

50376  
1992  
161

61302

50376  
1992  
161

N°d'ordre:935

présentée à

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

pour obtenir le grade de

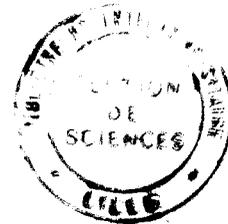
**DOCTEUR DE L'UNIVERSITE**

**Spécialité: Sciences des Matériaux**



par

**Xavier LETARTRE**



**CARACTERISATIONS ELECTRIQUES  
D'HETEROSTRUCTURES DE  
SEMI-CONDUCTEURS**

**soutenue le 03 Juillet 1992 devant la commission d'examen:**

**Président: Mr G. SALMER**  
**Rapporteurs: Mr J.P. HIRTZ**  
**Mr P. VIKTOROVITCH**  
**Examineurs: Mr M. LANNOO**  
**Mr K. PLOOG**  
**Mr D. STIEVENARD**



à ma femme Sylvie

à mes enfants Emilie, Céline et Adrien

à mes parents

à ma famille

à mes amis

"La Nature est un temple où de vivants piliers  
Laissent parfois sortir de confuses paroles:  
L'homme y passe à travers des forêts de symboles  
Qui l'observent avec des regards familiers."

Charles Baudelaire



Compétence, enthousiasme et sens critique sont les qualités que l'on espère trouver chez un directeur de thèse. Que Didier STIEVENARD soit remercié de me les avoir dispensées avec prodigalité.

Je tiens à exprimer particulièrement ma gratitude à Michel LANNOO qui m' a accueilli dans le Laboratoire d'Etude des Surfaces et Interfaces qu'il dirige. De plus, ses connaissances théoriques et son aisance en ce domaine m'ont été d'une aide constante.

Je remercie vivement Monsieur le professeur SALMER de m'avoir fait l'honneur de présider le jury.

Que Messieurs J.P. HIRTZ et P. VIKTOROVITCH soient assurés de ma profonde reconnaissance pour avoir accepté le rôle difficile de rapporteur.

Je remercie également le professeur PLOOG pour sa présence comme examinateur et pour l'intérêt qu'il porte à mon travail.

Recevoir, dans le cadre de son travail, à la fois soutien et amitié est un privilège rare. Que Didier GOGUENHEIM soit assuré de ma profonde gratitude.

Je tiens à remercier aussi D. DERESMES de sa disponibilité et de son aide précieuse.

Que tous les membres du laboratoire trouvent par ailleurs ici l'expression de mon amitié la plus sincère.

Je remercie l'Institut Supérieur d'Electronique du Nord qui m'a permis de réaliser ce travail dans un environnement aussi riche qu'amical.

La Fondation Norbert Segard et la Fédération Universitaire et Polytechnique de Lille trouveront ici l'expression de ma gratitude pour le soutien financier qu'elles m'accordèrent.

Je remercie aussi le Centre Hyperfréquences et Semi-conducteurs et le Laboratoire Central de Recherche de Thomson qui m'ont fourni les échantillons sans lesquels cette thèse n'aurait pas vu le jour.

Enfin, que ma femme et mes enfants soient assurés de mon éternelle affection, eux qui ont su, même dans l'absence, en donner sans compter.

Je veux encore exprimer ma reconnaissance à mes parents qui m'ont soutenu, en toute circonstance, par la confiance qu'ils ont en moi.

TABLE DES MATIERES
--------------------

	page
<u>INTRODUCTION GENERALE</u> .....	9
<u>CHAPITRE I : CARACTERISTIQUES CAPACITE-TENSION</u> .....	11
I-1 Introduction: paramètres d'une hétérostructure.....	13
I-2 Détermination directe des paramètres: méthode de Kroemer.	19
I-3 Détermination indirecte par simulation de C(V).....	29
I-4 Modèle analytique pour un simple puits quantique.....	59
I-5 Résultats expérimentaux.....	69
I-6 Conclusion.....	79
Références du chapitre I.....	81
<u>CHAPITRE II : TECHNIQUES SPECTROSCOPIQUES</u> .....	83
<u>A) Spectroscopie d'admittance sur un multipuits quantique</u> .....	85
II-A-1 Introduction.....	85
II-A-2 Principe.....	86
II-A-3 Détermination de la discontinuité de bande.....	88
II-A-4 Résultats expérimentaux.....	93
II-A-5 Conclusion.....	98

<u>B) D.L.T.S. sur un puits quantique</u> .....	101
II-B-1 Introduction.....	101
II-B-2 Comportement d'un puits quantique en D.L.T.S.....	103
II-B-3 Résultats expérimentaux.....	112
II-B-4 Conclusion.....	116
Références du chapitre II.....	119
<u>CONCLUSION GENERALE</u> .....	121
<u>ANNEXES</u> .....	123
ANNEXE I-A : Démonstration des formules de Kroemer.....	125
ANNEXE I-B : Validité des simulations "quantiques".....	133
ANNEXE II : Calcul de l'effet tunnel par la méthode d'Oppenheimer.....	145
Références des annexes.....	153
<u>GLOSSAIRE</u> .....	155

## INTRODUCTION

Grâce aux nouvelles techniques de croissance telles que l'épitaxie par jets moléculaires ou l'épitaxie par décomposition de composés organo-métalliques, la physique des hétérostructures de semi-conducteurs a connu un formidable développement depuis le début des années 80. Ces nouveaux procédés permettent, en effet, d'associer des matériaux différents en contrôlant la position des interfaces à la monocouche près. On est ainsi à même de générer de nouvelles propriétés électriques ou optiques sur des structures parfaitement contrôlées.

Outre leur intérêt en physique fondamentale (effet tunnel résonnant, effet Hall quantique), les hétérostructures sont la source de nombreuses applications. En premier lieu, le confinement des porteurs dans un puits quantique permet de les séparer spatialement des impuretés dont ils proviennent. Cette propriété, en augmentant la mobilité des porteurs, ouvre la voie à des transistors hautement performants (H.E.M.T.). En ce qui concerne les composants à effet tunnel, l'utilisation de puits quantiques, contenant donc des niveaux d'énergie discrets, rend plus sélectif le passage du courant; ce qui provoque en particulier une augmentation notable de la résistance différentielle négative d'une diode à effet tunnel. Enfin, dans le domaine optique, la réduction du nombre de dimensions des structures, en renforçant l'interaction matière-lumière, a permis la réalisation de structures nouvelles, telles que le laser à puits quantique, dont la supériorité sur les structures à matériau unique a été démontrée.

Parce qu'elle est la garante de la qualité du confinement des porteurs, la discontinuité de bande, présente à l'hétérojonction entre deux semi-conducteurs, constitue le paramètre qui gère l'essentiel des propriétés d'une hétérostructure. La connaissance précise de cette hauteur de barrière est donc indispensable afin de prévoir le comportement de multicouches semi-conductrices. Aussi, le calcul et la mesure des discontinuités de bande entre matériaux reste un sujet de grand intérêt.

Dans ce travail, nous nous sommes efforcés de démontrer que les

techniques de caractérisation électrique permettaient de déterminer avec précision ce paramètre, tout en ne mettant en jeu qu'un dispositif expérimental relativement léger. Dans ce but, nous avons utilisé trois techniques complémentaires en effectuant, pour chacune d'elles, l'effort de modélisation nécessaire à l'interprétation des résultats et, donc, à la mesure de la discontinuité de bande.

Le premier chapitre est consacré à l'étude des caractéristiques capacité-tension ( $C(V)$ ) d'une hétérostructure. Nous montrons tout d'abord que la technique  $C(V)$ , bien qu'attractive par sa simplicité, doit être utilisée avec précaution. En effet, une interprétation trop sommaire des résultats génère une imprécision importante sur la mesure de la discontinuité de bande. Nous développons donc, pour des hétérostructures convenablement choisies, une méthode systématique de détermination de ce paramètre, qui permet de réduire fortement l'intervalle d'erreur. Enfin, en appliquant cette méthode à un simple puits quantique, nous mesurons la discontinuité de bande du système GaAs/GaInAs.

Dans le second chapitre, nous nous intéressons à des techniques plus spectroscopiques. Nous mettons notamment en évidence la puissance de la spectroscopie d'admittance pour déterminer la discontinuité de bande sur un multipuits quantique. En améliorant l'interprétation précédemment proposée pour cette technique, nous mesurons alors la discontinuité de bande du système GaAs/GaAlAs. De plus, en analysant les phénomènes qui gouvernent la conduction dans un puits quantique (effets thermo-ionique et tunnel), nous construisons un modèle original permettant d'interpréter les spectres D.L.T.S. (Deep Level Transient Spectroscopy) obtenus sur une telle structure. En appliquant cette technique à un simple puits quantique, nous mettons séparément en évidence les deux processus de conduction. En outre, nous confirmons le résultat obtenu au premier chapitre pour la discontinuité de bande GaAs/GaInAs.

# Chapitre I : CARACTERISTIQUE CAPACITE-TENSION

## I-1 Introduction

Paramètres d'une hétérostructure

## I-2 Détermination directe des paramètres: méthode de Kroemer

- a) Principe
- b) Analyse de la sensibilité
- c) Adaptation de la méthode à la structure de l'échantillon

## I-3 Détermination indirecte par simulation de C(V)

- a) Principe
- b) Méthode systématique de détermination des paramètres: cas d'une S.H.J.
- c) Influence de la structure sur la détermination des paramètres
- d) Le problème de la quantification: cas d'un simple puits quantique

## I-4 Modèle analytique pour un simple puits quantique

- a) Principe
- b) Discussion
- c) Intérêt du modèle

## I-5 Résultats expérimentaux

- a) Multipuits quantiques GaAlAs/GaAs/GaAlAs
- b) Puits quantiques GaAs/GaInAs/GaAs

## I-6 Conclusion



## I-1 INTRODUCTION

La mesure de la capacité en fonction de la tension appliquée ( $C(V)$ ) sur une diode Schottky permet habituellement la détermination du profil de dopage dans un semi-conducteur [1]. En effet, la capacité mesurée rend compte de la variation de densité de charges à la limite de la zone désertée, lorsqu'on module celle-ci par une excitation sinusoïdale  $dV_p$  (figure I-1). Si  $C$  est la capacité mesurée et  $V_p$  la tension appliquée, on a :

$$W = \frac{\epsilon S}{C} \quad \text{I-1}$$

et :

$$N_D(W) = \frac{-2}{e\epsilon S^2} \left[ \frac{dC^{-2}}{dV_p} \right]^{-1} \quad \text{I-2}$$

où:  $W$  est la limite de la zone déplétée

$N_D(W)$  le dopage en  $W$

$\epsilon$  la constante diélectrique

$e$  la charge de l'électron (en valeur absolue)

$S$  la surface de l'échantillon

Cependant, si la concentration de porteurs libres varie indépendamment du dopage ou de façon significative sur une distance inférieure à la longueur de Debye, l'interprétation du  $C(V)$  n'est plus aussi simple. C'est notamment le cas lorsqu'on étudie une hétérostructure car on observe alors une localisation des porteurs à proximité des hétérojonctions. A titre d'illustration, la figure I-2a montre le profil de porteurs libres dans une S.H.J.<sup>(\*)</sup>. De part et d'autre de l'hétérojonction, on observe une accumulation ou une désertion de porteurs. L'équation de Poisson permet d'exprimer le

(\*) Un glossaire, situé à la fin du manuscrit, explique les sigles utilisés

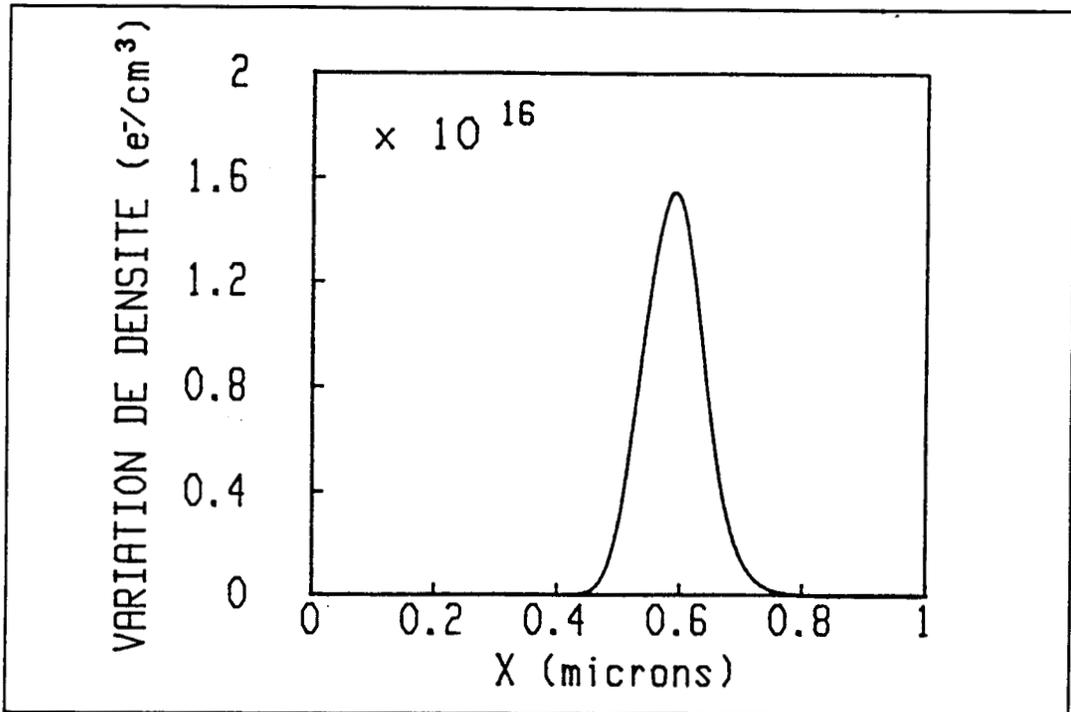


figure I-1: Variation de la densité de charges lors de la mesure de la capacité d'une diode Schottky

potentiel de surface :

$$V_p = \frac{-e}{\epsilon} \int_0^w x\rho(x) dx \quad \text{I-3}$$

où  $\rho(x)$  est la densité de charges.

De plus, la charge stockée dans l'échantillon est donnée par :

$$Q = eS \int_0^w \rho(x) dx \quad \text{I-4}$$

Si on applique une excitation  $dV_p$ , il y aura une variation  $\delta\rho(x)$  de la densité de charges et une variation  $\delta W$  du bord de zone désertée (figure I-2-b). On aura donc:

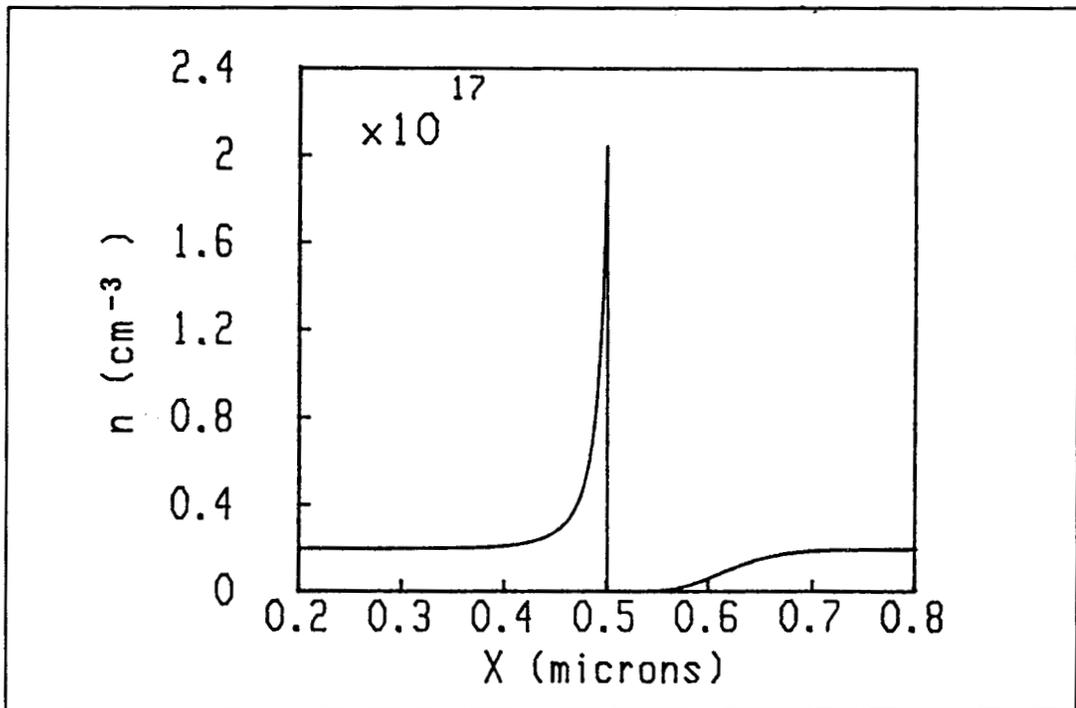


figure I-2a: Profil de porteurs d'une S.H.J.

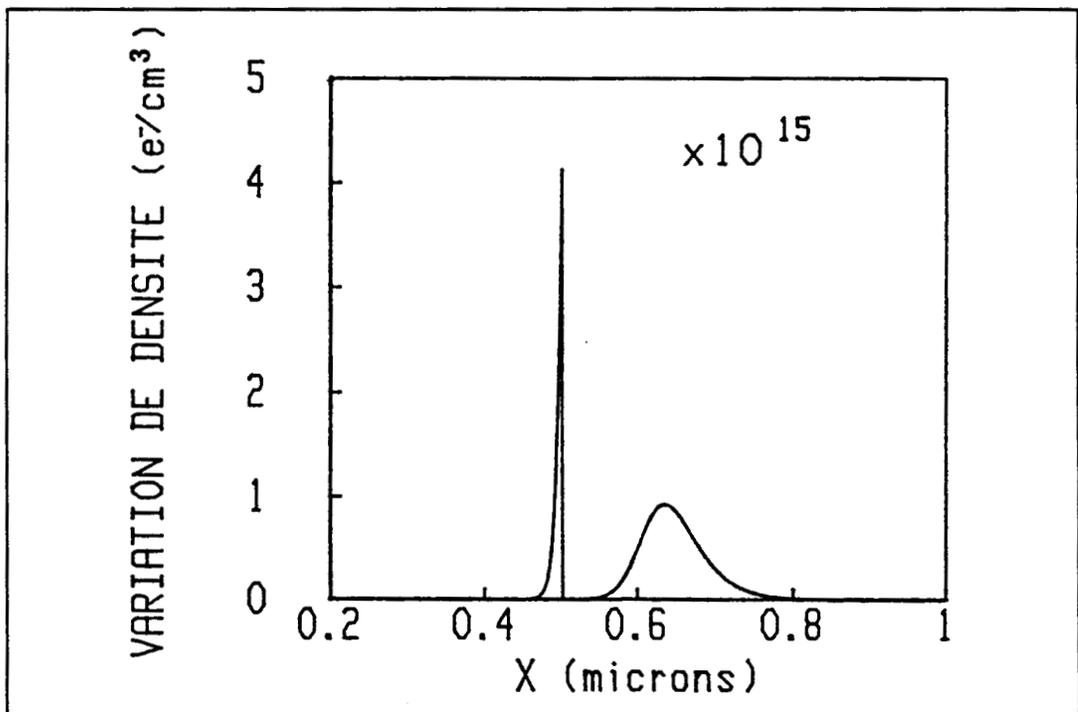


figure I-2b: Variation de la densité de charges lors de la mesure de la capacité d'une S.H.J.

$$dV_p = \frac{-e}{\epsilon} \left[ \int_0^W x \delta\rho(x) dx + W\rho(W) dW \right] \quad \text{I-5}$$

$$dQ = es \left[ \int_0^W \delta\rho(x) dx + \rho(W) dW \right] \quad \text{I-6}$$

Dans le cas d'un semi-conducteur homogène dont le dopage varie peu sur une longueur de Debye, on pourra négliger le premier terme de ces expressions et, en utilisant la relation:

$$C = - \frac{dQ}{dV_p} \quad \text{I-7}$$

retrouver les expressions I-1 et I-2. Pour une S.H.J., la figure I-2b montre que cette simplification n'est plus possible. Donc, lorsqu'on exploite le C(V) par les formules I-1 et I-2, on obtient seulement ce qu'il est convenu d'appeler un profil apparent de porteurs:  $\hat{n}(\hat{x})$ . Cette fonction donne en effet une image de la densité de porteurs dans l'échantillon. La figure I-3 montre le C(V) et le profil apparent typiques d'une S.H.J.: on observe un pic dans la densité de porteurs apparente correspondant à l'accumulation des électrons près de l'interface. Malheureusement, aucune expression du C(V) sur hétérostructures n'ayant pu être établie, on ne peut remonter directement aux paramètres physiques de l'échantillon.

Pour exploiter de telles mesures, deux méthodes ont été proposées. La première, la plus couramment utilisée, consiste à simuler le C(V) en résolvant numériquement l'équation de Poisson et extraire les paramètres (dopages, D.B. ...) de la comparaison avec l'expérience [2,3,4]. La seconde, proposée par Kroemer [5] est une méthode plus directe dans le cas d'une S.H.J. . Par une simple intégration des résultats expérimentaux, elle permet de déterminer la D.B. .

Au vue de la dispersion importante des résultats expérimentaux, nous avons réalisé, en premier lieu, une analyse de la sensibilité de ces diverses méthodes et leur adaptation aux différents types d'hétérostructure. Ces deux méthodes étant essentiellement numériques, nous avons ensuite développé un modèle analytique du C(V) dans le cas d'un S.P.Q. . Celui-ci permet d'interpréter plus rapidement et plus

qualitativement les expériences. Enfin, nous présentons des résultats expérimentaux sur différents échantillons (S.P.Q., M.P.Q.).

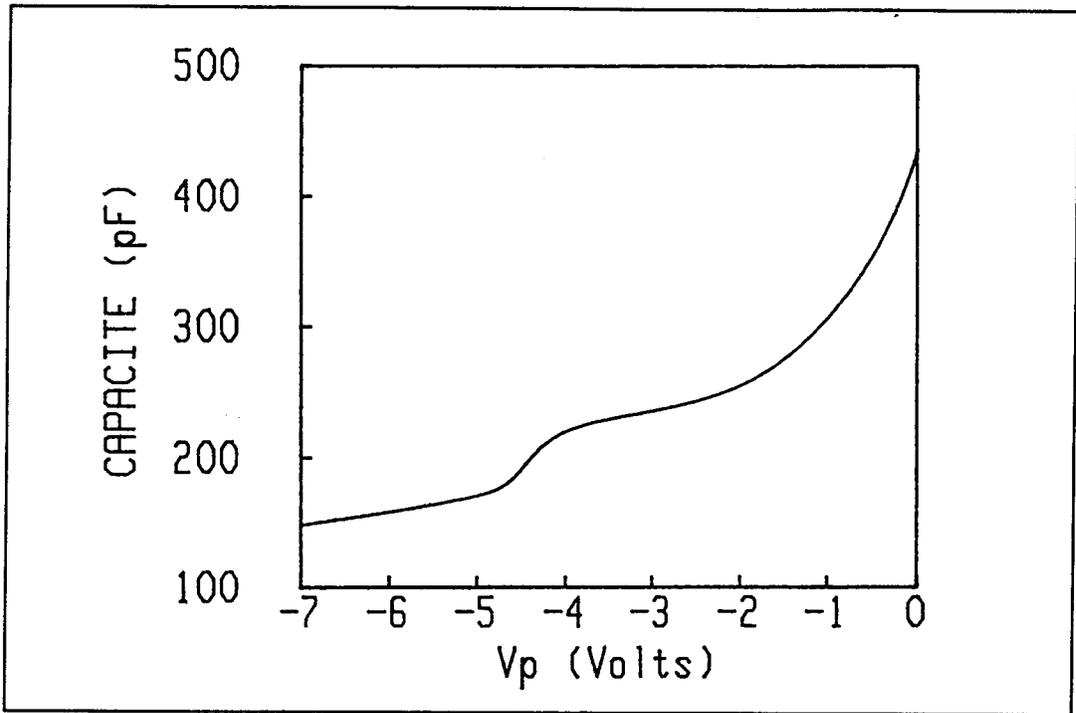


figure I-3: Caractéristique C(V) d'une S.H.J.

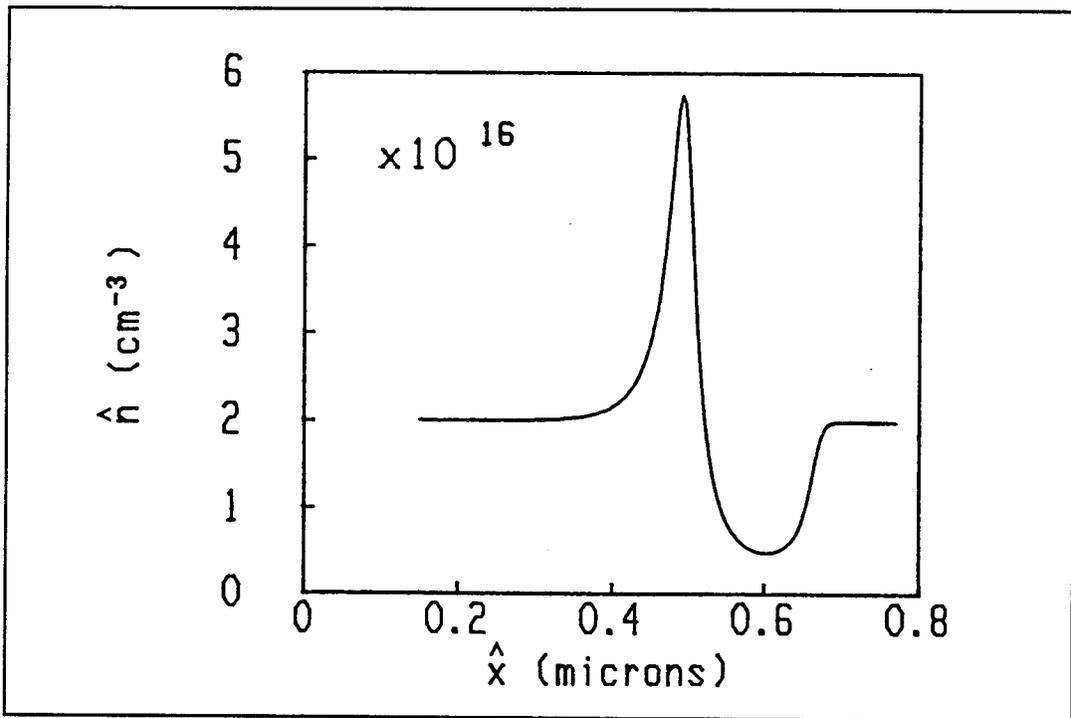


figure I-3: Profil apparent d'une S.H.J.

