apparente des niveaux	27
2.1.3 Détermination expérimentale du 1er niveau	30
2.2 Caractéristiques statiques en courant $I(V)$	33
2.2.1 Allure des caractéristiques	33
2.2.1.1 Analyse de la supply function	33
2.2.1.2 Caractéristiques $I(V)$ théoriques	34

2.2.2	Approximation analytique du courant $J_{\text{vallée}}$	35
2.2.3	Contraste en courant théorique	37
2.3	Optimisation des structures	38
2.3.1	Compromis entre $J_{\text{pic}}$ et le contraste en courant, critère d'optimisation	38
2.3.2	Guides pour le choix d'un système de matériaux	40
<b>3.</b>	<b>Réaction de charge d'espace et perte de cohérence</b>	<b>44</b>
3.1	Réaction de charge d'Espace dans la zone active	44
3.1.1	Réaction de charge d'espace dans la double barrière : objectifs et moyens	44
3.1.2	Méthode de calcul "Runge-Kutta"	45
3.1.2.1	Mise en forme de l'équation de Schrödinger	45
3.1.2.2	Algorithme	46
3.1.2.3	Initialisation de la méthode, calcul des coefficients de réflexion et de transmission	47
3.1.2.4	Traitement des discontinuités aux interfaces	48
3.1.2.5	Stabilité numérique	49
3.1.3	Répartition des charges dans la zone active	50
3.1.3.1	Calcul exact	50
3.1.3.2	Estimation de la charge piégée	51
3.1.4	Calcul auto-consistant	51
3.1.4.1	Méthode de calcul	52
3.1.4.2	Résultats	53
3.1.4.3	Bistabilité intrinsèque	53
3.2	Potentiels hors de la zone active	55
3.2.1	Niveau de Fermi dans l'émetteur	55
3.2.2	Traitement de la couche d'accumulation	56
3.2.2.1	Position du problème	56
3.2.2.2	Méthode de résolution	56
3.2.2.3	Résultats	57
3.2.3	Caractérisation par Magnétotunneling	58
3.3	Formalisme du courant partiellement séquentiel	60
3.3.1	Nécessité d'un tel formalisme	60
3.3.2	Mise en oeuvre du formalisme de Jonson	61
3.3.2.1	Présentation	61
3.3.2.2	Signification physique du facteur $\gamma$	62
3.3.2.3	Modifications induites sur la fonction de transmission	63
3.3.3	Modifications de la caractéristique $J(V)$	64
3.3.3.1	Comportement des extrêmes du courant	64
3.3.3.2	Contraste en courant	64
3.3.4	Comparaison théorie-expérience	65
<b>4.</b>	<b>Analyse dynamique</b>	<b>67</b>

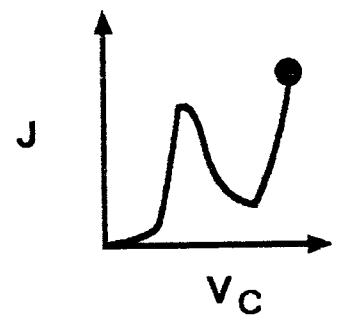
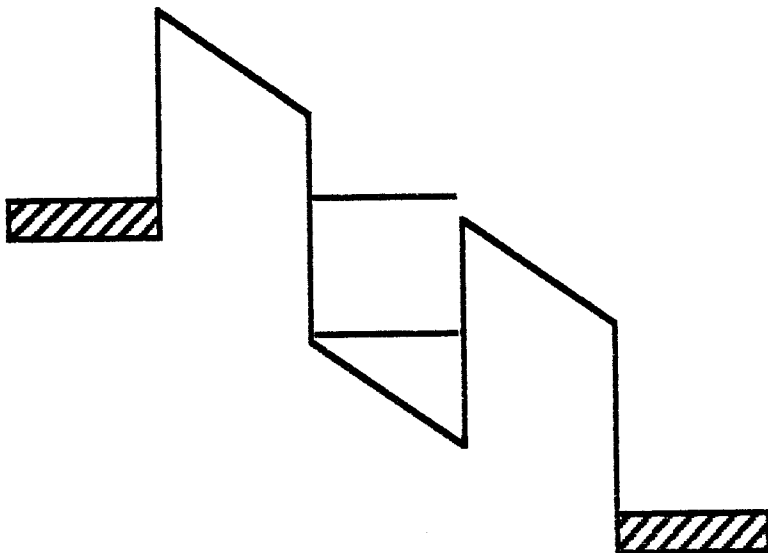
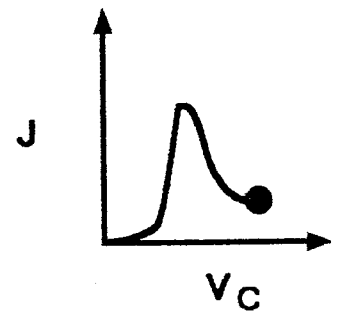
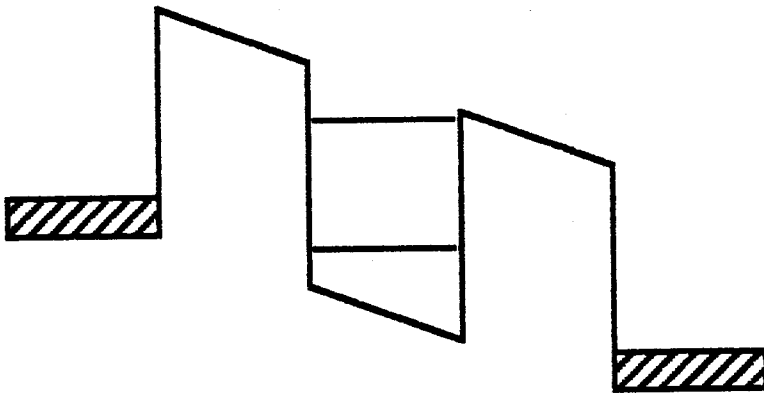
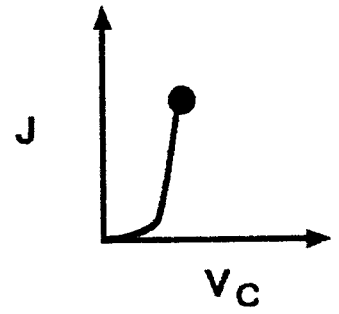
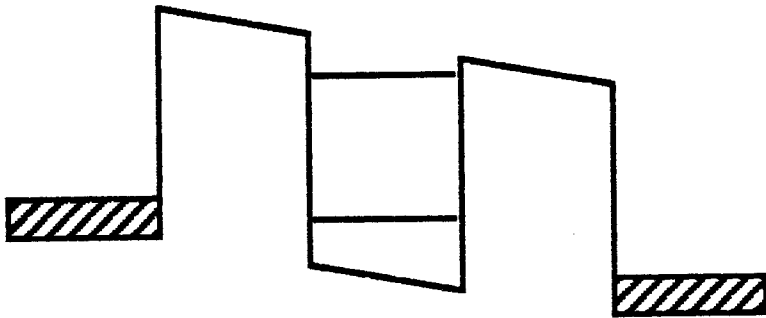
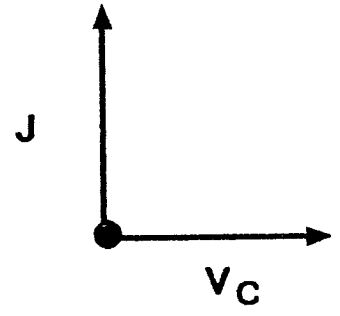
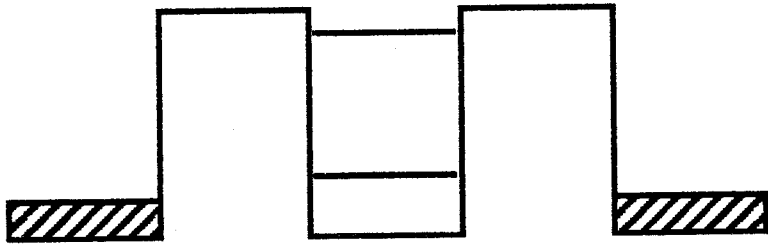
4.1	Durée de vie du niveau fondamental	67
4.1.1	Détermination analytique	67
4.1.2	Caractérisation par photoluminescence résolue en temps	69
4.1.2.1	Principes	69
4.1.2.2	Limites de la méthode	70
4.1.2.3	Résultats expérimentaux	71
4.1.3	Etude sous polarisation	74
4.2	Modélisation dynamique	76
4.2.1	Résolution de l'équation de Schrödinger dépendant du temps.	76
4.2.1.1	Initialisation	76
4.2.1.2	Méthode explicite	77
4.2.1.3	Méthode implicite	78
4.2.1.4	Mise en oeuvre	79
4.2.2	Résultats	80
4.2.2.1	Illustration des mécanismes mis en jeu	80
4.2.2.2	Temps caractéristiques	81
4.2.2.3	Probabilité transmise	82
<b>5.</b>	<b>Application à d'autres structures</b>	<b>84</b>
5.1	La triple barrière	84
5.1.1	Méthode de calcul de la transmission en traitement cohérent	84
5.1.2	Méthode de calcul partiellement cohérente	86
5.1.3	Fonction de transmission	87
5.2	Double barrière incluant une perturbation dans le puits	89
5.2.1	Présentation des structures	89
5.2.1.1	Classification	89
5.2.2	Outil numérique	89
5.2.3	Influence de l'amplitude de la perturbation sur les énergies des niveaux résonants	90
5.2.4	Réalisations expérimentales	91
5.3	Autres structures	92

## Introduction

Les premières études sur l'effet tunnel résonant dans les hétérostructures semiconductrices ont été menées dès le début des années 70. Dans une publication devenue célèbre [1], R. TSU et L. ESAKI ont démontré théoriquement qu'il est possible d'obtenir, en tirant parti des effets de résonance, une Résistance Différentielle Négative (RDN) dans les caractéristiques de conduction des structures à multipuits quantiques. Ce concept est alors vérifié expérimentalement pour des hétérostructures à double barrière par Chang [2]. Cependant les difficultés technologiques de l'époque, notamment le manque de maîtrise dans l'épitaxie des couches de quelques mailles atomiques d'épaisseur, ont fait que l'effet de RDN n'était clairement visible qu'à très basse température sur la courbe de conductance.

Ce n'est qu'à partir de 1983 que grâce aux progrès effectués dans les techniques d'épitaxie, par jet moléculaire principalement, la réalisation de composants présentant une RDN importante à température ambiante est devenue possible. Suite aux travaux de Sollner [3], qui a reporté la détection d'un signal à 2.5 THz par une diode à tunnel résonant, un regain d'intérêt formidable s'est porté sur le sujet, tant aux plans théorique qu'expérimental.

La motivation essentielle des études est double. Tout d'abord, l'inertie de l'effet de tunnel résonant devrait se situer, pour des structures optimisées, à l'échelle de la dixième de picoseconde du fait de la combinaison des temps de passage dans les barrières et de piégeage dans le puits. C'est donc un effet physique dont le temps de réponse est théoriquement un ordre de grandeur en dessous de ceux de phénomènes physiques plus conventionnels (inertie d'avalanche, de transit...). Ensuite, il devrait être possible d'obtenir, en raison de la sélectivité du phénomène, un rapport très important entre courant maximum ( $J_{pic}$ ) et courant minimum ( $J_{vallée}$ ). Depuis la démonstration en 1985 [4] par Sakaki d'une RDN significative à température ambiante sur des structures à double barrière Al As/Ga as, le rapport  $J_{pic}$  sur  $J_{vallée}$  n'a cessé d'augmenter. Les valeurs les plus importantes sont proches de 4 pour des structures Ga Al As/Ga As [5], de 6 pour les matériaux In Al As/In Ga As [6]. La fabrication de structures contraintes In GA As/Al As a porté ce rapport à 30 [7] très récemment.





Parallèlement et grâce à ces études de matériaux, de nombreuses propositions de composants nouveaux intégrant des structures à double barrière sont parues dans la littérature. Elles concernent tant les dipôles avec pour objectifs principaux la génération, la multiplication, la détection d'ondes hyperfréquences [8] aux fréquences millimétriques et submillimétriques que les tripôles dont les applications visent plus particulièrement la logique rapide [9].

Dès lors la diode double barrière s'impose comme le premier élément d'une famille de composants pour lesquels les phénomènes quantiques interviennent directement en tant que principe de fonctionnement et non plus comme un élément perturbateur ou limitatif des performances.

Le principe de fonctionnement d'une structure tunnel résonant à double barrière peut se comprendre à l'aide de la figure 1.

Les porteurs situés dans le puits voient leur énergie quantifiée du fait de leur confinement par les barrières.

Les probabilités de passage par effet tunnel des zones classiquement interdites ne sont pas négligeables car les barrières sont de faibles épaisseurs.

Sous l'action d'une polarisation extérieure, il est possible d'amener le premier niveau discret du puits en regard des domaines d'énergie fortement peuplés dans l'émetteur. Il en résulte pour les porteurs incidents une augmentation très importante de la probabilité de franchissement de la double barrière (effet de résonance), et donc une augmentation du courant traversant la structure.

A plus forte tension, il n'y a plus correspondance entre les énergies des porteurs dans la zone d'émetteur et le 1er niveau quantique, ce qui entraîne une chute brutale des valeurs de transmission.

Des pics successifs de la transmission apparente de la double barrière peuvent être observés au passage de chaque niveau discret du puits quantique.

Notre travail s'inscrit dans le cadre des études de modélisation de la diode à double barrière en vue d'applications analogiques très hautes fréquences.

La spécificité de ces structures se situe dans les faibles temps de réponse, les densités de courant

élevées tout en préservant le contraste en courant, les réactions de charge d'espace possibles, l'existence de contributions non résonantes importantes.

Pour décrire l'ensemble de ces phénomènes, que nous avons pris en compte par différents modèles, nous avons opté pour l'articulation suivante.

Le premier chapitre est consacré essentiellement à l'exposé des formalismes des matrices de transfert, qui permettent d'accéder aux fonctions d'ondes, aux coefficients de réflexion et de transmission en et hors équilibre, et aux valeurs de densité de courant. Le formalisme des matrices de transfert proposé par Ricco et Azbel [10] est plus particulièrement détaillé. La double barrière est alors modélisée par le produit de 7 matrices complexes  $2 \times 2$ . Nous montrons que les pics de transmission peuvent être approximés par une lorentzienne, ce qui nous donne une estimation des valeurs de courant maximum. La dépendance des extrêmes de courant en fonction des transmissions des 2 barrières est également discutée.

Dans le chapitre 2, nous focalisons notre étude sur les évolutions des niveaux d'énergie de confinement, des transmissions en et hors résonance en fonction des données structurelles des hétérojonctions. Nous considérons plus particulièrement l'incidence du champ électrique interne déformant le potentiel, sur les valeurs d'énergie de résonance (stark-shift). Les résultats théoriques sont alors corroborés par une étude expérimentale de la commande en tension du niveau fondamental relativement à l'énergie de Fermi dans l'émetteur. Pour les transmissions, nous précisons le passage entre états de forte et faible conduction, ce qui nous permet de proposer des expressions simplifiées des valeurs pic et vallée de courant. Les critères d'optimisation du contraste en courant, par un choix judicieux des matériaux et de la géométrie, complètent ces aspects.

Dans le chapitre 3 nous considérons deux effets qui se révèlent primordiaux pour les composants, à savoir la réaction de charge d'espace et la prise en compte d'un transport de charge partiellement non cohérent. La réaction de charge d'espace se manifeste à l'intérieur du puits et dans la zone d'émetteur. Pour décrire les modifications de potentiel qui en résultent nous avons été amenés à développer des logiciels spécifiques calculant de manière autoconsistante le potentiel et la charge

électronique. Les effets de bistabilité intrinsèque, qui résultent des différences dans les valeurs de charges accumulées dans le puits pour les états passant et non passant, sont étudiés notamment en accédant aux densités surfaciques d'électrons à partir de leur probabilité de présence. Pour la couche d'accumulation, où les mécanismes diffusifs jouent un rôle prépondérant, nous nous limitons à un traitement dans l'approximation de Thomas Fermi. Le transport partiellement non cohérent est étudié en se basant sur le formalisme phénoménologique proposé par Jonson et Grincwajg [11]. Nous recherchons par cette étude principalement à décrire de façon réaliste les transmissions non résonantes à l'origine des rapports  $J_{pic} / J_{vallée}$  mesurés bien en deçà des prévisions théoriques. Les nouvelles estimations des contrastes de courant sont alors confrontées à l'expérience.

La variable temps est introduite dans le 4ème chapitre, qui est consacré à l'étude des limitations fréquentielles intrinsèques des diodes tunnel résonant. Dans ce but nous avons mis au point un logiciel de simulation de l'interaction d'un paquet d'ondes gaussien avec la double barrière. Le calcul est basé sur la résolution numérique de l'équation de Schrödinger unidimensionnelle dépendante du temps. Les principaux phénomènes mis en jeu (interférences dans l'émetteur, piégeage et fuite au travers des barrières) sont alors illustrés à partir des probabilités de présence dans une représentation espace-temps. Ces résultats théoriques sont comparés à des expériences de photoluminescence résolue en temps, effectuées sur des doubles barrières Ga Al As à faible concentration d'Aluminium.

Dans le dernier chapitre, nous montrons que les formalismes de calcul développés sont parfaitement applicables à des structures pour lesquelles on cherche à réaliser une ingénierie de la fonction d'onde. Les cas spécifiques de la triple barrière, et de la double barrière incluant un puits secondaire, sont plus particulièrement abordés.

- [1] R. TSU et L. ESAKI  
Appl. Phys. Lett., 11, 1973, p 562
- [2] L.L. CHANG, L. ESAKI, R. TSU  
Appl. Phys. Lett., 12, 1974 p 593
- [3] T.C.L.G. SOLLNER, W.D. GOODHUE, P.E. TANNENWALD, C.D. PARKER,  
D.D. PECK  
Appl. Phys. Lett. 49, 1983 p 588
- [4] M. TSUCHIYA, H. SAKAKI, J. YOSHINO  
Jap. Journal of Appl. Phys., 24, 1985, p L 466
- [5] C.I. HUANG, M.J. PAULUS, C.A. BOZADA, S.C. DUDLEY, K.R. EVANS, C.E. STUTZ,  
R.L. JONES, M.E. CHENEY  
Appl. Phys. Lett. 51, 1987, p 121
- [6] Y. SUGIYAMA, T. INATA, S. MUTO, Y. NAKATA, S. HYAMIZU  
Appl. Phys. Lett. 52, 1988, p 314
- [7] T. BROEKAERT, W. LEE, C.G. FONSTAD  
Appl. Phys. Lett 53, 1988, p 1545
- [8] T.C.L.G. SOLLNER, E.R. BROWN, H.Q. LE  
à paraître dans Physics of Quantum Electron Devices, édité par F. Capasso - Springer -  
Verlag
- [9] A. SHIBATOMI, N. YOKOYAMA  
Solid State Technology, Nov. 87, p 101
- [10] B. RICCO, M. YA, AZBEL  
Phys. Rev. B, 29, 1984 p 1970
- [11] M. JONSON, A. GRINCWAJG  
Appl. Phys. lett. 51, 1987, p 1729

## **CHAPITRE 1**

# Chapitre 1

## Outil numérique

### 1.1 Position du problème

#### 1.1.1 Spécificité : détermination de la transmission à toutes les énergies

L'effet tunnel résonant peut être théoriquement observé pour tout état en forte interaction avec un continuum. La figure 1-1 schématise les variations spatiales de bandes de conduction et de valence. Les dimensions géométriques du puits de potentiel sont comparables à la longueur d'onde de de Broglie associée à l'électron. L'énergie des porteurs est dans ce cas quantifiée.

Le couplage avec le continuum est important : les électrons ont une probabilité non négligeable de passage par effet tunnel au travers des zones classiquement interdites. On parle dans ce cas d'état quasi-lié, ou métastable, par opposition au confinement strict que l'on peut observer dans une structure à gaz bidimensionnel.

Il y a donc possibilité de transport vertical par effet tunnel. L'objectif de la modélisation sera d'accéder aux caractéristiques électriques. Dans ce but l'on procède en 2 temps. Tout d'abord nous devons déterminer les probabilités de transmission, et ceci pour toute valeur de l'énergie des porteurs incidents. En pratique, il nous faut donc résoudre l'équation de Schrödinger, et accéder ainsi à la fonction d'onde sur l'ensemble de la structure. On en déduit alors les coefficients de transmission. Le calcul du courant s'effectue en pondérant la fonction de distribution en énergie des porteurs incidents par les probabilités de transmission ainsi calculées.

#### 1.1.2 Hypothèses

Dans l'ensemble du travail, nous nous placerons sous les hypothèses suivantes :

- Nous considérerons une structure à double barrière constituée de couches semiconductrices dont les dimensions transverses sont infinies. Cela revient à négliger les effets de bords. En

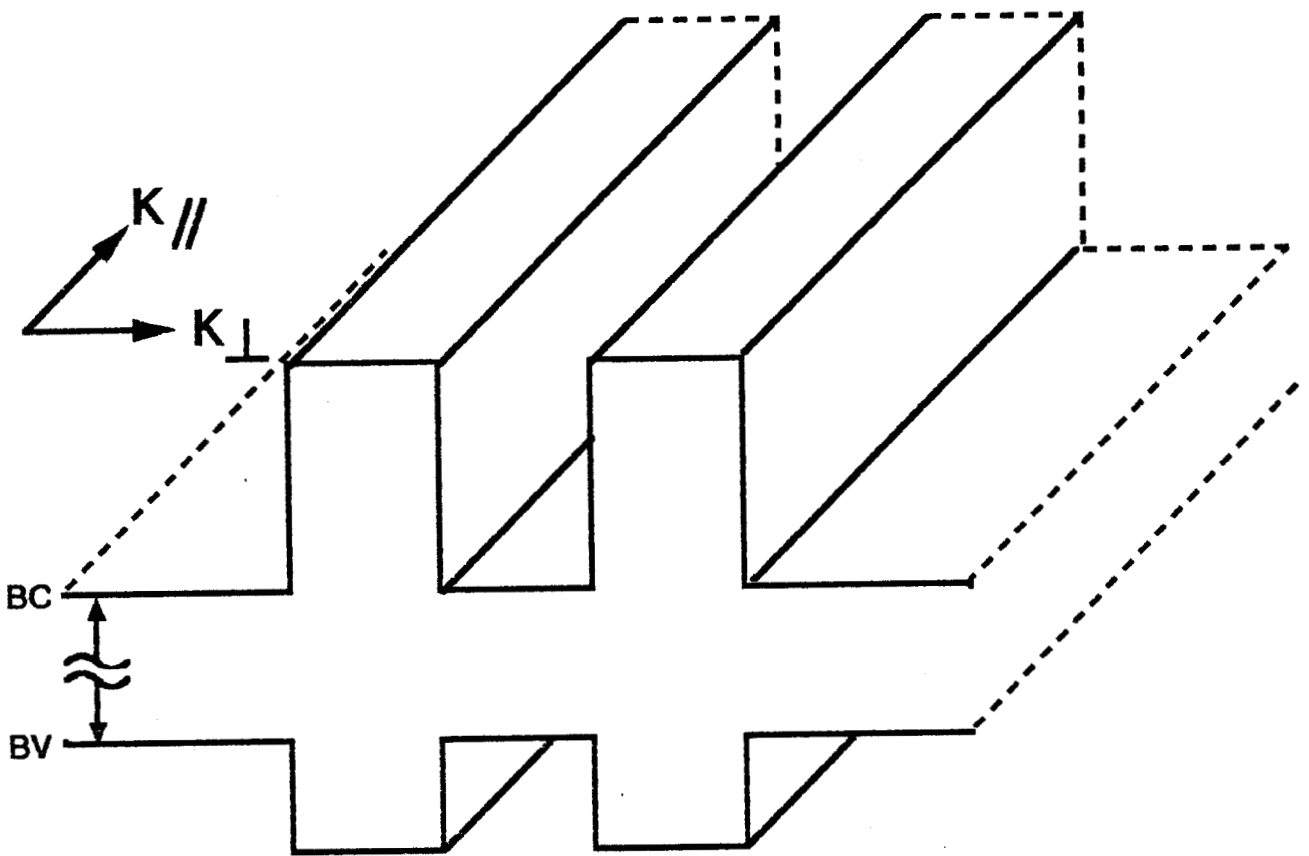


Fig. 1.1 : Bandes de conduction et de valence d'une Double Barrière à l'équilibre. Ce schéma inclut les hypothèses d'interfaces planes et abruptes entre les différentes couches épitaxiées. ( La largeur de la bande interdite n'est pas représentée à la même échelle que les discontinuités de bandes.)

outre, les transitions entre les différents matériaux seront modélisées par des interfaces abruptes. Nous supposerons de plus l'absence de fluctuations d'interfaces.

- Seul le transport des électrons sera pris en compte, dans la mesure où les trous sont minoritaires dans la plupart des applications. Ainsi la modélisation de la seule bande de conduction sera nécessaire. Le profil de cette bande est la somme d'un potentiel électrique et du potentiel cristallin discontinu, fixé par la géométrie de la structure.
- Nous supposerons que le formalisme de la masse effective est applicable y compris pour des hétérostructures de quelques couches atomiques d'épaisseur. La masse effective des électrons  $m^*$  sera prise identique à celle définie dans le matériau en 3 dimensions. Les récents travaux de Cohen et Fang [1] semblent justifier cette hypothèse. Enfin, nous considérerons que cette masse ne dépend pas de l'énergie, quoique la non parabolicité de structure de bande puisse être introduite.
- Le transport dans les directions parallèles et perpendiculaire aux couches sera considéré comme totalement indépendant. De cette manière, l'hamiltonien du système peut être scindé en 2 opérateurs, dont seul le terme décrivant la fonction d'onde suivant la direction de croissance sera exploité. Pour simplifier les notations cette fonction d'onde sera notée  $\varphi$ .

Compte tenu de ces hypothèses, l'équation générale unidimensionnelle, permettant le calcul de la fonction d'onde s'écrit :

$$i\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial t} = \frac{-\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial z^2} + V(z) \varphi \quad (1-1)$$

En régime indépendant du temps, celle-ci se simplifie sous la forme :

$$\frac{-\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial z^2} + [V(z) - E_z] \varphi = 0 \quad (1-2)$$

Dans cette équation, la fonction d'onde suivant la direction de croissance (axe  $z$ ) ne dépend que de l'énergie longitudinale  $E_z$ , des données géométriques et des paramètres des matériaux employés (masse effective, hauteur des barrières qui déterminent le potentiel  $V(z)$ )



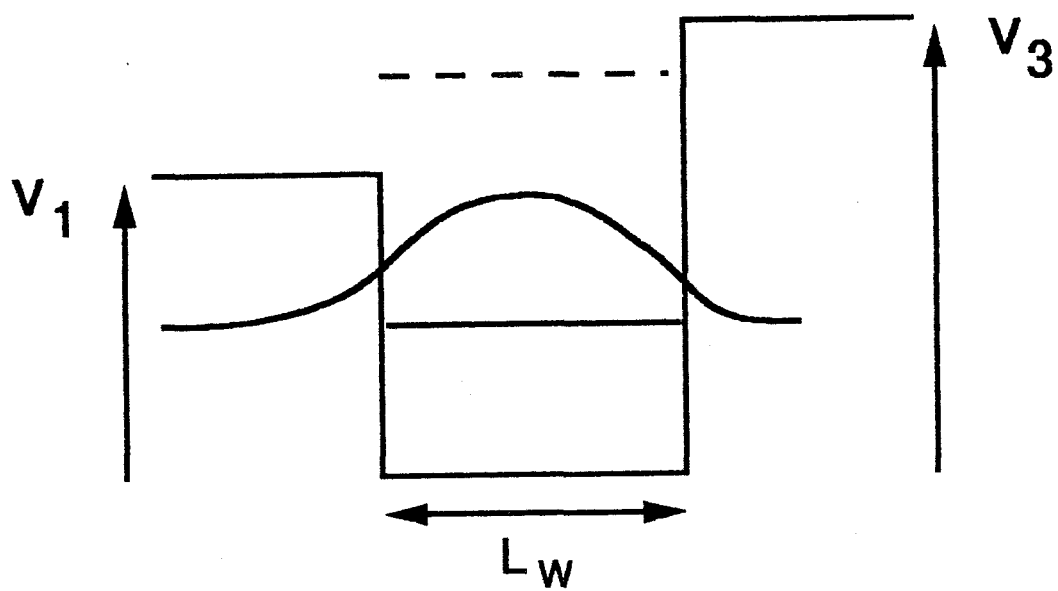


Fig. 1.2 : Exemple de confinement dans un puits quantique encadré par des barrières de hauteurs différentes et d'épaisseur infinie.

## 1.2 Approche analytique de la structure à double barrière à l'équilibre

### 1.2.1 Niveaux liés dans un puits rectangulaire encadré par des barrières de hauteurs quelconques

Il est possible, dans une première approche analytique, de déterminer les niveaux d'énergie d'une structure à double barrière en supposant que la fuite des électrons est rendue impossible par des barrières de largeur infinie.

La hauteur finie de ces barrières autorise la pénétration de la fonction d'onde de part et d'autre du puits. La figure 1-2 schématise ce cas général de confinement strict dans un puits (région 2) de largeur  $L_w$  encadré par 2 barrières dissymétriques (régions 1 et 3) de hauteurs respectives  $V_1$  et  $V_3$ .

La largeur infinie des barrières, zones classiquement interdites pour l'énergie correspondant à ces niveaux, nous imposent les conditions aux limites  $\varphi(z) = 0$  pour  $z \rightarrow \pm\infty$ . De ce fait, les seules formes de fonctions d'ondes acceptables dans les régions 1 et 3 s'écrivent :

$$\text{région 1 : } \varphi_1(z) = A_1 e^{+\alpha_1 z} \quad Z \leq L_w/2$$

$$\text{région 3 : } \varphi_3(z) = A_3 e^{-\alpha_3 z} \quad Z \geq L_w/2$$

Les coefficients d'atténuation de la fonction d'onde sont donnés par  $\alpha_1 = \sqrt{2m_1^*(V_1 - E_z)}/\hbar$  et  $\alpha_3 = \sqrt{2m_3^*(V_3 - E_z)}/\hbar$  où les  $m_i^*$  ( $i = 1 \text{ à } 3$ ) sont les masses effectives dans les différentes régions.

Dans la région 2,  $\varphi$  peut se mettre sous la forme :

$$\varphi_2(z) = A_2 e^{ik_2 z} + B_2 e^{-iK_2 z} \quad -L_w/2 \leq z \leq L_w/2$$

Le coefficient de propagation  $K_2$  étant donné par :  $K_2 = \sqrt{2m_2^*E_z}/\hbar$

L'application des conditions de continuité de  $\varphi$  et de  $\frac{1}{m} \frac{\partial \varphi}{\partial z}$  aux 2 interfaces conduit à l'équation transcendante [2].

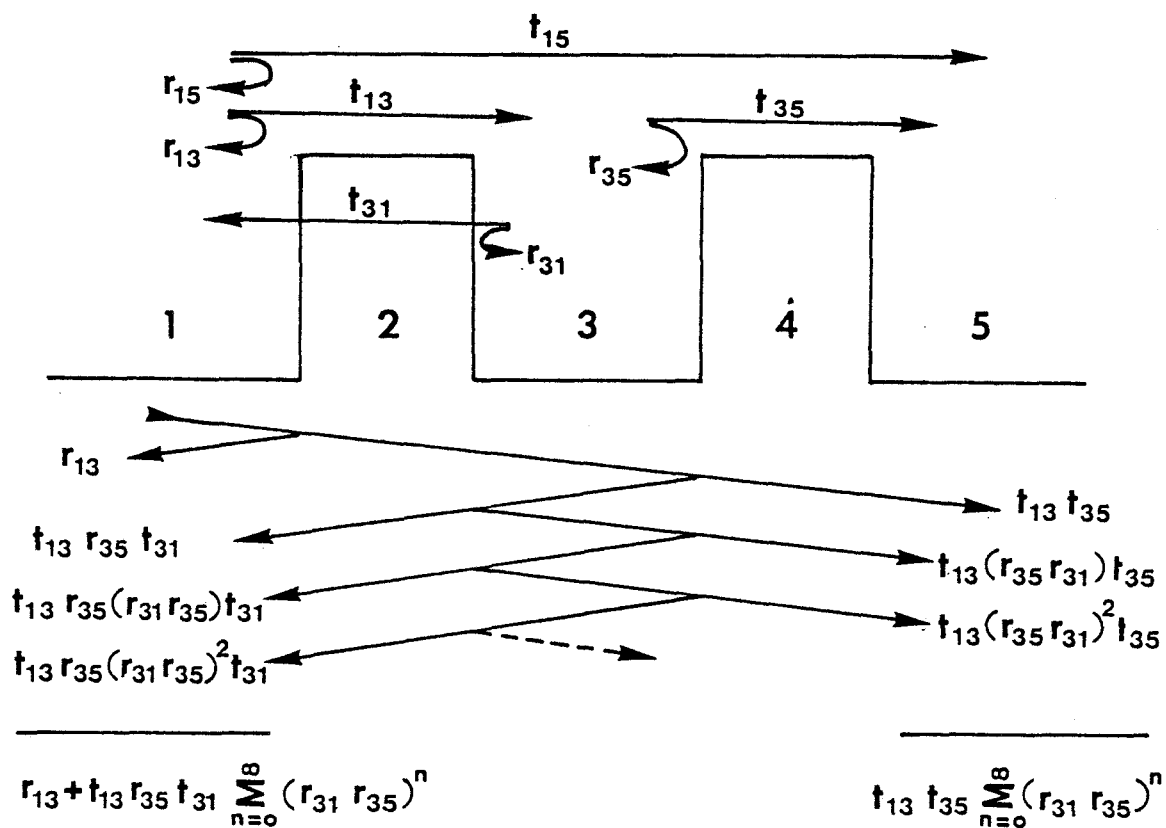


Fig 1.3 : Méthode d'obtention des coefficients de transmission et de réflexion en amplitude  $t_{15}$  et  $r_{15}$  présentés par la double barrière, à partir des coefficients relatifs à chacune des deux barrières prises isolément.

$$\operatorname{tg} K_2 L_W = \left( 1 + \frac{\alpha_1}{\alpha_3} \right) / \left( \frac{m_3^* K_2}{m_2^* \alpha_3} - \frac{m_2^* \alpha_1}{m_1^* K_2} \right) \quad (1-3)$$

dont les racines sont les énergies  $E_n$  des niveaux d'indice  $n=1,2,\dots$

Pour le cas d'un puits symétrique ( $V_1 = V_3$ ), le nombre  $n$  des niveaux d'énergie inférieure à la hauteur des barrières, est donné par la relation

$$n = \operatorname{Int} \left( 1 + \frac{\sqrt{2m_2^* V_1}}{\pi \hbar} L_W \right) \quad (1-4)$$

Lorsque la largeur  $L_W$  tend vers zéro, le niveau fondamental affleure le haut du puits de potentiel.

On vérifie que lorsque les barrières sont de hauteur infinie ( $\alpha_i = 0, i = 1 \text{ et } 3$ ), on retrouve la condition de quantification  $k_2 L_W = n \pi$ . Pour chaque niveau lié :

$$E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2m_2^* L_W^2} \quad (1-5)$$

le puits contient  $n$  demies longueurs d'ondes associées aux porteurs.  $E_n$  varie alors en  $1 / L_W^2$

## 1.2.2 Courbe $T = f(E_z)$ d'une double barrière à l'équilibre

### 1.2.2.1 Construction interférentielle

Le fait que la transmission des porteurs au travers d'une double barrière soit de nature résonante peut se comprendre à partir de la construction interférentielle de leur fonction d'onde. La figure 1-3 va nous permettre d'illustrer cet aspect. Nous définirons respectivement les coefficients complexes de transmission  $t_{ij}$  et de réflexion  $r_{ij}$  de la fonction d'onde entre les différentes régions notées 1 à 5. Ces

coefficients doivent être exprimés par rapport au même plan de référence. L'onde incidente est décomposée à chaque fois qu'elle subit une réflexion et une transmission sur une barrière.

La réflexion et la transmission globale de la structure apparaissent à chaque extrémité sous la forme d'une suite géométrique infinie de termes.

On obtient :

$$r_{15} = r_{13} + \frac{t_{13}r_{35}t_{31}}{1 - r_{35}r_{31}} \quad (1-6)$$

$$t_{15} = \frac{t_{13}t_{35}}{1 - r_{35}r_{31}} \quad (1-7)$$

Lorsque l'énergie des porteurs incidents coïncide avec celle d'un des niveaux quasi-liés, la différence de phase qui correspond à 1 aller/retour dans le puits, notée  $2\Phi$ , est multiple de  $2\pi$ . La sommation en sortie côté collecteur des probabilités de présence de 2 porteurs représentatifs de la population électronique, ayant effectué un nombre différent d'allers/retours dans le puits, est constructive. Simultanément l'on assiste à une destruction interférentielle côté émetteur.

Dans le cas contraire (la différence de phase n'est plus multiple de  $2\pi$ ), il y a destruction interférentielle côté collecteur, et construction côté émetteur.

### 1.2.2.2 Forme des pics de transmission : Approximation Lorentzienne

Les expressions complexes des eqs 1-6 et 1-7 peuvent conduire à des coefficients de transmission de la probabilité de présence des porteurs mis sous la forme :

$$T_{15} = \frac{T_{13}T_{35}}{1 + R_{13}R_{35} - 2\sqrt{R_{13}R_{35}} \cos 2\Phi} \quad (1-8)$$

où les coefficients réels  $T_{ij}$  et  $R_{ij}$  représentent les probabilités de transmission et de réflexion des porteurs. Ces coefficients en puissance  $T$  et  $R$  sont reliés aux coefficients en amplitude  $t$  et  $r$  par :

$$T_{ij} = t_{ij} t_{ij}^* \times \frac{K_j}{K_i} \times \frac{m_i^*}{m_j^*} \quad (1-9)$$

$$R_{ij} = r_{ij} r_{ij}^* \quad (1-10)$$

La valeur résonante est alors :

$$T_{res} \approx \frac{4T_{13}T_{35}}{(T_{13} + T_{35})^2} \quad (1-11)$$

On note que pour des barrières symétriques à l'équilibre  $T_{res}$  est égale à l'unité : la double barrière est totalement transparente pour les énergies privilégiées correspondant aux niveaux quasi-liés du puits.

Lorsque l'énergie des porteurs est voisine de l'énergie de résonance  $E_n$  correspondant au  $n^{\text{ième}}$  niveau, on peut avoir une première idée des variations de  $T_{15}$  en effectuant un développement limité de  $\cos 2\Phi$ , les autres paramètres étant supposés constants à leur valeur déterminée à l'énergie  $E_n$ .

En introduisant  $\beta = \frac{\partial(2\Phi)}{\partial E}$  il vient :

$$2\Phi(E = E_n + dE) = \beta dE + 2n\pi \quad (1-12)$$

$$\cos 2\Phi = 1 - \frac{(\beta dE)^2}{2} \quad (1-13)$$

en introduisant (1-13) dans (1-8) on obtient :

$$T_{15} = \frac{T_{13}T_{35}}{(1 - \sqrt{R_{13}R_{35}})^2 + (\beta dE)^2} \quad (1-14)$$

qui peut être mis sous une forme lorentzienne, de largeur totale à mi hauteur  $\Gamma = \frac{T_{13}+T_{35}}{\beta}$

$$T_{15}(E) = T_{res} \times \frac{1}{1 + \left[ \frac{E_n - E}{\Gamma/2} \right]^2} \quad (1-15)$$

La formule introduit  $\beta = \frac{\partial(2\Phi)}{\partial E}$ . En pratique, ce paramètre peut être exprimé en fonction de l'énergie de résonance  $E_n$ .

Introduisons dans ce but la largeur effective d'occupation de la fonction d'onde [3] sur un niveau d'indice  $n$  :

$$d_{eff} = \frac{n\lambda}{2} \approx \frac{n\pi\hbar}{\sqrt{2m^*E_n}} \quad (1-16)$$

où  $m^*$  est la masse effective dans le puits.

Pour une énergie  $E = E_n + dE$ , nous considérerons que  $d_{eff}$  reste identique à sa valeur définie à la résonance. La phase  $2\Phi$  vaut alors :

$$2\Phi = 2d_{eff} \frac{\sqrt{2m^*E_n}}{\hbar} \quad (1-17)$$

d'où l'on tire :

$$\beta = \frac{d_{eff} \sqrt{2m^*}}{\hbar \sqrt{E_n}} = \frac{n\pi}{E_n} \quad (1-18)$$

La largeur à mi-hauteur s'exprime maintenant

$$\Gamma = \frac{E_n}{n\pi} (T_{13} + T_{35}) \quad (1-19)$$

Les résonances sont d'autant moins sélectives que l'ordre des niveaux est élevé. Notons cependant que pour des niveaux très proches de la hauteur de barrière, le fort couplage avec le continuum déformera les pics de résonance.

### 1.2.2.3 Transmission hors résonance, contraste de transmission

Pour les énergies situées entre 2 niveaux quasi-liés du puits, la transmission de la double barrière prend des valeurs très faibles (transmission non résonante). On repère particulièrement la transmission Hors Résonance qui correspond à la condition sur la phase  $2\Phi$  :  $\cos 2\Phi = -1$ . L'équation (1-8) se réduit pour ce cas particulier à :

$$T_{\text{hors res}} = \frac{T_{13}T_{35}}{(1 + \sqrt{R_{13}R_{35}})^2} \approx \frac{T_{13}T_{35}}{4} \quad (1-20)$$

C'est la transmission que l'on obtiendrait en accolant les 2 barrières.

- **Contraste de transmission**

Pour le niveau fondamental, on définit le contraste de transmission par  $T_{\text{res}} / T_{\text{Horsres}}$ . Une expression approchée est donnée par  $\frac{1}{(T_{13} + T_{35})^2}$ , en négligeant les variations des transmissions des 2 barrières entre les énergies correspondant aux cas de résonance et hors résonance.

Lorsque les 2 barrières sont fortement dissymétriques, le rapport des transmissions peut s'écrire :



$$T_{res} / T_{horsres} = \frac{1}{T_{max}^2} \quad (1-21)$$

où  $T_{max}$  désigne la transmission de la barrière la plus transparente. Ces résultats sont conformes à l'analyse de Ricco [4].

### 1.3 Formalismes pour l'obtention de la courbe de transmission

Les formules analytiques proposées précédemment permettent de saisir le sens des évolutions des probabilités de transmission. En pratique, il est cependant nécessaire de calculer rigoureusement les courbes de transmission pour toutes les énergies hors équilibre.

Nous aurons recours dans ce cas à des méthodes de résolution numériques de l'équation de Schrödinger, dont la plus élaborée sera présentée dans le chapitre 3 traitant des réactions de charge d'espace. Pour les études systématiques relatives à l'influence des paramètres structuraux, les fonctions de transmission ont été obtenues en utilisant le formalisme des matrices de transfert que nous allons à présent considérer.

#### 1.3.1 Présentation des formalismes des matrices de transfert

Le formalisme des matrices de transfert consiste à déterminer de façon itérative les coefficients complexes  $C^+$  et  $C^-$  des parties incidentes et réfléchies des fonctions d'onde dans les différentes zones constituant la structure. Une application de cette méthode avait été exposée dans l'article original de Tsu et Esaki, dans le cadre de l'approximation Marches Plates. L'espace est alors discrétisé en une série de zones de potentiel constant sur lesquelles l'équation de Schrödinger admet des solutions analytiques simples. Les fonctions d'ondes  $y$  sont des combinaisons linéaires des fonctions sinus et cosinus dans les zones autorisées, et d'exponentielles croissante et décroissante dans les zones interdites.

A chaque interface on vérifie la continuité de la fonction d'onde et de sa dérivée première divisée par la masse effective relative à chacune des 2 zones adjacentes.

Par ailleurs, dans la zone collecteur, (région N) on suppose l'existence d'une seule onde progressive dont on se fixe arbitrairement l'amplitude et la phase, par exemple  $\Phi = e^{iK_N Z}$ , ce qui permet de poser  $C_N^+ = 1, C_N^- = 0$ .

L'obtention des coefficients  $C_0^+$  et  $C_0^-$  dans la zone d'émetteur passe par la résolution d'un système d'équations à 2 N inconnues qui peut se mettre sous une forme matricielle.

Les différents formalismes de détermination des fonctions d'onde basés sur les matrices de transfert différent essentiellement par l'espace géométrique décrit par chaque matrice élémentaire.

Dans la plupart des simulations que nous avons effectuées dans l'approximation Marches Plates, nous avons utilisé le formalisme proposé par Ricco [4]. Néanmoins d'autres formes de matrices utilisées par Ando [5] ainsi que celles introduites par Vassel [6] ou par Tsu et Esaki dans leur article original de 1973 [7] ont été proposées.

Les matrices de Tsu et Esaki sont historiquement les premières à avoir été utilisées. Il s'agit d'un formalisme assez général qui permet de traiter le cas d'un super réseau fini. L'amplitude de la transmission est obtenue grâce au produit de matrices élémentaires, elles mêmes résultant de la composition de 3 matrices complexes  $2 \times 2$ .

### 1.3.2 Matrices de Ando

Les matrices proposées par Ando [5] ont été utilisées pour calculer la transmission à travers une barrière de forme quelconque. Chaque matrice permet de modéliser 2 régions englobant une discontinuité de potentiel. La forme générale de ces matrices exprimée pour une discontinuité d'abscisse  $z = a$ , est :

$$T(K, K')(a) = -\frac{1}{2} \begin{bmatrix} (1+\eta)e^{-(K'-K)a} & (1-\eta)e^{-(K'+K)a} \\ (1-\eta)e^{+(K'+K)a} & (1+\eta)e^{+(K'-K)a} \end{bmatrix} \quad (1-22)$$

où  $K$  est relatif à la zone  $Z < a$  où la masse effective des porteurs est  $m^*$   
 $K'$  est relatif à la zone  $Z > a$  où la masse effective des porteurs est  $m'^*$

et  $\eta = \frac{K}{K'} \times \frac{m'^*}{m^*}$

dans une région classiquement autorisée,  $K$  prend la forme  $iK = i \frac{\sqrt{2m^*(E-V)}}{\hbar}$

dans une région classiquement interdite,  $K$  prend la forme  $\alpha = \frac{\sqrt{2m^*(V-E)}}{\hbar}$

Il en résulte que la mise en oeuvre de cette méthode de résolution demande de tester la position relative du sommet des barrières de potentiel, variant avec la tension appliquée, par rapport à l'énergie des porteurs incidents.

Dans le cas général d'une structure présentant  $N$  discontinuités de potentiel, les coefficients  $C_N^+$  et  $C_N^-$  dans la région collecteur sont reliés aux coefficients  $C_0^+$  et  $C_0^-$  dans la région émetteur par la relation matricielle :

$$\begin{bmatrix} C_N^+ \\ C_N^- \end{bmatrix} = T_{tot} \begin{bmatrix} C_0^+ \\ C_0^- \end{bmatrix} \quad (1-23)$$

où  $T_{tot}$  résulte du produit de  $N$  matrices élémentaires. Il vient alors :

$$\begin{bmatrix} C_0^+ \\ C_0^- \end{bmatrix} = T_{tot}^{-1} \begin{bmatrix} C_N^+ \\ C_N^- \end{bmatrix} = \frac{1}{\text{Det } T_{tot}} \begin{bmatrix} T_{22} - T_{12} \\ -T_{21} T_{11} \end{bmatrix} x \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix} = \frac{1}{\text{Det } T_{tot}} \begin{bmatrix} T_{22} \\ -T_{21} \end{bmatrix} \quad (1-24)$$

Les coefficients T et R de transmission et de réflexion de la probabilité de présence présentés par la structure sont alors déduits :

$$T = \frac{1}{|T_{22}|^2} \frac{K_0 m_N^*}{K_N m_0^*} \quad (1-25)$$

$$R = \left| \frac{T_{21}}{T_{22}} \right|^2 \quad (1-26)$$

La manière la plus simple de représenter dans l'approximation Marches Plates la bande de conduction d'une double barrière sous polarisation est de considérer chaque couche épitaxiée comme une zone unique de potentiel constant égal à la moyenne du potentiel sur cette zone. La double barrière est alors décrite en 5 zones.

Quoique cette modélisation puisse paraître très simplifiée, nous verrons qu'elle donne une bonne approximation des caractéristiques de transmission à faible polarisation.

Dans le cas où chacune des 2 barrières constitue une région classiquement interdite, la matrice  $T_{tot}$  s'exprime sous la forme du produit de 4 matrices :

$$T_{tot} = T(\alpha_4, K_5)(d) \times T(K_3, \alpha_4)(c) \times T(\alpha_2, K_3)(b) \times T(K_1, \alpha_2)(a) \quad (1-27)$$

Les différents termes d'indice et de région sont explicités dans la figure 1-4.

Il est important de noter que cette méthode présente l'inconvénient de faire intervenir des termes qui sont des fonctions exponentielles de l'abscisse des discontinuités. Il en résulte que pour des structures dont les dimensions sont très importantes (typiquement  $> 500 \text{ \AA}$ ) il peut apparaître des erreurs numériques dans l'évaluation des termes exponentiels. Dans la mesure où les produits de

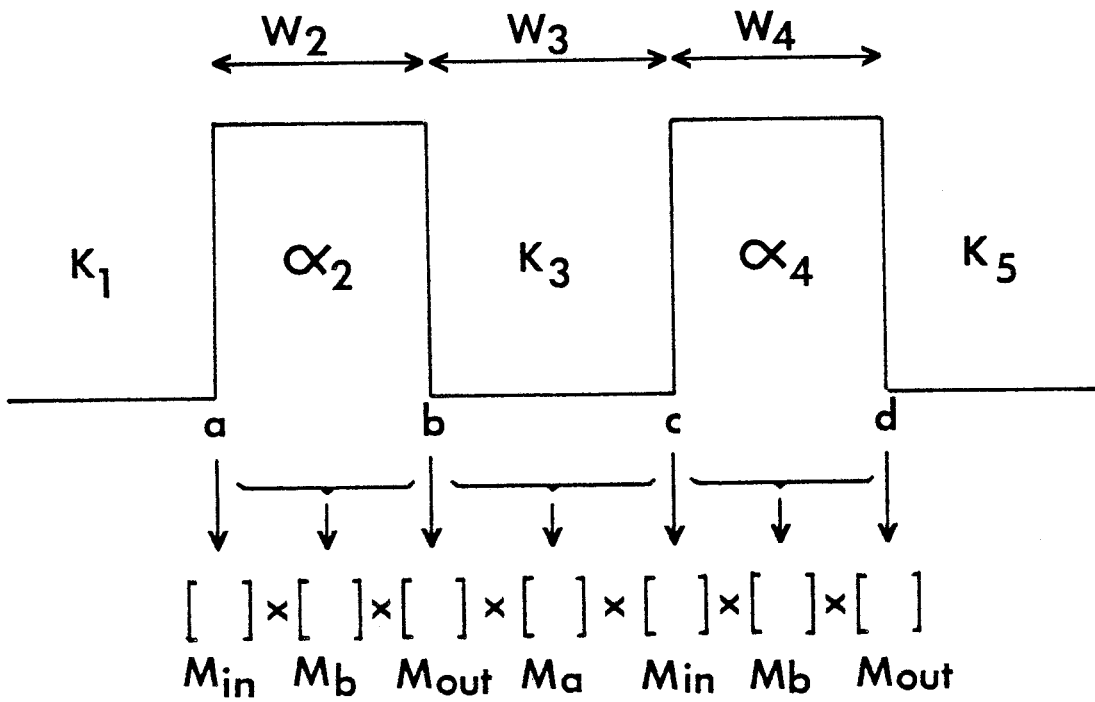


Fig 1.4 : Méthode des matrices de RICCO : Visualisation des régions et interfaces prises en compte par chacune des matrices dans la modélisation de la double barrière.

matrices conduisent à des rapports d'exponentielles de nombres très grands la méthode présente des risques d'instabilité numérique [8].

