

50376  
1992  
119  
N° 992

61997

50376  
1992  
119

# THESE

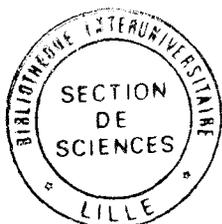
Présentée à

L'UNIVERSITE DES SCIENCES ET TECHNOLOGIES DE LILLE

pour obtenir le titre de

DOCTEUR DE L'UNIVERSITE

Spécialité : ELECTRONIQUE



par

Hélène LEROUX



## EFFETS TUNNEL INTERBANDE ET INTRABANDE DANS LES HETEROSTRUCTURES III-V DE COMPLEXITE CROISSANTE

Soutenue le 30 Juin 1992 devant la commission d'examen.

Membres du jury : MM.	E. CONSTANT	Président
	D. LIPPENS	Directeur de thèse
	P. HESTO	Rapporteur
	J.C. PORTAL	Rapporteur
	L. DOBRZINSKI	Examineur
	P. TABOURIER	Examineur
	J.ZIMMERMANN	Examineur



3 000 12

## Introduction générale

Les potentialités offertes par les structures quantiques mettant en jeu des matériaux semiconducteurs III-V de faible épaisseur ont été démontrées par Tsu et Esaki, il y a une vingtaine d'années. Les ruptures de bande de conduction et de valence résultant de la jonction de matériaux semiconducteurs différents permettent de moduler à volonté le potentiel électrostatique vu par les électrons incidents et de créer des puits et des barrières de potentiel artificiels. Ces hétérostructures ont des dimensions comparables aux longueurs d'onde associées aux particules participant au transport et présentent des états propres qui facilitent le passage par effet tunnel. Tsu et Esaki ont ainsi montré qu'il était possible d'obtenir dans des structures à puits quantiques un effet de résistance différentielle négative.

La mise en oeuvre de composants pour lesquels les effets quantiques sont prédominants n'a vraiment vu le jour que dans les années 80, lorsque les progrès de l'épitaxie (par jets moléculaires notamment) ont permis la croissance de couches alternées présentant des transitions abruptes et des épaisseurs de quelques monocouches atomiques. Depuis lors, la richesse dans les applications possibles de ces hétérostructures ne cesse de se confirmer. Si on s'intéresse plus particulièrement au transport vertical (lorsque les électrons traversent les structures perpendiculairement aux plans des hétérostructures), on peut mettre en évidence une grande diversité dans les mécanismes de conduction suivant le nombre de matériaux mis en jeu. On peut citer comme exemple la simple barrière de potentiel qui se révèle relativement opaque tout en permettant un stockage de charge et qui est utilisée en diode varactor. Si on multiplie le nombre d'hétérojonctions ne serait ce que pour réaliser une diode double barrière, il apparaît une conduction sélective qui est mise à profit pour obtenir des oscillateurs ou des multiplicateurs harmoniques. Enfin par un partage des fonctions d'onde sur une structure alternée complexe, on introduit des sous bandes d'énergie qui permettront la réalisation de transistors quantiques originaux.

Cette diversité de structures associées à une multiplicité d'applications potentielles motive un travail approfondi de modélisation qui doit garder un caractère suffisamment général pour pouvoir traiter des hétérostructures de complexité croissante.

Concrètement ce travail s'articule autour des points suivants :

Dans une première partie nous passons en revue les structures électroniques des différents matériaux semiconducteurs qui nous sont essentiels pour étudier les hétérostructures. Nous nous intéressons ensuite aux reports de discontinuités de bandes dans les hétérojonctions pour pouvoir envisager les différentes configurations d'hétérostructures.

Le deuxième chapitre porte sur les formalismes permettant de remonter aux caractéristiques de conduction pour un transport perpendiculaire. Il s'agit essentiellement de procédures numériques pour résoudre l'équation de Schrödinger de façon directe ou à l'aide des matrices de transfert.

Pour le traitement des zones d'accès, entre lesquelles les zones quantiques sont habituellement insérées, nous nous appuyons sur la résolution de l'équation de Poisson. Ces différents logiciels sont appliqués ensuite au cas de la simple barrière de potentiel qui constitue la brique de base de tout dispositif quantique à hétérostructure. Nous accédons ainsi au spectre de transmission, aux probabilités de présence électronique dans la structure ainsi qu'à ses caractéristiques courant-tension. Une étude succincte des barrières de potentiel formées électrostatiquement est finalement présentée.

En troisième partie nous nous intéressons aux propriétés de conduction de la double barrière de potentiel. Celle-ci constitue le dispositif le plus simple exploitant l'effet tunnel résonnant. Les matériaux utilisés appartiennent aux systèmes GaAlAs et AlInAs. Nous nous attachons à comprendre les différences rencontrées entre les caractéristiques courant-tension théorique et expérimentale en ce qui concerne la densité de courant pic, la tension pic et le contraste en courant. Nous verrons que le contraste en courant théorique est souvent surestimé et qu'il faut introduire une perte de cohérence de phase pour les électrons traversant la structure. Par ailleurs dans le cas des doubles barrières à forte discontinuité de bande de conduction, il se pose le problème de l'attribution d'une masse de bande interdite lors du passage par effet tunnel. Nous contournons cette difficulté par l'utilisation du modèle à deux bandes de Kane qui permet une bonne description de la relation de dispersion dans la bande interdite. Cette approche est menée à bien en utilisant pour la résolution des deux équations de Schrödinger couplées qui en résultent, le formalisme des matrices de transfert de Ando.

Nous passons ensuite dans le quatrième chapitre aux spécificités de conduction

# Table des matières

<b>1 Propriétés électroniques des structures à modulation de matériaux</b>	<b>1</b>
1.1 Introduction . . . . .	1
1.2 Matériaux constitutifs . . . . .	2
1.2.1 Matériaux binaires à base d'Arsenic . . . . .	2
1.1.1.1 GaAs . . . . .	2
1.1.1.2 AlAs . . . . .	3
1.1.1.3 InAs . . . . .	3
1.2.2 Matériaux binaires à base d'Antimoine . . . . .	4
1.1.2.1 GaSb . . . . .	4
1.1.2.2 AlSb . . . . .	4
1.2.3 Matériaux ternaires . . . . .	5
1.1.3.1 $Ga_{1-x}Al_xAs$ . . . . .	5
1.1.3.2 $In_{1-x}Ga_xAs$ . . . . .	6
1.1.3.3 $GaSb_{1-y}As_y$ . . . . .	6
1.3 Hétérojonctions . . . . .	7
1.3.1 Matériaux adaptés ou faiblement désadaptés . . . . .	7
1.3.2 Matériaux désadaptés en maille . . . . .	8
1.3.3 Structure de bande des simples hétérojonctions . . . . .	9
1.4 Hétérostructures multiples . . . . .	10
1.4.1 Hétérostructures de type I . . . . .	10
1.4.2 Hétérostructures de type II . . . . .	11
1.5 Conclusion . . . . .	11

rencontrées dans les superréseaux finis réalisés à partir d'hétérostructures multiples. Nous mettons en évidence l'influence du couplage interpuits et du couplage avec le continuum sur les spectres de transmission et les états de confinement, à partir de l'exemple de la triple barrière. Au terme de cette étude nous proposons une structure superréseau finie présentant une dispersion des niveaux quasi-liés dans les puits suffisamment importante pour former une minibande d'énergie résonnante puis nous en étudions les propriétés de conduction. L'exploitation des propriétés de confinement propres aux structures à multiples discontinuités de bande de conduction est finalement menée pour une structure triple barrière à largeur de puits variable et pour une double barrière hétérogène.

Le cinquième chapitre traite des hétérostructures de type II réalisées à partir de matériaux à base d'Antimoine. La prise en compte du couplage entre les fonctions d'ondes associées aux bandes de conduction et de valence se révèle ici nécessaire dans la mesure où les deux bandes relatives aux électrons et aux trous légers sont proches en énergie. Nous présentons ici de façon détaillée le modèle de bande décrivant la structure de bande au voisinage du centre de la zone de Brillouin. Deux modes de transport par effet tunnel peuvent se produire dans ces hétérostructures. On assiste à une conduction de type intrabande dans le cas des double barrières AlSb/InAs. La conduction est de type interbande dans les simples barrières InAs/GaSb ou dans les double barrières AlSb/GaAs/AlSb présentant un émetteur d'InAs.

# Chapitre 1

## Propriétés électroniques des structures à modulation de matériaux

### 1.1 Introduction

Le choix de matériaux semiconducteurs III-V constituant les hétérostructures est particulièrement large à l'heure actuelle. Les possibilités offertes par les matériaux binaires, ternaires ou quaternaires sont multiples et permettent de moduler à volonté les largeurs de bande interdite et la masse des porteurs de charge. Les différences entre les largeurs de bande interdite des matériaux formant les hétérojonctions se répercutent sur les variations spatiales de la bande de conduction et de valence de la structure totale et les discontinuités ainsi créées sont mises à profit pour contrôler les phénomènes de transport.

Cette ingénierie de bande interdite a été rendue possible par les progrès des techniques d'épitaxie (Epitaxie par Jet Moléculaire notamment). Nous exploiterons ici trois familles de semiconducteurs III-V à base d'Arsenic, d'Indium et d'Antimoine et nous laisserons de côté les composés à base de Phosphore ainsi que les hétérostructures Si/SiGe. Les méthodes de traitement des hétérostructures que nous développerons par la suite pourront cependant être aisément appliquées à ces derniers cas.

Dans ce chapitre, nous rappellerons dans un premier temps les propriétés électroniques des matériaux en volume, puis nous considérerons les différentes associations qui

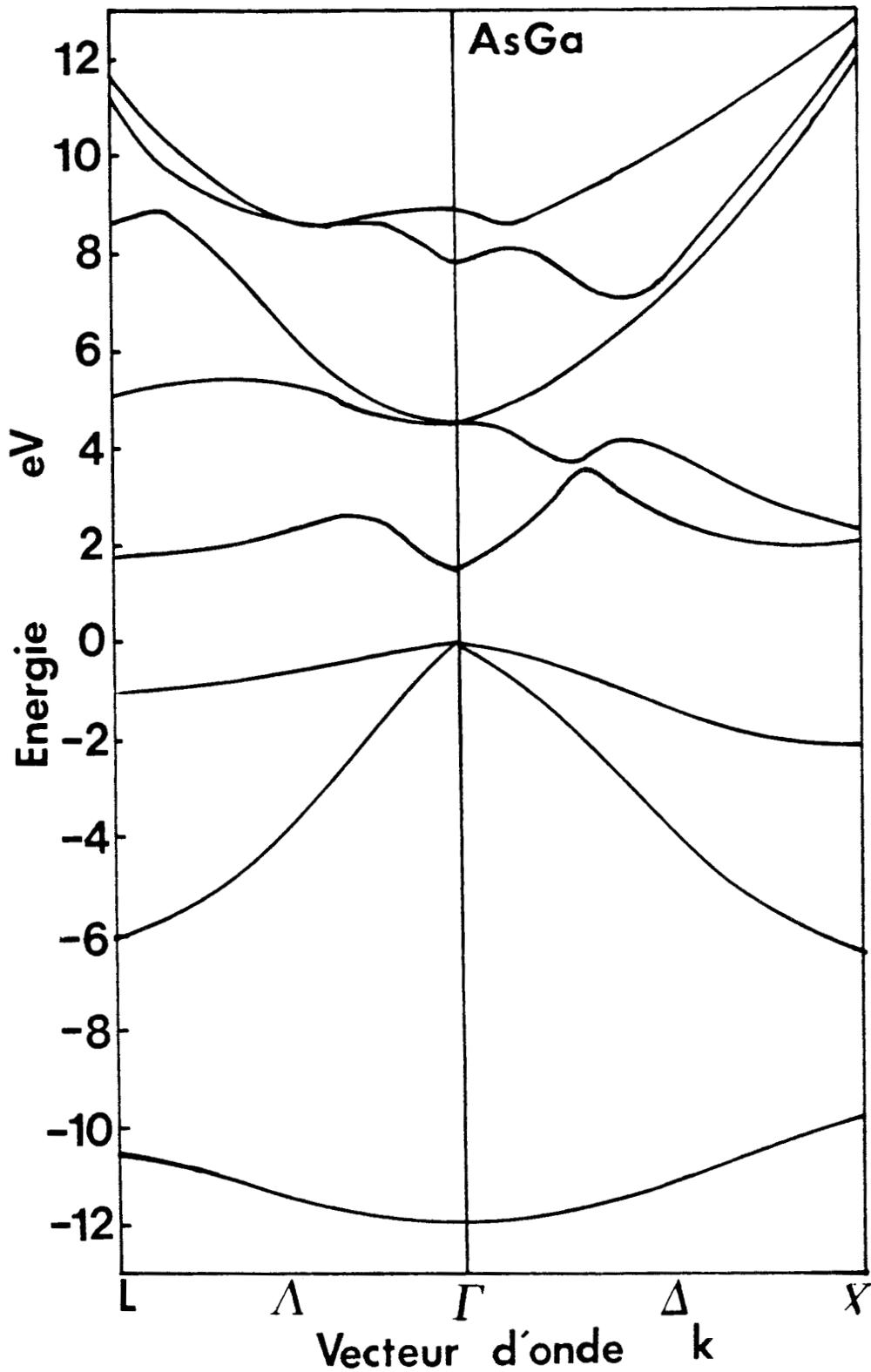


Figure 1.1 : Structure de bandes du GaAs dans les directions cristallines  $\Delta$  ( $\langle 100 \rangle$ ) et  $\Omega$  ( $\langle 111 \rangle$ ) calculé par la méthode du pseudopotentiel empirique local.

conduisent à la formation d'une hétérojonction tout en respectant la qualité cristalline. Nous verrons enfin qu'il est possible de créer différentes situations de localisation stricte et momentanée en multipliant les interfaces.

## 1.2 Matériaux constitutifs

Le traitement des effets tunnel et la dérivation des caractéristiques de conduction nécessitent un calcul préalable des structures de bande des matériaux constituant l'hétérostructure. Ce calcul des relations de dispersion entre l'énergie et le vecteur d'onde est un problème complexe résolu en partie par la méthode des liaisons fortes ou du pseudopotentiel. Les états d'énergie sont alors décrits sur l'ensemble de la zone de Brillouin et on peut en déduire les propriétés électroniques du matériau considéré. Les positions relatives des différentes vallées de la première bande de conduction déterminent la nature de la bande interdite. Des coefficients de non parabolicité seront éventuellement introduits dans le calcul des masses effectives lorsque les porteurs de charge assurant le transport s'écarteront des bas de bandes et l'anisotropie des structures de bande devra alors être prise en compte dans l'interprétation des résultats.

### 1.2.1 Matériaux binaires à base d'Arsenic

#### 1.1.1.1 GaAs

La figure 1.1 donne la structure de bandes calculée au laboratoire par la méthode du pseudopotentiel empirique local pour les deux directions cristallines principales  $\langle 100 \rangle$  et  $\langle 111 \rangle$  [1]. La référence en énergie est prise au bas de la bande de valence. La première bande de conduction présente un minimum au point  $\Gamma$  ainsi que deux vallées satellites aux points X et L à des énergies égales respectivement à 2,03 eV et 1,82 eV. Ces valeurs d'énergie sont généralement plus élevées que celle des niveaux quantiques fondamentaux des structures à effets tunnel sur lesquels nous travaillerons.

Par conséquent, nous pourrions négliger très souvent les transferts intervallées dans le GaAs et considérer que la population électrique se trouve majoritairement dans la vallée  $\Gamma$ .

La figure 1.2 donne les courbes isoénergies dans le plan  $\Gamma XK$  pour la première bande de conduction. On constate qu'au voisinage du point  $\Gamma$  pris comme origine, les

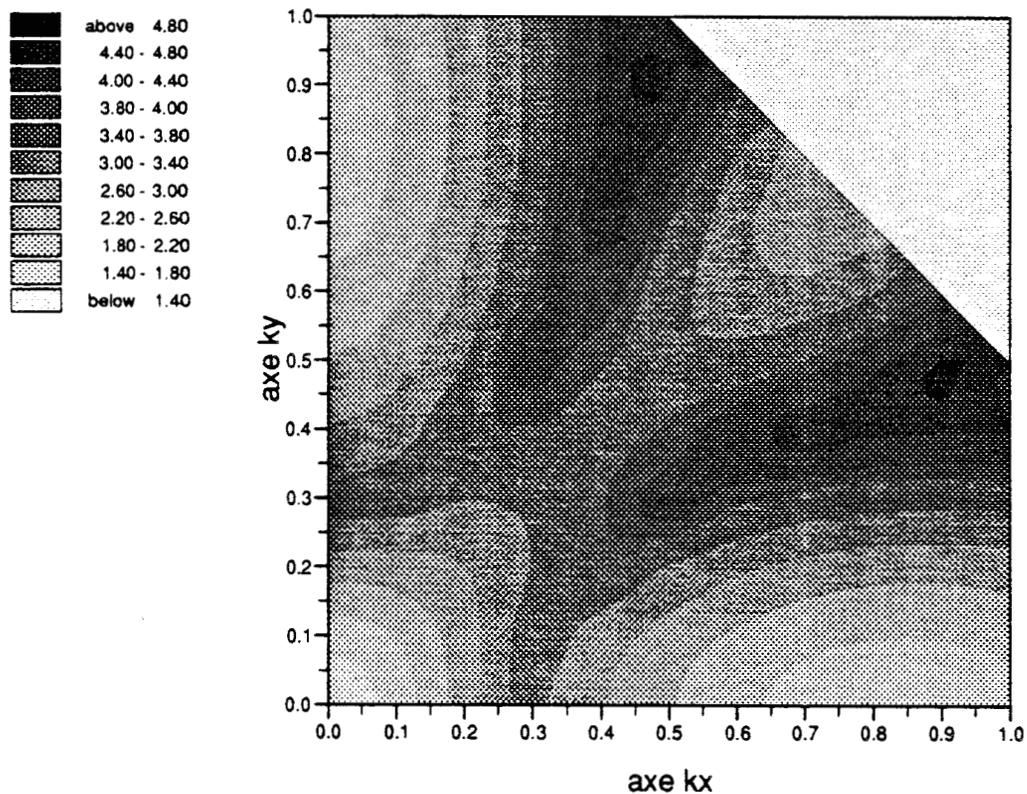


Figure 1.2 : Courbes isoénergie dans le plan  $\Gamma X K$  pour la première bande de conduction du GaAs. Le point  $\Gamma$  est pris comme origine.

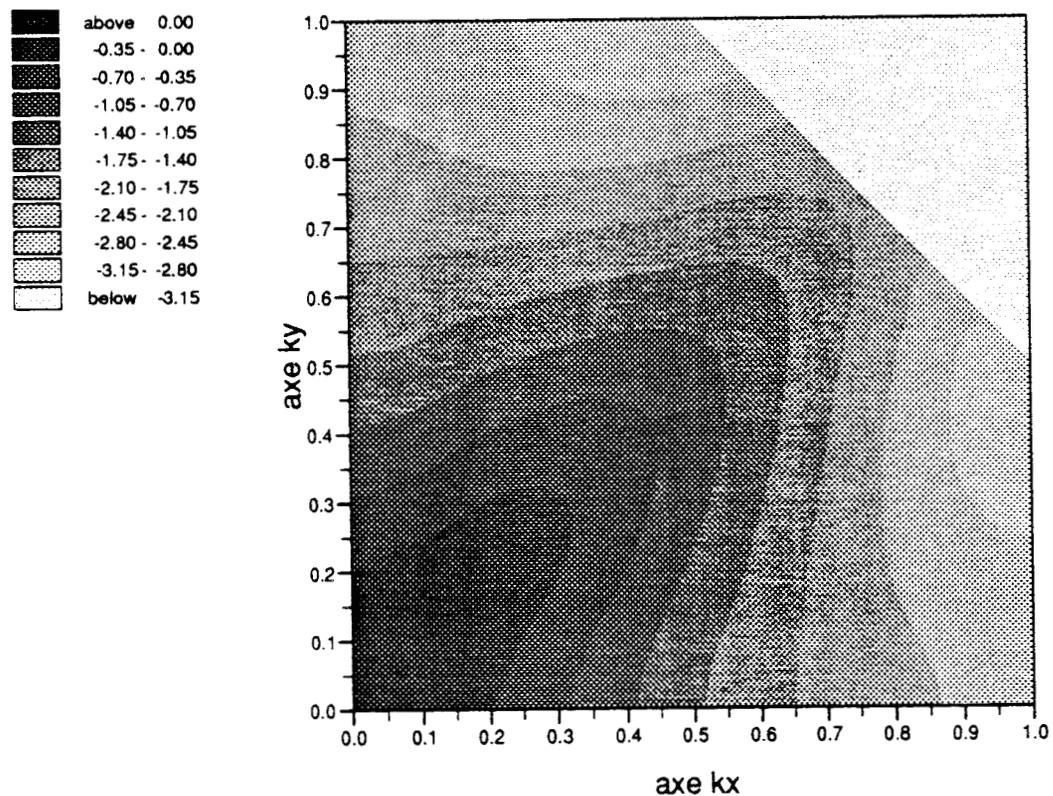


Figure 1.3 : Courbes isoénergie dans le plan  $\Gamma X K$  pour la première bande de valence (2 fois générée) du GaAs.

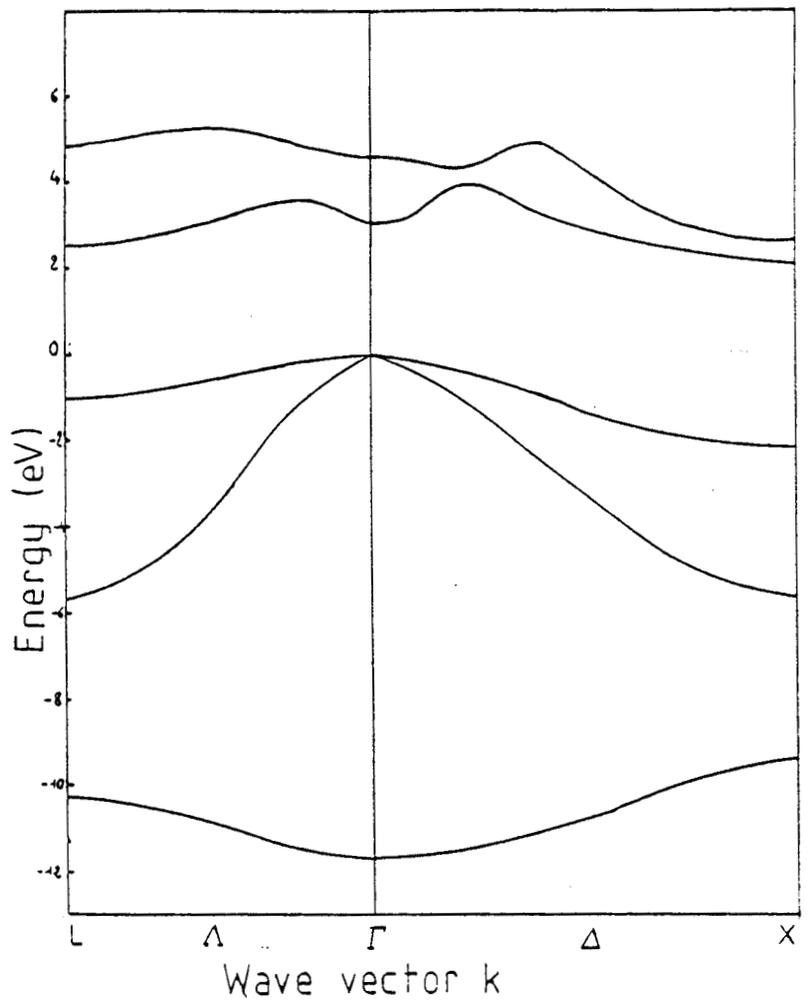


Figure 1.4 : Structure de bandes de l'AlAs dans les directions cristallines  $\Delta$  et  $\Lambda$  et calculées par la méthode du pseudopotentiel empirique local.

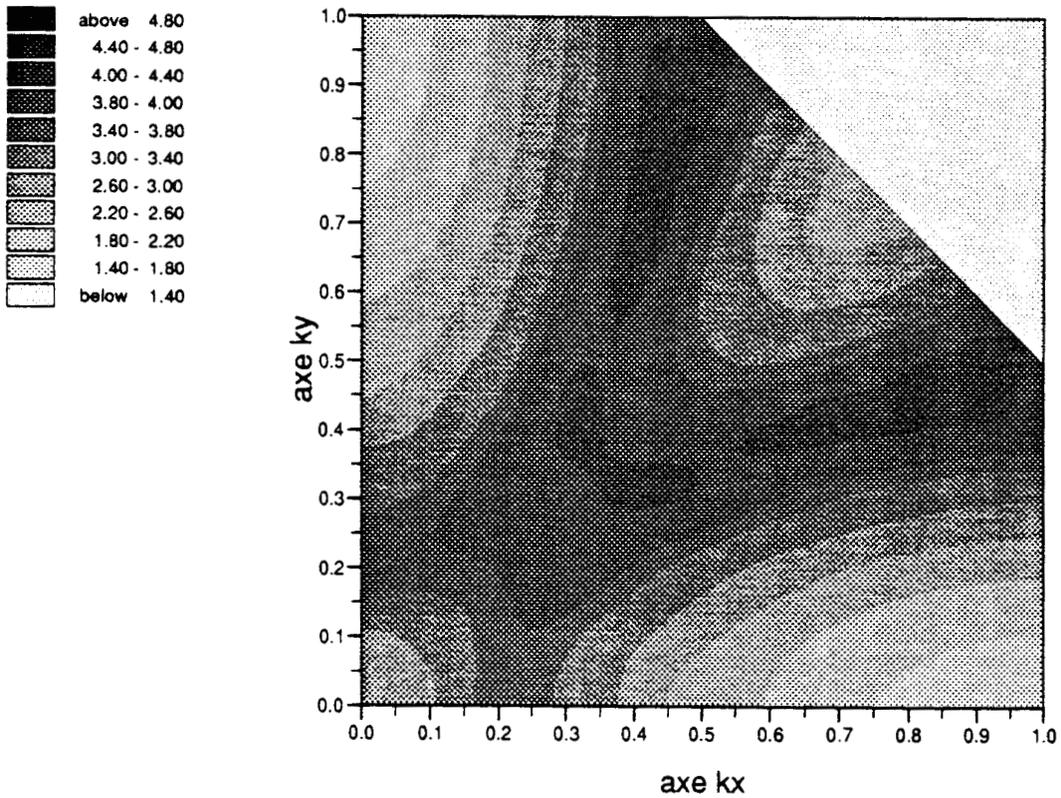
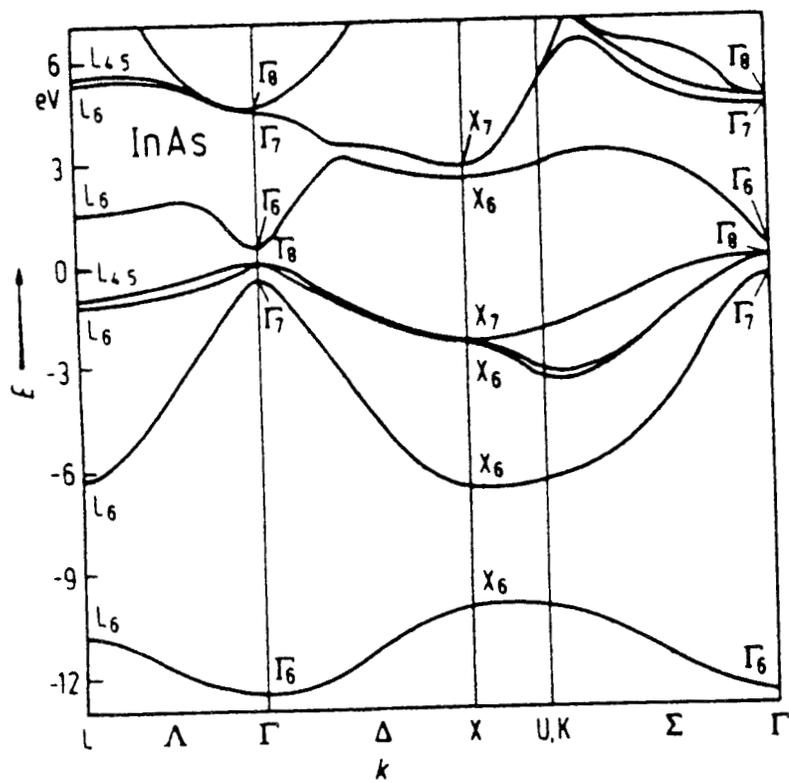


Figure 1.5 : Courbes isoénergie dans le plan  $\Gamma X K$  pour la première bande de conduction de l'AlAs dans le plan  $\Gamma X K$ .



**Figure 1.6 :** Structure de bandes de l'InAs dans les directions cristallines  $\Delta$  et  $\Lambda$ .  
D'après la référence 2.

courbes à énergie constante sont relativement isotropes. La masse effective de l'électron prend alors une valeur proche de la valeur expérimentale égale à 0,067. Par contre les relations de dispersion au voisinage du point X de coordonnées  $kx = 1$   $ky = 0$   $kz = 0$  sont fortement anisotropes.

Les masses longitudinale et transversale sont respectivement égales à 1,3 et 0,23.

Le même type de résultat est reporté en figure 1.3 pour la bande de valence. En raison des simplifications introduites dans le calcul, les bandes des trous lourds et des trous légers sont dégénérées. Les courbes isoénergies sont anisotropes même au voisinage du bas de la bande de valence située au point  $\Gamma$ .

### 1.1.1.2 AlAs

Si l'on s'intéresse maintenant au matériau AlAs on obtient les résultats reportés figure 1.4 pour les deux directions cristallines  $\Delta$  et  $\Lambda$ . Le point  $\Gamma$  se situe à près de 3 eV au dessus de la bande de valence et le minimum d'énergie se situe à présent au point X à 2,168 eV. Ce passage en gap indirect consécutif à la substitution du Gallium par l'Aluminium constitue une difficulté théorique très importante pour le traitement de l'effet tunnel dans le matériau AlAs. Nous verrons cependant que pour les applications composants le transport de la vallée  $\Gamma$  est prédominant et qu'ainsi le choix de la masse effective est moins équivoque.

On peut noter d'autre part que la valeur importante du gap direct conduit à une masse effective importante qui vaut alors 0,15. La définition de la masse effective dans la vallée X se heurte, comme dans le cas du GaAs, à l'existence d'une anisotropie importante illustrée sur la figure 1.5 où sont reportées les isoénergies dans le plan  $\Gamma X K$ .

La relation  $m^* = \frac{\hbar^2}{\frac{\partial^2 E}{\partial k^2}}$  donne alors pour la direction  $\Gamma X$   $m_{xt} = 1,1$  et pour la direction  $\Gamma K$   $m_{xt} = 0,19$ .

### 1.1.1.3 InAs

Si on remplace l'Aluminium par de l'Indium on provoque une diminution très importante de la bande interdite comme le montre la figure 1.6 qui précise les variations énergie vecteur d'onde dans les deux directions cristallines  $\langle 100 \rangle$  et  $\langle 111 \rangle$ . Ce résultat est obtenu à partir d'un calcul de pseudopotentiel non local [2]. Le gap direct



formé par la différence en énergie entre les points  $\Gamma_{6C}$  et  $\Gamma_{8V}$  est de 0,35 eV. Les énergies élevées des vallées satellites les rendent inaccessibles.  $E(L_{6C})$  vaut 1,53 eV et  $E(X_{6C})$  est égal à 2,28 eV. Elles ne seront donc pas prises en compte dans la description du transport dans l'InAs. La masse effective dans la vallée  $\Gamma$  est très faible, de l'ordre de 0,022. Les effets d'une masse aussi légère se feront sentir dans le calcul des densités d'état et dans la cohérence du transport.

## 1.2.2 Matériaux binaires à base d'Antimoine

La filière à base d'Antimoine est relativement moins courante que la filière à base d'Arsenic. Elle rencontre cependant un intérêt croissant pour l'étude de l'effets tunnel interbande et pour ses potentialités dans les applications très haute fréquence notamment pour la réalisation d'oscillateurs submillimétriques [3].

### 1.1.2.1 GaSb

La structure de bande du matériau GaSb est donnée en figure 1.7 [2]. Le gap est direct avec une largeur de bande interdite  $E(\Gamma_{6C}) - E(\Gamma_{8V})$  égale à 0.86 eV. Le positionnement des vallées satellites est respecté avec une vallée  $L$  qui se situe à 1,22 eV du bas de la bande de conduction. La masse effective associée à la vallée  $\Gamma$  est de 0,042. En dépit de ces différences quantitatives l'allure des branches de dispersion est comparable à celle du GaAs.

### 1.1.2.2 AlSb

La substitution du Gallium par l'Aluminium conduit au passage en gap indirect dont la valeur est de l'ordre de 1,6 eV figure 1.8. La vallée  $\Gamma$  est rejetée à 2,32 eV au dessus de la bande de valence.

Comme pour l'AlAs les phénomènes de transport peuvent se partager entre les vallées indirecte et directe et entraîner une incertitude très grande sur les valeurs de masse effective à utiliser. Quoiqu'il en soit une valeur quasi-isotrope de 0,12 peut être utilisée pour la masse effective dans la vallée  $\Gamma$ .

Notons finalement que les vallées  $\Gamma$  et  $L$  se situent par rapport au bas de la bande de valence  $\Gamma_{15v}$  à des énergies sensiblement égale puisque  $\Gamma_{15v} - L_{1C}$  vaut 2.21 eV [2].

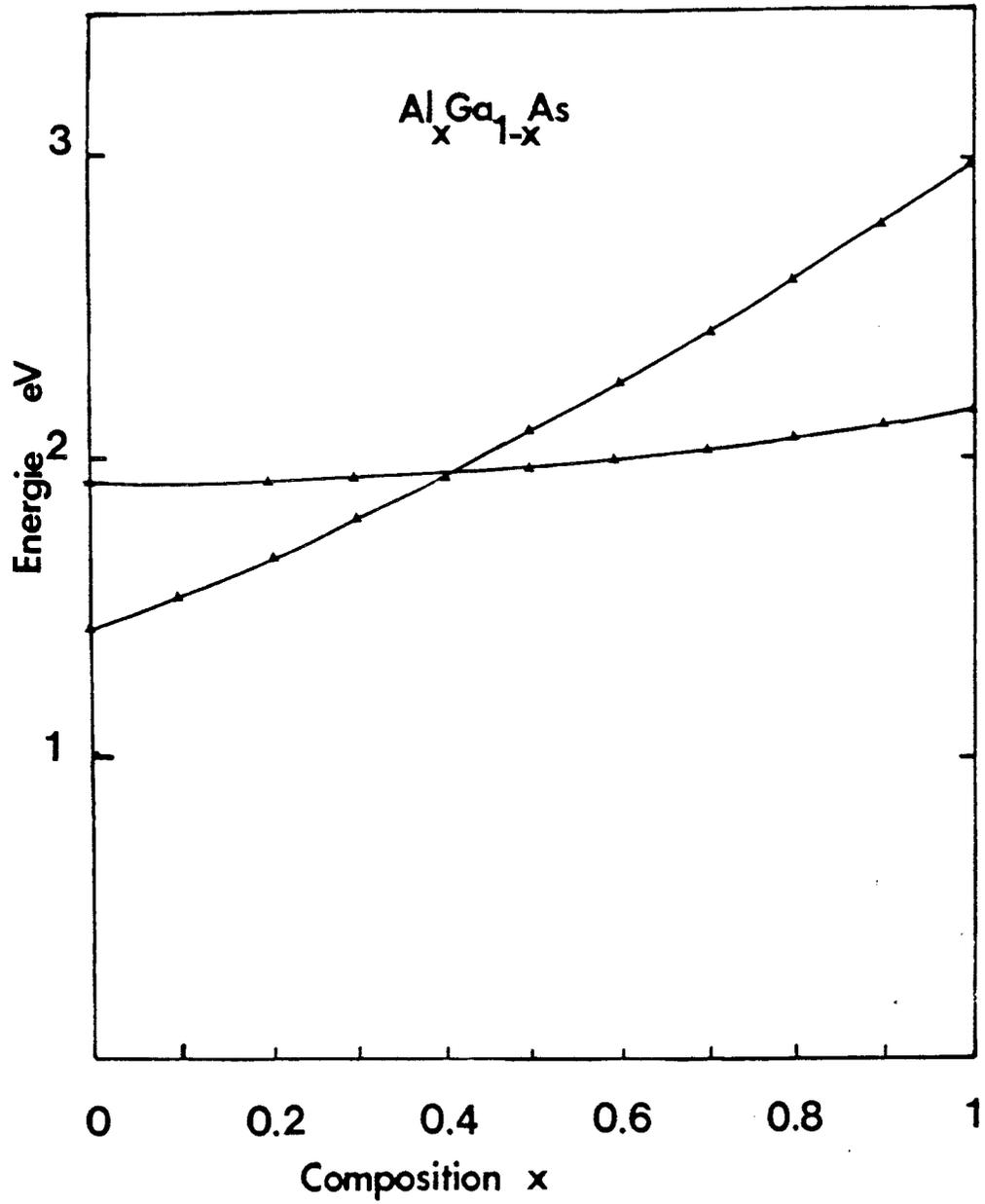


Figure 1.9 : Positionnement en énergie des vallées  $\Gamma$  et  $X$  du matériau  $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$  en fonction du pourcentage en Aluminium.

### 1.2.3 Matériaux ternaires

L'introduction d'un troisième et même d'un quatrième atome dans les matériaux binaires permet de faire varier de façon graduelle les constantes de réseaux et les valeurs de bande interdite. Les matériaux quaternaires sont utilisés dans quelques applications bien spécifiques et nous nous intéresserons surtout aux matériaux ternaires. Le calcul de la structure de bande peut dans ce cas être effectué dans l'hypothèse d'un cristal virtuel. L'électron est alors soumis à un potentiel moyen obtenu après pondération des potentiels élémentaires, correspondant aux matériaux binaires, par la concentration de l'élément substituant.

Une telle démarche a été utilisée au laboratoire [1]. Nous précisons ici les variations des bas de bande de conduction et des masses effectives de l'électron en fonction de la composition des matériaux.

#### 1.1.3.1 $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$

La figure 1.9 donne le positionnement en énergie des vallées  $\Gamma$  et  $X$  en fonction du pourcentage en Aluminium. Le passage gap direct-gap indirect, qui correspond au croisement entre les vallées  $\Gamma$  et  $X$  se produit pour une concentration d'Aluminium de l'ordre de 0,43. Une valeur de 37 % est actuellement adoptée pour la création du cross-over. De manière quantitative les variations des bandes interdites sont données par [4].

$$E_{g\Gamma} = 1,424 + 1,247x \quad \text{pour} \quad 0 \leq x \leq 0,45$$

$$E_{g\Gamma} = 1,424 + 1,247x + 1,147(x - 0,45)^2 \quad \text{pour} \quad 0,45 \leq x \leq 1$$

$$E_{gX} = 1,9 + 0,125x + 0,143x^2$$

$$E_{gL} = 1,708 + 0,642x$$

La référence en énergie est prise au sommet de la bande de valence.

Les relations donnant les masses de densité d'états pour les électrons ont pour expression :

$$m_{\Gamma} = 0,067 + 0,083 x$$

$$m_X = 0,85 - 0,14 x$$

$$m_L = 0,56 + 0,1 x$$

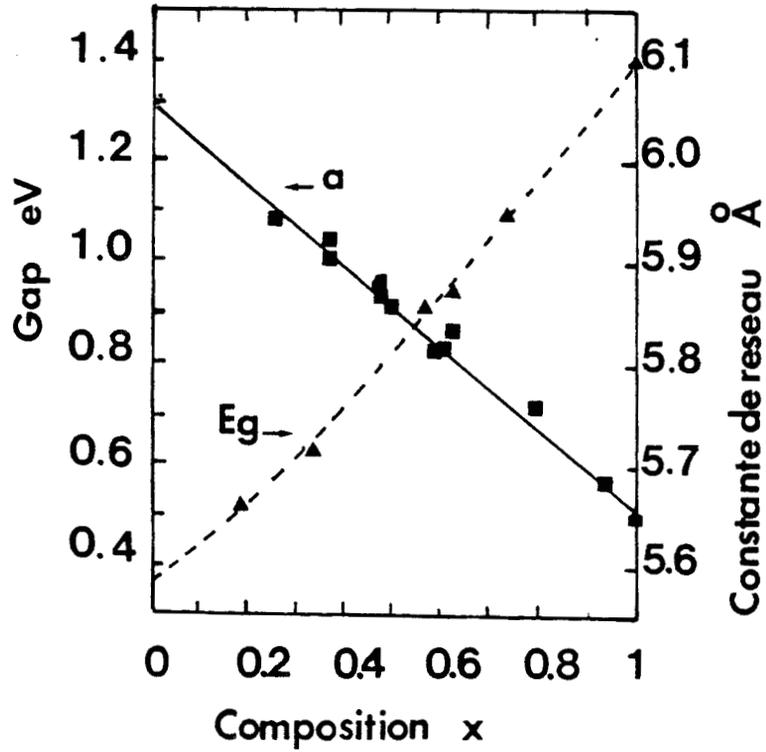


Figure 1. 10 : Evolution de la bande interdite et de la constante de réseau du matériau  $Ga_xIn_{1-x}As$  en fonction de la concentration  $x$  en Gallium. D'après la référence 5.

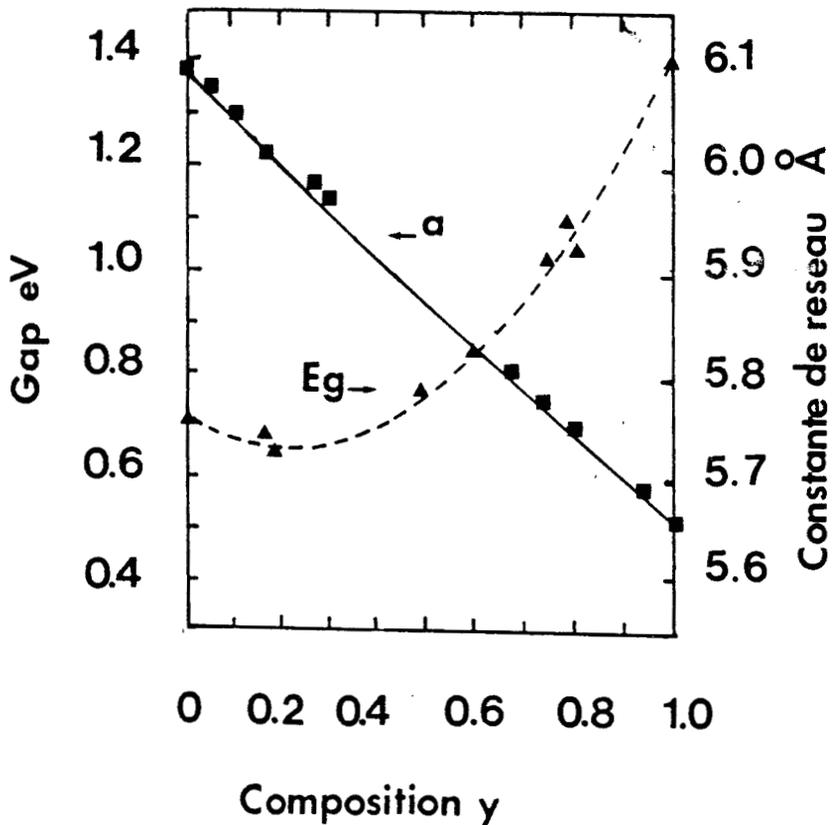


Figure 1. 11 : Evolution de la bande interdite et de la constante de réseau du matériau  $GaSb_{1-y}As_y$  en fonction de la concentration  $y$  en Arsenic. D'après la référence 5.

Le paramètre de réseau,  $a$ , suit quant à lui une variation linéaire en fonction de  $x$ .

$$a = 5,6533 + 0,0078 x$$

Cette relation montre que la constante de maille est quasi-constante quelle que soit la concentration en Aluminium introduite.

### 1.1.3.2 $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}$

Les évolutions du gap et de la constante de réseau en fonction de la concentration en Gallium des matériaux  $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}$  sont illustrées sur la figure 1.10. [5]

Le passage entre les deux valeurs extrêmes de  $E_g$  obtenues pour l'InAs (0,36 eV) et pour le GaAs (1,42 eV) se fait suivant une loi faiblement quadratique du type [2].

$$E_g(x) = 0,324 + 0,7x + 0,4x^2 \quad 300K$$

La diminution de la constante de réseau a lorsque le matériau  $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}$  présente un enrichissement en Gallium est quasi-linéaire. La différence relative  $\frac{a_{\text{InAs}} - a_{\text{GaAs}}}{a_{\text{GaAs}}}$  des constantes de réseau entre les matériaux GaAs et InAs est de l'ordre de 8 %.

Nous verrons au paragraphe 1.2.2 qu'en raison de cette désadaptation de maille importante, le pourcentage d'Indium devra être inférieur à 26 % lorsque le matériau  $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  sera associé au GaAs.

### 1.1.3.3 $\text{GaSb}_{1-y}\text{As}_y$

L'évolution de la bande interdite en fonction de la composition  $y$  en Arsenic dans les matériaux  $\text{GaSb}_{1-y}\text{As}_y$  est reportée sur la figure 1.11 [5]. La transition entre le matériau GaSb et le matériau GaAs est fortement non linéaire et peut être décrite suivant une loi quadratique du type  $E_g(y) = 1,43 - 1,9y + 1,2y^2$  [2].

Les variations du paramètre de maille sont tout à fait similaires à celles relevées pour le système  $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}$ .

On retrouvera par conséquent les mêmes problèmes d'adaptation posés par le matériau étudié précédemment.

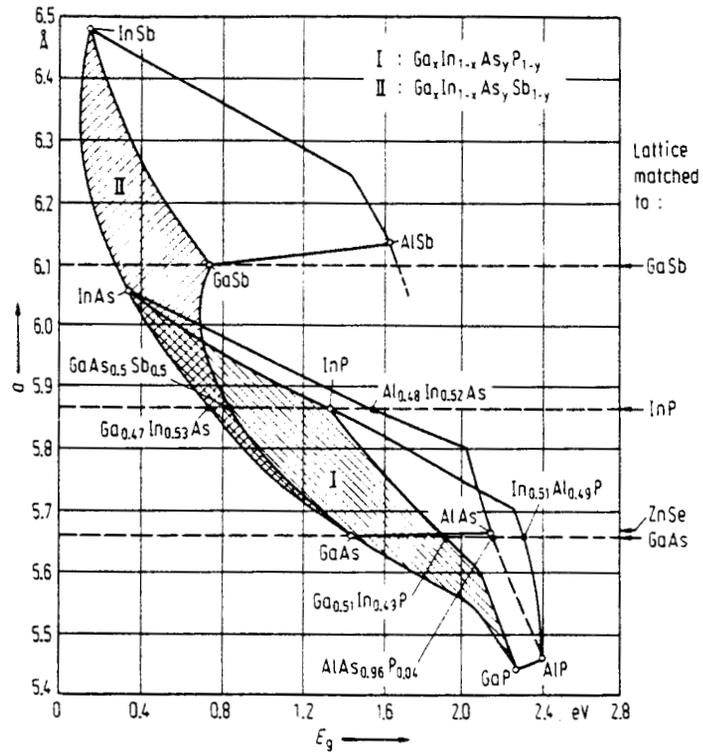


Figure 1.12 : Paramètre de maille en fonction de la valeur de bande interdite pour différents matériaux semiconducteurs III - V et leurs alliages.

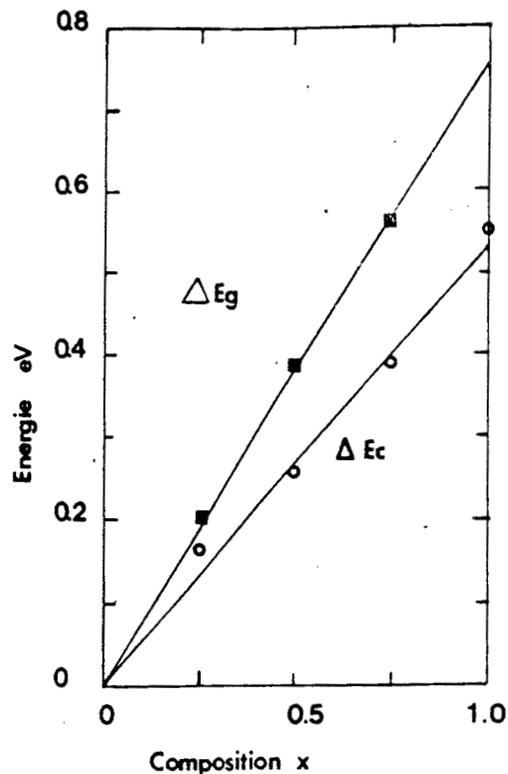


Figure 1.13 : Discontinuité de bande de conduction et de bande interdite pour l'hétérostructure  $In_{0,52}Ga_{0,48}As/In_{0,52}(Ga_{1-x}Al_x)_{0,48}As$  en fonction de la concentration en Aluminium  $x$  à 300 K. D'après la référence 6.

## 1.3 Hétérojonctions

L'empilement de deux matériaux semiconducteurs de caractéristiques différentes donne lieu à un réarrangement des bandes de conduction et de valence. Le paramètre essentiel de l'hétérostructure ainsi créée est la répartition de la discontinuité de bande interdite entre la bande de conduction et la bande de valence.

Sur le plan de la réalisation pratique, l'association de matériaux semiconducteurs est conditionnée par les différences relatives entre les paramètres de maille qui jouent un rôle prépondérant dans la qualité cristalline des hétérostructures. Nous étudions dans ce paragraphe les diverses hétérojonctions de matériaux qui pourront être épitaxiées sans création de défauts structuraux.

### 1.3.1 Matériaux adaptés ou faiblement désadaptés

La figure 1.12 donne les variations du gap en fonction du paramètre de maille pour les composés binaires III-V les plus utilisés ainsi que pour leur alliages [2].

Le système  $Ga_{1-x}Al_xAs$  présente en bon accord de maille avec le GaAs puisque la variation relative des paramètres de maille  $\frac{a_{Ga_{1-x}Al_xAs} - a_{GaAs}}{a_{GaAs}}$  est au plus de l'ordre de 0,1 %.

L'adaptation en maille sur l'InP est réalisée pour une large gamme de quaternaires  $(In_{0,52}Al_{0,48})_z(In_{0,53}Ga_{0,47})_{1-z}As$  situés entre les matériaux ternaires  $Ga_{0,47}In_{0,53}As$  et  $Al_{0,48}In_{0,52}As$ .

Si on s'intéresse aux discontinuités il est maintenant bien établi, que la discontinuité de bande de conduction entre le matériau GaAs et le ternaire  $Ga_{1-x}Al_xAs$  correspond à 60 % de la discontinuité de bande interdite lorsque le pourcentage d'Aluminium est inférieur à 40 %. Au delà du crossover, cette proportion est conservée pour le calcul de la discontinuité de la bande de conduction  $\Gamma$ . Ainsi pour des hétérojonction GaAs/AlAs, le  $\Delta Ec$  est pris égal à 930 meV.

Les variations des discontinuités  $\Delta Ec$  et  $\Delta Eg$  pour le système  $In_{0,52}Ga_{0,48}As$   $(In_{0,52}(Ga_{1-x}Al_x)_{0,48}As)$  en fonction de la concentration en Aluminium sont repro-

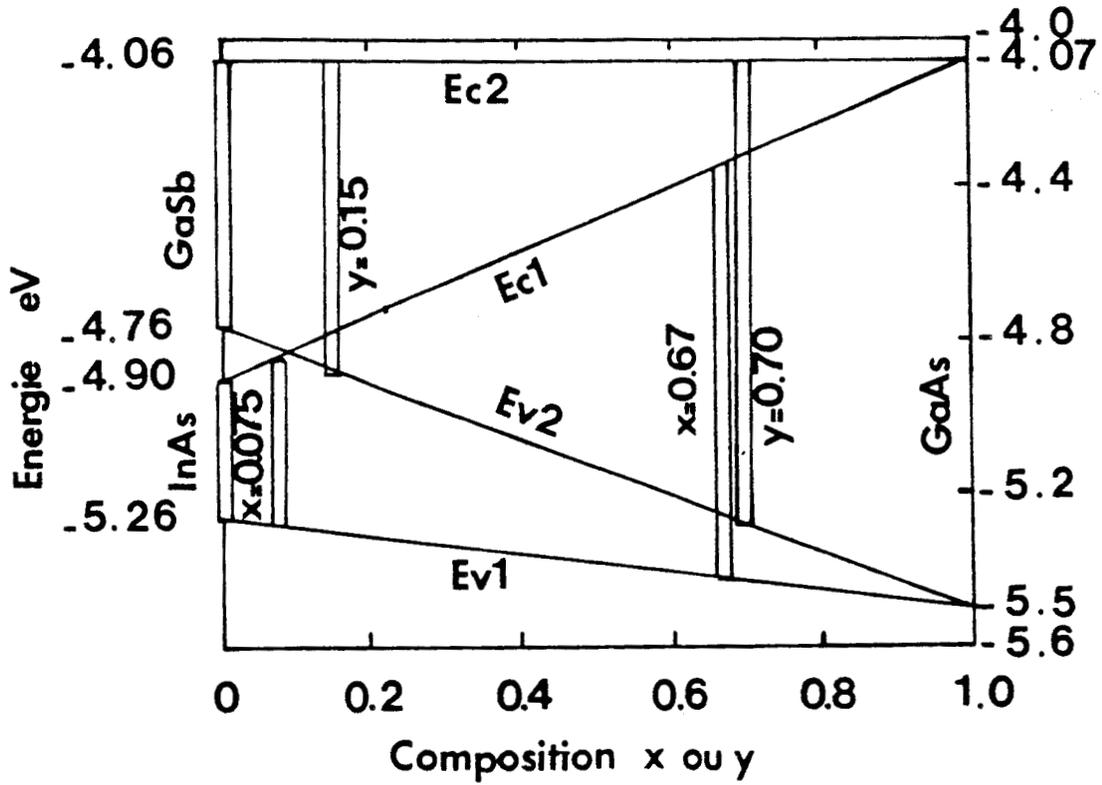


Figure 1.14 : Evolution des bandes de conduction et de valence des matériaux  $In_{1-x}Ga_xAs$  et  $GaSb_{1-y}As_y$  en fonction du pourcentage en Indium ou en Arsenic.

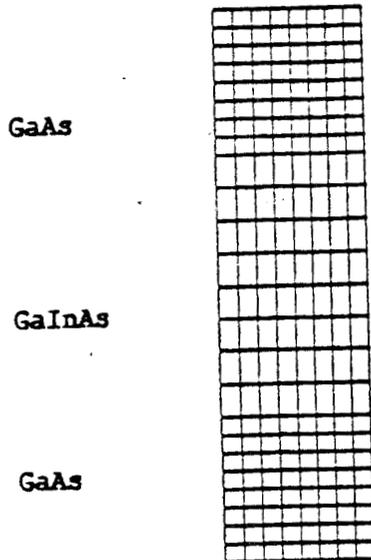


Figure 1.15 : Schématisation d'une croissance pseudomorphique de GaInAs sur un substrat GaAs.

duites sur la figure 1.13. La discontinuité de bande de conduction dépend linéairement du pourcentage d'Aluminium à travers la relation  $\Delta E_c = 0,53x$  et on considère aussi qu'elle correspond à 72 % de la discontinuité de la bande interdite. Ces résultats ont été déterminés par l'analyse de la composante de courant thermoionique dans des structure simple barrière [6]. Les bandes de conduction et de valence des hétérojonctions réalisées avec les matériaux  $In_{1-x}Ga_xAs$  et  $GaSb_{1-y}As_y$  s'agencent de deux façons différentes suivant les valeurs de  $x$  et  $y$  comme le montre la figure 1.14 [7].

Pour de faibles concentrations d'alliages inférieurs à 0,1 la bande de conduction du matériau  $In_{1-x}Ga_xAs$  et la bande de valence du matériau  $GaSb_{1-y}As_y$  se recouvrent.

Dans le cas où  $x = y = 0$  on obtient une hétérojonction InAs/GaSb pour laquelle la différence  $EV_2 - EC_1$  atteint la valeur maximale de 150 meV. Ce recouvrement diminue au fur et à mesure que les concentrations d'alliage augmentent. Au delà du croisement de  $EC_1$  et  $EV_2$  la bande de valence du GaSbAs se rapproche progressivement de la bande de valence du matériau GaInAs.

L'hétérojonction InAs/AlSb présente une configuration similaire où la bande de valence du matériau AlSb se situe à 60 meV au dessus de la bande de valence du matériau InAs. Les discontinuités de bande de conduction  $\Gamma\Gamma$  et  $\Gamma X$  sont respectivement égales à 1,8 eV et à 1,2 eV.

### 1.3.2 Matériaux désadaptés en maille

Lorsque deux matériaux de paramètres de maille légèrement différents sont placés en contact, il y a création de dislocations à l'interface. On réussit cependant à obtenir une épitaxie cohérente ou pseudomorphique, pour laquelle la désadaptation est accommodée de façon élastique, si l'épaisseur des couches est en dessous d'une valeur critique. Van der Merwe [8] a montré que lorsque la désadaptation était de 9 % l'épaisseur critique atteignait une monocouche atomique. Le modèle de Matthew [9] prévoit pour une telle valeur d'épaisseur critique une désadaptation de l'ordre de 4 %.

Lors de la croissance le substrat impose son paramètre de maille aux couches épitaxiées. Si le substrat est épais, le réseau cristallin du matériau désadapté se déforme pour atteindre dans le plan de l'interface un paramètre de maille commun au support d'épitaxie.

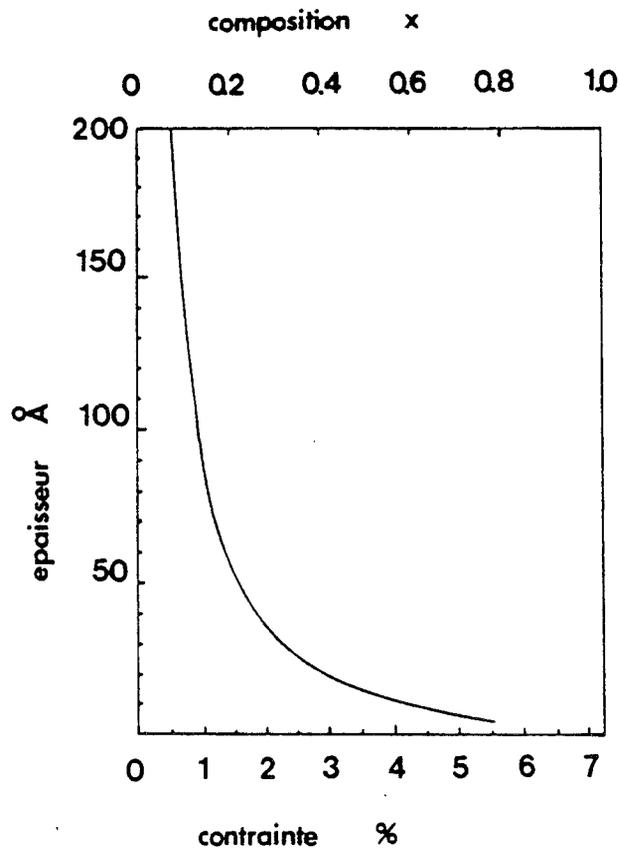


Figure 1.16 : Evolution de l'épaisseur critique de  $Ga_{1-x}In_xAs$  en fonction du pourcentage d'Indium dans le cas de l'hétérostructure  $Ga_{1-x}In_xAs/GaAs$ .

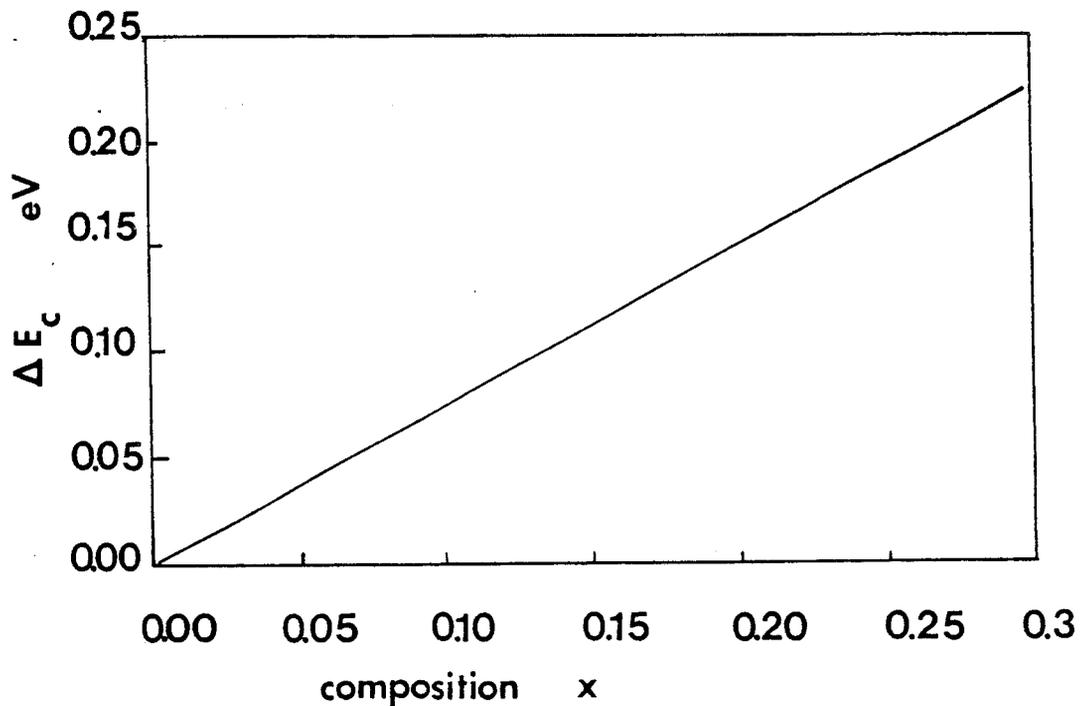


Figure 1.17 : Variation de la discontinuité de bande de conduction de l'hétérostructure  $GaAs/In_xGa_{1-x}As$  en fonction de la composition en Indium.

Ce processus s'accompagne d'un stockage d'énergie proportionnel à l'épaisseur des couches contraintes et, au delà d'une épaisseur critique, l'énergie emmagasinée est suffisante pour qu'il y ait création de défauts sous forme de dislocations d'interfaces. Sur la figure 1.15 est représenté le réarrangement du réseau cristallin du GaInAs lorsqu'il est épitaxié sur du GaAs. Le paramètre de maille du ternaire est supérieur à celui du GaAs et la couche GaInAs est en compression. Il en résulte un étirement de la maille cristalline dans la direction perpendiculaire à l'interface. Pour un pourcentage d'Indium égal à  $x = 0,15$  l'augmentation du paramètre de maille,  $a_{\perp}$ , est de 2 % [10].

La longueur critique  $L_C$  garantissant une contrainte purement élastique décroît très rapidement lorsque le pourcentage d'Indium augmente comme le montre la figure 1.16 [11] qui reporte les valeurs théoriques de  $L_C$  calculées avec le modèle de Matthews. On obtient ainsi pour  $x = 0,15$  une longueur  $L_C$  de l'ordre de 200 Å alors qu'avec  $x = 0,25$   $L_C$  n'est plus que de l'ordre d'une trentaine d'Angströms. Nous verrons que ce dernier pourcentage constitue une limite dans les applications tunnel résonnant basées sur les structures AlAs/GaInAs épitaxiées sur GaAs. Les discontinuités de bande de conduction de l'hétérostructure  $GaAs/In_xGa_{1-x}As$  sont données sur la figure 1.17. Des valeurs supérieures à 100 meV sont obtenues pour  $x > 0,2$ .

Lorsque l'hétérojonction  $AlAs/Ga_{0,42}In_{0,58}As$  est épitaxiée sur un substrat InP toute la contrainte due au désaccord de maille de 3,7 % entre l'AlAs et InP se reporte sur les barrières d'AlAs dont les épaisseurs sont toujours de l'ordre de quelques monocouches atomiques. La contrainte  $\frac{a_{AlAs} - a_{InP}}{a_{InP}}$  est négative et la couche d'AlAs est en tension. Des calculs effectués dans le cadre des liaisons fortes ont montré que cette contrainte abaisse la discontinuité de bande de conduction  $\Gamma$  de 0,166 eV par rapport à la valeur correspondant à 60 % de la différence des bandes interdites. Le minimum de la bande X dans l'AlAs est remonté de 0.148 eV et la masse effective de l'électron dans l'AlAs vaut 0.14 au lieu de 0.15 [12].

### 1.3.3 Structure de bande des simples hétérojonctions

Les différents arrangements pour les bandes de conduction et de valence ainsi que quelques exemples d'hétérojonctions permettant d'y aboutir sont précisés en figure 1.18. Dans le premier cas, le matériau de plus grande bande interdite constitue une barrière de potentiel pour les électrons et les trous. Dans le second cas, la barrière de potentiel pour les trous est réalisée par le matériau à plus faible bande interdite. Le cas *c* correspond quant à lui à une rupture de "gap" et l'hétérojonction est similaire à une homojonction

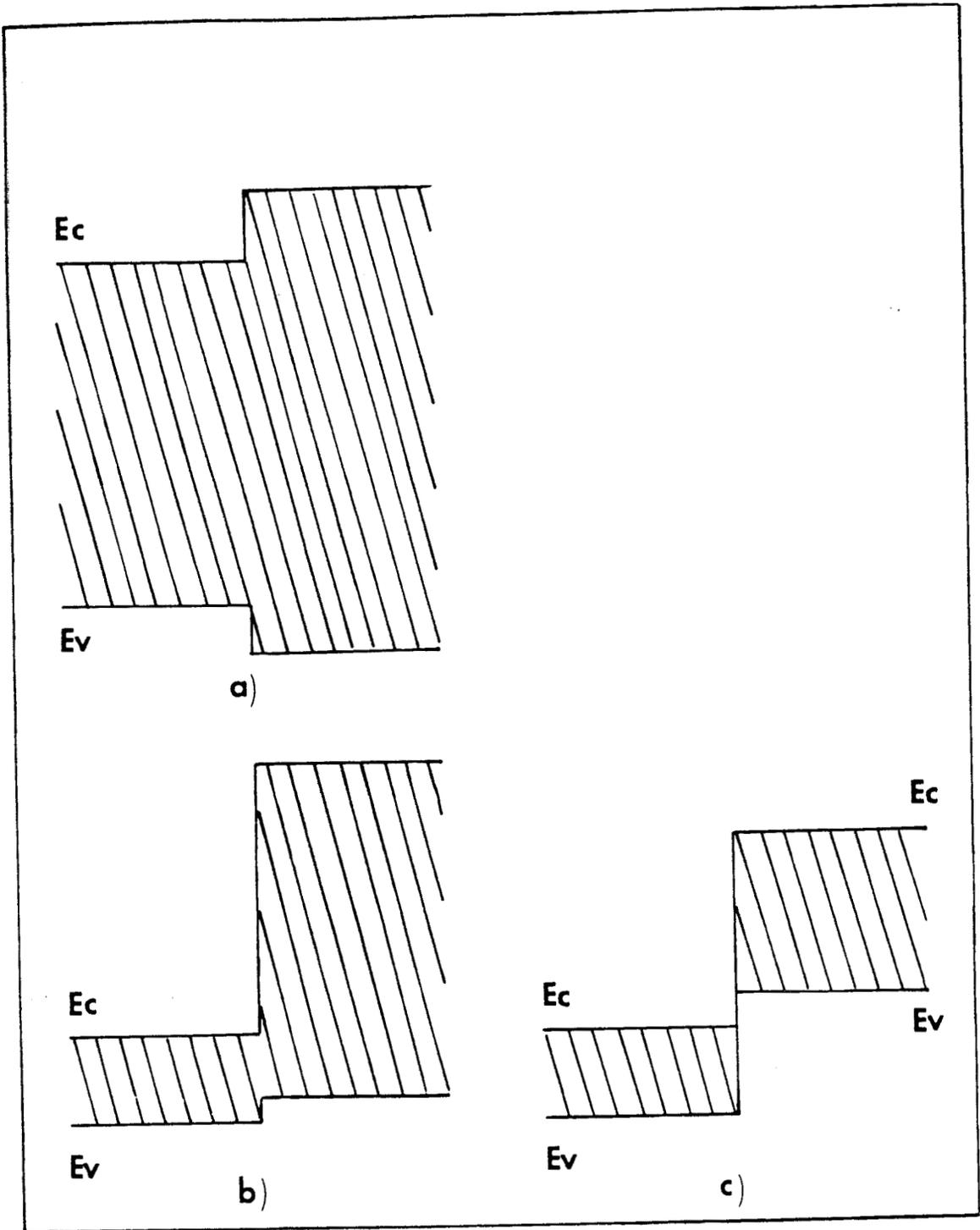


Figure 1.18 : Arrangements des bandes de conduction et de valence dans le cas d'une hétérostructure :

a : hétérostructure  $GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs$

b : hétérostructure  $InAs/AlSb$

c : hétérostructure  $InAs/GaSb$ .

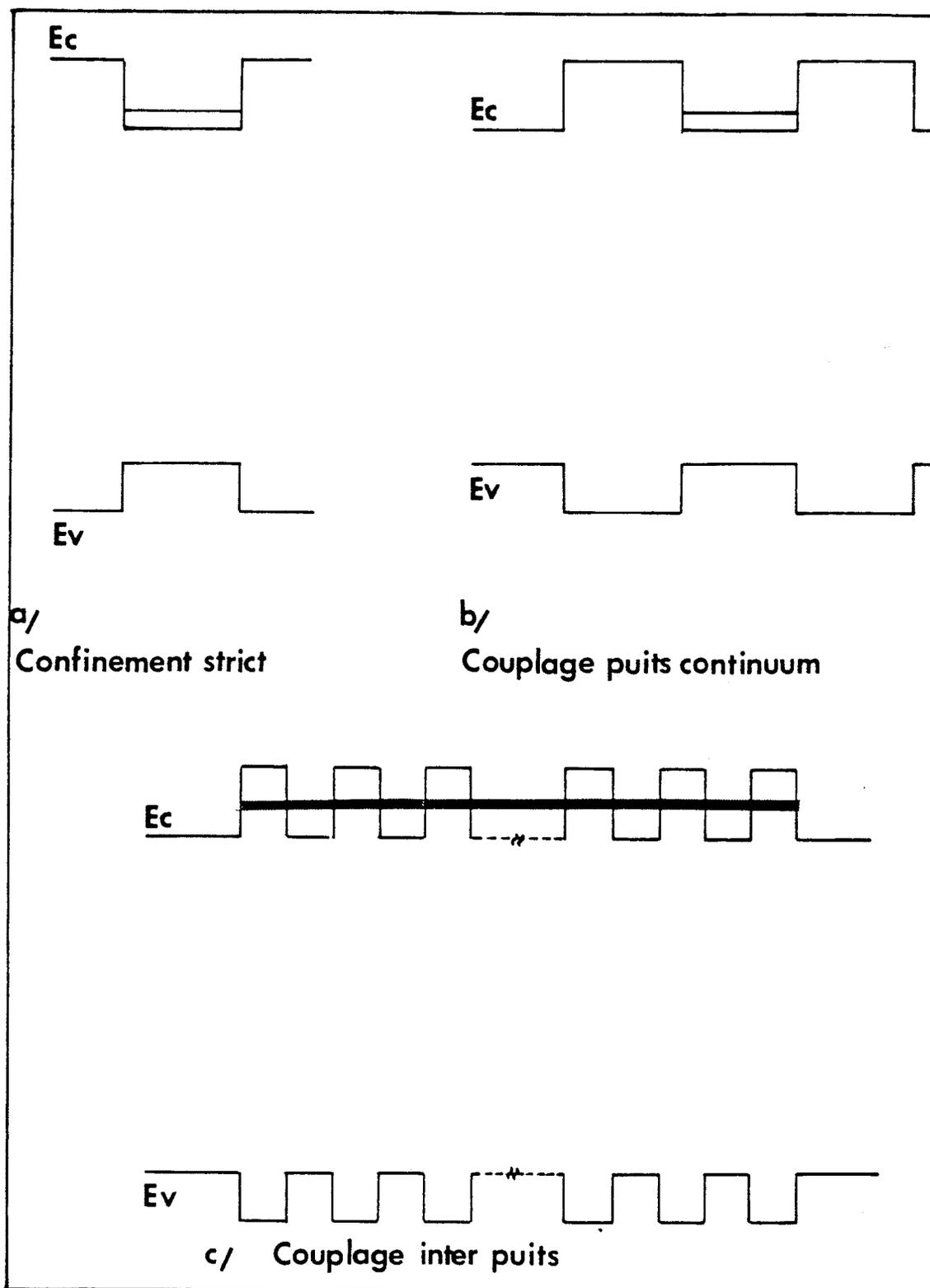


Figure 1.19: Situation de confinement dans le cas des hétérostructures de type I.