I-2 DETERMINATION DIRECTE DES PARAMETRES: METHODE DE KROEMERa) Principe

Dans le cas d'une hétérostructure, nous avons vu que les formules (I-1) et (I-2) ne permettaient d'obtenir qu'un profil apparent ( $\widehat{n}(\widehat{x})$ ). L'objet de la méthode de Kroemer[5] est de relier celui-ci à la densité de charges réelle ( $n_0(x)$ ) de l'hétérostructure à l'équilibre, en utilisant les propriétés des moments d'ordre zéro et d'ordre un de la concentration de porteurs. La démonstration complète se trouvant dans l'annexe I-A, on n'indique ici que le principe de la méthode.

Soit une H.J. définie par (figure I-4):

- $x_1$ : la position de l'interface
- $N_c(x)$ : la densité effective d'états dans la bande de conduction
- $N_D(x)$ : le dopage
- $\Delta E_c$ : la D.B.C.
- $\sigma_1$ : la densité superficielle de charges fixes à l'interface (on ne tiendra pas compte ici de défauts dont l'état de charge peut varier au cours de la mesure C(V) (niveaux profonds) )

La figure I-5 montre le profil apparent obtenu sur une telle structure. On remarque qu'il existe deux points  $\widehat{x}_1$  et  $\widehat{x}_2$  de part et d'autre desquels la concentration apparente,  $\widehat{n}(\widehat{x})$ , est égale au dopage,  $N_D(\widehat{x})$ . On montre alors que:

$$\int_{\widehat{x}_1}^{\widehat{x}_2} n_0(x) dx = \int_{\widehat{x}_1}^{\widehat{x}_2} \widehat{n}(x) dx \quad \text{I-8}$$

et:

$$\int_{\widehat{x}_1}^{\widehat{x}_2} x n_0(x) dx = \int_{\widehat{x}_1}^{\widehat{x}_2} x \widehat{n}(x) dx \quad \text{I-9}$$

Ces deux relations permettent de déterminer:

- D'une part la D.B., en écrivant de deux façons le potentiel électrostatique aux bornes de l'H.J. :

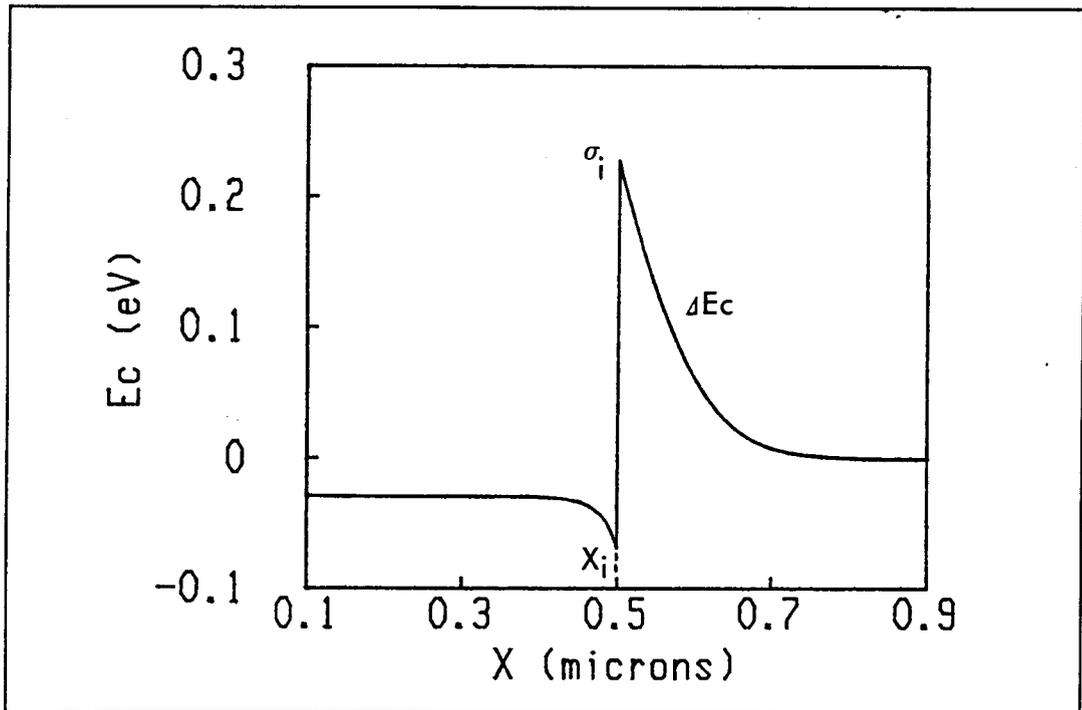


figure I-4: Bande de conduction d'une hétérojonction

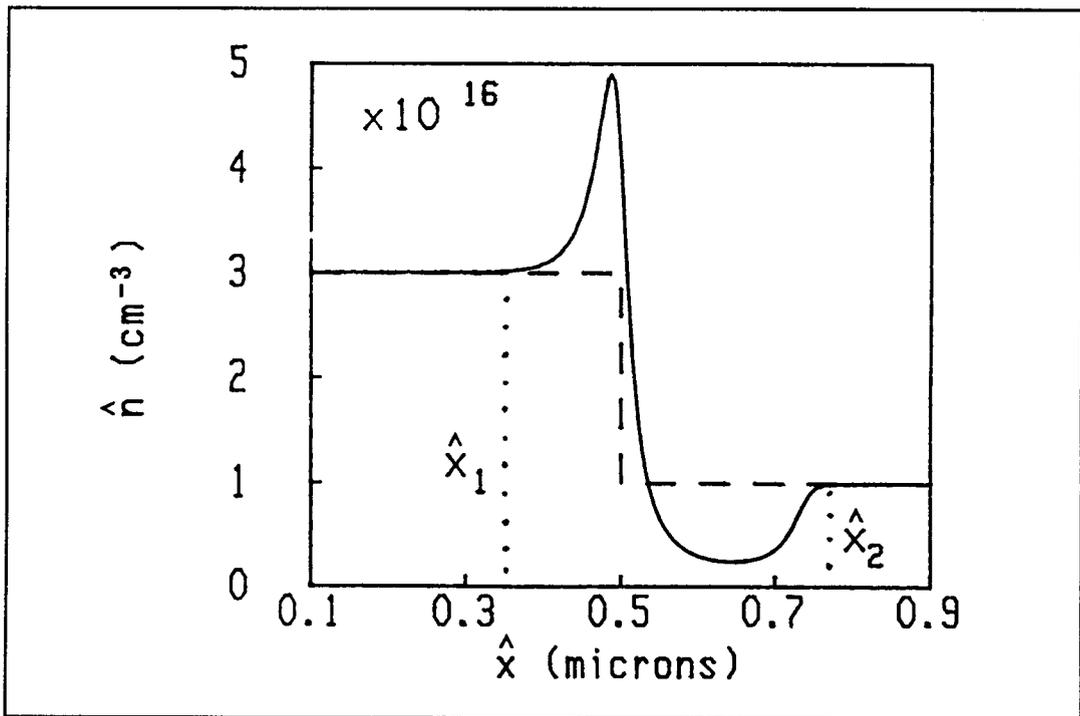


figure I-5: Profil apparent d'une S.H.J.

$$\Delta E_c = kT \text{Log} \left[ \frac{N_D(\hat{x}_1)N_C(\hat{x}_2)}{N_D(\hat{x}_2)N_C(\hat{x}_1)} \right] + \frac{e^2}{\epsilon} \int_{\hat{x}_1}^{\hat{x}_2} (N_D(x) - \hat{n}(x))(x - x_1) dx \quad \text{I-10}$$

- D'autre part, la densité superficielle de charges fixes à l'interface, en écrivant la neutralité de la S.H.J. à l'équilibre:

$$\sigma_1 = -e \int_{\hat{x}_1}^{\hat{x}_2} (N_D(x) - \hat{n}(x)) dx \quad \text{I-11}$$

où  $k$  est la constante de Boltzmann et  $T$  la température.

On voit donc que la connaissance du dopage et de la position de l'hétérojonction permet de remonter directement aux valeurs de  $\Delta E_c$  et  $\sigma_1$ . Le grand intérêt de cette méthode est sa simplicité de mise en oeuvre, puisqu'elle ne nécessite qu'une intégration numérique du profil apparent, mais nous allons voir qu'elle est fortement entachée d'imprécision.

### b) Analyse de la sensibilité

La détermination des paramètres ( $\Delta E_c, \sigma_1$ ) par la méthode de Kroemer est liée à la connaissance de la position de l'hétérojonction et du profil de dopage de l'échantillon. Or, par le profil apparent, on n'a pas accès au dopage près de l'hétérojonction (pour  $\hat{x}_1 < x < \hat{x}_2$ ). De plus, on détermine la position de l'interface ( $x_1$ ) par la position du pic du profil apparent ( $\hat{x}_1$ ), alors que la différence  $\hat{x}_1 - x_1$  peut être importante [6]. Nous allons analyser maintenant les erreurs induites par ces indéterminations.

Pour illustrer notre propos, nous utiliserons des profils apparents simulés sur lesquels nous appliquerons la méthode de Kroemer (le programme permettant d'obtenir ces profils sera présenté dans la partie suivante). Les caractéristiques des S.H.J. simulées sont résumées dans le tableau I-1. Dans tous les cas, la position de l'interface sera  $x_1 = 0.5\mu$ , la permittivité relative sera de 13 et la température de 300K.

Nom de la simulation	$\Delta E_c$ (eV)	$\sigma_1 / e$ (cm <sup>-2</sup> )	$N_D (x < x_1)$ (cm <sup>-3</sup> )	$N_D (x > x_1)$ (cm <sup>-3</sup> )
SHJ1 à SHJ3	0.3	+1 10 <sup>10</sup> à +1 10 <sup>11</sup>	1.5 10 <sup>16</sup>	5 10 <sup>15</sup>
SHJ4 à SHJ15	0.3	-5 10 <sup>9</sup> à -1 10 <sup>11</sup>	1.5 10 <sup>16</sup>	5 10 <sup>15</sup>
SHJ16	0.3	0	2 10 <sup>16</sup>	2 10 <sup>16</sup>

Tableau I-1

\* Erreur due à la position de l'interface :

Leu et Forrest [6] ont montré que la position apparente  $\hat{x}_1$  dépendait de la densité de charges à l'hétérojonction. On a représenté sur la figure I-6 l'erreur  $\delta x_1 = \hat{x}_1 - x_1$  en fonction de  $\sigma_1$ . On voit que celle-ci augmente fortement avec les densités superficielles négatives. En effet, les charges négatives ont tendance à repousser les électrons et donc à les éloigner de l'hétérojonction. Le barycentre des charges ( $\hat{x}_1$ ) diffère alors d'autant plus de la position de l'interface ( $x_1$ ).

Supposons que l'on commette une erreur  $\delta x_1 = \hat{x}_1 - x_1$  sur la position de l'hétérojonction. Celle-ci se répercute sur les paramètres de deux façons :

1. par une dépendance directe à  $x_1$ : les formules I-5 et I-6 donnent :

$$\delta_1(\Delta E_c) = \frac{e}{\epsilon} \sigma_1 \delta x_1 \quad \text{I-12}$$

$$\delta_1(\sigma_1) = 0 \quad \text{I-13}$$

2. par l'intermédiaire du dopage: en effet, pour calculer les paramètres, on doit faire l'hypothèse suivante:

$$N_D(x) = N_D(\hat{x}_1) \text{ pour } \hat{x}_1 < x < x_1$$

$$N_D(x) = N_D(\hat{x}_2) \text{ pour } x_1 < x < \hat{x}_2$$

Donc, si cette hypothèse est vérifiée, l'erreur sera :

$$\delta_2(\Delta E_c) = \frac{e^2}{2\epsilon} (N_D(\hat{x}_2) - N_D(\hat{x}_1)) (\delta x_1)^2 \quad \text{I-14}$$

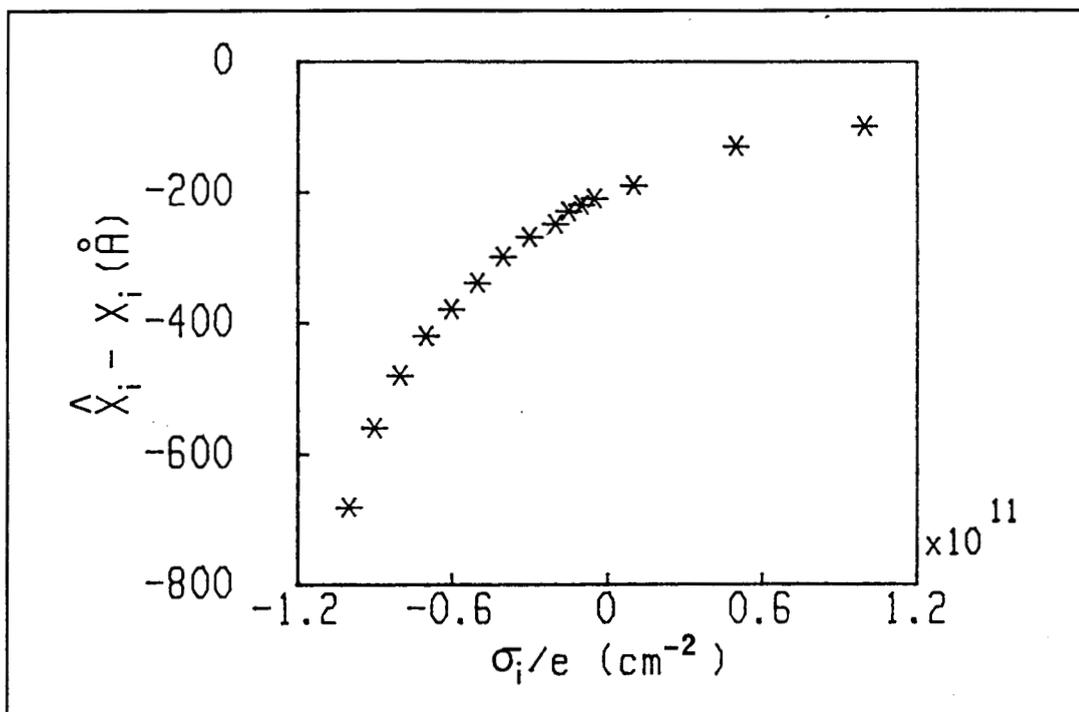


figure I-6: Erreur sur la position de l'interface en fonction de la densité de charges à l'hétérojonction

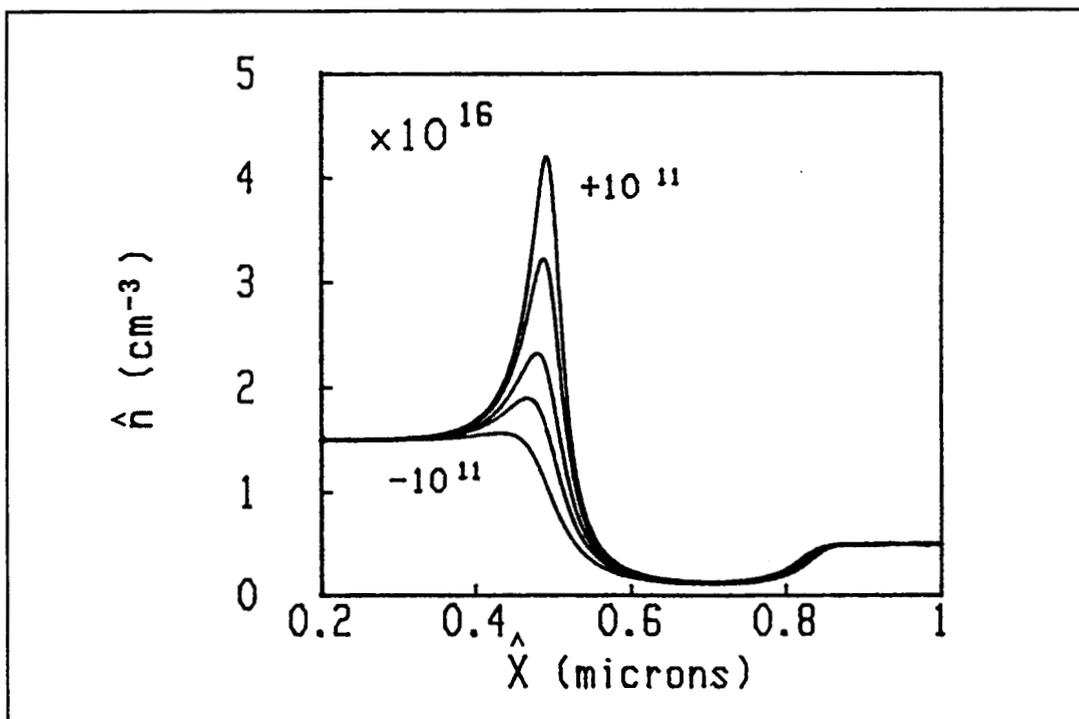


figure I-7: Profils apparents pour différentes valeurs de  $\sigma_1$ : de  $-10^{11}$  à  $+10^{11} \text{e}^{-}/\text{cm}^3$

$$\delta_2(\sigma_1) = e (N_D(\hat{x}_2) - N_D(\hat{x}_1)) \delta x_1 \quad \text{I-15}$$

Finalement, on a par addition :

$$\delta(\Delta E_c) = \frac{e}{\epsilon} \left[ \sigma_1 \delta x_1 + e(N_D(\hat{x}_2) - N_D(\hat{x}_1)) \frac{(\delta x_1)^2}{2} \right] \quad \text{I-16}$$

$$\delta(\sigma_1) = e (N_D(\hat{x}_2) - N_D(\hat{x}_1)) \delta x_1 \quad \text{I-17}$$

A l'aide des simulations SHJ1 à SHJ15 (figure I-7), on a représenté, sur la figure I-8, les erreurs sur les paramètres en fonction de la densité de charges à l'hétérojonction :

- Sur  $\Delta E_c$ , on observe que l'erreur peut être importante (jusqu'à 20% de la D.B.) pour des densités superficielles négatives.
- Sur  $\sigma_1$ , la courbe présente la même tendance mais l'erreur peut, dans ce cas, être supérieure à la valeur de la densité de charges elle-même. De plus, on peut remarquer que, même pour une interface parfaite ( $\sigma_1=0$ ), la méthode de Kroemer donnera une densité non négligeable ( $\sim 2.10^{10} \text{cm}^{-2}$ ).

\* Erreur due au dopage :

Supposons que l'on commette une erreur moyenne  $\delta N_D$  sur le dopage entre  $\hat{x}_1$  et  $\hat{x}_2$ . Les formules I-10 et I-11 nous donnent alors les erreurs sur les paramètres :

$$\delta(\Delta E_c) = \frac{e^2}{2\epsilon} \left[ (\hat{x}_2 - x_1)^2 + (\hat{x}_1 - x_1)^2 \right] \delta N_D \quad \text{I-18}$$

$$\delta(\sigma_1) = e (\hat{x}_2 - \hat{x}_1) \delta N_D \quad \text{I-19}$$

Pour la simulation SHJ16 (figure I-9), on obtient :  $\hat{x}_1=0.3\mu$  et  $\hat{x}_2=0.7\mu$ , et donc :

$$\frac{\delta(\Delta E_c)}{\Delta E_c} = 3.7 \times \frac{\delta N_D}{N_D} \quad \text{I-20}$$

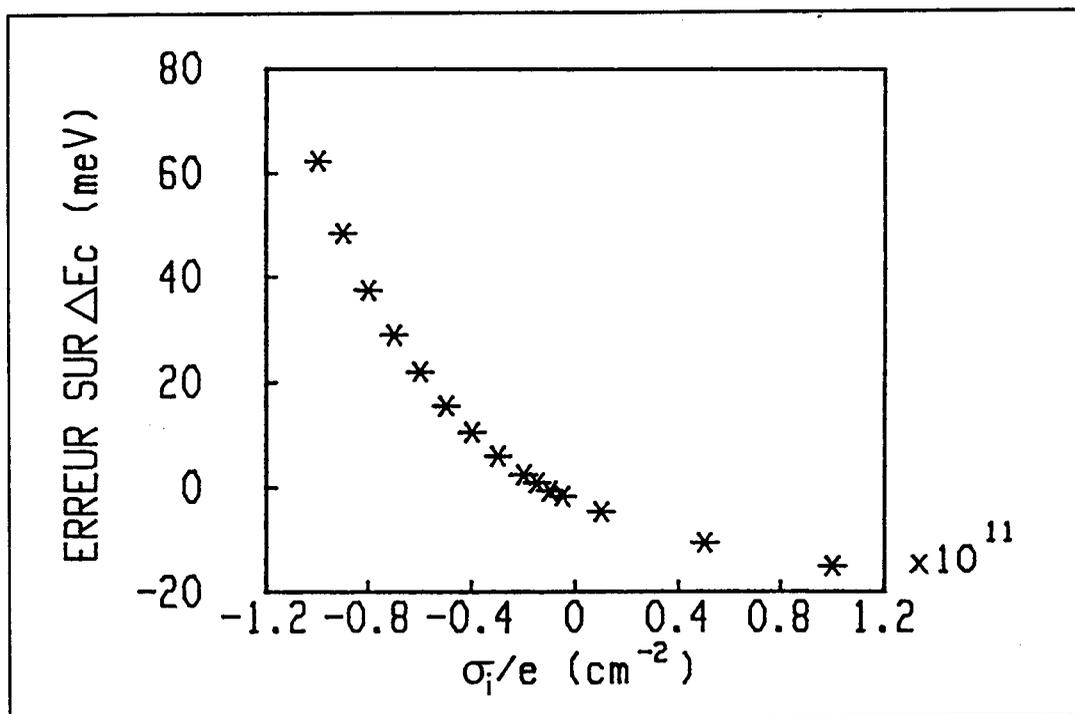


figure I-8: Erreur sur la D.B.C.

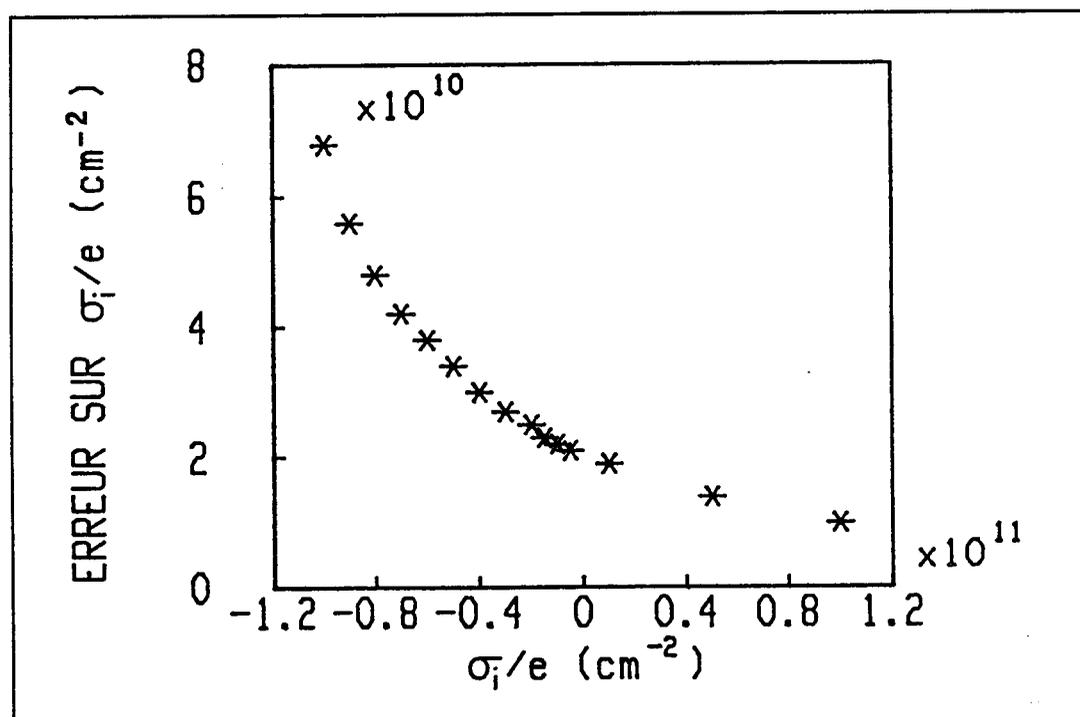


figure I-8: Erreur sur la densité superficielle de charges

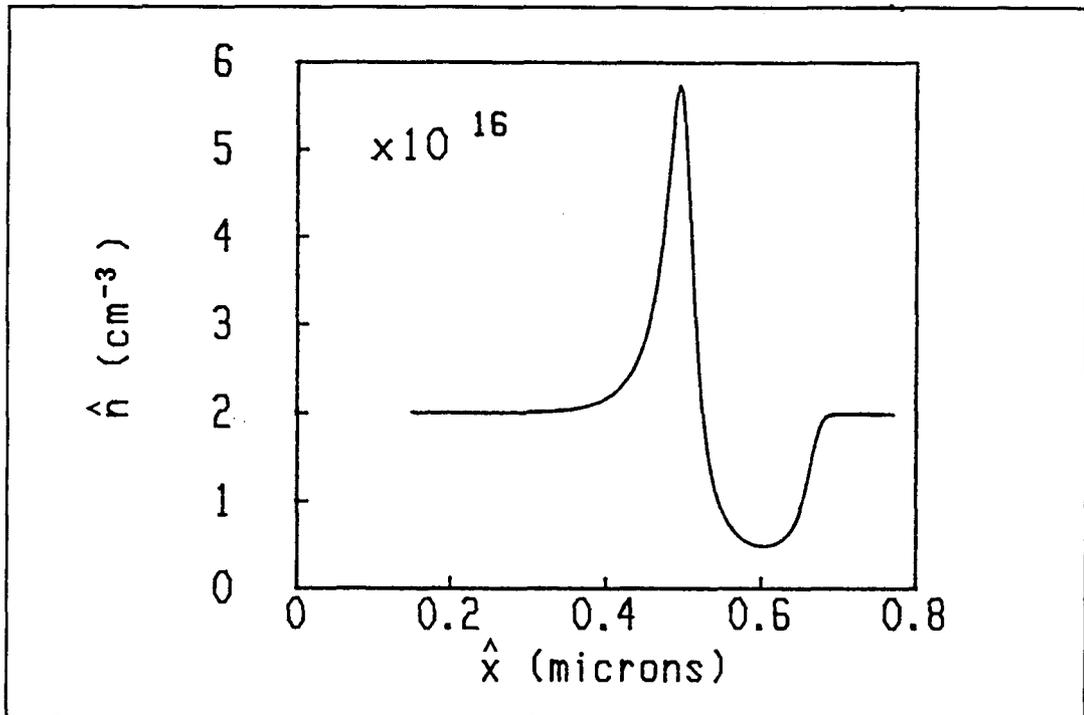


figure I-9: Profil apparent: simulation SHJ16

On voit donc que l'erreur relative sur le dopage se répercute avec un facteur quatre sur la détermination de la D.B. . Si  $\delta N_D = 10^{15} \text{ cm}^{-2}$  (5%), on a:

$$\delta(\Delta E_c) = 55 \text{ meV (19\%)} \quad \text{I-21}$$

Pour la même indétermination sur le dopage ,on obtient :

$$\frac{\delta(\sigma_1)}{e} = 4 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-2} \quad \text{I-22}$$

Les études précédentes ne portent que sur quelques exemples de S.H.J. car une étude générale serait beaucoup trop longue étant donnée la diversité des paramètres. Cependant, elles mettent en évidence des erreurs importantes sur la détermination de la D.B. . Pour la densité superficielle de charges, la situation est encore plus grave puisque les erreurs sont de l'ordre de grandeur des valeurs de  $\sigma_1$  communément obtenues [5,7]. On en déduit que la détermination de ce paramètre par

la méthode de Kroemer est impossible.