C'est pourquoi nous lui avons préféré le formalisme proposé par Ricco que nous allons à présent considérer.

### 1.3.3 Matrice de Ricco

Dans le formalisme de matrice de transfert proposé par Ricco [4] on distingue 2 types de matrices : matrices d'interface et matrices de propagation.

- Matrices d'interface

Elles décrivent une discontinuité de potentiel en faisant intervenir les vecteurs d'onde  $K_i$  ou coefficients d'atténuation  $\alpha_i$  de chaque côté de la discontinuité ( $i = 1$  ou  $2$ ), mais ne contiennent pas d'information sur l'abscisse de cette discontinuité.

Ces matrices admettent 4 expressions différentes suivant la nature des 2 zones mises en jeu :

$M_{in}$	décrit l'interface zone autorisée - interdite
$M_{out}$	décrit l'interface zone interdite - autorisée
$M_1$	décrit l'interface zone autorisée - autorisée
$M_2$	décrit l'interface zone interdite - interdite

$$M_{in}(K_1, \alpha_2) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + i \frac{K_1}{\alpha_2} R & 1 - i \frac{K_1}{\alpha_2} R \\ 1 - i \frac{K_1}{\alpha_2} R & 1 + i \frac{K_1}{\alpha_2} R \end{pmatrix} \quad (1-28)$$

$$M_{out}(\alpha_1, K_2) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 - i \frac{\alpha_1}{K_2} R & 1 + i \frac{\alpha_1}{K_2} R \\ 1 + i \frac{\alpha_1}{K_2} R & 1 - i \frac{\alpha_1}{K_2} R \end{pmatrix} \quad (1-29)$$

$$M_1(K_1, K_2) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + \frac{K_1}{K_2} R & 1 - \frac{K_1}{K_2} R \\ 1 - \frac{K_1}{K_2} R & 1 + \frac{K_1}{K_2} R \end{pmatrix} \quad (1-30)$$

$$M_2(\alpha_1, \alpha_2) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + \frac{\alpha_1}{\alpha_2} R & 1 - \frac{\alpha_1}{\alpha_2} R \\ 1 - \frac{\alpha_1}{\alpha_2} R & 1 + \frac{\alpha_1}{\alpha_2} R \end{pmatrix} \quad (1-31)$$

avec  $R = m_2^* / m_1^*$

- Matrices de propagation

Elles décrivent la propagation de la fonction d'onde dans un milieu homogène ( $K = \text{cste}$  ou  $\alpha = \text{cste}$ ). Elles sont de 2 types :

Propagation dans un milieu classiquement autorisé :

$$M_A(K, W) = \begin{pmatrix} e^{-iKW} & 0 \\ 0 & e^{+iKW} \end{pmatrix} \quad (1-32)$$

Propagation dans un milieu classiquement interdit :

$$M_B(K, W) = \begin{pmatrix} e^{-\alpha W} & 0 \\ 0 & e^{+\alpha W} \end{pmatrix} \quad (1-33)$$

où  $W$  désigne la dimension de la région homogène considérée.

Dans le cas de la double barrière,  $M_{tot}$  prend la forme :

$$\begin{aligned}
M_{tot} = & M_{in}(K_1, \alpha_2) \times M_B(\alpha_2, W_2) \times M_{out}(\alpha_2, K_3) \times M_A(K_3, W_3) \\
& \times M_{in}(K_3, \alpha_4) \times M_B(\alpha_4, W_4) \times M_{out}(\alpha_4, K_5)
\end{aligned} \tag{1-34}$$

Le rôle de chaque matrice dans la prise en compte de l'ensemble de la structure est illustré par la figure 1-4.

Cette méthode ne contenant que des termes en  $\exp(iKW)$  ou  $\exp(\alpha W)$  élimine les facteurs d'instabilité de la méthode matricielle précédente. Elle peut donc être appliquée sans inconvénient à des structures longues de type super réseau.

Pour décrire la double barrière, 7 matrices sont nécessaires contre 4 précédemment. Cependant les temps de calcul sont comparables par les 2 méthodes, les éléments des matrices  $M$  sont en effet plus simples à calculer que ceux des matrices  $T$ .

Les 2 méthodes sont équivalentes au point de vue des coefficients de réflexion et de transmission en puissance, qui sont utilisés dans le calcul du courant.

Les coefficients  $R$  et  $T$  sont obtenus dans la méthode de Ricco grâce à (1-25) et (1-26) en remplaçant  $T_{ij}$  par  $M_{ij}$ .

Cependant, il n'est plus possible d'appliquer la relation matricielle (1-23). En effet, les éléments de même emplacement dans les matrices  $T_{tot}$  et  $M_{tot}$  présentent des modules identiques, mais différent par leurs termes de phase.

### 1.3.4 Validité de l'approximation Marches Plates

Pour valider l'approximation Marches Plates, nous la comparons à la solution exacte correspondant au potentiel tilté (linéairement variable par morceaux). Sur la figure 1-5, nous donnons les résultats de calcul de la transmission en fonction de la tension appliquée pour une structure double barrière schématiquement représentée dans l'insert. L'énergie des porteurs incidents est prise égale à 50 mev. On constate que la transmission calculée dans l'approximation marches plates diffère de celle



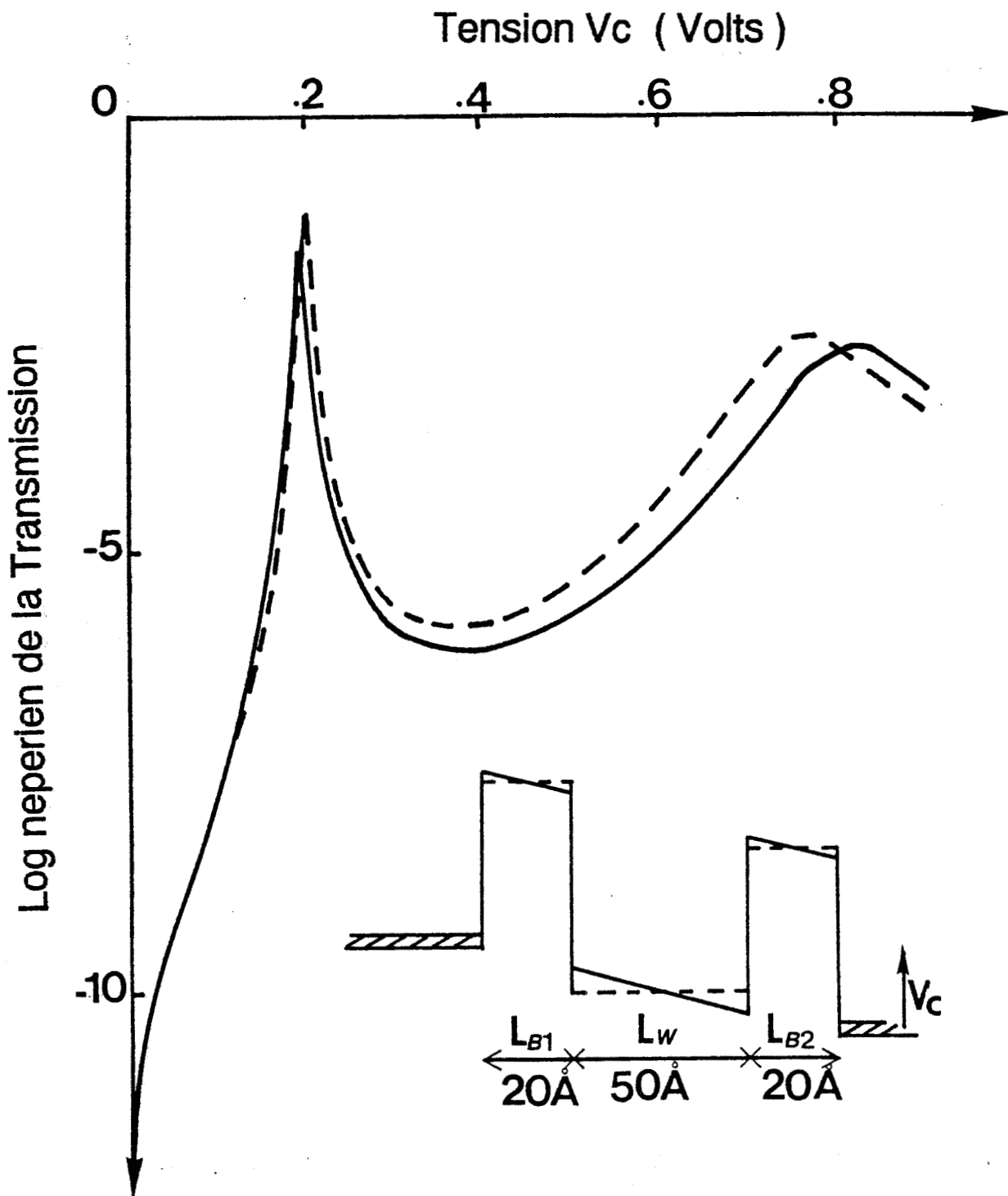


Fig 1.5 : Comparaison entre les coefficients de transmission de la probabilité de présence obtenus sous polarisation pour une double barrière Ga Al As / Ga As :

- Dans le cas de l'approximation Marches Plates. ( - - - - - )
- Par le calcul exact sur un potentiel linéairement variable par morceaux. ( ——— )

Largeur du puits :  $50\text{\AA}$ . Largeur des barrières :  $20\text{\AA}$ . Hauteur des barrières :  $\Delta V = 500\text{meV}$   
Masse effective des électrons :  $m = 0.067 m_e$  dans le puits et dans les barrières.

relative au potentiel tilté d'autant plus que le champ électrique dans la structure est important. A bas champ, les différences entre le calcul exact et approximé sont très peu marquées. Cette approximation se révèle par conséquent excellente pour une première approche des phénomènes physiques mis en jeu.

## 1.4 Courant traversant la double barrière

### 1.4.1 Obtention des caractéristiques de conduction

#### 1.4.1.1 Expression du courant

Pour obtenir une expression du courant traversant la double barrière, il faut se donner une distribution en énergie des porteurs s'appêtant à franchir la double barrière. Dans l'image classique d'une microstructure couplée à 2 continuums (l'émetteur et le collecteur), les fonctions de distribution dans les électrodes correspondent à des fonctions de Fermi-Dirac, respectivement  $f_e$  et  $f_c$ . Les densités d'état ont pour expression  $g = \frac{m^*}{4\pi^2\hbar^3}$

Le courant traversant la structure s'écrit alors [9] :

$$J = \frac{q}{4\pi^2\hbar^3} \int dK_z \int dK_T \times f_e(E, K_T) f_c(E, K_T) T(E, K_T) \frac{\partial E}{\partial K_T} \quad (1-35)$$

Les probabilités de transmission des porteurs étant supposées indépendantes du vecteur d'onde transverse ( $K_T$ ), il est possible de mener à bien l'intégration sur  $dK_T$ .

L'expression du courant que nous utiliserons en pratique est :

$$J = \frac{qm^*K_b\theta}{2\pi^2\hbar^3} \int_0^\infty T(E_z, V_c) F(E_z, V_c) dE_z \quad (1-36)$$

où  $\theta$  est la température.

La fonction  $F$  sera appelée supply function. Elle a pour expression [10] :

$$F = \ln \left\{ \frac{1 + \exp \left[ \left( E_F - E_z \right) / K_b \theta \right]}{1 + \exp \left[ \left( E_F - E_z - qV_c \right) / K_b \theta \right]} \right\} \quad (1-37)$$

Le calcul de la caractéristique  $J(V_c)$  demande donc la détermination des transmissions en fonction de l'énergie  $E_z$  pour chaque tension appliquée  $V_c$ .

Nous verrons au chapitre 3 que pour les structures réelles il se forme en amont de la barrière émetteur une couche d'accumulation qui entraîne une quantification de l'émetteur. Ce caractère 2D de l'émetteur, ainsi qu'un couplage éventuel entre les mouvements des porteurs dans les directions transverses et longitudinales, ne seront pas pris en compte dans le calcul du courant.

Bien que ces hypothèses apparaissent très restrictives l'application de la formule (1-36), conjuguée avec les diverses méthodes de calcul de la transmission exposées aux chapitres 1 et 3, permet de décrire les caractéristiques expérimentales de conduction électrique, notamment les valeurs des extrémums de courant et les tensions correspondantes.

#### 1.4.1.2 Nécessité d'une méthode d'intégration à pas variables

Le calcul effectif des caractéristiques de conduction nécessite une méthode d'intégration à pas variables. Nous verrons en effet que le pic de transmission correspondant au 1er niveau quasi-lié du puits présente une très faible largeur, typiquement  $\leq 1$  meV.

De plus, l'application d'une polarisation a pour effet de translater l'énergie de résonance. Ces 2 effets conjugués font qu'une méthode d'intégration à pas constants conduit à des temps de calcul prohibitifs. La méthode numérique que nous avons utilisé est exposée en annexe. Cette méthode permet de calculer directement le courant en identifiant la position du pic de transmission et en réduisant le pas d'intégration autour de ce pic de façon simultanée.

## 1.4.2 Approximation analytique du courant pic

Dans l'image très simplifiée du fonctionnement d'une double barrière, le courant pic correspond au cas où l'énergie du 1er niveau quasi-lié devient égale au minimum de la bande de conduction dans l'émetteur.

En pratique les simulations numériques montrent que la valeur maximale de l'intégrale :

$$\int_0^{\infty} T(E_z, V_c) \times F(E_z, V_c) dE_z$$

est obtenue pour une énergie apparente  $E_0$  mesurée par rapport au bas de la bande de conduction.

Nous supposons cette énergie  $E_0$  connue. Sa valeur est discutée en annexe, un bon ordre de grandeur est  $E_F / 5$ .

Une détermination analytique de  $J_{pic}$  peut alors être obtenue en incluant les hypothèses suivantes, qui seront vérifiées dans les applications :

- la contribution à l'intégrale du courant des termes hors résonance est négligeable. Le domaine d'intégration peut être réduit à un intervalle de largeur  $2\sigma$  centré autour de  $E_0$ .
- $qV_{pic} \gg E_F$ . On peut négliger le dénominateur de la supply fonction et poser

$$F \approx \ln \left( 1 + \exp \left[ (E_F - E_0) / K_b \theta \right] \right) \approx \frac{E_F - E_0}{K_b \theta} \quad (1-38)$$

pour  $E_F - E_0 > K_b \theta$ . En supposant les variations de la supply fonction négligeables dans l'intervalle de largeur  $2\sigma$ , le courant pic est donné par :

$$J_{pic} = \frac{qm^* K_b \theta}{2 \pi^2 \hbar^3} \times \frac{E_F - E_0}{K_b \theta} \int_{E_0 - \sigma}^{E_0 + \sigma} T(E_z) dE_z \quad (1-39)$$

L'intégration est immédiate en utilisant le fait que le pic de transmission est de forme lorentzienne, de hauteur  $T_{res}$  et de largeur à mi-hauteur  $\Gamma_e$ . On obtient :

$$J_{pic} = \frac{qm^* (E_F - E_0)}{4 \pi \hbar^3} \times T_{res} \Gamma_e \quad (1-40)$$

On constate que le courant pic dépend non seulement du maximum de la transmission  $T_{res}$  mais aussi de la largeur du pic de transmission. Par ailleurs, en première approximation, le courant pic est peu dépendant de la température pour des émetteurs fortement dopés ( $E_F > K_b \theta$ ). Cette remarque est confirmée par l'expérience [11].

En exprimant à présent  $T_{res}$  et  $\Gamma_e$  en fonction des transmission  $T_g$  et  $T_d$  des barrières gauche et droite pour l'énergie apparente  $E_0$  du 1er niveau, suivant (1-11) et (1-19) on obtient :

$$J_{pic} = \frac{qm^*(E_F - E_0)E_1}{\pi^2 \hbar^3} \times \frac{T_g T_d}{T_g + T_d} \quad (1-41)$$

S'il existe une forte différence entre les valeurs de transmission des barrières ( $T_{min} \ll T_{max}$ ),  $J_{pic}$  devient proportionnel à  $T_{min}$  : C'est la barrière la plus opaque qui impose le courant.

### 1.4.3 Dépendance du courant vallée, contraste en courant

La dépendance du courant vallée en fonction des coefficients de transmission des 2 barrières  $T_g$  et  $T_d$  peut être obtenue sous l'hypothèse que les porteurs traversant alors la double barrière ne transitent pas par un niveau quasi-lié. La transmission totale de la double barrière correspond alors au cas non résonant :  $T$  proportionnel à  $T_g \times T_d$ . Le courant vallée sera de même imposé par le produit des transmissions des 2 barrières.

Le contraste en courant attendu  $\frac{J_{pic}}{J_{val}}$  fait apparaître alors une dépendance en  $\frac{1}{T_g + T_d}$ , ou en  $\frac{1}{T_{max}}$  lorsque  $T_g$  et  $T_d$  sont fortement différents.

Ce résultat est à mettre en opposition avec le contraste en transmission qui varie en  $\frac{1}{T_{max}^2}$ .

Nous aurons l'occasion de revenir sur l'approximation analytique du courant vallée, et sur les conditions de validité de l'hypothèse réalisée, lors de l'étude des critères d'optimisation au chapitre 3.

# BIBLIOGRAPHIE

## CHAPITRE 1

- [1] : R.M. COHEN et Z.M. FANG  
J. Appl. Phys. 65, 1989, pp 612
- [2] : E.O. KANE  
"Tunneling phenomena in Solids"  
Edité par E. Burnstein et D. Lundquist, (Plenum, New-York, 1969)
- [3] : M. JONSON and A. GRINCWAJG  
Appl. Phys. Lett. 51, 1987, p 1729
- [4] : B. RICCO et M. AZBEL  
Phys. Rev.B 29, 4, 1984 p 1970
- [5] : Y. ANDO et T. ITOH  
J. Appl. Phys. 61, 1987 p 1497
- [6] : M. VASSELL, JOHNSON LEE, H.F. LOCKWOOD  
J. Appl. Phys. 54, 1983 p 5206
- [7] : R. TSU et L. ESAKI  
Appl. Phys. Lett. 22, 1973 P 562
- [8] : T. WEIL  
Thèse de doctorat de L'université  
Paris 6, 1987
- [9] : A.T. FROMHOLD  
Quantum Mechanics for Applied  
Physics and Engineering (Academic press) 1981
- [10] : S. CHOU, E. WOLAK, J.S. HARRIS JR  
Appl. Phys. Lett. 52, 1988 p 657
- [11] : Y. SUGIYAMA, T. INATA, S. MUTO, Y. NAKATA, S. HIYAMIZU  
Appl. Phys. Lett 52, 1988 p 314

## **CHAPITRE 2**

## Chapitre 2

### Caractéristiques statiques

## 2.1 Fonctions d'onde et transmission de la double barrière

### 2.1.1 Résultats à l'équilibre

#### 2.1.1.1 Niveaux quasi-liés

Les énergies des différents niveaux résonants d'une double barrière sont obtenues en pointant les différents maximums successifs de la fonction de transmission  $T = f(E_z)$ .

La figure 2.1 donne un exemple pour une structure GaAlAs,  $x = .4$ ,  $L_B = 50 \text{ \AA}$  / GaAs  $L_W = 50 \text{ \AA}$  / GaAlAs,  $x = .4$ ,  $L_B = 50 \text{ \AA}$ .

Dans ce cas, 2 niveaux d'énergie inférieure à la hauteur de barrière sont clairement mis en évidence.

Les niveaux ainsi obtenus incluent l'effet de la perturbation apportée par des épaisseurs de barrière finies, en comparaison au cas d'un confinement strict. L'influence d'un couplage avec le continuum sur les états liés est illustré sur la figure 2.2. L'énergie du niveau fondamental en fonction de la largeur de barrière  $L_B$  y est représentée pour des puits de différentes largeurs  $L_W$ . On constate que pour  $L_B > 20 \text{ \AA}$ , les niveaux sont indépendants de  $L_B$ .

Les valeurs calculées de façon exacte par la transmission coïncident avec celles obtenues par résolution de l'équation transcendante 1-3(cas ou  $L_B \rightarrow \infty$ ).

Au contraire, pour  $L_B < 20 \text{ \AA}$  on observe une décroissance de l'énergie du 1er niveau. Ceci résulte de la forte délocalisation de la fonction d'onde. De façon générale, les effets dus à un couplage important avec le continuum se feront sentir dès que  $L_B < 2/\alpha$  ou  $\alpha$  est le coefficient d'atténuation dans les barrières. Une étude en grandeurs normalisées des effets de recouvrement de fonction d'onde a été proposée par Bahder [1].



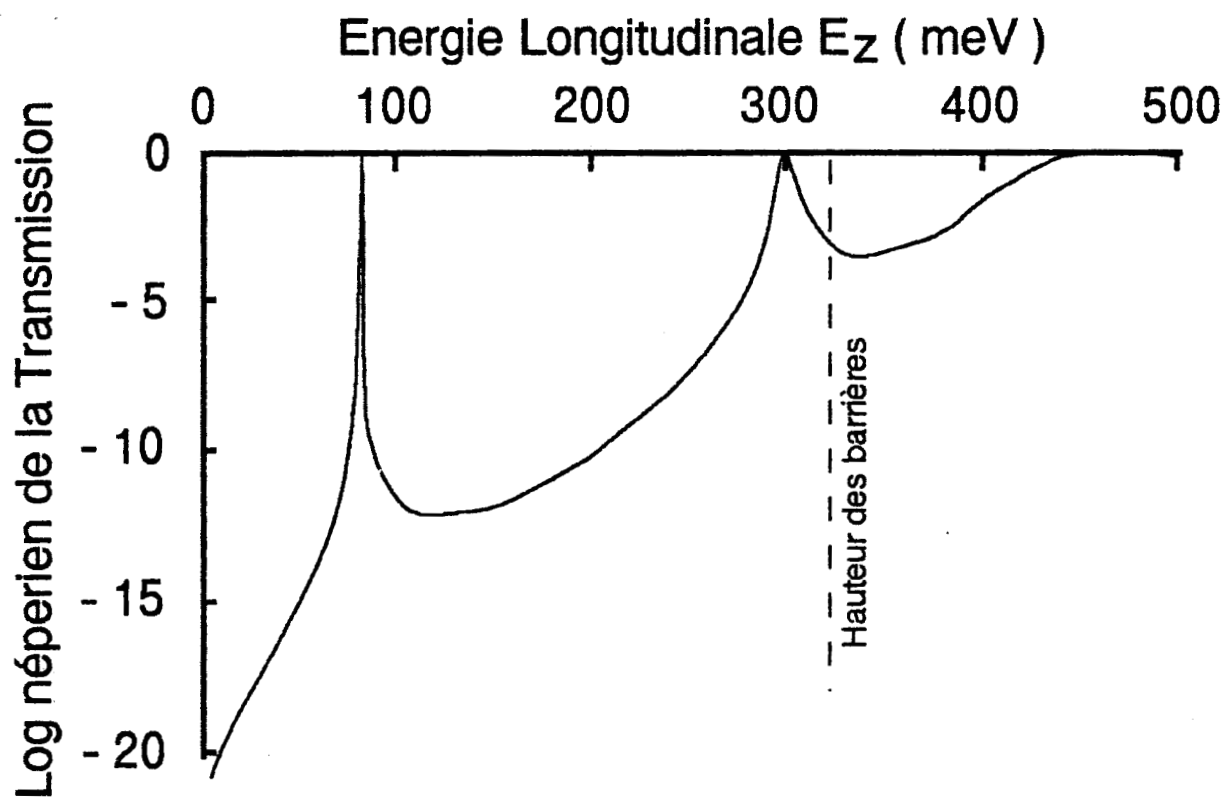


Fig 2.1 : Fonction de transmission  $T = f(E_z)$  pour une double barrière symétrique Ga Al Al ( $x=0.4$ ) / Ga As à l'équilibre.  
 Largeur du puits : 50 Å. Largeur des barrières : 50 Å. Hauteur des barrières :  $\Delta V = 320$  meV  
 Masse effective des électrons :  $m = 0.067 m_0$  dans le puits,  $m = 0.1 m_0$  dans les barrières.  
 2 niveaux quasi-liés, d'énergie  $E_1 = 82$  meV;  $E_2 = 300$  meV, sont repérables par leur pic de transmission. Un niveau virtuel existe également à  $E_3 = 460$  meV.

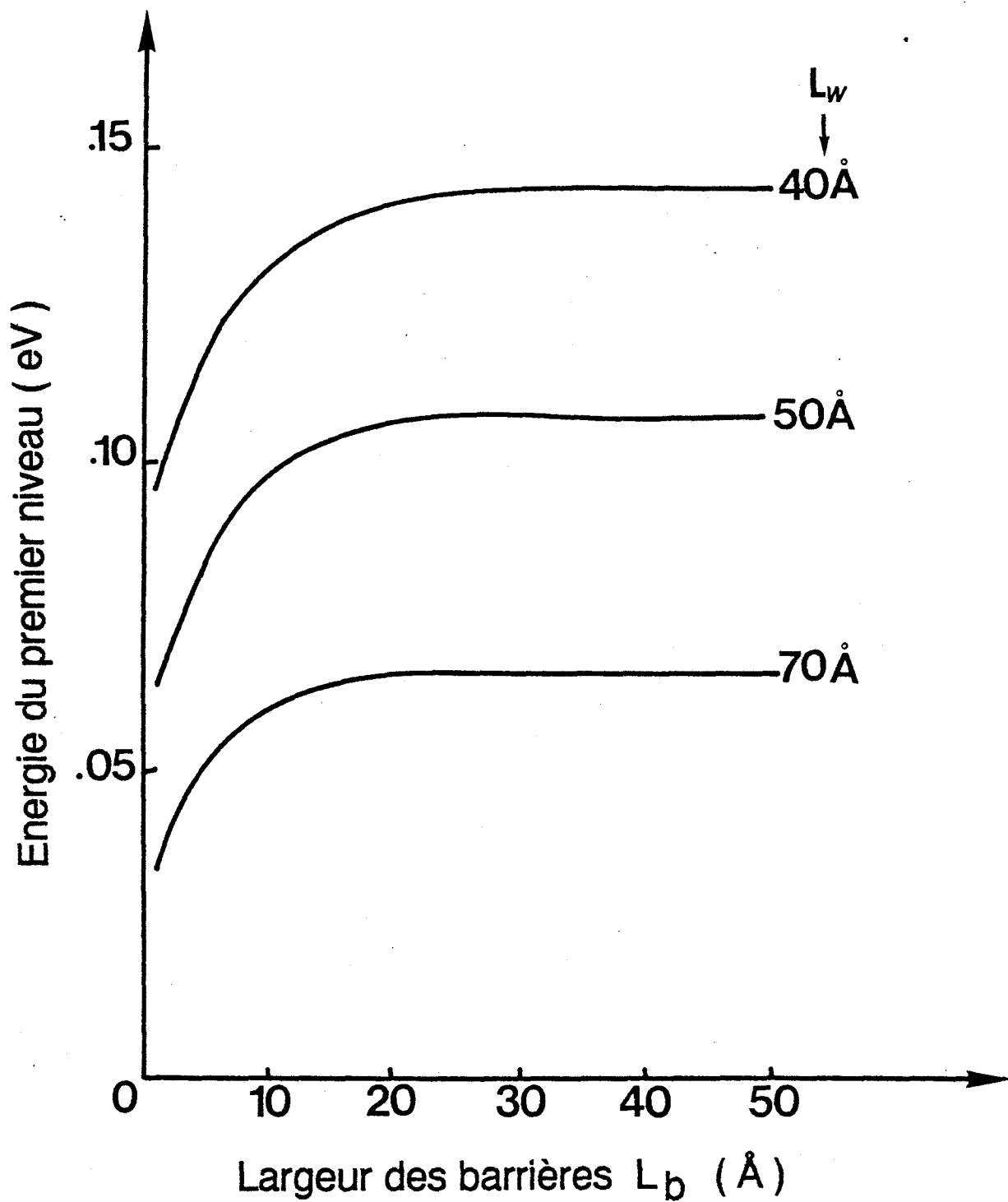


Fig 2.2 : influence de la largeur des barrières  $L_b$  sur l'énergie  $E_1$  du premier niveau quantique d'une Double Barrière symétrique Ga Al As / Ga As.  
 Hauteur des barrières :  $\Delta V = 320$  meV  
 Masse effective des électrons :  $m = 0.067 m_0$  dans le puits et dans les barrières.  
 3 largeurs de puits sont considérées :  $L_w = 40$  Å , 50 Å , 70 Å . On observe pour  $L_b < 20$  Å une chute des valeurs de  $E_1$  traduisant un fort couplage entre le puits et le continuum extérieur aux barrières.

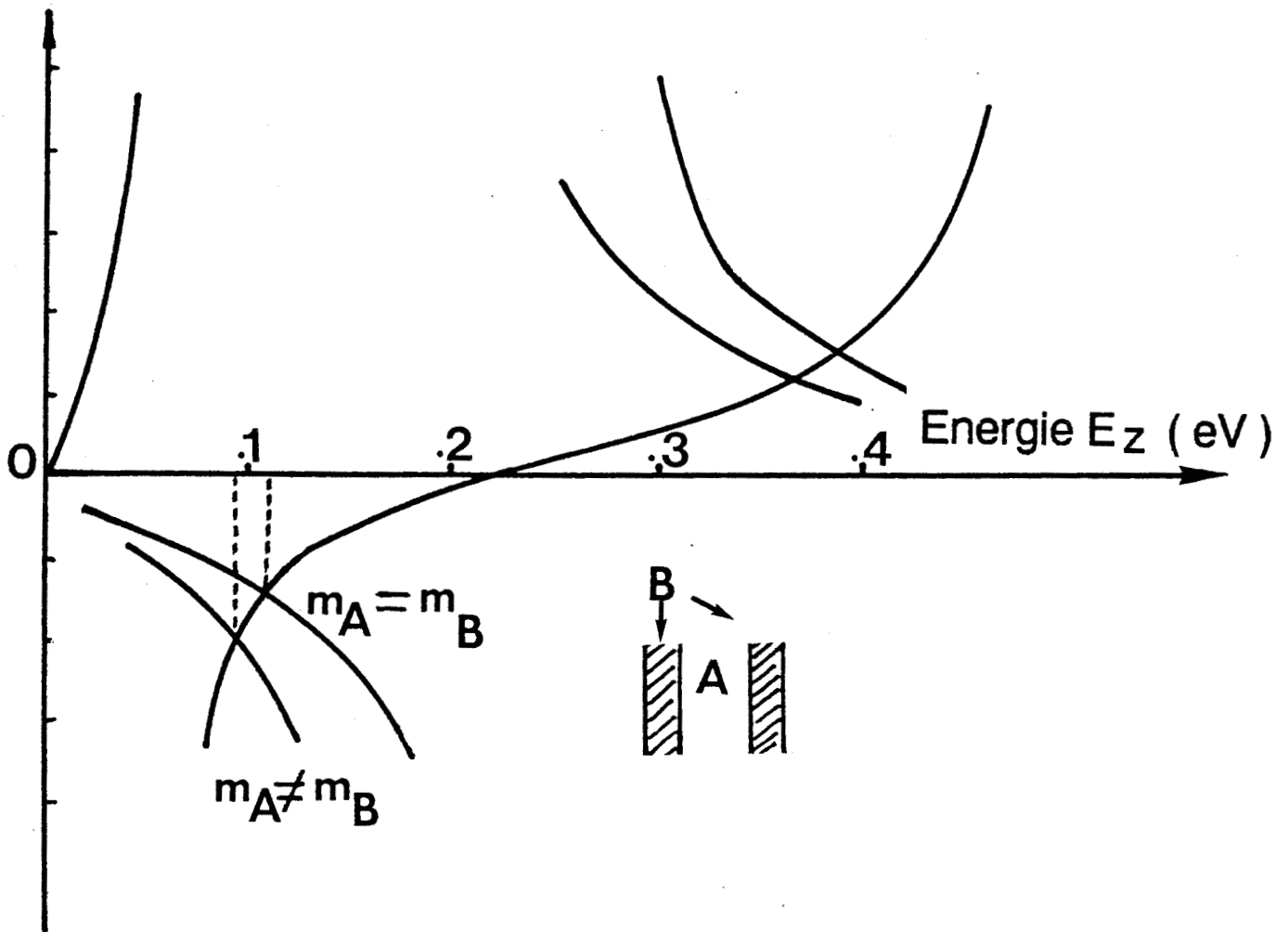


Fig 2.3 : Résolution graphique de l'équation transcendante 1-3 pour un puits en Ga As de largeur  $L_w = 50 \text{ \AA}$ , encadré par des barrières Ga Al As de hauteur 500 meV. Deux hypothèses sont envisagées :

- Masse effective des électrons :  $m = 0.067 m_e$  dans le puits et dans les barrières.
- Masse effective des électrons :  $m = 0.067 m_e$  dans le puits,  $m = 0.109 m_e$  dans les barrières.

L'évolution de l'énergie des niveaux résonants en fonction des paramètres de structure peut être l'objet d'une étude systématique à partir de l'équation 1-3. Un exemple de résolution graphique est donné figure 2-3. Cette équation donne des résultats équivalents à ceux de la méthode utilisant la transmission, si l'on prend soin de considérer des barrières suffisamment opaques.

la figure 2-4, montre l'évolution des niveaux quasi-liés en fonction de  $L_W$ .

- Pour  $L_W$  large, les premiers niveaux sont à des énergies très basses par rapport à la hauteur des barrières. On retrouve alors pour ces niveaux un comportement en  $\frac{1}{L_W}$  comparable au cas du puits infini.
- Pour  $L_W$  étroit, les niveaux résonants se rapprochent du haut de la barrière. Ils présentent alors un comportement en  $1/L_W$ .

La figure 2-5 reporte les variations des 2 premiers niveaux en fonction de la hauteur des barrières  $\Delta V$ . Pour les valeurs usuelles ( $\Delta V$  entre 100 et 500 meV), une variation des  $E_i$  ( $i = 1,2$ ) en  $\sqrt{\Delta V}$  est observée.

### 2.1.1.2 Courbes enveloppes de la fonction de transmission

Les expressions analytiques fournissant les valeurs de transmission résonante et hors résonance (1-11 et 1-20) peuvent être calculées à toutes les énergies. On obtient ainsi 2 courbes enveloppes que la fonction de transmission de la double barrière vient tangenter alternativement en des points discrets.

La figure 2.6 représente le cas de 3 doubles barrières symétriques ne différant que par la largeur  $L_W$  du puits. La courbe enveloppe supérieure est alors constante =1 à toutes les énergies (cf eq(1-11) avec  $T_g = T_d$ ). Cela ne serait pas le cas pour une structure asymétrique. Les 3 fonctions  $T(E_z)$  admettent les 2 mêmes courbes enveloppes, dont les expressions sont indépendantes de  $L_W$ .

Pour les énergies situées entre 2 pics de résonance, le point correspondant au minimum de transmission se situe à une énergie légèrement inférieure à celle vérifiant la condition  $\cos 2\Phi = -1$ . Par ailleurs on note que la transmission totale est pratiquement constante autour de ce minimum sur une plage d'énergie de plusieurs dizaines de meV.

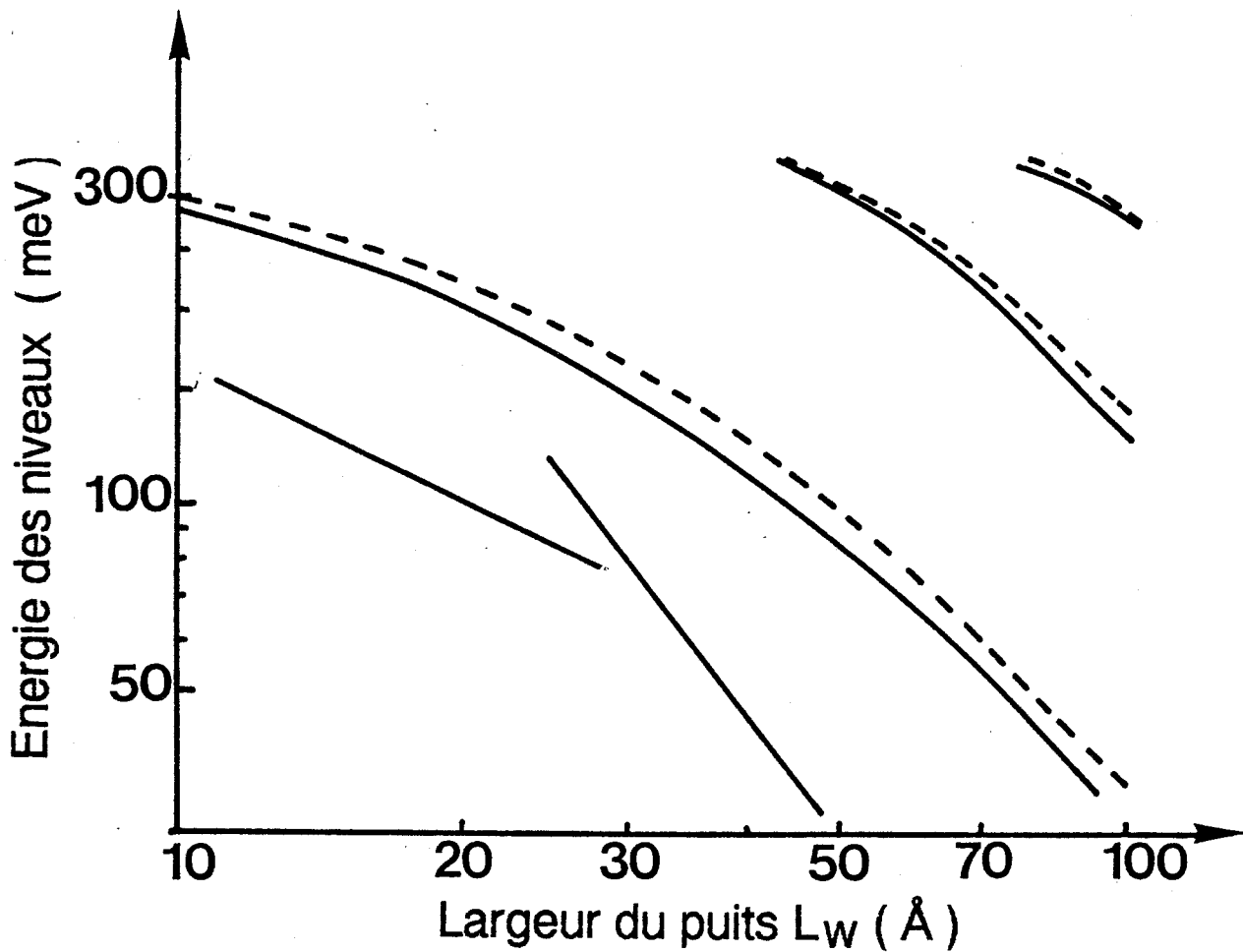


Fig 2.4 : Evolution des 1er et 2eme niveaux quantiques d'une double barrière Ga Al As / Ga As en fonction de la largeur  $L_w$  du puits Hauteur des barrières :  $\Delta V = 320$  meV  
Deux hypothèses sont envisagées :

- Masse effective des électrons :  $m = 0.067 m_e$  dans le puits et dans les barrières.
- Masse effective des électrons :  $m = 0.067 m_e$  dans le puits,  $m = 0.109 m_e$  dans les barrières.

Les échelles sont logarithmiques, les pentes correspondant à des évolutions des niveaux en  $1/L_w$  et en  $(1/L_w)^2$  sont reportées.

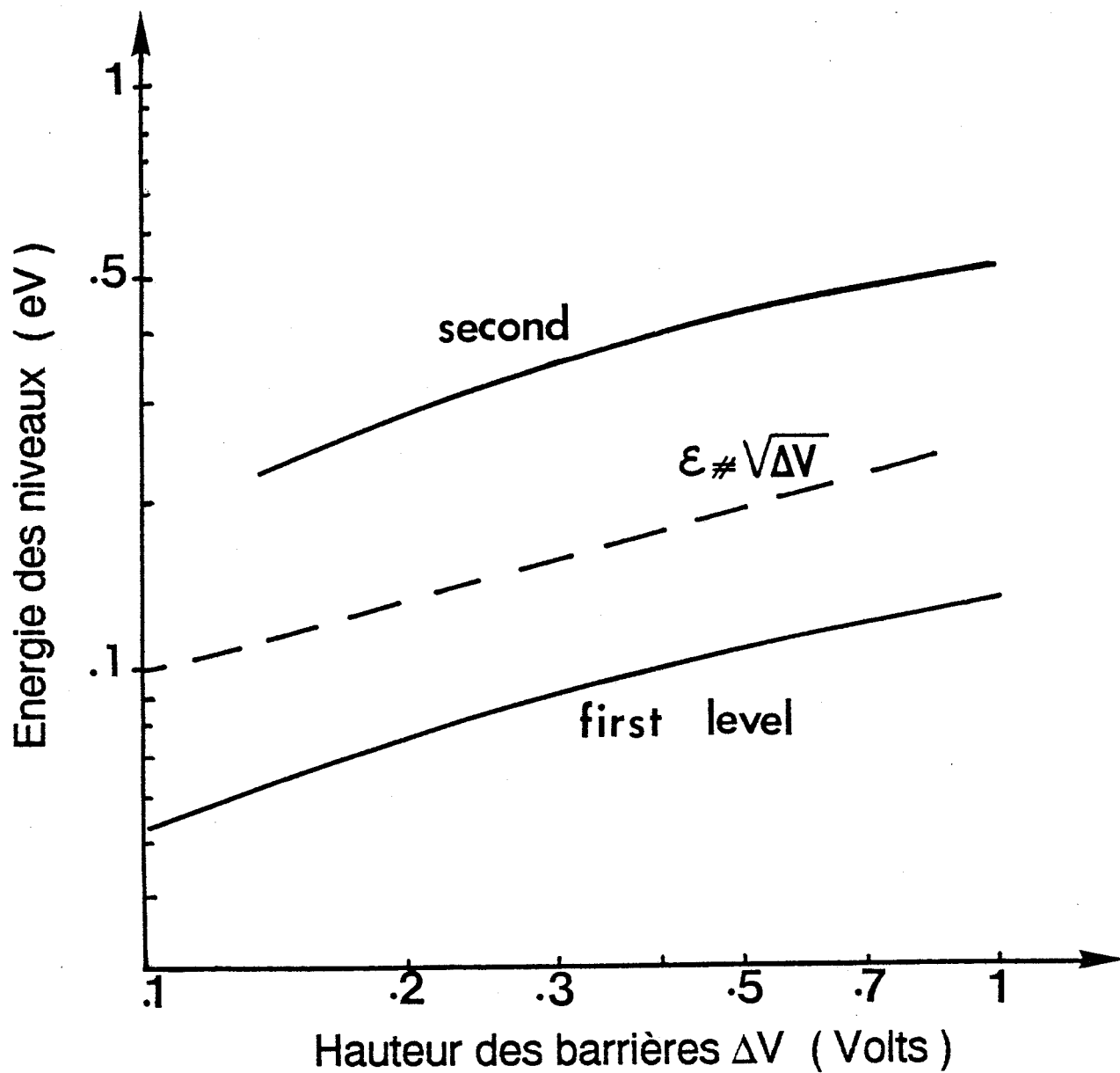


Fig 2.5 : Evolutions des 1er et 2eme niveaux quantiques d'un puits isolé en Ga As, en fonction de la hauteur  $\Delta V$  des barrières Ga Al As. La largeur du puits est fixée à 50 Å. Masse effective des électrons :  $m = 0.067 m_e$  dans le puits et dans les barrières. Les échelles sont logarithmiques, la pente correspondant à une évolution en  $\sqrt{\Delta V}$  est reportée.

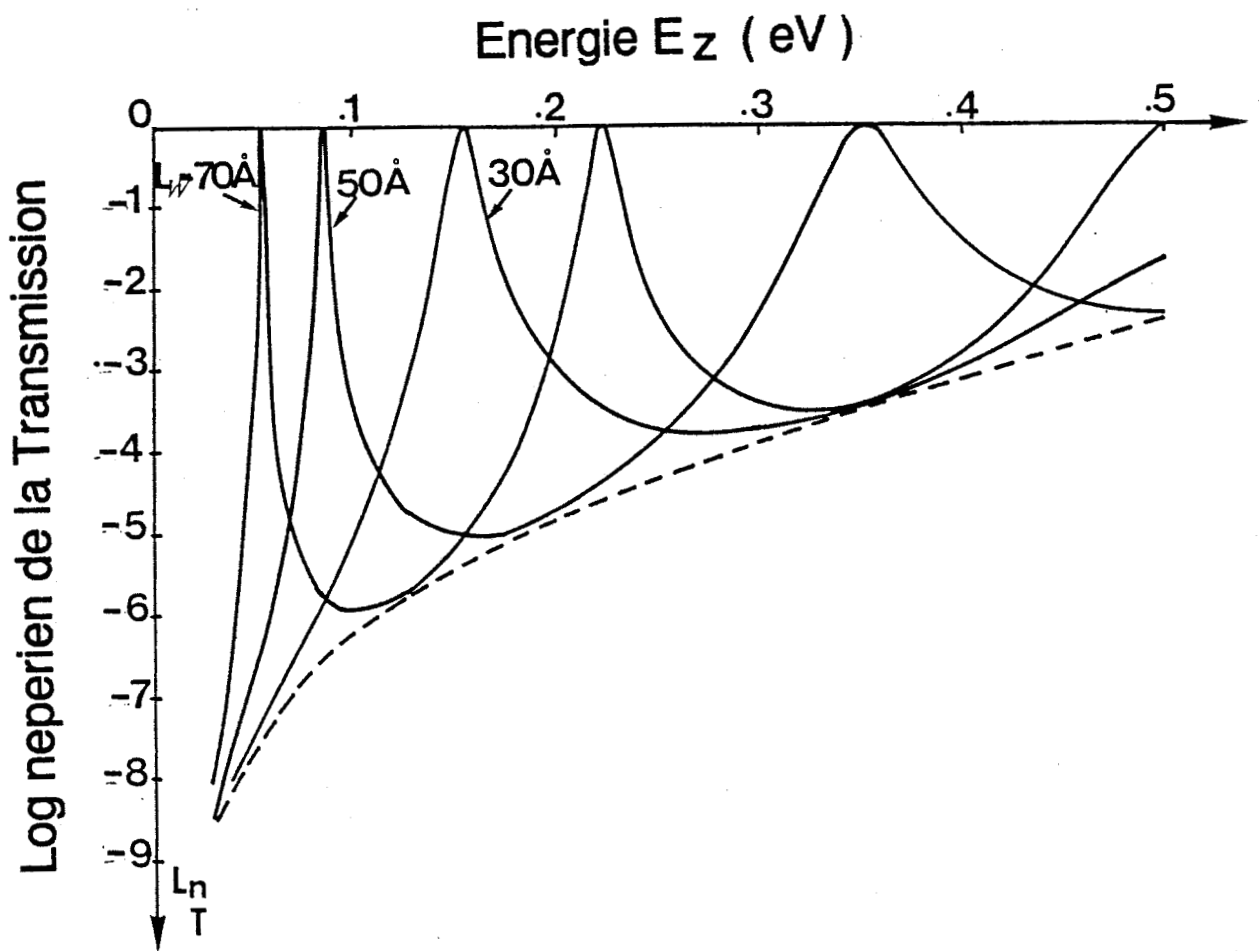


Fig 2.6 : Fonctions de transmission  $T = f(E_z)$  de 3 Doubles Barrières Ga Al As / Ga As symétriques à l'équilibre, ne différant que par la largeur  $L_w$  du puits.

Hauteur des barrières :  $\Delta V = 400 \text{ meV}$ , Largeur des barrières  $L_b = 20 \text{ \AA}$ .

Masse effective des électrons :  $m = 0.067 m_e$  dans le puits,  $m = 0.108 m_e$  dans les barrières.

