

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

Olivier VANBÉSIEN

**Simulation et Caractérisation électrique des diodes
double barrière à effet tunnel résonnant**



Soutenue le 3 Avril 1991 devant la commission d'examen.

Membres du jury :

Mr M. LANNOO

Mr D. LIPPENS

Mr J.P. NOUGIER

Mr R. FAUQUEMBERGUE

Mr E. CONSTANT

Mr J.F. PALMIER

Mr B. VINTER

Président

Directeur de thèse

Rapporteur

Rapporteur

Examineur

Examineur

Examineur

*à mes parents,
ma famille,
mes amis.*

*Il n'y a en réalité qu'une poignée
de phénomènes particuliers des arts et des sciences . . .
La découverte de toutes les causes et de toutes les sciences
ne serait qu'un travail de quelques années.*

F. BACON (1561-1626)

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 M. LANNOO, Directeur du Laboratoire d'Etudes des Surfaces et Interfaces, Directeur de recherche au CNRS, me fait l'honneur de présider cette commission d'examen. Je l'en remercie tout particulièrement.

Monsieur D. LIPPENS, Directeur de recherche au CNRS, a assuré la direction de ce travail. Ses conseils, sa disponibilité ainsi que ses compétences scientifiques ont été indispensables à son bon déroulement ; qu'il trouve ici l'expression de ma profonde reconnaissance.

Je remercie sincèrement Monsieur J.P. NOUGIER, Professeur de l'Université de Montpellier, et Monsieur R. FAUQUEMBERGUE, Professeur de l'Université de Lille, qui ont accepté de juger ce travail et d'en être les rapporteurs.

J'exprime mes plus vifs remerciements à Monsieur le Professeur E. CONSTANT, de l'Université de Lille, qui me fait l'honneur de participer à la commission d'examen.

Je voudrais aussi remercier Monsieur B. VINTER, du Laboratoire Central de Recherche de Thomson, pour avoir fourni à notre équipe des composants électroniques sans lesquels la partie expérimentale de ce travail n'aurait pu être complète, ainsi que pour les nombreuses discussions que nous avons eues ; qu'il me soit permis de lui témoigner toute ma gratitude.

Je suis très sensible à la présence de Monsieur J.F. PALMIER, du Centre National d'Etudes des Télécommunications ; je le remercie vivement de sa participation à ce jury.

Je tiens à exprimer toute ma sympathie à Mesdames E. DELOS et S. LEPILLIET et à Monsieur E. PLAYEZ, de la Centrale de Caractérisation, pour leur aide à la caractérisation électrique des composants. Je remercie également la Centrale de Technologie pour la croissance et la préparation de ces composants.

Mes remerciements s'adressent à l'ensemble du personnel du Centre Interuniversitaire de Traitement de l'Information, et particulièrement à Madame S. JENNEQUIN et Monsieur Y. TINEL, pour leur constante disponibilité.

Ce mémoire a été réalisé au C.I.T.I., avec le logiciel de traitement de texte LATEX (imprimante P3400PS) par Mesdames M. VANDAELE et I. DERUDDER. Je les remercie vivement pour la grande qualité du travail et leur patience sans faille.

Merci aussi à Monsieur J.P. DEHOORTER pour la reprographie de ce mémoire.

Je ne saurais oublier, dans ces remerciements, l'ensemble de l'équipe "transport vertical dans les hétérostructures", ainsi que tous mes amis du CHS, pour la sympathie témoignée tout au long de ces années.

Table des matières

Introduction	1
1 Analyse statique du transport quantique : résolution de l'équation de Schrödinger indépendante du temps	7
1.1 Introduction	7
1.2 Formalisme de dérivation du courant	9
1.2.1 Outil numérique	9
1.2.2 Les informations accessibles	10
1.3 Etude expérimentale	12
1.3.1 Technologie des composants	12
1.3.2 Résultats expérimentaux	15
1.4 Approche cohérente	19
1.4.1 Résultats numériques	19
1.4.2 Les limites de l'approche cohérente	24
1.5 Zone d'accumulation	25
1.5.1 Mise en oeuvre	25
1.5.1.1. Position du problème	25
1.5.1.2 Formalisme	25
1.5.2 Calcul des caractéristiques de conduction avec zone d'accumulation	28
1.5.2.1 Principe	28
1.5.2.2 Simulation $I - V$: confrontation théorie-expérience	28
1.5.2.3 Interprétation	29
1.6 Prise en compte des interactions	33
1.6.1 Analyse phénoménologique	33
1.6.1.1 Modèle	33
1.6.1.2 Résultats numériques	36
1.6.2 Détermination expérimentale des temps de cohérence - Etude en température	38

1.7	Conclusion	42
2	Analyse dynamique du transport quantique	49
2.1	Introduction	49
2.2	Réponse impulsionnelle d'une diode à tunnel résonnant	50
2.2.1	Intérêt de l'étude	50
2.2.2	Formalisme de résolution de l'équation de Schrödinger dépendante du temps	51
2.2.2.1	Initialisation des fonctions d'ondes	51
2.2.2.2	Discretisation de l'équation de Schrödinger : méthode implicite	54
2.2.2.3	Les conditions aux limites : cas de l'injection continue	56
2.2.2.4	Remarques	58
2.2.3	Résultats numériques. Confrontation théorie-expérience	59
2.2.3.1	Validation de la méthode : étude des composants InGaAs/AlAs	59
2.2.3.2	Etude du système AsGa/AlAsGa	67
2.2.3.3	Confrontation théorie-expérience	69
2.2.4	Inertie de stockage	71
2.3	Détermination de l'impédance équivalente des diodes à tunnel résonnant	72
2.3.1	Introduction	72
2.3.2	Circuit équivalent à éléments localisés et problèmes associés à la mesure	72
2.3.2.1	Stabilité des mesures	72
2.3.2.2	Etude de la structure à forte conduction	75
2.3.2.3	Les limitations du circuit équivalent "RC"	81
2.3.3	Mise en évidence d'une inductance intrinsèque sur une structure à faible conduction	82
2.3.3.1	Les circuits équivalents	82
2.3.3.2	Confrontation théorie-expérience. Structure larges barrières	86
2.3.3.3	Remarques	90
2.4	Conclusion	90
3	La méthode de Monte-Carlo appliquée au tunnel résonnant	97
3.1	Introduction	97

3.2	Utilisation de la méthode de Monte-Carlo pour l'évaluation des régimes transitoires	98
3.2.1	La méthode de Monte-Carlo appliquée au transport électronique	98
3.2.2	Structure électronique	100
3.2.2.1	Méthode du pseudopotentiel empirique	100
3.2.2.2	Résultats	103
3.2.3	Taux d'interactions	107
3.2.3.1	Interactions prises en compte	107
3.2.3.2	Validité de l'approximation de la masse effective	110
3.2.4	Résultat : évolution temporelle de la vitesse	113
3.2.4.1	Zone de transit à champ électrique constant	113
3.2.4.2	Injection dans une zone dopée	114
3.3	Modèle macroscopique	120
3.3.1	Formalisme	120
3.3.2	Résultats	124
3.3.2.1	Niveaux d'impédance et performances attendues	124
3.3.2.2	Réaction de charge d'espace en transit	128
3.3.3	Discussion	130
3.4	Etude de faisabilité : simulation des diodes à tunnel résonnant par la méthode de Monte-Carlo	131
3.4.1	Principe	131
3.4.2	Résultats numériques	135
3.4.3	Les problèmes rencontrés	140
3.5	Conclusion	141
4	Structures à multiplication de discontinuités	147
4.1	Introduction	147
4.2	Structures à perturbations de potentiel	148
4.2.1	Principe	148
4.2.2	Etude théorique	149
4.2.2.1	Cas d'une perturbation de potentiel centrée dans le puits	149
4.2.2.2	Autres types de perturbations	155
4.2.2.3	Remarques	155
4.2.3	Confrontation théorie-expérience	156
4.2.3.1	Résultats extraits de la littérature	156
4.2.3.2	Structure $Al_{0.6}Ga_{0.4}As/GaAs/In_{0.25}Ga_{0.75}As$	157

4.3	Tunnel séquentiel dans les puits quantiques multiples	159
4.3.1	Observation expérimentale	159
4.3.2	Modélisation	161
4.3.2.1	Formalisme de la triple barrière	161
4.3.2.2	Caractéristiques courant-tension	162
4.3.3	Remarques	165
4.4	Les superréseaux de dimension finie	166
4.4.1	Cadre de l'étude	166
4.4.2	Les superréseaux finis symétriques	168
4.4.2.1	Conditions d'existence d'une minibande	168
4.4.2.2	Localisation induite par le champ électrique	170
4.4.3	Structure à fenêtre de transmission "plate"	173
4.4.3.1	Principe	173
4.4.3.2	Etude théorique	174
4.4.3.3	Problèmes liés à la réalisation expérimentale	181
4.5	Conclusion	182
	Conclusion	187

A	Résolution de l'équation de Schrödinger - Méthode de RUNGE	
	KUTTA : détails numériques	192
B	Calcul des conditions aux limites pour la résolution de l'équation de Schrödinger dépendante du temps	196
C	Méthode de Monte-Carlo : ORGANIGRAMMES	200
D	Compléments sur la structure de bandes du GaAs	206
E	Incohérence dans les structures triple barrière	210

Introduction

Introduction

L'électronique quantique est, à l'heure actuelle, un sujet de recherche en pleine expansion tant au niveau théorique qu'expérimental. Ce domaine englobe tous les composants où les propriétés ondulatoires de l'électron sont à la base des mécanismes de fonctionnement. Une majorité de ces composants tirent parti des phénomènes d'interférence. Les diodes à effet tunnel résonnant appartiennent à cette catégorie.

Les premières études sur ce sujet datent du début des années 1970. R. Tsu et L. Esaki [1] ont alors montré qu'il était théoriquement possible d'obtenir, dans des structures à puits quantiques, des effets de résistance différentielle négative. On avait ainsi, pour la première fois, l'opportunité d'observer la manifestation d'effets quantiques par de simples mesures électriques. Cependant, les difficultés technologiques ont ralenti le développement de ce nouveau domaine de l'électronique. L. Chang, d'IBM Yorktown, explique [2] : "Nous avons dû construire nous-mêmes le système sous-vide capable de déposer des couches minces qui constituent les superréseaux. Comment limiter la contamination des couches piégées par le substrat ? Comment aligner les réseaux cristallins des diverses couches ?" En dépit de ces problèmes, dès 1974, l'effet de résistance différentielle négative est observé expérimentalement, à très basses températures.

Ce n'est véritablement qu'à partir de 1983 qu'il a été possible, grâce aux progrès effectués dans les techniques d'épitaxie, d'étudier intensivement ces nouvelles structures. La motivation essentielle de ces travaux se situe dans leurs temps caractéristiques très faibles. Ainsi, très récemment en électronique analogique, une diode à tunnel résonnant, fabriquée dans le système de matériaux InAs/AlSb, a oscillé à la fréquence de 675 GHz [3]. Dans le même laboratoire, la détection d'un signal à 2.5 THz a également été reportée [4]. Au sein de l'équipe, de la multiplication d'harmonique à 320 GHz a été obtenue dans le système GaAs/AlAs [5]. Pour la logique, l'utilisation de ces structures mène à une simplification des circuits. A titre d'exemple, le transistor à tunnel résonnant de type RHET ("resonant tunneling hot electron transistor"), proposé par les laboratoires de Fujitsu [6], permet de réaliser la fonction NOR-Exclusif avec un seul composant. De plus, la voie semble ouverte au développement de la logique multi-états [7] [8].

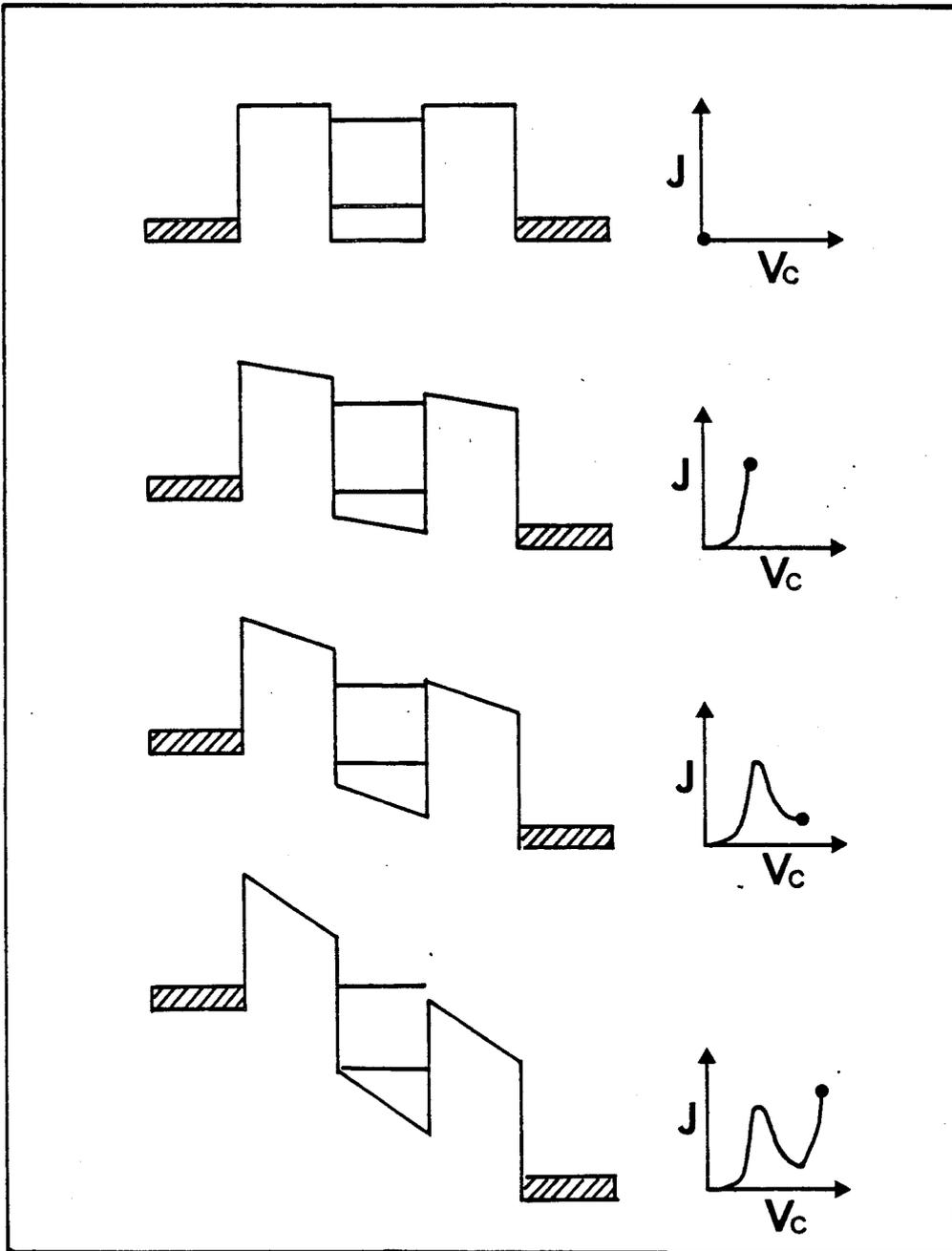


Figure 1 : Principe de fonctionnement d'une diode double barrière à effet tunnel résonnant.

Parallèlement à ces réalisations pratiques, qui intéressent particulièrement l'astronomie ou les télécommunications, de nombreuses études théoriques ont été menées, afin de comprendre l'ensemble des phénomènes physiques qui interviennent dans les structures double barrière.

Le principe général de fonctionnement d'une diode à tunnel résonnant peut se comprendre à l'aide de la figure 1 :

- Les porteurs, confinés par les deux barrières, voient leur énergie quantifiée. Ce confinement est momentané car, du fait de la faible épaisseur des barrières (typiquement quelques nanomètres), la probabilité de passage par effet tunnel est non négligeable.
- L'effet tunnel résonnant a pour origine le fait que les niveaux quantifiés représentent un chemin privilégié pour les électrons. Lorsque ces niveaux sont inaccessibles sous l'action de la polarisation, le courant chute, ce qui se traduit par une résistance différentielle négative.

Par cette approche simplifiée, on s'aperçoit que la physique mise en jeu dans ces effets est relativement complexe et qu'un traitement plus approfondi est nécessaire pour préparer les applications. C'est dans cette optique que nous orientons ce mémoire. Pour cela, nous ferons largement appel aux techniques numériques qui, seules, peuvent permettre de quantifier les phénomènes, sans pour autant oublier la réalité expérimentale. De nombreuses mesures électriques seront en effet reportées.

Dans le premier chapitre, nous étudierons les caractéristiques courant-tension de diodes double barrière GaAs/AlGaAs en régime statique. Nous baserons notre analyse sur la résolution de l'équation de Schrödinger indépendante du temps, en essayant de définir le domaine de validité de l'hypothèse d'un transport purement cohérent par une étude en température. Nous serons amenés à compléter ce modèle par la description des propriétés d'injection bidimensionnelle de la zone d'émetteur. Enfin nous introduirons, dans le cadre d'une approche phénoménologique, la notion de transport incohérent afin de mieux décrire les régimes de faible conduction.

Nous analyserons, dans le deuxième chapitre, le régime dynamique d'une diode à tunnel résonnant. Nous résoudrons l'équation de Schrödinger dépendante du temps en

simulant une injection continue de porteurs. Cette étude nous permettra de visualiser le comportement des électrons peuplant ou quittant le puits et de quantifier les temps caractéristiques mis en jeu. Des mesures d'impédances nous amèneront à mettre en évidence l'effet du temps de vie du niveau quasi-lié sur les potentialités fréquentielles des hétérostructures double barrière.

Dans le troisième chapitre, nous nous focaliserons sur les effets d'électrons chauds existant dans le collecteur. La méthode particulière de Monte-Carlo sera utilisée pour étudier le transport non stationnaire dans cette zone. Par une méthode macroscopique de description du transit, nous serons en mesure d'optimiser l'espaceur de collecteur en longueur et en dopage. Les premiers éléments d'une simulation Monte-Carlo, couplant les aspects quantique et diffusif, compléteront cette étude sur le transport électronique.

Dans le dernier chapitre, nous appliquerons les méthodes numériques mises au point à des structures plus complexes. Nous verrons qu'il est possible d'améliorer, par "ingénierie de la fonction d'onde", les caractéristiques statiques (non linéarité, contraste en courant) des diodes à tunnel résonnant, en introduisant dans la structure des perturbations de potentiel. Nous étendrons cette étude au tunnel séquentiel dans les multipuits quantiques. Enfin, nous terminerons par une discussion sur les conditions d'existence d'une minibande dans les superréseaux de dimension finie.

Bibliographie

- [1] R. TSU, L. ESAKI
Tunneling in a finite superlattice
Applied Physics Letters 22 (1973) p. 562.
- [2] E. CORCORAN
La quête des points quantiques.
Pour la science, Janvier 1991.
- [3] E.R. BROWN, C.D. PARKER, L.J. MAHONEY, J.R. SÖDERSTRÖM,
T.C. Mac GILL
Room temperature oscillations up to 675 GHz in InAs/AlSb resonant tunneling diodes.
Device Research Conference (Santa Barbara) (1990).
- [4] T.C.L.G. SOLLNER, W.R. GOODHUE, P.E. TANNENWALD, C.D. PARKER,
D.D. FECK
Resonant tunneling through quantum well at frequencies up to 2.5 THz.
Applied Physics Letters 43 (1983) p. 588.
- [5] R. BOUREGBA, D. LIPPENS. L. PALMATEER, E. BOCKENHOFF,
M. BOGEY, J.L. DESTOMBES, A. LECLUSE
Frequency multiplication using resonant tunneling diode with output at submil-
limetre wavelengths.
Electronics Letters Vol 26 (1990) p. 1804.
- [6] N. YOKOYAMA, K. IMAMURA, S. MUTO, S. HIYAMIZU, H. NISHI
A new fonctionnal resonant tunneling hot electron transistor (RHET)
Jpn Journal of Applied Physics Vol 24 n°11 (1985) pp L853.
- [7] S. SEN, F. CAPASSO, A.Y. CHO, D. SIVCO
Resonant Tunneling Device with Multiple Negative Differential Resistance :

Digital and Signal Processing Applications with Reduced Circuit Complexity
I.E.E.E. Trans. on Electron Devices Vol ED34 n°10 (1987).

[8] F. CAPASSO, R.A. KIEHL

Resonant tunneling transistor with quantum well base and high energy injection :
a new negative differential resistance device.

Journal of Applied Physics 58 (3), 1985.

Chapitre 1

Analyse statique du transport quantique :
résolution de l'équation de Schrödinger
indépendante du temps

Chapitre 1

Analyse statique du transport quantique : résolution de l'équation de Schrödinger indépendante du temps

1.1 Introduction

L'analyse statique du transport quantique appliquée aux structures à tunnel résonnant a fait l'objet, ces quinze dernières années, de nombreuses études. Diverses approches, basées sur la résolution de l'équation de Schrödinger indépendante du temps, ont été proposées, soit par des formalismes matriciels [1] [2] [3] [4], soit en termes de fonctions de Wigner [5].

Nous avons, pour notre part, développé une méthode directe de résolution de l'équation de Schrödinger par un algorithme de type Runge-Kutta [6]. Le point fort de cette approche est qu'elle peut prendre en compte, sans discrétisation excessive, une forme de potentiel quelconque résultant soit des modulations de matériau et de dopage soit d'effets électrostatiques. La mise en place des techniques numériques et leur validation par rapport aux formalismes matriciels sont présentées dans la thèse de Loïc de Saint Pol [7].

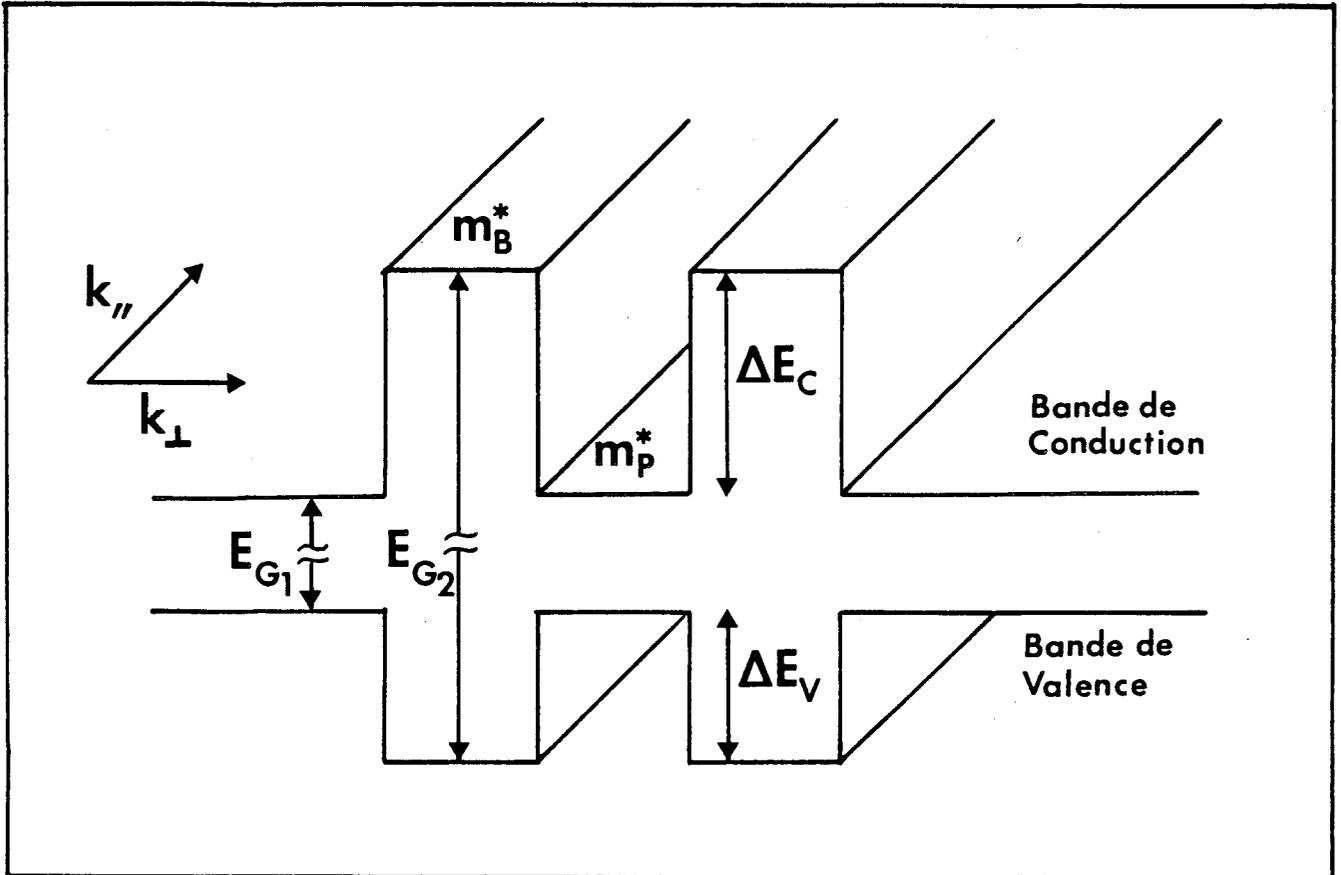


Figure 1.1 : Bandes de conduction et de valence d'une structure double barrière à l'équilibre. Ce schéma montre les hypothèses de simulation et inclut l'approximation d'interfaces planes et abruptes entre les différentes couches épitaxiées (Les échelles en énergie ne sont pas respectées).

Par conséquent nous éluderons, dans notre présentation, les aspects purement numériques en insistant cependant sur le degré des approximations utilisées. Nous serons alors en mesure de confronter directement les résultats de calcul du courant tunnel et les caractéristiques courant-tension que nous avons mesurées dans une large gamme de température [8].

L'introduction dans les simulations d'effets de réaction de charge d'espace et de destruction partielle de la cohérence du transport électronique dans le puits sera abordée [9]. Ceci nous permettra de mettre en évidence les différents phénomènes spécifiques rencontrés dans ces composants.

1.2 Formalisme de dérivation du courant

1.2.1 Outil numérique

Le détail de la procédure numérique utilisée pour la résolution de l'équation de Schrödinger est présenté dans l'annexe A.

Dans l'ensemble de cette première partie, nous ferons les approximations suivantes, résumées sur la figure 1.1 :

- Seul le transport électronique est pris en compte. Dans la plupart des structures que nous étudions, la conduction par trous est en effet négligeable. Nous ignorons également le transport multivallée.
- Nous considérons des structures à double barrière constituées de couches semi-conductrices alternées dont les interfaces sont abruptes. Nous reviendrons plus tard sur les effets de fluctuations d'interfaces.
- Les transports dans les directions parallèle et perpendiculaire aux couches sont considérés comme totalement indépendants dans la mesure où nous n'introduisons de variations de potentiel que dans la direction de croissance, notée z , dans la suite de ce travail. Nous réduisons ainsi notre problème à une équation unidimensionnelle et nous nous intéressons au transport perpendiculaire aux couches (k_{\perp}).

- Nous supposons que la fonction d'onde $\varphi(z)$ est obtenue par la résolution de l'équation différentielle $H\varphi(z) = E\varphi(z)$ où H représente l'Hamiltonien mono-électronique dans l'approximation de la masse effective. Cette dernière sera considérée comme la masse effective de bande de conduction du matériau massif correspondant. Nous verrons que cette approche peut être critiquable, notamment lorsque les discontinuités de potentiel deviennent importantes (supérieures à 500 meV). Une autre définition de la masse effective du porteur lors de son passage par effet tunnel dans les barrières devra être considérée [10].

Compte tenu de ces hypothèses, l'équation générale unidimensionnelle en régime indépendant du temps s'écrit :

$$\frac{-\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{1}{m^*(z)} \frac{\partial}{\partial z} \varphi(z) \right) + (V(z) - E_z) \varphi(z) = 0 \quad (1.1)$$

où $\varphi(z)$ représente la fonction d'onde (fonction enveloppe) qui ne dépend, dans la direction de croissance z , que de l'énergie longitudinale E_z . Le terme $V(z)$ résulte des données structurales des matériaux utilisés et du potentiel électrostatique (polarisation externe, réaction de charge d'espace).

1.2.2 Les informations accessibles

Les informations accessibles sont de deux ordres. Il est tout d'abord possible d'avoir accès à la fonction enveloppe en tout point de la structure et à toute énergie, en et hors équilibre. Nous verrons que cette information est importante pour le traitement partiellement cohérent du transport électronique. Ensuite nous pouvons calculer le spectre de transmission $T(E_z, V_c)$ à partir duquel on dérive le courant tunnel au travers de la structure. Ce courant est calculé par la formule suivante :

$$J(V_c) = \frac{qm^* k_b \theta}{2 \pi^2 \hbar^3} \int_0^\infty T(E_z, V_c) F(E_z, V_c) d E_z \quad (1.2)$$

où θ représente la température.

La fonction $F(E_z, V_c)$ est appelée fonction d'alimentation ("supply function"). Elle traduit la distribution en énergie des porteurs issus du collecteur et de l'émetteur s'appêtant à interagir avec le système double barrière-puits.

Si l'on suppose un même dopage côté émetteur et côté collecteur, et donc un même niveau de Fermi, elle a pour expression [11] :

$$F(E_z, V_c) = Ln \left[\frac{1 + \exp((E_F - E_z)/k_b \theta)}{1 + \exp((E_F - E_z - qV_c)/k_b \theta)} \right] \quad (1.3)$$

E_F représente le niveau de Fermi côté émetteur et V_C la tension appliquée aux bornes de la diode. En pratique on montre que, très rapidement sous l'effet de la tension, le flux d'électrons généré par le collecteur devient négligeable et que le terme exponentiel du dénominateur de l'équation (1.3) n'est que du second ordre, petit devant un.

Région	Matériaux	ECHANTILLON A		ECHANTILLON B	
		Dopage cm ⁻³	Epaisseur nm	Dopage cm ⁻³	Epaisseur nm
(1)	GaAs	2.10 ¹⁸	500	1.10 ¹⁸	300
(2)	GaAs	2.10 ¹⁶	75	non dopé	60
(3)	<i>Al_{0.35}Ga_{0.65}As</i>	non dopé	5	non dopé	10
(4)	GaAs	non dopé	5	non dopé	5
(5)	<i>Al_{0.35}Ga_{0.65}As</i>	non dopé	5	non dopé	10
(6)	GaAs	2.10 ¹⁶	50	non dopé	60
(7)	GaAs	2.10 ¹⁸	1000	2.10 ¹⁸	300

Tableau 1.1 : Caractéristiques des structures à tunnel résonnant étudiées.

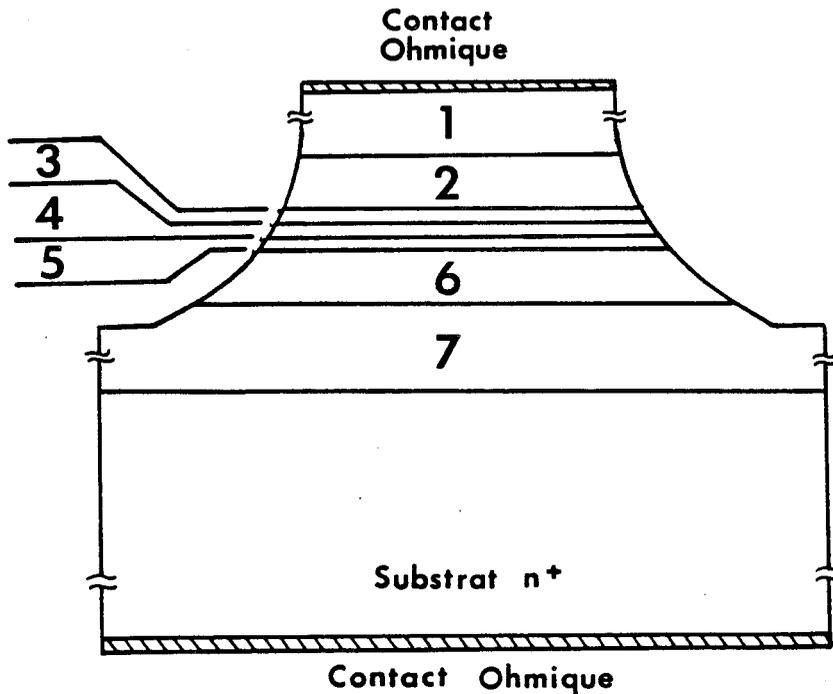


Figure 1.2 : Séquence de croissance d'un échantillon de type A

1.3 Etude expérimentale

1.3.1 Technologie des composants

Deux types de structures double barrière fabriquées dans le système AsGa/AlGaAs sont spécialement étudiés ici. Leurs principales caractéristiques sont résumées dans le tableau 1.1, le processus technologique est schématisé figure 1.2.

Pour le matériau ternaire $Al_xGa_{1-x}As$, nous avons pris des concentrations d'aluminium inférieures à 40%, afin d'exclure la complexité du transport électronique multivallée. En effet, comme l'AsGa, les composés $Al_xGa_{1-x}As$ possèdent un gap direct (minimum de la bande de conduction en Γ , centre de la première zone de Brillouin) tant que la teneur en aluminium n'excède pas une valeur de l'ordre de 40%. Au-delà de cette limite, le gap devient indirect (minimum de la bande de conduction au point X, dans la direction cristallographique $\langle 100 \rangle$). Les effets de conduction par vallées satellites dans les barrières risquent alors de ne plus être négligeables [12]. Par ailleurs il nous faut conserver une hauteur de barrière suffisante pour observer des effets tunnel résonnant marqués. Compte tenu de ces contraintes, nous avons utilisé des concentrations de l'ordre de 30 à 35%.

Les deux composants étudiés ont été fabriqués par épitaxie par jets moléculaires (EJM). Le premier, que nous dénommerons échantillon A, a été épitaxié au Centre Hyperfréquences et Semiconducteurs tandis que le second, échantillon B, l'a été au Laboratoire Central de Recherche de Thomson.

Le substrat utilisé est en AsGa dopé n^{++} ($N_D > 10^{18} \text{ cm}^{-3}$) au Silicium, orienté dans la direction cristallographique $\langle 100 \rangle$. La séquence de croissance est la suivante : deux zones fortement dopées AsGa (régions 1 et 7) sont séparées de la zone double barrière-puits (régions 3,4 et 5) par des espaceurs faiblement dopés (régions 2 et 6). Pour la structure A, deux couches AsGa de très faible épaisseur, non référencées dans un but de simplification, sont épitaxiées de part et d'autre des barrières afin d'éviter l'interdiffusion des atomes d'Aluminium et de Silicium. Ces structures peuvent être comparées aux diodes QWITT ("quantum well injection transit time diode") que nous étudierons plus particulièrement dans le chapitre 3. Ces structures sont fabriquées à des températures relativement faibles, de l'ordre de 600°C , de manière à limiter la ségrégation des atomes de Silicium en surface.

La largeur de puits est constante pour les deux structures étudiées ($L_W = 5 \text{ nm}$). Par contre, l'échantillon A a des largeurs de barrières L_B de 5 nm, les espaceurs ont 50 nm d'épaisseur et sont dopés de $2.10^{16} \text{ cm}^{-3}$. L'échantillon B a des largeurs de barrières de 10 nm, pour des espaceurs non intentionnellement dopés de 60 nm.

Pour la réalisation des composants de type A, au Centre Hyperfréquences et Semiconducteurs, des contacts ohmiques AuGe-Ni-Au sont déposés face avant après photolithographie de motifs de test et face arrière uniformément sur la plaquette. Ces contacts ohmiques sont alliés à une température de 430°C pendant 40 secondes. L'isolation des composants se fait par mésas ; elle est réalisée par attaque chimique. Pour les opérations technologiques des échantillons de type B, on se référera à Vodjdani et al [13]. Pour l'échantillon A, le masque intègre de multiples mésas dont les diamètres s'échelonnent entre $100 \mu\text{m}$ et $15 \mu\text{m}$. Néanmoins, compte tenu des densités de courant élevées attendues, nous avons utilisé exclusivement des échantillons de $15 \mu\text{m}$ de diamètre dans ce travail. Pour l'échantillon B, à faibles densités de courant, nous avons pris des motifs de tests carrés de $30 \mu\text{m}$ et $60 \mu\text{m}$ de côté.

a

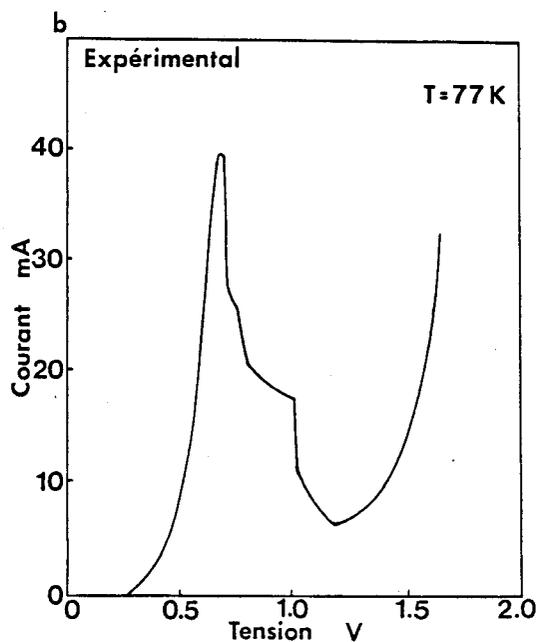
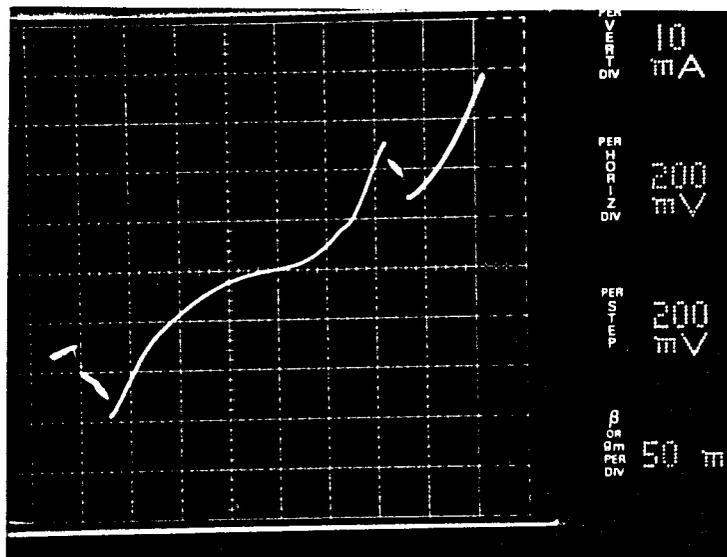


Figure 1.3 : Caractéristiques courant-tension typiques pour un échantillon de type A, diamètre $15 \mu m$

a) $\theta = 300$ K

b) $\theta = 77$ K

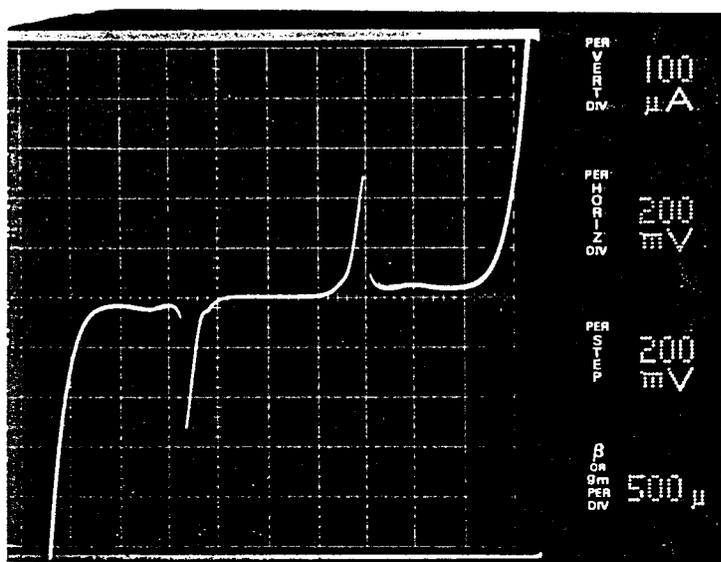
1.3.2 Résultats expérimentaux

La figure 1.3a montre une caractéristique courant-tension typique pour une diode de type A, de diamètre $15 \mu m$, à température ambiante. On mesure un rapport courant pic sur courant vallée (PTVR : peak to valley ratio) de l'ordre de 1.8 ± 0.2 à 300 K. Cette valeur est comparable aux résultats publiés dans la littérature pour une telle concentration d'Aluminium [14]. La densité de courant pic est de $14 \pm 2 \text{ kA} \cdot \text{cm}^{-2}$. A 77 K, figure 1.3b, le PTVR est égal à 6 pour des densités de courant proches de $20 \text{ kA} \cdot \text{cm}^{-2}$.

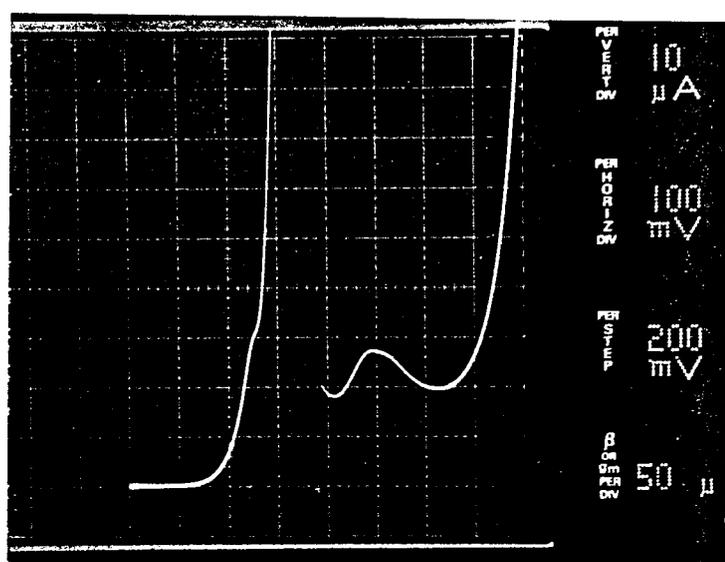
Sur la figure 1.3a, une déformation apparaît dans la montée de courant pour une tension de $\sim 0.26 \text{ V}$. Nous verrons que ceci est caractéristique de la présence d'une zone d'accumulation qui se construit en amont de la double barrière en fonction de la polarisation. Cette anomalie tend à disparaître pour de très basses températures [15].

Sur la figure 1.3b, on peut aussi remarquer des accidents dans la zone de résistance différentielle négative (RDN). Ces phénomènes sont dus à l'instabilité de la diode en régime de RDN qui se met à osciller spontanément. La valeur du courant mesuré n'est alors qu'une valeur moyenne des fluctuations de courant dont le spectre est relativement basse fréquence [16].

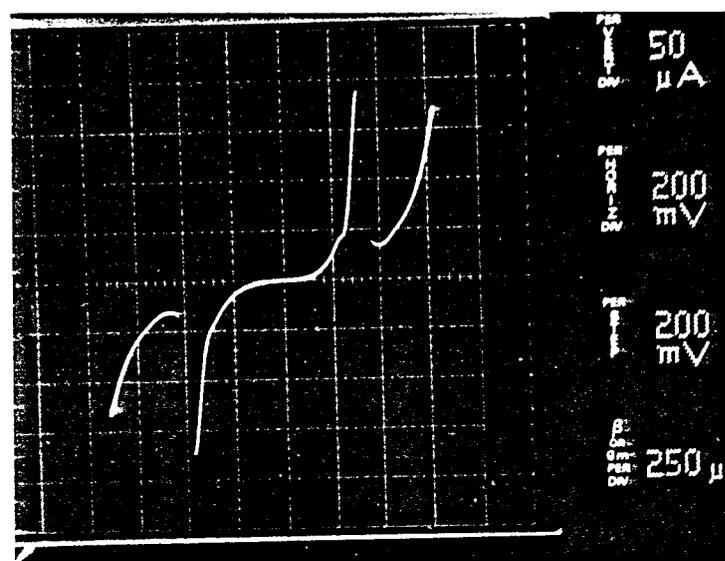
Pour l'échantillon B, de surface $900 \mu m^2$, aucune résistance différentielle négative ne peut être observée à température ambiante. Par contre, à la température de l'azote liquide, un contraste en courant de 20 pour une densité de courant pic de $11 \text{ A} \cdot \text{cm}^{-2}$ est mesuré figure 1.4a. Ce rapport pic sur vallée est comparable aux meilleurs résultats publiés jusqu'alors dans la littérature pour ce système de matériaux. Un tel PTVR atteste la très bonne qualité de l'échantillon. Les problèmes liés à la croissance des interfaces directes et inverses semblent être bien maîtrisés au vu de la symétrie satisfaisante obtenue pour les polarisations directe et inverse. De plus on observe, sur la figure 1.4b, une variation significative du courant dans le régime de faible conduction en vallée, qui peut être attribuée au passage d'électrons au travers de la structure par effet tunnel assisté par émission de phonons optiques.



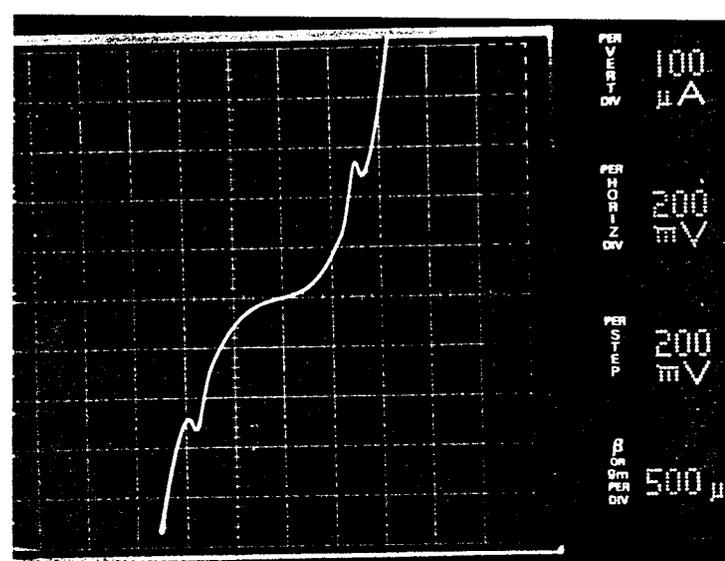
a



b



c



d

Figure 1.4 : Caractéristiques courant-tension typiques pour un échantillon de type B, de surface $900 \mu\text{m}^2$

a) $\theta = 77 \text{ K}$

b) $\theta = 77 \text{ K}$, observation du pic dû au passage par effet tunnel assisté par émission de phonons optiques.

c) $\theta = 180 \text{ K}$

d) $\theta = 260 \text{ K}$

Ce phénomène a déjà été largement mis en évidence et étudié à 4 K pour des structures semblables [17][18]. Sont reportées aussi, figures 1.4c et 1.4d, les courbes $I - V$ à 180 K et 260 K. En raison d'une augmentation très rapide du courant vallée, le PTVR tombe à 6 pour 180 K et l'effet de résistance différentielle négative disparaît quasiment à 260 K. On relève aussi, expérimentalement, que le courant pic passe par un minimum de l'ordre de $180 \mu A$ à 210 K. Pour terminer, il est à noter que la tension correspondant au maximum de courant est peu dépendante de la température, quel que soit l'échantillon considéré.

Les figures 1.5a et 1.5b résument les évolutions expérimentales des courants pics et vallées en fonction de la température respectivement pour une diode de type A (surface : $1.767 \cdot 10^{-6} cm^2$) et pour une diode de type B (surface : $3.6 \cdot 10^{-5} cm^2$).

Les évolutions sont similaires dans les deux cas :

- Le courant vallée (I_V) reste quasiment constant de 77 K jusqu'à des températures de l'ordre de 180 K, puis montre une brusque augmentation pour des températures plus élevées. Ceci peut être facilement interprété par l'élargissement de la fonction de distribution en énergie des porteurs incidents.
- L'augmentation simultanée du courant pic (I_p) ne suffit pas, dans la partie supérieure de l'échelle de température, à conserver un rapport pic sur vallée constant. La résistance différentielle négative disparaît pour des températures voisines de 260 K et de 400 K pour des largeurs de barrières respectives de 10 nm et de 5 nm.
- Dans la partie inférieure de la gamme de température, c'est-à-dire de 77 K à 290 K pour l'échantillon A et de 77 K à 210 K pour l'échantillon B, une augmentation non négligeable du courant pic est observée à mesure que les composants sont refroidis. Ces variations sont de l'ordre de 30% par rapport à la valeur minimale. Ce comportement peut être expliqué par la présence des espaceurs AsGa faiblement ou non dopés, comme nous le verrons au paragraphe 1.5.

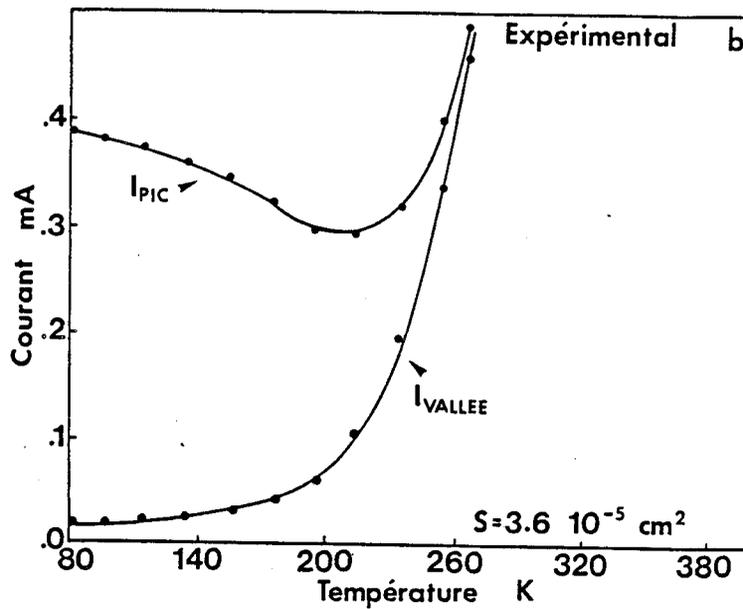
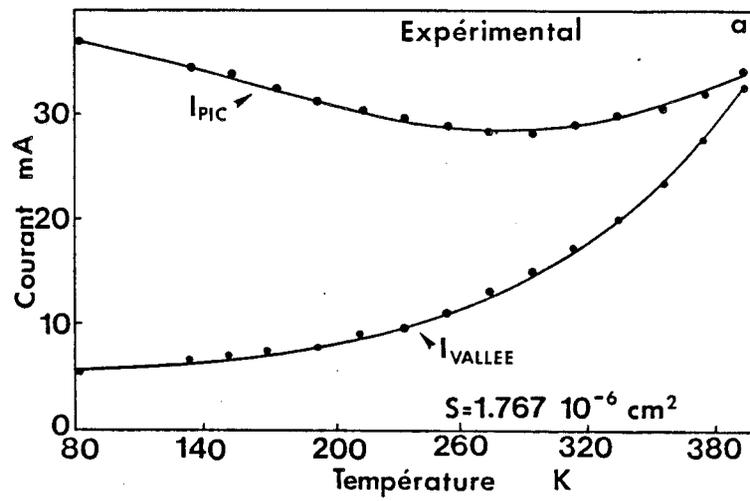


Figure 1.5 : Evolutions expérimentales des courants pics et courants vallées en fonction de la température pour l'échantillon A (1.5a) et pour l'échantillon B (1.5b).

1.4 Approche cohérente

1.4.1 Résultats numériques

Les résultats numériques que nous allons présenter sont obtenus en utilisant le modèle décrit dans le paragraphe 1.2. On suppose un transport purement cohérent des électrons traversant par effet tunnel une structure double barrière-puits sans espaces.

Nous négligeons de plus la réaction de charge d'espace dans le puits. Cette hypothèse est justifiée par les valeurs de densités de courant attendues (de l'ordre de $20 \text{ kA} \cdot \text{cm}^{-2}$ au maximum) et donc des valeurs de densités de charges piégées dans le puits (inférieures à 10^{11} cm^{-2} pour la diode de type A [19]).

Les données de simulation pour les deux structures A et B sont les suivantes. Nous considérons :

- Une hauteur de barrière de 0.27 eV ; ceci représente 60% de la discontinuité de bande interdite entre l'AsGa et l' $\text{Al}_{.35}\text{Ga}_{.65}\text{As}$.
- Un niveau de Fermi de 55 meV correspondant à un dopage de $1 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ dans l'émetteur.
- Le choix de la masse effective est plus problématique.

Les calculs ont été menés avec des masses effectives de $0.067 \cdot m_o$ pour l'AsGa et $0.096 \cdot m_o$ pour $\text{Al}_{.35}\text{Ga}_{.65}\text{As}$. Ce choix de paramètres, qui correspondent aux masses de bas de bande de conduction dans une approximation parabolique, n'exclut pas un certain nombre d'incertitudes. En effet, les porteurs peuvent traverser les barrières par effet tunnel avec des énergies très inférieures au bas de bande de conduction. Il a été montré que, dans ce cas, les électrons ont alors une masse apparente plus faible que celle de bas de bande de conduction. Cet effet est ici ignoré. On peut néanmoins penser que l'augmentation de la longueur de décroissance (diminution de la masse) de la fonction d'onde évanescence dans les barrières aurait pour effet d'augmenter la valeur de courant pic et de diminuer le rapport courant pic sur courant vallée. Des simulations incluant ces effets, menées dans notre équipe, ont montré cependant que ces variations étaient secondaires pour les structures caractérisées dans cette étude.

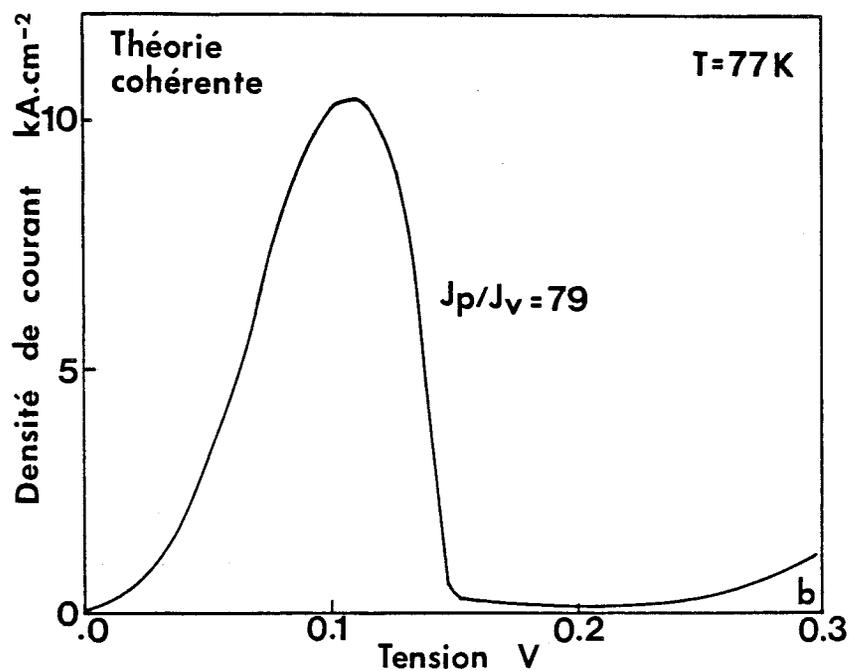
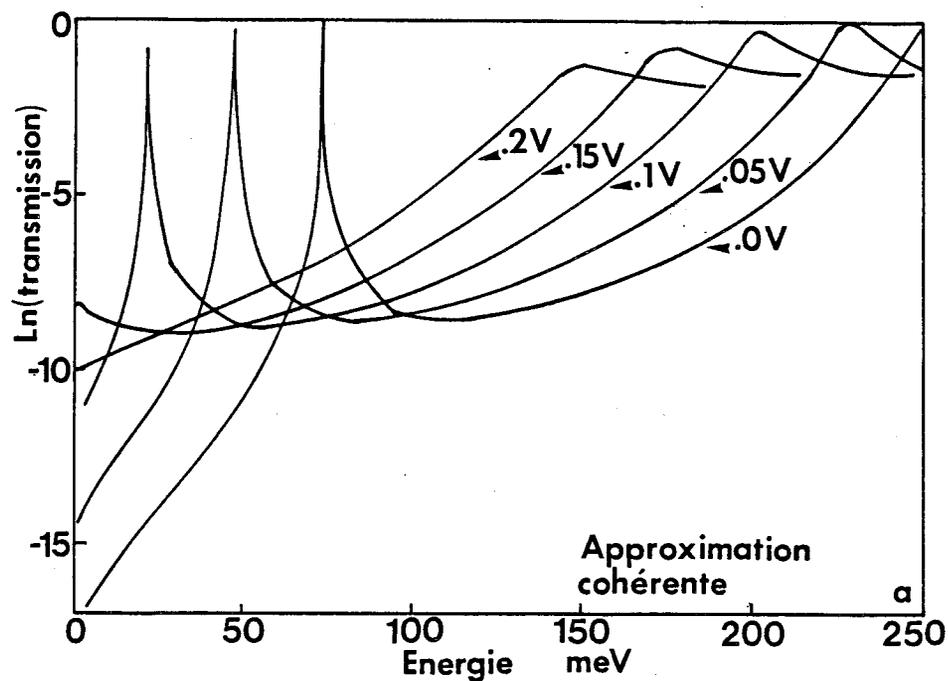


Figure 1.6 : Approche cohérente : résultats numériques sur une double barrière avec $L_W = L_B = 5$ nm.

- a) Courbes de transmission en fonction de l'énergie longitudinale en équilibre et sous polarisation.
- b) Caractéristique courant-tension calculée à 77 K.

Sur la figure 1.6a, nous avons reporté les résultats du calcul des probabilités de transmission pour une diode de type A à l'équilibre et en polarisation. On constate que, sous l'action de la tension, l'énergie de résonance (niveau quasi-lié dû au confinement momentané des porteurs dans le puits) qui correspond au premier pic de transmission est décalée vers les basses énergies. Cet effet s'accompagne d'une diminution sensible de la valeur maximale de la transmission, qui s'explique par la dissymétrisation de la structure sous polarisation. Il en résulte que, contrairement à l'approche simplifiée présentée dans l'introduction, la valeur pic du courant est obtenue lorsque l'énergie du niveau quasi-lié est légèrement supérieure à l'énergie du bas de bande de conduction de l'émetteur.

La figure 1.6b montre la caractéristique $I - V$ calculée à 77 K pour la structure de type A à partir des courbes de transmission précédentes. La valeur du courant pic de $12 \text{ kA} \cdot \text{cm}^{-2}$ est de l'ordre de grandeur de la valeur mesurée. En revanche, le rapport courant pic sur courant vallée est largement surestimé avec une valeur égale à 79, alors que le PTVR expérimental n'est que de 6. Si des calculs similaires sont effectués avec la structure B, le désaccord sur la valeur de contraste en courant est encore plus flagrant, puisque le PTVR calculé vaut 23000 pour 20 expérimentalement. Cette limite des théories cohérentes pour décrire les courants vallées est maintenant bien établie. Nous reviendrons sur ce point dans le paragraphe 1.6.

L'évolution numérique des courants pics et vallées en fonction de la température est reportée sur la figure 1.7, à la fois pour des barrières de 5 nm (courbes supérieures) et pour des barrières de 10 nm (courbes inférieures), pour une largeur de puits de 5 nm. Sur cette figure on peut remarquer que, théoriquement, l'effet de résistance différentielle négative disparaît à 480 K pour $L_B = 5 \text{ nm}$ et 220 K pour $L_B = 10 \text{ nm}$. Ces valeurs sont en bon accord avec les valeurs mesurées, $\theta_C^{exp} = 400 \text{ K}$ ($L_B = 5 \text{ nm}$) et $\theta_C^{exp} = 260 \text{ K}$ ($L_B = 10 \text{ nm}$). Ceci montre que la disparition de l'effet de RDN en fonction de la température peut être décrite dans l'approximation d'un processus tunnel purement cohérent. Sur cette base, il est possible d'étudier la dépendance de cette température critique (θ_c) en fonction des largeurs de barrières et plus généralement des paramètres structuraux.

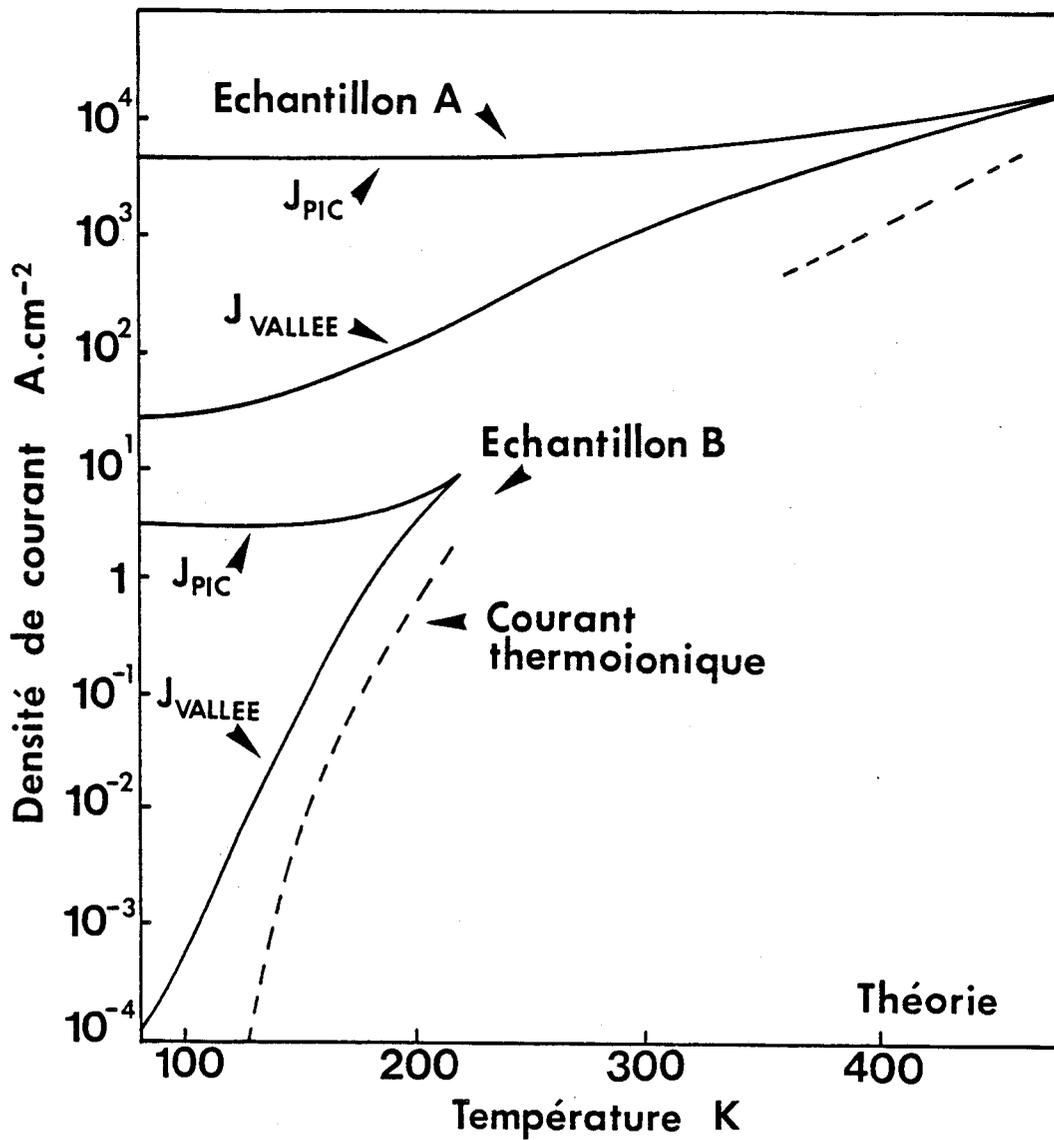


Figure 1.7 : Evolutions calculées des densités de courant pic et vallée en fonction de la température pour la structure de type A (courbes supérieures) et pour la structure de type B (courbes inférieures). Le courant thermoionique calculé en fonction de la température est reporté en pointillé.

Pour illustrer cet aspect, nous avons représenté sur la figure 1.8 les fonctions de distribution en énergie des électrons à 77 K et à 300 K pour un émetteur dopé à 10^{18}cm^{-3} , ainsi que les spectres de transmission calculés à tension vallée pour les structures A et B. A 77 K, l'intégration du produit transmission-fonction de distribution en énergie donnant accès au courant (eq. 1.2) fait intervenir un domaine d'énergie limité par le bas de bande de conduction côté émetteur et le niveau de Fermi. A température ambiante, il y a élargissement du domaine d'intégration compte tenu de la queue de distribution en énergie des porteurs excités thermiquement. Il en résulte une augmentation très rapide du courant vallée. Le fait que la disparition de la RDN se produise à des températures d'autant plus faibles que les barrières sont larges peut se comprendre en considérant les variations des courbes de transmission des échantillons A et B. On constate en effet, pour ce dernier échantillon, que tout élargissement de la fonction d'alimentation entraîne un accroissement important du produit $T(E_z, V_c) F(E_z, V_c)$ qui prend alors des valeurs comparables en et hors résonance. Par contre, pour l'échantillon A, les variations moins marquées de la transmission et les valeurs très nettement supérieures des densités de courant (rapport 1000 : 1 entre les deux structures) font que cette température critique est repoussée vers des valeurs plus élevées.