Il faut noter que Leu et Forrest [6] ont proposé une méthode permettant de prendre en compte l'erreur sur la position de l'hétérojonction. Cependant, elle nécessite l'utilisation de simulations du profil apparent, ce qui alourdit l'analyse. Il est alors tout aussi simple d'ajuster le profil expérimental par les simulations, et ainsi extraire les paramètres de l'hétérostructure.

### c) Adaptation de la méthode à la structure de l'échantillon

Jusqu'alors, nous n'avons appliqué la méthode de Kroemer qu'à des S.H.J. car il s'agit, en fait, de la seule hétérostructure adaptée. En effet, supposons maintenant que notre échantillon comporte plusieurs hétérojonctions, et soient  $\Delta E_{ck}$ ,  $x_{1k}$  et  $\sigma_{1k}$  la D.B.C., la position et la densité superficielle de la  $k^{\text{ième}}$  interface. Les formules I-10 et I-11 peuvent être étendues à ce cas :

$$\sum_k \Delta E_{ck} = kT \text{Log} \left[ \frac{N_D(\hat{x}_1) N_C(\hat{x}_2)}{N_D(\hat{x}_2) N_C(\hat{x}_1)} \right] + \frac{e^2}{\epsilon} \int_{\hat{x}_1}^{\hat{x}_2} (N_D(x) - \hat{n}(x)) x dx - \frac{1}{\epsilon} \sum_k \sigma_{1k} x_{1k} \quad \text{I-23}$$

$$\sum_k \sigma_{1k} = -e \int_{\hat{x}_1}^{\hat{x}_2} (N_D(x) - \hat{n}(x)) dx \quad \text{I-24}$$

On voit sur l'équation I-23 qu'on ne pourra déterminer que la somme des D.B., à condition de négliger les densités superficielles de charges qu'on ne peut déterminer individuellement puisque la formule I-24 n'en donne que la somme. De plus, si on prend l'exemple d'un S.P.Q. (figure I-10), il est évident que, sur cette structure, on ne peut déterminer la D.B. puisque celle-ci va intervenir, dans la formule I-23 deux fois et avec des signes opposés. Plus généralement, la détermination de la D.B. ne sera possible que sur des hétérostructures ayant un nombre impair d'hétérojonctions, ou qui seront composées de plus de deux matériaux différents (on pourra obtenir alors la différence entre deux D.B.). Cependant, dans ce cas, la méthode sera encore moins précise. Notons enfin qu'il est possible de déterminer la moyenne des densités superficielles de l'ensemble des interfaces par la formule I-24.

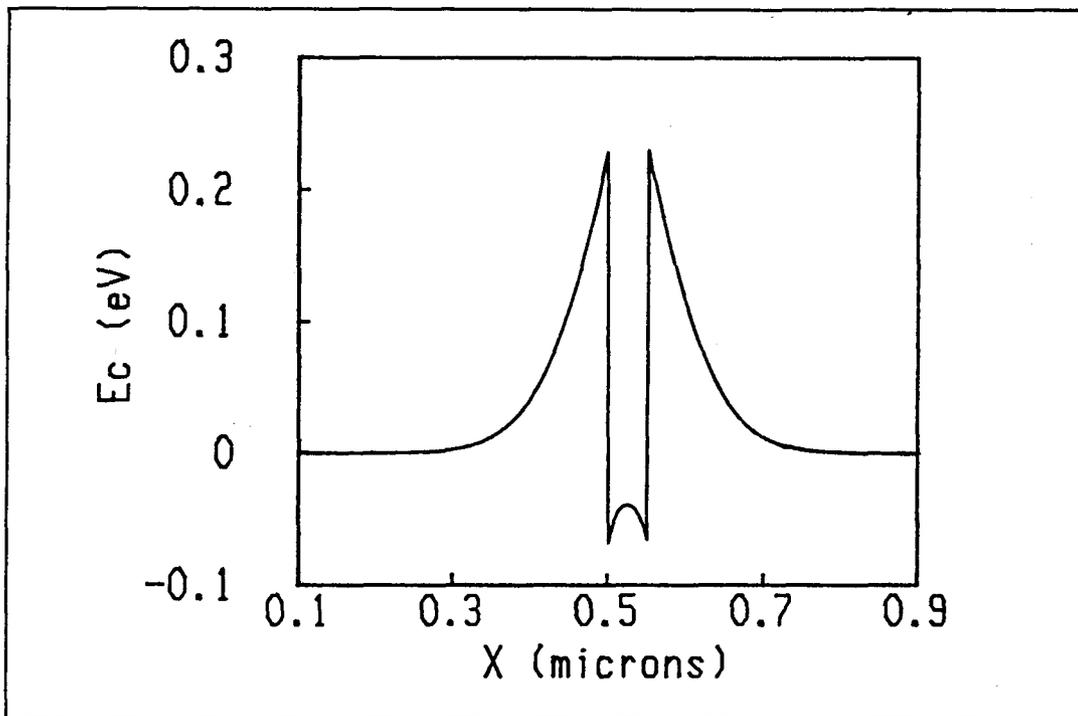


figure I-10: Bande de conduction d'un S.P.Q.

Nous avons donc montré que la méthode de Kroemer, bien qu'attractive par sa simplicité, était fort imprécise et qu'elle était peu applicable à des hétérostructures possédant plus d'une hétérojonction. En réalité, ces faiblesses peuvent être attribuées au fait que cette technique n'utilise qu'une faible partie de l'information contenue dans le profil apparent puisque celle-ci ne se réduit pas aux moments d'ordre zéro et un. Il faut donc, pour permettre une analyse plus fine, utiliser la simulation de profils pour ajuster les paramètres sur le profil expérimental. C'est l'objet de la méthode présentée maintenant.

### I-3 DETERMINATION INDIRECTE PAR SIMULATION DE C(V)

#### a) Principe

Plusieurs méthodes ont été proposées, permettant de simuler une caractéristique  $C(V)$  sur une hétérostructure. Leur principe est toujours le même: on choisit arbitrairement les paramètres de l'hétérostructure, puis on résout numériquement l'équation de Poisson le long de la structure pour différentes tensions appliquées. Les formules I-1 et I-2 permettent alors d'obtenir le profil apparent simulé (P.A.S.), que l'on compare au profil apparent expérimental (P.A.E.). En cas de désaccord entre ces deux profils, on modifie les paramètres introduits dans la simulation de manière à se rapprocher de l'expérience et on peut ainsi déterminer les paramètres réels de l'échantillon.

Cependant, ces méthodes diffèrent par la procédure de résolution de l'équation de Poisson. En effet, celle-ci étant du second ordre, il faut se fixer des conditions initiales sur le potentiel et sur le champ électrique, choix qui peut se faire de deux façons. La plupart des auteurs [4,8,9] fixe le potentiel de surface (d.d.p. appliquée entre l'interface métal-semi-conducteur et le substrat semi-infini) et suppose une valeur du champ électrique en ce point. Ils intègrent alors l'équation de Poisson et vérifient si la solution trouvée satisfait aux conditions aux limites dans le substrat. En cas de désaccord, on choisit une nouvelle valeur du champ de surface et on recommence l'opération. Cette itération se poursuit jusqu'à ce que la précision désirée sur les conditions aux limites soit atteinte. Cette technique demande donc de longs temps de calcul et, de plus, ne converge que si la valeur initiale choisie pour le champ électrique est proche de la valeur réelle [10]. Pour éviter ces problèmes, nous avons utilisé une méthode plus astucieuse introduite par Missous et Rhoderick [10]. Il s'agit d'intégrer l'équation de Poisson du substrat vers la surface, ce qui permet d'éviter toute itération sur les conditions initiales.

Nous présentons, ici, cette technique dans le cas d'une S.H.J., l'extension à des structures plus complexes étant évidente. La S.H.J. est composée de deux régions: l'une près de la surface (région 2), l'autre semi-infinie (région 1). Les paramètres associés à chaque

région sont:

- $N_{Dk}$ : dopage dans la région k (k=1 ou 2)
- $n_{ik}$ : concentration intrinsèque d'électrons dans la région k
- $L_{Dk}$ : longueur de Debye intrinsèque dans la région k
- $N_{Ck}$ : densité effective d'états dans la bande de conduction pour la région k
- $\epsilon_k$ : permittivité diélectrique de la région k
- $E_i$ : niveau de Fermi intrinsèque
- $V_p$ : potentiel de surface (d.d.p. appliquée)
- $Q$ : charge stockée dans la structure par unité de surface
- $E_F$ : niveau de Fermi, supposé constant le long de la structure

L'équation de Poisson dans la région k s'écrit:

$$\frac{d^2V}{dx^2} = -\frac{e}{\epsilon} (N_{Dk} - n) \quad \text{I-25}$$

On définit les variables  $u_k$  et  $u_{Bk}$  par:

$$u_k = (E_F - E_i)/kT \quad \text{I-26}$$

$$N_{Dk} = n_{ik} \exp(u_{Bk}) \quad \text{I-27}$$

L'équation (I-25) se réécrit alors:

$$\frac{d^2u_k}{dx^2} = \frac{1}{2L_{Dk}^2} (e^{u_k} - e^{u_{Bk}}) \quad \text{I-28}$$

Sachant qu'à l'infini le champ et le potentiel s'annulent, on peut intégrer une fois dans la région 1:

$$\left(\frac{du_1}{dx}\right)^2 = \frac{1}{L_{D1}^2} [e^{u_1} - e^{u_{B1}} - (u_1 - u_{B1})e^{u_{B1}}] \quad \text{I-29}$$

puis dans la région 2:

$$\left(\frac{du_2}{dx}\right)^2 = \frac{1}{L_{b2}^2} [e^{u_2} - e^{u_2(x_1)} - (u_2 - u_2(x_1))e^{u_{B2}}] + \left(\frac{du_2}{dx}\right)_{(x=x_1)}^2 \quad \text{I-30}$$

De plus, les conditions de raccordement à l'interface ( $x=x_1$ ) pour le potentiel et le champ entraînent:

$$u_1(x_1) - u_2(x_1) = \text{Log} \left( \frac{N_{c1} n_{i2}}{N_{c2} n_{i1}} \right) - \frac{\Delta E_c}{kT} \quad \text{I-31}$$

$$\text{où } \Delta E_c = E_{c1}(x_1) - E_{c2}(x_1)$$

$$\epsilon_1 \left(\frac{du_1}{dx}\right)_{(x=x_1)} + \frac{e\sigma_1}{kT} = \epsilon_2 \left(\frac{du_2}{dx}\right)_{(x=x_1)} \quad \text{I-32}$$

Il suffit alors d'utiliser  $u_1(x_1)$  comme paramètre: on choisit une valeur de celui-ci et on obtient  $\left(\frac{du_1}{dx}\right)_{(x=x_1)}$  par l'équation I-29, puis

$u_2(x_1)$  et  $\left(\frac{du_2}{dx}\right)_{(x=x_1)}$  par I-31 et I-32. Il reste alors à intégrer l'équation I-30 entre  $x_1$  et 0, puis à calculer:

$$V_p = \frac{kT}{e} \left( u_2(0) - u_{B1} + \text{Log} \left( \frac{N_{c1} n_{i2}}{N_{c2} n_{i1}} \right) \right) \quad \text{I-33}$$

$$Q = - \frac{\epsilon_2 kT}{e} \left(\frac{du_2}{dx}\right)_{(x=0)} \quad \text{I-34}$$

En faisant varier le paramètre  $u_1(x_1)$ , on obtient ainsi la fonction  $Q(V_p)$  et la capacité par unité de surface:

$$C = - \frac{dQ}{dV_p} \quad \text{I-35}$$

et le P.A.S. par:

$$\hat{n}(\hat{x}) = - \frac{2}{e\epsilon_m} \left[ \frac{dC^{-2}}{dV_p} \right]^{-1} \quad \text{I-36}$$

avec:

$$\hat{x} = \frac{\epsilon_m}{C}$$

où  $\epsilon_m$  est la constante diélectrique utilisée pour calculer le P.A.E. .

Cette méthode ne nécessite donc qu'une seule itération pour déterminer le paramètre  $u_1(x_1)$  correspondant au premier potentiel  $V_p$  désiré, alors que les méthodes précédentes utilisaient une itération pour chaque  $V_p$ . On gagne ainsi un temps considérable pour simuler le  $C(V)$ .

De plus, pour simuler une hétérostructure comprenant plus d'une hétérojonction, il suffit de prendre, comme paramètre ajustable, la valeur de la variable  $u$  à la dernière interface et d'utiliser les conditions de passage pour chaque interface comprise entre cette dernière et la surface.

Nous avons développé un programme utilisant cette méthode et permettant de simuler le  $C(V)$  pour n'importe quel type d'hétérostructure. Les figures I-11 à I-13 présentent les résultats de simulation pour trois structures différentes: un S.P.Q., une S.B. et un M.P.Q. . Deux observations peuvent être faites, montrant que le profil apparent est une image plus ou moins déformée du profil réel de la structure à l'équilibre:

- A une zone d'accumulation de porteurs correspond un plateau sur le  $C(V)$  et un pic sur le profil apparent (cas d'un puits de potentiel).

- A une zone de désertion correspond une variation rapide du  $C(V)$  et une vallée dans le profil apparent (cas d'une barrière de potentiel).

#### b) Méthode systématique de détermination des paramètres:

##### cas d'une S.H.J.

Comme nous l'avons souligné au paragraphe I-2, un P.A. obtenu par  $C(V)$  contient intrinsèquement plus d'informations que ses seuls moments d'ordre zero et un. On peut donc s'attendre à ce que la méthode présentée ici soit plus précise que la méthode de Kroemer. Cependant, le nombre d'inconnues ( $x_1, N_p, \sigma_1, \Delta E_c$ ) reste toujours aussi

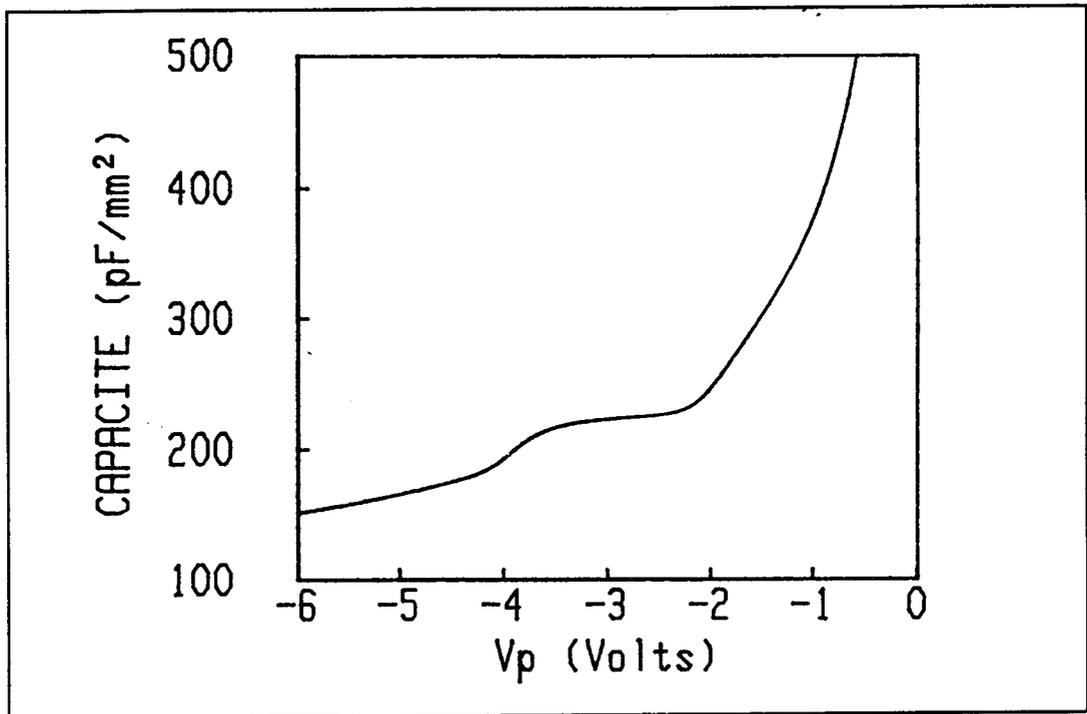


figure I-11: Caractéristique C(V) d'un S.P.Q.

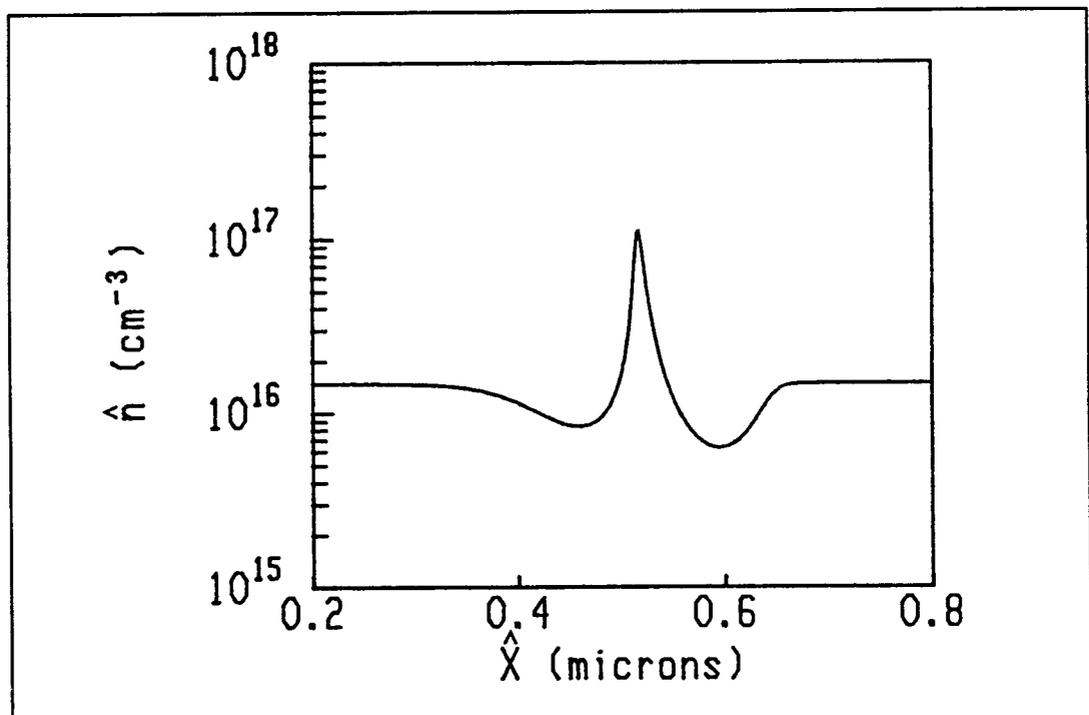


figure I-11: Profil apparent d'un S.P.Q.

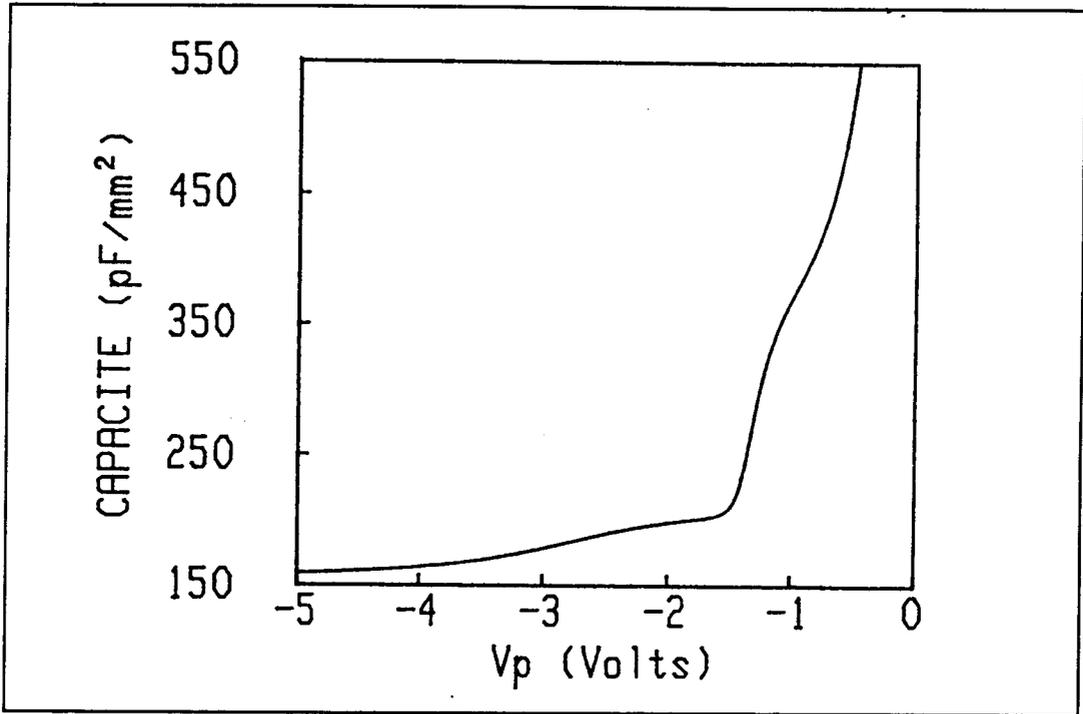


figure I-12: Caractéristique C(V) d'une S.B.

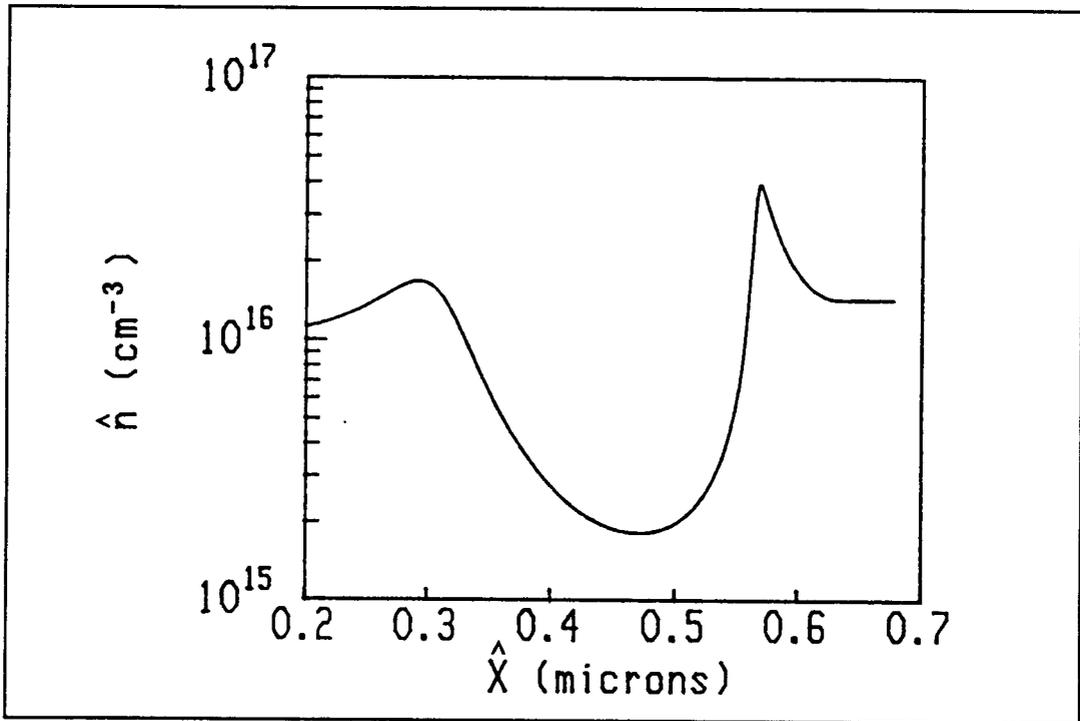


figure I-12: Profil apparent d'une S.B.

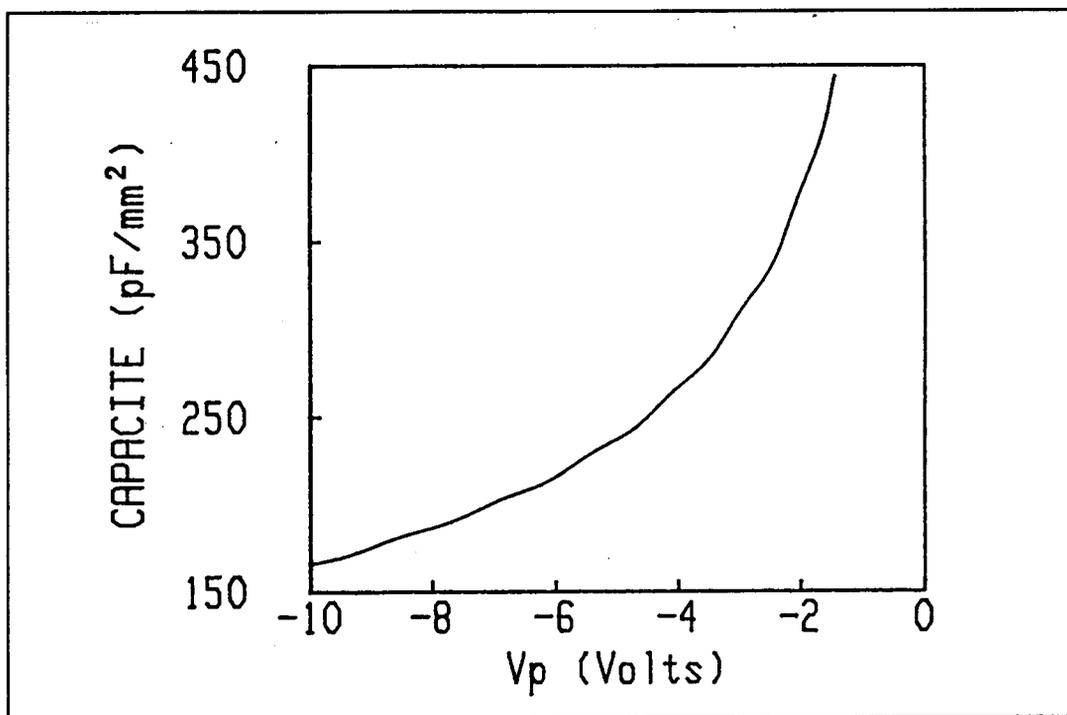


figure I-13: Caractéristique C(V) d'un M.P.Q.