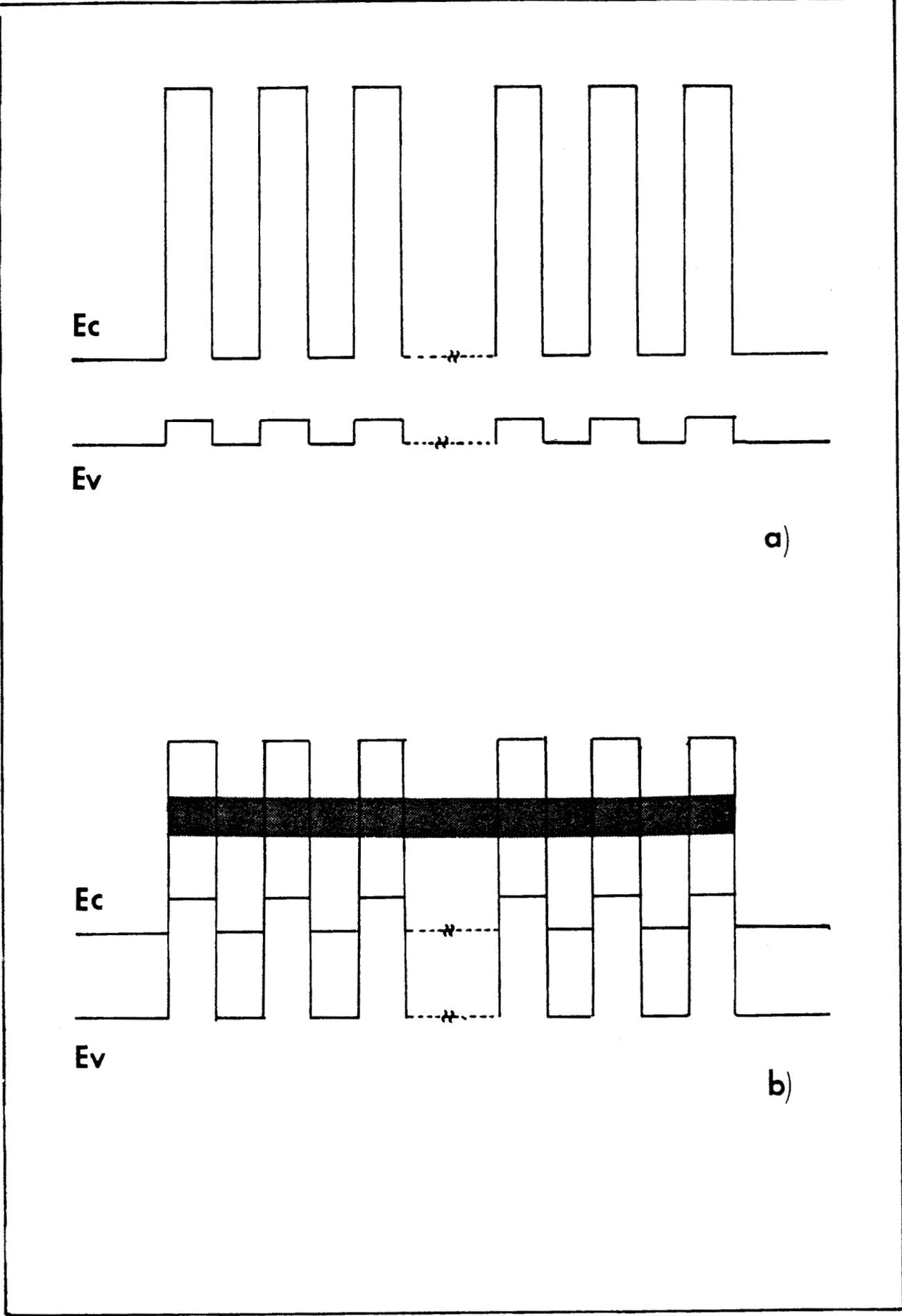


Figure 1.20 : Situation de confinement dans le cas des hétérostructures de type II.

$NP$  où la bande de conduction du matériau I et une partie de la bande de valence du matériau II sont en regard.

## 1.4 Hétérostructures multiples

Les hétérojonctions présentées dans les paragraphes précédents constituent les empilements de base pour la réalisation d'hétérostructures multiples. La juxtaposition de matériaux de "gaps" différents résulte en une succession de barrières et de puits de potentiel pour les porteurs de charges.

Les épaisseurs des matériaux épitaxiés sont de l'ordre de la longueur d'onde de De Broglie associée aux électrons et aux trous et des effets de confinement apparaissent. Ils seront de nature différentes suivant les matériaux utilisés et suivant le nombre d'interfaces.

### 1.4.1 Hétérostructures de type I

La figure 1.19 schématise les différentes situations de confinement que l'on peut rencontrer dans les hétérostructures de type I. La double hétérojonction correspond à une situation de confinement strict. Les porteurs de charge ne peuvent s'échapper du puits par effet tunnel et leur durée de vie sur les niveaux discrets est infinie. On parle dans ce cas d'états liés.

Des barrières de potentiel d'épaisseur finie permettent un couplage entre le continuum et les états localisés du puits. Les niveaux présentent alors un élargissement en énergie et leur durée de vie prend une valeur finie. Les états quantiques sont quasi liés ou métastables. La structure double barrière correspond à ce cas de confinement schématisé en figure 1.19b.

En multipliant les interfaces, on crée soit un multipuits quantique soit un super-réseau. Dans le cas du multipuits quantique les puits sont séparés par des barrières épaisses et présentent le même niveau lié. Seul le superréseau permet d'observer des effets tunnel puisque le couplage interpuits  $y$  est important. Les niveaux quantiques dans les puits sont dispersés et forment une minibande d'énergie dont la position et la largeur dépendent des paramètres de structure (figure 1.19c.)

### 1.4.2 Hétérostructures de type II

Des hétérostructures multiples réalisées notamment à partir de matériaux à base d'Antimoine peuvent conduire soit à un confinement en quinconce (staggered heterostructure) soit à des ruptures de gap (broken gap heterostructure) figure 1.20. Nous retiendrons que pour le premier type d'hétérostructure le passage des électrons à travers la zone interdite se fera à des énergies proches du sommet de la bande de valence du matériau de barrière. L'avantage de la structure à rupture de gap réside dans l'absence de barrière sur la plage d'énergie correspondant au recouvrement des bandes de conduction et de valence. Le confinement dans la bande de valence est alors assuré par l'interface entre les deux matériaux et les niveaux quasi liés constituent un chemin préférentiel pour le tunnel interbande.

## 1.5 Conclusion

L'étude des matériaux semiconducteurs III-V que nous avons présentée est loin d'être exhaustive puisque nous nous sommes seulement intéressés aux matériaux utilisés dans la suite de ce travail. Nous avons pu voir cependant que leurs possibilités d'association sont diverses et conduisent à des situations de confinement variées. Les propriétés élémentaires des matériaux pseudomorphiques ont été esquissées et nous avons laissé de côté les superréseaux contraints. Nous retiendrons seulement qu'une désadaptation de maille supérieure à 1 % n'empêche pas l'épitaxie des structures présentant une bonne qualité cristalline, lorsque les longueurs de couches actives n'excèdent pas une longueur critique. Notre étude va, à présent, porter sur les propriétés de conduction des hétérostructures de complexité croissante. Les aspects technologiques ne seront pas abordés et les simulations seront mises en oeuvre à partir des données matériaux telles que les valeurs de bande interdite, les hauteurs de barrière de potentiel et les masses électroniques.

# Bibliographie

- [1] O. VANBÉSIEN  
Thèse de doctorat de l'Université de Lille I, Avril 1991
- [2] Semiconductors  
Group IV Elements and III V compounds  
Data in Science and Technology  
Springer - Verlag
- [3] E.R. BROWN, C.D. PARKER, CALAWA, MANFRA, CHEN, L.J. MAHONEY,  
W.R. GOODHUE, SODERSTRÔM et TC Mac GILL  
Microwave and Optical Technology Letters, Vol 4 n ° 1 January 5, 1991
- [4] S. ADACHI  
J. A. Phys. 58 (3) 1 August 1985
- [5] H. SAKAKI, L.L. CHANG  
Applied Physics Letters, Vol 31 n ° 3 page 211
- [6] Y. SIGIYAMA, T. IUATA, T. FUJII, Y. NAKATA, S. MUTO, S. HIYAMIZU  
Japanese Journal of Applied Physics  
Vol 25, n ° 8 1986, p. L648-L650
- [7] G.A. SAI HALASZ, R. TSU and L. ESAKI  
Applied Physics Letters, Vol 30, n ° 12 15 june 1977
- [8] VANDER MERWE  
????????????????????????????????
- [9] MATTHEWS  
J. Vac, Sci. Techn. vol 12 n ° 1 January/february 1975

[10] CHARASSE

Thèse de doctorat, Paris 6, Novembre 1985

[11] D.J. ARENT, K. DENEFFE, C. VAN HOOF, J. DEBOECK and G. BORGHS

J. Appl. Phys. 66 (4), 15 august 1989

[12] T. INATO, S. MUTO, Y. NAKATA, S. SASA, T. TUJII, S. HIYAMIZY

Japanese Journal of Applied Physics

Vol 26, n° 8 August 1987, PP L1332-L1334

# Table des matières

<b>2</b>	<b>Transport à travers une simple barrière de potentiel Effet tunnel intrabande</b>	<b>1</b>
2.1	Approche analytique de l'effet tunnel . . . . .	2
2.1.1	Formalisme général . . . . .	3
2.1.2	Dérivation de la transmission par l'approximation WKB . . . . .	5
2.2	Techniques de modélisation de la transmission . . . . .	7
2.2.1	Matrices de Ando . . . . .	7
2.2.2	Matrices de Ricco . . . . .	9
2.2.3	Résolution directe de l'équation de Schrödinger . . . . .	10
2.2.4	Résultats sur barrières nues . . . . .	14
2.2.4.1	Atténuation de la fonction d'onde dans la barrière de potentiel . . . . .	14
2.2.4.2	Application de l'approximation WKB au cas de la simple barrière de potentiel rectangulaire . . . . .	14
2.3	Traitement des zones d'accès . . . . .	17
2.3.1	Phénomène de diffusion . . . . .	17
2.3.1.1	Modélisation . . . . .	17
2.3.1.2	Exemples de résultats . . . . .	18
2.3.2	Prise en compte de la zone d'accumulation . . . . .	19
2.3.2.1	Modélisation . . . . .	19
2.3.2.2	Exemples de résultats . . . . .	22
2.4	Calcul du courant . . . . .	22
2.4.1	Cas des barrières sans espaceurs . . . . .	22
2.4.1.1	Importance des composantes de courant activé thermiquement . . . . .	22

2.4.1.2	Comparaison entre les courants calculés à partir de l'approximation WKB et à partir de la résolution directe de l'équation de Schrödinger . . . . .	23
2.4.2	Comparaison théorie expérience . . . . .	23
2.5	Transparence des barrières électrostatiques . . . . .	25
2.5.1	Détermination des équipotentiels . . . . .	25
2.5.2	Variations du potentiel parallèlement à la grille . . . . .	26

## Chapitre 2

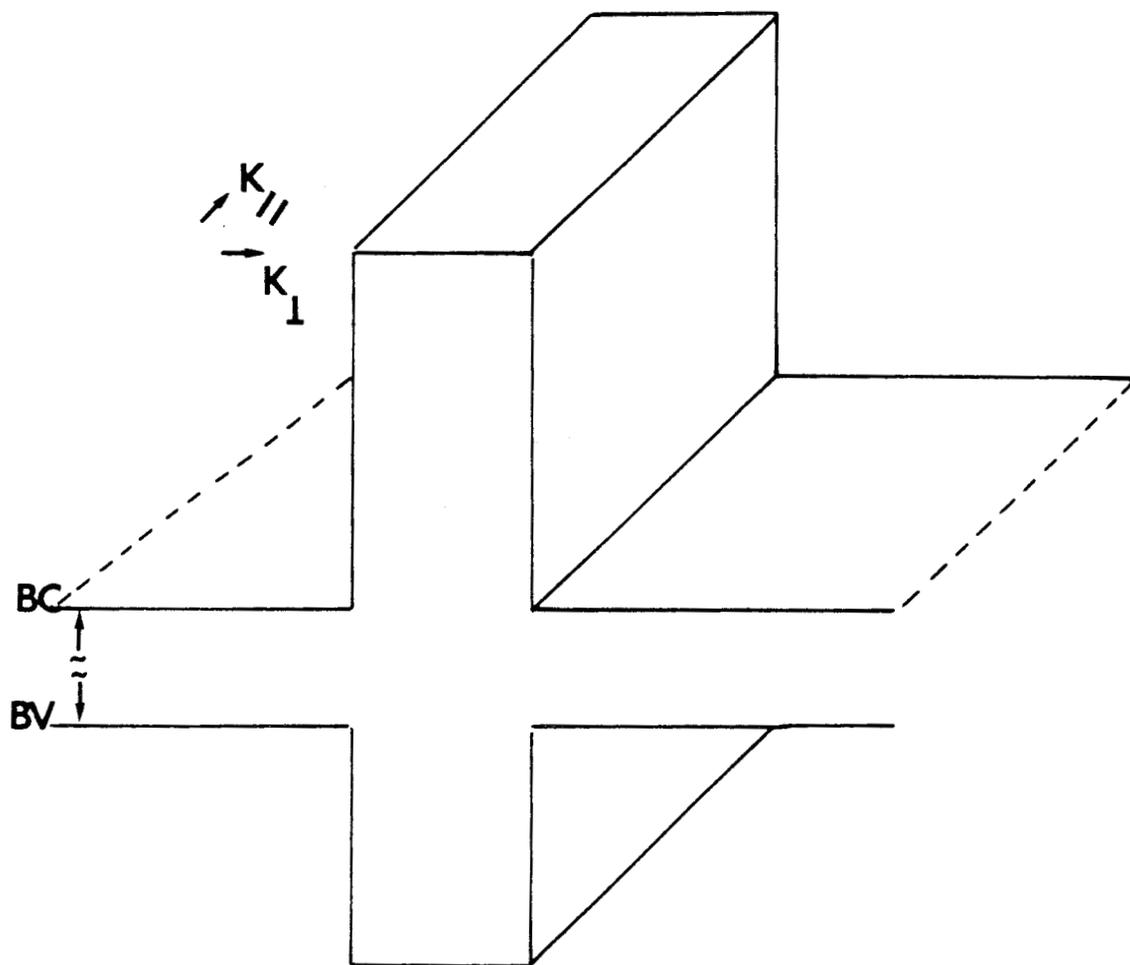
# Transport à travers une simple barrière de potentiel Effet tunnel intrabande

Ce chapitre porte sur l'étude du transport par effet tunnel à travers une simple barrière de potentiel.

Les phénomènes quantiques et les mécanismes de conduction décrits dans le cas de cette "brique" de base seront applicables aux structures plus complexes abordées par la suite.

D'un point de vue technologique, une barrière de potentiel peut être réalisée soit par une modulation de dopage soit par une modulation de matériaux. On peut modifier également dans le cas des nanostructures le potentiel vu par les électrons à l'aide d'une jonction de type Schottky. Ces méthodes permettent une grande diversité dans les formes de potentiel ainsi que dans la hauteur et la largeur des barrières.

Pour décrire le passage par effet tunnel des électrons à travers une barrière de potentiel de configuration quelconque, il faut développer un formalisme très général basé sur la résolution directe de l'équation de Schrödinger indépendante du temps. La nature ondulatoire des électrons sera ainsi prise en compte et la fonction d'onde qui leur est associée sera calculée en tout point de la structure. La probabilité de passage par effet tunnel ou la transmission, pourra alors être déduite pour une énergie donnée. Nous utiliserons ce formalisme pour valider la description de l'effet tunnel à travers



**Figure 2. 1:** Bande de conduction et de valence d'une structure simple barrière à l'équilibre. Les échelles en énergie ne sont pas respectées.

une barrière de potentiel rectangulaire obtenue par l'approximation Wentzel-Brillouin Kramer (WKB). Nous essaierons par ailleurs d'établir quelques règles concernant l'influence des paramètres de structure sur la transmission. Ces aspects de modélisation seront ensuite complétés par les formalismes des matrices de transfert.

La simple barrière de potentiel est par ailleurs souvent séparée des contacts fortement dopés par des zones semiconductrices beaucoup plus faiblement dopées. Celles-ci ont pour rôle essentiel d'établir le champ électrique à l'interface espaceur-barrière de potentiel. Il faut alors prendre en compte, dans le calcul de la transmission de la structure totale, la nouvelle figure de potentiel. Celle-ci résulte de la diffusion des porteurs de la zone de contact vers l'espaceur, de l'accumulation des porteurs dans la zone d'émetteur et de la déplétion dans l'espace collecteur.

Compte tenu des longueurs mises en jeu, il apparaît que le traitement simultané de ces mécanismes et du passage par effet tunnel est loin d'être simple. Il faut utiliser une méthode hybride réunissant le calcul classique des courbures de bande dans l'approximation de Thomas - Fermi et la résolution de l'équation de Schrödinger .

Finalement nous nous intéressons aux caractéristiques de conduction qui constituent les seules données accessibles expérimentalement. Nous les obtiendrons par l'intégration sur l'énergie du produit de la transmission et de la fonction d'alimentation qui est le reflet de la distribution des porteurs incidents dans les zones de contact.

## 2.1 Approche analytique de l'effet tunnel

Le calcul du courant tunnel à travers une zone classiquement interdite (figure 2.1) est établi en posant au préalable plusieurs hypothèses :

- Les dimensions transverses de la structure sont supposées infinies.
- Les directions parallèle et perpendiculaire aux couches sont considérées comme étant indépendantes.
- Le champ électrique est toujours appliqué le long de l'axe de croissance et on prend seulement en compte la composante d'énergie perpendiculaire  $Ez$ . On suppose donc la conservation du moment transversal  $k_{//}$  .

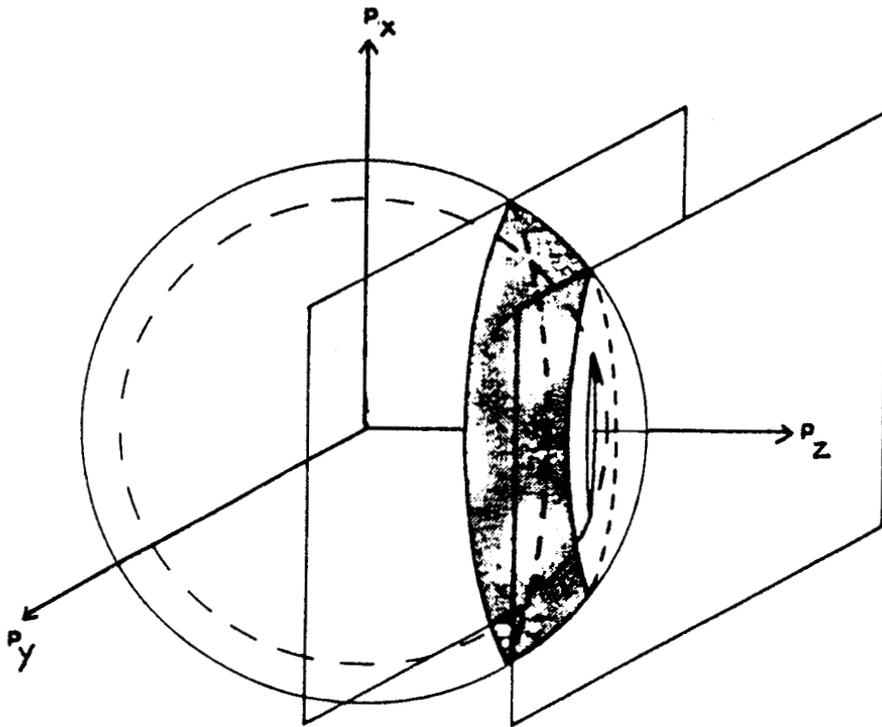


Figure 2. 2: Sphère de Fermi

- On utilise le formalisme de la masse effective et toutes les données matériaux utilisées sont celles présentées en volume. Cette hypothèse peut paraître restrictive mais elle se justifie à partir de la bonne description des sous bandes que l'on obtient dans le cas des superréseaux qui mettent en jeu des épaisseurs de matériaux très faibles.
- Les mécanismes de transport sont supposés purement cohérents, et les structures étudiées ne présentent pas de rugosité d'interface. Nous verrons par la suite que l'on peut introduire un élargissement collisionnel au niveau de la transmission dans le cas des double barrières.
- Les interfaces entre matériaux sont abruptes.
- Enfin, nous limitons notre analyse à l'étude de l'effet tunnel direct dans les structures  $GaAs/Al_xGa_{1-x}As/GaAs$ .

### 2.1.1 Formalisme général

Les caractéristiques de conduction dépendent à la fois, de la distribution en énergie des électrons se trouvant dans la zone fortement dopée d'émetteur, et de leur probabilité de franchir la barrière soit par effet tunnel soit par injection thermionique, soit par d'autres mécanismes assistés par défauts notamment.

La répartition en énergie des porteurs dans une zone semiconductrice est représentée de façon simple à l'aide de sphères isoénergies dans l'espace des moments (figure 2.2). La sphère de Fermi de rayon  $E_F$  fixe une limite d'occupation par les électrons d'autant plus réaliste que l'on travaille à basse température.

Le courant tunnel correspond aux flux d'électrons susceptibles de traverser la barrière de potentiel dans un sens ou dans l'autre avec une composante de moment longitudinale comprise entre  $p_z$  et  $p_z + dp_z$ . Le flux d'électrons de l'électrode 1 vers l'électrode 2 est donné par [1].

$$Flux_{1 \rightarrow 2} = 2 \frac{p_z}{m} f_1(E) (1 - f_2(E)) g(E, p_z) dp_z dE$$

où

- $g(E, p_z) = \frac{2\pi m}{(2\pi\hbar)^3}$  est la densité d'états dans l'espace des moments correspondant à une énergie  $E$  et un moment compris entre  $p_z$  et  $p_z + dp_z$
- $f_1(E)$  est la probabilité de présence d'un électron d'énergie  $E$  dans l'électrode 1
- $(1 - f_2(E))$  est la probabilité de trouver des places vacantes à une énergie  $E$  dans l'électrode 2

On calcule de la même façon le transfert d'électrons de l'électrode 2 vers l'électrode 1.

L'élément de courant prenant en compte ces deux composantes de flux devient :

$$J((E, p_z) dp_z dE = \frac{2p_z}{m} (f_1(E) - f_2(E)) g(E, p_z) T(p_z) dp_z dE$$

où  $T(p_z)$  traduit la transmission de la barrière de potentiel vue par les électrons et donc la probabilité de traverser la zone interdite par effet tunnel .

L'intégration de l'élément de courant sur l'énergie et sur la composante de moment  $p_z$  permet d'aboutir au courant total

$$J_{tot} = \frac{K_B T}{2\pi^2 \hbar^3} \int_0^\infty T(p_z) p_z F(E) dp_z$$

$F(E_z)$  est la fonction d'alimentation qui représente la distribution des électrons dans la zone d'émetteur avec une énergie  $E_z = \frac{p_z^2}{2m}$ .

Le courant tunnel est donc obtenu en pratique par l'intégration sur l'énergie longitudinale  $E_z$  du produit de la transmission par la fonction d'alimentation.

La transmission est calculée à partir de la résolution de l'équation de Schrödinger, indépendante du temps. Comme on s'intéresse ici uniquement au transport à travers la bande de conduction, cette équation prend la forme :

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

$E_z$  est l'énergie longitudinale de l'électron incident.

$\varphi$  est la fonction d'onde associée à l'électron au point de la structure d'abscisse  $z$

Si le potentiel est constant par morceaux, figure 2.1, la fonction d'onde  $\varphi$  peut prendre deux formes différentes.

Lorsque l'abscisse  $z$  correspond à un point de la barrière de potentiel, zone classiquement interdite,  $\varphi$  est égale à

$$\varphi(z) = A_1 e^{-\alpha_1 z} \quad \text{avec} \quad \alpha_1 = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(V_1 - E_z)}$$

Dans le cas où le point  $z$  se trouve dans une zone de potentiel classiquement permise,  $\varphi(z)$  est une onde stationnaire :

$$\varphi(z) = A_2 e^{ik_2 z} + B_2 e^{-ik_2 z} \quad \text{avec} \quad k_2 = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(E_z - V_2)}$$

La transmission est définie comme le rapport des modules au carré des fonctions d'onde de collecteur et d'émetteur pondérés par le rapport des vitesses

$$T = \frac{|\varphi_c|^2}{|\varphi_e|^2} \frac{v_c}{v_e}$$

Lorsque le potentiel de la structure n'est pas constant, l'équation de Schrödinger, ne peut être résolue de façon directe. Une expression analytique de la fonction d'onde peut cependant être obtenue dans le cadre de l'approximation WKB si on suppose que le potentiel  $V(z)$  est lentement variable. [1]

### 2.1.2 Dérivation de la transmission par l'approximation WKB

La fonction d'onde associée aux électrons traversant une zone de potentiel lentement variable n'est plus tout à fait plane et se met sous la forme  $\varphi(z) = A \exp\{iW(z)\}$  où  $w(z)$  est une fonction de  $z$  tendant vers  $kz$  lorsque le potentiel est constant.

Si on remplace  $\varphi(z)$  par son expression dans l'équation de Schrödinger on obtient une équation différentielle non linéaire de la forme :

$$\frac{\partial^2 w}{\partial z^2} - \left(\frac{\partial w}{\partial z}\right)^2 + [k(z)]^2 = 0 \quad \text{avec} \quad k(z) = \left[\frac{2m}{\hbar^2} (E - V(z))\right]^{1/2}$$

Cette équation peut être résolue par itérations successives en posant :

$$\left(\frac{\partial w}{\partial z}\right)^2 \simeq [k(z)]^2$$

$$\frac{\partial^2 w}{\partial z^2} \simeq \mp k'(z)$$

L'approximation *WKB* consiste à s'arrêter à la première itération. La valeur initiale de  $W$  est :

$$w_0(z) = \mp \int^z k(z) dz + cste$$

La valeur de  $W$  obtenue à la première itération prend la forme

$$w_1(z) = \mp \int^z \left[ [k(z)]^2 \mp ik'(z) \right]^{1/2} dz + cste$$

La fonction d'onde devient alors

$$\varphi(z) = A' k(z)^{-1/2} \exp \left\{ \mp i \int^z k(z) dz \right\}$$

et on en déduit une expression analytique de la transmission où :

$$T(E) \simeq \exp - 2 \int_{z_1}^{z_2} \eta(z) dz \quad \text{avec} \quad \eta(z) = \left\{ \frac{2m}{\hbar^2} [V(z) - E] \right\}^{1/2}$$

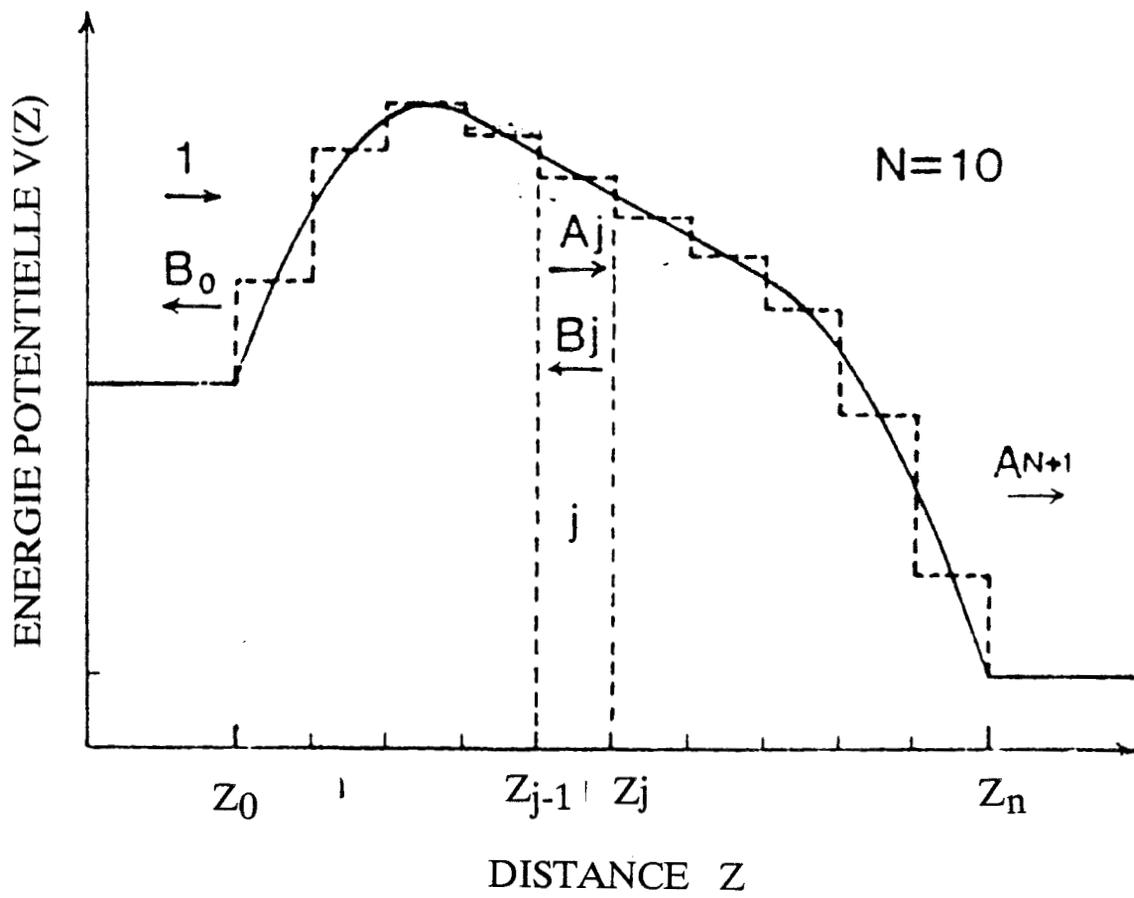


Figure 2. 3: Approximation de la barrière de potentiel par une fonction en escalier

L'expression de  $w(z)$  montre que, pour qu'il y ait convergence de la méthode, la valeur de  $k(z)$  doit vérifier :

$$|\lambda| \frac{dp}{dz} \ll |2\pi p|$$

où  $\lambda$  est la longueur d'onde associée aux électrons et  $p$  leur moment.

L'approximation *WKB* est donc limitée aux zones de potentiel où la variation du moment sur une longueur d'onde est très inférieure au moment de la particule lui-même et n'est plus valide aux points de "détour" où le vecteur d'onde  $k(z)$  s'annule.

Cette condition constitue une restriction dans l'utilisation de l'approximation *WKB* pour le calcul de la transmission à travers des barrières de potentiel rectangulaires sous polarisation.

Un calcul plus exact de la transmission est obtenu soit par les matrices de transfert soit par la résolution directe de l'équation de Schrödinger .

## 2.2 Techniques de modélisation de la transmission

### 2.2.1 Matrices de Ando

La figure 2.3 schématise une barrière de potentiel de forme quelconque. La structure est découpée en zones de potentiel constant par morceaux :

$$V(z) = V_j = V \left( \frac{z_{j-1} + z_j}{2} \right)$$

$$m^*(z) = m_j^* = m^* \left( \frac{z_{j-1} + z_j}{2} \right)$$

La fonction d'onde associée à un électron traversant la zone de potentiel élémentaire comprise entre  $x_{j-1}$  et  $x_j$  est plane :

$$\varphi_j(z) = A_j \exp ik_j z + B_j \exp - ik_j z \quad \text{avec} \quad k_j = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m_j^* (E - V_j)}$$

La matrice reliant la fonction d'onde  $\varphi_j$  à  $\varphi_{j-1}$  est obtenu en posant la continuité de  $\varphi$  et de  $\frac{1}{m^*} \frac{\partial \varphi}{\partial z}$  à l'interface des zones de potentiel  $V_j$  et  $V_{j+1}$  [2].

$$M_j = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} (1 + S_j) \exp[-i[k_{j+1} - k_j]x_j] & (1 - S_j) \exp[-i[k_{j+1} + k_j]x_j] \\ (1 - S_j) \exp[-i[k_{j+1} + k_j]x_j] & (1 + S_j) \exp[-i[k_{j+1} - k_j]x_j] \end{pmatrix}$$

$$\text{avec } S_j = \frac{m_{j+1}^*}{m_j^*} \frac{k_j}{k_{j+1}}$$

Les amplitudes  $A_{N+1}$  et  $B_{N+1}$  de la fonction d'onde dans le collecteur sont ainsi reliées aux amplitudes  $A_0, B_0$  de la fonction d'onde d'émetteur par :

$$\begin{pmatrix} A_{N+1} \\ B_{N+1} \end{pmatrix} = \prod_{j=0}^{N-1} M_j \begin{pmatrix} A_0 \\ B_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_0 \\ B_0 \end{pmatrix}$$

En supposant qu'il n'y a pas de réflexion de la fonction d'onde dans le collecteur et que l'amplitude de l'onde incidente est égale à 1 on obtient

$$A_0 = 1, \quad B_{N+1} = 0, \quad A_{N+1} = \frac{m_{N+1}^*}{m_0^*} \frac{k_0}{k_{N+1}} \times \frac{1}{M_{22}}$$

La transmission est alors égale à :

$$T = \frac{m_0^*}{m_{N+1}^*} \frac{k_{N+1}}{k_0} |A_{N+1}|^2$$

Ce formalisme permet donc de calculer la transmission de structures présentant des potentiels fortement variables.

Le pas de discrétisation est choisi suffisamment fin pour bien décrire la figure de potentiel. Un pas de 1 Å a été utilisé pour les structures que nous avons modélisées. Les matrices de Ando sont bien adaptées pour calculer la transmission dans le cas du

tunnel intrabande et s'avèrent intéressantes dans le cas du tunnel interbande où il faut résoudre deux équations de Schrödinger couplées.

Il faut cependant noter que cette méthode de calcul est très lourde et peut présenter des instabilités numériques pour des structures supérieures à 1000 Å.

### 2.2.2 Matrices de Ricco

Le découpage de la structure est construit à partir des transitions entre deux zones de potentiel de nature différente (zone permise, zone classiquement interdite).

Les six matrices mises en jeu sont ;

- Les matrices d'interface

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

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

$M_1$  décrit l'interface zone autorisée - autorisée

$M_2$  décrit l'interface zone interdite - interdite

$$M_{in} = (k_j, \alpha_{j+1}) = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 + i \frac{k_j}{\alpha_{j+1}} R & 1 - i \frac{k_j}{\alpha_{j+1}} R \\ 1 - i \frac{k_j}{\alpha_{j+1}} R & 1 + i \frac{k_j}{\alpha_{j+1}} R \end{bmatrix}$$

$$M_{out} = (\alpha_j, k_{j+1}) = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 - i \frac{\alpha_j}{k_{j+1}} R & 1 + i \frac{\alpha_j}{k_{j+1}} R \\ 1 + i \frac{\alpha_j}{k_{j+1}} R & 1 - i \frac{\alpha_j}{k_{j+1}} R \end{bmatrix}$$

$$M_1 = (k_j, k_{j+1}) = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 + \frac{k_j}{k_{j+1}} R & 1 - \frac{k_j}{k_{j+1}} R \\ 1 - \frac{k_j}{k_{j+1}} R & 1 + \frac{k_j}{k_{j+1}} R \end{bmatrix}$$

$$M_2 = (\alpha_j, \alpha_{j+1}) = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 + \frac{\alpha_j}{\alpha_{j+1}} R & 1 - \frac{\alpha_j}{\alpha_{j+1}} R \\ 1 - \frac{\alpha_j}{\alpha_{j+1}} R & 1 + \frac{\alpha_j}{\alpha_{j+1}} R \end{bmatrix}$$

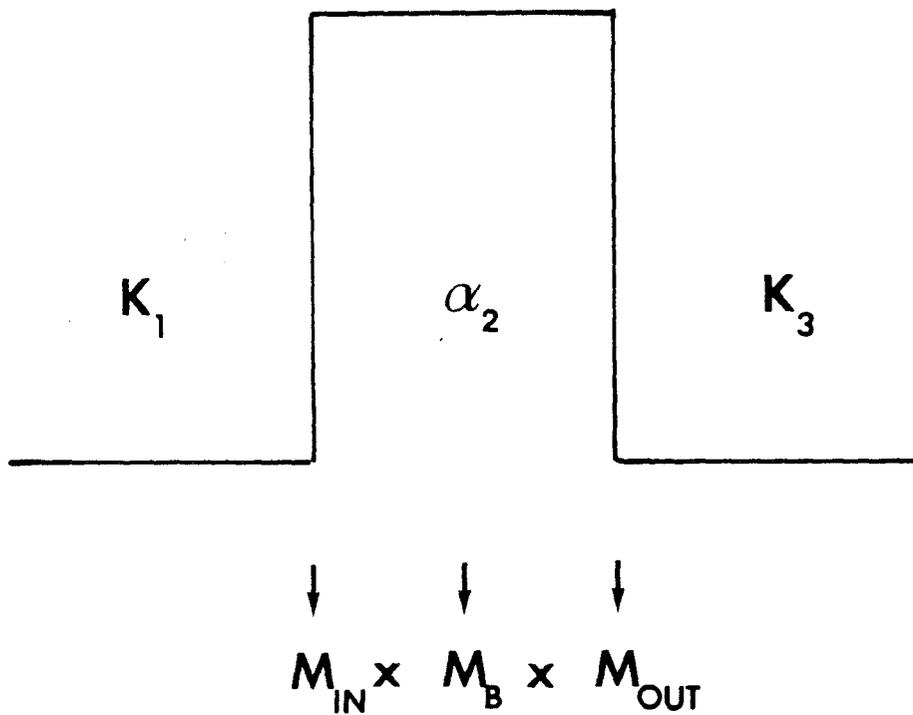


Figure 2.4 : Visualisation des régions et interfaces intervenant dans les matrices de Ricco servant à décrire la simple barrière de potentiel

avec  $R = \frac{m_{j+1}^*}{m_j^*}$ ,  $\alpha$  coefficient d'atténuation dans la zone interdite,  
 $k$ , vecteur d'onde dans la zone permise

- Les matrices de propagation

$M_a$  décrit la propagation dans un milieu classiquement autorisé

$M_b$  décrit la propagation dans un milieu classiquement interdit

$$M_a(k_j, L) = \begin{pmatrix} e^{-ik_j L} & 0 \\ 0 & e^{ik_j L} \end{pmatrix}$$

$$M_b(\alpha_j, L) = \begin{pmatrix} e^{-\alpha_j L} & 0 \\ 0 & e^{\alpha_j L} \end{pmatrix}$$

$L$  représente la longueur de la zone considérée.

Dans le cas d'une simple barrière de potentiel rectangulaire, la transmission s'écrit  $T = M_{in} M_b M_{out}$  (figure 2.4).

L'avantage de ce formalisme réside dans l'absence de termes exponentiels. On peut ainsi calculer la transmission de structures très longues à discontinuités multiples sans instabilité numérique (cas des superréseaux)

### 2.2.3 Résolution directe de l'équation de Schrödinger

Les méthodes matricielles évoquées précédemment ne permettent pas d'accéder facilement aux fonctions d'onde en tout point de la structure. Cette information s'avère cependant très importante puisqu'elle permet de prévoir la répartition des charges dans les zones actives, reflet de la probabilité de présence électronique. La résolution directe de l'équation de Schrödinger par une méthode de calcul de type Runge-Kutta a donc été mise en oeuvre au laboratoire [3]. De façon générale, la méthode de Runge-Kutta permet de substituer à une équation différentielle d'ordre  $n$  un système de  $n$  équations couplées du premier ordre.

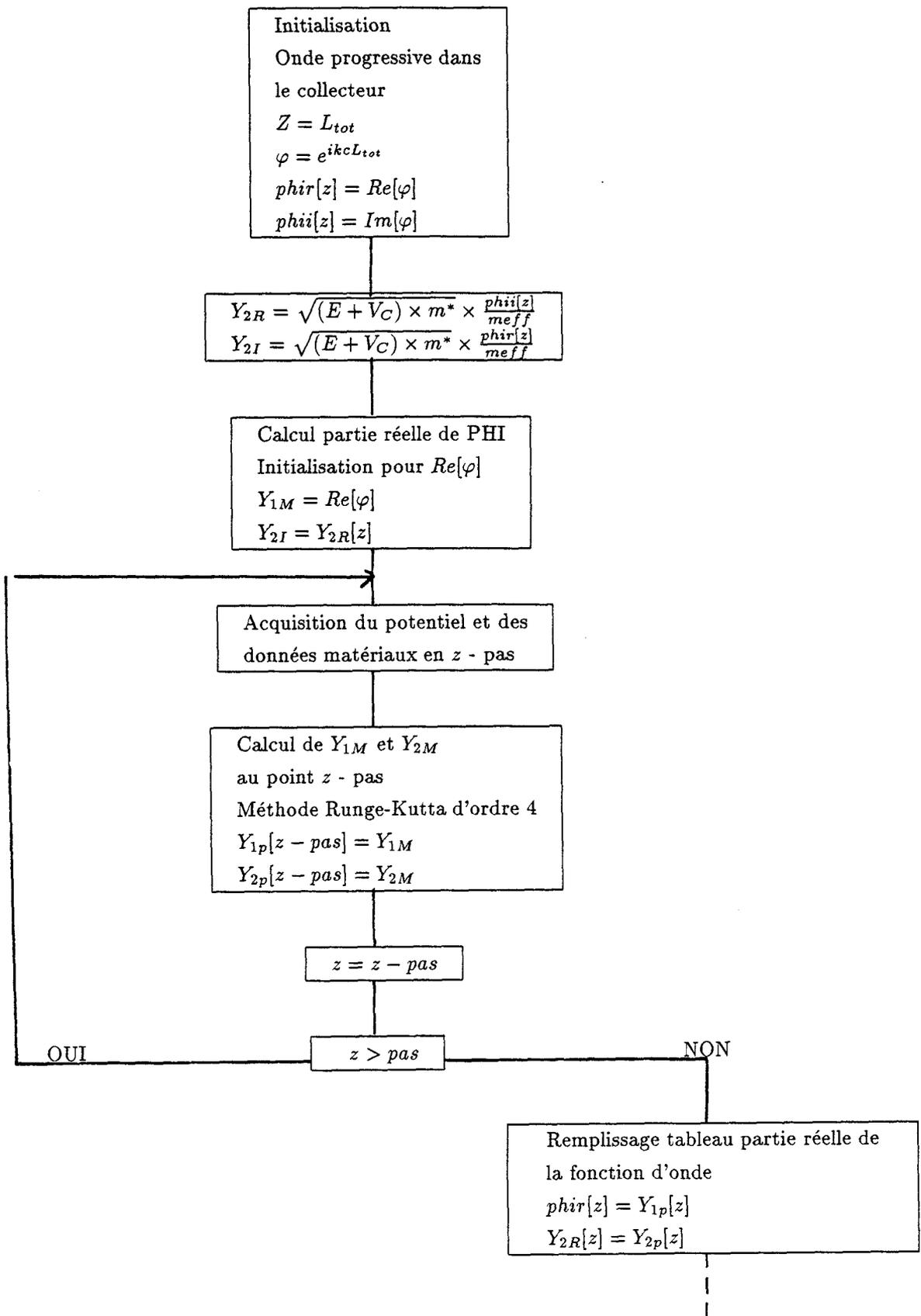
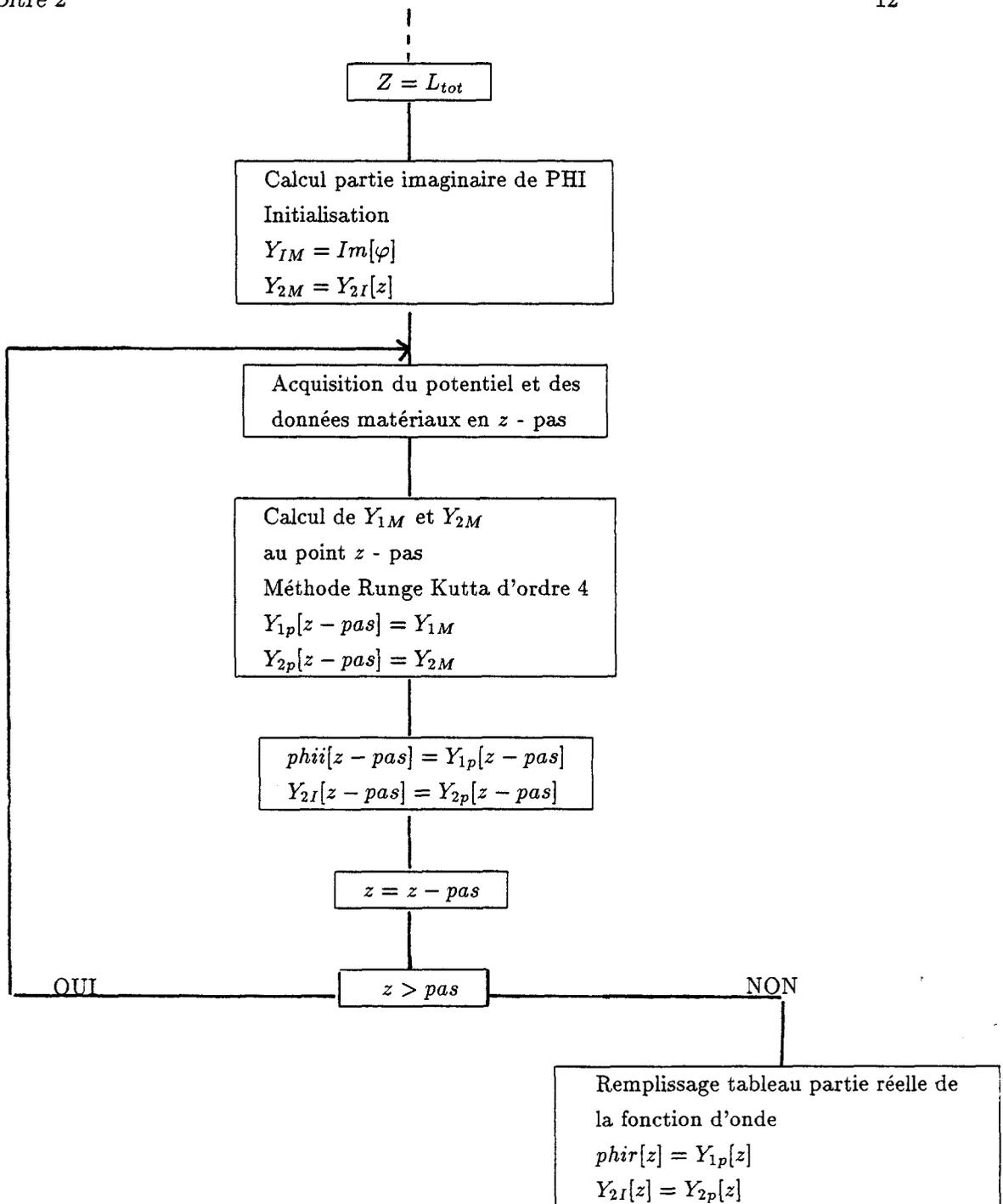


Figure 2.5 : Organigramme donnant les grandes lignes du calcul de la fonction d'onde dans le cas de la résolution directe de l'équation de Schrödinger



L'équation de Schrödinger d'ordre 2 est donc transformée en un système de deux équations du premier degré à l'aide du changement de variable

$$Y_1(z) = \varphi(z)$$

$$Y_2(z) = \frac{\hbar}{\sqrt{2qmo}} \frac{\partial \varphi}{\partial z} \times \frac{m_o}{m^*}$$

On obtient alors le système d'équations suivantes :

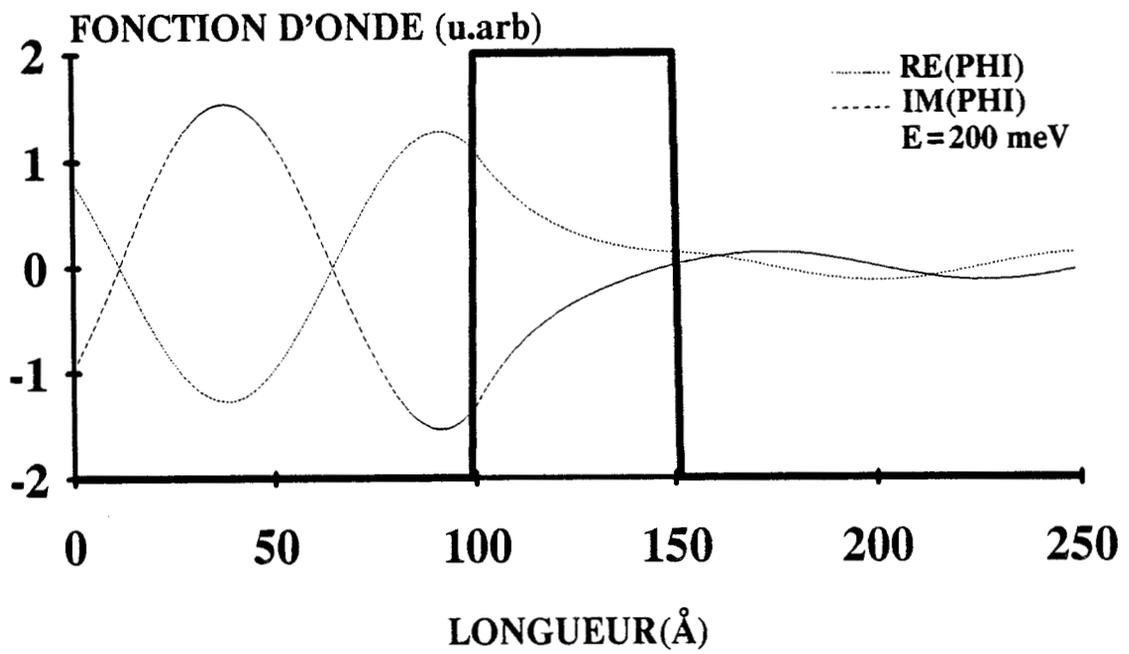
$$\frac{\partial Y_1(z)}{\partial z} = \frac{m^*}{m_0} \sqrt{\frac{2qmo}{\hbar}} Y_2(z)$$

$$\frac{\partial Y_2(z)}{\partial z} = \frac{m^*}{m_0} \sqrt{\frac{2qmo}{\hbar}} \left[ \frac{V(z) - E}{q} \right] Y_1(z)$$

La résolution de ces équations doit respecter les conditions de continuité du courant aux points de discontinuité de potentiel. Répercutées sur les fonctions d'onde, ces conditions imposent la continuité de  $Y_1(z)$  et de  $Y_2(z)$ .

Les grandes lignes de la procédure numérique utilisée pour résoudre le système d'équations sont illustrées par l'algorithme reporté en figure 2.5. Celui-ci présente trois blocs distincts pour l'initialisation et le traitement des parties réelle et imaginaire de la fonction d'onde.

Au départ, la structure est discrétisée de telle sorte qu'à chaque pas on puisse affecter une masse à l'électron ainsi qu'une valeur de potentiel. La fonction d'onde dans le collecteur n'admet qu'une composante progressive dont on peut fixer arbitrairement l'amplitude et la phase. La fonction d'onde au point d'abscisse  $L_{tot}$  correspondant à la limite supérieure de la zone simulée est choisie égale à  $\varphi = e^{ik_N z}$ . Les parties réelle et imaginaire de  $Y_2$  en  $z = L_{tot}$  sont alors calculées. La donnée de  $Y_2$  et  $Y_1$  en  $z = L_{tot}$  constitue l'initialisation des deux boucles de calcul sur  $z$  permettant d'obtenir les parties réelle et imaginaire de la fonction d'onde en tout point de la structure ainsi que sa dérivée. La probabilité de présence électronique  $|\varphi|^2$  est ensuite déduite.



**Figure 2.6 :** Evolution spatiale des parties réelle et imaginaire de la fonction d'onde associée à un électron d'énergie 200 meV.  
La hauteur de barrière est de 300 meV

L'acquisition de la fonction d'onde et de sa dérivée dans la zone d'émetteur en  $z = 0$  permet en particulier le calcul du coefficient de transmission de la structure qui prend la forme :

$$T = \left| \frac{1}{C_0^+} \right|^2 \times \frac{k_{Ltot}}{k_0} \times \frac{m_{\text{emetteur}}^*}{m_{\text{collecteur}}^*} \quad \text{avec}$$

$$C_0^+ = \frac{1}{2} \left[ Y_1(o) + \frac{m^*}{m_0} \frac{\sqrt{2qmo}}{i\hbar k_0} Y_2(o) \right]$$

## 2.2.4 Résultats sur barrières nues

### 2.2.4.1 Atténuation de la fonction d'onde dans la barrière de potentiel

La figure 2.6 montre l'évolution spatiale des parties réelle et imaginaire de la fonction d'onde lorsqu'un électron incident est confronté à une barrière de potentiel rectangulaire. L'onde stationnaire dans la zone d'émetteur classiquement permise est atténuée de façon exponentielle lors de sa traversée dans la barrière. Dans la zone collecteur la fonction d'onde n'admet qu'une composante progressive

### 2.2.4.2 Application de l'approximation WKB au cas de la simple barrière de potentiel rectangulaire

On considère ici une simple barrière de potentiel rectangulaire limitée par les points d'abscisse  $x_1$  et  $x_2$ .

La transmission en l'absence de polarisation est donnée par [1].

$T = \exp \left\{ -2 \left[ \left( \frac{2m}{\hbar^2} \right) (U - E) \right]^{1/2} (x_2 - x_1) \right\}$  où  $U$  est la hauteur de la barrière et  $x_1$  et  $x_2$  sont les points de détour.

Sous polarisation, la barrière devient successivement trapézoïdale puis triangulaire.

$$T_{\text{trapezoidale}} \simeq \exp \left[ -4 \frac{(2m)^{1/2}}{3\hbar} \left[ \frac{3}{2} (x_2 - x_1) (U - E)^{1/2} - \frac{3F}{8} \frac{(x_2 - x_1^2)}{(U - E)^{1/2}} \right] \right]$$

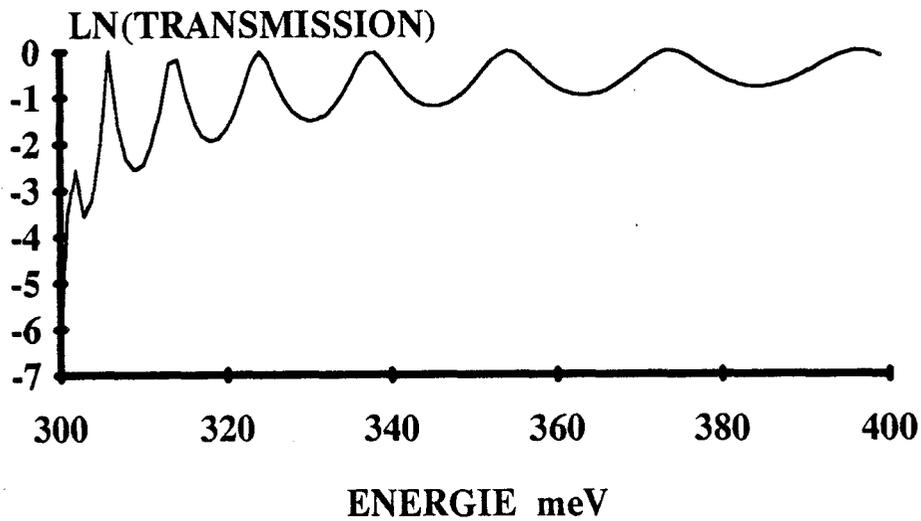


Figure 2. 7: Evolution de la transmission présentée par une barrière de potentiel rectangulaire en absence de polarisation. Les énergies considérées sont supérieures à la hauteur de barrière

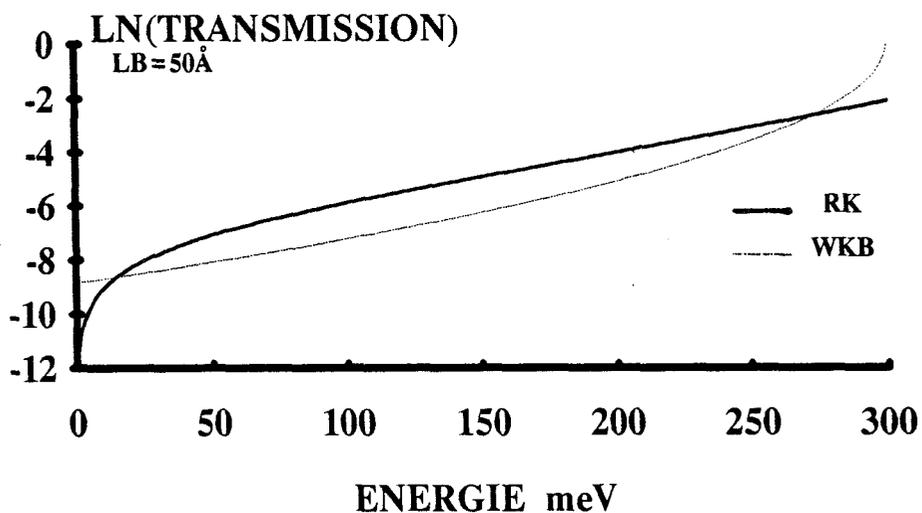
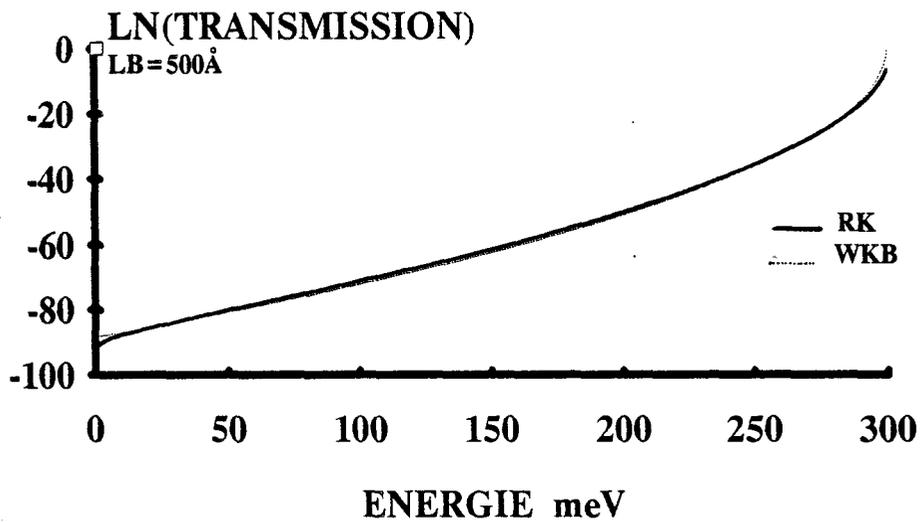


Figure 2. 8: Courbe de transmission en absence de polarisation de la structure simple barrière.  
 - Résultats obtenus par l'approximation WKB  
 - Résultats obtenus par la résolution directe de l'équation de Schrödinger

$$T_{\text{triangulaire}} \simeq \exp \left[ -4(2m)^{1/2} \frac{(U - E)^{3/2}}{3F\hbar} \right]$$

$F$  est le champ électrique appliqué à la barrière.

Nous allons à présent comparer les coefficients de transmission en fonction de l'énergie des électrons incidents, obtenus par l'approximation WKB à ceux calculés par la résolution directe de l'équation de Schrödinger. Un écart entre les deux figures de transmission sera mis en évidence et nous verrons que les phénomènes interférentiels ne peuvent être décrits par le traitement analytique.

- Mise en évidence de réflexion d'interfaces pour des énergies supérieures à la hauteur de barrière

La structure considérée ici est une barrière de GaAlAs avec  $x = 0.40$ . La discontinuité de bande de conduction est de l'ordre de 300 meV.

La figure 2.7 illustre la construction interférentielle des ondes associées aux électrons d'énergie supérieures à la hauteur de barrière obtenue par la méthode de résolution directe de l'équation de Schrödinger. Là où l'approximation WKB prédit une transmission unitaire, un traitement exact met en évidence des phénomènes de réflexions multiples qui se traduisent par une ondulation de la transmission. Les valeurs maximales sont unitaires. De toute évidence, les valeurs d'énergie correspondant aux extrema peuvent être reliées à l'adaptation de multiples demi-longueurs d'onde à la largeur de barrière comme dans le cas d'un puits rectangulaire isolé de largeur équivalente.

- Etude en fonction de la largeur de barrière

Les courbes de transmission en fonction de l'énergie des électrons incidents pour des barrières de 500 Å et de 50 Å en absence de polarisation sont représentées en figure 2.8. Lorsque  $L_B = 500$  Å les écarts relatifs entre les deux courbes de transmission sont faibles. En revanche lorsque la barrière n'est plus que de 50 Å, ordre de grandeur typique pour les barrières utilisées en pratique, un désaccord important est mis en évidence entre les deux approches.

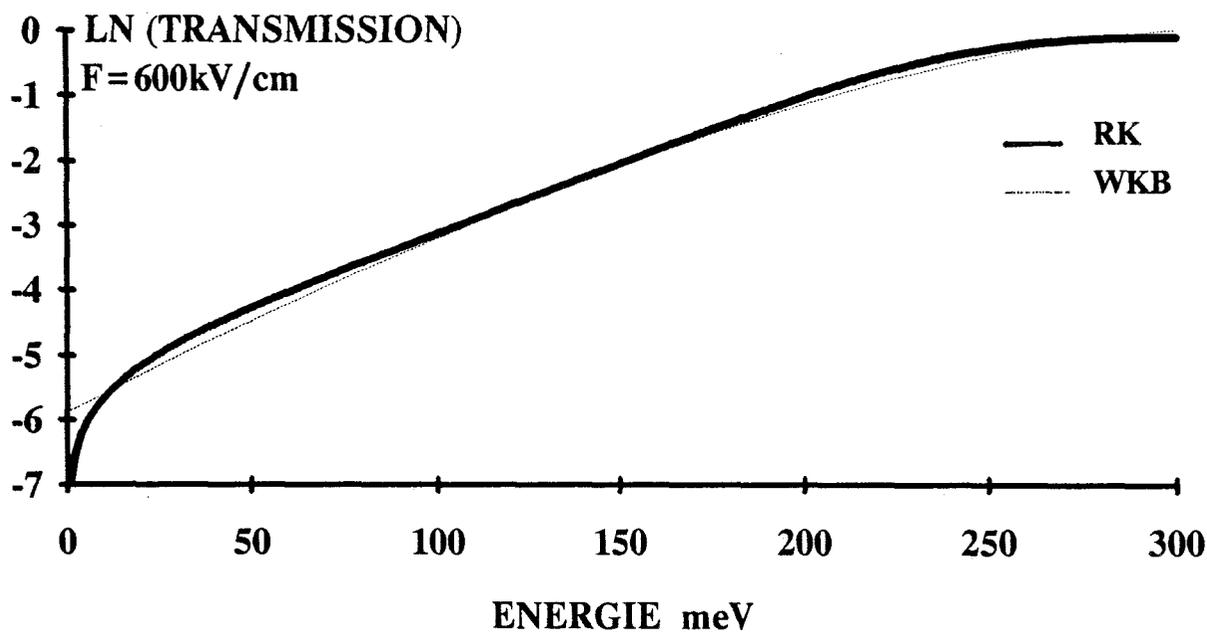
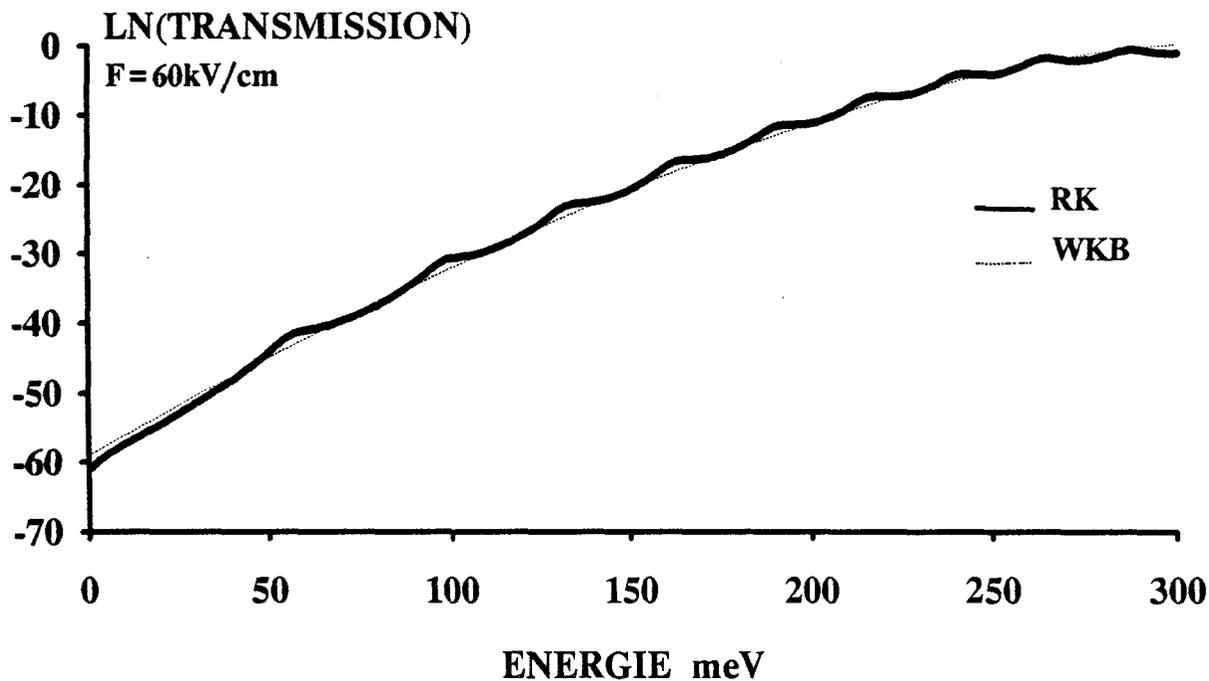


Figure 2. 9 : Calcul de la transmission lorsque l'on applique un champ électrique  $F$  à la simple barrière de longueur  $L_B = 500 \text{ \AA}$ ,  $L_B = 50 \text{ \AA}$

- Résultats obtenus par l'approximation WkB
- Résultats obtenus par la résolution directe de l'équation de Schrödinger

- Etude lorsque la barrière est triangularisée

Lorsque la barrière de 500 Å est polarisée figure 2.9, la résolution directe de l'équation de Schrödinger fait apparaître des oscillations sur la courbe de transmission. Celles-ci se produisent à des énergies préférentielles parfaitement représentées par les énergies des niveaux qui se créent dans un puits triangulaire infini. Ces valeurs propres sont données par la relation [4]

$$E_n(eV) \approx \left( \frac{\hbar^2}{2m_w^*} \right)^{1/3} \left( \frac{3}{2} \pi F q \right)^{2/3} \left( n + \frac{3}{4} \right)^{2/3}$$

où  $F$  est le champ électrique uniforme.

Le tableau 1 donne les valeurs d'énergie pour les huit premiers niveaux d'un puits triangulaire.

n	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
$E_n(meV)$	55	98	132	162	190	216	241	264	286	308

On peut noter qu'elles sont sensiblement égales aux énergies d'ondulation observées sur la courbe de transmission de la barrière de potentiel, entièrement triangularisée. Qualitativement, tout se passe comme si la transition aval entre le GaAlAs et le GaAs se comportait comme une interface virtuelle réfléchissant très partiellement les ondes transmises.

Ce phénomène d'interférences appelé effet Fowler-Nordheim [5] n'apparaît pas pour des barrières de largeur 50 Å figure 2.9 même sous un champ électrique peu réaliste de 600 kV/cm. Les valeurs de champ électrique permettant d'aboutir à la triangularisation des barrières de faible épaisseur sont en effet trop élevées pour qu'il y ait création de niveaux résonnants derrière la barrière de hauteur 300 meV.

## 2.3 Traitement des zones d'accès

La structure simple barrière précédemment étudiée est en pratique insérée dans des zones d'accès.

Celles-ci sont généralement constituées d'un réservoir d'électrons dont le dopage est de l'ordre de  $10^{18} \text{cm}^{-3}$  suivi de zones d'espaceur faiblement ou non intentionnellement dopées. Nous nous trouvons donc confrontés au phénomène de diffusion des porteurs de la zone semiconductrice dégénérée. Il se crée en outre, au pied de la barrière partiellement bloquante du côté émetteur, une zone d'accumulation lorsque la structure est polarisée. Dans la région collecteur, la formation d'une zone de déplétion doit être prise en compte.

### 2.3.1 Phénomène de diffusion

#### 2.3.1.1 Modélisation

Le traitement de la diffusion peut se faire à partir de la résolution simultanée de l'équation donnant la distribution de porteurs dans l'approximation de Thomas Fermi et de l'équation de Poisson. Le système d'équations couplées ainsi obtenu s'écrit.

$$\left\{ \begin{array}{l} n(z) = N_C F_{1/2}(E_c(z) - E_F) \\ \frac{\partial F}{\partial z} = \frac{q}{\epsilon} [N_D - n(z)] \end{array} \right.$$

où  $F_{1/2}$  est l'intégrale de Fermi Dirac

La diffusion se produisant dans une zone d'équilibre, le niveau de Fermi est pris constant sur l'ensemble de la zone simulée. On détermine alors les variations spatiales du bas de bande de conduction  $E_c(z)$  dont l'écart avec  $E_F$  donne  $n(z)$ . Par réaction de charge d'espace, le potentiel s'en trouve modifié jusqu'à une situation d'équilibre où le potentiel de diffusion stabilise les échanges de porteurs entre les zones  $n^+$  et  $n$ , avec les conditions aux limites  $n = N_{D1}$  à gauche et  $n = N_{D2}$  à droite. Pratiquement l'enchaînement de l'auto cohérence se fait sur le champ électrique à l'interface  $n^+/n$ . L'annulation de ce champ aux extrémités gauche et droite et les conditions aux limites sur les densités de porteurs doivent être vérifiées simultanément.

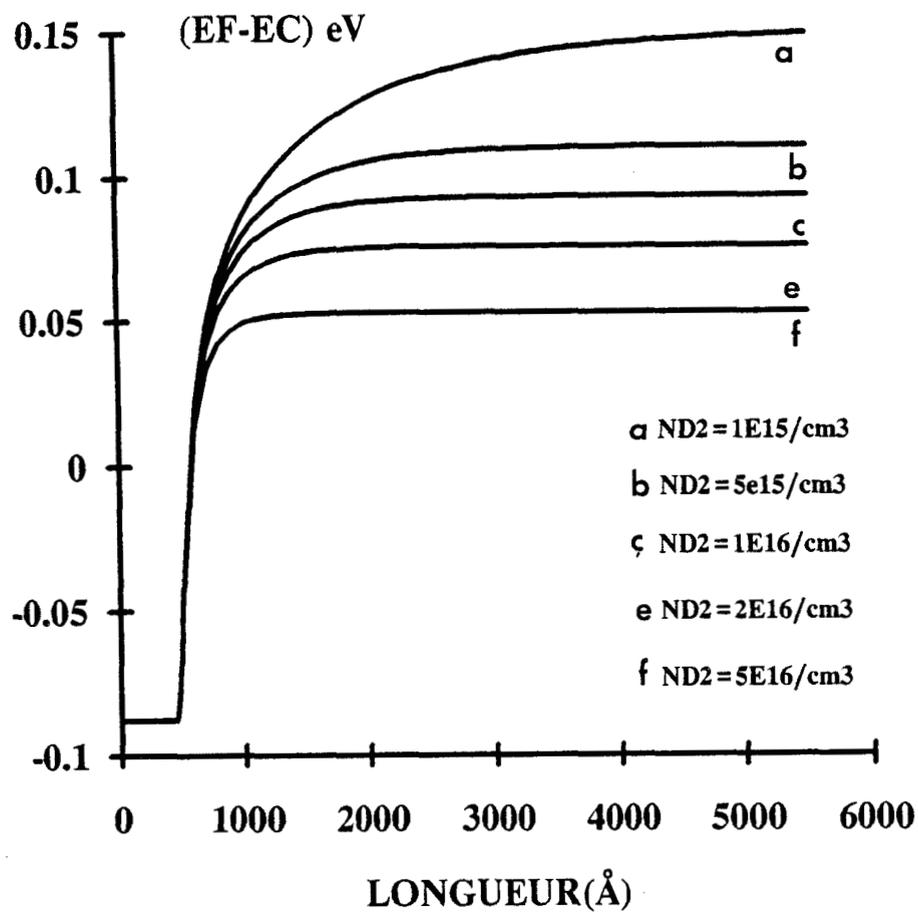


Figure 2.10 : Evolution spatiale du potentiel de diffusion dans le cas d'une homojonction  $n^+/n$  en fonction du dopage de la région II  $ND_1 = 2.10^{18} \text{cm}^{-3}$

On peut également traiter les phénomènes de diffusion en utilisant l'approche de Lundström [6][7].