Les transmissions des trois Doubles Barrières admettent la même courbe-enveloppe inférieure. Le premier pic de résonance voit sa largeur diminuer avec l'énergie du 1er niveau.

stationary-wave functions  
probability densities

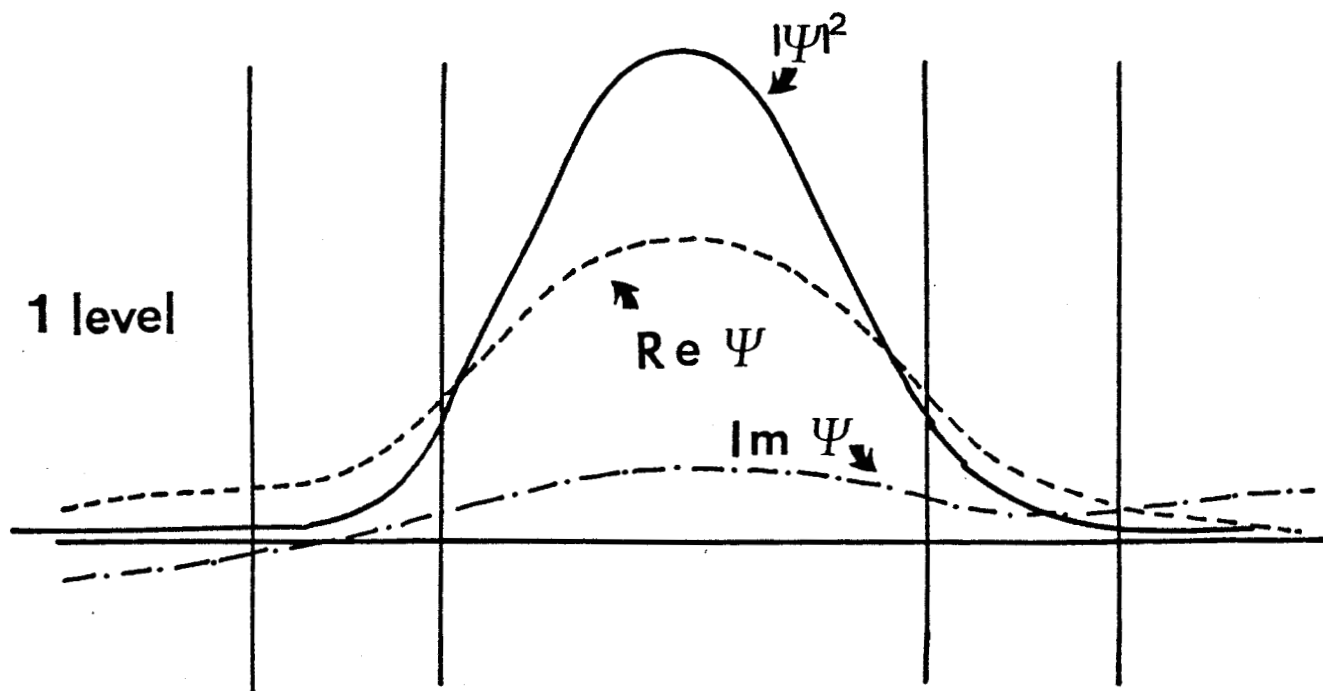
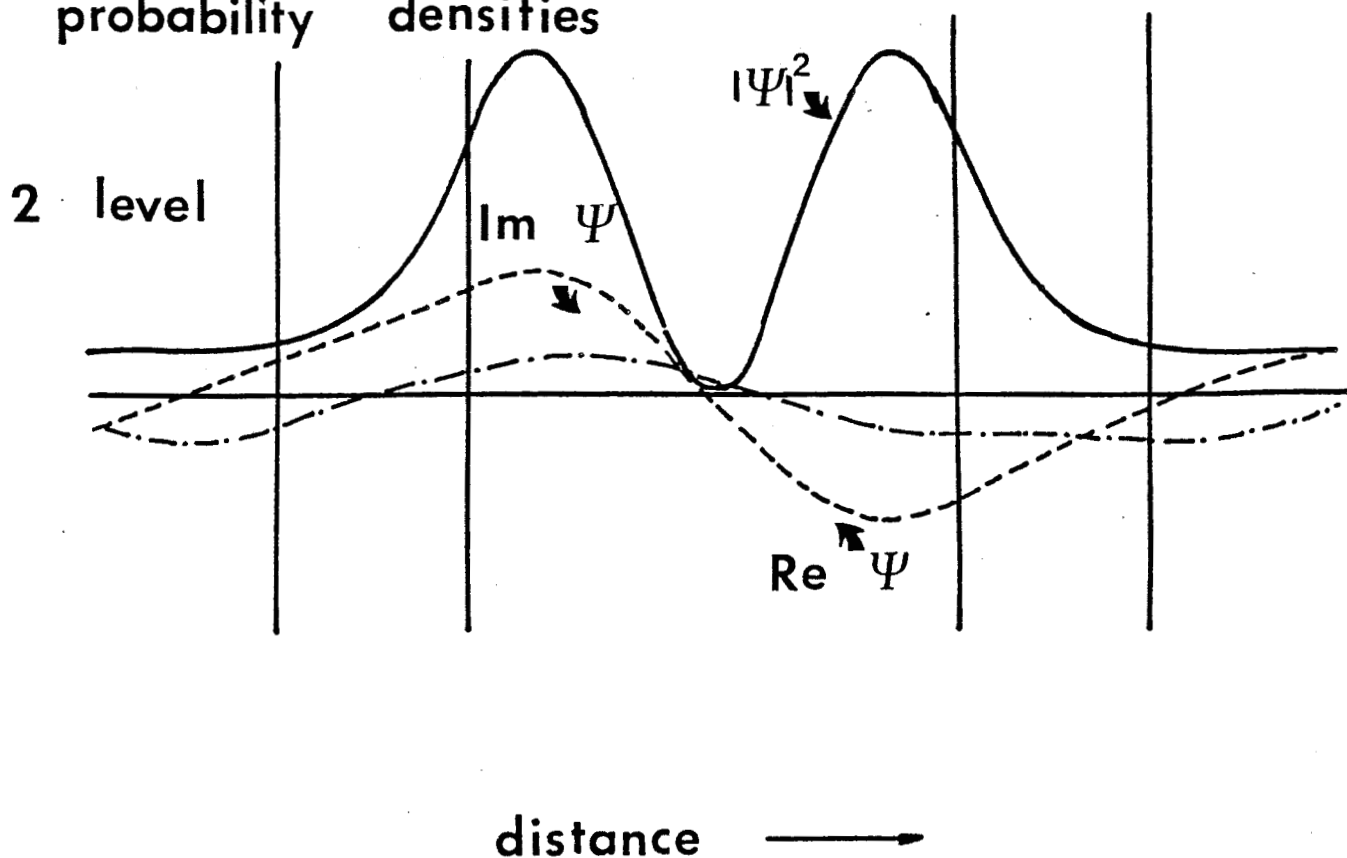


Fig 2.7 : Répartition de la densité de probabilité de présence pour les 1er et 2eme niveaux quasi-liés d'une Double Barrière Ga Al As / Ga As à l'équilibre.  
Largeur du puits : 50 Å. Largeur des barrières : 20Å. Hauteur des barrières :  $\Delta V = 500$  meV  
Masse effective des électrons :  $m = 0.067 m_e$  dans le puits et dans les barrières.



### 2.1.1.3 Fonctions d'onde

#### \* Problème de la normalisation

Contrairement au cas déjà évoqué du confinement strict par des barrières d'épaisseur infinie, pour lequel il est possible de normaliser la fonction d'onde en posant  $\int_{-\infty}^{+\infty} |\varphi(z)|^2 dz = 1$  ; la probabilité de présence dans le cas d'une double barrière s'étend sur la totalité de l'espace avec une intégrale non bornée. En particulier dans la région collecteur, la présence d'une seule onde progressive implique  $|\varphi(z)|^2 = Cste$ . La phase et l'amplitude pouvant être quelconques, il est alors commode d'effectuer la normalisation par référence à l'onde transmise en posant  $|\varphi(z)|^2 = 1$  dans la région collecteur.

$|\varphi|^2$  est ainsi définie de façon univoque pour chaque énergie.

#### \* Fonction d'onde à l'équilibre

La figure 2.7 représente la probabilité de présence électronique pour des valeurs d'énergie correspondant aux 2 premières résonances. Ces résultats sont obtenus à l'équilibre en ajustant l'énergie des porteurs incidents aux niveaux d'énergie quantifiée du puits. La structure est symétrique, la transmission totale est donc unitaire. La fonction d'onde dans la région émetteur ne contient qu'une composante progressive qui y impose  $|\varphi|^2 = Cste$ .

A l'intérieur de la double barrière, ce sont 1 ou 2 demies longueurs d'onde qui prennent place sur une largeur effective  $d_{eff}$  supérieure à la largeur géométrique du puits. La profondeur de pénétration dans chaque barrière (indiquée  $i$ ) peut être approximée par  $1/\alpha_i$ .

## 2.1.2 Résultats sous polarisation

L'application d'une polarisation en tension va modifier profondément l'allure de la fonction de transmission de la double barrière par rapport à l'équilibre. Ces modifications seront dues à deux causes : la destruction de la symétrie et l'abaissement de l'énergie apparente des niveaux.

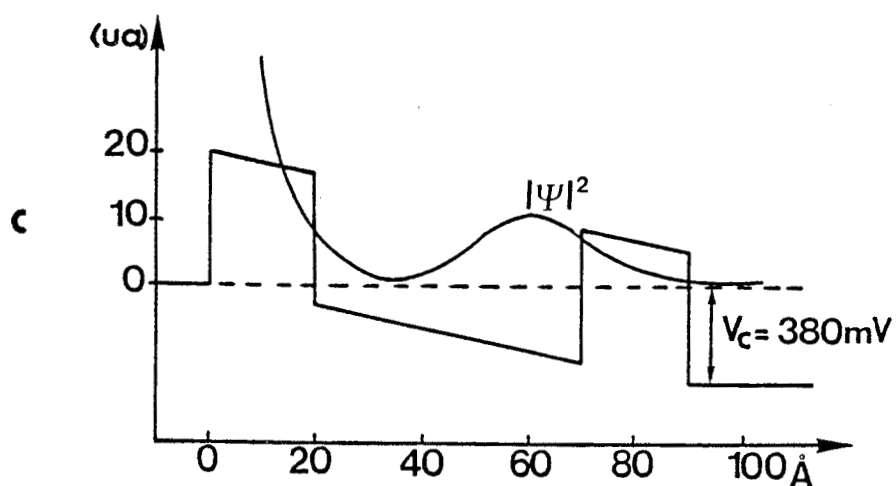
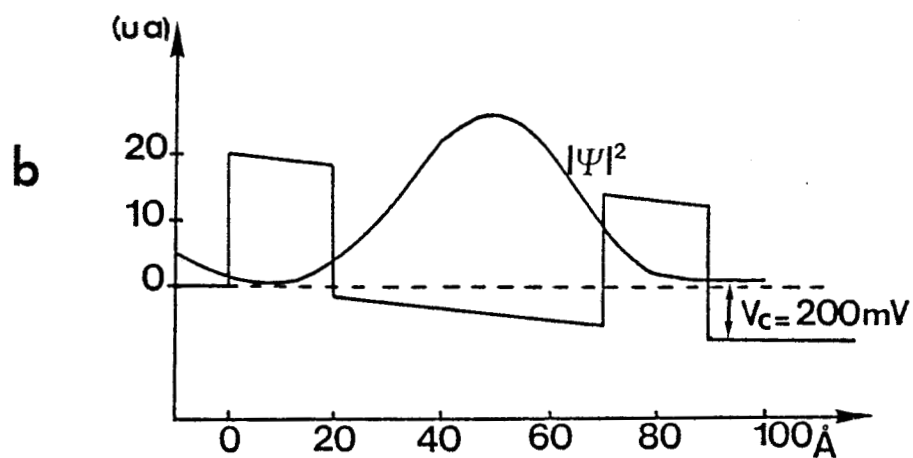
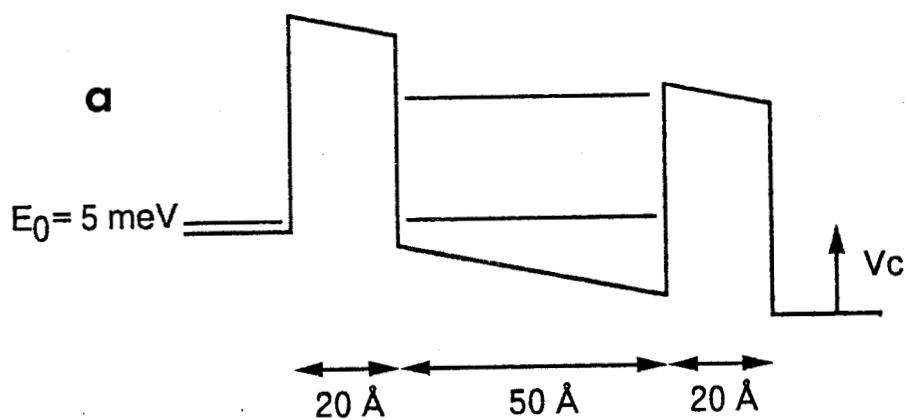


Fig 2.8 : La structure décrite fig 2.7 est placée sous polarisation en tension. L'énergie d'injection dans l'émetteur est fixée à  $E_0 = 5 \text{ meV}$ . (a). La densité de probabilité de présence est représentée en (b) pour une tension de polarisation réalisant l'alignement de  $E_0$  avec le premier niveau quasi-lié. La situation (c) correspond au cas pour lequel l'énergie d'injection  $E_0$  se situe entre les 2 premiers niveaux résonants.

### 2.1.2.1 Destruction de la symétrie

L'existence d'un champ électrique va avoir pour conséquence l'abaissement différent de la hauteur apparente de chacune des 2 barrières. [2]

La figure 2.8a représente le potentiel total de la structure dans l'hypothèse d'un champ constant localisé dans la zone puits + barrière. La condition de résonance est obtenue, à  $E_z$  fixé, par ajustement de la tension  $V_c$ .

Pour une structure initialement symétrique, les porteurs accélérés par le champ électrique voient une barrière côté collecteur plus transparente que celle côté émetteur :  $T_d > T_g$ . De ce fait la transmission  $T_{res}$  n'est plus égale à 1. Cela se traduit sur la fonction d'onde à la première résonance par la présence dans l'émetteur d'une onde stationnaire, repérable sur la figure 2.8.b par une probabilité de présence non constante.

Lorsque l'on augmente la tension appliquée  $V_c$ , l'énergie incidente  $E_z$  fixée ne coïncide plus avec un niveau quasi-lié. La figure 2.8.c est ainsi obtenue pour une situation entre la 1ère et la 2ème résonance. Le phénomène d'onde stationnaire est alors beaucoup plus marqué. Cela est dû au très fort coefficient de réflexion présenté par la structure.

### 2.1.2.2 Abaissement de l'énergie apparente des niveaux (stark shift [3])

L'application d'une polarisation en tension induit également un abaissement de l'énergie apparente des niveaux, mesurée par rapport au bas de la bande de conduction dans l'émetteur. Cet abaissement peut être décomposé en 2 effets distincts :

- L'abaissement moyen du potentiel du puits, qui entraîne avec lui l'ensemble des niveaux quasi-liés.  
 Dans l'hypothèse d'un champ électrique  $F$  uniforme localisé à l'intérieur de la structure puits-barrières, l'abaissement moyen des niveaux varie linéairement avec  $F$ .  
 Pour le cas particulier d'une structure symétrique, chaque niveau chute de  $V_c / 2$ .
- La déformation du potentiel du puits par rapport à sa forme rectangulaire initiale modifie la répartition de la probabilité de présence à la résonance. Sur la figure 2.8.b, on peut remarquer en effet un décalage vers la droite du maximum de  $|\varphi|^2$  dans le puits par rapport à l'allure

symétrique de la figure 2.7. La conséquence sur l'énergie apparente des niveaux est un stark shift quadratique en  $F$ .

Un raisonnement incluant des barrières de hauteur infinie permet d'appréhender qualitativement ce phénomène sur le niveau fondamental en s'affranchissant de la pénétration de la fonction d'onde dans les barrières.

En prenant la référence en énergie au milieu du puits, la condition de quantification du 1er niveau, d'énergie  $E'_1$ , s'exprime :

$$\int_{-L_W/2}^{+L_W/2} K(Z) dz = \pi \quad (2-1)$$

Pour des champs électriques de faible intensité ( $F \ll \frac{2E'_1}{L_W}$ )  $K(Z)$  peut être remplacé par son développement limité au 2ème ordre en  $F$  :

$$K(Z) = \frac{\sqrt{2m^*}}{\hbar} \sqrt{E'_1 + FZ} \approx \frac{\sqrt{(2m^*E'_1)}}{\hbar} \left( 1 + \frac{FZ}{2E'_1} - \frac{(FZ)^2}{8E'^2_1} \right) \quad (2-2)$$

(2.1) se met alors sous la forme :

$$E'_1 \left( 1 - \frac{F^2 L_W^2}{48E'^2_1} \right) = E_1 \quad (2-3)$$

où  $E_1$  est l'énergie du 1er niveau quasi-lié dans la structure à l'équilibre, donné par l'équation (1-5)

L'amplitude du stark-shift induit sur le 1er niveau vaut alors :

$$E_1 - E'_1 = \frac{m^* F^2 L_W^4}{24 \pi^2 \hbar^2} \quad (2-4)$$

On met ainsi en évidence la dépendance du stark-shift en  $L_W^4$  et en  $F^2$  pour des faibles valeurs de champ. Pour le cas de barrières de hauteur non infinie, un coefficient correctif  $\omega$  doit être pris en compte du fait de la pénétration de la fonction d'onde dans les barrières [4].

Pratiquement, lorsque le calcul de la transmission est mené sur le potentiel exact, on montre que l'amplitude du stark-shift du 1er niveau quasi-lié est négligeable ( $< 1 \text{ meV}$  dans le cas d'un puits de 50 Å de largeur) en comparaison de la variation totale de l'énergie apparente  $E_0$  de ce niveau avec la

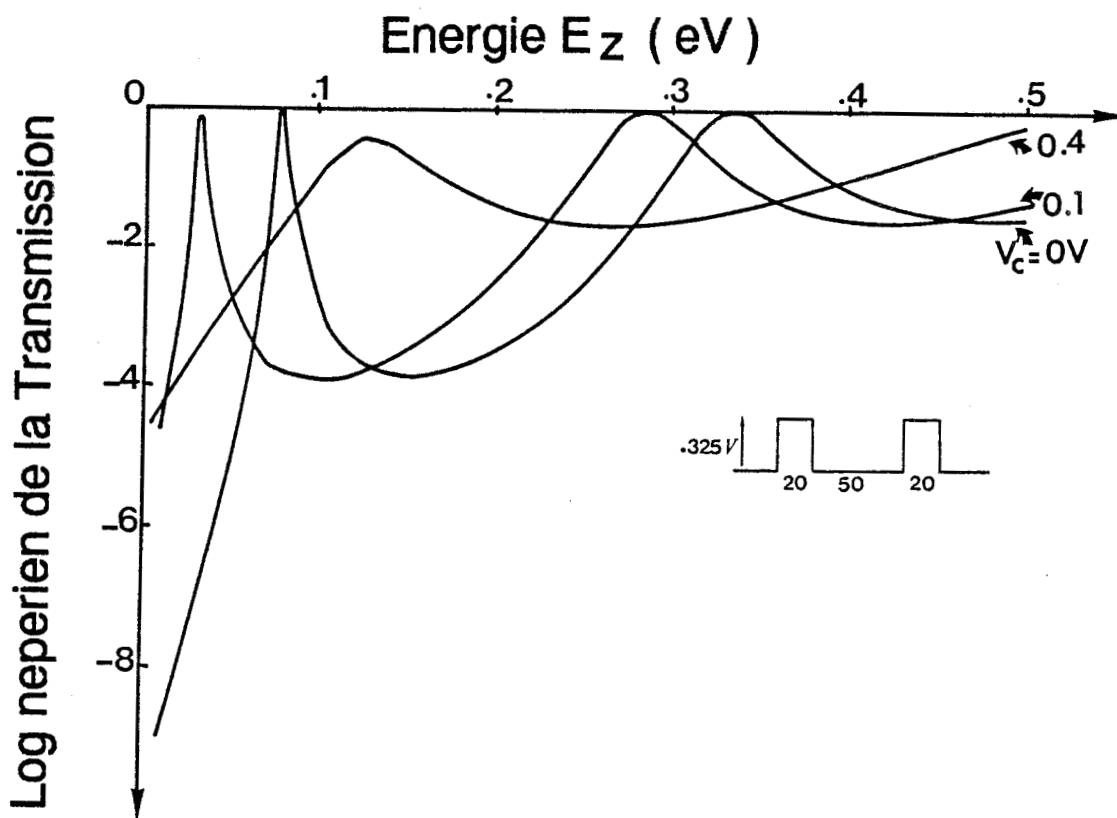


Fig 2.9 : Fonctions de transmission  $T = f(E_z)$  d'une double Barrière Ga Al As / Ga As symétrique, à l'équilibre et sous des tensions de polarisation de 0.1 et 0.4 Volts.

Largeur du puits : 50 Å. Largeur des barrières : 20Å. Hauteur des barrières :  $\Delta V = 325$  meV  
Masse effective des électrons :  $m = 0.067 m_e$  dans le puits,  $m = 0.1 m_e$  dans les barrières.  
On remarque que pour une polarisation de 0.4 V le pic correspondant au premier niveau a disparu.

tension. Le stark-shift se révèle par contre plus important pour des largeurs de puits de l'ordre de 100 Å.

Les raisonnements présentés sont valables pour le niveau fondamental. Pour les états excités, on montre que les phénomènes sont plus complexes, et qu'en particulier les variations du second niveau en fonction du champ électrique sont très peu marquées [5].

A fort champ,  $F > 2E_1 / L_w$ , le 1er niveau se trouve localisé dans un puits triangulaire. La condition de quantification, donnée par l'équation (2-1), ne s'applique plus. Ce cas de figure ne présente qu'un intérêt relatif dans la mesure où ce niveau n'est plus accessible directement aux électrons situés dans l'émetteur. En effet son énergie est alors inférieure au bas de la bande de conduction dans l'émetteur.

Lorsque les processus physiques dissipatifs permettent toutefois l'occupation de ce niveau, il convient d'avoir recours à une astuce de mise en oeuvre afin de le détecter par la méthode du calcul de la transmission.

Il suffit de translater l'énergie de référence dans l'émetteur, en y créant une zone supplémentaire, classiquement autorisée. Ce décalage en énergie se rencontre très souvent dans les structures réalisées lorsque les zones semiconductrices très fortement dopées, qui imposent le niveau de Fermi, sont séparées de la double barrière proprement dite par des zones moins dopées. Le décalage de la bande de conduction est alors une réalité pour ces cas d'émetteur inhomogène.

En résumé, la conséquence globale de l'application d'une tension sera le décalage vers les énergies inférieures des différents pics présentés par la fonction de transmission, ainsi que la modification des valeurs des transmissions résonantes. La figure 2-9 représente la fonction de transmission dans le cas d'une structure symétrique, à l'équilibre et sous des tensions de polarisation de 0,1 V (les pics sont décalés de 50 meV) et de 0,4 V (le pic du 1er niveau a disparu).

La largeur à mi-hauteur du 1er pic dépend des conditions de polarisation. Pour une structure symétrique, une faible polarisation a pour effet d'augmenter la hauteur apparente de la barrière

émetteur, et d'abaisser celle de la barrière collecteur par rapport au 1er niveau résonant. Ainsi les transmissions de chaque barrière évoluent en des sens opposés, mais leur somme reste quasi-constante [6]. Il en résulte que le couplage avec le continuum, qui fixe la largeur du pic de résonance selon l'équation 1-19, est pratiquement inchangé. Ceci explique que les variations apparentes de la largeur du pic avec la tension soient très peu marquées dans ce cas.

### 2.1.3 Détermination expérimentale du 1er niveau

Nous nous proposons dans ce paragraphe de montrer qu'une simple étude en température des caractéristiques  $I(V)$  permet de remonter à la position relative du 1er niveau confiné par rapport à l'énergie de Fermi [7]-[8].

En pratique la détermination des niveaux quasi-liés par une méthode optique, telle que la photoluminescence, reste problématique pour des structures dont les barrières sont de faibles dimensions.

L'amplitude du signal est en effet directement proportionnelle au rapport des temps de fuite et des temps de recombinaison radiative. Un temps de fuite très inférieur à  $\tau_r$  interdit toute mesure. Nous allons voir que l'étude de la conduction tunnel assistée thermiquement permet de s'affranchir de cette difficulté, et de visualiser les variations de  $E_0 - E_F$  en incluant les effets introduits par les couches d'accumulation et de déplétion.

Pour cela nous allons déterminer une expression analytique de  $J(\theta, V_c)$  pour des points de polarisation très inférieure à  $V_{pic}$ . Nous supposons que dans la gamme de température étudiée, la contribution des transmissions hors résonance à la valeur du courant est négligeable. Nous admettrons de plus que les variations de la transmission sont Lorentziennes centrées autour de  $E_0$ , tandis que la supply function sera considérée constante à sa valeur  $F(E_0, \theta, V_c)$  sur la largeur du pic de transmission.

Compte tenu de ces hypothèses, le courant peut se mettre sous la forme :

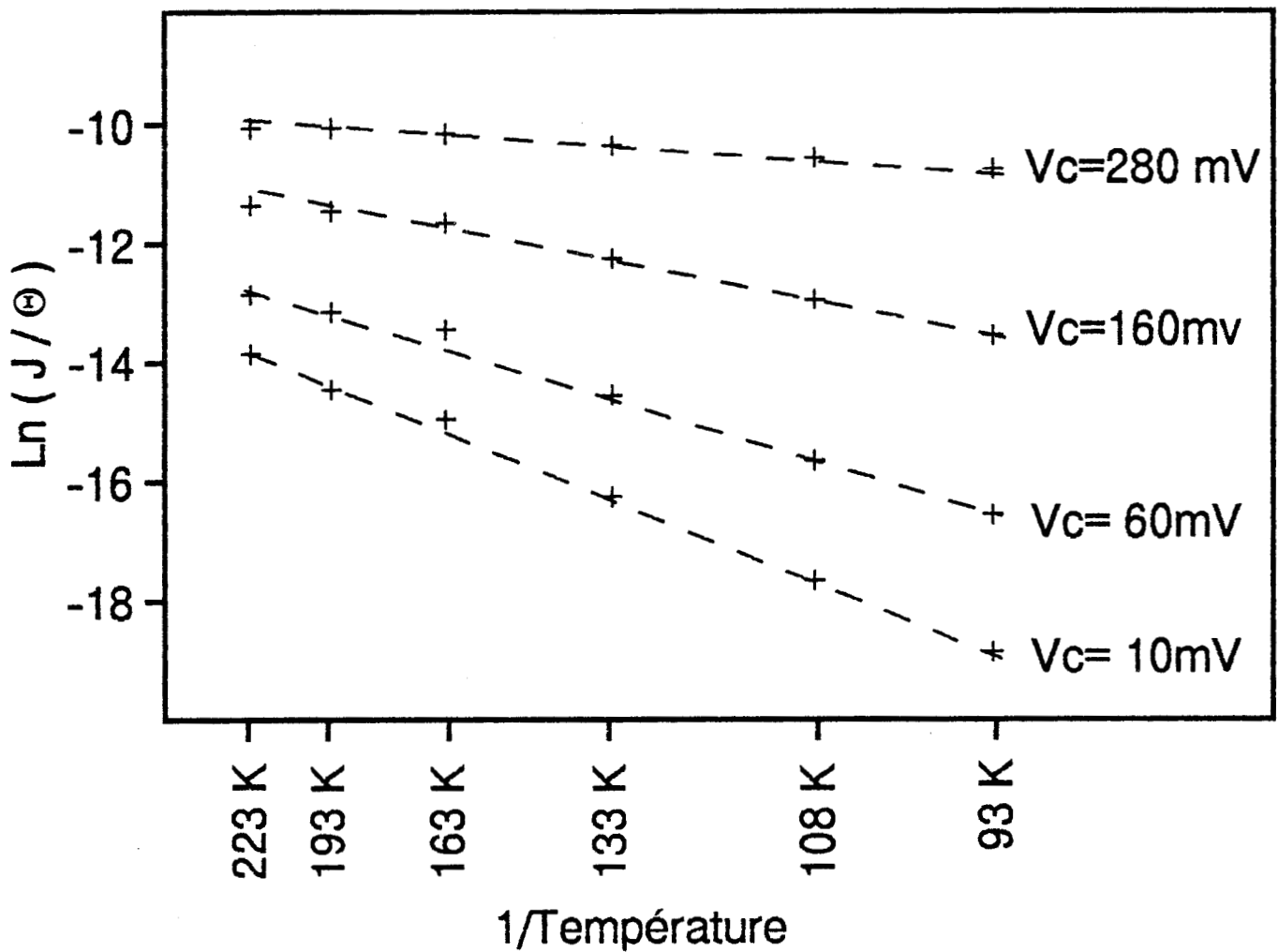


Fig 2.10 : Methode de determination expérimentale de l'énergie du premier niveau quasi-lié. Des relevés de  $I(V)$  à différentes températures permettent de tracer le diagramme d'Arrhenius  $\ln(J/\Theta) = f(1/\Theta)$ . Pour chaque tension de polarisation  $V_c$  (ici directe), les points obtenus sont quasiment alignés selon des droites de pente  $(E_f - E_0(V_c)) / k_B \Theta$ .  
 Caractéristiques de la Double Barrière mesurée : Ga Al As ( $x = 0.3$ ) / GaAs, Largeur des barrières et du puits 50 Å. Espaceurs de 500 Å et 750 Å dopés  $2 \cdot 10^{16}$ .



$$J(\theta, V_c) = \frac{qm^* K_B \theta T(E_0)}{2\pi^2 \hbar^3} \Gamma_e \frac{\pi}{2} F(E_0, \theta, V_c) \quad (2-5)$$

L'expression de la supply function, pour une énergie  $E_z = E_0$  peut être simplifiée si  $E_0 - E_F > K_B \theta$ .

On obtient alors :

$$F(E_0, \theta, V_c) \approx \exp((E_F - E_0) / K_B \theta) (1 - \exp(-qV_c / K_B \theta)) \quad (2-6)$$

En normalisant  $J$  par rapport à  $K_B \theta (1 - \exp(-qV_c / K_B \theta))$ , on obtient pour expression du courant

$$\frac{J(\theta, V_c)}{K_B \theta (1 - \exp(-qV_c / K_B \theta))} = \frac{J_0}{E_F} \exp((E_F - E_0) / K_B \theta) \quad (2-7)$$

où  $J_0$  est une constante pour  $V_c$  fixée, donnée par :

$$J_0 = \frac{qm^* E_F T(E_0(V_c)) \Gamma_e \pi / 2}{2\pi^2 \hbar^3} \quad (2-8)$$

On obtient sur le diagramme d'Arrhenius des droites de pente  $(E_F - E_0(V_c)) / K_B \theta$ .

Cette loi exponentielle des valeurs de courant en fonction de  $1/\theta$  est expérimentalement vérifiée, comme on peut le constater sur la figure 2-10. La structure considérée est une double barrière  $\text{Al}_{0.3} \text{Ga}_{0.7} \text{As } 50 \text{ \AA} - \text{GaAs } 50 \text{ \AA} - \text{Al}_{0.3} \text{Ga}_{0.7} \text{As } 50 \text{ \AA}$  ; encadrée par 2 zones dopées à  $2.10^{16} \text{ cm}^{-3}$ , de largeurs respectives 500 et 750 Å.

A chaque extrémité 2 zones fortement dopées à  $2.10^{18} \text{ cm}^{-3}$  terminent la séquence.

Le domaine de validité en température, déterminé pour cette structure, est conditionné par 2 effets [9]. Pour des températures  $> 300 \text{ K}$ , les transmissions non incluses dans la 1ère résonance viennent se rajouter au courant et ainsi fausser la loi.

Pour des températures  $< 90 \text{ K}$ , le courant redevable au 1er niveau devient du même ordre de

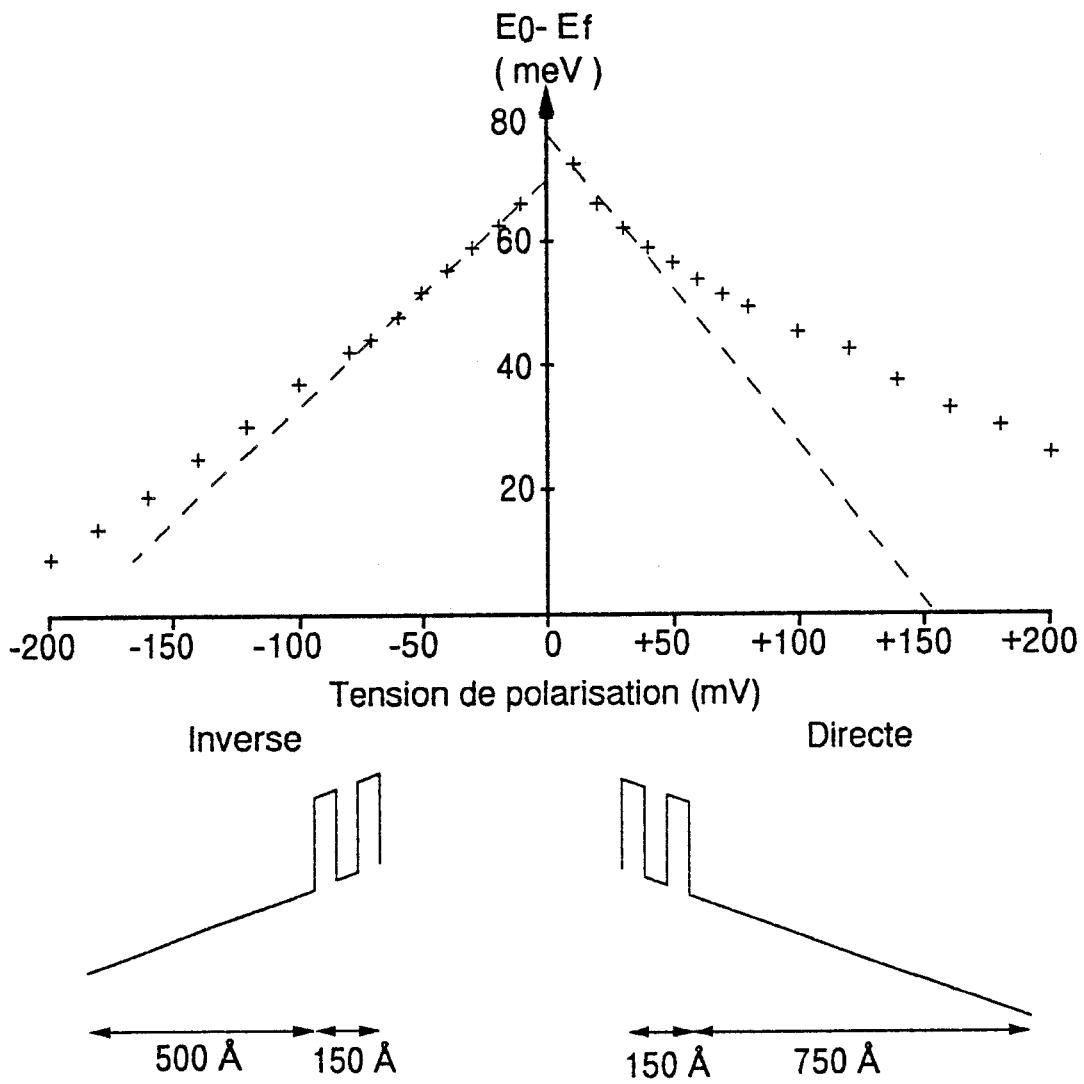


Fig 2.11 : Commande de l'énergie du 1er niveau quasi-lié par la tension, relativement à l'énergie de Fermi dans l'émetteur. La double barrière étudiée est identique à celle décrite fig. 2.10. Les 2 sens de polarisation sont explorés. L'extrapolation en  $V_c = 0$  donne  $E_1 - E_f = 76$  meV en direct (70 meV en inverse).

grandeur que le terme de courant crée par les électrons passant hors résonance à des énergies inférieures à  $E_F$ .

Cette étude a été menée pour les 2 sens de polarisation. En polarisation inverse, on a pu constater une dispersion importante des points de mesure. Dans ce cas nous avons eu recours à la méthode des moindres carrés pour déterminer les pentes des droites.

La figure 2.11 décrit la commande de  $E_0$  par la tension  $V_c$  relativement à l'énergie de Fermi. En extrapolant à tension nulle les variations de  $E_0(V_c)$  en polarisation directe, nous obtenons la valeur  $E_1 - E_F = 76 \text{ meV}$  ( $70 \text{ meV}$  en inverse). Ces valeurs tirées de l'expérience sont en très bon accord avec la valeur de  $73 \text{ meV}$  que l'on peut calculer théoriquement pour le niveau fondamental. En effet il convient de prendre ici pour l'énergie  $E_F$  un quasi-niveau de Fermi que l'on peut estimer très proche du bas de la bande de conduction dans la structure étudiée.

L'étude de la commande en tension en polarisation directe révèle un abaissement de l'énergie de confinement, initialement en  $V_c/2$  pour  $V \leq 30 \text{ meV}$ , et qui obéit ensuite à la loi  $E_0 - E_F \approx 56 \text{ meV} - V_c/6, 1$ .

La pente de  $1/6$  peut s'expliquer par les zones d'accumulation et de déplétion adjacentes à la double barrière. Ces zones, visualisées sur les insets de la figure 2.11 introduisent des décalages dans la tension de commande.

Les mesures effectuées en polarisation directe sont plus difficilement interprétables. La décroissance de  $E_0$  avec  $V_c$  s'effectue avec une pente moyenne de l'ordre de  $1/2,6$  jusqu'à  $V_c = 70 \text{ meV}$ .

Au delà la courbe  $E(V_0)$  n'admet plus d'asymptote. Les différences notables entre les 2 sens de polarisation sont probablement liées aux différences d'états d'interfaces directes et inverses vues par les électrons suivant le sens de polarisation.

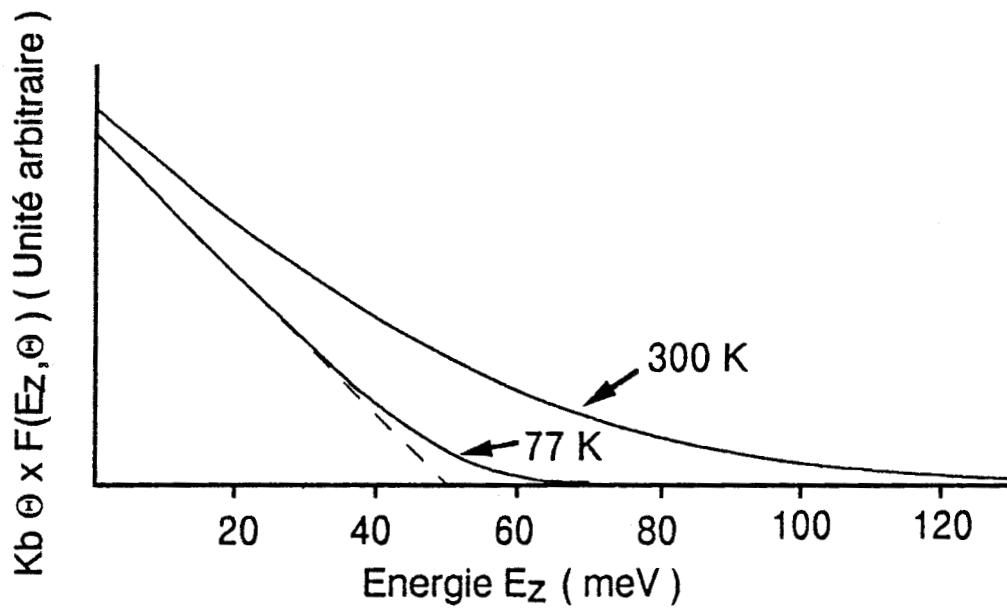


Fig 2.12 : Supply Function  $F ( E_z )$  multipliée par le préfacteur  $K_b \theta$ , pour des températures de 300 k, 77 k et proche de 0K. L'énergie de Fermi est prise égale à 50 meV indépendamment de la température.

## 2.2 Caractéristiques statiques en courant $I(V)$

### 2.2.1 Allure des caractéristiques

Dans ce paragraphe, nous allons nous attacher à expliquer les variations du courant en fonction de la tension, à partir de la supply function et des remarques faites sur la transmission de la double barrière.

L'expression du courant traversant la structure fait intervenir sous le signe intégral, outre la fonction de transmission, la supply function  $F$ .

#### 2.2.1.1 Analyse de la supply function

Dans le cas d'un émetteur tridimensionnel, cette fonction s'exprime

$$F(E_z, \theta, V_c) = \ln \left[ \frac{1 + \exp((E_F - E_z) / K_B \theta)}{1 + \exp((E_F - E_z - qV_c) / K_B \theta)} \right] \quad (2-9)$$

$F$  traduit la distribution en énergie des porteurs qui s'appêtent à franchir la double barrière de l'émetteur vers le collecteur et vice-versa.

En bande plate ces 2 composantes de courant sont en moyenne égales. Le courant résultant est alors nul.

Lorsqu'une tension est appliquée, le rôle du dénominateur devient rapidement négligeable. Pour  $qV_c \gg K_B \theta$ , la supply function s'écrit :

$$F(E_z, \theta) = \ln \left( 1 + \exp((E_F - E_z) / K_B \theta) \right) \quad (2-10)$$

Sur la figure 2.12 nous avons représenté les variations de  $F$  ainsi obtenue, multipliée par le terme  $K_B \theta$ , en fonction de l'énergie longitudinale des porteurs à 0,77 et 300 K respectivement.

On constate que pour des températures très basses,  $F(E_z, \theta)$  varie linéairement :

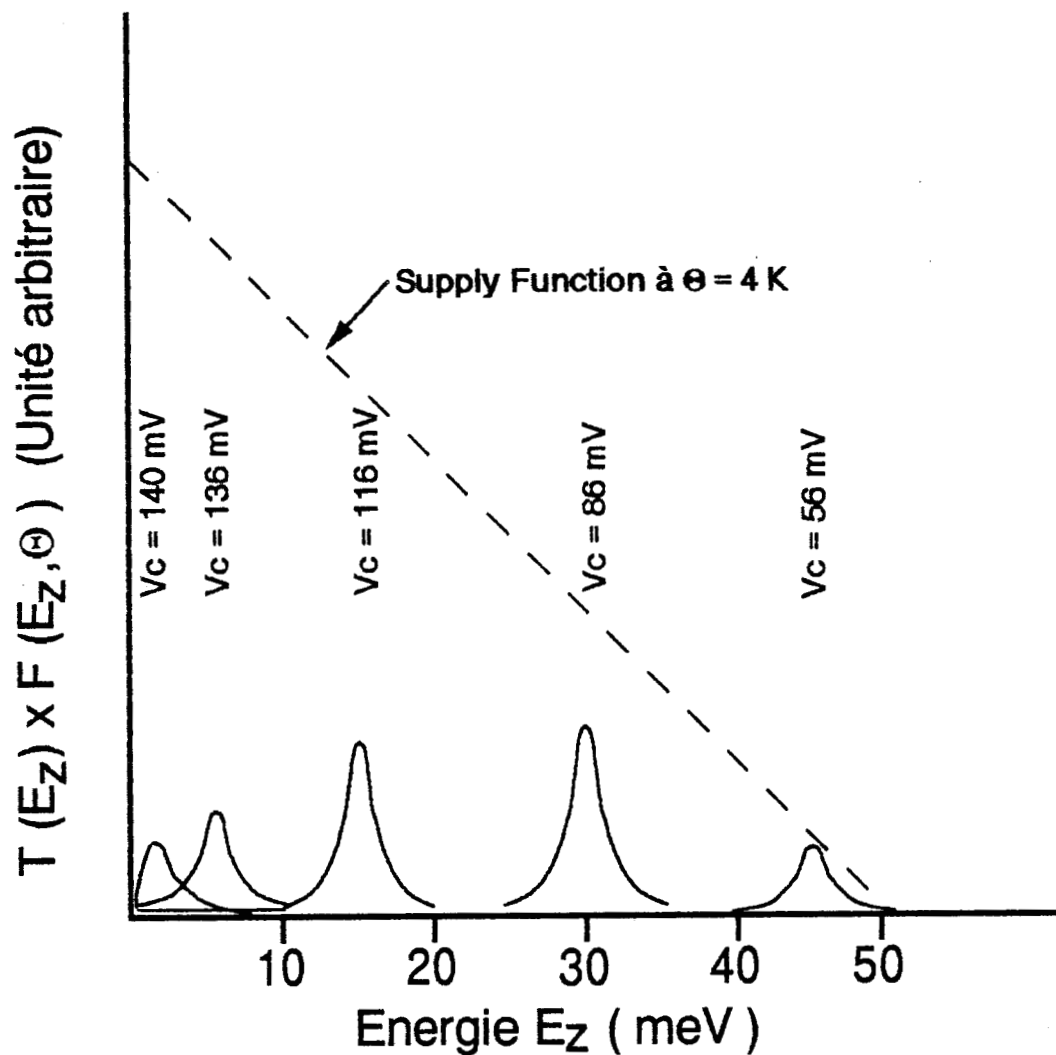


Fig 2.13 : Formation du pic de courant à basse température pour une double barrière Ga Al As / Ga As. Le pic de transmission, multiplié par la supply function à 4 K, est représenté dilaté 10 fois en largeur pour des tensions de polarisation de 56; 86, 116; 136 et 140 mV. Le courant est proportionnel à l'aire sous ce pic. La diminution du courant est produite par la chute de la valeur de transmission résonante, la largeur du pic variant peu.

Largeur du puits : 50 Å. Largeur des barrières : 50 Å. Hauteur des barrières :  $\Delta V = 230$ meV  
Masse effective des électrons :  $m = 0.067 m_e$  dans le puits,  $m = 0.092 m_e$  dans les barrières.

$$\begin{cases} F(E_z, \theta) = \frac{E_F - E_z}{K_B \theta} & \text{pour } E_z < E_F \\ F(E_z, \theta) \approx 0 & \text{pour } E_z > E_F \end{cases} \quad (2-11)$$

L'augmentation de la température se manifeste essentiellement par la présence d'une queue de distribution qui peut être approximée par :

$$F(E_z) \approx \exp\left(\frac{E_F - E_z}{K_B \theta}\right) \quad \text{pour } E_z > E_F \quad (2-12)$$

### 2.2.1.2 Caractéristiques $I(V)$ théoriques

La figure 2.13 va nous permettre d'illustrer les variations  $J(V)$  à très basses températures. La fonction  $F$  est alors assimilable à une fonction triangle. Pour la structure envisagée, le 1er niveau résonant se situe à l'équilibre à une énergie supérieure à l'énergie de Fermi.

Tant que l'énergie de résonance  $E_0$  est supérieure à  $E_F$ , le courant traversant la double barrière est très faible, car la probabilité de trouver des porteurs d'énergie  $E_z > E_F$  est elle aussi faible. On doit observer une brusque augmentation des valeurs de courant lorsque le 1er niveau croise l'énergie de Fermi dans l'émetteur.[10]

Tant que la tension appliquée n'induit que de faibles variations de la transmission maximum du pic de résonance, la variation du courant est linéaire avec  $V_c$ . [11]

Dans une première analyse, cette augmentation des valeurs de courant se poursuit tant que  $E_0$  est comprise entre  $E_c$  et  $E_F$ . Dès que  $E_0$  devient inférieure à  $E_c$ , on devrait observer une chute très brutale des valeurs de courant, puisqu'on ne peut satisfaire à la conservation du vecteur  $K$  longitudinal.

En réalité, on a pu constater que la valeur maximale de la transmission décroît avec la tension. Il en résulte que la valeur pic du courant est obtenue pour une énergie apparente  $E_0$  supérieure à  $E_c$ . Une brusque augmentation des valeurs de courant, caractéristique du croisement entre  $E_F$  et  $E_0$ , suivie d'une variation linéaire de  $I$  avec la tension sont effectivement observées à l'hélium.

Nous avons vu au § 1.4.2 que le courant pic pouvait être considéré comme pratiquement

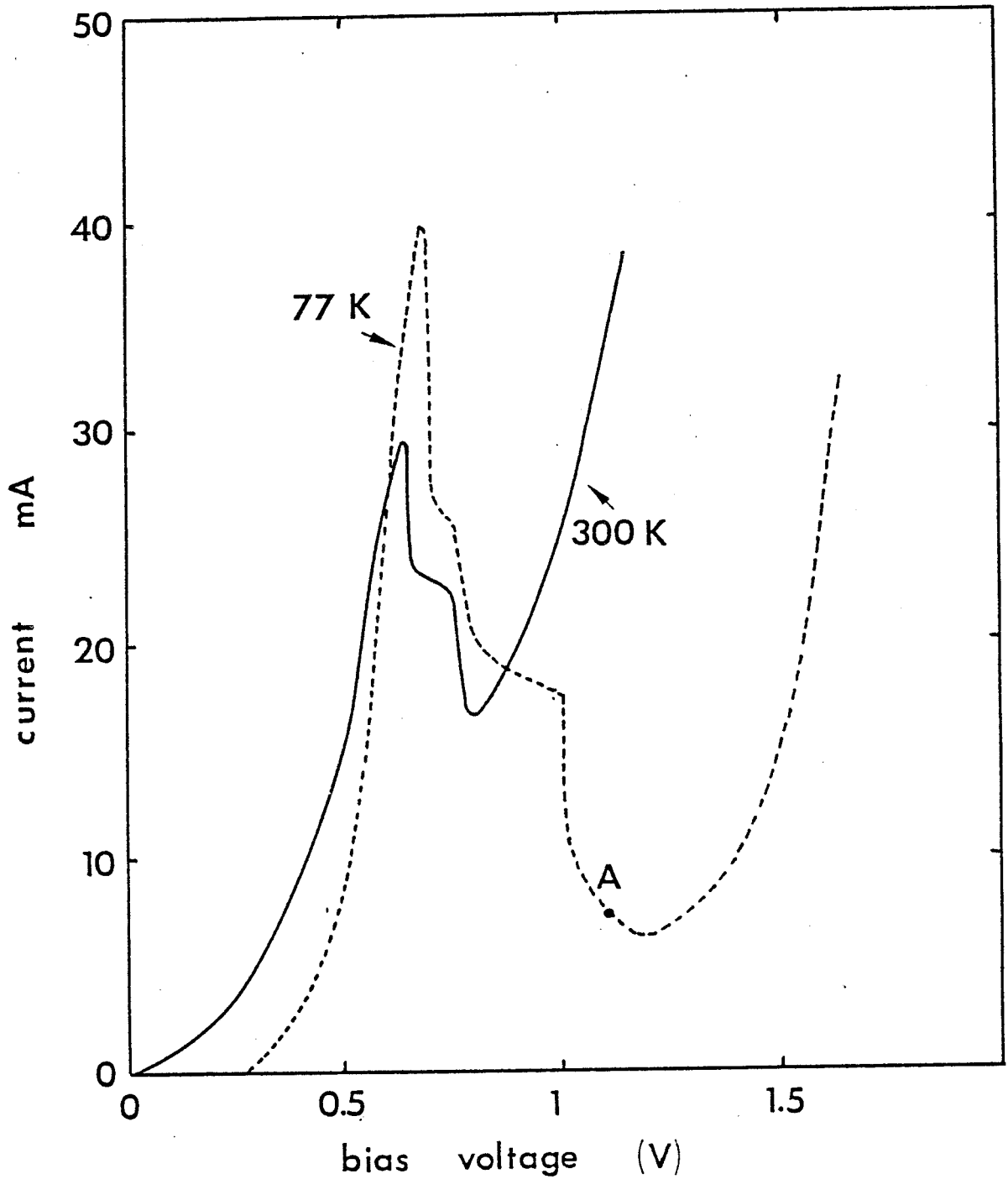


Fig 2.14 : Caractéristiques  $J(V)$  expérimentales à 77 K et 300 K.  
 Caractéristiques de la Double Barrière mesurée : GaAlAs ( $x = 0.3$ ) / GaAs, Largeur des barrières et du puits 50 Å. Espaceurs de 500 Å et 750 Å dopés  $2 \cdot 10^{16}$ .



indépendant de la température. Cette remarque est à nuancer. La couche d'accumulation joue notamment un rôle sur la hauteur apparente des barrières : les caractéristiques de cette couche peuvent varier en fonction de la température, comme nous le verrons au chapitre 3. En fait la densité de courant pic observé sur la structure précédemment décrite décroît lentement de 20,5 à 15,9 KA/cm<sup>2</sup> lorsque la température augmente de 77 à 300 K. C'est à l'ambiante que la valeur minimum du  $J_{pic}$  est observée.

Pour des températures plus élevées, l'existence dans la fonction  $F$  d'une queue de distribution permet le passage d'une composante de courant soit par les niveaux d'ordre supérieurs, soit au dessus des barrières (composante thermoionique). On observe dans ce cas une augmentation du courant pic en fonction de la température.

La valeur à basse température du courant vallée est imposée par la transmission hors résonance. Lorsque la température augmente, le même phénomène d'étalement de la supply function permet aux électrons à l'énergie du 2ème niveau de traverser la structure. Il en résulte une augmentation notable du courant vallée.

La figure 2.14 donne les caractéristiques  $I(V)$  de cette même structure GaAlAs ( $x = 0.3$ )/GaAs, à 77 et 300 K. On note que l'augmentation du courant avant et après la zone de RDN est retardée à basses températures. La valeur du courant pic est peu sensible à la température alors que le courant vallée croît effectivement fortement entre 77 et 300 K; en accord avec les explications précédentes.

## 2.2.2 Approximation analytique du courant $J_{vallée}$

- Hypothèses, critère de validité.