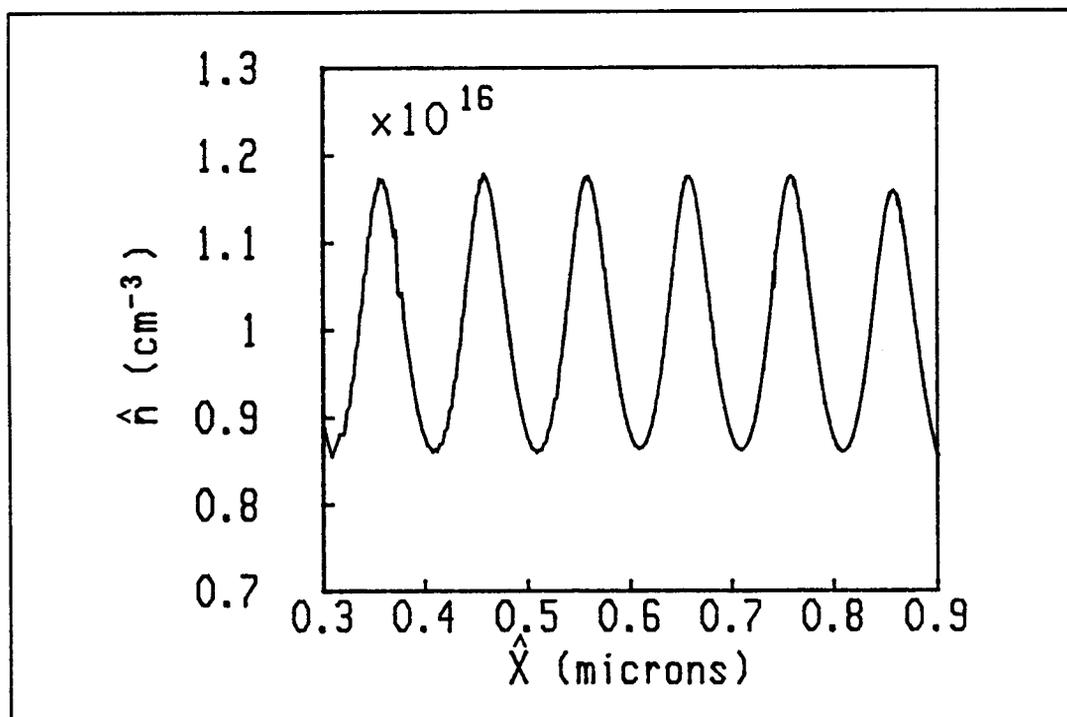


figure I-13: Profil apparent d'un M.P.Q.

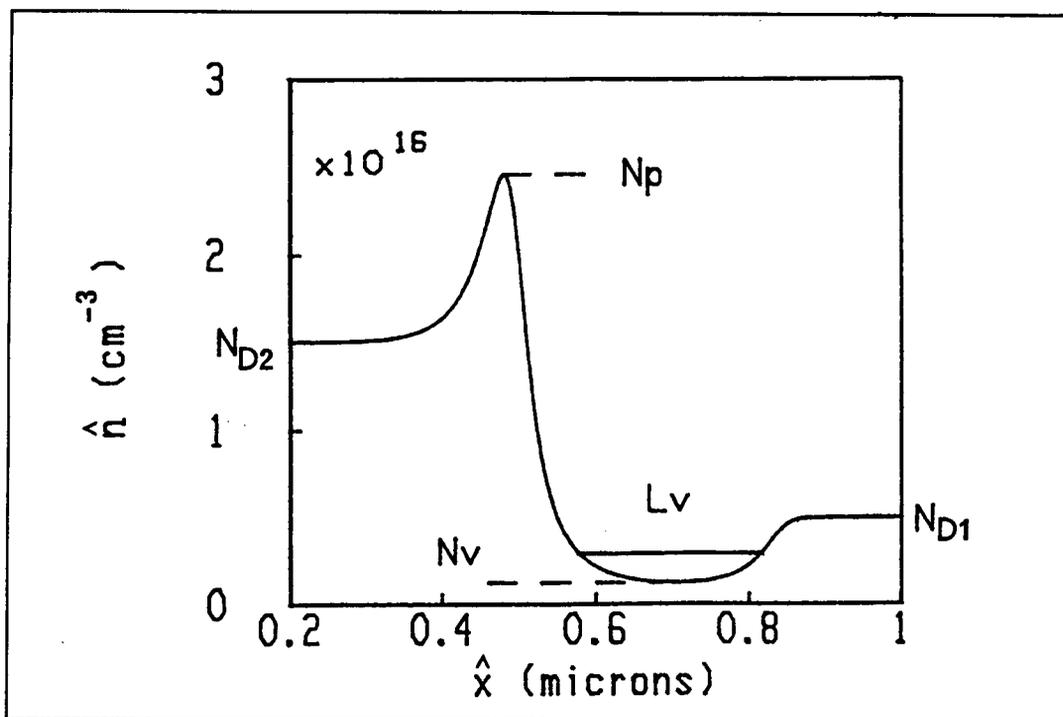


figure I-14: Profil apparent de l'"échantillon"

important et il faut étudier la possibilité de les déterminer de façon indépendante. Pour comparer notre méthode à celle de Kroemer, on utilisera un exemple de S.H.J. (appelée "échantillon") dont les paramètres sont ceux de la simulation SHJ1 (tableau I-1) avec  $\sigma_1=0$ . Nous nous placerons dans la situation d'un expérimentateur qui obtient, par un C(V) sur cette structure, le profil apparent de la figure I-14 (appelé "profil expérimental"). Nous devons alors réaliser des simulations pour différentes valeurs des paramètres et les comparer au "profil expérimental". Étudions alors l'influence de ces paramètres sur le P.A. .

\* Influence de la position de l'interface :

Nous avons vu, dans le paragraphe I-2, qu'une imprécision sur la position de l'interface ( $x_1$ ) occasionnait de graves erreurs dans la détermination des paramètres par la méthode de Kroemer. Par simulation, on montre au contraire qu'une variation de  $x_1$  ne fait que décaler le P.A. sans changer sa forme. On s'affranchit donc ici d'une source importante d'erreurs. Cette constatation nous permettra en effet de déterminer  $\Delta E_c$  et  $\sigma_1$  indépendamment de  $x_1$ , grâce à la méthode

que nous présentons maintenant.

\* Précision de la méthode :

Pour commencer, nous supposerons que l'on connaît parfaitement le dopage de l'échantillon. Nous définirons alors un P.A. par trois de ses caractéristiques (figure I-14) :

- l'amplitude du pic :  $N_p$  ( $\text{cm}^{-3}$ )
- l'amplitude de la vallée :  $N_v$  ( $\text{cm}^{-3}$ )
- la largeur à mi-hauteur de la vallée,  $L_v$ , définie par :

$$L_v = \hat{x}_{v2} - \hat{x}_{v1} \quad \text{avec} \quad \hat{n}(\hat{x}_{v2}) = \hat{n}(\hat{x}_{v1}) = \frac{N_{D1} + N_v}{2}$$

Ces termes ont l'avantage d'être indépendants de  $x_1$ , et nous pouvons donc, par simulation, étudier leur évolution en fonction de  $\Delta E_c$  et  $\sigma_1$ . On trace alors (figure I-15 à I-17) leur dépendance à  $\sigma_1$  pour différentes valeurs de  $\Delta E_c$ . On détermine ensuite les valeurs de ces caractéristiques pour le "profil expérimental" :

- $N_v = (1.24 \pm .1) 10^{15} \text{ cm}^{-3}$
- $N_p = (2.46 \pm .1) 10^{16} \text{ cm}^{-3}$
- $L_v = (.244 \pm .01) \mu\text{m}$

Les précisions ci-dessus ont été évaluées sur la base du dispositif expérimental de notre laboratoire et du bruit numérique qu'engendre le calcul du P.A. à partir du C(V).

On peut alors, pour chacune des caractéristiques et pour chaque valeur de  $\Delta E_c$ , évaluer l'intervalle en  $\sigma_1$  à l'intérieur duquel on trouve la caractéristique égale à celle du "profil expérimental", à la précision près. On obtient ainsi, en fonction de  $\Delta E_c$ , trois bandes dont l'intersection représente l'ensemble des valeurs de  $\Delta E_c$  et  $\sigma_1$  que l'expérimentateur est susceptible de trouver au terme de son étude (figure I-18). On observe que la bande correspondant au paramètre  $L_v$  est beaucoup plus étroite que les autres. Ce terme, image de la désertion des porteurs dans le matériau à grande largeur de bande interdite, est donc le plus sensible aux paramètres introduits dans la simulation.

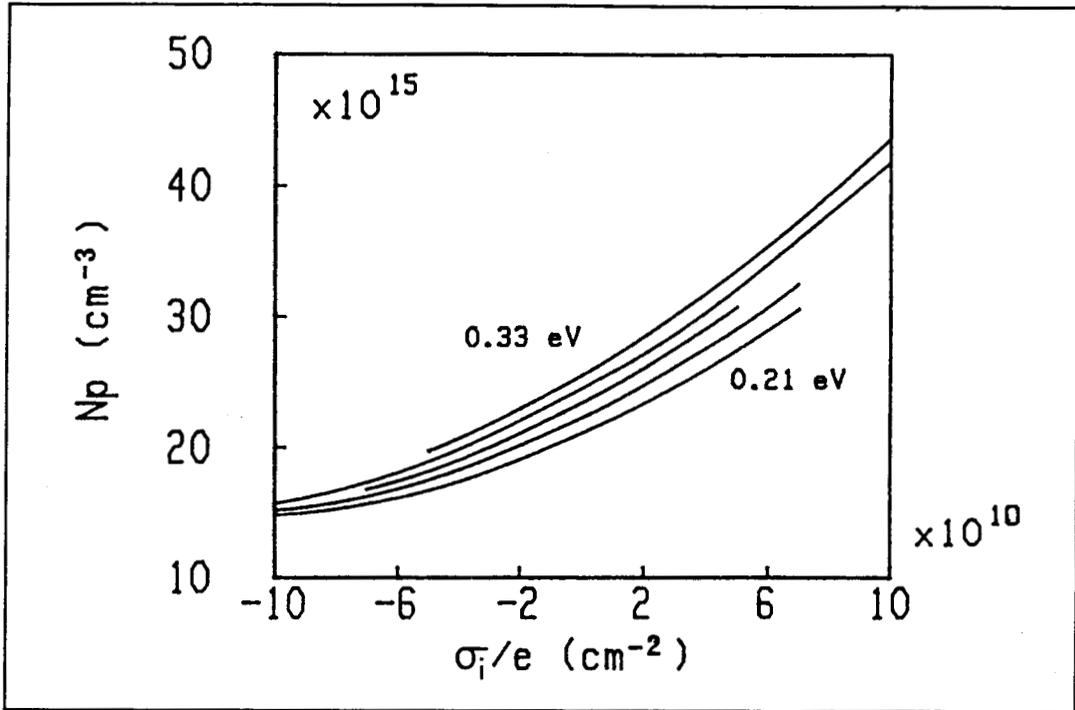


figure I-15: Influence de  $\sigma_1$  sur  $N_p$  pour différentes valeurs de la D.B.C.: 0.21, 0.24, 0.27, 0.30 et 0.33 eV

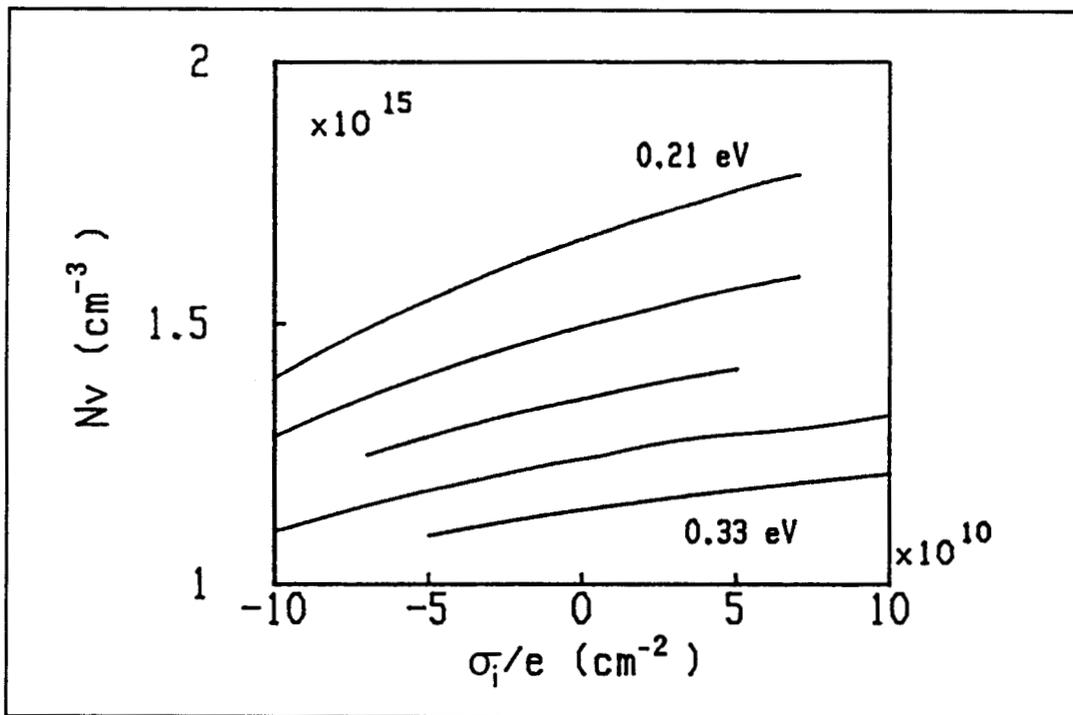


figure I-16: Influence de  $\sigma_1$  sur  $N_v$

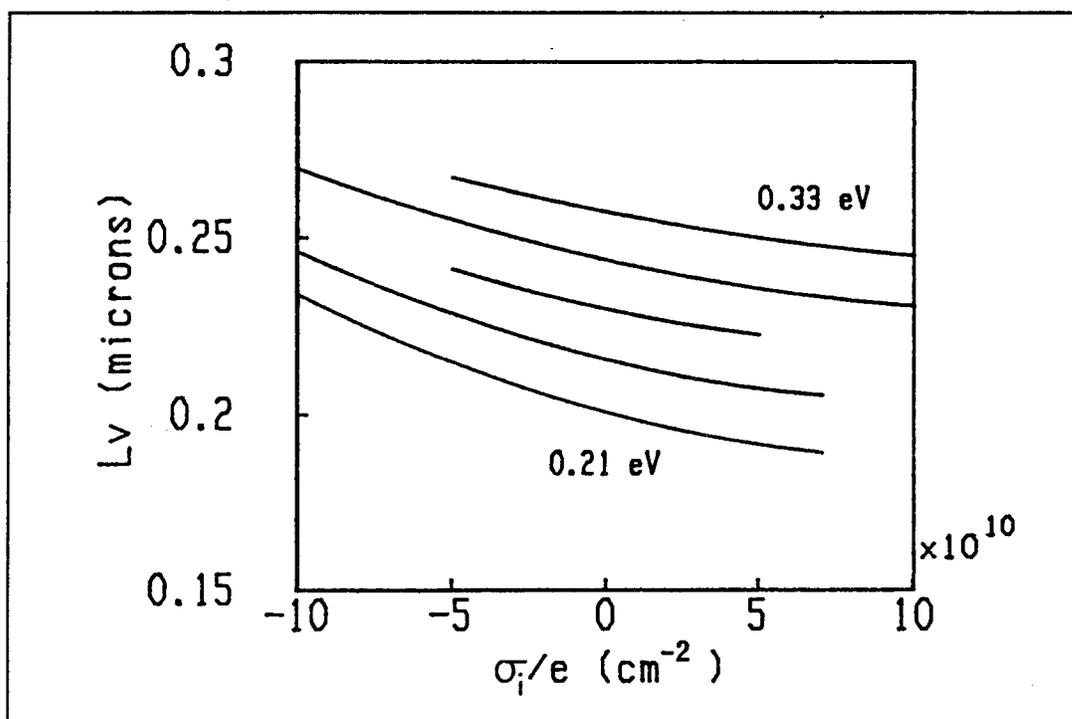


figure I-17: Influence de  $\sigma_1$  sur  $L_v$

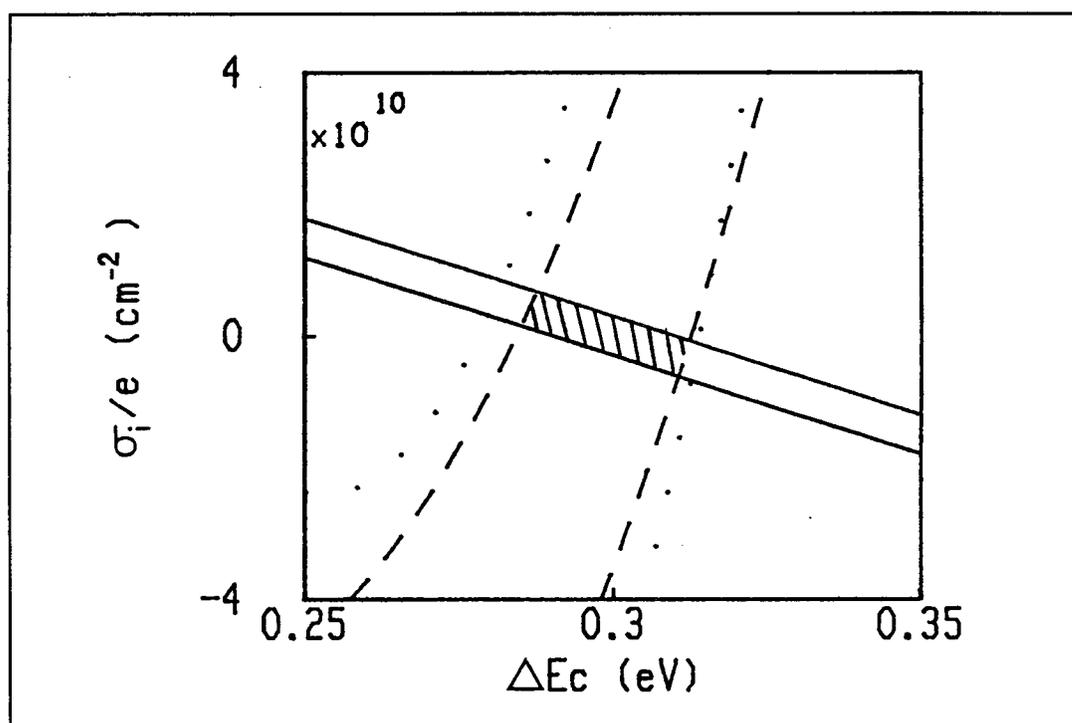


figure I-18: Détermination des paramètres: chaque bande correspond à l'imprécision sur les caractéristiques ( $\_$ :  $L_v$ ,  $--$ :  $N_p$ ,  $\dots$ :  $N_v$ ). L'espace hachuré donne le domaine de détermination des paramètres

Pour notre exemple on détermine :

$$\begin{aligned} - \Delta E_c &= (.3 \pm 0.015) \text{ eV} \\ - \frac{\sigma_1}{e} &= (0 \pm 7) 10^9 \text{ cm}^{-2} \end{aligned}$$

On vient ainsi de décrire une méthode systématique permettant d'obtenir les paramètres d'une S.H.J. ainsi que les intervalles de confiance de ces valeurs. De plus, notre exemple met en évidence la bonne précision de cette méthode puisqu'on obtient la D.B.C. à 5% et une erreur faible sur  $\sigma_1$  (une interface comprenant une densité superficielle de défauts inférieure à  $10^{10} \text{ cm}^{-2}$  est habituellement considérée comme "propre", c'est à dire proche du cas  $\sigma_1=0$ ).

\* Erreur due au dopage :

Contrairement à l'étude ci-dessus, nous allons examiner le cas où le dopage de l'échantillon est mal connu. La figure I-19 représente le profil de dopage réel (graduel) et celui supposé par l'expérimentateur (abrupt). Pour majorer l'erreur commise, nous avons volontairement choisi une situation très éloignée d'un profil abrupte [11], le but étant avant tout de comparer notre méthode à celle de Kroemer. En réalisant le même travail que précédemment, on obtient le nouveau domaine des paramètres  $\Delta E_c$  et  $\sigma_1$  :

$$\begin{aligned} - \Delta E_c &= (.27 \pm .025) \\ - \sigma_1/e &= (1 \pm 1) 10^{10} \text{ cm}^{-2} \end{aligned}$$

Par ailleurs, si on applique la méthode de Kroemer à cet "échantillon", en faisant la même erreur sur le dopage, on obtient :

$$\begin{aligned} - \Delta E_c &= .265 \text{ eV} \\ - \sigma_1/e &= -1 10^{10} \text{ cm}^{-2} \end{aligned}$$

C'est à dire une erreur du même ordre de grandeur.

En conclusion, notre méthode, bien qu'aussi sensible que la méthode de Kroemer à l'indétermination sur le dopage, permet de s'affranchir de l'indétermination sur la position de l'interface et, donc, de gagner en précision sur la détermination de la D.B.C. . De plus, contrairement à la méthode de Kroemer, elle peut s'appliquer à d'autres types d'hétérostructure que la S.H.J., comme nous le verrons

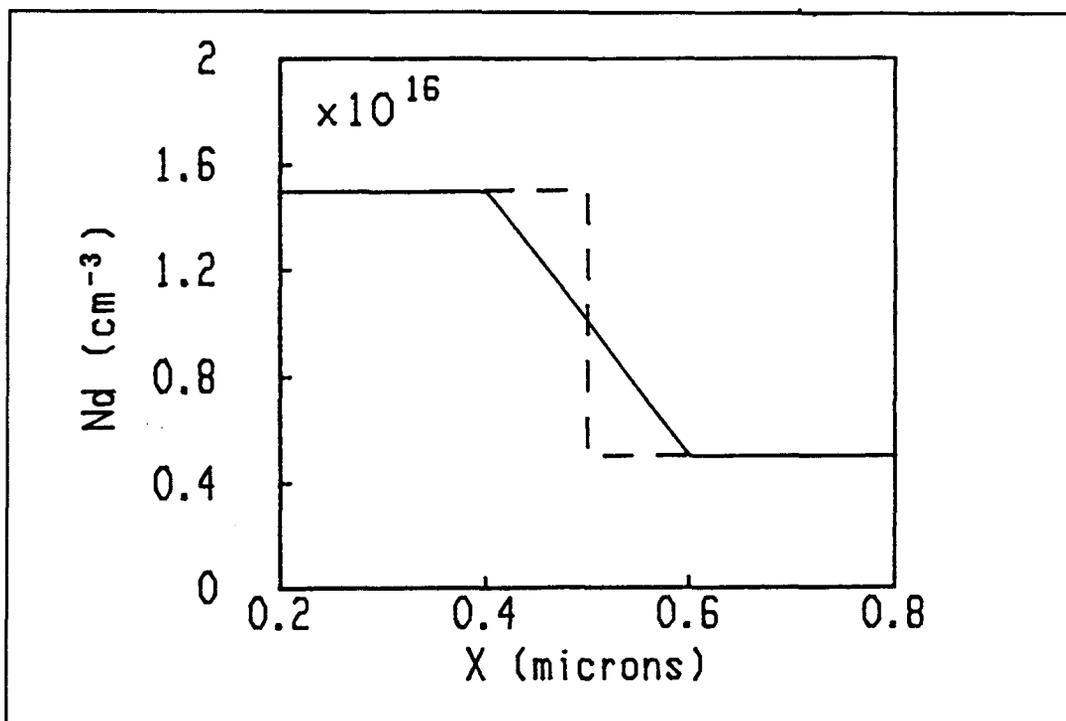


figure I-19: Profil de dopage (—:réel,---:supposé)

plus loin. La contrepartie de ces avantages est bien évidemment le temps puisque la méthode de Kroemer est quasiment directe alors que la nôtre nécessite une dizaine de simulations ainsi qu'un traitement sur chacune d'elles.

### c) Influence de la structure sur la détermination des paramètres

Nous avons montré au paragraphe I-2 que la méthode de Kroemer n'était applicable qu'aux seules S.H.J. . Nous allons maintenant étudier les limitations de notre méthode quant à la détermination des paramètres sur différentes structures. Pour cela, nous choisirons trois structures qui permettent de mettre en évidence les situations où notre méthode est performante ou non. Pour chacune d'elles, nous nous poserons donc la question : peut-on, par  $C(V)$ , déterminer les paramètres de façon fiable ?

#### \* La simple barrière :

Soit la S.B. de la figure I-20; dans un cas particulier, la réponse à notre question est simple: si la largeur de barrière est

assez grande pour permettre au potentiel de relaxer totalement entre les deux interfaces (figure I-21), la S.B. est alors équivalente à l'association de deux S.H.J. indépendantes. Le profil apparent obtenu (figure I-22) confirme ce résultat, et on est alors à même d'étudier indépendamment la première ou la deuxième hétérojonction de la même façon que dans le paragraphe I-3b. Dans ce cas, nous dirons que la structure n'est pas une "vrai S.B.". Pour estimer la largeur de barrière nécessaire à réaliser cette condition, on peut prendre deux fois la largeur de zone désertée correspondant à la hauteur de barrière. En négligeant le potentiel créé par l'accumulation, on a :

$$W_0 \approx \sqrt{\frac{2\epsilon\Delta E_c}{e^2 N_D}} \quad \text{I-38}$$

et la condition est alors :

$$L_B \geq 2W_0 \quad \text{I-39}$$

Pour fixer les idées, on obtient, avec une D.B.C. de 0.3 eV, un dopage de  $1 \cdot 10^{16} \text{ cm}^{-3}$  et une permittivité relative de 13,  $W_0 \approx 0.2 \mu$ .