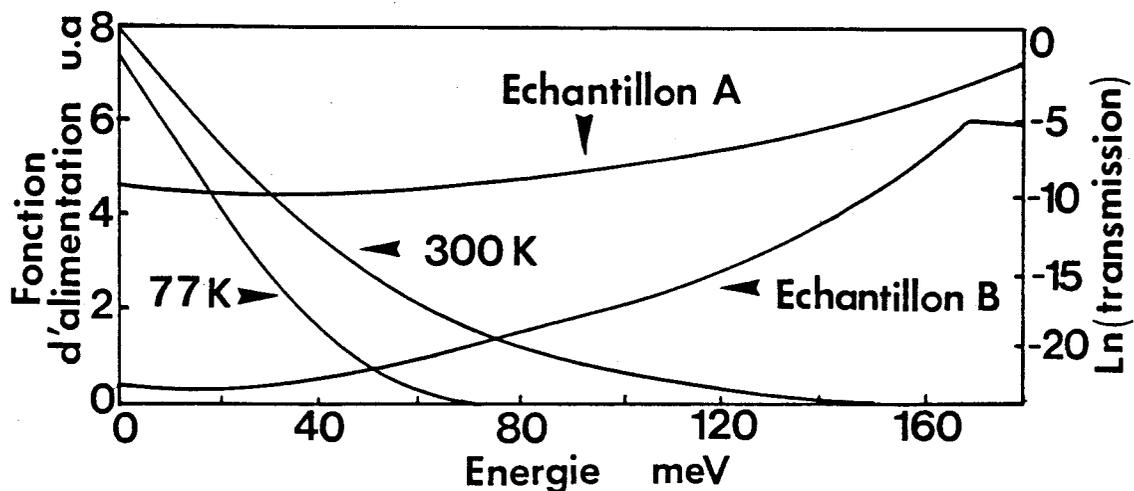


Figure 1.8 : Fonctions d'alimentation à 300 K et 77 K et probabilités de transmission correspondant aux courants vallées pour les structures A et B en fonction de l'énergie longitudinale.

A partir de ces constatations, on peut proposer une estimation de la température critique θ_c d'existence de la RDN en supposant que le courant vallée est dominé par la composante tunnel du courant. Pour valider cette hypothèse, nous avons tracé figure 1.7 la composante de courant thermoionique obtenue en ne comptabilisant que le courant calculé pour des énergies supérieures à la hauteur de la première barrière côté émetteur. Cette dernière est toujours inférieure au courant vallée d'au moins un ordre de grandeur ; son influence est donc secondaire. Ainsi, quand l'augmentation de la probabilité de passage par effet tunnel en fonction de l'énergie ne peut plus être contrebalancée par la décroissance de la fonction de distribution en énergie, la densité de courant vallée augmente très rapidement.

En approximant les variations de $T(E_z, V_C)$ et $F(E_z, V_C)$ par des fonctions exponentielles, on montre [20] qu'il est possible d'obtenir une estimation de θ_c . Nous obtenons :

$$\theta_C = \frac{1}{k_B} \frac{\hbar}{d} \sqrt{\frac{\Delta E_C}{2m_b^*}} ; d = L_{Bg} + L_{Bd} \quad (1.4)$$

avec ΔE_C la hauteur de barrière, m_b^* la masse effective de barrière, L_{Bg} et L_{Bd} les largeurs de barrières gauche et droite. Cette équation donne $\theta_c \simeq 200$ K pour $L_B = 10$ nm et 390 K pour $L_B = 5$ nm (avec $L_B = L_{Bg} = L_{Bd}$).

1.4.2 Les limites de l'approche cohérente

Nous venons de voir que l'approche cohérente permet d'obtenir des renseignements précieux sur les valeurs de courant pic mises en jeu ainsi que sur la température pour laquelle l'effet de résistance différentielle négative disparaît.

Cependant des désaccords importants subsistent principalement sur les rapports courant pic sur courant vallée, l'évolution de la composante de courant pic aux basses températures, les tensions de seuil.

Deux effets physiques, négligés jusqu'alors, peuvent être à l'origine de ces différences :

- D'une part, ces structures intègrent des espaceurs de part et d'autre de la zone active. Il se forme alors une zone d'accumulation et une zone de déplétion en amont et en aval de la double barrière.
- D'autre part, ces simulations ne tiennent compte en aucun cas des interactions qui peuvent aider ou perturber le passage des électrons par effet tunnel.

Nous allons maintenant inclure ces phénomènes dans les calculs.

1.5 Zone d'accumulation

1.5.1 Mise en oeuvre

1.5.1.1 Position du problème

Le fait d'insérer des espaceurs au cours de la croissance des diodes tunnel résonnant se traduit par plusieurs effets au niveau du collecteur et de l'émetteur.

Dans la région collecteur, la formation de la zone de déplétion peut être, dans une première approche, prise en compte à partir de la résolution de l'équation de Poisson unidimensionnelle en négligeant toute charge libre. Avec cette hypothèse, l'intégration de cette équation est alors immédiate et conduit à une tension supplémentaire résultant de la chute du champ électrique.

Dans la région amont (zone émetteur), deux phénomènes sont à prendre en compte. Tout d'abord, il y a la diffusion des porteurs des zones servant de réservoir électronique vers l'espaceur. Ensuite, du fait que la double barrière bloque partiellement les électrons, il se forme près de la barrière une zone d'accumulation. Ces effets, difficiles à modéliser, sont certainement les plus importants pour le transport électronique.

1.5.1.2 Formalisme

La difficulté de la modélisation de l'espaceur vient du traitement auto-cohérent du potentiel électrostatique résultant de la charge libre. Plusieurs approches théoriques ont été proposées pour traiter ces problèmes de réaction de charge d'espace dans les composants à tunnel résonnant. Des résultats numériques ont été proposés, dans lesquels le transport quantique est considéré en termes de Fonctions de Wigner pour étudier les

états hors équilibre [21] [22]. Néanmoins, comme l'a clairement démontré Frensley [22], les interactions sur phonons dans l'espace doivent être incluses dans les simulations pour obtenir des variations de potentiel physiquement acceptables. Dans ce dernier cas, la courbure de bande est trouvée similaire à celle calculée par une approche de type Thomas-Fermi, largement utilisée par ailleurs [23] [24] [25].

Dans ce travail, nous avons développé une méthode de calcul auto-cohérent du potentiel vu par les électrons dans l'émetteur dans l'approximation Thomas-Fermi [26]. Par ailleurs nous avons formulé les hypothèses suivantes :

- le niveau de Fermi est supposé constant dans l'ensemble de la zone émetteur ;
- la zone d'accumulation est modélisée en absence de passage de courant ;
- les processus de diffusion entre les zones fortement dopées et faiblement dopées sont calculés à l'équilibre.

L'enchaînement des séquences de calcul est le suivant :

- Pour une valeur de champ électrique donnée à l'interface, on estime une valeur du potentiel en ce point.
- La résolution de l'Intégrale de Fermi nous permet, en fonction de la différence de valeur entre ce potentiel et le niveau de Fermi, de déterminer la concentration locale de porteurs $n(z)$:

$$n(z) = \frac{\sqrt{2}}{\pi^2} \left(\frac{m^*}{\hbar^2} \right)^{3/2} \int_{E_c}^{\infty} (E - E_C(z))^{1/2} \cdot \frac{1}{1 + \exp \frac{E_C(z) - E_F}{kT}} dE \quad (1.5)$$

- Nous calculons alors, en résolvant l'équation de Poisson compte tenu du dopage, le champ électrique au pas spatial voisin.
- En intégrant une nouvelle fois l'équation de Poisson, une nouvelle valeur de tension est déduite en ce nouveau point.

Si la valeur de tension initiale est mal choisie, on n'arrive pas à écranter le champ électrique et à retrouver une densité de porteurs libres équivalente à la concentration d'impuretés de la zone considérée (cas de divergence). Alors une nouvelle valeur de

potentiel, supérieure ou inférieure à la précédente, est choisie (en général par dichotomie entre deux valeurs extrêmes) et l'on répète l'ensemble de la procédure. Pratiquement, cet algorithme est appliqué à la fois pour traiter la diffusion $n^+ - n$ (double auto-cohérence sur le champ électrique et le potentiel à l'homojonction) ainsi que pour le calcul de la zone d'accumulation en amont de la première barrière.

Généralement, un pas spatial de 0.1 nm est utilisé et la procédure converge après quelques itérations. Un exemple typique de résultat obtenu par ce calcul est donné sur la figure 1.10a qui montre les variations spatiales de la bande de conduction altérée par les processus de diffusion et d'accumulation des porteurs. On constate que ceci revient à inclure une troisième barrière électrostatique. Elle résulte de l'alignement des niveaux de Fermi entre les régions n^+ et n et de la formation d'un puits quasi-triangulaire à la première interface de la double barrière. La profondeur et l'ouverture de ce dernier puits dépendent de la température et du champ électrique imposés dans la zone active.

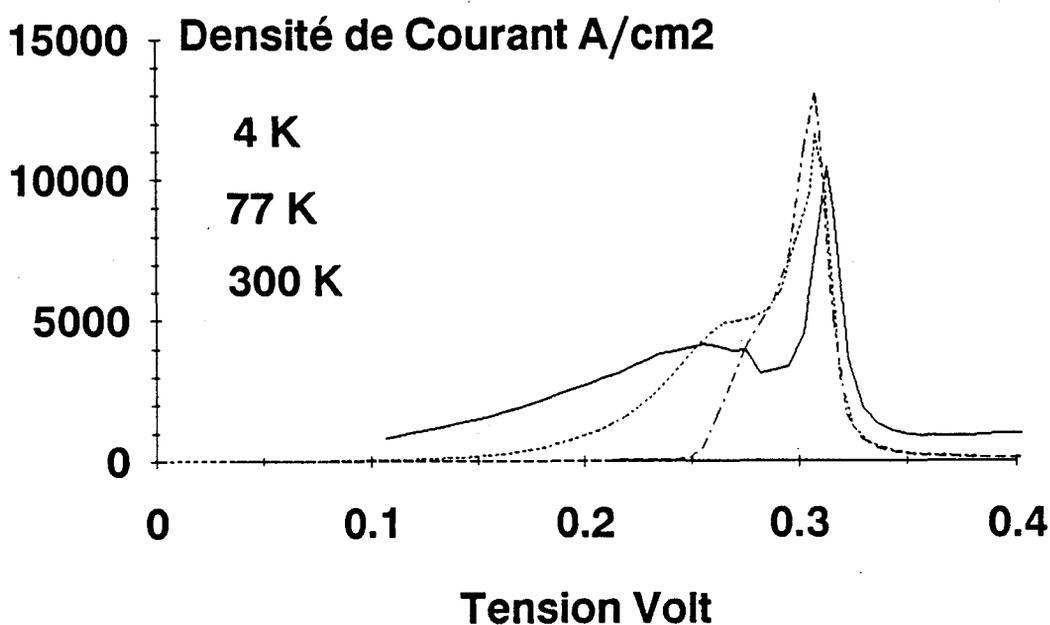


Figure 1.9 : Caractéristiques courant-tension théoriques à 300 K, 77 K et 4 K pour l'échantillon A, lorsque les effets de réaction de charge d'espace dans l'émetteur sont introduits dans les simulations.

1.5.2 Calcul des caractéristiques de conduction avec zone d'accumulation

1.5.2.1 Principe

Les variations du potentiel vu par les électrons une fois calculées, il nous faut maintenant déterminer les probabilités de transmission en fonction de l'énergie longitudinale. En pratique, la simulation Runge-Kutta décrite précédemment est parfaitement adaptable à cette situation dans la mesure où l'on résout directement l'équation de Schrödinger pour un potentiel quelconque.

L'accès à l'information de courant est calqué sur la procédure décrite au paragraphe 1.2.2, en supposant que la fonction de distribution en énergie est fixée par les zones n^+ tridimensionnelles. Il convient enfin d'ajouter aux variations de potentiel d'émetteur et de double barrière celle correspondant à la zone de déplétion en aval.

1.5.2.2 Simulation $I - V$: confrontation théorie-expérience

Les simulations présentées sur la figure 1.9 sont calculées pour la structure A, barrières et puits de 5 nm, avec une zone d'espaceur dopée à 2.10^{16}cm^{-3} et une zone réservoir dopée à $2 \cdot 10^{18} \text{cm}^{-3}$ pour les trois températures de 4 K, 77 K et 300 K.

Le résultat le plus marquant de la figure 1.9 est l'existence de deux pics de courant, notamment à 300 K. A cette température les valeurs de densités de courant calculées, correspondant aux tensions de 0.26V et 0.32V, sont respectivement $4 \text{ kA} \cdot \text{cm}^{-2}$ et $10.5 \text{ kA} \cdot \text{cm}^{-2}$. Ces valeurs sont en bon accord avec celles relevées sur la figure 1.3a pour des tensions similaires ($4.3 \text{ kA} \cdot \text{cm}^{-2}$ et $13.5 \text{ kA} \cdot \text{cm}^{-2}$). Le premier pic observé à 300 K tend à s'estomper et même à disparaître quand la température est abaissée jusqu'à 4 K, en accord avec les observations expérimentales [15].

Par ailleurs on constate que la valeur du courant pic augmente consécutivement à un abaissement de la température (Θ). La variation de la densité de courant pic (J_p) est de l'ordre de 20% entre 77 K et 300 K, en accord avec les variations relevées expérimentalement reportées figure 1.5a.

Cette évolution de J_p avec la température met en jeu plusieurs effets qui interagissent. En premier lieu, la décroissance de Θ entraîne une variation significative du niveau de Fermi dans la zone faiblement dopée. Initialement dans la bande interdite à 300 K, il se situe au-dessus de la bande de conduction à 77 K. Ceci entraîne une diminution de la hauteur effective de la barrière de potentiel, vue par les électrons injectés. Cet effet est minimisé cependant par l'extension de la queue de distribution en énergie des porteurs incidents quand Θ augmente. En second lieu, on constate que toute modification de la profondeur du puits quasi-triangulaire se répercute sur la transparence de la première barrière. En revanche à très haute température, comme le montrent simulations et données expérimentales, la seule extension de la queue de distribution des porteurs générés par le réservoir au-dessus de niveau de Fermi suffit à renverser la tendance, permettant alors à J_p d'augmenter.

Avant d'interpréter ces résultats en termes de transmission, il est à noter que les valeurs des états de faible conduction sont toujours sous estimées. Tout d'abord, ceci peut être imputable au fait que les interactions sont encore ignorées à ce stade du travail. Ensuite, ceci peut être dû au degré de simplification introduit dans la méthode. En particulier, par l'utilisation d'un modèle de Thomas-Fermi pour décrire l'accumulation de charges, il est clair que nous avons tendance à surestimer la densité de porteurs près de l'interface espaceur - première barrière par rapport à un modèle entièrement quantique. Par conséquent la barrière formée par la réaction de charge d'espace est, elle aussi, surévaluée. Un moyen de tester la sensibilité de la méthode est de faire varier cette hauteur de barrière en modulant le dopage dans l'espaceur. Les simulations menées pour des dopages compris entre 10^{16}cm^{-3} et 10^{17}cm^{-3} , pour une même longueur d'espaceur [15], montrent que l'interprétation qui va suivre reste valable.

1.5.2.3 Interprétation

Pour comprendre l'origine de ce double mécanisme de conduction tunnel, nous allons nous concentrer sur deux cas particuliers montrant les phénomènes impliqués et leur forte dépendance en température.

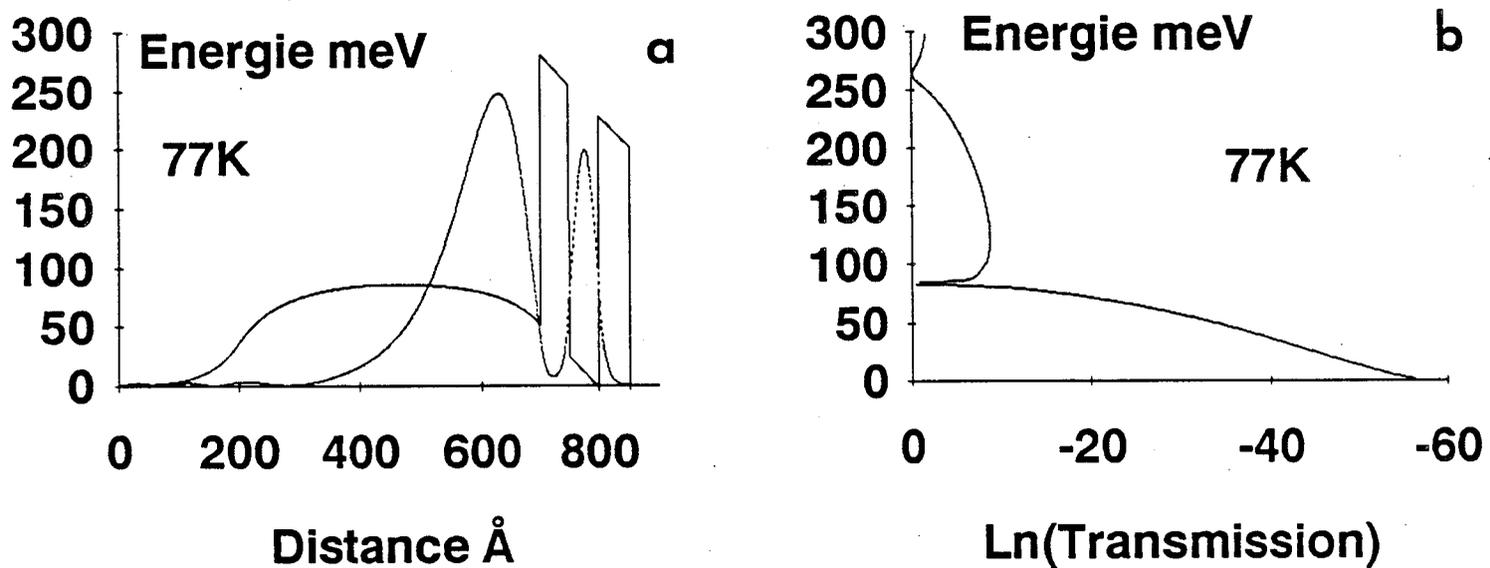


Figure 1.10 : Profil de bande de conduction (1.10a) et probabilités de transmission (1.10b) pour une tension correspondant au courant pic à 77 K pour l'échantillon A. La fonction d'onde calculée pour l'énergie résonnante $\epsilon = 84.3$ meV est aussi reportée.

Nous avons représenté, figure 1.10a, le diagramme de bande calculé de manière auto-cohérente pour une tension appliquée qui correspond à la densité de courant pic à 77 K. Le niveau de Fermi est tracé en pointillé. La fonction d'onde, en fonction de la distance correspondant à l'énergie résonnante de 84.3 meV révélée par le pic de transmission sur la figure 1.10b, est aussi représentée. Le calcul numérique montre que le pic de courant est obtenu pour une énergie résonnante bien au-dessus de la bande de conduction à l'interface espaceur-double barrière. L'effet de résistance différentielle négative apparaît immédiatement après le croisement du premier niveau quantifié de la zone d'accumulation et du premier niveau quasi-lié du puits. La fonction d'onde, donc la probabilité de présence des électrons, est alors répartie entre les deux puits. Ces résultats théoriques sont en accord avec l'analyse de Thomas et al [27].

En conséquence, on observe l'existence d'une bande d'énergie quasiment interdite aux porteurs incidents en dessous du niveau de la zone d'accumulation. D'un point de vue pratique, ceci montre que la chute du potentiel dans le puits quasi-triangulaire augmente la transparence de la barrière gauche mais n'entraîne pas d'élargissement de la gamme d'énergie à partir de laquelle les électrons peuvent traverser la structure.

Dès lors que l'échelle d'énergie des électrons qui participent à la conduction est définie, considérons le cas où il existe deux chemins privilégiés de passage par effet tunnel pour les porteurs incidents, à température ambiante. Nous avons pour cela tracé, figures 1.11a et 1.11b, le diagramme d'énergie ainsi que les probabilités de transmission pour une tension de polarisation de 0.26V. Cette valeur correspond à la déformation basse tension de la caractéristique courant-tension de la diode de type A (figure 1.3a). Deux pics de transmission sont mis en évidence :

- Le plus important, pour une énergie de 115.3 meV, est obtenu pour des électrons provenant des états étendus au-dessus de la barrière émetteur formée par la réaction de charge d'espace. Quand le niveau quasi-lié rencontre la queue de distribution des porteurs, une forte augmentation de la transmission est observée. Elle est suivie d'une diminution, que l'on peut attribuer à des interférences destructives de l'onde associée à un électron situé dans la zone d'accumulation. Ceci correspond au premier chemin privilégié pour les électrons. Puisque cette composante de courant fait intervenir des électrons situés à des énergies supérieures au niveau de Fermi de la zone n^+ , cet effet est d'autant plus important que la température est élevée. A basse température, ce type de conduction devient mineur, comme le montrent théorie (figure 1.9) et expérience (figure 1.3b).

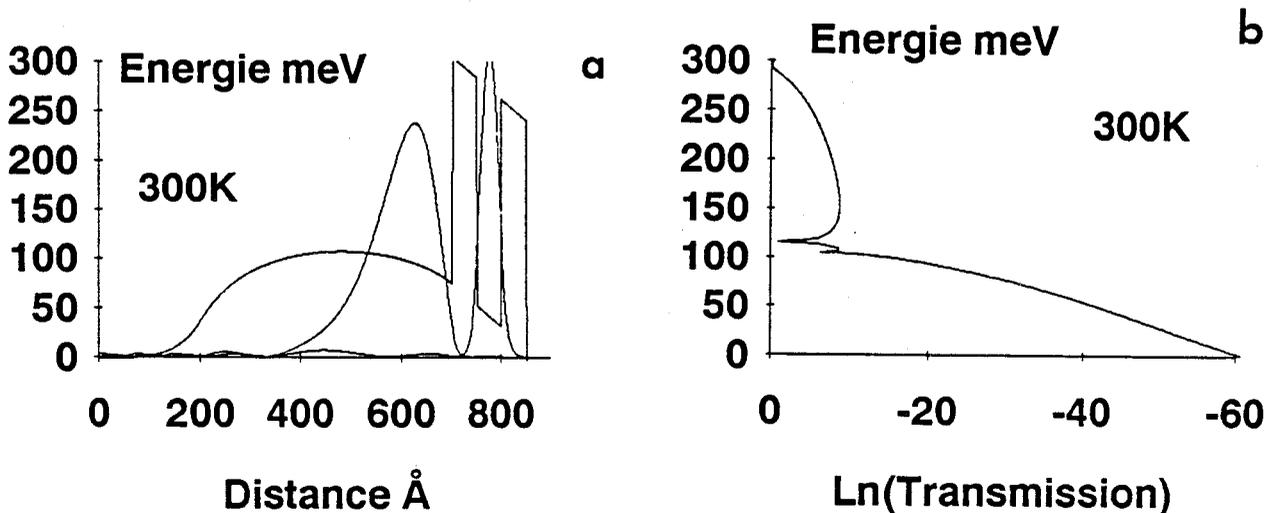


Figure 1.11 : Profil de bande de conduction (1.11a) et probabilités de transmission (1.11b) correspondant au premier pic de courant calculé à 300 K pour l'échantillon A. Les fonctions d'ondes sont calculées pour les deux énergies résonnantes $\epsilon_1 = 104.25$ meV (---) et $\epsilon_2 = 115.3$ meV (-----).

- Le second chemin possible est obtenu pour des tensions plus élevées, lorsque les niveaux du puits quantique d'une part et de la zone d'accumulation d'autre part s'alignent. Ceci est mis en évidence par la présence du pic de transmission à 104.25meV sur la figure 1.11b.

En résumé, cette analyse montre que la barrière, formée par la diffusion des porteurs du réservoir vers l'espaceur dans l'émetteur, joue le rôle d'un filtre énergétique, en découplant la fonction de distribution tridimensionnelle initiale en deux composantes de porteurs incidents.

Pour être complet au niveau de l'influence des variations de potentiel dues aux transferts de charge, il faudrait considérer, dans le modèle, les problèmes liés aux charges piégées dans le puits et ceux liés aux charges injectées dans l'espaceur en aval de la double barrière. Ces effets pourraient modifier quantitativement les phénomènes décrits dans ce paragraphe. En première analyse cependant, au vu des structures étudiées, des densités de courant obtenues et des niveaux de dopage, ces effets peuvent être considérés comme du second ordre. L'étude de structures dissymétriques, où l'on cherche soit à renforcer le piégeage des charges dans le puits soit à obtenir de fortes densités de courant, nécessiterait sans aucun doute l'introduction dans les procédures numériques de ces effets supplémentaires. Un effort dans ce sens est actuellement mené au sein de l'équipe.

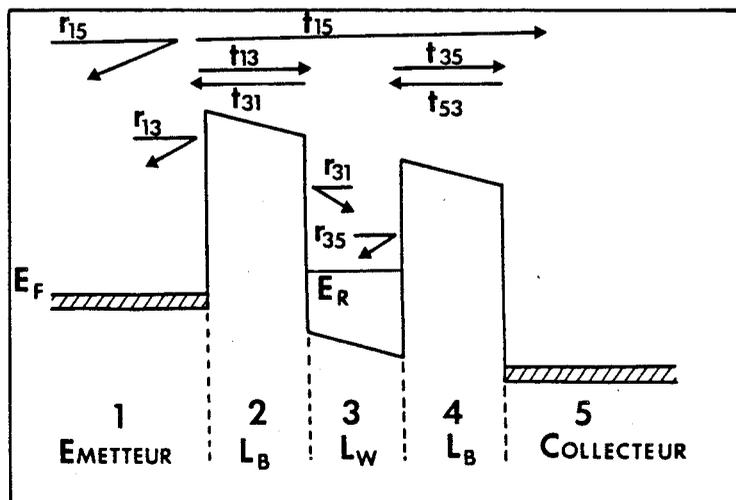


Figure 1.12 : Profil de potentiel schématisé d'une diode double barrière avec les coefficients de transmission et de réflexion associés.

1.6 Prise en compte des interactions

1.6.1 Analyse phénoménologique

1.6.1.1 Modèle

L'approche théorique, afin d'inclure les effets dus au transport incohérent des porteurs dans notre modèle, est basée sur le formalisme présenté par Jonson et Grincwajg [28]. Une autre analyse similaire, permettant de décrire l'importance relative des passages par effet tunnel cohérent et incohérent, a été proposée par Büttiker [29] [30].

Pour cela nous n'allons plus considérer le coefficient de transmission global de la structure, mais le décomposer en coefficient de transmission et de réflexion en amplitude et en phase, région par région, comme le montre la figure 1.12. Pour accéder aux coefficients de transmission t_{15} et de réflexion r_{15} , il suffit de traduire la construction interférentielle de la fonction d'onde des électrons. Mathématiquement cela se met sous la forme de deux suites géométriques de raison complexe $r_{35}r_{31}$:

$$\begin{aligned}
 t_{15} &= t_{13}t_{35} + t_{13}r_{35}r_{31}t_{35} \\
 &+ t_{13}(r_{35}r_{31})^2t_{35} + \dots \\
 &\dots + t_{13}(r_{35}r_{31})^nt_{35} + \dots
 \end{aligned} \tag{1.6}$$

et

$$\begin{aligned}
 r_{15} &= r_{13} + t_{13}r_{35}t_{31} + t_{13}r_{35}r_{31}r_{35}t_{31} \\
 &+ t_{13}r_{35}(r_{31}r_{35})^2t_{31} + \dots \\
 &+ t_{13}r_{35}(r_{31}r_{35})^nt_{31} + \dots
 \end{aligned} \tag{1.7}$$

En sommant à l'infini ces termes, on obtient :

$$t_{15} = t_{13} t_{35} \sum_{i=0}^{\infty} (r_{35} r_{31})^i = \frac{t_{13} t_{35}}{1 - r_{35} r_{31}} \quad (1.8)$$

et

$$r_{15} = r_{13} + t_{13} r_{35} t_{31} \sum_{i=0}^{\infty} (r_{35} r_{31})^i = r_{13} + \frac{t_{13} r_{35} t_{31}}{1 - r_{35} r_{31}} \quad (1.9)$$

Les coefficients de transmission et de réflexion en puissance, que nous appellerons T_{15} et R_{15} , sont définis dans l'approximation cohérente par :

$$T_{15} = |t_{15}|^2 \frac{k_5}{k_1} \frac{m_1^*}{m_5^*} \quad (1.10)$$

et

$$R_{15} = |r_{15}|^2 \quad (1.11)$$

La prise en compte d'une perte de cohérence partielle est effectuée en introduisant le coefficient phénoménologique γ , compris entre 0 et 1, qui va permettre de pondérer la population électronique qui franchit la double barrière de manière cohérente. Pratiquement ceci revient à considérer que, au cours d'un aller-retour dans le puits, $\gamma r_{31} r_{35}$ électrons ne voient pas leur phase perturbée par une interaction.

Les coefficients de transmission et de réflexion cohérents ont alors pour expression :

$$r_{15}^{coh} = r_{13} + \frac{t_{13} \gamma r_{35} t_{31}}{1 - \gamma r_{35} r_{31}} \quad (1.12)$$

$$t_{15}^{coh} = \frac{t_{13} t_{35}}{1 - \gamma r_{31} r_{35}} \quad (1.13)$$

Notons que le cas $\gamma = 1$ représenterait un transport purement cohérent.

Le coefficient de transmission global de la structure est alors composé de deux parties :

- une partie cohérente comme précédemment :

$$T_{15}^{coh} = |t_{15}^{coh}|^2 \frac{k_5}{k_1} \frac{m_1^*}{m_5^*} \quad (1.14)$$

- une partie incohérente, qui redistribue l'ensemble des porteurs ayant perdu leur mémoire de phase en fonction des transmissions élémentaires des deux barrières T_{13} et T_{35} , avec :

$$T_{ij} = |t_{ij}|^2 \frac{k_j}{k_i} \frac{m_i^*}{m_j^*} \quad (1.15)$$

On peut alors écrire :

$$T_{15}^{inc} = (1 - R_{15}^{coh} - T_{15}^{coh}) \frac{T_{35}}{T_{13} + T_{35}} \quad (1.16)$$

La transmission totale est donc :

$$T_{15} = T_{15}^{coh} + T_{15}^{inc} \quad (1.17)$$

Le coefficient γ peut être relié à la longueur de cohérence ξ par l'expression suivante :

$$\gamma = \exp(-2d_{eff}/\xi) \text{ avec } \xi = \tau_i \cdot v \quad (1.18)$$

d_{eff} est la demi-longueur d'onde des électrons à l'énergie résonnante, τ_i le taux d'interaction moyen des électrons dans le puits et v la vitesse de groupe des porteurs au passage de la double barrière à l'énergie résonnante.

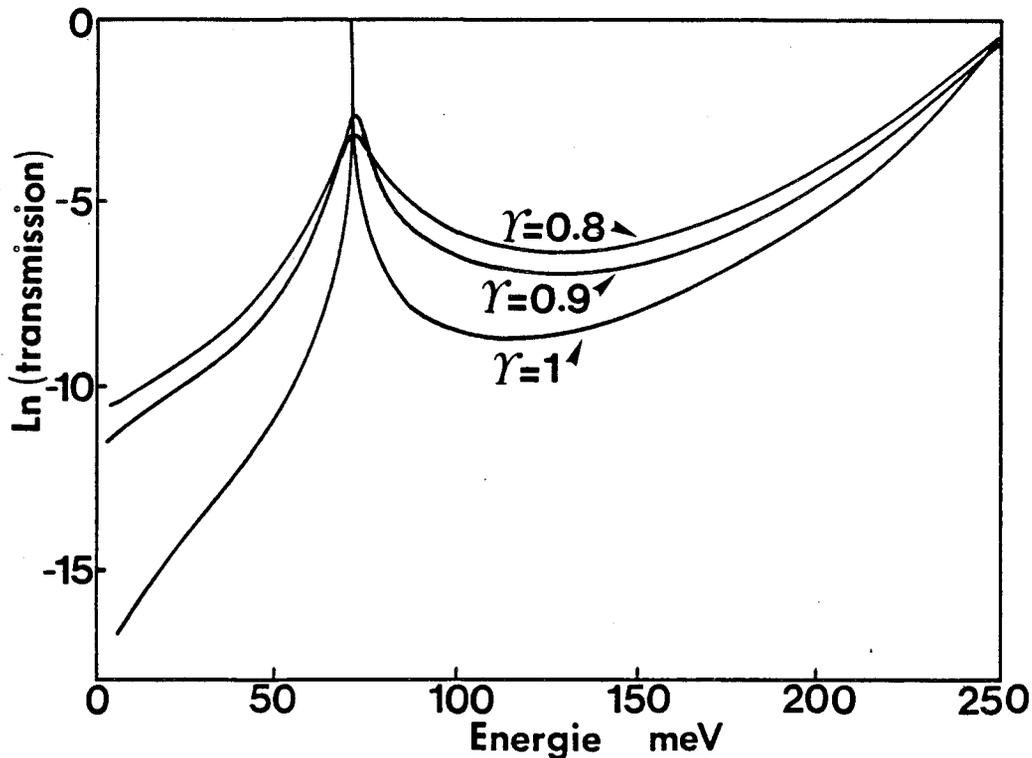


Figure 1.13 : Courbes de transmission théoriques en fonction de l'énergie longitudinale pour différentes valeurs de γ pour la structure de type A.

1.6.1.2 Résultats numériques

Sur la figure 1.13 sont tracées les courbes de transmission en fonction de l'énergie longitudinale pour différentes valeurs du paramètre γ . Ces résultats sont calculés pour la structure A. On observe une décroissance du pic de transmission et un élargissement de ce pic qui s'accroissent en augmentant le degré d'incohérence. Ceci se traduit par une réévaluation importante des transmissions non résonnantes. Ainsi le contraste de transmission (transmission résonnante divisée par transmission non résonnante) est diminué à mesure qu'augmente la part accordée au processus de destruction de la cohérence de phase des porteurs dans le puits. Ces résultats sont en accord avec l'analyse de Büttiker [29]. Avec un modèle analytique différent, cet auteur conclut que les processus inélastiques impliqués dans la destruction de cohérence de phase mènent à un élargissement de la transmission résonnante et, parallèlement, à un élargissement de la densité d'états du puits.

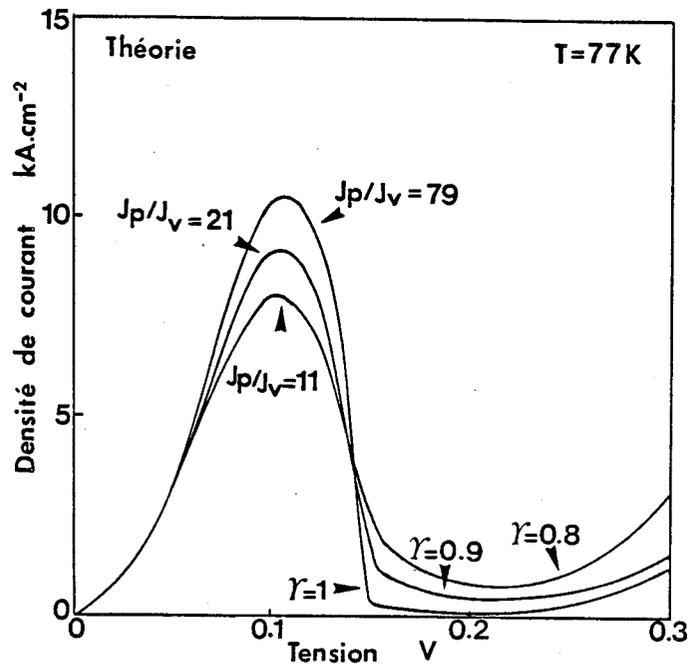


Figure 1.14 : Caractéristiques courant-tension calculées pour différentes valeurs de γ pour une structure de type A en absence d'espaces.

Il est à noter cependant que la perte de cohérence au niveau de la phase de l'onde n'implique pas forcément un choc inélastique. Ainsi toute interaction, pour laquelle l'énergie des porteurs est conservée tout en entraînant un changement de k_x , peut être théoriquement décrite par l'approche que nous venons de développer. Nous essaierons, dans le paragraphe suivant, de cerner les diverses causes à l'origine de la destruction de phase.

Si l'on s'intéresse maintenant aux caractéristiques $I - V$, on obtient les résultats reportés sur la figure 1.14. Ces calculs sont menés pour un système double barrière puits isolé (aucun espaceur n'est inclus dans la simulation) à la température de 77 K.

On note deux effets marquants lorsqu'on augmente le degré d'incohérence :

- La densité de courant pic diminue légèrement, de l'ordre de 20% entre $\gamma = 1$ et $\gamma = 0.8$.
- En revanche la densité de courant vallée est très fortement réévaluée ; elle est multipliée par 9 entre $\gamma = 1$ et $\gamma = 0.8$. Ceci est dû, sans conteste, à l'augmentation des contributions hors résonance de la transmission, effet discuté précédemment ;

ce qui a pour conséquence de diminuer le rapport courant pic sur courant vallée. Pour une valeur de γ égale à 0.8, le PTVR calculé est de 11. Cette valeur est relativement proche des valeurs expérimentales (6 à 7 pour la même température) pour une structure qui, rappelons-le, possède des espaceurs non inclus dans ces calculs.

1.6.2 Détermination expérimentale des temps de cohérence - Etude en température

Pour la structure de type A, un accord satisfaisant entre la théorie et l'expérience est obtenu dans la gamme de température 77-400 K pour les trois paramètres (courant pic, courant vallée, PTVR) pour une valeur de $\gamma = 0.8$. Ces résultats sont présentés figures 1.15a et 1.15b.

Cette valeur γ peut être reliée à un temps moyen d'interaction τ_i à partir de l'équation (1.16). Celui-ci dans le cas présent est de l'ordre de 0.1 ps. Il est intéressant de comparer cette valeur au temps de vie du niveau quasi-lié du puits, que l'on peut extraire de la courbe de transmission par l'expression $\tau = \hbar/\Gamma$ avec Γ la largeur à mi-hauteur du pic de transmission. Ce dernier vaut, pour la structure A, 2 ps. Cette différence, d'un ordre de grandeur, montre la nécessité d'inclure les processus incohérents dans nos simulations pour traduire au mieux les évolutions expérimentales.

Deux remarques supplémentaires peuvent être faites au vu des résultats de la figure 1.15 :

- Tout d'abord, l'introduction des interactions n'a pas d'influence notable sur la température à laquelle disparaît la résistance différentielle négative. Ceci permet de penser que la disparition de la RDN est dominée par les variations de la fonction de distribution en énergie en fonction de la température.
- Ensuite, un accord relativement satisfaisant dans l'ensemble de la gamme de température considérée est obtenu en gardant le facteur γ constant. De la même façon cette faible sensibilité de γ avec la température a été retrouvée lors de l'étude de la structure B, où une valeur proche de 0.9 nous a permis de décrire les évolutions expérimentales.

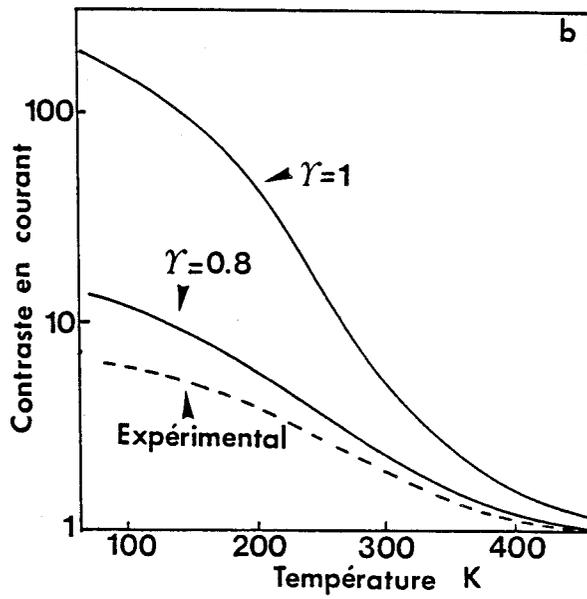
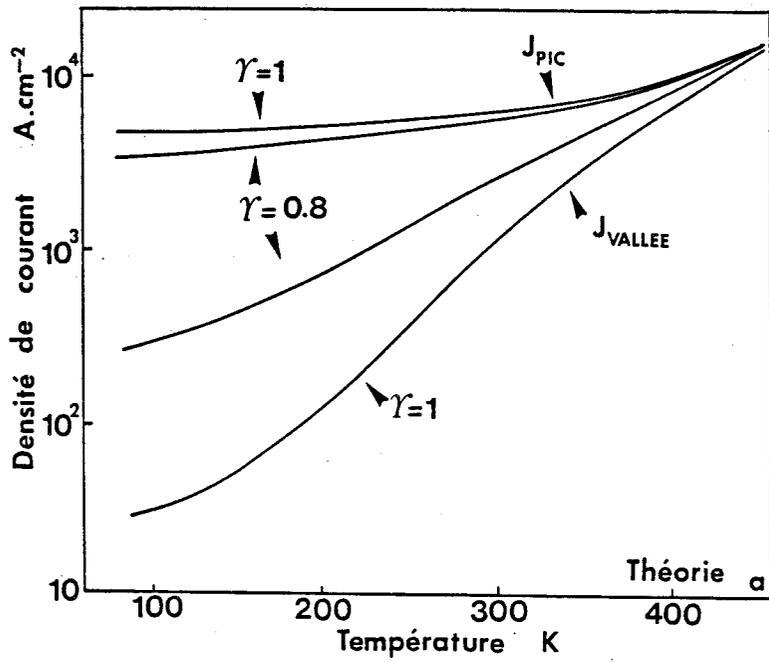


Figure 1.15 : Variations théoriques des densités de courant pic et vallée en fonction de la température pour $\gamma = 1$ et $\gamma = 0.8$ (Structure de type A) (1.15a). Evolutions expérimentale (-----) et théoriques (—) du rapport courant pic sur courant vallée en fonction de la température (1.15b).

Le modèle phénoménologique de Jonson et Grincwajg, s'il permet de donner des ordres de grandeur de la fréquence de la destruction de phase, ne nous permet pas, par contre, de considérer l'importance relative des différentes interactions.

Si l'on s'interroge sur la nature physique des interactions impliquées dans le processus tunnel, il faut alors déterminer directement la fréquence des interactions prises séparément. On trouve dans la littérature un certain nombre de travaux traitant ces aspects [31] [32] [33].

Avant de détailler les différentes interactions susceptibles d'aider le passage de la double barrière par effet tunnel, il nous semble nécessaire d'insister sur l'importance des conditions expérimentales et du choix des structures. Ainsi, actuellement, il semble difficile de tirer des conclusions générales sur la prédominance de l'une ou l'autre des interactions. Néanmoins, au vu des travaux basés sur une approche directe de ces processus, il nous semble que trois types dominent : ce sont, respectivement, l'émission de phonons optiques, l'interaction sur impuretés et les fluctuations d'interfaces.

- **EMISSION DE PHONONS** : Rappelons brièvement le principe de l'émission de phonons comme aide au processus tunnel, que l'on a mis en évidence figure 1.4b sur la structure B. Lorsque la diode est polarisée en courant vallée, un électron côté émetteur, dont l'énergie n'est pas initialement égale à celle du niveau quantifié du puits, peut en émettant un phonon être en résonance avec le niveau du puits ; ce processus intervient lorsque l'écart entre le niveau quasi-lié du puits et l'énergie initiale de l'électron correspond à l'énergie d'un phonon $\hbar\omega$. Il en résulte que ces phénomènes sont observés, soit sur des structures où le contact émetteur est très faiblement dopé (dans ce cas, le niveau de Fermi qui fixe la limite supérieure de la fonction de distribution à basse température est inférieur à $\hbar\omega$), soit sur des structures intégrant des zones de type espaceur importantes (dans ce cas, le potentiel de diffusion permet de restreindre la plage d'énergie des électrons incidents). L'importance de ces phénomènes de tunnel assisté par phonons a été mise en évidence expérimentalement par observation directe de la caractéristique $I - V$ et par étude sous champ magnétique. Ces études ont montré que les phonons impliqués correspondent aux modes de vibration des barrières. Ceci a été démontré, sans ambiguïté, pour des structures AlInAs/GaInAs [34]. Les tensions de polarisation où apparaissent de façon claire ces effets sont celles pour lesquelles, dans une hypothèse purement cohérente, le système serait dans un état de très faible conduction.

- **INTERACTION SUR IMPURETES** : Très tôt l'interaction sur impuretés fut considérée comme une source de perturbations dans les mécanismes de conduction par effet tunnel. Ainsi, pour la plupart des structures épitaxiées, la zone active est non intentionnellement dopée et elle est insérée entre deux zones de faible épaisseur, elles aussi non dopées. On dispose actuellement de relativement peu d'informations sur l'influence des interactions sur impuretés si ce n'est la publication récente de Cheng et Harris [35]. Dans le but d'étudier leur influence, ces auteurs ont en effet dopé intentionnellement les barrières avec des niveaux de dopage allant jusqu'à $3.0 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$. Leur conclusion est que l'on n'observe une dégradation du rapport pic sur vallée que pour des valeurs de dopage élevées pour des structures AsGa / AlAs avec des épaisseurs de barrières de 2.5 nm. Au vu de ces résultats, pour les structures que nous étudions, il semble que cet effet soit du second ordre.

- **FLUCTUATIONS D'INTERFACES** : Il est clair que, en l'état actuel de la technologie, l'image d'une interface bien définie est utopique. En effet il se forme, lors de la croissance, des îlots que l'on assimile à des rugosités d'interfaces. L'une des conséquences directes est que la largeur du puits quantique est localement modifiée. Au niveau de l'énergie de confinement, ceci se traduit par un élargissement de la fenêtre de transmission. L'autre conséquence est qu'un électron interagissant avec une interface modifie sa composante k_z (dans la direction de croissance), tout en conservant son énergie totale. Cela revient à introduire des perturbations inélastiques dans la direction perpendiculaire aux couches, alors que l'interaction est globalement élastique.

L'importance de ces fluctuations d'interfaces a été étudiée par Guéret et al [36] [37] par un relevé systématique des caractéristiques de conduction de composants dont les largeurs de barrières varient entre 1.5 nm et 31 nm, en modifiant les conditions de croissance (désorientation du substrat, interruptions de croissance, . . .). Ces travaux expérimentaux ont montré l'importance primordiale de ces phénomènes, qui tendent à réduire considérablement les rapports courant pic sur courant vallée.

De plus, ces interactions semblent intervenir essentiellement en régime de résistance différentielle négative [32] et sont peu sensibles à la température. Par conséquent il est sûr que l'amélioration des performances statiques des diodes à tunnel résonnant passe par une meilleure maîtrise de la croissance des interfaces. Un certain nombre d'informations sur l'optimisation des structures ont été publiées

dans la littérature. Citons, par exemple, la mise en évidence de l'influence des interfaces directes et inverses [38].

Au vu de cette discussion, il semble donc bien que toute interaction contribue à mettre en résonance des états d'énergie initialement hors résonance. C'est ce que traduit l'élargissement de la transmission que nous avons calculé. Par ailleurs nous avons vu que le facteur γ , qui traduit l'incohérence partielle des porteurs au passage de la double barrière, se révèle relativement indépendant de la température. Ceci permet de penser que ce sont probablement les désordres d'interfaces qui sont à l'origine des diminutions notables des rapports courant pic sur courant vallée que nous avons observés. Pour aller plus loin dans les conclusions, il nous semble nécessaire d'effectuer une étude plus complète en modifiant volontairement la qualité des interfaces.

1.7 Conclusion

Nous avons présenté, dans ce chapitre, des mesures électriques sur des structures double barrière AsGa / AlGaAs pour une large gamme de température. De telles études nous ont procuré de nombreuses informations sur la manière dont les électrons sont issus de l'émetteur avant d'interagir avec l'hétérostructure. Les principales conclusions sont les suivantes :

- (i) Une approche cohérente du processus tunnel permet de prévoir la température à laquelle l'effet de résistance différentielle négative disparaît. Cette disparition est le résultat de l'élargissement de la fonction de distribution en énergie des électrons, qui provoque une augmentation très rapide de la part hors-résonance du courant avec la température.
- (ii) Quand de larges espaceurs peu dopés sont épitaxiés en amont de la double barrière, une barrière électrostatique se forme par réaction de charge d'espace, qui divise la population électronique issue du réservoir fortement dopé en deux parties, l'une provenant des états étendus de l'espaceur (injection tridimensionnelle), l'autre du niveau quantifié se créant dans la zone d'accumulation (injection bidimensionnelle).
- (iii) L'analyse du courant vallée, toujours supérieur aux prévisions théoriques, suggère la prédominance d'effets dus aux fluctuations d'interfaces par rapport aux interactions intrinsèques de type émission de phonons optiques. Cette conclusion

s'appuie sur l'insensibilité de la longueur de cohérence des électrons dans la gamme de température envisagée.

Sur la base de ces études purement statiques, nous allons à présent considérer l'étude de la double barrière en régime dynamique, afin de mettre en évidence les potentialités fréquentielles de ce type de composant.

Bibliographie

- [1] R. TSU, L. ESAKI
Tunneling in a finite superlattice
Applied Physics Letters 22 (1973) p 562.

- [2] Y. ANDO, T. ITOH
Calculation of transmission tunneling current across arbitrary potential barriers.
Journal of Applied Physics 61 (1987) p 497.

- [3] B. RICCO, M. YA AZBEL
Physics of resonant tunneling - The one dimensional double barrier case.
Physical Review Vol. 29, n°4 (1984) p 1970.

- [4] M.O. VASSEL, J. LEE, H.F. LOCKWOOD
Multibarrier tunneling in $Al_xGa_{1-x}As/GaAs$ heterostructures.
Journal of Applied Physics 54 (1983) p 5206.

- [5] W.R. FRENSLEY
Voir par exemple, Wigner function model of a resonant tunneling semiconductor device.
Phys Rev B Vol. 36, n°3 (1987) p 1570.

- [6] R. THEODOR
Analyse numérique
Ed Masson (1982)

- [7] L. DE SAINT POL
Modélisation de l'effet tunnel résonnant dans les hétérostructures double barrière en vue d'applications analogiques très hautes fréquences.
Thèse Université de Lille (1990).

- [8] O. VANBÉSIEN, R. BOUREGBA, P. MOUNAIX, D. LIPPENS
Temperature dependence of peak to valley current ratio in resonant tunneling double barriers.
Resonant Tunneling in Semiconductors : Physics and Applications - Ed Plenum Press (1990), in the press.
- [9] D. LIPPENS, J.L. LORRIAUX, O. VANBÉSIEN, L. de SAINT POL
Experimental investigations of the effect of inelastic scattering on resonant tunneling.
Inst. Phys. Conf. Ser n°106 Chapter 1 p. 813 (1989).
- [10] V. SADAUNE, D. LIPPENS
Tunnel résonnant dans des hétérostructures AlGaAs à forte concentration d'aluminium.
Journées de la matière condensée, Montpellier (1990).
- [11] S.Y. CHOU, E. WOLAK, J.S. HARRIS
Resonant tunneling of electrons of one or two degrees of freedom.
Appl. Phys. Lett. 52 (1988) p. 657.
- [12] E.E. MENDEZ, W.I. WANG, E. CALLEJA, C.E.T. GONÇALVES DA SILVA
Voir par exemple, Resonant tunneling via X-point states in AlAs-GaAs-AlAs heterostructures.
Appl. Phys. Lett. 50 (1987) p. 1263
- [13] N. VODJDANI, F. CHEVOIR, D. THOMAS, D. COTE, P. BOIS, E. COSTARD, S. DELAITRE
Photoluminescence and space charge distribution in a double barrier diode under operation.
Appl. Phys. Lett. 55 (1989) p. 1528.
- [14] C.I. HUANG, M.J. PAULUS, C.A. BOZADA, S.C. DUDLEY, K.R. EVANS, C.E. STUTZ, R.L. JONES, M.E. CHENEY
AlGaAs/GaAs double barrier diodes with high peak to valley current ratio.
Appl. Phys. Letters 51 (1987) p. 121.
- [15] H. LEROUX, P. MOUNAIX, D. LIPPENS
Investigation of quantum states in the cathode region of resonant tunneling diodes.
Présenté à Gallium Arsenide and Related Compounds. Jersey (1990).

- [16] R. BOUREGBA, O. VANBÉSIEN, L. DE SAINT POL, D. LIPPENS
Al₃Ga₇As/GaAs microwave resonant tunneling oscillator.
Ann telecomm. 45 n°3.4 (1990) p. 184.
- [17] V.J. GOLDMAN, D.C. TSUI, J.E. CUNNINGHAM
Evidence for L.O. phonon-emission-assisted tunneling in double barrier heterostructures.
Phys. Rev. B. 36 (1987) p. 7635.
- [18] F. CHEVOIR, B. VINTER
Calculation of phonon assisted tunneling and valley current in a double barrier diode.
Appl. Phys. Lett. 55 (1989) p. 1859.
- [19] L. EAVES, M.L. LEADBEATER, D.G. HAYES, E.S. ALVES, F.W. SHEARD, G.A. TOOMBS, P.E. SIMMONDS, M.S. SKOLNICK, M. HENINI, O.H. HUGHES.
Electronic and spectroscopic studies of space charge buildup, energy relaxation and magnetically enhanced bistability in resonant tunneling structures.
Solid State Electronics, Vol. 21, n°12 (1989) p. 1101.
- [20] L. de SAINT POL, O. VANBÉSIEN, D. LIPPENS
Estimation of temperature limit for negative differential resistance using resonant tunneling.
Electronic Letters, Vol. 26, n°5 (1990) p. 342.
- [21] N.C. KLUKSDAHL, A.M. KRIMAN, D.K. FERRY, C. RINGHOFER
Self consistent study of the resonant tunneling diode.
Phys. Rev. B 39 (1989) p. 7720.
- [22] W.R. FRENSLEY
Effect of inelastic processes on the self consistent potential in the resonant tunneling diode.
Solid. State Electronics, Vol. 32, n°12 (1989) p. 1235.
- [23] M.A. REED, W.R. FRENSLEY, W.M. DUNCAN, R.J. MATYI, A.C. SEABAUGH, H.L. TSAI
Quantitative resonant tunneling spectroscopy : I-V characteristics of precisely characterized resonant tunneling diodes.
Appl. Phy. Lett. 54 (1989) p. 1256.

- [24] P. CHENG, J.S. HARRIS Jr
Improved design of AlAs/GaAs resonant tunneling diodes.
Appl. Phys. Lett. 56 (1990) p. 1676.
- [25] R.K. MAINS, J.P. SUN, G.I. HADDAD.
Observation of intrinsic bistability in resonant tunneling diodes modeling.
Appl. Phys. Lett. 55 (1989) p. 371.
- [26] P. MOUNAIX, O. VANBÉSIEN, D. LIPPENS
Effect of cathode spacer layer on the current voltage characteristics of resonant tunneling diodes.
Appl. Phys. Lett. 57 (1990) p.1517.
- [27] D. THOMAS, F. CHEVOIR, P. BOIS, E. BARBIER, Y. GULDNER,
J.P. VIEREN
Magneto tunneling studies of charge build-up in double barrier diodes.
Proc. of the 4th International Conference on Superlattices, Microstructures and Microdevices (1988).
- [28] M. JONSON, A. GRINCWAJG
Effect of inelastic scattering on resonant and sequential tunneling in double barrier heterostructures.
Appl. Phys. Letters 51 (1987) p. 1729.
- [29] M. BÜTTIKER
Coherent and sequential tunneling in series barriers.
IBM J. Res. Dev. 32:63 (1988)
- [30] M. BÜTTIKER
Quantum coherence and phase randomization in series resistors.
Resonant Tunneling in Semiconductors : Physics and applications (1990) (Plenum Press), in the press.
- [31] B. VINTER, F. CHEVOIR
Scattering processes, coherent and incoherent transport in resonant tunneling structures.
Resonant Tunneling in Semiconductors : Physics an applications (1990) (Plenum Press), in the press.

- [32] F. CHEVOIR, B. VINTER
Resonant and scattering - assisted tunneling in double barrier diodes.
Proposé à Physical Review B.
- [33] J. LEO, A.H. Mac DONALD
Disorder assisted tunneling through a double barrier structure.
Phys. Rev. Letters 64 (1990) p. 817.
- [34] A. CELESTE, L.A. CURY, J.C. PORTAL, M. ALLOVON, D.K. MAUDE,
L.EAVES, M. DAVIES, M. HEATH, M. MALDONADO
AlAs and InAs mode LO phonon emission assisted tunneling in (InGa)
As/(AlIn)As double barrier structures.
Solid State Electronics 32 (1989) p. 1191.
- [35] P. CHENG, J.S. HARRIS Jr.
Effect of Si doping in AlAs barrier layer of AlAs-GaAs-AlAs double barrier reso-
nant tunneling diodes.
Appli. Phys. Letters 55 (1989) p. 572.
- [36] P. GUÉRET, C. ROSSEL
Investigations on resonant tunneling and the role of interface roughness scattering
in quantum wells.
Resonant Tunneling in Semiconductors : Physics and Applications (1990) (Plenum
Press) in the press.
- [37] P. GUÉRET, C. ROSSEL, W. SCHULP, H.P. MEIER
Investigations on resonant tunneling III-V heterostructures : Comparison between
experimental data and model calculations.
Journal of Appl. Phys 66 (1989) p. 4312.
- [38] H. TEWS, R.D. SCHNELL, R. NEUMANN
Non equivalent heterointerfaces in AlGaAs/GaAs double barrier resonant
tunneling diodes grown by metalorganic vapor phase epitaxy.
Electronics Letters 25 (1989) p. 1711.

Chapitre 2

Analyse dynamique du transport quantique

Chapitre 2

Analyse dynamique du transport quantique

2.1 Introduction

Si l'on considère les meilleures performances mondiales des composants à tunnel résonnant tant en oscillation (675 GHz) [1] qu'en détection (2.5 THz) [2], il est indéniable que les processus physiques mis en jeu ont des temps de réponse très faibles.

Nous allons, dans ce chapitre, essayer d'apporter des éléments d'information sur les temps impliqués dans les processus tunnel. Ils vont aussi nous permettre d'évaluer les limites fréquentielles intrinsèques des composants. L'analyse de ces temps de réponse a fait l'objet de nombreux travaux, provoquant parfois des controverses [3] [4] [5].

De nombreux temps caractéristiques du transport électronique dans une hétérostructure ont été définis [6] [7] :

- le temps de transit des électrons au travers de la structure ("dwell time") ;
- le temps de Larmor, lié aux propriétés de Spin des électrons ;
- le temps de niveau quasi-lié du puits ;
- le temps de traversée des barrières, zones classiquement interdites en énergie ("diffusive transversal time") ;

- le temps d'établissement de la probabilité de présence dans le puits ("build-up time") ;
- etc ...

Au plan des applications, quels sont les temps qui limitent les performances fréquentielles des diodes double barrière ? Est-ce le temps de vie du niveau quasi-lié qui traduit le confinement momentané des porteurs dans le puits ? Est-ce le temps nécessaire à l'établissement de la résonance ?

Nous tâchons de répondre à ces questions sur la base de la réponse d'une diode, d'une part à un échelon de tension et d'autre part à la modulation harmonique du potentiel.

Les aspects théoriques et expérimentaux sont successivement considérés. Tout d'abord, nous présentons les résultats d'une étude numérique de la réponse impulsionnelle par résolution de l'équation de Schrödinger dépendante du temps. Ensuite, nous analysons des mesures d'impédances "petit signal" en termes de schéma équivalent.

2.2 Réponse impulsionnelle d'une diode à tunnel résonnant

2.2.1 Intérêt de l'étude

L'intérêt d'étudier la réponse à un échelon de tension d'une double barrière est triple :

- c'est, tout d'abord, une méthode grand signal qui permet de parcourir l'ensemble de la plage de tension correspondant au régime de résistance différentielle négative ;
- en outre, elle traduit les phénomènes physiques en termes d'éléments localisés ;
- enfin, elle est en mesure de décrire des systèmes loin de l'équilibre.

Il est intéressant de comparer cette démarche à celle plus classique d'un paquet d'onde Gaussien en interaction avec une double barrière [8] [9] [10]. Rappelons en effet que, dans la plupart des cas, on impose une énergie initiale au paquet d'onde incident tout en maintenant le potentiel constant. Par ailleurs on initialise le paquet d'onde

près de l'hétérostructure, alors que les expériences de conduction mettent en jeu un flux continu d'électrons.

En résumé, ces simulations numériques sont plus proches des expérimentations optiques (photoluminescence dépendante du temps) que des expériences électriques.

Les avantages décisifs dans la description des phénomènes, que nous nous proposons de détailler à présent, se font aux dépens d'une complexité accrue de la modélisation.

2.2.2 Formalisme de résolution de l'équation de Schrödinger dépendante du temps

2.2.2.1 Initialisation des fonctions d'ondes

Le système dont nous allons étudier les caractéristiques dynamiques est un système ouvert : la structure double barrière-puits peut être considérée, en polarisation, comme une zone active loin de l'équilibre, entourée de deux réservoirs en équilibre thermodynamique. L'analyse des systèmes ouverts se révèle, en général, très complexe et le choix des conditions aux limites du problème s'avère délicat [11].

Définissons, tout d'abord, les fonctions d'ondes que nous injectons dans la simulation. Elles nous permettent de calculer les données numériques telles que la concentration électronique ou la densité de courant particulière. Nous supposons que l'état du système résulte de la superposition d'états ψ_i , représentatifs d'un état d'énergie E_i , avec une probabilité associée p_i . Nous considérons que ces états ψ_i sont non corrélés entre eux [12].

Seule la zone double barrière-puits supporte la tension, comme l'illustre la figure 2.1a. Les fonctions d'ondes hors de cette région sont donc de type ondes planes. Dans la zone d'émetteur, elles se décomposent en une onde incidente dont nous supposons l'amplitude constante et en une onde réfléchie d'amplitude variable qui se développe au cours de la simulation. Côté collecteur, nous supposons l'absence d'onde réfléchie dans la mesure où la contribution des ondes issues du réservoir du collecteur devient très rapidement négligeable sous polarisation.

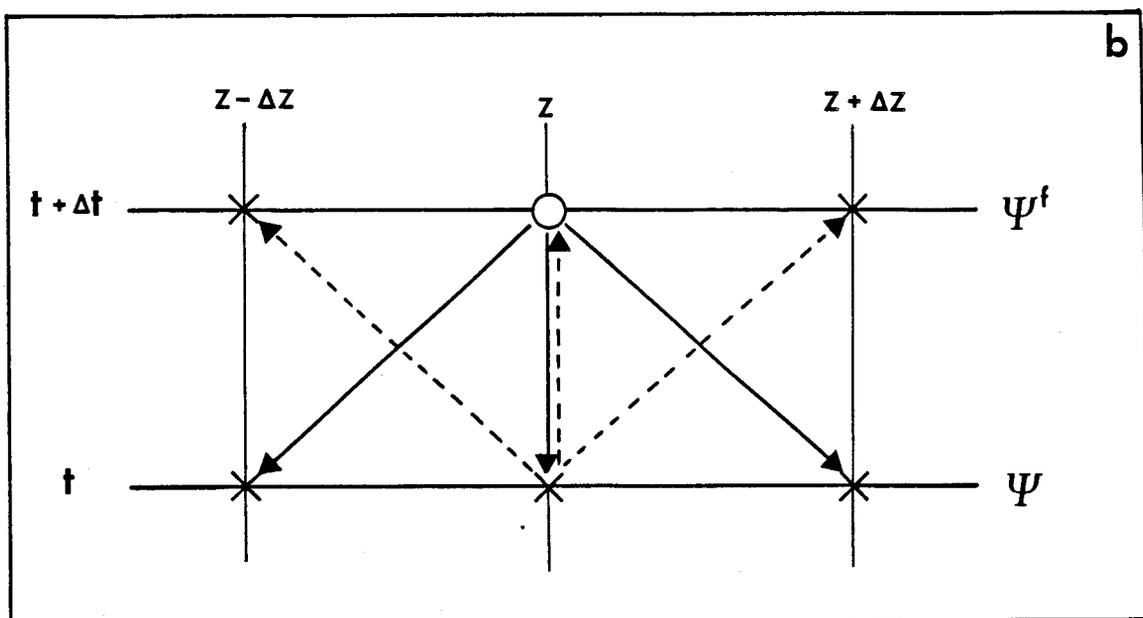
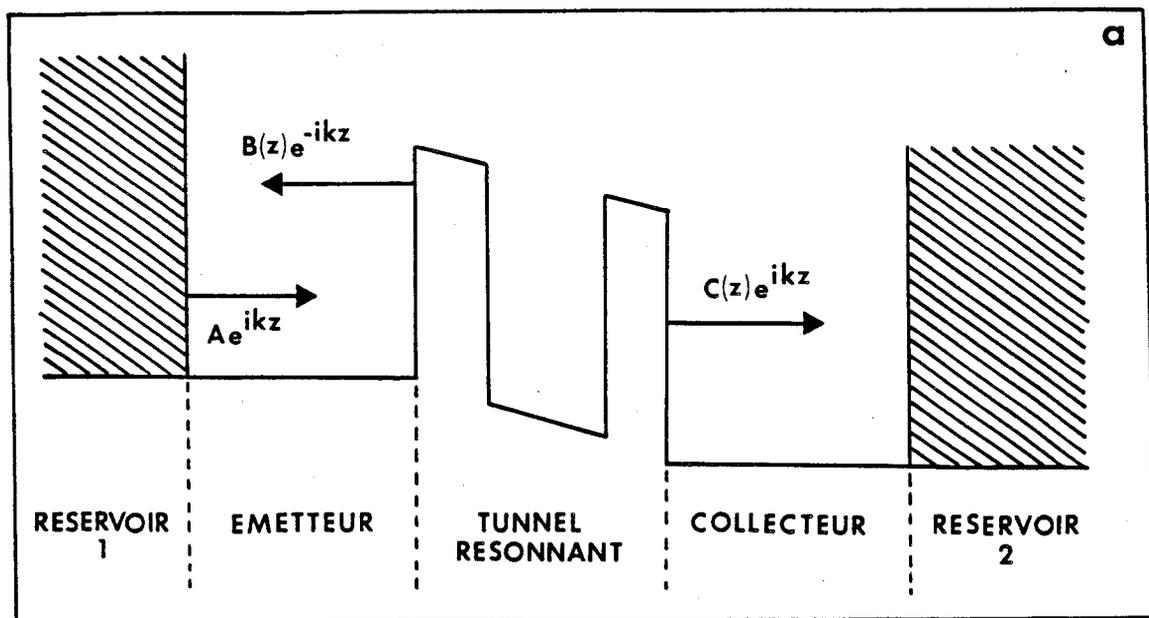


Figure 2.1 : Résolution de l'équation de Schrödinger dépendante du temps.