La détermination exacte du courant vallée dans le cas général nécessite l'évaluation numérique de l'intégrale (1.36) pour les valeurs de transmission à la tension  $V_{vallée}$ . A l'inverse de la transmission correspondant au courant pic (souvent approximée par une Lorentzienne sur une plage d'énergie très étroite), les valeurs de transmission au courant vallée sont importantes sur l'ensemble du domaine d'existence de la supply function. Cependant une expression approchée du courant  $J_{vallée}$  peut être proposée en se plaçant sous les hypothèses suivantes :

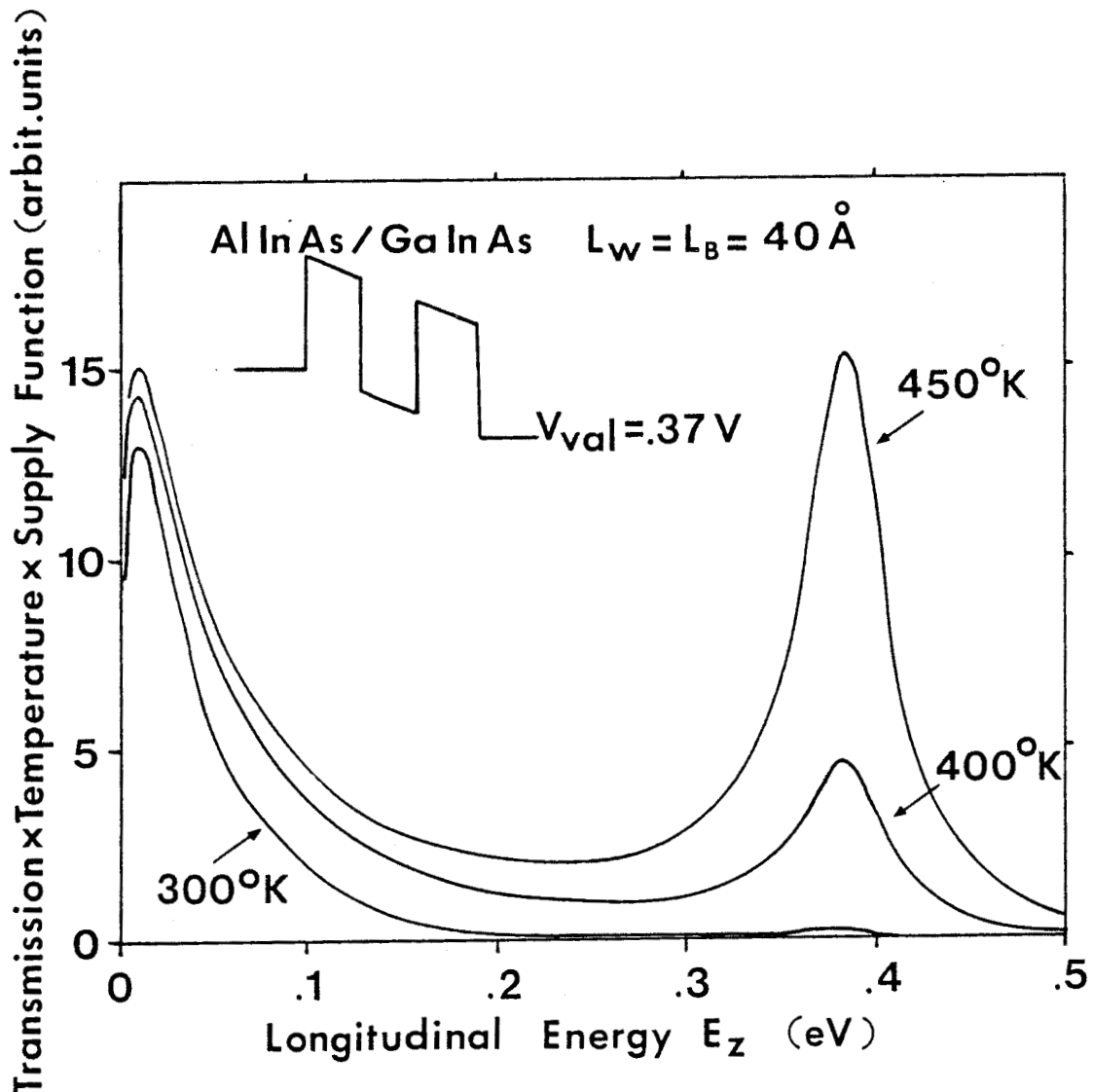


Fig 2.15 : Limitation en température de l'approximation analytique du courant vallée. La polarisation considérée correspond au courant vallée. Le produit  $K_b \Theta F(E_z) T(E_z)$  est représenté pour des températures de 300; 400 et 450 K. Pour  $\Theta > 300$  K, la conduction thermiquement assistée via le 2eme niveau ne rentre plus dans le cadre des hypothèses.

Structure considérée : AlInAs / GaInAs

Masse effective des électrons :  $m = 0.042 m_e$  dans le puits,  $m = 0.075 m_e$  dans les barrières.

Largeur du puits : 40 Å. Largeur des barrières : 40 Å. Hauteur des barrières :  $\Delta V = 530$  meV

- La séparation en énergie entre le niveau fondamental et le 1er niveau excité est largement supérieure à  $E_F$ , de telle manière que seule la transmission hors résonance contribue à construire le courant vallée (composante de courant à travers le 2ème niveau négligeable.)
- La température est suffisamment basse pour que la largeur effective du domaine d'intégration entre  $E_z = 0$  et  $E_z = E_F + \text{quelques } K_B \theta$ , soit suffisamment réduite afin que l'on puisse considérer la transmission comme constante sur ce domaine. Ceci peut être vérifié par un calcul exact des fonctions de transmission à l'équilibre comme en polarisation.

La figure 2.15 permet de définir les limites de la validité de ces hypothèses. Nous avons représenté le produit  $K_B \theta F(E_z, \theta) T(E_z)$  calculé numériquement en fonction de  $E_z$  pour une structure AlInAs 40 Å / GaInAs 40 Å / AlInAs 40 Å. Le choix de cette structure se justifie par l'écart important en énergie (428 meV) entre le niveau fondamental et le 1er niveau excité, qui se situe à des valeurs d'énergie proches de la discontinuité de bande de conduction, égale à 0.53 eV. La polarisation en tension appliquée correspond à l'obtention du courant vallée. Ce courant est directement proportionnel à l'aire sous chacune des courbes tracées pour les températures  $\theta = 300, 400$  et  $450 K$ . Nous constatons que jusqu'à  $\theta = 300 K$  ce courant vallée n'est redevable qu'aux électrons traversant la structure à des énergies non résonantes. Pour  $\theta = 450 K$ , la contribution du 2ème niveau devient du même ordre de grandeur que celle des énergies inférieures. Ce dernier cas est hors des limites de validité des hypothèses permettant un traitement analytique.

La valeur limite, environ 300 K obtenue ici pour une largeur de puits de 40 Å, peut être notablement réduite lorsque l'on choisit une largeur de puits plus importante.

Pour le système GaAlAs/GaAs ( $x = 0.3$  ;  $L_W = 50$  Å) dans lequel  $E_2 - E_1$  ne vaut plus que 190 meV, les hypothèses ne sont plus vérifiées que pour des températures inférieures à 150 K.

Nous voyons ici que l'existence d'un grand écart entre les énergies des 2 premiers niveaux est un facteur essentiel pour l'obtention d'une valeur faible du courant vallée à température ambiante.

Cette limite en température établie on peut poser  $T(E_z) \approx T_g T_d$  où  $T_g$  et  $T_d$  sont maintenant les transmissions des barrières gauche et droite pour la polarisation  $V_c = V_{val}$ .

Dans ces conditions, le courant vallée se met sous la forme :

$$J_{val} = \frac{qm^*T_gT_d}{2\pi^2\hbar^3} K_B \theta \int_0^\infty F(E_z, \theta) dE_z \quad (2-13)$$

Le courant vallée est fonction de la température au travers du terme

$$f(\theta, E_F) = K_B \theta \int_0^\infty F(E_z, \theta) \quad (2-14)$$

A basses températures,  $f(E_F, \theta)$  tend vers sa valeur limite  $\frac{E_F^2}{2}$ . Le courant vallée est alors donné par :

$$J_{val} = \frac{qm^*E_F^2}{4\pi^2\hbar^3} T_g T_d \quad (2-15)$$

A plus hautes températures,  $f(\theta, E_F)$  peut être approximé par :

$$f(\theta, E_F) \approx \frac{E_F^2}{2} + 0.35 K_B \theta E_F + 0.7 (K_B \theta)^2 \quad (2-16)$$

### 2.2.3 Contraste en courant théorique

Nous avons établi des expressions analytiques des courants pic et vallée en fonction des transmissions des 2 barrières (1-41) et (2-13). Le contraste en courant peut alors en être déduit, à la condition préalable d'établir une correspondance entre les transmissions élémentaires  $T_g$  et  $T_d$  obtenues à  $V_c = V_{pic}$  et  $V_c = V_{val}$ .

Nous introduirons ici un coefficient  $\alpha > 1$  afin de traduire l'accroissement de la transparence des 2 barrières lorsque la tension de polarisation est augmentée de  $V_{pic}$  à  $V_{val}$ . Ce coefficient est défini par la relation :

$$T_g T_d (V_c = V_{val}) = \alpha T_g T_d (V_c = V_{pic}) \quad (2-17)$$

A titre d'exemple une expression de  $\alpha$  peut être obtenue dans le cas d'une structure où les 2 barrières sont de même hauteur  $\Delta V$  : considérons que l'application d'une tension de polarisation  $V_c$  abaisse la barrière côté émetteur de  $\beta V_c$  tandis que la barrière côté collecteur voit sa hauteur apparente moyenne diminuée de  $\beta' V_c$ . Pour une structure vérifiant  $L_w = L_d = L_g$ , on aurait  $\beta = \frac{1}{6}$ ;  $\beta' = \frac{5}{6}$ .

En utilisant l'approximation *WKB* pour exprimer les différentes transmissions de la relation 2.17, il vient :

$$\ln(\alpha) = \frac{\sqrt{2m_{bar}^* / \Delta V}}{\hbar} [V_{val} - V_{pic}] [\beta' L_d - \beta L_g] \quad (2-18)$$

Le rapport entre les courants pic et vallée peut maintenant être mis sous la forme :

$$\frac{J_{pic}}{J_{val}} = \frac{2(E_F - E_0) E_1}{\alpha f(\theta, E_F)} \frac{1}{T_g + T_d} \quad (2-19)$$

où  $T_g$  et  $T_d$  correspondent à la polarisation  $V_c = V_{pic}$

## 2.3 Optimisation des structures

### 2.3.1 Compromis entre $J_{pic}$ et le contraste en courant, critère d'optimisation

Nous allons ici mettre en évidence l'existence d'une relation liant le pic de courant et le contraste  $J_{pic} / J_{vallée}$  pour une structure donnée. Il est intuitif que l'obtention d'un fort courant pic et d'un rapport  $J_{pic} / J_{vallée}$  important sont des objectifs antinomiques. Par exemple un épaissement des barrières permet bien d'augmenter théoriquement le contraste en courant, mais cela se fait au détriment de l'intensité du courant pic.

2 relations peuvent être déduites des eqs 2-19 et 1-41 en considérant que les variations du paramètre  $\alpha$  par un changement de géométrie sont négligeables au 1er ordre. La première relation s'écrit :

$$\frac{J_{pic}}{J_{val}} = \frac{qm^* (E_F - E_0)^2 E_1^2}{\pi^2 \hbar^3 2 \alpha f(E_F, \theta)} T_{res} \frac{1}{J_{pic}} \quad (2-20)$$

Considérons le graphe  $J_{pic}$  fonction de  $J_{pic} / J_{val}$ , de la figure 2.16a. L'hyperbole correspondant

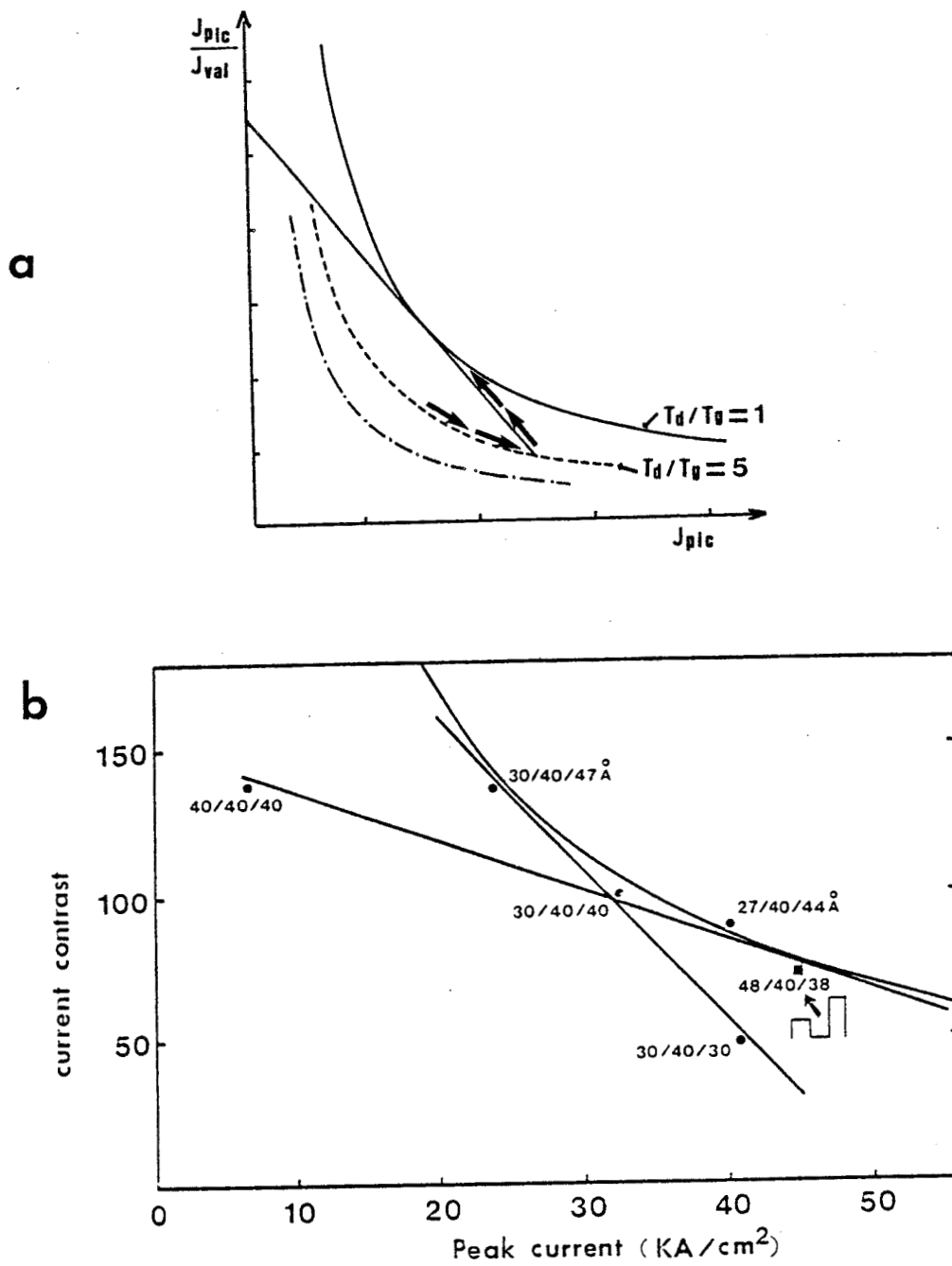


Fig 2.16 : Graphe Contraste en courant /  $J_{pic}$

a) A partir du point représentatif d'une DB, il suffit de 2 déplacements pour atteindre l'hyperbole optimum.  
 b) Les points représentatifs de structures Al In As / Ga In As ( $L_w = 40 \text{ \AA}$ ) ne différant que par la largeur d'une barrière, sont trouvés quasi-alignés (résultat d'un calcul numérique à 300 K). Une structure présentant une barrière émetteur en Ga Al In As ( $x=0.5$ ), est également reportée.

à  $T_{res} = 1$  constitue le lieu des optimums, les points situés au delà n'étant pas accessibles pour le système de matériaux considérés.

Le critère définissant une structure optimale, est donc la recherche de l'égalité des transmissions à l'énergie de resonance pour la polarisation  $V_c = V_{pic}$ .

Par conséquent, la structure optimale peut être réalisée par une hétérostructure dissymétrique pour laquelle, sous polarisation, chaque barrière présente un coefficient  $T_0$  de transmission en puissance donné par :

$$T_0 = \frac{2 \pi^2 \hbar^3 J_{pic}}{qm^* (E_F - E_0) E_1} \quad (2-21)$$

La seconde relation liant  $J_{pic}$  au contraste en courant est obtenue en substituant dans (2-19) le facteur  $\frac{1}{T_d + T_g}$  par son équivalent :

$$\frac{1}{T_d} - \frac{1}{T_d^2} \frac{T_d T_g}{T_d + T_g} \quad (2-22)$$

on obtient alors

$$\frac{J_{pic}}{J_{val}} = -\frac{1}{T_d^2} \frac{2 \pi^2 \hbar^2}{qm^* \alpha_f(E_F, \theta)} J_{pic} + \frac{1}{T_d} \frac{2(E_F - E_0) E_1}{\alpha_f(E_F, \theta)} \quad (2-23)$$

ainsi qu'une expression similaire en remplaçant  $T_d$  par  $T_g$ .

Ces 2 relations vont nous permettre de déplacer le point représentatif d'une structure sur le graphe  $J_{pic}$  / contraste en courant, par modifications successives de la géométrie. Ainsi par une modification simultanée des 2 barrières telle que le rapport  $T_g / T_d$  soit conservé, on se déplace le long d'une hyperbole. Lorsqu'une seule des 2 barrières est modifiée on se déplace le long d'une droite tangente à l'hyperbole optimum.

L'optimisation d'une structure pour un  $J_{pic}$  donné pourra donc être réalisée par 2 déplacements

successifs sur le graphe  $J_{pic} / J_{val}$  en fonction de  $J_{pic}$ . Un tel chemin est visualisé par des flèches sur la figure 2-16a.

Pour valider ces résultats analytiques, nous avons également effectué un calcul exact des caractéristiques  $I(V)$  de différentes structures dans le système de matériaux AlInAs/GaInAs/AlInAs. Les résultats de ce calcul numérique sont reportés sur la figure 2-16b. La largeur de puits est fixée à 40 Å. La température de 300 K constitue la limite de validité des approximations analytiques du courant vallée.

Nous constatons que les points représentatifs des structures ne différant que par la largeur d'une seule barrière sont effectivement quasi-alignés. En traçant l'hyperbole optimale résultante où  $T_{res} = 1$  à partir des résultats numériques, le paramètre  $\alpha$  peut être ajusté. On trouve  $\alpha = 2,7$ .

La plupart des résultats concernant cette optimisation ont été obtenus par différenciation de la largeur des barrières. Les composés quaternaires GaInAlAs devraient permettre également d'optimiser les structures en jouant sur les hauteurs respectives des barrières [12]. A titre d'exemple, nous avons reporté sur la figure 2-16b le résultat d'un calcul effectué sur une structure  $\text{Ga}_{0.5}\text{In}_{0.5}\text{As}$ ,  $L_B = 48$  Å / GaInAs,  $L_W = 40$  Å / AlInAs,  $L_B = 30$  Å. On constate qu'il est possible théoriquement d'obtenir une densité de courant de 50 KA/cm<sup>2</sup> associée à un contraste en courant de 30.

Il convient de remarquer que les valeurs de contraste en courant ainsi calculées sont systématiquement surestimées par rapport aux résultats expérimentaux [13]-[15]. Un meilleur accord entre théorie et expérience sera recherché au chapitre 3.

Nous nous proposons de compléter cette recherche de la structure optimale en donnant quelques indications sur le choix d'un matériau.

### 2.3.2 Guides pour le choix d'un système de matériaux

Par le choix judicieux d'un système de matériaux, il est possible de faire varier les masses effectives dans le puits et les barrières ainsi que les discontinuités de la bande de conduction, donc des hauteurs de barrière. Dans le tableau 1, nous avons regroupé les valeurs numériques communément



admisses pour le système GaAs/GaAlAs pour une concentration en Aluminium  $x = 0,37$  correspondant au cross-over gap direct-gap indirect; pour le système binaire GaAs/AlAs, pour le système GaInAs/InP et pour le système GaInAs/AlInAs.

Pour les structures ternaires  $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$  ( $x < 0,37$ ), les discontinuités  $\Delta E_c$  sont peu importantes (majorées par la valeur  $300 \text{ meV}$ ). Il en résulte l'existence d'une composante thermoionique qui peut masquer la contribution tunnel pour des températures élevées.

Les structures GaAs/AlAs présentent théoriquement des discontinuités de bande de conduction très importantes, de l'ordre de  $1 \text{ eV}$  si l'on suppose que seuls les porteurs localisés en vallée  $\Gamma$  dans la zone de Brillouin participent à la conduction par effet tunnel.

Un certain nombre d'études récentes ont montré cependant la possibilité pour les électrons de subir un transfert en vallée X [17]-[18]. La hauteur de barrière est alors notablement réduite ( $0,2 \text{ eV}$ ) et la masse effective, qui correspond à la valeur longitudinale, croît très fortement ( $m^* = 1,1 m_e$ ).

La réalité expérimentale tend à prouver que les 2 aspects de tunnel via les vallées  $\Gamma$  et X coexistent. Les méthodes de simulation développées jusqu'ici ne nous permettent pas de prendre en compte cet aspect.

Pour le système GaInAs/InP, plusieurs déterminations expérimentales des discontinuités des bandes de valence  $\Delta E_v$  et de conduction  $\Delta E_c$  ont montré que  $\Delta E_c$  est relativement faible, de l'ordre de  $0,2 \text{ eV}$ . De telles structures sont donc plus favorables pour observer l'effet tunnel résonant de trous. Nous n'avons pas envisagé cette étude sur les trous dans la mesure où pour les composants, le transport par électrons semble plus favorable.

Le système GaInAs/AlInAs constitue un excellent candidat pour la réalisation de diodes double barrières. Les masses effectives des porteurs y sont plus faibles que dans le système GaAs/GaAlAs. De plus la hauteur de discontinuité de bande de conduction atteint  $0,5 \text{ eV}$ , ce qui assure un meilleur confinement.

Pour préciser cette sensibilité des structures à faible hauteur de barrière à une augmentation de

Matériau	$m^*$ conduction	$\Delta\varepsilon_g(\text{ev})$	$\Delta\varepsilon_c(\text{ev})$	Remarque
GaAs/GaAlAs $x_c = 0.37$	0.067/0.098	1.42/1.88 $\Delta\varepsilon_g = 0.46$	0.3	$\Delta\varepsilon_c = 65\% \varepsilon_g$ density of state effective mass
GaAs/AlAs	0.067/0.150	1.42/2.17 $\Delta\varepsilon_g = 0.75$	0.94	Choix des masses effectives et discontinuités $\Gamma$ -X et/ou $\Gamma$ - $\Gamma$
GaInAs/InP	0.04/0.08	0.73/1.29 $\Delta\varepsilon_g = 0.56$	0.2 à 0.4	Indétermination sur la valeur des discontinuités : tunnel de trous tunnel d'électrons
GaInAs/InAlAs	0.04/0.0836	0.73/1.47 $\Delta\varepsilon_g = 0.74$	$\sim 0.5$	

la température, nous pouvons essayer d'établir l'expression d'une température maximale au delà de laquelle il semble illusoire d'espérer observer une résistance différentielle négative.

Une approximation par défaut de la transmission aux énergies inférieures au second pic de résonance est fournie par la courbe-enveloppe de la transmission non résonante.

Sur la figure 2.6 on constate que celle-ci présente un caractère exponentiellement croissant avec  $E_z$ . En exprimant selon la formule WKB les transmissions des 2 barrières de largeur  $L_g$  et  $L_d$ , de même hauteur  $\Delta E_c$ , la courbe enveloppe inférieure peut être décrite par

$$T(E_z) = T_0 e^{\eta E_z} \quad (2-24)$$

où  $T_0$  est une constante et

$$\eta = \sqrt{\frac{2m_{bar}^*}{\Delta E_c} \frac{L_g + L_d}{\hbar}} \quad (2-25)$$

La queue de distribution de la supply function est par contre exponentiellement décroissante avec  $E_z$  :  $F(E_z, \theta) \approx \exp((E_F - E_z) / K_B \theta)$ .

Pour les énergies inférieures au second niveau résonant, le produit  $T(E_z) F(E_z, \theta)$  intervenant sous le signe intégral lors du calcul du courant vallée sera croissant ou décroissant selon le signe de  $\eta - \frac{1}{K_B \theta}$ . On observe, pour les températures rendant le produit croissant, avec  $E_z$  un courant vallée très grand qui empêche l'existence de la RDN.

La condition  $\eta = \frac{1}{K_B \theta}$  conduit à une expression de la température critique  $\theta_c$  :

$$\theta_c = \frac{1}{K_B} \frac{\hbar}{L_g + L_d} \sqrt{\frac{\Delta E_c}{2m_{bar}^*}} \quad (2-26)$$

Pour la structure GaAlAs ( $x = 0.3$ )/GaAs décrite au § 2.1.3 on obtient numériquement  $\theta_c = 372$  K. Expérimentalement on montre que l'accroissement du courant vallée avec la température est tel que la RDN disparaît à 370 K [16].

La relation 2-26 fait intervenir plusieurs paramètres géométriques et structuraux de la double barrière. La hauteur de discontinuité de bande de conduction  $\Delta E_c$  joue effectivement un rôle

important. On note également que  $\theta_c$  est d'autant plus élevée que la masse effective dans les barrières est faible. De plus des faibles largeurs de barrières contribueront à augmenter cette température critique.

La largeur du puits n'apparaît pas dans l'expression de  $\theta_c$ . En fait la relation 2-26 est justifiée lorsque le second niveau est virtuel, ou lorsqu'il affleure le haut des barrières comme c'est le cas pour nos structures expérimentales. Pour des puits de largeur supérieure à celles remplissant ce critère, l'augmentation de la transmission autour du second niveau permet l'apparition d'une composante de courant thermiquement assisté amplifiée par le phénomène de résonance. La température critique effective doit alors être plus faible que celle calculée ici.

## BIBLIOGRAPHIE

### CHAPITRE 2

- [1] : T.B. BAHDER, C.A. MORRISON, J.D. BRUNO  
Appl. Phys. Lett. 51, 1987 p.1089
- [2] B. RICCO, M. YA. AZBEL  
Phys. Rev. B. 29, 1984 p 1970
- [3] G. BASTARD, E.E. MENDEZ, L.L. CHANG, L. ESAKI  
Phys. Rev. B,28, 1983 p 3241
- [4] G. BASTARD  
Wave mechanics applied to semiconductor heterostructures, p 308  
Les éditions de physique, 1988
- [5] M. MATSUURA et T. KAMIZATO  
Phys. Rev. B, 33, 1986 p 8395
- [6] L. de SAINT POL, D. LIPPENS, F. CLEROT, B. LAMBERT,  
B. DEVEAUD, B. SERNAGE  
à paraître dans Institute of Physics Conference Series, Ga As and relative compounds 1989
- [7] M.A. REED, J.W. LEE, H.L. TSAI  
Appl. Phys. Lett. 49, 1986 p 158
- [8] O.H. HUGHES, M. HENINI, E.S. ALVES, L.EAVES, M.L. LEADBEATER, J.T. FOSTER.  
F.W. SHEARD, G.A. TOOMBS, A. CELESTE, F.C. PORTAL  
J. Vac. Sci. Technol. B6, 1988 p 1161
- [9] P. GUERET, C. ROSSEL, E. MARCLAY, H. MEIER  
J. Appl. Physl. 66, 1989 p 278
- [10] V.J. GOLDMAN, D.C. TSUI, F.E. CUNNINGHAM, W.T. TSANG  
J. Appl. Phys. 61, 1987 p 2693
- [11] H.C. LIU, G.C. AERS  
J. Appl. Phys., 65, 1989. p 4908
- [12] Y. SUGIYAMA, T. INATA, T. FUJII, Y. NAKATA, S. MUTO, S. HIYAMIZU  
Jap. J of Applied Physics. 25, 1986 p L 648
- [13] S. MUTO, T. INATA, Y. SUGIYAMA, Y. NAKATA, T. FUJII, G. OHNISHI,  
S. HIYAMIZU  
Jap. J. of Applied Physics. 26, 1987 p L 220
- [14] R.C. POTTER, A.A. LAKHANI, D. BEYEA, H. HIER  
J. Appl. Phys. 63, 1988 p 5875

- [15] S. SEN, F. CAPASSO, A.L. HUTCHINSON, A.Y. CHO  
Electronics Letters, 23, 1987, p 1229
- [16] O. VANBESIEN  
Thèse de doctorat de l'Université de Lille I, à paraître.
- [17] R. BERESFORD, L.F. LUO, W.I. WANG, E.E. MENDEZ  
Appl. Phys. Lett. 55, 1989 p 1555
- [18] P. CHENG, B.G. PARK, S. KIM, J.S. HARRIS Jr  
J. Appl. Phys. 65, 1989 p 5199

## **CHAPITRE 3**

## **Chapitre 3**

### **Réaction de charge d'espace et perte de cohérence**

Les modèles numériques développés au chapitre précédent permettent d'interpréter les mécanismes physiques à l'origine de l'existence d'une résistance différentielle négative. La comparaison des caractéristiques de courant calculées et mesurées met cependant en évidence des désaccords quantitatifs importants tant sur les valeurs des tensions critiques que sur celles des densités de courant.

Afin d'améliorer la description des caractéristiques expérimentales de conduction, nous allons dans ce chapitre inclure à notre modèle initial des phénomènes que nous avons jusqu'alors négligés. Ces phénomènes sont de 2 ordres :

- Le premier concerne la réaction de charge d'espace qui se produit dès que la densité de porteurs libres n'est plus négligeable devant la densité d'impuretés ionisées. C'est en particulier le cas dans le puits quantique lorsque la structure de la barrière collecteur permet une forte accumulation de charges.

De la même façon, il se crée en amont de la structure double barrière une zone d'accumulation qui joue un rôle déterminant sur la position et l'amplitude du pic de courant.

- Le second est relatif à la perte de cohérence des mécanismes de conduction par effet tunnel, qui peuvent mener à un accroissement spectaculaire du courant vallée.

### **3.1 Réaction de charge d'Espace dans la zone active**

Pour la clarté de l'exposé nous distinguerons la réaction de charge d'espace (RCE) dans l'ensemble puits quantique-barrières, de celle dans la couche d'accumulation d'émetteur qui sera abordée dans le §2.

#### **3.1.1 Réaction de charge d'espace dans la double barrière : objectifs et moyens**

L'étude de la réaction de charge d'espace dans une double barrière (DB) a fait l'objet de



plusieurs publications.[1]-[6]. Les traitements proposés sont soit analytiques, soit numériques en supposant que les variations spatiales du potentiel sont décrites par des fonctions linéaires par morceaux.

Les répercussions de la RCE sur les caractéristiques de conduction sont très importantes. Il s'avère donc nécessaire de prendre un pas de discrétisation très fin afin de modéliser le mieux possible le potentiel. Cela augmente notablement la complexité du traitement numérique.

Dans le souci de pouvoir étudier également d'autres types de structures que la double barrière, nous avons mis en oeuvre une méthode de calcul de la fonction d'onde et des coefficients de transmission et de réflexion, dans un potentiel quelconque. Cette méthode est basée sur la résolution numérique de l'équation de Schrödinger indépendante du temps, suivant un algorithme de calcul dit de Runge-Kutta.

### 3.1.2 Méthode de calcul "Runge-Kutta"

#### 3.1.2.1 Mise en forme de l'équation de Schrödinger

L'équation de Schrödinger indépendante du temps est du second degré en  $Z$  :

$$\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2 \varphi(Z)}{\partial Z^2} + (E - V(z)) \varphi(z) = 0 \quad (3-1)$$

Nous allons la scinder en 2 équations couplées du 1er degré. Pour cela posons :

$$\begin{cases} Y_1(Z) = \varphi(Z) \\ Y_2(Z) = \frac{\hbar}{\sqrt{2qm_e}} \frac{\partial \varphi(Z)}{\partial z} \times \frac{1}{R} \end{cases} \quad (3-2)$$

où  $m_e$  est la masse de l'électron,  $R = m^* / m_e$  la masse effective réduite relative à chaque zone.

En dérivant par rapport à  $Z$  et en utilisant (3-1), on substitue à l'équation de Schrödinger un système d'équations équivalent dont les inconnues sont les fonctions  $Y_1(Z)$  et  $Y_2(Z)$  :

$$\begin{cases} \frac{\partial Y_1(Z)}{\partial Z} = R \frac{\sqrt{2qm_e}}{\hbar} Y_2(Z) \\ \frac{\partial Y_2(Z)}{\partial Z} = R \frac{\sqrt{2qm_e}}{\hbar} \frac{(V(Z) - E)}{q} Y_1(Z) \end{cases} \quad (3-3)$$

### 3.1.2.2 Algorithme

Pratiquement, la résolution du système (3-3) est obtenue numériquement par une méthode itérative, après discrétisation spatiale du potentiel.

Les variables  $Y_1^{i+1}$  et  $Y_2^{i+1}$  à l'abscisse  $Z_{i+1}$  sont calculées à partir des valeurs de  $Y_1^i$  et  $Y_2^i$  au pas précédent d'abscisse  $Z_i$  au moyen des fonctions  $f_1$  et  $f_2$

$$\begin{cases} Y_1^{i+1} = f_1(Y_1^i, Y_2^i, Z_i) \\ Y_2^{i+1} = f_2(Y_1^i, Y_2^i, Z_i) \end{cases} \quad (3-4)$$

Les différentes méthodes numériques possibles se distinguent par l'ordre maximal pour lequel est assurée l'identité des développements limités, selon la variable  $Z$ , des fonctions  $f_1$  et  $Y_1$  d'une part, et  $f_2$  et  $Y_2$  d'autre part.

Dans la méthode d'Euler au 1er ordre, dite méthode de la tangente,  $f_1 - Y_1^i$  et  $f_2 - Y_2^i$  sont respectivement les dérivées des fonctions  $Y_1$  et  $Y_2$  au point  $Z_i$  exprimées grâce à (3-3). Une précision satisfaisante n'a pu être atteinte lors du calcul de la fonction d'onde ni avec cette méthode ni avec les méthodes d'Euler dérivées au second ordre. C'est pourquoi nous avons eu recours à la méthode Runge-Kutta d'ordre 4. [7]

Le système (3-4) se met alors sous la forme :

$$\begin{cases} Y_1^{i+1} = Y_1^i + \frac{1}{6} [T_1^1 + 2T_2^1 + 2T_3^1 + 4T_4^1] \\ Y_2^{i+1} = Y_2^i + \frac{1}{6} [T_1^2 + 2T_2^2 + 2T_3^2 + T_4^2] \end{cases} \quad (3-5)$$

Les expressions des coefficients  $T_b^a$  en fonction de  $Y_1^i$ ,  $Y_2^i$ , de la masse effective et du potentiel au point d'abscisse  $Z_i$  sont données en annexe.

### 3.1.2.3 Initialisation de la méthode, calcul des coefficients de réflexion et de transmission

Dans la région collecteur ( $Z \geq Z_N$ ), la fonction d'onde n'admet qu'une composante progressive dont on peut fixer arbitrairement l'amplitude et la phase. Nous calculons  $Y_1$  et  $Y_2$  numériquement pas à pas de droite à gauche. Loin de la double barrière, le potentiel est constant.

On peut poser :  $\varphi = e^{iK_N Z}$  avec  $K_N = K(Z_N)$ .

En  $Z = Z_N$  les fonctions  $Y_1$  et  $Y_2$  sont initialisées aux valeurs :

$$\begin{cases} Y_1(Z_N) = e^{iK_N Z_N} \\ Y_2(Z_N) = \frac{i\hbar K(Z_N)}{R\sqrt{2qm_e}} e^{iK_N Z_N} \end{cases} \quad (3-6)$$

- Calcul des coefficients de réflexion et de transmission

Dans la région émetteur ( $Z \leq Z_o$ ), de potentiel constant,  $\varphi$  peut être mise sous la forme d'une onde incidente et d'une onde réfléchie :

$$\varphi(Z) = C_0^+ \varphi^+ C_0^- \varphi^- \quad (3-7)$$

avec  $\varphi^+ = e^{iK_o Z}$  et  $\varphi^- = e^{-iK_o Z}$  où  $C^+$  et  $C^-$  sont des coefficients complexes,  $K_o = K(Z_o)$ . Au point d'abscisse  $Z_o = 0$ , il vient :

$$\begin{cases} \varphi^+(Z_o) = 1 \\ \varphi^-(Z_o) = 1 \\ \frac{\partial \varphi^+}{\partial Z}(Z_o) = iK_o \\ \frac{\partial \varphi^-}{\partial Z}(Z_o) = -iK_o \end{cases} \quad (3-8)$$

ce qui permet de poser :

$$\begin{cases} \varphi(Z_0) = C_0^- + C_0^+ \\ \frac{\partial \varphi}{\partial Z}(Z_0) = iK_0(C_0^+ - C_0^-) \end{cases} \quad (3-9)$$

l'équation (3-2), exprimée en  $Z = Z_0$  devient :

$$\begin{cases} Y_1(Z_0) = C_0^+ + C_0^- \\ Y_2(Z_0) = \frac{i\hbar K_0}{R\sqrt{2qm_e}}(C_0^+ - C_0^-) \end{cases} \quad (3-10)$$

d'où l'on tire les valeurs de  $C_0^+$  et  $C_0^-$  en fonction de  $Y_1(Z_0)$  et  $Y_2(Z_0)$ , obtenus après application de la méthode numérique de résolution de l'équation de Schrödinger :

$$\begin{cases} C_0^+ = \frac{1}{2} \left[ Y_1(Z_0) + R \frac{\sqrt{2qm_e}}{i\hbar K_0} Y_2(Z_0) \right] \\ C_0^- = \frac{1}{2} \left[ Y_1(Z_0) - R \frac{\sqrt{2qm_e}}{i\hbar K_0} Y_2(Z_0) \right] \end{cases} \quad (3-11)$$

les coefficients de réflexion et de transmission de la probabilité de présence en sont déduits :

$$R = \left| \frac{C_0^-}{C_0^+} \right|^2, T = \left| \frac{1}{C_0^+} \right|^2 \times \frac{K_N}{K_0} \times \frac{m_{\text{émetteur}}^*}{m_{\text{collecteur}}^*} \quad (3-12)$$

### 3.1.2.4 Traitement des discontinuités aux interfaces

La résolution du système d'équations différentielles couplées doit respecter, à chaque discontinuité du potentiel cristallin, 2 équations de continuité.

La continuité de  $\varphi$  impose celle de  $Y_1$

La continuité de  $\frac{1}{m^*} \frac{\partial \varphi}{\partial Z}$  impose celle de  $Y_2$

Le système d'équations est résolu pas à pas depuis l'abscisse  $Z_N$  jusqu'à la 1ère interface située en  $Z = Z_p$ . La masse effective et le potentiel pris en compte en  $Z_p$  correspondent aux valeurs limites à droite de la discontinuité.

Les variables  $Y_1$  et  $Y_2$  ainsi calculées servent à réinitialiser la méthode à partir de  $Z = Z_p$ , pour

poursuivre le calcul avec les valeurs de masse effective et de potentiel correspondant aux limites à gauche de la discontinuité.

La résolution du système d'équations différentielles couplées est ainsi menée à bien d'interface en interface jusqu'à la zone d'émetteur en  $Z = Z_0$ .

### 3.1.2.5 Stabilité numérique

#### Critère de A-stabilité

Par définition une méthode numérique est dite A-stable [7] si, lorsque l'on fait tendre la longueur  $dz$  du pas de discrétisation vers zéro, on a

$$\lim_{n \rightarrow \infty} Y_n = 0$$

pour toute équation différentielle  $Y' = -AY$  ou  $A$  est un nombre complexe dont la partie réelle est positive. Cela revient à "tester" la méthode sur une équation qui admet une solution exponentiellement décroissante. La plus grande valeur de la partie réelle de  $A$  assurant la stabilité de la résolution est appelée rayon de stabilité. Ce rayon ne dépend que de la méthode numérique employée ; celui de la méthode Runge-Kutta vaut 2,78.

Pour que la résolution du système (3-3) soit stable, il faut que soit vérifié un critère sur chacune des 2 équations du 1er ordre :

$$\begin{cases} dz \times R \times \frac{\sqrt{2qm_e}}{\hbar} < 2,78 \\ dz \times \frac{\sqrt{2qm_e}}{\hbar} \times \frac{\text{Max} |V(Z) - E|}{q} < 2,78 \end{cases} \quad (3-13)$$

Le choix du pas peut être également réalisé en considérant que 1 longueur d'onde, correspondant à la valeur d'énergie la plus élevée utilisée dans les calculs, doit être discretisée en au moins 15 pas, comme on a pu le constater en pratique.

### 3.1.3 Répartition des charges dans la zone active

#### 3.1.3.1 Calcul exact

A tension de polarisation  $V_c$  fixée, lors du calcul de l'intégrale fournissant la densité de courant  $J$  traversant la structure (1-36), chaque élément d'énergie  $dE_z$  contribue au courant total par un élément de courant  $dJ(E_z)$

$$dJ(E_z) = \frac{qm^* K_B \theta}{2\pi^2 \hbar^3} T(E_z) F(E_z, \theta, V_c) dE_z \quad (3-14)$$

De même lorsque l'on fait varier  $E_z$  sur la distribution d'énergie d'émetteur la superposition de chacun des éléments de charge  $dn(Z)$ , correspondant aux énergies comprises entre  $E_z$  et  $E_z + dz$ , forme la densité locale de charges dans la zone active.

$$n(Z) = \int_0^{\infty} dn(Z, E_z, V_c) dE_z$$

Dans la région collecteur,  $|\varphi|^2$  est normalisée à 1 pour chaque énergie. Il vient dans cette région.

$$dn(Z, E_z, V_c) = \frac{dJ(E_z)}{qv(E_z, V_c)} \left| \varphi(Z, E_z) \right|^2 \quad (3-15)$$

où  $v(E_z, V_c) = \sqrt{2m^* / (E_z + qV_c)}$  est la vitesse ballistique acquise par les porteurs injectés à l'énergie  $E_z$  dans l'émetteur, et subissant une chute de potentiel  $V_c$  lors de la traversée de la structure.

En utilisant (3-15) sur l'ensemble de la zone active, la densité locale de charges est donnée par :

$$n(Z) = \frac{qm^* K_B \theta}{2\pi^2 \hbar^3} \int_0^{\infty} \frac{T(E_z) F(E_z, \theta, V_c)}{qv(E_z, V_c)} \left| \varphi(z, E_z) \right|^2 dE_z \quad (3-16)$$

Ce calcul peut être mené à bien en parallèle avec le calcul du courant.

### 3.1.3.2 Estimation de la charge piégée

L'amplitude de la réaction de charge d'espace est gouvernée par la quantité surfacique  $Q$  de charges piégées dans la zone active. Nous allons estimer cette charge pour une situation correspondant à l'obtention du courant pic. Nous utilisons pour cela la notion de temps moyen de résidence des porteurs dans le puits, équivalent à la durée de vie de l'état quasi-lié. Nous verrons au chapitre 4 que ce temps  $\tau_e$  est relié à la largeur à mi-hauteur du pic de la transmission correspondant au premier niveau par la relation  $\tau_e = h / \Gamma_e$ .

On peut alors exprimer la charge piégée par une relation du type  $Q = J_{tot} \times \tau_e$  où  $J_{tot}$  est le courant total redevable aux flux de porteurs à travers les 2 barrières.

$J_{tot}$  est ainsi différent du courant traversant la structure, où seuls les porteurs sortant du puits par la barrière collecteur sont pris en compte.

Posons donc  $J_{tot} = J_{pic} \times (T_d + T_g) / T_d$ . En reprenant l'expression de  $J_{pic}$  en fonction des transmissions des 2 barrières et de la différence  $E_F - E_0$  entre l'énergie de Fermi dans l'émetteur et l'énergie du 1er niveau dans la structure sous polarisation (1-41) il vient :

$$Q = \frac{qm^*(E_F - E_0)}{\pi\hbar^2} \frac{T_g}{T_g + T_d} \quad (3-17)$$

Cette expression est identique à celle proposée par Payne [4] à partir d'un raisonnement sur un mécanisme où le transfert de charges se fait de manière séquentielle entre l'émetteur, le puits et le collecteur.

Nous constatons que la charge piégée est maximale lorsque la barrière côté collecteur est beaucoup plus opaque que la barrière côté émetteur.

### 3.1.4 Calcul auto-consistant

La charge accumulée dans le puits de potentiel, dont nous venons de donner une expression, modifie le champ électrique interne et donc entraîne des variations spatiales de potentiel. Il en résulte des modifications du niveau quasi-lié dans le puits et par voie de conséquence des flux des porteurs

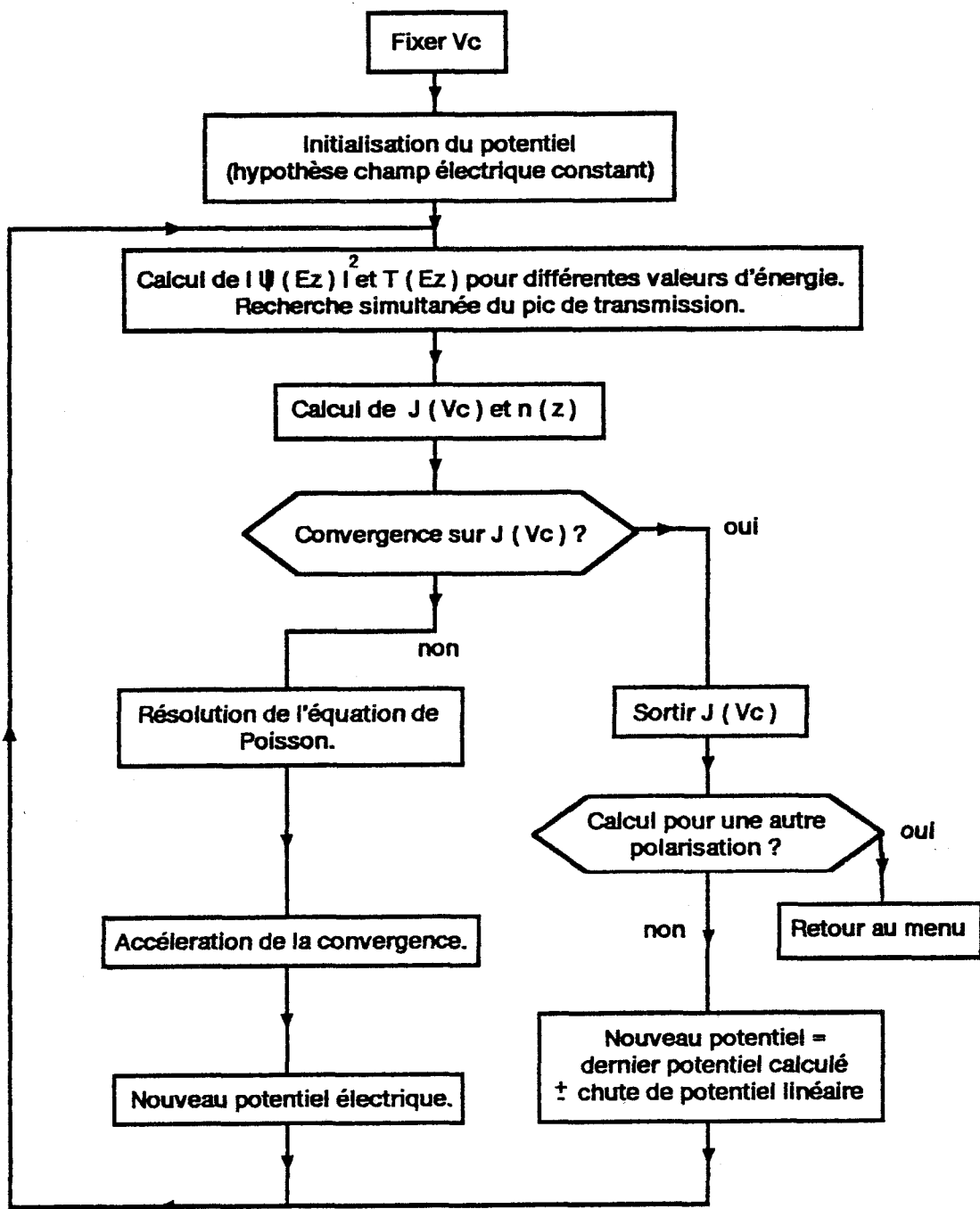


Fig.3 .1 : Organigramme de la méthode auto-consistante de calcul du potentiel et du courant.



alimentant le puits. Pour traiter ce mécanisme de contre-réaction nous résolvons de façon autoconsistante le système d'équations couplées formé par l'équation (3-16) permettant le calcul de  $n(z)$  et l'équation de Poisson à 1 dimension :

$$\frac{\partial^2 V(Z)}{\partial Z^2} = \frac{q}{\epsilon} [n(Z) - N_D] \quad (3-18)$$

les conditions aux limites sont fournies par :

$$\begin{aligned} V(Z_0) &= 0 \\ V(Z_N) &= V_C \end{aligned}$$

### 3.1.4.1 Méthode de calcul

La méthode itérative utilisée pour résoudre simultanément les équations de Poisson et de Schrödinger, est présentée figure 3-1.

Le potentiel électrique d'initialisation est déduit de l'hypothèse d'un champ électrique uniforme s'étendant sur l'épaisseur de la zone semiconductrice (puits + barrières).

La densité de courant correspondant à la tension fixée  $V_c$  est calculée de façon itérative. Nous déterminons les coefficients de transmission en fonction de l'énergie, d'où nous déduisons une valeur de courant. Simultanément la densité de charges libres  $n(Z)$  est évaluée. Ceci permet le calcul de la nouvelle répartition du champ électrique à partir duquel est déduit le potentiel.

Pour limiter le temps de calcul nous avons introduit la méthode d'accélération de convergence qui consiste à rectifier les modifications du potentiel en considérant la valeur moyenne entre le potentiel utilisé à l'itération précédente et celui déduit de la résolution de l'équation de Poisson.

Grâce à cette méthode il suffit de 4 à 6 itérations pour stabiliser le courant dans une fourchette de 1 %.

Pour le calcul du courant à une tension différente, nous supposons pour la première itération que l'incrément de tension se répartit linéairement dans la zone active, et vient s'y ajouter ou retrancher au dernier potentiel calculé. On simule ainsi un sens d'exploration de la caractéristique.

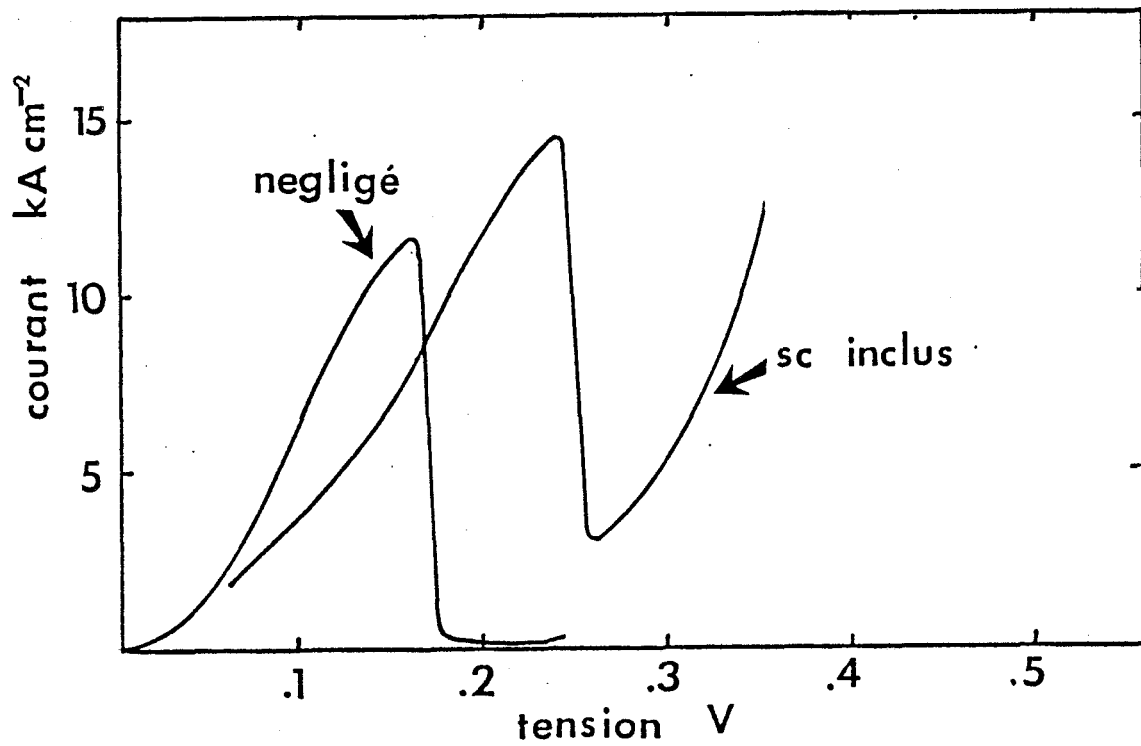


Fig 3.2 : Comparaison entre les caractéristiques  $J(V)$  calculées numériquement pour une Double Barrière Ga In As / Al In As , avec et sans prise en compte de la réaction de charge d'espace.  
 Largeur du puits : 40 Å. Largeur des barrières : 40 Å côté émetteur, 60 Å côté collecteur.  
 Hauteur des barrières :  $\Delta V = 530\text{meV}$   
 Masse effective des électrons :  $m = 0.042 m_e$  dans le puits,  $m = 0.075 m_e$  dans les barrières.