On va maintenant étudier le cas où  $L_B \ll 2W_0$ , en utilisant une S.B. test vérifiant :

- dopage constant:  $N_D = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$
- permittivité relative:  $\epsilon_r = 10$
- largeur de barrière:  $L_B = 0.1 \mu$

Pour différentes valeurs de  $\Delta E_c$ , allant de 0.1 à 0.4 eV, nous avons simulé le P.A. de la structure (figure I-23). On observe alors que le P.A. ne dépend pas de la D.B.C. si celle-ci est supérieure à 0.15 eV et qu'il est donc impossible de la mesurer par C(V). Cette constatation peut s'expliquer assez facilement: en effet, puisque le potentiel varie peu dans la barrière ( $L_B \ll 2W_0$ ), la densité de porteurs libres dans celle-ci est approximativement constante et peut être estimée par :

$$n \approx N_D \exp\left(\frac{-\Delta E_c}{kT}\right) \quad \text{I-40}$$

Donc, pour une D.B.C. supérieure à 0.15 eV, on calcule une

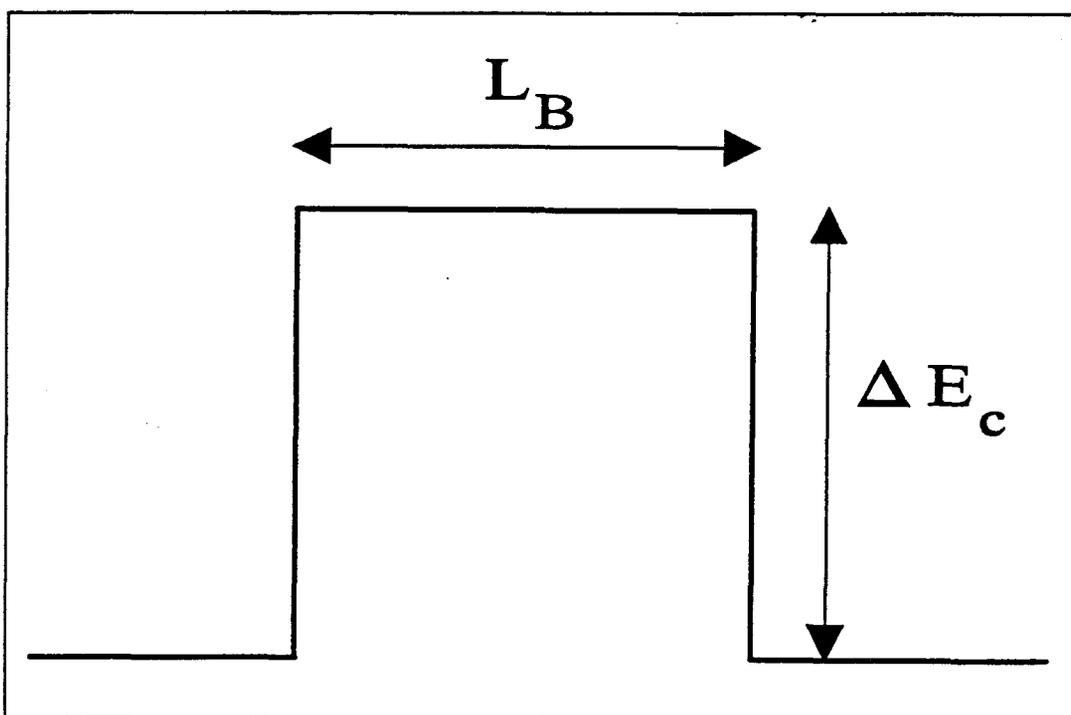


figure I-20: Représentation schématique d'une S.B.

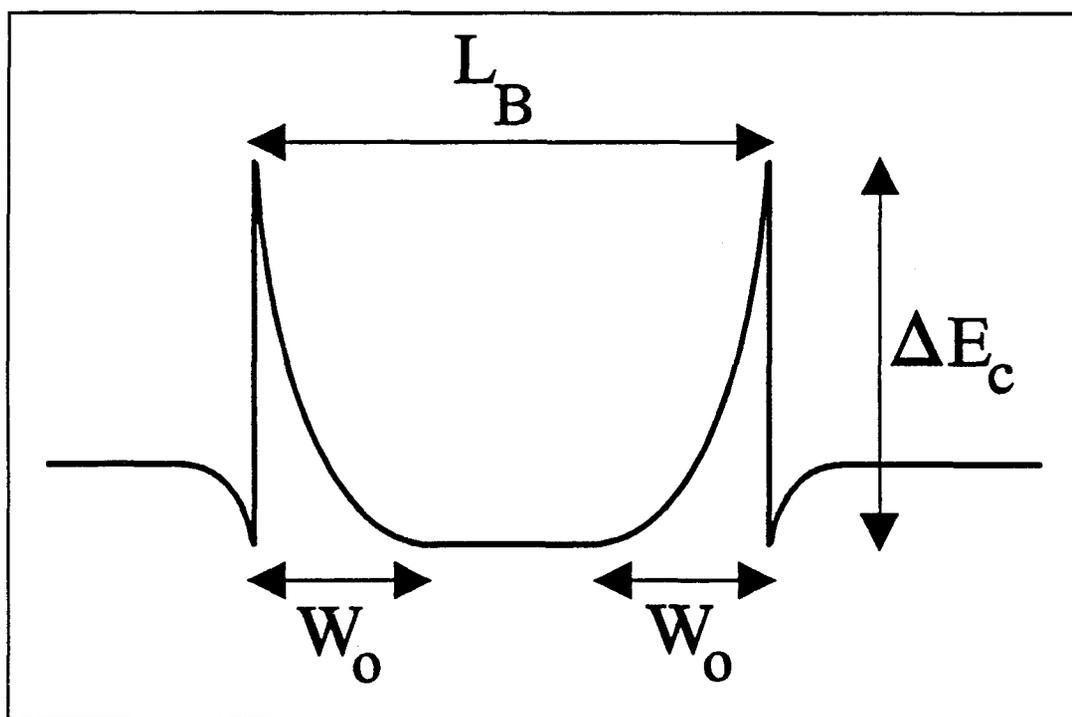


figure I-21: S.B. constituée de deux S.H.J. indépendantes

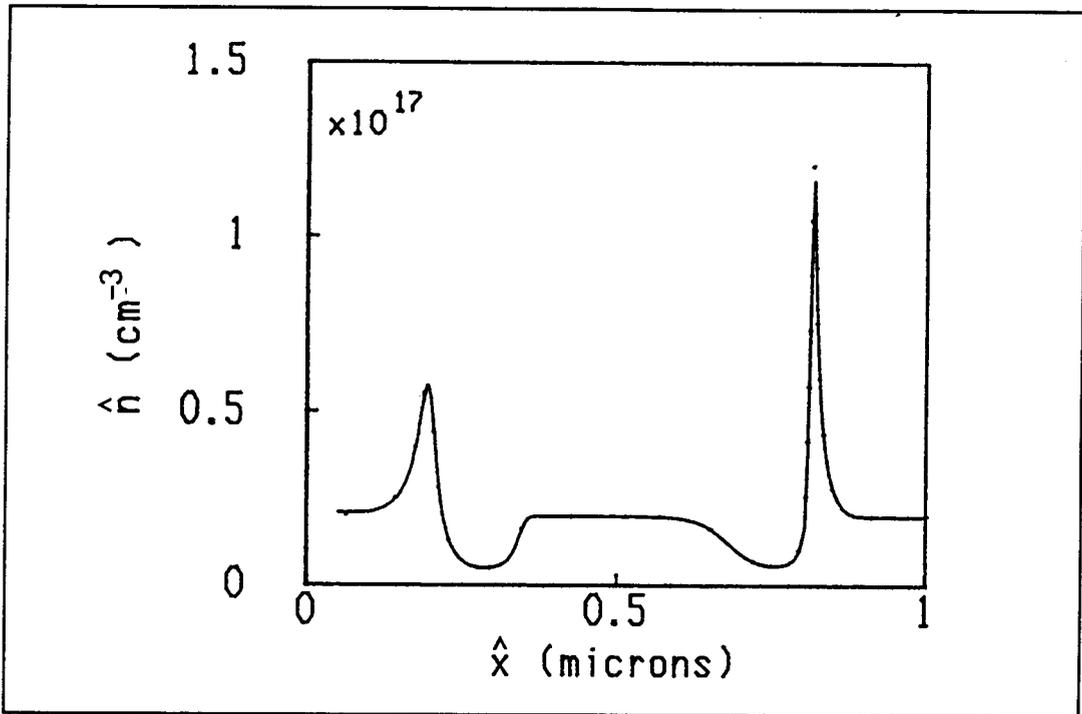


figure I-22: Profil apparent d'une "fausse S.B."

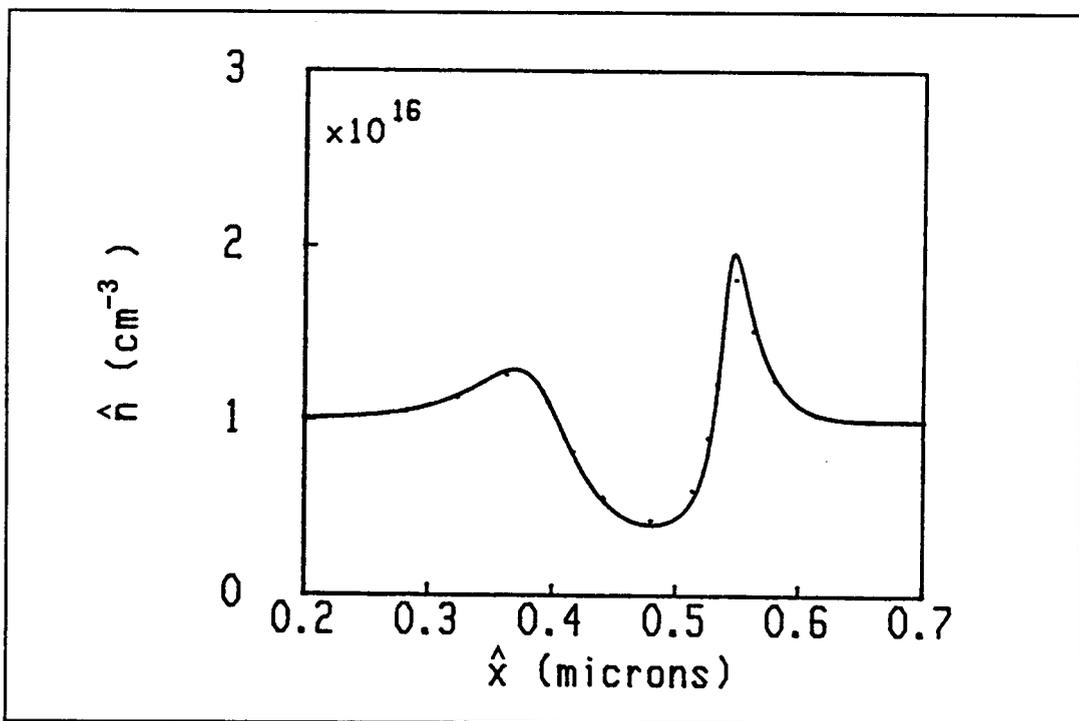


figure I-23: Evolution du profil apparent d'une S.B. avec la D.B.C. (—:0.4 eV, ...:0.1 eV)

concentration inférieure à  $\frac{N_D}{400}$  à température ambiante, c'est à dire quasiment nulle. Ainsi, la distribution de charges, et donc le P.A., ne dépendent plus de la D.B.C. .

Ce résultat est, de plus, confirmé par de précédents travaux [12], effectués au laboratoire et utilisant la même méthode. Cette étude a, par ailleurs, montré que l'on pouvait déterminer d'une part les dopages des différents matériaux avec une bonne précision, et d'autre part les densités de charges aux interfaces avec une assez bonne sensibilité ( $1$  à  $2 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$  pour un dopage moyen de  $10^{16} \text{ cm}^{-3}$ ).

Ainsi, on a montré que, pour une "vrai S.B.", notre méthode ne permet pas de déterminer les discontinuités de bande, mais qu'elle peut être utilisée pour mesurer indépendamment les dopages des différents matériaux et les densités superficielles de charges aux interfaces. Evidemment, il existe une gamme de largeur de barrière entre ces deux cas extrêmes pour laquelle on pourrait déterminer la D.B.C.; cependant, cette situation manque trop de généralité pour présenter un intérêt notable et donc pour justifier une étude plus approfondie.

#### \* Le multipuits quantique

Soit le M.P.Q. de la figure I-24. Nous pouvons faire, pour cette structure, la même remarque que pour la S.B. . En effet, si les largeurs des puits et barrières successifs sont suffisamment grandes, nous aurons encore une fois un ensemble de S.H.J. indépendantes. Dans le cas contraire, il nous faut étudier l'influence des différents paramètres sur le P.A. . Ces paramètres sont:

- pour les puits: la largeur du puits ( $L_p$ ), son dopage ( $N_{DP}$ ) et sa permittivité relative ( $\epsilon_p$ ).
- pour les barrières, on a les mêmes paramètres affectés de l'indice "B".
- pour les interfaces: la D.B.C. ( $\Delta E_c$ ) et la densité superficielle de charges ( $\sigma_1$ ).
- les paramètres liés à l'expérience: la température (T) et la permittivité relative utilisée pour calculer le P.A. ( $\epsilon_m$ ).

Nous supposons en outre que tous les puits et toutes les barrières sont équivalents ( même dopage, même permittivité et même largeur), et que la D.B.C. et la densité de charges sont les mêmes à chaque interface (structure périodique). La figure I-25 montre un P.A. simulé typique d'un M.P.Q. . La périodicité de ce profil nous permet de

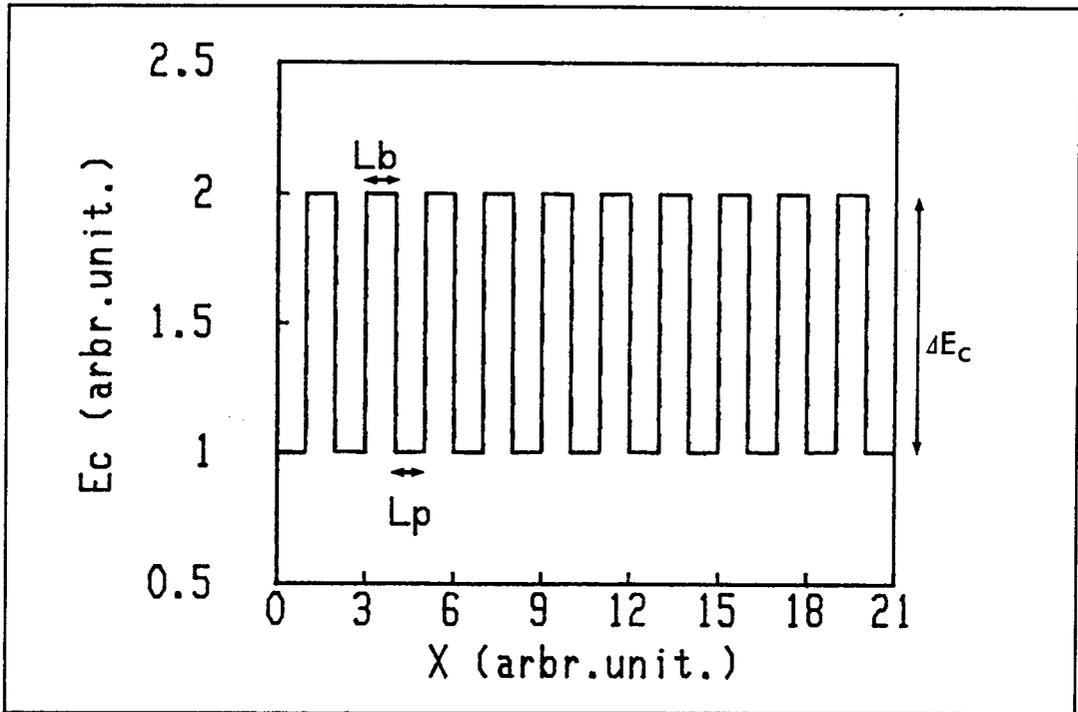


figure I-24: Représentation schématique d'un M.P.Q.

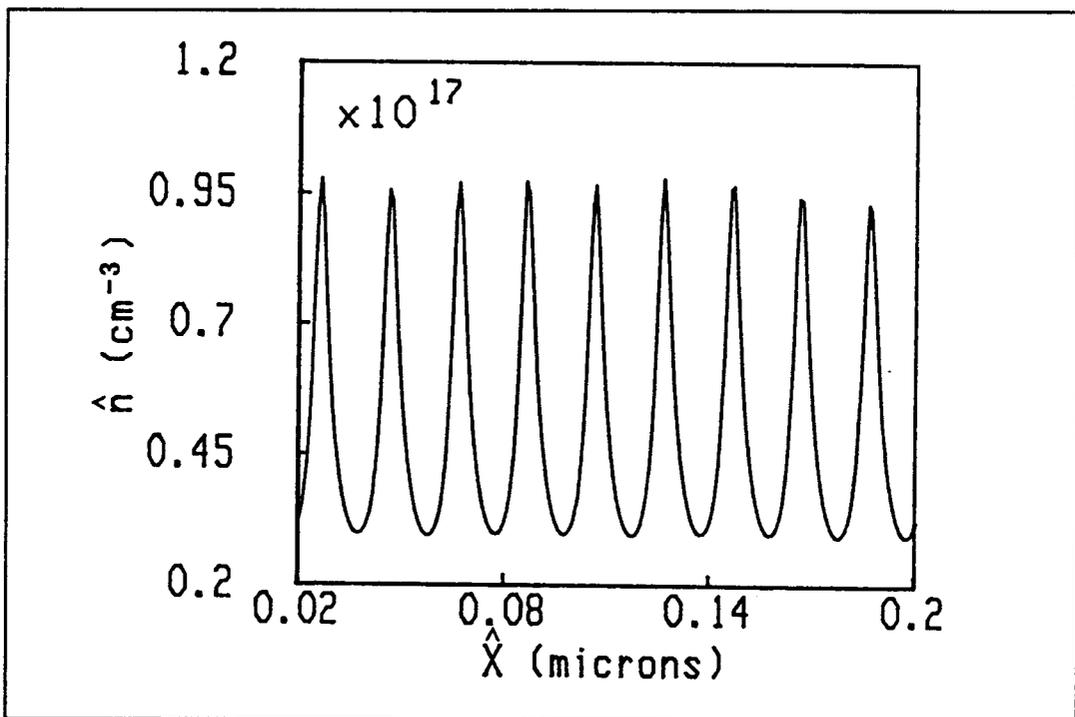


figure I-25: Profil apparent d'un M.P.Q.

définir:

- le dopage moyen:

$$N_{Dm} = \frac{L_P N_{DP} + L_B N_{DB}}{L_P + L_B} + \frac{2 \sigma_i}{L_P + L_B} e \quad \text{I-41}$$

- la permittivité moyenne:

$$\epsilon_m = \frac{L_P + L_B}{L_P / \epsilon_P + L_B / \epsilon_B} \quad \text{I-42}$$

(les barrières et les puits pouvant être assimilés à des capacités en série)

- la longueur de Debye moyenne:

$$L_{Dm} = \sqrt{\frac{\epsilon_m kT}{e^2 N_{Dm}}} \quad \text{I-43}$$

A partir du  $C(V)$ , on calcule le P.A. ( $\hat{n}(\hat{x})$ ) en utilisant la permittivité  $\epsilon_m$ , puis on définit le profil apparent normalisé (P.A.N.) par la fonction:

$$\frac{\hat{n}}{N_{Dm}} \left( \frac{\hat{x}}{L_P + L_B} \right) \quad \text{I-44}$$

(le P.A.N. correspondant au P.A. de la figure I-25 est donné sur la figure I-26)

Pour un grand nombre de simulations, faisant varier chacun des paramètres, soit individuellement, soit simultanément avec d'autres, nous avons calculé le P.A.N. . On montre alors que celui-ci ne dépend que de trois paramètres:

$$\frac{L_{Dm}}{L_P}, \frac{L_{Dm}}{L_B}, \frac{\epsilon_P}{\epsilon_B}$$

C'est à dire que tous les P.A. simulés ayant ces trois paramètres en commun donnent lieu à des P.A.N. identiques. On voit donc que, si on suppose connues les largeurs de puits et de barrières, les permittivités et la température, le  $C(V)$  ne permet de déterminer qu'un

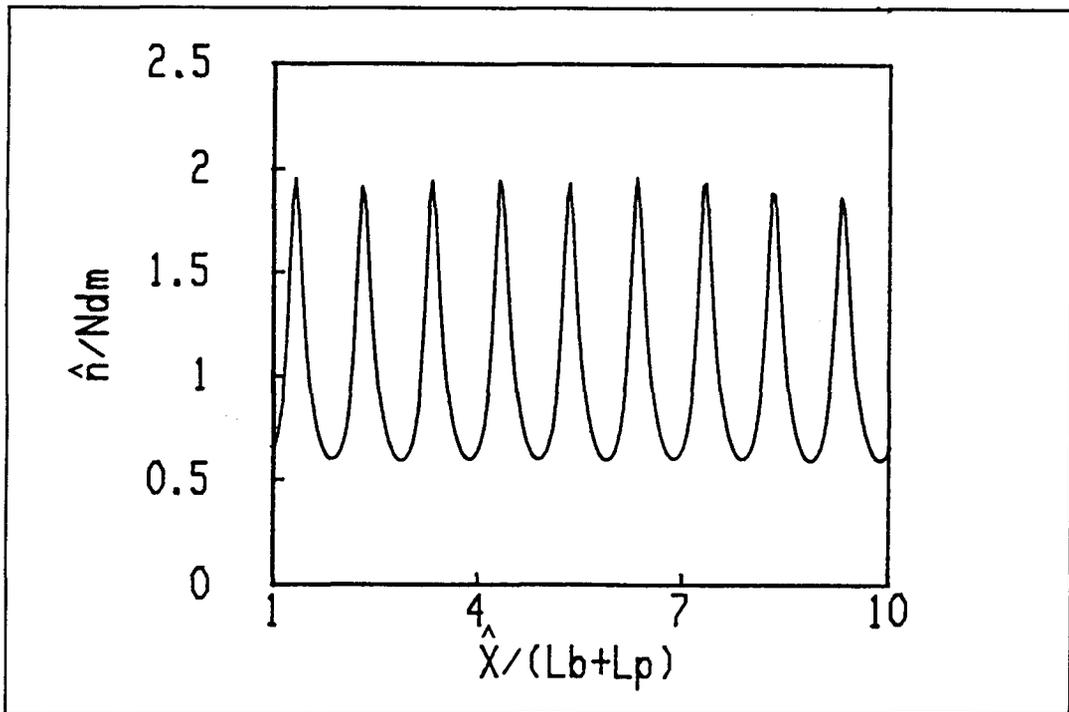


figure I-26: Profil apparent normalisé d'un M.P.Q.

dopage moyen ( $N_{D_m}$ ) prenant en compte les densités superficielles de charges aux interfaces. Il faut noter que ce dopage moyen peut être obtenu dans le cadre de la méthode de Kroemer par le moment d'ordre zéro du P.A. . Notre méthode n'apporte donc pas plus d'informations dans le cas d'un M.P.Q. .

\* Le simple puits quantique :

Pour les mêmes raisons que dans le cas des structures précédentes, si les deux hétérojonctions constituant le puits sont suffisamment éloignées, le S.P.Q. est équivalent à la juxtaposition de deux S.H.J. indépendantes. Dans le cas contraire, c'est à dire pour un puits fin, le confinement des porteurs va induire une quantification que nous ne pouvons plus négliger. Notre programme de simulation de  $C(V)$ , ne prenant pas en compte cet effet, ne peut donc pas être utilisé sur de telles structures. C'est pourquoi l'étude du S.P.Q. fera l'objet du paragraphe suivant où nous verrons comment on peut introduire la quantification dans une simulation de  $C(V)$ .

\* Tableau récapitulatif

Pour résumer, nous avons indiqué, dans le tableau I-2, les paramètres que l'on peut déterminer sur chaque structure par la technique C(V):

	S.H.J.	S.B.	M.P.Q.	S.P.Q.
$\Delta E_c$	X			X
$\sigma_1$	X	X		
$N_D$	X	X	X	X

d) Le problème de la quantification: cas d'un simple Puits quantique

Soit un puits quantique (figure I-27) de largeur  $L_p$ , de hauteur  $\Delta E_c$  et qui possède M niveaux quantiques ( $E_1$ ). Nous devons étudier l'influence de la quantification sur le C(V), ou le P.A., de cette structure. Pour ce faire, il est intéressant d'évaluer l'erreur commise quand on calcule la concentration d'électrons dans le puits dans l'hypothèse d'un système tridimensionnel (cas d'un puits large). Dans le cas général, la concentration moyenne d'électrons est donnée par:

$$n = \frac{1}{\Omega} \int_0^{\infty} N(E) f(E) dE \quad \text{I-45}$$

où  $\Omega$  est le volume du puits ( $\Omega = S \cdot L_p$ ),  $N(E)$  la densité d'états (tenant compte du spin) et  $f(E)$  la fonction de Fermi. La densité d'états s'écrit:

à trois dimensions:

$$N_{3D}(E) = \Omega \frac{\sqrt{2} m^{*3/2}}{\pi^2 \hbar^3} E^{1/2} \quad \text{I-46}$$

à deux dimensions:

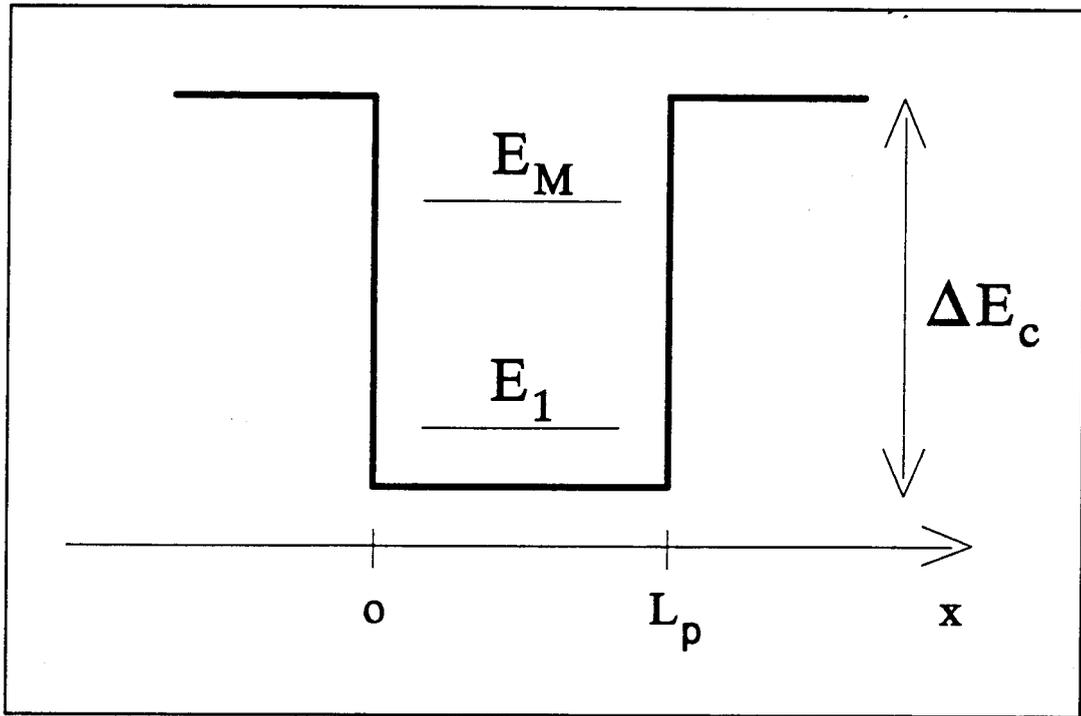


figure I-27: Représentation schématique d'un S.P.Q.