Hypothèses de simulation :

a) Définition des fonctions d'ondes.

b) Principe de la discrétisation implicite

Pour définir l'ensemble de fonctions d'ondes initiales, caractéristique d'un état de conduction, nous utilisons la méthode décrite au chapitre 1. La solution obtenue pour chaque énergie E_i , correspondant à un vecteur d'onde k_i perpendiculaire aux couches, est alors normalisée, de telle sorte que l'onde plane incidente relative à l'état i traduise le flux de particules fournies par le réservoir supposé en équilibre thermodynamique. Chaque fonction d'onde voit son importance pondérée par la probabilité p_i . Celle-ci est définie par :

$$p_i = \frac{m^* k_B}{2\pi^2} \frac{\theta \Delta k}{\hbar^2} \text{Log} \left(1 + e^{(E_F - E_i)/k_B \theta} \right) \quad (2.1)$$

avec :

$$E_i = \frac{\hbar^2 k_i^2}{2m_i^*} \quad (2.2)$$

Dans l'expression (2.1), Δk représente le pas de discrétisation dans l'espace des vecteurs d'ondes et E_F le niveau de Fermi de l'émetteur. L'équation (2.1) est obtenue en intégrant la distribution de Fermi-Dirac sur le moment transverse (k_{\parallel}).

Nous pouvons alors déduire, pour tout temps t et en tout point z de l'espace, la concentration électronique $n(z, t)$ et la densité de courant particulaire $J_n(z, t)$:

$$n(z, t) = \sum_i p_i \psi_i^*(z, t) \psi_i(z, t) \quad (2.3)$$

et

$$J_n(z, t) = \frac{-q\hbar}{m^*} \sum_i p_i \text{Im} \left(\psi_i^*(z, t) \frac{\partial \psi_i(z, t)}{\partial z} \right) \quad (q > 0) \quad (2.4)$$

2.2.2.2 Discrétisation de l'équation de Schrödinger : méthode implicite

La résolution de l'équation de Schrödinger dépendante du temps se révèle un problème délicat, même sous sa forme unidimensionnelle. Nous utilisons cette simplification dans la mesure où nous négligeons le mouvement des porteurs parallèlement aux couches. Sous cette forme, et en supposant une masse effective constante dans tout le système, elle s'écrit :

$$i \hbar \frac{\partial \psi(z)}{\partial t} = \frac{-\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2 \psi(z)}{\partial z^2} + V(z) \psi(z) \quad (2.5)$$

En pratique, pour résoudre cette équation, nous employons une méthode du second ordre proposée par Goldberg et al [13]. Nous utilisons le développement de Cayley pour l'opérateur d'évolution e^{-iHdt} :

$$e^{-iHdt} = \left(1 - \frac{1}{2} iHdt\right) / \left(1 + \frac{1}{2} iHdt\right) \quad (2.6)$$

La discrétisation de l'équation (2.5) à partir de (2.6) mène à une équation implicite, dont le principe est résumé figure 2.1b. Sur ce schéma, on constate que la fonction d'onde au temps $t + \Delta t$ notée ψ^f dépend des valeurs de la fonction d'onde au temps précédent en trois points de l'espace $z - \Delta z$, z , $z + \Delta z$. Par ailleurs, on peut considérer que la fonction ψ à l'instant donné dépend de ψ^f aux trois points d'abscisse notés auparavant.

On obtient alors l'équation implicite suivante, dans laquelle j désigne un point de l'espace :

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \psi_{j-1}^f + \left(i \frac{2m^* \Delta z^2}{\hbar \Delta t} - 1 - \frac{m^* V'_j \Delta z^2}{\hbar^2} \right) \psi_j^f + \frac{1}{2} \psi_{j+1}^f = \\ - \frac{1}{2} \left(\psi_{j-1} + \psi_{j+1} \right) + \left(i \frac{2m^* \Delta z^2}{\hbar \Delta t} + 1 + \frac{m^* V'_j \Delta z^2}{\hbar^2} \right) \psi_j \end{aligned} \quad (2.7)$$

Dans cette expression, le potentiel V' est référencé par rapport à la valeur en $z = z_0$ à gauche de la structure.

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 \\ \frac{1}{2} & a_{22} & \frac{1}{2} & 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & a_{33} & \frac{1}{2} & 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 \\ \dots & \dots \\ \dots & \dots \\ 0 & \dots & \dots & 0 & \frac{1}{2} & a_{jj} & \frac{1}{2} & 0 & \dots & 0 \\ \dots & \dots \\ \dots & \dots \\ 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 & \frac{1}{2} & a_{n-1,n-1} & \frac{1}{2} \\ 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 & a_{n,n-1} & a_{n,n} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1^f \\ \psi_2^f \\ \dots \\ \dots \\ \psi_j^f \\ \dots \\ \dots \\ \psi_n^f \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} & 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 \\ -\frac{1}{2} & b_{22} & -\frac{1}{2} & 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2} & b_{33} & -\frac{1}{2} & 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 \\ \dots & \dots \\ \dots & \dots \\ 0 & \dots & \dots & 0 & -\frac{1}{2} & b_{jj} & -\frac{1}{2} & 0 & \dots & 0 \\ \dots & \dots \\ \dots & \dots \\ 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 & -\frac{1}{2} & b_{n-1,n-1} & -\frac{1}{2} \\ 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 & b_{n,n-1} & b_{n,n} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \dots \\ \dots \\ \psi_j \\ \dots \\ \dots \\ \psi_n \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \\ \dots \\ \dots \\ C_j \\ \dots \\ \dots \\ C_n \end{pmatrix}$$

où • $a_{jj} = -b_{jj}^* = -1 - \frac{m^* V_j^i \Delta z^2}{\hbar^2} + \frac{i 2 m^* \Delta z^2}{\hbar \Delta t}$ pour $j \neq 1$ et $j \neq n$

• les coefficients

$$a_{11}, a_{12}, a_{n,n-1}, a_{n,n}$$

$$b_{11}, b_{12}, b_{n,n-1}, b_{n,n}$$

et

$C_j (j = 1, n)$ sont déterminés par les conditions aux limites.

Figure 2.2 : Représentation matricielle de l'équation de Schrödinger dépendante du temps discrétisée par une méthode implicite du second ordre.

Etendu à l'espace, on obtient un système de n équations à n inconnues que l'on peut mettre sous la forme matricielle suivante, représentée sous sa forme développée sur la figure 2.2 :

$$A(t) \psi^f(t) = B(t) \psi(t) + C(t) \quad (2.8)$$

$\psi^f(t)$ et $\psi(t)$ sont deux matrices colonnes contenant les coordonnées spatiales des fonctions d'ondes respectivement à $t + \Delta t$ et t . $A(t)$ et $B(t)$ sont deux matrices tridiagonales complexes dont les dimensions sont fixées par la discrétisation de l'espace simulé.

Le caractère fini de l'espace nous impose maintenant de fixer des conditions aux limites. C'est un point crucial dans l'élaboration d'une méthode de simulation pour les systèmes ouverts. Ces conditions viennent tout d'abord fixer les éléments extradiagonaux et diagonaux extrêmes (par exemple a_{11}, a_{12}) des matrices $A(t)$ et $B(t)$. Elles amènent de plus une matrice colonne $C(t)$ que nous expliciterons par la suite.

Les matrices $A(t)$ et $B(t)$ sont donc carrées d'ordre n , avec n le nombre de points de l'espace représentant la structure. Typiquement un pas de 0.1 nm sera choisi pour des longueurs de zones simulées variant, selon les structures, entre 30 nm et 100 nm. L'équation (2.8) peut être résolue par la méthode dite d'élimination de Gauss, facilitée par les propriétés tridiagonales du système.

2.2.2.3 Les conditions aux limites : cas de l'injection continue

Pour les conditions aux limites qui nous permettent de traduire l'injection continue de porteurs, nous reprenons les hypothèses proposées par Mains et Haddad [12] [14]. D'autres approches ont été également proposées [15] [16] ; elles sont cependant moins directes, étant basées sur un traitement du transport hors équilibre en termes de fonctions de Wigner.

Pour l'écriture des conditions aux limites côté émetteur en $z = z_0$, la difficulté réside dans l'existence d'une onde réfléchiée par la structure double barrière dont on ne peut connaître les caractéristiques qu'en cours de simulation. Il convient, dans le calcul, d'absorber cette onde réfléchiée pour permettre aux particules n'ayant pas franchi la double barrière de quitter le système. L'émetteur se comporte comme une charge

adaptée pour ces particules. Il en est de même pour les porteurs transmis côté collecteur qui quittent le système en $z = z_{max}$ sans subir de réflexion sur les limites.

On perd ainsi la mémoire des particules qui ont quitté l'espace de simulation, ce qui introduit la notion d'irréversibilité dans les phénomènes mis en jeu.

En pratique, nous supposons qu'il n'y a pas de chute de potentiel dans les zones qui encadrent la double barrière. Les fonctions d'ondes sont alors des ondes planes. A $t = 0$ et en $z = z_0$, toute fonction d'onde de l'ensemble défini dans le paragraphe 2.2.2.1 a la forme générale suivante :

$$\psi = A e^{ik_e z} + B(z) e^{-ik_e z} \quad (2.9)$$

Le terme d'amplitude A , qui traduit l'interaction avec le réservoir, ne dépend pas de z ni de t dans la mesure où l'injection est continue. Par contre, la fonction enveloppe de l'onde réfléchie $B(z)$ varie spatialement.

Si l'on suppose une variation de $B(z)$ linéaire au voisinage de $z = z_0$, alors l'équation de Schrödinger dépendante du temps (2.5) peut s'écrire :

$$i \hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{\hbar^2 k_e^2}{2m^*} \psi + i \frac{\hbar^2 k_e}{m^*} \frac{\partial B(z)}{\partial z} e^{-ik_e z} \quad (2.10)$$

La solution pour la fonction d'onde au temps futur peut être enfin approximée par :

$$\psi(t = \Delta t) \simeq \psi(t = 0) e^{-i(E/\hbar)\Delta t} + \frac{\hbar k_e}{m^*} \frac{\partial B(z)}{\partial z} e^{-ik_e z} \cdot \Delta t \quad (2.11)$$

Dans cette équation, le premier terme du second membre donne l'évolution temporelle pour un état d'énergie où $B(z)$ est supposé constant ; le second terme donne la modification locale de la fonction d'onde due à la variation de l'onde réfléchie.

Au point de sortie, en $z = z_{max}$, l'onde transmise s'écrit :

$$\psi = C(z) e^{ik_e z} \quad (2.12)$$

où

$$k_s = \sqrt{2m^*(E - V)/\hbar} \quad (2.13)$$

V représentant la chute de potentiel dans la double barrière. En supposant aussi une variation linéaire de $C(z)$, la fonction d'onde au temps futur peut être écrite en $z = z_{max}$:

$$\psi(t = \Delta t) \simeq \psi(t = 0) e^{-i(E_s/\hbar)\Delta t} - \frac{\hbar k_s}{m^*} \frac{\partial C(z)}{\partial z} e^{ik_s z} \cdot \Delta t \quad (2.14)$$

Il nous reste, pour calculer les derniers éléments des matrices $A(t)$ et $B(t)$, à préciser en termes de fonctions d'ondes proches des limites les termes $\frac{\partial B(z)}{\partial z}$ et $\frac{\partial C(z)}{\partial z}$.

Deux approches ont été envisagées, l'une explicite [12] l'autre semi-implicite [14], afin d'augmenter la discrétisation temporelle sans induire d'instabilité numérique. Le détail de ces calculs figure en Annexe B.

2.2.2.4 Remarques

L'élaboration de ce logiciel de simulation implique quelques remarques :

- La première concerne le choix du pas de discrétisation temporelle Δt . Avec les conditions aux limites semi-implicites, il est envisageable d'augmenter Δt jusqu'à 1 fs, préservant ainsi le temps calcul. Néanmoins, les processus de passage par effet tunnel sont très rapides et on risque, à cette échelle de temps, de perdre des informations sur les transitoires de courant. Dans nos calculs nous utilisons des pas typiquement de l'ordre de 0.2 à 0.5 fs. En pratique, il n'est pas rare d'étudier l'évolution des systèmes durant 1 ps. Compte tenu d'une part du nombre de fonctions d'ondes nécessaire pour traduire la distribution en énergie des porteurs incidents (de l'ordre d'une centaine au minimum) et d'autre part de la discrétisation spatiale, il en résulte la gestion de matrices à éléments complexes relativement lourdes. A titre d'ordre de grandeur, le calcul d'un transitoire de courant, pour les doubles barrières que nous avons étudiées, nécessite une dizaine d'heures sur micro ordinateur COMPAQ 33 MHz pour une procédure numérique écrite en Fortran.

- La seconde remarque est d'ordre physique. Bien que nous ayons considéré simultanément plusieurs fonctions d'ondes, chacune représentative d'un état d'énergie donné, nous négligeons toute corrélation entre ces états. C'est donc une démarche monoélectronique. L'autre limitation des calculs présentés est que nous négligeons toute perturbation du potentiel par la charge d'espace. De même nous négligeons le courant de déplacement résultant de la modification du champ électrique interne induit par la variation de potentiel.

2.2.3 Résultats numériques. Confrontation théorie-expérience

2.2.3.1 Validation de la méthode : étude des composants InGaAs/AlAs

La première étape de ces études dans le domaine temporel va consister à valider notre simulation. Dans ce but, nous avons choisi d'étudier la structure fabriquée et caractérisée électriquement par Inata et al [17] et simulée dans l'article original de Mains et Haddad [12]. Ce composant est une structure pseudomorphique $In_{0.53}Ga_{0.47}As - AlAs$ pour laquelle d'excellentes caractéristiques expérimentales ont été observées. Des rapports courant pic sur courant vallée de 14 à température ambiante et de 35 à 77 K, pour des densités de courant de l'ordre de $2-4 \cdot 10^4 \text{ A.cm}^{-2}$, ont été relevés.

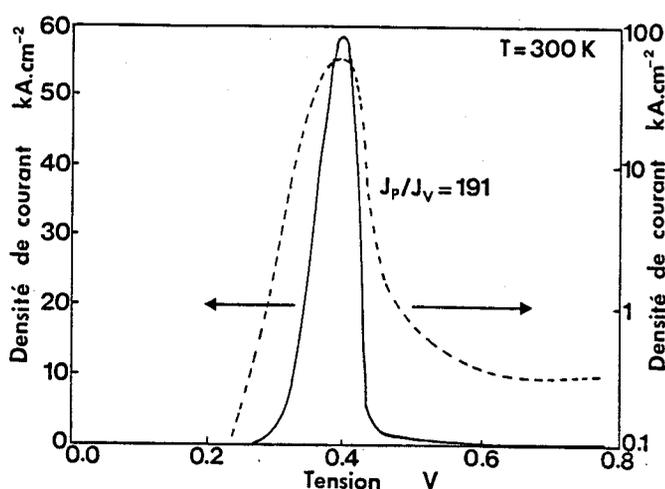


Figure 2.3 : Caractéristique courant-tension théorique à 300 K de la structure $In_{0.53}Ga_{0.47}As/AlAs$, en échelle linéaire (—) et en échelle logarithmique (- - - -). ($L_B = 2.3 \text{ nm}$; $L_W = 4.5 \text{ nm}$)

Les paramètres de la structure sont :

- largeur de puits 4.5 nm ;
- largeur des barrières 2.3 nm ;
- nous supposons une discontinuité de potentiel à l'interface AlAs/InGaAs de 1.2 eV, ainsi qu'une masse effective constante au sein de la structure égale à $0.042 m_0$.

La figure 2.3 montre la caractéristique courant-tension que nous avons calculée avec un pas de discrétisation spatiale de 0.1 nm. Pour chaque tension de polarisation, la densité de courant est obtenue à partir de la relation (2.4) en effectuant une sommation sur cent fonctions d'ondes. Dans ces conditions, nous obtenons une définition suffisante pour parcourir l'ensemble de la caractéristique $I(V)$. Le rapport courant pic sur courant vallée, calculé à température ambiante, est de 191. Cette valeur est donc très supérieure à la valeur expérimentale. Un tel désaccord était attendu dans la mesure où le calcul est ici purement cohérent.

La densité de courant pic est $J_p = 58.4 \text{ kA.cm}^{-2}$ pour une tension de 0.4 V ; la densité de courant vallée est $J_V = 0.3 \text{ kA.cm}^{-2}$ pour une tension de 0.7 V.

Compte tenu de ces caractéristiques statiques calculées dans l'hypothèse d'un champ uniforme au sein de la double barrière, deux types de transitoires peuvent être étudiés :

- Transition pic-vallée ("TURN-OFF") : pour $t < 0$, $V = 0.4V$ et l'on passe instantanément pour $t \geq 0$ à $V = 0.7V$.
- Transition vallée-pic ("TURN-ON") : pour $t < 0$, $V = 0.7V$ et pour $t \geq 0$, $V = 0.4V$.

ETUDE DE LA TRANSITION PIC-VALLEE :

La transition courant pic-courant vallée permet de décrire le passage d'un état de forte conduction, résultant de la mise en résonance du système, vers un état de très faible conduction, traduisant une désadaptation à l'énergie de résonance. Du point de vue des densités de porteurs, ceci correspond à une situation initiale pour laquelle il y a une forte concentration d'électrons piégés dans le puits, suivie d'un processus de fuite des porteurs vers le collecteur.

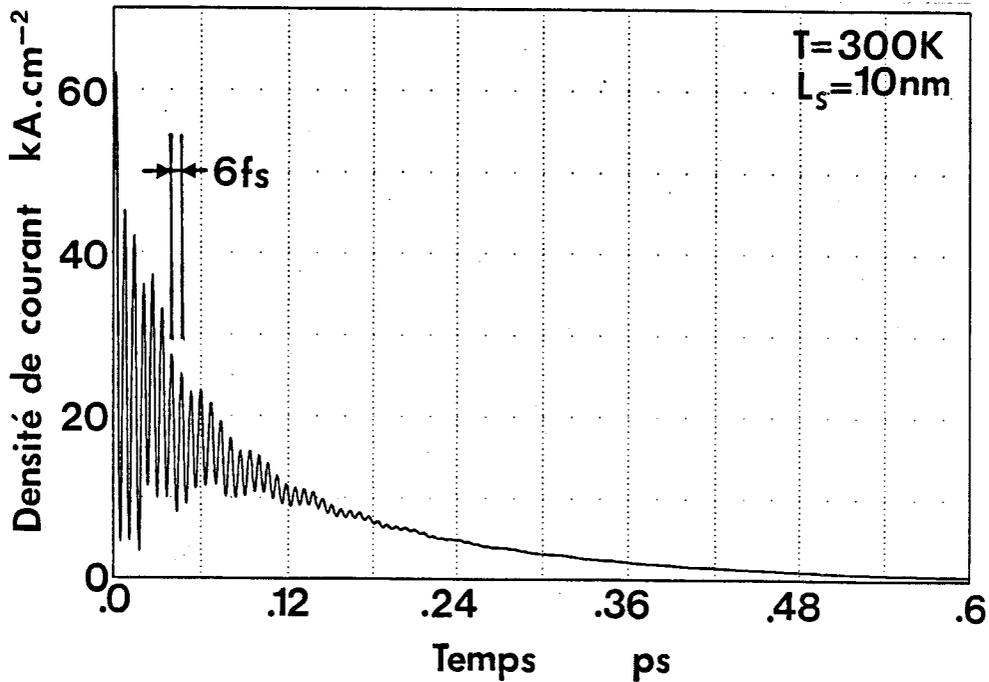


Figure 2.4 : Evolution de la densité de courant moyenne en fonction du temps pour une transition pic-vallée de la structure $In_{.53}Ga_{.47}As/AlAs$ à 300 K pour des largeurs d'espaceurs de 10 nm. ($L_B = 2.3$ nm; $L_W = 4.5$ nm)

La figure 2.4 donne un exemple typique de transitoire de courant. Dans la simulation, deux espaceurs de 10 nm entourent la structure double barrière-puits. La densité de courant représentée en fonction du temps est une moyenne spatiale sur toute la structure de $J_n(z, t)$ définie par l'équation (2.4).

Au vu de cette courbe, on distingue deux régimes d'approche vers la solution d'équilibre :

- Aux temps très courts, on observe des oscillations prononcées de très faible période qui se superposent à une évolution de type "exponentielle décroissante". La période de ces oscillations est de 6 fs. En première approximation, ce temps correspond au temps nécessaire à un électron à l'énergie de résonance pour faire un aller-retour dans le puits. Un calcul simple donne :

$$T = \sqrt{\frac{2m^* L_W^2}{E_{res}}} \quad (2.15)$$

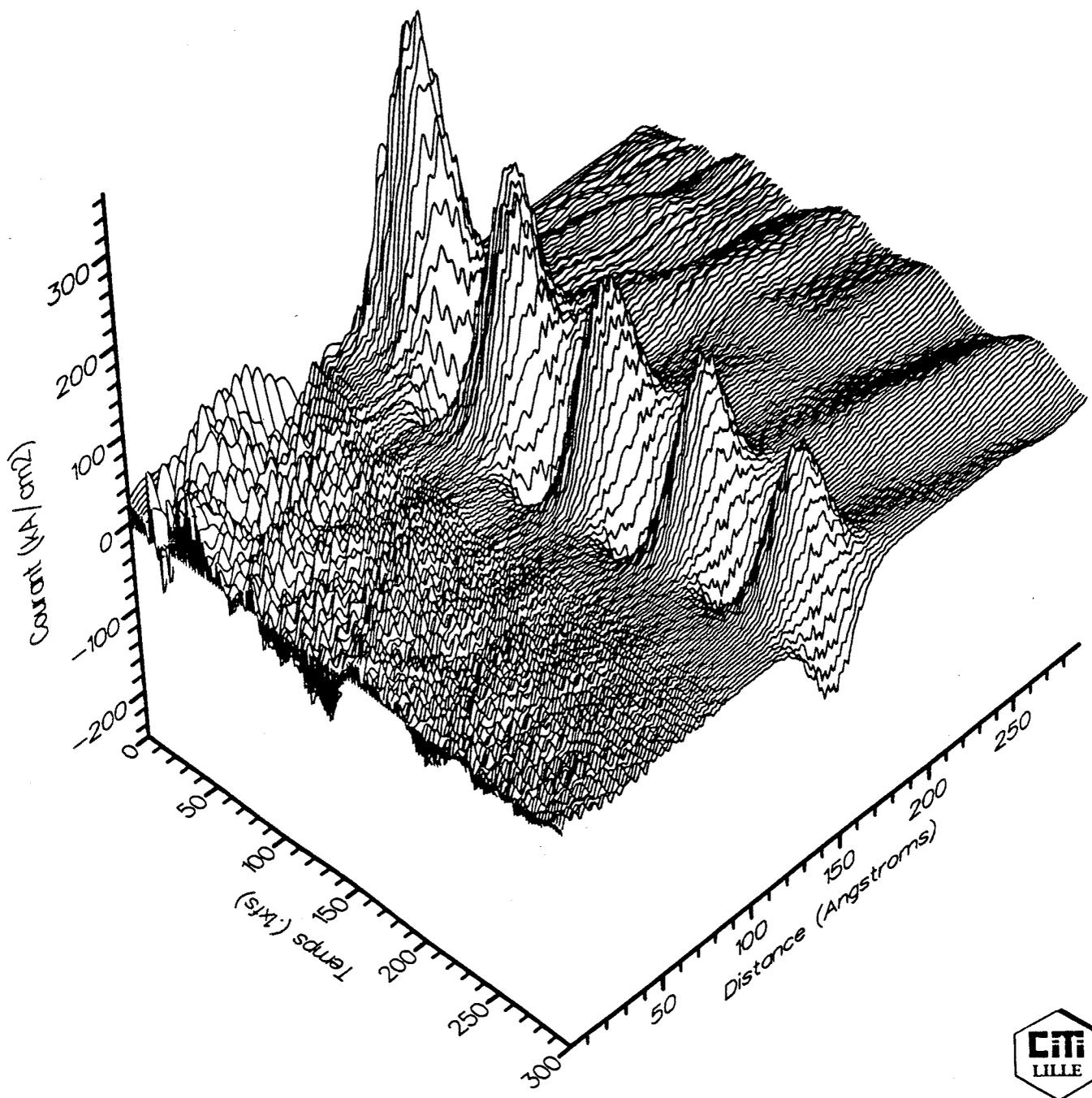


Figure 2.5a : Evolution spatiale de la densité de courant en fonction du temps pour la transition pic-vallée de la structure $In_{.53}Ga_{.47}As/AlAs$ à 300 K ($L_B = 2.3 \text{ nm}$; $L_W = 4.5 \text{ nm}$), de 0 à 30 femtosecondes.

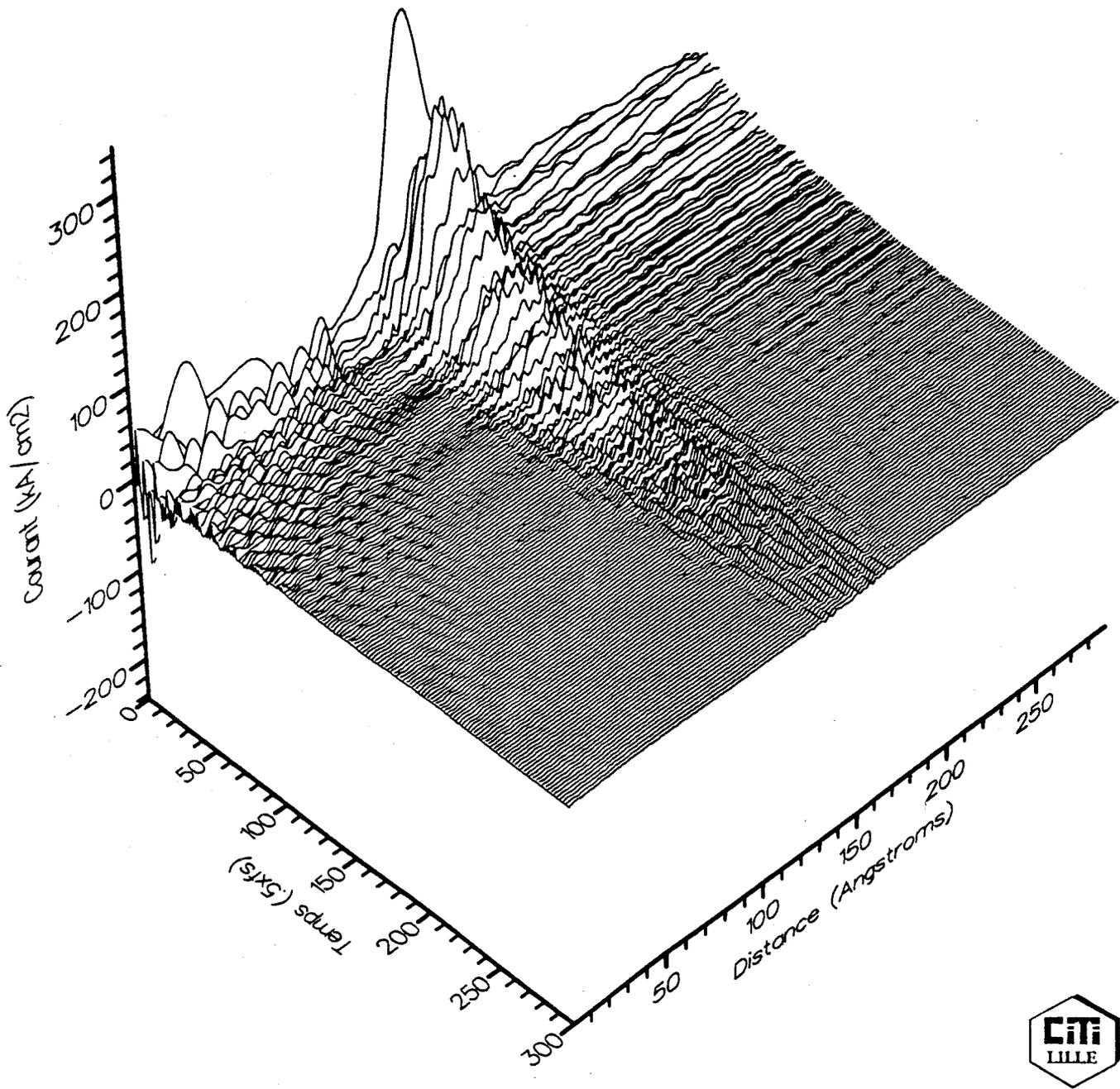


Figure 2.5b : Evolution spatiale de la densité de courant en fonction du temps pour la transition pic-vallée de la structure $In_{0.53}Ga_{0.47}As/AlAs$ à 300 K ($L_B = 2.3 \text{ nm}$; $L_W = 4.5 \text{ nm}$), de 0 à 150 femtosecondes.

Pour la structure considérée, nous obtenons 6.5 fs.

- Aux temps longs, ces oscillations disparaissent et l'on obtient une décroissance de $Jn(t)$ quasiment exponentielle.

Si l'on considère à présent les évolutions spatiales de la densité de courant, nous obtenons les résultats visualisés sur la figure 2.5a qui donne une représentation espace-temps tridimensionnelle de $Jn(z, t)$:

- A l'intérieur du puits, on note de très fortes variations entre des valeurs positives et négatives des densités de courant, qui sont le reflet de la direction d'évolution des porteurs piégés dans le puits. Elles s'atténuent progressivement avec le temps.
- Côté collecteur, on constate que la mise hors résonance du système se traduit par un abaissement progressif des valeurs de courant, comme le montre plus clairement la figure 2.5b. Parallèlement dans l'émetteur, comme la double barrière devient opaque, la résultante des composantes de courant incident et réfléchi prend des valeurs très faibles. Ceci traduit bien le fait que, au niveau de l'évolution de la densité de courant, tout se passe comme si on vidait uniquement le puits de ses porteurs.

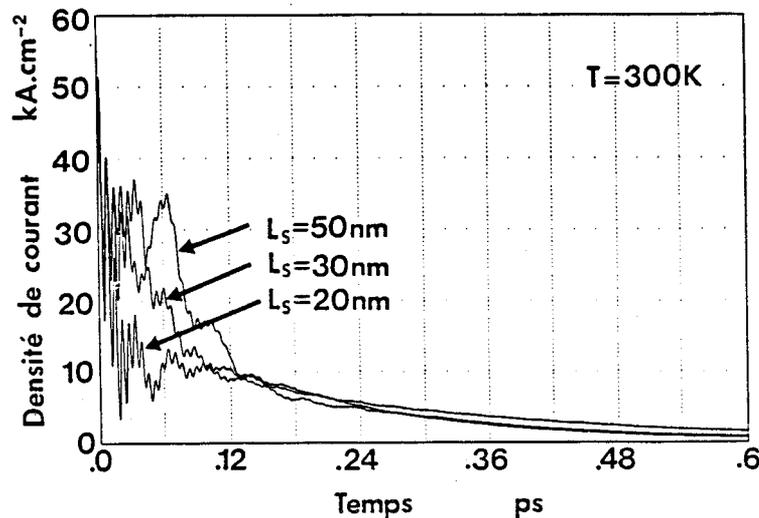


Figure 2.6 : Comparaison des transitoires de courant de la structure $\text{In}_{.53}\text{Ga}_{.47}\text{As}/\text{AlAs}$ pour une transition pic-vallée à 300 K en fonction du temps. Les largeurs d'espaceurs sont respectivement 20 nm, 30 nm et 50 nm ($L_B = 2.3 \text{ nm}$; $L_W = 4.5 \text{ nm}$).

- On peut noter cependant que les valeurs de courant sont entachées de fluctuations importantes près de $z = z_0$. Elles se traduisent au niveau du courant moyen, sur la courbe 2.4, par une légère modulation des oscillations de courant observées en début de transitoire. Il semble que ce soit un effet parasite, qui peut être relié à la largeur des espaceurs entourant l'hétérostructure. Pour préciser cet effet, nous avons reporté figure 2.6 les résultats obtenus pour des zones espaceurs variant de 20 à 50 nm. L'allure des transitoires s'en trouve nettement modifiée. Néanmoins on observe toujours les rapides oscillations et les courbes montrent la même tendance exponentielle à partir de 0.18 ps. Il est probable que ces perturbations viennent de la non idéalité de la modélisation de contact émetteur, qui ne parvient pas à absorber toutes les charges réfléchies en cas de forte désadaptation. En pratique, toutefois, les porteurs qui n'ont pas quitté l'espace de simulation vont se retrouver localisés dans l'émetteur, car la double barrière leur apparaît infranchissable. Cet effet parasite ne va donc pas influencer sur les phénomènes qui se passent en aval. Au bout d'un temps suffisamment long, le contact joue pleinement son rôle en absorbant complètement les charges réfléchies et l'on obtient alors un courant constant dans l'émetteur, qui correspond au courant vallée.

Si l'on s'intéresse maintenant aux temps mis en jeu dans la décroissance temporelle du courant induit dans le circuit extérieur, on constate une légère distribution des constantes de temps lors du retour vers le régime d'équilibre.

Nous illustrons cela sur la figure 2.7, où nous avons reporté le transitoire en échelle logarithmique. Sur cette figure, on peut relever des temps variant de 0.06 ps en tout début de courbe jusqu'à des temps de l'ordre de 0.16 ps et 0.27 ps en fin de transitoire. Il est important de noter que ces temps se retrouvent quelle que soit la longueur des espaceurs simulés. Pour comparaison le temps de vie du niveau quasi-lié, extrait de la courbe de transmission de la structure $\tau_r = \hbar/\Gamma$, vaut 0.23 ps. Cette distribution des temps de relaxation a été évoquée dans la littérature par Frensley [15]. Il faut cependant insister sur le fait que la majorité du transitoire est dominée par un temps comparable au temps de vie du niveau résonnant (τ_r). Ceci valide les approches simplifiées pour lesquelles l'adaptation de la fonction d'onde à de nouvelles conditions de potentiel se fait à une échelle de temps comparable à τ_r .

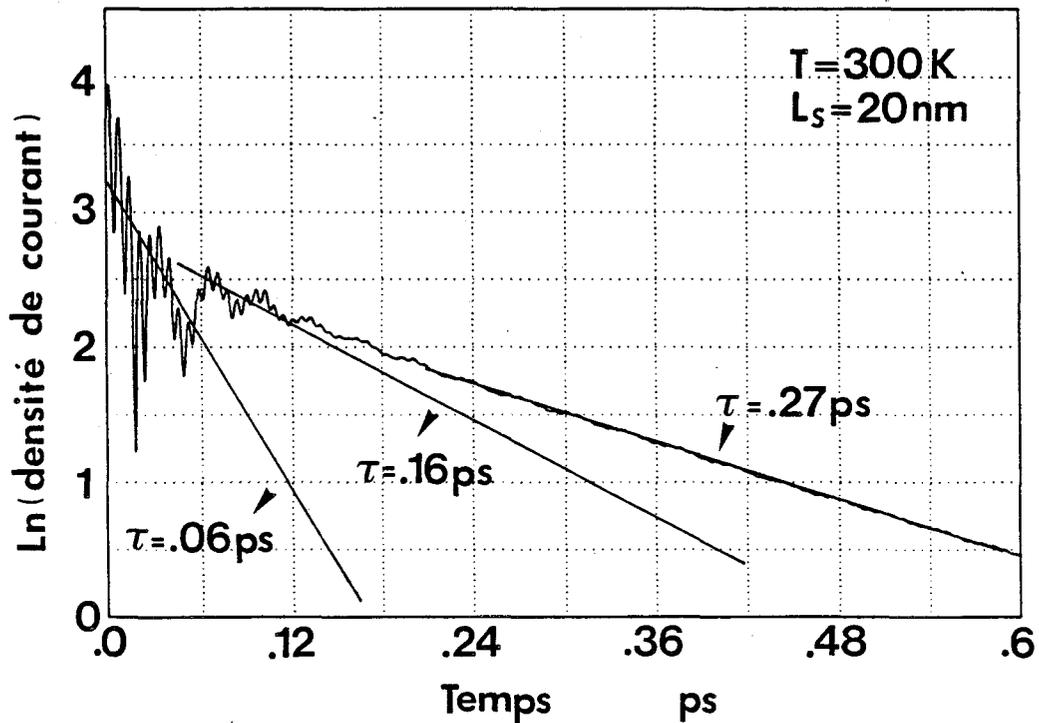


Figure 2.7 : Evolution de la densité de courant moyenne en fonction du temps pour une transition pic-vallée de la structure $\text{In}_{.53}\text{Ga}_{.47}\text{As}/\text{AlAs}$ à 300 K en échelle logarithmique ($L_S = 20 \text{ nm}$; $L_B = 2.3 \text{ nm}$; $L_W = 4.5 \text{ nm}$).

ETUDE DE LA TRANSITION VALLEE-PIC :

Le cas du "TURN-ON" est représenté figure 2.8. Comme dans le cas précédent où la variation instantanée de la tension avait provoqué une accélération des porteurs et donc une augmentation quasi-instantanée de la densité de courant, ici l'effet inverse se produit. On observe une chute extrêmement rapide du courant qui devient légèrement négatif. Cette figure montre également que le courant tend rapidement vers la moitié de sa valeur pic ($28 \text{ kA}\cdot\text{cm}^{-2}$) avec une constante de temps caractéristique de l'ordre de 100 fs. Comme dans le cas précédent, une oscillation se superpose à la croissance du courant. Son origine est identique à celle observée dans le cas de la transition pic-vallée. Ensuite le courant augmente plus lentement vers la valeur pic.

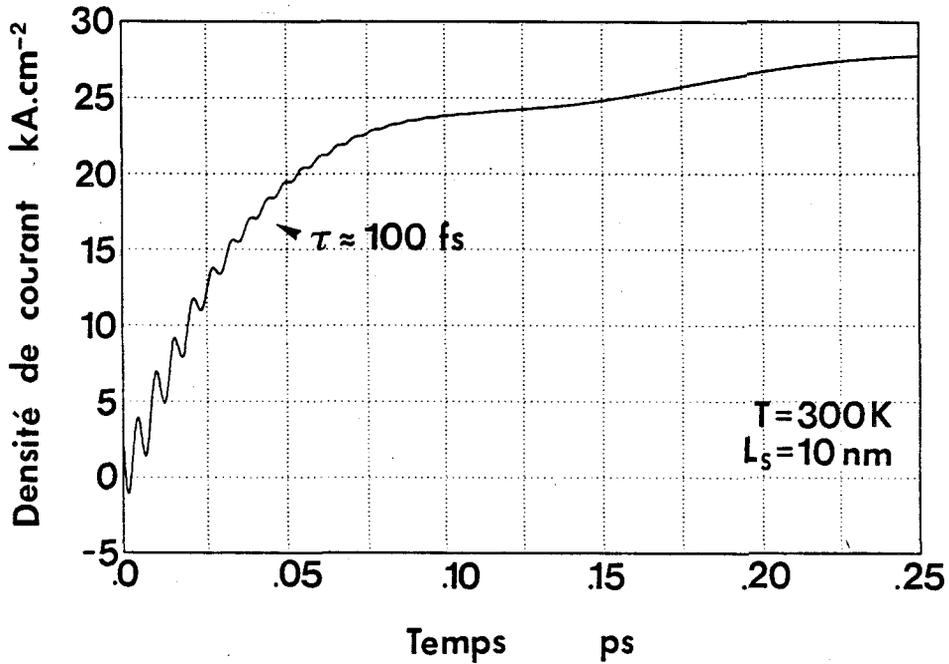


Figure 2.8 : Evolution de la densité de courant moyenne en fonction du temps pour une transition vallée-pic de la structure $In_{.53}Ga_{.47}As/AlAs$ à 300 K ($L_S = 10 \text{ nm}$; $L_B = 2.3 \text{ nm}$; $L_W = 4.5 \text{ nm}$).

Pour résumer les résultats de ces expériences numériques, on peut dire que les constantes de temps qui interviennent dans les régimes transitoires sont majorées par des temps caractéristiques (temps de fuite, temps de construction de la résonance) qui sont du même ordre de grandeur que le temps de durée de vie de l'état résonnant.

2.2.3.2 Etude du système AsGa/AlAsGa

Après avoir analysé le comportement dynamique de la structure pseudo-morphique, nous pouvons appliquer notre modèle au système AsGa-AlAsGa.

La structure simulée, dont le transitoire courant pic-courant vallée est représenté figure 2.9, est similaire à l'échantillon A du chapitre 1. Barrières et puits ont 5 nm d'épaisseur ; la discontinuité de potentiel est de 0.23 eV ; une masse effective $m^* = 0.067m_0$ a été choisie constante pour toute la structure.

Le transitoire est appliqué entre $V = 0.12 \text{ V}$ correspondant au courant pic et le

courant vallée à $V = 0.165$ V.

L'ensemble des commentaires faits au paragraphe précédent reste valable au vu de la figure 2.9 :

- La période des oscillations, en début de transitoire, est désormais de 25 fs. En appliquant la formule (2.15) qui restreint l'aller et retour de l'électron piégé à l'intérieur du puits à la dimension géométrique du puits, on trouve 17 fs. L'ordre de grandeur est respecté. Pour obtenir une comparaison plus satisfaisante, il faudrait plutôt raisonner en termes d'occupation de la probabilité de présence à l'intérieur du puits. Ceci doit permettre d'englober la pénétration de la fonction d'onde dans les barrières.
- Les temps de fuite que l'on calcule à partir de la courbe 2.8 sont compris entre 0.23 ps et 0.53 ps sur les 800 premières femtosecondes du transitoire. La valeur 0.53 fs correspond à la constante de temps aux temps longs. Sa valeur est tout à fait comparable à celle calculée à partir de la courbe de transmission à l'équilibre qui vaut 0.6 ps.

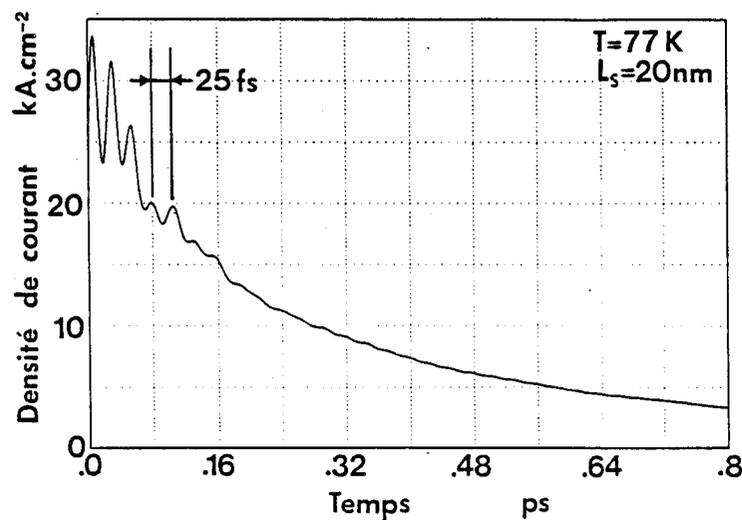


Figure 2.9 : Evolution de la densité de courant moyenne en fonction du temps pour une transition pic-vallée de la structure $\text{Al}_{.37}\text{Ga}_{.65}\text{As}/\text{GaAs}$ à 77 K ($L_B = L_W = 5$ nm, $L_S = 20$ nm).

Si les simulations faites jusqu'à présent permettent d'apporter une bonne image des transitoires de courant pour des structures optimisées en vue d'applications composants, il convient d'insister sur les hypothèses simplificatrices d'une telle représentation :

- En premier lieu, il reste une incertitude très importante qui concerne le rôle exact des interactions sur la dynamique du système. Dans l'état actuel des recherches, il nous semble que cette question soit encore ouverte. Un certain nombre d'études ont tenté de montrer que l'interaction sur phonons réduisait considérablement le temps de passage entre deux puits couplés [18]. Transposés à la double barrière, ces travaux permettent de penser que les temps que l'on calcule peuvent être surestimés en supposant un transport exempt de collisions.
- La seconde hypothèse concerne le profil de potentiel utilisé. Nous négligeons les effets de courbure de bande à l'intérieur du puits, résultant de la charge piégée, ainsi que dans les zones de contact. Les phénomènes dans ce cas sont très complexes, comme l'analyse statique l'a montré dans le premier chapitre. Il nous semble difficile de prévoir les modifications induites par ces effets.
- Outre ces limitations physiques, la procédure numérique devient particulièrement lourde dès qu'on cherche à simuler des barrières larges ($L_B \geq 7 \text{ nm}$). On se heurte, en effet, à une résonance qui devient extrêmement sélective ($\Gamma < 10^{-5} \text{ eV}$). Ceci nécessite de prendre en compte un très grand nombre de fonctions d'ondes (> 1500) pour accéder à l'information de courant dans toute la gamme de tension envisagée. De plus, les temps de retour à l'équilibre deviennent très longs (de l'ordre de quelques centaines de picosecondes) et impliquent un temps d'observation important. Les temps de calcul deviennent alors prohibitifs sur microordinateur et il convient de s'orienter vers des moyens de calcul plus puissants.

2.2.3.3 Confrontation théorie-expérience

Expérimentalement plusieurs techniques ont été mises en oeuvre pour mesurer le temps de réponse intrinsèque des composants incluant des doubles barrières. Citons en particulier les mesures de photoluminescence en fonction du temps [19] [20] et l'échantillonnage électro-optique [21] [22]. Des mesures purement électriques peuvent également permettre d'accéder aux caractéristiques dynamiques. Elles sont pourtant moins directes. Nous présenterons, dans un paragraphe suivant, une analyse basée sur

les mesures d'impédances.

Tackeuchi et al [21], par échantillonnage électro-optique sur des structures InGaAs/InAlAs aux dimensions comparables à celles de la structure A ($L_B = L_W = 5 \text{ nm}$), parviennent à mesurer des temps de fuite de l'ordre de 0.5 ps sur des transitoires de courant expérimentaux. De la même manière, Mourou et al [22] ont mesuré des temps de l'ordre de 2 picosecondes sur des structures GaAs/AlAs. Les travaux concernant la photoluminescence sont plus disparates. Ainsi Tsuchiya et al [19], en mesurant des doubles barrières AlAs/GaAs, ont montré une très grande sensibilité du temps de décroissance de la photoluminescence en fonction des largeurs de barrières, avec une limite inférieure de l'ordre de 20 ps. Citons également nos propres résultats [23] obtenus en collaboration avec le CNET (Centre National d'Etudes et de Télécommunications) sur des structures AsGa/AlAsGa pour lesquelles la concentration d'aluminium est limitée à 35%. Ce sont ces résultats que nous avons reportés sur la figure 2.10, en même temps que les évaluations théoriques obtenues à partir de la courbe de transmission pour deux hauteurs de barrières 0.23 eV et 0.3 eV. Nous avons également reporté deux résultats obtenus par notre simulation respectivement pour des largeurs de barrières de 2.5 nm et 5 nm. On constate que l'ordre de grandeur est respecté entre ces différentes approches théoriques et les mesures expérimentales.

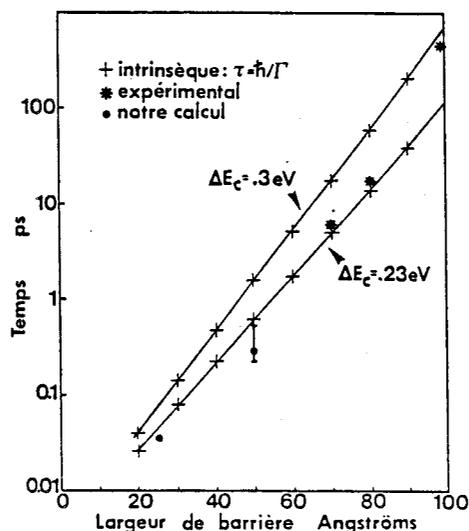


Figure 2.10 : Comparaison théorie-expérience des temps de fuite de structures AlGaAs/GaAs symétriques en fonction des largeurs de barrières.

2.2.4 Inertie de stockage

L'analyse de la réponse du courant à une brusque variation de potentiel nous permet de calculer l'impédance grand signal de la diode, hormis la contribution capacitive induite par le courant de déplacement. Nous reprenons ici les calculs présentés par Brown et al [24].

La fonction réponse impulsionnelle de la diode peut être écrite :

$$h(t) = (\Delta V)^{-1} \frac{di(t)}{dt} \quad (2.16)$$

où ΔV représente l'amplitude du créneau de tension appliqué à la diode et $i(t)$ la réponse en courant du composant à cette variation de potentiel.

L'admittance, en fonction de la pulsation, est alors directement calculée par transformée de Fourier :

$$y(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} h(t) \exp(-i\omega t) dt \quad (2.17)$$

Nous appliquons ce traitement au transitoire de courant obtenu pour un échelon de tension d'amplitude 0.045 V. En utilisant une représentation de type impédance plutôt qu'admittance, on montre que $z(\omega) = y^{-1}(\omega)$ s'écrit de manière très simple :

$$z(\omega) = r + i\omega l \quad (2.18)$$

Pour la structure AsGa/AlGaAs avec $L_B = L_W = 5 \text{ nm}$, on trouve $r = -11 \Omega$ et $l = -2.6 \text{ pH}$ pour un diamètre supposé de $15 \mu\text{m}$. Jusqu'à des fréquences très élevées de l'ordre du terahertz, les deux éléments, résistif et réactif, sont trouvés quasiment indépendants de la fréquence.

On aurait obtenu un résultat identique en supposant une évolution purement exponentielle du courant de type $\exp(-t/\tau_N)$, entre le courant pic et le courant vallée, avec $\tau_N = 1/r = 0.23 \text{ ps}$. Ceci signifie que la distribution des temps de relaxation observée figure 2.9, affectant le transitoire de courant, n'est pas suffisante pour être décelée au niveau de l'impédance de la diode. En revanche il devrait être possible,

comme nous le verrons dans le paragraphe suivant, d'obtenir des informations sur le temps de résonance à partir de la mesure d'un terme inductif intrinsèque.

Intuitivement un terme inductif dans la description en éléments localisés des phénomènes mis en jeu peut se comprendre dans la mesure où l'adaptation de la fonction d'onde à une nouvelle situation de tension ne peut se faire instantanément. Il convient de remarquer cependant que l'inductance, qui intervient en série avec la résistance différentielle négative, est elle aussi négative. Ceci provient directement de la relation $l = r \cdot \tau_N$. Il est à noter également que cette relation n'est pas valable au voisinage des extrema de courant où la conductance passe par zéro.

2.3 Détermination de l'impédance équivalente des diodes à tunnel résonnant

2.3.1 Introduction

Nous allons maintenant nous attacher à caractériser expérimentalement les effets de retard dans l'établissement du courant à une excitation de tension, par la mesure de l'impédance équivalente des diodes. L'un des problèmes qui se posent en pratique est de s'affranchir des éléments extrinsèques qui traduisent l'environnement de la diode. C'est pourquoi nous scindons notre présentation en deux sections. Elles correspondent à la mesure de deux diodes fondamentalement différentes : la première nous permet de traiter les problèmes de mesure et d'interprétation, la seconde nous permet de mettre en évidence les effets d'inductance intrinsèque.

2.3.2 Circuit équivalent à éléments localisés et problèmes associés à la mesure

2.3.2.1 Stabilité des mesures

Le problème principal de la mesure de l'impédance équivalente de la diode en régime de résistance différentielle négative est l'existence d'oscillations parasites. Pour nous aider à établir un critère de stabilité, nous pouvons reprendre les études faites sur les diodes tunnel de type Esaki. Le schéma équivalent, dans ce cas, se résume à celui donné figure 2.11. Dans l'ensemble de cette partie, nous négligeons les effets d'inductance intrinsèque représentés par L_{QW} .

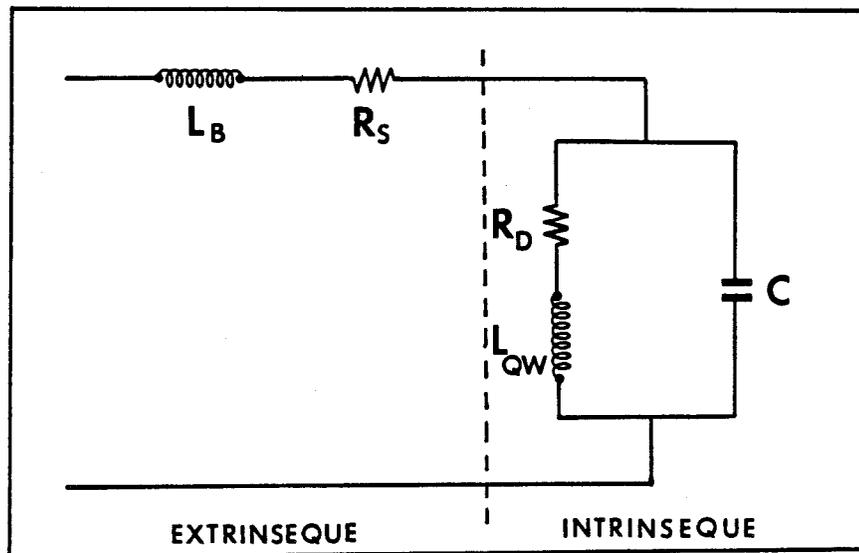


Figure 2.11 : Circuit équivalent à éléments localisés d'une diode à tunnel résonnant.

Dans ce schéma, les éléments intrinsèques R_d et C décrivent respectivement les effets de résistance différentielle négative et la capacité associée à la double barrière. La résistance R_S tient compte des termes de résistances séries de contact, des zones semiconductrices peu dopées, . . . Le terme L_b est l'inductance de connexion à la diode.

On montre alors que les conditions pour s'affranchir des oscillations sont [25] :

$$L_b < |R_d| R_S C \tag{2.19}$$

et

$$|R_d| > R_S \tag{2.20}$$

Il en résulte qu'il est nécessaire de travailler avec un niveau d'impédance minimum pour satisfaire les relations (2.19) et (2.20). Ceci peut être réalisé quand la section des composants est suffisamment réduite et/ou quand la transparence des barrières est faible. Par ailleurs il faut minimiser le terme d'inductance dû à la connectique.

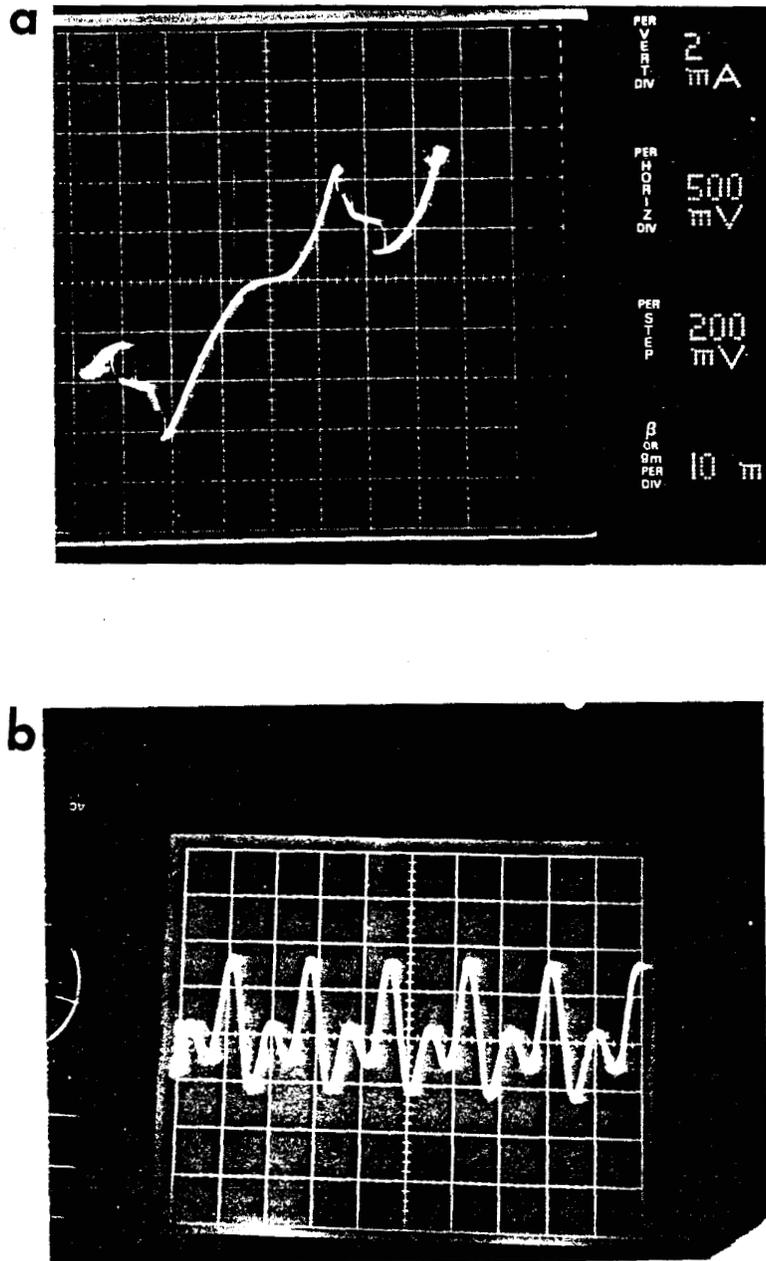


Figure 2.12 : Instabilité des diodes à tunnel résonnant en régime de résistance différentielle négative : déformations de la caractéristique courant-tension (a), visualisation de la tension à l'oscilloscope (b).

Pour illustrer concrètement ce qui se passe en pratique lorsqu'on ne respecte pas ces critères, nous représentons figure 2.12a une caractéristique $I(V)$ fortement instable en régime de résistance différentielle négative. On constate que l'existence d'oscillations, dont les variations temporelles sont visualisées figure 2.12b, se traduit sur la courbe $I(V)$ par des épaulements entre V_{pic} et $V_{vallée}$. Une analyse fine des différents régimes d'oscillations a été proposée dans la littérature [25] [26].

L'étude détaillée de ces phénomènes sort du cadre de notre travail. Nous retenons cependant qu'il est impossible dans ce cas d'obtenir une information fiable sur la résistance différentielle négative. Elle n'est alors que la valeur moyenne des états de conduction résultant des oscillations de tension.

2.3.2.2 Etude de la structure à forte conduction

Les mesures d'impédances sont effectuées par un analyseur de réseau HP8510B dans la gamme de fréquence 0.1-12.1 GHz. Au préalable, les composants sont montés dans des boîtiers microondes de type microruban BMH60. Pour minimiser l'inductance de connexion entre les lignes de transmission et les composants, la thermocompression d'un fil d'or de très faible longueur est effectuée. La liaison entre la cellule de mesure et l'analyseur de réseau est réalisée à l'aide de transitions APC7-OSM. Nous introduisons une calibration de type LRL qui nous permet de déterminer directement l'impédance dans le plan de la diode.

Etude en régime de résistance différentielle positive :

La structure caractérisée correspond à la structure A du chapitre 1, de diamètre 15 μm . Dans un premier temps, les mesures sont faites à température ambiante et nous montrons, figures 2.13a et 2.13b, les évolutions expérimentales des parties réelles et imaginaires (traits pleins) de l'impédance du composant en régime de résistance différentielle positive [27].

Trois points de polarisation sont présentés :

- à l'origine de la courbe $I - V$ ($V=0$ V) ;
- dans la zone de courant activé thermiquement ($V=200$ mV) ;
- pour une tension proche de la résonance ($V=600$ mV).

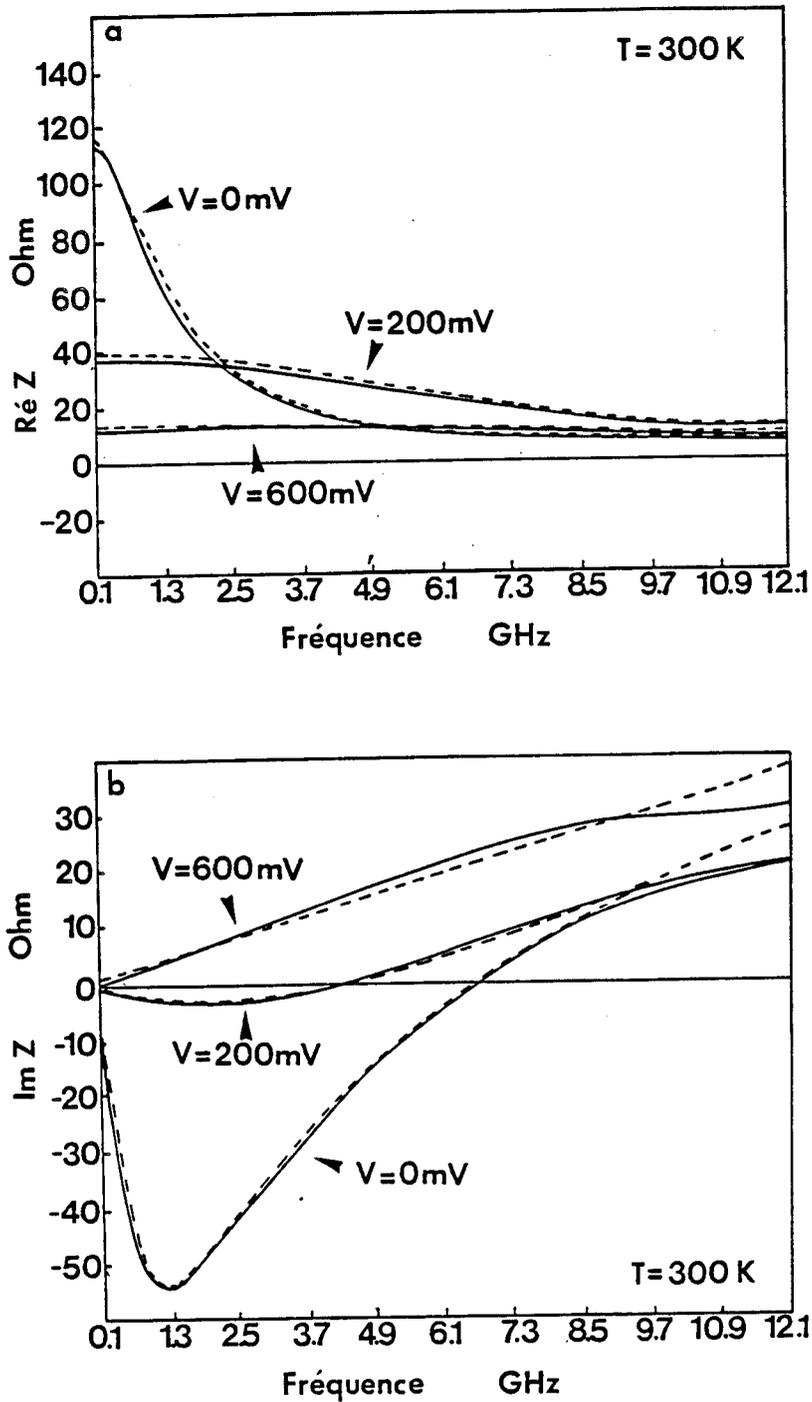


Figure 2.13 : Evolutions expérimentales (—) et théoriques (----) [Modèle RC] de l'impédance d'une diode $Al_3Ga_{.7}As/AlAs$ ($L_B = L_W = 5\text{ nm}$) à 300 K en régime de résistance différentielle positive en fonction de la fréquence.

- a) Partie réelle de Z
- b) Partie imaginaire de Z.