### 3.1.4.2 Résultats

Sur la figure 3-2 nous faisons la comparaison pour une structure AlInAs 40 Å/GaInAs 40 Å/AlInAs 60 Å, entre les caractéristiques de courant en fonction de la tension calculées en négligeant et en incluant la RCE. On constate une augmentation du courant pic et de la tension correspondante lorsque la RCE est prise en compte.

Pour comprendre ces résultats, nous avons reporté sur la figure 3-3 les variations spatiales de potentiel correspondant à  $V_{pic}$ , et donc à la charge piégée maximum.

On observe que la RCE entraîne une diminution de la chute de potentiel (liée à une diminution du champ électrique interne) dans la 1ère moitié de la structure côté émetteur. Au contraire les variations de potentiel sont renforcées côté collecteur.

Il en résulte que la valeur du potentiel moyen du puits se retrouve avec RCE à une énergie supérieure à celle calculée sans RCE, pour une même tension appliquée. L'ensemble des niveaux quasi-liés subit le même décalage.

La chute de tension moindre côté émetteur a pour conséquence qu'il faut appliquer plus de tension pour faire baisser le niveau quasi-lié. Ceci explique l'augmentation de la tension fournissant le courant pic. Dans la seconde moitié de la structure, un champ électrique de plus forte intensité que le champ constant considéré sans RCE, entraîne un abaissement supplémentaire de la hauteur apparente de la barrière collecteur. Un accroissement du courant pic s'en suit.

### 3.1.4.3 Bistabilité intrinsèque

On constate en outre que pour une tension de polarisation  $V_c$  intermédiaire entre les  $V_{pic}$  définis avec et sans prise en compte de la réaction de charge d'espace, 2 états stables sont accessibles.

- La figure 3-4a représente le cas où une RCE importante permet au 1er niveau de se maintenir à quelques  $meV$  au dessus de la bande de conduction dans l'émetteur. Un fort courant traverse alors la structure, ce qui permet d'entretenir la charge piégée. Cet état est atteint lors d'un balayage en tension croissant.

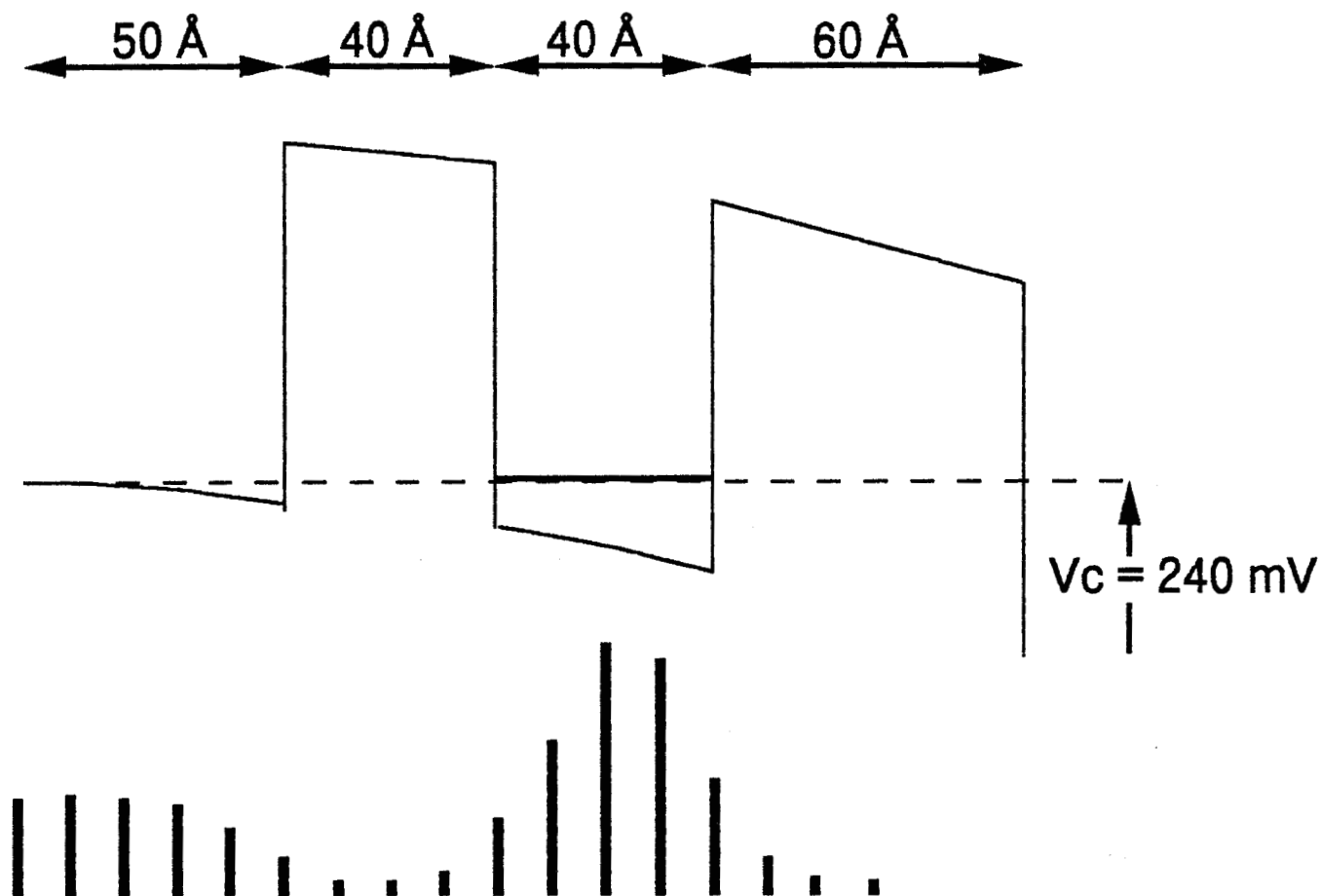


Fig. 3.3 : Potentiel calculé pour la structure de la fig. 3.2, polarisée à  $V_{pic}$  avec la réaction de charge d'espace. La densité de charges est schématisée pour chaque tranche de 10 Å d'épaisseur. La charge piégée dans le puits vaut  $7.5 \cdot 10^{11} / \text{cm}^2$ .

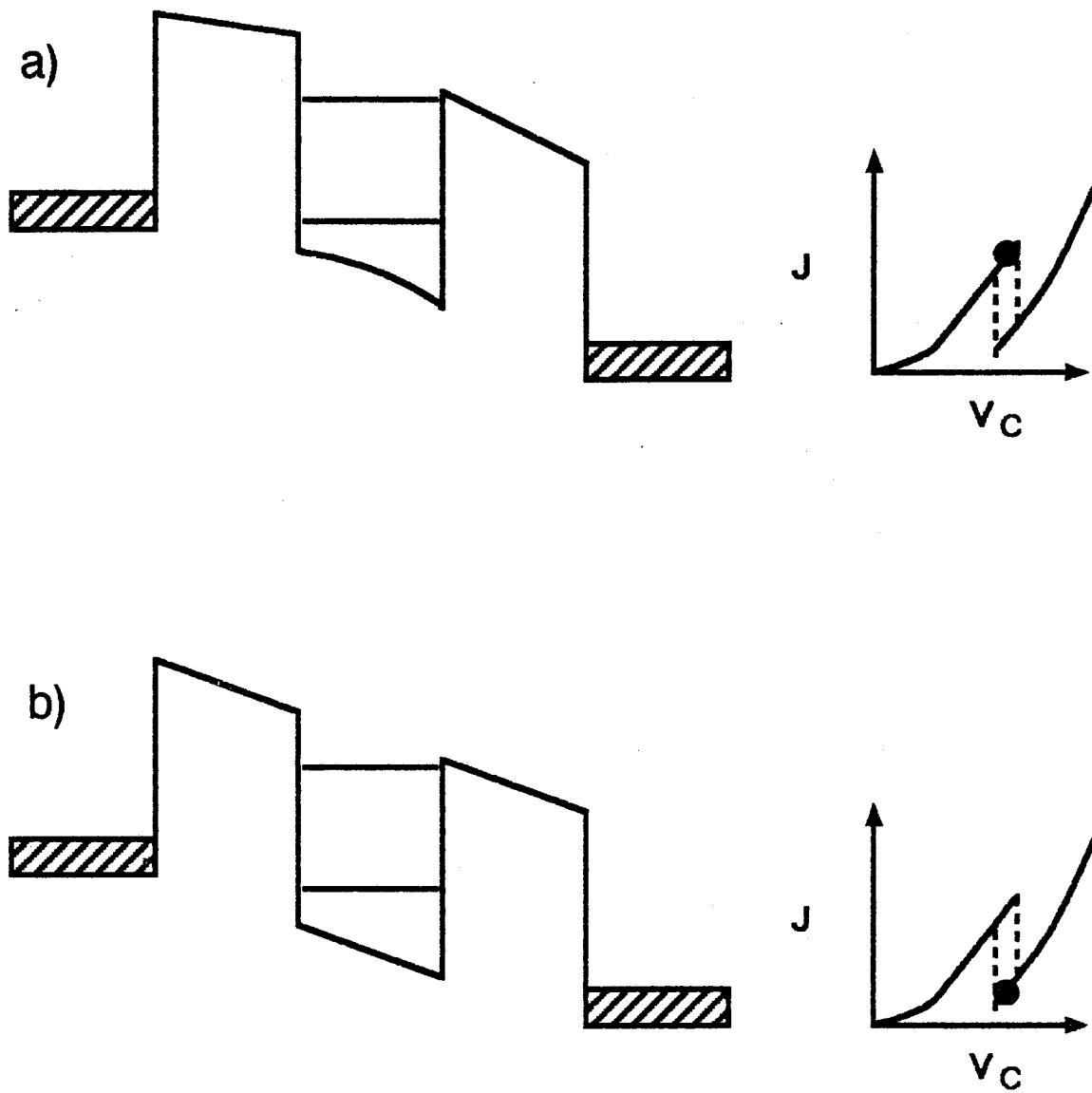


Fig. 3.4 : Bistabilité intrinsèque : Schématisation du potentiel pour les deux états.  
 Pour la même tension de polarisation, la conduction est élevée en a) et faible en b).

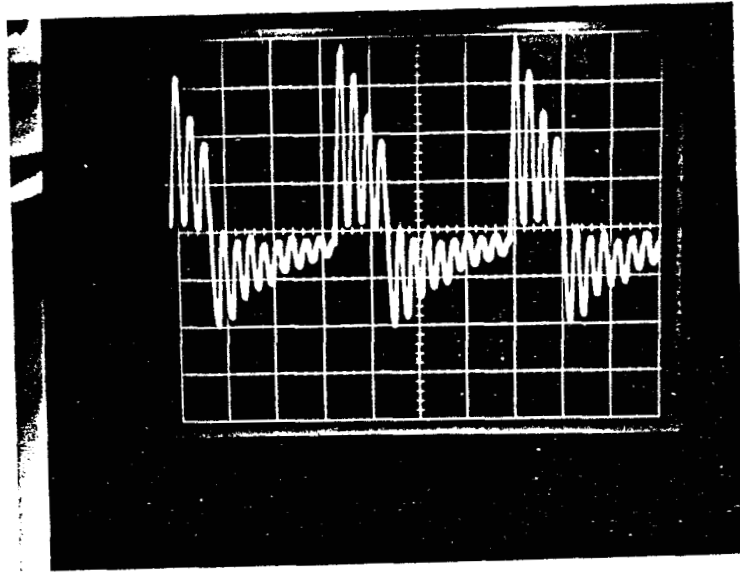


Fig. 3.5 : Visualisation sur l'oscilloscope des oscillations Basses Fréquences se produisant dans l'ensemble diode-circuit de polarisation.

- Dans le cas représenté sur la figure 3-4b, le 1er niveau se situe en dessous du bas de la bande de conduction dans l'émetteur. Le courant vallée obtenu ne provoque qu'une faible charge piégée, insuffisante pour provoquer une réaction de charge d'espace susceptible de ramener la structure dans le cas précédent. Cet état est obtenu lors d'un balayage en tension décroissant.

Cette bistabilité de la caractéristique statique est une propriété intrinsèque au composant [8]. Elle a été observée sans ambiguïté par Alves [9] sur une structure dissymétrique dont la barrière côté collecteur, plus épaisse que celle côté émetteur, assure une forte rétention des charges piégées. L'amplitude de la RCE en est ainsi augmentée. On note qu'alors les transitions entre les états passant et non passant sont brutales et ne laissent pas place à une zone de Résistance Différentielle Négative étendue.

Dans le cas des structures que nous avons réalisées expérimentalement, les barrières sont symétriques et de faible épaisseur. La charge piégée est insuffisante pour que la bistabilité intrinsèque induite par RCE ne soit pas masquée par d'autres formes de bistabilités extrinsèques.

En particulier la présence d'une résistance série  $R_s$ , non négligeable provoque une hystérésis importante sur le  $I(V)$  dans la mesure où la chute de potentiel aux bornes de  $R_s$  dépend très fortement des états passant ou non passant.

D'autre part, les caractéristiques statiques  $I(V)$  relevées expérimentalement présentent en effet, une forme en plateau dans la zone de RDN [10]. Cet effet est souvent la conséquence de la présence d'oscillations basses fréquences ( $< 500$  MHz), qui se développent spontanément dans l'ensemble diode-circuit de polarisation lorsque la tension appliquée correspond à la zone de RDN [11].

La figure 3-5 représente ces oscillations visualisées à l'oscilloscope. Le courant mesuré correspond alors à une moyenne temporelle des valeurs instantanées du courant.

Cette différence entre caractéristique apparente et caractéristique vraie continue à faire l'objet de nombreux travaux [10]-[12]. On pourra se référer au travail de Liu [11] pour une première approche de ces problèmes.

Dans tous les cas, il est important de noter que ces instabilités constituent un obstacle à la

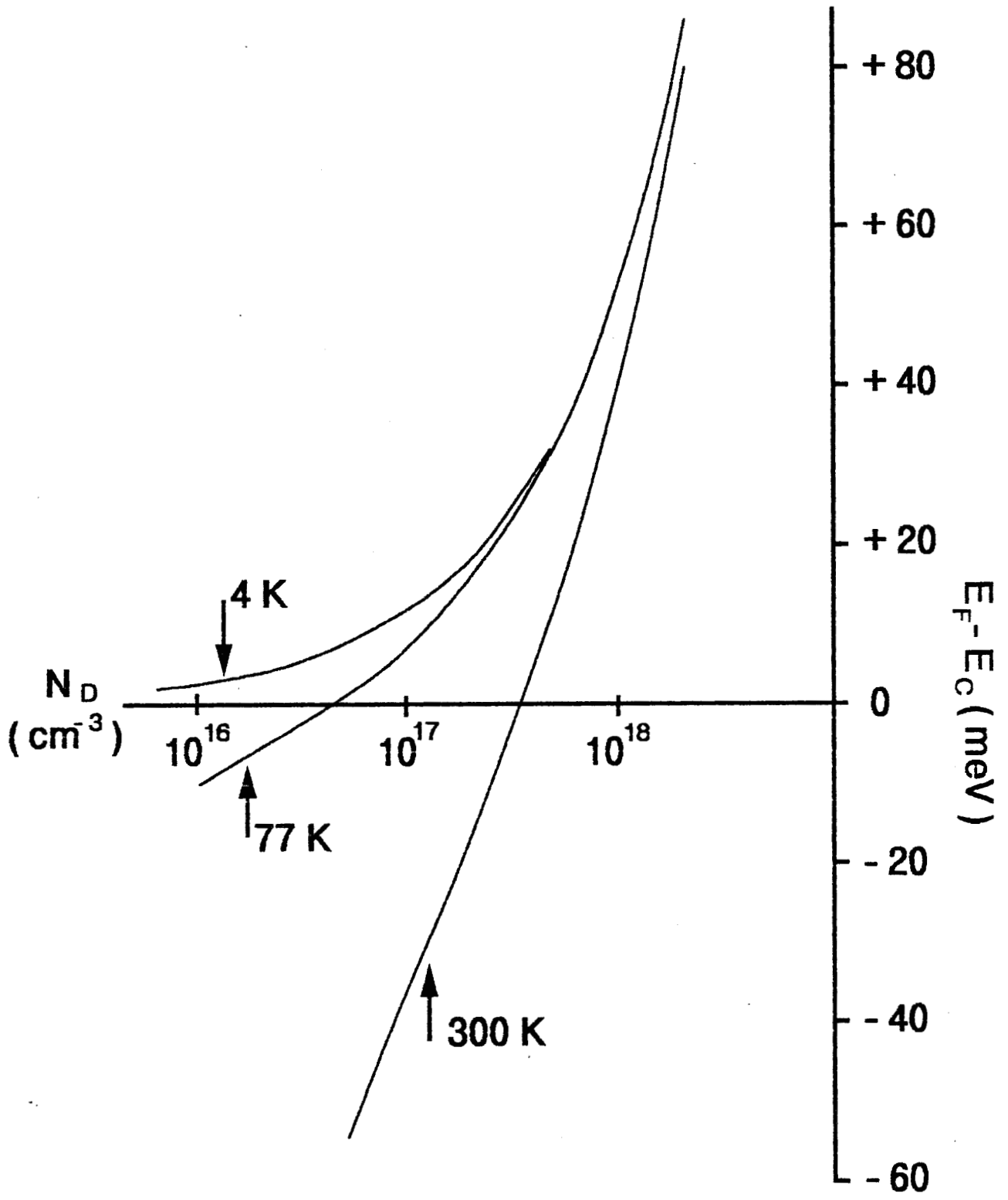


Fig. 3.6 : Evolution du niveau de Fermi relativement à  $E_c$  en fonction du dopage  $N_d$  dans le Ga As pour des températures de 4; 77 et 300 K. Pour  $N_d > 10^{18} / \text{cm}^3$ ,  $E_f - E_c$  devient quasiment indépendant de la température.



mesure de la caractéristique  $I(V)$  intrinsèque. Elles empêchent l'observation directe de la conductance différentielle négative maximale, ainsi que le relevé de la vraie valeur du courant  $J_{vallée}$ . Ceci est vrai pour toute mesure statique ou dynamique (mesure d'impédance).

## 3.2 Potentiels hors de la zone active

### 3.2.1 Niveau de Fermi dans l'émetteur

Le niveau de Fermi dans l'émetteur n'est fonction que du dopage et de la température. Sa détermination est réalisée par l'intégrale de Fermi-Dirac : [13]

$$F_{1/2}(\eta) = 2\pi^{-1/2} \int_0^{\infty} [\exp(x-\eta) + 1]^{-1} x^{1/2} dx \quad (3-19)$$

où  $\eta = \frac{E_F - E_C}{K_B \theta}$   $F = \frac{N_D^+}{N_C}$ . Le terme  $x^{1/2}$  permet de prendre en compte la forme parabolique de la bande de conduction. La densité effective d'états pour le GaAs est donnée par :

$$N_C = 2 \left( \frac{m^* K_B \theta}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} \quad (3-20)$$

Pour les conditions expérimentales où nous nous trouvons (valeurs de dopage élevées, températures supérieures à l'azote), nous supposons que tous les atomes donneurs sont ionisés.

Le calcul numérique de l'intégrale de Fermi-Dirac peut être évité en utilisant le recouvrement des domaines de validité des différentes relations analytiques approchées liant  $F$  à  $\eta$  :

$$\begin{aligned} \text{pour } \eta \leq -2 & : \eta = \ln(F) \text{ (relation de Boltzmann)} \\ \text{pour } -2 \leq \eta \leq 2 & : \eta = \ln(F) + 0,3553F \text{ [14]} \\ \text{pour } \eta > 2 & : \eta = \pi^{1/3} \left[ \frac{3F}{4} \right]^{2/3} \text{ (relation de Sommerfeld)} \end{aligned}$$

Les niveaux de Fermi ainsi calculés sont reproduits figure 3-6. On constate que pour un dopage  $N_D \geq 10^{18} / \text{cm}^3$ ,  $E_F - E_C$  devient quasiment indépendant de la température.

## 3.2.2 Traitement de la couche d'accumulation

### 3.2.2.1 Position du problème

La prise en compte de la couche d'accumulation est loin d'être triviale[15]-[16], dans la mesure où sa formation peut dépendre de mécanismes de transport. Elle influe de manière très importante sur la hauteur apparente des barrières et donc sur l'intensité du courant traversant la structure.

Nous nous attacherons ici à rendre compte de son rôle dans les mécanismes de conduction, en introduisant des simplifications importantes compte tenu de la complexité du problème.

Nous nous situerons toujours dans l'approximation de Thomas-Fermi pour le calcul de la densité de charges  $n(z)$ . Nous supposons de plus qu'aucun courant ne traverse la structure. La population électronique locale  $n(Z)$  est alors considérée comme statique et assimilable à celle qui se forme dans des états de faible conduction.  $n(Z)$  est alors directement reliée à la différence  $E_F - E_C$  au travers de l'intégrale de Fermi-Dirac introduite au § précédent, avec maintenant  $F = n(Z) / N_C$ .

La forme de la couche d'accumulation sera calculée en se fixant les paramètres  $N_D$  et  $\theta$ . Il existe alors pour chaque valeur  $F_0$  du champ électrique sur l'interface de la 1ère barrière ( $Z_0 = 0$ ) une solution unique respectant les conditions aux limites :

$$\begin{aligned} F(z) &\rightarrow 0 \\ E_C(z) &\rightarrow 0 \end{aligned} \quad \text{pour } Z \rightarrow -\infty$$

nous prenons ici comme référence en potentiel le bas de la bande de conduction loin dans l'émetteur.

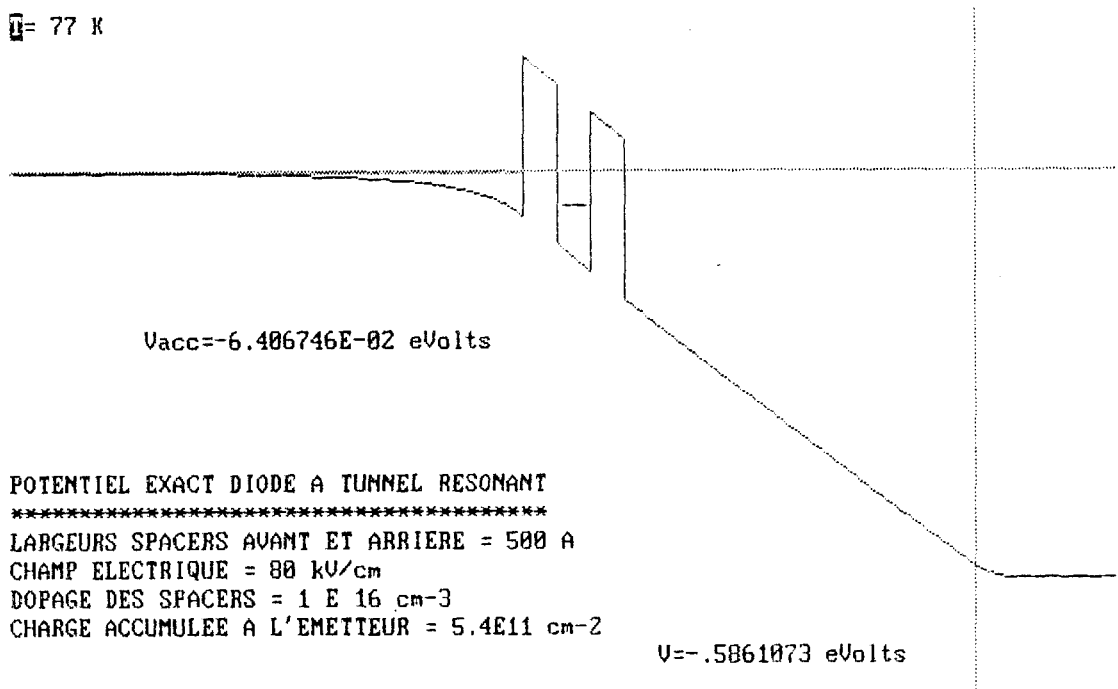
### 3.2.2.2 Méthode de résolution

Pratiquement nous nous fixons une valeur de champ électrique sur la 1ère interface de la barrière émetteur.

Nous recherchons alors par approximations successives la profondeur en  $Z_0 = 0$  et la forme de la couche d'accumulation; c-a-d la position du bas de la bande de conduction pour tout  $Z$ .

Dans ce but nous nous fixons arbitrairement la profondeur  $E_C(Z_0)$  de la couche

$T = 77 \text{ K}$



$V_{acc} = -6.406746 \times 10^{-2} \text{ eVolts}$

POTENTIEL EXACT DIODE A TUNNEL RESONANT

\*\*\*\*\*

LARGEURS SPACERS AVANT ET ARRIERE = 500 A

CHAMP ELECTRIQUE = 80 kV/cm

DOPAGE DES SPACERS =  $1 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$

CHARGE ACCUMULEE A L'EMETTEUR =  $5.4 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$

$V = -.5861073 \text{ eVolts}$

Fig. 3.7 : Couche d'accumulation d'émetteur à 77 K pour un champ électrique dans la Double Barrière de 80 KV / cm. Dopage dans l'émetteur :  $N_d = 10^{16} / \text{cm}^3$

d'accumulation, puis résolvons le système d'équations couplées constitué par l'intégrale de Fermi-Dirac et l'équation de Poisson, en partant de  $Z_0 = 0$  vers l'émetteur.

On cherche à vérifier les conditions initiales en  $Z \rightarrow -\infty$ . Si le  $E_C(Z_0)$  choisi ne correspond pas au  $E_{CO}$  solution du problème, le calcul de la couche d'accumulation devient fortement divergent :

Si  $E_C(Z_0) < E_{CO}$  la population électronique est plus élevée que dans la solution du problème. Le champ électrique chute trop rapidement lorsque l'on s'éloigne de l'interface et prend des valeurs négatives.

Si  $E_C(Z_0) > E_{CO}$  le champ électrique ne chute pas assez rapidement et  $E_C(Z)$  devient positif.

On se définit ainsi 2 critères simples permettant de mettre en évidence la position relative de  $E_C(Z_0)$  et  $E_{CO}$ . Une fois réalisé un encadrement de  $E_{CO}$ , sa valeur peut être recherchée par dichotomie.

On constate lors de ces calculs une extrême sensibilité de la solution par rapport à la variable  $E_C(Z_0)$ . Une erreur relative de  $10^{-5}$  peut entraîner une divergence du potentiel à une distance de 500 Å de l'interface.

### 3.2.2.3 Résultats

La figure 3-7 représente la forme de la couche d'accumulation calculée pour  $N_D = 10^{16} / \text{cm}^3$ ,  $\theta = 77 \text{ K}$ ,  $F_0 = 80 \text{ KV} / \text{cm}$ . On constate que dans ce cas, la chute de potentiel en  $Z_0 = 0$  est de  $64 \text{ meV}$  ce qui confirme l'importance de cette zone. Une étude de la profondeur  $E_{CO}$  en fonction du champ électrique  $F_0$  en  $Z_0 = 0$  montre que cette couche d'accumulation se forme rapidement dès les faibles valeurs de champ ( $F_0 < 20 \text{ KV} / \text{cm}$ ) et se creuse de façon plus lente pour les champs d'intensité plus élevée. Une augmentation de la profondeur de cette couche d'accumulation, par rapport à la bande de conduction loin dans l'émetteur, est également observée lors d'un accroissement de la température. Cependant cet effet est nettement compensé par l'abaissement concomitant du niveau de Fermi avec la température  $\theta$ . Ainsi  $E_F - E_{CO}$  diminue lorsque  $\theta$  augmente.

Les résultats présentés ici ne constituent qu'une première approche des phénomènes mis en jeu.

En effet l'apport de charges libres, dues à l'existence d'un courant traversant la structure, a été négligé. On peut supposer que l'effet principal de ce courant soit la création d'un pseudo-niveau de Fermi dans la zone d'espaceur faiblement dopée, ce qui modifie profondément les positions relatives de  $E_F$  et  $E_C$ .

D'autre part, bien que le modèle classique utilisé ne traite pas les effets de quantification dans l'émetteur, il est possible de dégager de ces résultats des tendances utiles à la compréhension des phénomènes mis en jeu.

Dans la plupart des cas de structures expérimentales (espaceur peu dopé de grande dimension), la couche d'accumulation contient au moins un niveau fondamental discret. Les niveaux d'ordres supérieurs se recouvrent fortement et forment par contre un quasi-continuum [8]. L'existence de ces niveaux est révélée par un calcul de la transmission sur l'ensemble formé par l'espaceur d'émetteur (considéré comme une barrière supplémentaire) et la double barrière.

Le niveau fondamental de la couche d'accumulation participe certainement à l'injection des porteurs dans la zone active. Il est nécessaire dans ce cas d'admettre son peuplement grâce à des mécanismes de relaxation permettant aux électrons de passer du continuum à ce niveau. On a ainsi 2 mécanismes qui concourent simultanément au courant selon des canaux différents :

- émetteur tridimensionnel - puits quantique - collecteur
- émetteur bidimensionnel - puits quantique - collecteur.

### 3.2.3 Caractérisation par Magnétotunneling

Expérimentalement, la densité de charges piégées dans la couche d'accumulation peut être caractérisée par le relevé des variations de courant à tension de polarisation fixée lorsque l'échantillon est soumis à un champ magnétique intense  $B$  de direction parallèle au courant ( $\vec{B} // \vec{J}$ ). [17]-[18]-[15]

Ces caractérisations par Magnétotunneling font l'objet d'un travail, en collaboration avec le SNCT de Grenoble et l'INSA de Toulouse, qui sort du cadre de notre étude. Nous allons néanmoins

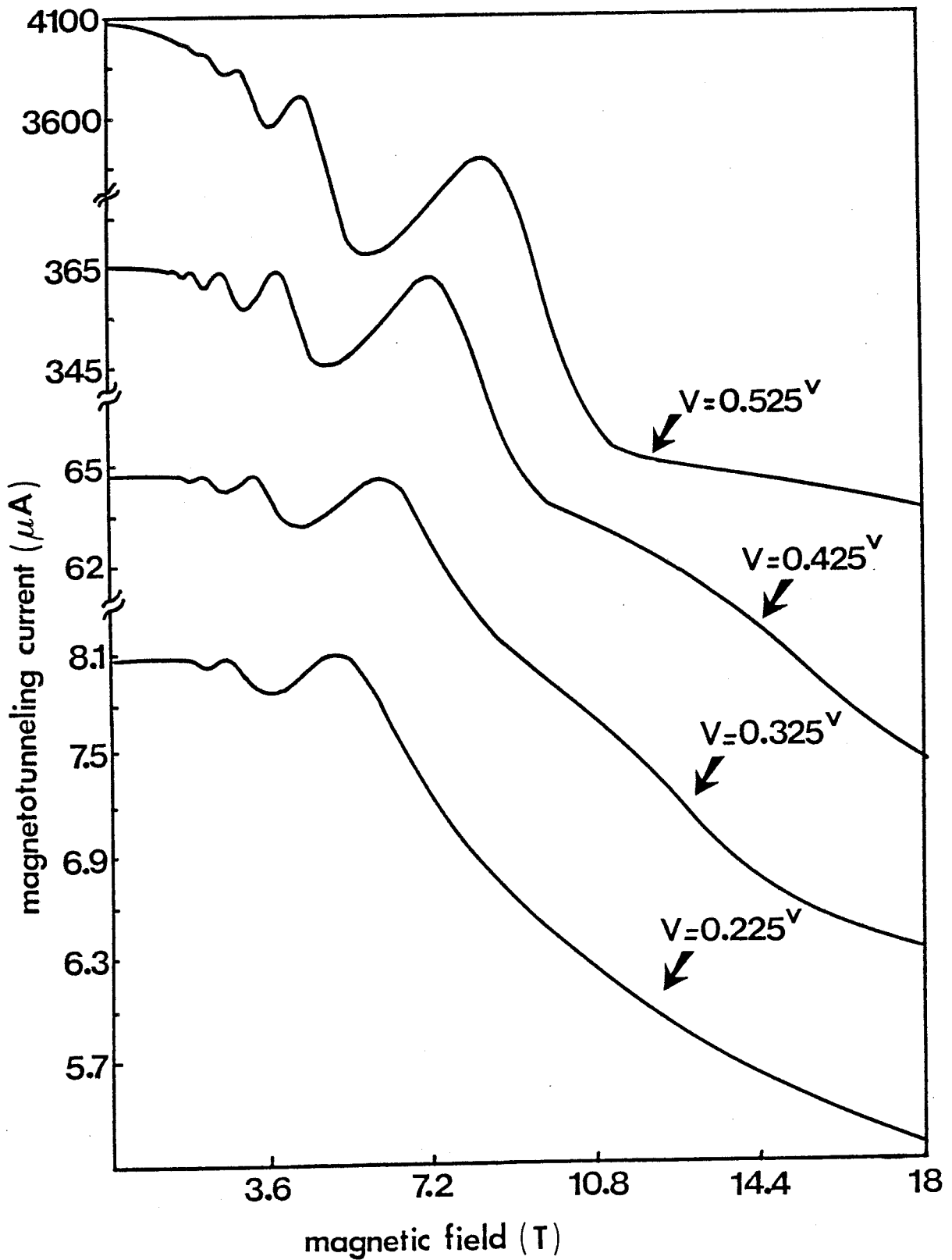


Fig. 3.8 : Oscillations du courant en fonction du champ magnétique  $B$ , orienté suivant la direction de croissance des couches, pour différentes tensions de polarisation. Ces oscillations sont périodiques en  $1/B$ . Mesures effectuées à 4 K sur une Double Barrière symétrique Ga Al As ( $x=0.3$ ; Largeur des barrières 50 Å) / Ga As (Largeur du puits 50 Å).

donner quelques résultats saillants visant à préciser l'ordre de grandeur des densités de charge surfacique.

Le champ magnétique a pour effet d'apporter une quantification supplémentaire (confinement par champ magnétique). Les niveaux quasi-liés se scindent alors en niveaux de Landau. Leurs énergies respectives sont, pour le niveau fondamental  $E_0$ .

$$E_n = E_0 + \left(n + \frac{1}{2}\right) h \omega_c \quad n = 1, 2, \dots$$

avec  $\omega_c = \frac{qB}{m^*}$  la pulsation cyclotron

Les expériences de magnétotunneling s'effectuent à l'hélium liquide. A cette température, la fonction de Fermi présente une variation très rapide autour de  $E_F$ .

On montre que le relevé de la caractéristique  $I(B)$  à tension fixée présente une allure oscillante avec une périodicité en  $1/B$ . La figure 3-8 montre un exemple de résultat obtenu pour la structure décrite au § 2.1.3. On définit alors un champ fondamental  $B_F$  donné par la relation

$$\frac{1}{B_F} = \frac{1}{B_{N+1}} - \frac{1}{B_N}$$

où  $B_N$  et  $B_{N+1}$  sont les valeurs de champ critiques pour lesquelles on observe des extrêmes de courant consécutifs de même nature.

La densité surfacique de charges peut être évaluée par la relation :

$$N_s = \frac{qB_F}{\pi h}$$

La figure 3-9 représente les variations de  $B_F$  et de  $N_s$  en fonction de la tension. On constate que les variations mesurées sont pratiquement linéaires jusqu'à une tension de 0.6 volt où les oscillations de courant disparaissent. La densité de charge surfacique maximum est de l'ordre de  $6.10^{11}$  électrons/cm<sup>2</sup>. Cette valeur est élevée, comparable à celle rencontrée dans les composants de

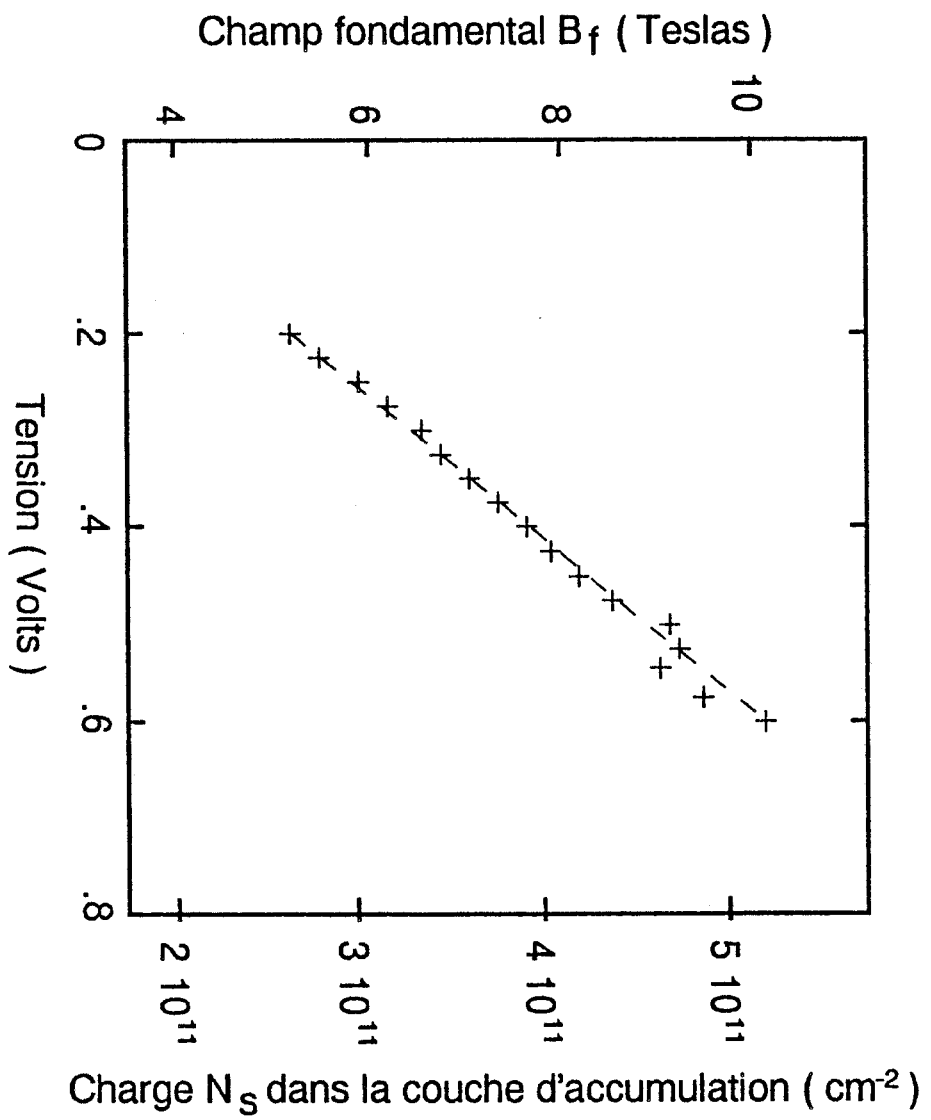


Fig. 3.9 : Charge  $N_s$  piégée dans la couche d'accumulation, et champ fondamental  $B_f$ , en fonction de la tension de polarisation. Ces résultats sont déduits des mesures représentées fig 3.8.



type TEGFET, et montre l'importance des phénomènes d'accumulation dans les composants à double barrière.

### 3.3 Formalisme du courant partiellement séquentiel

#### 3.3.1 Nécessité d'un tel formalisme

Nous avons jusqu'à présent considéré que le flux d'électrons incident conservait sa cohérence tout au long de son passage au travers de la double barrière. En fait cette hypothèse n'est que partiellement vérifiée. Il existe pour chaque électron une probabilité non négligeable de subir une interaction, telle qu'un choc sur phonon, qui peut avoir pour effet une redistribution aléatoire de la fonction d'onde décrivant le transport dans la direction de croissance des couches.

Le porteur "oublie" alors son origine [19] et s'il est localisé dans le puits, il en sortira du côté émetteur ou collecteur au prorata des coefficients de transmission des 2 barrières. Les électrons qui franchissent effectivement la double barrière le font donc suivant un processus séquentiel.

En fait les 2 processus, incohérent et cohérent, existent simultanément. Weil a démontré que l'intensité du courant *pic* doit être indépendante de la part de mécanisme séquentiel entrant en compte dans le transport des porteurs [20]. Pour le calcul de l'intensité du courant *pic*, on effectue l'intégration du *pic* de résonance de la transmission, pondéré par la supply function, sur une plage d'énergie très étroite imposée par la courbe de transmission. On observe que cette intégrale est conservée lorsque l'on fait varier la proportion relative des 2 mécanismes.

Nous verrons qu'un calcul exact fait apparaître de légères variations de  $J_{pic}$  avec le degré d'incohérence introduit dans le modèle.

Un tel raisonnement ne peut s'appliquer pour le courant vallée, pour lequel c'est la supply function qui impose le domaine d'intégration. La transmission non résonante obtenue par un mécanisme purement séquentiel est supérieure à celle calculée dans le cas cohérent

$$\left( \frac{T_g T_d}{T_g + T_d} > T_g T_d \text{ si } T_g + T_d < 1 \right)$$

On peut donc supposer que l'existence d'un mécanisme partiellement non cohérent dans la conduction globale est à l'origine du mauvais accord entre les courants vallée expérimentaux et les valeurs prédites par une modélisation purement cohérente.

### 3.3.2 Mise en oeuvre du formalisme de Jonson

#### 3.3.2.1 Présentation

Plusieurs analyses des mécanismes tunnel perturbés par les interactions (sur phonons, sur impuretés, ainsi que l'influence des fluctuations d'interfaces) ont été reportées dans la littérature [21]-[24].

Le formalisme proposé par Jonson et Grincwajg [21] nous a semblé particulièrement bien adapté pour inclure dans la modélisation l'effet de la redistribution de la phase des porteurs par des perturbations.

Nous avons vu au chapitre 1 que les coefficients de transmission en amplitude  $t_{15}$  et  $r_{15}$  de la double barrière considérée dans son intégralité, s'expriment en fonction des coefficients de transmission et de réflexion  $t_{ij}$  et  $r_{ij}$  propres à chacune des barrières prises isolément. L'analogie avec un interféromètre Fabry Perrot conduit aux expressions (1.6) et (1.7).

La perte de cohérence des porteurs à l'intérieur du puits peut être modélisée de la façon suivante. A chaque aller-retour réalisé entre les 2 barrières l'amplitude de la fonction d'onde, correspondant aux porteurs ayant gardé leur information de phase, est obtenue après multiplication par un coefficient phénoménologique réel  $\gamma \leq 1$ . Les coefficients en amplitude relatifs à la double barrière deviennent alors :

$$t_{15} = \frac{t_{13}t_{35}}{1 - \gamma r_{35}r_{31}} \quad (3-21)$$

$$r_{15} = r_{13} + \frac{r_{35}t_{13}t_{31}\gamma}{1 - \gamma r_{35}r_{31}} \quad (3-22)$$

Les coefficients en puissance de transmission et réflexion cohérents  $T_{coh15}$  et  $R_{coh15}$  peuvent être calculés en utilisant les expressions (1-9) et (1-10)

$$T_{coh15} = t_{15} t_{15}^* \frac{k_5 m_1}{k_1 m_5} \quad R_{coh15} = r_{15} r_{15}^* \quad (3-23)$$

Pour  $\gamma = 1$  on retrouve le cas du mécanisme purement cohérent

Pour  $\gamma < 1$  les porteurs ayant perdu leur cohérence ne sont pas pris en compte par les formules (3-22) et (3-23). La relation  $R_{coh} + T_{coh} = 1$  n'est plus vérifiée. On peut cependant rendre compte de la conduction non cohérente en notant que les porteurs perturbés par des interactions contribuent à la transmission totale pour la proportion  $T_d / (T_d + T_g)$ .

La transmission totale vaut alors :

$$T_{tot15} = T_{coh15} + (1 - R_{coh15} - T_{coh15}) \frac{T_d}{T_g + T_d} \quad (3-24)$$

Le calcul du courant est réalisé suivant la même procédure qu'auparavant.

### 3.3.2.2 Signification physique du facteur $\gamma$

Il est intéressant de relier le facteur  $\gamma$  au taux d'interaction  $\tau_i$ . Les électrons piégés dans le puits à l'énergie de la 1ère résonance  $E_1$  se déplacent à la vitesse moyenne  $v = \sqrt{2E_1 / m^*}$ . On peut ainsi définir l'équivalent d'un libre parcours moyen par  $\zeta = \tau_i \cdot v$ . Lors d'un aller et retour dans le puits, les porteurs se déplacent sur une longueur  $2deff$  qui correspond à la longueur d'onde à l'énergie  $E_1$  :  $2deff = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2m^*E_1}}$  La proportion  $\gamma$  de porteurs n'ayant pas subi d'interaction au bout d'une distance  $2deff$  est  $\gamma = \exp(-2deff / \zeta)$ .

Il vient alors :

$$\tau_i = \frac{\pi\hbar}{E_1 \ln(1/\gamma)} \quad (3-25)$$

Il est intéressant de rapprocher ce résultat du temps de vie du premier niveau, fourni par

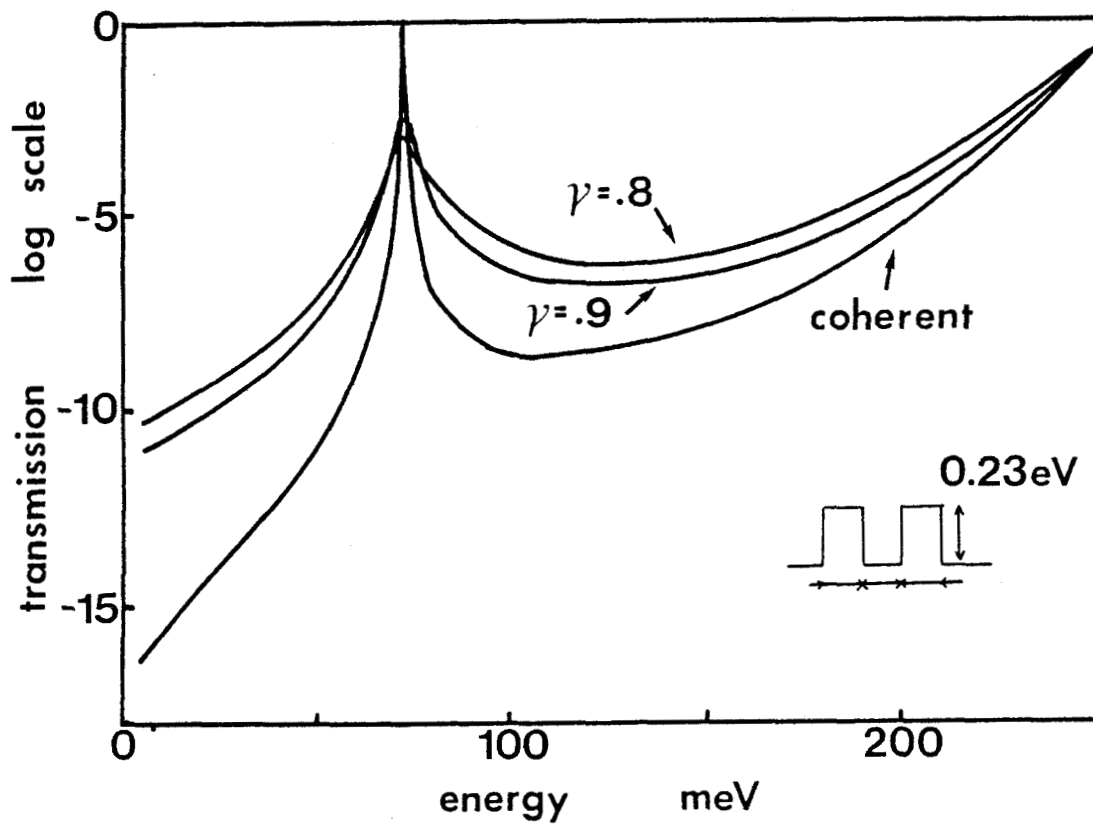


Fig. 3.10 : Fonctions de transmission  $T = f(Ez)$  d'une Double Barrière Ga Al As / Ga As symétrique, calculées de manière cohérente et en incluant un paramètre de non cohérence  $\gamma = 0.9$  et  $\gamma = 0.8$ . Largeur du puits : 50 Å. Largeur des barrières : 50 Å. Hauteur des barrières :  $\Delta V = 230 \text{ meV}$ . Masse effective des électrons :  $m = 0.067 m_e$  dans le puits,  $m = 0.092 m_e$  dans les barrières. La prise en compte d'un transport partiellement cohérent conserve l'aire sous le pic de résonance, mais augmente la transmission non résonante.

$$\tau_e = \frac{\pi \hbar}{E_1 (T_g + T_d)}$$

On s'attend à ce que la perte de cohérence des porteurs dans le puits ait une influence primordiale sur le mécanisme de conduction, et donc sur la caractéristique statique tension-courant, dès que le temps moyen entre 2 interactions prend des valeurs inférieures au temps moyen de résidence dans le puits. Cela arrive pour

$$\gamma \leq \exp - (T_g + T_d) \approx 1 - (T_g + T_d) \quad (3-26)$$

### 3.3.2.3 Modifications induites sur la fonction de transmission

La figure 3-10 représente la fonction de transmission de la structure  $\text{Ga}_{0.7}\text{Al}_{0.3}\text{As}$  50 Å /  $\text{GaAs}$  50 Å /  $\text{Ga}_{0.7}\text{Al}_{0.3}\text{As}$  50 Å, à l'équilibre, pour les valeurs de  $\gamma = 1 ; 0,9 ; 0,8 ; 0$ . [25]

On constate que la prise en compte d'un facteur  $\gamma < 1$  abaisse les transmissions résonantes et élargit simultanément les pics de résonance. Leur nouvelle largeur à mi-hauteur vaut

$$\Gamma = \Gamma_e + \Gamma_i \text{ ou } \Gamma_i = 2\hbar / \tau_i.$$

Le produit de cette largeur  $\Gamma$  par la transmission résonante est trouvé indépendant de  $\gamma$ , ainsi que l'avait prédit Weil [20]. Hors résonance, le minimum de la transmission augmente quasi-linéairement entre les valeurs limites relatives aux processus totalement cohérent ou incohérent, en fonction de la répartition entre ces 2 mécanismes.

Pour un mécanisme purement cohérent ( $\gamma = 1$ ) la transmission globale hors résonance peut être approximée par

$$T_{tot} = \alpha T_g T_d$$

où le paramètre  $\alpha$  à la même signification que celle décrite au chapitre précédent,  $T_g$  et  $T_d$  représentent les transmissions des 2 barrières à l'énergie de la 1ère résonance.