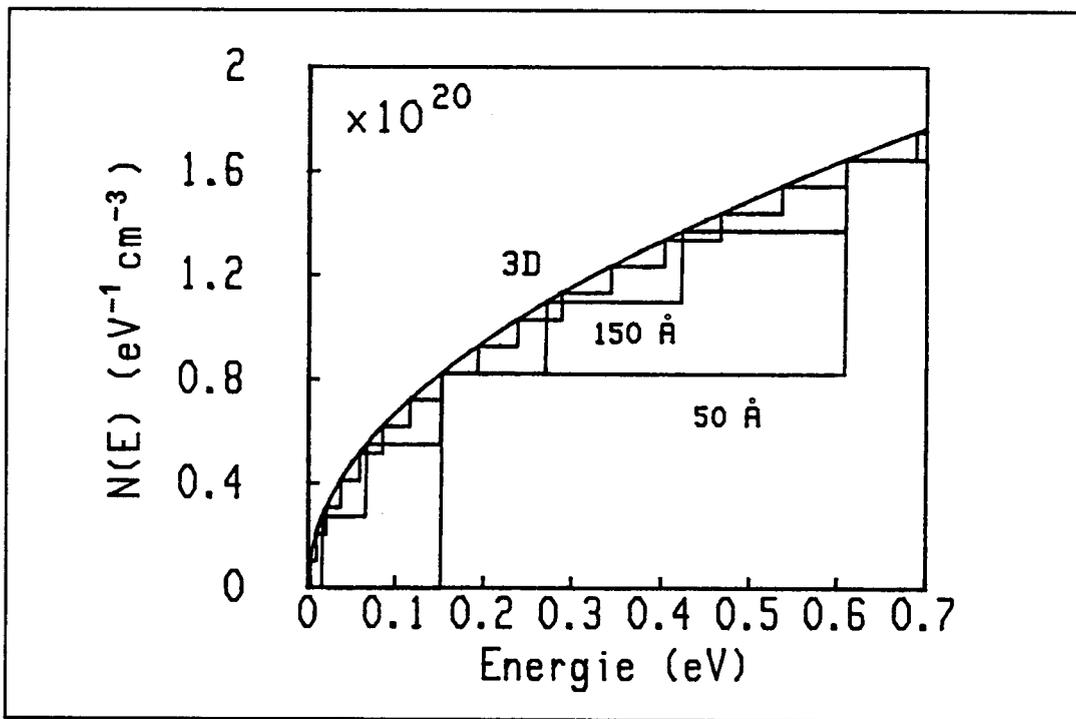


figure I-28: Densité d'états pour différentes largeurs de puits:  
 $L_p = 50, 150$  et  $400 \text{ \AA}$ . Densité d'états à 3 dimensions

$$N_{2D}(E) = \frac{S m^*}{\pi \hbar^2} \cdot K \quad \text{I-47}$$

où K est un entier défini par:

$$\text{si } E_i < E < E_{i+1} \text{ alors } K=i$$

Sur la figure I-28, on a représenté la densité d'états par unité de volume pour un puits infiniment profond et pour différentes valeurs de  $L_p$ . On voit que  $N_{2D}$  se rapproche de  $N_{3D}$  quand le puits s'élargit, c'est à dire quand la densité de niveaux quantiques augmente. A trois dimensions, la concentration d'électrons est alors donnée par :

$$n_{3D} = \frac{\sqrt{2} m^{*3/2}}{\pi^2 \hbar^3} \int_0^{\infty} \frac{E^{1/2}}{1 + \exp\left(\frac{E-E_f}{kT}\right)} dE \quad \text{I-48}$$

De plus, on peut montrer [13], qu'à deux dimensions, la concentration d'électrons s'écrit:

$$n_{2D} = \frac{m^* kT}{\pi \hbar^2 L_p} \sum_{i=1}^M g\left(\frac{E_i - E_f}{kT}\right) \quad \text{I-49}$$

où la fonction g est définie par:

$$g(u) = \mathcal{L}n(1+\exp(u)) - u \quad \text{I-50}$$

Il faut noter que  $n_{2D}$  est une concentration moyenne puisqu'on ne tient pas compte des fonctions d'ondes associées aux niveaux. On appelle alors erreur relative le terme:

$$\delta = \frac{n_{3D} - n_{2D}}{n_{2D}} \quad \text{I-51}$$

La figure I-29 représente les variations de cette erreur en fonction de la concentration réelle d'électrons ( $n_{2D}$ ), pour deux couples de valeurs de  $L_p$  et de  $\Delta E_c$ , correspondants respectivement à une faible et à une forte quantification. On voit que, pour  $n_{2D} < 1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ ,

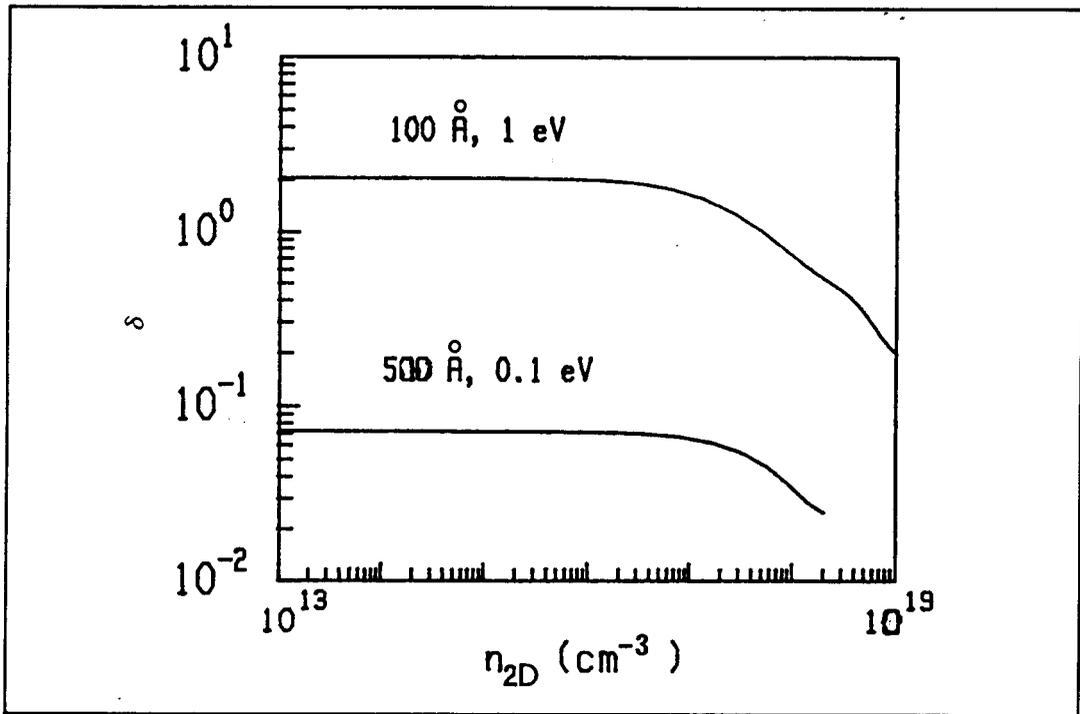


figure I-29: Erreur relative sur la concentration d'électrons dans le puits

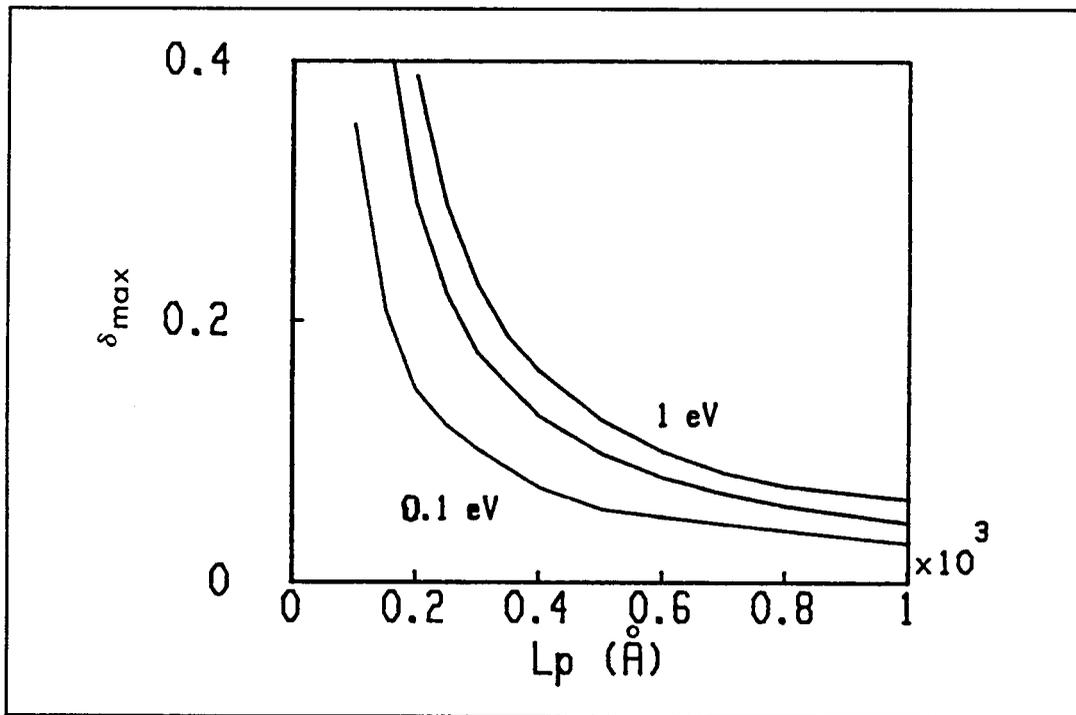


figure I-30: Erreur relative maximum sur la concentration de porteurs en fonction de la largeur du puits pour différentes valeurs de  $\Delta E_c$ : 0.1, 0.3 et 1 eV

l'erreur est à peu près constante. Grâce à ce constat, on peut tracer l'évolution de cette erreur maximum en fonction de la largeur du puits pour différentes valeurs de  $\Delta E_c$  (figure I-30). On observe évidemment que l'erreur est d'autant plus grande que le puits est plus fin et plus profond, c'est à dire que la quantification est plus importante. On montre ainsi que, pour les valeurs de D.B.C. habituelles ( $0.1 \text{ eV} < \Delta E_c < 1 \text{ eV}$ ), l'erreur reste inférieure à 10 % tant que  $L_p$  est supérieure à 700 Å. Par contre, pour des puits plus étroits, l'erreur peut devenir très importante (jusqu'à 200 %).

Pour résoudre ce problème nous avons mis au point une version "quantique" de notre programme de simulation de C(V). Elle consiste à supposer que la concentration de porteurs dans le puits est constante et donnée par l'équation I-49. On peut alors intégrer l'équation de Poisson comme au paragraphe I-3 et obtenir ainsi le P.A. . Cependant, cette technique impose que deux conditions soit respectées:

- d'une part, que les niveaux quantiques soient peu modifiés par le champ électrique, ce qui est vrai, pour un champ constant, au premier ordre en perturbation.
- d'autre part, que le puits soit suffisamment fin pour que l'hypothèse d'une densité constante d'électrons soit justifiée.

Les limites de ces deux approximations sont discutées dans l'annexe I-B. On y calcule notamment l'erreur  $\delta(E_1)$  faite sur le premier niveau d'énergie du puits. On peut alors relier celle-ci à l'erreur que l'on commettra dans la détermination de la D.B.C. par la méthode C(V). En effet, en différenciant l'équation I-B-1 (cas  $n=1$ ), on obtient:

$$\lambda = \frac{\delta(\Delta E_c)}{\Delta E_c} = \left[ 1 + \frac{\sqrt{1 - \frac{E_1}{\Delta E_c}}}{\gamma} \right] \frac{\delta(E_1)}{E_1} \quad \text{I-52}$$

où  $\gamma$  est un paramètre sans dimension défini dans l'annexe I-B. Le terme  $\delta(E_1)$  représente ici l'erreur moyenne sur  $E_1$  faite au cours du calcul de la caractéristique C(V). Il faut noter que cette équation nous informe non seulement sur l'amplitude de l'erreur mais aussi sur son signe. Elle nous permet donc de corriger la valeur obtenue. On peut alors, pour une valeur donnée du champ électrique (F) ou de la densité de charges ( $n_w$ ), déterminer les couples ( $L_p, \Delta E_c$ ) qui induisent

une valeur fixée,  $\lambda_0$ , de l'erreur. Dans le domaine situé sous la courbe ainsi obtenue, l'erreur sera donc inférieure à  $\lambda_0$ . Les courbes I-31 à I-34 montrent de tels "abaques" pour  $\lambda_0 = 5\%$  et  $10\%$ .

Dans la seconde partie de l'annexe I-B, on évalue l'erreur  $\delta(V_w)$  faite sur le calcul de la d.d.p. aux bornes de la structure. On en déduit alors l'erreur sur la capacité. En utilisant:

$$C(V_p) = - \frac{dQ}{dV_p}$$

on obtient:

$$\frac{\delta C}{C} = - \frac{d(\delta(V_w))}{dV_p} \quad \text{I-53}$$

Cette erreur ne peut pas, pour l'instant, être évaluée, puisque nous ne connaissons pas d'équation liant la tension appliquée  $V_p$  et la d.d.p. liée au puits  $V_w$ . Nous résoudrons ce problème grâce au modèle analytique que nous exposons dans le paragraphe suivant.

Nous avons ainsi réalisé un programme de simulation de  $C(V)$ , prenant en compte la quantification de façon simplifiée et dont nous pouvons évaluer la précision.

On peut alors comparer les P.A. obtenus avec ou sans quantification. A titre d'exemple, on a simulé le  $C(V)$  et le P.A. pour les paramètres suivants:

$$L_p = 70 \text{ \AA} , \Delta E_c = 0.4 \text{ eV} , N_D = 1.5 \times 10^{16} , T = 300 \text{ K}$$

Le résultat montre bien l'importance de la quantification (figures I-35 et I-36). On observe notamment que celle-ci modifie nettement les "largeurs de vallée" du P.A. et nous verrons que, comme pour la S.H.J., ces dimensions sont très sensibles aux paramètres de simulation.

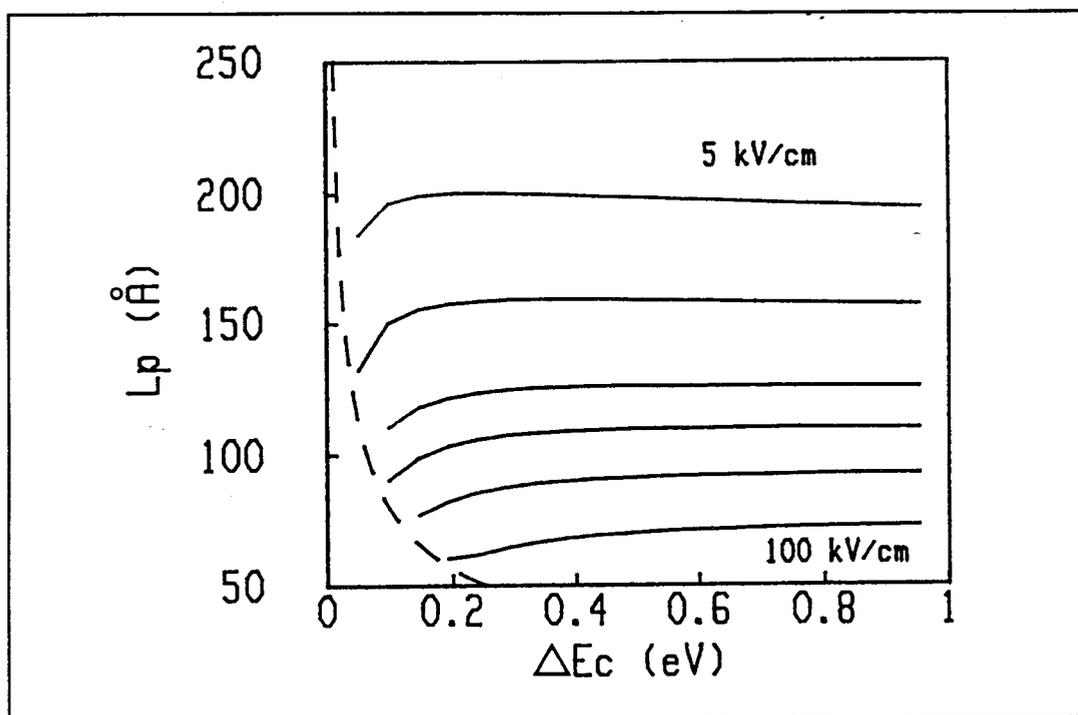


figure I-31: Abaque pour  $\lambda_0=10\%$ ,  $F=5,10,30,50$  et  $100\text{kV}$ , en pointillés: courbe correspondant à  $\gamma=0.6$  (voir annexe I-B)

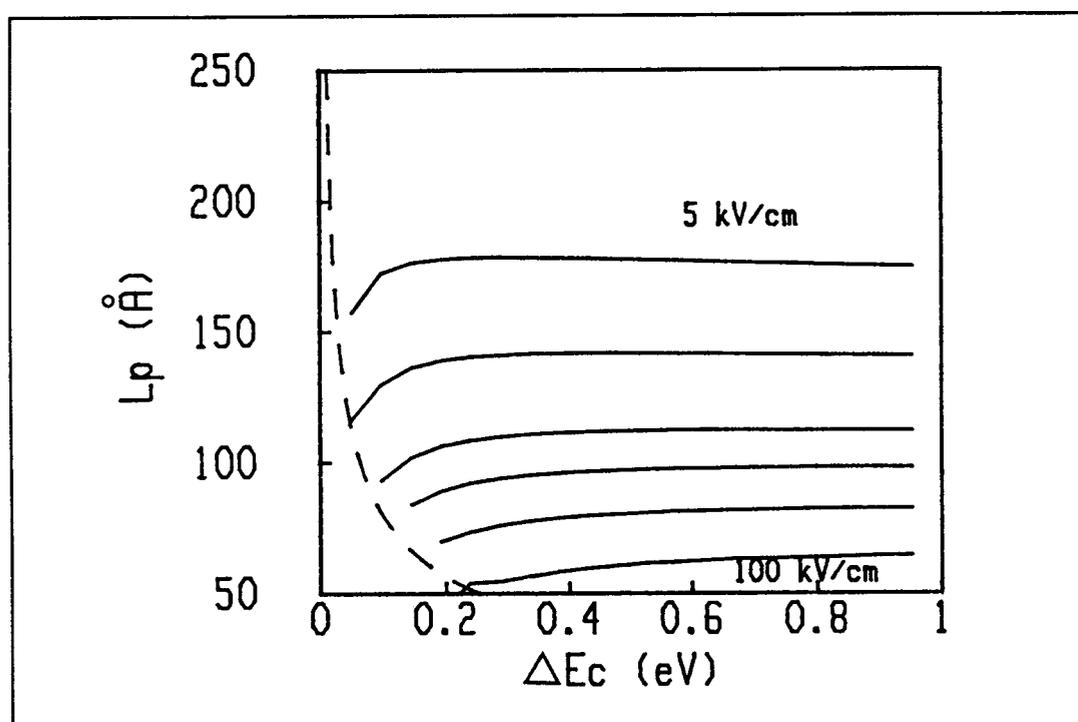


figure I-32: Abaque pour  $\lambda_0=5\%$  (mêmes valeurs du champ)

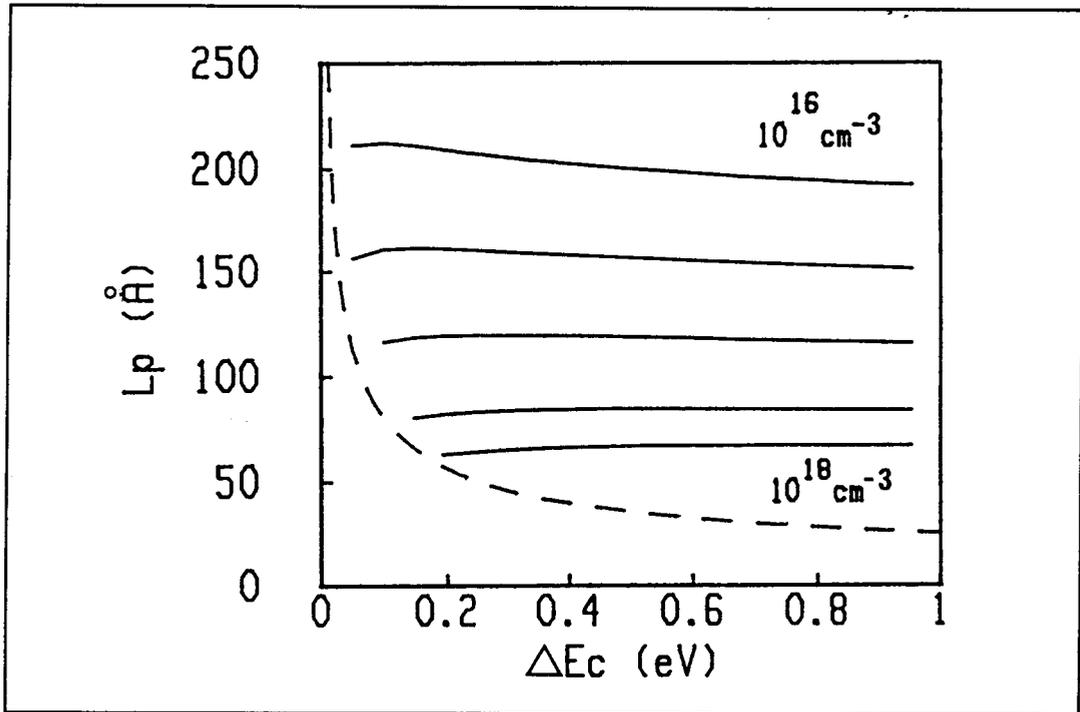


figure I-33: Abaque pour  $\lambda_0=10\%$ ,  $n_w=0.1, 0.5, 1, 5, 10 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$

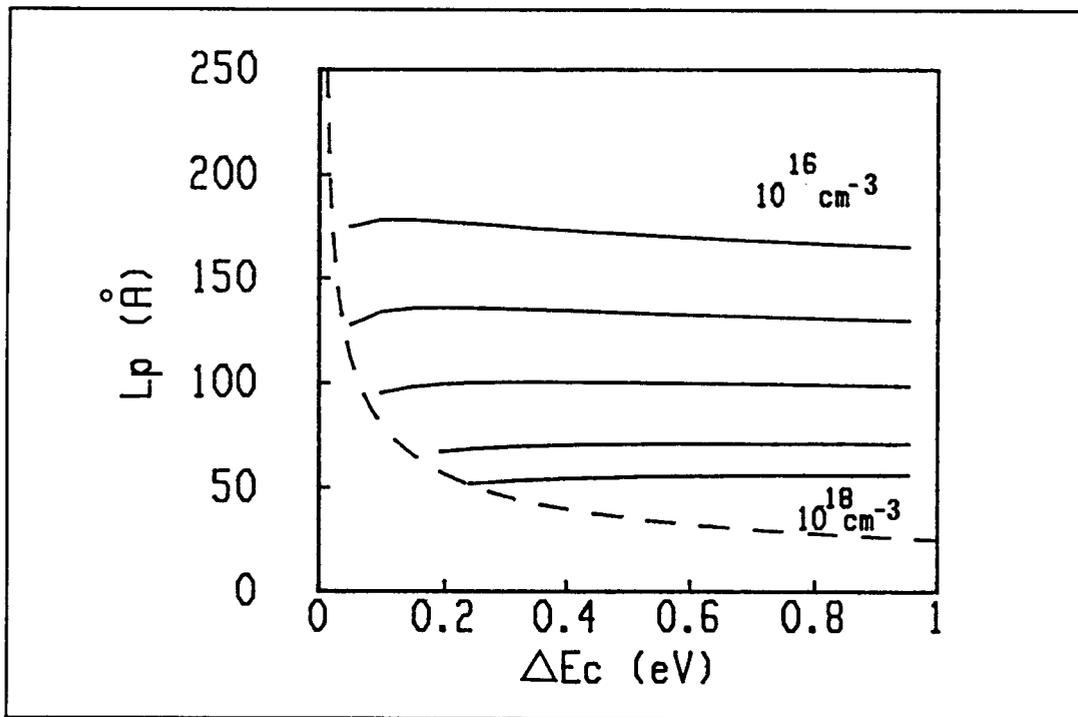


figure I-34: Abaque pour  $\lambda_0=5\%$  (mêmes valeurs de  $n_w$ )

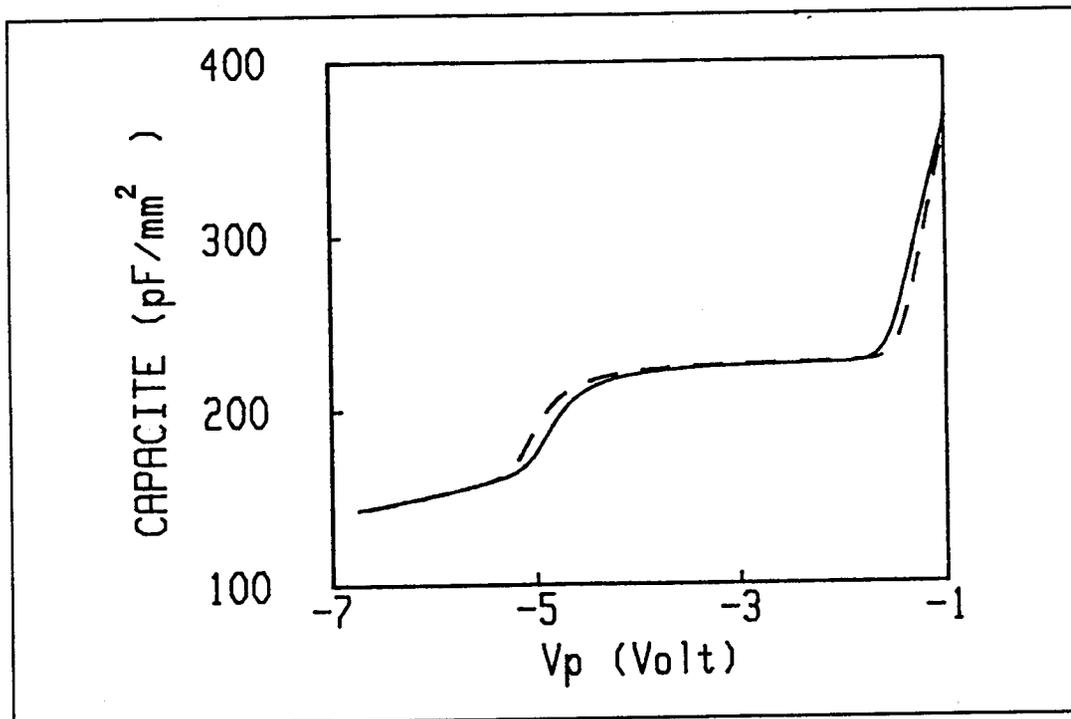


figure I-35: Caractéristique  $C(V)$  d'un S.P.Q. (---: sans quantification, \_\_: avec quantification)

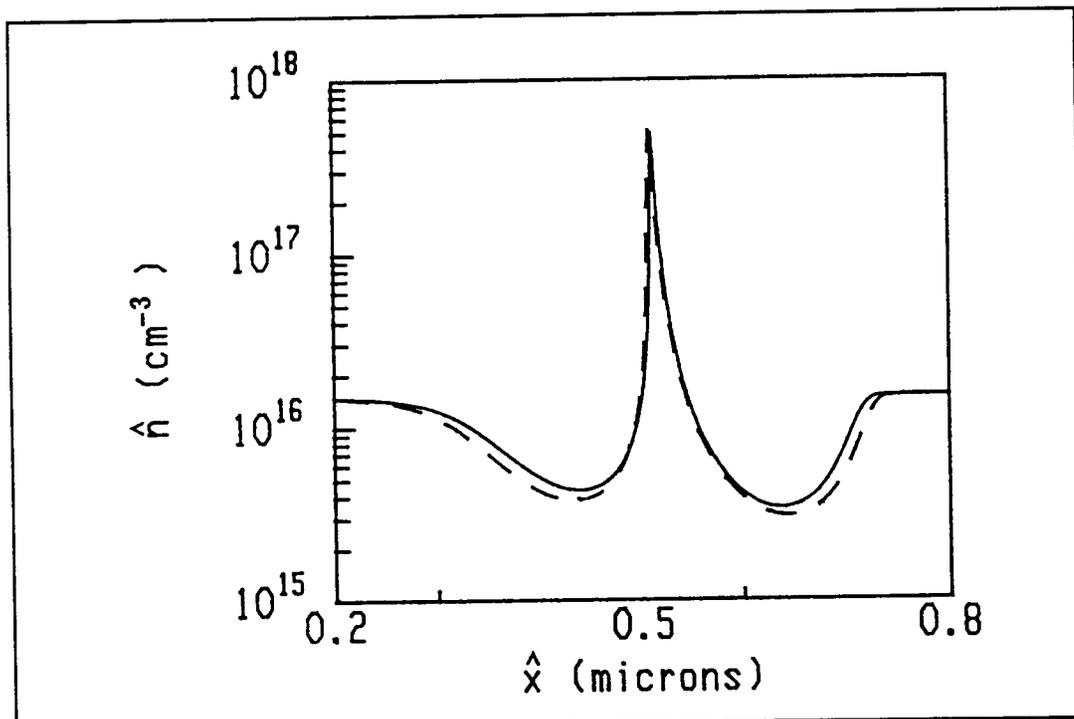


figure I-36: Profil apparent d'un S.P.Q. (---: sans quantification, \_\_: avec quantification)



## I-4 MODELE ANALYTIQUE POUR UN S.P.Q.

### a) Principe

Nous avons montré, dans les paragraphes précédents, que seule une simulation du  $C(V)$  permettait de l'interpréter de façon fiable et d'extraire les paramètres d'une hétérostructure. Cependant, dans le cas d'un S.P.Q., nous avons pu établir une expression analytique de la capacité associée à cette structure, formulation qui permet une interprétation plus directe des résultats expérimentaux.