Initialement proposé pour traiter de façon semi-analytique les hétérojonctions à partir des données d'affinité électronique, ce modèle peut être adapté pour traiter des homojonctions de type  $n^+/n$ .

Les équations clé sont, comme dans le traitement précédent, celles permettant de dériver la densité de porteurs libres et l'équation de Poisson. Celles-ci s'écrivent

$$n_z(x) = N_{cz}(x)F_{1/2}(\eta_c)$$

$$p_z(x) = N_{vz}(x)F_{1/2}(\eta_v)$$

$$\frac{\partial^2 U}{\partial r^2} = R^{-1} \left[ e^{U(G/2)} \sinh [U + (\gamma - 1/2)UG] - D \right]$$

On trouvera en annexe la signification des termes  $U$ ,  $\gamma$ ,  $UG$ ,  $R$ ,  $R$  ainsi qu'un développement plus complet des équations mises en jeu. Les autres paramètres ont leur signification habituelle.

### 2.3.1.2 Exemples de résultats

La figure 2.10 montre les variations spatiales du potentiel de diffusion pour différents dopages des zones d'espaceurs notées II. La concentration en impuretés de la zone dégénérée notée I est prise constante et égale à  $2.10^{18}cm^{-3}$ . La transition du matériau I au matériau II s'effectue à  $500 \text{ \AA}$  de l'abscisse  $z = 0$  et la modulation de dopage est abrupte. La référence d'énergie correspond au niveau de Fermi. Loin de la zone de transition on retrouve des niveaux de Fermi correspondant aux matériaux en volume, fixant ainsi la hauteur du potentiel de diffusion. Le retour à des constantes de matériaux en volume est d'autant plus étalé sur l'espace que le niveau de dopage de la région II est faible. Pour  $N_{D_{II}} = 5.10^{16}cm^{-3}$  la longueur de diffusion est de l'ordre de  $500 \text{ \AA}$ . L'introduction d'une homojonction  $n^+/n$  va donc translater la barrière de potentiel d'une valeur équivalente au potentiel de diffusion. Il en résulte une diminution de la transparence de la structure particulièrement notable pour les porteurs incidents de faible énergie. Nous verrons cependant que ce phénomène est contrebalancé par la création d'une zone d'accumulation dans la région II lorsque l'on polarise la structure .

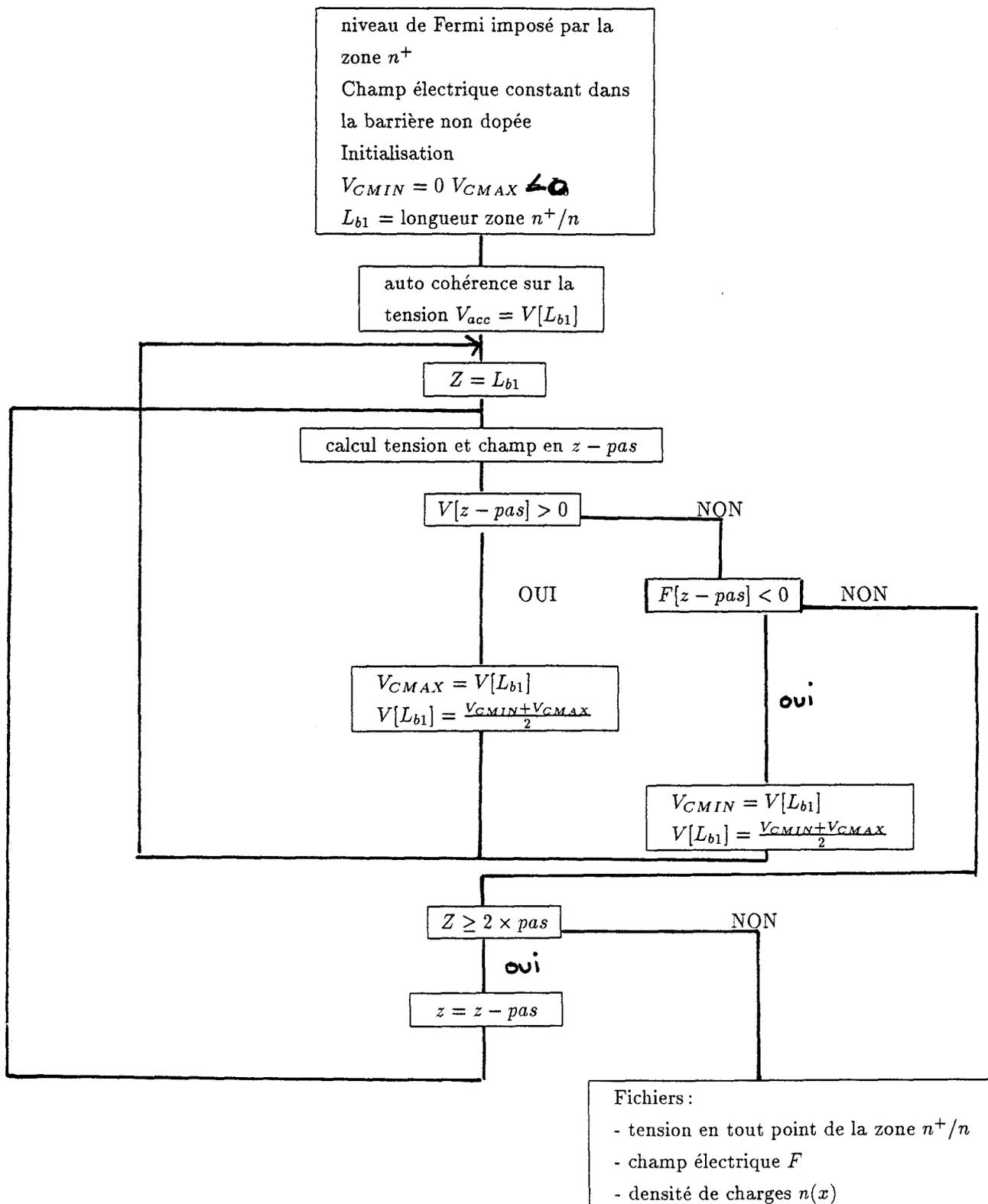


Figure 2.11 : Procédure numérique pour la résolution des équations couplées de Poisson et de Schrödinger

## 2.3.2 Prise en compte de la zone d'accumulation

### 2.3.2.1 Modélisation

Le traitement de la zone d'accumulation qui se forme en amont de toute hétérostructure sous polarisation peut se faire dans le cadre de l'approximation de Thomas-Fermi comme pour l'analyse de la diffusion. Cette approche peut paraître restrictive pour une zone où l'on peut observer, comme nous le verrons par la suite, des effets de quantification. Un traitement plus rigoureux serait de résoudre de façon auto-cohérente les équations de Schrödinger et de Poisson. En fait, si une telle analyse se révèle possible dans les milieux fermés ou faiblement couplés, il n'en est pas de même ici où la proximité du réservoir d'électrons fait qu'il y a existence d'états étendus et confinés en même temps. Par ailleurs, on éprouve énormément de difficultés à chiffrer les transitions qui peuvent s'opérer entre ces états étendus et les états localisés. Ces problèmes ont été en partie résolus par des traitements numériques extrêmement lourds basés sur la détermination de la fonction de distribution de Wigner qui permet d'introduire un terme de relaxation. Les résultats obtenus dans ce cas se sont révélés très proches de l'analyse "quasi-volumique" que sous entend le traitement par Thomas-Fermi [8]. Rappelons en effet que, dans ce cas, la population électronique  $n(z)$  n'est fonction que de la valeur locale de  $E_C - E_F$ , en faisant abstraction de tout effet de quantification. Compte tenu de sa rapidité de calcul, nous avons utilisé cette dernière méthode. Nous retrouverons par la suite les effets de quantification en résolvant l'équation de Schrödinger et en y incluant un potentiel de type Thomas Fermi. L'autre hypothèse de notre calcul de zone d'accumulation concerne le fait que nous négligeons le courant de conduction. On parle dans ce cas de l'approximation à courant nul. On impose donc un niveau de Fermi constant dans l'ensemble de la zone d'émetteur et l'on fait ainsi abstraction de la notion de quasi-niveau de Fermi. Cette hypothèse se justifie par le fait que dans la plupart des hétérostructures étudiées, la part d'électrons impliquée dans les processus de conduction est souvent très faible par rapport à l'ensemble de la population électronique. Ainsi, si une hétérostructure permet de "faire" du courant, c'est souvent grâce à des vitesses élevées plutôt que grâce à un nombre de porteurs important. La procédure numérique que nous utilisons pour résoudre les équations couplées de Poisson et de Thomas Fermi est illustrée en figure 2.11. La référence d'énergie est imposée par le dopage de la zone considérée. Pratiquement nous travaillons sur le champ électrique à l'extrémité droite de la zone de simulation qui correspond à l'interface entre l'hétérostructure et la zone d'accès. L'auto-cohérence est vérifiée par essais successifs sur la tension  $V_{acc}$  traduisant la chute de potentiel sur la zone d'accumulation. Cette valeur de potentiel est

déterminée par dichotomie. La valeur de  $V_{acc}$  à chaque itération dépend des inégalités stipulant soit que le potentiel est positif soit que le champ électrique est négatif en un point donné. Ceci permet de définir deux valeurs d'encadrement  $V_{cmin}$  et  $V_{cmax}$  à partir desquelles une nouvelle valeur est affectée à  $V_{acc}$ . Les critères de convergence sont basés sur la vérification de la neutralité et de l'écrantage du champ électrique.

En pratique ce calcul se révèle extrêmement sensible à la valeur de  $V_{acc}$ . Il faut quelquefois opérer plus d'une cinquantaine d'itérations pour que la convergence soit assurée.

Les variations de potentiel résultant de l'application d'un champ électrique à l'interface espaceur-barrière sont ensuite superposées à la figure de potentiel due à la diffusion des porteurs. On a ainsi accès aux variations du bas de bande de conduction dans l'ensemble de la zone d'émetteur située en amont de l'hétérostructure.

Pour les zones semiconductrices en aval, nous supposons un champ électrique constant dans la barrière de potentiel et une zone complètement désertée dans l'espaceur de la région collecteur. On peut, en dernière étape, rajouter le potentiel de diffusion des zones collecteur  $N^{++}$  vers les zones tampons.

Ce calcul de potentiel sur la structure totale est ensuite introduit dans le programme de résolution de l'équation de Schrödinger pour le remplissage du tableau des variations de la bande de conduction à chaque pas. La transmission et le courant sont ensuite obtenus avec les procédures exposées précédemment.

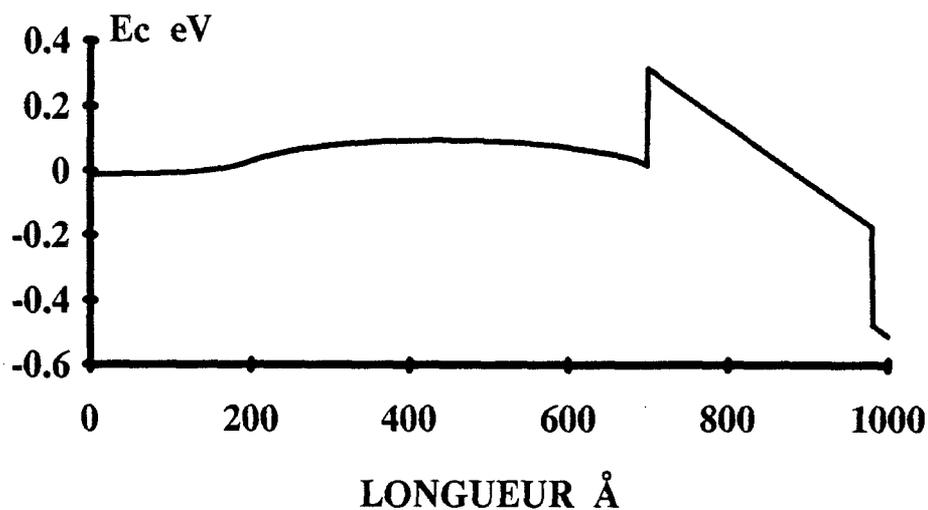


Figure 2.12 : Courbure de la bande de conduction d'une simple barrière précédée d'un espaceur  $E_f = 86$  meV

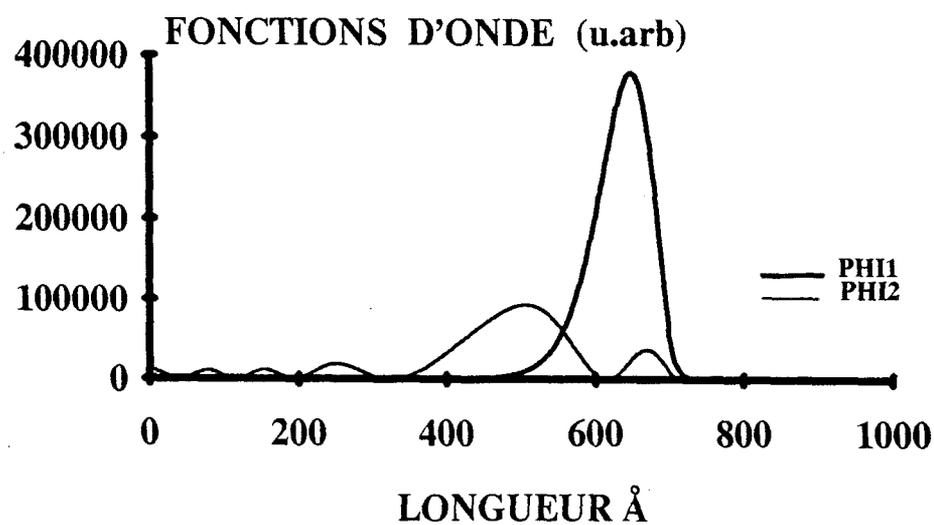
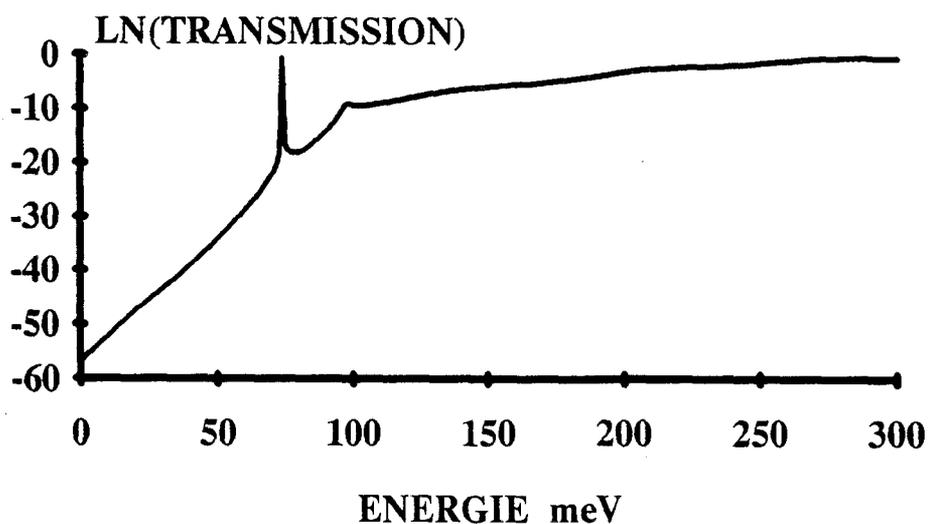


Figure 2.13 : Spectre de transmission et fonctions d'onde associées à  $\epsilon_r = 74$  meV et à  $\epsilon_r = 98$  meV.

### 2.3.2.2 Exemples de résultats

La figure 2.12 montre la courbure de bande d'une structure simple barrière de 300 Å présentant en amont un espaceur dopé à  $2.10^{16} \text{cm}^{-3}$  précédé d'une zone de contact dopé à  $2.10^{18} \text{cm}^{-3}$ . Le champ électrique appliqué à l'interface barrière-espaceur est supposé égal à 200 kV/cm et on peut noter la création d'une zone d'accumulation au pied de la barrière. Il apparaît alors sur le spectre de transmission de la figure 2.13 deux pics à 74 meV et 98 meV. Ceux-ci correspondent à deux chemins préférentiels pour le passage par effet tunnel à travers la structure. Le premier maximum de transmission est bien résolu et il est associé à une fonction d'onde de premier niveau figure 2.13. La probabilité de présence est entièrement localisée dans la zone d'accumulation. Le maximum est situé à 650 Å légèrement en retrait par rapport à l'interface barrière-espaceur où l'on aurait une densité de porteurs libres dans une approche semi-classique. En revanche, si l'on trace la fonction d'onde correspondant au second pic, on obtient des variations de la probabilité de présence caractéristique d'une fonction d'onde de deuxième niveau dans un puits triangulaire. Il faut préciser cependant que nous nous trouvons à la limite de confinement dans la mesure où la probabilité de présence est loin d'être négligeable en dehors de la zone d'accumulation proprement dite. En fait ce second niveau affleure le bas de bande de conduction de l'espaceur, ce qui se traduit par un couplage très important avec les états étendus d'émetteur.

## 2.4 Calcul du courant

### 2.4.1 Cas des barrières sans espaceurs

#### 2.4.1.1 Importance des composantes de courant activé thermiquement

La figure 2.14 montre la distribution en énergie des porteurs se trouvant dans la zone de contact dopée à  $2.10^{18} \text{cm}^{-3}$  en fonction de la température. Au fur et à mesure que la température augmente, la fonction d'alimentation s'annule à des énergies de plus en plus élevées. La limite d'occupation définie par le niveau de Fermi n'est donc valable qu'aux très basses températures. Cet étalement de la fonction d'alimentation pour des températures de l'ordre de 300 K va jouer un rôle non négligeable dans le transport à travers la barrière de potentiel. Les faibles valeurs de transmission pour des énergies inférieures au niveau de Fermi  $E_F = 58 \text{ meV}$  rendent le courant tunnel pur quasi inexistant dans le cas de la barrière de 500 Å, comme le montre la figure 2.15 où est reportée la caractéristique  $I - V$  à 77 K. A 300 K, figure 2.15, le courant tunnel est activé thermiquement. Seuls les électrons se situant dans la queue de distribution de la fonc-

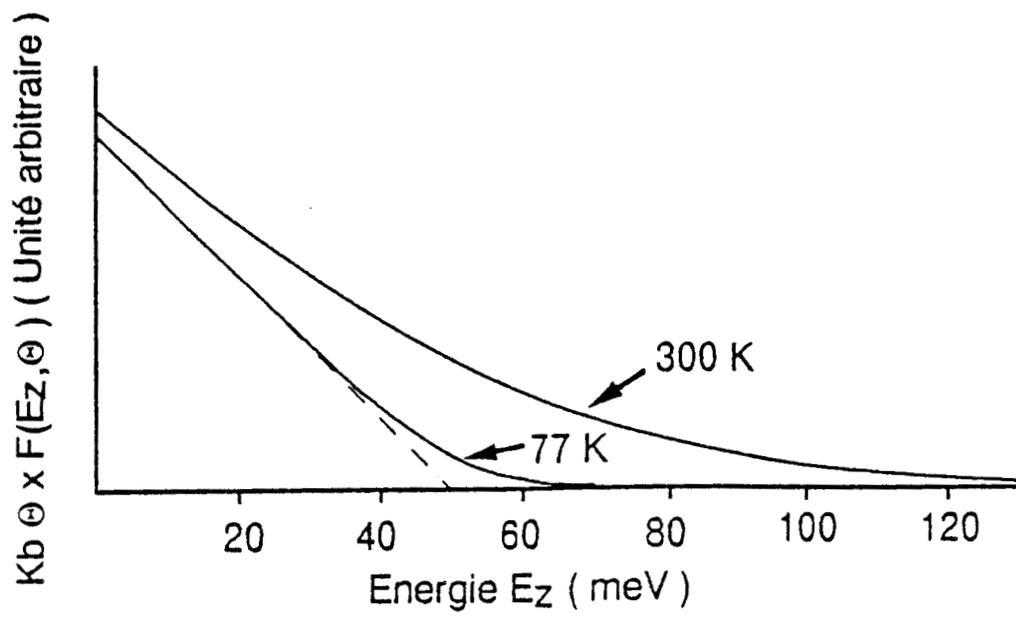


Figure 2.14: Evolution de la fonction d'alimentation en fonction de la température.

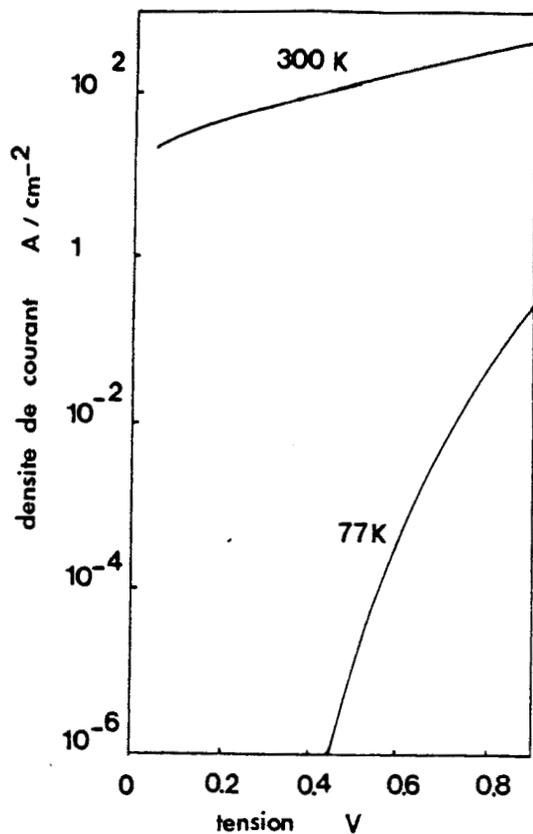


Figure 2. 15 : Evolution du courant traversant une barrière de potentiel de 500 Å à 77 K et à 300 K.

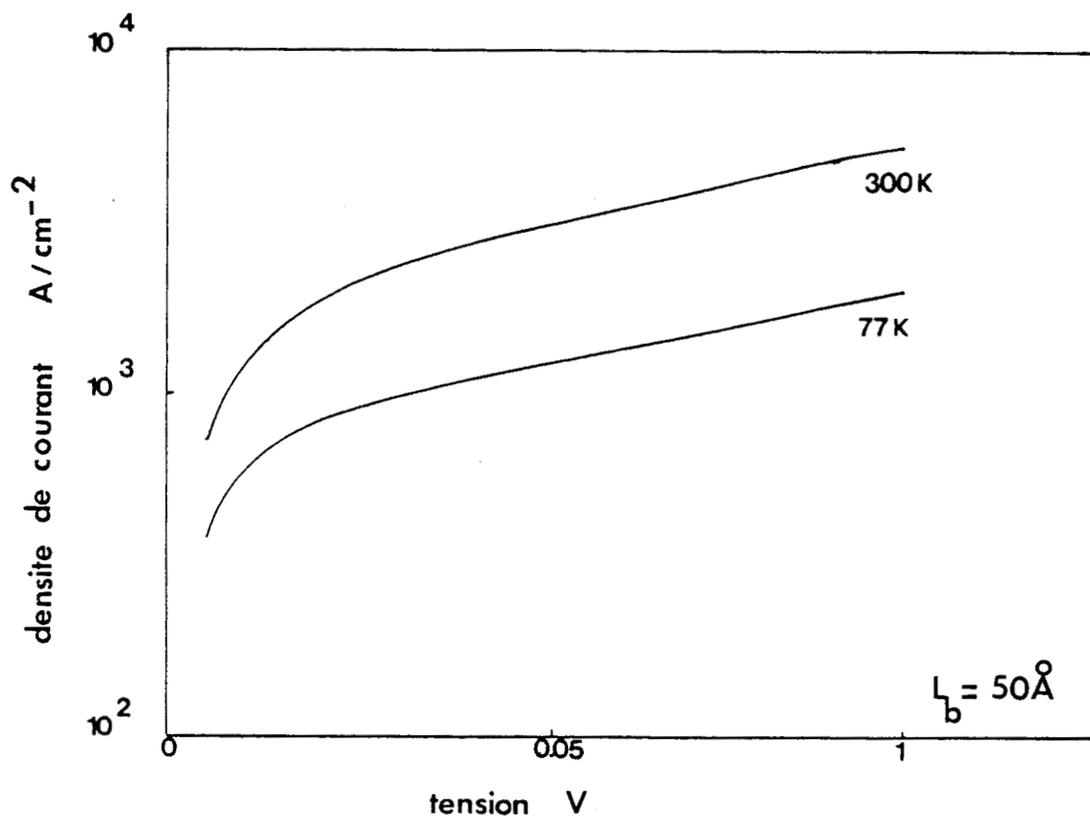


Figure 2.16 : Evolution du courant traversant une barrière de potentiel de 50 Å à 77 K et à 300 K.

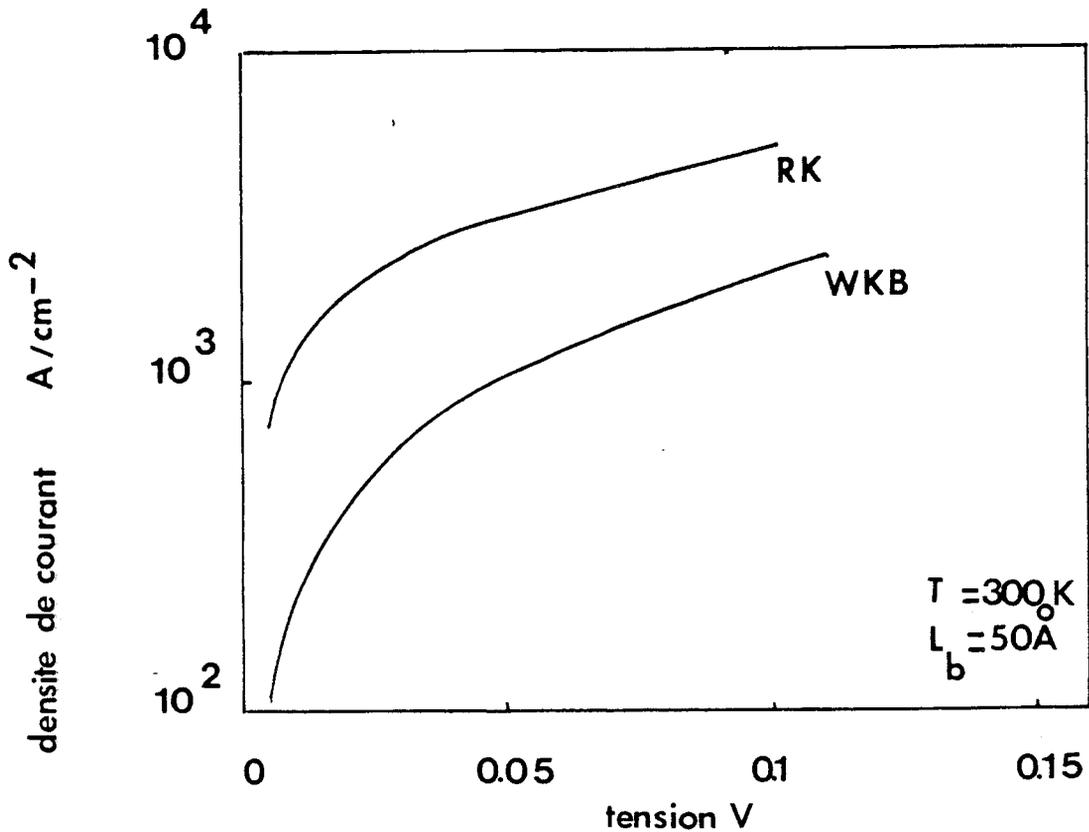
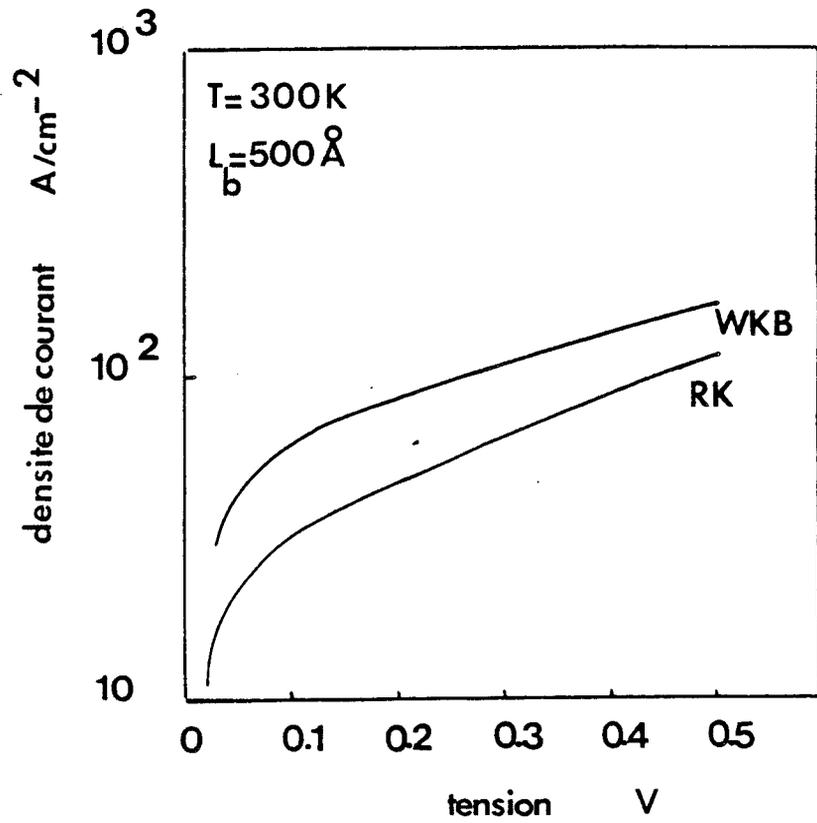


Figure 2.17 : Comparaison des caractéristiques I-V obtenues par la résolution directe de l'équation de Schrödinger et par l'approximation WKB -  $L_B = 500\text{Å}$ ,  $L_B = 50\text{Å}$

tion d'alimentation participent au transport. Lorsque la barrière est de 50 Å, les deux composantes de courant thermoionique et tunnel pur sont comparables (figure 2.16).

#### 2.4.1.2 Comparaison entre les courants calculés à partir de l'approximation WKB et à partir de la résolution directe de l'équation de Schrödinger

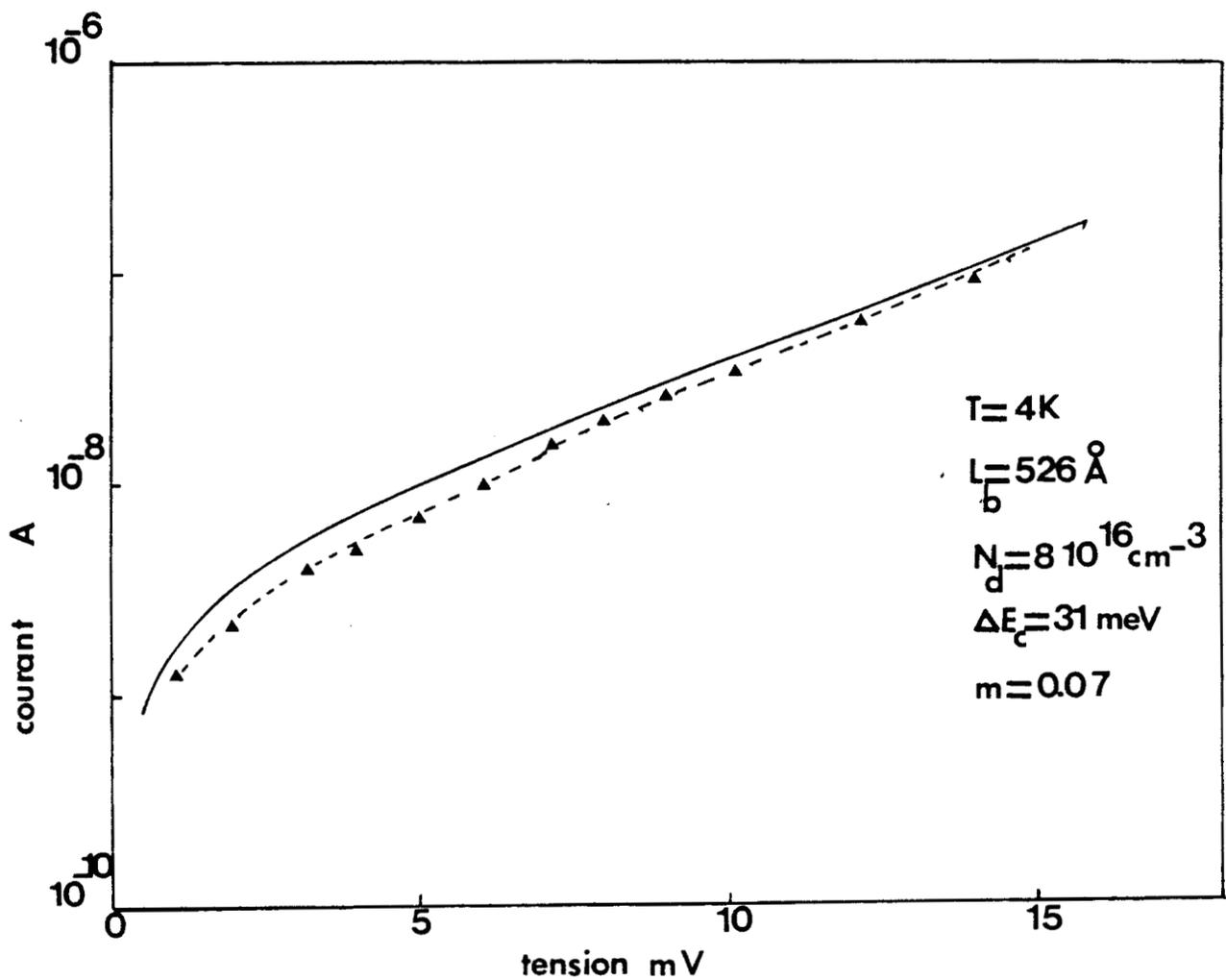
La figure 2.17 montre les caractéristiques  $I - V$  calculées à partir des courbes de transmission obtenues par WKB et par la résolution directe de l'équation de Schrödinger. Les faibles oscillations observées sur les courbes de transmission de la barrière de 500 Å n'apparaissent pas sur le courant. L'effet Fowler-Nordheim résonnant bien défini dans les structures métal-isolant-métal [5][9] est donc négligeable dans le cas de barrières semiconductrices encadrées par des électrodes fortement dopées. Le courant obtenu par WKB est surestimé dans le cas des barrières de 500 Å puisque cette méthode prédit des valeurs unitaires de transmission au dessus de la barrière.

Lorsque la barrière est de 50 Å la tendance est inverse puisque dans ce cas, la transmission calculée par la résolution directe de l'équation de Schrödinger aux basses énergies est supérieure à la transmission obtenue par WKB. Au vu de ces résultats on peut noter des écarts pouvant aller jusqu'à un facteur 8 entre les deux méthodes de calcul. La méthode WKB donne néanmoins une première approximation en  $\exp(-K_B L_B)$  de la transparence de la barrière étudiée.

#### 2.4.2 Comparaison théorie expérience

Nous allons essayer de valider les calculs de courant en fonction de la tension appliquée à la simple barrière à partir de deux exemples. Cette comparaison sera rendue difficile par les phénomènes de conduction parasite qui tendent à masquer les très faibles niveaux de courant tunnel à travers une structure simple barrière.

La première structure simulée est une barrière de  $Ga_{1-x}Al_xAs$  non dopée présentant une concentration d'Aluminium de 0,04 et encadrée par deux électrodes de GaAs dopée à  $8.10^{16} cm^{-3}$ . Les mesures de courant ont été effectuées par Zimmermann [10] à 4,2 K pour des échantillons de  $125 \times 125 \mu m^2$  de section. La largeur nominale de la barrière est de 500 Å. Les résultats de ces mesures sont reportées en figure 2.18. Les valeurs de courant sont très faibles de l'ordre de la dizaine de nanoampères. Les tensions mises en jeu sont inférieures à 15 mV dans la mesure où la hauteur de barrière est de 31,5 meV. Les résultats de notre calcul, obtenus à partir de la résolution directe de



**Figure 2. 18 :** Caractéristique I-V d'une structure simple barrière de 500 Å sans espaceur. Comparaison théorie-expérience  
 . Courbe théorique obtenue par la résolution directe de l'équation de Schrödinger  
 . Courbe expérimentale d'après la référence 10

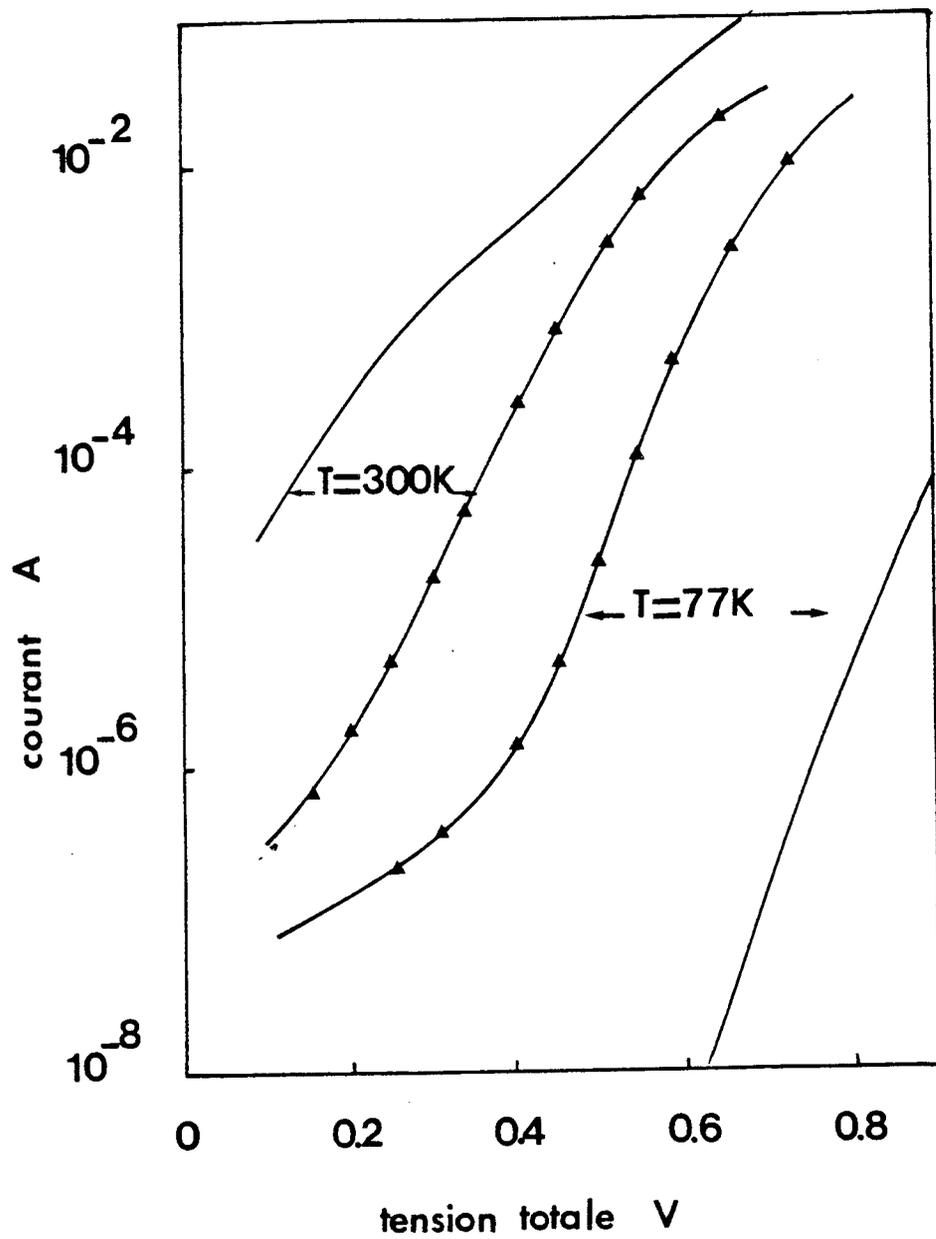


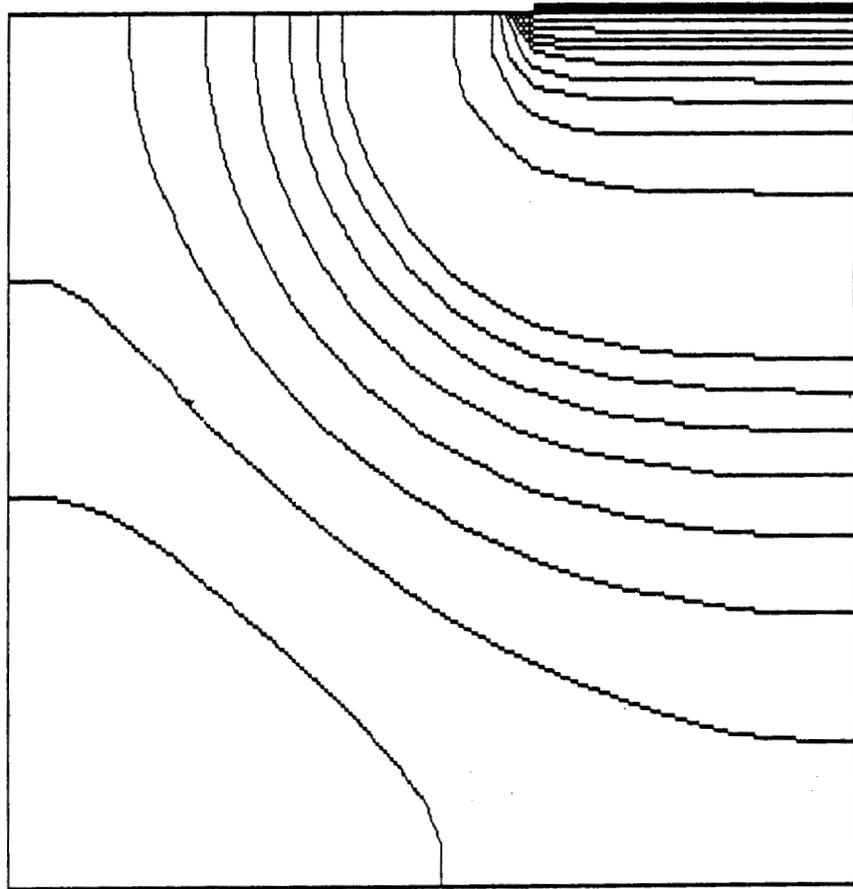
Figure 2. 19: Caractéristique I-V d'une structure simple barrière de  $500 \text{ \AA}$  précédée d'un espaceur de  $1 \mu\text{m}$

- courbe théorique
- ▲ courbe expérimentale

l'équation de Schrödinger sont représentés en trait continu. L'accord théorie expérience est ici excellent tant dans l'évolution que dans les valeurs qualitatives si on se fixe une largeur de barrière de 526 Å.

L'autre structure diffère de la précédente par le pourcentage d'Aluminium qui est de 0,4 (la hauteur de barrière est donc de 300 meV). Elle fait intervenir par ailleurs un espaceur de 1  $\mu\text{m}$  de longueur avec un niveau de dopage presque résiduel de  $5.10^{15}\text{cm}^{-3}$  supposé. La section des composants est de  $46 \times 46 \mu\text{m}^2$ . On trouvera dans la référence 11 plus de précisions sur les paramètres de structure.

Les résultats des mesures continues effectuées à 300 K et à 77 K sont donnés sur la figure 2.19. Les évolutions sont quasi identiques pour ces deux températures. La diminution du courant à la température de l'azote liquide est dans le meilleur des cas de deux ordres de grandeur. Ces mesures ont été effectuées dans le sens de polarisation tel que l'espaceur très peu dopé se trouve en amont de la simple barrière. Il faut donc rendre compte de la barrière de potentiel électrostatique très importante qui se forme entre cette zone et l'émetteur de GaAs dopé à  $2.10^{18}\text{cm}^{-3}$ . Les résultats de la simulation menée à 300 K montrent que la prise en compte de l'espaceur [12] tend à modifier l'allure de la courbe de courant pour des tensions de l'ordre de 0,4 V. Il existe par ailleurs un désaccord relativement important entre les valeurs de courant calculées et mesurées pour les faibles tensions de l'ordre de 0,25 V. En revanche ce désaccord n'est plus que d'un facteur 2 à 3 pour des tensions de l'ordre de 0,5 V. De toute évidence, une interprétation basée sur l'effet tunnel purement cohérent se révèle trop simpliste. Ceci est corroboré par les résultats calculés à 77 K qui ne sont plus du tout comparables aux relevés expérimentaux. Les valeurs expérimentales beaucoup plus élevées peuvent être expliquées par une conduction par effet tunnel assistée par les pièges profonds qui permet un courant important même si les distributions en énergie des porteurs incidents sont fortement resserrées en dessous du niveau de Fermi. Cette hypothèse a été également avancée pour interpréter le désaccord observé entre les caractéristiques de conduction théorique et expérimentale de structures simple barrière de 300 Å de largeur. [13]



**Figure 2.20** : Evolution des équipotentiels en fonction de la profondeur  $y$  sous la grille. La zone simulée correspond à un quart de la structure. Le potentiel de surface est négligé.

## 2.5 Transparence des barrières électrostatiques

Nous nous proposons ici de voir dans quelle mesure un électron peut traverser par effet tunnel une barrière électrostatique. Très récemment, en effet, différentes propositions ont été publiées dans la littérature [14] [15][16] [17] pour effectuer un confinement latéral des électrons par la commande en tension d'une grille ultra courte. Sous certaines conditions de polarisation, les porteurs peuvent traverser par effet tunnel la barrière électrostatique induite par la tension de grille.

La forme du potentiel que les porteurs doivent affronter est radicalement différente de celle obtenue pour des hétérostructures, tant par l'aspect de la barrière que par ses dimensions beaucoup plus importantes. Il en résulte que les effets tunnel ne sont significatifs que pour des énergies très proches du haut de la barrière. Il faut donc travailler à très basse température afin d'éviter tout étalement de la fonction d'alimentation qui tend à favoriser l'injection thermoionique. Bien que cette condition soit assez restrictive, si l'on vise une application composant, il nous paraît néanmoins intéressant d'évaluer par le calcul les variations du potentiel électrostatique ainsi que sa transparence en fonction de l'énergie des électrons incidents. Nous verrons que les potentiels avec lesquels interagissent les électrons ont une forme parabolique et qu'ainsi la méthode directe de résolution de l'équation de Schrödinger prend toute sa généralité.

### 2.5.1 Détermination des équipotentiels

Nous ne prétendons pas faire ici une étude exhaustive des potentiels vus par un flux d'électrons à l'approche d'une région semiconductrice surmontée d'une grille, mais plutôt d'apporter les premiers éléments de réponse sur ces structures à transport latéral.

L'exemple que nous avons choisi consiste en une zone semiconductrice dopée uniformément à  $10^{16} \text{ cm}^{-3}$ . Le motif de grille déposé de part et d'autre sur cette zone a une longueur de 400 Å. Pour dériver la forme de potentiel, il nous faut résoudre l'équation de Poisson à deux dimensions, lorsqu'un potentiel est appliqué sur la grille. Dans ce but nous avons utilisé un programme de résolution bidimensionnelle de l'équation de Poisson mettant en jeu la méthode du double balayage bien connue au laboratoire et qui sera présenté dans la référence [18].

Nous négligeons l'application de la tension entre les électrodes constituant les

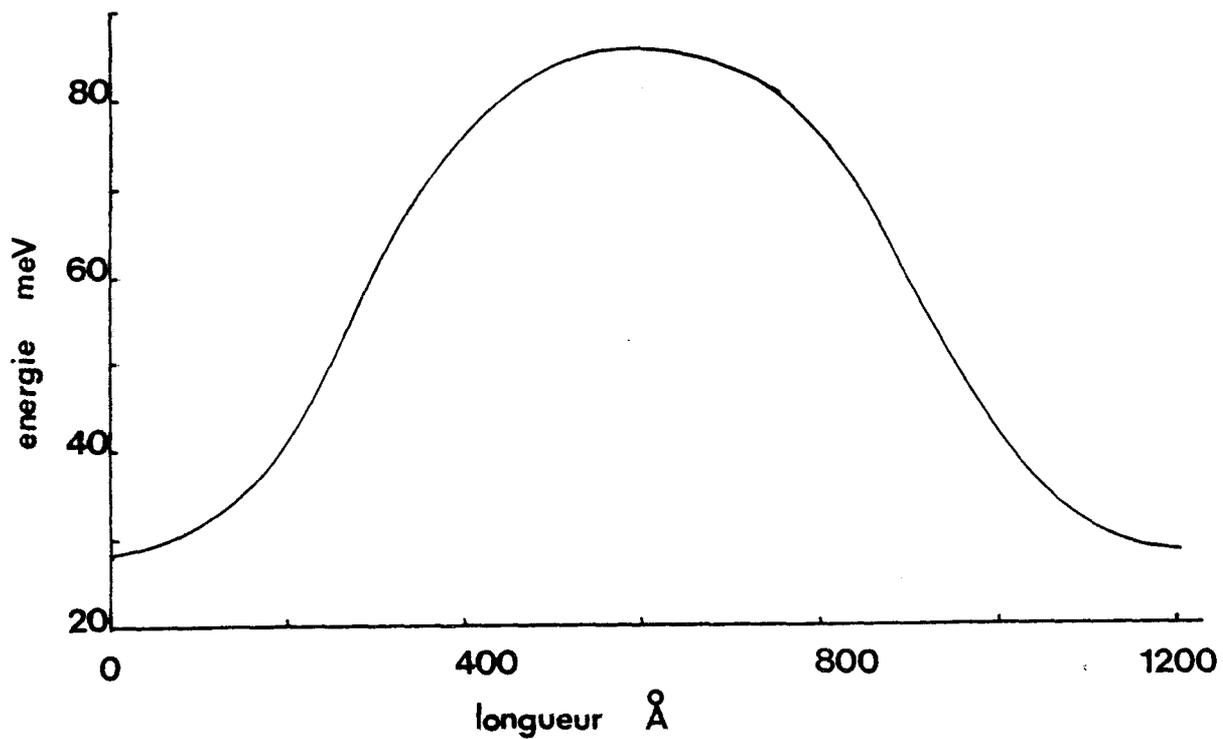


Figure 2. 21 : Evolution de la barrière électrostatique résultant de la formation d'équipotentiels dans la zone semiconductrice.

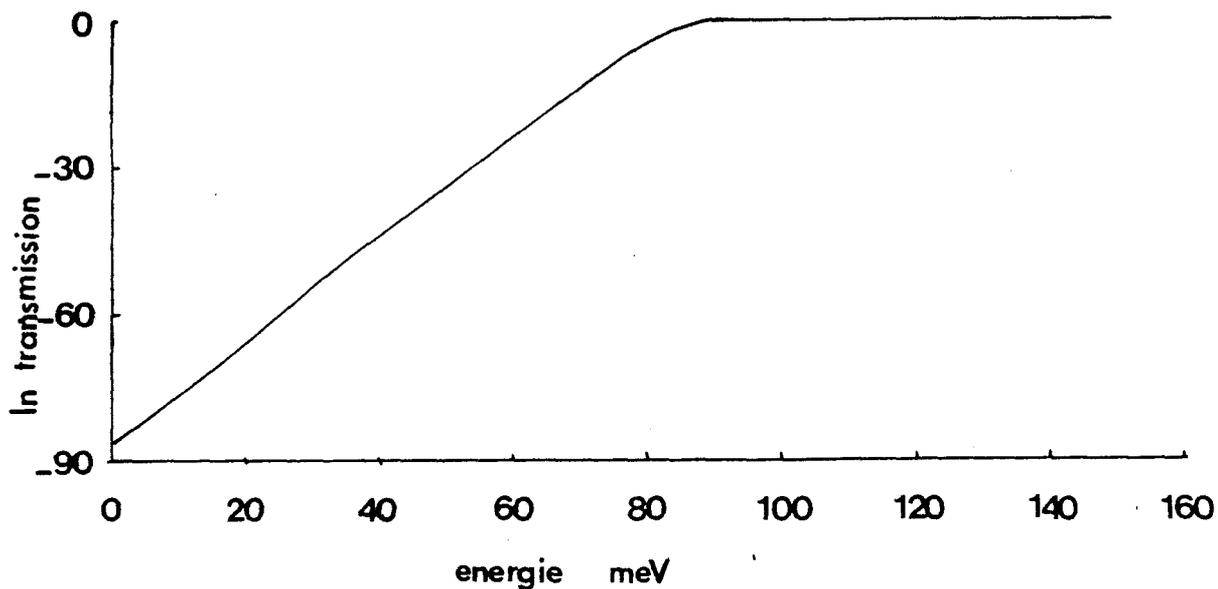


Figure 2. 22 : Spectre de transmission de la barrière électrostatique en absence de polarisation obtenue par la résolution directe de l'équation de Schrödinger

réservoirs d'électrons qui jouent le rôle de source et de drain. Les équipotentielles sont donc symétriques par rapport à un axe perpendiculaire à la grille en son milieu et on peut restreindre la zone de simulation à un demi espace. La figure 2.20 montre les équipotentielles sous la grille lorsqu'on y applique une tension de - 1V. On constate que les effets de bord sont d'autant plus marqués que l'on s'éloigne de l'électrode de commande. Au voisinage de celle-ci le potentiel est relativement plat. Rappelons que nous avons négligé ici le potentiel de surface dont il faudra impérativement tenir compte dans une application pratique. Notons enfin que c'est la grandeur  $E_C - E_F$  qui est ici tracée avec  $E_C$  le bas de la bande de conduction et  $E_F$  le niveau de Fermi constant dans toute la structure. La densité de porteurs libres est obtenue dans le cadre de l'approximation de Thomas-Fermi.

$$N_{(x,y)} = N_{c(x,y)} F_{1/2} \left( \frac{(E_F - E_C(x-y))}{kT} \right)$$

### 2.5.2 Variations du potentiel parallèlement à la grille

Nous nous intéressons aux variations spatiales du bas de la bande de conduction et les valeurs calculées précédemment sont translatées de  $E_F$ . Pour tirer parti au mieux de la fermeture des équipotentielles nous nous sommes placés à une profondeur de 250 Å sous la grille. Les valeurs du potentiel  $V(z)$  parallèlement à la grille sont reportées sur la figure 2.21. La valeur maximale de potentiel est de l'ordre de 80 meV avec un étalement évalué à partir de la largeur à mi-hauteur de plus de 800 Å.

La figure 2.22 donne les variations en fonction de l'énergie longitudinale, de la transmission. Celle-ci initialement très faible (- 80 en échelle logarithmique) atteint de façon monotone une valeur unitaire pour une énergie correspondant au sommet de la barrière. Pour une variation d'énergie de 5 meV la transmission peut être modulée de plus de trois ordres de grandeur. Il est donc bien évident, que la probabilité de passage par effet tunnel n'est non négligeable que pour des valeurs d'énergie de l'ordre de 80 meV où la largeur effective de barrière n'est plus que de 200 Å environ. C'est donc une approche tout à fait différente de celle des hétérostructures de semiconducteurs puisqu'il faut travailler avec des distributions en énergie très proche de la hauteur des barrières de confinement. Ce passage entre une structure totalement opaque et une structure faiblement transparente donne à la barrière électrostatique un comportement en tout ou rien. Dans un dispositif bi-grille, il est possible d'associer aux deux

barrières électrostatiques induites un puits de potentiel où l'on peut observer un effet tunnel résonant avec des transmissions unitaires pour des énergies bien inférieures à la hauteur de barrière. Dans un dispositif à grilles multiples, le transport pourra s'opérer par minibande.

# Bibliographie

- [1] A.T. FROMHBOLD  
Quantum Mechanics for Applied Physics and Engineering  
Academic Press
- [2] Y. ANDO, T. ITOH  
Journal of Applied Physics 61 (n), 1987
- [3] L. DE SAINT POL  
Thèse Université de Lille, 1990
- [4] C. WEISBUCH, B. VINTER  
Quantum semiconductor structures : Fundamentals and applications  
Academic Press, Boston
- [5] K.H. GUNDLACH  
Solid State Electronics, vol 9, 1966
- [6] M. S. LUNDSTROM, R.J.S. SCHULKE  
IEEE Transactions on Electron Devices, Vol ED-30 n ° 9, 1983
- [7] M. S. LUNDSTRÖM, R.J.S. SCHULKE  
Solid State Electronics, vol 25, n ° 8, 1982
- [8] W.R. FRENSLEY  
Solid state Electronics, vol 32, n ° 12, 1989
- [9] Y. GNO, T. MAKINO  
Japanese Journal of Applied Physics, vol 29, n ° 11, 1990
- [10] B. ZIMMERMANN, E. MARCLAY, M. ILEGEMS, P. GUERET  
Journal of Applied Physics, 64 (7), 1988

- [11] F. DANNEVILLE  
Thèse Université de Lille, 1991
- [12] T.W. HICKWOH, P.M. SOLOMON  
Applied Physics Letters, 44 (1), 90, 1984
- [13] D. DELAGEBEAUDEUF, P. DELESCLUSE, P. ETIENNE, J. MASSIES,  
M. LAVIRON, J. CHAPLAT, T. LIUH  
Electronics Letters, vol 28 n ° 1982
- [14] K. ISMAIL, W. CHU, A. YEN, D. A. AUTORIADIS, H.I. SMITH  
Applied Physics Letters 54 (5), 1989
- [15] K. ISMAIL, D. A. AUTORIADIS, H.I. SMITH  
Applied Physics Letters 54 (12), 1989
- [16] K. ISMAIL, W. CHU, A. YEN, D. A. AUTORIADIS, H.I. SMITH  
Applied Physics Letters 52 (13), 1989
- [17] S.J. MANION, L.D. BELL, W.J. KAISER, P. D. MASKER, R.E. MULLER  
Applied Physics Letters 59, (2), July 1991
- [18] V. SADAUNE  
Thèse Université de Lille, à paraître

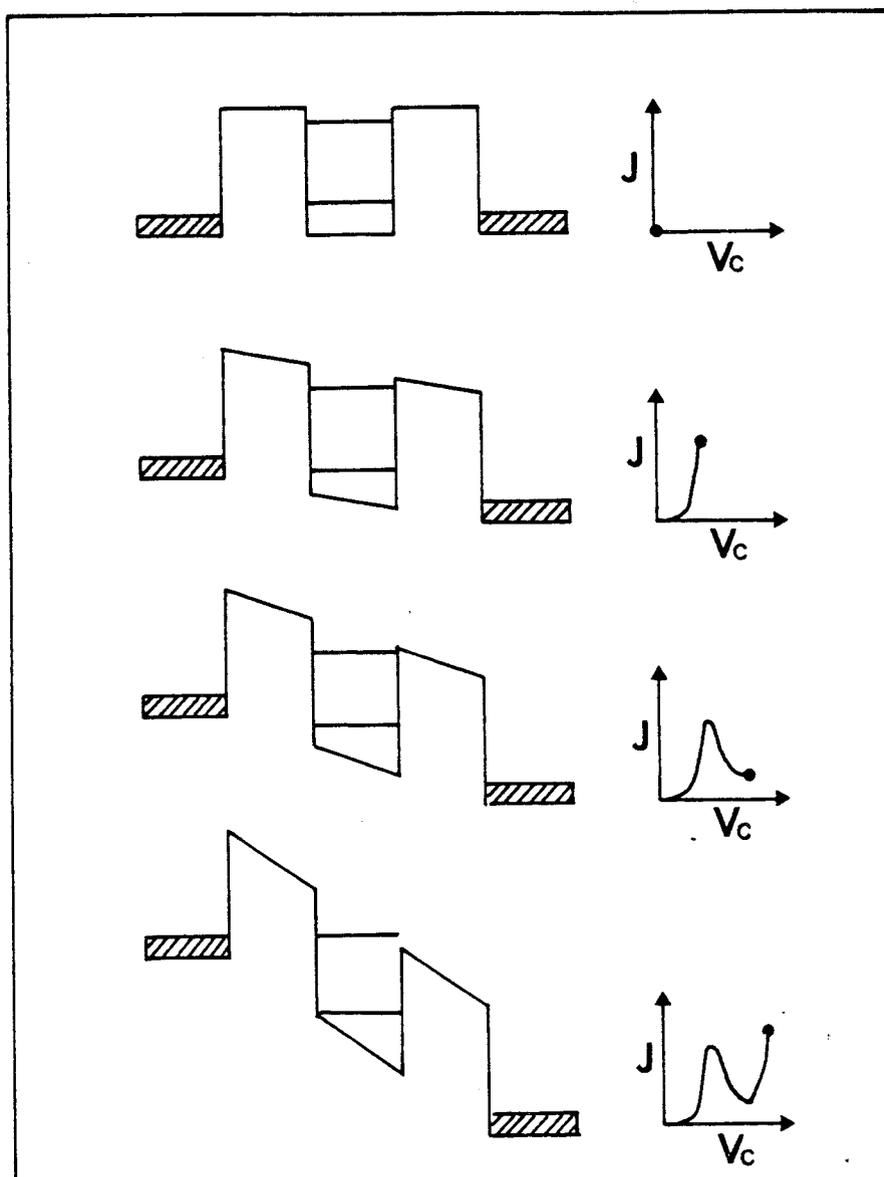
# Table des matières

<b>3</b>	<b>Effet tunnel résonnant dans les double barrières</b>	<b>1</b>
3.1	Structures élémentaires dans le système GaAlAs/GaAs . . . . .	2
3.1.1	Double barrière à gap direct . . . . .	2
3.1.1.1	Approche cohérente . . . . .	3
3.1.1.2	Approche non cohérente . . . . .	4
3.1.2	Double barrière en matériau binaire AlAs/GaAs . . . . .	11
3.1.2.1	Notion de masse de bande interdite . . . . .	11
3.2	Rôle de l'espaceur d'émetteur : injection 2D . . . . .	13
3.2.1	Mise en évidence expérimentale d'une anomalie de conduction activée thermiquement . . . . .	13
3.2.2	Mise en évidence théorique de deux termes de conduction . . . .	14
3.2.2.1	Etude à 300 K . . . . .	14
3.2.2.2	Etude à basse température . . . . .	14
3.2.3	Influence de la largeur des espaceurs . . . . .	15
3.3	Structures élémentaires dans le système $\text{Al}_{0,4}\text{In}_{0,52}\text{As}/\text{Ga}_{0,47}\text{In}_{0,53}\text{As}$ .	17
3.3.1	Double barrière $\text{Al}_{0,48}\text{In}_{0,52}\text{As}/\text{Ga}_{0,47}\text{In}_{0,53}\text{As}$ . . . . .	17
3.3.1.1	Structure à forte densité de courant . . . . .	18
3.3.1.2	Structure à faible densité de courant . . . . .	21

## Chapitre 3

# Effet tunnel résonnant dans les double barrières

Nous nous intéressons ici aux structures double barrière réalisées dans les systèmes  $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}/\text{GaAs}$  et  $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{As}/\text{Ga}_{1-y}\text{In}_y\text{As}$ . Ces hétérostructures ont des dimensions géométriques comparables aux longueurs d'onde associées aux particules participant au transport et présentent des états propres qui facilitent le passage par effet tunnel qui devient résonnant. Le principe de l'effet tunnel résonnant est illustré sur la figure 3.1. En appliquant une polarisation extérieure le premier niveau discret du puits est amené en regard du réservoir d'électrons de l'émetteur. La probabilité de franchir la double barrière est donc accrue et il en résulte une augmentation notable du courant. A plus forte tension, il n'y a plus correspondance entre les énergies des porteurs et le niveau quasi-lié du puits de potentiel et la transmission diminue. Ce caractère discret des états de conduction entraîne une non-linéarité des caractéristiques I-V et permet la réalisation d'oscillateurs très haute fréquence notamment. Le temps de piégeage dans le puits et le temps de traversée des barrières sont très courts et conduisent donc à des temps de réponse des dispositifs de l'ordre de la picoseconde. L'objet de ce chapitre est la modélisation des caractéristiques de conduction des structures à double barrière et sa confrontation aux résultats expérimentaux. On met ainsi en évidence des divergences dans le contraste en courant, dans les valeurs de tension pic, qui ont des origines diverses. Il s'agit d'une part de la perte de cohérence du transport induite par les multiples interactions. Celle-ci sera traitée de façon globale par le modèle de Jonson et Grincwajg [1], sans évaluer la part due à l'émission de phonons, aux impuretés et aux fluctuations d'interfaces.



**Figure 3.1 :** Principe de l'effet tunnel résonnant dans le cas d'une structure double barrière.

Il faut d'autre part souligner que dans la mesure où certaines hétérostructures présentent de fortes discontinuités de potentiel, le transport par effet tunnel à travers les zones interdites se fait loin du bas de la bande de conduction des barrières. La pénétration des fonctions d'onde dans les barrières ne peut alors être traitée en affectant à l'électron la masse de bas de bande de conduction. Il apparaît aussi que, lorsque le matériau utilisé pour former le puits de potentiel est à faible bande interdite (cas du GaInAs, InAs), on se heurte à la non-parabolicité classique de bande de conduction.

De façon générale, la prise en compte des phénomènes de non-parabolicité passe par la description des structures de bande. Nous n'avons pas retenu ici les méthodes du pseudopotentiel et des liaisons fortes qui donnent des relations de dispersion sur toute la zone de Brillouin, et qui sont complexes. Nous nous sommes plutôt tournés vers le modèle de Kane [2][3] à deux bandes qui correspond à une description locale de la structure de bande autour du centre de la zone de Brillouin. Finalement comme les double barrières sont toujours insérées entre deux espaceurs, nous considérons les phénomènes d'injection bi-dimensionnelle qui remettent en cause l'image d'un couplage continuum niveau quantique dans le puits. Nous en étudions les effets sur les caractéristiques I-V.

### 3.1 Structures élémentaires dans le système GaAlAs/GaAs

Nous allons nous attacher à montrer les spécificités des structures à gap direct puis celles des structures à gap indirect dans le système  $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}/\text{GaAs}$ . Nous avons vu en effet au chapitre 1 que la transition entre ces deux états se fait pour une concentration de l'ordre de 40%. Les études porteront sur des double barrières  $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$   $x < 0,4$  et AlAs.

#### 3.1.1 Double barrière à gap direct

La séquence de croissance de l'échantillon pris en référence est schématisée sur la figure 3.2. L'épitaxie a été réalisée par jet moléculaire au laboratoire. La concentration en Aluminium de l'ordre de 35 % permet de négliger la conduction par les vallées satellites. La hauteur de barrière est de 270 meV. Cette valeur relativement faible permet de considérer que les effets tunnel auront lieu dans la bande interdite du  $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$  près du bas de la bande de conduction.

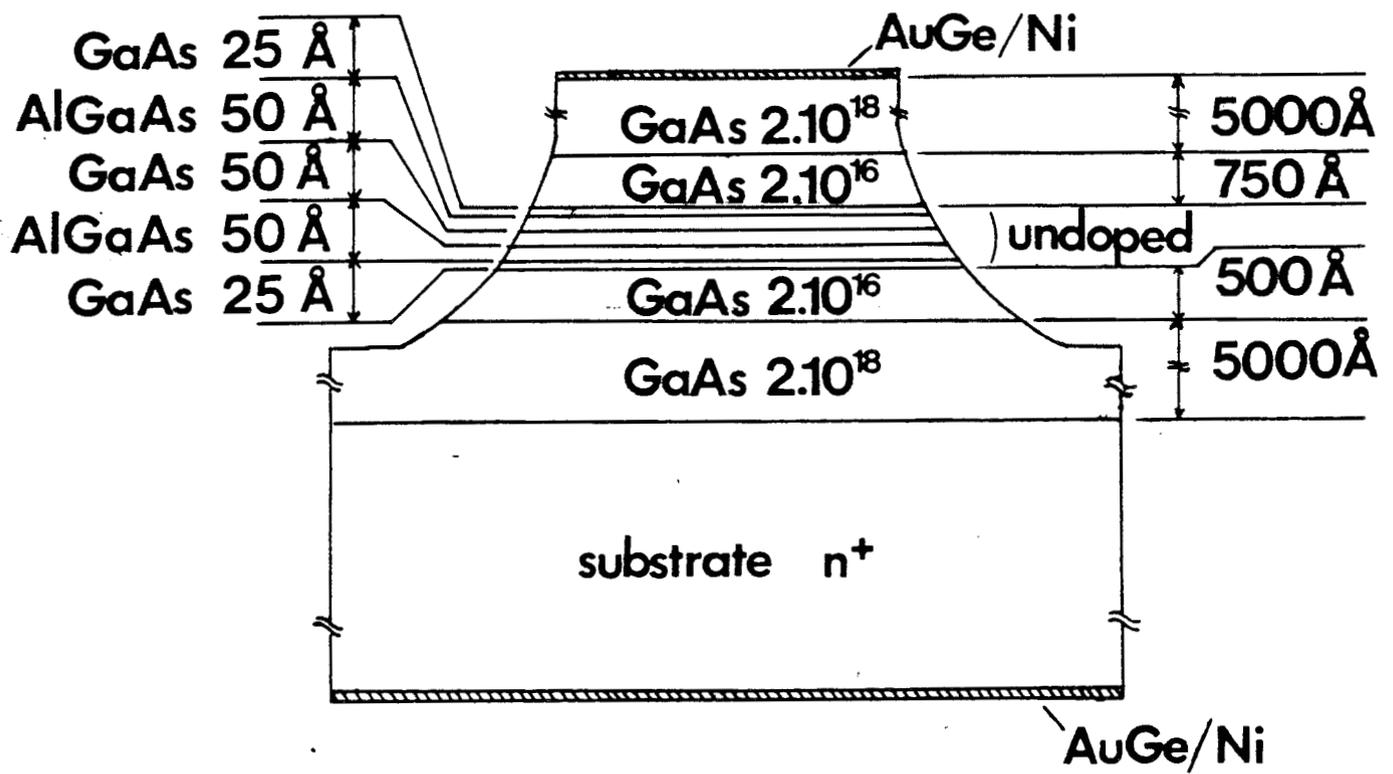
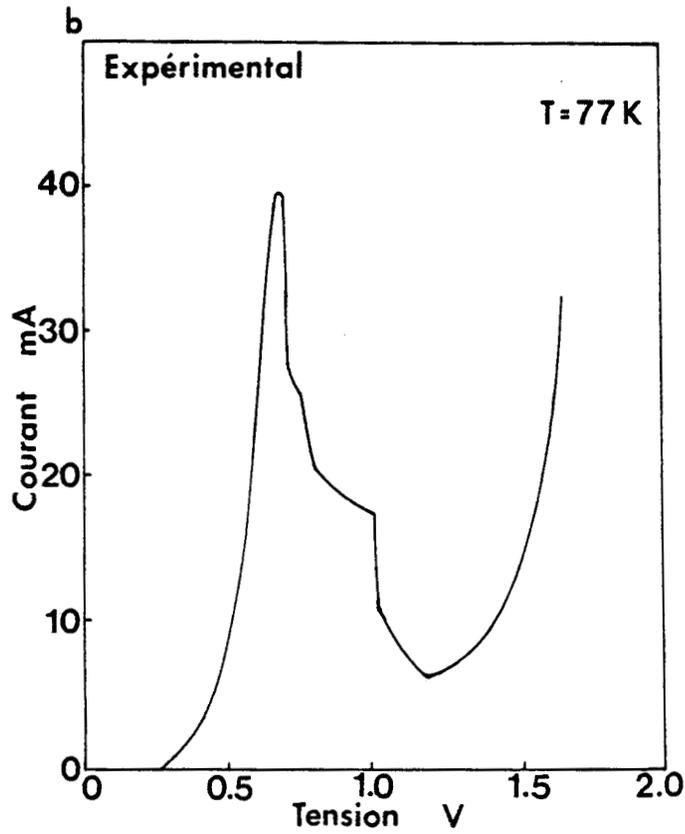
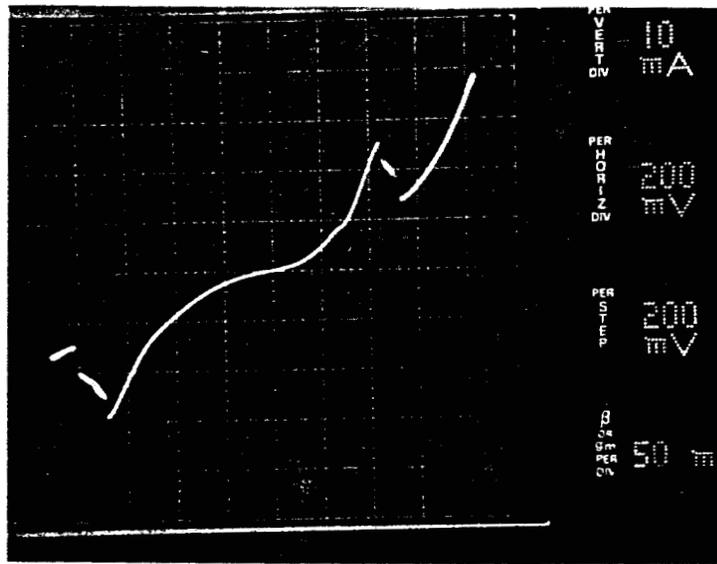


Figure 3.2: Séquence de croissance de la structure double barrière  $Ga_{0,65}Al_{0,35}As/GaAs$ .