Il s'agit maintenant d'évaluer les éléments localisés du circuit de la figure 2.11, en négligeant L_{QW} en résistance différentielle positive. Un premier jeu de paramètres peut être obtenu de la façon suivante :

- La résistance R_d est théoriquement la résistance différentielle au point de polarisation. Si l'on suppose que le processus tunnel est un mécanisme suffisamment rapide, il est alors possible d'extraire sa valeur par dérivation de la courbe $I - V$ statique. La figure 2.14 montre les variations de $R_d = (dV/dI)$ en fonction de la polarisation ainsi que la caractéristique $I - V$ mesurée. R_d varie rapidement d'une valeur de 130Ω à $V=0$ V jusqu'à 10Ω près de la résonance.

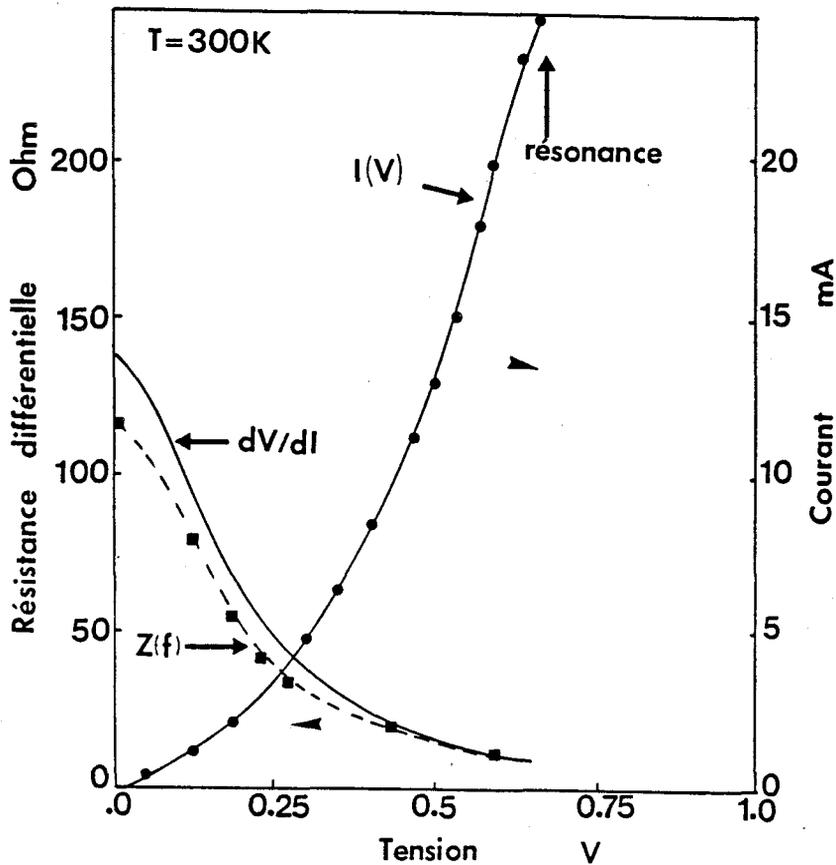


Figure 2.14 : Caractéristique courant tension et résistance dynamique d'une diode $Al_3Ga_{0.7}As/AlAs/GaAs$ ($L_B = L_W = 5$ nm) obtenue par différentiation de la courbe $I(V)$ et par mesures d'impédances à 300 K.

- La capacité C prend en compte les zones d'accumulation et de déplétion dans les espaceurs ainsi que l'hétérostructure double barrière-puits. Une évaluation directe de cette capacité est difficile : d'une part l'écrantage du champ électrique fait intervenir une zone d'accumulation, d'autre part nous travaillons avec des régimes de fortes densités de courant qui peuvent introduire de la réaction de charge d'espace dans la zone de déplétion. En effet, la densité de charges mobiles que l'on peut estimer par $n = J/eV - n = 1.2 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ pour une densité de courant de 20 kA.cm^{-2} et une vitesse moyenne de 10^7 cm.s^{-1} - est du même ordre de grandeur que le dopage $N_D = 2 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ de l'espaceur en aval de la double barrière. Enfin, cette capacité est susceptible de varier avec la tension. On montre ainsi qu'elle devient très vite inférieure à la capacité plan pour laquelle le diélectrique est restreint à la double barrière (1.3 pF) dès que l'on quitte l'équilibre. En pratique nous déterminons cette capacité par ajustement.
- R_S est dominée par la résistance de contact et par la résistance des espaceurs. Pour une couche en-tête avec un niveau de dopage de l'ordre de $2 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, la résistance de contact est typiquement de $10^{-6} \Omega.\text{cm}^{-2}$. La valeur de $5 \cdot 10^{-6} \Omega.\text{cm}^{-2}$ semble plus représentative du processus technologique pour cette série de diodes. En considérant un diamètre de $15 \mu\text{m}$, on obtient une résistance de contact de l'ordre de 3Ω . Il faut alors y ajouter la contribution des zones espaceurs que l'on peut estimer à 0.5Ω . On trouve donc R_S égale à 3.5Ω . Cette estimation semble réaliste, dans la mesure où des valeurs supérieures de R_S auraient perturbé le contrôle en tension de la diode, effet non constaté expérimentalement.
- L'inductance de connexion est directement fonction de sa longueur et de son diamètre, ici de l'ordre de $15 \mu\text{m}$. Compte tenu du rapprochement entre le composant et la ligne de transmission de la cellule ainsi que du diamètre du fil, on obtient typiquement 0.5 nH .

Avec ce jeu initial de données, il est possible de procéder à la comparaison théorie-expérience. Les résultats sont reportés figures 2.13a et b (traits pointillés). Pour les éléments indépendants de la tension, les valeurs retenues sont $R_S = 4.3 \Omega$ et $L_b = 0.53 \text{ nH}$. Pour C et R_d , qui varient selon le point de polarisation, on trouve pour les trois exemples précités :

-	$V = 0 \text{ V}$	$R_d = 115 \Omega$	et	$C = 1 \text{ pF}$
-	$V = 200 \text{ mV}$	$R_d = 34 \Omega$	et	$C = 0.69 \text{ pF}$
-	$V = 600 \text{ mV}$	$R_d = 8 \Omega$	et	$C = 0.69 \text{ pF}$

En étendant ces mesures à l'ensemble de la montée de courant, on obtient pour $R(V)$ la courbe référencée $Z(f)$ sur la figure 2.14. On constate un très bon accord avec dV/dI .

De plus, au niveau de la partie réactive, on constate que le décalage vers les basses fréquences de la fréquence de transition entre un comportement inductif et un comportement capacitif est bien traduit. Cet effet est directement la conséquence d'une augmentation de la conductance dynamique à tension croissante. En aucun cas il n'est nécessaire d'inclure un terme d'inductance autre que celui dû à la connexion. Il est important de souligner ce point, dans la mesure où, dans la littérature, il a été proposé d'introduire un terme d'inductance intrinsèque en série avec R_S [28].

Enfin précisons que le désaccord, que l'on peut observer dans la partie supérieure de la bande de fréquence pour la partie imaginaire de l'impédance, peut être attribué à une résonance de la cellule de mesure pour une fréquence de l'ordre de 13 GHz.

Etude en régime de résistance différentielle négative :

Lorsqu'on se polarise en régime de résistance différentielle à température ambiante, le composant se révèle instable quelles que soient les conditions de polarisation. Pour augmenter le niveau d'impédance, nous avons donc plongé la diode dans l'azote liquide. A cette condition, nous avons pu nous affranchir des oscillations pour un point de polarisation proche de la vallée. Les résultats expérimentaux et théoriques sont reportés sur la figure 2.15. Les valeurs des éléments localisés sont :

$$R_S = 3.5 \Omega, C = 0.6 \text{ pF}, L_b = 0.55 \text{ nH}, R_d = -120 \Omega$$

L'analyse de ces résultats [29] montre qu'il est nécessaire d'augmenter la résistance dynamique jusqu'à une valeur de l'ordre de 120 Ω . Il en résulte que la constante RC du circuit est ici de 72 ps, ce qui situe la fréquence caractéristique pour laquelle le niveau d'impédance est divisé par 2 à 2.2 GHz. La fréquence de coupure de la résistance différentielle négative est de 12 GHz.

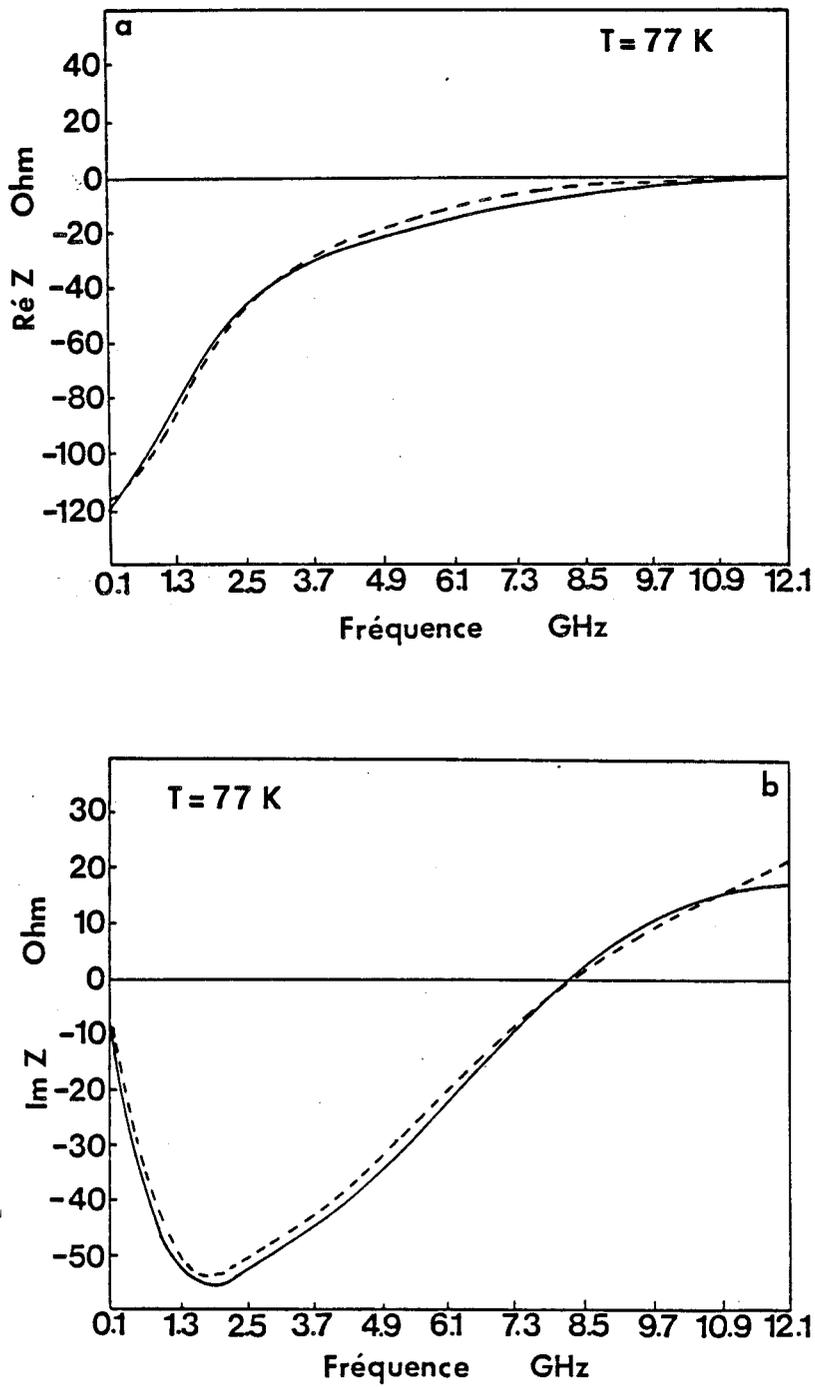


Figure 2.15 : Evolutions expérimentales (—) et théoriques (----) [Modèle RC] de l'impédance d'une diode $Al_3Ga_{0.7}As/AlAs$ ($L_B = L_W = 5\text{ nm}$) à 77 K en régime de résistance différentielle négative.

- a) Partie réelle de Z
- b) Partie imaginaire de Z .

Si l'on considère le terme d'inductance L_b , on obtient la même valeur qu'en régime de résistance différentielle positive, ce qui est une confirmation supplémentaire du caractère extrinsèque de L_b . La valeur relativement élevée de cette inductance, qui malgré tout nous apparaît la limite inférieure d'une technologie de thermocompression, a pour conséquence de situer la fréquence de résonance du circuit LC aux alentours de 8 GHz.

Il apparaît que, si l'on cherche à diminuer de façon significative L_b , il est nécessaire de mettre en oeuvre des processus technologiques plus élaborés.

Des premiers essais, qui utilisent une technologie intégrée, où la connexion électrique est réalisée par un microruban, ont été effectués au sein de notre équipe. Ces études ont montré qu'il est possible de gagner un ordre de grandeur sur L_b (typiquement $L_b = 50$ pH a été obtenu), permettant d'étendre le domaine de validité du critère de stabilité [30] [31].

2.3.2.3 Les limitations du circuit équivalent "RC"

Lorsqu'on essaie d'appliquer la méthode précédente à une structure possédant des barrières larges, similaire à la structure B du chapitre 1, des désaccords dans la confrontation théorie-expérience apparaissent lors de l'analyse en régime de résistance différentielle négative. Il n'est plus possible, par exemple, de décrire correctement la fréquence à laquelle disparaît la résistance différentielle négative. Pour pallier cette difficulté, il faut inclure les effets réactifs du courant particulaire dans l'analyse, phénomène que nous avons déjà introduit dans les études des transitoires de courant.

Rappelons que ces effets sont directement reliés au temps de vie du niveau quasi-lié. Il est donc tout à fait logique que, pour des structures à fortes densités de courant, ces phénomènes ne soient pas décelables dans la gamme de fréquence envisagée. Par ailleurs, le fait de travailler avec des composants de section importante ($S = 1.767 \cdot 10^{-6} \text{ cm}^2$) implique que l'inductance ramenée est tout à fait négligeable comparée à la capacité due au courant de déplacement [32].

Il n'en est pas de même pour des structures où les temps de réponse sont de l'ordre de quelques centaines de picosecondes, qui correspondent en pratique à des densités de courant de l'ordre de quelques dizaines d'ampères par centimètre carré.

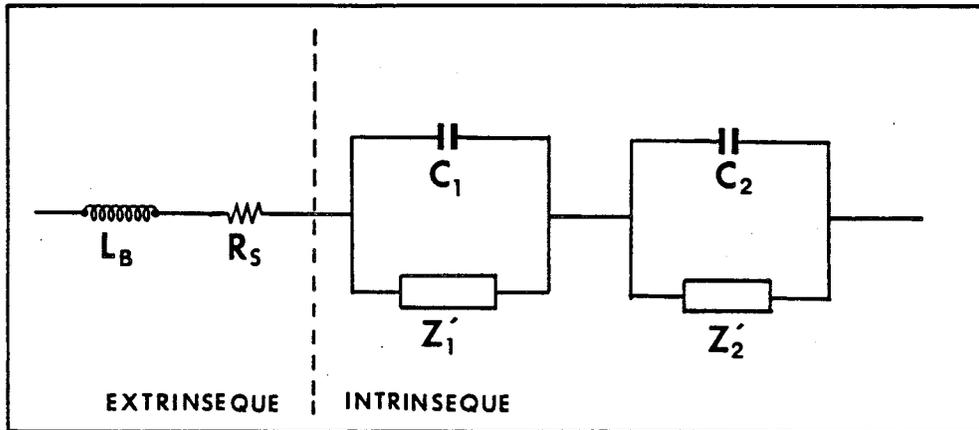


Figure 2.16 : Circuit équivalent petit signal d'une diode tunnel résonnant basé sur une analyse séquentielle de l'évolution du courant.

2.3.3 Mise en évidence d'une inductance intrinsèque sur une structure à faible conduction

2.3.3.1 Les circuits équivalents

Plusieurs modèles peuvent être proposés pour rendre compte d'un terme réactif intrinsèque. Nous utilisons ici deux modèles présentés respectivement par Brown et al [24] et par Sheard et Toombs [33], en montrant leur parfaite équivalence quant à la description de $Z(f)$.

Le premier modèle, noté "RLC" [24], a été proposé pour interpréter les variations de la puissance délivrée par des diodes en oscillation en fonction de la fréquence. Ces auteurs montrent qu'un modèle simplifié de type "RC" surestime la fréquence maximale d'oscillation. Par contre, un bon accord théorie-expérience est obtenu par le modèle "RLC" présenté figure 2.11. Dans la mesure où les données expérimentales proviennent d'une analyse grand signal, c'est en fait à la valeur moyenne des termes inductifs que l'on a accès. On peut néanmoins admettre que, en moyenne, on obtient une inductance intrinsèque $L_{QW} = \tau \cdot R_d$, où τ est le temps de vie du niveau résonnant et R_d la résistance différentielle moyenne sur l'excursion en tension aux bornes de la diode. Avec le circuit représenté figure 2.11, on peut déduire la fréquence maximale d'oscillation par la formule :

$$f_{RLC} = \frac{1}{2\pi} \left\{ \left[\frac{1}{L_{QW} \cdot C} \left(1 - \frac{C}{2L_{QW} \cdot G^2} \right) \right] \times \left[1 - \left(1 - \frac{(GR_S + 1)/GR_S}{(C/2L_{QW}G^2 - 1)^2} \right)^{1/2} \right] \right\}^{1/2} \quad (2.21)$$

avec $G = 1/R_d$.

Par passage à la limite $\tau \rightarrow 0$ qui correspond à l'hypothèse de phénomènes instantanés, on retrouve la solution classique du circuit "RC" :

$$f_{RC} = \frac{1}{2\pi C} \sqrt{-G/R_S - G^2} \quad (2.22)$$

La conséquence principale de l'introduction de L_{QW} dans le circuit équivalent est de diminuer la fréquence de coupure de la résistance différentielle négative ($f_{RCL} < f_{RC}$).

Le second modèle de Sheard et Toombs [33] a été proposé pour étudier plus particulièrement les structures dissymétriques. L'approche utilisée dans ce cas est séquentielle. Le processus tunnel global se fait alors en deux étapes : tout d'abord, les porteurs traversent la barrière émetteur par effet tunnel et vont dans le puits ; ensuite, ils s'échappent vers le collecteur. Il est donc plus direct d'utiliser une représentation mettant en série deux circuits bouchons représentatifs des deux processus.

Ce traitement permet de prendre en compte la contre-réaction électrostatique due à l'accumulation de charges dans le puits, particulièrement importante pour des structures dissymétriques, et de plus d'inclure l'effet capacitif de la zone d'accumulation dans l'émetteur.

Hormis les éléments extrinsèques R_S et L_b , qui ont toujours la même signification que précédemment, le circuit un peu plus complexe présente quatre éléments, montrés figure 2.16 :

- La capacité C_1 rend compte de l'accumulation de charges dans la zone amont de la double barrière. En première approximation, elle peut être définie comme un condensateur plan dont l'espace interélectrodes correspond à la distance entre les

maxima des probabilités de présence électronique dans la zone d'accumulation et dans le puits. De façon plus pratique, C_1 peut être calculée par la relation :

$$C_1 = \frac{\epsilon S}{L_\psi + L_{B_1} + L_W/2} \quad (2.23)$$

où L_ψ est la longueur d'écrantage du champ électrique dans l'émetteur, L_{B_1} la largeur de la première barrière et L_W la largeur du puits. La constante diélectrique ϵ peut être considérée comme constante et égale à celle du GaAs.

- La capacité C_2 intègre la partie aval de la double barrière, en particulier la zone de déplétion. Elle a une expression similaire :

$$C_2 = \frac{\epsilon S}{L_W/2 + L_{B_2} + L_D} \quad (2.24)$$

où L_D est la longueur de la zone désertée.

- Les impédances Z'_1 et Z'_2 ont pour expression :

$$\frac{1}{Z'_1} = \frac{1}{R_C} \cdot \frac{i\omega + \tau_2^{-1}}{i\omega + \tau_0^{-1}} \quad (2.25)$$

et

$$\frac{1}{Z'_2} = \frac{1}{R_D} \cdot \frac{\tau_C^{-1}}{i\omega + \tau_0^{-1} + \tau_C^{-1}} \quad (2.26)$$

où τ_1 et τ_2 représentent respectivement les temps de fuite des barrières gauche et droite ;

$\tau_0(1/\tau_0 = 1/\tau_1 + 1/\tau_2)$ est le temps de vie du niveau quasi lié ;

$\tau_C = R_C C_1$.

Ces expressions utilisent également deux résistances notées R_C et R_D .

La première de ces résistances (R_C) traduit les variations de la fonction de remplissage du puits $f(V_1)$ à une variation de tension localisée au niveau de la barrière émetteur (V_1). On a en effet :

$$R_C = \frac{\partial f(V_1)}{\partial V_1} \quad (2.27)$$

La fonction $f(V_1)$ dépend non seulement de la barrière émetteur mais aussi de la façon dont sont peuplés les états d'énergie de l'émetteur. C'est donc une fonction relativement complexe, en particulier lorsque l'émetteur est bidimensionnel. Il est alors difficile de l'évaluer directement.

En revanche, R_d traduit la résistance à la fuite des électrons vers le collecteur. On peut l'approximer par :

$$R_d = \tau_2 / C_2 \quad (2.28)$$

A partir des relations (2.25) et (2.26), on constate que, pour ω tendant vers 0, le schéma équivalent se résume à deux circuits RC parallèles mis en série. La résistance différentielle statique a alors pour expression :

$$R = \frac{\tau_2}{\tau_0} \cdot \frac{C_1 + C_2}{C_2} R_C + R_d \quad (2.29)$$

en supposant la résistance série négligeable.

Cette expression donne un moyen d'accéder à R_C dans la mesure où R est la résistance différentielle que l'on peut calculer à partir de la courbe $I - V$ expérimentale.

En appliquant cette procédure, comme l'ont fait Sheard et Toombs [33] sur nos mesures, on constate que ce modèle permet de décrire les variations expérimentales de l'impédance pour la structure à fortes densités de courant. Les conclusions que nous avons tirées dans le paragraphe précédent restent valables.

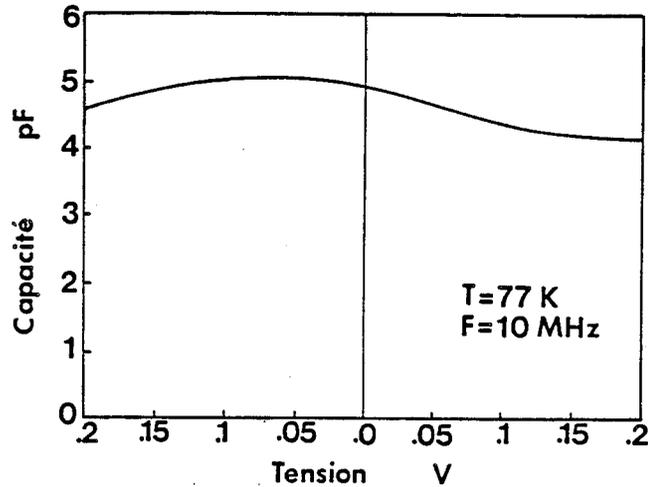


Figure 2.17 : Caractéristique capacité-tension d'une diode $Al_3Ga_{0.7}As/GaAs$ ($L_B = 10 \text{ nm}$; $L_W = 5 \text{ nm}$) à 77 K

2.3.3.2 Confrontation théorie-expérience. Structure larges barrières

Pour la structure à larges barrières, on peut s'attendre à ce qu'il soit possible de mettre en évidence un effet d'inductance intrinsèque. Ces structures ont des résistances dynamiques de l'ordre de $1 \text{ k}\Omega$ et des temps de durée de vie de l'état résonnant proches de la nanoseconde. Une rapide estimation de L_{QW} , à partir de la relation $L_{QW} = \tau R_d$, donne $L_{QW} = 1 \mu H$.

Pour vérifier expérimentalement cette valeur, il convient au préalable de déterminer au mieux les autres éléments localisés du schéma équivalent de la figure 2.11. Si cet objectif est atteint, il est alors possible de se limiter à un seul paramètre ajustable pour reproduire les variations expérimentales de l'impédance : le temps de vie du niveau quasi-lié.

Nous utilisons dans ce but des mesures complémentaires de $C(V)$, $Z(f)$ et $I(V)$.

- Mesure de la capacité : $C(V)$.

La figure 2.17 montre les variations de la capacité de la diode en fonction de la tension en polarisation directe et inverse. Ces mesures sont effectuées à 77 K à la fréquence de 10 MHz. On constate que, sur une plage de tension comprise entre -0.2 V et $+0.2 \text{ V}$, la capacité est quasi constante avec une valeur proche de 4.65 pF . Si l'on traduit cette valeur en termes de longueur de zone désertée par la relation

$e = \epsilon.S/C$, on obtient $e = 85 \text{ nm}$ pour $S = 3.6 \cdot 10^{-5} \text{ cm}^{-2}$. Ce résultat est en excellent accord avec les longueurs cumulées de la double barrière et de l'espaceur côté collecteur. Rappelons que ces zones sont non intentionnellement dopées ; il en résulte qu'elles sont très rapidement désertées pour de faibles tensions de polarisation. Cet accord peut s'expliquer aussi par le fait que, contrairement aux structures à fortes densités de courant, les effets de charges d'espace sont ici négligeables.

• Détermination des éléments extrinsèques : $Z(f)$

Les deux éléments à déterminer sont L_b et R_S . Pour calculer ce dernier élément, il suffit de relever les variations fréquentielles de la partie réelle de l'impédance lorsque le composant est non polarisé. Dans ce cas la constante RC est souvent très importante, compte tenu de la résistance R_d , et l'impédance tend alors très vite (quelques gigahertz) vers la résistance série. Pour ce composant, nous avons trouvé $R_S = 4.5\Omega$.

En conservant $V = 0$, l'étude de la partie imaginaire de $Z(f)$ permet d'accéder à L_b à partir de la fréquence de résonance du circuit LC . Nous obtenons $L_b = 0.45nH$.

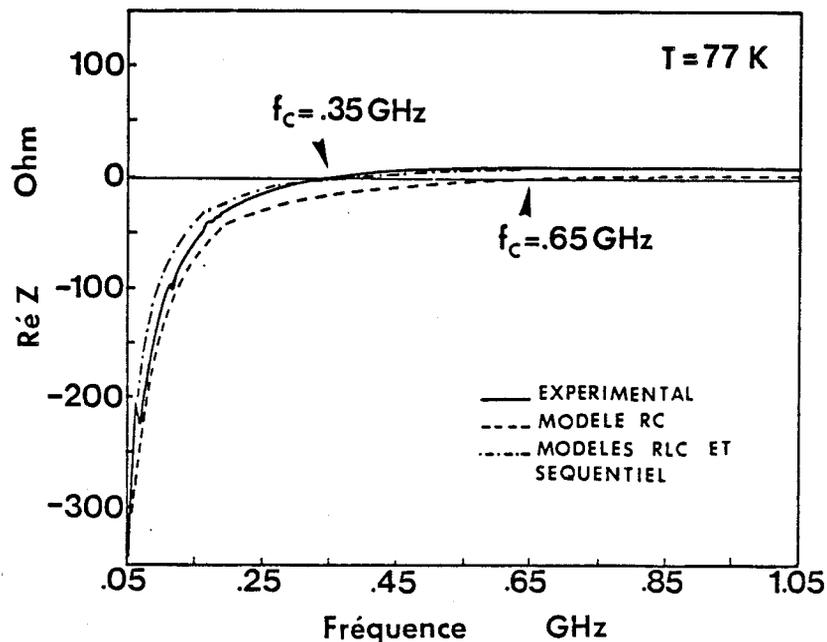


Figure 2.18a : Comparaison théorie-expérience de l'évolution fréquentielle de l'impédance d'une diode (partie réelle de Z) $Al_{.35}Ga_{.65}As/AlAs$ ($L_B = 10 \text{ nm}$; $L_W = 5 \text{ nm}$) à 77 K en régime de résistance différentielle négative.

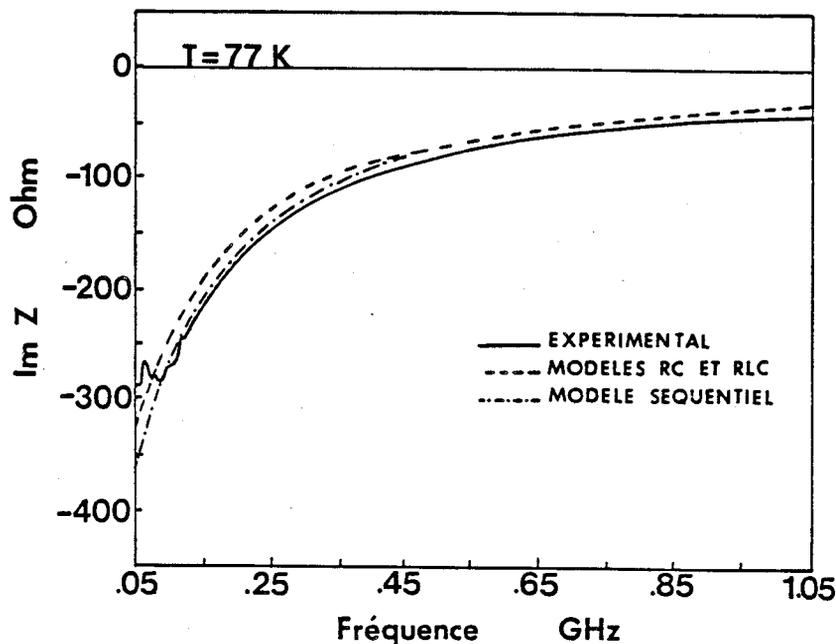


Figure 2.18b : Comparaison théorie-expérience de l'évolution fréquentielle de l'impédance d'une diode (partie imaginaire de Z) $Al_{.35}Ga_{.65}As/AlAs$ ($L_B = 10 \text{ nm}$; $L_W = 5 \text{ nm}$) à 77 K en régime de résistance différentielle négative.

- Mesure de la résistance différentielle négative : $I(V)$.

En pratique la RDN est déterminée en différentiant point par point la courbe $I(V)$ mesurée à 77K. Rappelons que, pour cette structure à forte impédance, la caractéristique courant tension est inconditionnellement stable dans toute la plage d'existence de la résistance différentielle négative. On obtient typiquement des valeurs variant entre -500Ω et $-2 \text{ k}\Omega$.

- Détermination de L_{QW} .

Les figures 2.18a et 2.18b montrent l'évolution des parties réelles et imaginaires de l'impédance mesurée à 77 K entre 50 MHz et 1.05 GHz. Sur ces figures, nous avons également reporté les valeurs calculées en supposant respectivement un modèle de type "RC" et un modèle de type "RLC". Le point de polarisation est situé un peu au-delà du milieu de la zone de résistance différentielle négative. La valeur de R_d en ce point est -650Ω . Au vu de ces résultats, on constate que la coupure de la partie réelle de l'impédance n'est pas correctement estimée par une approche de type "RC" ($f_c = 650 \text{ MHz}$).

Par contre un excellent accord est obtenu sur la valeur $f_c = 350 \text{ MHz}$ par le modèle

de type "RCL", pour une valeur de L_{QW} ajustée à -410 nH. Cet abaissement de la fréquence de coupure consécutif à l'introduction de L_{QW} n'est pas un effet fin. Il existe un facteur deux entre les valeurs de f_c données par les deux modèles. Ceci étant, on peut extraire une estimation du temps de vie du niveau quasi-lié. On trouve $\tau = L_{QW}.R_d = 0.6 \text{ ns}$ avec la valeur précédente de L_{QW} . Cette estimation expérimentale est en bon accord avec celle calculée à partir de la courbe de transmission $\tau = \hbar/\Gamma$, comme le montre la figure 2.10. Enfin il est à noter que L_{QW} n'affecte pas de manière significative les variations de $X(f)$.

Nous pouvons maintenant étudier dans quelle mesure le modèle de Sheard et Toombs permet de rendre compte des variations fréquentielles de $Z(f)$.

La première étape consiste à déterminer les valeurs des temps τ_0, τ_1 et τ_2 , des capacités C_1 et C_2 et des résistances R_C et R_D :

- Pour l'évaluation de τ_1 et τ_2 , nous supposons que τ_0 , le temps de vie du niveau quasi-lié du puits, est de 1 ns. De plus, nous considérons que les temps de fuite à gauche et à droite sont identiques. On obtient $\tau_1 = \tau_2 = 2 \text{ ns}$.
- Pour le calcul de C_1 , nous supposons que la zone d'accumulation s'étend sur une longueur caractéristique de 5 nm. A partir de la relation (2.23), nous obtenons $C_1 = 22.6 \text{ pF}$ pour une surface de $3.6 \cdot 10^{-5} \text{ cm}^2$. Avec l'hypothèse d'une zone désertée de 60 nm côté collecteur nous trouvons, pour les mêmes conditions, $C_2 = 5.5 \text{ pF}$.
- Pour le calcul des éléments résistifs, nous déterminons tout d'abord R_D par la relation $R_D = \tau_2/C_2$, ce qui donne $R_D = 360 \Omega$. Sachant que la résistance statique au point de polarisation envisagé vaut -650Ω , on en déduit par l'équation (2.29) $R_C = -100 \Omega$.

Les valeurs calculées de $Z(f)$ en fonction de la fréquence sont reportées sur les figures 2.18a et 2.18b, respectivement pour les parties réelle et imaginaire de l'impédance. Pour ces simulations, nous avons conservé les valeurs précédentes de R_S et L_b . Les différences que l'on trouve avec le comportement fréquentiel du circuit RLC sont minimales, comme on peut le constater sur les variations de la partie imaginaire. Pour simplifier les figures 2.18a et 2.18b, nous avons donc reporté une seule évolution pour la partie réelle. Ceci montre la parfaite équivalence entre les deux modèles. Le

même type de traitement a été appliqué pour d'autres points de polarisation en résistance différentielle négative. Les mêmes phénomènes se reproduisent et les valeurs de temps de vie du niveau résonnant s'échelonnent entre 0.5 ns et 1 ns.

2.3.3.3 Remarques

Les résultats que nous venons de présenter nous semblent une première vérification expérimentale de l'influence non négligeable du temps de vie fini du niveau quasi-lié sur la fréquence maximale d'oscillation.

En utilisant une structure à très faibles densités de courant, il nous a été possible de mettre en évidence cet effet pour de très basses fréquences et ce, avec des surfaces de composants relativement grandes. A l'avenir, il nous semble qu'il devrait être possible de transposer ces résultats au cas des diodes à fortes densités de courant.

De manière générale, l'expérience que nous avons tirée de ces premières mesures nous amène à faire les remarques suivantes :

- Il convient, tout d'abord, de travailler sur des composants de surface extrêmement faibles pour que, d'une part, la stabilité de la diode soit assurée et que, d'autre part, l'effet inductif intrinsèque ne soit pas masqué par les effets capacitifs.
- Il est impératif, ensuite, d'effectuer les mesures d'impédances pour des fréquences proches de la fréquence de coupure de la résistance différentielle négative. Il en résulte que, pour des temps de piégeage de l'ordre de la picoseconde, des mesures à 40 GHz sont nécessaires.

2.4 Conclusion

Dans ce chapitre, nous nous sommes intéressés aux transitoires de courant lorsqu'un échelon de tension est appliqué aux bornes de la diode et à la mise en évidence expérimentale d'un effet d'inductance intrinsèque par des mesures d'impédances.

Au terme de cette étude, les points suivants méritent d'être soulignés :

- Par la résolution de l'équation de Schrödinger dépendante du temps, on obtient une image très physique de la façon dont les porteurs remplissent ("transition

vallée-pic”) le puits ou s’en échappent (”transition pic-vallée”). En particulier, il est possible de mettre en évidence des inversions du sens de déplacement des porteurs autour du milieu du puits où la probabilité de présence est maximale. De plus, les simulations montrent l’existence d’une distribution des temps de relaxation lors du retour à l’équilibre. Transposée à l’information d’impédance grand signal, cette dispersion ne suffit pas à introduire une dépendance fréquentielle du terme réactif de l’impédance. Dans le cas d’une transition pic-vallée, ce terme réactif est inductif et négatif.

- Sur cette base théorique, nous avons cherché à extraire cet effet d’inductance négative par la mesure d’impédances de diodes à très faibles densités de courant. Nous avons alors montré qu’il est nécessaire de prendre en compte l’influence du temps de vie fini du niveau quasi-lié, trouvé égal à 0.6 ns pour nos composants, afin de décrire correctement les variations fréquentielles de l’impédance. La conséquence pratique dans les applications de cet effet est de réduire de manière significative (un facteur deux dans notre cas) la fréquence maximale d’oscillation des composants à tunnel résonnant.

Il est temps, désormais, de considérer plus en détail l’espace de transit situé en aval de la double barrière. Dans cette zone, les porteurs injectés sont des électrons chauds et ils y subissent des chocs. Nous allons étudier ces effets de transport par la méthode de Monte-Carlo.

Bibliographie

- [1] E.R. BROWN, C.D. PARKER, L.J. MAHONEY, J.R. SÖDERSTRÖM,
T.C. Mac GILL
Room temperature oscillations up to 675 GHz in InAs/AlSb resonant tunneling
diodes.
Device Research Conference (Santa Barbara) (1990).
- [2] T.C.L.G. SOLLNER, W.D. GOODHUE, P.E. TANNENWALD, C.D. PARKER,
D.D. FECK
Resonant tunneling through quantum wells at frequencies up to 2.5 THz.
Appl. Phys. Letters 43 (1983) p. 588.
- [3] S. COLLINS, D. LOWE, J.R. BARKER
The quantum mechanical tunneling time problem-revisited.
J. Phys. C. Solid State Phys. 20 (1987) p. 6213.
- [4] R. LANDAUER, M. BÜTTIKER
Diffusive transversal time : Effective area in magnetically induced interference.
Phys. Rev. B. Vol. 32 n°12 (1987) p. 6255.
- [5] M. BÜTTIKER, R. LANDAUER
Comment on "The quantum mechanical tunneling time problem-revisited"
J. Phys. C. Solid State Phys. 21 (1988) p. 6207.
- [6] P.J. PRICE
Frequency dependance of resonant tunneling
Resonant Tunneling in Semiconductors : Physics and Applications (Plenum Press)
(1990) in the press.

- [7] G.C. CALDERON
Tunneling times in double heterostructures
Resonant Tunneling in Semiconductors : Physics and Applications (Plenum Press)
(1990) in the press.
- [8] L. de SAINT POL
Modélisation de l'effet tunnel résonnant dans les hétérostructures double barrière
en vue d'applications analogiques très hautes fréquences.
Thèse - Université de Lille I (1990).
- [9] C. PRESILLA, G. JONA-LASINIO, F. CAPASSO
Dynamical analysis of resonant tunneling in presence of a self consistent potential
due to the space charge.
Resonant Tunneling in Semiconductors : Physics and Applications (Plenum Press)
(1990), in the press.
- [10] S. COLLINS, D. LOWE, J.R. BARKER
A dynamical analysis of resonant tunneling
J. Phys. C. : Solid State Phys. 20 (1987) p. 6233.
- [11] W.R. FRESNLEY
Boundary Conditions for Open Quantum Systems Driven Far from Equilibrium.
Rev. of Modern Physics, à paraître.
- [12] R.K. MAINS, G.I. HADDAD
Time dependant modeling of resonant tunneling diodes from direct solution of the
Schrödinger equation
J. Appl. Phys. 64 (1988) p. 3564.
- [13] A. GOLDBERG, H.M. SCHEY, J.L. SCHWARTZ
Computer Generated Motion Picture of 1 - dimensional quantum mechanical
Transmission and Reflection phenomena
Am. J. Phys. 35 (1967) p. 177.
- [14] R.K. MAINS, G.I. HADDAD
Improved boundary conditions for the time dependant Schrödinger equation.
Appl. Phys. 67 (1990) p. 591.

- [15] W.R. FRENSLEY
Wigner function model of a resonant tunneling semiconductor device.
Phys. Rev. B. Vol. 36 n°3 (1987) p. 1570.
- [16] K.L. JENSEN, F.A. BUOT
Numerical aspects on the simulation of I-V characteristics and switching times of resonant tunneling diodes.
J. Appl. Phys. 67 (1990) p. 2153.
- [17] T. INATA, S. MUTO, Y. NAKATA, S. SASA, T. FUJII, S. HIYAMIZU
A pseudomorphic $In_{0.53}Ga_{0.47}As/AlAs$ resonant tunneling barrier with a peak to valley ratio of 14 at room temperature.
Jpn Journal of. Appl. Phys. 26 (1987) L. 1332.
- [18] D.Y. OBERLI, J. SHAH, T.C. DAMEN, J.M. KUO, J.E. HENRY, J. LARY, S.M. GOODNICK
Optical phonon-assisted tunneling in double quantum well structures
Appl. Phys. Lett. 56 (1990) p. 1239.
- [19] M. TSUCHIYA, T. MATSUSUE, H. SAKAKI
Tunneling escape rate of electrons from quantum well in double barrier heterostructures.
Phys. Rev. Letters. Vol. 59 n°20 (1987) p. 2356.
- [20] T.B. NORRIS, X.J. SONG, W.J. SCHAFF, L.F. EASTMAN, G. WICKS, G.A. MOUROU
Tunneling escape time from a quantum well under the influence of an electric field.
Appl. Phys. Lett. 54 (1989) p. 60.
- [21] A. TACKEUCHI, T. INATA, S. MUTO, E MIYAUCHI
Picosecond Characterization of InGaAs/InAlAs Resonant Tunneling Barrier Diode by Electro-Optic Sampling.
Jpn. Journal of Appl. Phys. 28 (1989) 1 750.
- [22] J.F. WHITAKER, G.A. MOUROU, T.C.L.G. SOLLNER, W.D. GOODHUE
Picosecond switching time measurement of a resonant tunneling diode.
Appl. Phys. Lett. 53 (1988) p. 385.

- [23] L. de SAINT POL, D. LIPPENS, F. CLÉROT, B. LAMBERT, B. DEVEAUD, B. SERMAGE
Time domain analysis of resonant tunneling in double barrier heterostructures
Inst. Phys. Conf. Ser n°106, chapter 11 (1989) p. 801.
- [24] E.R. BROWN, C.D. PARKER, T.C.L.G. SOLLNER
Effect of quasi-bound state lifetime on the oscillation power of resonant tunneling diodes.
Appl. Phys. Lett. 54 (1989) p. 934.
- [25] C. KIDNER, I. MEHDI, J.R. EAST, G.I. HADDAD
Power and Stability limitations of resonant tunneling diodes
IEEE Trans. on microwave theory and techniques Vol. 38 n°7 (1990) p. 864.
- [26] R. BOUREGBA, O. VANBÉSIEN, L. de SAINT POL, D. LIPPENS
 $Al_3Ga_7As - GaAs$ microwave resonant tunneling oscillator.
Ann. Telecommun. (45) n°3-4 (1990) p.184.
- [27] D. LIPPENS, O. VANBÉSIEN
Experimental study of the microwave impedance of resonant tunneling diodes.
Microwave and Optical Technology Letters, Vol. 2 n°7 (1989) p. 233.
- [28] J.M. GERING, D.A. CRIM, D.G. MORGAN, P.D. COLEMAN, W. KOPP, H. MORKOÇ
A small signal equivalent circuit model of $GaAs - Al_xGa_{1-x}As$ resonant tunneling heterostructures at microwave frequencies.
J. Appl. Phys. 61 (1987) p. 271.
- [29] D. LIPPENS, P. MOUNAIX
Small signal impedance of $GaAs - Al_xGa_{1-x}As$ resonant tunneling heterostructures at microwave frequency.
Electronic letters Vol. 24 n°18 (1988) p. 1180.
- [30] D. LIPPENS, E. BARBIER, P. MOUNAIX
Fabrication of high performance $Al_xGa_{1-x}As/In_yGa_{1-y}As/GaAs$ resonant tunneling diodes using a microwave compatible technology
I.E.E.E. Electron device letters, Mars 91.

- [31] P. MOUNAIX, A. FATTORINI, J.L. LORRIAUX, M. FRANÇOIS, M. MIENS,
J. VANBREMEERSCH, D. LIPPENS
Integration of a resonant tunneling structure for microwave applications.
A paraître dans Revue de Physique Appliquée.
- [32] O. VANBÉSIEN, D. LIPPENS
D.C. and A.C. analysis of high current double barrier structures.
Solid State Electronics Vol. 32 n°12 (1989) p. 1533.
- [33] F.W. SHEARD, G.A. TOOMBS
Space charge effects and ac response of resonant tunneling double barrier diodes.
Solid State Electronics Vol. 32 n°12 (1989) p. 1433.

Chapitre 3

La méthode de Monte-Carlo appliquée au
tunnel résonnant

Chapitre 3

La méthode de Monte-Carlo appliquée au tunnel résonnant

3.1 Introduction

La méthode de MONTE-CARLO est largement utilisée dans l'étude du transport électronique. Initialement, elle a permis de déterminer les propriétés de conduction de matériaux massifs (la vitesse de dérive en fonction du champ électrique [1] [2], les coefficients d'ionisation par choc [3], etc . . .). Grâce à la puissance accrue des moyens de calcul, elle a été également appliquée à l'étude du transport dans les superréseaux [4], dans les composants à effet de champ [5] ou encore dans les transistors bipolaires à hétérojonctions [6]. Le calcul du transport dans les sous-bandes d'un gaz 2D a été possible en introduisant dans cette méthode des effets quantiques [7]. De manière générale, il a été montré que cette approche du transport est particulièrement bien adaptée pour traiter les problèmes d'électrons chauds [8].

Cette approche est basée sur un traitement statistique des phénomènes d'interactions que subissent les porteurs (électrons ou trous). Ses prévisions quant aux performances attendues des composants simulés se sont révélées très proches de la réalité physique.

Dans le cadre de ce chapitre, nous utiliserons la méthode de MONTE-CARLO de deux façons distinctes :

- Tout d'abord, nous l'emploierons pour évaluer les régimes transitoires dans l'espaceur aval d'une diode à tunnel résonnant. Cela nous permettra, par exemple, de connaître le comportement en vitesse moyenne d'un paquet de porteurs injectés hors équilibre dans une zone de transit. En couplant les résultats ainsi obtenus à une approche macroscopique du transit [9], nous pourrons calculer les performances en puissance et les niveaux d'impédance d'une diode de type QWITT ("Quantum Well Injection Transit Time"). Nous serons alors en mesure d'optimiser cette zone de transit, en longueur et en dopage, afin d'augmenter les performances de ces composants.
- Ensuite, nous étudierons un nouveau type de simulation MONTE-CARLO, qui nous permettra d'englober une structure tunnel résonnant complète [10]. Dans cette approche, nous distinguerons les régions où il sera impératif de prendre en compte le caractère ondulatoire de l'électron (zone double barrière-puits) des régions où le porteur sera considéré comme une particule. Loin d'être exhaustive, cette étude nous permettra toutefois de saisir l'intérêt d'une telle modélisation. Celle-ci demande néanmoins des moyens informatiques souvent considérables.

3.2 Utilisation de la méthode de Monte-Carlo pour l'évaluation des régimes transitoires

3.2.1 La méthode de Monte-Carlo appliquée au transport électronique

Le logiciel de base que nous allons utiliser est une méthode monoparticulaire à champ électrique constant, développée il y a quelques années dans notre laboratoire [11]. Ce logiciel a été adapté et complété pour l'étude du transport à champs électriques très élevés (typiquement supérieurs à 100 kV.cm^{-1}). Le but était alors d'étudier les propriétés d'ionisation par choc dans les matériaux massifs GaAs et $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ [12].

Les principes essentiels de cette méthode sont les suivants : au sein du semi-conducteur, le porteur libre est soumis à une force développée par le champ électrique interne ; de plus, il subit des interactions avec le réseau cristallin.

Classiquement, le bilan entre l'action du champ électrique et les phénomènes de diffusion est obtenu par la résolution de l'équation de BOLTZMANN dont on ne peut



trouver des solutions analytiques que dans des cas très simples. L'un des moyens de contourner cette difficulté consiste à simuler le transport des porteurs en traitant les chocs avec le réseau de manière statistique.

En pratique, l'histoire de l'électron ou du trou est étudiée dans l'espace réciproque. Le parcours du porteur peut alors se décrire par une succession de phases dites de vol libre, perturbées par des interactions avec le réseau. Détaillons ces deux processus :

- Phase de vol libre : le vol libre est défini par rapport à un intervalle de temps pendant lequel le porteur ne subit aucune interaction provenant du réseau ; la force développée par le champ électrique F dans la direction z est :

$$\hbar \frac{dk}{dt} = e.F \quad (3.1)$$

Si à présent on discrétise l'intervalle de temps d'observation de la particule, le vecteur d'onde obéit à une équation aux différences finies à partir de laquelle il est possible de remonter à l'énergie et à la vitesse de la particule :

$$k(t + \Delta t) = k(t) + qF.\Delta t/\hbar \quad (3.2)$$

- Traitement des interactions : à la base, nous supposons que les probabilités d'interactions ne dépendent que de l'énergie ; nous négligeons donc toute anisotropie dans l'espace réciproque. Ceci nous permet de calculer, à toute énergie, les probabilités d'interactions qui sont ensuite sommées afin de définir un taux d'interaction global. La comparaison de ce dernier à un nombre aléatoire permet de déterminer si le porteur, à l'instant donné, subit une interaction. Si c'est le cas, un second nombre aléatoire est tiré afin de définir le type de choc que subit effectivement le porteur. Enfin, on calcule l'état du porteur après interaction suivant que celle-ci est élastique ou inélastique.

Nous donnons, en annexe C, l'organigramme de principe simplifié d'une telle simulation, appelée monoparticulaire dans la mesure où nous ne considérons que l'histoire d'un seul porteur.

Le but que nous nous fixons dans ce chapitre est de suivre, temporellement et spatialement, l'évolution d'un paquet de porteurs injectés dans une zone de transit. Il est donc nécessaire de développer une simulation multiparticulaire.

En pratique, le nombre de particules utilisées doit être suffisant (typiquement plusieurs milliers) pour accéder au régime transitoire (en vitesse ou en énergie) sans que celui-ci soit noyé dans un bruit numérique important.

De plus, il est à noter que :

- aucune interaction de type électron-électron n'est implantée dans notre simulation ;
- nous envisageons la possibilité de prendre en compte un champ électrique variant spatialement.

Avant de mettre en oeuvre une telle simulation, deux points méritent d'être soulignés ; ils représentent les deux moteurs du programme :

- il faut décrire avec suffisamment de précision la structure électronique des matériaux envisagés ;
- il faut calculer les probabilités d'interactions en fonction des paramètres intrinsèques des matériaux.

3.2.2 Structure électronique

3.2.2.1 Méthode du pseudopotentiel empirique

Le transport électronique dans les zones de transit des diodes à tunnel résonnant va impliquer des énergies relativement élevées dans la première bande de conduction. Ainsi les relations de dispersion simples, du type $E = \hbar^2 k^2 / 2 m^*$, ne suffiront plus. Il semble donc nécessaire d'avoir une connaissance plus approfondie de la structure de bandes dans la première zone de Brillouin. La détermination des diagrammes de dispersion peut se faire à l'aide de plusieurs formalismes. Citons par exemple les calculs dans l'approximation des liaisons fortes ou les méthodes de pseudopotentiel.

Comme nous allons nous intéresser exclusivement au transport électronique, nous avons utilisé des calculs de structure de bandes par la méthode du PSEUDOPOTENTIEL EMPIRIQUE LOCAL [13], qui est bien adaptée à la description des bandes de conduction.

Le principe général de la méthode consiste à déterminer les valeurs d'énergie propres $E_n(k)$ par la résolution de l'équation de Schrödinger :

$$\left(\frac{p^2}{2m} + V(r)\right) \psi_n(k) = E_n(k) \psi_n(k) \quad (3.3)$$

où $\psi_n(k)$ représente la fonction d'onde de l'électron et $V(r)$ le potentiel atomique ; il peut s'écrire :

$$V(r) = \sum_G V(G) S(G) e^{iGr} \quad (3.4)$$

où G est un vecteur du réseau réciproque, $S(G)$ représente le facteur de structure, $V(G)$ est le facteur de forme du pseudopotentiel. On montre que, dans le cas des semiconducteurs, le potentiel peut se mettre sous la forme :

$$V(r) = \sum_G \left(S^S(G) V^S(G) + i S^A(G) V^A(G) \right) e^{iG \cdot r} \quad (3.5)$$

(S pour symétrique, A pour antisymétrique) avec, dans la structure diamant ou zinc-blende, des facteurs de structure s'écrivant :

$$S^S(G) = \cos(G\tau)$$

$$S^A(G) = \sin(G\tau) \quad (3.6)$$

avec $\tau = a(1/8, 1/8, 1/8)$, a représentant la constante de maille.

La détermination des potentiels symétriques et antisymétriques se fait par un ajustement de ces paramètres pour reproduire les caractéristiques expérimentales de la structure de bandes (par exemple : transition optique, réflectance . . .).

En pratique, nous utilisons un pseudopotentiel empirique local n'incluant pas l'interaction spin-orbite ; il en résulte que pour la bande de valence :

- nous ne décrivons pas la levée de dégénérescence trous lourds - trous légers ;
- nous n'obtenons pas de décalage en énergie dit de "SPLIT-OFF" pour la troisième bande de valence.

Ces approximations n'ont cependant pas d'incidence sur les bandes de conduction.

Concrètement, il suffit de calculer $E(k)$ dans la zone de BRILLOUIN réduite à partir de laquelle, par symétrie, on peut connaître l'ensemble de la structure de bandes.

Celle-ci, compte tenu des symétries propres à la structure zinc-blende, est définie par :

$$\left\{ \begin{array}{l} k_z < k_y < k_x \\ k_z + k_y + k_x \leq 2\pi/a \end{array} \right. \quad (3.7)$$

Nous allons étudier tout d'abord les deux composés binaires GaAs et AlAs, puis envisager, dans l'approximation du cristal virtuel (ACV), les structures de bandes des composés $Al_xGa_{1-x}As$. Dans cette approche au premier ordre, l'incorporation aléatoire des atomes d'Aluminium par substitution d'atomes de Gallium est décrite par un environnement moyen des atomes d'Arsenic.

Lorsque l'on a affaire à un ternaire qui forme une solution solide, on ne peut plus vraiment considérer un potentiel périodique. L'approximation ACV consiste à écrire que le potentiel pour un ternaire $(A^{III})_{1-x}(C^{III})_x(B^V)$ est celui d'un cristal où chaque site III contient un atome virtuel (AC) moyen entre (A) et (C), créant ainsi un potentiel moyen :

$$V_{AC}(x, \vec{r}) = (1-x)V_A(\vec{r}) + xV_C(\vec{r}) \quad (3.8)$$

Etant donné que :

$$V(G) = \frac{1}{\Omega} \int \int \int V(\vec{r}) e^{i\vec{G}\vec{r}} d^3 \vec{r} \quad (3.9)$$

les facteurs de forme du matériau ternaire s'écrivent :

$$V_{AC}(x, G) = \frac{1}{\Omega} (\Omega_{AB}(1-x)V_A(G) + \Omega_{CB}xV_C(G)) \quad (3.10)$$

où Ω, Ω_{AB} et Ω_{CB} sont respectivement les volumes des cellules unités dans la solution solide (AC) B et dans les cristaux AB et CB. Si l'on suppose que la structure zinc-blende reste inchangée, on a :

$$\Omega = \alpha(a_{AC})^3 ; \Omega_{AB} = \alpha(a_{AB})^3 ; \Omega_{CB} = \alpha(a_{CB})^3 \quad (3.11)$$

En admettant :

$$a_{AC} = (1 - x)a_{AB} + xa_{CB} \quad (\text{Loi de Végard}) \quad (3.12)$$

on obtient finalement :

$$V_{AC}(G) = \frac{(1 - x)(a_{AB})^3 V_A(G) + x(a_{CB})^3 V_C(G)}{((1 - x)a_{AB} + xa_{CB})^3} \quad (3.13)$$

Nous pouvons donc, en fonction des potentiels du GaAs et l'AlAs, étudier les ternaires du type $Al_xGa_{1-x}As$.

3.2.2.2 Résultats

Les potentiels cristallins utilisés par la simulation pour le GaAs et l'AlAs sont reportés dans le tableau 3.1. Le tableau 3.2 résume les résultats obtenus pour les principales transitions inter-bandes et intra-bandes. L'origine en énergie est prise au point Γ_{15V} de la bande de valence ; nous reportons les valeurs calculées pour les principaux points de symétrie de la zone de Brillouin. Nous comparons ces dernières avec les données expérimentales et des résultats extraits de la littérature [14] [15] [16] [17].

Malgré une relative dispersion, on constate un accord raisonnable entre les valeurs données par notre calcul et celles reportées dans la littérature.

Si l'on étend ces résultats hors des directions cristallines principales, on obtient les représentations visualisées figures 3.1 et 3.2 qui donnent les courbes isoénergies dans le plan $\Gamma X K$ ($\Gamma(0,0,0)$; $X(0,0,1)$; $K(0,.75,.75)$) respectivement pour le GaAs et l'AlAs :

- Pour le GaAs le "gap" (bande interdite) est direct, pour l'AlAs il est indirect. La vallée centrale Γ est quasiment isotrope dans les deux cas ; en revanche la vallée

satellite X dans la direction $\langle 1,0,0 \rangle$ est fortement anisotrope (de forme ellipsoïdale).

V Rydbergs	$GaAs$	$Al_xGa_{1-x}As$ $x = 0.45$	$AlAs$
V_3^S	- 0.2375	- 0.2296	- 0.2200
V_8^S	+ 0.0025	+ 0.0027	+ 0.0030
V_{11}^S	+ 0.0675	+ 0.0686	+ 0.0700
V_3^A	+ 0.0660	+ 0.0687	+ 0.0720
V_4^A	+ 0.0425	+ 0.0526	+ 0.0650
V_{11}^A	+ 0.0065	+ 0.0033	- 0.0006
Constante de maille Å	5.6533	5.6568	5.6611

Tableau 3.1 Valeurs des pseudopotentiels et paramètres de maille pour $Al_xGa_{1-x}As, x = 0, .45, 1$

Ga As	Notre calcul eV	Expérimental eV	Topol et al eV	Chelikowsky et al eV
$\Gamma_{15V} - \Gamma_{1C}$	1.49	1.53	1.53	1.51
$\Gamma_{15V} - \Gamma_{15C}$	4.57	4.55 à 4.71	4.59	4.55
$X_{1C} - X_{3C}$	0.36	0.58	0.60	0.35
$X_{15V} - X_{1C}$	4.00	4.10 à 4.30	3.90	4.92
$L_{3V} - L_{1C}$	2.64	2.70 à 3.00	2.70	3.02
Al As	Notre calcul eV	Expérimental eV	Hess et al eV	Stuckel et al eV
$\Gamma_{15V} - \Gamma_{1C}$	3.06	3.23	3.21	2.50
$\Gamma_{15V} - \Gamma_{15C}$	4.60	4.43	4.56	4.57
$\Gamma_{15V} - X_{1C}$	2.02	2.23	2.25	2.38
$X_{1C} - X_{3C}$	0.54	0.35	0.36	0.48
$X_{5V} - X_{1C}$	4.20	4.61	4.22	4.39
$L_{3V} - L_{1C}$	3.54	4.00	3.46	3.37

Tableau 3.2 Comparaison théorie-expérience des structures de bandes du GaAs et de l'AlAs aux principaux points de symétrie de la zone de BRILLOUIN.

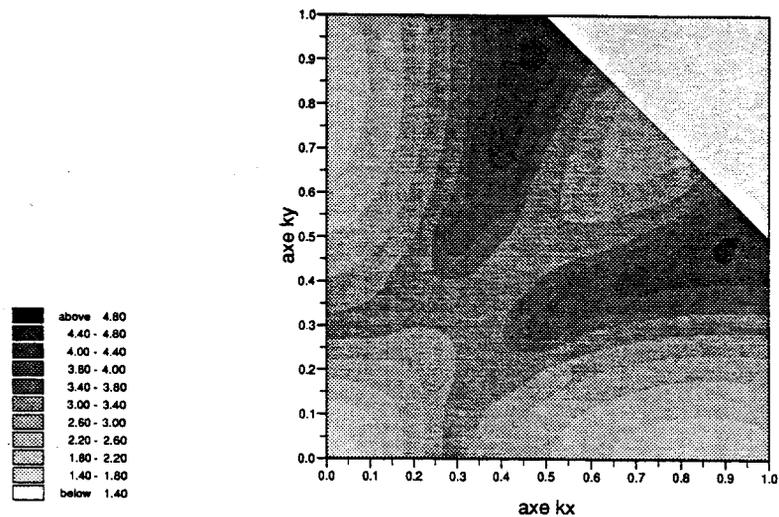


Figure 3.1 : Courbes isoénergies dans le plan $\Gamma X K$ pour le GaAs. Première bande de conduction.

- La valeur de gap augmente, en passant de 1.49 eV pour le GaAs (transition $\Gamma_{15V} - \Gamma_{1C}$) à 2.02 eV pour l'AlAs (transition $\Gamma_{15V} - X_{1C}$).
- De manière générale, les points à énergie élevée se situent dans la direction cristallographique $\langle 2\ 1\ 0 \rangle$ au point W de la première zone de Brillouin.
- De la même façon, on peut avoir une représentation de la structure de bandes dans le plan ΓLK (L dans la direction $\langle 1\ 1\ 1 \rangle$), qui montre l'existence au point L d'une troisième vallée, fortement anisotrope elle aussi.

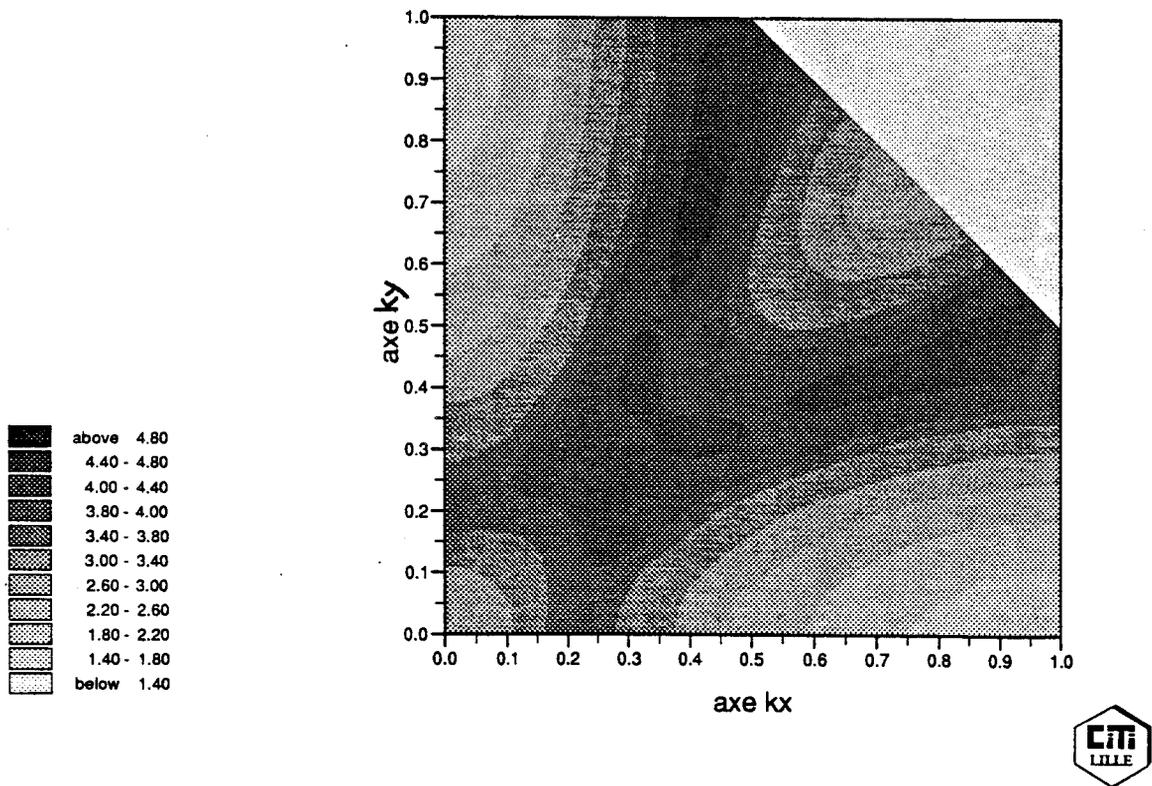


Figure 3.2 : Courbes isoénergies dans le plan $\Gamma X K$ pour le AlAs. Première bande de conduction.

D'autres informations concernant la seconde bande de conduction et les bandes de valence, qui ne nous intéressent pas directement pour les propriétés de transport dans les diodes tunnel, sont reportées en annexe D.

La première bande de conduction du matériau ternaire $Al_xGa_{1-x}As$ est représentée, dans le plan ΓXK , figure 3.3 [18]. Ce calcul est fait dans l'approximation du cristal virtuel avec les valeurs de potentiel figurant dans le tableau 3.1. Les isoénergies, sous leur forme tridimensionnelle (énergie sur l'axe z), ont été obtenues pour une teneur en Aluminium de 45%. Cette concentration est proche de celle du "cross-over" (généralement admis pour une concentration de 37%) pour lequel les niveaux d'énergie aux points X et Γ sont dégénérés. La topologie générale de la première bande de conduction est similaire à celle des composés binaires.