Bien entendu, cette simplification se fait au prix d'une approximation supplémentaire. Nous conservons, tout d'abord, celles relatives au puits quantique: niveaux d'énergie indépendants du champ électrique, densité de porteurs constante dans le puits. De plus, nous appliquons l'approximation de zone de charge d'espace aux régions voisines du puits. Deux situations peuvent alors se présenter, suivant l'intensité de la d.d.p. appliquée aux bornes de l'échantillon. Pour de faibles polarisations (figure I-37), la tension crée simplement une zone désertée  $W$  près de la jonction Schottky mais n'affecte pas la forme du potentiel autour du puits. La capacité mesurée est alors celle correspondant à un semi-conducteur homogène partiellement déserté. Dans ce cas, le puits n'intervient donc pas dans l'expression de la capacité et celle-ci est donnée par l'expression:

$$C = \frac{\epsilon S}{W} \quad \text{où} \quad W = \sqrt{\frac{2 \epsilon}{e N_D} V_P} \quad \text{I-54}$$

Si la polarisation augmente (figure I-38), la zone désertée créée par la tension et celle due au puits se recouvrent, et on considérera donc que toute la région située à gauche du puits est vide de porteurs libres. Cette situation se réalise dès que:

$$W \geq W_\ell = L - W_0 - \frac{L_p}{2}$$

c'est à dire si la d.d.p. appliquée est supérieure à une tension limite  $V_\ell$  donnée par:

$$V_\ell = \frac{e N_D}{2 \epsilon} W_\ell^2$$

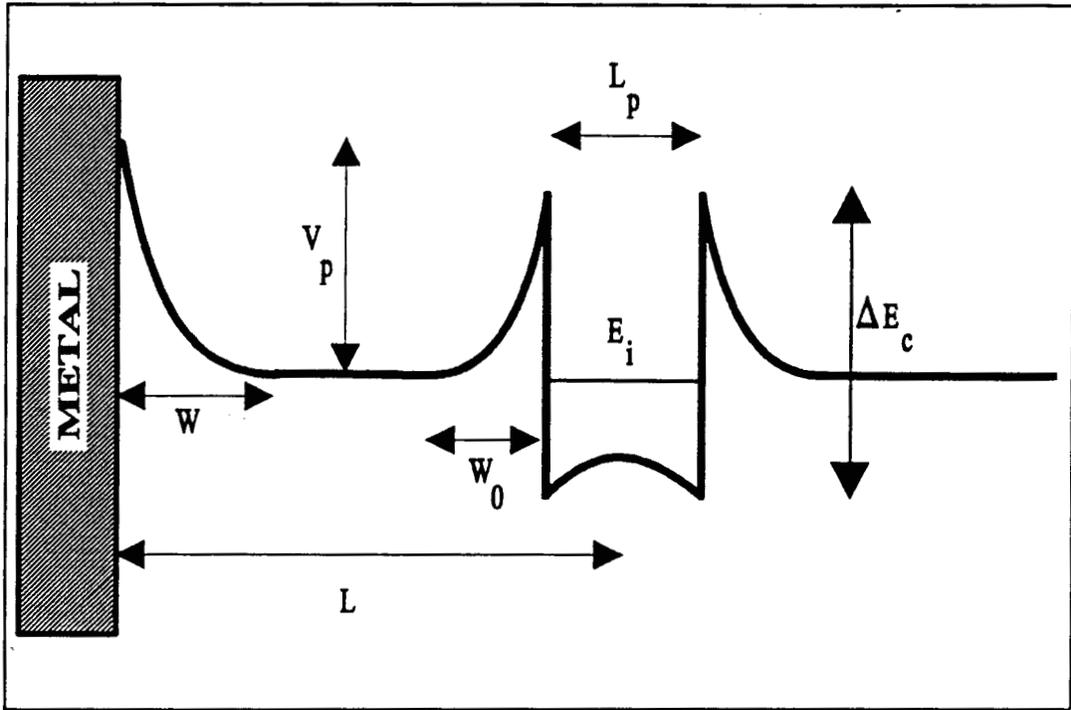


figure I-37: S.P.Q. sous faible polarisation

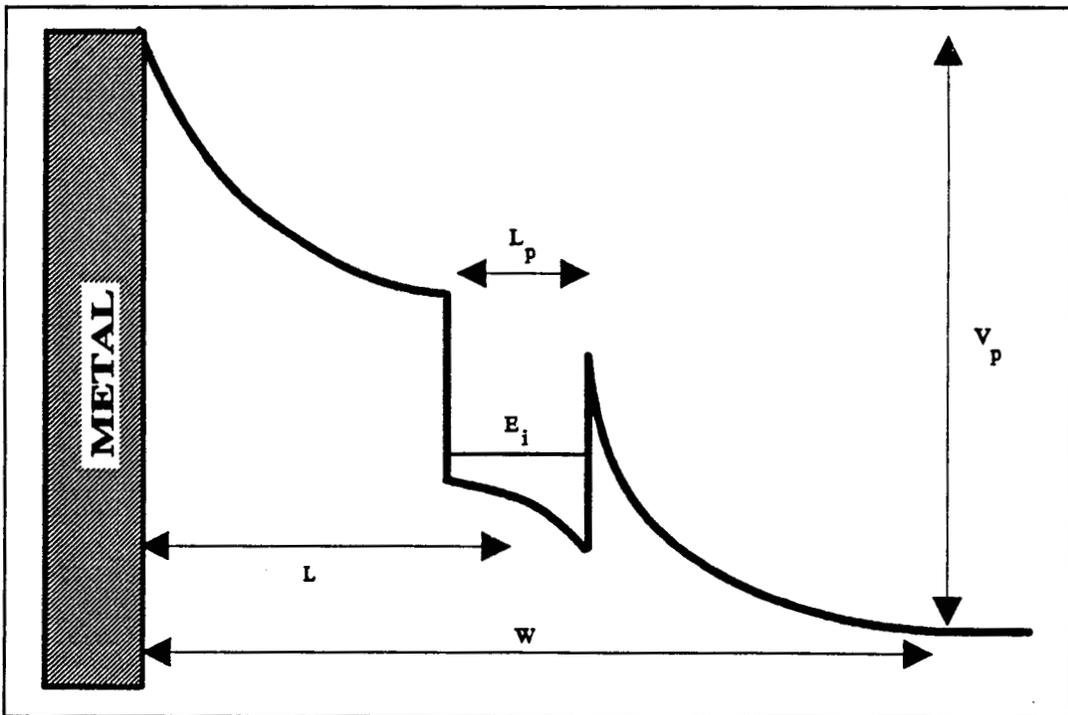


figure I-38: S.P.Q. sous forte polarisation

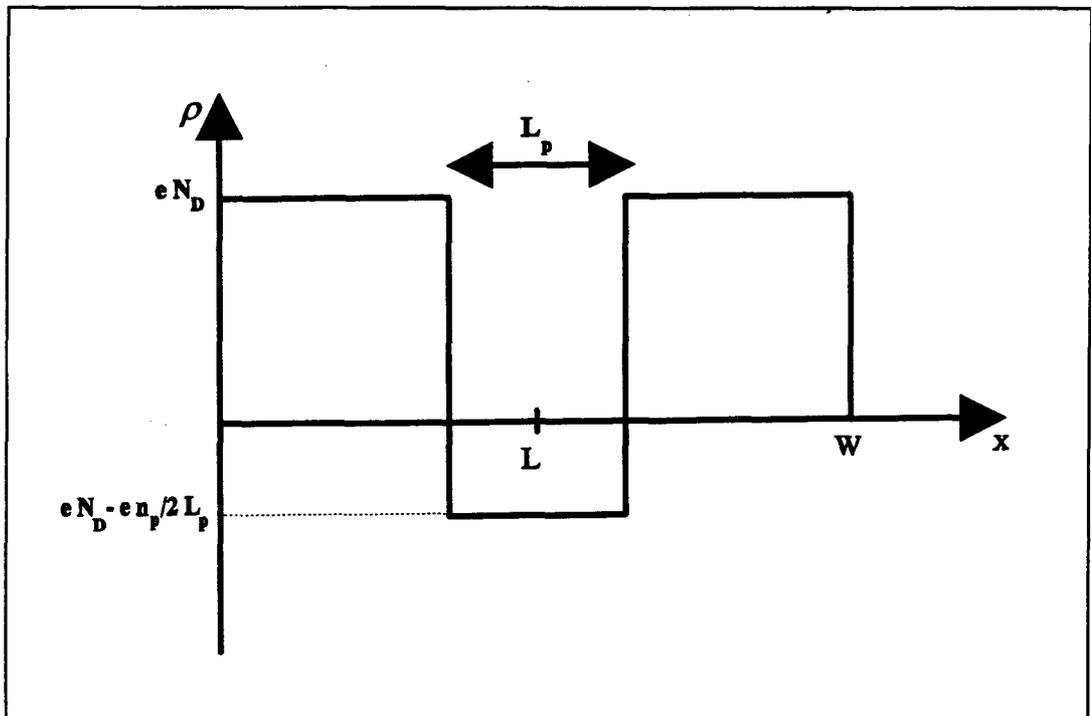


figure I-39: Distribution de charges du S.P.Q.

La distribution de charges est alors celle indiquée par la figure I-39 et on peut facilement intégrer l'équation de Poisson. On obtient ainsi la d.d.p. appliquée:

$$V_p = \frac{-e N_d}{2 \epsilon} W^2 + \frac{e n_p}{\epsilon} L \quad \text{I-55}$$

et la charge stockée dans la structure:

$$Q = S e (N_d W - n_p) \quad \text{I-56}$$

où  $n_p$  est la concentration d'électrons par unité de surface dans le puits. Différenciant ces expressions, on a:

$$dV_p = \frac{-e N_d}{\epsilon} W dW + \frac{e L}{\epsilon} dn_p \quad \text{I-57}$$

et:

$$dQ = S e (N_D dW - dn_p) \quad \text{I-58}$$

Pour obtenir une expression de la capacité, il reste à exprimer  $dn_p$  en fonction de  $dW$ . L'équation I-49 peut s'écrire:

$$n_p = \frac{m^* kT}{\pi \hbar^2} \sum_{i=1}^M [ \ln(1 + \exp(u_i)) - u_i ] \quad \text{I-59}$$

où:

$$u_i = \frac{E_i - E_F}{kT}$$

En intégrant l'équation de Poisson entre  $W$  et  $L$ , avec la densité de charges de la figure I-39, on a:

$$E_i = E_i^{(0)} - \Delta E_c + \frac{e^2 N_D}{2 \epsilon} (W - L)^2 - \frac{e^2 n_p}{4 \epsilon} L_p \quad \text{I-60}$$

où  $E_i^{(0)}$  est le niveau calculé pour le "puits plat". En différenciant les équations I-58 et I-59, on obtient:

$$dn_p = - \alpha \frac{W - L}{L_p} N_D dW \quad \text{I-61}$$

avec:

$$\alpha = \frac{4 S \frac{L_p}{a_B^*}}{1 - S \frac{L_p}{a_B^*}} \quad \text{I-62}$$

où:

$$S = \sum_{i=1}^M \frac{1}{1 + \exp(u_i)} \quad \text{et} \quad a_B^* = \frac{e^2 m^*}{4 \pi \hbar^2 \epsilon} \quad \text{I-63}$$

En introduisant l'expression I-61 dans les équations I-57 et I-58, on obtient finalement:

$$C = - \frac{dQ}{dV_p} = \epsilon S \frac{1 + \alpha \frac{W - L}{L_p}}{W + \alpha \frac{W - L}{L_p} L} \quad \text{I-64}$$

On a ainsi obtenu une expression de la capacité associée à un S.P.Q. . . Cependant, l'équation I-64 ne donne pas directement la dépendance en tension de la capacité et un léger traitement numérique est nécessaire pour tracer une caractéristique  $C(V)$ . Le calcul, dont la figure I-40 donne un organigramme, consiste à effectuer une dichotomie sur la valeur de  $n_p$  pour chaque valeur de tension.

### b) Discussion

On peut donner une interprétation plus physique de l'expression établie ci-dessus. En effet, introduisons la "zone désertée apparente":

$$\hat{x} = \frac{\epsilon S}{C}$$

Cette grandeur représente le barycentre de la variation de densité de charges  $\Delta\rho(x)$  due à la variation de tension  $dV$  [5]:

$$\hat{x} = \frac{\int_0^{\infty} x \Delta\rho(x) dx}{\int_0^{\infty} \Delta\rho(x) dx} \quad \text{I-65}$$

Dans le cadre du modèle analytique, on a:

$$\hat{x} = \frac{W N_D dW - L dn_p}{N_D dW - dn_p}$$

Soit, en utilisant I-61:

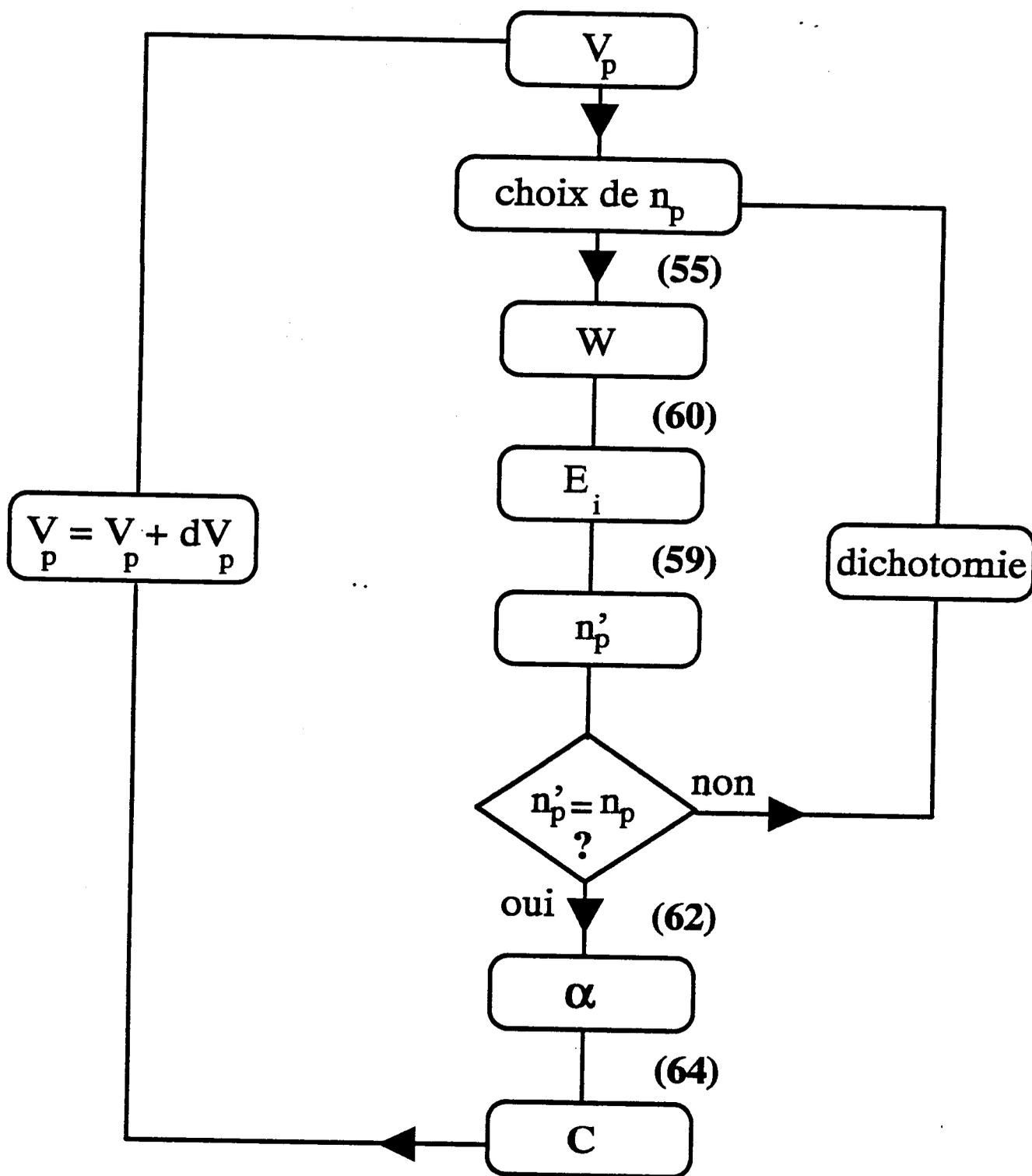


figure I-40

$$\hat{x} = \frac{W + \alpha \frac{W - L}{L_p} L}{1 + \alpha \frac{W - L}{L_p}} \quad \text{I-66}$$

ce qui confirme bien l'expression de la capacité donnée par I-64 ( $C = \frac{\epsilon S}{\hat{x}}$ ). Dans l'équation ci-dessus, on retrouve les deux contributions à la capacité du S.P.Q., l'une liée à l'augmentation de la zone désertée, située en W, l'autre liée à la diminution du nombre d'électrons dans le puits, situé en L.

La figure I-41 compare les caractéristiques C(V) obtenues par le modèle analytique et par le programme de simulation. On observe un bon accord entre les deux méthodes de calcul, validant ainsi l'équation I-64. Cependant, le modèle analytique induit une marche de capacité correspondant à la tension limite  $V_\ell$ . Cette discontinuité est évidemment due à l'approximation de zone désertée. En effet, dans notre modèle, on passe d'une situation où le puits n'intervient pas dans l'expression de la capacité à une situation où le matériau situé avant le puits est totalement vide de porteurs. Le barycentre  $\hat{x}$  passe alors brutalement d'une valeur inférieure à  $W_\ell$  à une valeur supérieure à L. Ce modèle correspond donc à une situation idéale de zone de charge d'espace abrupte dont on se rapproche pour les basses températures (figure I-41).

### c) Intérêt du modèle

On peut, en premier lieu, utiliser ce modèle pour ajuster les paramètres d'un S.P.Q. en comparant les C(V) calculés aux C(V) expérimentaux. Cependant, le gain en temps de calcul qu'apporte cette méthode ne justifie pas la perte de précision qu'elle provoque et il reste préférable d'utiliser le programme de simulation.

En fait, l'intérêt de ce modèle est tout autre. Tout d'abord, il permet, comme nous l'avons montré dans le paragraphe précédent, de mettre en évidence les paramètres physiques qui influent sur la capacité d'un S.P.Q. . De plus, grâce à cette formulation analytique, il est maintenant possible d'évaluer numériquement les erreurs induites par le programme de simulation. En effet, le calcul des erreurs données par les expressions I-52 et I-53 nécessite, pour une d.d.p. fixée, la connaissance du champ électrique F et de la densité

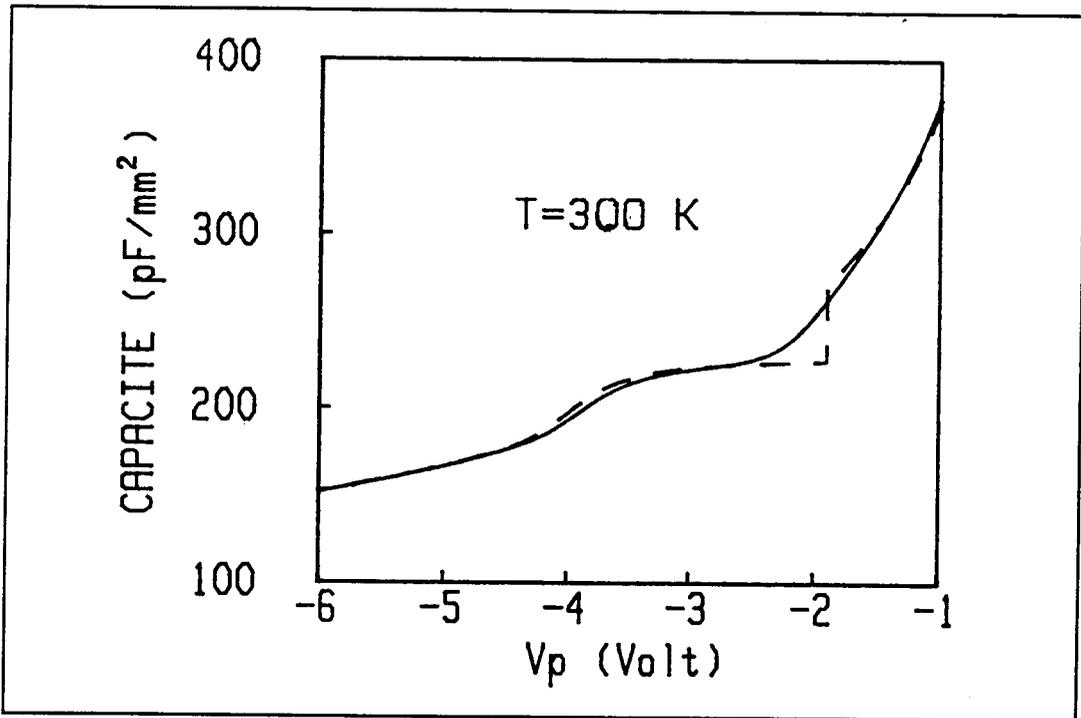


figure I-41: Comparaison entre le  $C(V)$  simulé (—) et le  $C(V)$  analytique (---)

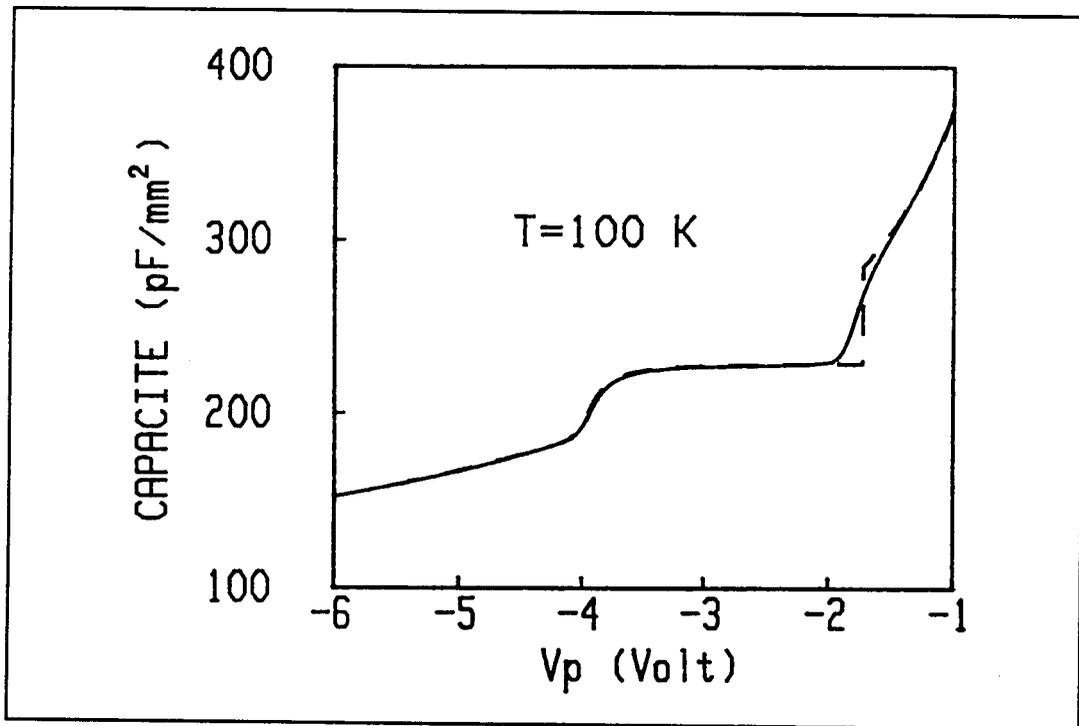


figure I-41: Comparaison entre le  $C(V)$  simulé (—) et le  $C(V)$  analytique (---)

de porteurs  $n_p$  dans le puits (voir annexe I-B). Ces grandeurs sont accessibles grâce au modèle analytique et on peut donc suivre l'évolution des erreurs tout au long de la caractéristique  $C(V)$ . Nous illustrerons ce point lorsque nous discuterons des résultats expérimentaux dans le paragraphe I-5. Enfin, pour étudier la D.L.T.S. sur un S.P.Q., ce modèle nous servira de base pour interpréter les expériences. En effet, grâce à celui-ci, nous aurons accès à la densité de porteurs et au potentiel dans toute la structure, et nous pourrons ainsi établir les cinétiques de capture et d'émission d'électrons par le puits quantique.