**Figure 3.3 :** Caractéristiques courant tension pour un échantillon de  $15\mu m$  de diamètre  
 a)  $T = 300 K$   
 b)  $T = 77 K$

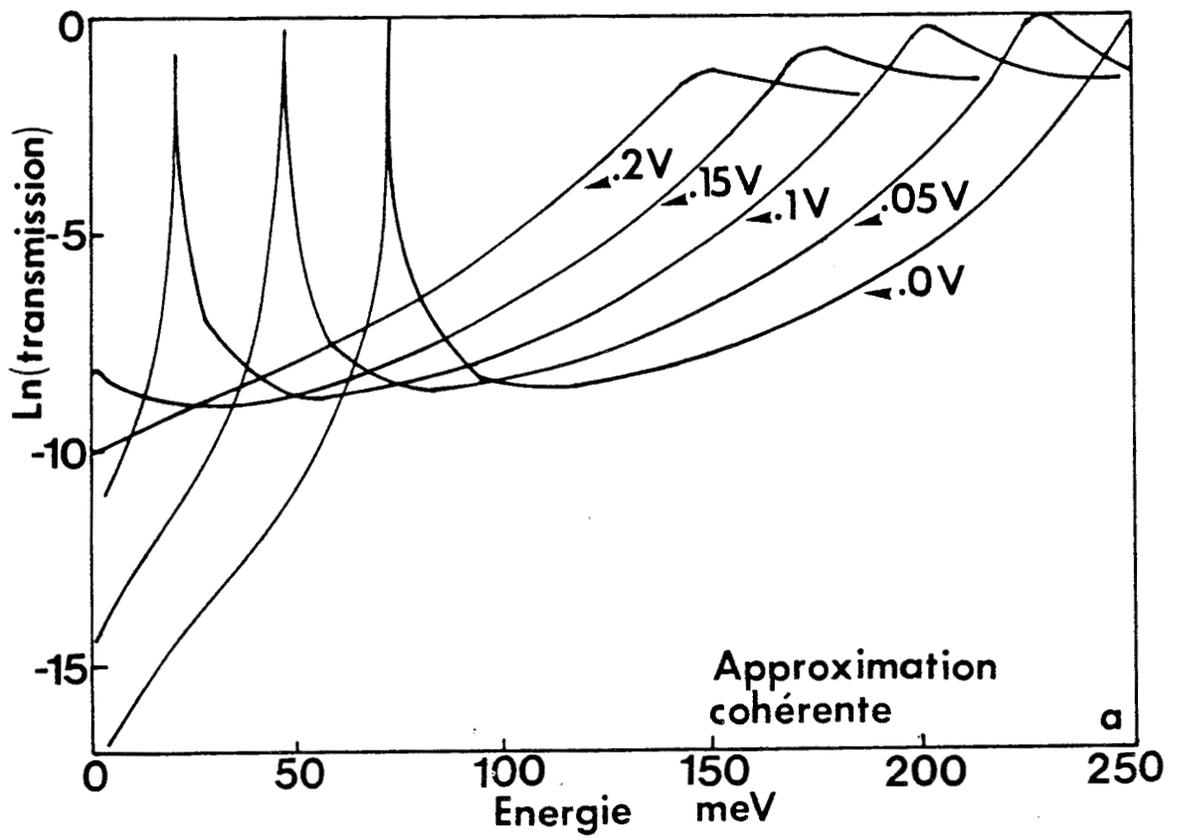


Figure 3.4 : Evolution de la transmission en fonction de l'énergie longitudinale pour différentes polarisations. Approche cohérente.

La structure est symétrique avec des largeurs de barrière et de puits de 50 Å. Des espaceurs peu dopés à  $2.10^{16} \text{cm}^{-3}$  ont été placés de part et d'autre de la double barrière afin de s'affranchir de la diffusion des atomes de Si dans la zone active. Les caractéristiques courant-tension expérimentales pour une diode de  $1,76 \cdot 10^{-6} \text{cm}^2$  sont reportées sur la figure 3.3.

La tension pic est de l'ordre de 0,5V. Les densités de courant sont de 15 kA/cm<sup>2</sup> à 300 K et de 20 kA/cm<sup>2</sup> à 77K. Le contraste en courant de 1,8 : 1 à 300 K atteint 6:1 à la température de l'azote liquide. L'épaule observé en zone de résistance différentielle négative est la conséquence des oscillations spontanées conduisant à des effets d'autopolarisation.

Une des premières étapes dans la modélisation des caractéristiques de courant consiste à ne considérer que la double barrière et à supposer une approche totalement cohérente.

### 3.1.1.1 Approche cohérente

Les évolutions de la transmission, en fonction de l'énergie longitudinale des porteurs sans prise en compte des zones d'espaceurs et en absence de polarisation, sont représentées sur la figure 3.4. Les résultats sont obtenus par la méthode de Runge Kutta. Nous introduisons un saut de masse aux interfaces en prenant une masse de 0,067 dans le GaAs et de 0,096 dans l' $\text{Al}_{0,35}\text{Ga}_{0,65}\text{As}$ . Le pic de transmission à 86 meV correspond au premier niveau quasi lié du puits. Sous polarisation, on assiste à un décalage du niveau résonnant vers les basses énergies avec une diminution sensible de sa valeur maximale. Compte tenu de cette décroissance, le courant pic est obtenu pour une énergie légèrement supérieure à l'énergie de bas de bande de conduction de l'émetteur. C'est une première modification quantitative comparativement au fonctionnement décrit dans l'introduction dans lequel le courant pic doit être obtenu au croisement du premier niveau résonnant avec le bas de la bande de conduction de l'émetteur. Outre l'information sur les énergies de résonance, on peut déduire des courbes de transmission la durée de vie  $\tau_r$  des porteurs sur le niveau quasi-lié. On montre en effet que  $\tau_r$  est obtenu à partir de la largeur à mi-hauteur  $\Gamma_e$  du pic de résonance par la relation :

$$\tau_r = \frac{\hbar}{\Gamma_e}$$

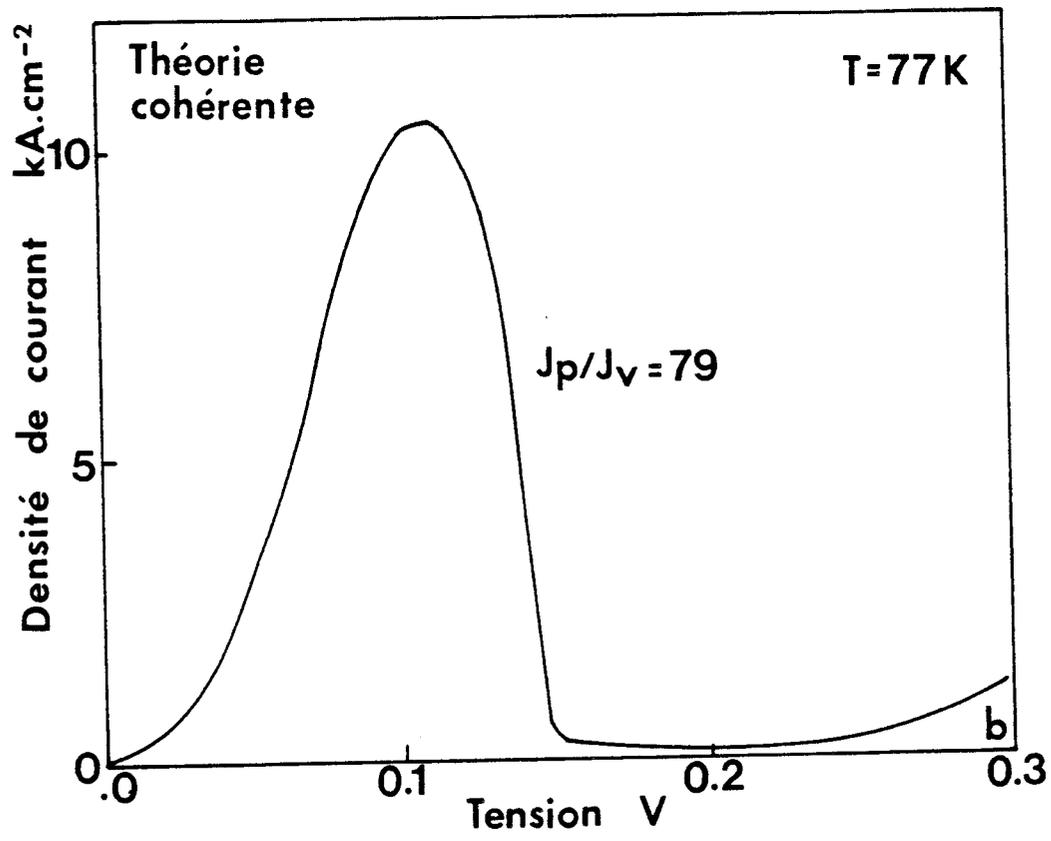


Figure 3.5 : Caractéristique courant-tension calculée à 77 K.

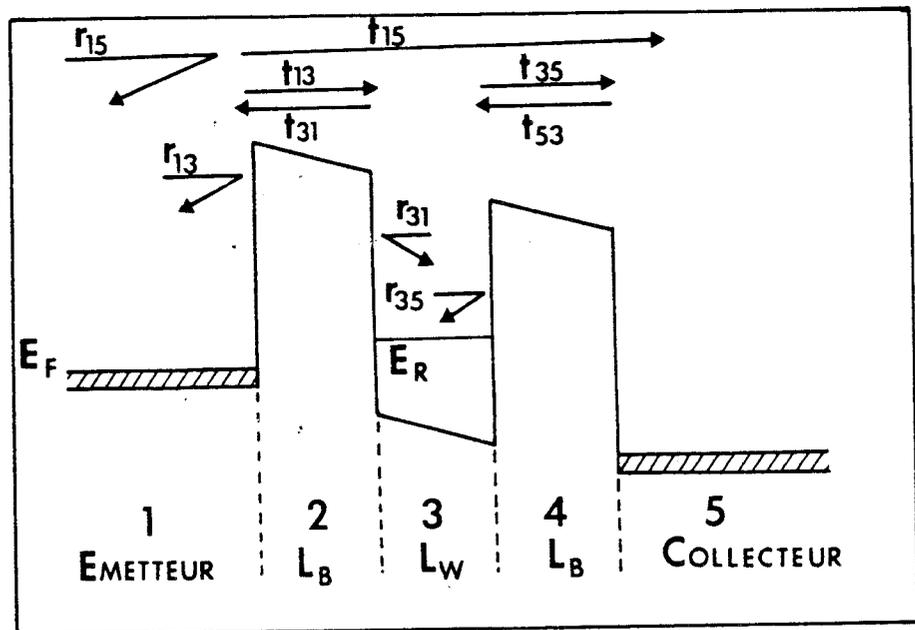


Figure 3.6 : Description des transmissions et réflexions partielles en amplitude dans une structure double barrière.

$\Gamma_e$  représente l'élargissement intrinsèque résultant du couplage entre le continuum et les électrons piégés momentanément dans le puits. Dans cet élargissement collisionnel les interactions mises en jeu se font entre les porteurs et les barrières et conduisent à des transmissions et des réflexions partielles. Pour la structure considérée  $\tau_r$  est typiquement de l'ordre de la picoseconde. On peut également avoir une bonne description de la transmission au voisinage du pic en approximant la forme de la courbe par une Lorentzienne. On obtient alors :

$$T(E) = T_{res} \frac{1}{1 + [(E_r - E)/\Gamma_e/2]^2}$$

où  $T_{res}$  désigne la transmission à la résonance,  $E_r$  le niveau résonnant.  $T_{res}$  prend une valeur unitaire à l'équilibre lorsque les structures sont symétriques. La caractéristique I-V, figure 3.5, calculée à 77 K est obtenue par une méthode d'intégration à pas variable [8] du produit de la fonction d'alimentation et de la transmission. Le niveau de Fermi est pris à 68 meV, ce qui correspond à un dopage d'émetteur de  $10^{18} \text{cm}^{-3}$ . On obtient un bon ordre de grandeur pour l'évaluation du courant pic ( $12 \text{ kA/cm}^2$  au lieu de  $20 \text{ kA/cm}^2$  observé). La valeur du contraste en courant est par contre très largement surestimée (79 au lieu de 6 à 77K). Il faut donc réévaluer la valeur du courant vallée en introduisant l'effet des interactions intervenant lors du passage par effet tunnel des porteurs.

### 3.1.1.2 Approche non cohérente

On peut concevoir que lorsqu'il existe des chocs inélastiques au niveau de l'énergie longitudinale, un porteur dont l'énergie incidente n'est pas égale à l'énergie de résonance puisse profiter malgré tout du chemin préférentiel constitué par l'énergie propre, en émettant ou en absorbant un phonon.

De façon schématique, il y a possibilité de créations de bandes latérales de transmission qui conduisent dans une image continue à un élargissement de la figure de transmission. Il s'agit ici de traduire cet élargissement en faisant abstraction de la nature microscopique des interactions. Dans ce but, nous utilisons le formalisme de Jonson et Grincwajg [1] qui permet d'élargir artificiellement la transmission par un traitement phénoménologique. La figure 3.6 décrit la partition de la structure double barrière en cinq régions. On définit alors les coefficients de transmission et de réflexion en amplitude dans les zones classiquement permises. L'astuce consiste à introduire un coefficient  $\gamma$  compris entre 0 et 1 qui traduit le pourcentage d'électrons n'ayant subi

aucune interaction. La perte de cohérence au niveau de  $k_z$  est due aux perturbations qui affectent les électrons en modifiant leurs phases lors des allers et retours dans le puits. On parle alors d'interactions inélastiques. En fait ce modèle se rapproche de celui proposé par Büttiker [5] qui introduit un paramètre  $\epsilon$  ayant la même signification que la facteur  $\gamma$ . Ce facteur  $\gamma$  peut être relié à des grandeurs plus physiques telles qu'un taux d'interaction à l'aide de la relation  $\gamma = \exp - 2 \frac{def f}{\xi}$ , où  $\xi$  est la longueur de cohérence de l'onde,  $def f$  est la longueur effective du puits incluant les profondeurs de pénétration des fonctions d'onde au voisinage des interfaces puits-barrières.

Pour le calcul de la transmission globale de la structure, on peut considérer séparément le cas des transmissions cohérente et incohérente. En ce qui concerne la transmission cohérente  $T_{15}^{coh}$  entre les zones 1 et 5 d'émetteur et de collecteur, il suffit de faire la somme des ondes partiellement transmises à chaque aller et retour.

$$t_{15} = t_{13} t_{35} + t_{13} \gamma r_{35} r_{31} t_{35} + t_{13} (\gamma r_{35} r_{31})^2 t_{35} + \dots$$

$$\dots + t_{13} (\gamma r_{35} r_{31})^n t_{35} + \dots$$

$$r_{15} = r_{13} + t_{13} \gamma r_{35} t_{31} = t_{13} r_{35} r_{31} t_{31} = t_{13} \gamma r_{35} (r_{31} \gamma r_{35})^2 t_{31} = \dots$$

$$\dots = t_{13} \gamma r_{35} (\gamma r_{31} r_{35})^n t_{31} = \dots$$

En sommant à l'infini :

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

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

les coefficients de transmission et de réflexion en puissance  $T_{15}^{coh}$  et  $R_{15}^{coh}$  sont alors définis par :

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

$$R_{15}^{coh} = |r_{15}^{coh}|^2$$

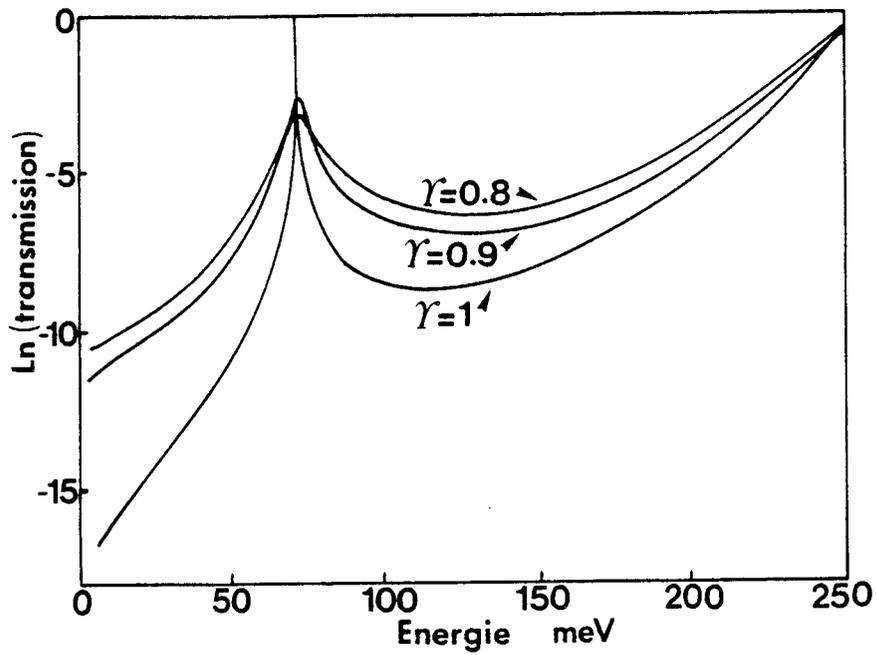


Figure 3.7: Evolution du spectre de transmission dans une approche non cohérente pour deux valeurs de  $\gamma$ .

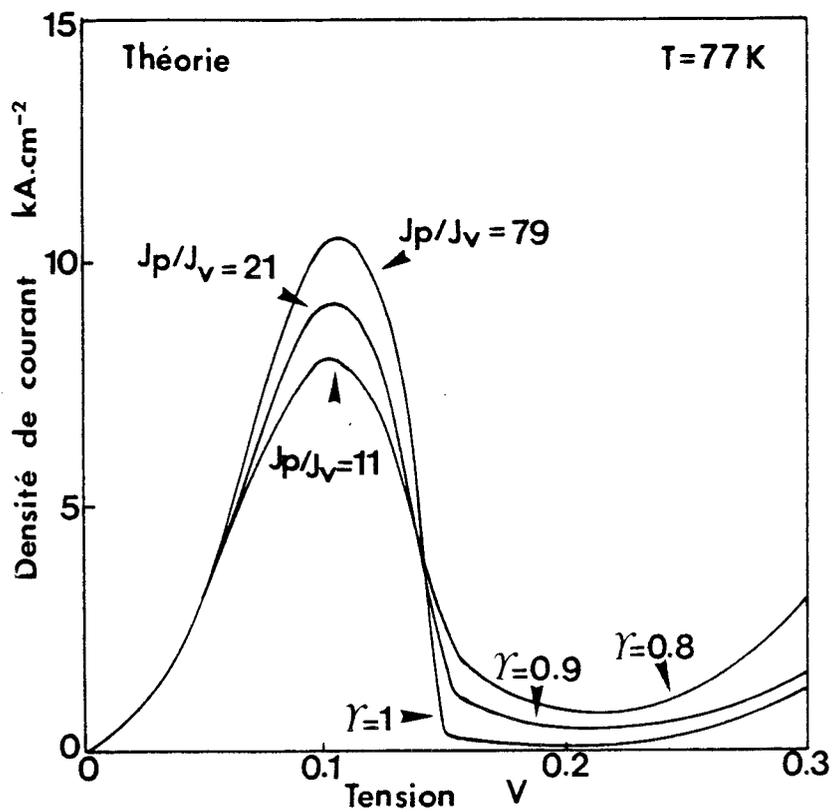


Figure 3.8 : Caractéristiques courant-tension calculées pour différentes valeurs de  $\gamma$ .

En ce qui concerne la contribution incohérente nous supposons que les porteurs ayant perdu la mémoire de leur phase vont s'enfuir vers le collecteur. La contribution incohérente prend alors la forme :

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

La transmission totale se calcule en sommant les contributions cohérente et incohérente.

$$T_{15} = T_{15}^{coh} + T_{15}^{inc}$$

Les effets d'une perte de cohérence au niveau des probabilités de transmission à l'équilibre sont illustrés sur la figure 3.7. La structure simulée est celle considérée précédemment. Deux valeurs de coefficients  $\gamma$  égales à 0,9 et 0,8 sont prises en exemple et comparées au cas de l'approche cohérente où  $\gamma = 1$ . La perte de cohérence se traduit par un élargissement de la transmission qui s'accompagne d'une diminution de sa valeur maximale. Nous allons voir cependant que la conjugaison de ces deux effets permet de conserver le produit de la fonction d'alimentation et de la transmission et donc la valeur du courant pic. En revanche on peut s'attendre à une augmentation des valeurs de courant vallée résultant de l'accroissement des valeurs de transmission hors résonance. De façon très schématique on peut exprimer la largeur à mi hauteur du pic de transmission sous la forme  $\Gamma = \Gamma_c + \Gamma_i$ . Dans cette expression  $\Gamma_i$  est l'élargissement naturel dû au couplage avec le continuum,  $\Gamma_c$  est l'élargissement collisionnel résultant de la perte de cohérence. Globalement on assiste à une diminution du contraste en courant qui est inversement proportionnel à l'élargissement  $\Gamma$ .

Ces considérations sont vérifiées par les calculs de courant dont les résultats obtenus pour  $\gamma = 0,9$  et  $\gamma = 0,8$  sont donnés sur la figure 3.8. Une valeur du facteur  $\gamma$  égale à 0.8 permet de rendre compte du contraste en courant expérimental (11 au lieu de 6). Si on s'intéresse maintenant à l'évaluation du temps moyen que passent les porteurs sur le niveau quantique on constate qu'il est plus faible que dans le cas de l'approche cohérente puisque  $\Gamma_c$  est très largement supérieur à  $\Gamma_i$ . Ceci est en contradiction apparente avec la valeur de densité de courant qui reste inchangée et qui devrait logiquement suivre la diminution des temps de vie. En fait, il faut bien voir que le traitement que nous venons de proposer tend à globaliser les interactions non seulement dans leur origine mais aussi dans les plages de tension. Or expérimentalement on observe que les interactions apparaissent dans les caractéristiques I-V dans des conditions de polarisation correspondant au courant vallée lorsque le niveau quantique est inaccessible aux électrons incidents. Un pic de phonons peut être mis en évidence à très

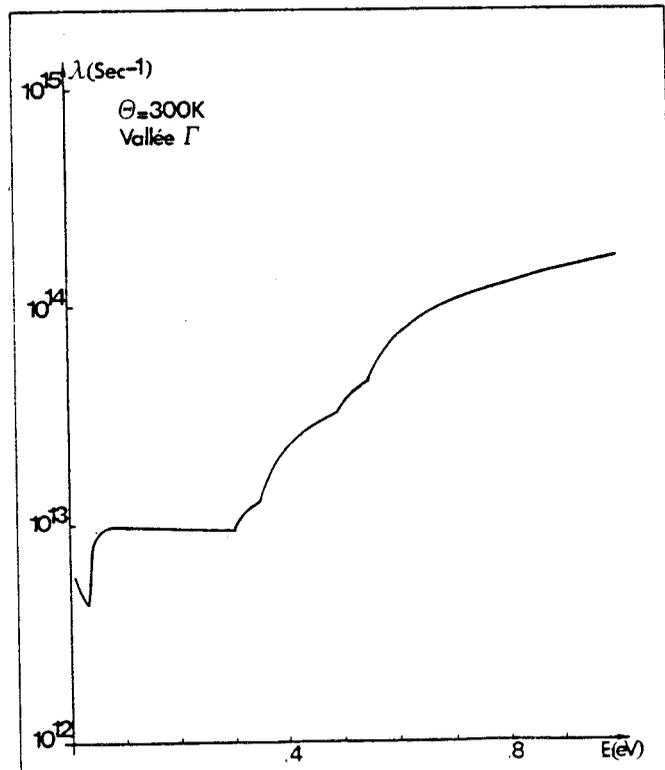


Figure 3.9: Taux d'interaction en vallée centrale à 300 K.

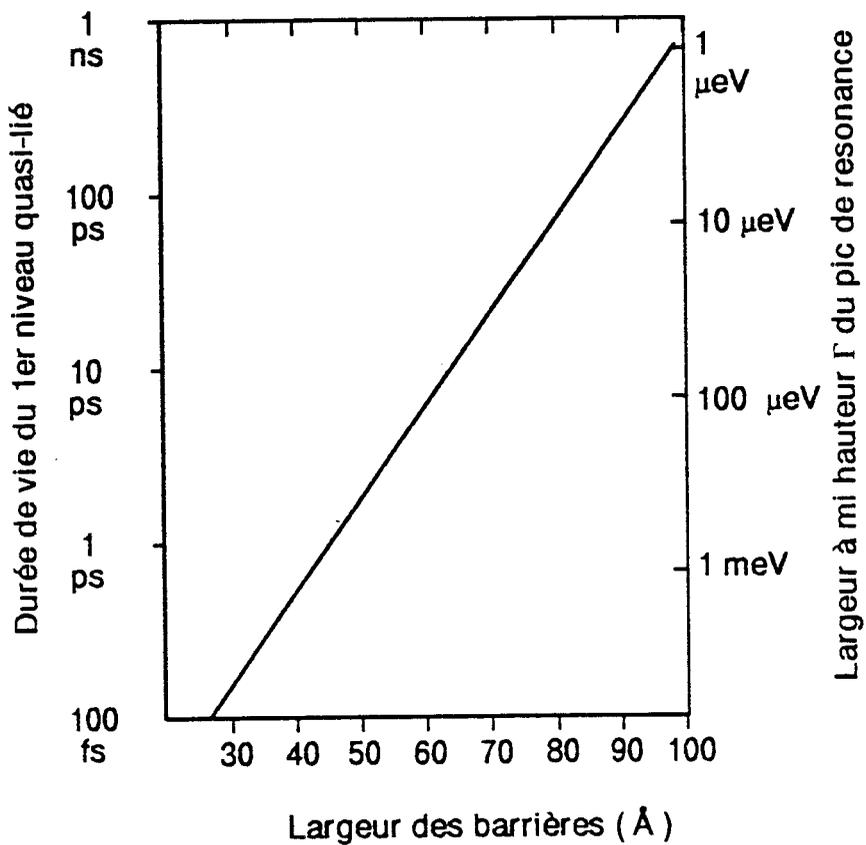


Figure 3.10: Durée de vie du premier niveau quasi-lié d'une structure symétrique GaAlAs ( $x = 0,3$ )/GaAs en fonction de la largeur de barrière.  $\Delta EC = 230$  meV.

basse température dans certaines structures et introduit une deuxième composante de courant résonnant dans le courant vallée [6]. Il semble donc que l'effet tunnel assisté par phonons joue un rôle plus important dans les situations de faible conduction que dans le cas où la transmission est résonnante. Ces différences ne peuvent pas être prises en compte par un modèle phénoménologique et expliquent le paradoxe qui consiste à prévoir une diminution des durées de vie sans rapport avec l'expérience.

On considère maintenant la longueur de cohérence  $\xi$  déduite de l'expérience. Comme on se trouve dans un système confiné, il peut être judicieux de lui substituer une information temporelle à l'aide d'un temps de libre parcours moyen. Ce passage se fait à l'aide de la relation  $\xi = \tau_i v$  où  $v$  est la vitesse du paquet d'onde représentative de la population d'électrons, piégée dans le puits et  $1/\tau_i$  est la fréquence décrivant la perte de cohérence. En utilisant la valeur de  $\gamma$  égale à 0,8 et en assimilant  $def$  à la largeur du puits de 50 Å on obtient  $\xi$  compris entre 400 et 500 Å. La vitesse peut être calculée à l'énergie de résonance déduite de la courbe de transmission cohérente et qui vaut 80 meV pour des tensions nulles. On obtient alors une vitesse balistique de  $6 \cdot 10^7$  cm/s. Le temps  $\tau_i$  est alors voisin de  $10^{-13}$  s. Cette valeur semble cohérente pour des interactions mettant en jeu des collisions sur phonons. Pour s'en rendre compte, nous avons tracé sur la figure 3.9 la fréquence de collisions dans la vallée centrale  $\Gamma$  calculée pour du GaAs massif en sommant l'ensemble des interactions. On constate que très rapidement les collisions se produisent toutes les  $10^{-13}$  s. La figure 3.10 donne les temps de durée de vie en fonction de la largeur de barrière pour la structure considérée [8]. On constate que pour  $L_b = 50$  Å le temps de durée de vie est de 1 ps d'un ordre de grandeur supérieur au taux d'interaction moyen. Dans ces conditions, il est inévitable que les électrons, pendant le court laps de temps où ils sont piégés à l'intérieur du puits, subissent des interactions qui détruisent leur cohérence.

### Optimisation des structures.

Il nous semble intéressant d'apporter pour les structures GaAlAs à gap direct quelques éléments d'optimisation pour le courant pic et le contraste en courant. Ces deux paramètres sont primordiaux pour toutes les applications analogiques ou numériques des doubles barrières. Pour une utilisation en oscillateur, les densités de courant doivent être les plus élevées possibles pour diminuer la constante de temps RC. A titre d'exemple les meilleures densités de courant expérimentales sont de 400 kA/cm<sup>2</sup> et les

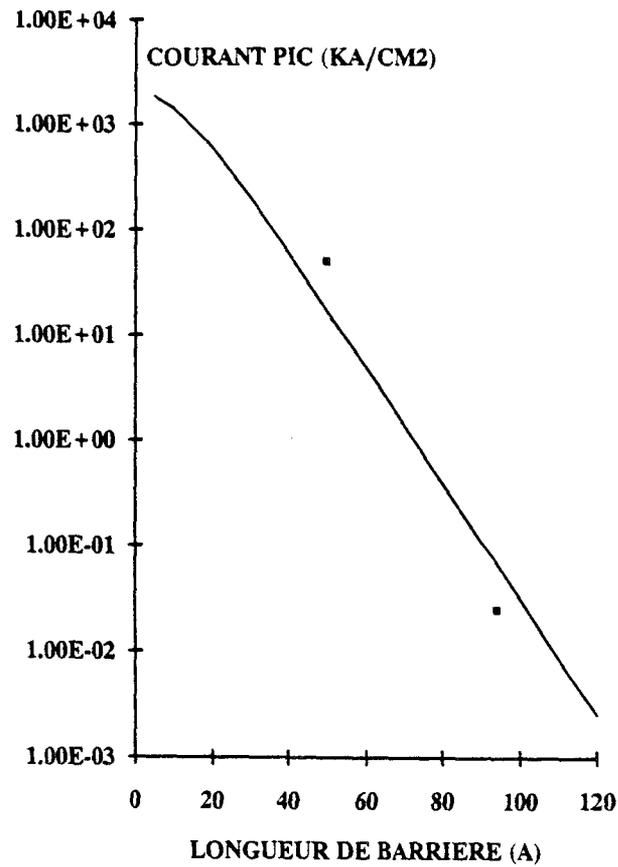


Figure 3.11 : Evolution du courant pic pour une double barrière  $Ga_{0,65}Al_{0,35}As/GaAs$  en fonction de la longueur de barrière.

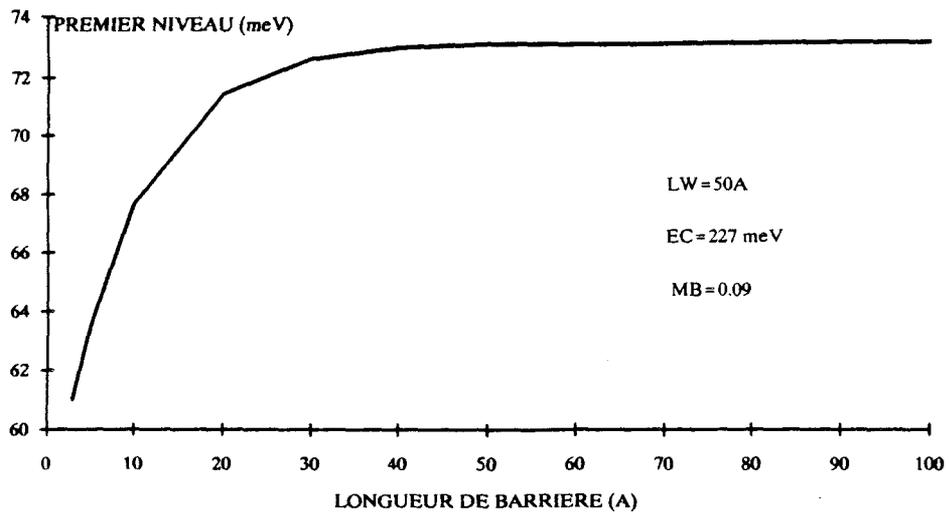


Figure 3.12 : Variation de l'énergie du premier niveau quasi-lié dans une structure double barrière en fonction de la largeur de barrière.

fréquences d'oscillation se rapprochent du terahertz [9].

- Etude du courant pic

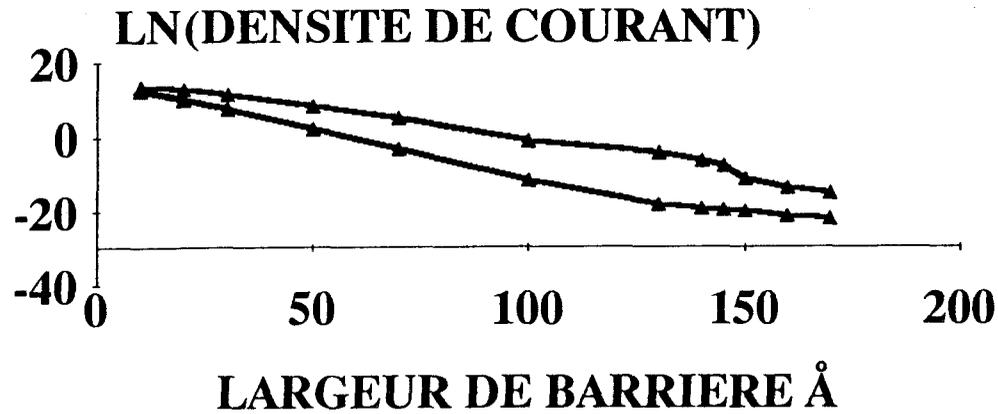
L'évolution du courant pic calculée pour une structure barrière puits  $\text{Al}_{0,35}\text{Ga}_{0,65}\text{As}/\text{GaAs}$  en fonction de la largeur de barrière est présente en échelle semi-logarithmique sur la figure 3.11. La température est de 77 K le niveau de Fermi de 68 meV. Les densités de courant varient entre 10  $\text{kA}/\text{cm}^2$  et 100  $\text{kA}/\text{cm}^2$  pour  $L_b$  comprise entre 30 Å et 100 Å. On observe pour des largeurs de barrière supérieures à 30 Å une dépendance linéaire de  $\ln(J_{pic})$  en fonction de  $L_b$ . Cette dépendance exponentielle de la valeur du courant pic peut se comprendre dans la mesure où  $J_{pic}$  est proportionnelle à la transparence de la barrière la plus limitante [8]. Guéret, dans la référence [4], a montré que l'expression approchée du courant pic est :

$$J_p = \frac{mq}{2\pi\hbar^3} E_F E_r e^{-k_b L_b}$$

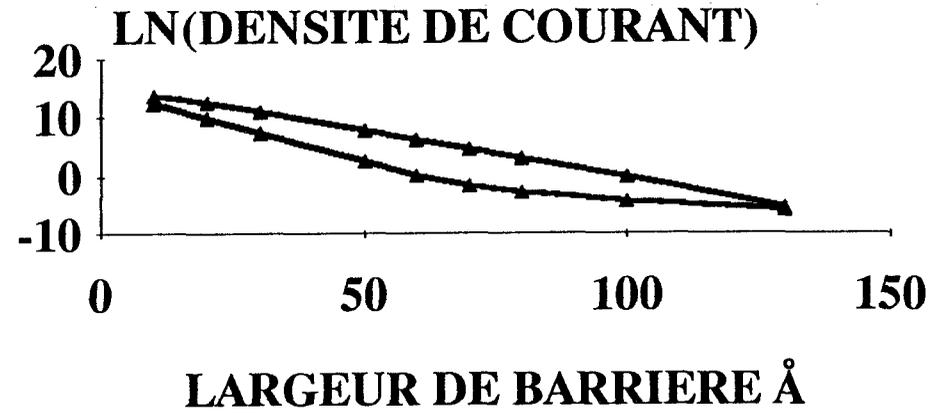
où  $E_p$  et  $E_r$  sont respectivement l'énergie de Fermi et l'énergie résonnante.  $E_r$  est ici égale à 73 meV.  $k_b$  est la constante d'atténuation de l'onde évanescence dans la barrière. Sur cette même figure, nous avons reporté les valeurs mesurées de  $J_{pic}$  pour deux structures expérimentales dont les paramètres de composition sont voisins de ceux de la structure théorique. Ces relevés ont été effectués à 77 K dans la mesure où, à la température ambiante, les hétérostructures résonnantes avec des barrières larges ne présentent pas d'effet de résistance différentielle négative permettant de pointer la densité de courant pic comme nous le verrons par la suite. Les valeurs conséquentes des rapports  $J_{pic}/J_{vallée}$ , égale à 2 pour  $L_b = 50$  Å et égale à 16 pour  $L_b = 95$  Å attestent de la qualité de ces structures. Les densités de courant sont quant à elles en accord tout-à-fait raisonnable avec les calculs. Pour  $L_b$  inférieure à 30 Å on constate que la densité de courant tend à saturer. Cet effet est une conséquence directe de l'affaiblissement progressif du confinement qui se traduit par une chute de l'énergie du niveau résonnant au fur et à mesure que les largeurs de barrière diminuent, figure 3.12. La dépendance du courant pic n'est plus alors exclusivement en  $\exp(-k_b L_b)$ .

Des largeurs de barrière de l'ordre de 8,5 Å correspondant à trois monocouches nous semblent être la limite de définition d'une barrière de potentiel. La densité de courant pic théorique est voisine de  $10^6$   $\text{A}/\text{cm}^2$ . Cette valeur extrêmement élevée peut paraître surprenante pour un dispositif qui fait appel à un processus de filtrage et donc

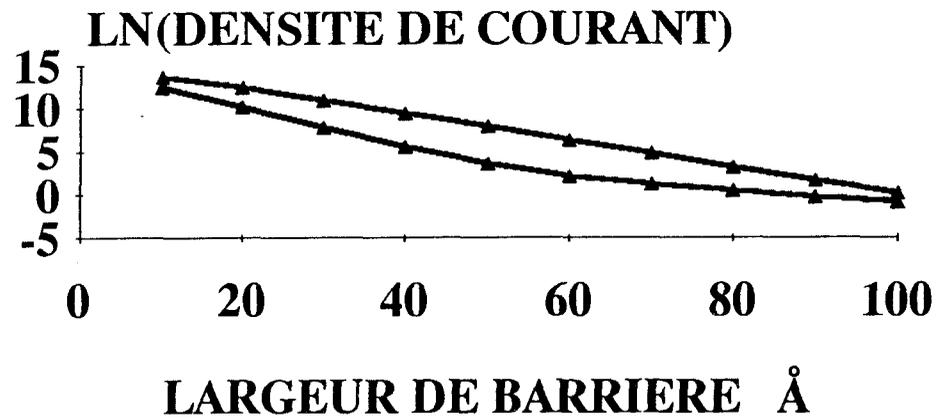
T=77 K



T=150 K



T=200 K



T=300 K

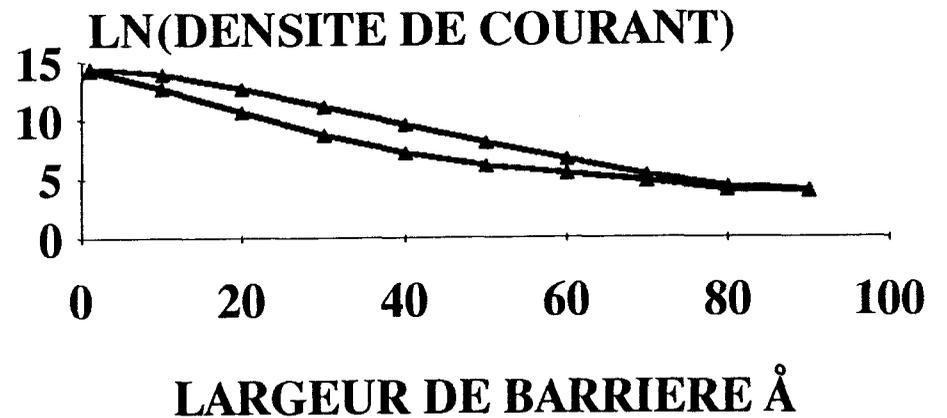


Figure 3.13 : Evolution des densités de courant pic et de courant vallée en fonction de la longueur de barrière pour différentes températures.

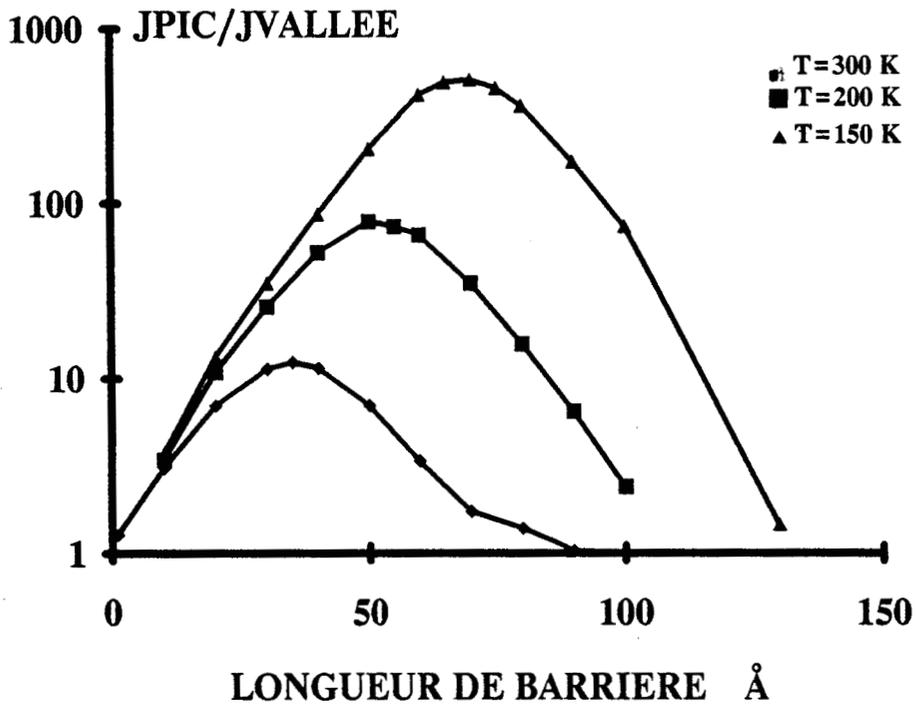


Figure 3.14 : Evolution du contraste en courant en fonction de la largeur de barrière pour différentes températures.

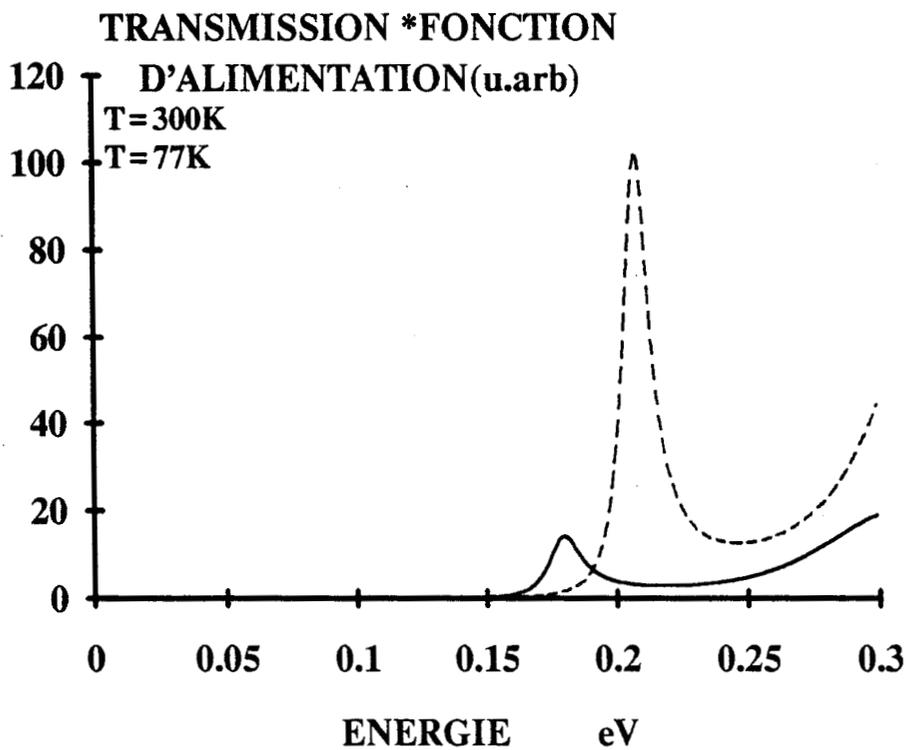


Figure 3.15 : Evolution du produit de la fonction d'alimentation pour la transmission pour des polarisations correspondant au courant vallée.

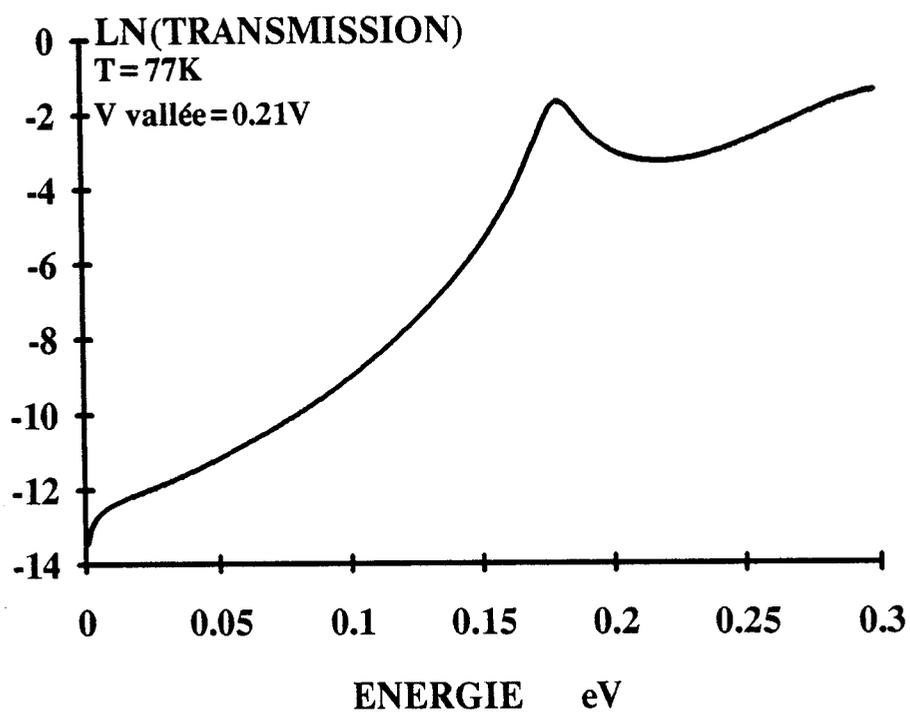
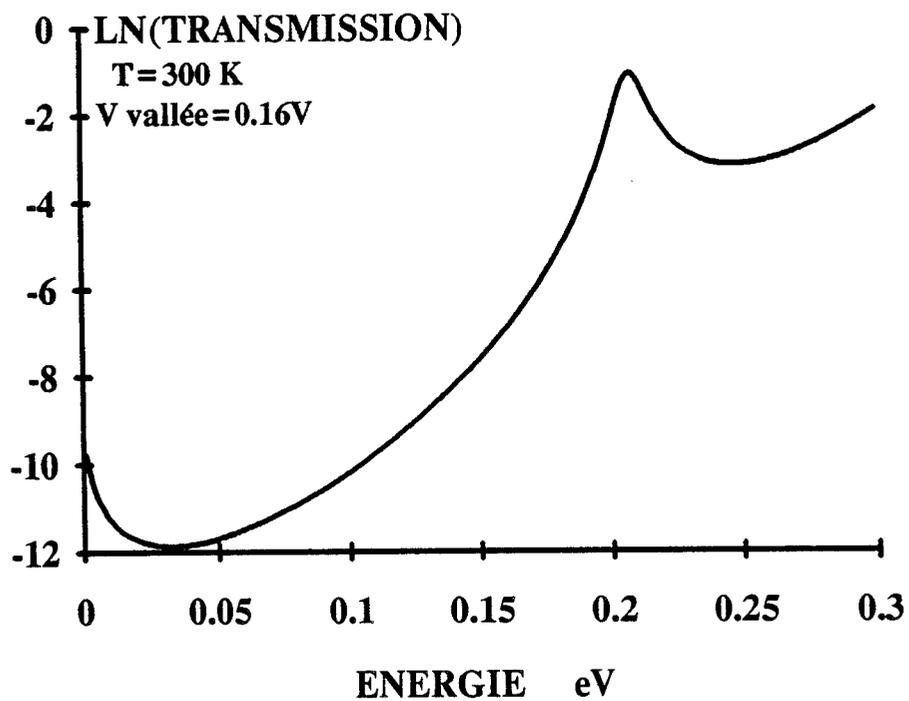


Figure 3.16: Mise en évidence de la contribution du second niveau quasi-lié au courant vallée.

à une sélection dans une population d'électrons dispersée en énergie. Il faut cependant se rappeler que les électrons acquièrent des vitesses balistiques extrêmement élevées comme nous avons pu nous en rendre compte dans le calcul du taux d'interaction.

- Etude du contraste en courant.

L'ensemble des figures 3.13a à 3.13d donne les résultats des simulations de  $J_{pic}$  et  $J_{vallée}$  pour un échantillon de température compris entre 77 K et 300 K. On constate une rupture de pente dans l'évolution du courant vallée qui se produit pour des largeurs de barrière d'autant plus faibles que la température est élevée. Si on transpose ces résultats en termes de contraste en courant on obtient les données reportées sur la figure 3.14 qui font apparaître une largeur de barrière optimale non prévue par les analyses simplifiées des dispositifs résonnants. On peut montrer en effet dans une première approche qu'une hétérostructure double barrière-puits se comporte hors résonance comme si les deux barrières étaient accolées [8]. Cette assimilation à une barrière équivalente de largeur double fait que dans un cas idéal le courant vallée varierait en  $\exp - 4 k_b L_b$ . On vérifie effectivement cette loi exponentielle du courant vallée pour les faibles largeurs de barrières. Par contre cette loi de variation n'est plus valable lorsque l'on considère les effets de température qui favorisent la conduction résonnante avec le second niveau ainsi que le courant assisté thermiquement. Nous avons reporté sur la figure 3.15 l'intégrande utilisé dans le calcul du courant qui correspond au produit de la fonction d'alimentation  $F$  et de la probabilité de transmission  $T$  pour des polarisations correspondant au courant vallée à 300 K et à 77 K. La largeur de barrière considérée est de 50 Å. Les deux pics mis en évidence sur cette figure correspondent à une contribution parasite résonnante via le deuxième niveau comme le prouvent les évolutions de la transmission reportées sur la figure 3.16 pour des polarisations correspondant au courant vallée. L'écart en énergie entre le niveau fondamental et le premier niveau excité pour la structure étudiée est de l'ordre de 210 meV. Dans des conditions de courant vallée, le niveau fondamental est situé très près en deça du bas de bande de conduction de l'émetteur correspondant au zéro en énergie. Il est par conséquent inaccessible aux porteurs situés dans le réservoir de l'émetteur. La seconde résonance en favorisant la conduction entraîne une augmentation du produit  $F \times T$  d'autant plus nette que la température est élevée. Pour  $T = 77$  K la contribution résonnante parasite est faible et l'approche simplifiée relative à une évolution exponentielle de  $J_{vallée}$  est tout à fait vérifiée. Ce n'est plus le cas pour  $T = 300$  K où le maximum présenté par  $F \times T$  est très marqué. On se trouve alors à la rupture de pente dans les variations

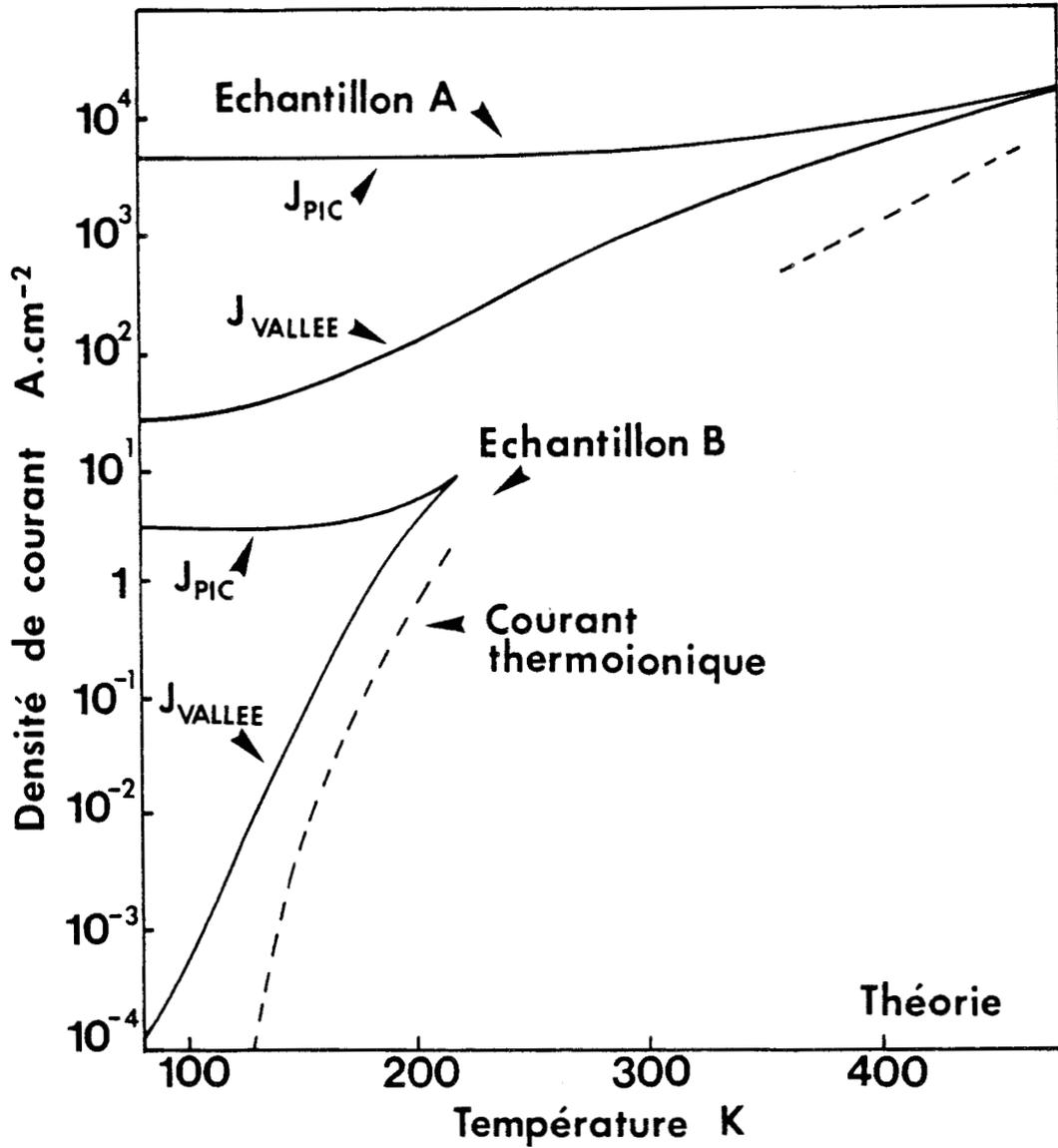


Figure 3.17: Relevés expérimentaux du courant pic et du courant vallée pour deux échantillons  $Ga_{0,65}Al_{0,35}As/GaAs$   
 a)  $L_B = 50 \text{ \AA}$   
 b)  $L_B = 100 \text{ \AA}$

de  $\ln(J_{\text{vallée}})$  en fonction de  $L_b$ . On peut donc conclure à partir de cette analyse qu'il est toujours beaucoup plus favorable de travailler avec des structures double barrière présentant un second niveau le plus élevé possible. Chaque niveau lié est donné par l'expression  $E_n = \frac{n^2 \hbar^2 \pi^2}{2m_b^* L_b^2}$ . Le choix de structures pseudomorphiques  $\text{Ga}_{1-x}\text{In}_x\text{As}/\text{GaAs}$  permet de réduire la largeur du puits du fait de la faible masse effective de l'électron dans le  $\text{GaInAs}$  et ainsi on obtient un écart important entre le niveau fondamental et le premier niveau excité. On peut par ailleurs se rendre compte de l'influence de la discontinuité de potentiel  $\Delta E_c$  et de la largeur de barrière  $L_b$  en s'intéressant à la notion de température critique pour laquelle l'effet de résistance différentielle négative disparaît. On montre que [10] :

$$T_c = \frac{\hbar}{2k_B} \frac{1}{L_b} \sqrt{\frac{\Delta E_c}{2m_{bar}^*}}$$

où  $k_B$  est la constante de Boltzmann,  $m_{bar}^*$  la masse effective des électrons dans la barrière de potentiel. On a donc intérêt à travailler avec des structures présentant des largeurs de barrière les plus faibles possibles ainsi que des discontinuités de potentiel élevées pour repousser au maximum la température critique.

La validité de cette expression théorique est confirmée par les relevés expérimentaux du courant pic et du courant vallée en fonction de la température pour les largeurs de barrière de 50 Å et 100 Å, figure 3.17. Le courant pic est peu modifié par une augmentation de la température tandis que l'accroissement du courant vallée est d'autant plus marqué que les largeurs de barrière sont importantes. On observe donc une dégradation du contraste en courant au fur et à mesure que la température augmente [11] et la valeur de barrière pour laquelle le contraste en courant est maximal décroît comme le montre la figure 3.14. De toute cette étude, il se dégage donc une largeur de barrière optimale de 50 Å pour une double barrière de  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$   $x = 0,35$  lorsque l'on travaille à température ambiante. Pour des structures à plus forte discontinuité de potentiel telles que les structures adaptées  $\text{Al}_{0,48}\text{In}_{0,42}\text{As}/\text{Ga}_{0,47}\text{In}_{0,53}\text{As}$  ou  $\text{AlAs}/\text{GaAs}$ , les largeurs de barrière optimales sont beaucoup plus faibles de l'ordre de 20 Å [12].

GaAs	5000 Å	$2.10^{18}$ at/cm <sup>3</sup>
GaAs	500 Å	$2.10^{17}$ at/cm <sup>3</sup>
GaAs	50 Å	N.I.D
AlAs	17 Å	N.I.D
GaAs	45 Å	N.I.D
AlAs	17 Å	N.I.D
GaAs	50 Å	N.I.D
GaAs	500 Å	$2.10^{17}$ at/cm <sup>3</sup>
GaAs	5000 Å	$2.10^{18}$ at/cm <sup>3</sup>
GaAs	Substrat N <sup>+</sup>	

Figure 3.18 : Séquence de croissance de la structure double barrière AlAs/GaAs.

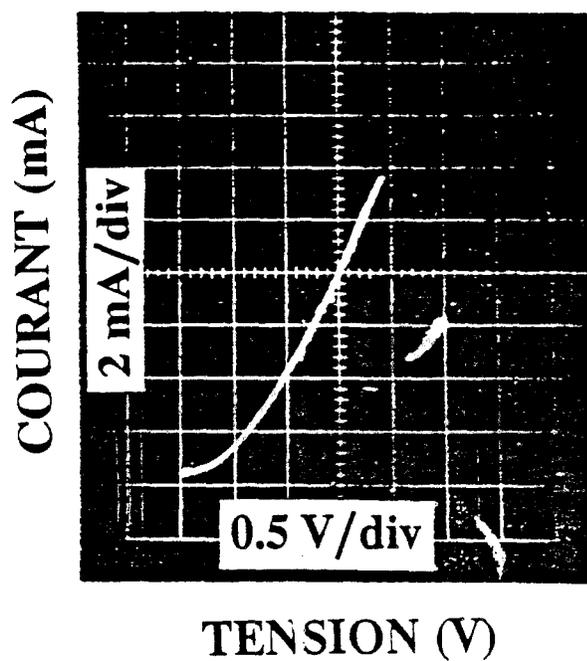


Figure 3.19 : Caractéristique statique courant tension mesurée à 300 K pour un échantillon de 3  $\mu$ m de diamètre.

### 3.1.2 Double barrière en matériau binaire AlAs/GaAs

#### 3.1.2.1 Notion de masse de bande interdite

La figure 3.18 présente la séquence de croissance de la structure double barrière AlAs/GaAs réalisée au Laboratoire Central de Recherche Thomson. La caractéristique statique, figure 3.19, est mesurée à 300 K pour des échantillons de  $3 \mu\text{m}$  de diamètre. Le courant pic est de  $160 \text{ kA/cm}^2$  autour de 2V et le rapport  $J_{\text{pic}}/J_{\text{vallée}}$  est de 2,5 : 1.

Dans ce qui suit, nous ne considérons que le transport par la vallée  $\Gamma$ , puisque les épaisseurs de barrières sont faibles, de l'ordre de  $17 \text{ \AA}$  [13]. Le calcul cohérent du courant tel qu'il a été exposé précédemment ne permet pas de décrire la densité de courant pic expérimentale puisque l'on obtient une densité calculée de  $32 \text{ kA/cm}^2$ , figure 3.20. La discontinuité de bande de conduction a été prise égale à 960 meV et on a pris une masse de bas de bande de conduction de 0,15 dans l'AlAs. Le choix de cette valeur de masse n'est pas judicieux puisque du fait de la forte hauteur de barrière entre le GaAs et l'AlAs, le transport par effet tunnel s'opère loin de la bande de conduction de l'AlAs. Il se pose donc le problème de la notion de masse effective affectée aux électrons lors de leur traversée de la bande interdite de l'AlAs. De façon intuitive, on peut songer à alléger la masse effective de l'électron, dans la mesure où en première approximation, la masse de bas de bande de conduction est proportionnelle au gap et qu'un électron traversant par effet tunnel une barrière de potentiel "voit" une bande interdite effective réduite. Brozak [14] a proposé une renormalisation de la masse effective dans la bande interdite de l'AlAs sur la base des données expérimentales de résonance cyclotron. La masse effective dans la bande interdite de l'AlAs devient égale à 0,09 au lieu de 0,15. La figure 3.21 montre le calcul du courant effectué dans une approche cohérente avec le choix d'une masse effective de 0,09. Un courant pic de  $100 \text{ kA/cm}^2$  permet de se rapprocher des données expérimentales. Une masse équivalente à celle de la masse prise dans le GaAs aurait aussi bien pu être introduite puisque les barrières d'AlAs sont très fines.

Une autre approche consiste à effectuer les calculs de transmission de la double barrière en prenant en compte à la fois la fonction d'onde associée à la bande de conduction et celle correspondant à la bande de valence. Ce calcul est obtenu dans le cadre du modèle à deux bandes de Kane qui sera développé et largement utilisé dans

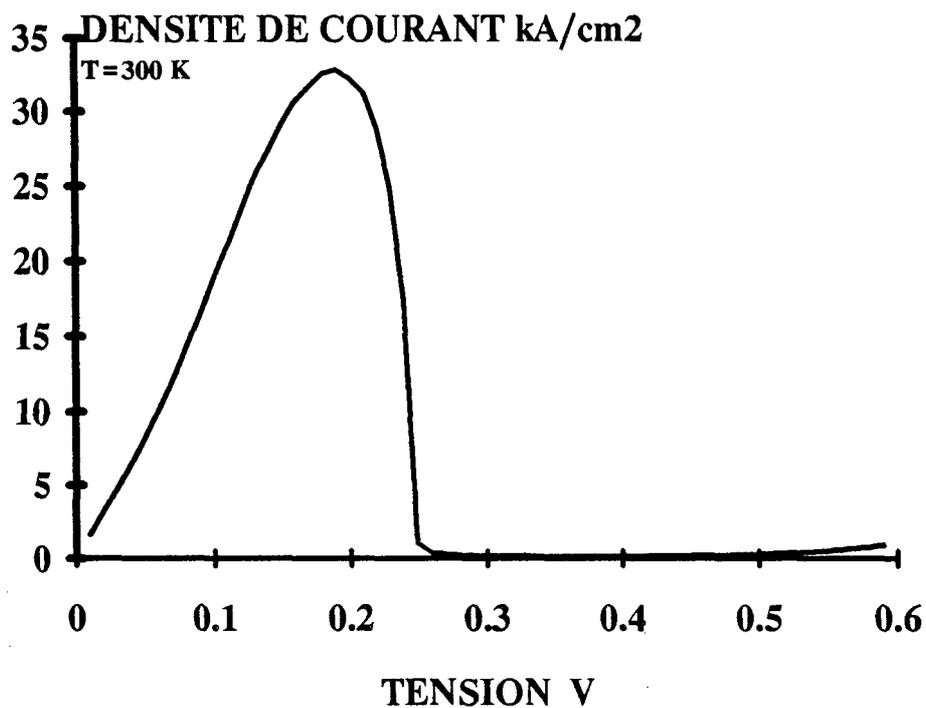


Figure 3.20 : Caractéristique courant tension calculée en utilisant une masse de bas de bande de conduction dans l'AlAs:  $m_b = 0,15m_0$ .

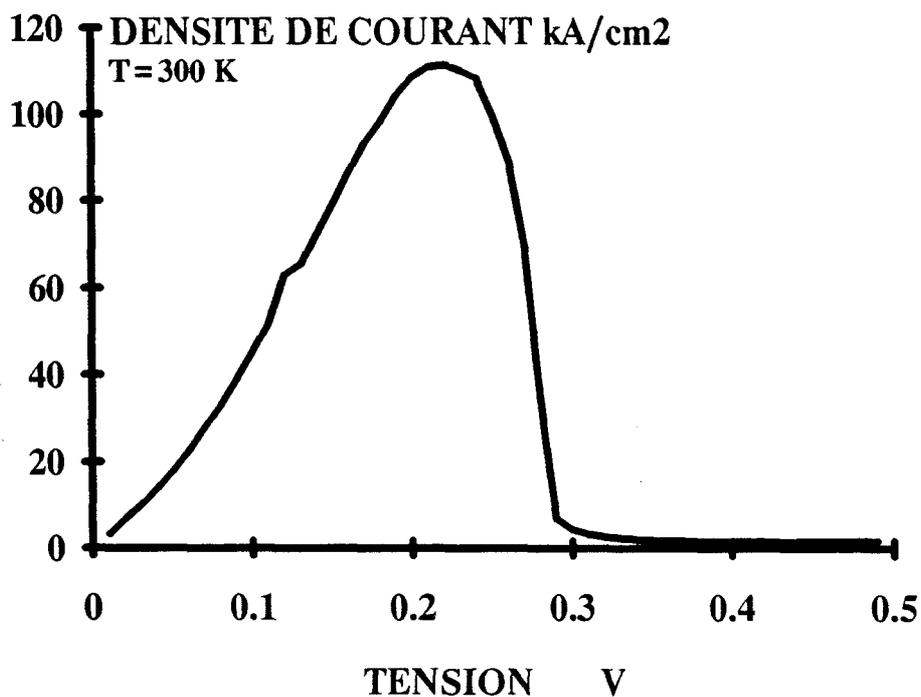


Figure 3.21 : Caractéristique courant tension calculée avec une renormalisation de la masse dans l'AlAs:  $m_b = 0,09m_0$ .