Il s'agit maintenant, sur la base de ces calculs de structures de bandes, de déterminer les taux d'interactions. En toute rigueur, il serait nécessaire de traduire le caractère anisotrope des bandes de conduction, particulièrement dans les vallées satellites où les différences entre masses transversale et longitudinale sont importantes. La prise en compte de ces effets se révèle cependant très complexe au niveau du traitement et nous avons dû introduire des approximations dans les calculs.

3.2.3 Taux d'interactions

3.2.3.1 Interactions prises en compte

Pour calculer les taux d'interactions, nous utilisons une représentation 3 vallées (Γ, L et X). Celles-ci sont considérées isotropes (calcul de la masse effective par pondération sur les trois directions de l'espace réciproque) et les courbures de bandes sont décrites à l'aide de coefficients de non-parabolicité.

Quatorze interactions différentes sont introduites dans le programme : interaction sur impuretés (en fonction du dopage du matériau), interaction piézo-électrique, interaction sur phonon acoustique, interactions sur phonon optique (LO : longitudinal, TO : transversal), interactions intra et intervallées, ionisation par choc. L'état en énergie et en moment du porteur après interaction dépend de l'interaction considérée, élastique ou inélastique, inter ou intravallée, etc . . . [2] [11] [12]. Le calcul est mené pour chacune

des trois vallées. La figure 3.4 montre l'évolution de ces probabilités d'interactions pour la vallée centrale Γ . Si, à basse énergie, l'interaction sur impuretés semble prépondérante, on remarque que, très vite, ce sont les probabilités de passage en vallées satellites qui dominent l'ensemble des interactions.

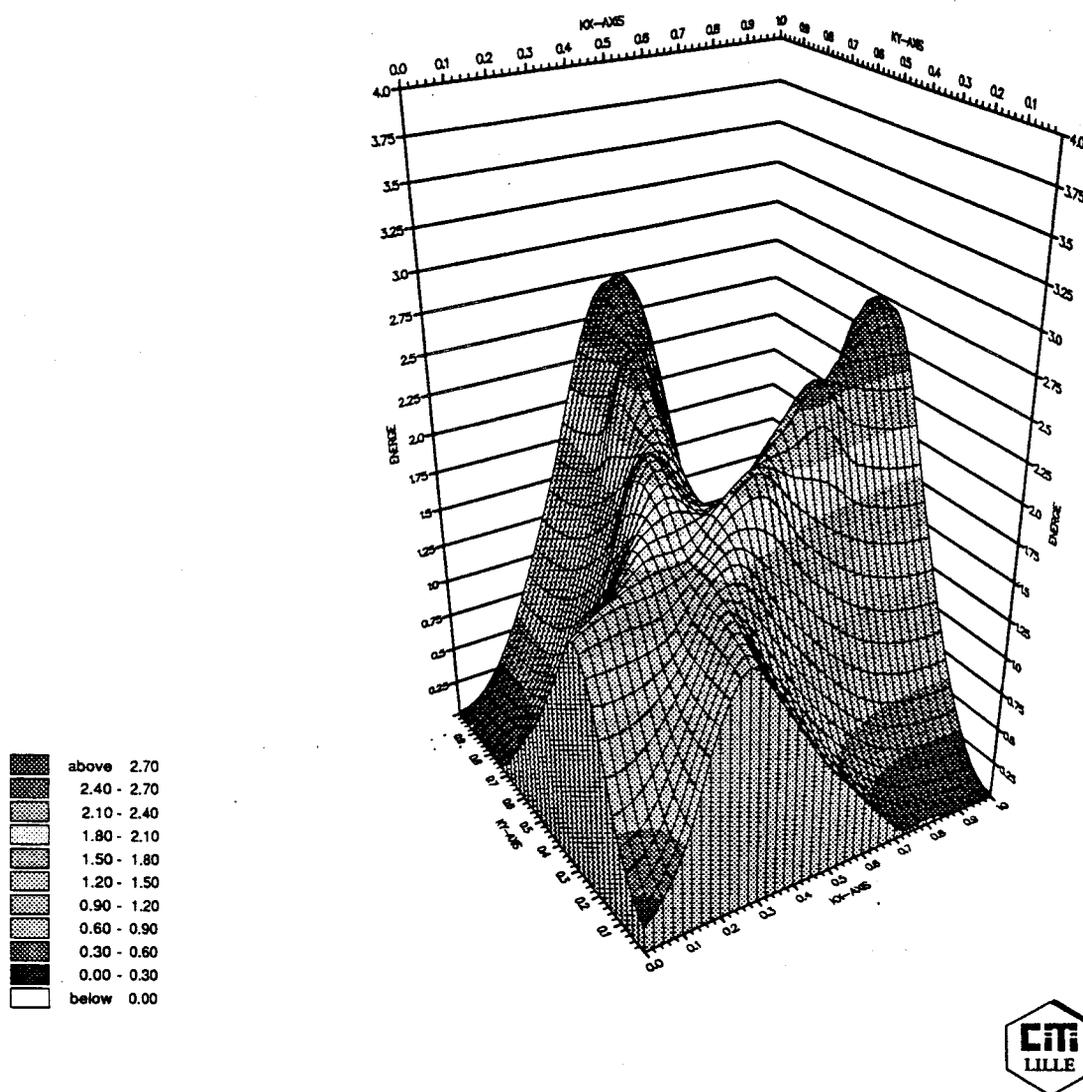


Figure 3.3 : Courbes isoénergies dans le plan $\Gamma X K$ pour le $Ga_{0.55} Al_{0.45} As$. Première bande de conduction, représentation tridimensionnelle.



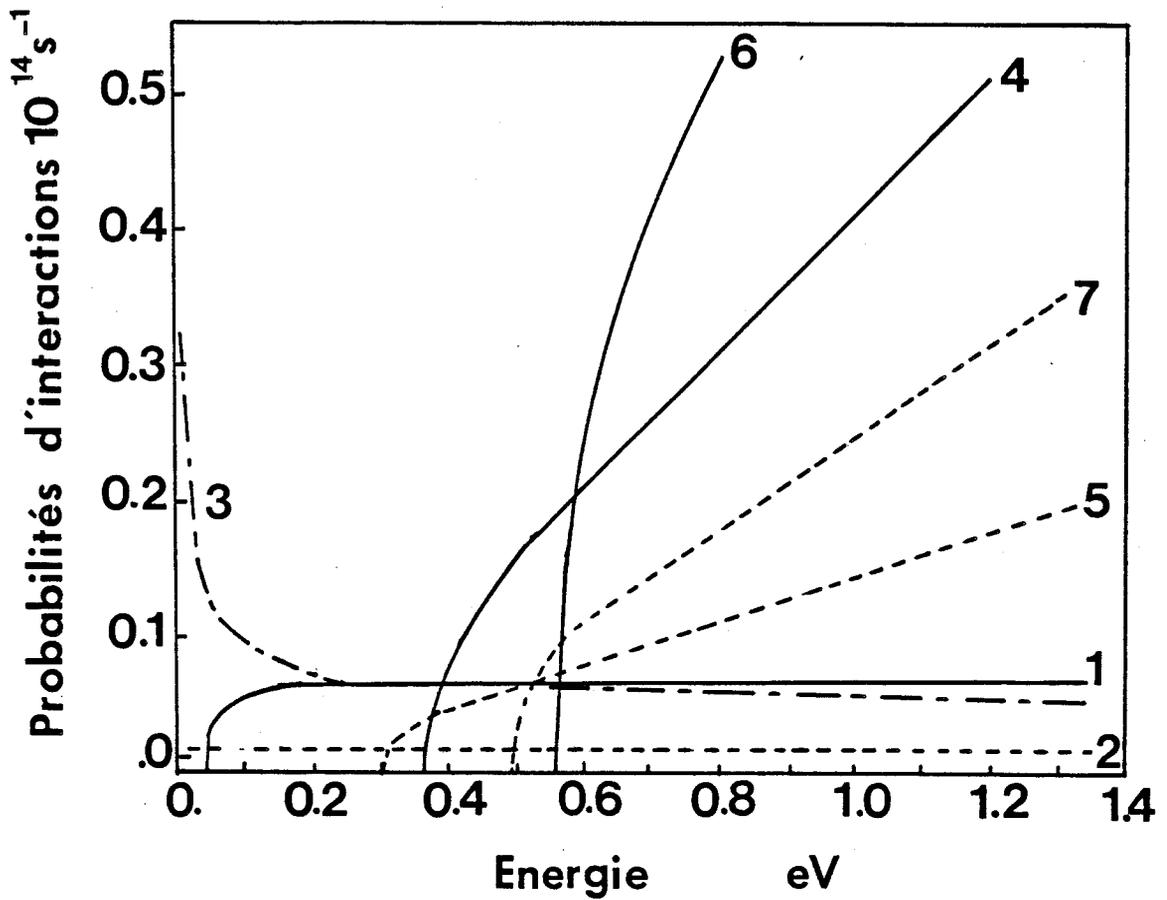


Figure 3.4 : Probabilités d'interactions dans le GaAs en fonction de l'énergie pour des porteurs localisés en vallée centrale Γ (Approximation de la masse effective).

- 1 - interaction optique-polaire émission.
- 2 - interaction optique-polaire absorption.
- 3 - interaction sur impuretés.
- 4 - interaction intervallée $\Gamma \rightarrow X$ émission.
- 5 - interaction intervallée $\Gamma \rightarrow X$ absorption.
- 6 - interaction intervallée $\Gamma \rightarrow L$ émission.
- 7 - interaction intervallée $\Gamma \rightarrow L$ absorption.

3.2.3.2 Validité de l'approximation de la masse effective

Dans les précédents calculs des taux d'interactions, qui permettent d'obtenir le taux global par sommation, nous utilisons l'approximation de la masse effective. Or, pour des énergies supérieures à 0.8 eV, la structure de bandes réelle montre un point d'inflexion dans la direction $\langle 1,0,0 \rangle$, soit une dérivée seconde qui s'annule en changeant de signe. Si l'on garde la définition classique de la masse effective, celle-ci devient négative et il est alors impossible de calculer un taux d'interaction.

L'un des moyens reportés dans la littérature pour déduire un taux d'interaction global (λ_i) pour ces points de haute énergie est de supposer que λ_i est proportionnel à la densité d'états. C'est cette hypothèse qui a été utilisée par Shichijo et al [3] dans les calculs de l'ionisation par choc.

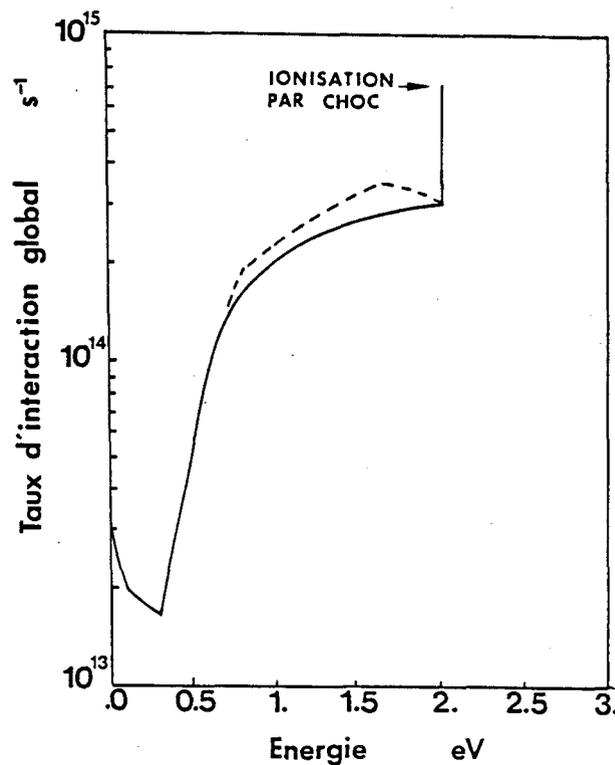


Figure 3.5 : Taux d'interaction global en fonction de l'énergie. Le calcul est mené dans l'approximation de la masse effective (—) ou à partir de la densité d'états de première bande de conduction (- - -).

La figure 3.5 montre le résultat de ce calcul. Pour des énergies supérieures à 0.8 eV (trait pointillé), le taux d'interaction est estimé par :

$$\frac{1}{\tau(E)} = 2 \pi g^2 \rho_o(E - 0.03) E/\hbar$$

où g^2 assure la continuité entre le calcul utilisant l'approximation de la masse effective pour $E < 0.8$ eV et le calcul utilisant la densité d'états.

Pour des énergies supérieures à 2 eV, l'ionisation par choc est introduite. La section efficace d'interaction est supposée très grande (calcul de la probabilité proposé par Keldysh [19]) et devient donc dominante sur toutes les autres interactions.

Nous avons également reporté sur cette figure les valeurs $\lambda_i(E)$ lorsque l'on suppose que les relations de dispersion peuvent être approximées grâce à des coefficients de non parabolicité qui, concrètement, correspondent à une masse effective dépendante de l'énergie (trait plein).

On observe sur ce dessin que la différence entre les deux approches, pour des énergies comprises entre 0.8 eV et 2.0 eV, est relativement faible. Il est à noter que le taux d'interaction, calculé à partir de la densité d'états, présente une faible décroissance à partir de 1.6 eV, montrant ainsi que les sites à énergies élevées sont relativement peu nombreux en première bande de conduction.

Compte tenu de la nature statistique de la méthode de Monte-Carlo, l'écart observé figure 3.5 sera en partie gommé sur les résultats en valeur moyenne. Nous conservons donc l'approximation de la masse effective précédemment définie. Précisons que cette démarche n'est pas restreinte aux diodes tunnels ; elle a permis d'analyser avec succès le comportement des électrons chauds dans les matériaux massifs ou dans les multipuits quantiques [20]. Dès lors que les hypothèses de simulation sont bien établies, nous allons nous intéresser à l'évolution temporelle d'un paquet de porteurs injectés par une double barrière dans une zone de transit faiblement dopée.

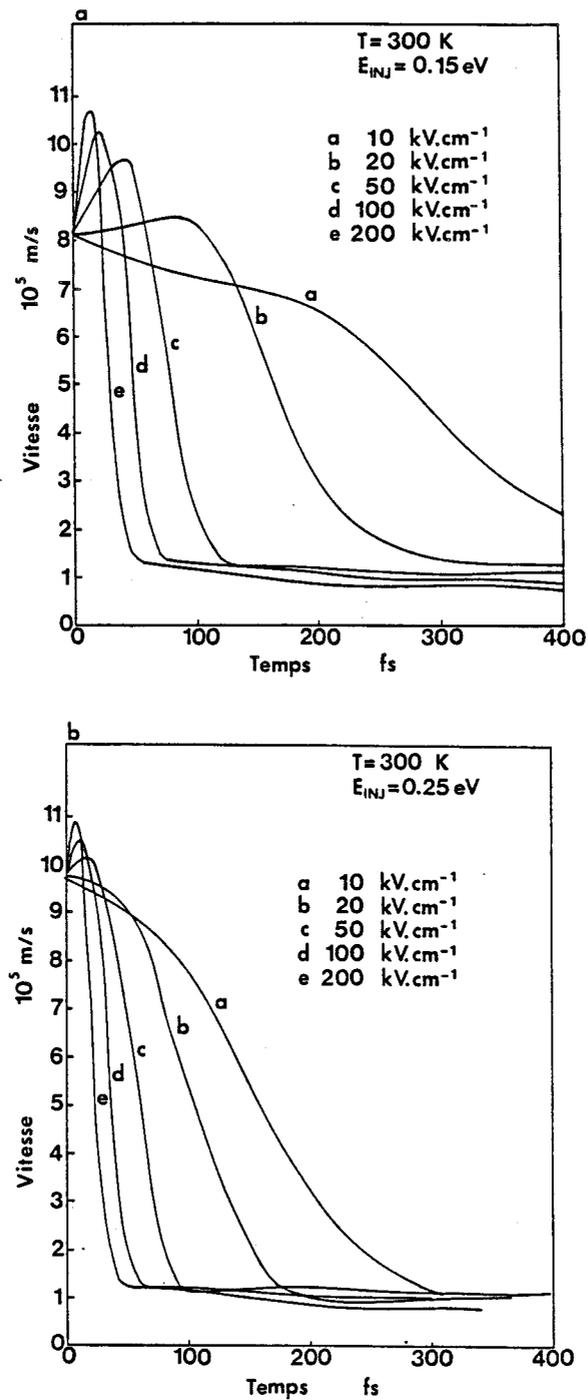


Figure 3.6 : Evolution de la vitesse moyenne des porteurs injectés dans une zone de transit à champ électrique constant.
 a) énergie d'injection $\varepsilon = 0.15 \text{ eV}$.
 b) énergie d'injection $\varepsilon = 0.25 \text{ eV}$.

3.2.4 Résultat : évolution temporelle de la vitesse

3.2.4.1 Zone de transit à champ électrique constant

Nous supposons, dans ce calcul, un paquet d'électrons filtré par une hétérostructure de type double barrière centré à une énergie ε_r donnée (niveau résonnant). Ces électrons ont, à l'injection, un moment défini par $\vec{k}(0, 0, k_z)$ dans la direction du champ électrique. Leur vitesse initiale est calculée directement à partir de la structure de bandes du GaAs. Dans la mesure où les porteurs sont injectés pour une énergie égale à $2\varepsilon_r$, qui prend typiquement des valeurs inférieures aux transitions $\Gamma - X$ ou $\Gamma - L$, on peut supposer qu'initialement ils sont injectés en vallée centrale.

Les conditions aux limites à gauche de la zone simulée sont donc définies par l'injecteur. Dans le cas, très peu probable, où un électron se présente de nouveau à cette interface, nous supposons qu'il subit une réflexion. Par contre, à l'extrémité droite de la zone active, les porteurs sont absorbés, ce qui modélise le contact de collecteur. Ces conditions aux limites étant posées, il suffit d'observer l'évolution temporelle du paquet de porteurs injectés dans l'espace réciproque et dans l'espace réel.

Les figures 3.6a et 3.6b représentent les vitesses de transit en fonction du temps pour différents champs électriques supposés constants spatialement et indépendants du temps, respectivement pour des énergies d'injection de 0.15 eV et 0.25 eV.

On constate tout d'abord que, pour les énergies d'injection (ε_i) considérées, les vitesses initiales sont théoriquement très élevées (de l'ordre de 8 à $10 \cdot 10^7 \text{ cm.s}^{-1}$).

Pour des champs supérieurs à 20 kV.cm^{-1} quand $\varepsilon_i = 0.15 \text{ eV}$, et pour des champs supérieurs à 50 kV.cm^{-1} quand $\varepsilon_i = 0.25 \text{ eV}$, on note un phénomène de survitesse marqué pour les électrons à la sortie de l'injecteur. Ceci correspond à des porteurs qui sont accélérés par le champ électrique et qui ne subissent pas d'interactions pendant un laps de temps relativement court compris entre 40 et 80 femtosecondes. Ils atteignent très rapidement les sites dans l'espace réciproque où la vitesse est la plus élevée. Ensuite la vitesse décroît brutalement pour retrouver des niveaux correspondant aux vitesses moyennes de transit dans un matériau massif et les électrons perdent la mémoire de leur injection à haute énergie. On retrouve alors des vitesses moyennes de

l'ordre de $7 \cdot 10^6 \text{ cm.s}^{-1}$ au bout de quelques centaines de femtosecondes. Le phénomène de survitesse que nous venons de décrire peut être intéressant à utiliser, d'un point de vue pratique, pour diminuer le temps de transit des porteurs dans la zone espaceur d'une diode tunnel résonnant.

3.2.4.2 Injection dans une zone dopée

Pour les structures expérimentales, l'injection se fait dans une zone dopée. On évite par ce biais d'une part les phénomènes de réaction de charge d'espace et d'autre part les incertitudes liées au dopage résiduel des bâtis d'épitaxie.

Nous allons étudier ici le cas particulier d'un dopage de $2 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ pour un espaceur de 150 nm de longueur. Nous supposons de plus que l'énergie d'injection est de 0.15 eV, ce qui représente une valeur typique de niveau de confinement dans la double barrière de 0.075 eV et un champ électrique initial de 100 kV.cm^{-1} .

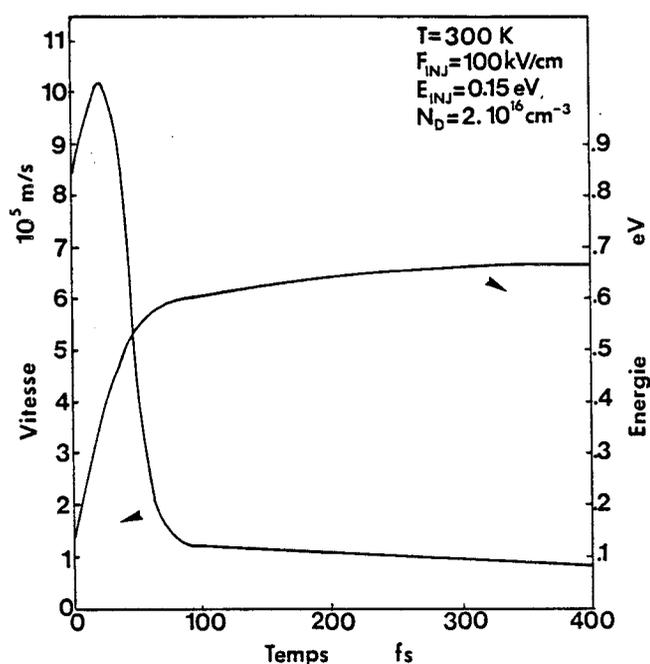


Figure 3.7 : Evolution de la vitesse moyenne et de l'énergie moyenne d'un paquet de porteurs injectés à 0.15 eV dans une zone de transit dopée.

Pour illustrer l'incidence d'un champ électrique continûment variable sur l'espace, nous supposons que les variations spatiales de $F(z)$ ne sont fonction que du dopage. Ceci revient à simuler un fonctionnement à des densités de courant telles que la concentration de charges libres soit négligeable devant la concentration d'impuretés.

Par ailleurs, nous admettons la présence d'une zone fortement dopée à une distance de 150 nm, qui permet d'annuler le champ électrique sur une très faible distance.

Les caractéristiques de vitesse et d'énergie moyennes en fonction du temps sont reportées sur la figure 3.7. La courbe $v = f(t)$ est tout à fait comparable aux courbes décrites dans le paragraphe précédent. La vitesse tend vers sa valeur stationnaire 7.10^6 cms^{-1} avec une énergie moyenne quasi-constante de 0.65 eV au bout de 300 fs.

En réalité, le régime transitoire de l'état des porteurs est le résultat d'interactions complexes entre la vallée centrale Γ et les vallées satellites respectivement L et X . Pour illustrer ce point, nous avons visualisé pour trois temps significatifs, $t = 50$ fs, 100 fs et 400 fs, sur les figures 3.8a, 3.8b et 3.8c, la position des particules simulées, vallée par vallée, en reportant également leur état d'énergie par rapport à la bande de conduction.

On constate que, parce qu'initialement l'ensemble de l'injection se fait par des porteurs situés en vallée Γ , les distributions sur les vallées L et X sont relativement peu marquées au bout de 50 fs. Cette tendance s'inverse aux temps ultérieurs dans la mesure où les porteurs subissent des interactions de type transfert intervallée. Ainsi, au temps $t = 400$ fs, la majorité des électrons se retrouve dans les vallées satellites.

Au-delà de cette analyse des résultats bruts, ces différentes représentations permettent de mettre en évidence la notion de "fenêtre sans collision" introduite par Tang et al [21] ("CFW" : collision free window).

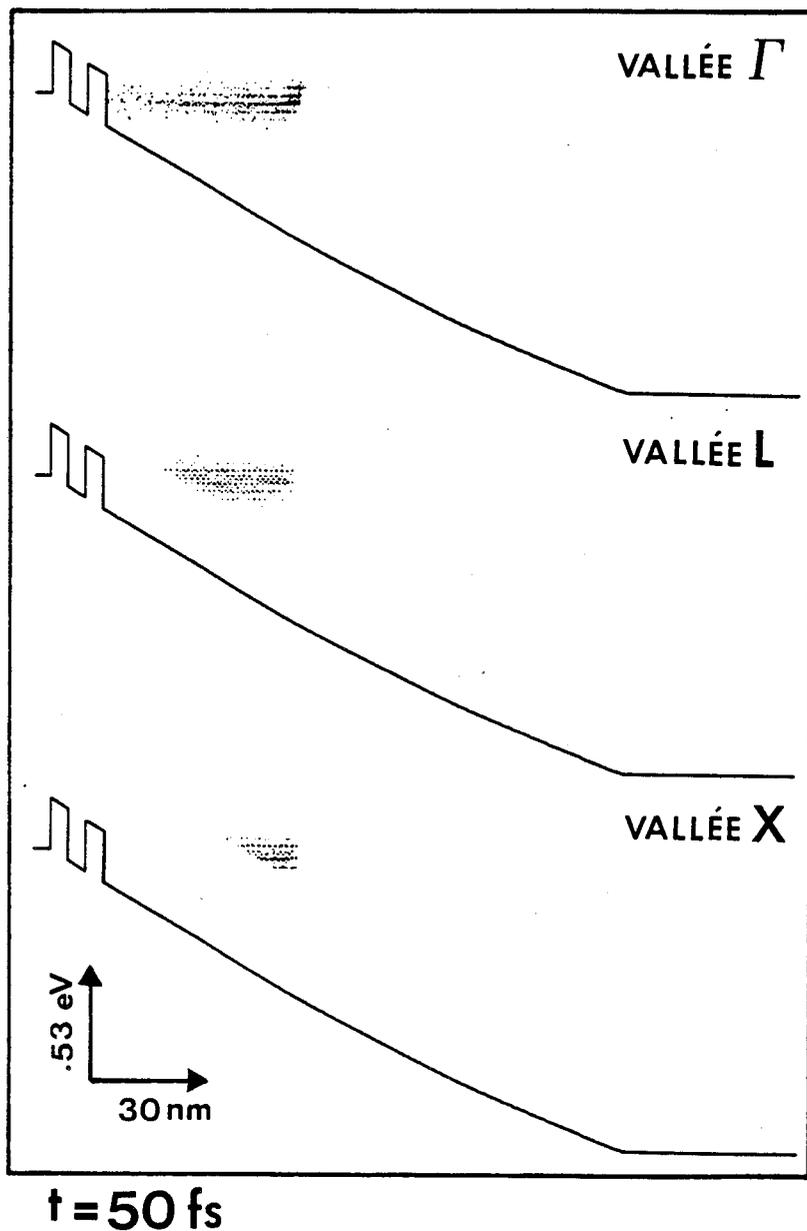


Figure 3.8a : Localisation spatiale et valeur d'énergie, à $t = 50 \text{ fs}$, vallée par vallée, d'un paquet de porteurs injectés à $t = 0 \text{ fs}$, à une énergie de 0.15 eV dans une zone de transit dopée.

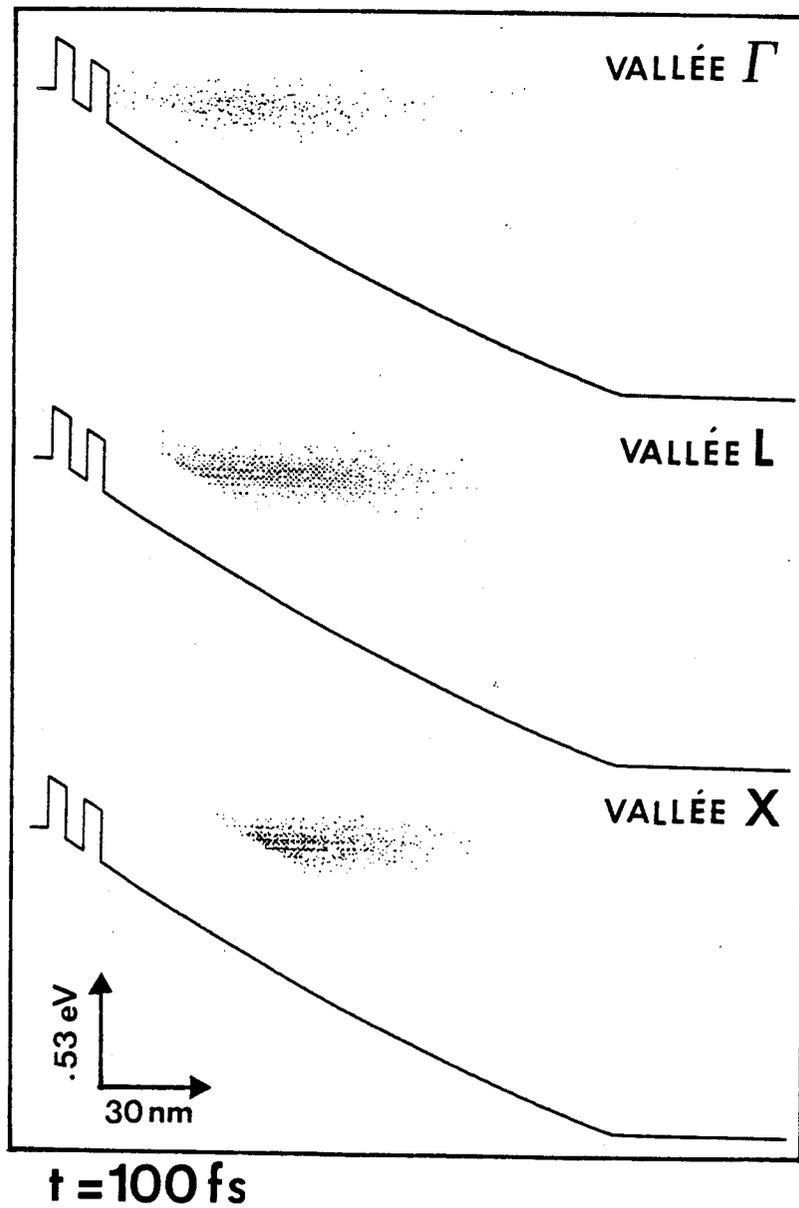


Figure 3.8b : Localisation spatiale et valeur d'énergie, à $t = 100 \text{ fs}$, vallée par vallée, d'un paquet de porteurs injectés à $t = 0 \text{ fs}$, à une énergie de 0.15 eV dans une zone de transit dopée.

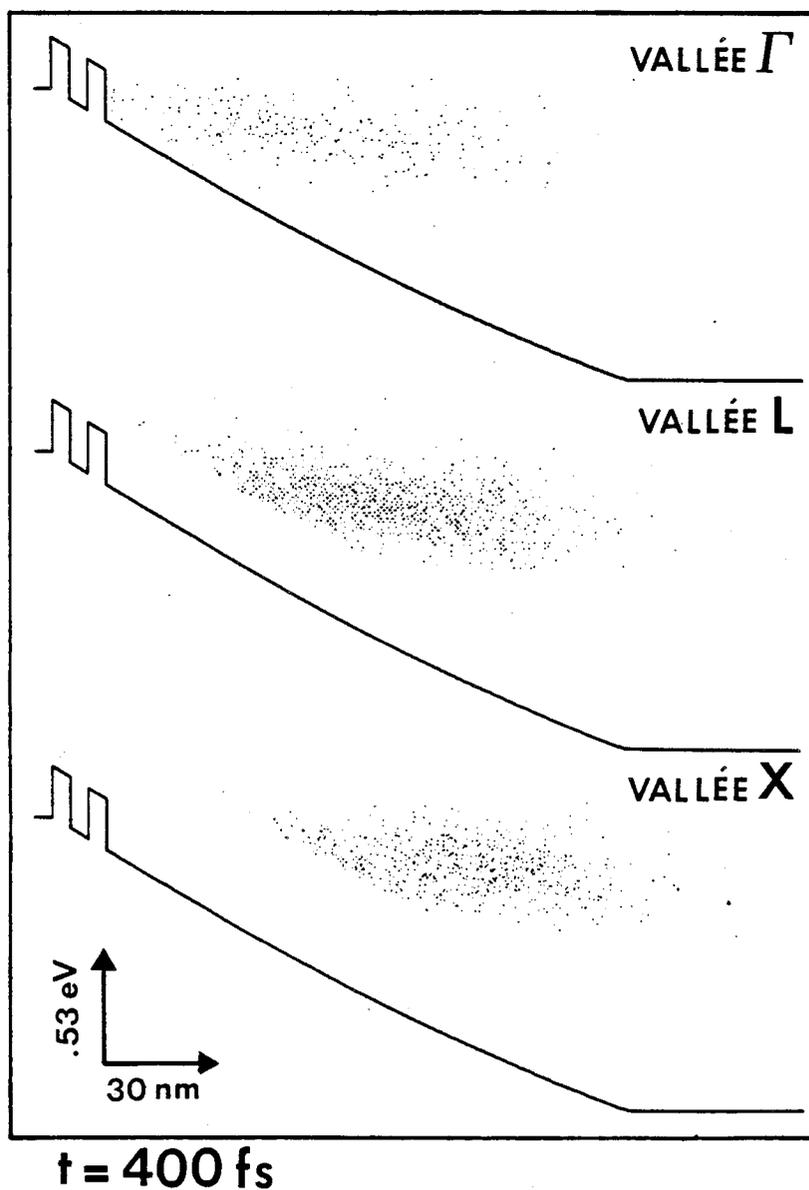


Figure 3.8c : Localisation spatiale et valeur d'énergie, à $t = 400$ fs, vallée par vallée, d'un paquet de porteurs injectés à $t = 0$ fs, à une énergie de 0.15 eV dans une zone de transit dopée.

En effet on constate que, au bout de 50 fs, un très grand nombre de porteurs ont déjà franchi une distance de l'ordre de 50 nm. Ceci peut s'expliquer non seulement par le fait que la majorité des porteurs se trouve en vallée Γ , mais aussi par le fait que leur distribution en énergie est étroite (rappelons qu'à $t = 0$ à l'injection tous les porteurs ont la même énergie). En fait, la distribution en énergie va être introduite par les différentes collisions inélastiques qui, agissant sur une population initialement centrée, créent des strates séparées par l'énergie de phonon, comme le montre la figure 3.8a.

Cet arrangement se perd au cours du temps et le paquet de porteurs semble se figer en même temps que la distribution en énergie s'élargit. Si maintenant on essaie d'appliquer ces résultats de simulation à l'optimisation des composants, il semble utile de traduire la vitesse moyenne des électrons en fonction de la distance parcourue. L'évolution spatiale de la vitesse est reportée figure 3.9 pour deux valeurs de champ électrique. Ces courbes montrent clairement qu'il est possible de conserver une vitesse moyenne élevée de l'ordre de $8 \cdot 10^7 \text{ cm.s}^{-1}$ sur 100 nm avec un champ électrique de 20 kV.cm^{-1} . Par contre, pour un champ de 100 kV.cm^{-1} , une longueur maximale de 40 nm est admissible si l'on veut exploiter avec profit la notion de survitesse. Ce résultat est attendu dans la mesure où l'on retarde le transfert des porteurs en vallées satellites avec un champ électrique de moindre importance.

Concrètement, pour des diodes à tunnel résonnant, les valeurs de champ électrique mises en jeu sont de l'ordre de 100 kV.cm^{-1} . Il en résulte que pour le système de matériaux GaAlAs, il nous faut limiter la longueur des espaceurs à des valeurs de l'ordre de 50 nm, afin que le retard dû au transit ne vienne pas inhiber les avantages intrinsèques du tunnel résonnant.

Nous venons de voir les états transitoires des porteurs injectés par une double barrière dans une zone de transit. Il nous reste à évaluer les niveaux de puissance et d'impédance qu'il est possible d'obtenir avec de telles structures.

Nous nous proposons, dans ce but, de développer une méthode macroscopique dérivée des formalismes utilisés pour étudier les composants à injection et temps de transit. Il est à noter que, dans cette approche, les notions de vitesse moyenne sont dérivées de celles que nous venons de présenter par la méthode de MONTE-CARLO.

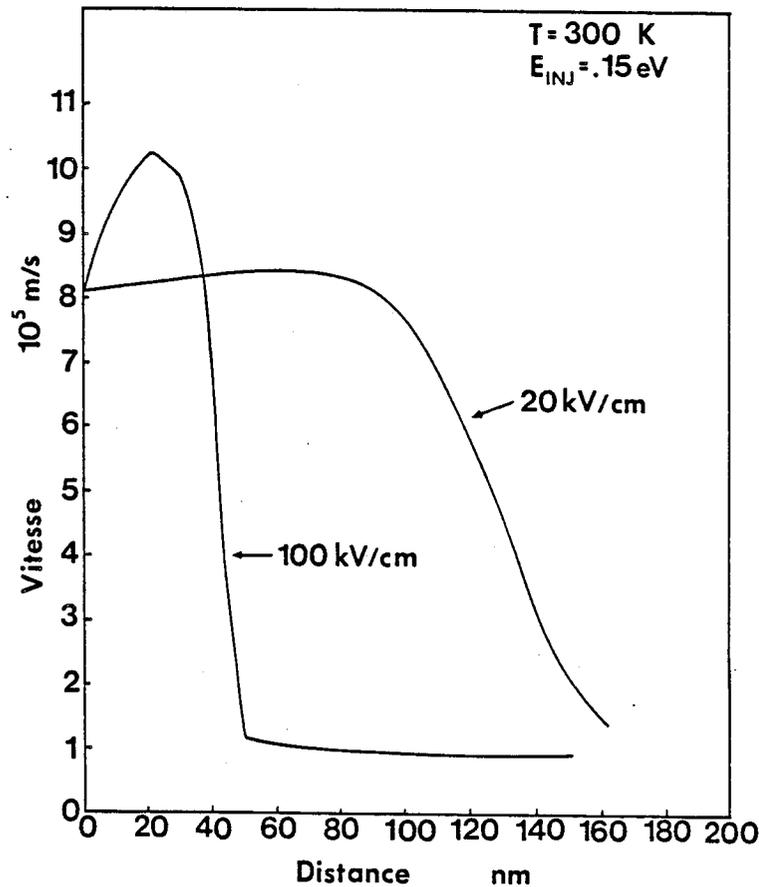


Figure 3.9 : Evolution de la vitesse moyenne des porteurs en fonction de leur position dans la zone de transit.

3.3 Modèle macroscopique

3.3.1 Formalisme

L'analyse théorique des effets de transit pour les composants à effet tunnel peut se faire à partir du modèle général des composants à injection et temps de transit [22]. Une telle démarche a été utilisée dans la référence [23]. Dans ce travail, l'injection des porteurs par effet tunnel est traduite par une conductivité d'injection dont il est possible de faire varier la phase et l'amplitude. Les auteurs s'attachent alors à définir la fréquence de coupure de la résistance différentielle négative en fonction de la valeur de ce paramètre. Par ailleurs, une étude expérimentale a permis d'obtenir des premiers résultats en oscillation en variant les longueurs de zones de transit [24]. Si ces travaux permettent d'avoir une première approche des phénomènes, ils intègrent difficilement

les données réelles des composants, comme les niveaux de dopage par exemple.

Le modèle macroscopique de Song et Pan [9][25][26] permet d'étudier l'incidence des paramètres de structures de la zone de transit. Nous allons ici l'utiliser afin de décrire l'influence de la longueur de transit, du niveau de dopage ou du point de polarisation sur la puissance et le rendement des diodes QWITT.

Présentons tout d'abord très brièvement le modèle. L'injecteur est entièrement décrit par sa caractéristique $J(V)$. La tension dans le plan d'injection est donnée par :

$$V^{inj}(t) = V_{dc}^{inj} + V_{RF}^{inj} \cos \omega t \quad (3.14)$$

La densité de courant injectée est une fonction instantanée de $V^{inj}(t)$. On a donc :

$$J^{inj}(t) = J(V^{inj}(t)) \quad (3.15)$$

Pour la description des effets de transit, nous supposons que les porteurs sont injectés dans la zone de transit conformément à $J^{inj}(t)$. Au cours de leur transit, leur étalement spatial suit une fonction enveloppe de type gaussien, donnée par la relation :

$$g(z, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi S(t)}} \exp \left[-\frac{(z - M(t))^2}{2S(t)} \right] \quad (3.16)$$

$$M(t) = \int_0^t v(t') dt' \quad (3.17)$$

$$S(t) = \int_0^t D(t') dt' \quad (3.18)$$

où $v(t)$ représente la vitesse moyenne d'ensemble des porteurs ; il est possible de la déduire des simulations précédentes. $D(t)$ est le coefficient de diffusion qui, en toute rigueur, est une fonction dépendante du temps. En fait on montre que, pour des champs électriques suffisamment élevés (typiquement 100 kV.cm^{-1}), $D(t)$ est relativement indépendant du champ électrique, avec une valeur proche de $15 \text{ cm}^2\text{s}^{-1}$.

On définit alors la fonction réponse impulsionnelle par :

$$f(z, t) = v(t).g(z, t) \quad (3.19)$$

Cette fonction permet de traduire la densité de courant de conduction dans la zone de transit résultant à tout instant de l'injection d'un courant unitaire $\delta(t)$ dans le plan d'injection ($z = 0$). En excluant toute génération de porteurs dans la zone de transit, la densité de courant de conduction locale s'écrit :

$$\begin{aligned} J^{cond}(z, t) &= \int_{-\infty}^t f(z, t - \tau) J^{inj}(\tau) d\tau \\ &= \int_t^{\infty} f(z, \tau) J^{inj}(t - \tau) d\tau \end{aligned} \quad (3.20)$$

Ainsi cette densité de courant de conduction est le produit de convolution entre la densité de courant injectée et la fonction réponse.

Pour calculer les puissances générées et les rendements de conversion, il nous faut évaluer la densité de courant induite dans le circuit extérieur, donnée par :

$$\begin{aligned} J^{ind}(t) &= \frac{1}{W + L} \int_{-L}^W J^{cond}(z, t) dz \\ &= \frac{1}{W + L} \int_0^W J^{cond}(z, t) dz + \frac{L}{W + L} J^{inj}(t) \end{aligned} \quad (3.21)$$

où L est la longueur de la zone d'injection et W la longueur de la zone de transit.

Il reste à déterminer la chute de tension aux bornes de la zone de transit ; elle est accessible en faisant la moyenne spatiale de la valeur locale de la tension. Cette dernière est déduite de l'équation de Poisson, en introduisant $n_{SC}(z, t)$ la densité de charges libres à l'abscisse z . Celle-ci a pour expression :

$$n_{SC}(z, t) = \frac{1}{q} \int_0^{\infty} g(z, \tau) J^{inj}(t - \tau) d\tau \quad (3.22)$$

On en déduit :

$$V^{dep}(t) = - \int_0^W \left[\int_0^z \frac{q}{\epsilon} \{N_D - n_{SC}(z', t)\} dz' - E(0, t) \right] dz \quad (3.23)$$

où q est la charge de l'électron, ϵ la permittivité diélectrique du GaAs, N_D le dopage

de la zone de transit et $E(0, t)$ le champ électrique au plan d'injection ($z = 0$) au temps t . On tient compte ainsi des effets de réaction de charge d'espace.

La détermination de l'impédance petit signal est alors immédiate en définissant la tension totale par :

$$V(t) = V^{inj}(t) + V^{dep}(t) \quad (3.24)$$

et en décomposant en série de Fourier les informations temporelles de courant et de tension.

La conductance dynamique est alors donnée par :

$$G_D = Re \left[\frac{J_{RF}^{ind} e^{j\psi}}{V_{RF} e^{j\varphi}} \right] = \frac{J_{RF}^{ind}}{V_{RF}} \cos(\psi - \varphi) \quad (3.25)$$

où $J_{RF}^{ind} e^{j\psi}$ et $V_{RF} e^{j\varphi}$ sont les composantes fondamentales de la décomposition des équations (3.21) et (3.24).

La puissance RF générée est :

$$\begin{aligned} P_{RF} &= Re \left[\frac{1}{2} \left(J_{RF}^{ind} e^{j\psi} \right) \left(V_{RF} e^{j\varphi} \right)^* \right] \\ &= -\frac{1}{2} J_{RF}^{ind} V_{RF} \cos(\psi - \varphi) \end{aligned} \quad (3.26)$$

La puissance continue par unité de surface est donnée par :

$$P_{dc} = J_{dc}^{ind} V_{dc} \quad (3.27)$$

où J_{dc}^{ind} et V_{dc} représentent les composantes continues de (3.21) et (3.24) ; enfin le rendement de conversion $dc - RF$ se calcule par :

$$\eta = \frac{P_{RF}}{P_{dc}} \quad (3.28)$$

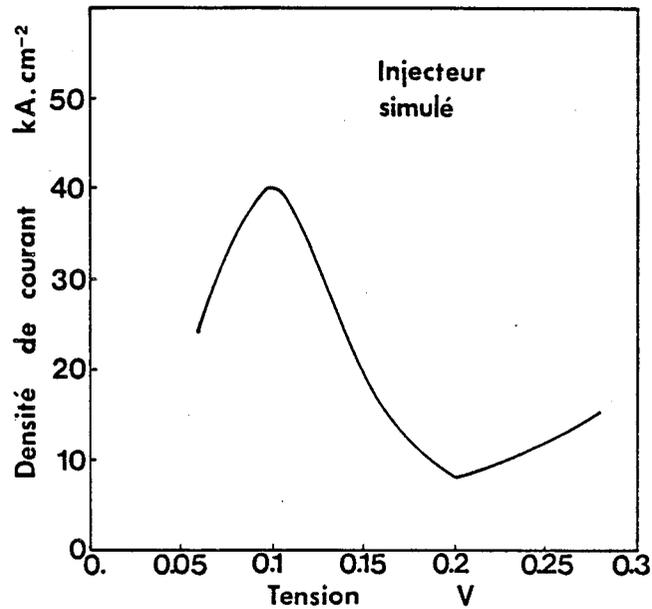


Figure 3.10 : Modèle macroscopique : caractéristique J-V de l'injecteur simulé.

3.3.2 Résultats

3.3.2.1 Niveaux d'impédance et performances attendues

- Caractéristiques d'injection : A titre d'exemple, nous supposons que l'injecteur a les caractéristiques statiques suivantes, schématisées sur la figure 3.10. Bien que fictif, cet injecteur nous semble réaliste compte tenu de l'expérience acquise dans ce domaine.

Les données essentielles sont :

- $V_{pic} = 0.1 V$: $J_{pic} = 40 kA cm^{-2}$
- $V_{vallée} = 0.2 V$: $J_{vallée} = 8 kA cm^{-2}$
- la diode est supposée avoir une surface de $1.767 \cdot 10^{-6} cm^2$, ce qui correspond à un diamètre de $15 \mu m$.

L'ensemble de la courbe est paramétré par une fonction lorentzienne pour décrire la première résonance, par une fonction exponentielle pour traduire la remontée vers la seconde résonance.

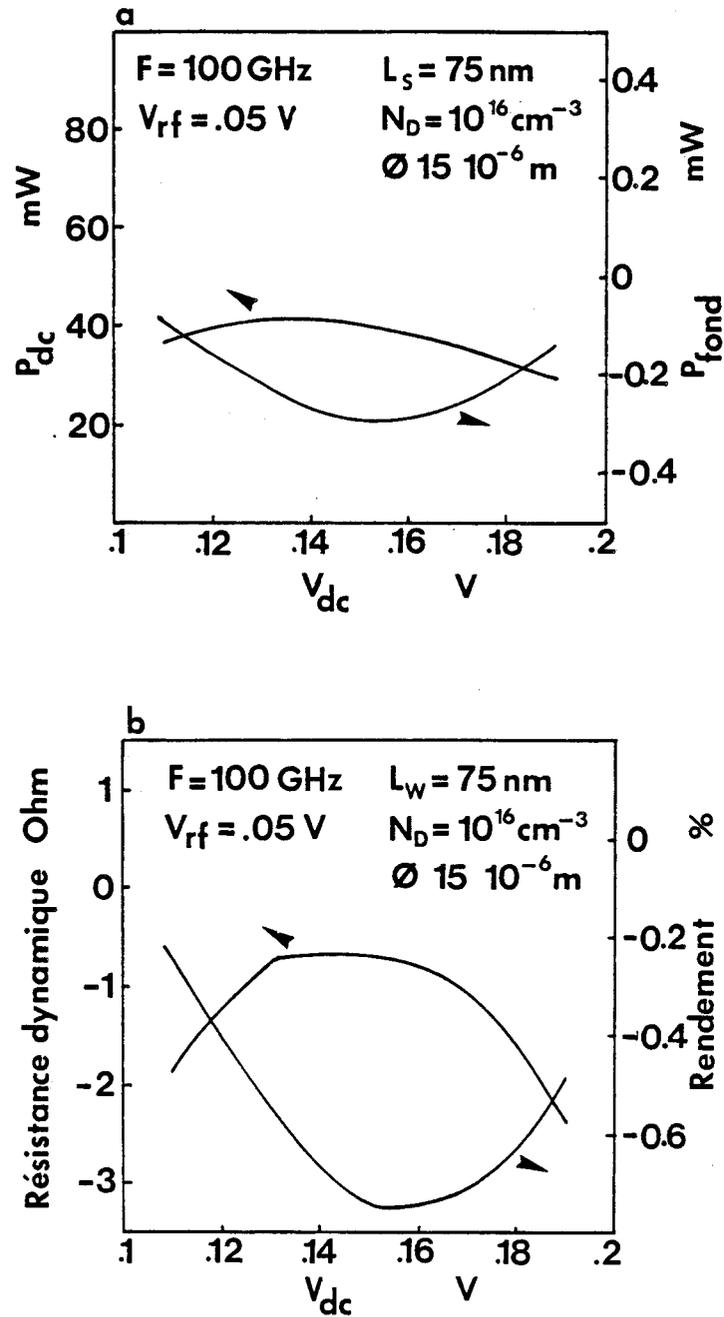


Figure 3.11 : Modèle macroscopique : étude en oscillation à 100 GHz en fonction de la polarisation statique :

- a) puissances continue et fondamentale.
- b) résistance dynamique et rendement.

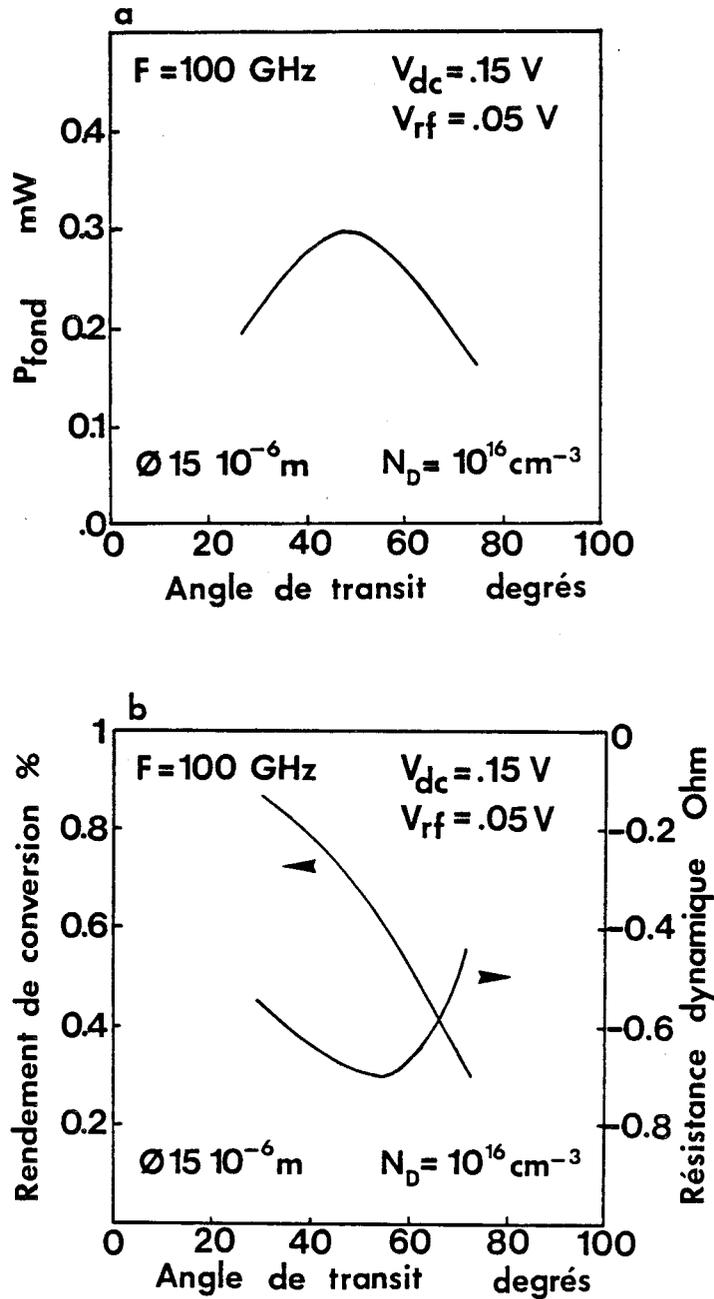


Figure 3.12 : Modèle macroscopique : étude en oscillation à 100 GHz en fonction de l'angle de transit :

a) puissance du fondamental.

b) rendement de conversion et résistance dynamique.

- Influence du point de polarisation : Les figures 3.11a et 3.11b permettent de chiffrer l'influence du point de polarisation sur les niveaux de puissance, de résistance et de rendement.

La simulation est effectuée ici pour une fréquence d'oscillation fixée à 100 GHz. La longueur de l'espaceur (L_S) est 75 nm pour un dopage de 10^{16} cm^{-3} . En termes d'angle de transit, défini par $\theta = \omega L_S / v_S$, on obtient 45° en supposant une vitesse moyenne proche de la vitesse de saturation de 10^7 cm s^{-1} . Par ailleurs nous avons supposé que l'excursion de la tension alternative est de 50 mV. Plusieurs points équirépartis sur la zone de résistance différentielle négative de la courbe $J(V)$, entre 0.11 V et 0.19 V, ont été choisis. Ils conduisent aux résultats des figures 3.11a et b.

La puissance continue est de l'ordre de 40 mW compte tenu de la tension de transit. La puissance délivrée à la fréquence fondamentale est maximale, avec une valeur de 300 μW , sensiblement au milieu de la caractéristique.

On obtient ainsi des rendements de conversion de 0.75 %. Pour le niveau de la résistance dynamique, on obtient des résultats à la limite de -1Ω , qui constitue l'impédance minimale adaptable. Elle est quasi-constante dans la zone centrale de la courbe, comme on peut l'observer expérimentalement, et croît en valeur absolue au fur et à mesure que l'on se rapproche des extrema de la caractéristique $J(V)$. Une diminution sensible du diamètre de la zone active permettrait d'augmenter le niveau d'impédance, facilitant ainsi, en pratique, l'utilisation de ces composants.

- Influence de la longueur de transit : Une autre étude peut être menée en fonction des longueurs d'espaceurs. Nous nous polarisons, pour cela, en milieu de résistance différentielle négative avec une excursion dynamique de 50 mV. Lorsque la structure double barrière qui joue le rôle d'injecteur est polarisée en zone de RDN, l'angle d'injection est de l'ordre de 270° (traduisant le fait que le courant injecté maximum présente un retard de l'ordre de 270° par rapport au début de la période de la tension alternative). Il faut donc que le paquet soit collecté en fin de période, ce qui implique que l'angle de transit maximum est ici de 90° . Ceci se base sur des considérations simples, en supposant que le courant est injecté très

localement en tension, que la vitesse de dérive est constante et que la diffusion ainsi que la réaction de charge d'espace sont négligeables.

Nous allons voir que dans notre cas, où l'on introduit des caractéristiques précises quant à la description du transport, il est possible d'effectuer l'optimisation de la longueur des zones de transit des composants.

Les éléments d'appréciation de cette longueur sont donnés dans les figures 3.12a et 3.12b. Elles montrent respectivement le niveau de puissance délivrée à la fréquence fondamentale (P_{fond} ici à 100 GHz), le rendement de conversion et la résistance dynamique (R_D) en fonction de l'angle de transit (θ).

Il est à noter que les valeurs maximales de P_{fond} et R_D sont obtenues pour des valeurs de θ sensiblement égales à 55 °. Ces valeurs traduites en termes de longueur d'espaceur (L_S) correspondent à L_S comprise entre 75 nm et 90 nm. Par ailleurs on observe que le rendement de conversion décroît à mesure qu'augmente θ . Ceci peut se comprendre dans la mesure où la puissance dissipée en continu augmente suite à une chute de tension accrue aux bornes de la zone de transit.

3.3.2.2 Réaction de charge d'espace en transit

L'un des effets venant limiter la valeur maximale de la puissance générée à la fréquence fondamentale est, sans conteste, la réaction de charge d'espace induite par la densité de charges libres injectées dans un espaceur faiblement dopé. Cet effet est illustré sur la figure 3.13 où nous avons reporté, sur la période du signal hyperfréquence, les variations de la densité de courant induite et de la tension totale.

La structure simulée ici comporte, dans la zone collecteur, un espaceur de 200 nm, faiblement dopé à 10^{16} cm^{-3} , pour laquelle il est attendu que les effets de réaction de charge d'espace soient significatifs. Ceci explique que la fréquence d'opération n'est que de 20 GHz. Pour l'injecteur, la caractéristique statique $J(V)$ est calculée sur la courbe expérimentale à 77 K d'une structure GaAs/GaAlAs avec barrières et puits de 5 nm (structure A du chapitre 1). Le courant pic vaut 21 kAcm^{-2} pour $V = 0.11 \text{ V}$ et le courant vallée vaut 3.4 kAcm^{-2} pour $V = 0.18 \text{ V}$.

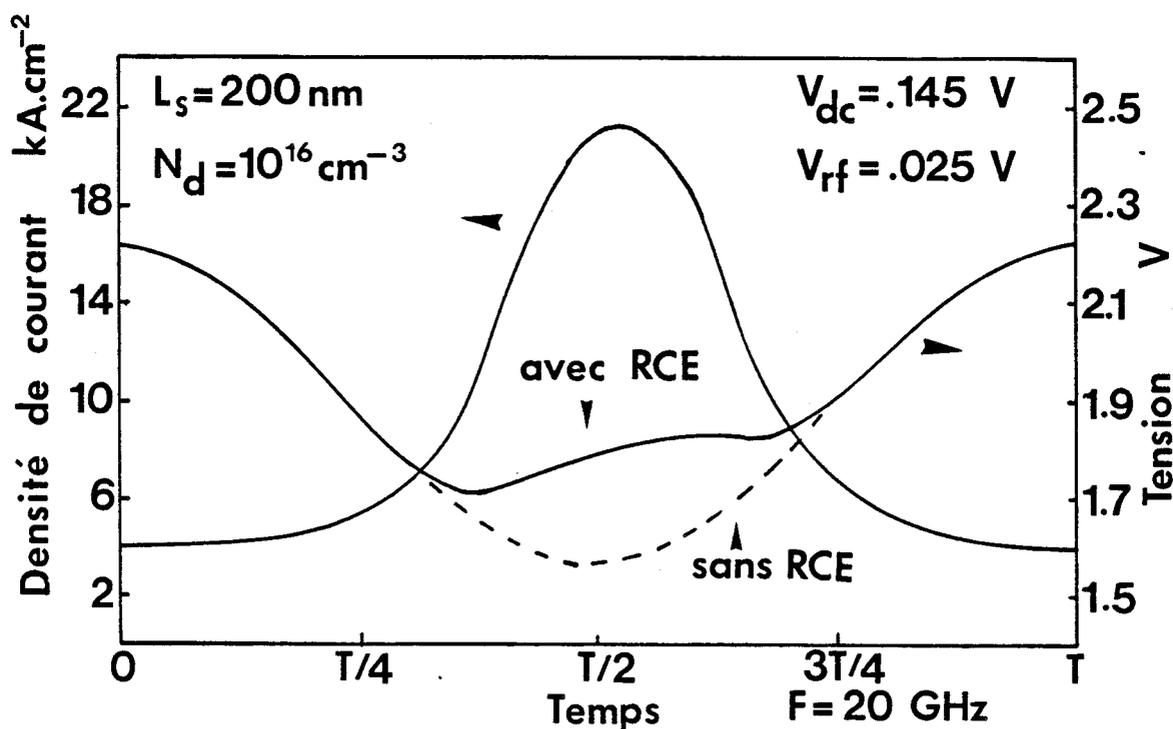


Figure 3.13 : Modèle macroscopique : influence de la réaction de charge d'espace.

Sur la figure 3.13, qui compare les cas avec et sans réaction de charge d'espace, on observe une nette déformation de la courbe de tension, lorsque la densité de courant induite traversant la structure est maximale. Pour s'assurer que la densité de porteurs injectés est bien du même ordre de grandeur que le niveau de dopage de l'espaceur, évaluons le terme $n = J/qv$. Etant donné la longueur importante de la zone de transit, il est raisonnable de prendre une vitesse très proche de celle de saturation, dans la mesure où l'effet de survitesse précédemment décrit n'intervient pas de façon prépondérante. De plus, le champ électrique reste à des valeurs très élevées compte tenu de la réaction de charge d'espace. Pour $J = 20 \text{ kA.cm}^{-2}$, on obtient une valeur de l'ordre de $2 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$. Il en résulte que le dopage n'arrive pas à écranter le champ électrique et que tout changement de pente local se répercute très fortement sur l'ensemble de la structure compte tenu de la longueur importante de l'espaceur.

Si l'on vise un fonctionnement à plus hautes fréquences, il convient d'éviter cette réaction de charge d'espace et, dans ce but, d'augmenter le niveau de dopage. Des valeurs proches de 10^{17} cm^{-3} pour des applications à des fréquences de l'ordre de

100 GHz nous semblent correctes.

A l'inverse, si le dopage est insuffisant, les aberrations de la tension mises en évidence précédemment tendent à modifier l'injection. Ce caractère auto-cohérent n'est pas pris en compte dans les simulations. A la limite et pour un fonctionnement à tension totale constante, l'augmentation de la chute de tension au niveau de la zone de transit, aux dépens de celle au niveau de l'injecteur, devrait se traduire par une coupure du phénomène d'injection. On est donc en présence d'un système oscillant entre des situations de forte et faible injection. Ces fonctionnements, basés sur une réaction de charge d'espace importante, nous semblent cependant être réservés à des fréquences relativement faibles.

3.3.3 Discussion

Nous venons de développer un modèle simple qui, appliqué à quelques exemples bien choisis, nous a permis de cerner les facteurs importants influant sur les performances des composants lorsqu'une zone de transit relativement étendue est accolée à une double barrière en zone collecteur.

Il apparaît tout d'abord que, pour des longueurs de quelques dizaines de nanomètres, l'effet de survitesse permet de maintenir les temps de transit à des valeurs comparables aux temps intrinsèques d'une double barrière. En ce qui concerne la valeur optimale de dopage pour un fonctionnement aux fréquences millimétriques, celle-ci se situe à des valeurs supérieures à 10^{17} cm^{-3} afin de s'affranchir des effets de réaction de charge d'espace.

Les implications au niveau de la caractéristique statique sont, en premier, une amplification des tensions mises en jeu. Ceci est particulièrement valorisant pour la recherche d'une puissance de sortie la plus développée possible, dans la mesure où elle permet d'augmenter l'excursion de tension alternative.

En termes d'impédance, l'ajout d'une zone de transit permet de diminuer la capacité intrinsèque du composant, ce qui concourt à une décroissance de la constante RC de la diode qui limite en pratique la fréquence maximale d'oscillation.

La plupart des résultats obtenus dans ce paragraphe utilisent comme référence

une diode du $15\mu m$ de diamètre. En conséquence, les niveaux d'impédance sont un peu faibles pour pouvoir être adaptés. Il est bien évident que, pour une réalisation destinée à un fonctionnement haute fréquence, une diminution importante des dimensions latérales est nécessaire. Des études préliminaires ont été effectuées dans ce sens, au sein de l'équipe, avec des sections de composants de $9\mu m^2$.

Quoi qu'il en soit, cette réduction des surfaces n'entraîne pas de diminution de la constante RC, puisqu'à la diminution de capacité s'oppose l'augmentation de résistance. Il n'en est pas de même pour la puissance délivrée qui est proportionnelle au volume de semiconducteur. Il apparaît donc que la diode tunnel résonnant est, malgré tout, extrêmement limitée en puissance de sortie. Si l'on vise un fonctionnement en oscillateur, il semble possible d'intégrer dans un système plusieurs diodes [25][27]. L'un des obstacles à cette intégration, à l'heure actuelle, est la dispersion importante des caractéristiques $I(V)$ sur une même plaquette pour des composants à faibles largeurs de barrières qui, seuls, présentent des densités de courant intéressantes.

Face à ces difficultés, il apparaît que, pour augmenter tant les fréquences maximales d'oscillation que les puissances de sortie, l'effort doit avant tout porter sur l'amélioration des caractéristiques d'injection. Les structures AlSb/GaSb, où des densités de courant de plus de $400kAcm^{-2}$ ont été obtenues, sont les témoins de cet effort.

3.4 Etude de faisabilité : simulation des diodes à tunnel résonnant par la méthode de Monte-Carlo

3.4.1 Principe

Une nouvelle application de la méthode de Monte-Carlo dans le cas particulier des diodes à tunnel résonnant a été proposée par Baba et al [10] [28]. La principale caractéristique de la simulation est de considérer les électrons comme des particules dans les espaceurs et comme des paquets d'onde au sein de la zone tunnel résonnant.