Pour un mécanisme totalement incohérent ( $\gamma = 0$ ), on a

$$T_{tot} = \alpha \frac{T_g T_d}{T_g + T_d}$$

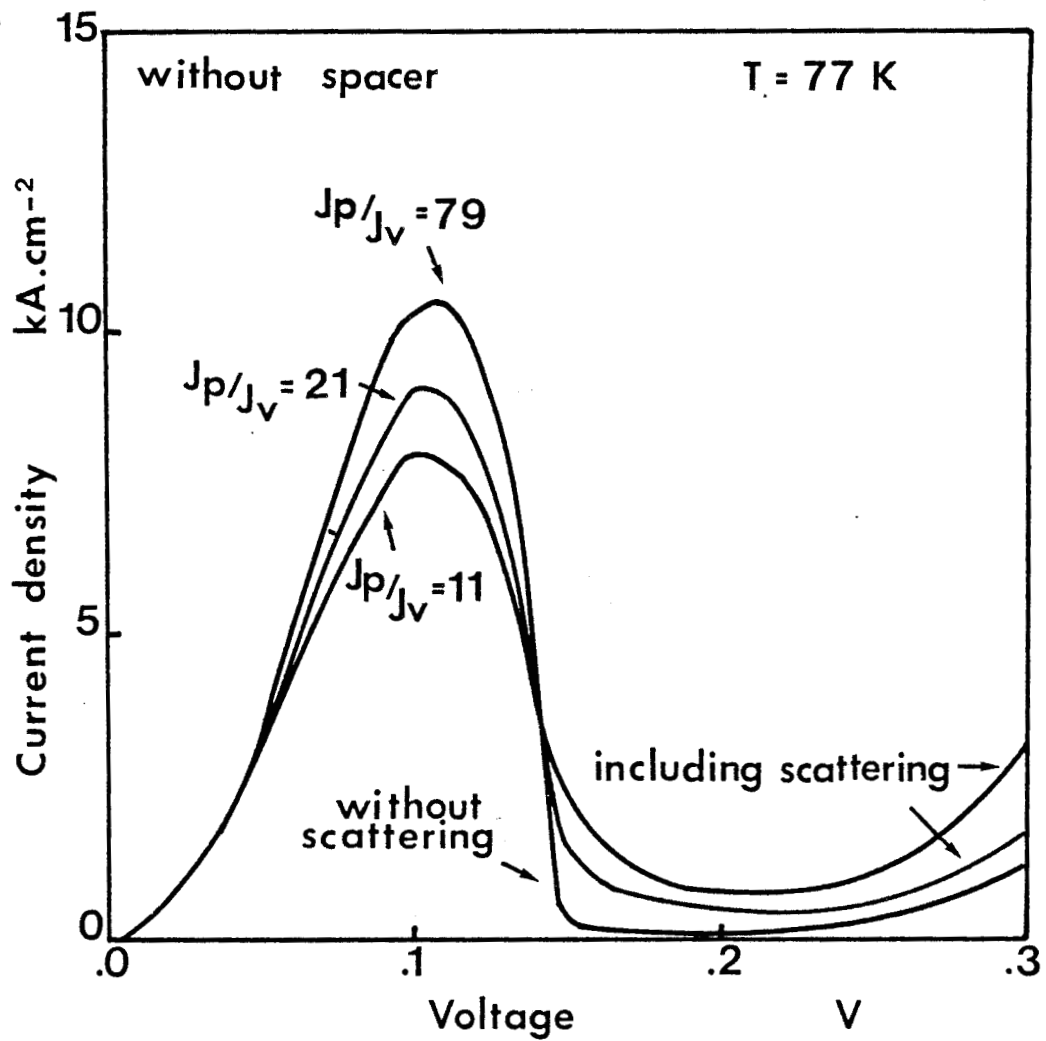


Fig. 3.11 : Caractéristiques  $J(V)$  calculées à 77 K pour la Double Barrière de la fig. 3.10, suivant un processus cohérent et en incluant un paramètre  $\gamma = 0.9$  et  $\gamma = 0.8$ . L'introduction de la perte de cohérence fait légèrement diminuer  $J_{pic}$ . Le contraste en courant chute de 79 à 21 et 11 respectivement.

Pour des valeurs de  $\gamma$  comprises entre 0 et 1, cette même transmission peut être approximée par

$$T_{tot} = \alpha(1-\gamma) \frac{T_g T_d}{T_g + T_d}$$

### 3.3.3 Modifications de la caractéristique J (V)

#### 3.3.3.1 Comportement des extrêmums du courant

La figure 3-11 permet de dégager le comportement des courants pic et vallée lorsque l'on fait varier le paramètre  $\gamma$ . Les caractéristiques  $J(V)$  sont représentées pour la structure correspondant aux transmissions de la figure 3-10.

- Courant pic : Son amplitude n'est pas indépendante de  $\gamma$ , mais chute lorsque le taux d'interaction augmente. Ce comportement peut être explicité par le fait que la courbe enveloppe supérieure de la fonction de transmission sous polarisation ne peut pas être considérée comme constante en fonction de l'énergie sur la largeur du pic de résonance. Lorsque l'énergie du 1er niveau approche le bas de la bande de conduction, le pic de résonance élargi par le processus de transport séquentiel n'est plus de forme gaussienne. Il en résulte une diminution du courant pic par rapport au cas totalement cohérent. Ce phénomène peut être décrit par une loi empirique pour la structure étudiée :

$$J_{pic}(\gamma) = J_{val}(\gamma) + J_{pic\text{cohérent}} e^{-\frac{(1-\gamma)}{0.3}} \quad (3-27)$$

où  $J_{val}(\gamma)$  permet de décrire la contribution thermiquement assistée.

- courant vallée : Il suit le même comportement que la transmission non résonante. Le courant vallée peut s'exprimer par la relation approchée

$$J_{val}(\gamma) \approx J_{val\text{cohérent}} + \frac{J_{pic\text{cohérent}} \alpha f(E_F, \theta) (1-\gamma)}{2(E_F - E_0) E_1} \quad (3-28)$$

#### 3.3.3.2 Contraste en courant

Pour un taux d'interaction tel que la partie cohérente puisse être négligée devant la partie non cohérente de la transmission non résonante, c-a-d pour  $\tau_i \ll \tau_e$ , le contraste en courant devient quasiment indépendant de la largeur des barrières. Comme les variations sur  $J_{val}$  sont beaucoup plus

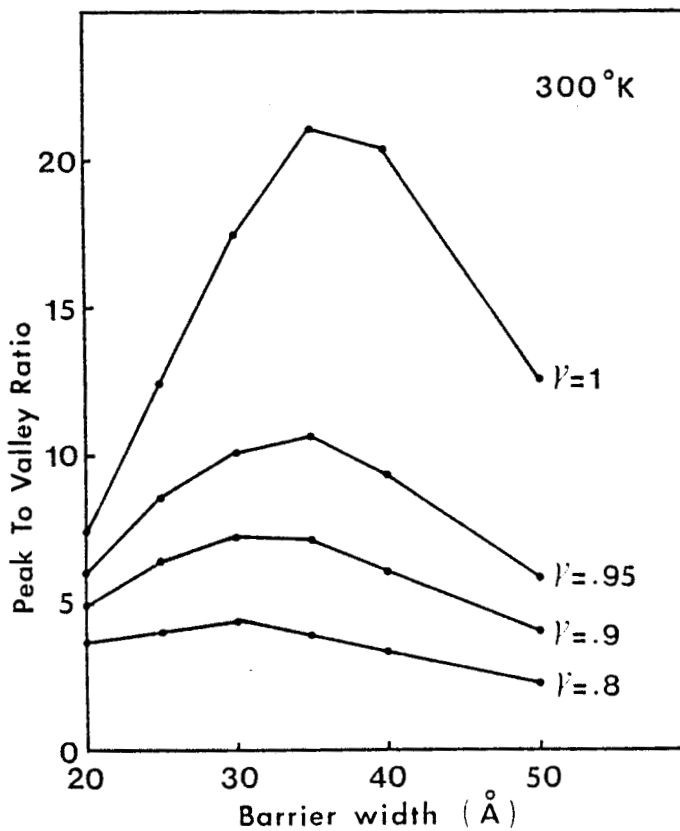
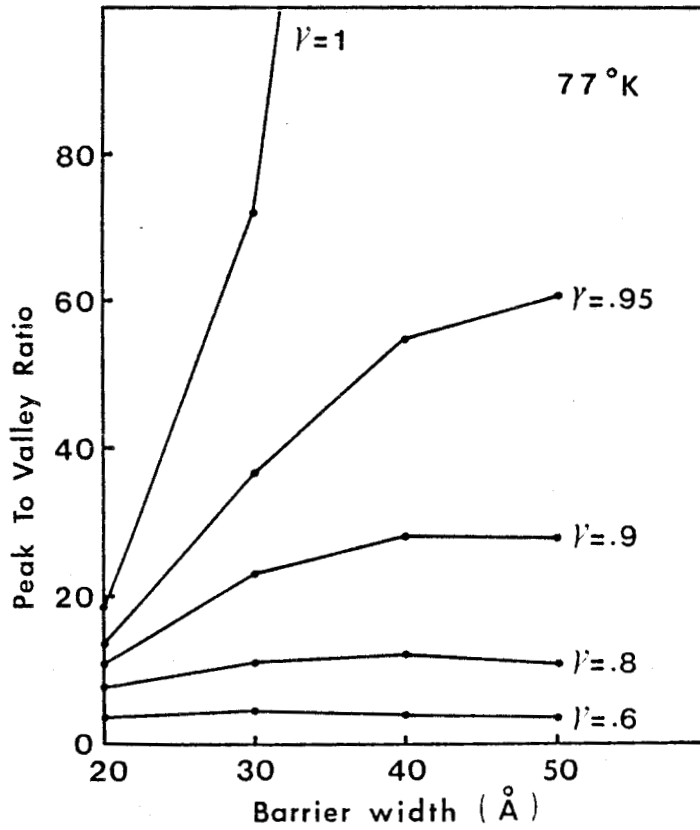


Fig. 3.12 : Contraste en courant théorique d'une Double Barrière Ga Al As ( $x=0.3$ ) / Ga As symétrique en fonction de la largeur  $L_b$  des barrières, pour différentes valeurs du paramètre  $\gamma$ . La largeur du puits est fixée à 50 Å. Hauteur des barrières :  $\Delta V = 230\text{meV}$  Masse effective des électrons :  $m = 0.067 m_e$  dans le puits,  $m = 0.092 m_e$  dans les barrières.  
a) à 77 K, le contraste en courant est systématiquement croissant avec  $L_b$ .  
b) à 300 K, le courant thermoionique fait chuter le contraste  $J_{pic} / J_{val}$  pour  $L_b > 35$  Å. Dans les deux cas, l'introduction d'un transport non cohérent tend à estomper la dépendance du contraste en courant vis-à-vis de la largeur des barrières.



importantes en proportion relative que celles sur  $J_{pic}$ , on peut considérer le courant pic comme constant en fonction de  $\gamma$ . Le contraste en courant peut être écrit :

$$\frac{J_{pic}}{J_{val}}(\gamma) \approx 1 + \frac{2(E_F - E_O)E_1}{\alpha f(E_F, \theta)(1 - \gamma)} \quad (3-29)$$

On constate que cette expression du contraste en courant ne fait pas intervenir de paramètre dépendant de la largeur de barrière.

Les figures 3-12a et 3-12b reportent en fonction de la largeur des barrières  $L_B$  les rapports  $J_{pic} / J_{vallée}$  attendus pour des structures symétriques  $Ga_{0.6}Al_{0.4}As/GaAs$ . Ces calculs ont été réalisés pour 2 températures  $\theta = 77$  et  $\theta = 300$  K et différentes valeurs de  $\gamma$ . La largeur du puits est fixée à 50 Å. On constate que la dépendance de  $J_{pic} / J_{val}$  avec  $L_B$  s'atténue d'autant plus que  $\gamma$  est éloigné de 1, valeur pour laquelle la théorie cohérente prédit un contraste en courant exponentiellement croissant avec  $L_B$ . A 77 K, le rapport  $J_{pic} / J_{vallée}$  croît de façon monotone avec  $L_B$  pour  $\gamma$  compris entre 0.6 et 1. A 300 K, la présence d'un courant thermoionique provoque la chute du contraste en courant pour des largeurs de barrières  $\geq 40$  Å. Une largeur de barrière optimum se dégage alors vers 35 Å pour les structures envisagées. Une telle structure devrait présenter un courant pic de 80 KA/cm<sup>2</sup> et un contraste en courant supérieur à 4 à température ambiante, en supposant un taux d'interaction de  $1,3 \cdot 10^{-13}$  s, soit  $\gamma = 0,8$ .

### 3.3.4 Comparaison théorie-expérience

Grâce à cette méthode de calcul du courant partiellement séquentiel, les caractéristiques expérimentales de conduction des diodes décrites au § 2.1.3 ont pu être modélisées tant à température ambiante qu'à l'azote liquide. [26].

Nous nous sommes fixés comme objectif de décrire simultanément les courants pic et vallée observés. les seuls paramètres que nous avons fait varier sont le facteur  $\gamma$  et la largeur  $L_A$  de la zone modélisant la couche d'accumulation. L'énergie de Fermi dans l'émetteur est fixée à 50 meV. Le

## TYPICAL I(V) CHARACTERISTIC

$\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As-GaAs}$  DBH

mesa  $15\ \mu\text{m}$

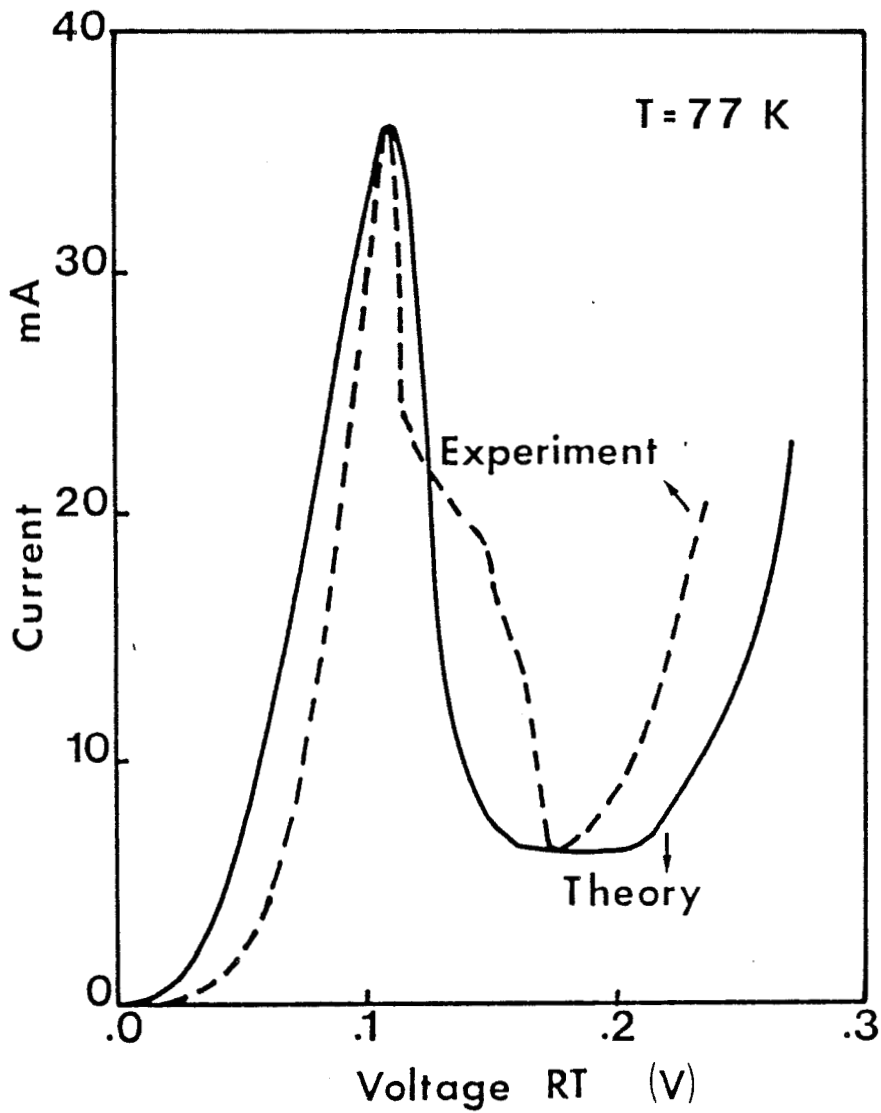


Fig. 3.13 : Comparaison des caractéristiques  $I(V)$  théoriques et expérimentales à 300 K. Les valeurs de tension expérimentales ont été corrigées de la chute de tension dans la zone de déplétion. Un taux d'interaction de  $1.3 \cdot 10^{-13}\ \text{s}$  a été introduit.

champ est supposé constant dans l'ensemble de la structure. la figure 3-13 montre la comparaison théorie-expérience à  $\theta = 77$  K.

Les valeurs de tensions expérimentales ont été corrigées de la chute de tension estimée dans la zone de déplétion, afin de pouvoir effectuer une comparaison avec les tensions utilisées dans le calcul. On constate que le rapport  $J_{pic} / J_{vallée}$  expérimental, de l'ordre de 6, est bien décrit pour un facteur  $\gamma = 0,8$ . Nous en déduisons un taux d'interaction voisin de  $1,3 \cdot 10^{-13}$  s. Une étude en fonction de la température entre 77 et 400 K montre que le facteur  $\gamma$  est peu dépendant de la température.

## BIBLIOGRAPHIE

### CHAPITRE 3

- [1]: B. RICCO et M. AZBEL  
Phys. Rev. B 29, 4, 1984 p 1970
- [2]: H.ONISHI, T. INATA, S. MUTO, N. YOKOYAMA, A. SHIBATOMI  
Appl. Phys. Lett. 49, 1986 p 1248
- [3]: K.F. BRENNAN  
J. Appl. Phys. 62, 1987 p 2392
- [4]: M.C. PAYNE  
Semicond. Sci. Technol 2, 1987 p 797
- [5]: M. CAHAY, M. Mc LENNAN, S. DATTA, M.S. LUNDSTROM  
Appl. Phys. Lett. 50, 1987 p 612
- [6]: F. W. SHEARD, G.A. TOOMBS  
Appl. Phys. Lett. 52, 1988 p 1228
- [7]: R. THEODOR  
Initiation à l'analyse numérique, Ed. MASSON, 1982
- [8]: V.J. GOLDMAN, D.C. TSUI, J.E. CUNNINGHAM  
Phys. Rev. Lett 58, 1987 p 1256  
Cet article a donné lieu aux commentaires suivants :
  - T.C.L.G. SOLLNER  
Phys. Rev. Lett. 59, 1987 p 1622
  - V.J. GOLDMAN, D.C. TSUI, J.E. CUNNINGHAM  
Phys. Rev. Lett. 59, 1987 p 1623
- [9]: E.S. ALVES, L. EAVES, M. HENINI, O.H. HUGUES, M.L. LEADBEATER, F.W. SHEARD, G.A. TOOMBS, G. HILL, M.A. PATE  
Electronics Letters 24, 1988 p 1191
- [10]: J.F. YOUNG, B.M. WOOD, H.C. LIU, M. BUCHANAN, D. LANDHEER, A.J. SPRINGTHORPE, P. MANDEVILLE  
Appl. Phys. Lett. 52, 1988 p 1398
- [11]: H.C LUI  
Appl. Phys. Lett. 53, 1988 p 485
- [12]: T.J. SHEWCHUK, JM GERING, P.C. CHAPIN, P.D. COLEMAN, W. KOPP, C.K. PENG, H. MORKOC  
Appl. Phys. Lett. 47, 1985, p 986
- [13]: W.B. JOYCE, R.W. DIXON  
Appl Phys. Lett 31, 1977 p 354
- [14]: H. KROEMER  
IEEE Transactions on Electron Devices, 25, 1978, p 850

- [15] : V.J. GOLDMAN, D.C. TSUI, J.E. CUNNINGHAM  
Phys. Rev. B 35, 1987, p 9387
- [16] : T.C.L.G SOLLNER, E.R. BROWN, H.Q. LE  
à paraître dans Physics of Quantum Electron Devices, édité par F. Capasso - Springer - Verlag
- [17] : D. THOMAS, F. CHEVOIR, P. BOIS, E. BARBIER, Y. GULDNER, J.P. VIEREN  
4ème conférence internationale "Superlattices, Microstructures and Microdevices", Trieste, 1988  
R. BOUREGBA, Thèse de doctorat de l'Université de Lille 1, à paraître.
- [18] : L. EAVES, G. TOOMBS, F. SHEARD, C. PAYLING, M. LEADBEATER, E. ALVES, T. FOSTER, P. SIMMONDS, M. HENINI, O. HUGHES, J.C. PORTAL, G. HILL, M. PATE  
Appl. Phys. Lett 52, 1988 p 212
- [19] : R. LANDAUER  
Z. Phys. B - Condensed Matter 68, 1987 p 217
- [20] : T. WEIL et B. VINTER  
Appl. Phys. Lett. 50, 1987 p 1281
- [21] : M. JONSON et A. GRINCWAJG  
Appl. Phys. Lett. 51, 1987 p 1729
- [22] : A. DOUGLAS STONE, P.A. LEE  
Phys. Rev. Lett. 54, 1985, p 1196
- [23] : R. GUPTA, B.K. RIDLEY  
J. Appl. Phys. 64, 1988 p 3089
- [24] : B. GU, C. COLUZZA, M. MANGIANTINI, A. FROVA  
J. Appl. Phys. 65, 1989 p 315
- [25] : D. LIPPENS, J.L. LORRIAUX, O. VANBESIEN, L. DE SAINT POL  
Ga As and Related compounds conference, Karuizawa, Japon, 1989
- [26] : O. VANBESIEN, D. LIPPENS  
à paraître dans Solid State Electronics

## **CHAPITRE 4**

# Chapitre 4

## Analyse dynamique

Un des attraits particuliers de la diode à double barrière réside en sa capacité théorique d'atteindre des fréquences de fonctionnement supérieures à celles obtenues avec des composants de type conventionnels dipôles ou tripôles.

D'un point de vue expérimental, des oscillations ont été obtenues avec une diode DB jusqu'à 200 GHz [1] et des résultats préliminaires ont montré la possibilité d'osciller à 420 GHz.[2] Une utilisation en détection jusqu'à 2,5 THz a été également reportée [3]. Ces résultats montrent que les propriétés électriques observées en régime statique sur ce type de composants, peuvent être conservées en régime dynamique pour des fréquences allant jusqu'à plusieurs centaines de GHz.

La raison principale doit être recherchée dans les très faibles valeurs de temps mises en jeu lors des processus de transport par effet tunnel et de piégeage des porteurs dans le puits, ce dernier phénomène apparaissant comme le plus limitant dans la capacité à monter en fréquence. C'est pourquoi nous nous intéressons dans ce chapitre à la détermination des temps caractéristiques décrivant les processus de transfert de charges dans la zone active puits-barrières.

### 4.1 Durée de vie du niveau fondamental

#### 4.1.1 Détermination analytique

Compte tenu du couplage important des états localisés avec les zones d'émetteur et de collecteur qui forment un continuum, tout porteur placé à l'intérieur du puits va s'en échapper si l'on suppose qu'il ne subit pas d'interaction rétrodiffusive.

En conséquence, la probabilité de présence d'une population électronique, initialement localisée à l'intérieur du puits, et dont l'énergie correspond à un niveau quasi-lié, décroît avec le temps.

Cette décroissance suit une loi exponentielle de type  $e^{-t/\tau}$ . On définit pour chaque niveau quasi-

lié un temps  $\tau_e$  appelé durée de vie du niveau quantique. Pour la plupart des structures, seul le niveau fondamental est peuplé. Le temps moyen de résidence des porteurs dans le puits  $\tau$  correspond alors à la durée de vie du 1er niveau.

On montre pour un état quasi-lié couplé avec un continuum, que  $\tau_e$  est relié à la largeur totale à mi hauteur  $\Gamma$  du pic de transmission par une relation du type du principe d'incertitude d'Heisenberg [4]-[5]

$$\tau_e = \frac{\hbar}{\Gamma} \quad (4-1)$$

Nous avons vu au § 1.2 que la largeur du 1er pic de résonance peut s'exprimer en fonction de l'énergie du niveau fondamental  $E_1$  mesurée par rapport au bas de la bande de conduction au milieu du puits, et des transmissions des barrières gauche et droite à l'énergie de ce même niveau.

$$\Gamma = \frac{E_1}{\pi} (Tg + Td) \quad (4-2)$$

On accède ainsi analytiquement au temps caractéristique du niveau fondamental :

$$\tau_e = \frac{\pi \hbar}{E_1 (Tg + Td)} \quad (4-3)$$

Le sens physique de ce résultat peut être mis en évidence en considérant qu'un électron possédant l'énergie  $E_1$  se déplace dans le puits d'une barrière à l'autre avec une vitesse  $v = \sqrt{2E_1 / m^*}$ . Pour chaque aller-retour, la longueur du parcours effectué vaut  $\lambda(E = E_1) = 2deff$  et la probabilité de présence est multipliée par  $(1 - Tg)(1 - Td)$ .

Le temps  $\tau_e$  au bout duquel la probabilité de présence des porteurs dans le puits est divisée par  $e$ , correspond à  $n$  allers et retours tels que

$$\left[ (1 - Tg)(1 - Td) \right]^n = e^{-1} \quad (4-4)$$

On en déduit que le temps nécessaire pour effectuer ces  $n$  allers et retours est



$$\tau_e = \frac{n\lambda}{v} \approx \frac{\pi\hbar}{E_1(Tg + Td)} \quad (4-5)$$

Rappelons que la transparence d'une barrière est exponentiellement dépendante de la masse et de la largeur des barrières. Il en résulte qu'il est impératif de rendre compte des différences de masses effectives entre le puits et les barrières si l'on veut accéder quantitativement aux valeurs de  $\tau_e$ .

Sur la figure 4-1 nous avons tracé le temps de durée de vie calculé à partir de la relation 4-3 pour une structure double barrière symétrique Ga<sub>0.7</sub>Al<sub>0.3</sub>As - GaAs.

La largeur du puits est conservée constante à 50 Å tandis que l'épaisseur des barrières varie de 30 à 100 Å.

Pour la concentration en Aluminium choisie, la hauteur de discontinuité de bande de conduction est 230 meV, la masse effective  $m_{bar}^*$  dans les barrières est 0.092  $m_e$ ,  $m_{puits}^* = 0.067 m_e$ .

On constate que  $\tau_e$  varie de quelques centaines de fs à 1 ns.

## 4.1.2 Caractérisation par photoluminescence résolue en temps

### 4.1.2.1 Principes

Les mécanismes mis en jeu sont illustrés sur la figure 4-2. L'échantillon est soumis à une excitation laser  $h\nu_{laser}$  permettant de créer des paires électron-trou à une valeur d'énergie supérieure à celles correspondant aux transitions optiques entre les niveaux quantifiés des bandes de conduction et de valence. Ce processus de création est suivi d'un mécanisme très rapide de relaxation des porteurs qui se localisent en pratique sur les niveaux fondamentaux. Les populations d'électrons et de trous dont l'énergie correspond à un niveau quantifié vont se recombiner, donnant lieu à un signal en photoluminescence d'énergie correspondant au puits quantique. Ainsi grâce à un balayage fréquentiel de la luminescence détectée, il est théoriquement possible de distinguer les recombinaisons des porteurs localisés de celles des porteurs situés dans les zones adjacentes. Lorsque le détecteur est accordé sur la longueur d'onde correspondant aux recombinaisons à partir des niveaux fondamentaux,

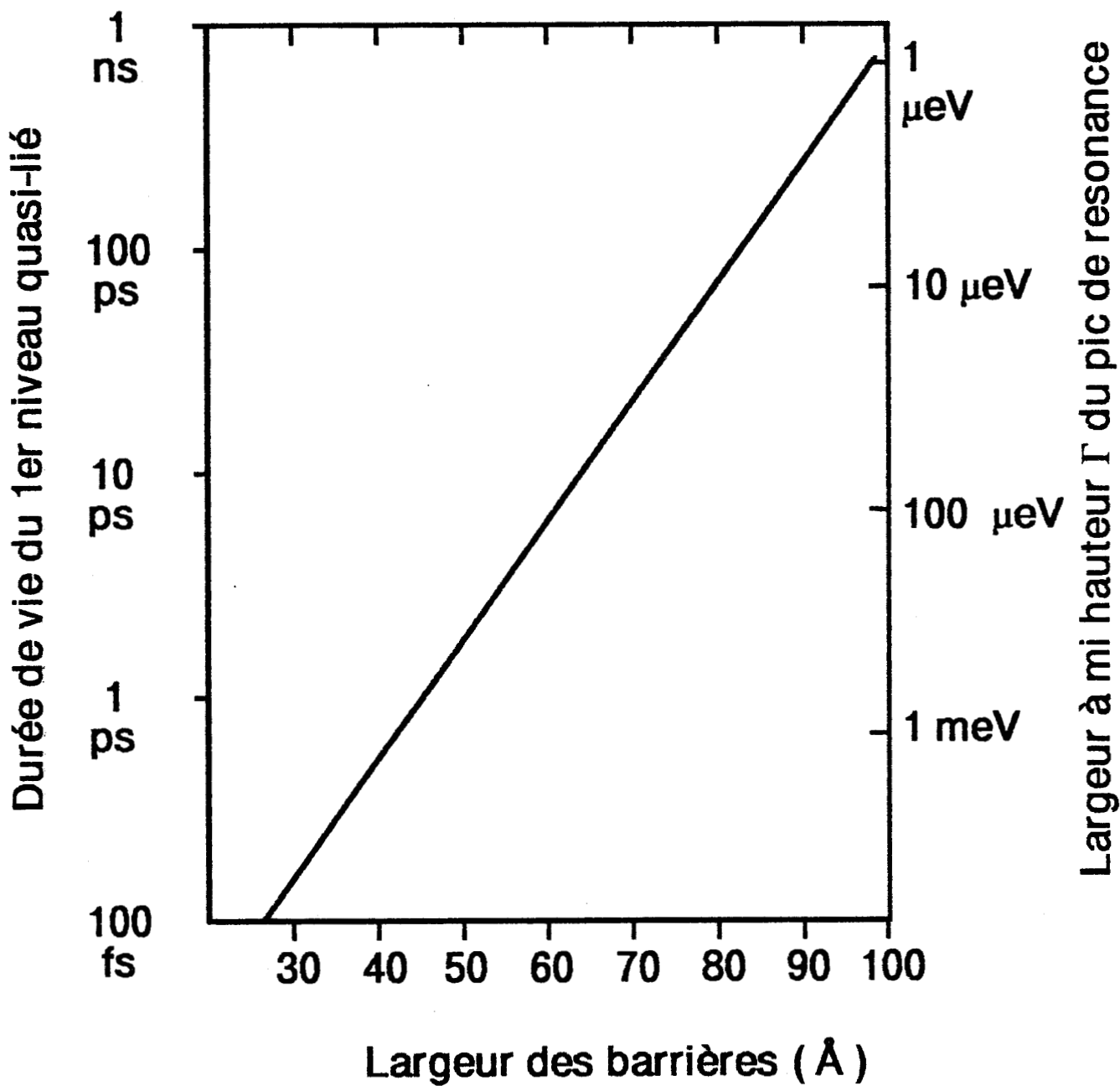


Fig. 4.1. Durée de vie du premier niveau quasi-lié d'une structure symétrique Ga Al As ( $x = 0.3$ ) / GaAs, en fonction de la largeur de barrières.  
 Hauteur des barrières :  $\Delta V = 230 \text{ meV}$   
 Masse effective des électrons :  $m = 0.067 m_0$  dans le puits,  $m = 0.092 m_0$  dans les barrières.

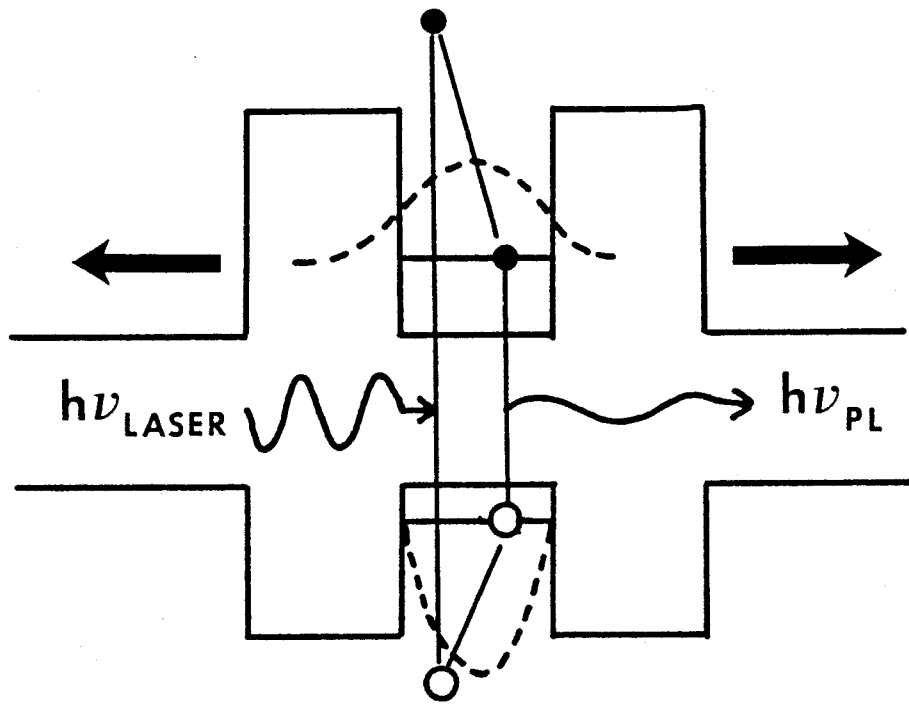


Fig 4.2. Schéma de principe des expériences de photoluminescence.

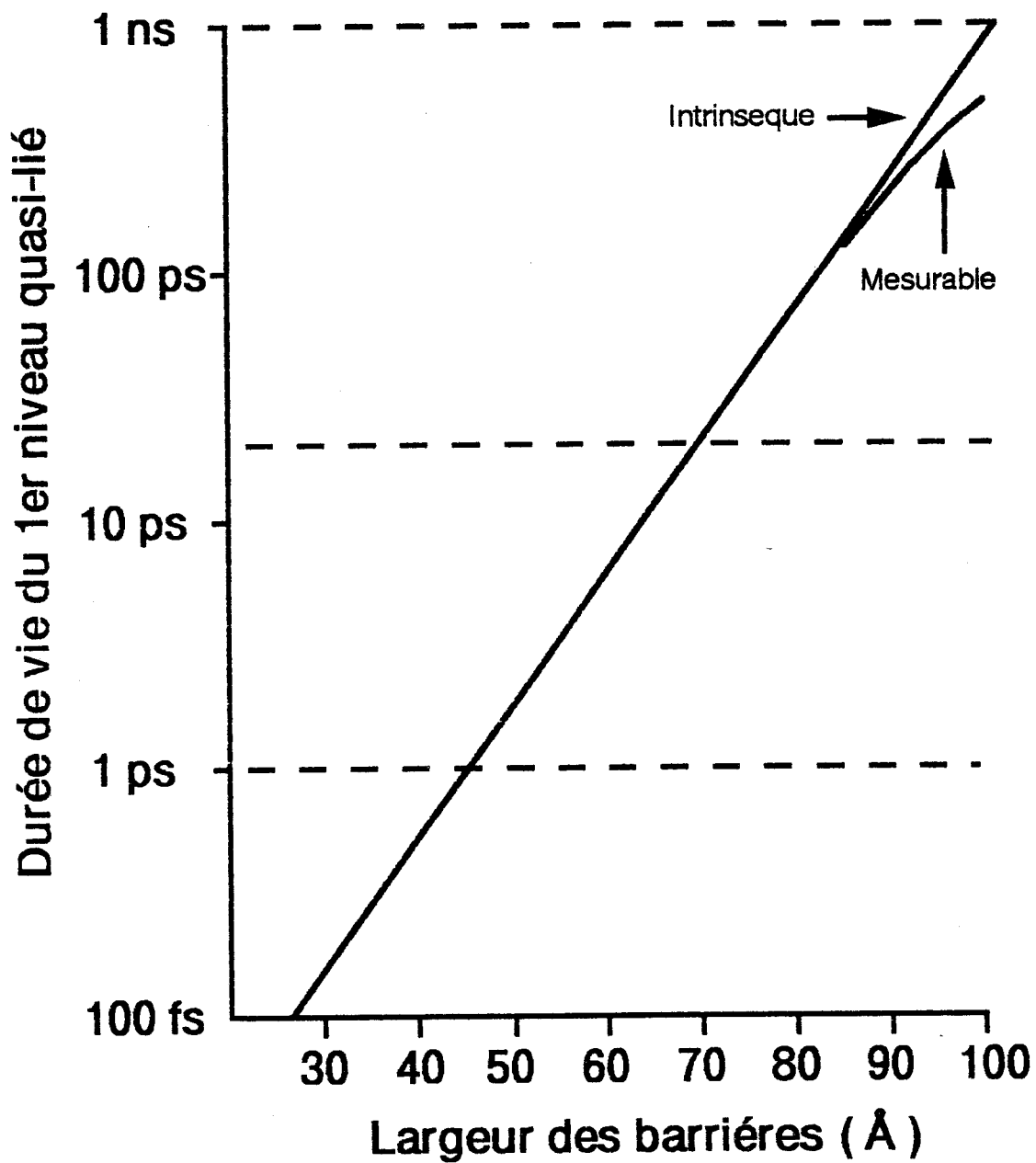


Fig. 4.3. Limitations sur la mesure de la durée de vie de la population piégée sur le premier niveau, pour des structures identiques à celles de la fig. 4.1.

les variations temporelles du signal de photoluminescence sont une mesure des variations de la densité électronique présente dans le puits.

2 processus principaux concourent simultanément à la diminution de la population électronique.

Ce sont respectivement :

- la fuite à travers les barrières, décrite par le temps  $\tau_e$
- la recombinaison radiative et non radiative des paires électrons-trous.

Le temps caractéristique de recombinaison radiatif  $\tau_r$ , dépend de la qualité du matériau et de la température.

Pour un matériau de bonne qualité il est de l'ordre de 1 ns pour des températures supérieures à 45 K.

Les recombinaisons non radiatives dépendent des structures semiconductrices utilisées, en particulier des états d'interface. Nous présenterons dans le paragraphe suivant les structures que nous avons utilisées en pratique pour minimiser ce phénomène parasite. Ainsi si l'on ne considère que la combinaison des 2 modes de dépeuplement, fuite par effet tunnel - recombinaison radiative, la puissance lumineuse détectée obéit à une loi exponentielle du temps, avec un temps caractéristique  $\tau$  donné par :

$$\frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_e} + \frac{1}{\tau_r} \quad (4-6)$$

#### 4.1.2.2 Limites de la méthode

Bien que le temps de vie du 1er niveau, déterminé par la transparence des barrières, soit un paramètre variant sur plusieurs décades, sa mesure expérimentale accepte 2 limitations, qui vont se traduire pour les échantillons testés par 2 critères sur les largeurs de barrières.

Ces limitations sont chiffrées sur la figure 4.3. La limite supérieure est imposée par  $\tau_r$ .

La limite inférieure dépend de la résolution temporelle du système expérimental, imposée

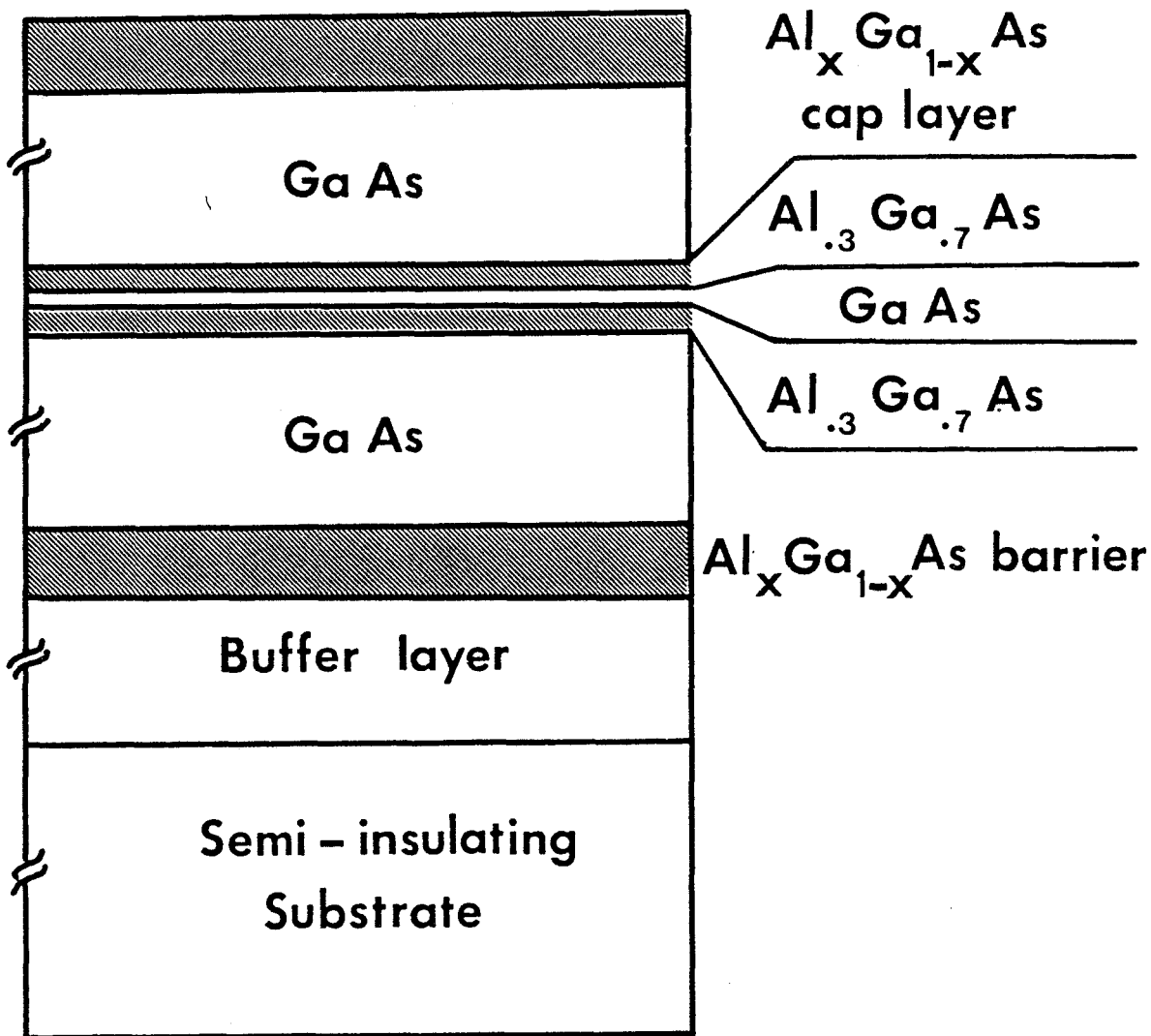


Fig. 4.4. Composition des structures étudiées par la photoluminescence résolue en temps.

essentiellement par la durée d'impulsion et la sensibilité du détecteur. Les mesures de photoluminescence résolue en temps ont été effectuées par le Centre National d'étude et Télécommunications (CNET). Deux systèmes de détection ont été utilisés. Le 1er, localisé au CNET Bagnoux, utilise une Streak camera. La limite de détection est dans ce cas de l'ordre de 20 ps. Le second système de mesure, implanté au CNET Lannion, est basé sur la méthode de conversion développée par Shah [6]. La résolution est alors meilleure que 1 ps.

#### 4.1.2.3 Résultats expérimentaux

La structure des échantillons est schématisée sur la figure 4-4. Les doubles barrières sont réalisées en matériaux  $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$ . Le choix d'une concentration en Aluminium de 30 % est retenu dans la mesure où le gap à cette concentration est direct. L'on évite de ce fait les problèmes d'interprétation rencontrés pour des mesures sur des structures  $\text{AlAs} - \text{GaAs}$ , pour lesquelles les minimums d'énergie correspondent aux vallées X. [7]

La largeur du puits est fixée à 50 Å. Les barrières sont symétriques et leur épaisseur varie entre 50 Å et 100 Å. Pour minimiser les phénomènes de recombinaison en surface et dans le substrat, 2 barrières respectivement en surface et en couche buffer ont été épitaxiées. Leur épaisseur est de 100 Å, interdisant les transferts de charges vers la surface et vers le substrat. Les zones adjacentes à la double barrière sont de 1 000 Å. Elles constituent des puits très élargis pour lesquels les effets de quantification sont négligeables. Par ailleurs le choix de leur dimension a été dicté par le fait qu'il est nécessaire de minimiser l'atténuation du signal de photoluminescence provenant du puits.

Un exemple d'analyse spectrale retardée à 5 ps pour une structure intégrant des barrières de 80 Å est donné sur la figure 4-5. L'intensité de photoluminescence est reportée en échelle logarithmique. On observe 2 pics caractéristiques de la photoluminescence des échantillons. Le 1er situé à 1,51 eV correspond au signal de photoluminescence issu du GaAs. Un pic d'énergie plus élevée ( $\epsilon = 1,60$  eV) peut être attribué à des mécanismes de recombinaison de porteurs localisés dans le puits. Un rapide calcul des niveaux quantifiés pour les électrons et les trous dans la structure considérée montre en effet

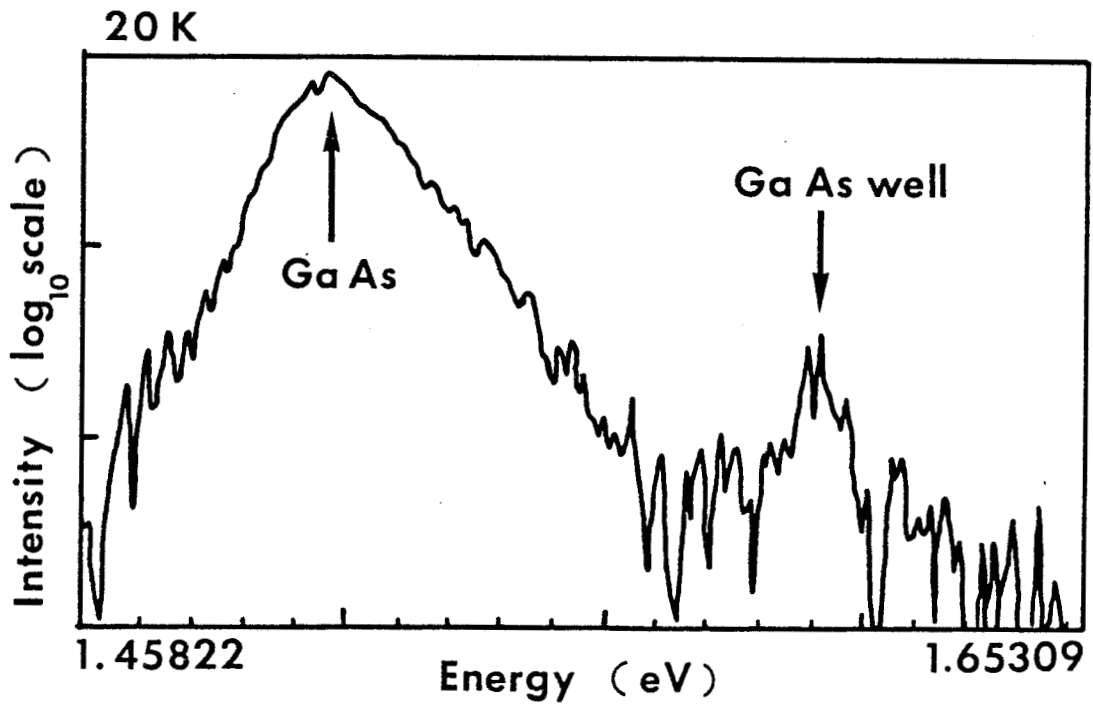


Fig. 4.5. Spectre de la photoluminescence recueillie à 5 ps de retard, pour une structure présentant des barrières de 100 Å.

On distingue le pic correspondant aux recombinaisons sur la largeur de bande interdite du Ga As, ainsi que le pic correspondant aux recombinaisons à partir des premiers niveaux quasi-liés des bandes de valence et de conduction.



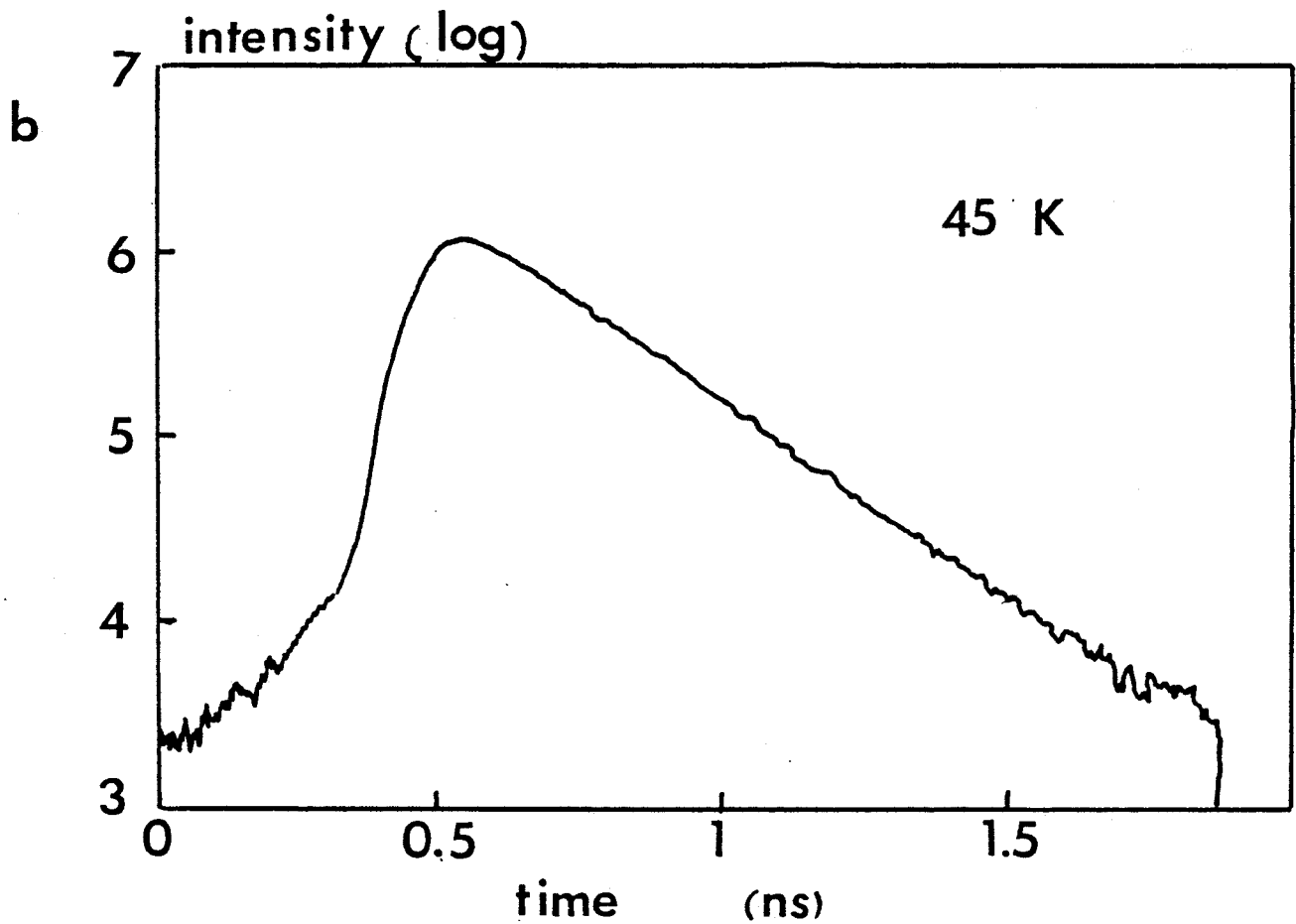
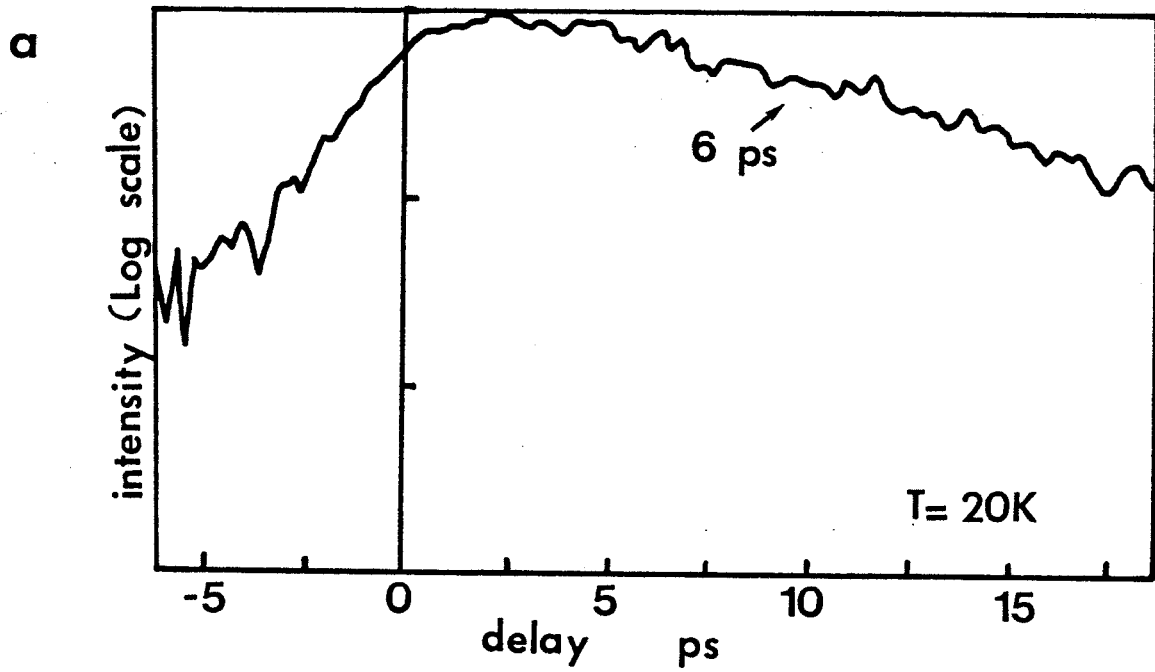


Fig. 4.6. Evolution temporelle de l'intensité de photoluminescence recueillie pour des structures intégrant des barrières de 70 Å (a) et de 100 Å (b).