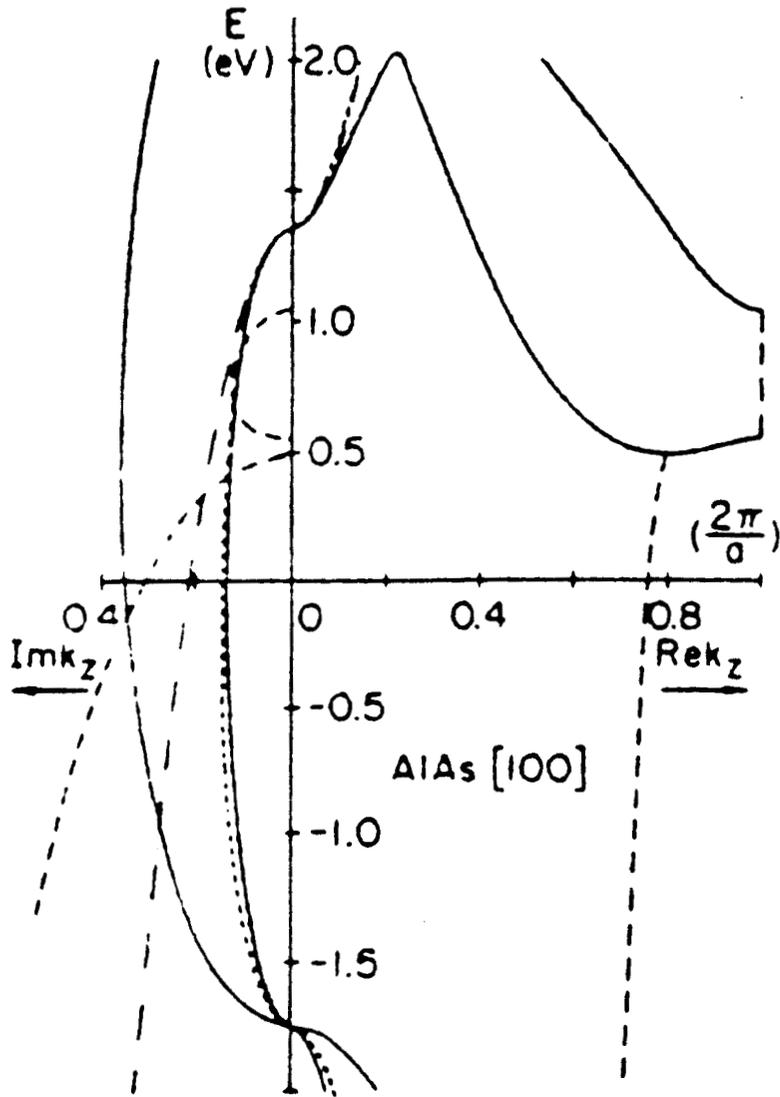
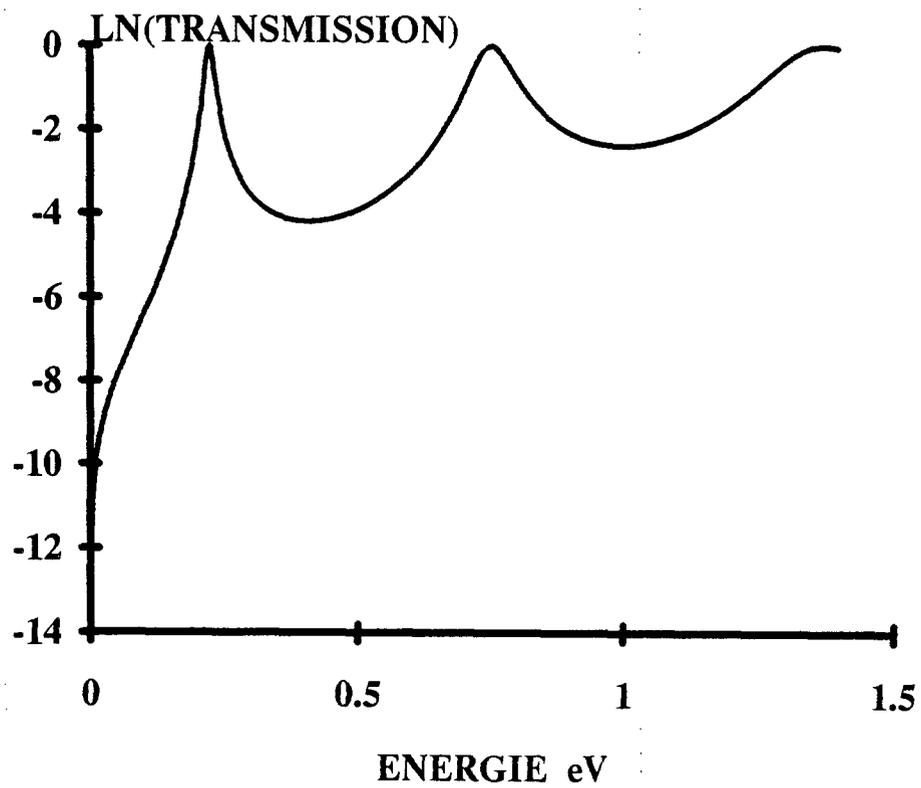
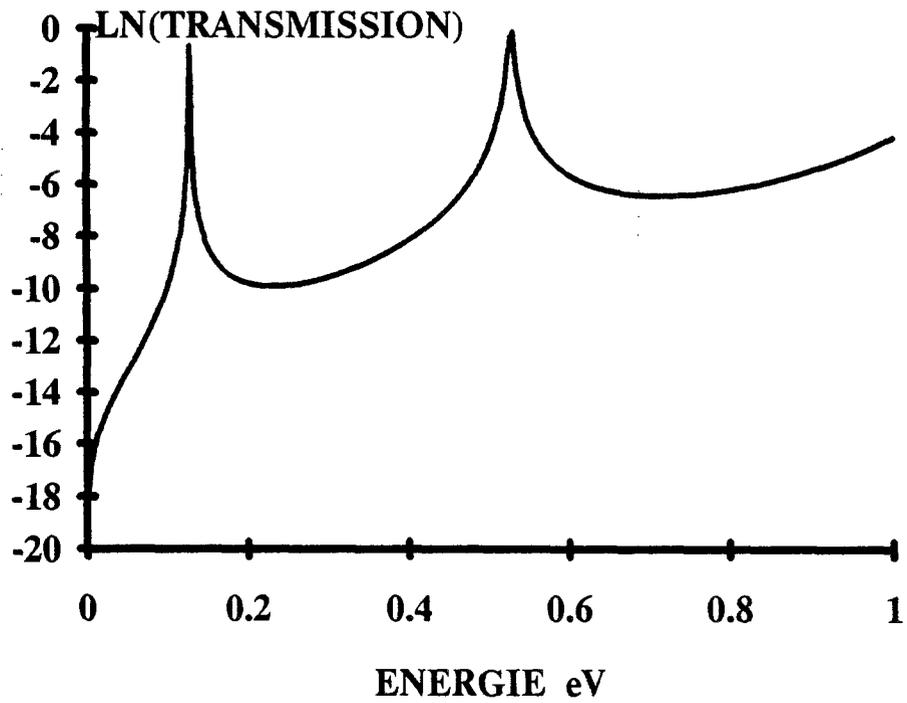


Figure 3.22: Structure de bande de l'AlAs

- modèle des liaisons fortes
- ..... modèle de Kane
- - - - Modèle à une bande



**Figure 3.23 :** Evolution de la transmission en fonction de l'énergie  
 a) modèle à une bande  
 b) modèle à deux bandes

le chapitre 5. On peut, grâce à ce modèle, décrire de façon plus exacte les relations de dispersion dans la bande interdite de l'AlAs comme le montre la figure 3.22. Sur cette figure sont reportées les variations de l'énergie en fonction de  $k$  complexe obtenues par la méthode des liaisons fortes, le modèle de Kane à deux bandes et le modèle à une bande [15]. On voit que le modèle à une bande prédit des valeurs trop élevées pour le vecteur d'onde dans la bande interdite de l'AlAs. La pénétration de la fonction d'onde dans les barrières d'AlAs est donc largement sous estimée. Cette mauvaise évaluation de  $k(E)$  permet d'expliquer en partie le désaccord obtenu entre le courant expérimental et le calcul basé sur la résolution de l'équation de Schrödinger en prenant :

$$k = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m_b (\Delta E_c - E)}$$

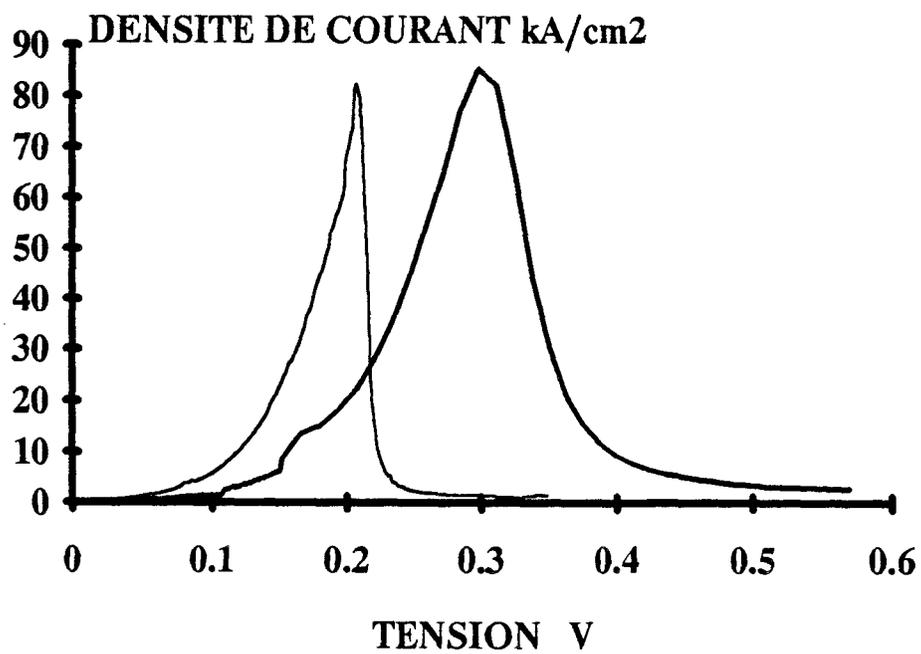
Dans le modèle à deux bandes [3] :

$$k = \frac{1}{\hbar P} \sqrt{(E_c - E)(E - E_v)}$$

où  $E_c$  et  $E_v$  désignent respectivement le bas de bande de conduction et le sommet de la bande de valence. Aucune notion de masse effective n'est introduite et on considère seulement la position relative en énergie de l'électron par rapport à la bande de conduction et à la bande de valence. La fonction d'onde dans la bande de valence est déduite de la fonction d'onde dans la bande de conduction à l'aide du couplage  $kP$  entre la bande de trous légers et la bande de conduction. Le couplage spin orbite des états de valence est pris ici égal à zéro dans la mesure où sa valeur dans le cas des matériaux à base d'Arsenic est faible devant la valeur de bande interdite. La procédure numérique utilisée sera décrite plus en détail ultérieurement.

Une comparaison entre les figures de transmission obtenues avec le modèle à une bande et le modèle à deux bandes est effectuée sur la figure 3.23. L'élargissement du pic de résonance situé à 221 meV permet un courant pic de l'ordre de 120 kA/cm<sup>2</sup> à 0,3 V pour un niveau de Fermi de 86 meV correspondant à  $N_D = 2.10^{18} \text{cm}^{-3}$ . Ce gain notable dans les valeurs du courant pic et de la tension associée permet de considérer que le modèle de Kane décrit relativement bien la conduction à travers les double barrières d'AlAs.

Si l'on désire conserver la notion de masse effective, il semble que, dans tous les cas, il faille renormaliser la masse. Un premier pas dans ce sens a été effectué au



**Figure 3.24 :** Caractéristique courant tension de la double barrière AlAs/GaAs avec prise en compte de l'espaceur en amont

- Modèle des liaisons fortes
- Modèle à deux bandes

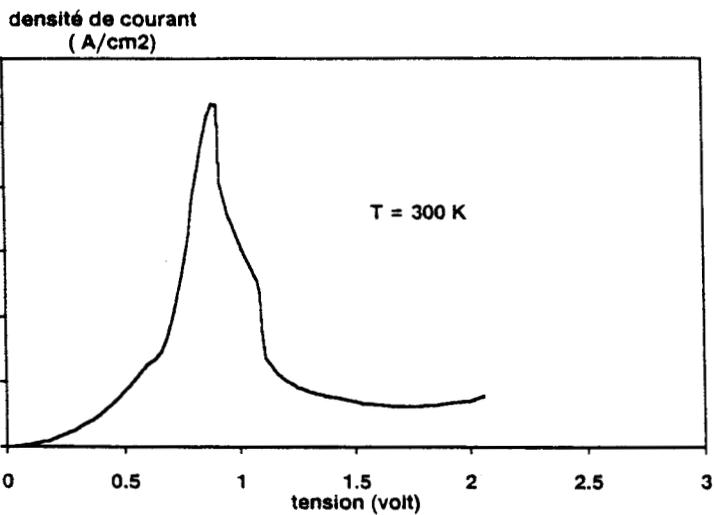
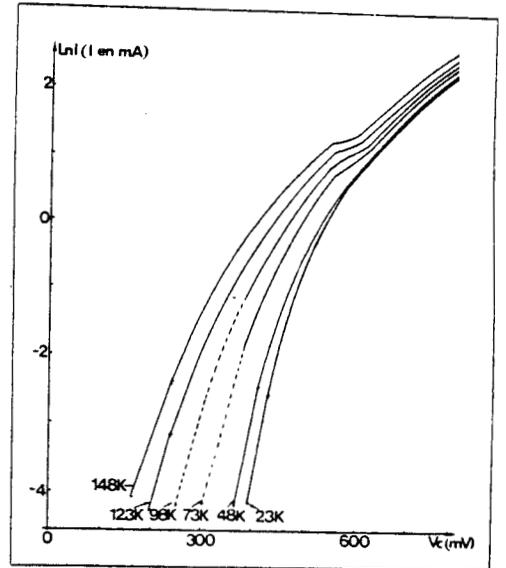
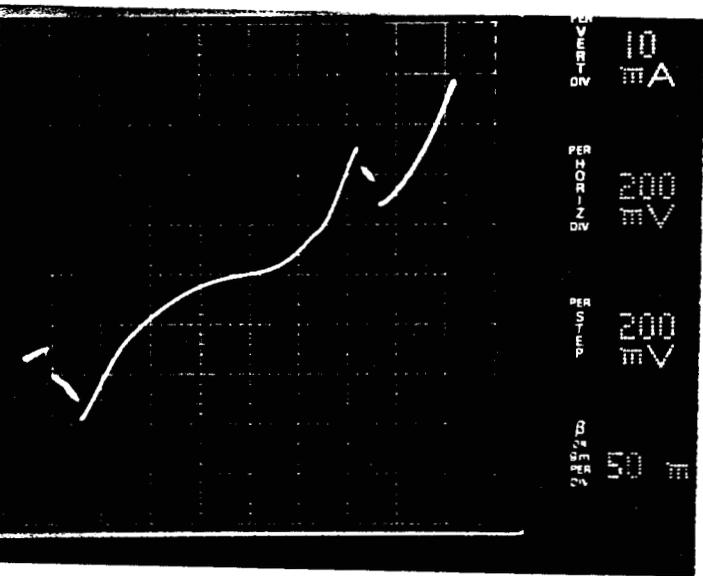


Figure 3.1 : Caractéristique de conduction d'un échantillon AlInAs/GaInAs à  $\theta = 300\text{K}$ .

Figure 3.25 : Mise en évidence d'un accident dans la montée en courant pour différentes structures double barrière.

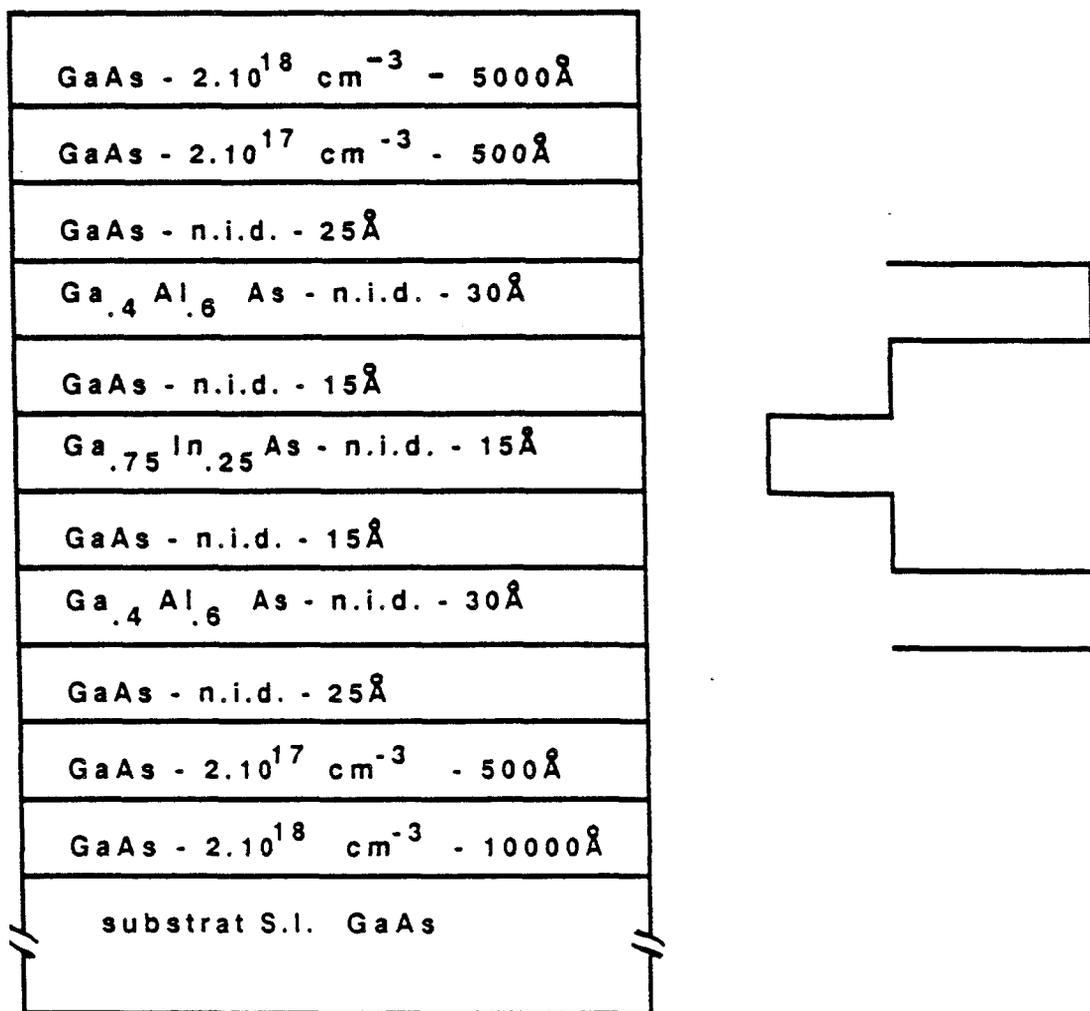


Figure 3.26 : Séquence de croissance de la structure pseudomorphique à puits enterré.

laboratoire [16] en dérivant la masse effective de bande interdite à partir d'un calcul de  $E(k)$  par la méthode des liaisons fortes. L'expression de la masse effective utilisée dans la bande interdite est alors :

$$m^*(E) = \frac{\hbar^2}{2} \frac{k^2}{E - E_0}$$

où  $E_0$  désigne le bas de la bande de conduction lorsque  $E > E_{g/2}$  et le sommet de la bande de valence lorsque  $E < E_{g/2}$ . La figure 3.24 montre que cette dernière approche aboutit aux mêmes résultats pour le calcul du courant pic que la méthode de Kane. Le calcul a été effectué avec la prise en compte en amont de la double barrière d'AlAs d'un espaceur de 500 Å dopé à  $2.10^{17} \text{ cm}^{-3}$ . On obtient une densité de courant pic de 86 kA/cm<sup>2</sup>.

## 3.2 Rôle de l'espaceur d'émetteur : injection 2D

### 3.2.1 Mise en évidence expérimentale d'une anomalie de conduction activée thermiquement

De nombreuses structures double barrière réalisées dans différents systèmes de matériaux présentent une anomalie de conduction dans la montée en courant. La figure 3.25 donne quatre exemples de relevés de caractéristiques I-V à 300 K. La première structure a été décrite dans le paragraphe 1 et nous visualisons ici les variations I-V pour une condition de polarisation où les électrons sont incidents à partir du substrat. La seconde structure diffère de la précédente par les barrières de potentiel qui sont constituées par trois couches d'AlAs de 8,5 Å, chacune séparée par des couches de GaAs de 8,5 Å d'épaisseur. Cette structure élémentaire est insérée entre deux espaceurs de 500 Å dopés à  $2.10^{16} \text{ cm}^{-3}$ . Le réservoir d'électrons est dopé à  $2.10^{18} \text{ cm}^{-3}$ . Le troisième échantillon est réalisé à partir d'une épitaxie d' $\text{Al}_{0,48}\text{In}_{0,52}\text{As}/\text{Ga}_{0,47}\text{In}_{0,53}\text{As}$ . La structure élémentaire est formée d'un puits de 60 Å encadré par des barrières de 40 Å et de 70 Å. En amont et en aval de la double barrière se trouvent deux espaceurs de 250 Å dopés à  $2.10^{16} \text{ cm}^{-3}$ . Enfin nous avons reporté le cas d'une structure pseudomorphique à puits enterré  $\text{Ga}_{0,4}\text{Al}_{0,6}\text{As}/\text{GaAs}/\text{Ga}_{0,75}\text{In}_{0,25}\text{As}/\text{GaAs}/\text{Ga}_{0,4}\text{Al}_{0,6}\text{As}$  dont les paramètres structuraux sont présentés sur la figure 3.26. Si on s'intéresse à l'évolution de cette anomalie de conduction en fonction de la température, on observe dans la plupart des cas sa disparition progressive lorsque la température décroît. Ceci est illustré sur la figure 3.27 qui présente le relevé des caractéristiques I-V entre 77 K et 300 K

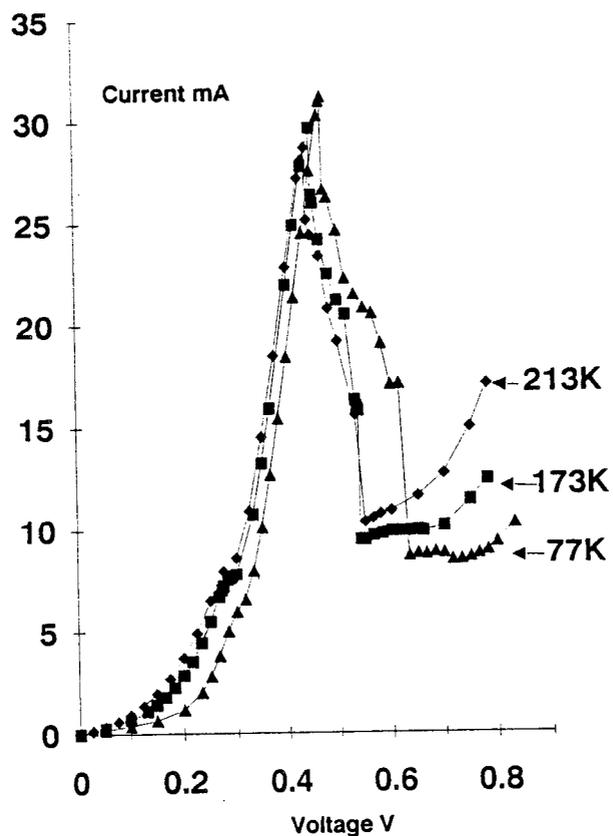


Figure 3.27 : Dépendance de la caractéristique courant tension en fonction de la température  $77 < T < 213$  K.

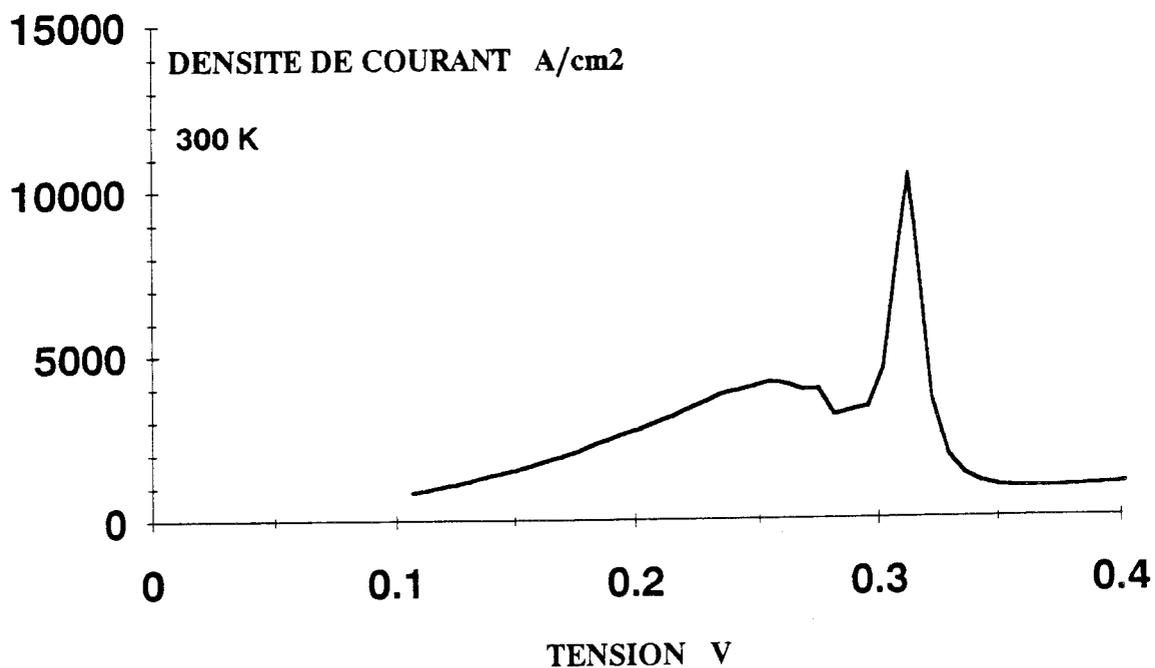


Figure 3.28 : Caractéristique courant tension calculée à 300 K.

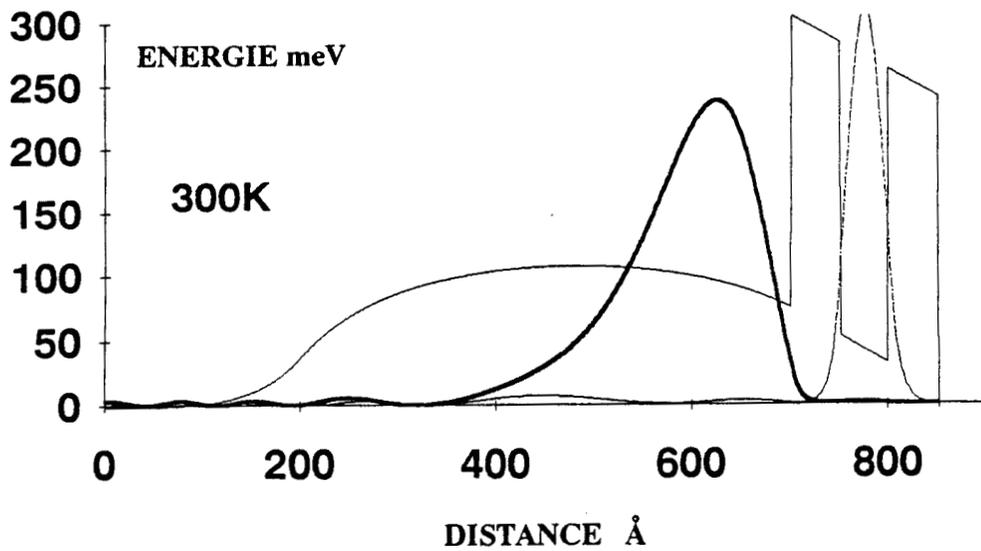


Figure 3.29a : Profil de bande de conduction pour la tension correspondant à l'accident de courant (0,25 V)

fonction d'onde calculée pour  $\epsilon_r = 104$  meV

fonction d'onde calculée pour  $\epsilon_r = 115$  meV

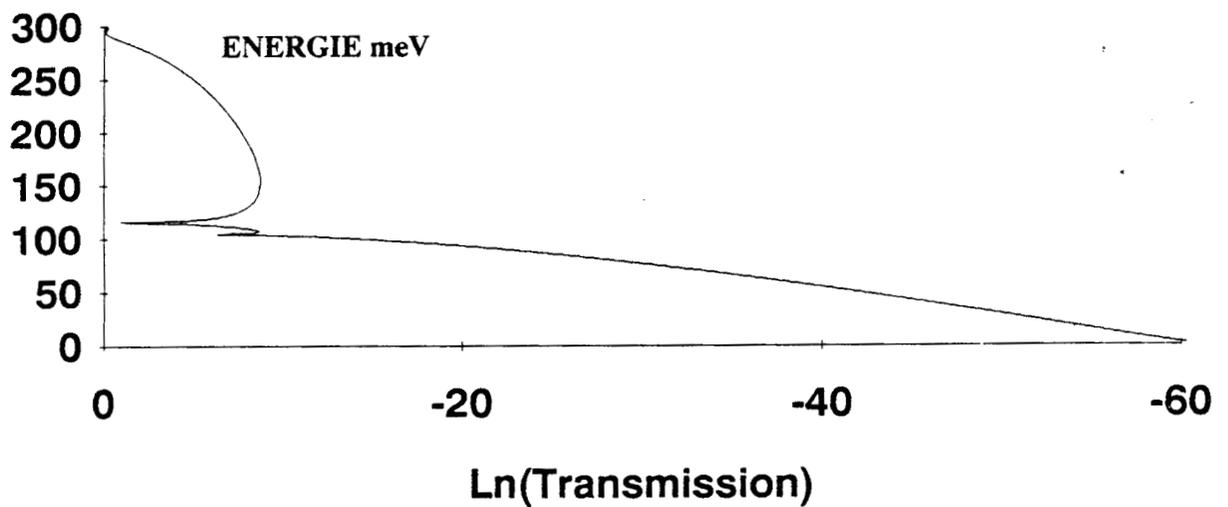


Figure 3.29b : Probabilités de transmission pour une tension de 0,25 V

$\epsilon_{r1} = 104$  meV

$\epsilon_{r2} = 115$  meV

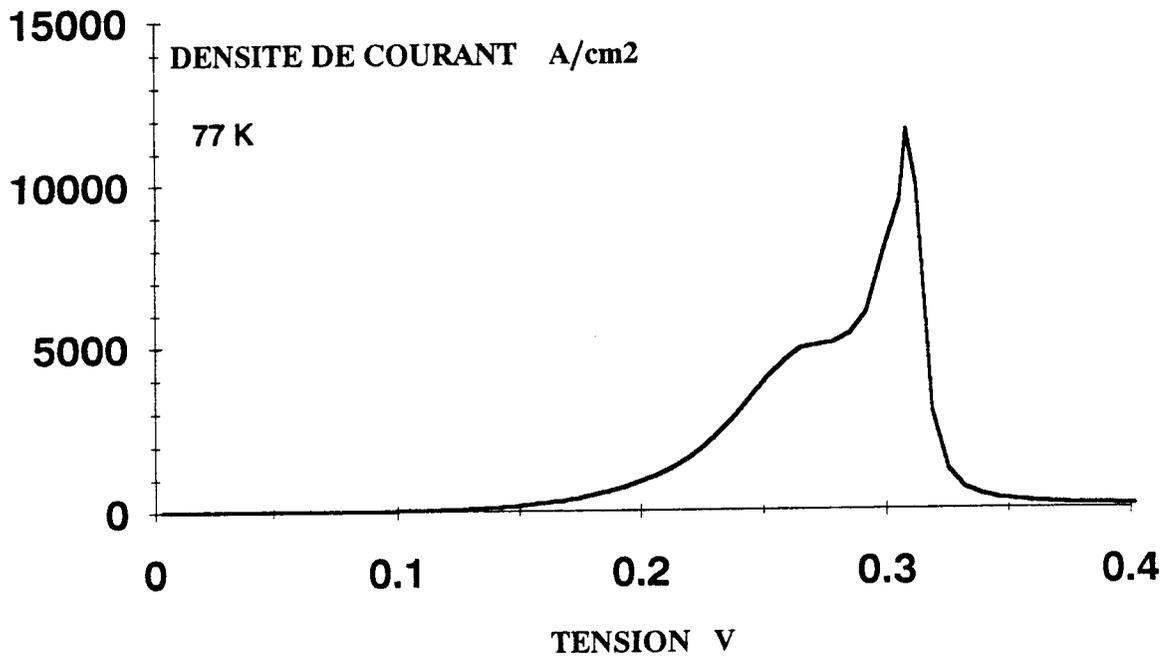


Figure 3.30a : Caractéristique courant tension calculée à 77 K.

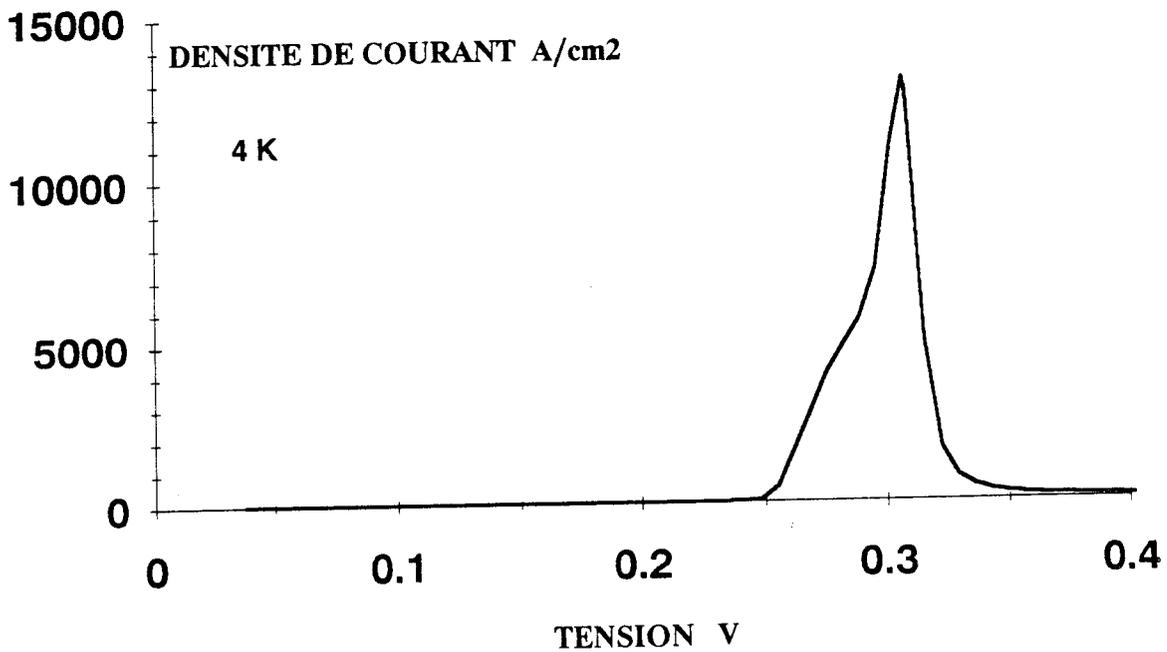


Figure 3.30b : Caractéristique courant tension calculée à 4 K.

pour la structure 1. Nous nous proposons à présent d'expliquer l'origine de l'inflexion dans la montée de courant avant que les variations I-V suivent une loi quasi-linéaire [17].

### 3.2.2 Mise en évidence théorique de deux termes de conduction

#### 3.2.2.1 Etude à 300 K

Dans ce qui suit nous restreignons notre analyse à la structure 1. Sur la figure 3.28 est reportée la caractéristique I-V calculée à 300 K de la structure double barrière présentant en amont un espaceur de 500 Å dopé à  $2 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ . L'anomalie de conduction se situe autour de 0,25 V et le courant pic de l'ordre de  $11 \text{ kA/cm}^2$  est obtenu à 0,32 V. Pour comprendre cette allure de caractéristique, nous avons reporté sur la figure 3.29 les variations de la bande de conduction pour l'ensemble de la structure à 0,25V. En regard de ces figures sont visualisées les probabilités de transmission en fonction de l'énergie. On constate que pour la figure référencée a, l'existence de deux pics de transmission à 104 meV et 115 meV. Si on trace à présent les probabilités de présence correspondant à ces deux énergies, on constate sans ambiguïté l'existence d'un niveau quasi-lié dans la zone d'accumulation situé à 104 meV par rapport au bas de la bande de conduction de l'émetteur fortement dopé. Par contre le pic situé à 115 meV est le reflet du niveau quantique fondamental de la structure double barrière puits.

A cette tension de polarisation, cette dernière énergie correspond au maximum de la courbure de bande calculée dans l'espaceur. Deux chemins préférentiels pour le passage par effet tunnel sont ainsi mis en évidence et sont accessibles aux porteurs situés dans la queue de distribution de la fonction d'alimentation pour un niveau de Fermi situé à 86 meV. On obtient ainsi un effet tunnel résonnant à partir des états étendus d'une part via le niveau fondamental du puits quantique, et d'autre part via le niveau quasi-lié de la zone d'accumulation.

#### 3.2.2.2 Etude à basse température

Les caractéristiques I-V calculées à 77 K et à 4 K sont reportées sur la figure 3.30. Conformément aux observations expérimentales le premier maximum de courant s'estompe lorsque la température décroît et disparaît complètement à 4K. Aux très basses températures, il n'y a plus d'étalement de la fonction d'alimentation qui s'an-

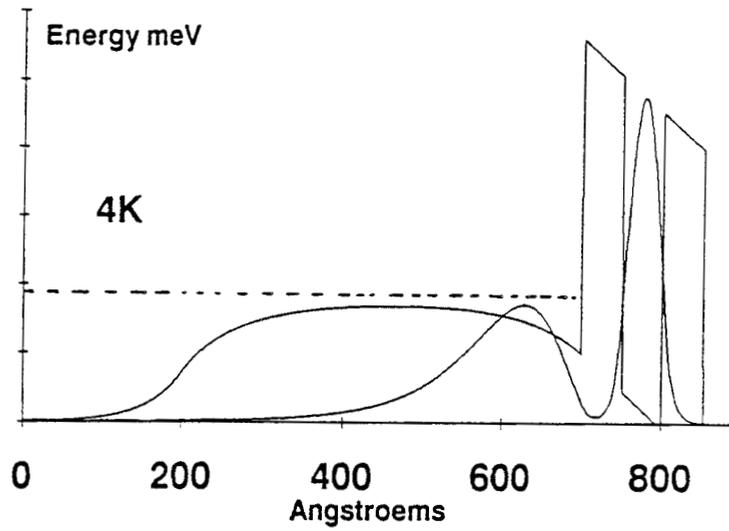


Figure 3.31a : Profil de bande de conduction pour la tension  $V_{pic}$  en fonction d'onde calculée à 81 meV.

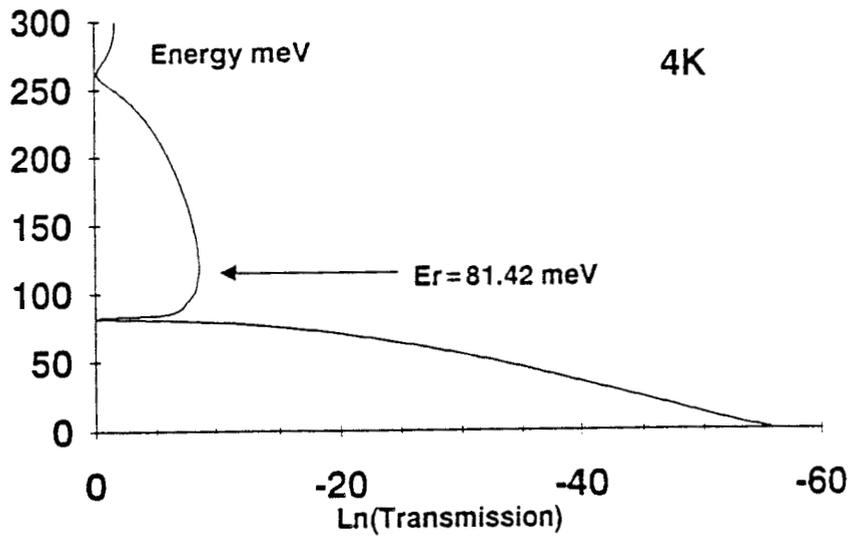


Figure 3.31b : Spectre de transmission à  $V = V_{pic}$ .

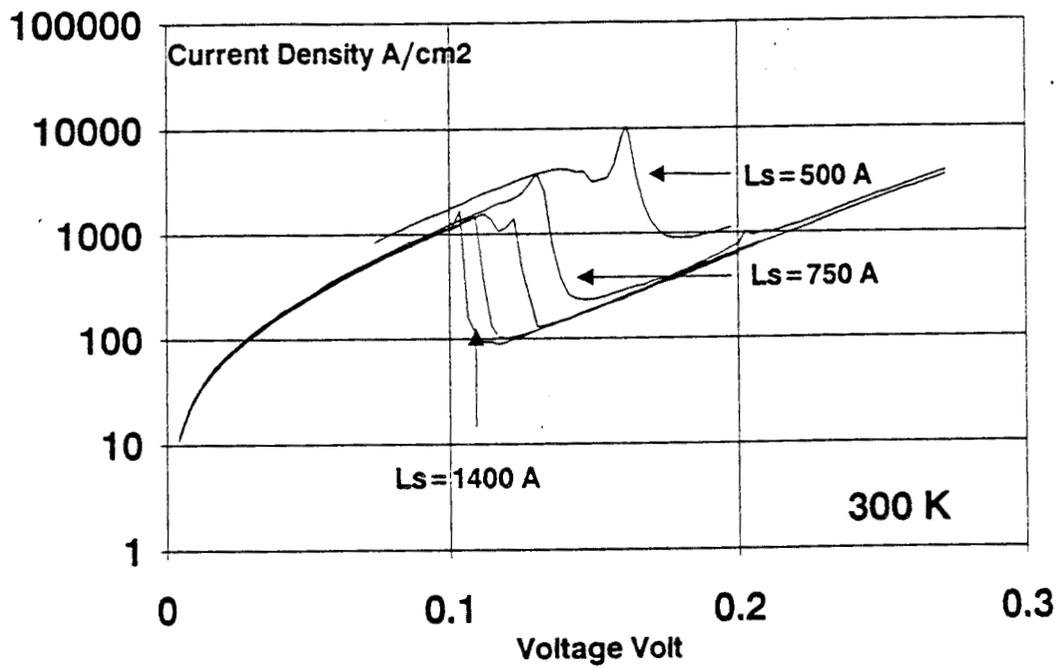
nule autour de 92 meV et la première composante de courant issue des états étendus n'est plus observée. La montée en courant à 4 K est donc monotone.

Un exemple de calcul de la courbure de bande à 4 K est donné sur la figure 3.31 ainsi que les probabilités de transmission. La tension de polarisation correspond à la tension pic calculée de 0,3V. C'est principalement la position du niveau de Fermi dans l'espaceur peu dopé par rapport à la bande de conduction qui modifie la hauteur de barrière électrostatique de diffusion. En comparant les figures 3.29 et 3.31, on constate que cette hauteur de 100 meV à 300 K n'est plus que de 80 meV à 4 K à 77 K. En règle générale, le niveau de Fermi est très peu dépendant de la température pour la zone dopée  $2 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$  alors qu'il se rapproche progressivement de la bande de conduction pour les espaceurs peu dopés. La figure de transmission à la polarisation 0,3V ne présente qu'un seul pic apparent à 81 meV. Nous nous trouvons ici au croisement entre le niveau quantique de la zone d'accumulation et du puits cristallin. Si on se réfère aux probabilités de présence correspondant à cette énergie résonnante, on constate que celle-ci se partage entre le puits électrostatique et le puits de la double barrière.

### 3.2.3 Influence de la largeur des espaceurs

Il peut être intéressant de voir à présent dans quelle mesure la largeur de l'espaceur joue un rôle dans la part que prennent les deux chemins préférentiels dans le passage par effet tunnel. Nous n'envisageons pas ici une variation du dopage puisque l'on peut montrer que les effets de zone d'accumulation subsistent pour des niveaux de dopage compris entre  $10^{16} \text{ cm}^{-3}$  et  $10^{17} \text{ cm}^{-3}$ .

La figure 3.32 montre les variations de la densité de courant en fonction de la tension pour des structures double barrière 50 Å/ 50 Å/ 50 Å présentant des largeurs d'espaceurs  $L_{sp}$  comprises entre 500 Å et 1400 Å. Le niveau de dopage est de  $2 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ . Le fait marquant est la diminution très rapide des valeurs de courant pic lorsque la zone d'espaceur s'épaissit. On constate de plus une diminution de la tension pic associée à une prédominance de la composante de courant activé thermiquement. Pour comprendre ces résultats, il faut se rappeler que nous considérons la structure dans son ensemble et qu'ainsi les états bidimensionnels de la zone d'accumulation ne sont alimentés que par le processus tunnel à travers la barrière électrostatique. Des espaceurs d'épaisseur importante sont peu favorables à l'effet tunnel.



**Figure 3.32 :** Variation de la caractéristique I-V en fonction de la largeur d'espaceur placée en amont de la double barrière.

Pour  $L_{sp} = 700 \text{ \AA}$  et  $L_{sp} = 1400 \text{ \AA}$  on n'observe plus qu'un seul pic de courant. L'effet de l'alignement des deux niveaux est contrebalancé par l'épaisseur importante de l'espaceur à traverser pour alimenter le réservoir d'électrons 2D que constitue la zone d'accumulation. En fait cette diminution du courant pic pour des espaceurs de plus en plus longs n'est pas aussi systématique lorsque l'on considère les données expérimentales du courant pic. Pour un espaceur de  $750 \text{ \AA}$ , le courant pic atteint  $17 \text{ kA/cm}^2$  à  $300 \text{ K}$  au lieu de  $14 \text{ kA/cm}^2$  lorsque l'espaceur est de  $500 \text{ \AA}$ . Cette relative insensibilité de la valeur de courant pic nous amène à remettre en cause les hypothèses de processus purement cohérent. Les simulations que nous avons effectuées ignorent totalement les mécanismes de relaxation des états étendus vers le niveau quantifié de la zone d'accumulation. Cette situation hybride qui inclue le couplage d'états étendus et d'états localisés ne peut être décrite par les calculs de taux d'interaction usuels qui se font entre niveaux localisés et dans lesquels on peut appliquer une norme. On peut cependant concevoir, sur la base des transitions inter sous-bandes qui prévoient des fréquences de relaxation de l'ordre de  $10^{+13} \text{ s}^{-1}$ , que la couche d'accumulation soit alimentée à partir des états étendus. La composante de courant attribuable au croisement des niveaux redevient alors comparable à celle calculée pour des espaceurs courts. Notons enfin que le caractère bidimensionnel de l'injection n'a été traduit qu'au niveau des transmissions. Nous avons ainsi éludé les problèmes de définition d'une fonction d'alimentation bidimensionnelle grâce à l'introduction de zones réservoirs volumiques. On aurait aussi bien pu considérer une population électronique en équilibre au niveau de la zone d'accumulation, ce qui suppose des mécanismes de relaxation extrêmement efficaces, et étudier leur fuite vers le collecteur à travers la double barrière. En toute dernière remarque, soulignons que dans le cas des espaceurs de longueur inférieure à  $500 \text{ \AA}$ , la diffusion et l'accumulation doivent être traitées de façon globale et non plus en découplant les deux phénomènes. L'algorithme mis au point pour traiter séparément la zone d'accumulation et de diffusion se révèle trop sensible pour que l'on puisse traiter séparément le cas des faibles longueurs d'espaceurs. Un effort est actuellement entrepris au laboratoire pour pallier ce problème sur la base de la résolution de l'équation de Poisson avec une méthode à double balayage [16].

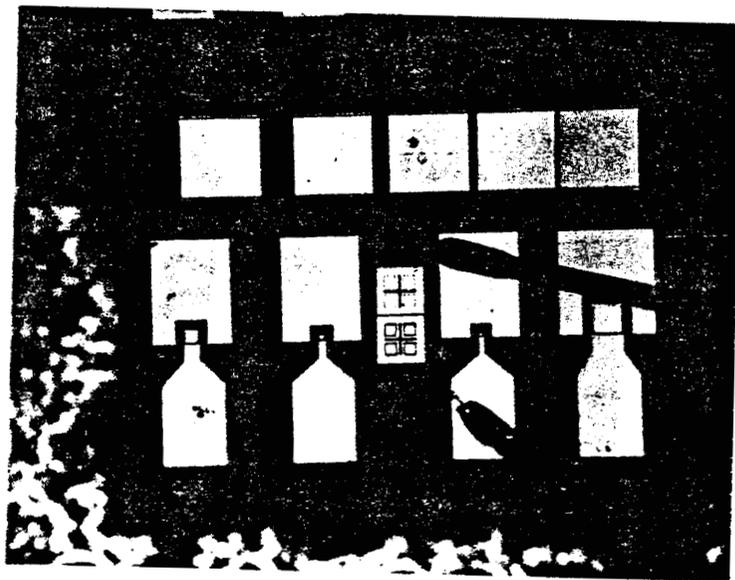


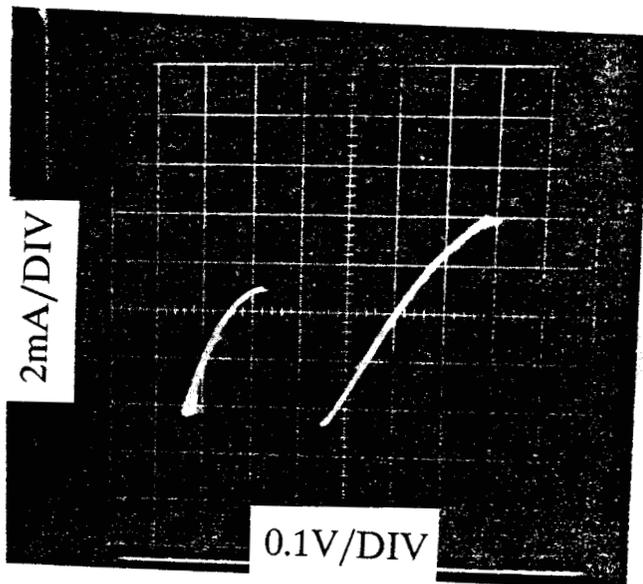
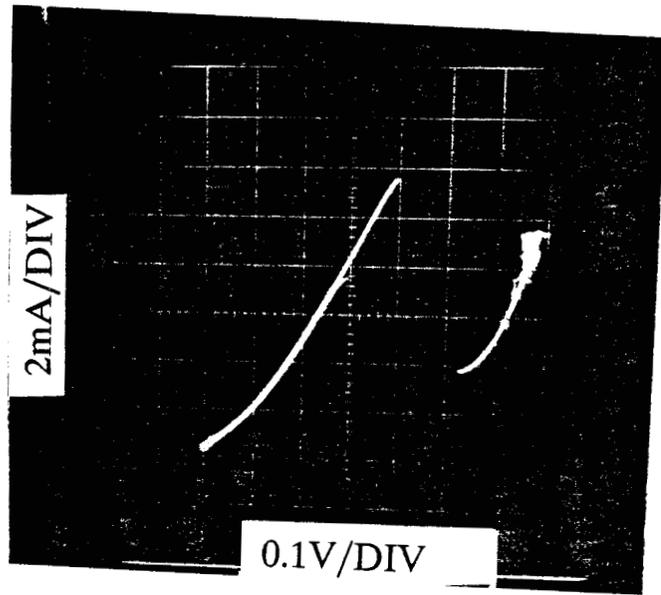
Figure 3. 33: Masque utilisé pour la réalisation des diodes.

### 3.3 Structures élémentaires dans le système $\text{Al}_{0,4}\text{In}_{0,52}\text{As}/\text{Ga}_{0,47}\text{In}_{0,53}\text{As}$

L'utilisation du matériau GaInAs pour les zones collecteur et émetteur de la double barrière nous impose pratiquement le choix de la concentration en Indium  $x = 0,53$  pour assurer l'adaptation en maille avec un substrat InP. On obtient alors une masse effective pour les électrons de 0.042. Cette masse effective étant plus faible que celle dans le GaAs on peut espérer préserver la cohérence des ondes associées aux électrons. En ce qui concerne le choix du matériau de barrière, il est possible de considérer l' $\text{Al}_{1-x}\text{In}_x\text{As}$  avec une concentration en Indium de  $x = 0,52$  ou l'AlAs. Dans le premier cas, la structure est adaptée sur InP, dans le second la structure est pseudomorphique et la contrainte s'exerce sur les barrières d'AlAs. Ces deux types de double barrière-puits nous semblent être des structures d'avenir tant pour les applications en dipôle qu'en tripôle. Une masse faible est favorable à l'élargissement du puits de potentiel en maintenant les niveaux quantifiés à des valeurs d'énergie élevée et la prise de contact pour une utilisation de la double barrière en tripôle est facilitée.

#### 3.3.1 Double barrière $\text{Al}_{0,48}\text{In}_{0,52}\text{As}/\text{Ga}_{0,47}\text{In}_{0,53}\text{As}$

Ce système de matériau présente des hauteurs de barrières relativement importantes de l'ordre de 530 meV, ce qui permet d'assurer un contraste en courant important à température ambiante et de limiter les contributions thermoioniques. La masse effective du bas de bande de conduction dans l' $\text{Al}_{0,48}\text{In}_{0,52}\text{As}$  n'est que de 0,075 mo. Ceci concourt à favoriser le passage par effet tunnel à travers les barrières qui peuvent être d'épaisseur raisonnable. On se trouve cependant confronté au problème de renormalisation de la masse de barrière compte tenu des fortes discontinuités de potentiel comme dans le cas des doubles barrières AlAs/GaAs. Par contre, l'analyse est facilitée par l'absence de transition gap direct - gap indirect. En ce qui concerne les paramètres importants que sont la densité de courant pic ainsi que le contraste en courant, nous allons retrouver les mêmes aspects antinomiques avec cependant des valeurs suffisamment élevées pour faire face à la plupart des applications. A titre d'exemple un courant pic de  $10^5 \text{ A/cm}^2$  pour un rapport  $J_{pic}/J_{vallée}$  de 6,3 a été trouvé à 77 K pour des barrières d'AlInAs de 32 Å [18]. Ce contraste en courant important associé à un courant pic élevé peut s'expliquer par la faible contribution du transport incohérent résultant de la faible valeur de la masse dans le puits de GaInAs.



**Figure 3.34** : Caractéristique I-V mesurée à l'ambiante  
a) Polarisation en direct  
b) polarisation en inverse.

Pour notre part, nous allons considérer deux structures  $\text{Al}_{0,48}\text{In}_{0,52}\text{As}/\text{Ga}_{0,47}\text{In}_{0,53}\text{As}$  qui présentent respectivement une forte et une faible densité de courant.

### 3.3.1.1 Structure à forte densité de courant

Les échantillons nous ont été fournis par Sunichi Muto des laboratoires Fujitsu. Les épaisseurs de barrière sont égales à 40 Å. Le puits de GaInAs est de 44 Å. La double barrière est séparée des réservoirs d'électrons dopés à  $1.10^{18}\text{cm}^{-3}$  ( $E_f = 87\text{ meV}$ ) par des espaceurs de 15 Å. Cette largeur d'espaceur est très faible et on peut considérer que la zone quantique est directement connectée aux zones dégénérées. Le rôle de cet espaceur permet simplement de s'affranchir de la diffusion vers la double barrière des atomes dopant les zones d'accès. Précisons également que le niveau de Fermi de 87 meV est élevé comparativement à celui que l'on obtiendrait avec un dopage équivalent dans le GaAs. (La faible masse effective dans le  $\text{Ga}_{0,47}\text{In}_{0,53}\text{As}$  tend en effet à diminuer la densité effective d'état). Enfin d'un point de vue technologique la prise de contact ohmique se trouve facilitée avec des résistances de contact qui peuvent être réduites d'un facteur 2. Les échantillons sont fabriqués dans une architecture de type planaire comme on peut s'en rendre compte sur la figure 3.33 qui donne une vue au microscope optique de quatre motifs pour lesquels les dimensions de la zone active s'échelonnent entre  $35 \times 35\ \mu\text{m}^2$  et  $4 \times 5\ \mu\text{m}^2$ . Le masque intègre par ailleurs, outre les motifs d'alignement, une échelle de résistance.

En pratique, nous avons caractérisé la structure de plus faible dimension pour deux raisons. On peut, d'une part, espérer travailler à un niveau d'impédance suffisamment élevé pour limiter les distorsions de la caractéristique I-V résultant des oscillations parasites [19]. Nous verrons, d'autre part, que les densités de courant mises en jeu sont élevées et que la caractérisation de diodes de section petite permet de limiter le courant et de s'affranchir des problèmes thermiques destructeurs. La section effective des diodes étudiées est légèrement inférieure à celle correspondant au masque avec une valeur égale à  $2.35 \cdot 10^{-7}\text{cm}^2$ .

La caractéristique I-V mesurée à température ambiante est donnée sur la figure 3.34 pour les deux sens de polarisation. Les caractéristiques  $J_{pic}$ ,  $J_{pic}/J_{vallée}$  et  $V_{pic}$  diffèrent légèrement suivant le sens de polarisation, ce qui montre la difficulté de maîtrise des interfaces directe et inverse. En valeur moyenne, on obtient une tension pic de l'ordre de 350 mV, un courant pic voisin de  $40\text{ kA/cm}^2$  un contraste en courant

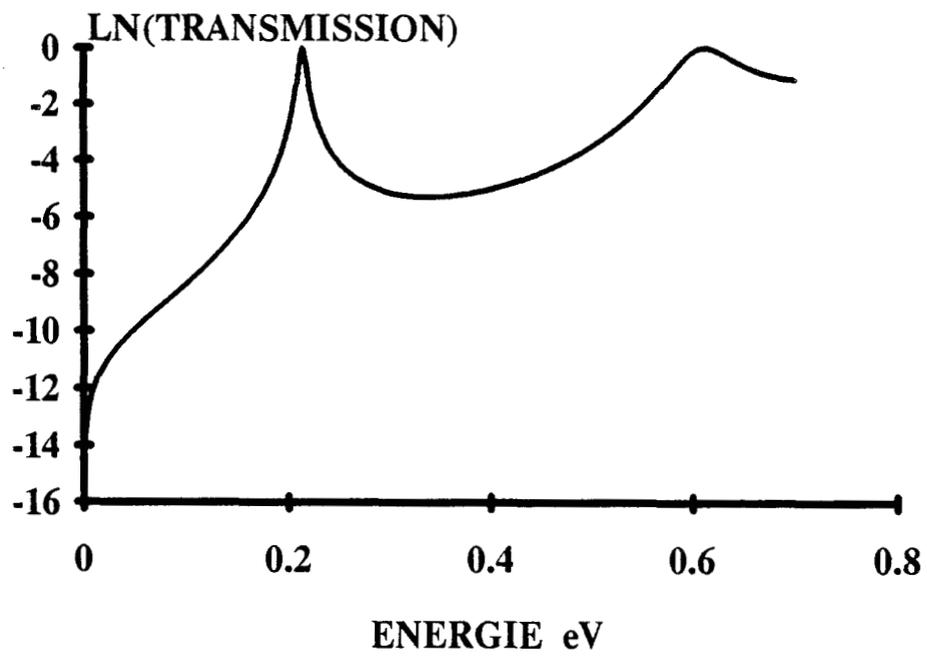


Figure 3.35: Spectre de transmission de la structure double barrière  $\epsilon_r = 210$  meV.

de 2,8 : 1. La faible valeur de tension pic reflète l'absence d'espaceur notamment aval qui tend à amplifier la tension de seuil. La valeur de plusieurs dizaines de kA pour  $J_{pic}$  est élevée vu les épaisseurs de barrières mises en jeu et s'explique par les faibles masses effectives. A titre de comparaison, pour obtenir des densités équivalentes dans le système GaAs/GaAlAs il faudrait travailler avec sept monocouches.

A 77 K on améliore sensiblement le rapport  $J_{pic}/J_{vallée}$  qui atteint 18 : 1. Les autres paramètres électriques restent inchangés. Théoriquement la structure étudiée se révèle un cas d'école où seul l'aspect de non parabolicité constitue une difficulté théorique. Avant d'aborder ce problème plus en détail, il nous semble utile de préciser les niveaux quantiques mis en jeu compte tenu du renforcement de la localisation résultant des hauteurs de barrière élevées. Dans ce but un simple tracé des probabilités de transmission en fonction de l'énergie donne directement la position des niveaux ainsi que l'intensité du couplage avec le continuum. Le résultat de ce calcul mené avec le modèle à deux bandes est donné sur la figure 3.35. A polarisation nulle, le niveau fondamental  $E_0$  se situe à 200 meV. Dans l'approximation d'une tension de seuil  $V_{pic} = 2E_0$ , on prévoit une tension pic de l'ordre de 0,4V tout à fait comparable au résultat expérimental. La faible largeur à mi-hauteur du pic de transmission explique la densité de courant élevée. Le second niveau en se situant à 600 meV est virtuel ( $\Delta E_c = 530$  meV) et ne joue qu'un rôle mineur. Précisons que le cas du GaInAs se révèle ici encore favorable pour une description simple du phénomène de transport. En effet les vallées satellites qui peuvent rapidement jouer un rôle pour des structures à base de GaAs (la vallée L se situe à 300 meV) sont repoussées à des valeurs d'énergie proches de 500 meV. Cette valeur est inférieure au gain d'énergie sur l'ensemble de la structure quantique. La nécessité de prendre en compte la contribution de la bande de valence par l'intermédiaire du modèle à deux bandes est confirmée par les résultats de la figure 3.36 où sont reportées les caractéristiques I-V calculées à partir de deux hypothèses.

La première fait intervenir la non parabolicité dans la bande interdite et dans le puits de potentiel par l'intermédiaire d'un coefficient de non parabolicité  $a$  [20][21][22]. La relation de dispersion est alors :

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m^*(1 + aE)} = E$$

où

$$a = \left(1 - \frac{m^*}{m_0}\right)^2 / Eg$$

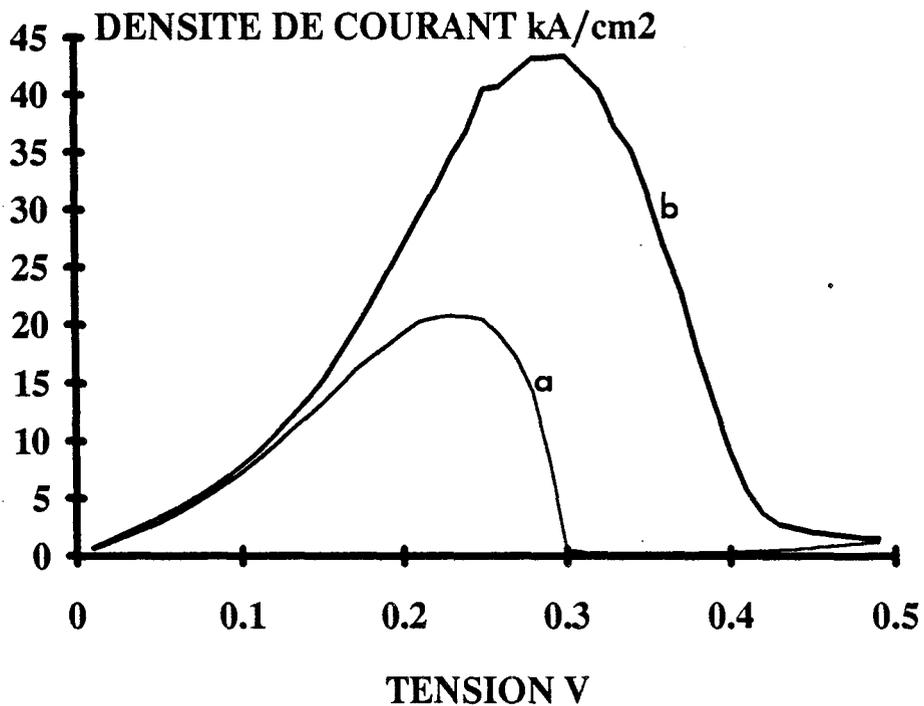


Figure 3.36 : Calcul de la caractéristique I-V mesurée à l'ambiante  
 a) modèle à une bande incluant un facteur de non parabolicité  
 b) modèle à deux bandes.

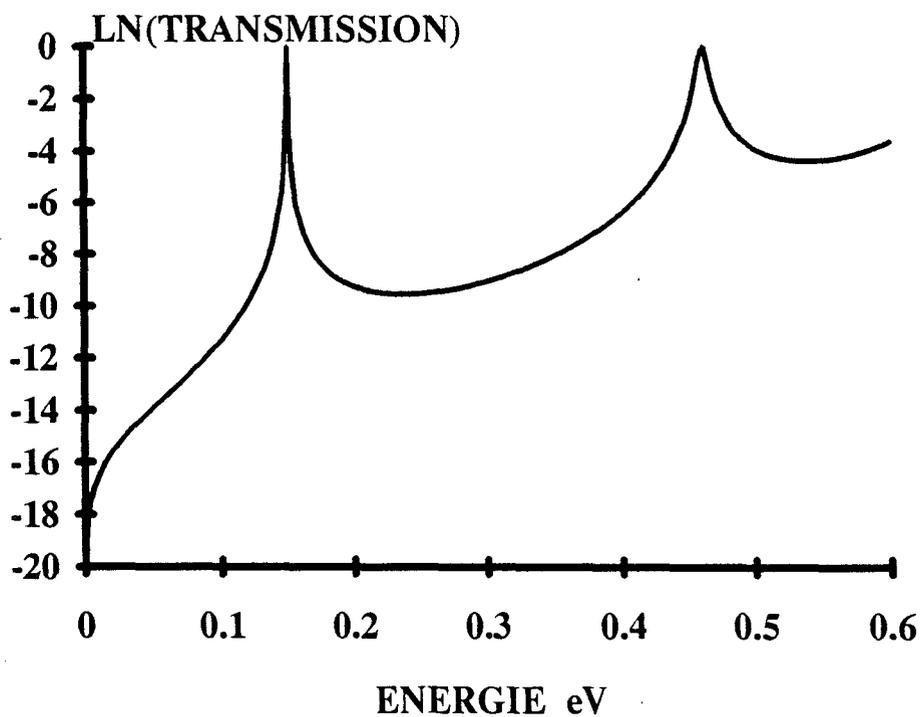


Figure 3.37 : Spectre de transmission calculé avec le modèle à une bande incluant un facteur de non parabolicité  $\epsilon_r = 150$  meV.

$m^*$  est la masse effective de l'électron au bas de la bande de conduction du matériau considéré.  $E$  est l'énergie de l'électron par rapport au bas de bande de conduction.

La masse électronique est ainsi allégée dans les matériaux de barrière et alourdie dans les matériaux de puits. Cette relation est obtenue en effectuant un développement limité autour du bas de bande de conduction de l'expression décrivant la valeur propre  $E_c$  de l'Hamiltonien à deux bandes [2] :

$$E_c = \frac{Eg}{2} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} + \sqrt{Eg^2 + \frac{4\hbar^2 k^2 P^2}{m^2}}$$

L'équation de Schrödinger relative à la bande de conduction est ensuite résolue comme précédemment après avoir rempli un tableau de masse fonction de l'énergie. Le résultat du calcul de courant dans ce cas conduit à une tension pic de l'ordre de 0,25V et à un courant pic de 20 kA/cm<sup>2</sup>, valeurs toutes deux inférieures aux relevés expérimentaux.

La deuxième hypothèse utilise le modèle à deux bandes. On obtient alors une amélioration sensible de l'accord entre valeurs théoriques et expérimentales avec des densités de courant pic tout à fait conformes à l'expérience de l'ordre de 40 kA/cm<sup>2</sup>. Les tensions pic théorique et expérimentale diffèrent d'environ 50 mV, ce qui peut s'expliquer par la chute de tension dans la résistance série estimée à environ 4  $\Omega$  pour cet échantillon (la résistance spécifique serait alors de l'ordre de  $9 \cdot 10^{-7} \Omega \cdot \text{cm}^2$ ). Si on s'intéresse au contraste en courant théorique, on constate que les deux modèles ne décrivent pas la réalité expérimentale. On obtient en effet un  $J_{pic}/J_{vallée}$  de 80 par la première approche et de 26 par la deuxième approche. Si l'on invoque la perte de cohérence, il faudrait introduire un facteur  $\gamma$  de 0,65 (voir paragraphe 1) pour passer de la valeur 80 à une valeur raisonnable de 4. Ceci est en contradiction avec le fait que la contribution incohérente du courant dans le matériau GaInAs est minimisée par rapport au matériau GaAs. En valeur relative, il apparaît ici encore que le modèle à deux bandes permet d'obtenir un meilleur accord théorie expérience. On peut comprendre ces différences entre les valeurs théoriques de  $J_{pic}/J_{vallée}$  à partir des seuls tracés de la transmission à l'équilibre. La figure 3.37 donne le résultat de ce calcul par le modèle incluant le facteur de non-parabolicité. En comparant cette dernière à la figure 3.35 obtenue avec le modèle à deux bandes, il apparaît que l'introduction de la fonction

GaInAs	$10^{19}\text{cm}^{-3}$	5000Å
GaInAs	$10^{17}\text{cm}^{-3}$	1000Å
GaInAs	NID	15Å
AlInAs	NID	50Å
GaInAs	NID	50Å
AlInAs	NID	50Å
GaInAs	NID	15Å
GaInAs	$10^{17}\text{cm}^{-3}$	1000Å
GaInAs	$10^{18}\text{cm}^{-3}$	4000Å
GaInAs	$10^{19}\text{cm}^{-3}$	5000Å
Substrat InP		

Figure 3.38 : Séquence de croissance de la structure à faible densité de courant.

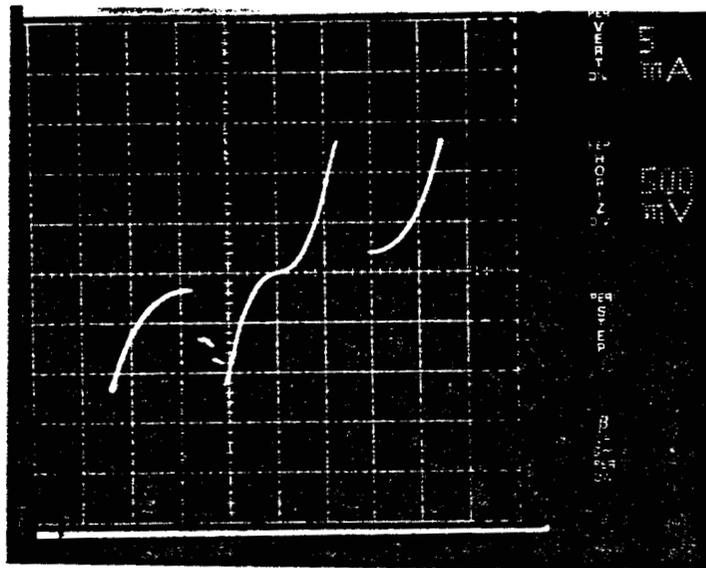


Figure 3.39 : Caractéristique I-V mesurée à 300 K.

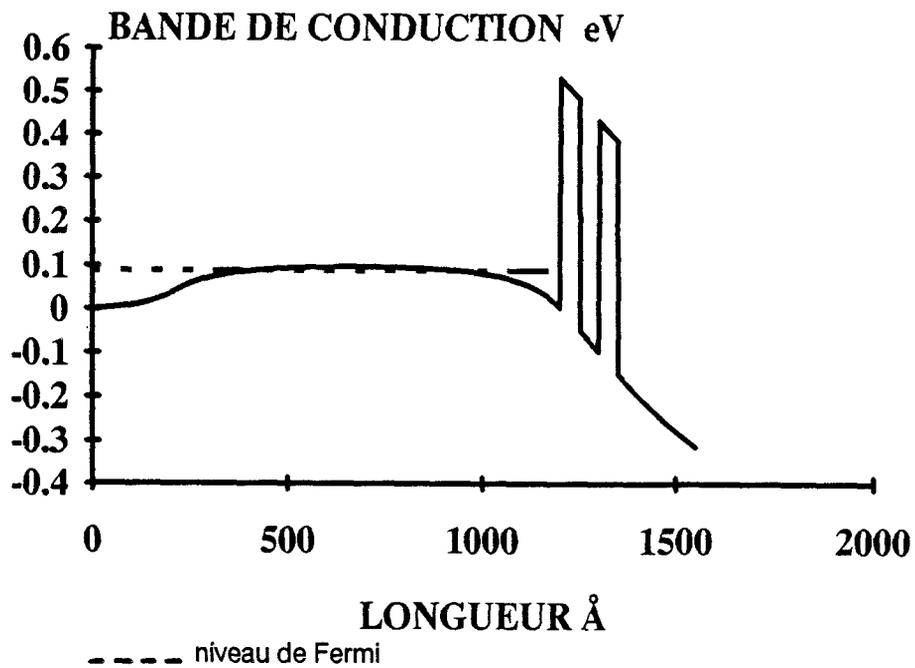


Figure 3.40 : Profil de la bande de conduction de la structure sous une polarisation de 0,6 V.

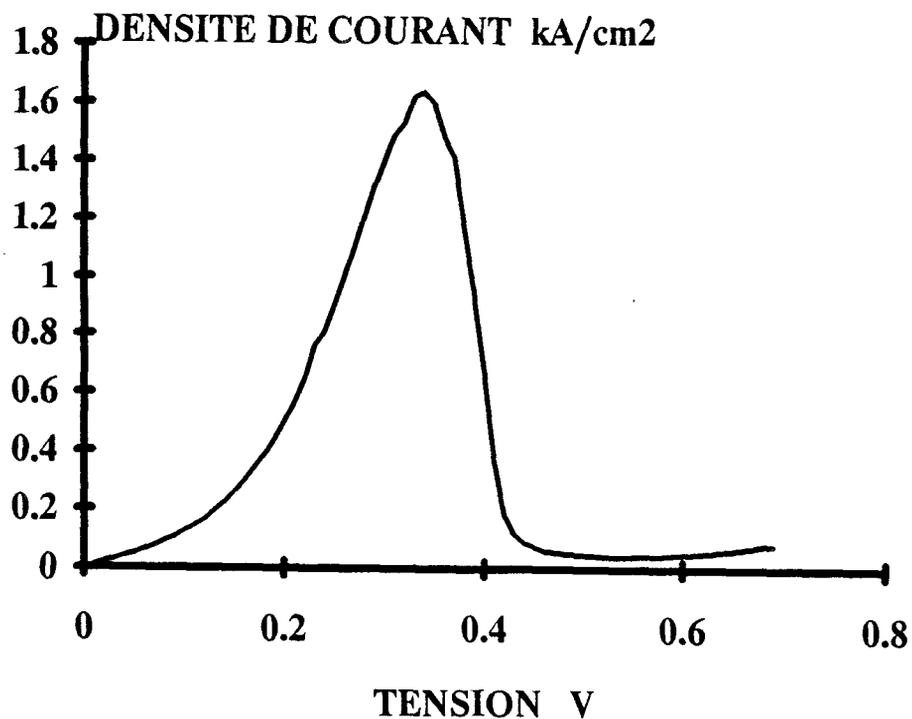


Figure 3.41 : Caractéristique courant-tension calculée à 300 K.

d'onde associée à la bande de valence décale le pic de transmission vers les hautes énergies, l'élargit et remonte la contribution hors résonance. On gagne ainsi un facteur 100 sur les valeurs de transmission hors résonance.

### 3.3.1.2 Structure à faible densité de courant

La structure à faible densité de courant AlInAs/GaInAs a été épitaxiée à l'Ecole Polytechnique de Lausanne. La fabrication des composants a été effectuées au Laboratoire Central de Recherche de Thomson. La séquence de croissance est schématisée sur la figure 3.38. Les barrières ont une largeur de 50 Å, les espaceurs sont dopés à  $10^{17}\text{cm}^{-3}$ . Cet épaissement des barrières ainsi que la diminution du niveau de dopage des espaceurs par rapport au cas de la structure précédente laissent présager une forte chute des valeurs de courant.