Le principe de la simulation est illustré figure 3.14, qui montre le diagramme de bande de conduction (vallée Γ) et donne une idée générale du modèle utilisé. Une hétérostructure double barrière non dopée est entourée d'un émetteur et d'un collecteur tous deux fortement dopés.

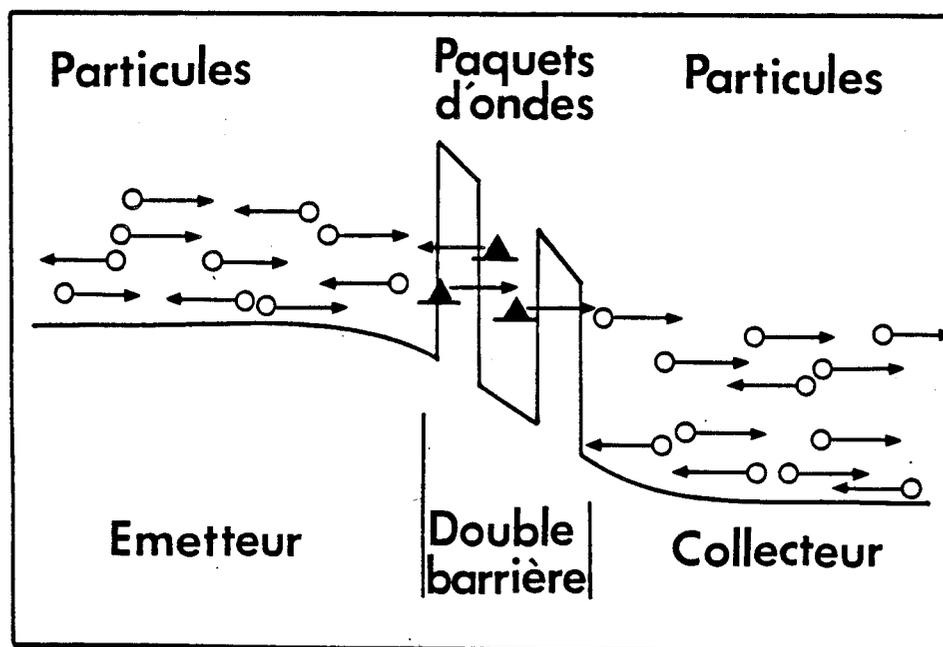


Figure 3.14 : Principe de simulation de la méthode de Monte-Carlo appliquée aux diodes à tunnel résonnant.

Dans ces deux dernières zones, les électrons en tant que particules sont accélérés par le champ électrique et subissent des interactions d'origines diverses. Quand la particule pénètre dans la double barrière, elle est traitée comme un paquet d'onde dont la localisation suit l'évolution spatiale de sa probabilité de présence au sein de la zone double barrière-puits. Celle-ci est calculée à l'énergie longitudinale incidente du porteur. Lorsque le paquet d'onde quitte l'hétérostructure, il est considéré de nouveau comme une particule classique.

Pour les vallées satellites (X et L), les électrons sont traités comme de simples particules sur l'ensemble de la zone simulée. En effet, dans la zone double barrière, la concentration électronique en vallées supérieures est faible. Il en résulte que la nature ondulatoire des porteurs peut être négligée, en première approximation, dans la détermination des propriétés de transport du système.

Dans le modèle, l'évolution des paquets d'onde dans la double barrière est étudiée à partir du calcul des coefficients de transmission et de réflexion, des temps de passage par effet tunnel et temps de réflexion et par la position moyenne du paquet d'onde dans la zone quantique. Ces différents coefficients sont extraits de la résolution de l'équation

de Schrödinger indépendante du temps unidimensionnelle. La non-parabolicité de bande de conduction ainsi que l'énergie transverse des porteurs sont prises en compte. L'équation de Schrödinger dans la direction z s'écrit :

$$\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \left[\frac{1}{m^*(z) \{1 + \alpha(E - V(z))\}} \frac{d}{dz} \psi(z) \right] + \left[E - V(z) - \frac{\hbar^2 k_t^2}{2m^*(z) \{1 + \alpha(E - V(z))\}} \right] \psi(z) = 0 \quad (3.29)$$

où $\psi(z)$ est la fonction d'onde, E l'énergie totale du porteur incluant l'énergie transverse, $V(z)$ le profil de bande de conduction, α représente le coefficient de non-parabolicité et k_t le vecteur d'onde transverse.

Cette équation est résolue par le même algorithme que dans le chapitre 1. Les temps de transmission (τ_t) et de réflexion (τ_r) sont calculés en utilisant les phases des coefficients de transmission et de réflexion [28]. Dans cette référence, les auteurs montrent que les temps ainsi calculés sont équivalents à ceux obtenus par une résolution de l'équation de Schrödinger dépendante du temps. Les équations pour obtenir ces temps sont :

$$\tau_t = \frac{1}{v(k_0)} \left\{ a_b + \frac{d\phi^+}{dk} \right\}$$

et

$$\tau_r = \frac{1}{v(k_0)} \frac{d\phi^-}{dk} \quad (3.30)$$

où $v(k_0)$ est la vitesse du paquet d'onde centré en k_0 , a_b l'épaisseur de la double barrière, k le vecteur d'onde, ϕ^+ représente la phase du coefficient de transmission (un nombre complexe), ϕ^- celle du coefficient de réflexion.

La position moyenne du paquet d'onde dans la double barrière est calculée en générant des nombres aléatoires avec une densité spatiale de probabilités correspondant à la probabilité de présence (carré de l'amplitude de la fonction d'onde en k_0) du porteur. Par ailleurs, pour simplifier le modèle, aucune interaction sur le paquet d'onde dans la double barrière n'est prise en compte.

Les temps τ_t et τ_r correspondent respectivement au temps de résidence des électrons dans la structure quantique et au temps d'interaction des porteurs qui se

heurtenant à l'interface émetteur-première barrière. Pour obtenir une image physique de ce dernier temps (τ_r), on peut se reporter aux simulations du passage d'un paquet d'onde gaussien à travers une double barrière [29]. On constate en effet que le paquet d'onde, en interagissant avec la première barrière, présente des phénomènes d'interférences complexes avant que les porteurs hors-résonance ne soient réfléchis vers l'émetteur.

Une procédure classique de Monte-Carlo, comme celle décrite dans les paragraphes précédents, est utilisée dans les régions fortement dopées pour la vallée Γ et sur la structure entière pour les vallées supérieures.

La procédure de calcul utilisée, reportée sur les organigrammes de l'annexe C, est la suivante :

- La distribution en énergie initiale des porteurs est calculée à l'équilibre thermodynamique (distribution de Fermi-Dirac). Elle est déterminée par le dopage. Les taux d'interaction à chaque énergie sont alors calculés et stockés.
- Le profil de potentiel est déterminé de manière auto-cohérente dans l'émetteur suivant la procédure numérique décrite dans le chapitre 1 et par simple résolution de l'équation de Poisson dans le collecteur, dans l'hypothèse d'un régime de désertion complète. Ce calcul dépend du dopage des espaceurs et du champ électrique imposé dans la double barrière. Ce potentiel reste alors inchangé tout au long de la simulation.
- Chaque porteur est suivi selon sa position dans le système. Le calcul est mené itérativement jusqu'à ce qu'il soit possible d'obtenir la valeur moyenne de paramètres clés tels que la concentration de porteurs $n(z)$.

A partir des informations de concentration et de vitesse, il est alors théoriquement possible d'en déduire une information de courant. En pratique, cette détermination peut se faire à partir des données extérieures à la double barrière pour des zones suffisamment éloignées de l'hétérostructure, où la détermination des vitesses moyennes est sans équivoque. En effet, au sein de la double barrière, le transport est supposé purement balistique, ce qui se traduit par des vitesses moyennes très élevées difficilement raccordables à celles correspondant à des régimes de diffusion.

3.4.2 Résultats numériques

Les résultats que nous présentons sont obtenus par la structure suivante :

- zone double barrière-puits : $L_W = L_B = 5nm$, ces régions sont non-intentionnellement dopées, la discontinuité de bande de conduction ΔE_C est égale à 0.23 eV, la masse effective de puits est $0.067 m_0$. Pour les barrières, nous prenons $0.092 m_0$.
- zones émetteur et collecteur : chaque zone a une longueur de 50 nm, dopée n^+ à 10^{18} cm^{-3} ; le niveau de Fermi vaut alors 50 meV. Deux zones de faible épaisseur (5 nm) sont insérées entre les réservoirs et la double barrière. Ces régions sont non-intentionnellement dopées. Elles sont traitées, dans le calcul, comme parties intégrantes de la zone quantique.

Les conditions de simulation sont les suivantes :

- le pas spatial de 0.1 nm ;
- le pas temporel est 2 fs ;
- nous suivons l'évolution de 10000 particules pendant 2 ps ;
- la concentration électronique est calculée en faisant une moyenne sur le nombre de porteurs entre 1 ps et 2 ps en chaque point de l'espace. La densité est évaluée en supposant l'équilibre loin de la double barrière, soit $n(z=0) = 10^{18} \text{ cm}^{-3}$.

Nous illustrons les résultats de calcul pour trois régimes de fonctionnement de la diode :

- dans la zone de courant activé thermiquement pour un champ électrique de 20 kV.cm^{-1} , figure 3.15 ;
- proche de la résonance pour un champ électrique de 45 kV.cm^{-1} , figure 3.16 ;
- en régime de résistance différentielle négative, proche de la vallée pour un champ électrique de 60 kV.cm^{-1} , figure 3.17.

La distribution spatiale des particules en fonction de l'énergie longitudinale à $t = 2 \text{ ps}$ ainsi que la densité de porteurs tout au long de la structure sont représentées dans chacun des cas.

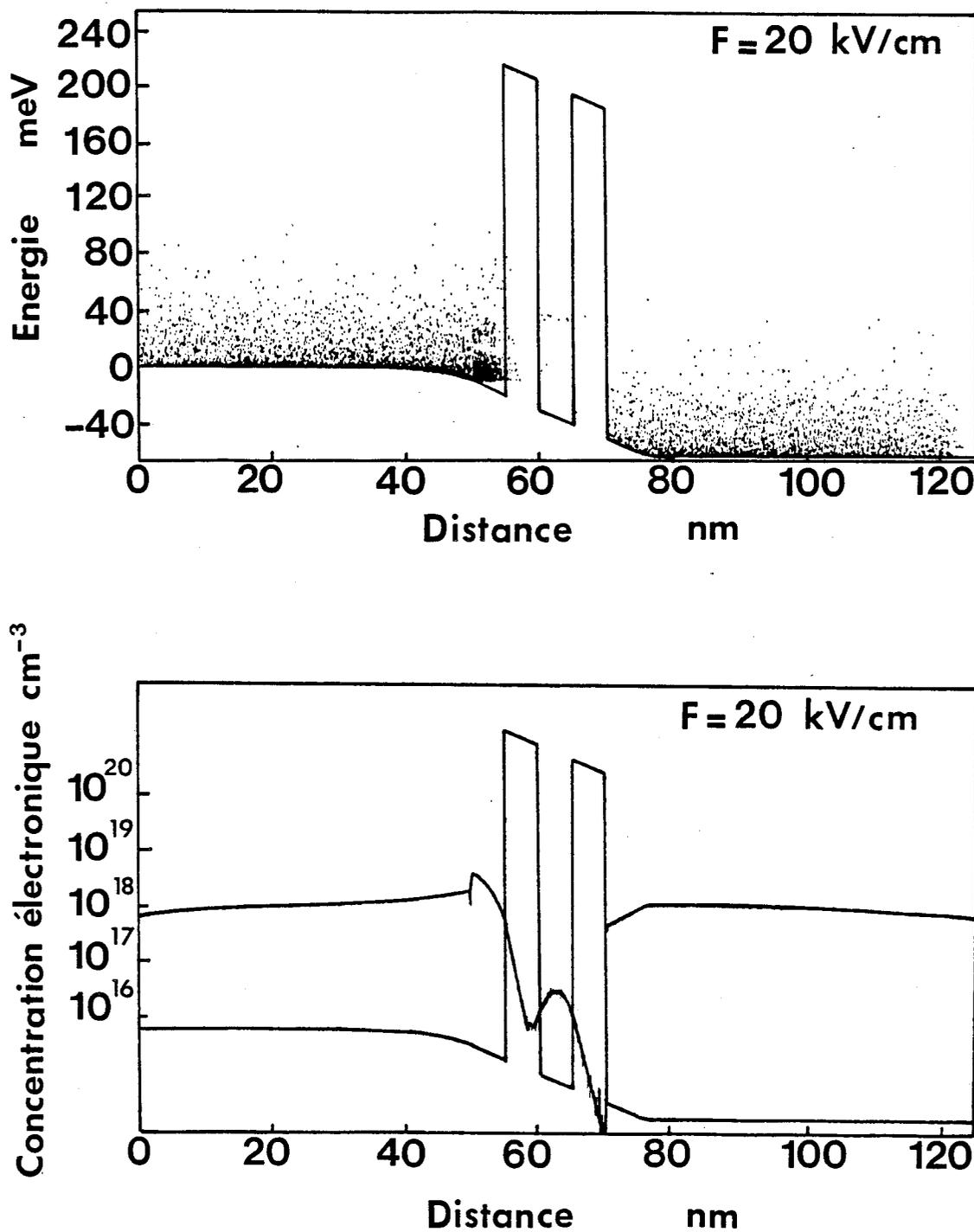


Figure 3.15 : Energie longitudinale d'un gaz électronique (a) et concentration électronique (b) dans une structure double barrière pour une polarisation correspondant à la zone de courant activé thermiquement.

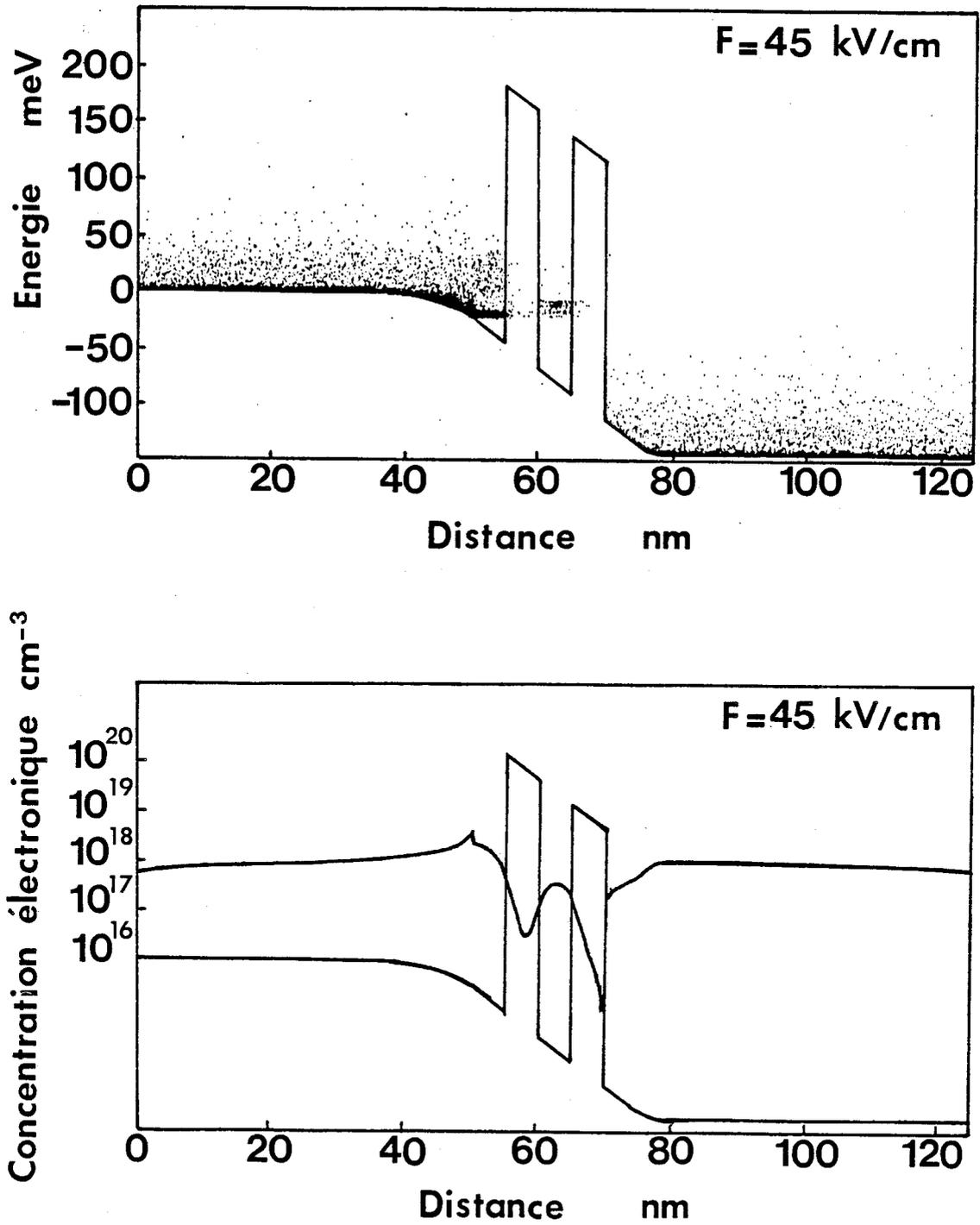


Figure 3.16 : Energie longitudinale d'un gaz électronique (a) et concentration électronique (b) dans une structure double barrière pour une polarisation proche de la résonance.

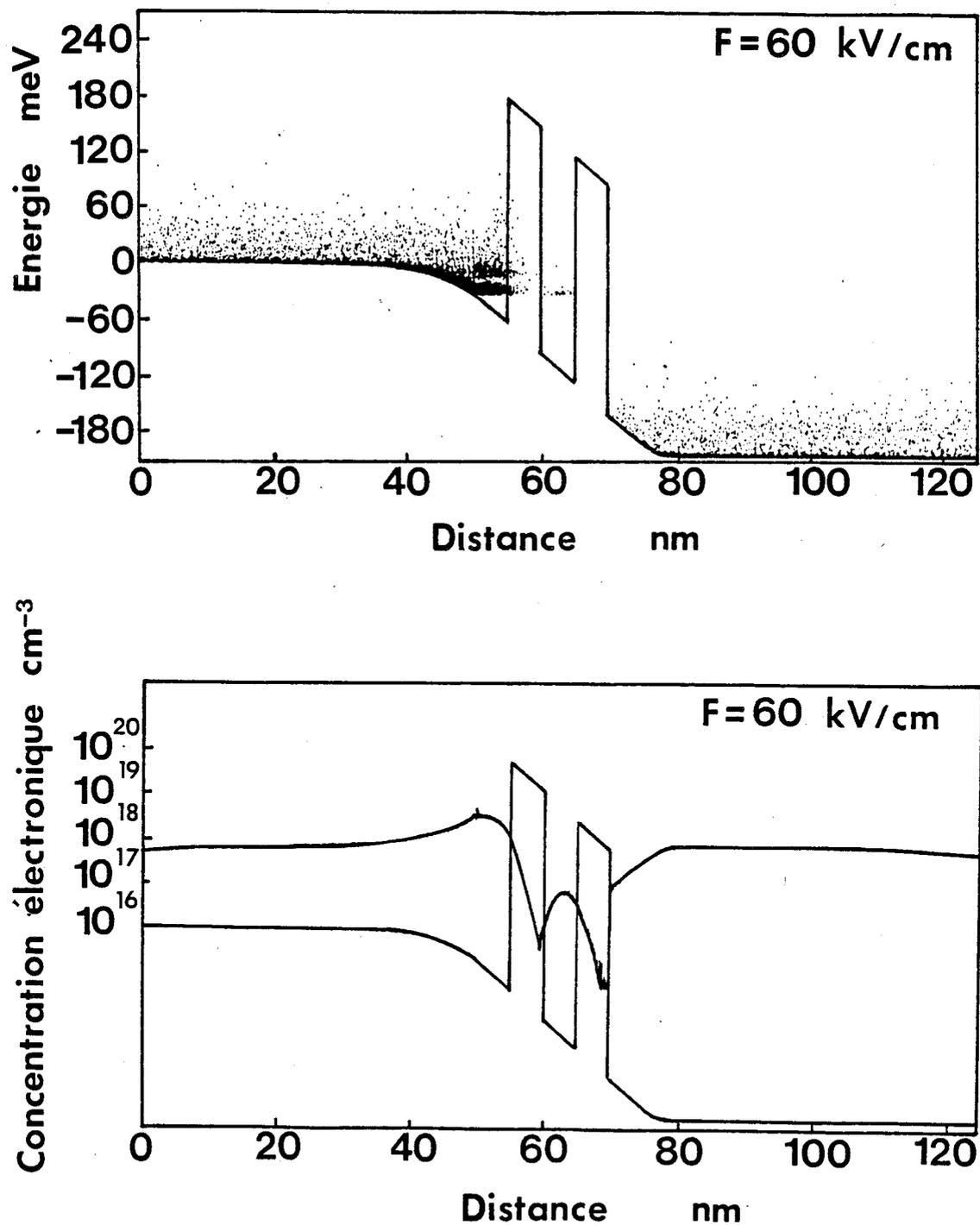


Figure 3.17 : Energie longitudinale d'un gaz électronique (a) et concentration électronique (b) dans une structure double barrière pour une polarisation correspondant au courant vallée.

Plusieurs informations sur le transport électronique peuvent être déduites de ces visualisations :

- Dans l'émetteur, compte tenu des valeurs très faibles de champ électrique, les électrons sont dans un état proche de leur distribution à l'équilibre thermodynamique ; leur énergie longitudinale obéit à la statistique de Fermi-Dirac.
- A la frontière émetteur-double barrière, une zone d'accumulation se forme, assumant la montée du champ électrique jusqu'à sa valeur quasi-constante dans la double barrière. L'analyse quantitative de cette densité de charges peut être faite à partir du tracé des concentrations électroniques en fonction de la distance. Les discontinuités que l'on observe sur ces figures, en amont de la double barrière, viennent de la difficulté de raccordement entre zones classiques et zones purement quantiques. Indépendamment de ces imperfections, on constate que la charge accumulée se situe vers $5 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$. Son évolution en fonction des valeurs de champ électrique est relativement complexe et résulte de deux effets antagonistes. D'une part, l'augmentation de la tension tend à accroître la densité de charges accumulées ; d'autre part, pour des tensions proches des états de conduction résonnants, une partie non négligeable des électrons fuit vers le collecteur. Ceci explique que, entre les valeurs 20 kV.cm^{-1} et 45 kV.cm^{-1} , il n'y a pas d'accroissement très important de la charge accumulée. On observe même un faible appauvrissement en électrons pour un état proche de la résonance. Il faut tempérer toutefois cette conclusion, dans la mesure où le nombre de particules simulées ici ne permet pas de décrire de façon entièrement satisfaisante l'apport d'électrons par les réservoirs. Néanmoins, il semble que cet effet existe et que, à la résonance, la densité de charge surfacique n_s dans la zone d'accumulation tend à être constante. En revanche, pour la valeur de 60 kV.cm^{-1} qui correspond à la vallée, on retrouve une très forte accumulation, comme on peut le constater sur la figure 3.17 [30]. La plage d'énergie ne comportant pas d'électrons au pied de la double barrière résulte du décalage de la limite de la zone traitée quantiquement, située un peu en amont de l'interface émetteur-première barrière. Les porteurs situés dans la zone quantique ne peuvent pas relaxer et donc peupler les états de basse énergie. Cet artifice, qui a été initialement introduit pour mieux traduire la position moyenne des porteurs vis-à-vis de la double barrière, permet de décrire de manière assez réaliste l'existence d'une bande interdite dans l'émetteur, que nous avons montrée dans le chapitre 1.

- Si l'on s'intéresse désormais à la charge piégée dans le puits, on constate que la concentration moyenne à la résonance est de l'ordre de $5 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$. En intégrant plus finement à l'intérieur du puits, on obtient une densité de charges piégées de 2 à $3 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$. Pour des conditions de polarisation proches de la vallée, cette valeur tombe à $2 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-2}$. Il est certain que, compte tenu de la valeur pic, il serait souhaitable, pour un développement ultérieur, d'introduire la réaction de charge d'espace dans le puits, afin de décrire plus exactement le remplissage du puits.
- Dans le collecteur, par opposition aux résultats obtenus en régime transitoire où l'on avait observé l'injection de porteurs chauds, les valeurs stationnaires calculées ici sont très proches de celles de l'équilibre.

3.4.3 Les problèmes rencontrés

Ce programme, dans son état actuel, tourne sur ordinateur Cyber 962 et nécessite pour un point de polarisation environ 5 à 6 heures d'unité centrale pour le suivi de 10000 particules. Il est bien évident que, pour une utilisation intensive, il est nécessaire de passer à des moyens de calcul beaucoup plus puissants. Ainsi, dans leur article original, Baba et al font état d'un temps limité à huit minutes sur super-ordinateur NEC-SX2.

L'amélioration la plus directe nous semble être l'utilisation d'un calcul vectoriel. En effet, des traitements similaires sont effectués pour chaque particule et les simulations de Monte-Carlo sont tout à fait aptes à être vectorialisées.

L'autre voie possible serait de simplifier la procédure de traitement des interactions. Néanmoins, dans la mesure où ces programmes sont appliqués à des hétérostructures de très faibles dimensions et que l'on ne peut isoler les zones d'accès, les gradients de champ électrique sont extrêmement importants ; il apparaît donc difficile de privilégier telle ou telle interaction.

Malgré ces problèmes de temps calcul, prohibitifs dans notre cas, nous avons pu obtenir une information sur le contraste de densités de charges qui peut se comparer de manière satisfaisante au contraste en courant. Ainsi pour un temps représentatif de 2 ps, nous avons obtenu, dans une situation résonnante, 582 électrons traversant la double barrière. Cette valeur est limitée à 41 dans une situation non résonnante. Le rapport est de 14 ; il est comparable à la valeur obtenue dans le chapitre 1 à 300 K pour une approche cohérente.

En adoptant un modèle particulière, on ouvre la voie à des études pour lesquelles les effets de distribution des grandeurs du transport sont primordiaux. C'est en particulier le cas des travaux sur le bruit. Rappelons qu'à l'heure actuelle il n'existe pratiquement aucune étude sur ce sujet pour les diodes à tunnel résonnant, hormis quelques mesures expérimentales en basses fréquences [31].

Une extension tout aussi valorisante de ces méthodes concerne la simulation de structures pour lesquelles les effets de réaction de charge d'espace sont importants. A titre d'exemple, citons les structures dissymétriques où les effets de bistabilité intrinsèque sont renforcés, ainsi que les structures quantiques contactées directement dans le puits pour lesquelles l'accumulation de charge constitue la commande du composant.

3.5 Conclusion

Ce chapitre traite des modélisations Monte-Carlo appliquées à la diode tunnel résonnant. L'apport de cette méthode concerne trois aspects :

- Le premier est relatif à l'effet de survitesse que l'on peut mettre en évidence dans les processus d'injection d'électrons chauds. Au cours de cette étude, nous avons appris que les porteurs sont capables de parcourir des distances de plusieurs dizaines de nanomètres avec des vitesses moyennes nettement supérieures à la vitesse stationnaire, et ceci à température ambiante.
- Cette information est ensuite utilisée dans un traitement macroscopique du processus de dérive. Par ce biais il est possible d'accéder à des informations utiles pour l'ingénieur, telles que les rendements de conversion ou le niveau d'impédance. Ces calculs sont menés lorsqu'un composant, intégrant un tunnel résonnant et une zone de transit importante, est utilisé en oscillation.
- Enfin nous avons montré qu'il était possible de tirer parti de la méthode de Monte-Carlo pour coupler des zones de contacts, où le transport est fortement diffusif, à la structure double barrière, qui ne peut être traitée que d'un point de vue quantique. A ce propos nous retiendrons que, par des tirages aléatoires dont les densités de probabilités correspondent aux probabilités de présence électronique, il est possible, non seulement d'avoir une image physique de ce qui se passe dans la double barrière, mais aussi de quantifier les densités de porteurs libres.

Il est certain que les méthodes présentées ici constituent une première étape dans la compréhension des composants à puits quantique et qu'il est nécessaire de compléter les méthodes de simulation. A titre d'exemple, citons les effets de réaction de charge d'espace qui sont à la base de très nombreux phénomènes physiques tels que la bistabilité intrinsèque. Cette extension des simulations passe néanmoins par l'utilisation de moyens de calcul extrêmement lourds, qui interdit souvent l'étude exhaustive des composants nécessaires à leur optimisation.

Dans le chapitre suivant, nous nous proposons de revenir à la structure double barrière qui apparaît comme l'élément déterminant dans la structure. Nous tenterons sur quelques exemples, d'améliorer les caractéristiques de conduction par "ingénierie de bande interdite" (band gap engineering).

Bibliographie

- [1] A. HOUSTON, A.G.R. EVANS
Electron drift velocity in n-GaAs at high electric field
Solid State Electronics 20 (1977) p. 197.
- [2] W. FAWCETT, A.D. BOARDMAN, S. SWAIN
Monte-Carlo determination of electron transport in Gallium Arsenide.
J. Phys. Chem. Solid 31 (1970) p. 1963.
- [3] H. SHICHIJO, K. HESS
Band structure dependant transport and impact ionization in GaAs
Physical review B 23, n°8 (1981).
- [4] M. ARTAKI, K. HESS
Monte-Carlo calculation of electron transport in GaAs/AlGaAs superlattices
Superlattices and Microstructures, Vol 1, n°6 (1985) p. 489.
- [5] K. TOMIZAWA, N. HASHIZUME
Ensemble Monte-Carlo simulation of an AlGaAs/GaAs heterostructure MIS-like
FET
IEEE Trans on Electron Devices, Vol 35, n°7 (1988) p. 849.
- [6] K. TOMIZAWA, Y. AWANO, N. HASHIZUME
Monte-Carlo simulation of AlGaAs/GaAs Heterojunction Bipolar Transistors.
IEEE Electron Device Letters, Vol EDL 5, n°9, (1984) p. 362.
- [7] K. YOKOYAMA, K. HESS
Monte-Carlo study of electronic transport in $Al_xGa_{1-x}As$ /GaAs single well
heterostructure.
Physical Review B, Vol 33, n°8 (1986) p. 5595.

- [8] P. LUGLI, S. GOODNICK, F. KOCH
Voir par exemple, Monte-Carlo study of hot electrons in quantum wells
Superlattices and Microstructures, Vol 2, n°4 (1986) p. 335.
- [9] I. SONG, D.S. PAN
Analysis and Simulation of the Quantum Well Injection Transit Time Diode
IEEE Trans. on Electron Devices, Vol 35, n°12, (1988) p. 2315.
- [10] T. BABA, M. AL MUDARES, J.R. BARKER
Monte-Carlo simulation of resonant tunneling diodes
Jpn Journal of Applied Physics, Vol 28, n°10 (1989) p. L 1682.
- [11] A. KASZYNSKI
Etude des phénomènes de transport dans les matériaux semiconducteurs par les
méthodes de Monte-Carlo : Application à l'Arséniure de Gallium de type n.
Thèse de doctorat de l'Université de Lille I (1979).
- [12] O. VANBÉSIEN
Ionisation par choc dans le GaAs, dans le $Al_xGa_{1-x}As$ et dans les hétérostructures
à multipuits quantiques.
DEA de Sciences des Matériaux - Université de Lille I (1987).
- [13] M. COHEN, J.R. CHELIKOWSKY
Pseudopotential for semiconductors
N Book and Semiconductors manual, Vol 1, North Holland Publishing.
- [14] I. TOPOL, H. NEUMANN, E. HESS
Band structures and effective masses for GaAs from a combined pseudopotential
- kp calculation
Phys. Stat. Solidi (b) 55 (1972).
- [15] J.R. CHELIKOWSKI, M.L. COHEN
Non local pseudopotential calculation for the electronic structure of eleven dia-
mond and zinc-blende semiconductors.
Phys. Rev. B, Vol 14, n°2 (1976).
- [16] E. HESS, I. TOPOL, K.P. SCHULZE, H. NEUMANN, K. UNGER
Band structure and pseudopotential from factors for AlAs
Phys. Stat. Solidi (b) 55 (1973) p. 187.

- [17] D.J. STUCKEL, R.N. EUWENA
Phys. Rev. 118 (1969) p. 1193.
- [18] D. LIPPENS, O. VANBÉSIEN
Monte-Carlo simulation of impact ionization by electrons in $Al_xGa_{1-x}As$
Inst. Phys. Conf. Ser. n°91 Chapter 7, (1987) p. 757.
- [19] L.V. KELDYSH
Concerning the theory of impact ionization in semiconductors
Soviet Physics JETP Vol 21, n°6 (1965) p. 1135.
- [20] D. LIPPENS, O. VANBÉSIEN, B. LAMBERT
Multiquantum well GaAs/AlGaAs structures applied to avalanche transit time devices
Journal de Physique Colloque C5 Supp. n°11 (Tome 48) (1987).
- [21] J.Y. TANG, K. HESS
Investigation of transient electronic transport in GaAs following high energy injection
IEEE Trans. on Electron Devices, Vol ED29, n°12 (1982) p. 1906.
- [22] M. GILDEN, M.E. HINES
Electronic Tuning effects in the Read Microwave Avalanche Diode
IEEE Trans on Electron Devices, Vol ED13, n°1 (1966) p. 169.
- [23] V.P. KESAN, K.P. NEIKIRK, P.A. BLAKEY, B.G. STREETMAN, T.D. LINTON Jr
The influence of transit-time effects on the optimum design and maximum oscillation frequency of quantum well oscillators
IEEE Trans. on Electron Devices, Vol 35, n°4 (1988) p. 405.
- [24] V.P. KESAN, AM. MORTAZAWI, D.R. MILLER, T. ITOH, B.G. STREETMAN, D.P. NEIKIRK
Microwave frequency operation of quantum well injection transit time (QWITT) diode
Electronic Letters, Vol 24, n°24 (1988) p. 1473.

- [25] I. SONG, D.S. PAN
Efficiency and power output of the quantum-well injection transit time device
IEEE Electron Device Letters, Vol EDL8, n°12 (1987) p. 560.
- [26] I. SONG, D.S. PAN
A generalized analytical model for the quantum well injection transit time diode
IEEE Trans. on Electron Devices, Vol 38, n°1 (1991), p. 14.
- [27] T.C.L.G. SOLLNER
Resonant Tunneling Oscillators for High-Frequency Applications
Resonant Tunneling in Semiconductors : Physics and Applications
Plenum Press (1990) in the press.
- [28] T. BABA, M. MIZUTA
Simulation of intrinsic bistability in resonant tunneling diodes.
Jpn Journal of Applied Physics, Vol. 28, n°8 (1989), p. L1322.
- [29] L. de SAINT POL, D. LIPPENS, F. CLÉROT, B. LAMBERT, B. DEVEAUD,
B. SERMAGE
Time domain analysis of resonant tunneling in double barrier heterostructures.
Inst. Phys. Conf. Ser. n°106, chapter 11 (1989), p. 801.
- [30] L. EAVES, M.L. LEADBEATER, D.G. HAYES, E.S. ALVES, F.W. SHEARD,
G.A. TOOMBS, P.E. SIMMONDS, M.S. SKOLNICK, M. HENINI,
O.H. HUGHES
Electrical and Spectroscopic studies of space charge buildup, energy relaxation and
magnetically enhanced bistability in resonant tunneling structures.
Solid State Electronics, Vol. 32, n°12 (189) p. 1101.
- [31] Y.P. LI, A. ZASLAVSKY, D.C. TSUI, M. SANTOS, M. SHAYEGAN
Noise characteristics of double barrier resonant tunneling structures below 10 kHz.
Phys. Rev. B. 41 (190) p. 8388.

Chapitre 4

Structures à multiplication de discontinuités

Chapitre 4

Structures à multiplication de discontinuités

4.1 Introduction

Précédemment, nous avons appliqué les modèles numériques exclusivement aux structures double barrière. Nous nous proposons dans ce chapitre, en nous basant sur l'expérience acquise, de voir dans quelle mesure de nouvelles structures peuvent être proposées.

Le modèle de résolution de l'équation de Schrödinger indépendante du temps que nous avons développé peut en effet être facilement étendu au cas de structures intégrant de multiples discontinuités. Ce sont les potentialités de ce type de composants que nous allons étudier ici. A chaque fois que cela sera possible, une confrontation avec l'expérience viendra enrichir la discussion. Dans le but d'isoler les contributions apportées par les modifications de structures, nous limiterons généralement notre analyse à une approche cohérente de la zone active.

Dans ce chapitre, nous focaliserons notre attention sur trois groupes de nouveaux composants :

- tout d'abord, nous améliorerons les caractéristiques statiques des diodes à tunnel résonnant en introduisant volontairement des perturbations de potentiel au sein de la double barrière ;
- ensuite, nous étudierons la notion de tunnel séquentiel dans les multipuits

quantiques par l'étude théorique d'une triple barrière ;

- enfin, l'analyse de la courbe de transmission de superréseaux symétriques de dimension finie nous amènera à nous interroger sur les conditions d'existence d'une vraie minibande. Nous proposerons alors une structure de dimension faible présentant des caractéristiques de transmission de type "bande plate".

4.2 Structures à perturbations de potentiel

4.2.1 Principe

Une des applications possibles des diodes à tunnel résonnant est la réalisation de multiplicateurs de fréquence à haut rang d'harmonique impair. De très bons résultats ont été obtenus, au sein de notre équipe, sur des diodes double barrière GaAs/AlAs [1]. En particulier, il a été montré qu'un signal à la fréquence fondamentale de 64 GHz peut servir à générer un signal hyperfréquence à 320 GHz après multiplication à l'harmonique 5. Les barrières, dans ce cas, ont 1.7 nm de largeur et on obtient des densités de courant pic extrêmement élevées de l'ordre de 280 kA.cm^{-2} . Par ailleurs, il est à noter, dans cette publication, que la puissance de sortie du cinquième harmonique pour une diode à tunnel résonnant devient comparable à celle des diodes Schottky .

Cette application se révèle donc très prometteuse et il convient d'essayer d'optimiser les caractéristiques des composants à tunnel résonnant.

Les éléments de motivation pour une recherche sur la multiplication de fréquence sont :

- premièrement, l'existence d'une résistance différentielle négative qui permet d'avoir des rendements de conversion théoriquement supérieurs à ceux obtenus pour des multiplicateurs résistifs conventionnels ;
- deuxièmement, la fonction qui décrit la caractéristique courant-tension est, pour des structures idéales, impaire ($I(-V) = -I(V)$) ; il en résulte que seuls les harmoniques de rang impair sont générés.

Les paramètres clés pour réaliser des multiplicateurs de fréquence performants sont :

- d'une part, l'obtention de densités de courant pic et de contrastes en courant très élevés ;
- d'autre part, l'obtention d'une non-linéarité maximale de la courbe I-V.

La recherche d'une forte densité de courant passe par une optimisation des largeurs de barrières, comme nous avons pu le montrer précédemment. Ainsi, pour obtenir une densité de courant de l'ordre de 100 kA.cm^{-2} , il est nécessaire de travailler avec des structures où les barrières n'ont que quelques couches atomiques d'épaisseur.

L'optimisation de la non-linéarité est plus complexe. Nous avons vu en effet que l'existence d'une zone d'accumulation en amont de l'hétérostructure influe fortement sur la montée de courant, alors que les modèles simplifiés prévoient une croissance linéaire.

Le rapport courant pic sur courant vallée est fortement dépendant de la contribution hors-résonance de la transmission qui s'appuie sur les phénomènes de résonance liés à l'existence de niveaux aux énergies plus élevées.

Nous allons montrer ici que, sur ce plan, des structures pseudomorphiques incluant des perturbations de potentiel dans le puits (figure 4.1) vont présenter des caractéristiques intéressantes. Ces structures vont nous permettre de contrôler localement la probabilité de présence dans le puits, conduisant à une véritable ingénierie des niveaux résonnants.

4.2.2 Etude théorique

4.2.2.1 Cas d'une perturbation de potentiel centrée dans le puits

Les cas de perturbations de potentiel centrées dans le puits sont représentés figures 4.1a et 4.1b.

Nous utilisons comme structure de base une diode à tunnel résonnant équivalente à la structure A du premier chapitre. Les barrières et le puits ont 5 nm d'épaisseur ; les barrières sont en $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$, la discontinuité de potentiel utilisée dans les calculs est de 0.23 eV.

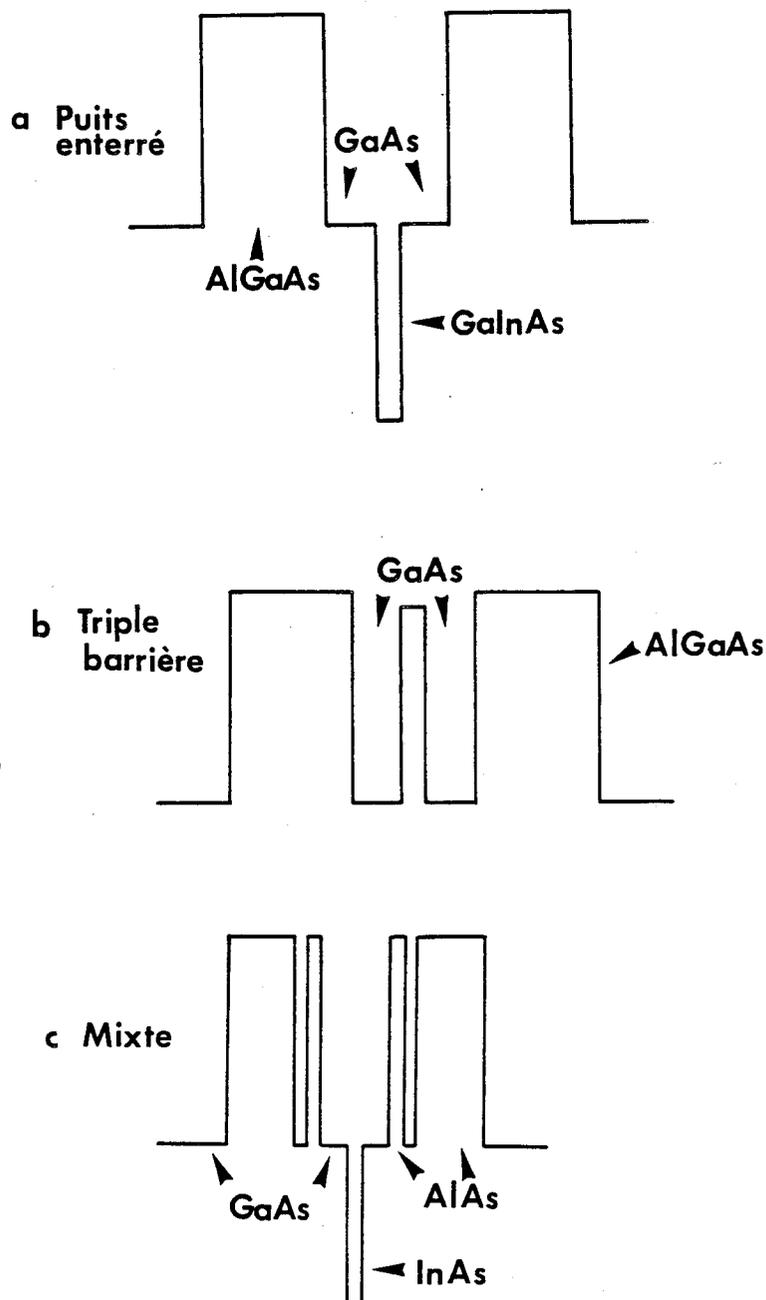


Figure 4.1 : Exemples de structures double barrière intégrant des perturbations de potentiel

D'un point de vue pratique, les perturbations de potentiel peuvent être créées lors de la croissance :

- pour la structure "triple barrière", quelques monocouches de GaAlAs sont insérées au centre du puits ($\Delta V_p > 0$) ;
- pour la structure "puits enterré", quelques monocouches de GaInAs sont déposées au centre du puits ($\Delta V_p < 0$).

Les concentrations variables d'Aluminium et d'Indium nous permettent de contrôler la hauteur ou la profondeur de la perturbation.

Dans le cas d'une perturbation très locale, la position au centre du puits permet de moduler l'énergie de confinement du niveau fondamental sans pour autant modifier l'énergie du premier niveau excité. En effet, au milieu du puits, la probabilité de présence électronique relative au premier niveau est maximale, tandis que celle du second niveau passe par zéro. Dans le cas du puits enterré, le niveau résonnant fondamental va être décalé vers les basses énergies. Pour la triple barrière, l'effet est inversé.

A ce stade du raisonnement, il nous semble utile de faire une remarque importante dans le cas du puits enterré. Il faut préciser que, si la largeur du puits profond est faible (typiquement une dizaine d'Angströms), aucun niveau lié n'existe dans cette perturbation. Pour le comprendre, on peut faire référence au cas d'un simple puits de GaInAs, de largeur L_W , encadré de GaAs. Lorsque L_W tend vers zéro, on montre que le premier niveau résonnant affleure le haut du puits. Le fait de renforcer le confinement par deux barrières, ici de GaAlAs, a pour effet de faire sortir le niveau fondamental du puits enterré. Le premier niveau est donc accessible aux électrons pour des conditions de polarisation proches de l'équilibre. Il n'en serait pas de même si l'on remplaçait la modulation de puits GaAs/GaInAs par un puits homogène de GaInAs.

La figure 4.2a représente les courbes de transmission théoriques pour cinq valeurs positives ou négatives de ΔV_p . Les discontinuités sont respectivement $\Delta V_p = 0.2$ eV, 0.1 eV (structures triple barrière), 0 eV (structure de référence), -0.1 eV et -0.2 eV (structures puits enterré). La largeur de la perturbation de potentiel est de 1 nm.

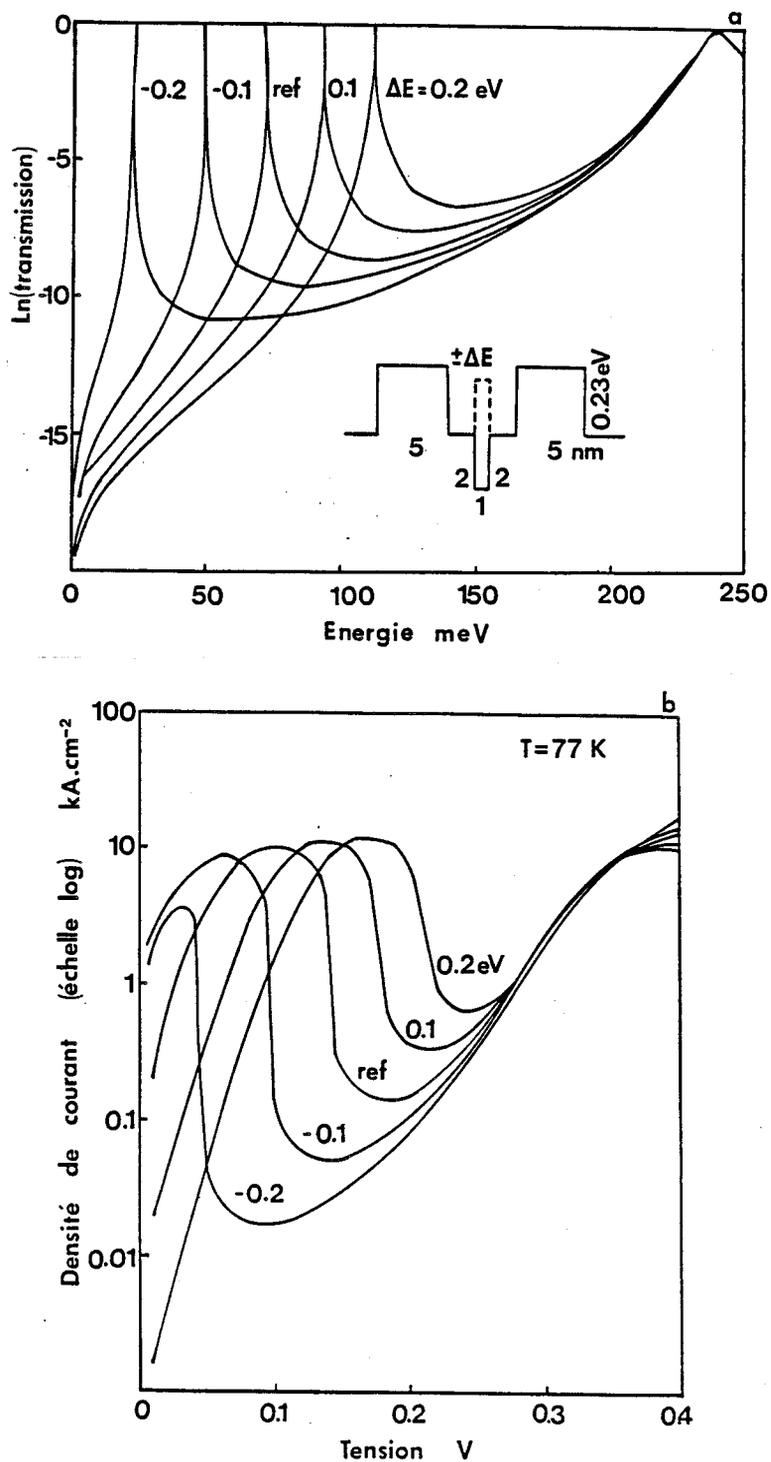


Figure 4.2 : Structures à perturbation de potentiel centrée dans le puits.
 a) Courbes de transmission en fonction de l'énergie longitudinale à l'équilibre.
 b) Caractéristiques courant-tension à 77 K.

Sur ces courbes, plusieurs effets importants sont à noter :

- Tout d'abord, on module bien l'énergie de confinement du premier niveau résonnant en fonction de la perturbation. De $E_1 = 112$ meV pour $\Delta V_p = 0.2$ eV, on tombe à $E_1 = 23$ meV pour $\Delta V_p = -0.2$ eV. La valeur de référence est 73 meV pour la structure sans perturbation. Le deuxième pic de résonance reste inchangé dans tous les cas.
- Ensuite, on constate que le fait d'écarter les deux niveaux résonnants ($\Delta E = 230$ meV pour $\Delta V_p = -0.2$ eV par rapport à $\Delta E = 180$ meV pour $\Delta V_p = 0$ eV) entraîne une diminution significative des valeurs de transmission hors résonance. Le contraste de transmission augmente et l'on peut donc s'attendre à calculer des rapports courant pic sur courant vallée plus élevés pour des structures à puits enterré.

Ce résultat se retrouve sur la figure 4.2b où sont reportées les caractéristiques courant-tension pour les cinq cas envisagés à 77 K. Dans le cas limite, on remarque que le rapport pic sur vallée est multiplié par 3 pour $\Delta V_p = -0.2$ eV par rapport à la structure de référence. C'est donc un effet important. Pour ce puits enterré, on peut aussi noter que la tension et la densité de courant à leur valeur pic sont diminuées. En effet, la conduction devient quasiment instantanée avec la polarisation, à partir du moment où le niveau résonnant est 23 meV au dessus de la bande de conduction de l'émetteur à l'équilibre. La diminution de la densité de courant peut s'expliquer par le fait que la largeur à mi-hauteur du pic de transmission est plus faible - $\Gamma = 0.6 \cdot 10^{-5}$ eV - alors qu'elle vaut $3.6 \cdot 10^{-4}$ eV (différence d'un facteur 4) pour la structure de base. Le produit de la fonction de distribution en énergie par la transmission est alors plus faible. Un tel effet est attendu car, en attirant le niveau fondamental vers les états de faible énergie, on tend à localiser plus fortement les porteurs.

Pour les autres cas, la densité de courant pic est équivalente et les différences ne sont significatives que pour le courant vallée. Ceci résulte des écarts de valeurs des transmissions hors-résonance. Enfin, dans les cinq simulations, la densité de courant présente la même remontée vers la seconde résonance.

Avant d'envisager des perturbations multiples, nous voulons comparer les structures à puits de potentiel localisé à celles pour lesquelles le puits profond occupe l'ensemble de l'espace situé entre les deux barrières. En utilisant un matériau à plus

faible bande interdite dans le puits par rapport aux zones de contact, on tend à obtenir un effet similaire, puisque dans ce cas la discontinuité de bande de conduction se répercute sur l'ensemble des états résonnants. On constate alors que, pour maintenir le premier niveau excité à des énergies élevées, il est nécessaire de restreindre la dimension globale du puits ; il en résulte qu'il faut agir tant sur la profondeur du puits que sur sa largeur, alors que, dans notre cas, l'optimisation est relativement directe.

Si l'on se place d'un point de vue technologique, la solution de puits de potentiel imbriqués nous semble également plus favorable. Elle permet en effet de diminuer l'épaisseur de la couche de GaInAs et donc de travailler avec des concentrations d'Indium plus élevées, avant que n'apparaissent des dislocations du fait de la désadaptation de maille entre le GaInAs et la GaAs.

Structure	E_0 meV	E_1 meV	$\Delta E =$ $E_1 - E_0$ meV	$\tau = \hbar/\Gamma$ pour E_0 ns
I	52	762	710	0.7
II	107	440	30	0.07
III	58	952	894	3

Tableau 4.1 : Résultats numériques d'énergies résonnantes et de temps de vie du niveau quasi-lié de structures double barrière, avec ou sans perturbation de potentiel (voir le texte pour le descriptif détaillé des structures).

4.2.2.2 Autres types de perturbations

Pour montrer la diversité des effets résultant de l'existence de perturbations de potentiel au sein de la double barrière, il est intéressant d'envisager les deux types de perturbations, puits et barrière, sur une même structure. Un exemple (que nous noterons structure I) est proposé sur la figure 4.1c.

Les perturbations ont des largeurs de 0.6 nm, ce qui permet d'envisager un puits profond d'InAs. Quant aux perturbations de type barrière, elles sont constituées d'un plan d'AlAs (0.6 nm). La position de ces plans est en retrait de 0.5 nm par rapport aux interfaces barrières-puits. La probabilité de présence du second niveau est en effet maximale pour ces valeurs d'abscisses.

A titre de comparaison, nous allons également effectuer des calculs sur deux autres structures de référence AlAs/GaAs/AlAs. La première, notée structure II, a des épaisseurs de barrières L_B de 2.7 nm pour une largeur de puits de 5.0 nm. Pour la seconde (notée structure III), $L_B = 3.8$ nm, $L_W = 2.8$ nm, la perturbation centrale de InAs est conservée. Cette largeur de barrière correspond à la distance entre le contact émetteur et la perturbation d'AlAs de la structure I.

Les résultats de l'étude des niveaux résonnants sont résumés dans le tableau 4.1. On constate que l'écart $\Delta E = E_1 - E_0$ pour la structure I est doublé par rapport à celui de la structure II. Corrélativement le premier niveau est abaissé de 50 meV.

Dans ce tableau, nous avons reporté les temps de durée de vie sur le niveau fondamental. On constate que les structures I et III sont loin d'être équivalentes et qu'une structure de type I est nettement plus favorable pour les applications. En effet, une valeur faible de temps de résidence sur le niveau quasi-lié se traduit par une densité de courant importante. Technologiquement, la structure I serait réalisable au vu des réalisations passées relatives à des structures double barrière pour lesquelles le confinement est réalisé par une alternance de matériaux binaires [2].

4.2.2.3 Remarques

Au terme de cette étude théorique, les acquis suivants méritent d'être soulignés :

- les perturbations de potentiel de type puits enterré permettent d'attirer vers

les basses énergies l'état fondamental de manière significative, rendant ainsi la conduction plus instantanée en fonction de la polarisation ;

- lorsque le premier état excité reste inchangé, ce décalage vers les basses énergies se traduit également par une amélioration notable du rapport courant pic sur courant vallée ;
- pour des structures complexes, il faut se préoccuper de la densité de courant qui peut conserver des valeurs élevées pour des structures à multiples discontinuités.

A titre de remarque, notons également que les perturbations que nous avons étudiées ici peuvent simuler la prise en compte de processus d'interactions dans le puits [3].

4.2.3 Confrontation théorie-expérience

4.2.3.1 Résultats extraits de la littérature

Perturbation de type puits : le meilleur rapport courant pic sur courant vallée obtenu à température ambiante pour une structure double barrière a été mesuré par une équipe du M.I.T. [4]. Il s'agit d'une structure adaptée sur substrat InP avec zones de contact collecteur et émetteur en $Ga_{0.47}In_{0.53}As$. La double barrière est composée d'une hétérostructure contrainte $AlAs(10 \text{ al})/Ga_{0.47}In_{0.53}As(4 \text{ al}) / InAs(6 \text{ al})/Ga_{0.47}In_{0.53}As(3 \text{ al})/AlAs(10 \text{ al})$ ("a.l." pour couche atomique, "atomic layer"). Grâce aux discontinuités de potentiel très importantes, les deux premiers niveaux résonnants sont très écartés ($\Delta E > 1 \text{ eV}$).

Ces auteurs obtiennent un rapport pic sur vallée de 30 à température ambiante et 63 à 77 K, avec des densités de courant pic de l'ordre de 6 kA.cm^{-2} . Pour une structure équivalente sans puits enterré d'InAs, le contraste en courant ne vaut plus que 19 à 300 K, avec une densité de courant de 7 kA.cm^{-2} .

Perturbation de type barrière : l'une des contributions les plus significatives a été publiée par Zohta et al [5]. A partir d'une structure conventionnelle GaAs/AlGaAs, ces auteurs montrent que, en insérant une perturbation centrée d'AlAs de 1 nm, la caractéristique de conduction présente deux pics rapprochés. On met ainsi en évidence expérimentalement le rapprochement des deux premiers niveaux quantiques.

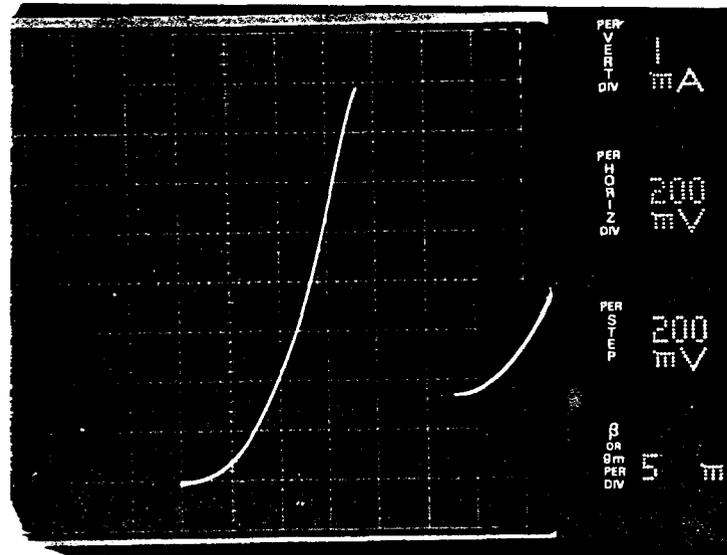


Figure 4.3 : Caractéristique courant-tension expérimentale à 300 K de la structure à puits enterré de $Ga_{.75}In_{.25}As$ (1.5 nm).

La structure de référence est

$Ga_{.4}Al_{.6}As(3nm)/GaAs(4.5 nm)/Ga_{.4}Al_{.6}As(3nm)$.

4.2.3.2 Structure $Al_{.6}Ga_{.4}As/GaAs/In_{.25}Ga_{.75}As$

Dans notre laboratoire, une diode tunnel résonnant à couches contraintes a été fabriquée [6]. Les paramètres structuraux sont les suivants :

- deux barrières $Al_{.6}Ga_{.4}As$ de largeur 3 nm ;
- un puits central d' $In_{.25}Ga_{.75}As$ de 1.5 nm encadré par deux couches de GaAs également de 1.5 nm, la largeur équivalente du puits est 4.5 nm.

Un exemple de caractéristique I-V, pour un composant de section $9 \mu m^2$, mesurée à 300 K est donné sur la figure 4.3. Le rapport pic sur vallée est ici excellent avec des valeurs typiques proches de 4.8 : 1, pour une densité de courant pic de l'ordre de 40 kA. cm^{-2} .

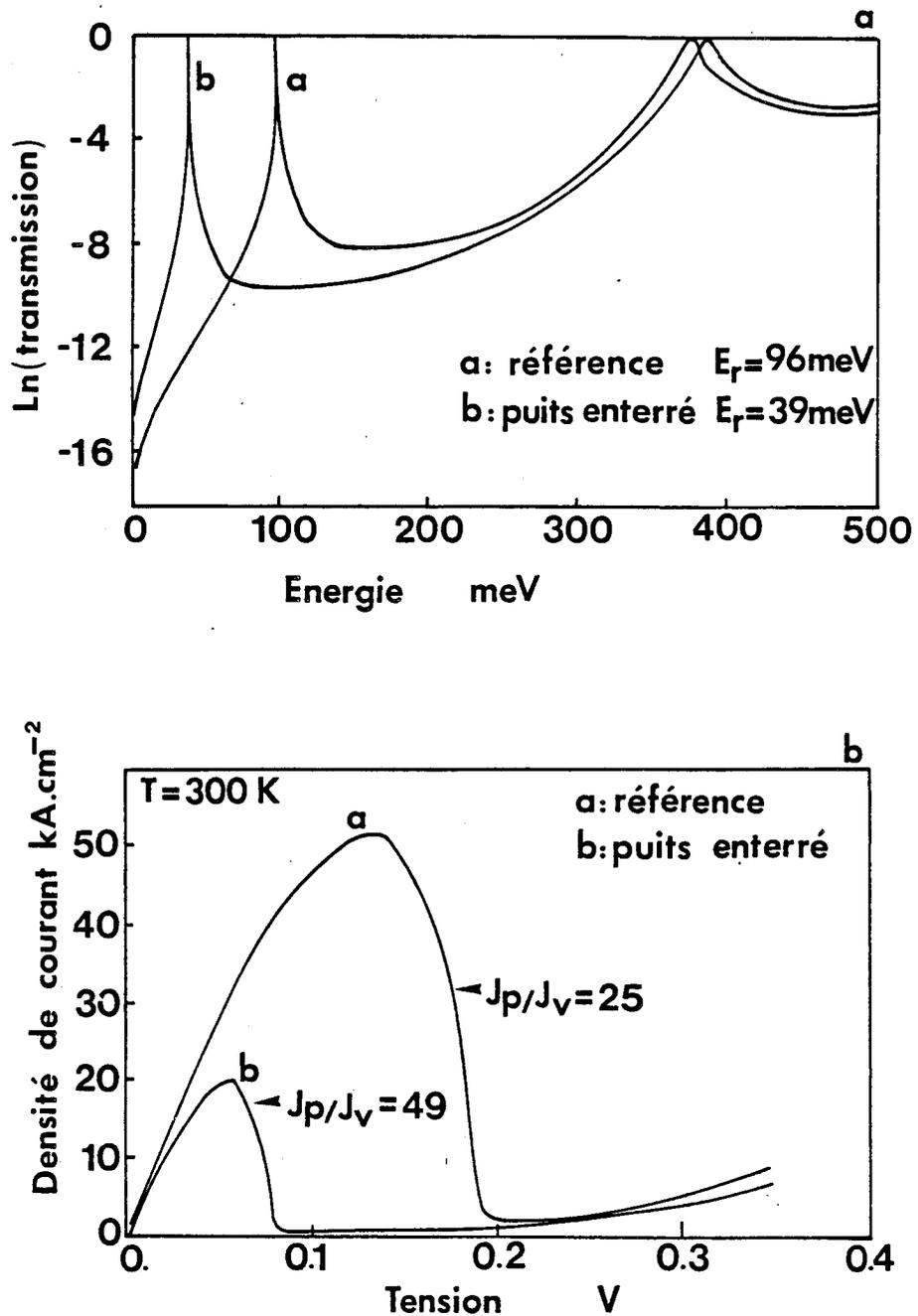


Figure 4.4 : Etude théorique de la structure à puits enterré de $Ga_{0.75}In_{0.25}As$ (1.5 nm). La structure de référence est $Ga_{0.4}Al_{0.6}As$ (3 nm) / $GaAs$ (4.5nm)/ $Ga_{0.4}Al_{0.6}As$ (3nm).
 a) Courbes de transmission en fonction de l'énergie longitudinale à l'équilibre.
 b) Caractéristiques courant-tension à 300 K.

Nous reportons figures 4.4a et 4.4b les résultats de simulation de cette structure. Les paramètres du calcul sont :

- $m_{GaAs}^* = 0.067 m_0$; $m_{AlGaAs}^* = 0.11 m_0$; $m_{GaInAs}^* = 0.058 m_0$;
- $\Delta E_{GaAs/AlGaAs} = 0.4 \text{ eV}$; $\Delta E_{GaAs/GaInAs} = - 0.15 \text{ eV}$.

Pour ces calculs théoriques, nous avons négligé l'influence de la vallée X qui, rappelons-le, correspond au minimum de la bande de conduction pour une concentration d'Aluminium de 60%. Les effets d'espaceurs ainsi que de perte de cohérence ne sont pas pris en compte. A titre de comparaison, les résultats de calculs effectués sur une structure sans puits enterré sont également reportés.

Sur les courbes de transmission de la figure 4.4a, on observe que le premier pic de transmission se translate de 96 meV à 39 meV, tandis que le second pic est constant aux alentours de 400 meV. Si la densité de courant pic, figure 4.5b, passe de 51 kA.cm⁻² à 20 kA.cm⁻² pour la structure à puits enterré, on gagne en théorie un facteur deux sur le rapport pic sur vallée grâce à une diminution notable du courant vallée.