L Barrières	$\tau$ intrinsèque	$\tau$ mesurable	$\tau$ expérimental
70 Å	20 ps	20 ps	6 ps
80 Å	70 ps	65 ps	15 ps
100 Å	1 ns	500 ps	475 ps

Tableau 4.1. Comparaison entre les durées de vie du 1er niveau

- Intrinsèques (données par  $h/\Gamma$ ).
- Mesurables (corrigées des recombinaisons non radiatives)
- Expérimentales.

que l'écart d'énergie entre les niveaux fondamentaux et le bas des bandes de conduction et de valence est de l'ordre de 90 meV.

Il est important de noter que la puissance du signal optique détecté au niveau du puits est extrêmement faible. A titre d'ordre de grandeur, précisons que la puissance laser incidente est de 100 W/cm<sup>2</sup> pour les expériences utilisant la détection de type conversion de fréquence, et que seule une très petite partie de ce signal est détectée sur la raie de haute énergie.

Compte tenu de ce problème de rendement de conversion très faible, il n'a pas été possible, pour la couche présentant des barrières de 50 Å, de distinguer sans ambiguïté le pic correspondant au 1er niveau du bruit de fond.

Pour les études purement temporelles, l'énergie de détection est ajustée dans la partie haute du spectre en maximisant la puissance mesurée. La figure 4-6a montre les variations temporelles du signal de photoluminescence ( $s(t)$ ) pour un échantillon ayant des barrières de 70 Å. On observe, en échelle semi logarithmique, des variations linéaires de  $s(t)$  sur pratiquement une décade. Cette décroissance exponentielle de la puissance détectée se fait avec un temps caractéristique  $\tau = 6ps$ .

La figure 4-6b visualise les résultats obtenus pour un échantillon ayant des barrières de 100 Å. La décroissance exponentielle de  $s(t)$  peut être identifiée ici sur 2 décades avec un temps caractéristique  $\tau = 475 ps$ .

Si l'on essaye à présent de comparer les temps mesurés dans ces 2 cas limites aux valeurs calculées par la relation 4-5, on obtient les données figurant dans le tableau 1. On constate que les valeurs théoriques et expérimentales sont du même ordre de grandeur. Les valeurs mesurées sont cependant systématiquement inférieures aux valeurs prédites. Plusieurs facteurs peuvent contribuer à cette différence :

- influence des temps de vie radiatifs et non radiatifs
- perte de cohérence dans le transport des porteurs

- fluctuations de la largeur des barrières
- réaction de charge d'espace à l'intérieur de la double barrière.

L'importance du 1er de ces points peut être appréhendée à partir de la relation 4-6. Il est clair que l'on obtiendra une réduction du temps de décroissance de  $s(t)$  pour des barrières larges lorsque  $\tau_r$  et  $\tau_e$  deviennent du même ordre de grandeur.

En ce qui concerne les fluctuations d'interface, elles peuvent conduire à des variations de la largeur nominale du puits. Ceci se traduit en première approximation par un élargissement du niveau quasi-lié. Ainsi pour une fluctuation de plus ou moins une monocouche ( $a/2 \approx 2,8 \text{ \AA}$ ), l'écart énergétique serait de l'ordre de plus ou moins 5 meV.

Les phénomènes de réaction de charge d'espace peuvent être importants, dans la mesure où le temps de vie des trous est très largement supérieur à celui des électrons. Ainsi, le dépeuplement préférentiel des électrons modifie les variations spatiales de la bande interdite et donc des probabilités de transmission  $T_g$  et  $T_d$  utilisées dans la relation 4-5. Actuellement il ne nous a pas été possible d'étudier les variations temporelles de  $s(t)$  en fonction de la puissance lumineuse incidente, et donc du nombre de porteurs présents, compte tenu des valeurs très faibles du signal détecté mentionnées auparavant.

Le dernier point est relatif à la perte de cohérence dans le transfert des charges. Rappelons que les mesures de photoluminescence ont été effectuées à l'équilibre et que l'on ne détecte que les porteurs issus du niveau fondamental. Dans la mesure où le détecteur n'est sensible qu'à l'énergie des niveaux quasi-liés, il nous semble que la part non cohérente du transport telle qu'elle est décrite dans le chapitre 3, ne puisse être mesurée.

Si à présent l'on essaie de comparer les résultats de cette étude avec ceux publiés dans la littérature [8]-[11] on trouve très peu de références compte tenu de la difficulté de la mesure. Nous avons déjà mentionné le travail de Tsuchiya sur des barrières Al As. Compte tenu de la hauteur de barrière extrêmement importante dans ce cas, les largeurs de barrières ayant conduit à des résultats

fiables sont comprises entre 28 Å et 62 Å, ce qui correspond à des temps de décroissance entre 60 ps et 400 ps. On constate que l'intervalle des valeurs de  $L_B$  conduisant à des résultats significatifs est extrêmement étroit, comme nous avons pu le constater pour nos propres mesures.

Enfin, notons qu'il existe dans ce cas une très grande incertitude sur la hauteur de barrière à prendre en compte, due au gap indirect de AlAs. Tsuchiya n'a considéré que des transitions de type  $\Gamma-\Gamma$ , tout en étudiant l'influence de différentes lois de répartition des discontinuités de bande interdite entre les bandes de conduction et de valence.

D'autres études ont eu pour objet des mesures sous polarisation. Nous allons maintenant les considérer.

### 4.1.3 Etude sous polarisation

La détermination du temps de vie du niveau fondamental, telle qu'elle a été réalisée sur des doubles barrières à l'équilibre, présente l'inconvénient de faire appel à la variation d'un paramètre technologique (ici la largeur des barrières). Cela nécessite la réalisation de plusieurs structures, obtenues dans des conditions de croissance très similaires.

Outre la difficulté de réaliser plusieurs épitaxies, la comparaison des mesures obtenues est soumise aux aléas de reproductibilité entre les différentes couches. Il semble plus intéressant de pouvoir réaliser plusieurs mesures sur le même composant, en ne faisant varier qu'un paramètre externe, tel que la tension appliquée.

Les doubles barrières très fortement dissymétriques, présentant une barrière côté émetteur plus haute ou plus épaisse que celle côté collecteur, sont des structures appropriées à une étude sous champ électrique. En effet, la transmission  $T_g$  de la barrière émetteur peut être considérée comme négligeable devant celle de la barrière collecteur  $T_d$ .

La durée de vie du niveau fondamental est alors donnée par :

$$\tau_e \approx \frac{\pi \hbar}{E_1 T_d} \quad (4-7)$$

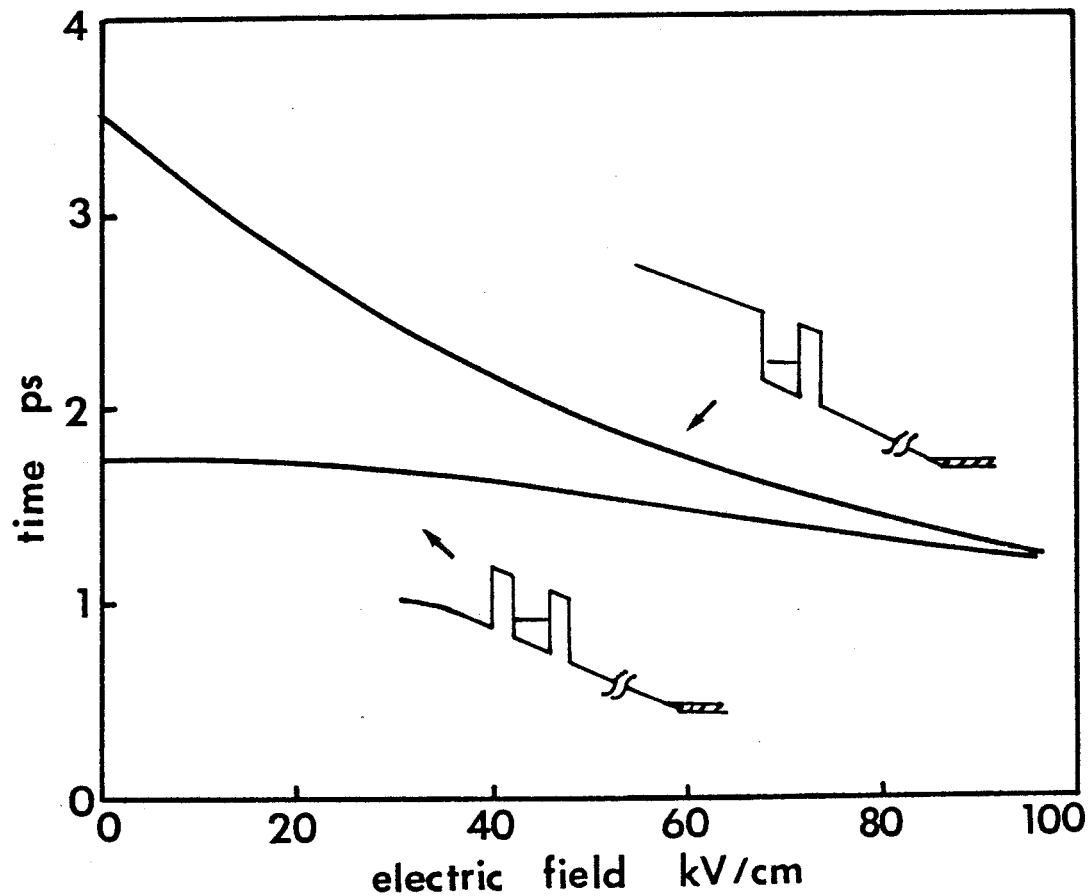


Fig. 4.7. Comparaison de la durée de vie du 1er niveau quasi-lié en fonction du champ électrique, pour une structure Ga Al As / Ga As symétrique avec des barrières de 50 Å et une structure assymétrique présentant une barrière emetteur très large (>200 Å), la barrière collecteur étant maintenue à 50 Å.  
 Hauteur des barrières :  $\Delta V = 230$  meV  
 Masse effective des électrons :  $m = 0.067 m_e$  dans le puits,  $m = 0.092 m_e$  dans les barrières.

La barrière collecteur voit sa hauteur, relativement à l'énergie du 1er niveau quasi-lié, diminuer lorsque le champ électrique  $F$  augmente. Comme le coefficient de transmission  $T_d$  est fonction de cette hauteur apparente de barrière, la durée de vie du niveau fondamental devient un paramètre électriquement ajustable et rapidement variable avec le champ électrique  $F$ .

Cette situation ne peut être assimilable au cas d'une double barrière symétrique, pour laquelle l'application d'un champ électrique fait remonter la hauteur apparente de la barrière émetteur par rapport au niveau fondamental, et abaisse simultanément la hauteur apparente de la barrière collecteur. La somme  $T_g + T_d$  ne varie alors plus qu'au second ordre avec  $F$ , comme on peut le montrer par un développement limité.

On trouve pour des champs faibles ( $F < E_1 / (L_W + L_B)$ )

$$T_g(F) + T_d(F) \approx 2T_o \left( 1 + \frac{m_{bar}^*}{4(V_o - E_1)} \frac{F^2 (L_B + L_W)^2 L_B^2}{\hbar^2} \right) \quad (4-8)$$

où  $V_o$  est la hauteur des barrières et  $T_o$  leur transmission à l'équilibre à l'énergie du 1er niveau.

$\tau_e$  sera alors très peu sensible au champ électrique appliqué.

La figure 4-7 permet de comparer les durées de vie  $\tau_e$  d'une double barrière symétrique identique à celle proposée par Liu [12], par rapport à la double barrière asymétrique obtenue en donnant à la barrière émetteur une largeur telle que le passage par effet tunnel y devienne impossible. Les 2 structures retrouvent la même durée de vie du niveau fondamental lorsque la fuite des porteurs par la barrière côté émetteur devient impossible dans la structure symétrique, *ie* lorsque  $F \approx 2E_1 / (L_W + L_B)$ .

Notons que les résultats obtenus ne concordent pas avec ceux établis par Liu, qui prédit une forte dépendance de  $\tau_e$  avec la polarisation pour des structures double barrière symétriques. Cette différence peut s'expliquer par l'aspect trop simplifié de la description des barrières dans la référence [12].

Expérimentalement, Norris a réalisé des déterminations de  $\tau_e$  sur des structures liées d'un côté.

[9]. Ses résultats sont en bon accord avec les valeurs prédites. Il convient toutefois d'insister sur le fait qu'il est relativement difficile de contrôler les variations spatiales du champ électrique hors double barrière, et ainsi accéder aux valeurs du champ moyen agissant sur la zone puits-barrières, à partir de la tension appliquée.

D'autres expériences ont été également réalisées sur des doubles barrières de largeur importante [13]-[14].

## 4.2 Modélisation dynamique

Notre objectif est de corréler les expériences de photoluminescence avec une modélisation numérique incluant la variable temps [15]. Cette démarche va nous permettre de calculer le temps de décroissance d'une charge électronique piégée dans le puits de potentiel, mais aussi le temps d'établissement du maximum de cette charge.

A cet effet, nous allons étudier l'interaction d'un paquet d'ondes gaussien au travers d'une double barrière, en nous restreignant à une analyse unidimensionnelle.

### 4.2.1 Résolution de l'équation de Schrödinger dépendant du temps.

#### 4.2.1.1 Initialisation

Nous retiendrons pour l'initialisation du paquet d'ondes une forme gaussienne, donnée par la relation [16] :

$$\varphi(Z) = \exp \left[ iK_0 Z - \left( \frac{Z - Z_0}{\sigma_Z} \right)^2 \right]$$

Le choix d'un paquet d'ondes gaussien présente plusieurs avantages :

- La transformée de Fourier d'une gaussienne d'écart type  $\sigma_z$  dans l'espace réel est une gaussienne d'écart type  $\sigma_k = 1/\sigma_z$  dans la représentation fréquentielle. On peut ajuster ainsi très précisément le spectre du paquet d'ondes initial, dépourvu de lobes secondaires.



- La propagation d'un paquet d'ondes gaussien centré sur  $K_0$  dans une région de potentiel constant s'effectue avec une vitesse moyenne définie par  $v = \frac{\hbar K_0}{m}$ . Au cours du temps ce paquet d'ondes garde une forme gaussienne tout en augmentant sa dispersion spatiale. L'amplitude du maximum décroît de manière à assurer la conservation du nombre total de charges  $N = \int_{-\infty}^{+\infty} |\varphi(Z)|^2 dz$ . Toute autre modification de la forme du paquet d'ondes au cours de la simulation est attribuable à une interaction avec le potentiel traversé.

Pour l'initialisation de ce paquet d'ondes, nous reprendrons les conclusions formulées par Goldberg [17]:

Le paquet d'ondes est initialisé dans l'émetteur de la double barrière. Le maximum de la densité de probabilité de présence se situe à  $Z = Z_0$  et on effectue une troncature hors de l'intervalle  $Z_0 \pm 2\sigma_z$ . On vérifie que cela ne provoque pas de modification sensible du spectre fréquentiel.

En pratique la dimension de la zone d'émetteur est prise supérieure à  $4\sigma_z$  pour inclure une zone absorbante permettant de s'affranchir des réflexions sur le bord du tableau numérique, sur laquelle nous reviendrons par la suite.

#### 4.2.1.2 Méthode explicite

Nous négligerons le mouvement des porteurs parallèlement aux couches. L'évolution temporelle du paquet d'ondes obéit numériquement à l'équation de Schrödinger unidimensionnelle dépendante de temps :

$$i\hbar \frac{\partial \varphi(Z)}{\partial t} = \frac{-\hbar^2}{2m^*(Z)} \frac{\partial^2 \varphi(Z)}{\partial Z^2} + V(Z) \varphi(Z) \quad (4-9)$$

De très nombreuses méthodes de résolution de cette équation sont proposées dans la littérature [18]. Dans ce travail nous avons exclusivement utilisé les schémas de calculs proposés par Goldberg [17], qui nous ont parus particulièrement illustratifs des difficultés de mise en oeuvre.

La première approche consiste à calculer  $\varphi^f(Z)$  au temps  $t + dt$  (l'indice  $f$  permet de nous affranchir du rappel de la variable temporelle) à partir de  $\varphi(Z)$  connue au temps  $t$ , par intégration de l'équation de Schrödinger en fonction du temps, au moyen d'une méthode au 1er ordre.

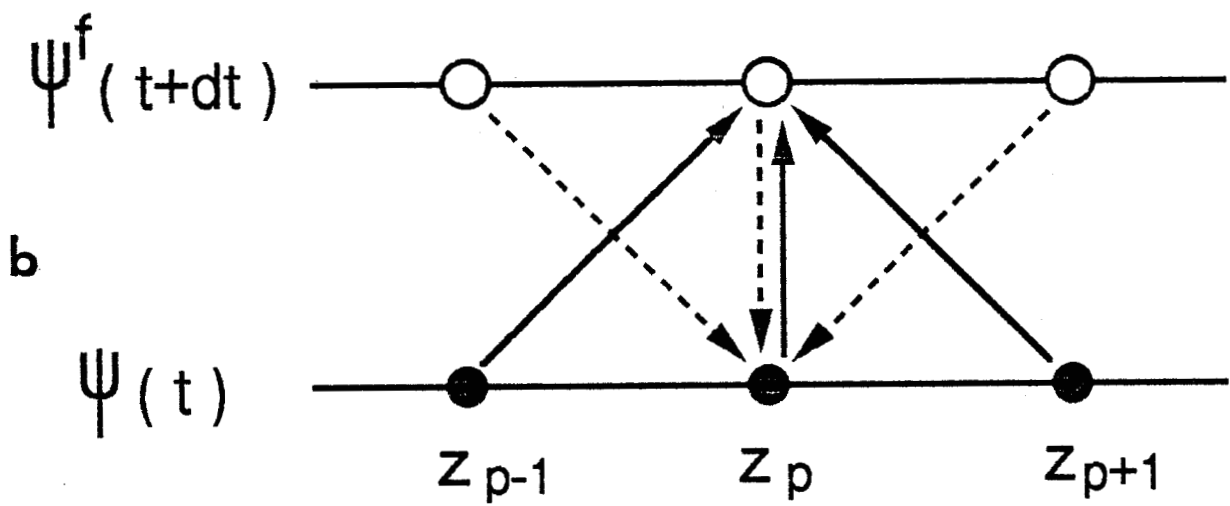
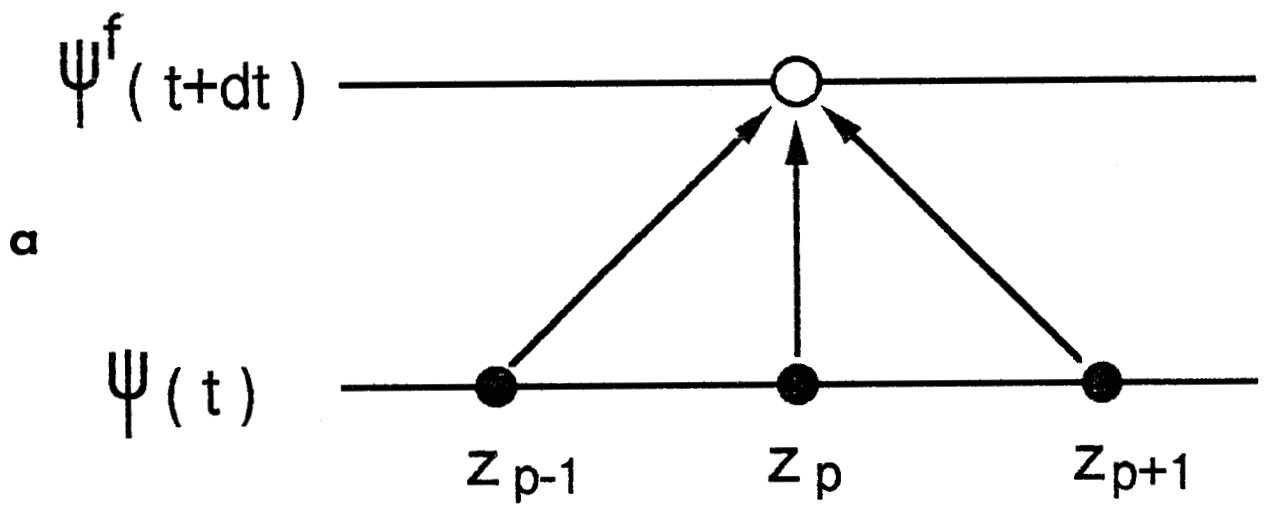


Fig. 4.8. Schéma de principe de la méthode de résolution de l'équation de schrodinger dependante du temps.  
 a) Méthode explicite.  
 b) Méthode implicite.

$$\varphi^f(Z) = \varphi(Z) + dt \Phi \left( t, \varphi(Z), \frac{\partial^2 \varphi(Z)}{\partial Z^2} \right) \quad (4-10)$$

avec

$$\Phi = \frac{\partial \varphi(Z)}{\partial t} = \frac{-\hbar}{2im} \frac{\partial^2 \varphi(Z)}{\partial Z^2} + \frac{1}{i\hbar} V(Z) \varphi(Z) \quad (4-11)$$

La dérivée seconde spatiale peut être linéarisée suivant une méthode à 3 points :

$$\frac{\partial^2 \varphi(Z)}{\partial Z^2} = \frac{1}{4dz^2} \left[ -\varphi(Z-dz) + 2\varphi(Z) - \varphi(Z+dz) \right] \quad (4-12)$$

où  $dz$  est le pas spatial du maillage pris en compte pour discrétiser la zone active.

Cette méthode est schématisée par la figure 4-8a. Elle présente l'avantage d'être explicite, c-a-d de donner  $\varphi^f$  en fonction de  $\varphi$  au temps précédent uniquement. Numériquement on montre que cette méthode est équivalente au développement au 1er ordre de l'opérateur d'évolution [17]

$$e^{-iH dt} = 1 - iH dt \quad (4-13)$$

Les premiers essais de cette méthode pour caractériser la propagation d'un paquet d'ondes gaussien, en l'absence de discontinuité d'interface, nous ont permis de constater des instabilités numériques. Celles-ci se développent très rapidement, en quelques itérations. Ce caractère hautement instable est dû à l'absence des termes au second ordre. Par conséquent cette méthode n'a pu être directement retenue. Elle constitue cependant la base de la méthode implicite que nous allons exposer.

#### 4.2.1.3 Méthode implicite

Nous utiliserons le développement de Cayley de l'opérateur d'évolution, valable jusqu'au second ordre [17]

$$e^{-iH dt} = \left( 1 - \frac{1}{2} iH dt \right) / \left( 1 + \frac{1}{2} iH dt \right)$$

Pratiquement, cela revient à superposer au développement précédent le même type de schéma en partant cette fois de  $\varphi^f$  supposée connue pour remonter à  $\varphi$ . Le pas sur le temps est alors négatif :

$$\varphi(Z) = \varphi^f(Z) - dt \Phi^f \left( t + dt, \varphi^f(Z), \frac{\partial^2 \varphi^f(Z)}{\partial Z^2} \right) \quad (4-14)$$

La connaissance de  $\varphi^f$  au temps  $t + dt$  nécessite alors pour chaque point d'abscisse  $Z$  la résolution d'une équation obtenue en sommant (4-10) et (4-14). On constate sur la figure 4-8b que la fonction d'onde  $\varphi^f$  au point  $Z$  est maintenant implicitement dépendante de  $\varphi$  et  $\varphi^f$  aux points  $Z - dz, Z, Z + dz$ .

En utilisant un maillage spatial de  $n$  points, le problème peut se mettre sous la forme matricielle

$$A(t + dt) \varphi^f = B(t) \varphi \quad (4-15)$$

où  $A$  et  $B$  sont des matrices tridiagonales complexes  $n \times n$  vérifiant :

$$B(t) = A^*(t) \quad (4-16)$$

La ligne courante  $k$  de la matrice  $A(t)$  s'écrit :

$$\begin{aligned} a_{k,k-1} &= \frac{1}{2} \\ a_{k,k} &= -1 - \frac{m^* V(Z_k, t) dz^2}{\hbar^2} + \frac{i 2m dz^2}{\hbar dt} \\ a_{k,k+1} &= \frac{1}{2} \end{aligned} \quad (4-17)$$

Au temps  $t_0 + p dt$ , la fonction d'onde  $\varphi_p$  est donnée par

$$A(t_0 + p dt) \varphi_p = \prod_{q=1}^{p-1} \left( B(t_0 + q dt) A^{-1}(t_0 + q dt) \right) B(t_0) \varphi_0 \quad (4-18)$$

Cependant, il sera plus commode de résoudre à chaque étape le système matriciel (4-15) par la méthode de diagonalisation-remontée de Gauss-Siedel. On peut ainsi obtenir une visualisation animée de l'évolution temporelle de la probabilité de présence.

#### 4.2.1.4 Mise en oeuvre

- Initialisation

La mise en oeuvre de la simulation passe par l'échantillonnage du potentiel. Le changement

de masse effective entre 2 matériaux est pris en compte. Aux interfaces on affectera pour le potentiel et la masse effective les moyennes des valeurs dans les 2 régions contiguës.

Le paquet d'ondes est initialisé avec un vecteur d'onde central  $K_0$  correspondant à une énergie proche de celle du 1er niveau quasi-lié. Le spectre d'énergie du paquet d'ondes  $\sigma(E)$  comparé à l'élargissement  $\Gamma$  du niveau quasi-lié, peut présenter 2 cas de figure.

Le 1er cas, qui correspond à  $\sigma(E) \gg \Gamma$ , est obtenu pour des barrières épaisses découplant fortement le niveau quantique du continuum.

Le 2nd cas, relatif à  $\sigma(E) < \Gamma$ , est obtenu pour des barrières de faible largeur. Pour ces 2 situations on s'assurera que le spectre d'énergie ne comporte pas de composante permettant d'entrer en résonance par le 2eme niveau, ni de composantes correspondant à des valeurs de  $K$  négatives.

Cela correspond typiquement à un  $\sigma_z$  entre 100 et 500 Å.

La stabilité de la méthode est vérifiée par la conservation de l'intégrale de la probabilité de présence. Elle est assurée pour  $dz = 1$  Å,  $dt = 5.10^{-16}$  s. Nous avons retenu ces valeurs pour l'ensemble des simulations.

- Charges adaptée numérique

Lors du calcul de l'évolution du paquet d'ondes, celui-ci subit sur chaque extrémité du tableau numérique une réflexion totale, comme si il butait sur une barrière de hauteur infinie. Cet artefact doit être éliminé car il provoque l'apparition d'une onde stationnaire indésirable. Pour cela, deux zones de 600 Å, situées à chaque extrémité de tableau, sont réservées à l'absorbption de l'onde s'éloignant de la double barrière.

On peut comparer ces zones absorbantes à des charges adaptées. Après chaque itération, l'atténuation de l'onde est réalisée par multiplication des parties réelle et imaginaire de la fonction d'onde par la fonction  $g(Z)$  lentement variable entre les valeurs limites 1 et 0.

Une fonction  $g$  convenable est donnée par :

$$g(z) = \frac{1}{1 + \exp\left[\frac{(Z - Z_c)}{40\text{Å}}\right]} \quad (4-19)$$

avec  $Z_c$  positionné à 300 Å de l'extrémité du tableau. On évite ainsi de devoir recourir à une extension de l'espace représenté, ce qui augmenterait de façon prohibitive le temps de calcul.

## 4.2.2 Résultats

### 4.2.2.1 Illustration des mécanismes mis en jeu

La figure 4-9 illustre les mécanismes mis en jeu lorsqu'un paquet d'ondes gaussien interagit avec une double barrière  $\text{Al}_3\text{Ga}_7\text{As}$  30 Å/ $\text{GaAs}$  50 Å/ $\text{Al}_3\text{Ga}_7\text{As}$  30 Å. Le choix de barrières

# WAVE-PACKET INTERACTING

## WITH A DOUBLE BARRIER

$$\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As DBH} \quad L_B = 30 \text{ \AA} \quad L_W = 50 \text{ \AA}$$

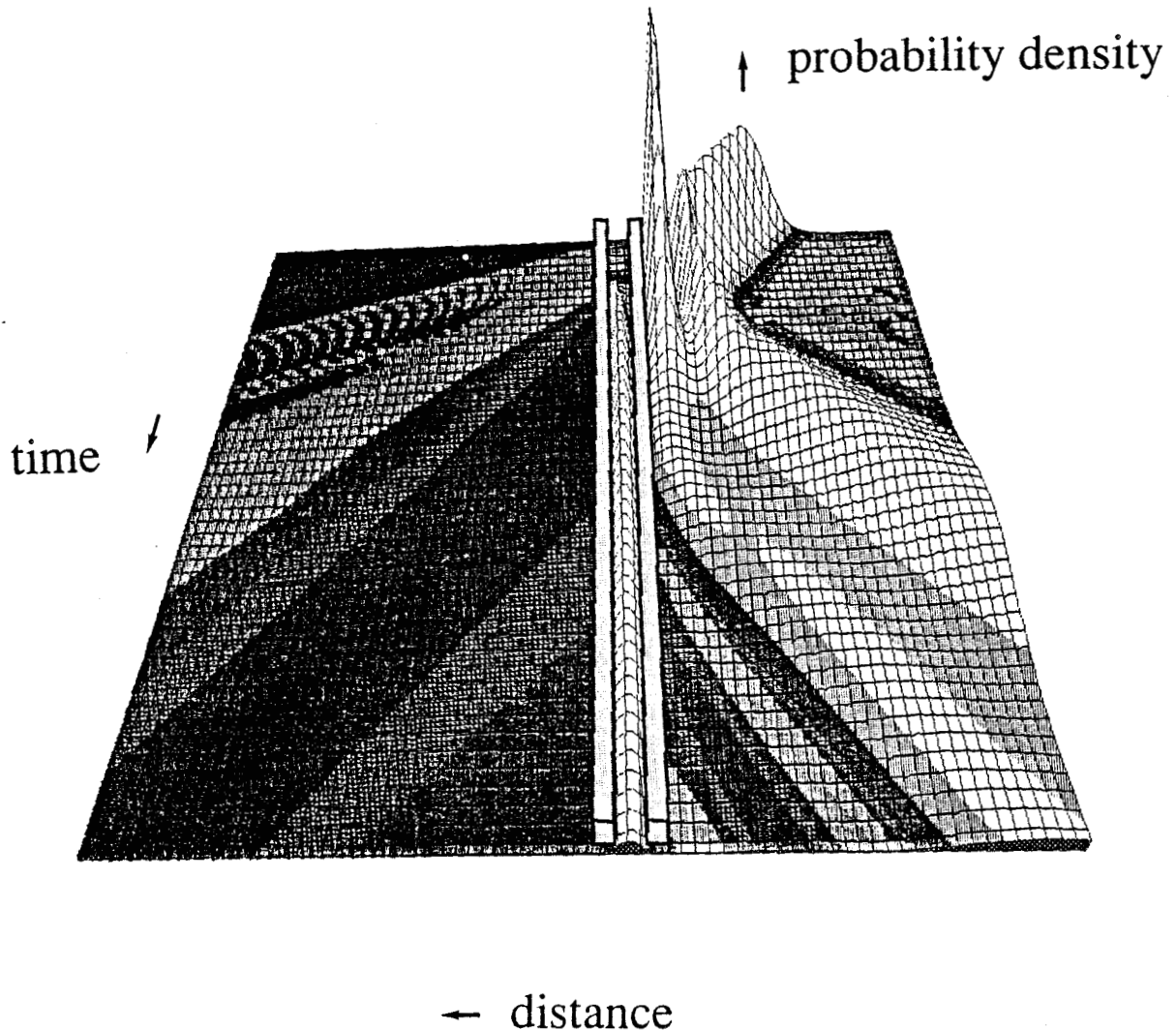


Fig. 4.9. Visualisation tridimensionnelle de l'interaction d'un paquet d'ondes gaussien, incident de la droite de la figure, avec une double barrière Ga Al As / Ga As. L'axe des temps est dirigé vers le lecteur. Largeur du puits : 50 Å. Largeur des barrières : 30 Å. Hauteur des barrières :  $\Delta V = 230$  meV. Masse effective des électrons :  $m = 0.067 m_e$  dans le puits,  $m = 0.092 m_e$  dans les barrières. Le paquet d'ondes a un écart-type initial  $\sigma = 120$  Å. La durée totale de la simulation est de 250 fs.

relativement minces permet d'obtenir des amplitudes de la probabilité de présence représentables à la même échelle dans l'émetteur et dans le puits.

L'écart type du paquet d'ondes est initialement de  $120 \text{ \AA}$ , l'énergie moyenne est de  $80 \text{ meV}$  alors que l'énergie résonante est de  $73 \text{ meV}$ .

Sur la représentation espace-temps de la figure 4-9, l'axe des temps est dirigé vers le lecteur. Cette disposition permet l'observation

- de fortes interférences dans la zone d'émetteur.  
Elles sont dues à la superposition des ondes progressives et des ondes ayant déjà subi une réflexion par la structure double barrière [19]. En fait cette interaction des ondes avec l'hétérostructure se réalise également à l'intérieur de la 1<sup>ère</sup> barrière, ce dernier point étant masqué sur la figure par la matérialisation de la double barrière.
- la majeure partie du paquet d'ondes est réfléchi en 2 paquets distincts qui correspondent aux composantes fréquentielles d'énergie supérieure et inférieure à l'énergie du niveau fondamental. En d'autres termes la double barrière agit comme un filtre passe-bande qui rejette les composantes hautes et basses du spectre. Les 2 paquets s'éloignent de la double barrière avec des vitesses moyennes différentes comme on peut le constater sur la figure au vu des trajectoires.
- Enfin on peut mettre en évidence le piégeage des porteurs dans le puits, ainsi que la propagation des porteurs transmis dans le collecteur.  
Le phénomène de piégeage et de dépeuplement du puits est analysé plus finement sur la figure 4-10. Ici l'espace et le temps sont inversés. Nous avons également omis de matérialiser les barrières. On constate que l'établissement d'une charge maximum ne se fait pas de façon instantanée. Par ailleurs on observe que la décroissance de la charge se fait via les barrières collecteur et émetteur.

#### 4.2.2.2 Temps caractéristiques

Afin d'accéder aux différents temps caractéristiques d'une telle simulation, la probabilité de présence intégrée sur la largeur du puits est calculée à chaque itération. la figure 4-11 est obtenue dans le cas d'une double barrière  $L_B = 50 \text{ \AA}$ . Par ailleurs l'écart-type du paquet d'ondes initial est ici de  $550 \text{ \AA}$ . 3 phases successives peuvent être distinguées :

build up ( $\tau_b$ ) and decay ( $\tau_d$ ) in the well

$\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$  DBH  $L_B = 30\text{\AA}, L_W = 50\text{\AA}$

$\varepsilon_0 = 80 \text{ meV}$

$\sigma_0 = 120 \text{\AA}$

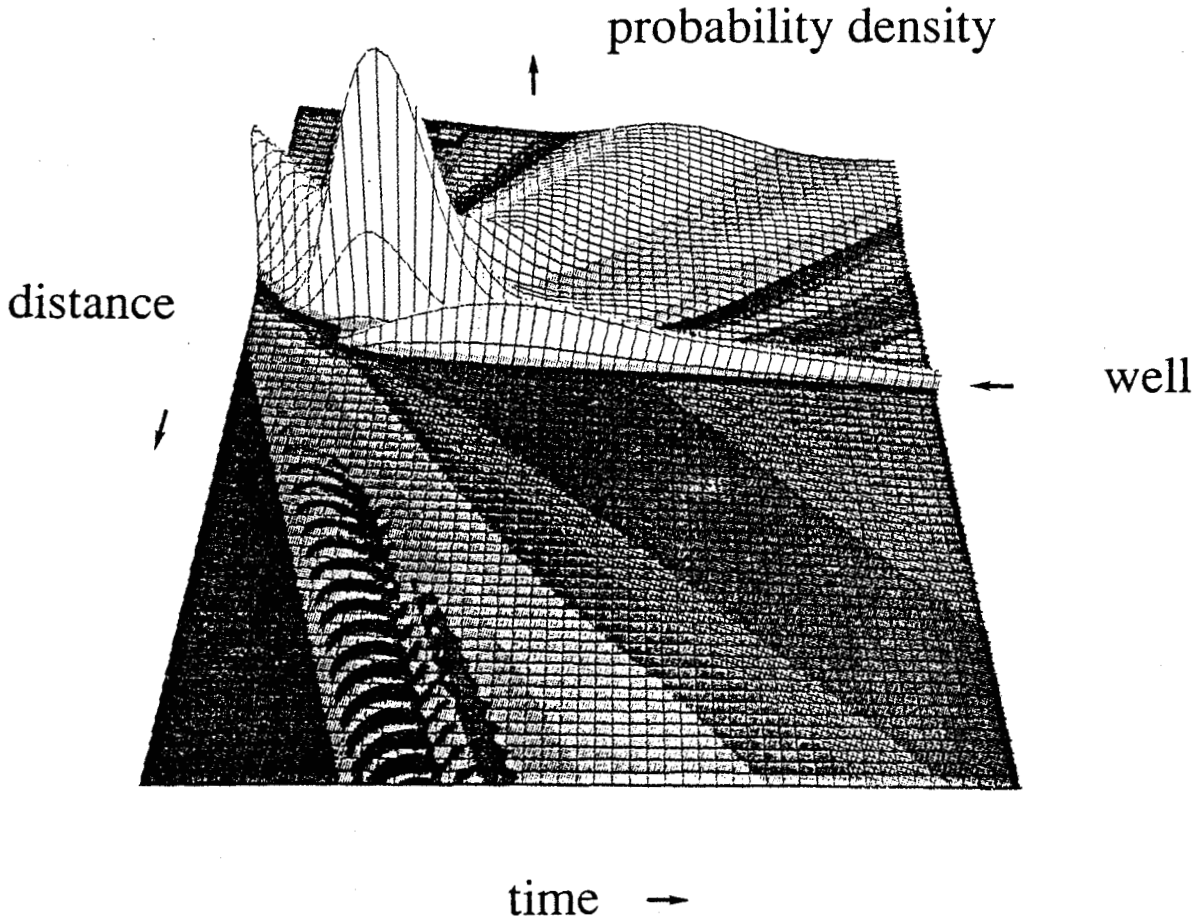


Fig. 4.10. Autre représentation de la même simulation que la fig.4.9.

L'axe des temps est dirigé vers la droite, le paquet d'ondes incident se rapproche du lecteur.  
Les barrières ne sont pas matérialisées afin de visualiser l'évolution de la charge piégée.



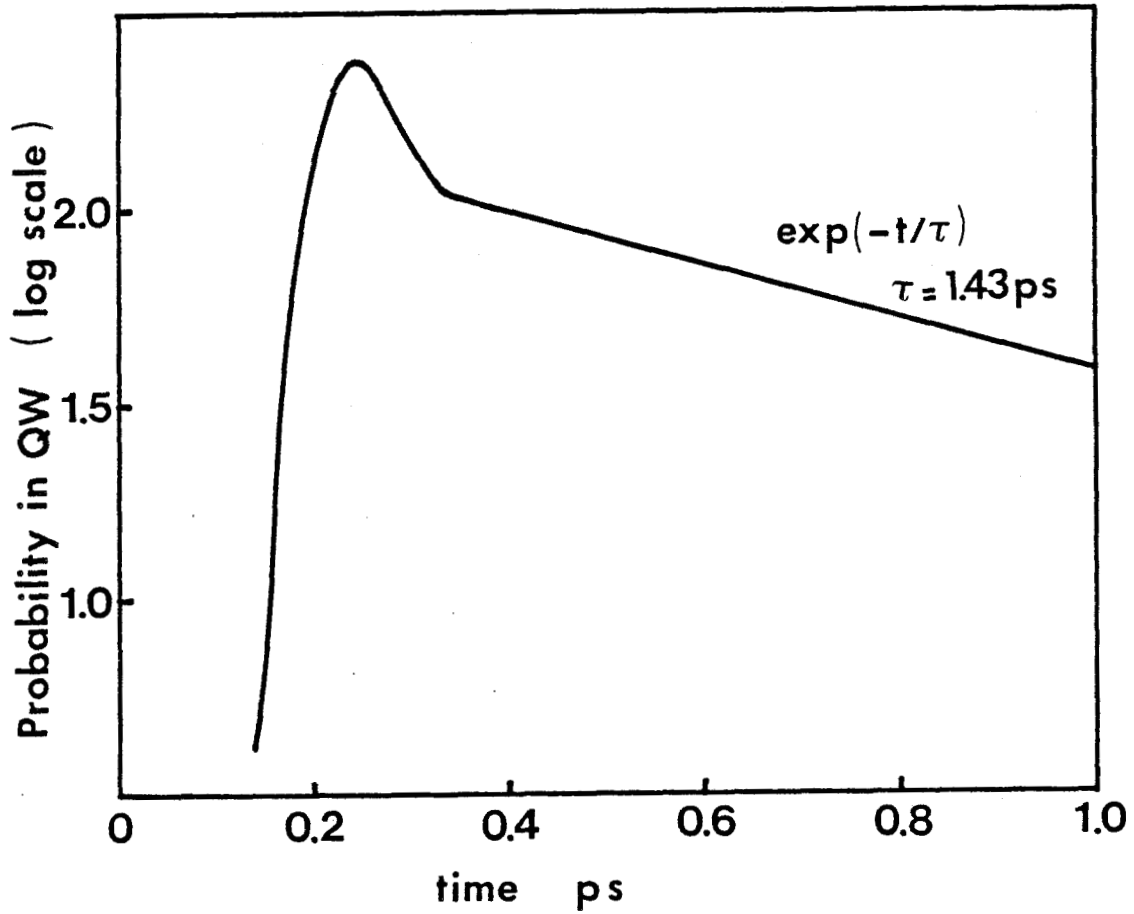


Fig. 4.11. Evolution temporelle de la charge piégée, intégrée à l'intérieur du puits d'une D B Ga Al As / Ga As.  
 Largeur du puits : 50 Å. Largeur des barrières : 50 Å.  
 Hauteur des barrières :  $\Delta V = 230$  meV  
 Masse effective des électrons :  $m = 0.067 m_e$  dans le puits,  $m = 0.092 m_e$  dans les barrières.  
 Le paquet d'ondes a un écart-type initial  $\sigma = 550$  Å.

- Remplissage du puits : la probabilité de présence dans le puits croît et est maximale en  $t = t_1$ . Ce temps correspond pratiquement à la durée qu'il aurait fallu au maximum du paquet d'ondes pour se déplacer jusqu'à l'emplacement du puits s'il n'y avait pas eu de barrière.
- Décroissance irrégulière de la charge piégée, entre les temps  $t_1$  et  $t_2$ . Une visualisation dynamique de  $|\varphi|^2$  durant cette phase permet de mettre en évidence une oscillation sur quelques Å du maximum du paquet d'ondes piégé dans le puits, avant stabilisation. La durée de ces phénomènes est fortement dépendante des conditions initiales ( $K_0, \sigma_Z$ ).
- Décroissance exponentielle de la probabilité de présence, correspondant à la fuite des porteurs au travers des barrières. La valeur du temps caractéristique de décroissance  $\tau$  ainsi déterminée est insensible aux conditions initiales. Ce temps coïncide avec la durée de vie de l'état fondamental dans une marge d'erreur de 15 %, pour les différentes structures étudiées. Pour le cas représenté sur la figure 4-11, la modélisation dynamique fournit  $\tau = 1.43$  ps alors que la durée de vie déduite de la largeur du pic de résonance est de 1.6 ps.

Ce dernier résultat est en accord avec ceux publiés par Collins et Guo [16] [10]. Néanmoins des écarts importants sont observés en ce qui concerne les valeurs des temps d'établissement  $\tau_b$  calculés numériquement. Ainsi si l'on s'en réfère aux résultats publiés dans la référence [10], les valeurs de  $\tau_b$  peuvent atteindre 0.5 ps pour des conditions de simulation identiques aux nôtres ( $\sigma_0 = 550$  Å)

#### 4.2.2.3 Probabilité transmise

Pour les simulations effectuées, où l'étalement initial du paquet d'ondes est supérieur à la largeur du puits, la fraction de la charge transmise apparaît dans la région collecteur sous la forme d'une courbe en cloche très déformée par rapport à la gaussienne initiale. L'étalement de cette courbe peut être comparé à  $1/\Delta K$ , où  $\Delta K$  est la largeur à mi-hauteur du pic de transmission du niveau fondamental, exprimée en nombre d'onde.

La principale nouveauté introduite par la modélisation dépendante du temps est que la probabilité de présence n'est pas transmise instantanément, ni même en un temps fini. Elle converge vers sa valeur finale lorsque  $t \rightarrow \infty$ .

La probabilité de présence  $n(t)$  intégrée dans la région collecteur, est trouvée croissante suivant une loi du type :

$$n(t) = T_{\text{paquet}} \mathcal{N} \left( 1 - \exp \left[ (t^* - t) / \tau \right] \right) \quad (4-20)$$

où -  $T_{\text{paquet}}$  est le taux de transmission global relatif au paquet d'ondes initial, résultant de l'application d'un taux de transmission propre à chaque composante fréquentielle

-  $\tau$  est le temps caractéristique de décroissance de  $|\varphi|^2$  dans le puits

-  $t^*$  est le temps correspondant au déplacement du maximum du paquet d'ondes de son emplacement initial jusqu'à l'interface double barrière/collecteur, déterminé dans le cas où il n'y aurait pas de barrière.

On peut donc considérer que l'on ne détecte pas de retard imputable à la traversée de la double barrière.

Notons que lorsque le puits de potentiel se trouve être beaucoup plus large que l'étalement du paquet d'ondes, la probabilité de présence transmise apparaît sous forme de pulses, séparés par des intervalles de temps correspondant à un aller-retour du paquet d'ondes dans le puits.

## BIBLIOGRAPHIE

### CHAPITRE 4

- [1]: E.R. BROWN, W.D. GOODHUE, T.C.L.G SOLLNER  
J. Appl. Phys. 64, 1988 p 1519
- [2]: E.R. BROWN  
Hot electron conference, Phénix. USA, 1989
- [3]: T.C.L.G SOLLNER, W.D. GOODHUE, P.E. TANNENWALD, C.D. PARKER, D.D. PECK  
Appl. Phys. Lett 43, 1983 p 588
- [4]: B. VINTER  
Journée d'Etudes sur l'Effet Tunnel Resonnant  
Université de Lille I, octobre 1988
- [5]: C. COHEN TANNOUJJI, B. DIU, F. LALOE  
Mécanique quantique tome 1, Collection Enseignement des Sciences, 16, Hermann
- [6]: J. SHAH  
IEEE Quantum Electronics 24, 1988 p 276
- [7]: E. MENDEZ, W. WANG, E. CALLEJA, C. GONCALVES DA SILVA  
Apply. Phys. Lett. 50 p 1263
- [8]: M. TSUCHIYA, T. MATSUSUE, H. SAKAKI  
Phys. Rev. Lett 59, 1987 p 2356
- [9]: T.B. NORRIS, X.J. SONG, W.J. SCHAFF, L.F. EASTMANN, G. WICKS, G.A. MOUROU  
Appl. Phys. Lett. 54, 1989 p 60
- [10]: H. GUO, K. DIFF, G. NEOFOTISTOS, J.D. GUNTON  
Appl. Phys. Lett 53, 1988 p 131
- [11]: M.K. JACKSON, M.B. JOHNSON, D.H. CHOW, T.C. Mc GILL, C.W. NIEH  
Appl. Phys. Lett. 54, 1989 p 552
- [12]: H.C. LIU  
Superlattices and Microstructures, 3, 1987 p 379
- [13]: N. VODJDANI, F. CHEVOIR, D. THOMAS, D. COTE, P. BOIS, E. COSTARD, S. DELAITRE  
Appl. Phys. Lett, 1989, 55 p 1528
- [14]: D. THOMAS  
Thèse de doctorat de l'Université de Paris 6, 1989
- [15]: L. DE SAINT POL, D. LIPPENS, F. CLEROT, B. LAMBERT, B. DEVEAUD, B. SERMAGE  
"16th Ga As and relative compounds conference", Karuizawa, Japon 1989  
à paraître dans Institute of Physics Conference Series

- [16]: S. COLLINS, D. LOWE, J.R. BARKER  
J. Phys. C. Solid State phys. 20, 1987, p 6233
- [17]: A. GOLDBERG, H.M. SCHEY, J.L. SCHWARTZ  
American journal of physics, 35, 1967, p 177
- [18]: R. KOSLOFF  
J. Phys. Chem., 92, 1988 p 2087
- [19]: A.P. JAUHO, M.M. NIETO  
Superlattices and microstructures, 2, 1986, p 407

## **CHAPITRE 5**

# **Chapitre 5**

## **Application à d'autres structures**

Les outils numériques que nous avons développés pour l'étude de la double barrière ont été conçus de manière à pouvoir être facilement adaptés au calcul des coefficients de transmission et de réflexion de structures différentes de la double barrière.