Pour faciliter la prise de contact, deux zones GaInAs fortement dopées à  $1.10^{19}\text{cm}^{-3}$  ont été épitaxiées de part et d'autre de la zone active. Compte tenu des dimensions des espaceurs de 1000 Å, ces zones fortement dopées n'influent pas directement sur les caractéristiques de conduction. Les caractéristiques I-V mesurées sous pointes à 300 K sont présentées sur la figure 3.39. La densité de courant pic est de  $1,5\text{ kA/cm}^2$  pour une tension de 0,6V. Le contraste en courant est de 7. Il convient d'insister sur la qualité de l'épitaxie caractérisée ici. Ceci est révélé non seulement par le très bon contraste en courant qui se situe au niveau des meilleurs performances mondiales en ce qui concerne ce système de matériaux, mais aussi par la symétrie des caractéristiques inverse et directe. Cette amélioration du contraste en courant s'accompagne néanmoins d'une sévère diminution de la densité de courant. Ceci est une illustration directe du compromis entre contraste en courant et conduction. D'un point de vue théorique, la situation se révèle un peu moins favorable que précédemment dans la mesure où les profils de dopage dans les zones d'accès comportent des transitions  $10^{18}\text{cm}^{-3} - 10^{17}\text{cm}^{-3}$ . Cependant, compte tenu de ces valeurs de dopage, on peut montrer que les longueurs de diffusion sont suffisamment restreintes pour que l'on retrouve une zone de GaInAs où le niveau de Fermi correspond à celui du matériau volumique. Sur la figure 3.40 est reporté le profil de diffusion de la transition  $10^{18}\text{cm}^{-3} - 10^{17}\text{cm}^{-3}$  correspondant à la tension pic ~~observée~~ <sup>experimentale</sup> de 0,6 V. On retrouve bien un niveau de Fermi dans la zone d'espaceur situé environ à 11 meV en-dessous de la bande de conduction. Le résultat du calcul de la caractéristique I-V effectué en considérant seulement la double barrière encadrée par deux zones dopées à  $10^{17}\text{cm}^{-3}$  avec un niveau de Fermi à -11

meV est donné sur la figure 3.41. On obtient un excellent accord théorie expérience avec un courant pic de  $1,6 \text{ kA/cm}^2$ . En revanche on retrouve les mêmes difficultés pour la description théorique du contraste en courant avec une valeur calculée de 38.

# Bibliographie

- [1] JONSON M., GRINCWAJG A.  
Applied Physics Letters, 51 (21), 23 Novembre 1987.
- [2] KANE K.O.  
Journal of chemical solids, Vol. 1, p. 249, 1957.
- [3] BASTARD G.  
Physical Review B., Vol 24, N ° 10, p. 5693, 1981
- [4] GUÉRET P., ROSSEL C., MARCLAY E., MEIER H.  
Journal of Applied Physics, 66 (1), p. 278, 1 July, 1989.
- [5] BÜTTIKER M.  
Resonant Tunneling in Semiconductors: Physics and Applications  
Edited by Leroy Chang, EE Mendez, C Tejedor  
(Plenum Press, New York), 1991.
- [6] VANBÉSIEN O.  
Thèse de Doctorat, Université de Lille, 1990.
- [7] SADAUNE V.  
Tunnel résonnant dans les double barrières à pseudoalliage AlAs/GaAs.  
Caractérisation électriques à très basses températures.  
Rapport interne (1989).
- [8] DE SAINT POL L.  
Thèse de Doctorat, Université de Lille, 1990.

- [9] BROWN E.R., PARKER C.D., CALAWA A.R., MANTA M.J., CHEN C.L., MAHONEY L.J., GOODHUE W.D., SÖDERSTRÖM R.E., Mc GILL T.C.  
Microwave and Optical Technology Letters, vol 4 n ° 1, 1991
- [10] DE SAINT POL L., VANBÉSIEN O., LIPPENS D.  
Electronics Letters, 1 March, Vol. 26, n ° 5, p. 342, 1990.
- [11] VANBÉSIEN O., BOUREGBA R., MOUNAIX P., LIPPENS D.  
Resonant Tunneling in Semiconductors: Physics and Applications Edité by LL Chang et al, Plenum Press New York, 1991.
- [12] BRUGGERS A., MEINER O., WÖLK C., DENFEL R.  
Proceedings of the 13<sup>th</sup> IEEE/Cornell Conference on Advanced Concepts in High Speed Semiconductor Devices and Circuits. August 5, 1991 (In press).
- [13] YUK KEIKO D. , JUKSON J.C.  
Physical Review B, Vol. 38, n ° 14, 15 November 1988.
- [14] BROZAK G.  
Physical Review Letters, Vol. 38, n ° 14, 15 November 1988.
- [15] SCHULMANN J.N., YIA CHUNG.  
Physical Review B, Vol. 24, n ° 8, 1981.
- [16] SADAUNE V.  
Thèse de l'Université de Lille I, à paraître
- [17] LEROUX H., MOUNAIX P., LIPPENS D.  
Inst. Phys. Conf. Ser. n ° 112: chapter 6, 1990.
- [18] INATA T., MUTO S., NAKATA Y., FUYII T., GHNISHI H., HIYAMIZU S.  
Japanese Journal of Applied Physics, vol. 25, n ° 12, p. L983, Dec. 1986
- [19] BOUREGBA R.  
Thèse de l'Université de Lille I, 1991
- [20] EHRENREICH  
Physical Review, Vol. 120, n ° 6, 1960.
- [21] CONWELL VASSEL.  
Physical Review, Vol. 166, n ° 3, p. 797.

[22] MUTO S., INATA T., SUGIYAMA Y., NAKATA Y., FUJII T., OHNISHI H.,  
HIYANIZV S.

Japanese Journal of Applied Physics, Vol. 26, n° 3, p. L220, March 1987.

# Table des matières

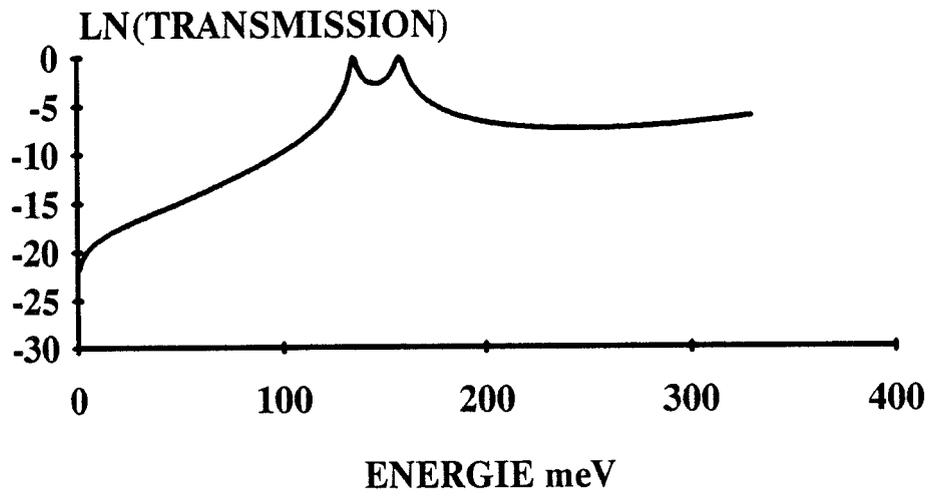
<b>4</b>	<b>Conduction dans les superréseaux</b>	<b>1</b>
4.1	Transitions vers les superréseaux finis . . . . .	2
4.1.1	Structure deux puits couplés . . . . .	2
4.1.2	Superréseaux finis . . . . .	4
4.1.2.1	Comparaison entre les superréseaux finis et infinis . . . . .	4
4.1.2.2	Recherche d'un superréseau fini présentant une fenêtre de transmission unitaire . . . . .	5
4.1.2.2.1	Application de la méthode image . . . . .	6
4.1.2.2.2	Réalisation d'un filtre en énergie . . . . .	6
4.1.2.2.3	Etude sous champ électrique . . . . .	7
4.1.2.2.4	Analogies électriques . . . . .	8
4.2	Vers une approche réaliste . . . . .	8
4.2.1	Elargissement collisionnel . . . . .	8
4.3	Etude théorique de la conduction dans un superréseau présentant une minibande . . . . .	9
4.4	Structure à largeur de puits variable . . . . .	12
4.5	Vérification expérimentale sur des barrières superréseaux . . . . .	13
4.6	Conclusion . . . . .	15

## Chapitre 4

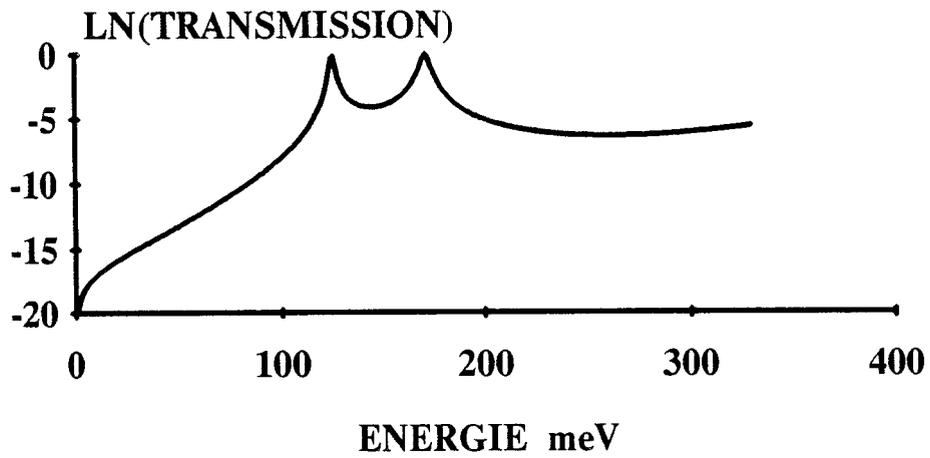
# Conduction dans les superréseaux

On emploie le terme de superréseau pour des structures constituées d'une alternance de matériaux semiconducteurs de bande interdite différente. Les dimensions des motifs sont choisies de telle sorte qu'on puisse assurer un couplage significatif entre chaque puits de potentiel. Ceci se traduit sur le spectre de transmission par la création d'une fenêtre sur une large gamme d'énergie où les phénomènes de réflexion sont minimisés. Pour un système idéal constitué d'une succession infinie de barrières et de puits de potentiel de largeur constante, la transmission est unitaire aux valeurs correspondant aux énergies de résonances.

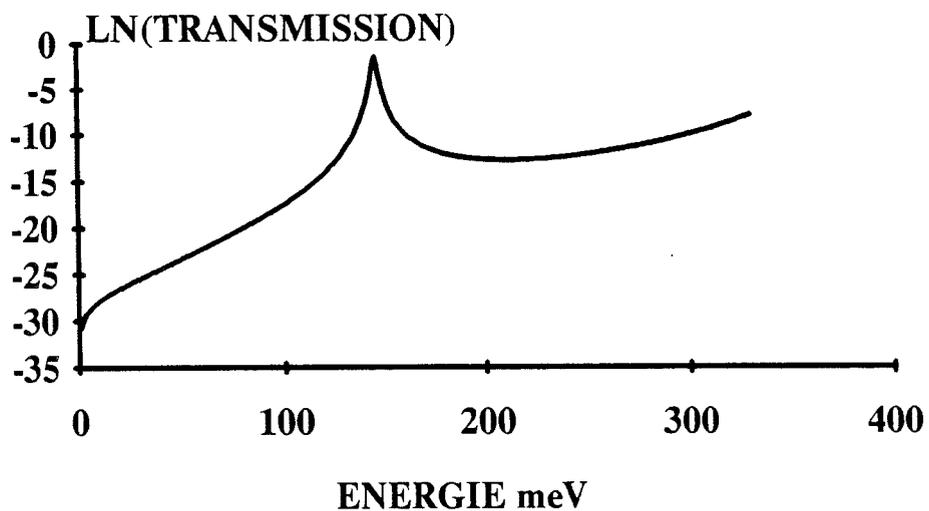
La mise en pratique des superréseaux impose bien évidemment de se tourner vers des structures finies. Des superréseaux finis ont été introduits en tant qu'émetteur et collecteur dans un transistor bipolaire mettant en jeu l'effet tunnel résonnant (structure  $\gamma$  Biquart) [1]. La valeur de bande interdite des matériaux de contact est ainsi augmentée artificiellement par rapport à celle du matériau de base. En contact d'émetteur et de collecteur également, ces superréseaux, séparés par une barrière plus large, permettent de créer deux fenêtres de transmission que l'on désaligne sous polarisation. Un effet de résistance différentielle négative est alors observé et mis à profit pour obtenir des oscillations à température ambiante [2]. Des effets de résistance différentielle négatives ont pu également être mis en évidence pour une structure superréseau encadrée par deux contacts ohmiques  $n^+$  avec des densités de courant pic qui permettent un fonctionnement à très haute fréquence [3]. On peut également citer l'utilisation d'un superréseau en tant que filtre de masse [4]. Nous nous proposons dans ce chapitre de considérer



a)  $L_B$  centrale = 30 Å



b)  $L_B$  centrale = 20 Å



c)  $L_B$  centrale = 80 Å

Figure 4.1 : Spectre de transmission pour 3 situations de couplage interpuits

trois aspects relatifs aux superréseaux. Il s'agit tout d'abord des effets de troncature sur la fenêtre de transmission. Il faut dans ce cas compenser la désadaptation de la structure avec le continuum par un choix approprié des largeurs de barrière et de puits pour tenter de rétablir une minibande. Le deuxième aspect concerne des structures triple puits suffisamment couplés pour que l'on puisse considérer des phénomènes de transport à travers une fenêtre de transmission sensiblement élargie par rapport au pic de transmission obtenue dans le cas d'une double barrière.

Dans un troisième temps, nous évaluons les possibilités de substituer des barrières homogènes d'une structure double barrière par une alternance de matériaux à grand gap et à petit gap de très faible épaisseur.

## 4.1 Transitions vers les superréseaux finis

Avant de considérer le cas de structures relativement étendues, il nous semble utile de traiter le cas de deux puits couplés qui vont nous permettre de dégager les conditions de formation d'une fenêtre de transmission élargie.

### 4.1.1 Structure deux puits couplés

La triple barrière de potentiel définit deux puits de potentiel dans lesquels deux situations de confinement peuvent se présenter. Si la barrière centrale est épaisse, les deux puits sont isolés et le passage par effet tunnel, d'un puits à l'autre est peu probable. Par contre, si le couplage interpuits est important, les fonctions d'onde relatives à chaque puits de potentiel se recouvrent et il en résulte une dispersion des niveaux quasi-liés. Le passage par effet tunnel à travers toute la structure est alors non négligeable. Ces deux situations sont illustrées sur la figure 4.1. Les hauteurs de barrière sont de 330 meV, la masse de l'électron dans les barrières est de 0,096  $m_0$ . Sur la figure 4.1a, les largeurs de barrière et de puits sont égales à 30 Å. La courbe de transmission présente deux pics à 134 meV et à 157 meV. Les fonctions d'onde associées données figure 4.2 sont équiréparties sur les deux puits. On obtient ainsi deux chemins préférentiels pour le passage par effet tunnel à travers la structure triple barrière. Si on augmente le couplage interpuits en prenant une barrière de 20 Å, (figure 4.1b), on note un écartement des deux pics de transmission qui se situent alors à 125 meV et à 171 meV. La figure 4.1c montre quant à elle le cas d'un sous couplage. La barrière centrale est de 80 Å. Les deux pics de transmission observés précédemment sont dégé-

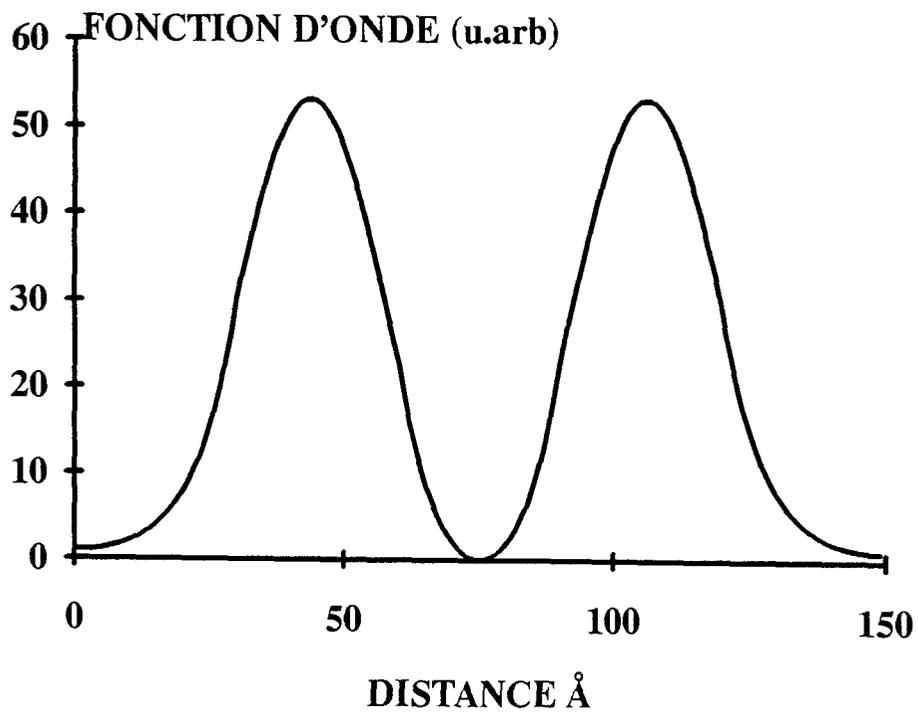
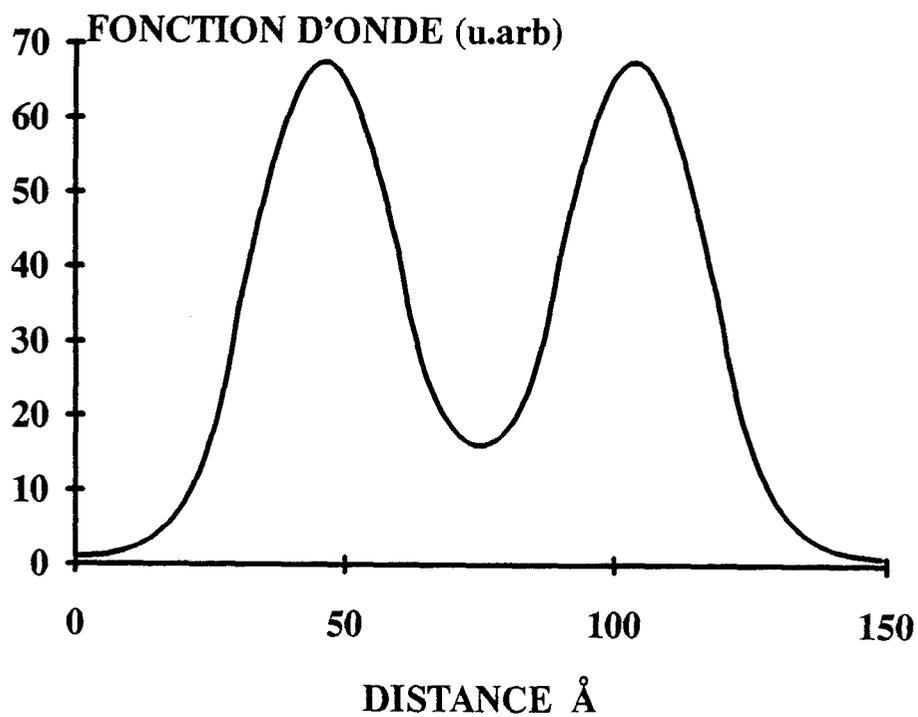


Figure 4. 2: Equirepartition de la fonction d'onde dans une triple barrière  $l_b = L_w = 30 \text{ \AA}$   
 a)  $\varepsilon_r = 134 \text{ meV}$   
 b)  $\varepsilon_r = 157 \text{ meV}$

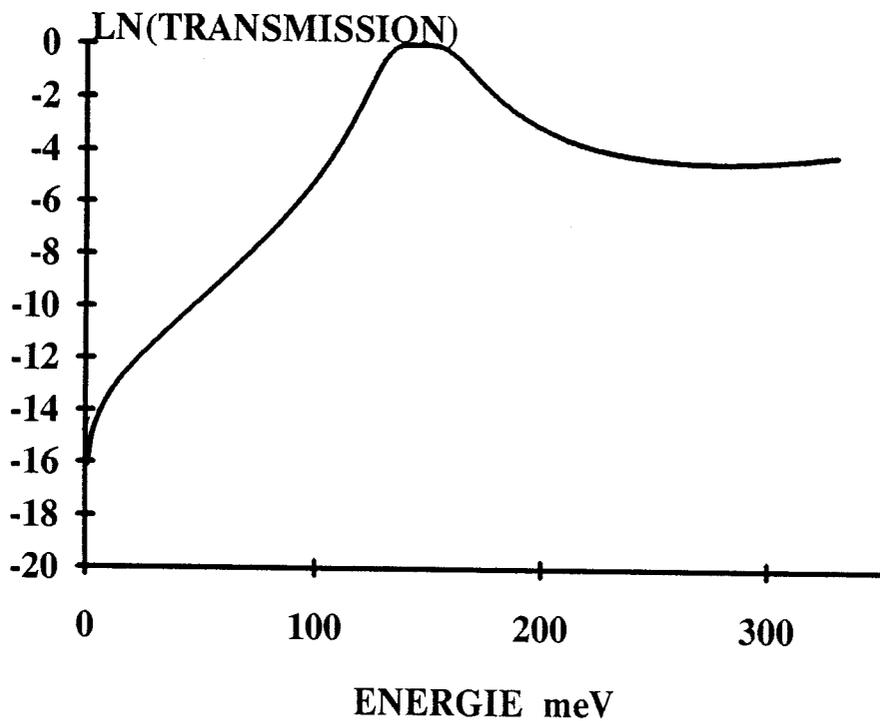
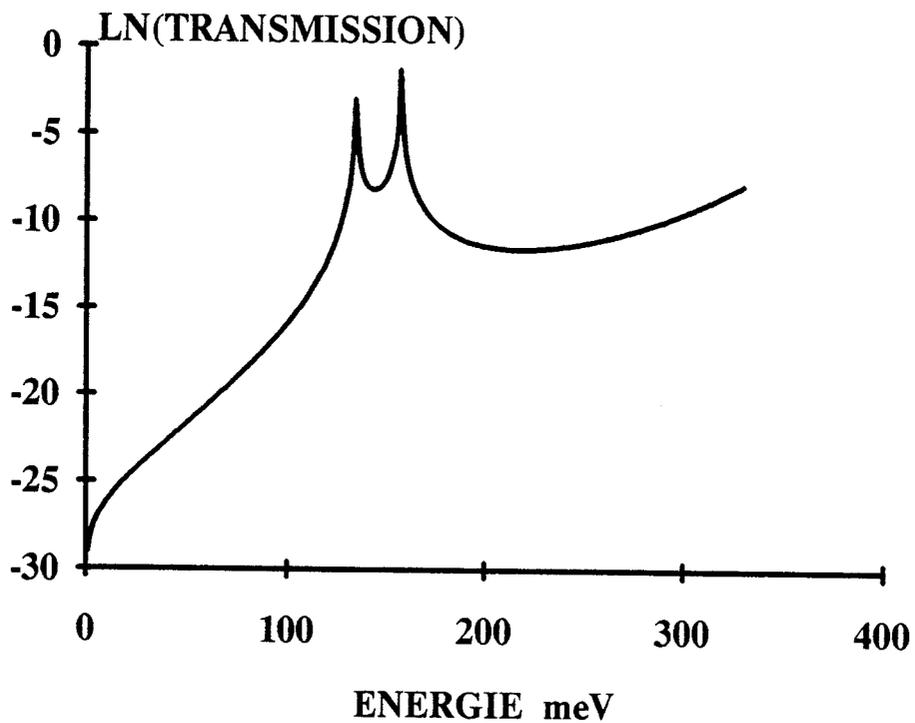


Figure 4.3 : Spectre de transmission pour deux situations de couplage avec le continuum  
 a)  $L_b$  extérieure = 50 Å  
 b)  $L_b$  extérieure = 15 Å.

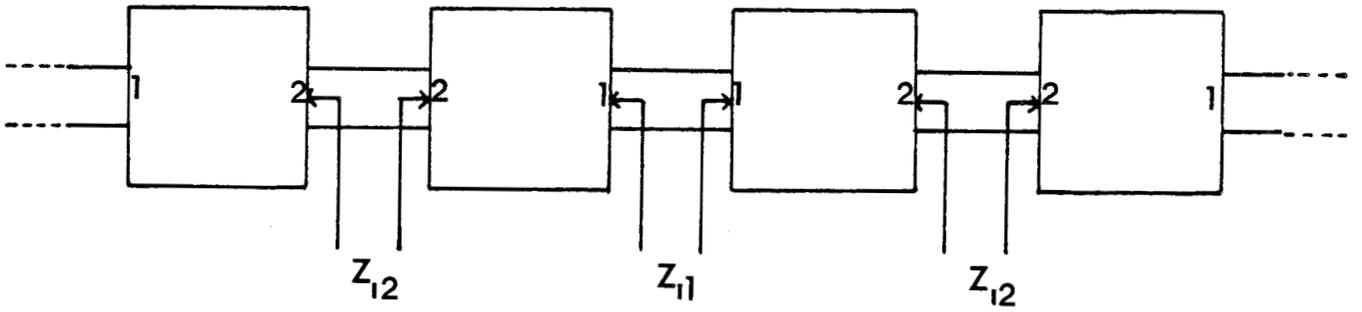


Figure 4.4 : Chaîne de quadripôles élémentaires

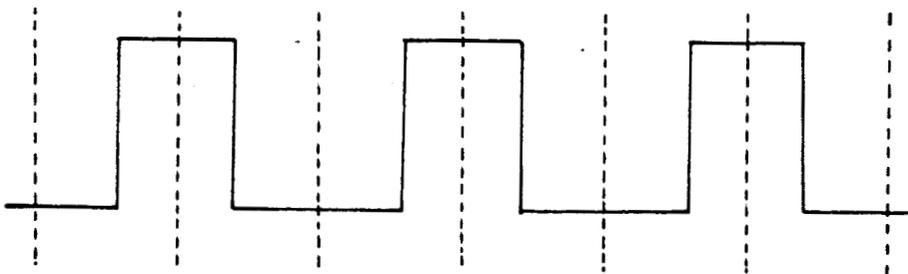


Figure 4.5 : Découpage de la structure triple barrière.

nés à 145 meV et le maximum de transmission est négatif en échelle logarithmique.

En conclusion, un couplage interpuits accru définit une bande passante où la transmission prend des valeurs proches de l'unité et où le passage par effet tunnel est favorisé. Nous nous intéressons maintenant aux barrières d'extrémité qui déterminent le couplage de la structure avec le continuum. En augmentant les dimensions des barrières extérieures dans la structure double puits, on favorise la sélectivité de chaque pic de transmission. A titre d'exemple, la figure 4.3a présente le spectre de transmission d'une triple barrière où les largeurs de barrières placées en bout sont de 50 Å. Le minimum de transmission vaut ici -8 au lieu de -3 en échelle logarithmique, lorsque toutes les barrières sont égales à 30 Å. Par contre la position des pics de transmission n'a pas varié. On peut donc obtenir une bande de transmission unitaire en augmentant de façon adéquate le couplage avec le continuum. On optimise ainsi la structure triple barrière de largeur de barrière centrale égale à 30 Å, en choisissant des largeurs de barrières d'extrémité égales à 15 Å. Le spectre de transmission correspondant à cette structure est donné sur la figure 4.3b. La fenêtre de transmission unitaire s'inscrit autour des deux valeurs d'énergie qui déterminaient les niveaux quasi-liés dans un double puits de largeur égale à 30 Å. Le choix des largeurs de barrières extérieures égales à la moitié de la barrière centrale et la réflexion quasi-négligeable sur la fenêtre de transmission qui en résulte peuvent se comprendre à partir d'une analogie électrique avec les lignes de transmission et la méthode image pour la réalisation de filtres électriques [5]. La chaîne infinie de quadripôles élémentaires tels qu'en tout plan de la structure l'impédance vue de la droite soit égale à l'impédance vue de la gauche, est présentée sur la figure 4.4. La succession de zones de barrière et de puits de potentiel peut être assimilée à une alternance de milieux d'impédance caractéristique différente [6].

L'expression de l'impédance caractéristique dans une zone semiconductrice prend la forme :

$$Z_0 = \frac{\hbar k}{im^*}$$

$$\text{avec } k = \frac{i}{\hbar} \sqrt{2m^* [E - V]}$$

Si on considère une structure double barrière, l'impédance d'onde vue de la droite est égale à l'impédance d'onde vue de la gauche pour les énergies résonnantes corres-

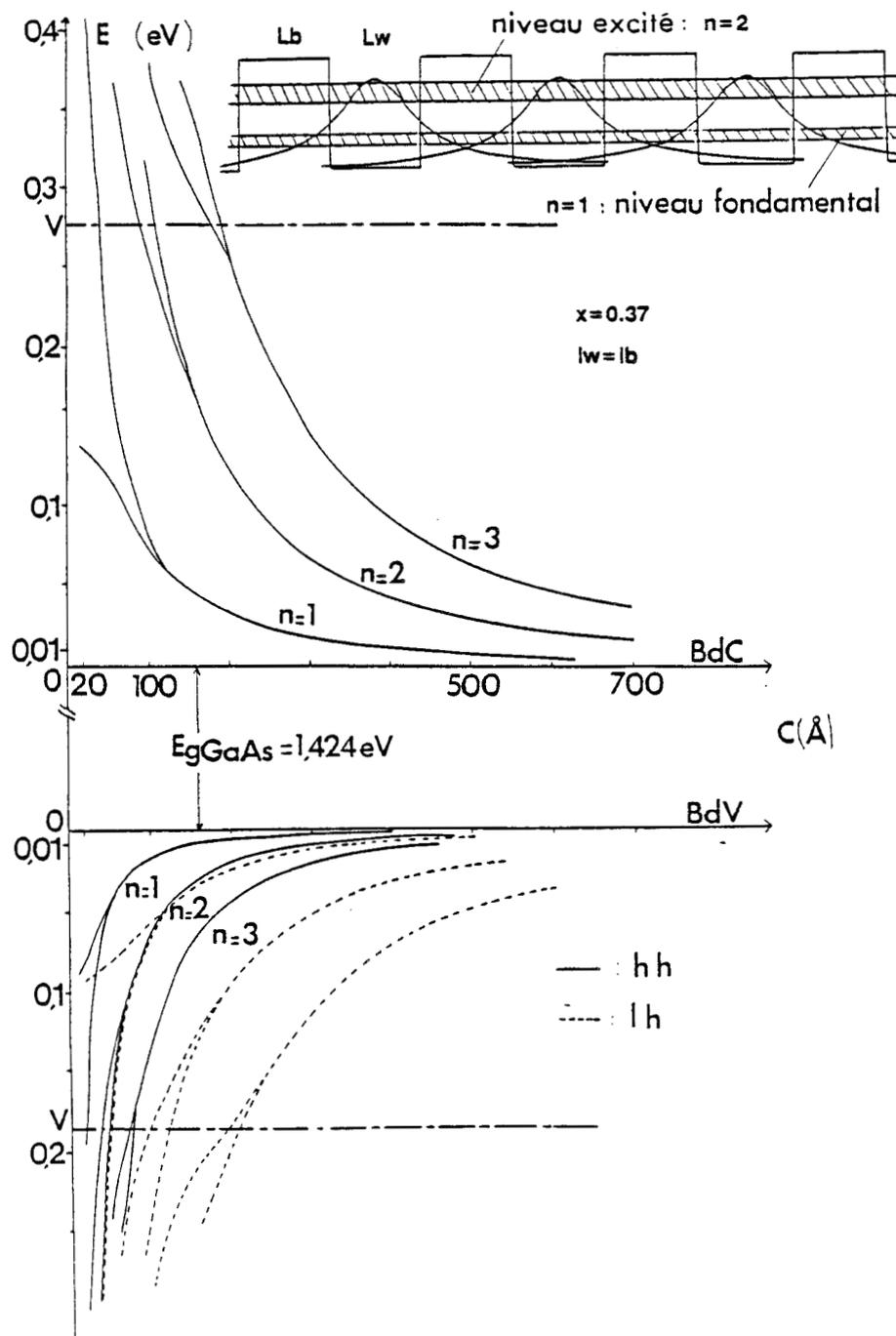


Figure 4.6 : Confinement des états quasi-liés dans un superréseau infini  $L_b = L_w = 30 \text{ \AA}$ .

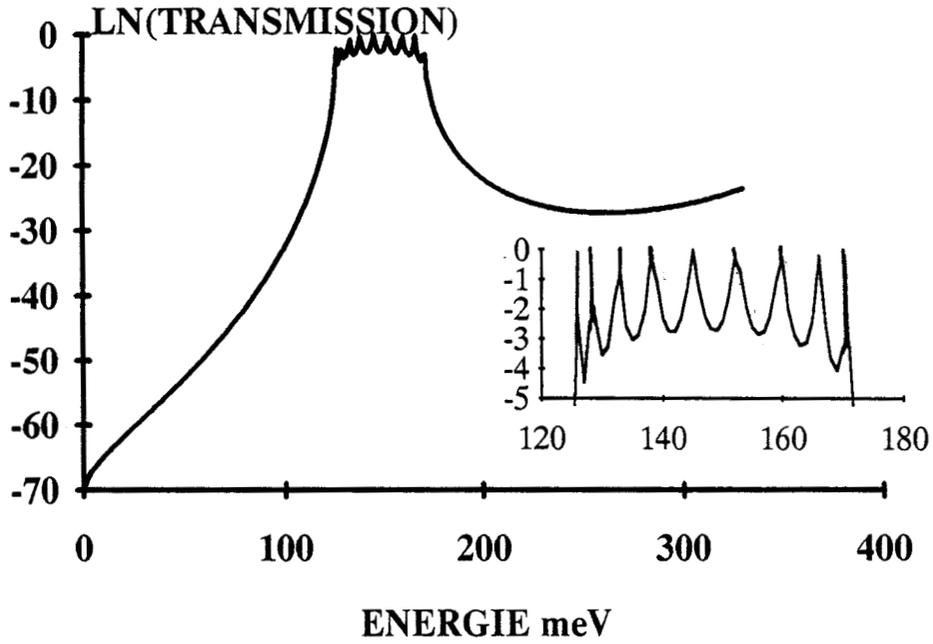


Figure 4.7 : Spectre de transmission en fonction de l'énergie pour un superréseau formé de 10 barrières -  $L_b = L_w = 30 \text{ \AA}$ .

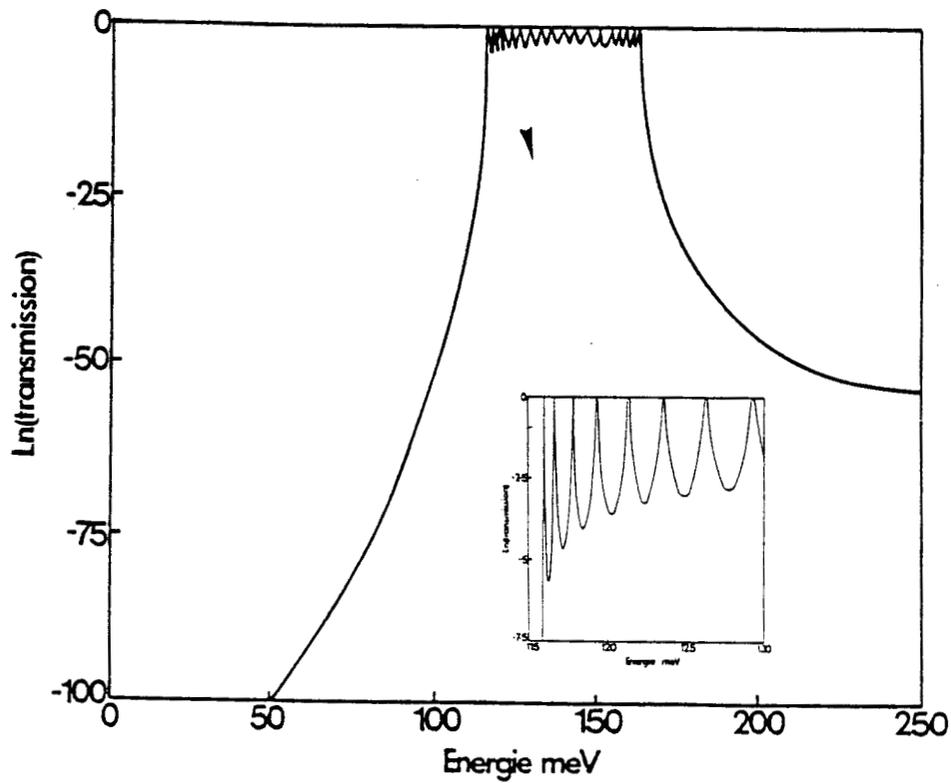


Figure 4.8 : Spectre de transmission en fonction de l'énergie pour un superréseau formé de 20 barrières -  $L_b = L_w = 30 \text{ \AA}$ .

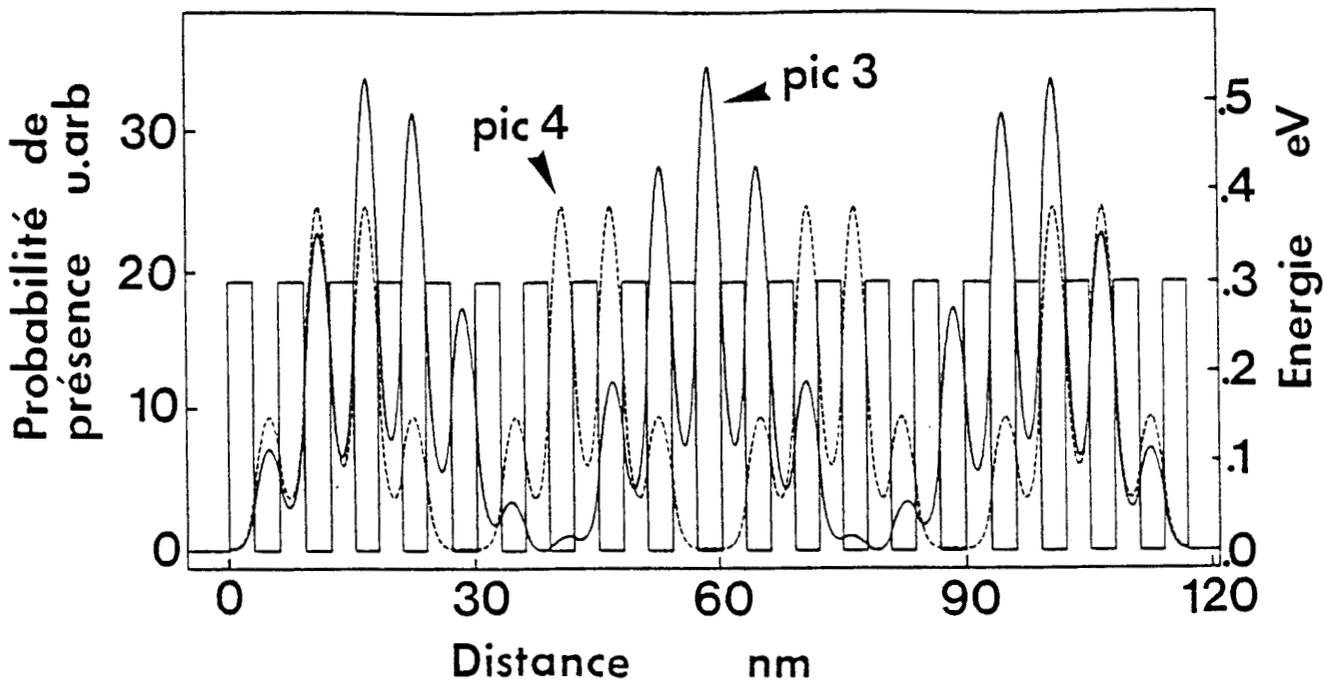
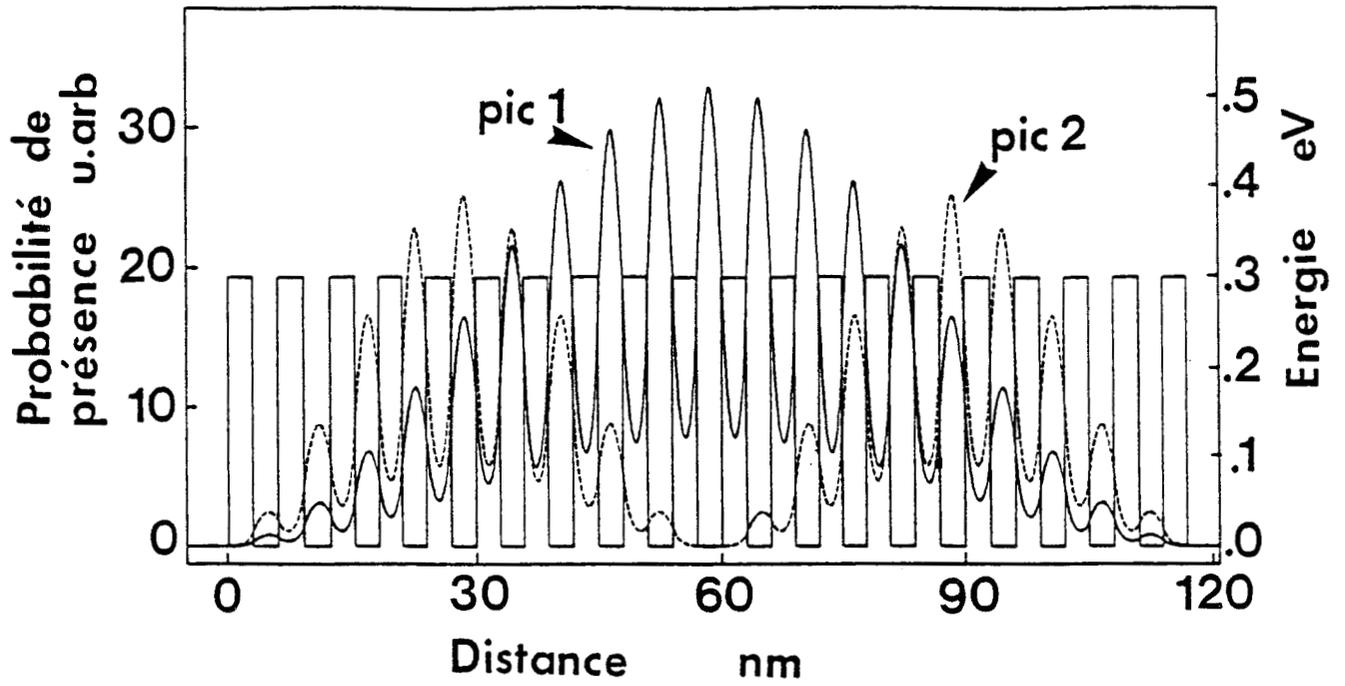


Figure 4.9 : Probabilités de présence électronique relatives aux quatre premiers pics de transmission d'un superréseau de 20 barrières  $L_b = L_w = 30 \text{ \AA}$  à l'équilibre.

pendant aux niveaux quasi-liés du puits [6].

Si on s'attache à assimiler la triple barrière à la succession de quadripôles présentés précédemment, il faut la découper en considérant que chaque cellule élémentaire est constituée d'une demi-barrière et d'un demi-puits (figure 4.5). Il apparaît alors clairement que la largeur des barrières extérieures doit être égale à la moitié de la barrière centrale, pour réaliser un filtre passe-bande en énergie. On peut cependant noter que la sélectivité de la fenêtre de transmission n'est pas très favorable à une utilisation de la structure triple barrière en filtre d'énergie puisqu'aux hautes énergies la transmission reste très importante et décroît seulement jusqu'à - 4 en échelle logarithmique pour une énergie égale à la hauteur de barrière. Nous allons donc augmenter le nombre de cellules élémentaires barrière puits pour améliorer le taux de rejection des filtres en énergie. Ceci nous conduit à nous intéresser aux superréseaux finis.

## 4.1.2 Superréseaux finis

### 4.1.2.1 Comparaison entre les superréseaux finis et infinis

Si on passe maintenant à une alternance infinie de barrière et de puits couplés on obtient un superréseau présentant une minibande sur une large gamme d'énergie. L'évolution de la minibande en fonction de la période  $L = L_W + L_B$  est représentée sur la figure 4.6 pour  $L_b = L_W$ . Ce résultat a été obtenu par la résolution de l'équation transcendante donnée par Bastard [7]. Le superréseau infini permet donc de réaliser un filtre en énergie dont la bande passante est d'autant plus large que la période est faible. Il est bien évident que dans le cas où  $L_b = L_W$  toute réduction de  $L_W$  s'accompagne d'une augmentation des valeurs d'énergie des niveaux dans les puits. Il faudra donc prendre garde à ne pas travailler avec des superréseaux présentant des minibandes virtuelles. Dans le cas où  $L_b = L_W = 30 \text{ \AA}$ , la minibande se situe à des énergies inférieures aux hauteurs de barrière et s'étend sur 40 meV. Le fait de tronquer cette structure infinie crée la désadaptation avec le continuum et la fenêtre de transmission présente alors des ondulations. Le spectre de transmission en fonction de l'énergie d'un superréseau formé de 10 barrières de 30  $\text{\AA}$  et de 9 puits de potentiel de 30  $\text{\AA}$  également est donné sur la figure 4.7. Neuf pics de transmission sont mis en évidence. Si on augmente le nombre de barrières (20 barrières, 19 puits) (figure 4.8) les pics de transmission se ressèrent à l'intérieur de la fenêtre de transmission. Le contraste entre les valeurs de transmission résonnantes et non résonnantes s'accroît. L'écart en énergie calculé entre les maxima

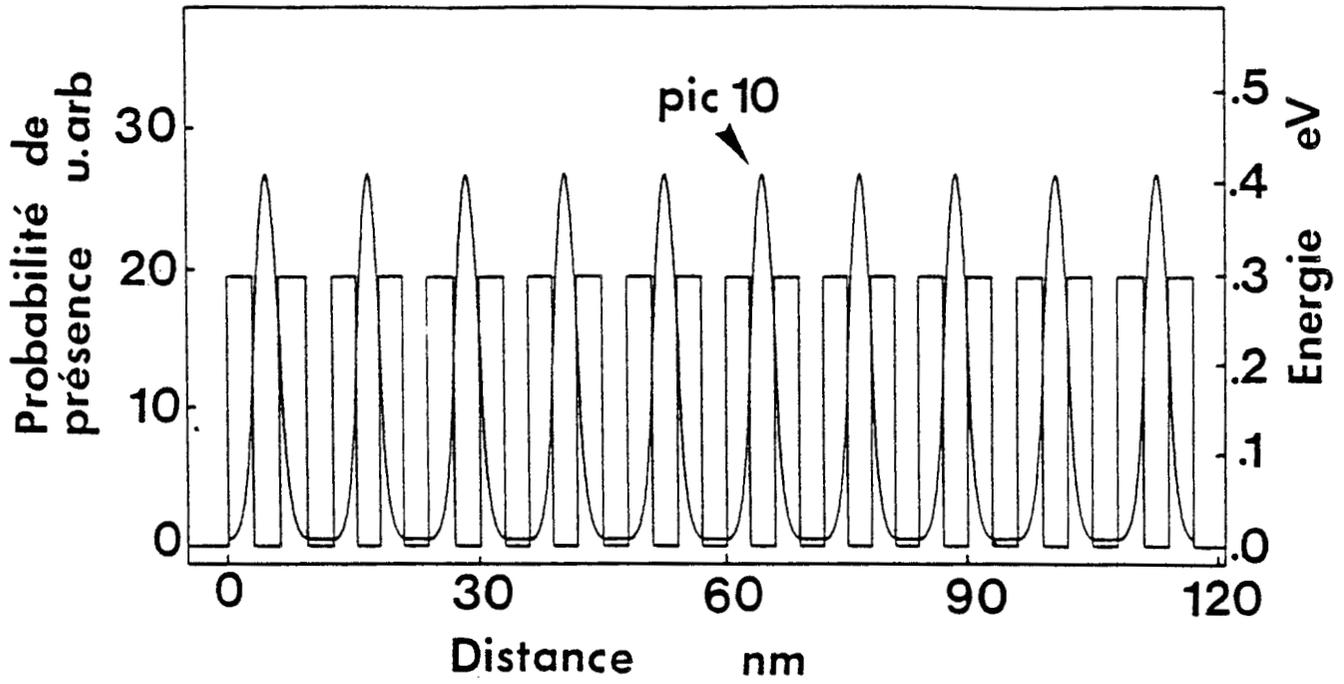


Figure 4. 10: Probabilités de présence électronique relatives au dixième pic de transmission d'un superréseau de 20 barrières  $L_b = L_w = 30 \text{ \AA}$  à l'équilibre.

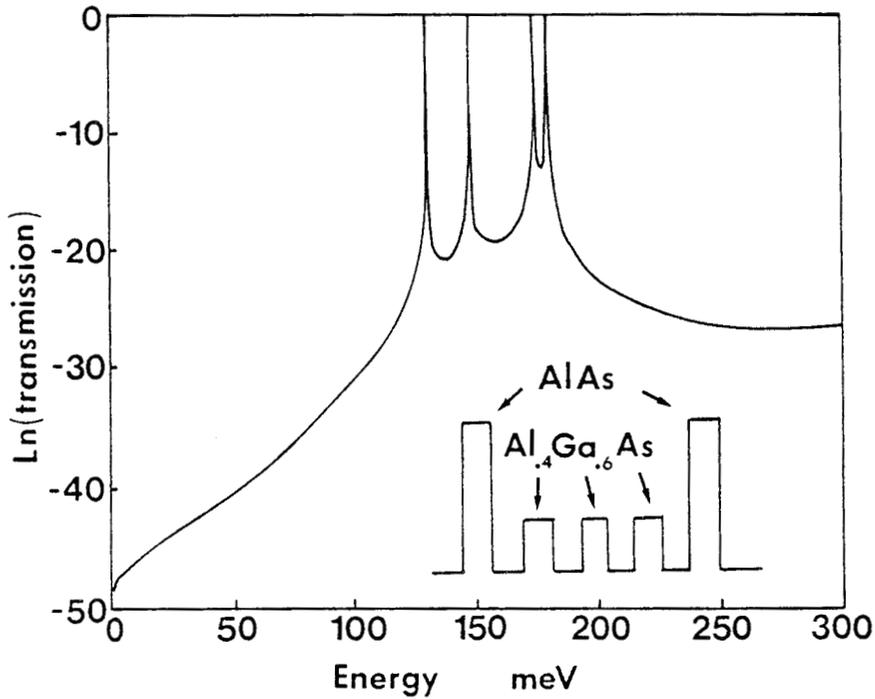


Figure 4.11: Spectre de transmission d'une structure superréseau fortement découplée avec le continuum par la présence de barrières d'AlAs placées en bout

de transmission aux limites de la fenêtre est de 47 meV. Cette valeur est comparable à celle de la minibande du superréseau infini. La figure 4.9 montre le module au carré des fonctions d'onde associées aux quatre premiers pics de transmission.

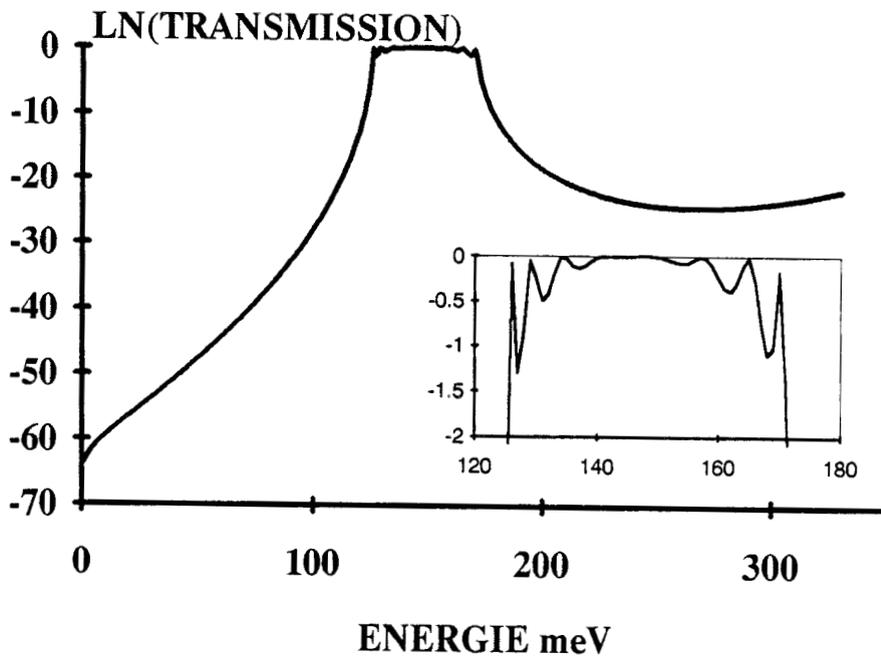
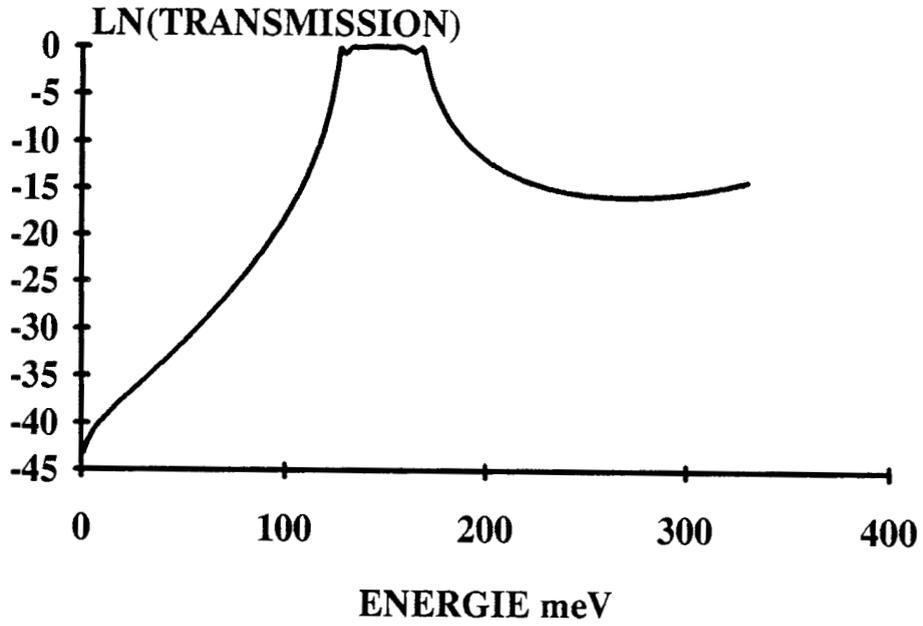
La densité de probabilité présente des points d'accumulation et chaque maximum dans les puits correspond à un mode d'interférences constructives. En fait la fonction d'onde élémentaire de chaque puits se superpose à une fonction enveloppe caractéristique des phénomènes d'interférence se produisant entre les deux extrémités de la structure alternée. On constate alors que les fonctions d'onde ne présentent en aucune façon la périodicité du motif élémentaire de la structure. On assiste aussi à des constructions interférentielles dans les zones de barrières qui s'amenuisent au fur et à mesure que l'ordre des fonctions d'onde augmente. La fonction d'onde associée au dixième pic retrouve une certaine périodicité figure 4.10. Elle est équirepartie tous les deux puits et s'annule dans chaque barrière.

#### **4.1.2.2 Recherche d'un superréseau fini présentant une fenêtre de transmission unitaire**

On a été tenté en première analyse d'accroître le nombre de période du superréseau fini pour minimiser le phénomène d'ondulation sur la fenêtre de transmission. On a en fait montré qu'il en résulte une augmentation du contraste entre les pics de transmission et les transmissions hors résonance. Par contre, le taux de rejection présenté par le superréseau est amélioré. L'analogie avec les filtres électriques se révèle donc fructueuse puisqu'il est bien connu que l'augmentation des cellules de filtrage conduit à une augmentation de la rejection hors-bande.

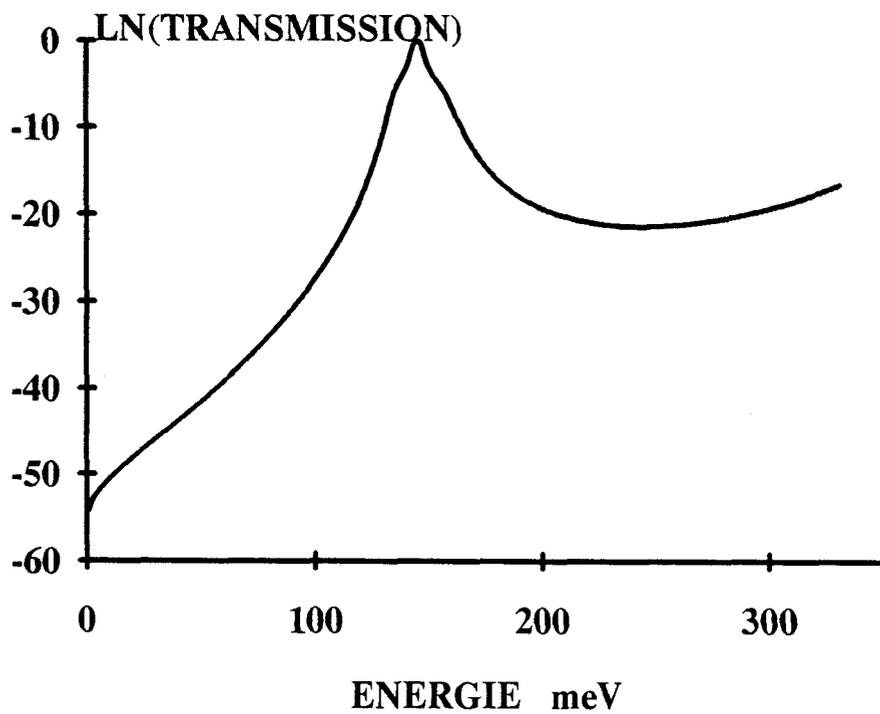
Pour se convaincre que l'élément dominant pour l'apparition de ripple de transmission est la désadaptation aux extrémités nous avons substitué aux barrières de type GaAlAs placées en bout de structure, des barrières de hauteur beaucoup plus élevée en AlAs. Les résultats du calcul de la transmission sont donnés sur la figure 4.11. Les variations de  $\ln(T)$  dans la fenêtre de transmission sont alors fortement amplifiées avec des valeurs minimales qui atteignent - 20 en échelle logarithmique.

Cet exemple montre de toute évidence que la recherche d'une bande de transmission unitaire passe par l'adaptation des fonctions d'onde aux limites de la structure alternée.



**Figure 4.12 :** Evolution de la transmission en fonction de l'énergie pour un superréseau  $L_b = L_w = 30 \text{ \AA}$   $L_b$  extérieure =  $15 \text{ \AA}$ .

- a) 7 barrières
- b) 10 barrières



**Figure 4.13** : Evolution de la transmission en fonction de l'énergie pour un superréseau de séquence  $L_b = 15, 30, 45, 60, 45, 30, 15 \text{ \AA}$ .

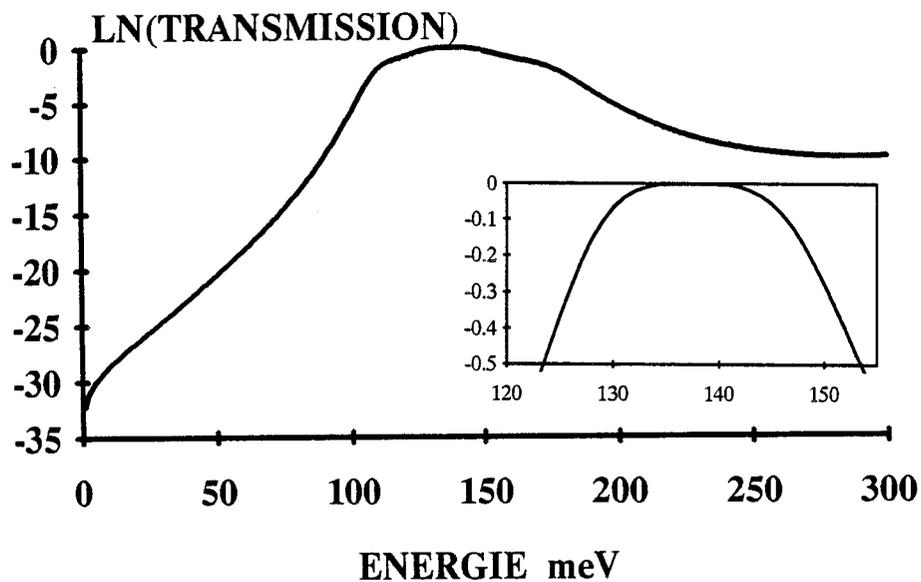


Figure 4.14 : Evolution de la transmission en fonction de l'énergie d'un superréseau de séquence  $L_b = 8, 16, 24, 32, 24, 16, 8 \text{ \AA}$ .

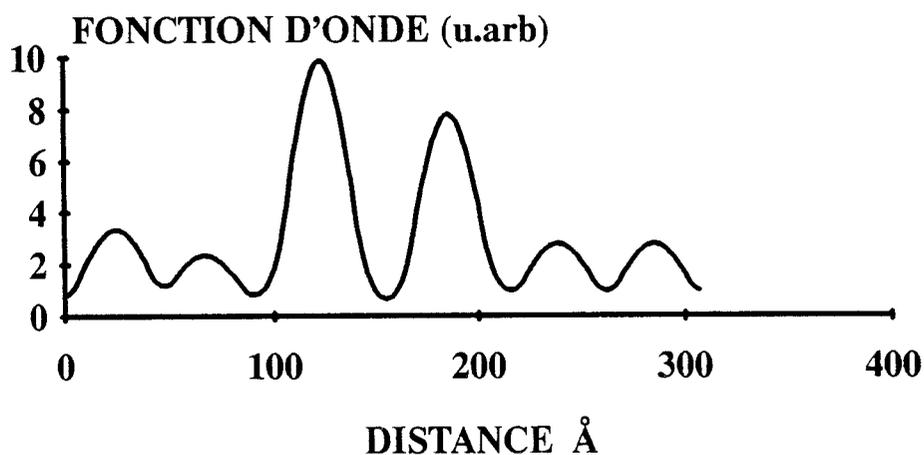
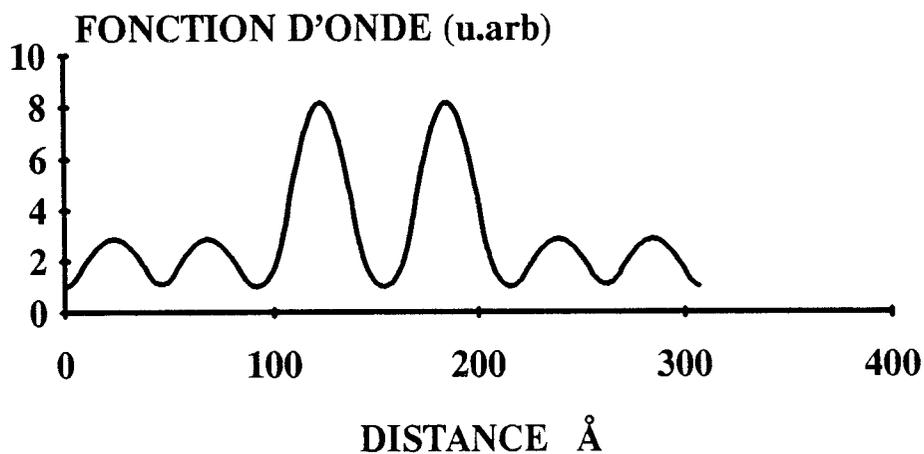


Figure 4.15 : Fonction d'onde associée aux énergies situées dans la minibande  
 a)  $\varepsilon_r = 138 \text{ meV}$   
 b)  $\varepsilon_r = 143 \text{ meV}$

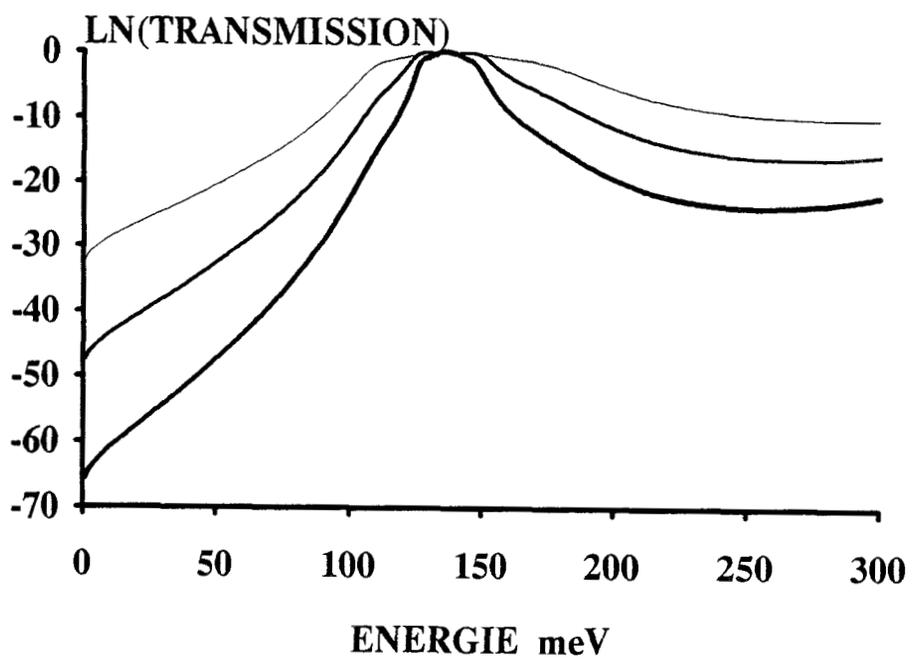
#### 4.1.2.2.1 Application de la méthode image

Si on reprend la structure double puits de largeur de barrière 15 Å, 30 Å, 15 Å avec des largeurs de puits de 30 Å et que l'on augmente le nombre de barrières au centre on constate la réapparition d'ondulation dans la fenêtre de transmission au fur et à mesure que le nombre de cellules augmente. Cette situation est illustrée sur la figure 4.12 où l'on a tracé le spectre de transmission pour 7 et 10 barrières. Il se crée des pics de transmission sur les bords de la bande plate d'autant plus marqués que l'on augmente le nombre de barrières centrales. La condition d'adaptation qui permettait d'obtenir une bande plate dans le cas de la triple barrière n'est plus valable. Il faut donc songer à isoler les cellules barrières puits au fur et à mesure que l'on s'approche du centre de la structure par un épaissement progressif des barrières.

#### 4.1.2.2.2 Réalisation d'un filtre en énergie

Le spectre de transmission de la figure 4.13 a été calculé pour la structure super-réseau de largeur de barrière 15, 30, 45, 60, 45, 30, 15 Å avec des largeurs de puits de 30 Å. Le découplage progressif des puits de potentiel est réalisé en choisissant une série arithmétique de raison 15 Å. On obtient alors une bande plate unitaire sur la gamme d'énergie 143 meV 147 meV. Cette fenêtre de transmission est très réduite à cause de la forte épaisseur de barrière centrale qui détermine la bande passante de la structure. Ceci montre que le caractère progressif des largeurs de barrières n'est pas tout et qu'il faut veiller à conserver une interdépendance entre les puits.

Si par contre on choisit une largeur de barrière extérieure de 8 Å qui correspond à trois monocouches atomiques de GaAlAs et une barrière centrale de 32 Å on obtient un superréseau présentant ~~4~~<sup>13</sup> barrières et 12 puits. La progression arithmétique est alors de 8 Å [8]. La largeur de la fenêtre de transmission unitaire est de 31 meV (figure 4.14) si on suppose que les limites sont obtenues pour des transmissions égales à 0.5. La seconde minibande ~~(figure 4.14)~~ est rejetée à des énergies supérieures aux hauteurs de barrière. Si on trace les fonctions d'onde correspondant aux énergies situées au milieu dans la mini bande tout se passe comme si on avait affaire à une série de double puits couplés dans lequel la fonction d'onde est équirepartie. <sup>figure 4.15</sup> On observe ensuite leur délocalisation progressive au fur et à mesure que l'on s'approche des bords de la minibande. Si on veut maintenant améliorer le taux de rejection de ce filtre en énergie il faut augmen-



**Figure 4. 16 :** Evolution du spectre de transmission en fonction du nombre de barrières dans le cas d'un superréseau à bande plate.

ter le nombre de cellules barrières puits. La figure 4.16 montre une comparaison des spectres de transmission pour des structures dont les largeurs de barrières respectent la séquence exposée précédemment. Le contraste entre la fenêtre de transmission unitaire et les transmissions hors résonance est effectivement accru lorsque l'on multiplie le nombre de cellules barrière puits. Ceci se fait cependant au détriment de la largeur de la bande passante puisque l'on introduit des barrières de plus en plus épaisses.

#### 4.1.2.2.3 Etude sous champ électrique

La figure 4.17 montre l'évolution du spectre de transmission en fonction du champ électrique appliqué à la structure superréseau avec  $L_B = 8, 16, 24, 32, 24, 16, 8 \text{ \AA}$  et  $L_W = 30 \text{ \AA}$ . A champ électrique croissant, on observe la destruction progressive de la minibande, puisque l'abaissement des barrières de potentiel modifie le couplage interpuits. A  $40 \text{ kV/cm}$  on n'obtient plus qu'un pic de transmission de largeur à mi-hauteur égal à  $15 \text{ meV}$ . Le décalage du maximum de transmission vers les basses énergies au fur et à mesure que le champ électrique augmente est typique du comportement des hétérostructures sous polarisation. A  $100 \text{ kV/cm}$  la courbe de transmission s'apparente à celle d'une double barrière avec une largeur de pic de  $0.17 \text{ meV}$ . Si on trace la fonction d'onde correspondant au maximum de transmission lorsque les valeurs de champ électrique sont respectivement de  $40 \text{ kV/cm}$  et  $100 \text{ kV/cm}$ , on peut noter la localisation progressive des électrons dans le troisième puits adjacent à la barrière centrale de  $32 \text{ \AA}$  (figure 18). Deux régimes de conduction différents seront donc mis en évidence dans le calcul du courant exposé au paragraphe suivant. Le premier sera caractéristique de l'existence d'une minibande et le deuxième sera relatif à des niveaux discrets.

On peut se faire une idée des valeurs de champ électrique nécessaires pour passer d'un régime de conduction par minibande à un régime de localisation en comparant l'énergie gagnée par les électrons grâce au champ électrique à la largeur de la fenêtre de transmission. L'extension spatiale de la fonction d'onde en fonction du champ électrique s'établit sur une région de largeur  $\Delta/qF$  où  $\Delta$  est la largeur de la fenêtre de transmission [9]. Avec une valeur de minibande  $35 \text{ meV}$  et un champ électrique  $F$  égal à  $100 \text{ kV/cm}^1$  on vérifie bien qu'à de telles valeurs la fonction d'onde entièrement localisée dans le troisième puits de potentiel s'étend uniquement sur  $30 \text{ \AA}$ .