Ces premiers essais d'ingénierie de la fonction d'onde se révèlent donc encourageants. Des travaux similaires sont effectués dans d'autres laboratoires. Citons, à ce propos, les résultats publiés récemment par Riechert et al [7]. Cette équipe de Siemens a montré que, avec un puits homogène de GaInAs, il est aussi possible d'obtenir expérimentalement de très bons contrastes de courant. Ainsi, pour une structure où le puits est constitué de GaInAs avec une concentration d'Indium de 8%, leur échantillon présente un rapport courant pic sur courant vallée de 4.1.

4.3 Tunnel séquentiel dans les puits quantiques multiples

4.3.1 Observation expérimentale

Lors de l'étude des propriétés de conduction et de bruit dans les hétérostructures à puits quantiques multiples GaAs/AlGaAs faiblement couplés, des paliers dans la caractéristique I-V ont été mis en évidence par la mesure du photocourant en fonction de la tension [8]. Le composant étudié est un multipuits quantique $Al_{.37}Ga_{.63}As/GaAs$ avec des largeurs de barrières et de puits de 10 nm contenant 25 périodes.

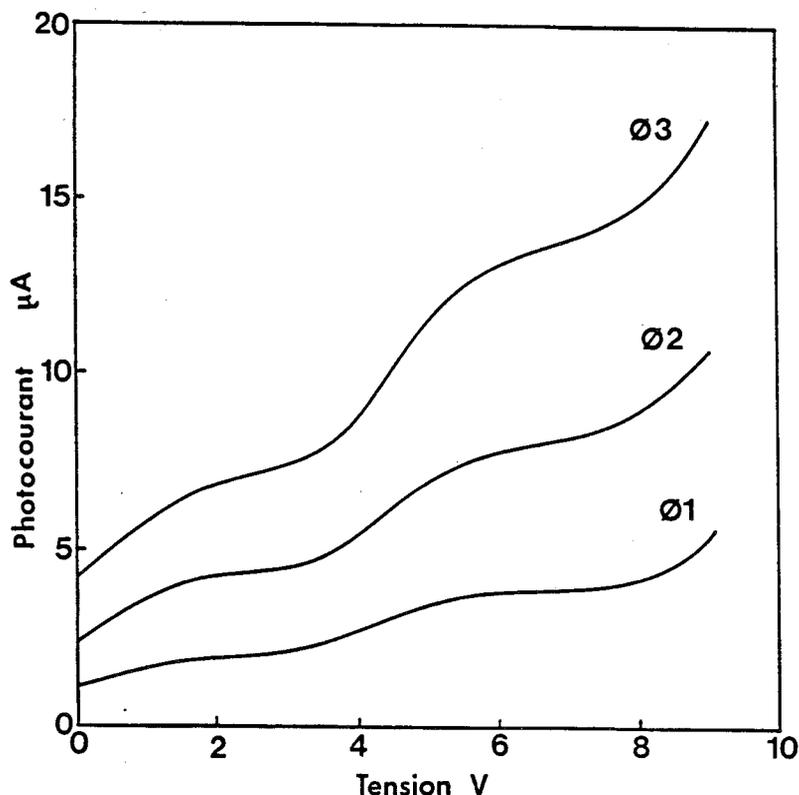


Figure 4.5 : Evolution expérimentale du photocourant en fonction de la polarisation pour différentes puissances d'éclairement d'une structure à multipuits quantiques GaAs/GaAlAs ($L_B = L_W = 10$ nm).

La figure 4.5 représente l'évolution du photocourant, mesuré par détection synchrone, en fonction de la tension à température ambiante. Le faisceau lumineux est focalisé au centre de la diode. Le fait important sur cette figure est la mise en évidence de plusieurs régimes de conduction.

En théorie, deux phénomènes physiques peuvent être invoqués :

- Puisque ces expériences font appel à une excitation optique par laser, une première origine de ces processus peut provenir des variations du coefficient d'absorption optique. De nombreux travaux ont montré en effet que l'absorption d'un rayonnement lumineux par une hétérostructure peut révéler les états quantifiés. Les phénomènes mis en jeu sont complexes et sont plus clairement mis en évidence à basse température dans la mesure où les transitions font intervenir les excitons. Il ne semble pas que ce soient ces effets que nous observons ici. Outre la température très élevée, l'éclairement par laser se fait à des énergies supérieures à la hauteur des barrières ; l'hétérostructure apparaît alors, d'un

point de vue optique, comme un matériau homogène possédant des caractéristiques d'absorption proches de celles du GaAs.

- En revanche, si l'on se place au niveau des propriétés de transport, des effets de tunnel séquentiel entre puits adjacents peuvent conduire à de tels paliers. Ainsi Capasso et al [9] ont mis en évidence de tels effets sur des structures AlInAs/GaInAs, qui se traduisent à très basse température par des effets de résistance différentielle négative. D'un point de vue théorique, ces phénomènes ont été prédits dès 1971 par Kazarinov et Suris [10].

4.3.2 Modélisation

4.3.2.1 Formalisme de la triple barrière

En préambule il nous faut souligner que, compte tenu de la largeur des barrières (10 nm), les puits quantiques sont faiblement couplés, même à l'équilibre. Les niveaux quantiques sont bien définis car les fonctions d'onde sont localisées. Sous l'application d'une tension, il est possible de mettre en regard des niveaux d'énergie d'indice consécutif, comme le montre la figure 4.6. Cet alignement se traduit par une forte augmentation des probabilités de passage à travers les barrières et donc des valeurs de courant.

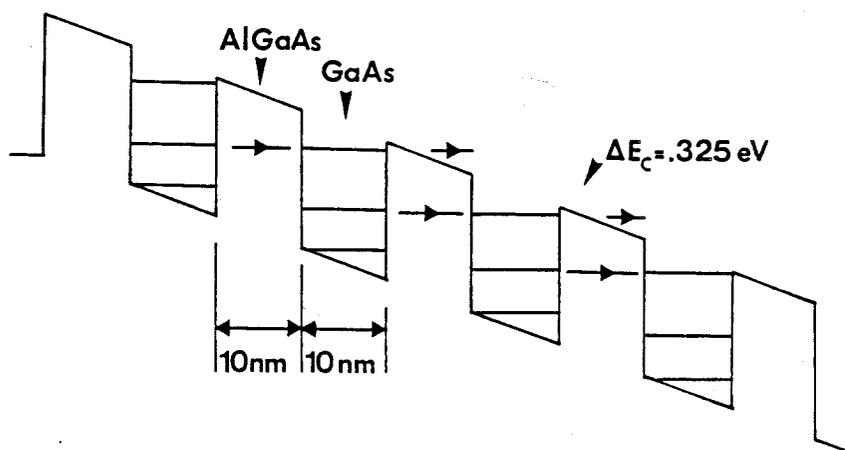


Figure 4.6 : Représentation schématique du profil de potentiel d'une structure à multipuits quantiques pour un champ électrique supposé uniforme.

En pratique, si l'on suppose une parfaite homogénéité du champ électrique, ce processus est limité à deux puits adjacents. Il est donc raisonnable de limiter la description théorique de ces phénomènes à une structure double puits.

Comparativement aux cas étudiés dans les paragraphes précédents, la structure triple barrière que nous considérons ici présente une opacité telle que les transmissions sont extrêmement sélectives. Par conséquent le calcul du courant se révèle très délicat. Par ailleurs, au plan physique, il semble utopique de stipuler une cohérence totale du transport pour des structures où les temps de résidence dans les puits sont importants. Nous effectuons donc les simulations avec un facteur d'incohérence $\gamma = 0.8$, qui correspond à la valeur que nous avons utilisée dans le premier chapitre. Les extensions numériques relatives au transport partiellement cohérent dans la triple barrière sont reportées dans l'annexe E.

4.3.2.2 Caractéristiques courant-tension

Les caractéristiques courant-tension d'une structure double puits sont tracées pour différentes températures sur la figure 4.7.

Les paramètres du calcul sont :

- largeur de barrière $L_B = 10$ nm ;
- largeur de puits $L_W = 10$ nm ;
- discontinuité de bande de conduction $\Delta E_C = 325$ meV pour une concentration d'Aluminium dans les barrières supposée de 40% ;
- masse effective de puits $0.067 m_0$, masse effective de barrière $0.1 m_0$;
- degré d'incohérence $\gamma = 0.8$ correspondant à un temps d'interaction de l'ordre de 10^{-13} s ;
- l'injection des porteurs est distribuée en énergie en supposant un niveau de Fermi de 50 meV.

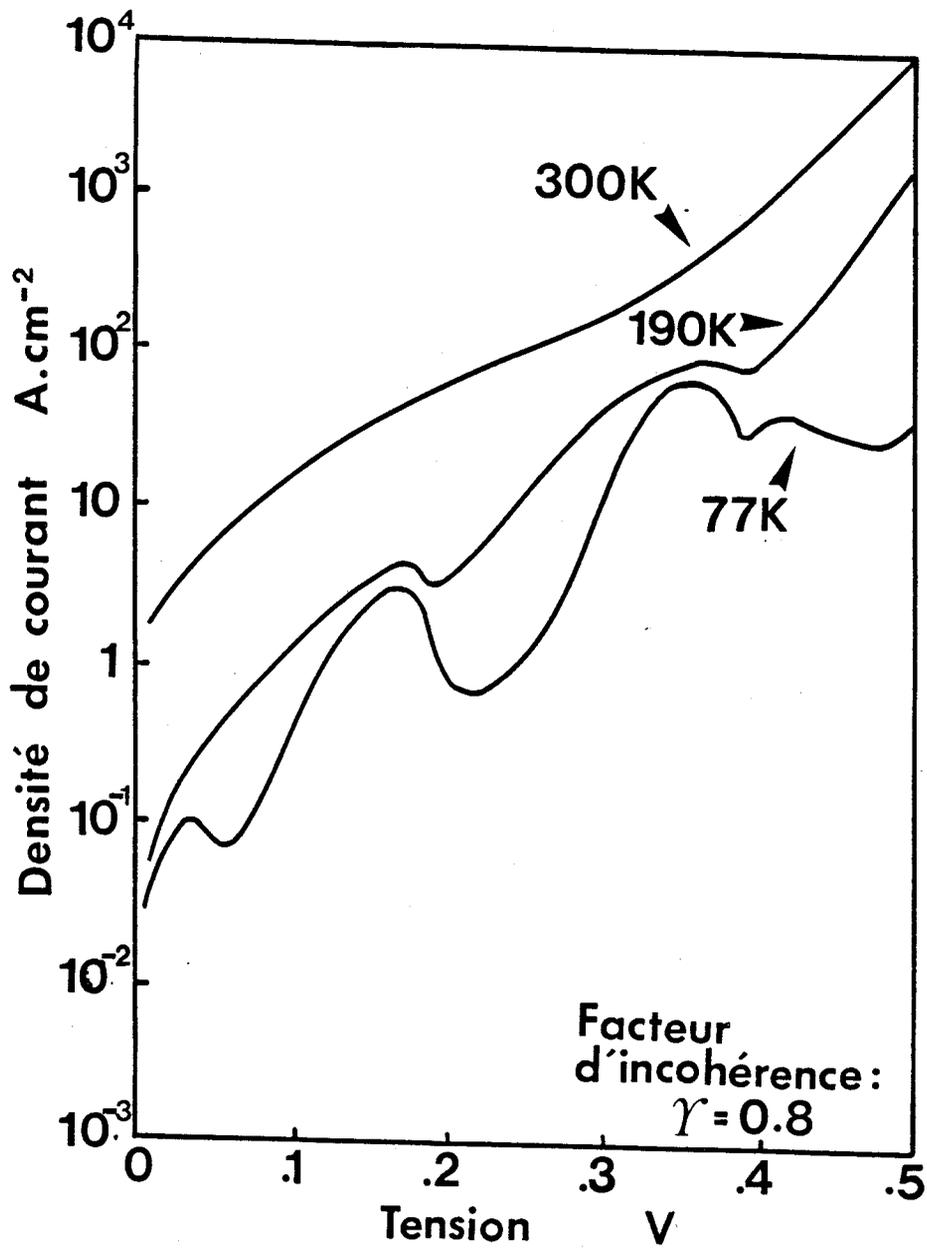


Figure 4.7 : Caractéristiques courant-tension d'une structure triple barrière GaAs/GaAlAs ($L_B = L_W = 10$ nm) pour différentes températures. Un facteur d'incohérence $\gamma = 0.8$ est inclus dans les calculs.

On note, sur cette figure, des zones de résistance différentielle négative à 77 K. Ces régimes surviennent pour des tensions de polarisation de 0.06 V, 0.20 V, 0.38 V et 0.44 V si l'on prend comme référence les minima de courant. Au fur et à mesure que la température augmente, ces accidents sont moins marqués et prennent l'allure de paliers comparables à ceux rencontrés expérimentalement.

Pour illustrer le phénomène de tunnel séquentiel à l'origine de ces accidents de conductance, nous avons reporté, sur la figure 4.8, la commande des niveaux résonnants en fonction de la chute de tension sur la triple barrière jusqu'à une polarisation de 0.5V.

On constate que, à l'équilibre, un puits contient trois niveaux quantiques. Un calcul de la transmission montre en fait que chaque niveau d'indice i se traduit, sur les probabilités de passage par effet tunnel, par deux pics d'autant plus écartés que le couplage entre les puits augmente. Ceci a été montré dans l'article original de Tsu et Esaki [11]. Dans le cas présent, pour le premier niveau, l'écart entre ces deux pics est de l'ordre de $4 \cdot 10^{-6}$ eV pour une valeur moyenne proche de 32 meV.

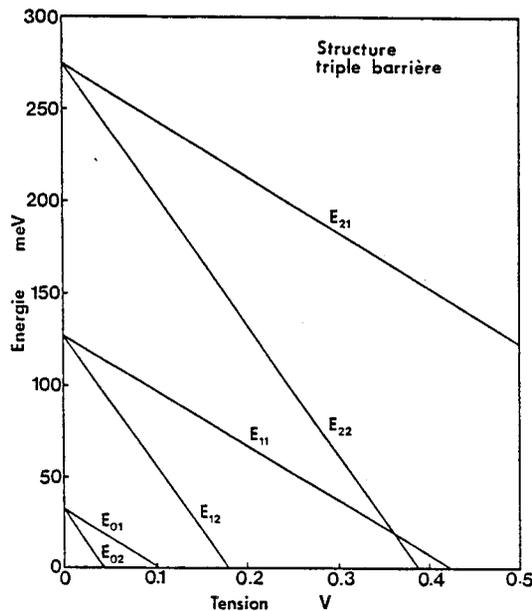


Figure 4.8 : Evolution des niveaux d'énergie résonnants en fonction de la polarisation pour une structure triple barrière GaAs / GaAlAs ($L_B = L_W = 10$ nm).

En polarisation et en supposant un champ électrique parfaitement uniforme, les niveaux s'abaissent linéairement avec une pente proportionnelle à la chute de tension locale de chacun des puits. Sur la figure 2.8, les niveaux sont repérés par E_{ij} ; $i = 0$ à 2 correspond à l'indice du niveau quantique et $j = 1$ à 2 correspond au numéro du puits.

La différence de commande des niveaux quantiques entre puits adjacents permet, par exemple, l'alignement entre le niveau d'ordre 2 du premier puits et le niveau d'ordre 3 du second. De plus, chaque niveau devient inaccessible électriquement quand il se situe en dessous de la référence d'énergie prise dans l'émetteur.

A l'aide de la représentation de la figure 4.8, il nous est maintenant possible d'interpréter les résultats des simulations de calcul du courant :

- les deux premières chutes de courant pour les tensions de 0.08 V et 0.2 V résultent du passage sous la bande de conduction respectivement des niveaux fondamentaux E_{0j} ($j = 1, 2$) et du niveau E_{12} ;
- l'accident situé vers 0.36 V correspond à l'alignement de E_{11} et E_{22} ; compte tenu que ce croisement se produit à une énergie proche de la bande de conduction de l'émetteur, l'effet de coupure de la conduction par le passage sous le niveau de référence intervient peu après.

4.3.3 Remarques

Le modèle de la triple barrière donne une image purement électrique des phénomènes mis en jeu. Son application directe à l'interprétation des résultats de photocourant pêche sur trois points :

- La différence majeure réside essentiellement dans la façon dont l'hétérostructure est alimentée en porteurs. Les mesures de photocourant ont été effectuées à des énergies telles que ce courant domine celui de saturation. Ceci implique que, théoriquement, il soit possible de peupler les niveaux excités directement.
- Il est fortement improbable que le champ électrique reste uniforme sur une structure de cette longueur (pour la structure expérimentale, la zone active est de l'ordre de 500 nm). Des inhomogénéités dans le champ électrique peuvent aussi provoquer d'autres conditions d'alignement entre les niveaux quantiques des différents puits.

- Enfin remarquons - et ceci est valable quelle que soit la manière dont on initialise la conduction - que les phénomènes de relaxation des états excités vers les niveaux fondamentaux sont ici négligés. On peut s'attendre à ce que ces effets de relaxation puissent, par exemple, permettre le remplissage d'un niveau inaccessible pour des porteurs venant de l'émetteur.

4.4 Les superréseaux de dimension finie

4.4.1 Cadre de l'étude

Les superréseaux ont fait l'objet de très nombreux travaux [12] [13] [14] afin de comprendre le transport dans ces structures. Comparé aux multipuits quantiques, le couplage entre les différents puits est ici important. Cette interdépendance entre les puits provoque une délocalisation de la probabilité de présence sur l'ensemble de la structure. La quantification de l'énergie, au lieu d'apparaître sous la forme de niveaux discrets, présente des minibandes. Les phénomènes de transport sont très dépendants de la dimension du superréseau et des conditions d'expérimentation. A un transport purement cohérent, attendu pour des longueurs faibles et à basse température, on peut substituer un transport très diffusif pour des structures étendues à température ambiante.

La maîtrise dans la technique de croissance de ces structures multiples a permis la conception de nouveaux composants.

Une des difficultés dans l'utilisation des superréseaux est la destruction de la minibande sous polarisation. Les premières idées ont pallié ce handicap en insérant l'hétérostructure dans des zones très fortement dopées, comme la base d'un transistor bipolaire par exemple [15].

En contact d'émetteur ou de collecteur ces superréseaux, séparés par une barrière plus large, ont été utilisés également pour créer deux fenêtres de transmission que l'on désaligne en appliquant une tension de polarisation. Cette étude a permis de mettre en évidence un effet de résistance différentielle négative, mis à profit pour obtenir des oscillations à température ambiante [16].

Dans la réalisation d'un transistor à puits quantique proposé par Reed et al [17],

les superréseaux d'émetteur et de collecteur servent à augmenter artificiellement la valeur de bande interdite des matériaux de contact par rapport au matériau de base.

Si les structures précédentes ont des motifs élémentaires identiques, d'autres auteurs ont proposé de moduler les largeurs de puits et de barrières. A titre d'exemple citons les composants, intégrant des modulations de largeur de puits pour lesquels on recherche un alignement des niveaux fondamentaux de chaque puits pour une tension de polarisation bien précise [18].

Compte tenu de l'étendue du sujet, notre apport va concerner trois aspects :

- nous préciserons tout d'abord les conditions d'existence d'une minibande par l'analyse des termes de transmission et des fonctions d'onde associées et nous verrons que la fenêtre de transmission peut présenter des ondulations importantes ;
- les effets de localisation par le champ électrique seront ensuite abordés ;
- enfin nous proposerons une structure pour laquelle une fenêtre de transmission plate est obtenue par modulation des largeurs de barrières sur la base d'un superréseau classique.

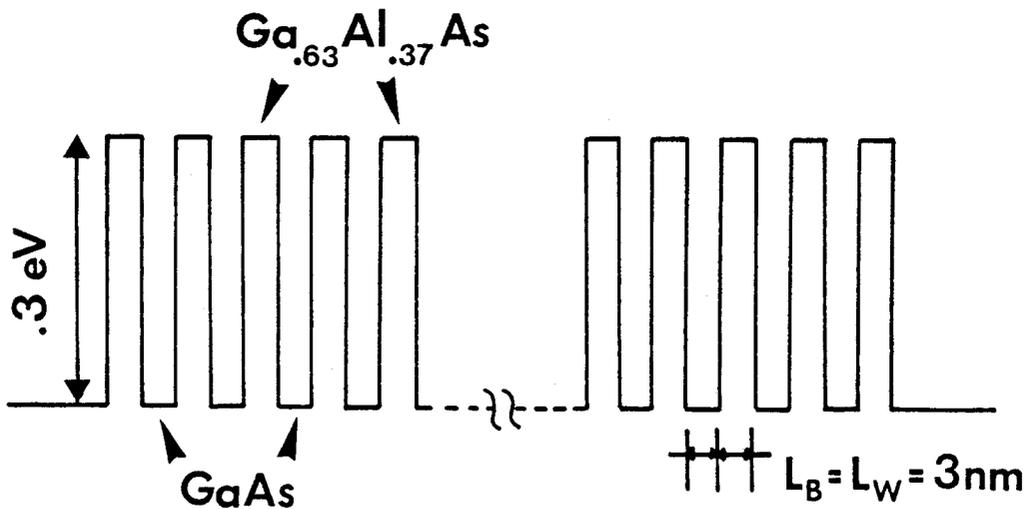


Figure 4.9 : Représentation schématique du profil de potentiel d'un superréseau symétrique ($L_B = L_W$).

4.4.2 Les superréseaux finis symétriques

4.4.2.1 Conditions d'existence d'une minibande

L'exemple type d'un superréseau symétrique ($L_B = L_W$) que nous allons étudier est représenté schématiquement figure 4.9.

Cette structure présente des largeurs de barrières et de puits égales à 3 nm. Nous supposons une concentration d'Aluminium de 37%, soit une discontinuité de bande de conduction de 300 meV. La masse effective dans le GaAs est égale à $0.067 m_0$; nous prenons $0.1 m_0$ dans les barrières.

Nous calculons les spectres de transmission pour des structures intégrant 10, 15, 20, voire 30 périodes, par la méthode numérique précédemment utilisée ; le transport est ici supposé purement cohérent. La figure 4.10 illustre le cas d'un superréseau 20 barrières.

On constate l'existence d'une fenêtre de transmission de largeur $\Delta = 47.7$ meV pointée entre les maxima de transmission extrêmes. Par un calcul analytique de la minibande d'un superréseau infini, dans l'approximation de la fonction enveloppe proposée par Bastard [19], on trouve un écart de l'ordre de 15% (le calcul donne 40 meV) [20]. En fait, on constate qu'il est nécessaire de simuler un nombre de périodes supérieur à dix motifs pour assurer des valeurs de largeurs de fenêtre de transmission comparables entre une hétérostructure infinie et un superréseau fini.

Corrélativement, on accentue les contrastes de transmission au fur et à mesure que l'on augmente le nombre de périodes. Cet effet est tout à fait comparable à l'augmentation de la réjection pour les filtres à résonateurs couplés à grand nombre de cellules.

De plus, on observe que le fait de tronquer la structure se traduit par des ondulations ("ripple") qui peuvent être importantes. Dans notre cas, le niveau minimal de transmission, pris au centre de la minibande, n'est plus que de 5% comparé à la valeur maximale unitaire. Ce "ripple" n'est pas modifié si l'on double ou triple le nombre de périodes. Au vu de ces phénomènes d'ondulation, il nous semble plus approprié de

parler en termes de "fenêtre de transmission" qu'en termes de "minibande".

Il faut toutefois tempérer cette conclusion dans la mesure où les perturbations, de type phonons ou désordres d'interface, tendent à élargir les pics de transmission, comme nous l'avons vu dans le cas d'une simple résonance. Cet élargissement collisionnel viendrait augmenter sensiblement la transparence globale de la structure.

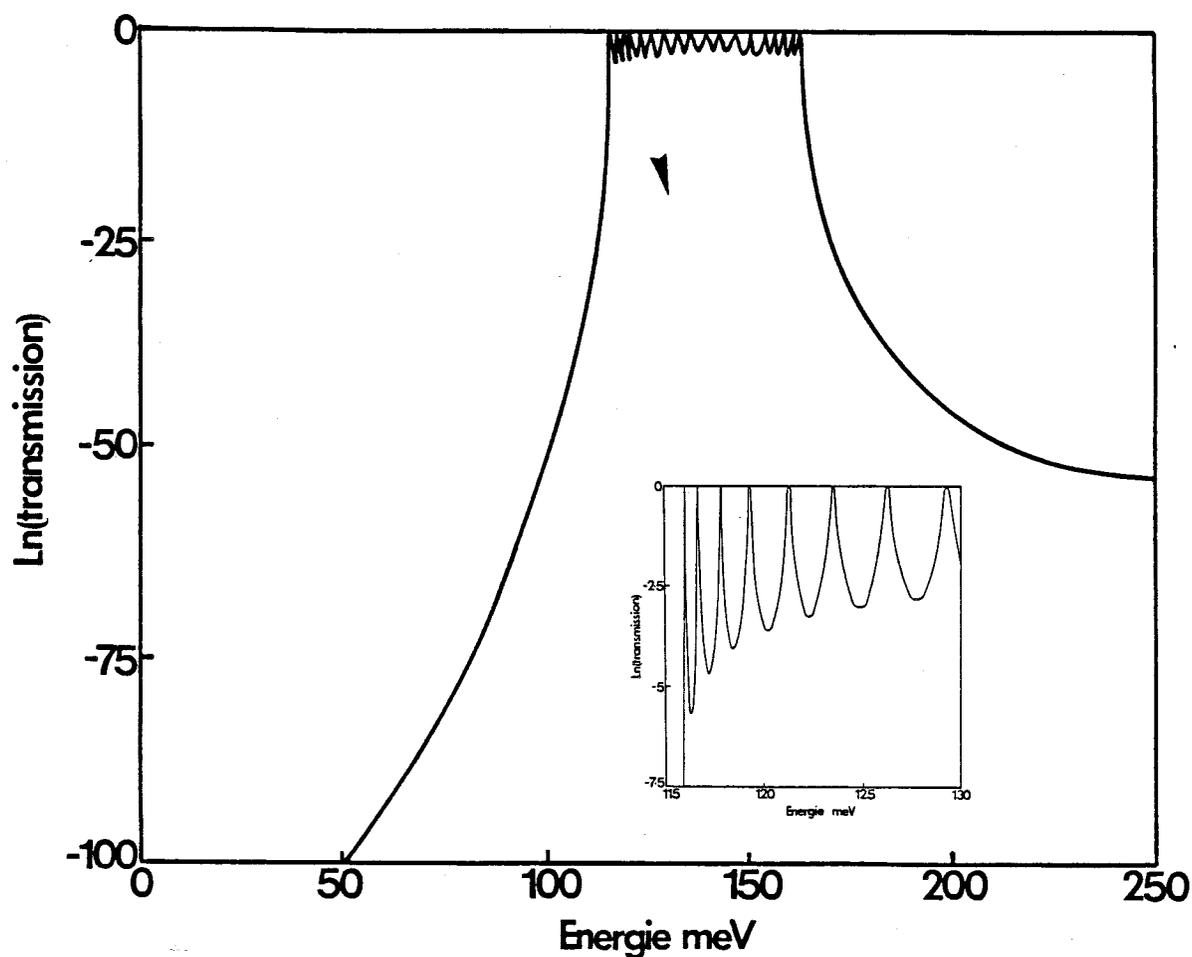


Figure 4.10 : Courbe de transmission en fonction de l'énergie longitudinale à l'équilibre d'un superréseau 20 barrières $GaAs/Ga_{0.63}Al_{0.37}As$ ($L_B = L_W = 3$ nm).

Le nombre de pics est égal au nombre de puits présents dans l'hétérostructure. Ils sont relativement bien répartis dans la minibande ; l'écart entre deux pics adjacents dépend de la largeur de la minibande. Dans le cas présent, l'écart moyen vaut 2.5 meV ; il en résulte que cet effet sera d'autant plus important que la minibande, qui ne dépend que du couplage entre les puits, sera large et que la structure comportera peu de motifs barrière-puits. C'est surtout cette dernière condition que l'on cherche à satisfaire pour l'étude du transport, dans la mesure où la cohérence des porteurs peut être préservée.

Avant de voir comment nous pouvons supprimer ces ondulations dans la transmission, nous allons nous intéresser aux effets de localisation par le champ électrique.

4.4.2.2 Localisation induite par le champ électrique

Pour préciser ces effets de localisation, nous allons nous intéresser aux probabilités de présence. La figure 4.11 donne le module au carré des fonctions d'ondes correspondant aux quatre premiers pics de transmission de la figure précédente. Ces deux figures illustrent parfaitement les phénomènes d'interférences constructives et destructives qui interviennent entre les deux transitions continuum-superréseau. Ainsi, on constate que la fonction d'onde élémentaire de chaque puits se superpose à une fonction enveloppe dont la longueur d'onde se compare à la largeur effective de l'hétérostructure. Il en résulte que, même à l'équilibre, il existe des points d'accumulation pour la densité de probabilité de présence électronique au sein du superréseau. Chaque pic, qui correspond à un mode d'interférence constructive, se traduit par une répartition différente des porteurs dans le composant.

La figure 4.12 donne les variations spatiales de la fonction d'onde pour le dixième pic. Pour celui-ci, la probabilité de présence est équirépartie à l'équilibre. Si à présent on impose un champ électrique uniforme de 23 kV.cm^{-1} , on peut localiser la fonction d'onde autour du dixième puits. Il est intéressant de chiffrer cette extension spatiale en fonction du champ électrique. Ces problèmes de localisation ont été reportés dans de nombreuses publications. Nous reprenons ici l'approche tirée de l'article de Beltram et Capasso [21] qui montre que, pour un champ électrique d'intensité F , la probabilité de présence est significative sur une région de largeur Δ/qF avec Δ la largeur de la fenêtre de transmission. Avec nos valeurs numériques ($\Delta = 48 \text{ meV}$, $F = 23 \text{ kV.cm}^{-1}$), nous obtenons 21 nm, soit une longueur englobant 3 à 4 périodes du superréseau.

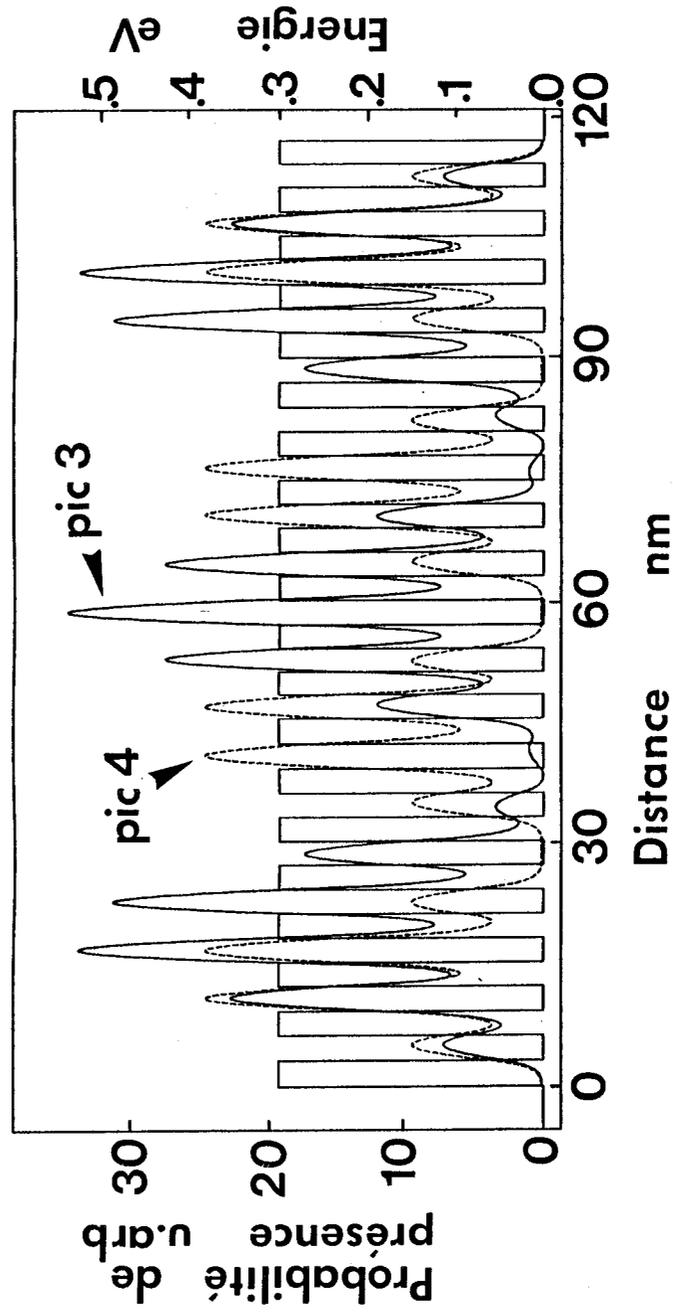
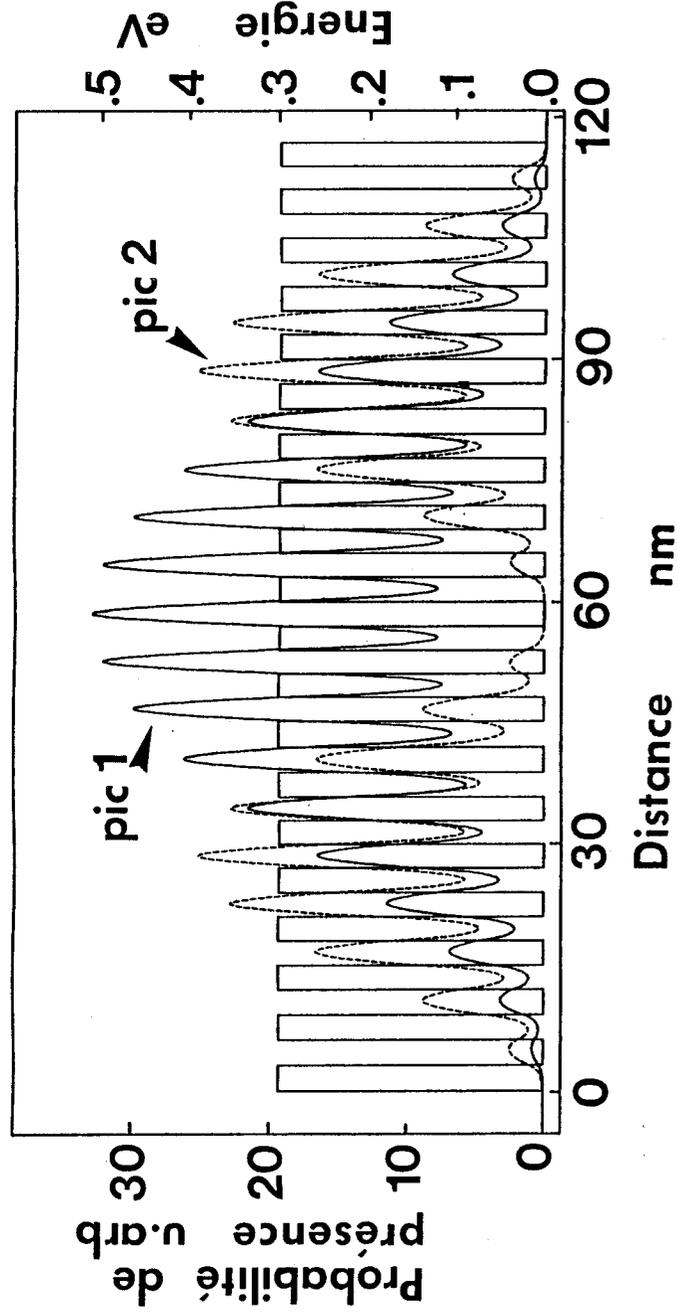


Figure 4.11 : Probabilités de présence électronique relatives aux quatre premiers pics de transmission d'un superréseau 20 barrières $GaAs/Ga_{0.63}Al_{0.37}As$ ($L_B = L_W = 3$ nm) à l'équilibre.

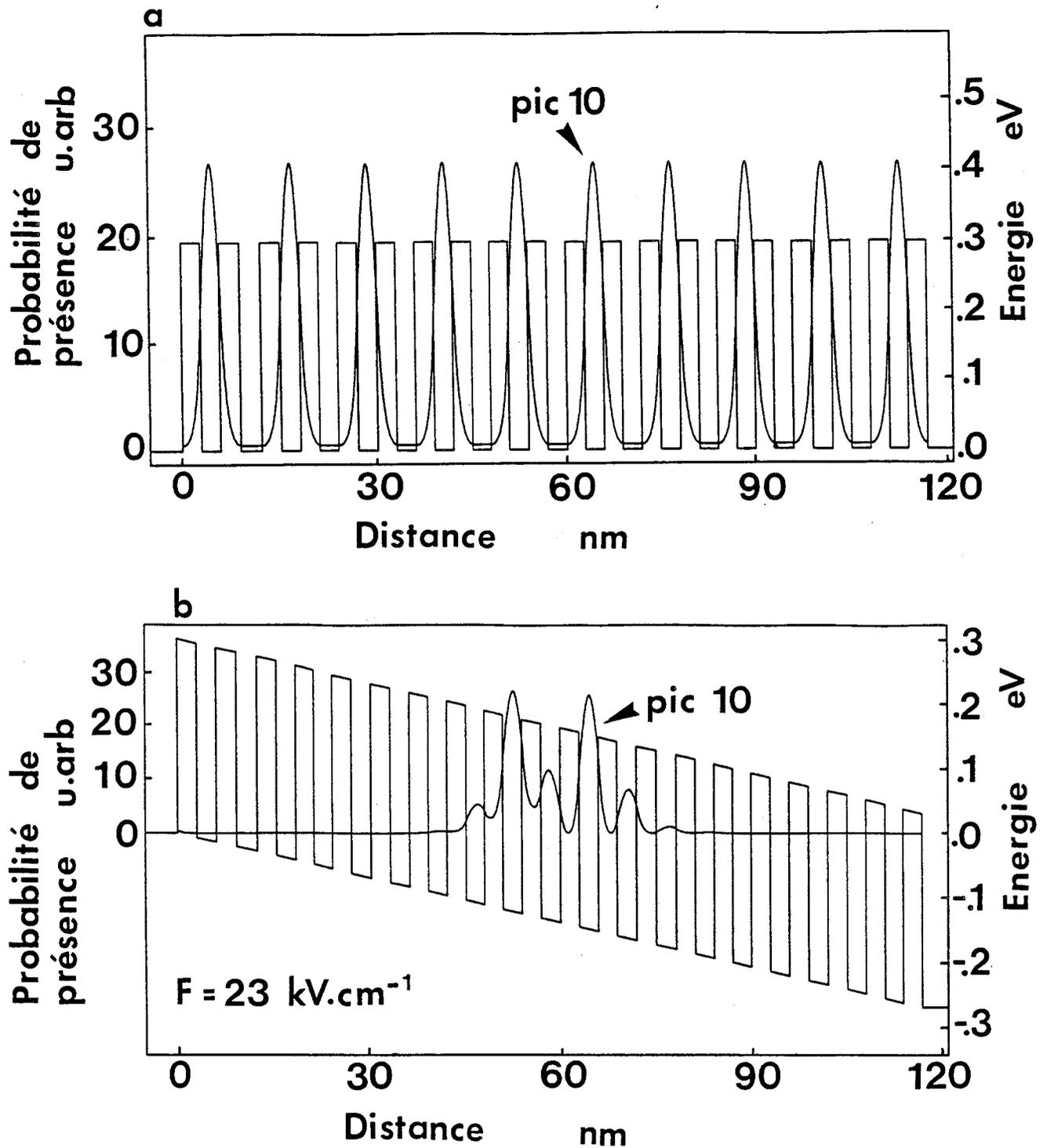


Figure 4.12 : Probabilité de présence électronique relative au dixième pic de transmission d'un superréseau 20 barrières $GaAs/Ga_{.63}Al_{.37}As$ ($L_B = L_W = 3 \text{ nm}$)

a) à l'équilibre

b) sous l'action d'un champ électrique uniforme de 23 kV cm^{-1} .

La condition de localisation stricte, qui correspond à la transition entre une minibande et une échelle de Wannier-Stark, est obtenue pour un champ électrique F tel que $F > \Delta / qD$ avec D la période spatiale de l'hétérostructure. Dans notre cas, ce régime apparaît pour $F > 80 \text{ kV.cm}^{-1}$. Pratiquement ceci correspondrait à une tension appliquée de l'ordre de 1 V.

4.4.3 Structure à fenêtre de transmission "plate"

4.4.3.1 Principe

Nous venons de voir que le fait que la fenêtre de transmission présente des pics multiples provient de phénomènes d'interférences constructives et destructives aux limites du superréseau fini. En d'autres termes, cela a pour origine la rupture entre un milieu à modulation de matériau et un milieu homogène.

Si l'on accroît cette désadaptation en insérant par exemple des barrières d'AlAs aux deux extrémités, les effets d'ondulation sont amplifiés très fortement. Ainsi, pour une structure aux dimensions réduites (5 motifs), on obtient un "ripple" maximum de -20 sur le logarithme népérien de la transmission. Toute recherche visant à supprimer ce "ripple" doit donc minimiser la désadaptation entre les zones de contact et le superréseau.

Une solution à ce problème est proposée sur la figure 4.13. Cette structure est conçue en fonction des critères suivants :

- il faut disposer d'une structure dont la longueur est au maximum de quelques dizaines de nanomètres ;
- nous devons respecter une symétrie dans l'agencement des motifs par rapport à un plan central dans la mesure où cette condition est nécessaire à l'existence d'une résonance unitaire à l'équilibre ;
- nous voulons travailler avec une seule minibande, ce qui implique des puits de largeur faible fortement couplés.

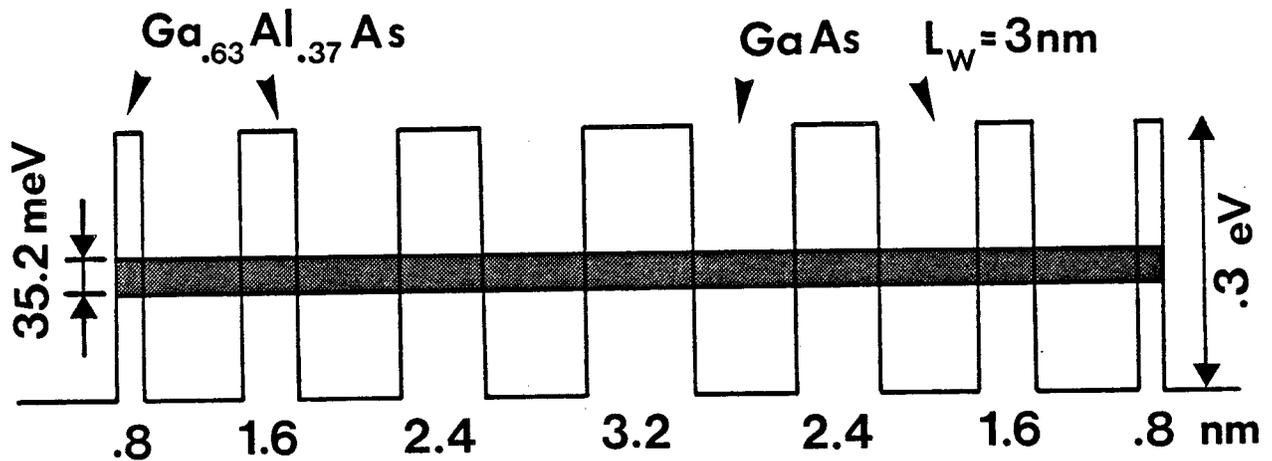


Figure 4.13 : Représentation schématique du profil de potentiel d'une structure à fenêtre de transmission "plate" $GaAs/Ga_{.63}Al_{.37}As$ à l'équilibre.

Pour diminuer les réflexions sur les bords de la structure, nous diminuons progressivement la largeur de barrière suivant une suite arithmétique de raison 0.8 nm. Globalement, les caractéristiques sont les suivantes : 6 puits de 3 nm, 7 barrières respectivement de 0.8 nm, 1.6 nm, 2.4 nm, 3.2 nm, 2.4 nm, 1.6 nm, 0.8 nm, soit une longueur totale de 30.8 nm.

Les paramètres des barrières ont été calculés pour correspondre approximativement à des multiples d'épaisseur de monocouches.

4.4.3.2 Etude théorique

L'étude théorique que nous allons mener suppose un transport purement cohérent.

SPECTRES DE TRANSMISSION : les courbes de transmission à l'équilibre et sous polarisation sont représentées en fonction de l'énergie longitudinale sur la figure 4.14.

- A l'équilibre, on peut noter l'existence d'une minibande sans ondulations. Si l'on calcule son extension en énergie (en supposant que les limites sont obtenues pour des transmissions égales à 0.5), on trouve 35.2 meV entre 121.2 meV et 156.4 meV. De part et d'autre les transmissions chutent rapidement. Les valeurs sont de

l'ordre de $5 \cdot 10^{-4}$ pour les énergies élevées. La seconde minibande est rejetée à des énergies supérieures aux hauteurs de barrières. La fenêtre de transmission résonnante est donc unique.

Si l'on trace la probabilité de présence pour une énergie quelconque située dans la minibande, on observe toujours la même allure. Ceci est illustré figure 4.15a. La fonction d'onde est bien répartie dans chacun des six puits et prend des valeurs minimales quasiment constantes au centre des barrières. C'est une condition nécessaire à l'obtention d'une vraie minibande. On voit ainsi qu'un contrôle de la longueur de décroissance de la fonction d'onde dans les barrières permet de modifier sensiblement l'allure de la courbe de transmission. Divers essais, en modifiant quelque peu la largeur d'une des barrières, ont montré une réapparition systématique des ondulations dès que l'on s'écarte de la configuration étudiée ici.

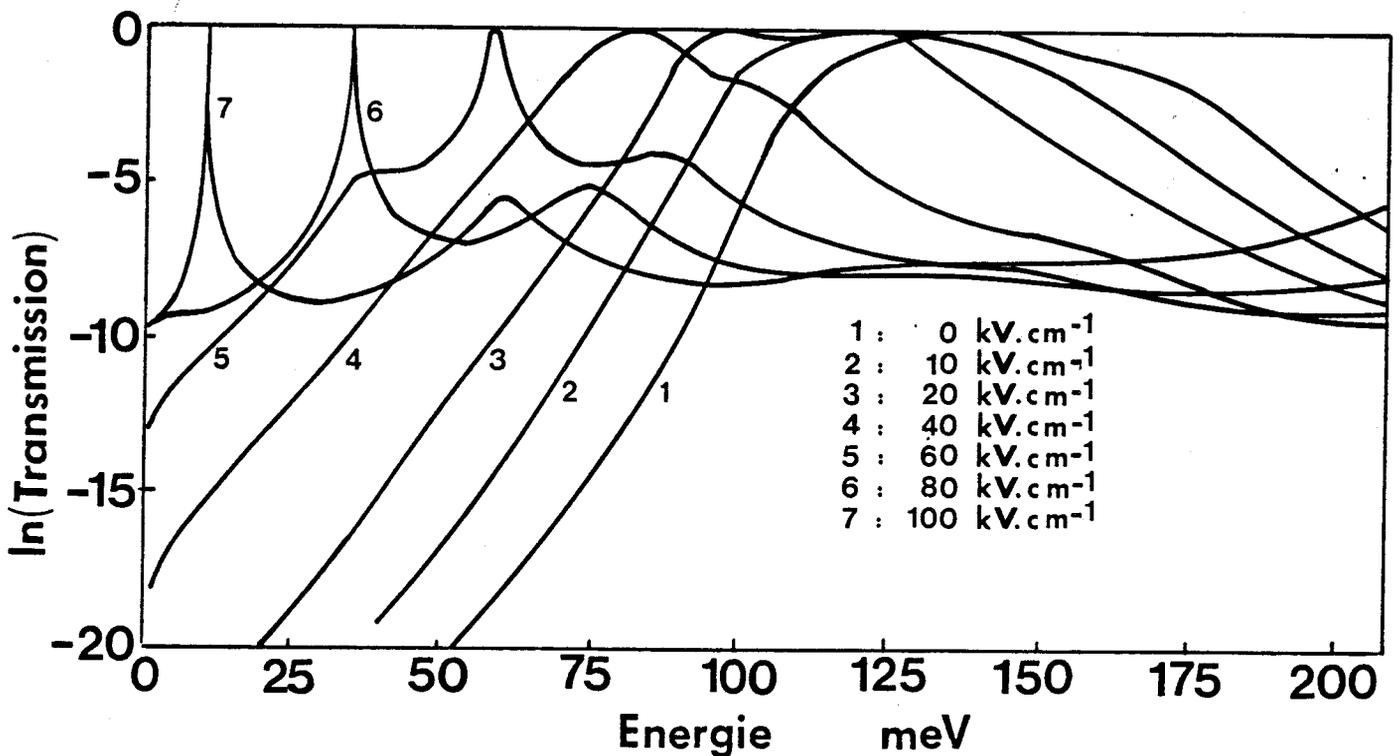


Figure 4.14 : Courbes de transmission à l'équilibre et en polarisation en fonction de l'énergie longitudinale d'une structure à fenêtre de transmission "plate" $GaAs/Ga_{.63}Al_{.37}As$

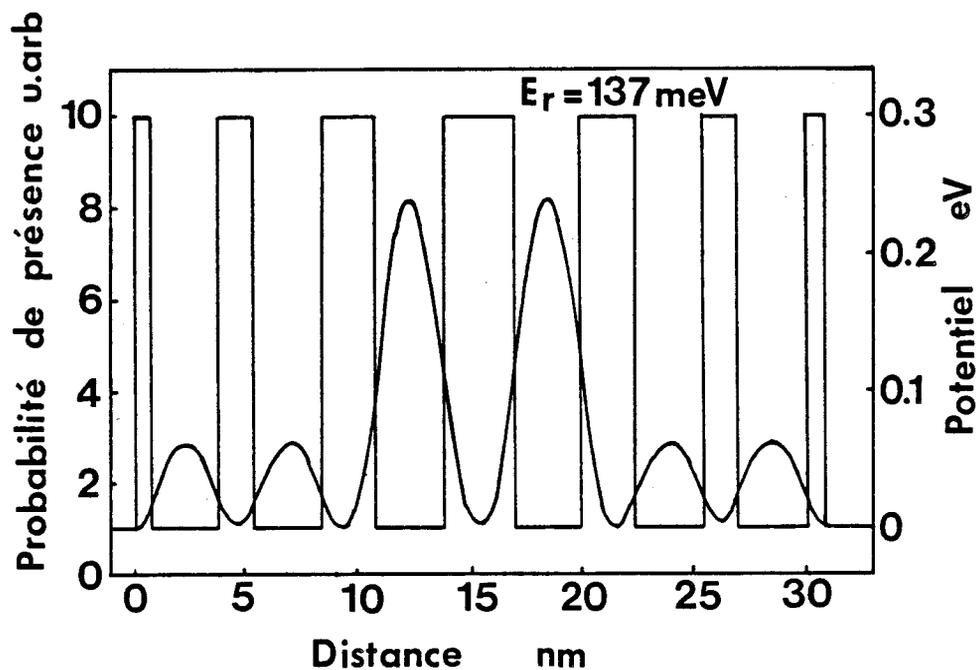


Figure 4.15a : Probabilité de présence à l'énergie résonnante pour une structure à fenêtre de transmission "plate" $GaAs/Ga_{.63}Al_{.37}As$ à l'équilibre.

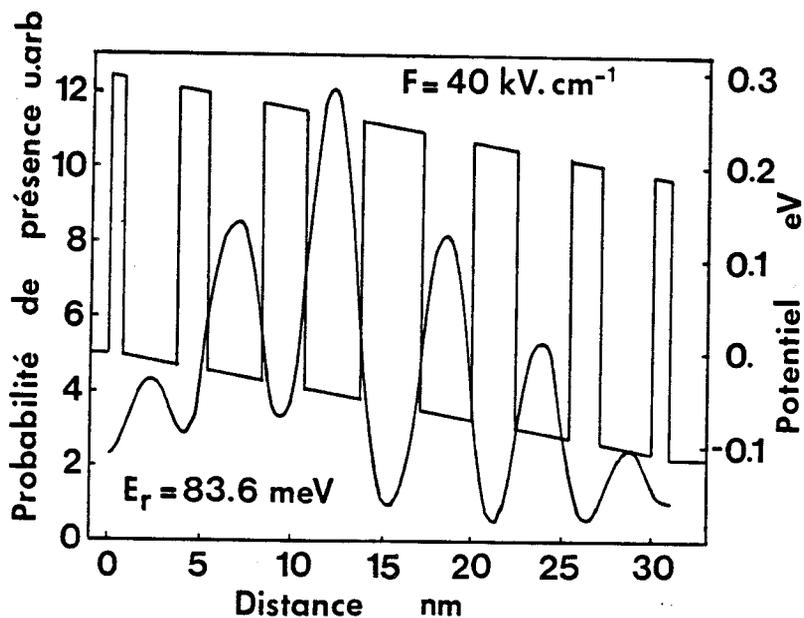


Figure 4.15b : Probabilité de présence à l'énergie résonnante pour une structure à fenêtre de transmission "plate" $GaAs/Ga_{.63}Al_{.37}As$ sous l'action d'un champ électrique uniforme de $40 \text{ kV} \cdot \text{cm}^{-1}$.

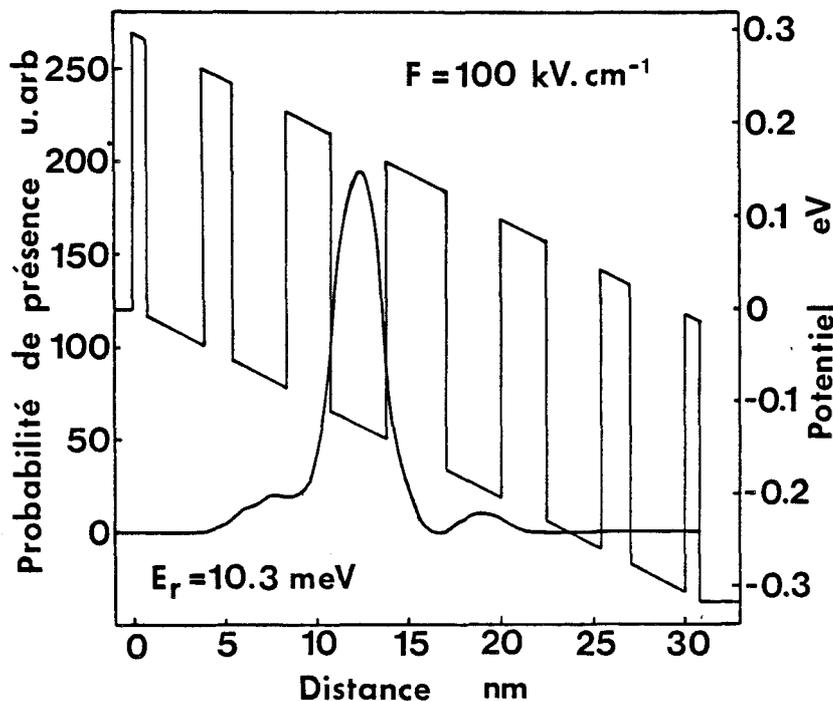


Figure 4.15c : Probabilité de présence à l'énergie résonnante pour une structure à fenêtre de transmission "plate" *GaAs/Ga_{0.63}Al_{0.37}As* sous l'action d'un champ électrique uniforme de 100 kV cm^{-1} .

- En polarisation, jusqu'à des valeurs de champs électriques de l'ordre de 40 kV cm^{-1} , la minibande se décale vers les basses énergies puis commence à se dégrader. A titre d'exemple, la largeur n'est plus que de 14.9 meV à 40 kV cm^{-1} . La fonction d'onde est toujours répartie entre les six puits, montrant néanmoins une localisation plus prononcée à gauche de la barrière centrale (figure 4.15b).
- Pour les polarisations supérieures, un pic de transmission se définit de largeur caractéristique 0.17 meV pour un champ électrique de 100 kV cm^{-1} . La courbe s'apparente alors à celle d'une diode double barrière. Ceci est confirmé par la fonction d'onde, représentée figure 4.15c, où l'on observe qu'elle est complètement localisée dans le troisième puits.

CARACTERISTIQUES COURANT-TENSION : au vu des remarques faites sur les courbes de transmission, on peut s'attendre à observer deux régimes de conduction différents : le premier est caractéristique de l'existence d'une minibande et le second relatif à des niveaux discrets.

Les caractéristiques courant-tension théoriques à 77 K et à 300 K sont représentées en traits pleins sur les figures 4.16a et 4.16b. On remarque que l'allure des courbes est fortement dépendante de la température. En effet les densités de courant varient d'un facteur 9 entre 300 K et 77 K en ce qui concerne le premier pic. Ceci est uniquement dû à la différence entre les fonctions d'alimentation à ces deux températures. A 300 K, il existe un fort recouvrement entre la queue de distribution des porteurs incidents et la minibande. Le produit $T(E_Z, V_C) \cdot F(E_Z, V_C)$ est alors très important. A 77 K, il faut augmenter la tension pour que les porteurs puissent atteindre les énergies de résonance. Pratiquement on constate que le premier pic de courant se produit pour une polarisation de 0.25 V pour laquelle existe déjà un pic de transmission plutôt qu'une minibande.

A 300 K, on constate que la résistance différentielle négative existe entre 0.1 V et 0.35 V. Cette baisse de la conduction est la conséquence de la destruction de la minibande. Le contraste de courant est ici de 100. A 77 K, la plage d'existence de résistance différentielle négative est plus restreinte, comme pour des structures de type double barrière. Le rapport courant pic sur courant vallée n'est plus que de 53.

Le deuxième pic de résonance, que l'on peut observer aux alentours de 0.55 V dans les deux cas, s'explique par le passage du pic de transmission élargi, que l'on met en évidence sur la courbe de transmission à 60 meV pour un champ électrique de 100 kV cm⁻¹, devant les états peuplés de l'émetteur.

Le calcul présenté ici dans l'hypothèse d'un champ électrique uniforme peut être sujet à caution. En effet les densités de courant sont importantes, notamment à 300 K, de même que la longueur du composant. Dans ce cas, il est probable que les effets de réaction de charge d'espace au sein de la structure ne soient plus négligeables.

Pour voir l'incidence de ces phénomènes sur la conduction, il nous faut rendre compte de la modification du potentiel par la charge libre. Ceci se fait par un calcul auto-cohérent entre les équations de Schrödinger et de Poisson. Nous reprendrons la démarche simplifiée déjà utilisée dans la référence [22].

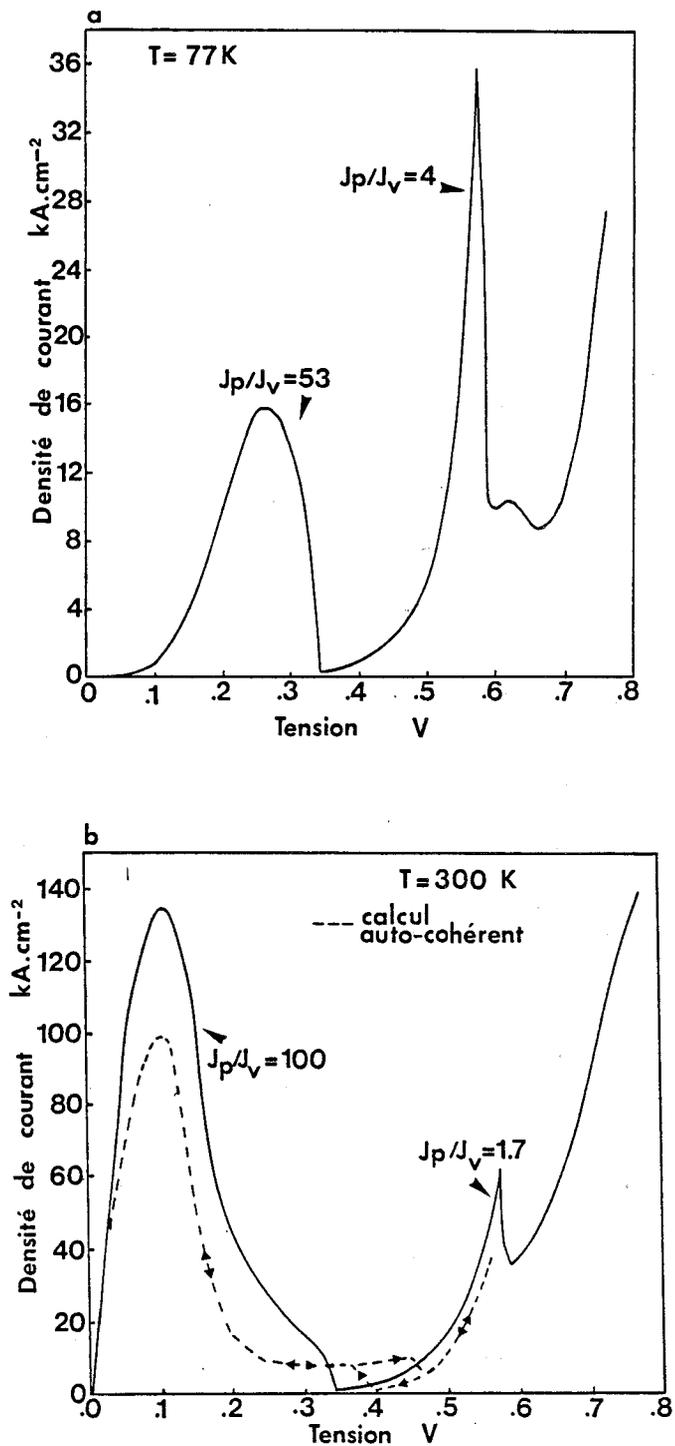


Figure 4.16 : Caractéristiques courant-tension théoriques de la structure à fenêtre de transmission "plate" $GaAs/Ga_{0.63}Al_{0.37}As$
 a) $T = 77 k$
 b) $T = 300 K$, avec calcul auto-cohérent de la densité de courant (----).

La concentration locale des porteurs est donnée par l'équation :

$$n(z) = \frac{qm^*k_b\theta}{2\pi^2\hbar^3} \int_0^\infty \frac{T(E_Z, V_C)F(E_Z, \theta, V_C)}{qv(E_Z, V_C)} |\varphi(z, E_Z)|^2 dE_Z \quad (4.1)$$

où $v(E_Z, V_C)$ est la vitesse balistique 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. Elle s'exprime par :

$$v(E_Z, V_C) = \sqrt{2(E_Z + qV_C)/m^*} \quad (4.2)$$

La concentration $n(z)$ est alors introduite dans l'équation de Poisson avec pour conditions aux limites, $V(z) = 0$ à gauche de la première barrière et $V(z) = V_C$ à droite de la dernière barrière. Ceci restreint l'étude de la réaction de charge d'espace à la zone active.

Ce potentiel, modifié par la charge libre, est alors utilisé dans l'équation de Schrödinger pour calculer la fonction d'onde et le courant. Notons que, si l'on effectue ce calcul en explorant par tensions croissantes ou décroissantes, il est possible de mettre en évidence les effets de bistabilité intrinsèque [23].

Nous reportons, sur la figure 4.16b, le résultat d'un tel calcul pour les deux sens d'exploration de la caractéristique I-V en nous limitant au premier pic de courant, pour des tensions comprises entre 0V et 0.55V.

Les conséquences de la prise en compte de la réaction de charge d'espace sont les suivantes :

- on constate, tout d'abord, une baisse de l'ordre de 25% du courant pic ;
- ensuite, on voit apparaître un plateau de courant suivi d'un léger phénomène de bistabilité en régime de faible conduction.

Il en résulte que le rapport courant pic sur courant vallée n'est plus que de l'ordre de 12. C'est sans doute la conclusion essentielle de l'utilisation d'un calcul auto-cohérent qui ne remet pas en cause les phénomènes de conduction par la minibande.

Il nous semble que ceci soit lié au fait que la structure présente une fonction d'onde également répartie dans les puits. Il n'en est peut être pas de même pour un super-réseau conventionnel où nous avons vu que des effets de localisation, même à l'équilibre, peuvent être importants.

4.4.3.3 Problèmes liés à la réalisation expérimentale

Nous terminerons ce chapitre en discutant des problèmes que l'on rencontre dans la réalisation de structures résonnantes de type superréseaux.

Ils concernent principalement la croissance des composants. En premier lieu, il se révèle relativement difficile de multiplier les interfaces pour obtenir un bon transport perpendiculaire. Nous avons vu auparavant que les fluctuations d'interfaces sont une cause importante de la dégradation des effets de résonance. Si l'on tend à bien maîtriser actuellement l'interface directe GaAs sur GaAlAs, il n'en est pas de même pour l'interface inverse.

Des premiers essais réalisés dans notre laboratoire, sur une structure de 30 nm de longueur totale intégrant des barrières en $Ga_{0.6}Al_{0.4}As$, se sont heurtés à ce genre de problème. Le relevé de la caractéristique I-V à température ambiante montre l'existence d'un accident à tensions élevées (de l'ordre de 0.6V) qu'il n'est pas possible d'accentuer, ni à la température de l'azote liquide, ni à celle de l'hélium liquide.

Cette insensibilité à la température nous semble être la signature d'une perturbation de type extrinsèque.