Ainsi les algorithmes mis au point se sont révélés suffisamment stables pour que l'on puisse augmenter le nombre de discontinuités vues par les porteurs de charges. Il devrait être possible dans les applications ultérieures, d'augmenter la complexité des hétérostructures pour lesquelles l'on calcule la transmission.

La détermination des caractéristiques de conduction par effet tunnel est alors directe en réutilisant les procédures de calcul de courant définies au chapitre 1.

Nous allons dans ce chapitre nous intéresser plus particulièrement à 2 structures dérivées de la double barrière : La triple barrière et la double barrière incluant une perturbation du potentiel dans la région du puits.

### **5.1 La triple barrière**

L'étude de la triple barrière apparaît naturellement comme un premier pas vers la modélisation de structures répétitives plus complexes telles que les super-réseaux.

#### **5.1.1 Méthode de calcul de la transmission en traitement cohérent**

la figure 5-1 schématise une triple barrière en découpant l'espace en 7 régions. Les coefficients de transmission et de réflexion d'une telle structure peuvent être obtenus numériquement

- soit grâce à une méthode de matrices de transfert, (voir chapitre 1)
- soit grâce au calcul de la fonction d'onde par la résolution de l'équation de Schrödinger au moyen d'une procédure de Runge Kutta (voir chapitre 3)

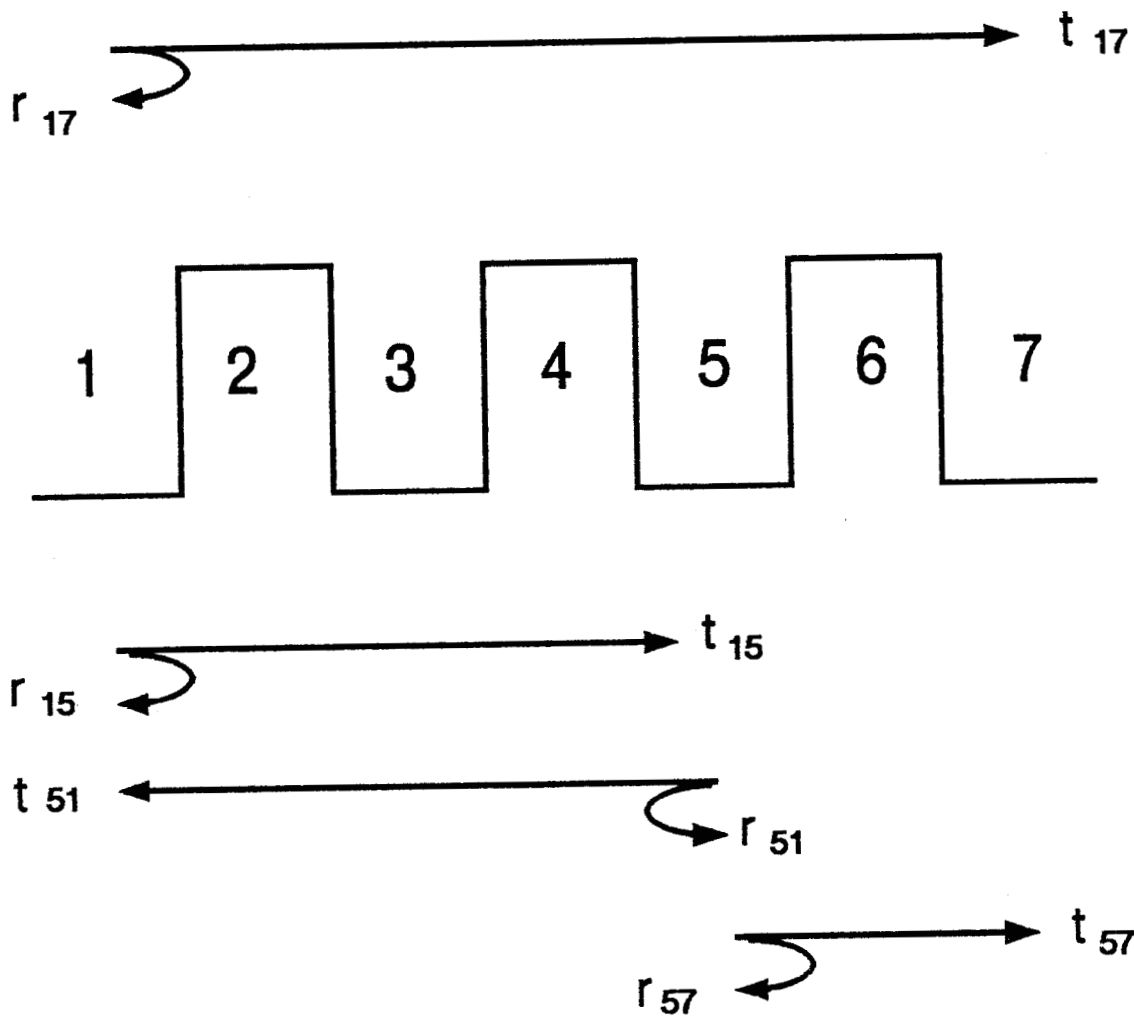


Fig. 5.1 : Obtention des coefficients de transmission et de réflexion d'une triple barrière, considérée comme l'association d'une double Barrière ( régions 1 à 5 ) et d'une troisième barrière ( régions 5 à 7 ).



- soit grâce à la généralisation du procédé de calcul mis en oeuvre pour la double barrière (voir chapitre 3).

Il suffit pour cette dernière approche de considérer la structure résultant de l'association :

- d'une part de l'ensemble formé par les 2 premières barrières (régions 1 à 5), dont les coefficients de transmission et de réflexion  $t_{15}$ ,  $t_{51}$ ,  $r_{15}$ ,  $r_{51}$  sont supposés connus
- d'autre part de la 3ème barrière (régions 5 à 7), de coefficients  $t_{57}$ ,  $r_{57}$ .

Ces coefficients en amplitude de la fonction d'onde sont tous exprimés dans un plan de référence unique.

Les coefficients de transmission et de réflexion en amplitude de la triple barrière sont alors donnés par

$$t_{17} = \frac{t_{15}t_{57}}{1 - r_{57}r_{51}} \quad (5-1)$$

$$r_{17} = r_{15} + \frac{t_{15}r_{57}t_{51}}{1 - r_{57}r_{51}} \quad (5-2)$$

Les coefficients en puissance sont obtenus grâce à

$$\begin{aligned} T_{17} &= t_{17}t_{17}^* \frac{K_7 m_1^*}{K_1 m_7^*} \\ R_{17} &= r_{17}r_{17}^* \end{aligned} \quad (5-3)$$

Il est aisé de vérifier, en développant les coefficients relatifs aux 2 premières barrières, que l'on obtient une formulation équivalente en considérant d'une part la première barrière prise isolément et d'autre part la structure formée par les 2ème et 3ème barrières.

La généralisation de ce procédé de groupement des accidents de potentiel en sous ensembles permet d'étendre cette méthode au cas des super-réseaux.

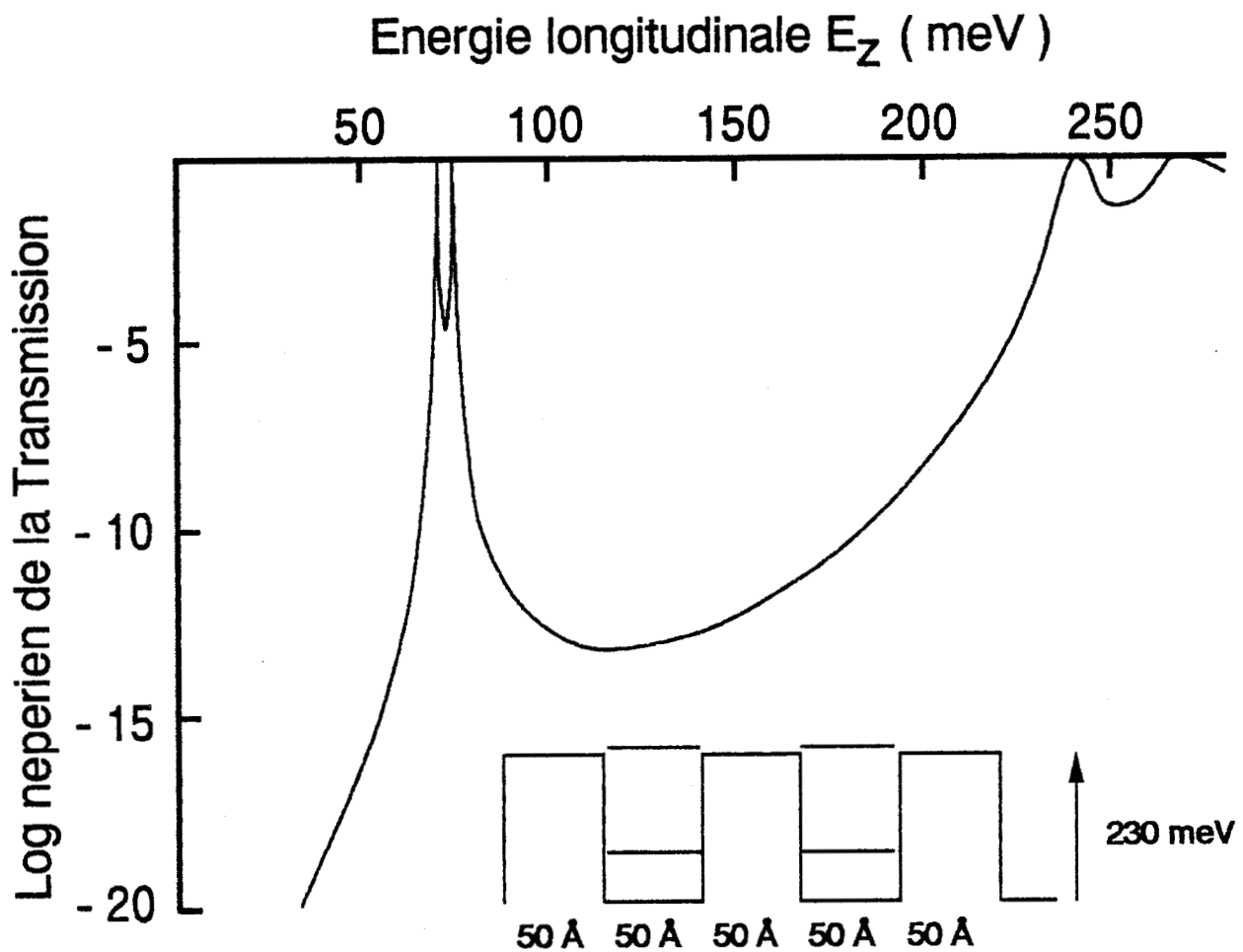


Fig. 5.2 : Fonction de transmission  $T = f(E_z)$  d'une triple barrière Ga Al As ( $x=0.3$ )/Ga As à l'équilibre.

Largeur des puits : 50 Å. Largeur des barrières : 50 Å. Hauteur des barrières :  $\Delta V = 230$  meV  
 Masse effective des électrons :  $m = 0.067 m_e$  dans les puits,  $m = 0.092 m_e$  dans les barrières.

$$N_C = \left[ T_{35}N_A + (T_{35} + T_{31})N_B \right] \frac{T_{57}}{T_{13}T_{35} + T_{35}T_{57} + T_{57}T_{13}} \quad (5-7)$$

La transmission totale de la triple barrière vaut alors :

$$T_{17tot} = T_{17coh} + N_C \quad (5-8)$$

### 5.1.3 Fonction de transmission

Considérons une triple barrière Ga Al As ( $x = 0.3$  ;  $L_{B1} = L_{B2} = L_{B3} = 50 \text{ \AA}$ )/Ga As ( $L_{W1} = L_{W2} = 50 \text{ \AA}$ ).

La figure 5-2 montre l'évolution du logarithme népérien de la transmission en fonction de l'énergie des porteurs incidents, à l'équilibre. On constate que chaque pic de transmission se scinde en 2 pics très rapprochés pour la géométrie choisie ici [1]. Ce dédoublement peut être interprété par une similitude des fonctions d'onde du niveau fondamental et du 1er niveau excité d'un puits élargi englobant l'ensemble des 2 puits. La perturbation centrale, en rejetant la fonction d'onde du niveau fondamental vers les interfaces extérieures, permet alors d'élever l'énergie de ce niveau à une valeur proche de celle du 1er niveau excité. Sur la base de cette hypothèse, le dédoublement observé à  $\epsilon = 260 \text{ meV}$  correspondrait aux 3ème et 4ème niveaux du puits élargi.

Sur la figure 5-3, nous avons reporté les variations de  $\ln(T)$  en fonction de  $E_z$  pour une tension de polarisation de  $V = 0.08 \text{ volts}$ . Les pics de transmission sont ici bien résolus, avec un écart d'énergie qui est de l'ordre de  $32 \text{ meV}$  pour les 2 premiers pics de résonance. Cet écart correspond à la différence de potentiel entre les milieux des 2 puits. L'application d'une tension a pour conséquence en effet de relocaliser les fonctions d'onde dans chacun des 2 puits constituant la triple barrière. En faisant varier l'énergie des porteurs incidents on révèle les différents états quasi-liés des puits élémentaires.

Il est important de noter que les valeurs des transmissions résonantes calculées pour la valeur  $V = 0.08 \text{ volts}$  sont nettement diminuées par rapport à la valeur en bande plate  $T_{res} = 1$ . Ceci

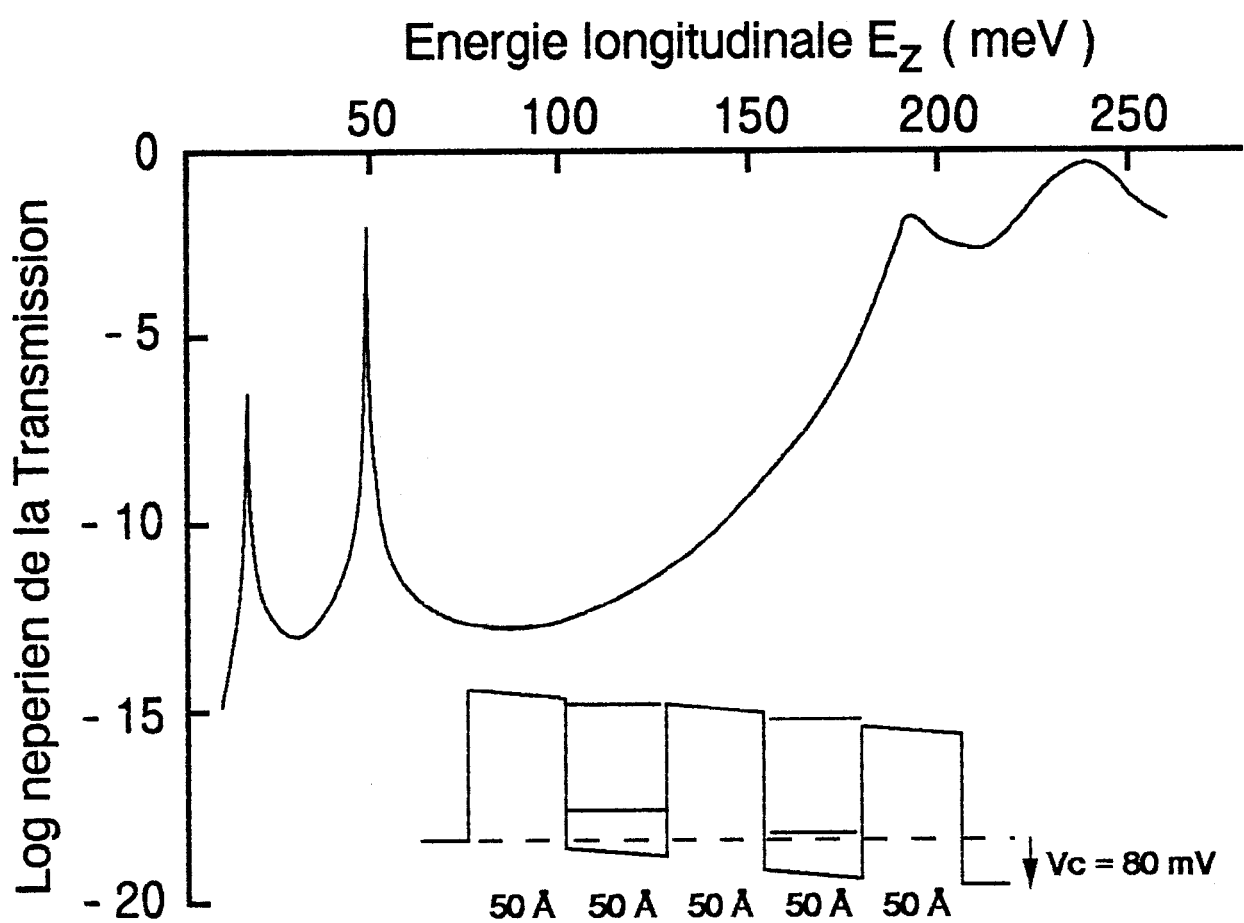


Fig. 5.3 : Fonction de transmission  $T = f(E_z)$  pour la même triple barrière que la fig. 5.2, sous une tension de polarisation de 80 mV.

s'explique par le fait que la transmission résonante n'affectant qu'un seul puits, le transfert de charges au travers de l'ensemble barrière-puits adjacent est non résonant.

Lorsque sous l'action de la tension appliquée, un niveau d'ordre  $n$  du 1er puits s'aligne avec le niveau d'ordre supérieur du puits adjacent, le maximum de la transmission retrouve des valeurs importantes [2]-[3]. Sous ces conditions le couplage entre les 2 puits redevient important et la probabilité de présence des électrons se répartit sur l'ensemble de la zone active.

Ces conclusions ne sont pas affectées par la prise en compte d'une perte de cohérence partielle du transport par effet tunnel. Nous avons vu en effet au chapitre 3 que l'introduction du paramètre  $\gamma$  augmente la largeur à mi-hauteur du pic de transmission en laissant inchangées les valeurs d'énergie pour lesquelles on observe les maximums. Cependant lorsque cet élargissement des pics par perte de cohérence devient supérieur à l'écart d'énergie observé entre 2 niveaux, les 2 pics attendus dans  $T(E_z)$  ne peuvent plus être résolus. C'est pourquoi il semble préférable de rechercher l'emplacement exact des niveaux dans l'hypothèse d'une transmission entièrement cohérente.

La densité de courant traversant une triple barrière est obtenue de la même façon que dans le cas de la double barrière, en réalisant l'intégrale sur la variable  $E_z$  de la fonction de transmission pondérée par la supply function.

La principale difficulté numérique est ici la possibilité de la présence de plusieurs pics de résonance de très faibles largeurs dans le domaine effectif d'intégration. Dans l'hypothèse d'une transmission cohérente et pour des barrières relativement larges chaque pic nécessite une intégration numérique à pas variable. Cependant lorsque l'on inclut au modèle une part de transport séquentiel non cohérent, une intégration à pas constant devient envisageable du fait de l'élargissement de l'ensemble des pics.

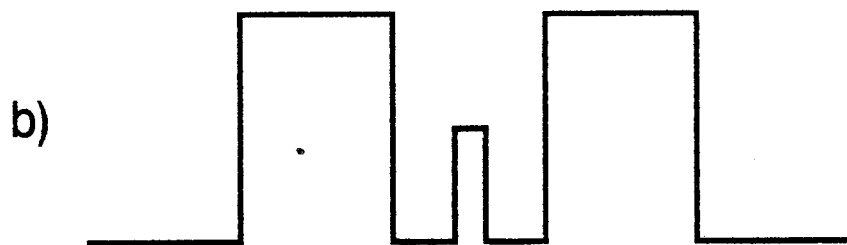
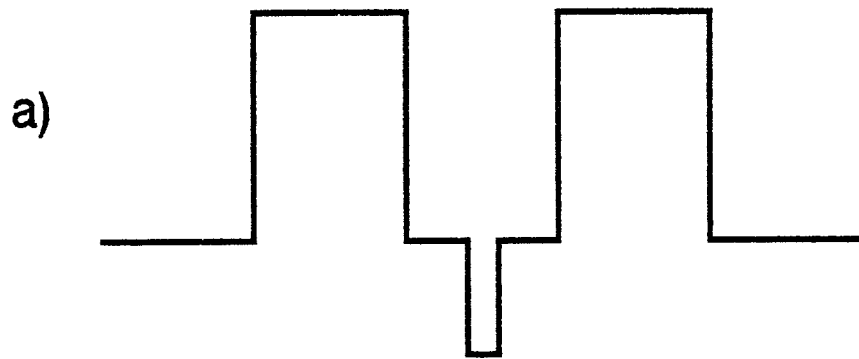


Fig. 5.4 : Double barrière incluant une perturbation dans le puits :  
a) Perturbation de type puits secondaire.  
b) Perturbation de type barrière.

## 5.2 Double barrière incluant une perturbation dans le puits

Nous avons vu au chapitre 2 que pour obtenir un contraste en courant  $J_p / J_v$  important, il est nécessaire que la conduction par le 2ème niveau se manifeste pour des valeurs de tension élevées. En pratique il faut donc que l'écart d'énergie entre les 2 premiers niveaux résonants soit important.

Pour une structure Double Barrière classique, cet espacement entre les niveaux quasi-liés est essentiellement déterminé par la largeur du puits.

Nous allons montrer maintenant que les algorithmes mis au point dans ce travail peuvent rendre compte de la présence d'un potentiel perturbateur dans le puits. Nous verrons en particulier qu'une structure à puits enterré peut accroître l'écart énergétique entre  $E_1$  et  $E_2$ .

### 5.2.1 Présentation des structures

#### 5.2.1.1 Classification

2 types de structures double barrière modifiée ont été proposées. Dans chaque cas une couche épitaxiée de largeur inférieure à celle des barrières est insérée au milieu du puits. La position du bas de la bande de conduction de cette nouvelle zone peut être :

- soit inférieure à celle du puits, créant ainsi un puits secondaire [4] (fig. 5-4a)
- Soit supérieure à celle du puits, créant une perturbation du type barrière de potentiel [5]-[6] (fig. 5-4b)

### 5.2.2 Outil numérique

Le dernier exemple correspond à une triple barrière présentant une barrière centrale différente des 2 barrières extrêmes. Elle peut donc être traitée numériquement en utilisant les mêmes programmes que précédemment.

Une perturbation de type puits secondaire peut également être analysée en la considérant comme une barrière de hauteur négative.

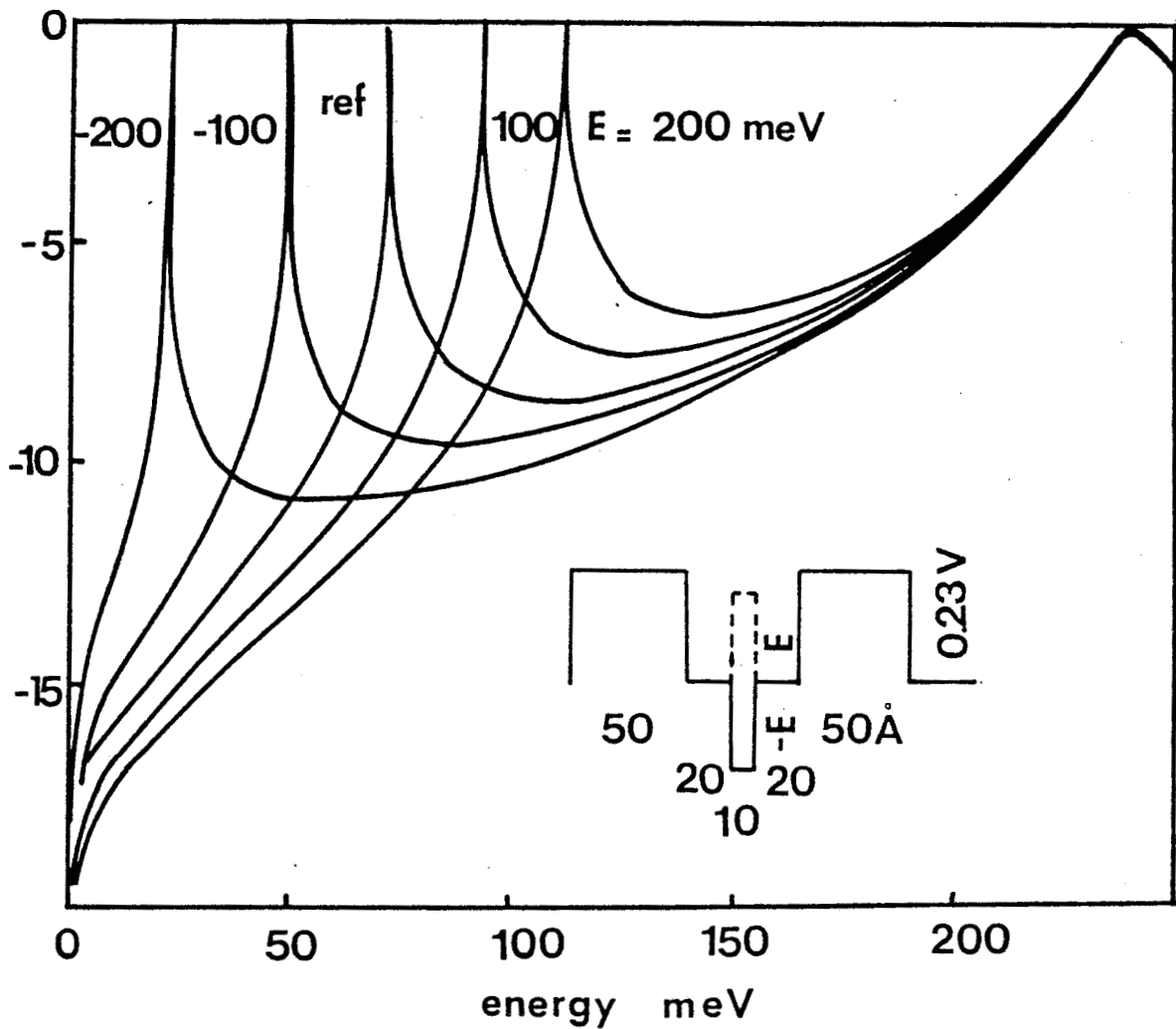


Fig. 5.5 : Fonctions de transmission de doubles barrières symétriques Ga Al As ( $x=0.3$ ) / Ga As à l'équilibre, incluant au centre du puits une perturbation de 10 Å de largeur. Des perturbations d'amplitude  $\Delta V = +200 ; +100 ; 0 ; -100 ; -200$  meV sont prises en compte.  
 Largeur des barrières : 50 Å. Hauteur des barrières :  $\Delta V = 230$  meV.  
 Composition du puits : Ga As 20 Å, perturbation 10 Å, Ga As 20 Å.  
 Masse effective des électrons :  $m = 0.067$  me dans le Ga As,  $m = 0.092$  me dans les barrières,  $m = 0.042$  me dans la perturbation.



La seule modification à apporter à notre outil numérique intervient lorsque l'on introduit un facteur de non cohérence et concerne le mode de répartition des électrons ayant perdu leur information de phase entre émetteur et collecteur. Pour une perturbation qui n'affecte que quelques couches atomiques, la répartition des probabilités de présence est peu différente de celle observée dans une structure double barrière conventionnelle. La méthode de répartition utilisée dans le calcul du courant de la double barrière semble ici la mieux adaptée.

Notons qu'alors la relation 3-25 liant  $\tau_i$  aux paramètres  $\gamma_1$  et  $\gamma_2$  ne peut plus être appliquée car l'espace physique de chacun des 2 puits considérés, de part et d'autre de la perturbation, ne correspond plus à une demi-longueur d'onde à l'énergie du 1er niveau quasi-lié.

### 5.2.3 Influence de l'amplitude de la perturbation sur les énergies des niveaux résonants

La figure 5-5 représente la fonction de transmission à l'équilibre d'une double barrière incluant un potentiel perturbateur dans le puits, pour différentes valeurs tant positives que négatives de l'amplitude  $\Delta V$  de cette perturbation.

La double barrière initiale Ga<sub>0.7</sub>Al<sub>0.3</sub>As 50 Å / GaAs 50 Å / Ga<sub>0.7</sub>Al<sub>0.3</sub>As 50 Å,  $m_{GaAs}^* = 0.067 m_e$ ,  $m_{GaAlAs}^* = 0.092 m_e$  a été modifiée en remplaçant une zone de 10 Å de largeur située au milieu du puits par une zone de même largeur et de potentiel constant. La masse effective sur cette zone a été fixée à  $m^* = 0.042 m_e$ , correspondant à une perturbation réalisée par une couche épitaxiée de GaInAs. Nous garderons cette même valeur de masse effective indépendamment de la valeur donnée au potentiel perturbateur, ce qui permettra de ne prendre en compte que les effets résultants de la perturbation de potentiel

On constate que :

- La présence de la perturbation provoque un décalage de l'énergie du pic de résonance relatif au 1er niveau quasi-lié. Ce niveau est translaté vers les énergies supérieures à sa position non perturbée (cas où  $\Delta V = 0$ ) lorsque la structure est du type triple barrière. Au contraire

lorsque la perturbation forme un puits enterré le 1er niveau est décalé vers des énergies plus basses.

- La position du 2ème niveau est insensible à la présence de la perturbation quel que soit son amplitude.

Cette différence de comportements entre les 2 niveaux peut s'expliquer physiquement par le fait qu'à l'équilibre la probabilité de présence associée au 1er niveau présente un maximum au milieu du puits, donc à l'emplacement de la perturbation. Au contraire la probabilité de présence calculée pour l'énergie du 2ème niveau présente un minimum au même endroit. Le 1er niveau subit donc fortement l'influence de la perturbation, tandis que le 2ème niveau n'en est pas affecté.

On vérifie sur un exemple de puits contenant des niveaux d'ordres supérieurs que les niveaux impairs subissent le même type de variations que le niveau fondamental, tandis que les niveaux pairs restent inchangés.

Il est à noter que la possibilité d'avoir un puits secondaire vide de tout niveau n'est pas en contradiction avec l'assertion du chapitre 1 spécifiant qu'un puits isolé contient au moins un niveau. En effet le puits créé ici par la perturbation ne peut être considéré comme isolé à cause de la proximité des 2 barrières.

## 5.2.4 Réalisations expérimentales

Expérimentalement des structures de type puits enterré ont été réalisées par Broekaert [4]. Les barrières sont en Al As, le puits enterré est en In As, le puits principal en In Ga As. Les auteurs ont reporté un contraste en courant de 30 à température ambiante, ce qui constitue la meilleure performance mondiale à ce jour. Ces très bonnes performances sont attribuables à l'écart énergétique très important entre les 2 premiers niveaux, de l'ordre de plusieurs centaines de  $meV$ . Par ailleurs il est à noter que l'utilisation de barrières Al As épitaxiées sur du Ga In As, adapté sur In P, introduit des discontinuités dans la bande de conduction très importantes interdisant toute conduction de type thermoionique même à température ambiante.

Par ailleurs des structures à 2 puits quantiques couplés par une barrière de potentiel de très faible largeur, ont été fabriquées dans le Système Ga Al As.

Ainsi dans le travail publié par Zohta [5], une perturbation de type AlAs d'épaisseur 10 Å est insérée dans une hétérostructure double barrière conventionnelle avec des barrières en Al Ga As. Le relevé des caractéristiques de conduction permet de mettre en évidence 2 pics rapprochés dans les variations  $I(V)$ . Ceci est en accord avec le rapprochement des 2 premiers niveaux, observé au paragraphe précédent.

### 5.3 Autres structures

Les exemples présentés ci-dessus ne constituent pas une liste exhaustive des applications potentielles des algorithmes mis au point. En particulier il devrait être possible d'évaluer les caractéristiques de transmission et de conduction des diodes constituées de 2 barrières de potentiel juxtaposées de hauteurs différentes [7].

En l'absence de polarisation, il n'y a pas de puits de potentiel. Ce n'est que sous l'action d'une tension de polarisation (barrière la plus élevée côté collecteur) qu'il se forme un puits triangulaire. Cette situation d'un puits fortement évolutif avec la tension peut être traitée par le formalisme de Runge Kutta décrit dans le chapitre 3. Il est évident qu'un potentiel trop simplifié de type Marches Plates ne saurait décrire une telle situation expérimentale.

Le cas du puits parabolique constitue un autre sujet d'études très intéressant. Dans ce cas en effet les niveaux quantifiés sont équidistants, ce qui peut se révéler très intéressant dans le cas d'applications où l'on tire parti de multiples résonances [8][9].

La forme quadratique du puits complique notablement le traitement numérique par opposition aux situations où les variations linéaires de potentiel permettent une résolution par les fonctions d'Airy. L'utilisation du formalisme Runge Kutta par sa généralité devrait permettre de traiter ce problème sans difficulté majeure.

## BIBLIOGRAPHIE

### CHAPITRE 5

- [1] R. TSU, L. ESAKI  
Appl. Phys. Lett. 22, 1973, p 562
- [2] T. NAKAGAWA, T. FUJITA., Y. MATSUMOTO, T. KOJIMA, K. OHTA  
Jap. J. of Applied Physics, 26. 1987 p L 980
- [3] C.J. SUMMERS, K.F. BRENNAN, A. TORABI, H.M. HARRIS  
Appl. Phys. Lett. 52, 1988 p 132
- [4] T.P.E. BROEKAERT, W. LEE, C.G. FONSTAD  
Appl. Phys. Lett. 53, 1988 p 1545
- [5] Y. ZOHTA, T. NOZU, M. OBARA  
Phys. Rev. B, 39, 1989 p 1375
- [6] H. MIZUTA, T. TANOUE, S. TAKAHASHI  
IEEE Transactions on electron devices, 35, 1988 p 1951
- [7] P.A. SHULZ, C.E.T. GONCALVEZ DA SILVA  
Appl. Phys. Lett. 52 1988, p 960
- [8] S. SEN, F. CAPASSO, A.C. GOSSARD, R.A. SPAH, A.L. HUTCHINSON, S.N.G. CHU  
Appl. Phys. Lett. 51, 1987 p 1428
- [9] S.Y. CHOU, J.S. HARRIS Jr  
Appl. Phys. Lett. 52, 1988, p 1422

**CONCLUSION GENERALE**

## Conclusion

Nous avons dans ce travail élaboré des modèles de calcul des caractéristiques de conduction tunnel dans des hétérostructures principalement double barrière, pour des applications analogiques très hautes fréquences. Les aspects spécifiques des structures étudiées tels que les transparences élevées des barrières de potentiel, l'étalement important de la fonction de distribution en énergie des porteurs dans l'émetteur si l'on vise un fonctionnement à température ambiante, ont été plus particulièrement considérées. Pour traiter ces problèmes nous avons mis au point différents logiciels opérant tant dans le domaine statique que dynamique.

Les logiciels mis au point, de complexité croissante, permettent de rendre compte des mécanismes physiques prépondérants responsables des anomalies de courant.

Le premier formalisme fait appel aux techniques de matrices de transfert qui traduisent la continuité des fonctions d'onde ainsi que de leurs dérivées de part et d'autre d'une discontinuité de potentiel. Le calcul de la transmission est alors effectué par produit de matrices dont les termes complexes sont directement déduits des variations de potentiel, supposé constant par morceaux, et de l'énergie de la particule incidente. Les calculs effectués sur ordinateur de table type COMPAQ 20 MHz sont extrêmement rapides et permettent une première estimation des caractéristiques de conduction, principalement pour de faibles polarisations. Sur cette base, nous avons développé une étude analytique des extrêmes de courant et mis plus particulièrement en évidence le caractère antinomique entre courant pic et contraste de courant.

Pour traiter des modifications de potentiel induites par les réactions de charge d'espace, nous avons développé des logiciels spécifiques traitant de façon autoconsistante l'équation de Schrödinger et l'équation de Poisson. L'équation de Schrödinger pour un potentiel présentant des courbures de bande est ici traitée par la méthode de résolution des équations différentielles de Runge-Kutta. Grâce aux techniques de calcul mises en oeuvre, nous avons pu notamment préciser les processus d'accumulation de charges dans le puits quantique à l'origine du phénomène de bistabilité intrinsèque reporté dans la littérature.

En ce qui concerne la couche d'accumulation d'émetteur, où les mécanismes de relaxation jouent un rôle prépondérant, un traitement classique de type Thomas Fermi a été adopté. Nous avons montré un abaissement très important de la barrière côté émetteur, qui se traduit par une augmentation très importante des valeurs de courant.

Pour prendre en compte la perte de cohérence partielle des porteurs localisés dans le puits, nous nous sommes basés sur le formalisme de Jonson et Grincwajg qui traduit mathématiquement le phénomène d'interférences constructives à la résonance résultant des multiples réflexions sur les barrières. La non cohérence est ici introduite par un paramètre ajustable dont l'incidence principale est d'élargir les pics de résonance de la fonction de transmission. Nous avons montré qu'il est ainsi possible de rendre compte de façon réaliste des caractéristiques expérimentales et de chiffrer la fréquence des perturbations détruisant la cohérence.

Pour rendre compte des caractéristiques temporelles, nous avons enfin développé un logiciel de résolution de l'équation de Schrödinger dépendant du temps permettant de suivre l'évolution de la fonction d'onde en chaque point de la zone active. La stabilité a été obtenue en employant une méthode implicite et les réflexions sur les extrémités de tableau ont été numériquement éliminées.

Comparativement aux précédents programmes de simulation, dont les temps de calcul se chiffrent en minutes, il s'agit ici d'un logiciel relativement lourd dans sa mise en oeuvre et dans son exploitation (plusieurs heures de temps de calcul). Les méthodes numériques se sont révélées particulièrement bien adaptées pour les études de filtrage en énergie et l'évaluation des temps de réponse intrinsèque des diodes tunnel résonant à partir de l'interaction simulée d'un paquet d'ondes gaussien avec la double barrière. Les logiciels mis au point sont loin d'être figés, comme le montrent les premiers exemples d'extension aux cas de la triple barrière et du puits enterré, présentés à la fin de ce travail. Il semble en particulier tout à fait possible de traiter le cas des super réseaux finis et des phénomènes de localisation par champ électrique dans ces structures.

A chacun des apports de modélisation, nous nous sommes efforcés de confronter nos résultats à l'expérience, puis de discuter des améliorations possibles. Ainsi nous avons déterminé les valeurs de

l'énergie du niveau fondamental, à faible durée de vie, à partir de la composante de courant activée thermiquement. Les caractéristiques statiques ont été relevées puis comparées aux résultats de modélisation. Le temps de fuite de la population piégée, mesuré par l'évolution temporelle du signal de photoluminescence de structures à double barrière, a été comparé aux valeurs prédites.

Au terme de ce travail il reste de nombreux points sur lesquels les techniques de description théoriques doivent faire l'objet d'un travail plus approfondi. Pour ne citer que celles qui nous paraissent prépondérantes, il nous semble que la modélisation de la couche d'accumulation d'émetteur doit être améliorée. Le problème est loin d'être trivial si l'on pense que sa formation fait intervenir les processus de diffusion inélastiques qui permettent le peuplement des états de basse énergie et les effets de quantification lorsque les porteurs résidants sont fortement liés. Le traitement des mécanismes de transport par effet tunnel assisté par phonons mérite également un effort accru. Il semble d'ores et déjà qu'ils jouent un rôle important lorsque le niveau quasi lié n'est accessible que sous la condition qu'il y ait émission d'un phonon. L'optimisation de structures présentant de forts contrastes en courant passe par une meilleure compréhension de ces problèmes.

Enfin une meilleure prise en compte des aspects technologiques dans la modélisation est certainement un prolongement important de ce travail. A titre d'exemple des dissymétries substantielles, dans les caractéristiques de conduction en polarisations directe et inverse probablement liées aux conditions de croissance, ont été notées pour des structures symétriques. La part jouée par ailleurs par les fluctuations d'interface dans la dégradation du rapport  $J_{pic} / J_{vallée}$  reste encore à préciser.



**ANNEXES**

# ANNEXE 1

## Méthode d'intégration à pas variable

Le calcul du courant traversant la double barrière est facilité par l'utilisation d'une méthode d'intégration à pas variable.

La fonction  $T(E_z)F(E_z, V_c, \theta)$  qui intervient sous le signe intégral dans l'équation (1-36) présente une allure quasi-lorentzienne lorsque le pic de transmission résonante du 1er niveau quasi-lié se trouve à une énergie  $E_0$  supérieure au bas de la bande de conduction dans l'émetteur.

La méthode utilisée ici permet l'intégration par pas variable d'une fonction  $g$  monotonement croissante puis décroissante selon la variable  $E_z$  sur un intervalle de largeur fixée.

Sur l'intervalle initial  $[E_{\min}, E_{\max}]$ , de largeur  $L$ , la fonction  $g$  est calculée en 4 points :

$$E_{\min}$$

$$E_1 = E_{\min} + Lx$$

$$E_2 = E_{\min} + L(1 - x)$$

$$E_{\max}$$

où  $x < 0.5$

En comparant  $g(E_1)$  et  $g(E_2)$ , l'intervalle initial peut être réduit à un intervalle de largeur  $L' = L(1 - x)$  qui contient le maximum de la fonction  $g$  :

Si  $g(E_1) > g(E_2)$ , l'intervalle d'intégration se réduit à  $[E_{\min}, E_2]$

Si  $g(E_1) < g(E_2)$ , l'intervalle d'intégration se réduit à  $[E_1, E_{\max}]$

On élimine ainsi un des 2 sous intervalles extrêmes, sur lequel l'intégration de  $g(E_z)dE_z$  peut être menée à bien, soit par la méthode des trapèzes, soit en interpolant la fonction  $g$  par une exponentielle.

La fonction  $g$  est déjà calculée en 3 points du nouvel intervalle. La valeur de  $x$  est choisie de manière à ce qu'il suffise de calculer  $g$  en 1 seul nouveau point pour se retrouver dans une situation homothétique de la précédente, avec un intervalle de largeur réduite. La fig. A illustre le cas où le sous intervalle le plus à gauche est éliminé.

Le critère d'homothétie permet, par comparaison des sous-intervalles, de fixer la valeur de  $x$

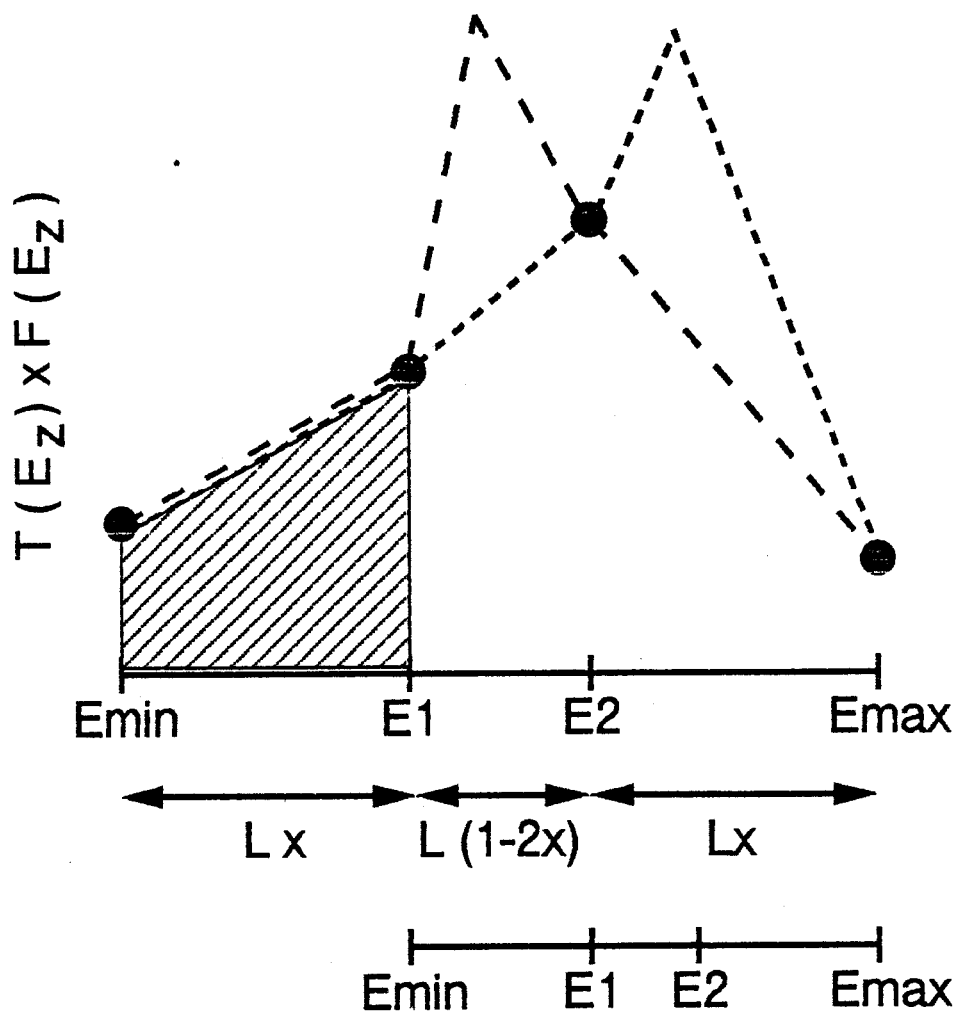


Fig A. : Méthode d'intégration à pas variable du pic de transmission : Lorsque  $g(E_2) > g(E_1)$ , le maximum de la fonction  $g$  ne peut pas se trouver entre  $E_{min}$  et  $E_1$ . Après le calcul d'un seul nouveau point et reattribution des noms des variables, l'intervalle restant est homothétique du précédent.

$$L' x = L(1 - 2x) \Rightarrow x^2 - 3x + 1 = 0 \Rightarrow x = \frac{3 - \sqrt{5}}{2} = 0.381966 \dots$$

L'intégration est menée à bien en réitérant cette procédure de réduction de la largeur de l'intervalle, jusqu'à obtenir un intervalle final beaucoup plus étroit que la largeur à mi-hauteur du pic de résonance. Cet intervalle final est alors intégré sur toute sa largeur. Si cet intervalle final est trouvé à une extrémité de l'intervalle initial, on peut en déduire que le pic de transmission n'a pas été détecté. Il convient alors de le rechercher dans un autre intervalle initial.

Simultanément au calcul du courant, cette méthode permet la détermination de la position du pic de résonance, et donc du niveau quasi-lié. Elle doit être complétée par une intégration à pas constants sur le reste du domaine d'existence de la supply function, pour lequel on suppose que les variations de la fonction de transmission sont moins abruptes.

## ANNEXE 2

### Formulation de la méthode Runge-Kutta

Le système d'équations différentielles couplées :

$$\begin{cases} \frac{\partial Y_1}{\partial z} = g_1(Y_1, Y_2, Z) \\ \frac{\partial Y_2}{\partial z} = g_2(Y_1, Y_2, Z) \end{cases}$$

peut être résolu numériquement pas à pas par la méthode dite "Runge-Kutta", d'ordre 4.

Les fonctions  $Y_1$  et  $Y_2$  sont alors représentées par les suites  $Y_1^i$  et  $Y_2^i$ . Les valeurs de ces 2 suites, au pas  $i+1$  (représentant les fonctions  $Y_1$  et  $Y_2$  à l'abscisse  $Z_{i+1} = Z_i + dz$ ) sont déduites des valeurs immédiatement précédentes par

$$\begin{cases} Y_1^{i+1} = Y_1^i + \frac{1}{6} [T_1^1 + 2T_2^1 + 2T_3^1 + T_4^1] \\ Y_2^{i+1} = Y_2^i + \frac{1}{6} [T_1^2 + 2T_2^2 + 2T_3^2 + T_4^2] \end{cases}$$

où les coefficients  $T_b^a$  ont pour expression

$$\begin{aligned} T_1^1 &= dz \times g_1(Y_1^i, Y_2^i, Z_i) \\ T_1^2 &= dz \times g_2(Y_1^i, Y_2^i, Z_i) \\ T_2^1 &= dz \times g_1\left(Y_1^i + \frac{T_1^1}{2}, Y_2^i + \frac{T_1^2}{2}, Z_i + \frac{dz}{2}\right) \\ T_2^2 &= dz \times g_2\left(Y_1^i + \frac{T_1^1}{2}, Y_2^i + \frac{T_1^2}{2}, Z_i + \frac{dz}{2}\right) \\ T_3^1 &= dz \times g_1\left(Y_1^i + \frac{T_1^1}{2}, Y_2^i + \frac{T_2^2}{2}, Z_i + \frac{dz}{2}\right) \\ T_3^2 &= dz \times g_2\left(Y_1^i + \frac{T_1^1}{2}, Y_2^i + \frac{T_2^2}{2}, Z_i + \frac{dz}{2}\right) \\ T_4^1 &= dz \times g_1\left(Y_1^i + \frac{T_1^1}{2}, Y_2^i + \frac{T_3^2}{2}, Z_i + dz\right) \\ T_4^2 &= dz \times g_2\left(Y_1^i + \frac{T_1^1}{2}, Y_2^i + \frac{T_3^2}{2}, Z_i + dz\right) \end{aligned}$$

Cette méthode est applicable au système (3-3) en posant :

$$g_1(Y_1^i, Y_2^i, Z_1) = R A Y_2^i$$

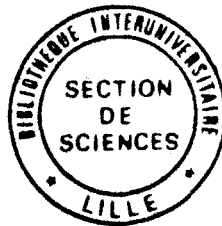
$$g_2(Y_1^i, Y_2^i, Z_1) = A (V(Z_i) - E) Y_1^i$$

où  $A = \frac{\sqrt{2qm_e}}{\pi}$ ,  $R$  est la masse effective réduite, supposée identique en  $Z_i$  et en  $Z_i + dz$ . Le potentiel en  $Z_i + \frac{dz}{2}$  sera calculé par une interpolation linéaire :

$$V(Z_i + dz/2) = \frac{1}{2}(V(Z_i) + V(Z_i + dz))$$

## RESUME

Ce travail traite des techniques de modélisation des caractéristiques de conduction par effet tunnel résonant et non résonant dans des hétérostructures de semiconducteurs de type double barrière. Les programmes de simulation donnent accès aux probabilités de transmission en régime établi et transitoire avec pour chacun des apports de modélisation, dans la mesure du possible, une confrontation théorie-expérience. Tout d'abord, nous décrivons les algorithmes basés sur le formalisme des matrices de transfert. Ce type de modélisation permet une étude des caractéristiques de conduction. Une approche analytique permet également de discuter des extremums de courant en fonction des paramètres structuraux. Nous focalisons ensuite notre travail sur les évolutions des niveaux d'énergie quasi-liés en fonction du potentiel de confinement. Nous précisons l'influence du champ électrique interne, les passages entre états de forte et faible conduction, ce qui nous permet de mettre en évidence le caractère antinémique entre une forte densité de courant pic et un contraste de courant élevé. La prise en compte de la réaction de charge d'espace et d'un transport partiellement non cohérent font l'objet d'une troisième partie. Pour traiter ces problèmes nous avons été amenés à développer des logiciels spécifiques calculant de manière autoconsistante le potentiel et la charge électronique. Les effets de bistabilité intrinsèque et la formation d'une couche d'accumulation dans l'émetteur sont plus particulièrement étudiés. Puis, les limitations fréquentielles des diodes tunnel résonant sont étudiées en simulant la propagation d'un paquet d'ondes Gaussien.



### MOTS CLES

Effet tunnel résonnant

Modélisation

AlGaAs/GaAs

Composants analogiques