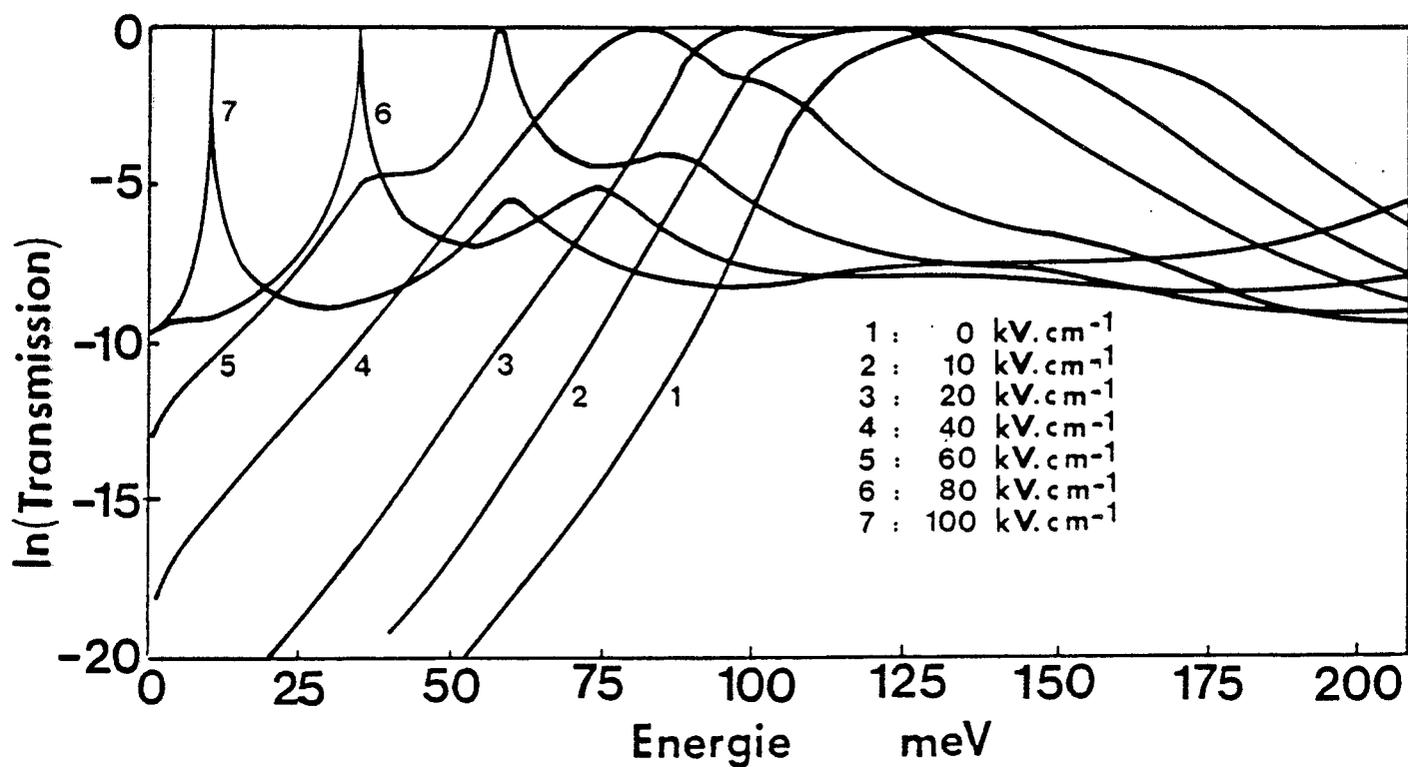


Figure 4. 17 : Variation du spectre de transmission en fonction du champ électrique appliqué sur le superréseau à bande plate.

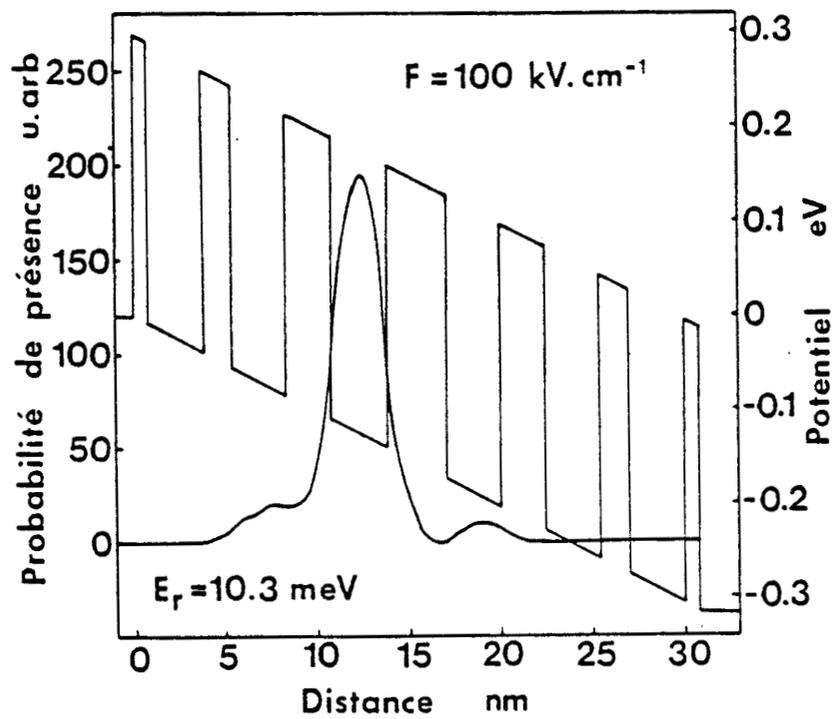
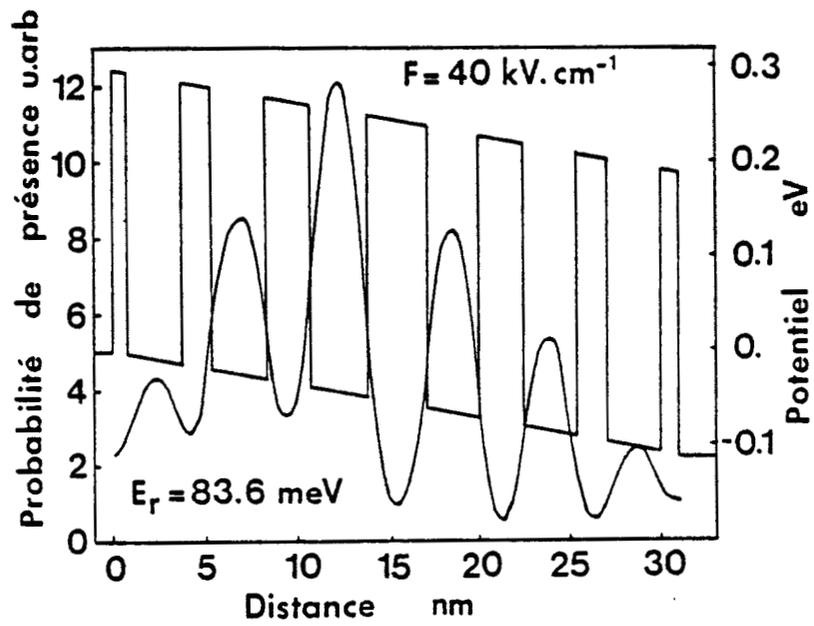


Figure 4.18 : Localisation de la fonction d'onde sous l'effet du champ électrique.

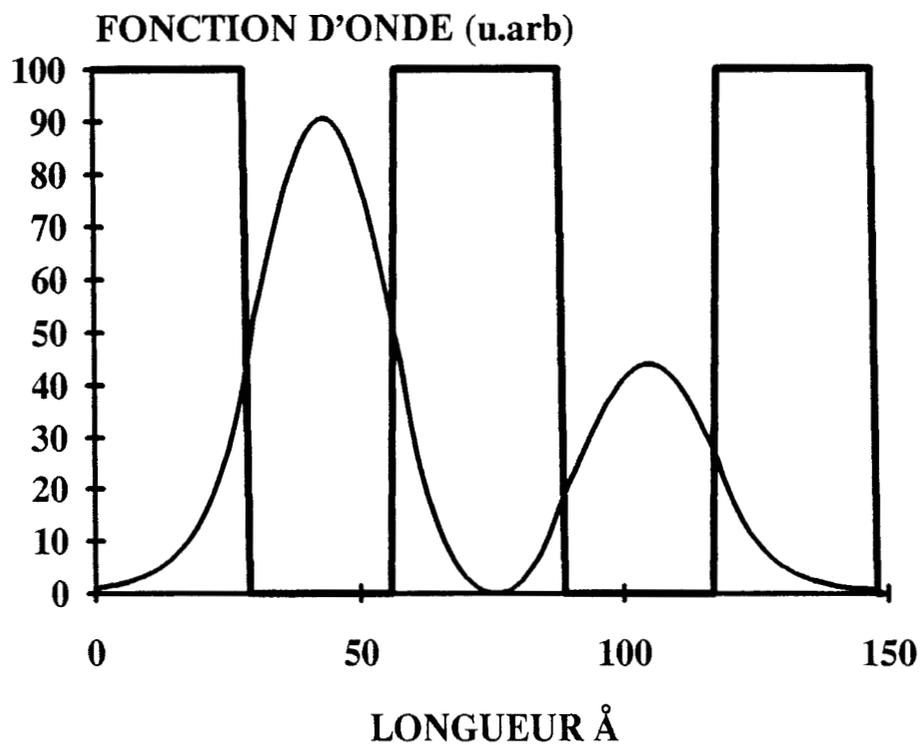
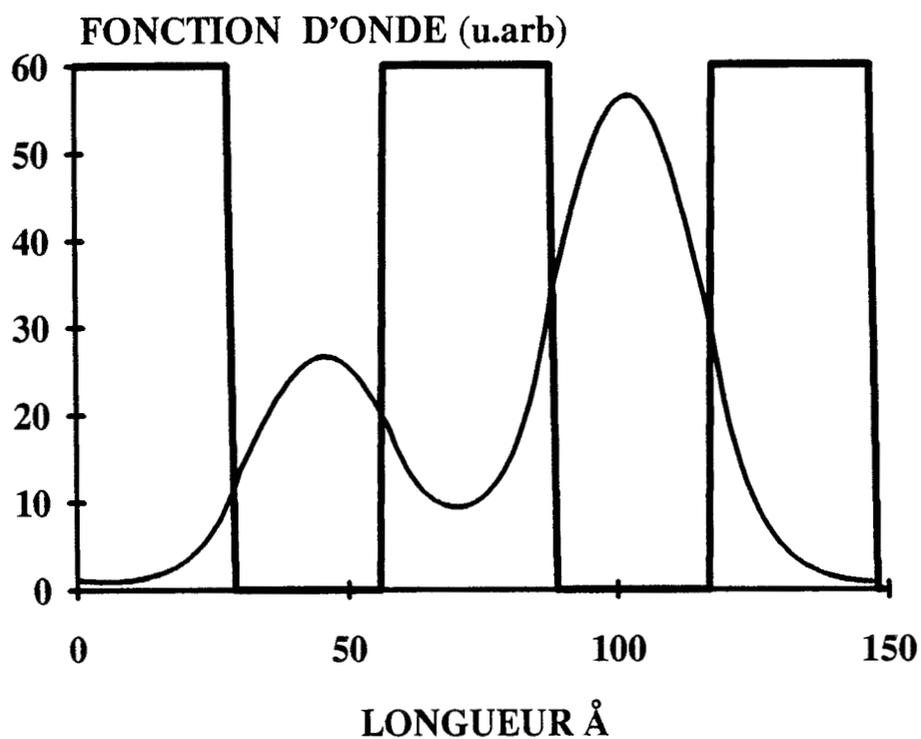


Figure 4.19 : localisation de la fonction d'onde dans la structure double puits lorsque  $L_{w1} = 28 \text{ \AA}$ , et  $L_{w2} = 30 \text{ \AA}$  et  $L_b = 30 \text{ \AA}$   
 a) fonction d'onde correspondant à  $\varepsilon_r = 137 \text{ meV}$   
 b) fonction d'onde correspondant à  $\varepsilon_r = 164 \text{ meV}$ .

#### 4.1.2.2.4 Analogies électriques

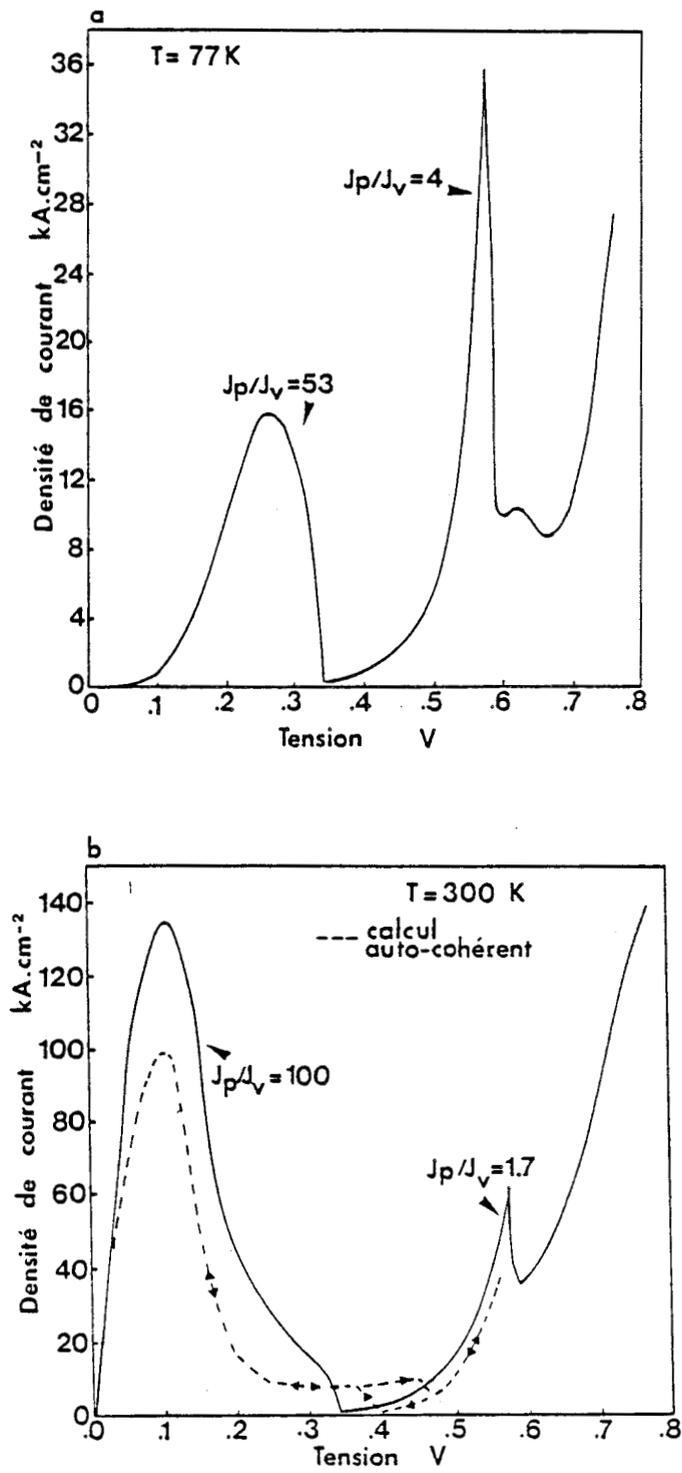
Une analogie entre les superréseaux et les filtres électriques s'impose de toute évidence. Par opposition aux filtres présentant un phénomène d'ondulation type filtre de Tchebicheff, on trouve dans la littérature [5] la proposition de filtre "Maximally flat" qui par une pondération des éléments réactifs de chaque cellule élémentaire permet d'obtenir une courbe de réponse plate.

Cette analogie très fructueuse entre les structures électriques et les superréseaux a été déjà mise en évidence dans la littérature [10][11][12]. On peut citer en particulier l'analogie faite par Gaylor et Brennan entre les ondes associées aux électrons se propageant dans un semiconducteur et les ondes optiques électromagnétiques dans les diélectriques. Le passage du filtre optiques au filtre à semiconducteurs se fait à partir des indices de réfraction  $n$  des différents diélectriques utilisés. La configuration du superréseau résultant diffère de celle du superréseau exposé au paragraphe précédent par deux points essentiels. Les largeurs de puits et les hauteurs de barrière ne sont pas égales et l'énergie des électrons incidents considérés est supérieure à la hauteur des barrières. La dispersion des niveaux quali-liés dans les puits n'est donc pas exploitée et la bande de transmission unitaire est située au-dessus des barrières. En transposant l'énergie cinétique  $E-V$  en terme de longueur on obtient ainsi des valeurs raisonnables de 100 Å. Notons finalement que la bande passante des filtres ainsi obtenus est faible de l'ordre de 3 meV.

## 4.2 Vers une approche réaliste

### 4.2.1 Elargissement collisionnel

Les structures nouvelles proposées n'ont de signification que si elles sont rapidement tronquées et si les minibandes obtenues sont relativement larges. L'approche théorique développée précédemment repose sur une description purement cohérente des phénomènes de transport alors qu'en pratique il est certain que des mécanismes de diffusion peuvent intervenir. D'après l'analyse phénoménologique du chapitre 3, chaque pic de transmission devrait alors présenter un élargissement collisionnel et perdre son caractère sélectif. Si on définit  $v_{max}$  comme étant la vitesse de groupe maximale que peuvent acquérir les porteurs à l'intérieur de la minibande, on peut lui affecter l'expression :



**Figure 4.20 :** Caractéristiques courant-tension théoriques de la structure à fenêtre de transmission plate

- a)  $T = 77 \text{ K}$
- b)  $T = 300 \text{ K}$ .

$$v_{max} = \frac{\Delta d}{\hbar}$$

avec  $\Delta$  la demi largeur de la minibande,  $d$  la période du superréseau [13]. En utilisant pour le temps de libre parcours moyen la valeur  $10^{-13}s$  calculée au chapitre 3 on obtient une longueur de cohérence  $\xi = v_{max}C$  de l'ordre de 400 Å pour une période de 60 Å.

On peut noter par ailleurs que la réalisation pratique d'une structure superréseau exige une maîtrise de l'épitaxie à l'échelle de la monocouche atomique. Si on reprend le cas de la triple barrière avec  $L_B = 30$  Å,  $L_W = 30$  Å et que l'on fait varier une largeur de puits de 2 Å il se crée une localisation de la fonction d'onde qui n'est plus équirépartie dans les deux puits de potentiel. La figure 4.19 montre les fonctions d'onde associée à chaque pic de transmission. On observe une localisation de la fonction d'onde correspondant au premier pic de transmission à 137 meV, dans le puits le plus large de 30 Å. Pour la fonction d'onde associée au deuxième pic à 164 meV le comportement est inverse. Si on considère une structure plus étendue présentant théoriquement une minibande on peut donc envisager sa destruction même en l'absence de polarisation, si les largeurs de barrières ou de puits varient d'une monocouche atomique.

### 4.3 Etude théorique de la conduction dans un superréseau présentant une minibande

L'étude théorique de la conduction dans un superréseau pose avant tout le problème de l'uniformité du champ électrique. Nous venons de voir en effet que la fonction d'onde sous l'action d'une tension externe tend à se localiser. Il en résulte que la densité de porteurs libres présente des points d'accumulation. Nous allons d'abord négliger ces phénomènes de charge d'espace (RCE) en nous attachant plutôt à étudier les variations de la conduction en fonction de la température. Dans un second temps nous tenons compte de ces effets de RCE qui, tout en n'invalidant pas les conclusions précédentes tendent à modifier les ordres de grandeur des valeurs de courant mises en jeu. Les caractéristiques I-V théoriques obtenues à 77 K et à 300 K en négligeant la réaction de charge d'espace sont représentées sur les figures 4.20a et 4.20b en traits continus. Le niveau de Fermi a été choisi égal à 50 meV, ce qui correspond typiquement à un dopage de  $10^{18}cm^{-3}$  pour un émetteur de GaAs. A 300 K la densité de courant pic est importante et vaut 140 kA/cm<sup>2</sup>. Ceci montre l'utilité des structures de type super-

réseau pour des applications très haute fréquence où la densité de courant s'avère être un paramètre clé.

La tension pic de 0,1 V correspond, à un champ électrique uniforme de 32 kV/cm. Cette valeur est proche de la valeur de champ à laquelle la minibande disparaît. On obtient ensuite un effet de résistance différentielle négative très prononcé avec un contraste en courant de 100:1 sur une gamme de tension située entre 0,1 V et 0,35 V. Cette plage de tension apparaît relativement étendue comparativement au cas d'une structure double barrière où la transition entre état de forte et de faible conduction est abrupte. En fait, il semble que ce soit l'un des points forts des structures superréseaux et nous allons voir dans ce qui suit que cela se vérifie pour des structures triple barrière dans lesquelles le couplage interpuits est important.

Vers 0,55 V on observe un second pic de courant attribuable au large pic de transmission, obtenu pour un champ de 100 kV/cm. Le contraste en courant n'est alors plus que de 1,7:1.

A 77 K l'importance relative des densités de courant pic est inverse. Ces différences entre les caractéristiques I-V à 300 K et à 77 K s'expliquent à partir de la distribution de la fonction d'alimentation en fonction de la température. A la température ambiante, l'étalement de la fonction d'alimentation permet un fort recouvrement de celle-ci avec la minibande aux basses tensions. A la température de l'azote liquide des tensions importantes sont nécessaires pour que les porteurs puissent atteindre les états résonnants. Comme on assiste à une diminution progressive de la minibande au fur et à mesure que la tension augmente, le premier courant pic à 77 K est inférieur au premier courant pic à 300 K.

En ce qui concerne le second pic de courant les phénomènes de transport sont identiques à ceux rencontrés dans le cas de la double barrière. Le contraste en courant augmente lorsque la température diminue tandis que la valeur du courant pic décroît.

Pour le traitement de la zone de charge d'espace il convient d'évaluer la densité locale de charge en tout point de la structure. La distribution de charge suit l'évolution de la probabilité de présence pour chaque énergie  $E_z$  donnée. Il reste à se donner un facteur de normalisation par l'intermédiaire de la densité de courant traversant la

structure .

Chaque élément d'énergie  $dE_z$  contribue au courant total par un élément de courant  $dJ(E_z)$  :

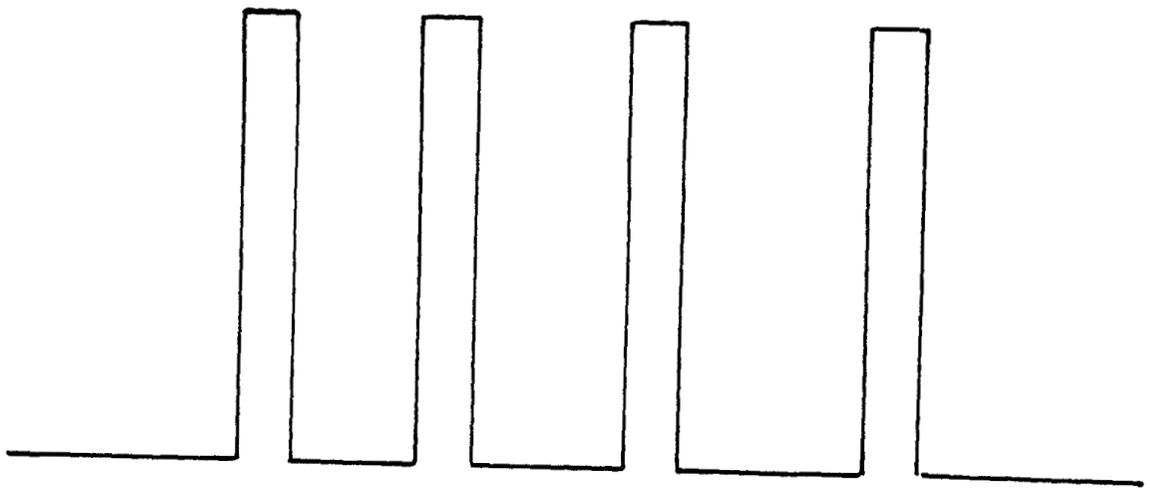
$$dJ(E_z) = \frac{qm^*k_B\theta}{2\pi^2\hbar^3}T(E_z)F(E_z, \theta, V_c)dE_z$$

Concrètement la distribution de charge  $dn$  est donnée par la formule

$$dn(z, E_z, V_C) = \frac{dJ(E_z)}{qv(E_z, v_c)}|\varphi(z, e_z)|^2$$

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

A partir de cette densité de charge et en résolvant l'équation de Poisson on obtient un nouveau potentiel déterminé par la charge mobile. Il suffit alors de la modifier continuellement de façon à ce que la tension totale soit conservée [14]. Les courbures de bande ainsi obtenues servent à une réactualisation du potentiel intervenant dans l'équation de Schrödinger afin de déterminer, outre  $n(z)$ , la transmission ainsi que la densité de courant. Cette procédure auto-cohérente entre les équations de Schrödinger et de Poisson est répétée jusqu'à ce que l'on obtienne la convergence sur la valeur finale du courant. Sur les figures précédentes nous avons représenté en traits pointillés les résultats d'un calcul auto-cohérent. On note une décroissance marquée du contraste en courant. Le rapport  $J_{pic}/J_{vallée}$  tombe à 12:1 principalement à cause d'une augmentation très importante du courant vallée. On observe par ailleurs que la prise en compte de la réaction de charge d'espace conduit à un léger phénomène de bistabilité vers 0,4 V. Ceci peut se comprendre par le stockage des porteurs à tension élevée lorsque le système est hors résonance qui conduit à des différences de tension suivant la direction de balayage. Excepté ces différences, les tendances générales sont conservées pour les variations du courant en fonction de la tension. Une densité de courant pic de 100 kA/cm<sup>2</sup> est obtenue pour le régime de minibande.



**Figure 4.21 :** Structure superréseau à largeur de puits variable

$$L_b = 14 \text{ \AA}$$

$$L_{W1} = 50 \text{ \AA}; L_{W2} = 40 \text{ \AA}; L_{W3} = 35 \text{ \AA}$$

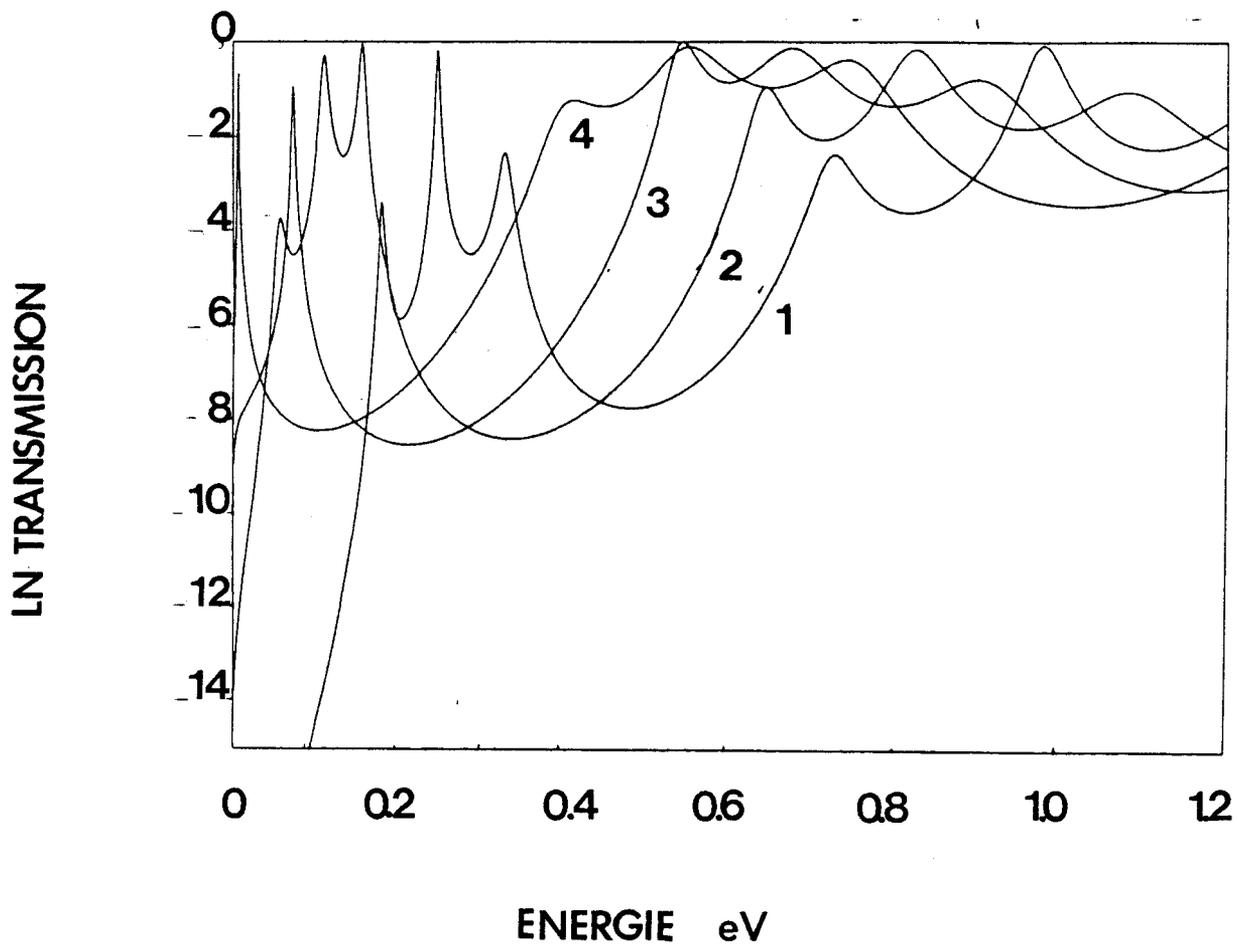


Figure 4.22 : Spectre de transmission en fonction de la tension appliquée

- 1)  $V = 0 \text{ V}$
- 2)  $V = 0,27 \text{ V}$
- 3)  $V = 0,546 \text{ V}$
- 4)  $V = 0,818 \text{ V}$

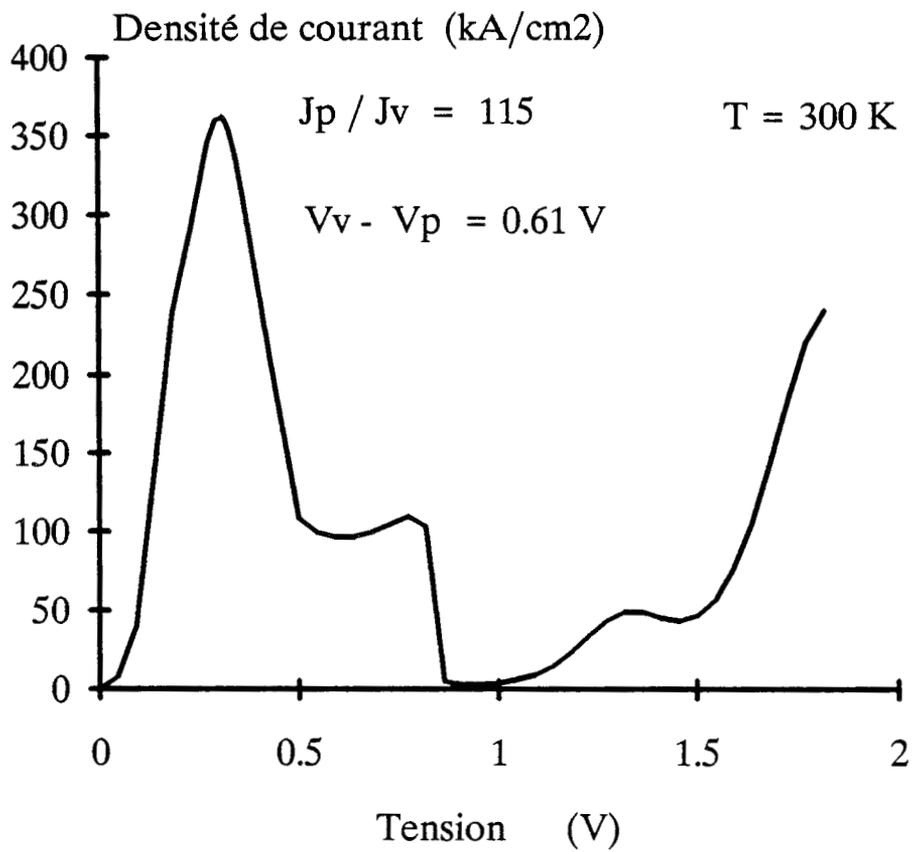


Figure 4.23: Caractéristique I-V calculée à 300 K.

#### 4.4 Structure à largeur de puits variable

Les études précédentes ont permis de dégager des tendances générales pour les tensions de seuil, les valeurs de densité de courant ainsi que pour la plage d'existence de la résistance différentielle négative. La structure présentée ici ne comporte que trois puits. On assure un couplage interpuits important qui impose l'utilisation de barrières de faible épaisseur. On choisit donc comme matériau de barrière l'AlAs avec des largeurs de l'ordre de 5 couches monoatomiques. La structure est détaillée sur la figure 4.21. Pour tenter de préserver la cohérence du transport nous utilisons le  $Ga_{0,47}In_{,53}As$  pour le matériau de puits.

En ce qui concerne le choix des dimensions géométriques il apparaît que si l'on conserve une largeur de puits constante, il y a levée de dégénérescence des états discrets et l'application d'un champ électrique conduit rapidement à la localisation des électrons.

L'idée consiste ici à réaliser une diminution progressive des largeurs de puits de l'émetteur vers le collecteur. Dans ce cas c'est l'application de la tension qui va rapprocher les niveaux quantiques et créer en quelque sorte une fenêtre de transmission. La figure 4.22 donne le spectre de transmission à différentes tensions comprises entre 0 et 1,2 V. Ce calcul est réalisé avec le modèle à une bande. A l'équilibre on peut noter trois pics situés entre 0,18 eV et 0,38 eV. Au fur et à mesure que l'on applique la tension les pics se rapprochent. A 0,54 V un seul pic est apparent autour de 100 meV. Pour une tension de 0,8 V le pic de transmission est proche du bas de bande de conduction de l'émetteur. La caractéristique I-V calculée à 300 K pour ce type de structure est donné sur la figure 4.23. Le fait marquant est l'existence d'une résistance différentielle négative sur une plage de tension de l'ordre de 0,7 V. Les densités de courant pic compte tenu de la très grande transparence de barrière est de 350 kA/cm<sup>2</sup> pour une tension de 0,27 V. Le contraste en courant calculé est de 110. Les caractéristiques électriques présentées théoriquement par cette structure sont extrêmement favorables à des applications analogiques en particulier en oscillateur. En première approximation en effet la puissance de sortie est directement reliée à l'excursion de tension correspondant à l'oscillation et à la densité de courant traversant la structure.

GaAs	$2 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$	5000 Å
GaAs	$2 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$	500 Å
GaAs	nid	25 Å
AlAs	nid	8,5 Å
GaAs	nid	8,5 Å
AlAs	nid	8,5 Å
GaAs	nid	8,5 Å
AlAs	nid	8,5 Å
GaAs	nid	50 Å
AlAs	nid	8,5 Å
GaAs	nid	8,5 Å
AlAs	nid	8,5 Å
GaAs	nid	8,5 Å
AlAs	nid	8,5 Å
GaAs	nid	25 Å
GaAs	$2 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3} \text{ Si}$	500 Å
GaAs	$2 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3} \text{ Si}$	5000 Å
Substrat $n^+$ GaAs		

Double Barrière

Figure 4.24: Structure double barrière hétérogène.

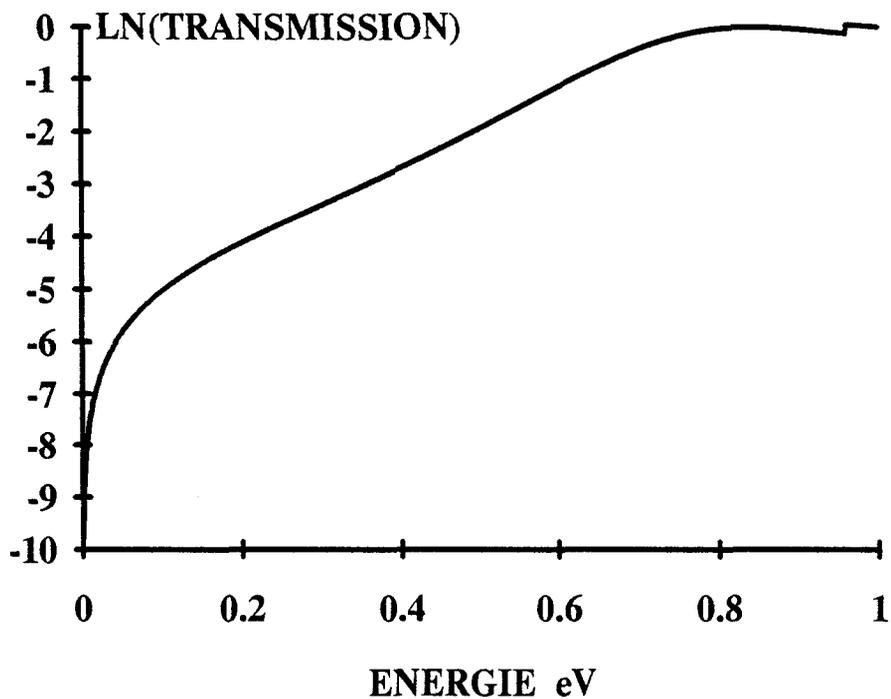


Figure 4.25 : Spectre de transmission de la barrière superréseau  $L_B = L_W = 8 \text{ \AA}$ .

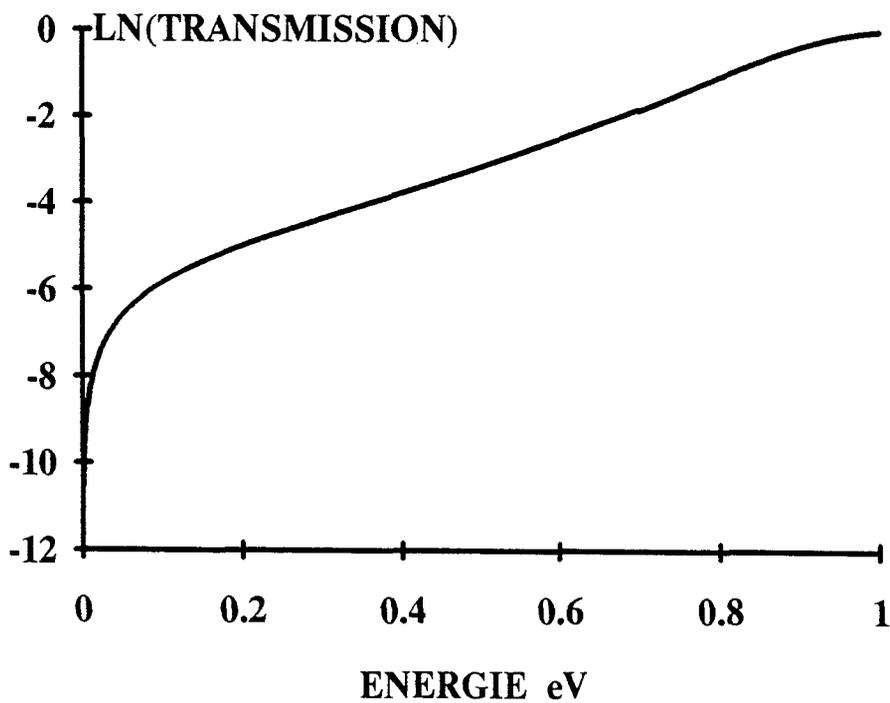


Figure 4.26 : Spectre de transmission d'une barrière homogène de GaAlAs.  
 $\Delta E_c = 700 \text{ meV}$ .  $L_b = 42 \text{ \AA}$ .

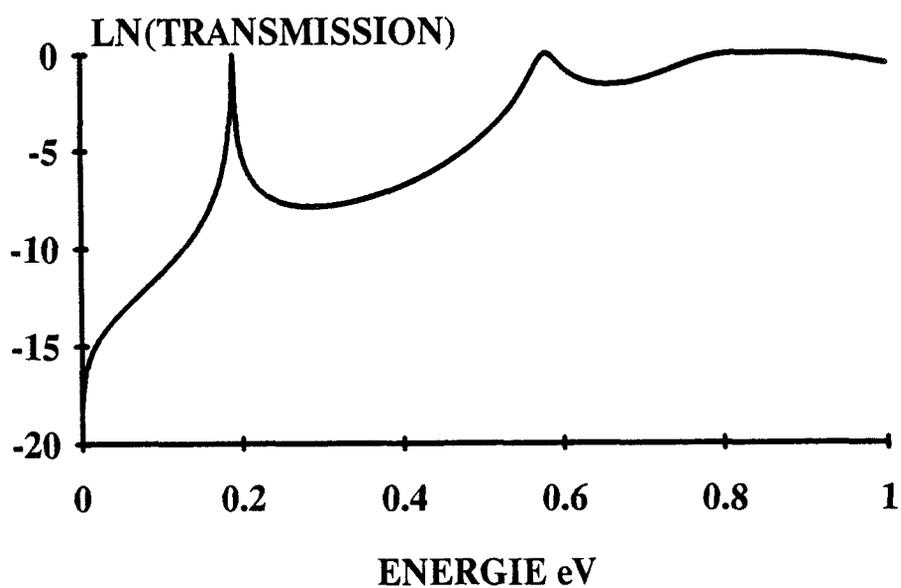


Figure 4.27 : Spectre de transmission d'une double barrière hétérogène à superréseau

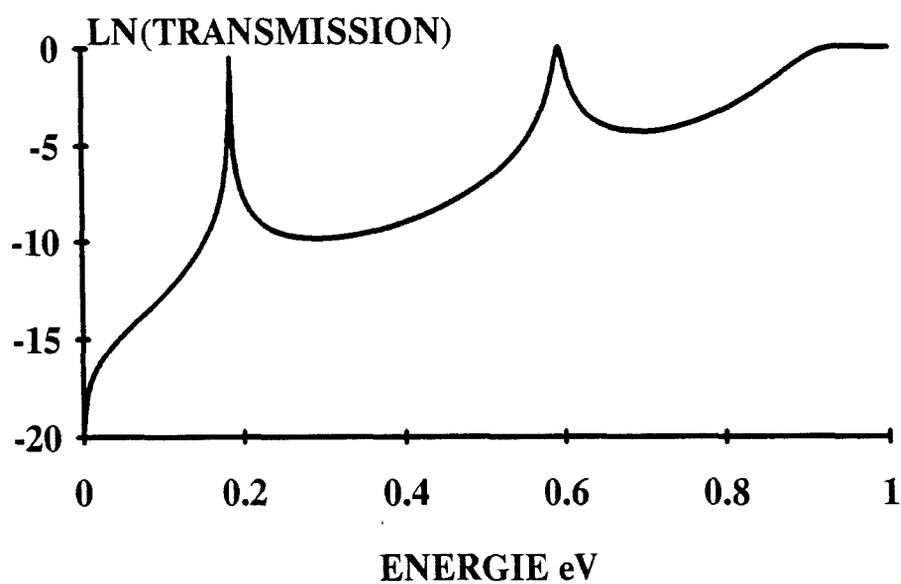


Figure 4.28 : Spectre de transmission d'une double barrière homogène de GaAlAs :  
 $\Delta E_c = 700 \text{ meV}$   $L_B = 42 \text{ \AA}$ .

## 4.5 Vérification expérimentale sur des barrières super-réseaux

La mise en oeuvre de structures incorporant des superréseaux avec un grand nombre de motifs reste très marginale à l'heure actuelle.

Nous avons vu les difficultés présentées par leur réalisation pratique ainsi que les problèmes théoriques posés par l'accumulation de charges qui conduit à une non uniformité de champ électrique. On tend donc de plus en plus à utiliser des structures de très courtes périodes limitées à quelques alternances de matériaux à grande et à petite bande interdite. C'est le cas des structures à tunnel résonnant dont les barrières sont formées par un superréseau. Nous allons dans ce paragraphe confronter les caractéristiques I-V théorique et expérimentale d'une structure de ce type. Celle-ci est schématisée sur la figure 4.24. Elle a été réalisée au Laboratoire Centrale de Recherche Thomson. C'est en fait une structure double barrière consistant en un puits de 50 Å encadré par deux barrières hétérogènes. Chaque barrière est constituée d'une alternance de matériaux AlAs et GaAs ayant une épaisseur de 3 monocouches atomiques. Une telle configuration de barrière a été élaborée pour diminuer sensiblement les rugosités d'interfaces pouvant survenir lors de l'épitaxie du matériau GaAs sur le matériau GaAlAs. On peut en effet penser que les transitions entre les matériaux binaires sont meilleures que celles mettant en jeu un matériau ternaire. Une bonne qualité des fronts de croissance permet d'obtenir de bonnes caractéristiques statiques I-V en direct comme en inverse.

Les zones d'accès sont quant à elles formées d'un émetteur dopé à  $2.10^{18} \text{cm}^{-3}$  suivi d'un espaceur de 500 Å dopé à  $2.10^{16} \text{cm}^{-3}$ .

Avant de considérer la structure dans son ensemble nous allons nous intéresser au spectre de transmission de la simple barrière superréseau. Pour des problèmes de discrétisation numérique les calculs ont été menés avec des pas entiers de 1 Å en considérant que chaque couche élémentaire a une épaisseur de 8 Å. La courbe de transmission obtenue pour  $L_b = L_W = 8 \text{ Å}$  est représenté sur la figure 4.25. Son allure générale est typique d'une simple barrière. Ce n'est que vers des énergies proches du haut de la barrière prise égale à 0,960 eV que l'on peut détecter une plage de résonance unitaire. Les niveaux liés avec des temps de vie extrêmement courts sont rejetés au delà de 0,7 eV. La barrière superréseau AlAs/GaAs/AlAs/GaAs/AlAs joue donc pleinement

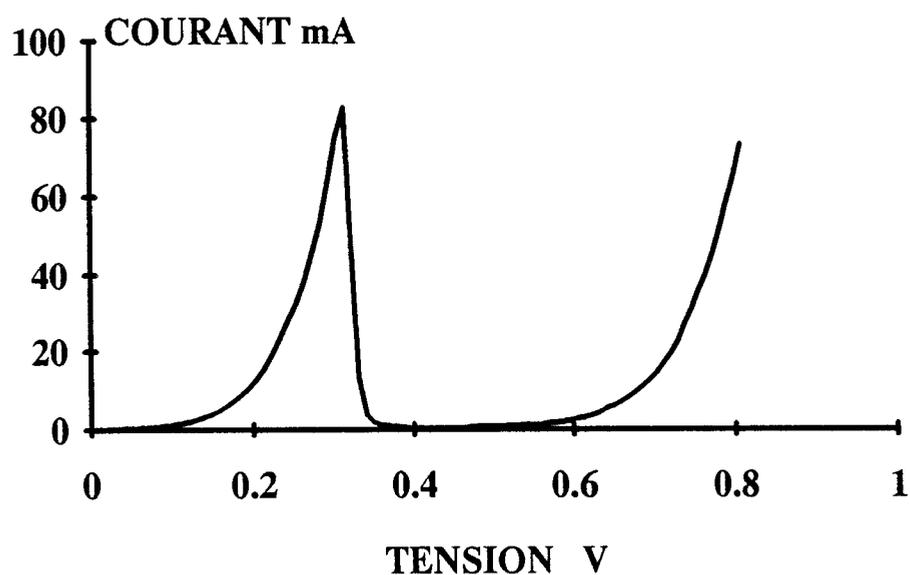


Figure 4.29 : Caractéristique I-V de la double barrière superréseau calculée à 300 K.

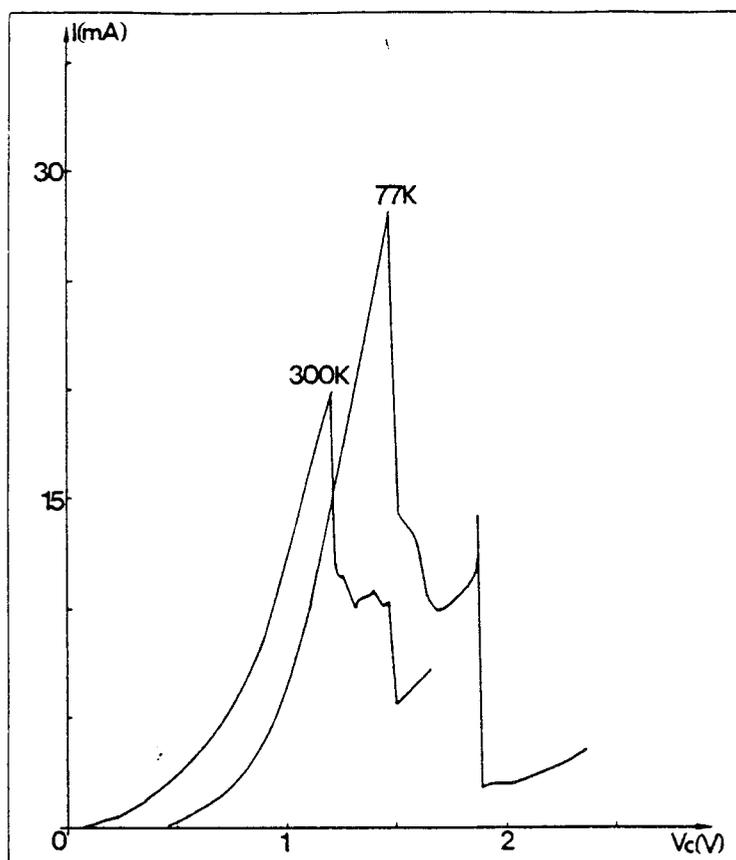


Figure 4.30 : Caractéristiques I-V de la double barrière superréseau mesurées à 300 K et à 77 K

son rôle de barrière de confinement.

Pour vérifier l'équivalence avec une barrière de potentiel homogène nous avons reporté sur la figure 4.26 le spectre de transmission d'une simple barrière de GaAlAs de longueur égale à 42 Å. Nous avons choisi une discontinuité de bande de conduction de 700 meV qui correspond à la valeur à laquelle s'établit une transmission unitaire dans le cas de la barrière superréseau. Les ordres de grandeurs des transmissions sont tout à fait respectés si on compare les figure 4.25 et 4.26.

En considérant maintenant la structure barrière puits on obtient les spectres de transmission donnés sur les figures 4.27 et 4.28. Ceux-ci correspondent aux cas où les barrières de confinement sont soit homogènes soit hétérogènes. La largeur de puits est prise égale à 50 Å. Les autres dimensions ainsi que les discontinuités ont été choisies comme précédemment. Les calculs ont été effectués dans le cadre du modèle à deux bandes. On peut noter une bonne concordance entre les niveaux quasi-liés présentés par les deux structures. Deux pics de transmission apparaissent autour de 190 meV et 580 meV. L'équivalence des potentiels de confinement est montrée une fois de plus. La structure superréseau est néanmoins légèrement plus transparente. Le calcul du courant pour la double barrière superréseau avec la prise en compte de l'espaceur est représentée sur la figure 4.29. On obtient théoriquement un courant pic de l'ordre de 80 mA si on suppose des échantillons de  $40 \times 40 \mu m^2$  de section. Les caractéristiques I-V mesurées à 77 K et à 300 K pour un échantillon de même section sont données sur la figure 4.30. Les contrastes en courant sont excellents puisqu'ils sont de 3,5:1 à l'ambiante et de 16 à la température de l'azote liquide. La valeur du courant pic est comprise entre 20 et 30 mA se trouve donc dans les ordres de grandeur calculés. Par contre les tensions de seuil expérimentales mises en jeu sont beaucoup plus élevées que celles obtenues par le calcul. Ceci est dû aux chutes de potentiel résultant des résistances série parasite, et de la formation de la zone de déplétion en aval de la structure double barrière. Des mesures de la résistivité de contact effectuées à l'analyseur de réseau ont montré que celle-ci est de l'ordre de  $5.10^{-5} cm^2$ . Les décalages en tension peuvent atteindre alors une centaine de millivolts.

En conclusion ces structures à barrière superréseau permettent de réaliser des composants de très bonne qualité privilégiant le contraste en courant. Un point non évoqué auparavant concerne le fait que l'on puisse s'affranchir grâce à ce type de struc-

ture des problèmes de mélange entre vallée  $\Gamma$  et  $X$ . C'est un problème d'actualité pour les structures simple barrière où l'on recherche un effet varactor. Il faut minimiser dans ce cas la conduction par effet tunnel qui se traduit par un terme de fuite au niveau de la capacité. Une solution consiste à épaissir fortement la barrière avec, en contre partie, l'apparition du couplage entre les vallées  $\Gamma$  et  $X$  si le système de matériaux  $Ga_{1-x}Al_xAs/GaAs$  avec  $x$  supérieur à 0,4 est retenu. Pour éviter cet inconvénient on peut substituer à la barrière homogène une alternance de barrière et de puits de potentiel fortement couplés.

## 4.6 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons tenté de dégager toute la richesse d'applications des superréseaux finis. Nous avons pu voir sur trois exemples qu'il est possible d'optimiser les paramètres de conduction tels que la densité de courant pic et la plage d'existence de la résistance différentielle négative. L'emploi de structures alternées incorporant un grand nombre de barrières et de puits nécessite au préalable un choix judicieux des largeurs de motifs.

Dans un superréseau conventionnel où les largeurs de barrières sont identiques, les probabilités de présence se superposent sur une fonction enveloppe résultant des interférences aux limites et la fenêtre de transmission présente des pics.

Nous avons montré qu'en modulant le couplage inter-puits sur une structure à multiples discontinuités, on peut rééquilibrer la fonction d'onde et obtenir ainsi une bande passante relativement plate comparativement à celle présentée par des superréseaux de largeur de barrières identique.

Par cette optimisation on peut tirer parti de la similitude entre les filtres électriques et les superréseaux à semiconducteurs. Il faut cependant garder à l'esprit le fait que la construction du motif se fait à partir de multiples de la monocouche atomique (2,8 Å typiquement) et qu'il est utopique de concevoir des largeurs de barrières dont les dimensions sont inférieures à 3 monocouches. Le succès de la réalisation pratique de superréseaux est par ailleurs très largement tributaire de la maîtrise de l'épitaxie. Le second exemple de superréseau que nous avons étudié souffre moins de ces limitations dans la mesure où nous avons restreint volontairement la structure à trois motifs. C'est principalement la plage d'existence de la résistance différentielle négative que l'on a

cherché à optimiser. Les résultats montrent les fortes potentialités des structures triple puits de largeur variable pour la réalisation de multiplieur et d'oscillateur.

Nous avons vu enfin qu'il était tout à fait possible de concevoir des barrières de confinement semi transparentes par le biais de structures alernées de courte période. En restreignant suffisamment la largeur des puits de ces barrières à superréseaux les états propres sont en effet rejetés vers les hautes énergies.

# Bibliographie

- [1] M.A. REED, W.R. FRENSLEY, R.J. MATYI, J.N. RANDALL,  
A.C. SEABAUGH  
Applied physics Letters 54, (11), March 1990
- [2] R.A. DAVIES M.J. KELLY, L.M. KERR  
Electronics Letters, vol 22, n ° 3, 30 th january 1986
- [3] J.F. PALMIER  
Resonant Tunneling in semiconductors  
Physics and Applications  
Edited by L.L. Chang, p. 361
- [4] ????????????????????
- [5] G.L. MATTHAEI, L. YOUNG, E.M.T.JONES  
Microwave Filters, Impedance Matching Networks and coupling structures  
Mc Grow-Hill Book company
- [6] A.N. KHONDER, M. REZWAN KHAN, A.F.M. ANWAR  
Journal of applied Physics, 63, (10), 15 may 1988
- [7] G. BASTARD  
Physical Review, vol 24 n ° 10 (1981), p. 5693
- [8] O. VANBESIEN, H. LEROUX, D. LIPPENS  
Solid state Electronics, 1992
- [9] F. BELTRAN. F. CAPASSO, D.L. SIVCO, A.L. HUTCHINSON, S.G. CHU,  
A.Y. CHO  
Physical review letters, vol 64, (1990) p. 3167

- [10] D.D. COAN, E. SORAR  
Applied physics letters 56, (18), 30 april 1990, p 1790
- [11] T.K. GAYLORD, K.F. BRENNAN  
Applied physics letters 53 (21), 21 november 1988 p 2047
- [12] T.K. GAYLORD, K.F. BRENNAN  
Journal of Applied Physics, 655, (2), 15 january 1989
- [13] F. CAPASSO, K. MOHAMMED, A.Y. CHO  
IEEE Journal of quantum electronics, vol QU22, n ° 9 septembre 1986
- [14] L. DE SAINT POL  
Thèse d'Electronique. Université de Lille I (1990)

# Table des matières

<b>5</b>	<b>Etude de l'effet tunnel dans les hétérostructures de type II</b>	<b>1</b>
5.1	Introduction . . . . .	1
5.1.1	Structure de bande des composés semiconducteurs III-V à bande interdite directe . . . . .	3
5.1.2	Simplification de la matrice de Kane . . . . .	4
5.1.2.1	Modèle à trois bandes . . . . .	4
5.1.2.2	Modèle à deux bandes . . . . .	5
5.1.3	Application du modèle à deux bandes au cas des hétérostructures	6
5.1.4	Calcul du coefficient de transmission d'une hétérostructures dans le cadre du modèle à deux bandes . . . . .	7
5.2	Intérêt du matériau InAs entrant dans la composition d'hétérostructures de type II . . . . .	8
5.3	Double barrière AlSb/InAs . . . . .	10
5.3.1	Utilisation du formalisme de Kane . . . . .	10
5.3.2	Etude la conduction . . . . .	11
5.4	Etude l'effet tunnel interbande dans les cas d'hétérostructures non dopées	13
5.4.1	Exemple de la simple barrière GaSb épitaxiée sur un matériau InAs	13
5.4.1.1	Mise en évidence de l'effet tunnel interbande . . . . .	13

## Chapitre 5

# Etude de l'effet tunnel dans les hétérostructures de type II

### 5.1 Introduction

Ce chapitre est consacré à l'étude de la conduction par effet tunnel à travers des hétérostructures de type II [1] dans lesquelles le glissement entre les bandes interdites peut conduire soit à une séparation spatiale entre les électrons et les trous, soit à une rupture de "gap". Celles-ci sont principalement réalisées dans les systèmes InAs/GaAsSb ou InAs/GaAlSb. L'introduction de ces hétérostructures vient du besoin de travailler avec un matériau possédant une bande interdite petite comme l'InAs. L'optoélectronique profite ainsi de transitions aux longueurs d'ondes élevées et la microélectronique de mobilités très importantes. L'utilisation conjointe du matériau InAs et des matériaux GaSb ou AlSb permet, par ailleurs, d'obtenir des discontinuités de bandes de conduction beaucoup plus grandes que celles obtenues dans le cas des hétérostructures  $GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs$ . En ce qui concerne la structure de bande électronique, on retrouve pour les antimoniures les mêmes difficultés que celles rencontrées pour les composés  $Ga_{1-x}Al_xAs$ . Le GaSb de gap direct présente une hiérarchie de vallée  $\Gamma, L$  et  $X$  assez comparable à celle du GaAs. Pour le système GaAlSb le passage en gap indirect, correspondant à un minimum de la bande de conduction en vallée  $X$ , est obtenu pour une concentration en Aluminium de 40 %. En dessous de cette valeur il se présente une situation de bande interdite pseudo-indirecte dans la mesure où les vallées  $L$  et  $X$  sont très proches en énergie. Ceci peut être l'une des raisons pour laquelle les études, publiées dans la littérature, sur ces matériaux relativement nouveaux, portent essentiellement sur des dispositifs ne mettant en jeu que les matériaux binaires GaSb,

AlSb épitaxiés sur un émetteur d'InAs.

Deux modes de transport peuvent intervenir dans les hétérostructures de type II suivant le positionnement relatif des bandes de conduction et de valence des différents matériaux. Si l'hétérostructure présente des bandes de conduction et de valence séparées en énergie, le passage des électrons ne se fait qu'à partir des états de la bande de conduction et l'effet tunnel est intrabande.

Par contre si la bande de valence d'un matériau constituant l'hétérostructure se positionne en regard de la bande de conduction d'un autre matériau on se trouve dans une situation de tunnel interbande. Les électrons bénéficient alors à la fois des états de valence et de conduction pour leur passage par effet tunnel. Le transport est alors similaire à celui rencontré dans les jonctions  $P^+N^+$ .

Ces homojonctions nécessitent des niveaux de dopage très élevés pour créer de fortes densités de population ainsi qu'une zone désertée d'épaisseur réduite. Les probabilités de passage par effet tunnel seront négligeables à ces seules conditions. L'utilisation d'hétérostructures de type II à rupture de bande interdite s'avère plus avantageuse qu'une homojonction  $P^+N^+$  à plusieurs égards. La largeur de barrière est modulable indépendamment du dopage des réservoirs d'électrons. La présence de niveaux quasi-liés dans la bande de valence va par ailleurs faciliter le passage par effet tunnel et donner lieu à un effet tunnel résonnant. On obtiendra ainsi de fortes densités de courant.

La modélisation du transport par effet tunnel à travers les hétérostructures de type II impose que l'on prenne en compte l'influence de la bande de valence. Nous commencerons donc par présenter le formalisme de Kane utilisé pour traiter la transmission de telles hétérostructures. Le mode de transport par effet tunnel intrabande sera étudié à travers la double barrière AlSb/InAs.

L'effet tunnel interbande sera, quant à lui, mis en évidence dans le cas du GaSb épitaxié sur InAs ainsi que dans le cas de la double barrière AlSb présentant un émetteur d'InAs et un puits GaSb. Ne disposant pas de résultats expérimentaux nous comparerons nos calculs de courant aux mesures publiées dans la littérature.

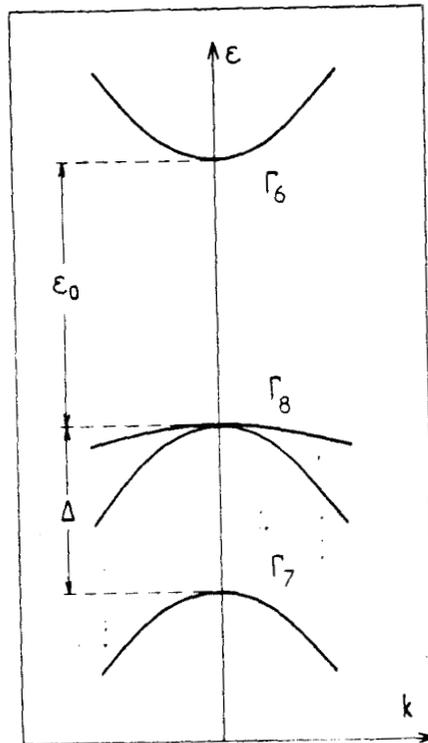


Figure 5.1 : Représentation schématique de la structure de bande des matériaux III-V.

	InP	InAs	InSb	GaP	GaAs	GaSb	AlAs	AlSb
$a(\text{Å})$	5.8687	6.0583	6.47937	5.45117	5.65325	6.09593	5.660	6.1355
$\epsilon_0$ (eV)	$\begin{cases} 1.4236 \\ 1.34 \end{cases}$	$\begin{cases} 0.418 \\ 0.354 \end{cases}$	$\begin{cases} 0.2352 \\ 0.180 \end{cases}$	$\begin{cases} 2.869 \leftrightarrow 2.885 \\ 2.780 \end{cases}$	$\begin{cases} 1.5192 \\ 1.420 \leftrightarrow 1.428 \end{cases}$	$\begin{cases} 0.8113 \leftrightarrow 0.8128 \\ 0.70 \end{cases}$	$\begin{cases} 3.13 \\ 2.95 \leftrightarrow 3.03 \end{cases}$	$\begin{cases} 2.32 (77\text{K}) \\ 2.219 \end{cases}$
$\Delta$ (eV)	$\begin{cases} 0.108 \\ 0.11 \end{cases}$	$\begin{cases} 0.38 \\ 0.371 \end{cases}$	$\begin{cases} 0.81 \\ 0.98 \end{cases}$	$\begin{cases} 0.32 \\ < 0.080 \end{cases}$	$\begin{cases} 0.341 \\ 0.340 \end{cases}$	$\{0.752 \leftrightarrow 0.756\}$	0.275	$0.65 \leftrightarrow 0.75 (T \sim 80\text{K})$
$\frac{m}{m_0} \Gamma_6$	$\begin{cases} 0.079 \\ 0.077 \end{cases}$	$\begin{cases} 0.023 \\ 0.027 \end{cases}$	$\begin{cases} 0.0139 \\ 0.013 \end{cases}$		$\begin{cases} 0.0665 \\ 0.067 - 0.069 \end{cases}$	$\{0.0405 \leftrightarrow 0.042\}$	0.124	
$\frac{m}{m_0} \Gamma_7$	-0.12	-0.026	$\{-(0.016 \leftrightarrow 0.021)\}$	-0.17	$\begin{cases} 0.082 \\ 0.068 \end{cases}$	$\begin{cases} 0.047 \leftrightarrow 0.052 \\ 0.044 \end{cases}$	-0.26	-0.11

Tableau 1 : Valeurs de bande interdite  $\epsilon_0$ , de couplage spin-orbite  $\Delta$ , ainsi que les masses d'électrons et de trous légers pour différents matériaux binaires.

	InP	InAs	InSb	GaAs	GaSb
$\varepsilon_0$ (eV)	1.4236	0.418	0.2352	1.5192	0.811
$\Delta$ (eV)	0.108	0.38	0.81	0.341	0.752
$m_{\Gamma_6}/m_0$	0.079	0.023	0.0139	0.0665	0.0405
$E_p$ (eV)	17	21.11	22.49	22.71	22.88

**Tableau 2 :** Valeur en eV de  $E_p \pm 2m_0P^2$  déduite de la valeur de la masse électronique pour différents matériaux binaires.

	$\langle iS^\dagger  $	$ \frac{3}{2}, \frac{1}{2}\rangle$	$ \frac{3}{2}, \frac{3}{2}\rangle$	$ \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\rangle$	$ iS^\downarrow\rangle$	$ \frac{3}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$	$ \frac{3}{2}, -\frac{3}{2}\rangle$	$ \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\rangle$
$\langle iS^\dagger  $	$\frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}$	$-\sqrt{\frac{2}{3}} P \hbar k_z$	$P \hbar k_+$	$\frac{1}{\sqrt{3}} P \hbar k_z$	0	$-\frac{1}{\sqrt{3}} P \hbar k_-$	0	$-\sqrt{\frac{2}{3}} P \hbar k_-$
$\langle \frac{3}{2}, \frac{1}{2}  $	$-\sqrt{\frac{2}{3}} P \hbar k_z$	$-\epsilon_0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}$	0	0	$\frac{P}{\sqrt{3}} \hbar k_-$	0	0	0
$\langle \frac{3}{2}, \frac{3}{2}  $	$P \hbar k_-$	0	$-\epsilon_0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}$	0	0	0	0	0
$\langle \frac{1}{2}, \frac{1}{2}  $	$\frac{1}{\sqrt{3}} P \hbar k_z$	0	0	$-\epsilon_0 - \Delta + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}$	$\sqrt{\frac{2}{3}} P \hbar k_-$	0	0	0
$\langle iS^\downarrow  $	0	$\frac{P}{\sqrt{3}} \hbar k_+$	0	$\sqrt{\frac{2}{3}} P \hbar k_+$	$\frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}$	$-\sqrt{\frac{2}{3}} P \hbar k_z$	$P \hbar k_-$	$\frac{1}{\sqrt{3}} P \hbar k_z$
$\langle \frac{3}{2}, -\frac{1}{2}  $	$-\frac{1}{\sqrt{3}} P \hbar k_+$	0	0	0	$-\sqrt{\frac{2}{3}} P \hbar k_z$	$-\epsilon_0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}$	0	0
$\langle \frac{3}{2}, -\frac{3}{2}  $	0	0	0	0	$P \hbar k_+$	0	$-\epsilon_0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}$	0
$\langle \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}  $	$-\sqrt{\frac{2}{3}} P \hbar k_+$	0	0	0	$\frac{P}{\sqrt{3}} \hbar k_z$	0	0	$-\epsilon_0 - \Delta + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}$

Figure 5.2: Hamiltonien de Kane.

### 5.1.1 Structure de bande des composés semiconducteurs III-V à bande interdite directe

La structure de bandes des composés III-V présentant une bande interdite directe au voisinage du point de symétrie  $\Gamma$  est schématisée sur la figure 5.1. Les extrema de bandes sont situés en  $k = 0$ . Les bandes de valence relatives aux trous lourds et trous légers sont dégénérées au centre de la zone de Brillouin. La bande de split-off est séparée de la bande de trous légers d'une énergie  $\Delta$ . Cette valeur appelée couplage spin-orbite des états de valence est une propriété atomique associée à l'anion du composé, soit l'Arsenic dans le GaAs ou l'Antimoine dans le GaSb.

Les valeurs de bande interdite  $E_g$  et de couplage spin-orbite pour les matériaux semiconducteurs III-V les plus usuels sont reportées sur le tableau I [2]. On peut remarquer que dans le cas des matériaux à base d'Arsenic, on pourra négliger la valeur de  $\Delta$  devant  $E_g$ . Par contre on considèrera, en première approximation, pour les matériaux à base d'Antimoine que  $\Delta$  est très grand devant le gap. La bande de spin-orbite sera donc rejetée à l'infini.

Chacune des bandes, représentées sur la figure 5.1 est en fait doublement dégénérée et si on néglige l'influence des autres bandes qui sont éloignées en énergie on peut décrire les états du système à partir d'une matrice  $8 \times 8$ . Cet Hamiltonien construit par Kane [3] est reporté sur la figure 5.2. L'origine des énergies est prise au bas de la bande de conduction.

La quantité  $P$  représente l'interaction entre un état de la bande de conduction et de la bande de valence. Elle est constante pour tous les matériaux III-V considérés comme le montre le tableau 2 [2] où sont reportées les valeurs en électronvolt de  $2 \times m_0 P^2$ . Celles-ci ont été calculées de telle sorte qu'il y ait concordance entre les valeurs expérimentales de la masse effective de l'électron et celles déduites des expressions de masse de bas de bande obtenues à partir du modèle de Kane. On trouve ainsi

$$\frac{1}{m_e} = \frac{2P^2}{\epsilon_g} \frac{[\epsilon_g + 2\Delta/3]}{\epsilon_g + \Delta}$$

$$\frac{1}{m_v} = \frac{-4P^2}{3\epsilon_g}$$

Soulignons dès à présent que la matrice de Kane décrit les interactions entre les différentes bandes au voisinage de  $k = 0$ . On ne peut donc envisager un calcul du transport par les vallées satellites à partir de ce modèle. C'est sans doute une limitation importante dans la mesure où nous avons vu que pour des dispositifs à effet tunnel il est souvent difficile de restreindre l'analyse aux seules vallées centrales.

## 5.1.2 Simplification de la matrice de Kane

### 5.1.2.1 Modèle à trois bandes

Si on suppose que les composantes du vecteur d'onde perpendiculaire à l'axe de croissance sont nulles ( $k_x = k_y = 0$ ) on peut, en première approximation, considérer que les bandes de trous lourds et des trous légers sont découplées. L'Hamiltonien à huit bandes peut alors être réduit à une matrice  $6 \times 6$  ne prenant en compte que les interactions entre les bandes relatives aux particules légères. Il apparaît alors seulement l'interaction  $P$  et le couplage spin-orbite. L'Hamiltonien devient alors :

$$\mathcal{H} = \begin{bmatrix} H & 0 \\ 0 & H \end{bmatrix}$$

$$\text{avec } H \begin{bmatrix} 0 & -\sqrt{\frac{2}{3}}Pp_z & \frac{P}{\sqrt{3}}p_z \\ -\sqrt{\frac{2}{3}}Pp_z & -E_g & 0 \\ \frac{P}{\sqrt{3}}p_z & 0 & -E_g - \Delta \end{bmatrix}$$

$$\text{et } p_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial z}$$

### 5.1.2.2 Modèle à deux bandes

Si maintenant la valeur de l'éclatement spin-orbite est très grande devant la bande interdite on peut se contenter d'inclure seulement deux états dans l'Hamiltonien et ne prendre en compte que les interactions entre la bande de conduction et la bande de valence de trous légers. On aboutit alors au modèle de Kane à deux bandes [4]. L'Hamiltonien a la même forme que précédemment et l'élément de matrice  $H$  se simplifie sous la forme :

$$H = \begin{bmatrix} 0 & -\sqrt{\frac{2}{3}}Pp_z \\ -\sqrt{\frac{2}{3}}Pp_z & -E_g \end{bmatrix}$$

La résolution de l'équation  $H(\psi) = E\psi$  permet d'obtenir le vecteur  $\begin{bmatrix} \psi_c \\ \psi_v \end{bmatrix}$  où  $\psi_c$  est la fonction d'onde associée à la bande de conduction et  $\psi_v$  est la fonction d'onde associée à la bande de valence de trous légers.

Cette équation admet des solutions si  $\text{Det}[\mathcal{H} - E] = 0$ . On en déduit la relation de dispersion :

$$E[E + E_g] = \frac{2}{3}\hbar^2 k_z^2 P^2 \quad (5.1)$$

La relation de dispersion obtenue à partir du modèle à trois bandes est quant à elle de la forme :

$$E[E + E_g][E + E_g + \Delta] = \hbar^2 k_z^2 P^2 \left[ E + E_g + \frac{2\Delta}{3} \right] \quad (5.2)$$

La relation 5.1 se déduit de la relation 5.2 en faisant tendre  $\Delta$  vers l'infini.

### 5.1.3 Application du modèle à deux bandes au cas des hétérostructures

On considère ici une hétérostructure composée de deux matériaux A et B de paramètres structuraux indicés A et B.