Une autre difficulté technologique majeure concerne la finesse de définition de la largeur des puits. On peut en effet s'attendre à ce que toute fluctuation de celle-ci concoure à une localisation involontaire de la fonction d'onde.

En dernière remarque, rappelons que l'étude théorique précédente se base sur une approche purement cohérente. Dans l'avenir, l'introduction des mécanismes de diffusion nous semble nécessaire dans le cas de structures longues.

4.5 Conclusion

Dans ce chapitre, essentiellement prospectif, nous avons essayé de montrer qu'un choix judicieux des hétérostructures permet de façonner la fonction d'onde.

Trois exemples ont été envisagés relatifs à l'insertion de perturbations de potentiel dans les puits, au tunnel séquentiel dans les structures multicouches et au superréseau fini à fenêtre de transmission "plate".

Pour ces structures, qui ont toutes pour dénominateur commun l'effet d'augmentation de la transmission suite à l'adaptation des énergies d'émetteur aux niveaux quantiques, nous avons pu voir qu'il est possible de contrôler les caractéristiques courant-tension.

Le déclenchement de la conduction à très basses tensions, l'augmentation des rapports courant pic sur courant vallée et l'extension de la plage d'existence de la résistance différentielle négative sont les retombées pratiques de ces recherches.

Les possibilités d'applications ne s'arrêtent pas là. Il faut, pour s'en convaincre, considérer le cas du puits enterré, qui peut contenir un niveau quantique suffisamment profond pour qu'il y ait accumulation de charges quasi-permanente. C'est alors un tout autre mode de fonctionnement pour ce composant, comparé à celui envisagé dans ce chapitre.

Bibliographie

- [1] R. BOUREGBA, D. LIPPENS, L. PALMATEER, E. BOCKENHOFF, M. BOGEY, J.L. DESTOMBES, A. LECLUSE
Frequency multiplication using resonant tunneling diode with output at submillimetre wavelengths.
Electronic letters, Vol. 26 (1990) p. 1805.
- [2] V. SADAUNE
Tunnel résonnant dans les doubles barrières à pseudoalliage AlAs/GaAs : caractérisations électriques à très basses températures.
Rapport interne (1989).
- [3] B. GU, C. COLUZZA, M. MANGIANTINI, A. FROVA
Scattering effects on resonant tunneling in double barrier heterostructures.
J. Appl. Phys. 65 (1989) p. 3510.
- [4] T.P.E. BROEKAERT, W. LEE, C.G. FONSTAD
Pseudomorphic $In_{.53}Ga_{.47}As/AlAs/InAs$ resonant tunneling diodes with peak to valley current ratio of 30 at room temperature.
Appl. Phys. Lett. 53 (1989) p. 1545.
- [5] Y. ZOHTA, T. NOZU, M. OBARA
Resonant tunneling spectroscopy of two coupled quantum wells.
Phys. Rev. B, 39 (1989) p. 1375.
- [6] D. LIPPENS, E. BARBIER, P. MOUNAIX
Fabrication of high performance $Al_xGa_{1-x}As/In_yGa_{1-y}As/GaAs$ resonant tunneling diodes using a microwave compatible technology.
I.E.E.E. Electron Device letters, Mars 1991.

- [7] H. RIECHERT, D. BERNKLAU, J.P. REITMAIER, R.D. SCHNELL
High performance resonant tunneling structures on GaAs substrates.
Electronic letters, Vol. 26 (1990) p. 341.
- [8] P. BÉDU
Propriétés de conduction et de bruit dans les multipuits quantiques GaAs/GaAlAs faiblement couplés.
D.E.A. Electronique (1989) Université de Lille I.
- [9] F. CAPASSO, M. KHALID, A.Y. CHO
Sequential resonant tunneling through a multiquantum well superlattice.
Appl. Phys. Lett. 48 (1986).
- [10] R.F. KAZARINOV, R.A. SURIS
Possibility of amplification electromagnetic waves in a semiconductor with a superlattice.
Soviet Physics Semiconductor, Vol. 5, n°4 (1971).
- [11] R. TSU, L. ESAKI
Tunneling in a finite superlattice.
Appl. Phys. Lett. 22 (1973) p. 562.
- [12] L. ESAKI, L.L. CHANG
New transport phenomenon in a semiconductor superlattice.
Phys. Rev. Letters, Vol. 33, n°8 (1974) p. 495.
- [13] A. SIBILLE, J.F. PALMIER, H. WANG, J.C. ESNAULT, F. MOLLOT
D.C. and microwave negative differential conductance in GaAs/AlAs superlattices.
Appl. Phys. Lett 56 (1990) p. 256.
- [14] E.E. MENDEZ, F. AGULLO RUEDA, J.M. HONG
Stark localization in GaAs-AlGaAs superlattices under an electric field.
Phys. Rev. Letters, vol. 60, n°23 (1988) p. 2426
- [15] P. ENGLAND, J.R. HAYES, E. COLAS, M. HELM
Hot electron transport in high-lying minibands in semiconductor superlattices.
Solid. State Electronics, Vol. 32 (1989) p. 219.
- [16] R.A. DAVIES, M.J. KELLY, T.M. KERR
Room temperature oscillations in a superlattice structure.
Electronic Letters, Vol. 22, n°3 (1986) p. 131.

- [17] M.A. REED, W.R. FRENSLEY, R.J. MATYI, J.N. RANDALL, A.C. SEABAUGH
Realization of a three-terminal transistor resonant tunneling device : the bipolar quantum resonant tunneling transistor.
Appl. Phys. Letters 54 (1989) p. 1034.
- [18] C.J. SUMMERS, K.F. BRENNAN, A. TORABI, H.M. HARRIS
Resonant tunneling and negative differential resistance in a variably spaced superlattice energy filter.
Appl. Phys. Lett. 52 (1988) p. 132.
- [19] G. BASTARD
Superlattice band structure in the envelope function approximation.
Phys. Rev. Vol. 24, n°10 (1981) p. 5693.
- [20] R. BOUREGBA
Localisation dans les hétérostructures multiples. Application aux composants à tunnel résonnant.
DEA Electronique, Université de Lille I (1988).
- [21] F. BELTRAM, F. CAPASSO, D.L. SIVCO, A. L. HUTCHINSON, S.G. CHU, A.Y. CHO
Scattering-controlled transmission resonances and negative differential conductance by field induced localization in superlattices.
Phys. Rev. Letters, Vol. 64 (1990) p. 3167
- [22] L. de SAINT POL
Modélisation de l'effet tunnel résonnant dans les hétérostructures double barrière en vue d'applications analogiques très hautes fréquences.
Thèse d'Electronique - Université de Lille I (1990).
- [23] E.S. ALVES, L. EAVES, M. HENINI, O.H. HUGHES, M.L. LEADBEATER, F.W. SHEARD, G.A. TOOMBS, G. HILL, M.A. PATE
Observation of intrinsic bistability in resonant tunneling devices.
Electronic Letters, Vol 24 (1988) p. 1190.

Conclusion

Conclusion

La description des mécanismes de fonctionnement des diodes à tunnel résonnant qui, outre la double barrière, englobent des espaceurs relativement étendus, a demandé de développer des logiciels de complexité croissante. Ceux-ci sont basés sur la résolution de l'équation de Schrödinger indépendante ou dépendante du temps, couplée éventuellement à l'équation de Poisson, et de l'équation de Boltzmann par la méthode de Monte-Carlo.

Dans la mesure du possible, les résultats de simulation ont été confrontés aux mesures que nous avons effectuées concernant les caractéristiques I-V et les mesures d'impédances de diodes double barrière dans une large gamme de température.

Au terme de ce travail, les points suivants méritent d'être rappelés.

Les conclusions essentielles de l'analyse du transport quantique concernent trois aspects qui sont, respectivement, le rôle de la température par l'intermédiaire de la fonction de distribution en énergie des électrons, l'influence de la zone d'accumulation en amont de la première barrière et la conduction assistée par défauts. Concernant ces trois points, nous avons pu montrer que :

- l'étalement du spectre d'énergie des porteurs incidents peut interdire l'observation de la résistance différentielle négative à température ambiante ;
- les modes d'injection sont soit bidimensionnel soit tridimensionnel dans le cas d'une forte accumulation de porteurs dans l'émetteur ;
- les désordres d'interface sont la cause majeure de la dégradation des contrastes de courant.

Concernant le régime dynamique, l'analyse des mécanismes de remplissage ou de vidage du puits quantique, consécutifs à de brusques variations de polarisation externe, montre que le temps de vie du niveau quasi-lié est l'élément prédominant dans la réponse fréquentielle intrinsèque du composant.

En termes d'impédance grand signal, ceci se traduit par un terme réactif négatif de type inductif qu'il faut impérativement prendre en compte pour des applications très

hautes fréquences. Ceci est démontré par des mesures d'impédances pour lesquelles un facteur deux est mis en évidence sur la fréquence maximale d'oscillation, suivant que le temps de vie du niveau résonnant est introduit ou non dans l'analyse.

En revanche, l'inertie de transit n'apparaît pas comme un facteur limitatif, si la structure est optimisée pour un transport en régime d'électrons chauds. Si l'on s'intéresse aux puissances exploitables, il apparaît que l'existence de la résistance différentielle négative sur une très faible plage de tension est un handicap certain, qui ne peut être contrebalancé que par une augmentation importante des densités de courant. En effet, les puissances développées restent faibles et ce fait semble être l'obstacle majeur à l'utilisation intensive des diodes double barrière en tant qu'oscillateurs. Au vu de cette conclusion, il apparaît que des applications, telles que la multiplication d'harmonique, le mélange ou la détection, soient plus prometteuses.

Dans cette optique, il convient d'optimiser la non linéarité de conduction et les contrastes de courant. Ce sont ces objectifs que nous nous sommes assignés pour tenter de définir de nouvelles structures multipliant les puits de potentiel.

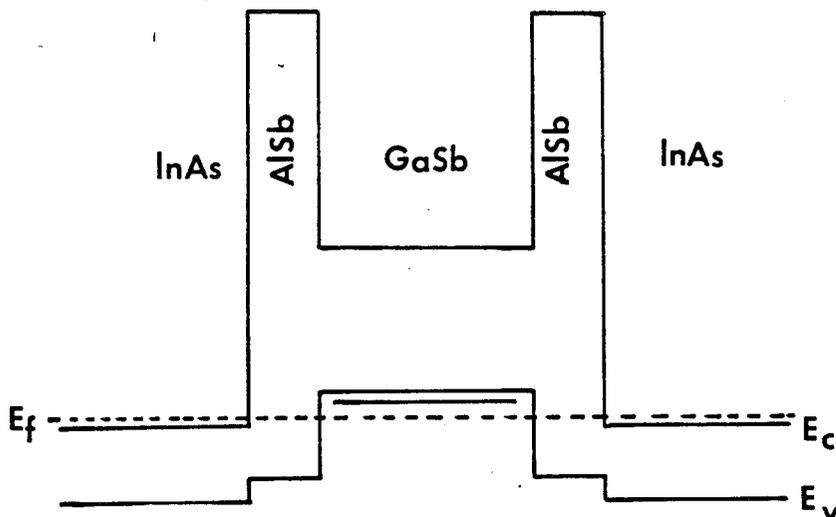


Figure 1 : Exemple d'une diode à effet tunnel résonnant interbande (RITD).

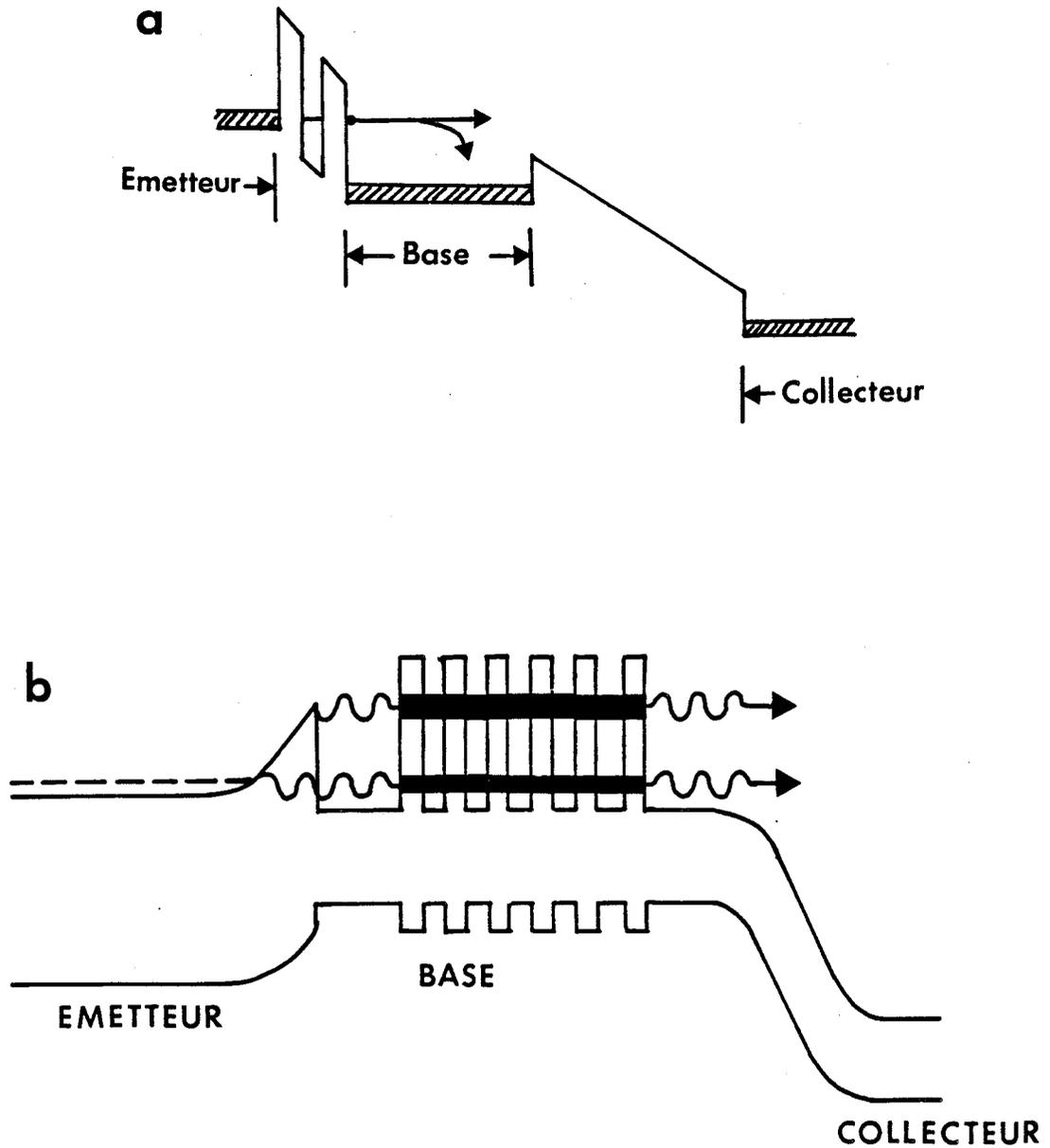


Figure 2 : Exemples de transistors intégrant des hétérostructures résonnantes.

a) RHET : resonant tunneling hot electron transistor.

b) RTT : resonant tunneling transistor.

De façon globale, les structures résonnantes apparaissent comme des filtres d'énergie, qui ne sont vraiment caractérisés qu'à partir du moment où l'on accède, non seulement à l'énergie de résonance, mais aussi à sa dispersion.

Un premier pas vers la prise en compte de ces effets de distribution, incluant des termes de perturbation, a été entrepris par une modélisation combinant la procédure numérique de Monte-Carlo et la résolution de l'équation de Schrödinger. Il nous semble que, par ce biais, il soit possible d'initialiser une étude sur le bruit pour lequel on ne dispose pratiquement d'aucune information à l'heure actuelle, hormis la caractérisation du bruit en $1/f$ relatif aux défauts.

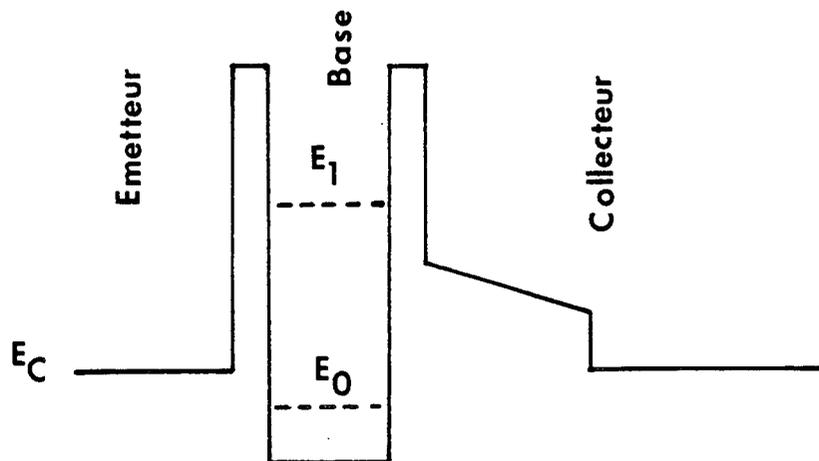


Figure 3 : Transistor à puits quantique.

Dans une perspective d'avenir, de nouvelles structures viennent d'être proposées. Elles font suite aux progrès remarquables effectués sur la croissance de structures à modulation de dopage et/ou de matériau. C'est, en particulier, le cas des diodes RIT ("resonant interband tunneling") [1] dont un exemple est schématisé sur la figure 1. Ce composant est conçu à partir de matériaux incorporant l'antimoine. On peut noter ici qu'il y a recouvrement entre la bande de conduction de l'émetteur en InAs et la bande de valence du matériau de puits en GaSb. L'intérêt de telles hétérostructures, qui utilisent l'effet tunnel interbande, vient d'un rapport courant pic sur courant vallée

extrêmement élevé, comme pour la diode tunnel conventionnelle proposée par Esaki. La reproduction de ces effets interbandes par des structures résonnantes bénéficie en outre de densités de courant élevées.

L'autre effort qui nous semble actuellement important, concerne les transistors. Les figures 2 et 3 donnent trois exemples de structures tripôles résonnantes. Les deux premières sont des structures conventionnelles de type unipolaire ou bipolaire, pour lesquelles on intègre une structure de filtrage soit dans l'émetteur (RHET : "resonant tunneling hot electron transistor", figure 2a) [2] soit dans la base (RTT : "resonant tunneling transistor", figure 2b) [3]. La troisième structure (figure 3) permet, par l'utilisation d'un puits enterré, de moduler l'échelle des énergies par une accumulation plus ou moins importante de charges localisées sur le niveau E_0 [4]. Les applications potentielles de ces structures à trois électrodes concernent la logique multi-états.

Enfin citons, comme voie de recherche à plus long terme, l'étude des effets tunnel résonnant dans les fils et boîtes quantiques [5] [6], qui illustre parfaitement la diversification actuelle de l'électronique et présente un aspect très novateur.

Bibliographie

- [1] T.C. Mac GILL
New negative differential tunnel structures.
Resonant tunneling in Semiconductors : Physics and Applications. Ed Plenum Press (1990) in the press.

- [2] A. SHIBATOMI, N. YOKOYAMA
Resonant Tunneling Transistors
Solid State Technology, 1987

- [3] F. CAPASSO, S. SEN, A.C. GOSSARD, A.L. HUTCHINSON, J.H. ENGLISH
Quantum Well Resonant Tunneling Bipolar Transistor Operating at Room Temperature.
I.E.E.E. Electron Device Letters, Vol EDL-7, n°10, (1986) p 573.

- [4] G.I. HADDAD, R.K. MAINS, U.K. REDDY, J.R. EAST
A proposed narrow band gap base transistor structure.
Superlattice and Microstructures, Vol 5, n°3 (1989).

- [5] M.A. REED, J.N. RANDALL, R.J. AGGARWAL, R.J. MATYI, T.M. MOORE, A.E. WETSEL
Observation of discrete electronic states in a zero-dimensional semiconductor nanostructure.
Physical Review letters, Vol 60 (1988) p. 535.

- [6] G. FAINI, A. RAMDANE, F. MOLLOT, H. LAUNOIS
1-D and O-D Resonant tunneling spectroscopy
Présenté à Gallium Arsenide and Related Compounds (Jersey)
Septembre 1990, à paraître.

Annexes

Annexe A

Résolution de l'équation de Schrödinger - Méthode de RUNGE KUTTA : détails numériques

L'équation de Schrödinger indépendante du temps à résoudre est du second degré en z :

$$-\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{1}{m^*(z)} \frac{\partial}{\partial z} \varphi(z) \right) + (V(z) - E_z) \varphi(z) = 0 \quad (\text{A.1})$$

Nous allons la scinder en deux équations couplées du premier degré. Pour cela, nous posons :

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

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 (A.1), on substitue à l'équation de

Schrödinger un système d'équations équivalent, dont les inconnues sont les fonctions $Y_1(z)$ et $Y_2(z)$

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

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

Pour assurer la stabilité de la procédure, nous avons eu recours, pour la discrétisation de l'équation, à une méthode de développement Runge-Kutta d'ordre 4. Le détail de la procédure numérique se trouve dans la thèse de L. de Saint Pol (Université de Lille I, 1990).

- Calcul des coefficients de réflexion et de transmission

En $z = z_n$, à l'extrémité droite de la structure, on pose :

$$\begin{cases} Y_1(z_n) = e^{ik_n z_n} \\ Y_2(z_n) = \frac{i\hbar k_n}{2\sqrt{2qm_e}} e^{ik_n z_n} \end{cases} \quad (\text{A.4})$$

En $z = z_0$, on peut écrire la fonction d'onde sous la forme d'une onde incidente et d'une onde réfléchie :

$$\varphi(Z) = C_o^+ \varphi^+ + C_o^- \varphi^- \quad (\text{A.5})$$

avec $\varphi^+ = e^{ik_0 z}$ et $\varphi^- = e^{-ik_0 z}$

Si l'on suppose $z_0 = 0$, on a alors :

$$\begin{cases} \varphi(z_0) &= C_{o^+} + C_{o^-} \\ \frac{\partial \varphi}{\partial z}(z_0) &= ik_o(C_{o^+} - C_{o^-}) \end{cases} \quad (\text{A.6})$$

En reportant ces équations dans le système (A.2), on peut extraire les coefficients C_{o^+} et C_{o^-} :

$$\begin{cases} C_{o^+} &= \frac{1}{2} \left[Y_1(z_0) + R \frac{\sqrt{2qme}}{i\hbar k_o} Y_2(z_0) \right] \\ C_{o^-} &= \frac{1}{2} \left[Y_1(z_0) - R \frac{\sqrt{2qme}}{i\hbar k_o} Y_2(z_0) \right] \end{cases} \quad (\text{A.7})$$

Les coefficients de réflexion (R) et de transmission (T) sont finalement :

$$R = \left| \frac{C_{o^-}}{C_{o^+}} \right|^2 \quad ; \quad T = \left| \frac{1}{C_{o^+}} \right|^2 \frac{K_n m_{\text{emetteur}}^*}{K_o m_{\text{collecteur}}^*} \quad (\text{A.8})$$

• Traitement des discontinuités aux interfaces

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

- la continuité de φ 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 première 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.

La résolution du système d'équations différentielles couplées est ainsi menée à bien, d'interface en interface, jusqu'à la zone d'émetteur en $z = z_0$.

Annexe B

Calcul des conditions aux limites pour la résolution de l'équation de Schrödinger dépendante du temps

A partir des équations en

$$z = z_0 ; \psi(t = \Delta t) \simeq \psi(t = 0) e^{-i(E/\hbar)\Delta t} + \frac{\hbar k_e}{m^*} \cdot \frac{\partial B(z)}{\partial z} \cdot e^{-ik_e z} \cdot \Delta t \quad (\text{B.1})$$

et en

$$z = z_{max} ; \psi(t = \Delta t) \simeq \psi(t = 0) e^{-i(E_s/\hbar)\Delta t} - \frac{\hbar k_s}{m^*} \cdot \frac{\partial C(z)}{\partial z} \cdot e^{-ik_s z} \cdot \Delta t \quad (\text{B.2})$$

deux méthodes sont envisageables pour déterminer $\frac{\partial B(z_0)}{\partial z}$ et $\frac{\partial C(z_{max})}{\partial z}$

a - Conditions aux limites explicites :

En $z = z_0$, on peut écrire

$$\frac{\partial B(z_0)}{\partial z} = \frac{B(z_0 + \Delta z) - B(z_0)}{\Delta z} \quad (\text{B.3})$$

Sachant que

$$\psi(z) = A e^{ik_e z} + B(z) e^{-ik_e z}$$

au voisinage de l'origine ; alors

$$B(z_0) = (\psi_1 - A e^{ik_e z_0}) e^{ik_e z_0}$$

et

$$B(z_0 + \Delta z) = (\psi_2 - A e^{ik_e(z_0 + \Delta z)}) e^{ik_e(z_0 + \Delta z)} \quad (\text{B.4})$$

avec ψ_1 et ψ_2 les valeurs respectives de ψ en z_0 et $z_0 + \Delta z$. On obtient pour ψ en $z = z_0$ au temps futur $t + \Delta t$ en reportant (B.4) dans (B.3) puis dans (B.1) :

$$\psi_1^f = \psi_1 \left(e^{-iE\Delta t/\hbar} - \frac{\hbar k_e \Delta t}{m^* \Delta z} \right) + \psi_2 \left(\frac{\hbar k_e \Delta t}{m^* \Delta z} e^{ik_e \Delta z} \right) + \frac{\hbar k_e \Delta t}{m^* \Delta z} A e^{ik_e z_0} (1 - e^{2ik_e \Delta z}) \quad (\text{B.5})$$

De même, en posant :

$$\frac{\partial C(z_{max})}{\partial z} = \frac{C(z_{max}) - C(z_{max} - \Delta z)}{\Delta z} \quad (\text{B.6})$$

on obtient, sachant que $\psi(z) = C(z) e^{ik_s z}$ au voisinage de z_{max} , l'équation :

$$\psi_N^f = \frac{\hbar k_s \Delta t}{m^* \Delta z} \psi_{N-1} + \psi_N \left(e^{-iE_s \Delta t/\hbar} - \frac{\hbar k_s \Delta t}{m^* \Delta z} \right) \quad (\text{B.7})$$

Grâce aux deux équations (B.5) et (B.7), on peut compléter les matrices $A(t)$, $B(t)$ et $C(t)$ définies au chapitre 2.



Avec cette méthode explicite, des valeurs maximales de discrétisation temporelle de $1-2 \cdot 10^{-16} s$ peuvent être utilisées. Au-delà de cette limite, la procédure numérique diverge.

b - Conditions aux limites semi-implicites :

Afin de pouvoir utiliser des pas de discrétisation temporelle plus élevés, une approche semi-implicite est possible.

Nous écrivons :

$$\frac{\partial B(z_0)}{\partial z} \approx \frac{1}{2} \left[\left(\frac{\partial B(z_0)}{\partial z} \right)_t + \left(\frac{\partial B(z_0)}{\partial z} \right)_{t+\Delta t} \right] \quad (\text{B.8})$$

et

$$\frac{\partial C(z_{max})}{\partial z} \approx \frac{1}{2} \left[\left(\frac{\partial C(z_{max})}{\partial z} \right)_t + \left(\frac{\partial C(z_{max})}{\partial z} \right)_{t+\Delta t} \right] \quad (\text{B.9})$$

Ces deux équations vont nous permettre, en utilisant la même méthode que dans le cas explicite, d'écrire deux équations discrétisées :

- en $z = z_0$

$$\psi_1^f \left(1 + \frac{\hbar k_e \Delta t}{2m^* \Delta z} \right) + \psi_2^f \left(-\frac{\hbar k_e \Delta t}{2m^* \Delta z} e^{ik_e \Delta z} \right) = b_1$$

avec :

$$b_1 = \psi_1 \left(e^{-iE\Delta t/\hbar} - \frac{\hbar k_e \Delta t}{2m^* \Delta z} \right) + \psi_2 \left(\frac{\hbar k_e \Delta t}{2m^* \Delta z} e^{ik_e \Delta z} \right) + \frac{\hbar k_e \Delta t}{2m^* \Delta z} e^{ik_e z_0} (1 - e^{2ik_e \Delta z}) (A + A^f) \quad (\text{B.10})$$

- en $z = z_{max}$

$$\psi_{N-1}^f \left(-\frac{\hbar k_s \Delta t}{2m^* \Delta z} e^{ik_s \Delta z} \right) + \psi_N^f \left(1 + \frac{\hbar k_s \Delta t}{2m^* \Delta z} \right) = b_N$$

avec

$$b_N = \left(\frac{\hbar k_s \Delta t}{2m^* \Delta z} e^{ik_s \Delta z} \right) \psi_{N-1} + \psi_N \left(e^{-iE_s \Delta t / \hbar} - \frac{\hbar k_s \Delta t}{2m^* \Delta z} \right) \quad (\text{B.11})$$

Cette méthode permet d'utiliser des pas en temps supérieurs à $5 \cdot 10^{-16}$ s.

Annexe C

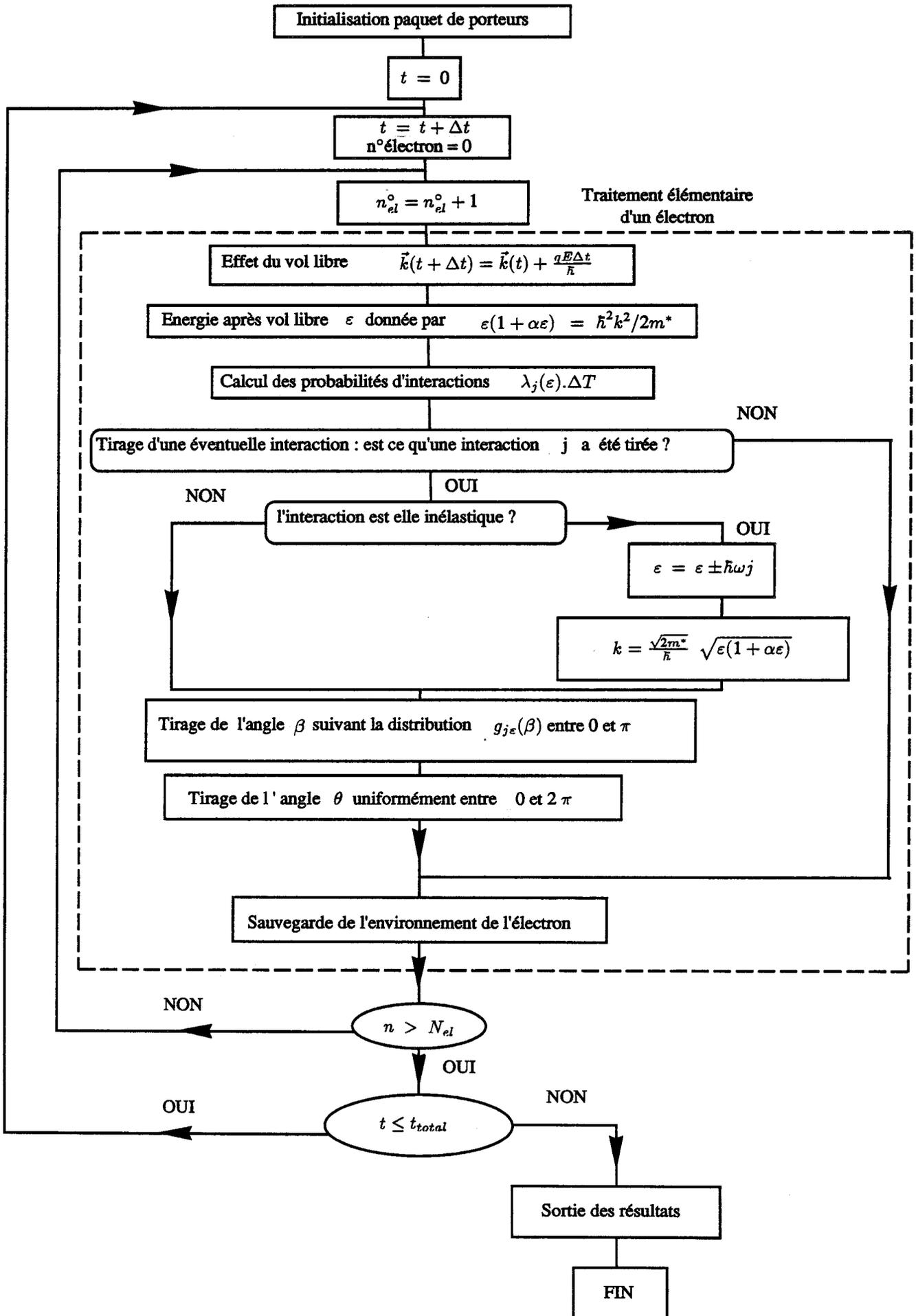
Méthode de Monte-Carlo : ORGANIGRAMMES

a - Monte-Carlo multiparticulaire.

b - Ensemble Monte-Carlo appliqué au tunnel résonnant.

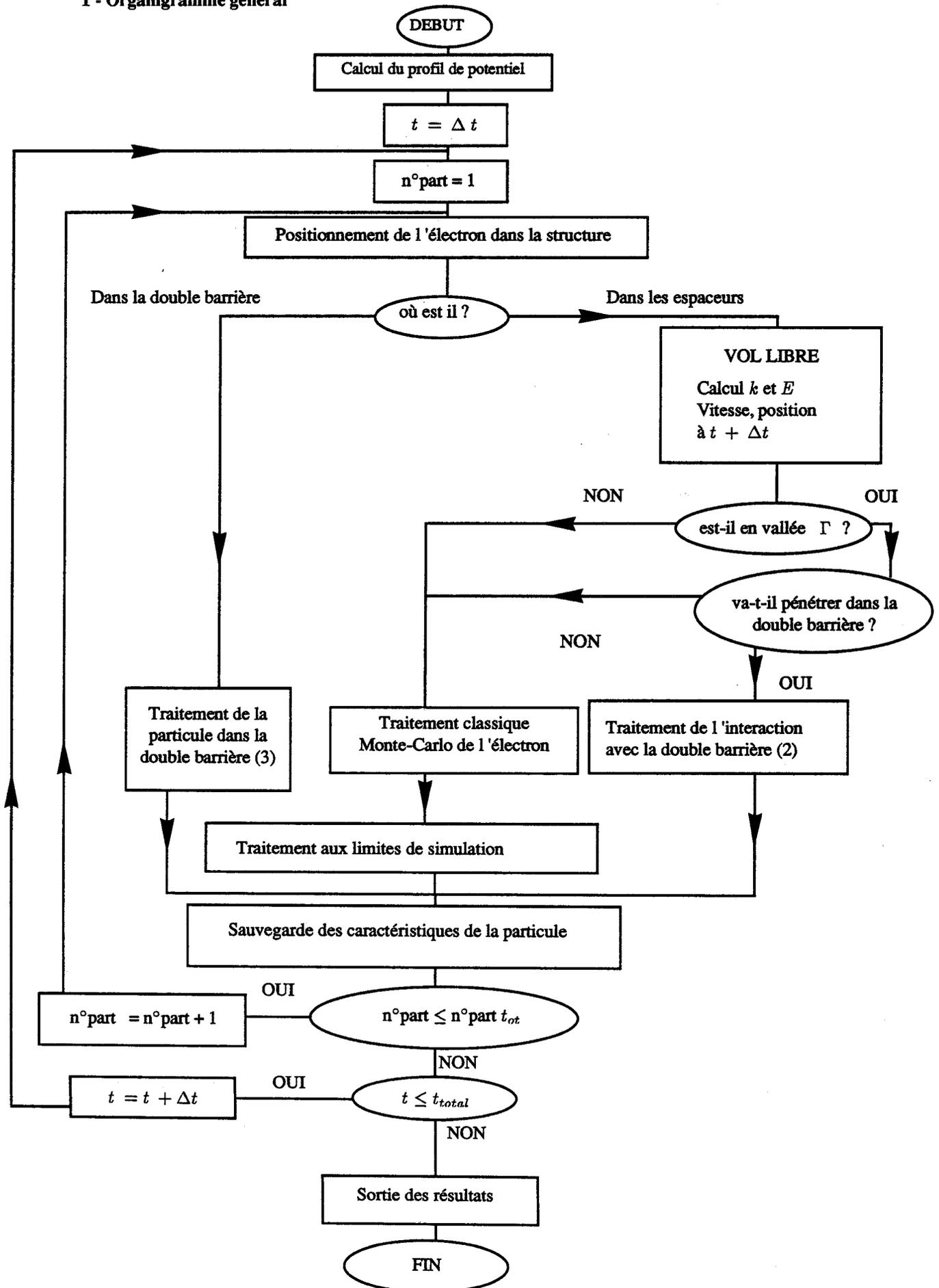
- 1. Organigramme général.**
- 2. Traitement de l'interaction avec la double-barrière : choix transmission-réflexion.**
- 3. Traitement de la particule dans la double barrière.**

a - Monte-Carlo classique multiparticulaire

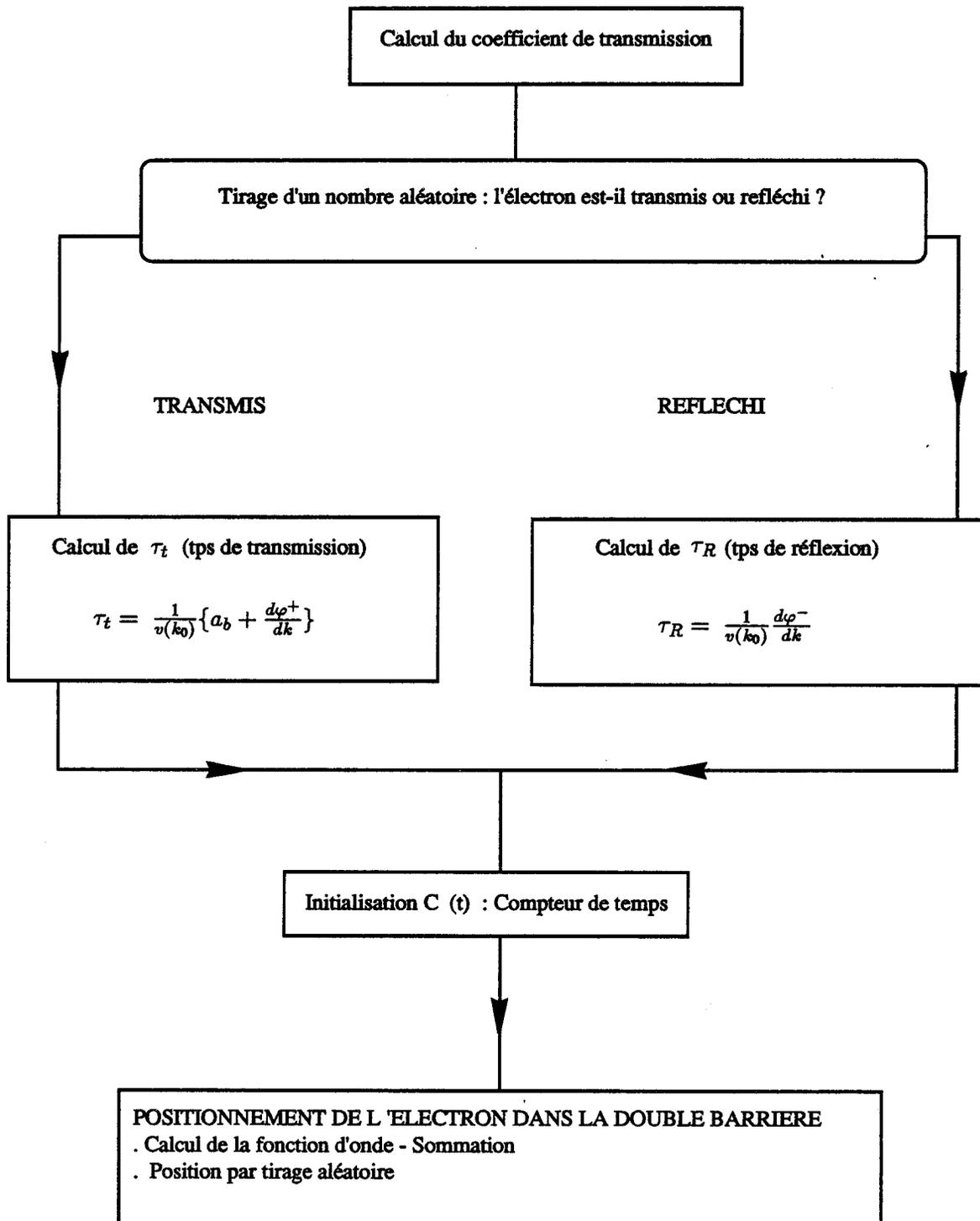


b - Ensemble Monte-Carlo appliqué au tunnel résonant

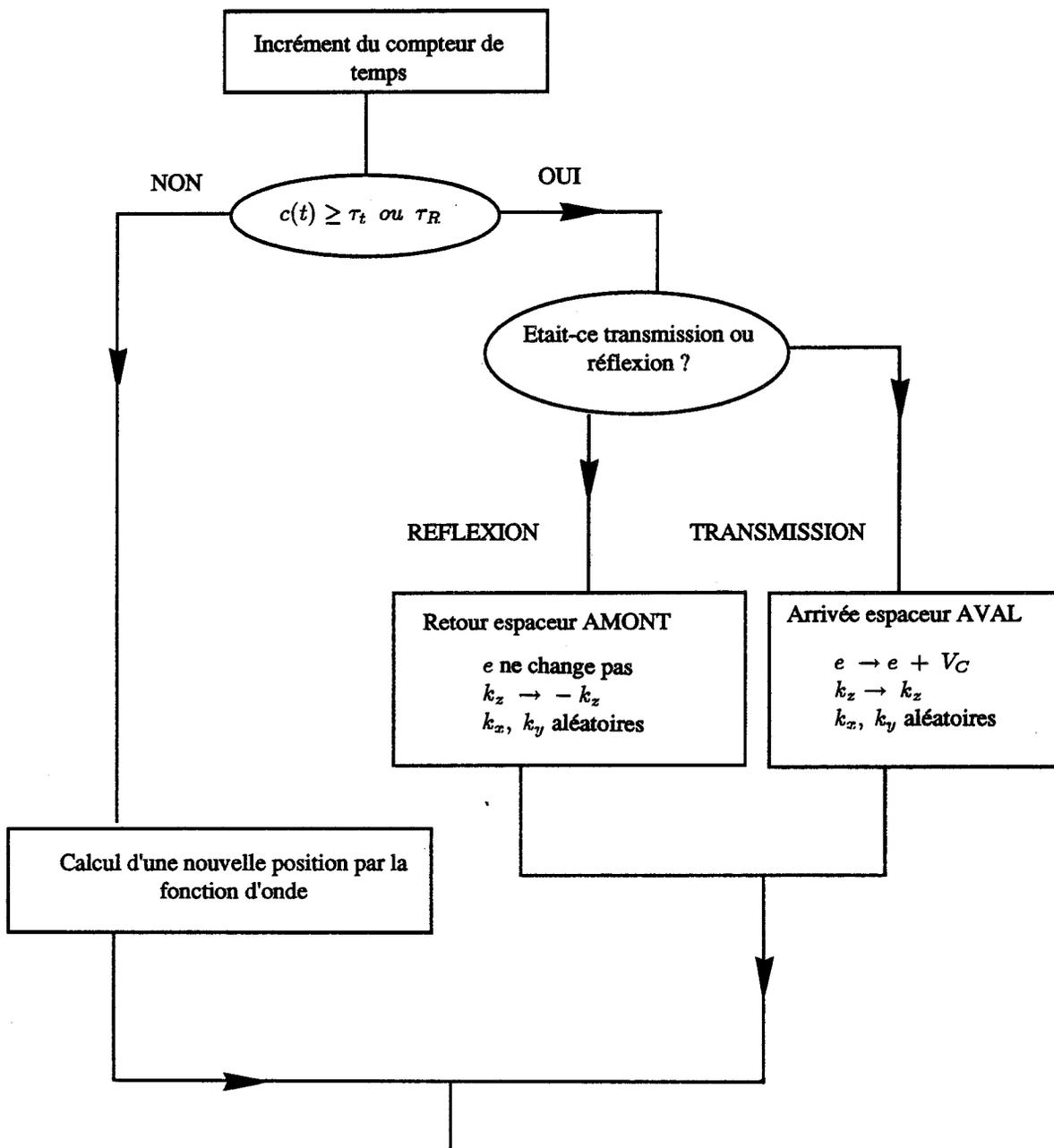
1 - Organigramme général



2 - Traitement de l'interaction avec la DOUBLE BARRIERE: Choix transmission-réflexion



3 - Traitement de la particule dans la double barrière



Annexe D

Compléments sur la structure de bandes du GaAs

Le programme du pseudopotentiel empirique local permet de calculer les bandes de conduction supérieures ainsi que les bandes de valence. Nous présentons ici quelques résultats qui concernent la deuxième bande de conduction et les premières bandes de valence. Seul le matériau GaAs est ici présenté. Pour l'AlAs et le GaAlAs, qualitativement, les raisonnements restent valables.

- Deuxième bande de conduction du GaAs

La figure D1 donne les relations de dispersion du GaAs incluant les bandes supérieures pour deux directions cristallines $\Delta(\langle 100 \rangle)$ et $\Lambda(\langle 111 \rangle)$. La figure D2 montre les isoénergies de la deuxième bande de conduction dans le plan ΓLK .

On note une grande proximité des première et deuxième bandes de conduction dans la direction $\langle 100 \rangle$ pour $k = 0.3 (2 \pi/a)$.

Il nous semble cependant qu'un porteur, possédant cette valeur de vecteur d'onde, localisé en première bande de conduction, peut difficilement transférer dans une bande supérieure. Outre le caractère instable de ce point, nous avons vu que les forces de rappels (interaction sur phonons et ionisation par choc) agissent avec une fréquence supérieure à 10^{15} par seconde. Il est raisonnable de supposer qu'une interaction va intervenir avant que la transition interbande ne se fasse. Ceci valide les simulations basées sur la prise en compte d'une seule bande de conduction.

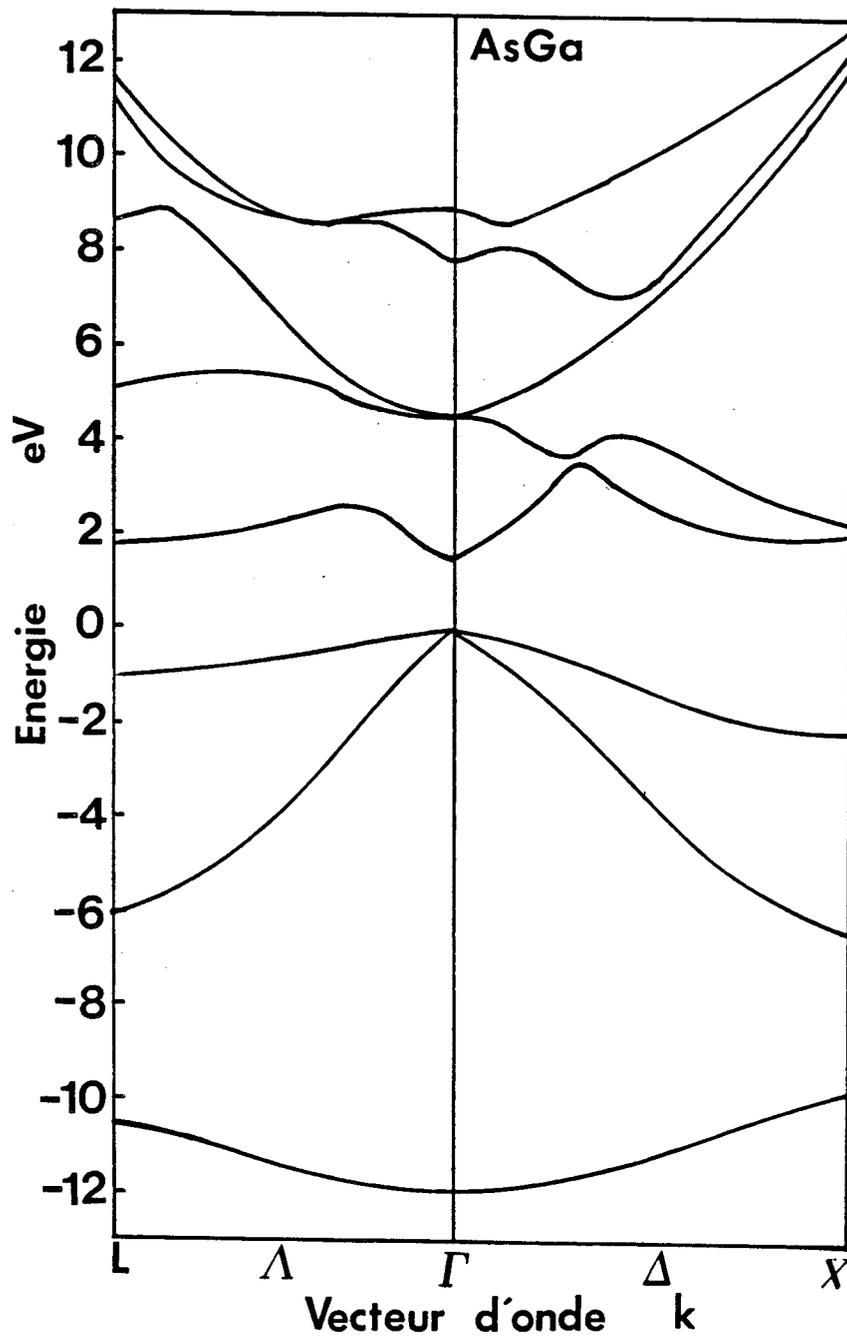


Figure D1 : Structure de bandes du GaAs dans les directions cristallines Δ ($\langle 100 \rangle$) et Λ ($\langle 111 \rangle$) calculée par la méthode du pseudo-potentiel empirique local.

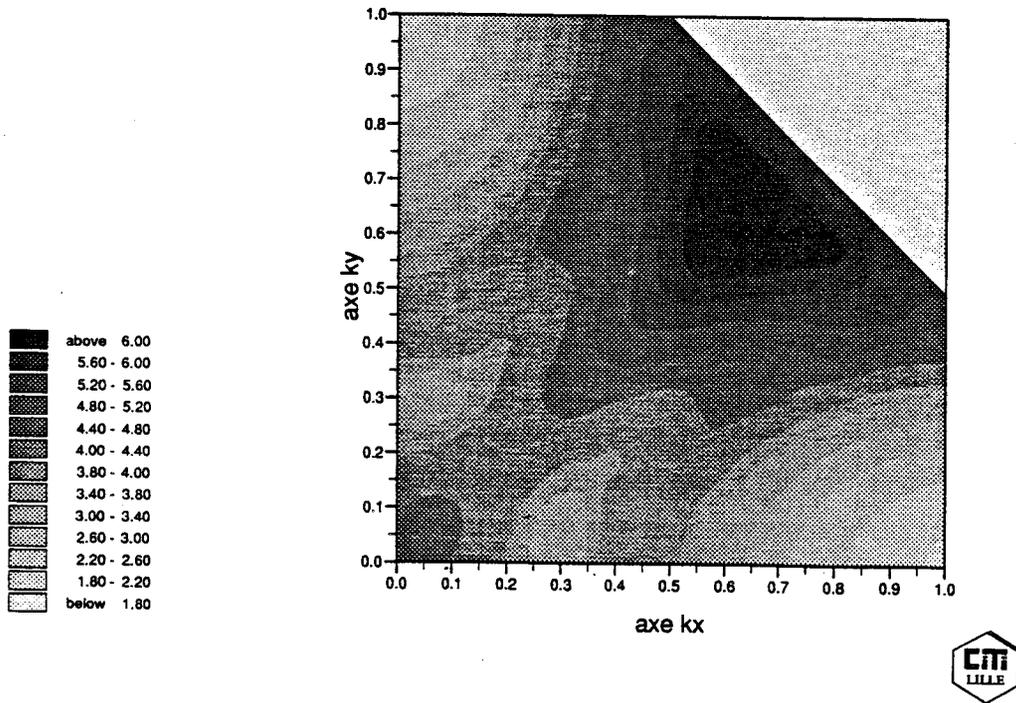


Figure D2 : Courbes isoénergies dans le plan $\Gamma X K$ pour le GaAs. Deuxième bande de conduction.

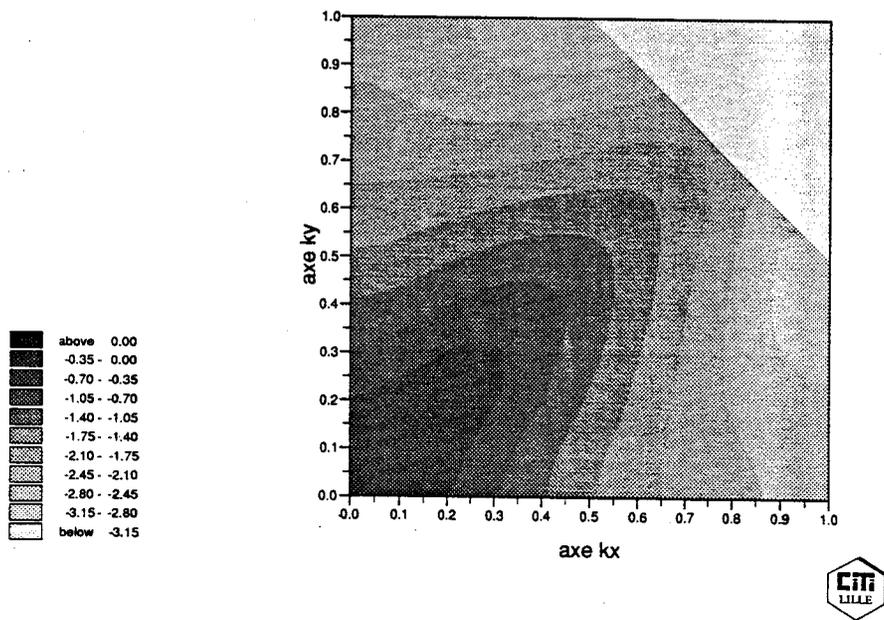


Figure D3 : Courbes isoénergies dans le plan $\Gamma X K$ pour le GaAs. Première bande de valence (2 fois dégénérée).

- Bandes de valence

Les figures D3 et D4 donnent les courbes isoénergies pour la première bande de valence deux fois dégénérée sur l'ensemble des valeurs d'énergie et la troisième bande de valence dégénérée au point Γ_{15V} .

On constate que, si la troisième bande de valence est relativement isotrope, il n'en est pas de même pour les deux bandes fondamentales.

Outre ce caractère d'anisotropie, il est bien évident qu'une étude du transport pour les trous demanderait de lever la dégénérescence trous lourds-trous légers et d'introduire le "SPLIT-OFF" (levée de dégénérescence de la troisième bande de valence en Γ_{15V}).

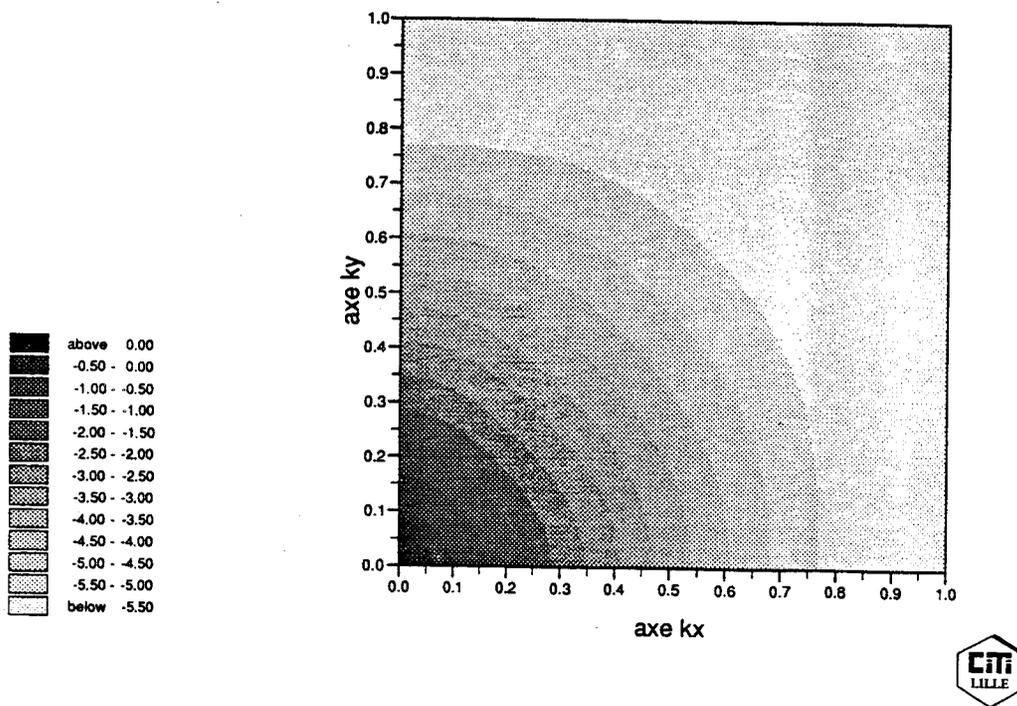


Figure D4 : Courbes isoénergies dans le plan $\Gamma X K$ pour le GaAs. Troisième bande de valence (l'énergie de "split-off" n'est pas traduite par le modèle).

Annexe E

Incohérence dans les structures triple barrière

Le formalisme, utilisé pour le calcul partiellement cohérent du courant dans une structure triple barrière, est illustré schématiquement sur la figure E.1.

Pour obtenir les coefficients de transmission et de réflexion globaux de la structure, notés t_{17} et r_{17} , il suffit de considérer la triple barrière comme l'association suivante :

- d'une part, l'ensemble formé par les deux premières barrières (région 1 à 5) avec les coefficients r_{15} , r_{51} , et t_{15} et t_{51} et un coefficient de non-cohérence noté γ_3 pour le puits référencé 3 :
- d'autre part, la troisième barrière avec les coefficients r_{57} et t_{57} et un coefficient de non-cohérence noté γ_5 pour le puits référencé 5.

En suivant alors la méthode décrite dans le chapitre 1, on obtient :

$$r_{15}^{coh} = r_{13} + \frac{t_{13}\gamma_3 r_{35} t_{31}}{1 - \gamma_3 r_{31} r_{35}} \quad \text{et} \quad t_{15}^{coh} = \frac{t_{13} t_{35}}{1 - \gamma_3 r_{31} r_{35}} \quad (\text{E.1})$$

$$r_{51}^{coh} = r_{53} + \frac{t_{53}\gamma_5 r_{31} t_{35}}{1 - \gamma_5 r_{31} r_{35}} \quad \text{et} \quad t_{51}^{coh} = \frac{t_{53} t_{31}}{1 - \gamma_5 r_{31} r_{35}} \quad (\text{E.2})$$

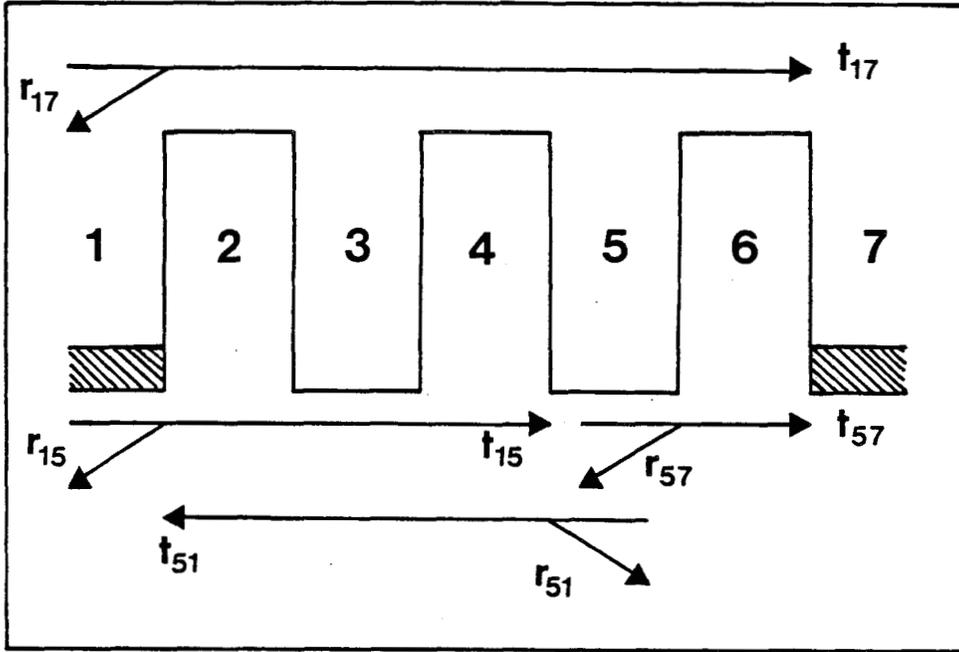


Figure E.1 : Formalisme de calcul partiellement cohérent de la transmission dans une structure triple barrière.

ensuite, en fonction de r_{57} et t_{57} :

$$r_{17}^{coh} = r_{15} + \frac{t_{15}\gamma_5 r_{51} t_{51}}{1 - \gamma_5 r_{51} r_{57}} \quad \text{et} \quad t_{17}^{coh} = \frac{t_{15} t_{51}}{1 - \gamma_5 r_{51} r_{57}} \quad (\text{E.3})$$

Les coefficients en puissance sont alors :

$$T_{17}^{coh} = t_{17} \cdot t_{17}^* \frac{k_7}{k_1} \frac{m_1^*}{m_7^*} \quad \text{et} \quad R_{17}^{coh} = r_{17} r_{17}^* \quad (\text{E.4})$$

En développant dans les formules (E.3) les coefficients relatifs aux deux premières barrières, il est aisé de vérifier que l'on obtient une formule équivalente en associant les deux dernières barrières.

Le calcul de la partie non cohérente de la transmission, due à la perte de cohérence de phase des porteurs dans chacun des puits, se fait selon le raisonnement suivant :

soient T_A et T_B les proportions des électrons ayant perdu leur cohérence de phase dans les puits respectivement notés 3 et 5, on a :

$$\begin{aligned} T_A &= 1 - T_{15}^{coh} - R_{15}^{coh} \\ T_B &= 1 - T_{37}^{coh} - R_{37}^{coh} \end{aligned} \quad (E.5)$$

avec

$$\left\{ \begin{aligned} T_{15}^{coh} &= |t_{15}|^2 \frac{k_5}{k_1} \frac{m_1^*}{m_5^*} \\ R_{15}^{coh} &= |r_{15}|^2 \\ T_{37}^{coh} &= \left| \frac{t_{35}t_{57}}{1-\gamma_5 r_{35} r_{57}} \right|^2 \frac{k_7}{k_3} \frac{m_3^*}{m_7^*} \\ R_{37}^{coh} &= \left| r_{35} + \frac{t_{35} \gamma_5 r_{37} t_{53}}{1-\gamma_5 r_{35} r_{37}} \right|^2 \end{aligned} \right.$$

La contribution non-cohérente à la transmission que l'on note T_C peut être alors calculée, en supposant que les électrons peuvent subir de nouveau des réflexions dans les puits adjacent. On obtient :

$$T_C = [T_A \cdot T_{35} + T_B (T_{13} + T_{35})] \cdot \frac{T_{57}}{T_{13} T_{35} + T_{13} T_{57} + T_{35} T_{57}} \quad (E.6)$$

$$\text{avec } T_{ij} = |t_{ij}|^2 \frac{k_j}{k_i} \frac{m_i^*}{m_j^*} \quad (E.7)$$

La transmission totale de la structure est finalement :

$$T_{17}^{tot} = T_{17}^{coh} + T_C \quad (E.8)$$

Le calcul du courant peut alors être mené par le même formalisme que dans le chapitre 1.

Résumé

Ce travail est consacré à la simulation et à la caractérisation électrique de diodes double barrière à effet tunnel résonnant. Ces composants tirent parti des effets d'interférence des ondes associées aux électrons et nous analysons ces phénomènes en régime indépendant du temps et en régime dynamique.

Dans ce but, nous présentons des logiciels de simulation permettant de calculer les probabilités de passage par effet tunnel ainsi que les flux de transfert de charges pour des transports cohérent et incohérent. A l'aide de ces formalismes, nous avons étudié les propriétés bidimensionnelles du contact d'émetteur et l'influence des perturbations intrinsèques et extrinsèques au sein de la structure quantique. Les implications de ces effets sont clairement mises en évidence par une étude expérimentale des caractéristiques de conduction, dans une très large gamme de température.

L'analyse des régimes transitoires permet de déterminer les temps de réponse des composants, que l'on peut relier au temps de vie du niveau quasi-lié. L'influence de celui-ci est directement évaluée par une mesure de l'impédance des diodes.

Nous complétons ces aspects par l'étude des phénomènes de transport non-stationnaire dans l'espace collecteur, grâce à une simulation multiparticulaire de type Monte-Carlo.

Nous dégageons enfin des perspectives d'avenir par une étude préliminaire de structures multipliant les discontinuités de potentiel. C'est le cas, notamment, des structures à puits enterré et des superréseaux de dimension finie.

Mots-clés

- tunnel résonnant
- système GaAs/AlAs
- caractéristiques de conduction
- mesures d'impédances
- quantification d'émetteur
- transport incohérent
- Schrödinger dépendant du temps
- simulation Monte-Carlo