L'application du modèle à deux bandes au cas des superréseaux est due à Bastard [5][6]. Celle-ci n'est valable que sous plusieurs hypothèses :

- \* Le potentiel d'interface est fortement localisé au voisinage de la transition entre les matériaux A et B
- \* Le potentiel d'interface conduit à un décalage des états de valence et de conduction au sommet des bandes. Ceci implique que les matériaux A et B aient les mêmes symétries spatiales et les mêmes constantes de réseaux. L'utilisation du modèle de Kane dans le cas de structures pseudomorphiques reste problématique.

Avec ces hypothèses on peut donc poser :

$$E_{c(v)}(z + d) = E_{c(v)}(z)$$

$$E_{c(v)}(z) = \begin{cases} 0 & \text{si } 0 \leq z \leq L_A \\ E_{c(v)} & \text{si } L_A \leq z \leq L_A + L_B \end{cases}$$

$$\text{avec } d = L_A + L_B$$

Le système d'équations à résoudre dans le cas d'une hétérostructure [7] devient alors :

$$\begin{bmatrix} E_c(z) - E & \sqrt{\frac{2}{3}} P \hbar k_z \\ \sqrt{\frac{2}{3}} P \hbar k_z & -E_A + E_v(z) - E \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \psi_c \\ \psi_c \end{bmatrix} = 0 \quad (5.3)$$

$E_A$  est la bande interdite du matériau A.

Pour garantir la continuité de la probabilité de courant aux interfaces on pose :

- \* la continuité de la fonction d'onde  $\psi$  à gauche et à droite de l'interface
- \* la continuité de  $\frac{1}{E_A + E - E_v(z)} \frac{d\psi}{dz}$  à l'interface

#### 5.1.4 Calcul du coefficient de transmission d'une hétérostructures dans le cadre du modèle à deux bandes

La résolution du système des deux équations couplées (5.3) est menée avec le formalisme de Ando (voir chapitre 2). Les fonctions d'onde associées aux bandes de conduction et de valence dans la région collecteur de l'hétérostructure s'écrivent :

$$\psi_{cN+1} = A_{cN+1} e^{ikN+1z} + B_{cN+1} e^{-ikN+1z}$$

$$\psi_{vN+1} = A_{vN+1} e^{ikN+1z} + B_{vN+1} e^{-ikN+1z}$$

où  $N + 1$  correspond à l'indice de discrétisation dans l'espace collecteur.

Si on suppose que la fonction d'onde associée à la bande de conduction est progressive dans le collecteur,  $B_{cN+1}$  est égal à zéro. Dans l'émetteur, il suffit de substituer à l'indice  $N + 1$  l'indice 0 et l'on pose le coefficient  $A_{c0}$  correspondant à l'onde incidente égal à 1.

On obtient  $A_{cN+1}$  par le produit des matrices de Ando en introduisant pour chaque élément de structure discrétisée par l'indice  $j$  les grandeurs suivantes :

$$k_j^2 = (E_{c_j} - E)(-E_{g0} + E_{v_j} - E) \times \frac{3}{2\hbar^2 P^2}$$

$$S_j = \frac{[-E_{g0} + E_{v_{j+1}} - E]}{[-E_{g0} + E_{v_j} - E]} \frac{k_j}{k_{j+1}}$$

Le coefficient  $A_{vN+1}$  est calculé à partir de l'expression :

$$A_{vN+1}^2 = \frac{3}{2} \frac{A_{cN+1}^2 \cdot [E_{cN+1} - E]^2}{P^2 \hbar^2 k_{N+1}^2}$$

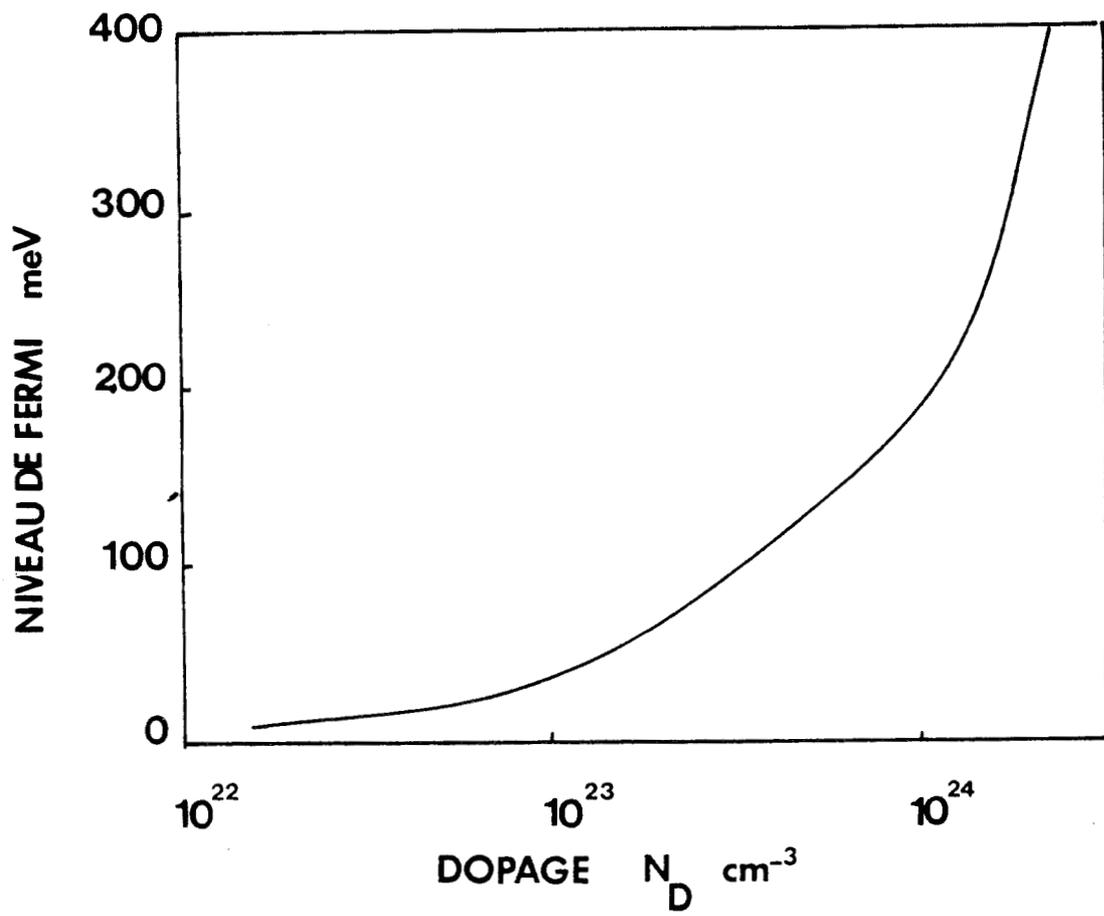


Figure 5.3 : Evolution du niveau de Fermi dans l'InAs en fonction du dopage de type  $n$ .

en supposant que la fonction d'onde associée à la bande de valence dans le collecteur soit également progressive.

$A_{vo}$  est déduite de  $A_{vN+1}$  pour la relation :

$$A_{vo} = A_{vN+1} M_{22}$$

où,  $M_{22}$  est l'élément de matrice résultant du produit des  $N$  matrices de Ando.

Le coefficient de transmission est calculé à partir des probabilités de courant de trous et d'électrons incidente et transmise :

$$T = \frac{k_{n+1}}{k_0} \frac{\left[ \frac{|A_{cN+1}|^2}{E+E_{go}-E_{vN+1}} + \frac{|A_{vN+1}|^2}{E-E_{cN+1}} \right]}{\frac{|A_{co}|^2}{E+E_{go}} + \frac{|A_{vo}|^2}{E}}$$

## 5.2 Intérêt du matériau InAs entrant dans la composition d'hétérostructures de type II

Il nous semble important de situer ici les propriétés particulières offertes par le matériau InAs utilisé pour construire les hétérostructures de type II. La faible masse électronique induite par la valeur de gap réduite aura des implications très importantes sur le transport. Avant d'aborder ces points, nous allons nous intéresser aux difficultés technologiques qui apparaissent dans la réalisation pratique des hétérostructures. Si on se reporte à l'évolution de la bande interdite en fonction du paramètre de maille on peut constater que le matériau InAs présente un désaccord de maille variant entre 0,6 % et 1 % avec les matériaux du système GaAlSb. La contrainte qui en résulte n'est donc pas négligeable mais sera technologiquement supportable pour une croissance de matériaux de faible épaisseur. En revanche le choix du substrat sur lequel le matériau InAs peut être épitaxié pose un certain nombre de problèmes. Le GaSb semble être la solution naturelle à adopter, mais on peut montrer que pour la plupart des techniques d'épitaxie les substrats de GaSb sont qualifiés avec un dopage résiduel de type  $P$  important, de l'ordre de  $10^{16} \text{ cm}^{-3}$  dans le meilleur des cas. On est, par conséquent, obligé d'avoir recours à un substrat de GaAs pour toutes les applications nécessitant un substrat semi

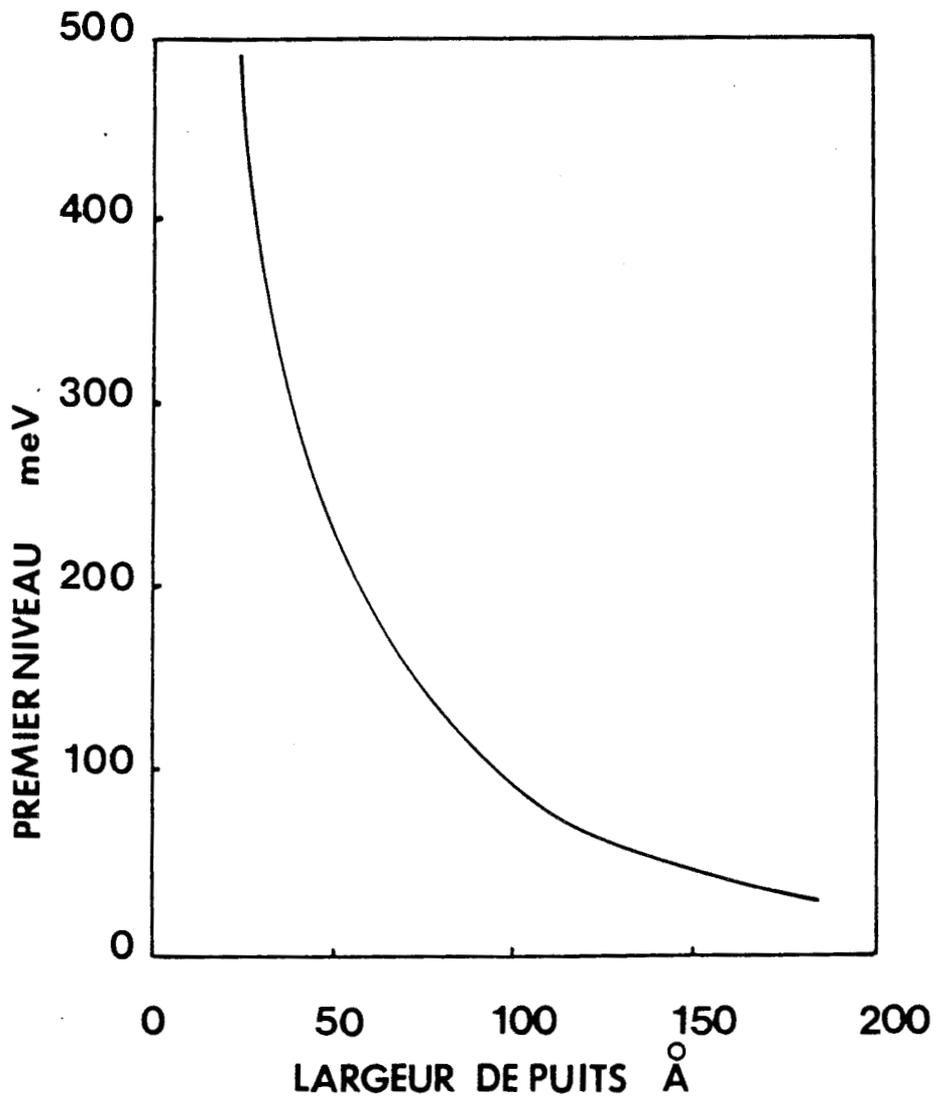


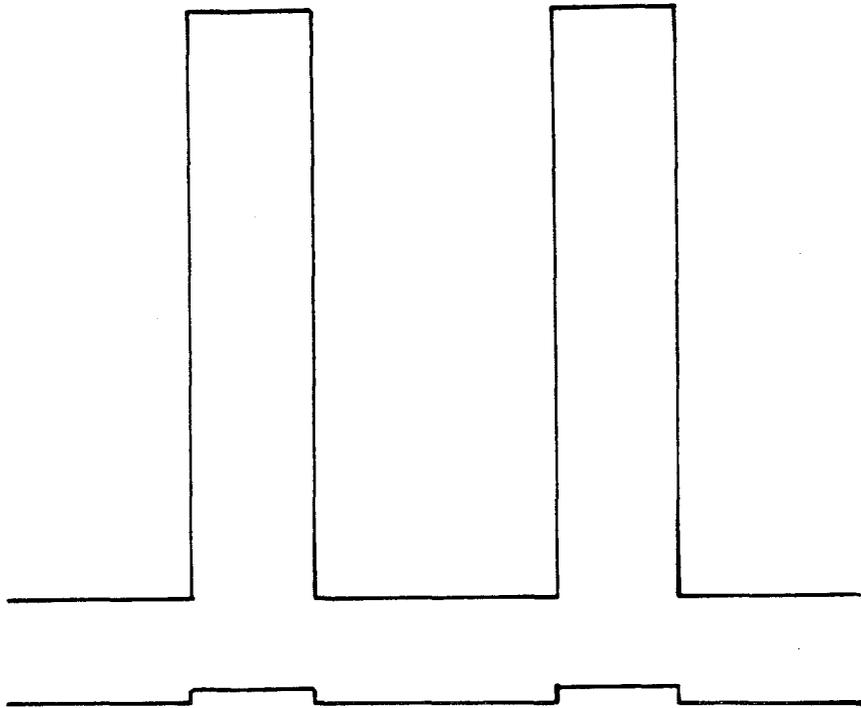
Figure 5.4: Positionnement du premier niveau quasi-lié dans un puits de potentiel d'InAs.

isolant. La désadaptation avec l'InAs est alors énorme, de plus de 7 %. La solution proposée jusqu'à présent consiste à interposer un superréseau  $GaAs/Ga_{0,3}In_{0,7}As$  à forte concentration d'Indium de manière à absorber la contrainte [8]. Si les problèmes de croissance sont maîtrisés, les avantages de l'InAs portent non seulement sur les propriétés de transport quantique mais aussi sur les propriétés des zones d'accès. En ce qui concerne ce dernier point, on tire parti d'un niveau de Fermi élevé en fonction du dopage. Nous avons reporté sur la figure 5.3 l'évolution du niveau de Fermi en fonction du nombre d'impuretés donneuses. Pour  $N_D = 2 \cdot 10^{18} cm^{-3}$  on trouve  $E_f = 270$  meV et pour  $N_D = 10^{19} cm^{-3}$  la valeur calculée est de 468 meV.

Ceci se traduira concrètement par des densités de courant extrêmement élevées. Pour un dispositif double barrière présentant un émetteur d'InAs, on peut atteindre des densités de courant de l'ordre de  $100$  kA/cm<sup>2</sup> pour des largeurs de barrière AlSb de 27 Å. Pour des structures dans le système GaAlAs, il a fallu descendre à des largeurs de barrière d'AlAs de 17 Å avec un émetteur de GaAs dopé de façon identique.

On peut aussi souligner la réduction très importante de la résistance de contact dans le matériau InAs. Des valeurs de résistivité spécifiques inférieures à  $2 \cdot 10^{-7} \Omega cm^2$  ont été reportées. Fondamentalement c'est la valeur de masse effective très faible ( $m_{eff} = 0,023m_0$ ), allant de paire avec la valeur de bande interdite de 0,36 eV qui favorise le passage par effet tunnel à l'interface métal semiconducteur. C'est un avantage technologique qui se révèle prépondérant pour les performances fréquentielles des composants. C'est en effet la résistance série induite par les contacts ohmiques qui limite la fréquence maximale d'oscillation des diodes à effet tunnel résonnant. On pourra se reporter à l'article de la référence [9] qui rapporte une fréquence de coupure de 712 GHz pour une double barrière AlSb/InAs utilisée en oscillateur.

Si maintenant on s'intéresse à l'arrangement des bandes de conduction et de valence des hétérostructures réalisées à partir du matériau InAs et des composés GaAlSb, on constate qu'il est fondamentalement différent de celui obtenu dans le cas des hétérostructures GaAs/GaAlAs. Les variations de bande interdite dans les deux systèmes se situent dans la même fourchette mais la discontinuité de gap se reporte essentiellement sur la bande de conduction pour les hétérostructures InAs/GaAlSb. On obtient ainsi un report de discontinuité de 90% de la différence de bande interdite dans le cas de l'hétérostructure InAs/AlSb si on considère les vallées  $\Gamma$ .



**Figure 5.5 :** Arrangement des bandes de valence et de conduction pour la double barrière AlSb/InAs.

Par des hauteurs de barrières aussi élevées, on limite aisément toute conduction d'origine thermoionique même à température élevée. Il faut par ailleurs souligner qu'avec une telle configuration d'hétérostructure, l'effet tunnel prend place près de la bande de valence et on se trouve devant des effets de non parabolicité de bande interdite très marqués favorables à l'obtention de densités de courant élevées. C'est pour cette raison qu'un modèle à deux bandes est nécessaire même si le processus tunnel est de type intrabande.

Remarquons pour terminer que le matériau InAs peut entrer aussi dans la composition de la zone quantique en tant que zone de puits de potentiel. L'effet de la masse électronique très faible se fait alors sentir principalement sur le positionnement des niveaux quasi-liés. La figure 5.4 montre l'évolution du premier niveau quasi-lié en fonction de la largeur de puits dans le cas d'une double barrière AlSb/InAs où  $L_b = 27 \text{ \AA}$ . Celui-ci se maintient à une énergie élevée même pour des largeurs de puits de  $100 \text{ \AA}$ . Il se situe alors à  $89 \text{ meV}$ . Cette valeur est à rapprocher de celle de l'énergie du premier niveau quasi-lié dans un puits de  $50 \text{ \AA}$  de GaAs. L'utilisation du matériau InAs se révèle donc tout à fait intéressante pour réaliser la base d'un transistor puisque la prise de contact sera facilitée par une largeur de puits importante.

## 5.3 Double barrière AlSb/InAs

### 5.3.1 Utilisation du formalisme de Kane

Le positionnement relatif des bandes de conduction et de valence dans le cas de la double barrière AlSb/InAs/AlSb est schématisé sur la figure 5.5. On se trouve ici dans une configuration d'hétérostructures de type II où la bande de valence du matériau de barrière se trouve à une énergie de  $60 \text{ meV}$  au-dessus de celle du matériau d'émetteur et de puits. Rappelons par ailleurs que la discontinuité de bande de conduction est quant à elle très élevée ( $1,8 \text{ eV}$ ) et qu'une telle discontinuité devrait permettre de s'affranchir du courant d'origine thermoionique. La discontinuité de bande de conduction  $\Gamma X$  est de l'ordre de  $1,3 \text{ eV}$  alors qu'elle n'est que de  $0,2 \text{ eV}$  dans l'hétérostructure GaAs/AlAs [10]. Ce dernier point nous permet de considérer que la conduction par les vallées  $\Gamma$  sera prédominante même lorsque les largeurs de barrière seront épaisses. Le transport par effet tunnel prend donc place à des énergies très proches de la bande de valence et très éloignées du bas de la bande de conduction. L'hétérostructure AlSb/InAs est donc un cas

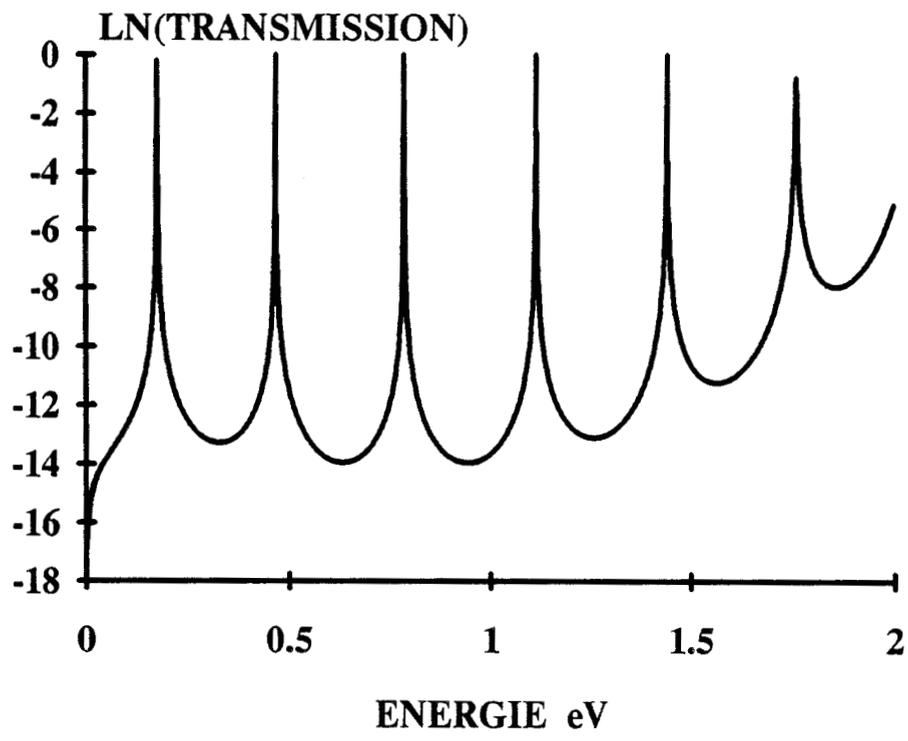


Figure 5.6 : Spectre de transmission d'une double barrière AlSb/InAs.

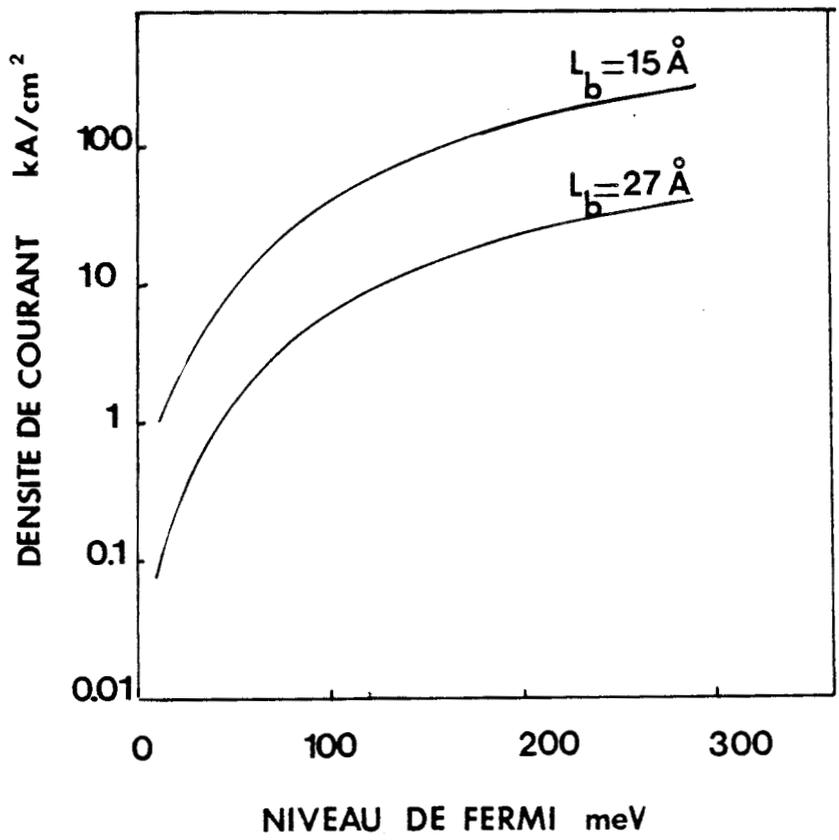


Figure 5.7 : Evolution du courant pic en fonction de la largeur de barrière.

fondamentalement différent de celui des hétérostructures GaAlAs/GaAs. L'utilisation du modèle à deux bandes de Kane nous semble nécessaire non seulement pour décrire des effets de conduction par effet tunnel près de la bande de valence mais aussi pour traduire l'état de fonction d'onde dans le matériau à petit gap InAs.

### 5.3.2 Etude la conduction

#### \* Spectre de transmission.

Nous illustrons les résultats de spectre de transmission sur une structure de largeur de puits de 66 Å avec des largeurs de barrière de 27 Å. La largeur de puits a été choisie pour cadrer avec les résultats expérimentaux tirés de la littérature et présentés par la suite. Le résultat du calcul  $Ln$  (transmission) en fonction de l'énergie est donné sur la figure 5.6. Le niveau fondamental se situe à 170 meV. L'échelle des énergies résonnantes fait apparaître de nombreux pics avec un deuxième niveau situé vers 450 meV. Cette présence de nombreux états propres est une conséquence directe de la profondeur importante du puits de potentiel. En revanche leur arrangement en énergie est influencé par l'hybridation des états de valence et de conduction.

#### \* Choix d'un niveau de dopage d'émetteur.

Compte tenu du positionnement des états d'énergie vu précédemment, il nous semble intéressant de voir dans quelle mesure le niveau de dopage dans l'émetteur joue un rôle sur la densité de courant pic. Nous avons pris pour ce calcul deux largeurs de barrières de 15 Å et de 27 Å, et fait varier le niveau de dopage de l'émetteur entre  $10^{16}$   $\text{cm}^{-3}$  et  $2 \cdot 10^{18}$   $\text{cm}^{-3}$  (figure 5.7). On retrouve conformément aux analyses effectuées dans le troisième chapitre une densité de courant pic qui diminue lorsque la largeur des barrières augmente. Cette diminution est de plus d'un ordre de grandeur. L'aspect le plus nouveau concerne le phénomène de saturation du courant pic à dopage élevé. Cela signifie concrètement qu'il est inutile d'augmenter exagérément le niveau de dopage dans les zones adjacentes aux doubles barrières au-delà de  $2 \cdot 10^{18}$   $\text{cm}^{-3}$ . Un étalement de la fonction de distribution des porteurs dans l'émetteur prenant place à des énergies très supérieures au niveau quasi-lié dans le puits de potentiel apporte en effet une contribution minimale au courant. Rappelons que le courant pic est obtenu essentiellement lors du croisement du niveau de Fermi avec le niveau fondamental et que le nombre d'états peuplés aux énergies inférieures au niveau de Fermi, est sensiblement

InAs	$> 5.10^{18} \text{ cm}^{-3}$	1000 Å
InAs	$2.10^{18} \text{ cm}^{-3}$	1000 Å
InAs	$2.10^{16} \text{ cm}^{-3}$	200 Å
AlSb		15 Å
InAs		64 Å
AlSb		15 Å
InAs	$2.10^{17} \text{ cm}^{-3}$	750 Å
InAs	$2.10^{18} \text{ cm}^{-3}$	2000 Å
InAs	$> 5.10^{18} \text{ cm}^{-3}$	$1 \mu\text{m}$
5 périodes		
$\text{In}_{0,7}\text{Ga}_{0,3}\text{As}$		2 ML
GaAs		2 ML
GaAs		5000 Å
Substrat GaAs		

**Figure 5.8 :** Séquence de croissance de la double barrière AlSb/InAs tirée de la référence [11]

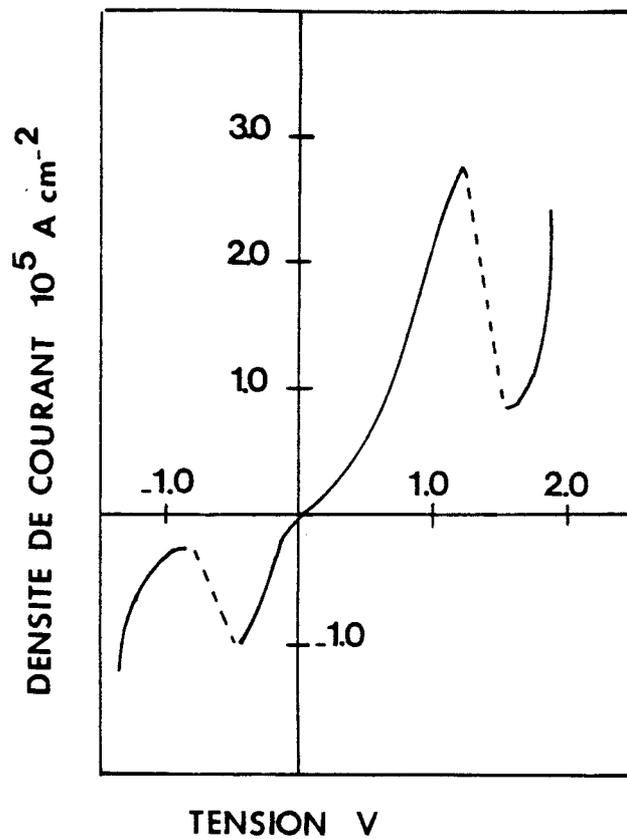
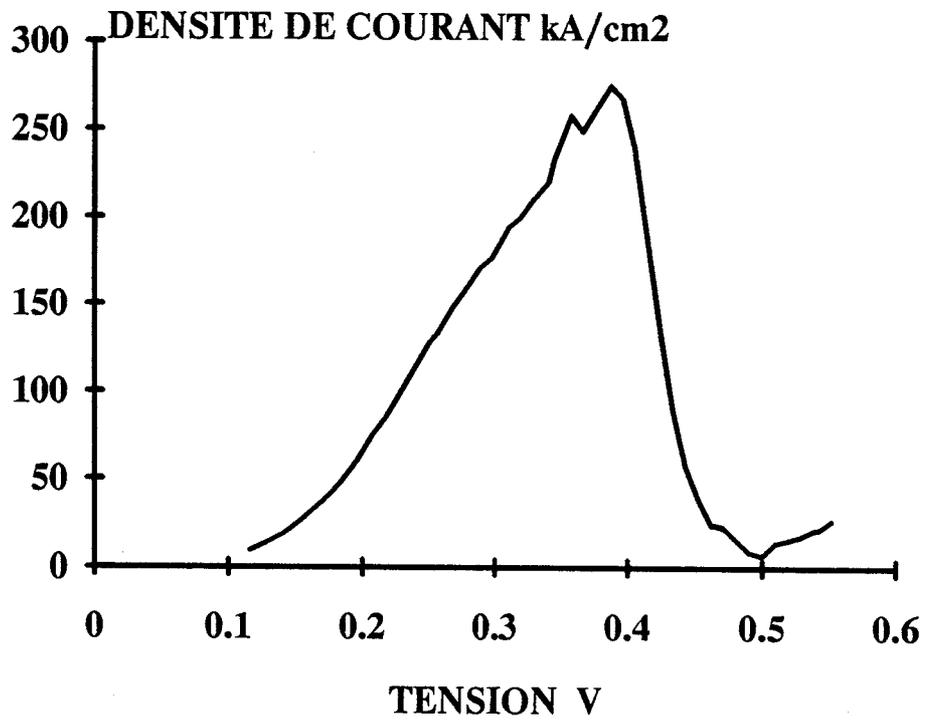


Figure 5.9 : Caractéristique I-V à 300 K  
 a) calculée avec le modèle de Kane  
 b) résultat expérimental.

InAs	$2 \cdot 10^{18}$	2500 Å
InAs	$2 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$	500 Å
AlSb		27 Å
InAs		64 Å
AlSb		27 Å
InAs	$2 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$	500 Å
Buffer InAs		1 $\mu\text{m}$
5 périodes		
In <sub>0,7</sub> Ga <sub>0,3</sub> As		2 ML
GaAs		2 ML
buffer GaAs		2500 Å
substrat GaAs		

**Figure 5.10** : Séquence de croissance de la structure double barrière AlSb/InAs tirée de la référence [12]

égal pour tous les niveaux de dopage.

\* Confrontation des résultats théoriques aux résultats expérimentaux.

Pour valider nos résultats théoriques, nous allons nous appuyer sur les caractérisations expérimentales de la référence [11]. La séquence de croissance de la structure étudiée est schématisée sur la figure 5.8. Les largeurs de barrières sont de 15 Å, la largeur de puits est de 64 Å. Un espaceur de 200 Å a été inséré entre la double barrière et le réservoir d'électrons dopé à  $2 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ . Le résultat du calcul de la caractéristique I-V effectué dans le cadre du modèle de Kane à deux bandes est montré sur la figure 5.9a. Nous avons également reporté sur la figure 5.9b la courbe expérimentale. On observe un excellent accord en ce qui concerne la densité de courant pic puisque l'on trouve dans les deux cas une valeur de  $270 \text{ kA/cm}^2$ . Les hautes densités de dislocations que les auteurs ont souligné dans leur article et qui ne sont évidemment pas prises en compte dans nos simulations semblent jouer un rôle secondaire. Par contre la tension pic n'est pas respectée puisqu'elle se situe autour de 1V sur la caractéristique expérimentale. C'est en fait probablement les effets de résistance série particulièrement cruciaux pour des fonctionnements à courants élevés qui expliquent ce désaccord.

Le contraste en courant est comme dans les cas précédents largement surestimé puisqu'il vaut 40 au lieu de 3. Le "fit" entre les tensions pic théorique et expérimentale peut être sensiblement amélioré si on s'intéresse à une structure à faible densité de courant. Dans ce but, nous avons effectué les calculs pour la structure expérimentale tirée de la référence [12] et schématisée sur la figure 5.10. La densité de courant pic mesurée est de  $5 \text{ kA/cm}^2$  autour de 0,3 V à 77K (figure 5.11a). Le contraste en courant est de 28. Notre calcul donne quant à lui une densité de courant pic de  $9 \text{ kA/cm}^2$  à 0,3V figure 5.11b. L'accord sur la tension pic est ici bien meilleur. Les densités de courant pic sont du même ordre de grandeur. Le contraste en courant expérimental est exceptionnel mais se trouve encore bien en deçà des prévisions théoriques qui sont rappelons-le basées sur des hypothèses de cohérence totale de phase.

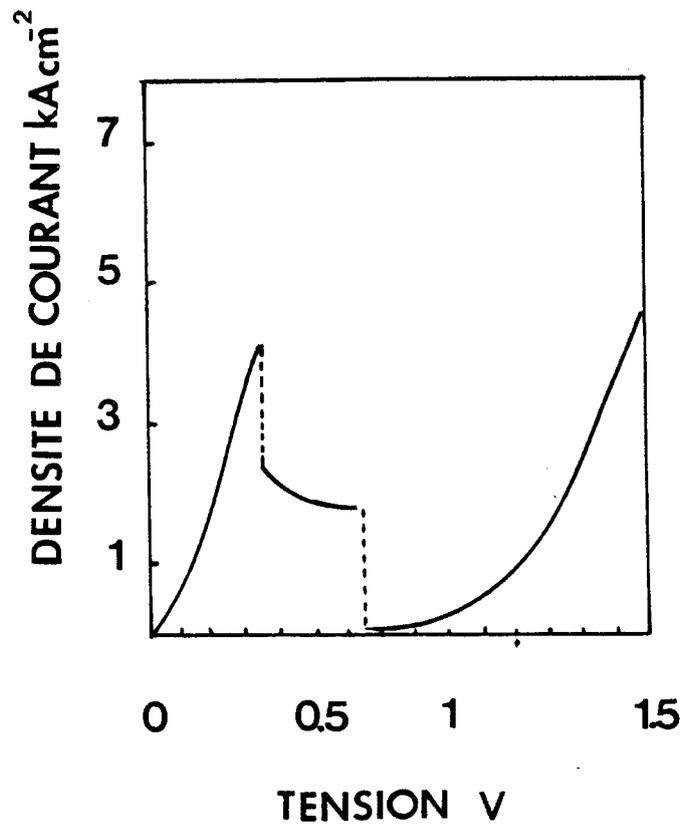
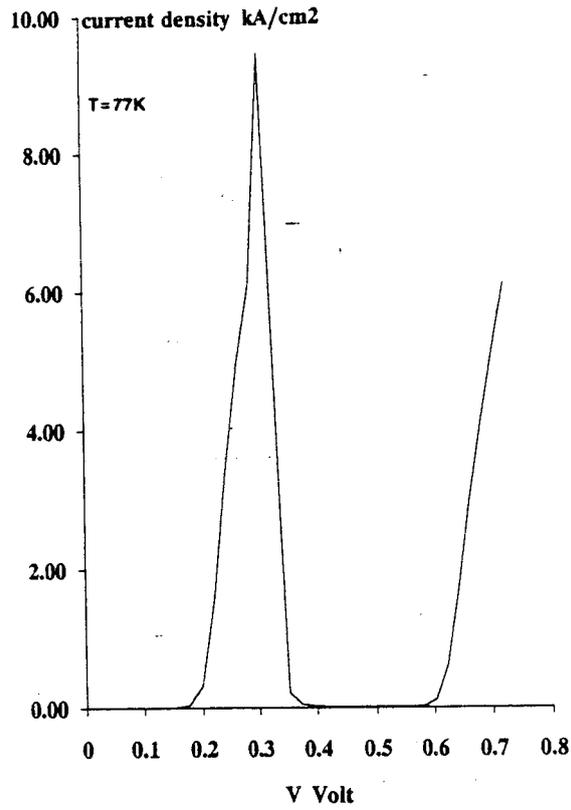
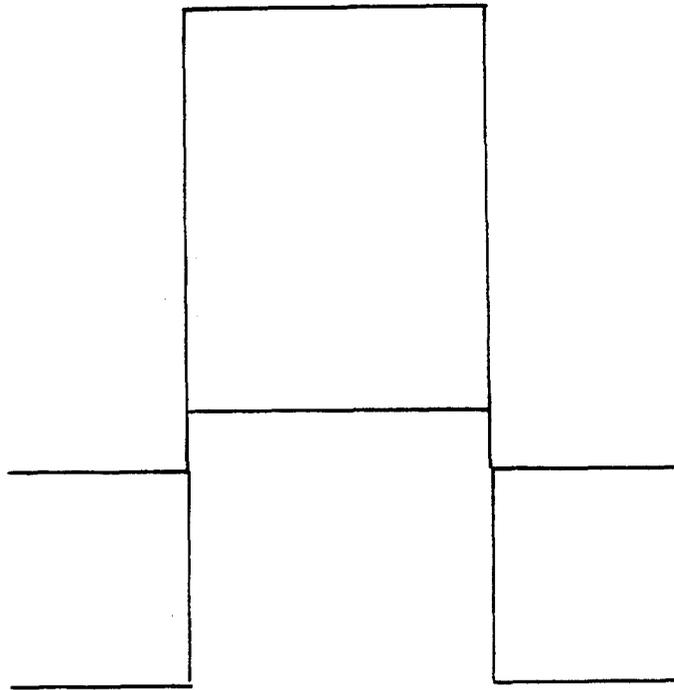


Figure 5.11 : Courbe courant-tension à 77 K  
 a) calculée avec le modèle à deux bandes  
 b) résultat expérimental.



**Figure 5.12** : Schématisation de la simple barrière de GaSb encadrée par le matériau InAs.

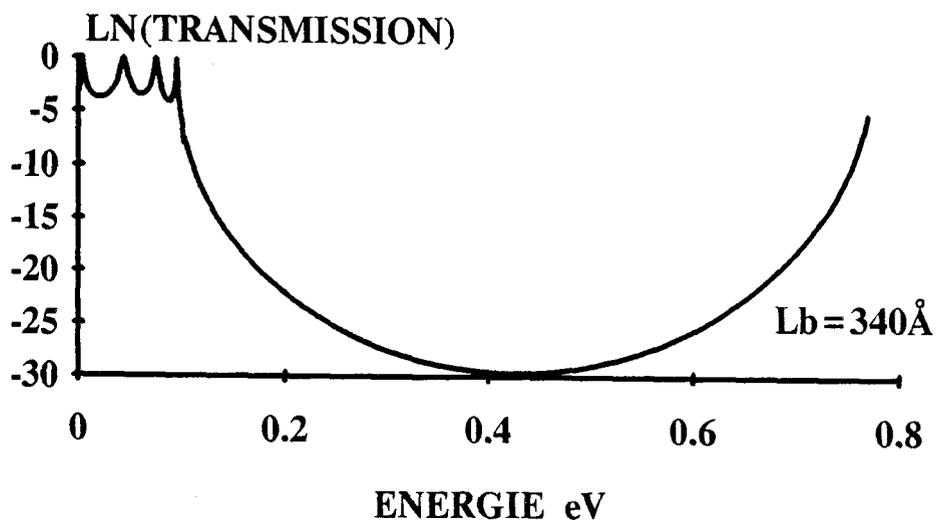
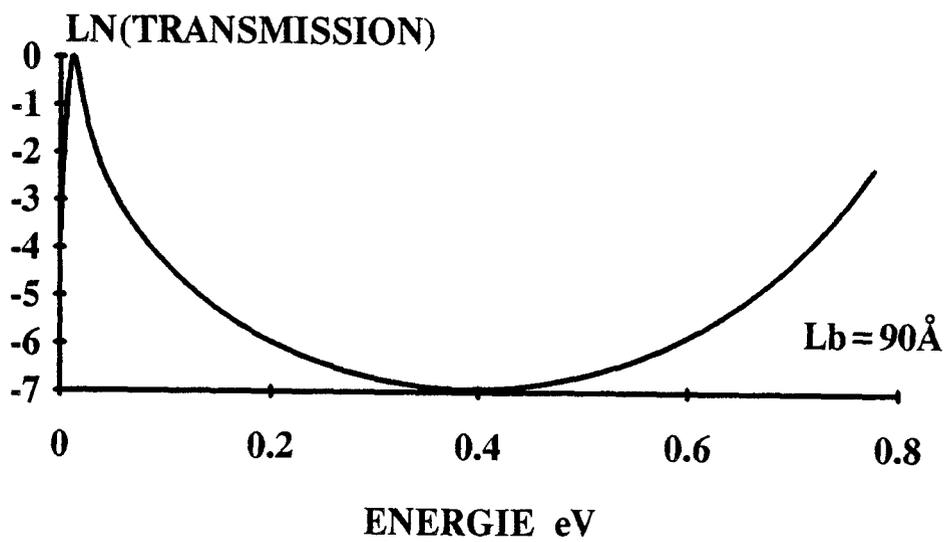
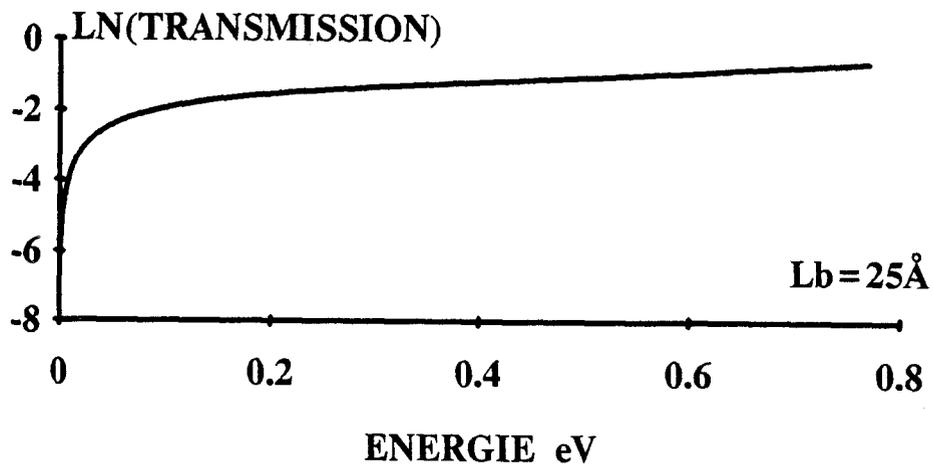


Figure 5.13 : Spectre de transmission de la simple barrière de GaSb pour différentes largeurs.

## 5.4 Etude l'effet tunnel interbande dans les cas d'hétérostructures non dopées

### 5.4.1 Exemple de la simple barrière GaSb épitaxiée sur un matériau InAs

#### 5.4.1.1 Mise en évidence de l'effet tunnel interbande

L'hétérostructure InAs/GaSb [13] est schématisée sur la figure 5.12. La discontinuité de bande de conduction est prise égale à 0,77 eV. La valeur de bande interdite du GaSb est 0,67 eV et la bande de valence se positionne à 100 meV au-dessus de la bande de conduction de l'InAs. Il se crée alors un puits de potentiel dans la bande de valence du GaSb. Le confinement n'est pas ici réalisé par deux zones interdites comme dans le cas des double barrières de potentiel. Il s'agit plutôt d'une hybridation entre les états de la bande de conduction de l'InAs et les états de la bande de valence du GaSb. Il y a création de niveaux quasi liés dans la bande de valence du GaSb et les fonctions d'ondes associées aux électrons et aux trous légers sont couplées à l'interface InAs/GaSb. Le niveau quasi-lié constituera un chemin préférentiel pour le passage des électrons par effet tunnel. On constate ainsi une analogie avec les mécanismes de conduction par effet tunnel intrabande. La différence réside dans l'absence de barrière de potentiel. La situation est par ailleurs similaire à celle rencontrée dans le cas des jonctions PN avec des transferts de charge entre bande de conduction et bande de valence et avec toutefois l'avantage d'un effet résonnant.

\* Spectre de transmission.

La figure 5.13 montre les spectres de transmission calculés pour trois largeurs de barrière de GaSb. Lorsque  $L_b = 90 \text{ \AA}$  on peut noter un seul niveau quasi-lié situé à 13 meV du bas de la bande de conduction de l'InAs. Pour  $L_b = 340 \text{ \AA}$  les niveaux se rapprochent du haut de la bande de valence du GaSb. On observe alors quatre pics de transmission situés à 3, 43, 73, 94 meV. Par contre, pour de faibles largeurs de barrière soit  $L_b = 25 \text{ \AA}$  le confinement très important rejette les niveaux quasi-liés à des énergies supérieures au recouvrement entre la bande de valence du GaSb et la bande de conduction de l'InAs. Le confinement se fait alors avec la bande interdite du matériau d'émetteur et les niveaux dans la bande de valence du GaSb ne sont plus accessibles

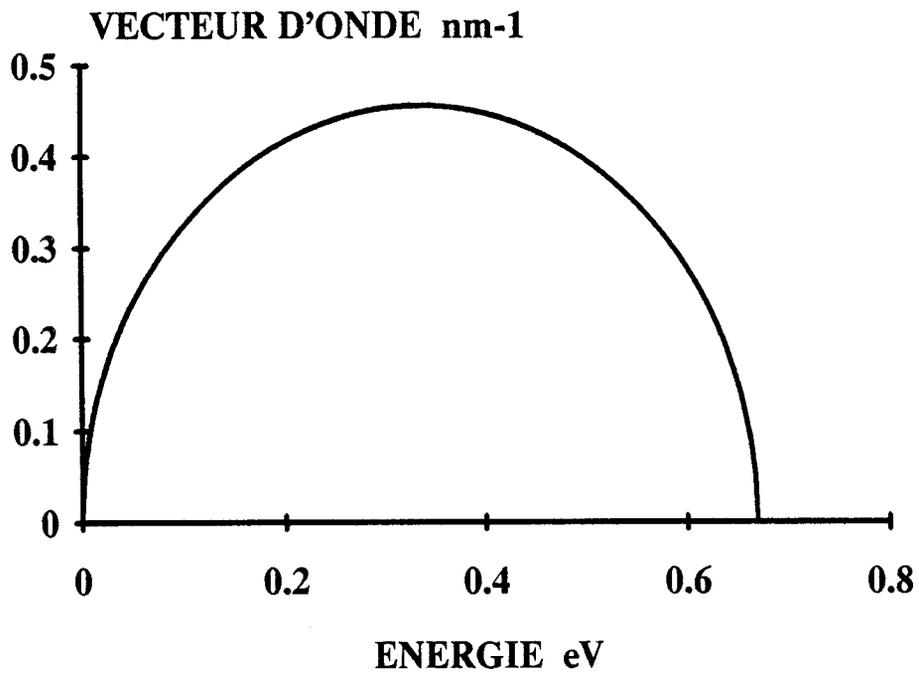


Figure 5.14 : Evolution du coefficient d'atténuation dans la bande interdite du GaSb. L'origine des énergies est prise au bas de la bande de valence.

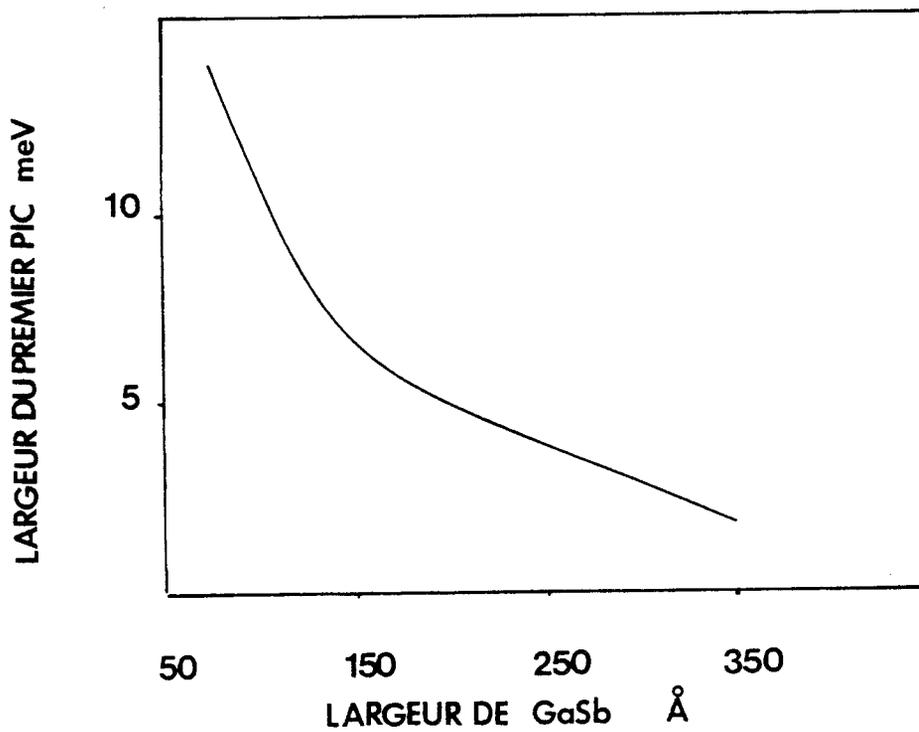


Figure 5.15 : Evolution de la largeur à mi-hauteur du premier niveau quasi-lié dans la bande de valence du GaSb.

aux électrons.

L'allure générale des courbes de transmission que nous avons montrées pour de fortes largeurs de barrières de GaSb ne présente pas une variation monotone et croissante comme dans le cas des simples barrières GaAlAs. Pour expliquer cette différence, il peut être intéressant de scinder le spectre de transmission en deux composantes. Il faut distinguer d'une part, la conduction des porteurs dont les énergies sont situées dans le recouvrement de la bande de valence et de conduction et d'autre part, l'effet tunnel prenant place dans la bande interdite du GaSb. Dans cette dernière situation on se trouve dans le cas d'une simple barrière de potentiel dont la transmission a pour expression exacte [14] :

$$T = \frac{4}{4 + \left[1 + (k/\alpha)^2 + (\alpha/k)^2 + 1\right] \sinh^2(\alpha L)}$$

avec  $k$  le vecteur d'onde dans la zone d'émetteur et  $\alpha$  le coefficient d'atténuation dans la bande interdite de la zone de barrière. Si  $\alpha L_b$  est très supérieur à 1 comme dans le cas des barrières épaisses, la transmission se simplifie en :

$$T = \left[ \frac{4 (\alpha/k)}{(1 + (\alpha/k)^2)} \right] e^{-2\alpha L_b}$$

La figure 5.14 montre l'évolution du vecteur d'onde imaginaire en fonction de l'énergie dans la bande interdite du GaSb.  $\alpha$  est maximal au milieu du gap et s'annule au bas de la bande de conduction et de valence. Le passage par effet tunnel est donc favorisé près des extréma de bandes et se trouve minimisé au milieu de la bande interdite. L'évolution du spectre de transmission pour des énergies correspondant à toute la gamme située entre la bande de valence et de conduction n'avait pas été visualisée jusqu'à présent dans la mesure où l'on s'intéresserait au passage par effet tunnel près du sommet de la bande de conduction du GaAlAs.

Ce raisonnement n'est plus valable pour des largeurs de barrière de GaSb comparables à l'atténuation des fonctions d'onde évanescents. L'expression de la transmission doit alors être considérée dans sa totalité. On obtient alors une évolution de plus en plus monotone comme l'illustre le spectre de transmission de la figure 5.13a pour  $L_b = 25 \text{ \AA}$ .

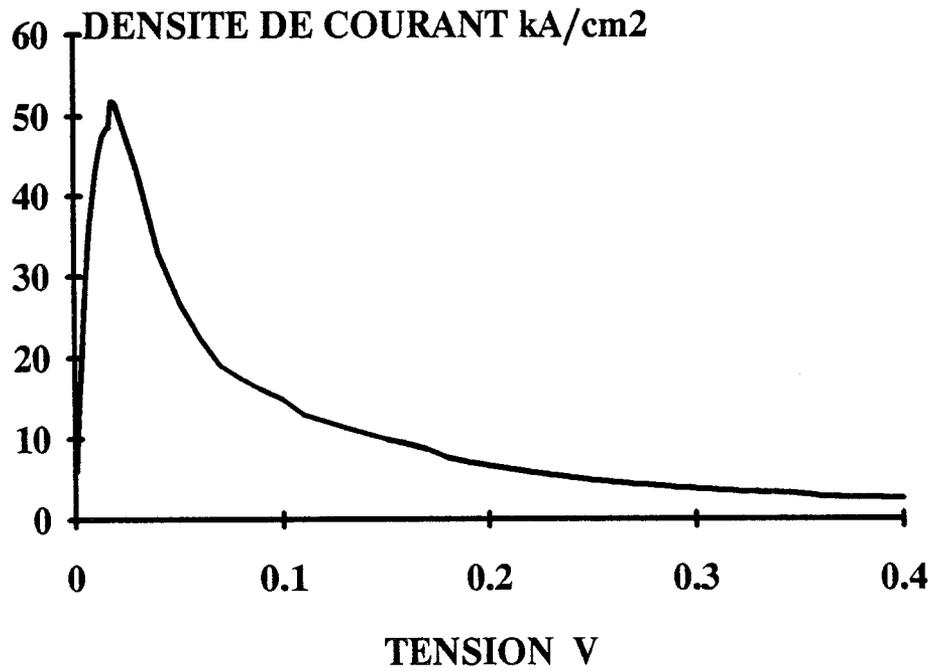


Figure 5.16 : Courbe courant-tension de la simple barrière de GaSb sans prise en compte de l'espaceur  $L_b = 90 \text{ \AA}$  -  $E_f = 270 \text{ meV}$

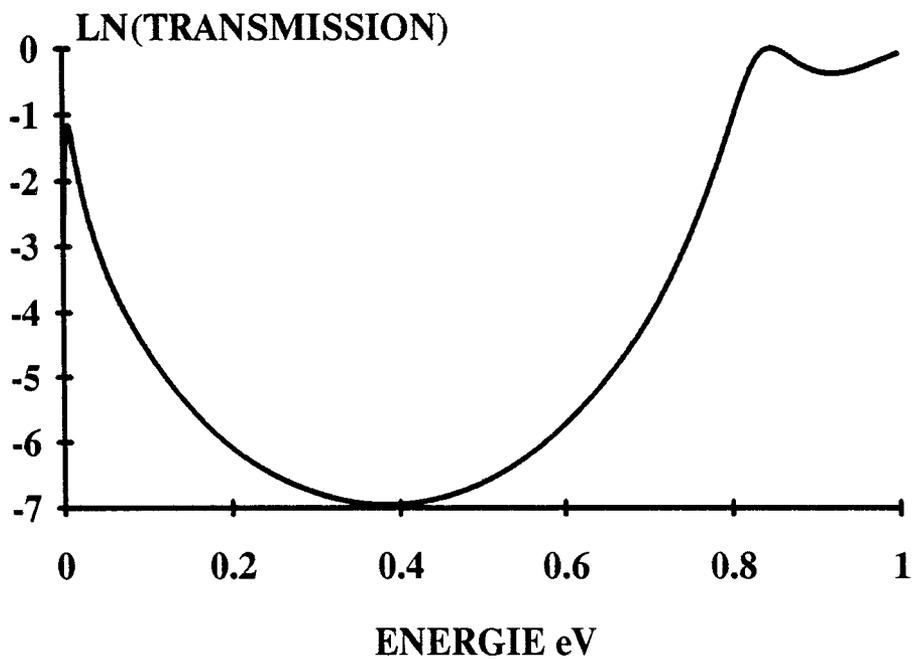


Figure 5.17 : Courbe de transmission correspondant à la tension pic.  $V_{pic} = 19 \text{ mV}$ .

Si on s'intéresse maintenant aux temps de durée de vie des niveaux quasi-liés dans la bande de valence du GaSb, on constate qu'ils peuvent être très courts. La figure 5.15 montre l'évolution de la largeur à mi-hauteur du premier pic de transmission en fonction de la largeur de barrière de GaSb. La largeur de résonance décroît lorsque la largeur de GaSb augmente. C'est une conséquence directe de la diminution de l'écart entre le sommet de la bande de valence de GaSb et les différents niveaux quantifiés. Pour des largeurs de barrière de l'ordre de 90 Å, on obtient une largeur de pic à mi-hauteur de 12 meV. Cette valeur est très supérieure aux valeurs trouvées dans le cas des double barrières d'AlSb qui sont de l'ordre de 3 meV. Pour des systèmes de type GaAlAs, il faudrait avoir recours à des structures de type superréseau pour obtenir une telle dispersion des valeurs d'énergie propre.

\* Caractéristiques I-V.

L'existence de niveaux quasi-liés dans la bande de valence de la barrière de GaSb permet un effet tunnel résonant qui conduit à la création d'une zone de résistance différentielle négative sur la caractéristique I-V. Pour illustrer cet aspect, nous avons calculé la courbe courant tension d'une barrière de GaSb de 90 Å alimentée par un émetteur d'InAs dopé à  $2.10^{18} \text{ cm}^{-3}$  à 77K. Celle-ci est montrée sur la figure 5.16. La montée en courant est très abrupte puisque le niveau quasi-lié situé à 13 meV est accessible immédiatement à une large population électronique. Le niveau de Fermi se positionne en effet à 270 meV du bas de la bande de conduction de l'émetteur et on obtient une densité de courant pic de  $50 \text{ kA/cm}^2$ . La figure de transmission correspondant à la tension pic de 19 mV présente un pic situé à quelques meV du bas de la bande de conduction de l'émetteur figure 5.17. A tension plus élevée, les électrons ne bénéficient plus du chemin préférentiel constitué par le niveau quasi-lié et sont confrontés à la bande interdite du GaSb. Il en résulte une chute de courant.

A l'issu de ces premiers résultats, on peut noter des différences sensibles entre les effets tunnel résonnant intrabande et interbande. La conduction est beaucoup plus instantanée dans ce dernier cas, sans perte des niveaux en courant. L'absence de barrière physique est un élément déterminant. Hors résonance, les porteurs doivent affronter une bande interdite comme dans les jonctions PN et la conséquence directe est l'inhibition des processus de conduction parasites.

# Bibliographie

- [1] D.A. COLLINS, D.H. CHOW, E.T. YU, D.Z.Y. TING, J.R. SÖDERSTRÖM, Y. RAJAKARUNAYAKE, T.C. Mc GILL, T.J. WATSON  
Resonant Tunneling in Semiconductors  
Edité par L. Changetal, Plenum Press, New York, 1991.
- [2] G. BASTARD  
Wave mechanics applied to semiconductor heterostructures.  
Monographies de physique.
- [3] E.O. KANE  
Physics of III-V compounds Semiconductors and semimetals  
Academic, New York p. 75, 1966.
- [4] E.O. KANE  
Journal of physics and Chemical Solids, Vol. 1, p. 249, 1957.
- [5] G. BASTARD  
Physical Review B., Vol. 24, n ° 10, p. 5693
- [6] G. BASTARD  
Physical Review B., Vol. 25, n ° 12, p. 7584
- [7] J.R. SÖDERSTRÖM, E.T. YU, M.K. JACKSON, Y. RAJAKARUNANAYAKE  
and T.C. Mc GILL  
Journal of applied Physics 68 (3), 1 August 1990.
- [8] S. KALEM, J.I. CHYI, H. MORKOÇ  
Applied Physics Letters 53 (17), October 1988.
- [9] E.R. BROWN, C.D. PARKER, A.R. CALAWA, M.J. MANFRA, C.L. CHEN,  
L.J. MAHOMEY and W.D. GOODHUE, J.R. SÖDERSTRÖM, T.C. Mc GILL  
Microwave and optical Technology letters, Vol. 4, n ° 1, January 1991.

- [10] L.F. LUO, R. BERESFORD, W.I. WANG  
Applied Physics Letters, 53 (23), December 1988.
- [11] J.R. SÖDERSTRÖM, E.R. BROWN, C.D. PARKER, L.J. MAHONEY, J.Y. YAS,  
T.G. ANDERSON, T.C. Mc GILL  
Applied Physics Letters 58, (3), 21 January 1991.
- [12] J.R. SÖDERSTRÖM, D.H. CHOW, T.C. Mc GILL  
IEEE Electron Devices Letters, Vol. 11, n ° 1, January 1990.
- [13] D.Z. Y. TING, E.T. YU, D.A. COLLINS, D.H. CHOW, T.C. Mc GILL  
Journal of Vacuum Science Technology B 8 (4), p. 810, July August 1990.
- [14] A.T. FROMHOLD  
Quantum mechanics for Applied Physics and engineering  
Academic Press, 1981.

## Conclusion générale

Nous avons étudié dans ce travail les mécanismes de conduction par effet tunnel pour des dispositifs à puits quantiques réalisés à partir d'hétérostructures de semi-conducteurs III-V.

La complexité croissante des structures considérées s'est manifestée aussi bien sur le nombre d'hétérojonctions mises en jeu que sur la configuration des discontinuités de bandes de conduction et de valence.

En ce qui concerne la zone quantique des composants que nous avons présentés, il se dégage la règle générale suivante :

Lorsque la structure permet aux électrons de pénétrer profondément dans les zones interdites, avec dans le cas limite un passage par effet tunnel près de la bande de valence, il faut impérativement introduire un couplage entre les bandes de valence et de conduction même si le transport est unipolaire. Concrètement ceci demande la résolution d'un système de deux équations de type Schrödinger pour décrire les états de valence et de conduction.

Nous avons vu, par ailleurs, que les zones d'accès jouaient un rôle plus primordial qu'il n'y paraissait à priori. Elles devaient au premier abord assurer uniquement la montée graduelle du champ électrique ainsi que les échanges avec le circuit extérieur. Or des effets quantiques relativement marqués ont été mis en évidence dans la zone d'espaceur émetteur. Ceux-ci constituent alors un intermédiaire entre les états du continuum et les niveaux quasi-liés du puits de potentiel.

On peut souligner par ailleurs la présence pour de nombreux dispositifs d'états cachés et quasi-liés. Ce point est à mettre en relation pour une structure classique avec les phénomènes de conduction parasites hors résonance. Pour des structures nouvelles de type transistor ces niveaux permettent de disposer d'états de commande et de conduction. C'est certainement dans cet axe qu'un travail ultérieur devrait porter, pour que l'on puisse avoir accès aux états propres des hétérostructures situés sous la bande de conduction du matériau d'émetteur qui a été prise jusqu'à présent comme origine des énergies.

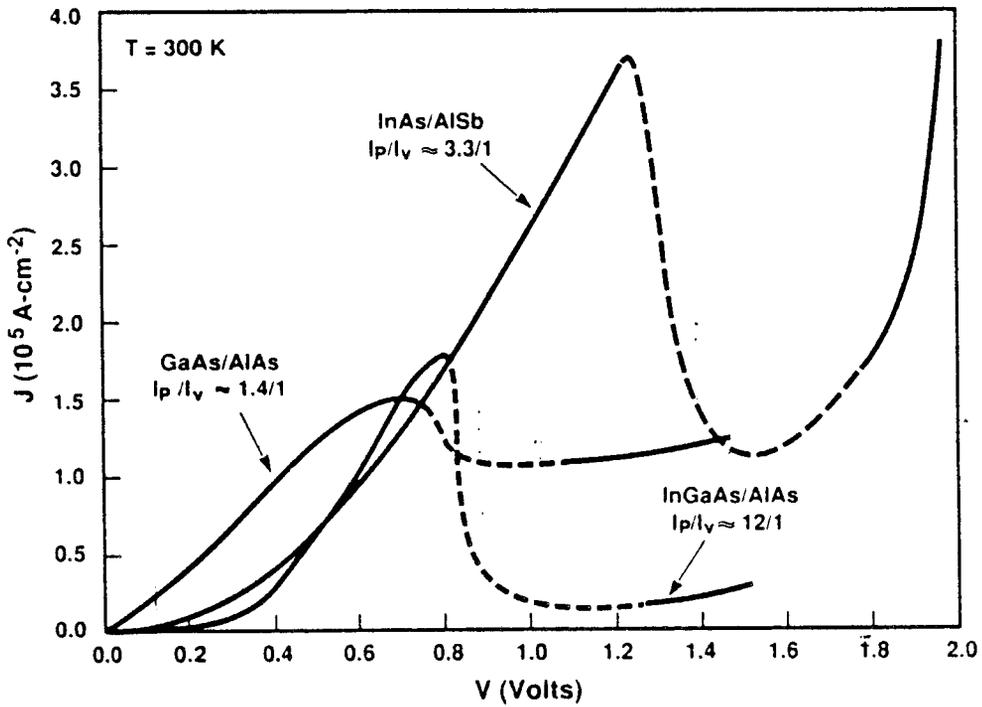


Figure 1 : Caractéristiques I-V obtenues pour des diodes à double barrières réalisées dans trois systèmes de matériaux différents.

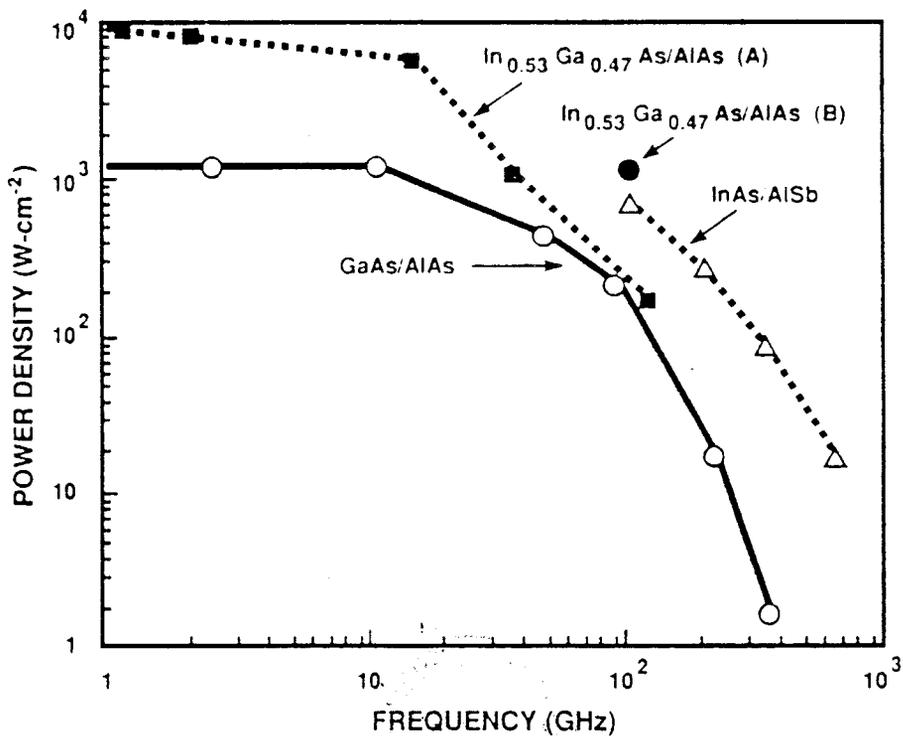


Figure 2 : Performances en fréquence de double barrières utilisées en oscillateur.

En ce qui concerne le choix des matériaux, nos simulations ont montré qu'il faut travailler avec des structures présentant des discontinuités de potentiel très importantes épitaxiées sur du GaInAs à forte concentration d'Indium. Cette tendance n'est pas démentie lorsque l'on s'intéresse aux réalisations pratiques. A titre d'exemple, les figures 1 et 2 montrent les meilleures caractéristiques statiques ainsi que les performances en tant qu'oscillateur de double barrières réalisées dans trois systèmes de matériaux différents. Ces résultats se passent de commentaires. Si l'on recherche à présent l'originalité par de nouvelles structures, les superréseaux finis se révèlent un axe privilégié compte tenu du grand nombre de degrés de liberté. Nous avons pour notre part focalisé notre attention sur les multiples hétérostructures à bande plate présentant une plage d'existence de résistance différentielle négative très étendue. D'autres configurations peuvent cependant être envisagées.

La filière à base d'Antimoine a permis d'ouvrir la voie de l'effet tunnel inter-bande que l'on observait surtout dans le cas des homojonctions dégénérées  $P^+N^+$ . On bénéficie alors, pour la conduction par effet tunnel, d'une augmentation considérable de la transparence des barrières qui résulte de l'effet de résonance pour les énergies quantifiées. Les mécanismes de faible conduction sont, par ailleurs, fortement atténués par la présence d'une bande interdite de largeur importante. Un effort visant à mettre en évidence des effets d'inversion de population dans des structures présentant des recouvrements de bandes entre matériaux InAs et GaSb a été reporté dans la littérature. Les hétérostructures de type II, si elle peuvent être mises à profit pour augmenter les performances des structures classiques, devraient dans un avenir proche pouvoir être utilisées dans des configurations originales.

Les potentialités de ces hétérostructures pour la réalisation de transistors quantiques sont très prometteuses.

Dans ce travail de modélisation, les programmes ont été mis au point au fur et à mesure des problèmes rencontrés. Un regroupement des blocs de simulation constituerait un premier pas vers la conception assistée par ordinateur des structures à puits quantiques microélectroniques et optoélectroniques. Sur la base de la détermination des courbures de bandes, des états couplés et cachés, et des probabilités de présence, il faudrait greffer alors d'autres calculs tels que ceux relatifs aux probabilités de transition inter sous-bandes ou au transport diffusif.



## Résumé

Ce travail est consacré à la modélisation du transport par effet tunnel dans des hétérostructures semiconductrices III-V réalisées dans les systèmes  $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}/\text{GaAs}$ ,  $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{As}/\text{Ga}_{1-x}\text{In}_x\text{As}$ ,  $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{Sb}/\text{InAs}$ . Ces hétérostructures définissent des barrières et des puits de potentiel pour lesquels on exploite l'existence de niveaux d'énergie quantifiés. L'effet tunnel résonnant résultant des effets d'interférences des ondes associées aux électrons y joue un rôle prépondérant.

Les aspects de simulations sont essentiellement basés sur la résolution de l'équation de Schrödinger indépendante du temps et sur des traitements autocohérents de la zone d'accès faisant intervenir des équations couplées. Nous accédons ainsi, aux fonctions d'onde associées aux particules, à la probabilité de passage par effet tunnel et nous en déduisons les caractéristiques courant-tension. Le cas de la simple barrière de potentiel semi-transparente, des hétérostructures double barrière résonnantes, des superréseaux sont plus particulièrement étudiés.

Nous mettons en évidence la possibilité de deux modes de transport par effet tunnel, de type intrabande ou interbande suivant l'arrangement des bandes de conduction et de valence des hétéroépitaxies considérées. Nous précisons par ailleurs l'importance des zones d'accès, de la cohérence de phase sur le transport par effet tunnel et nous proposons des structures alternées finies à pas variable permettant d'optimiser la fenêtre de transmission.

Chaque fois que cela s'est révélé possible, nous avons comparé nos calculs de caractéristiques de conduction à celles relevées expérimentalement.

Mots clés : Effet tunnel intrabande - Effet tunnel interbande - Tunnel résonnant -  
Modèle de Kane - Système  $\text{Al}_x\text{In}_{1-x}\text{As}/\text{Ga}_{1-x}\text{In}_x\text{As}$  -  
Système  $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{Sb}/\text{InAs}$  - Hétérostructures de type I et II -  
Caractéristiques statiques