## I-5 RESULTATS EXPERIMENTAUX

### a) Multipuits quantique

Nous avons étudié, par la technique C(V), des multipuits quantiques  $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}/\text{GaAs}/\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$  ( $x=0.39$ ) (Les caractéristiques de ces échantillons sont données sur la figure I-42). Les figures I-43 et I-44 montrent les C(V) et P.A. expérimentaux obtenus à différentes températures. On retrouve bien, sur le P.A., la périodicité de la structure ainsi que l'image de la localisation d'électrons dans les puits.

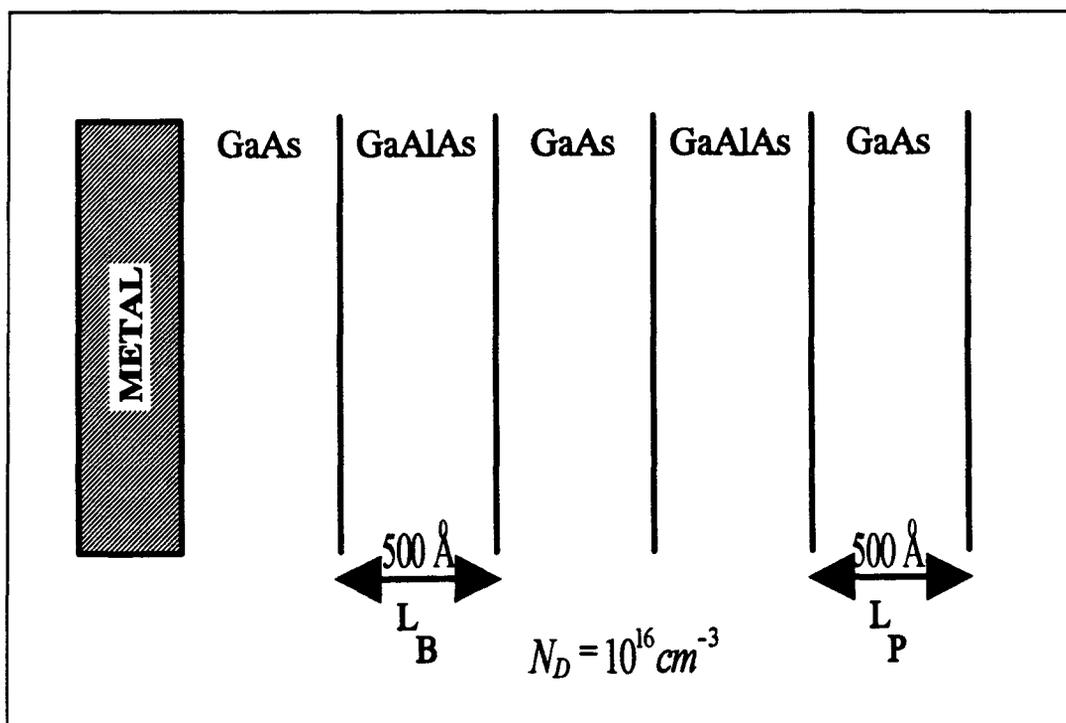


figure I-42: Caractéristiques du M.P.Q. étudié

Dans le paragraphe I-3-c, nous avons montré que, sur une telle structure, nous ne pouvons déterminer qu'un dopage moyen ( $N_{Dm}$ ), prenant en compte les densités de charges aux interfaces. Il suffit pour cela d'intégrer le P.A. . Dans notre cas, on a :

$$L_p = L_B = 500 \text{ \AA} , \quad \frac{\epsilon_p}{\epsilon_0} = 13.1 , \quad \frac{\epsilon_B}{\epsilon_0} = 12.0 [14] , \quad \text{soit} \quad \frac{\epsilon_m}{\epsilon_0} = 12.6$$

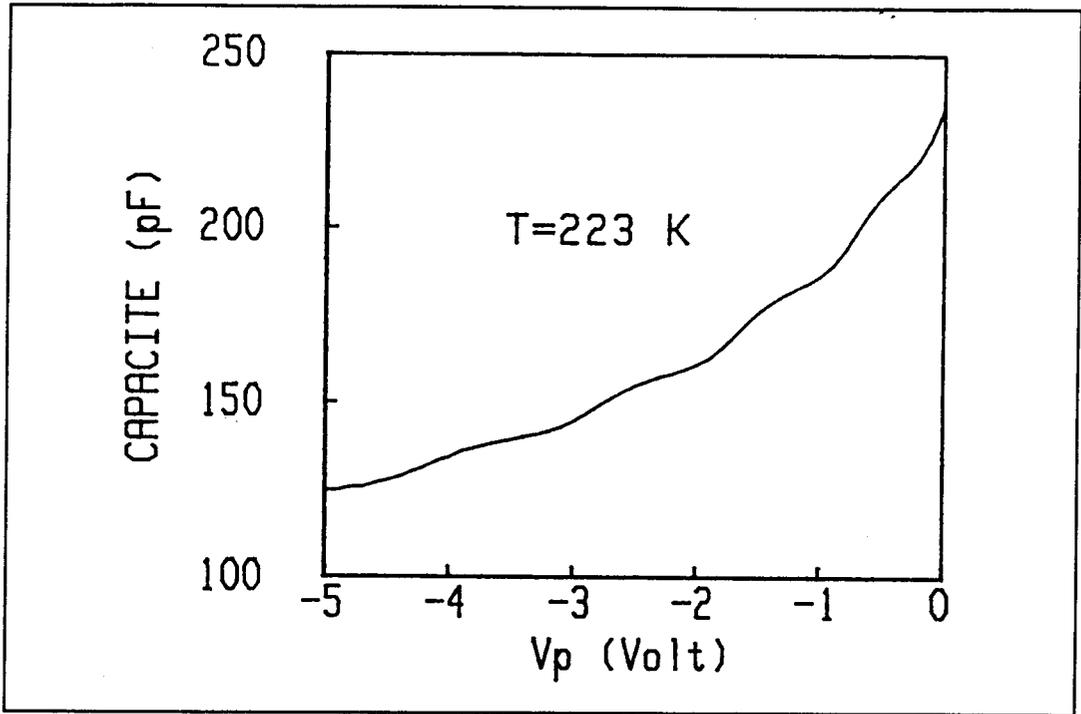


figure I-43: C(V) expérimental du M.P.Q.

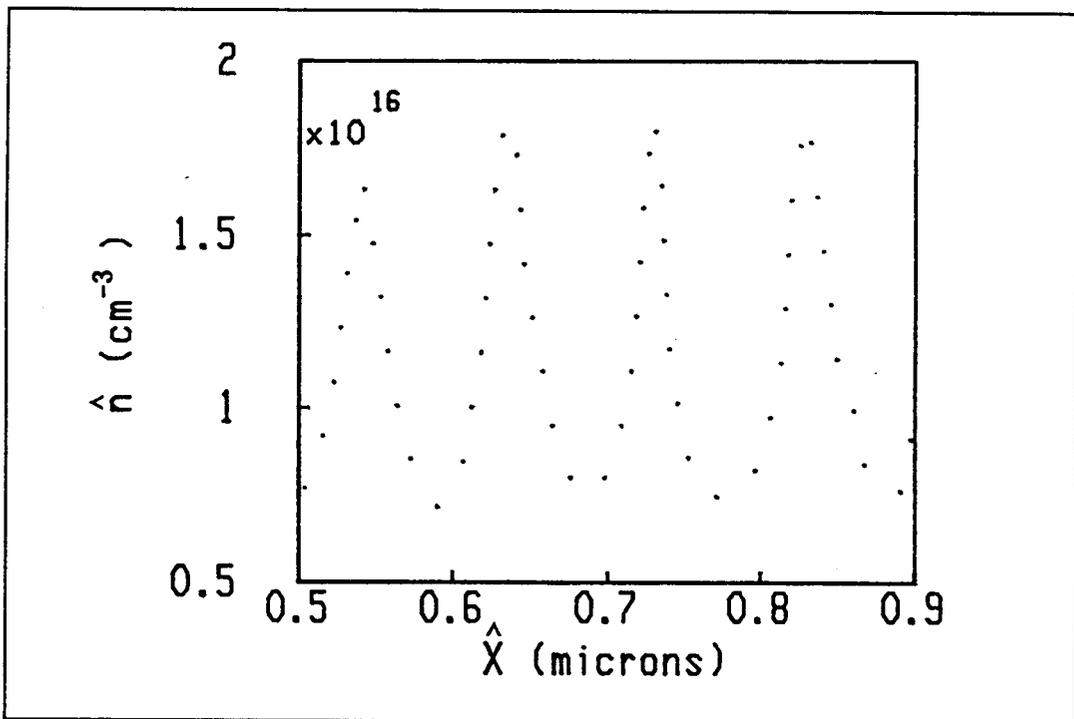


figure I-43: P.A. expérimental du M.P.Q.

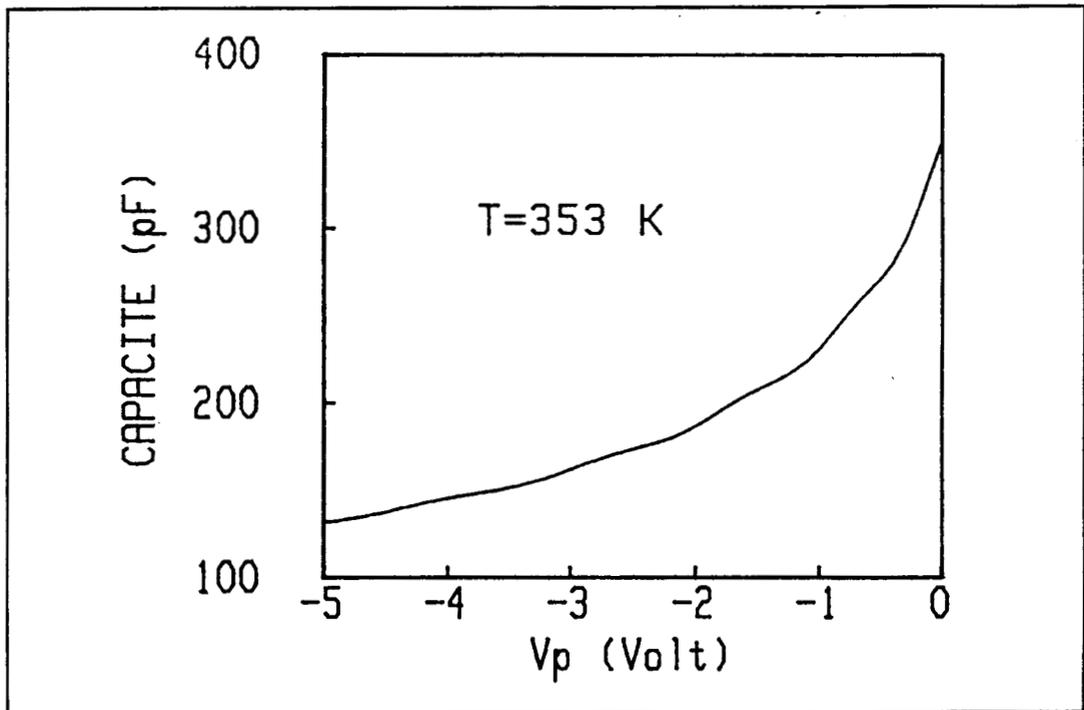


figure I-44: C(V) expérimental du M.P.Q.

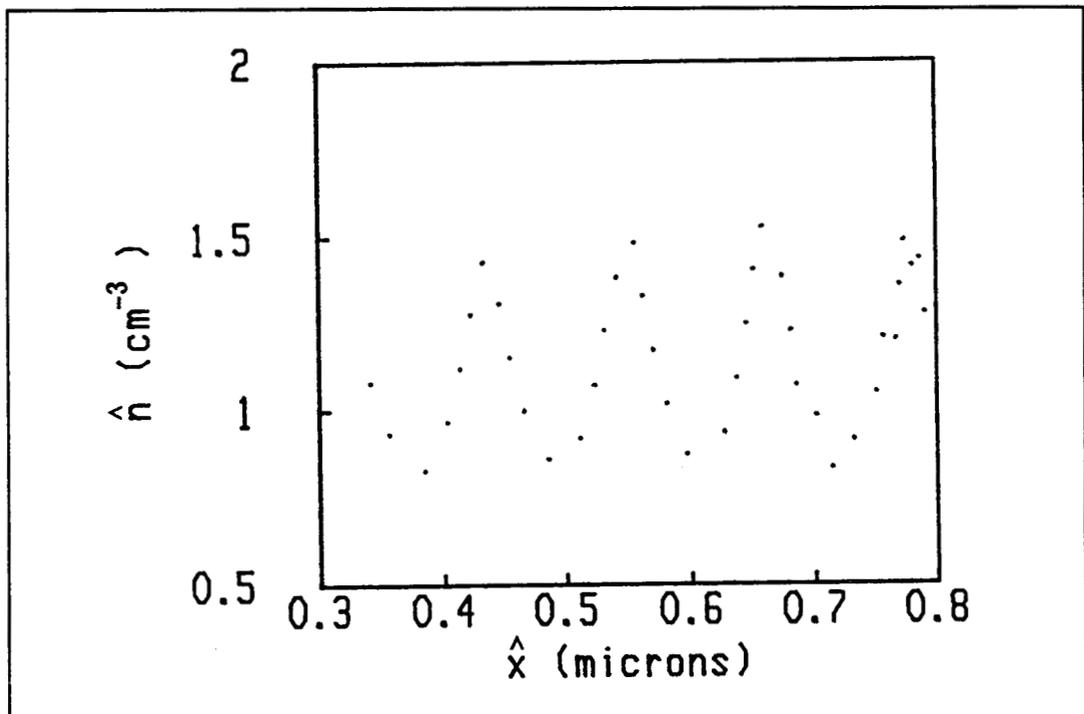


figure I-44: P.A. expérimental du M.P.Q.

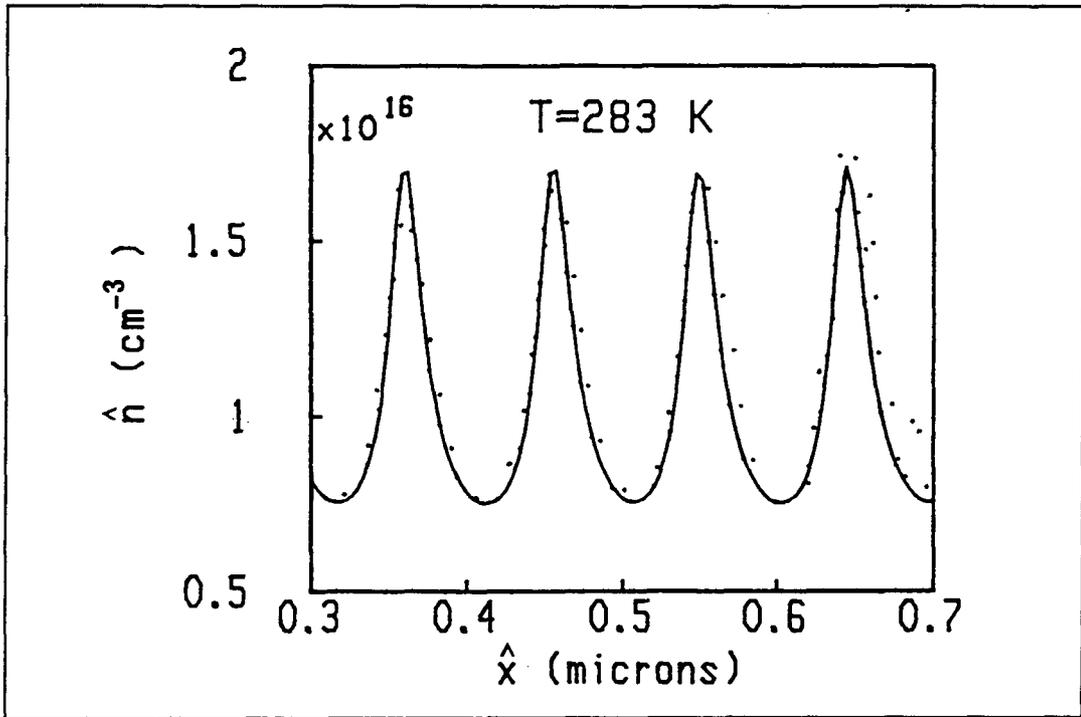


figure I-45: Comparaison entre le P.A. expérimental (...) et le P.A. simulé (—)

et on obtient, quelle que soit la température:

$$N_{Dm} = (1.1 \pm 0.1) 10^{16} \text{ cm}^{-3}$$

soit une valeur très proche de celle annoncée par le fondeur. Si on suppose que le dopage est constant et égal à celui annoncé, on a, par l'équation I-41:

$$0 < \frac{\sigma_1}{e} < 10^{10} \text{ cm}^{-2}$$

c'est à dire des interfaces "propres", résultat déjà obtenu sur ce système de matériaux dont la croissance est bien contrôlée [12]. On peut alors simuler le P.A. de cette structure et le comparer au P.A. expérimental (figure I-45).

Sur un M.P.Q., la technique C(V) est donc avare en informations et il sera nécessaire de développer d'autres techniques expérimentales afin d'obtenir notamment la D.B.C. . Cette étude fera l'objet du chapitre suivant.

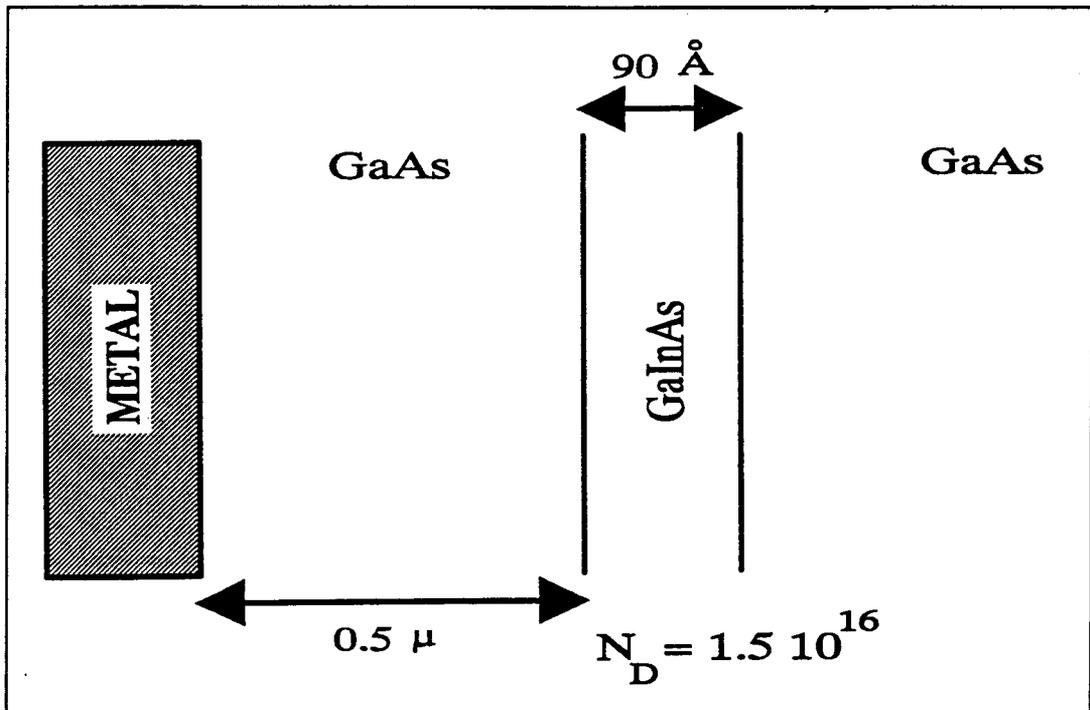


figure I-46: Caractéristiques du S.P.Q. étudié

#### b) Simple puits quantique

##### \* Détermination des paramètres

Nous avons appliqué la technique  $C(V)$  à des S.P.Q. GaAs/Ga<sub>x</sub>In<sub>1-x</sub>As/GaAs ( $x=0.25$ ) dont les caractéristiques sont données sur la figure I-46. Les figures I-47 et I-48 montrent les  $C(V)$  et les P.A. expérimentaux obtenus à différentes températures. Pour exploiter ces expériences, nous avons mis en oeuvre une méthode similaire à celle décrite dans le paragraphe I-3-b. Cependant, pour un S.P.Q., le nombre de paramètres à déterminer pour le S.P.Q. et le nombre de "caractéristiques d'ajustement" du P.A. correspondant sont plus importants (figure I-49), et l'exploitation est donc plus complexe. Nous avons pu, pourtant, ajuster indépendamment certains paramètres. En effet, les simulations montrent que  $L_{v2}$  et  $N_{v2}$  ne dépendent que de  $\Delta E_c$  et de  $\sigma_{12}$ , et que  $N_p$  ne dépend que de  $\Delta E_c$  et de  $\Sigma = \sigma_{11} + \sigma_{12}$ . Ainsi, pour une valeur donnée de la D.B.C., on peut déterminer des encadrements de  $\sigma_{11}$  et  $\sigma_{12}$ . Ensuite, en ajustant  $L_{v1}$  et  $N_{v1}$ , on affine

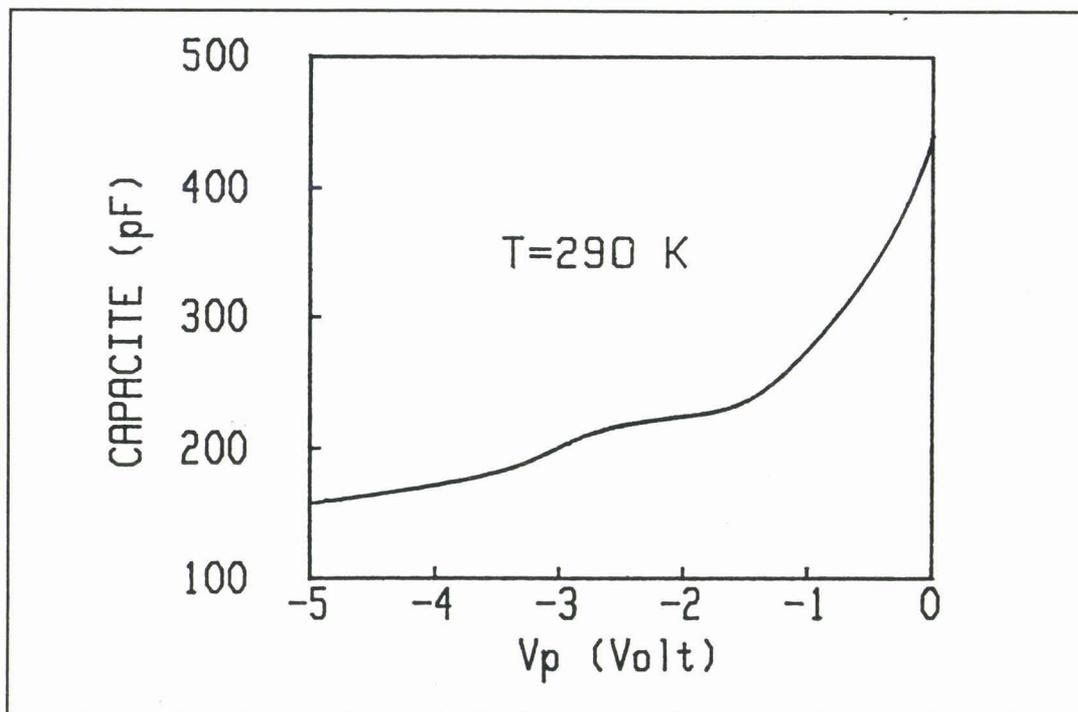


figure I-47: C(V) expérimental du S.P.Q.

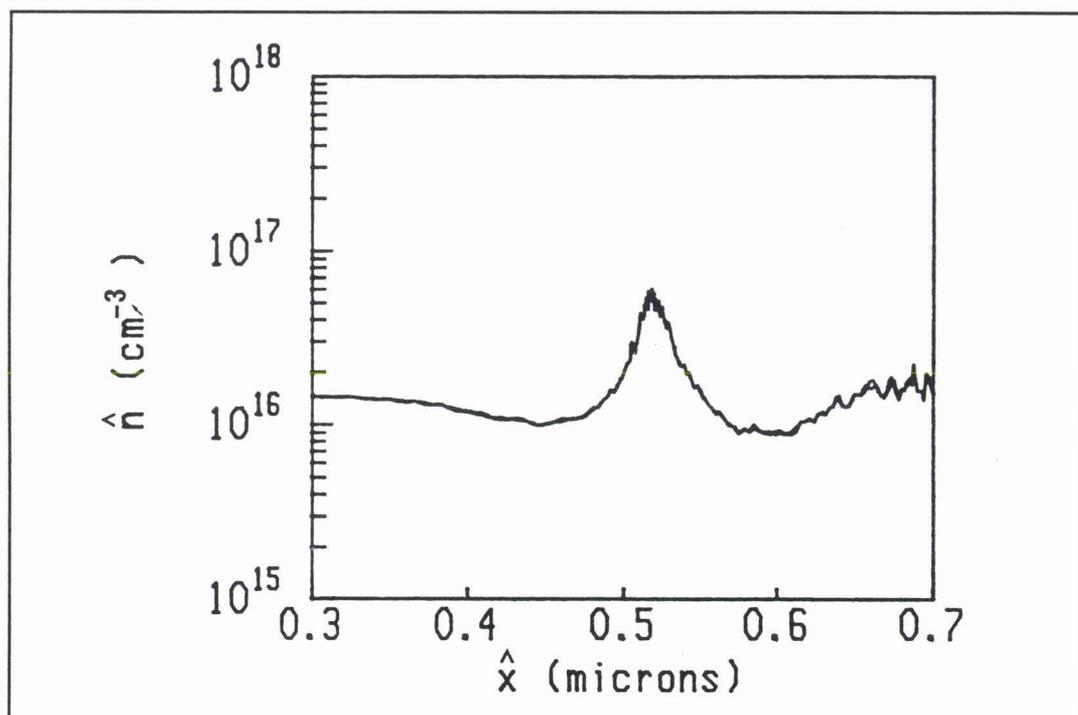


figure I-47: P.A. expérimental du S.P.Q.

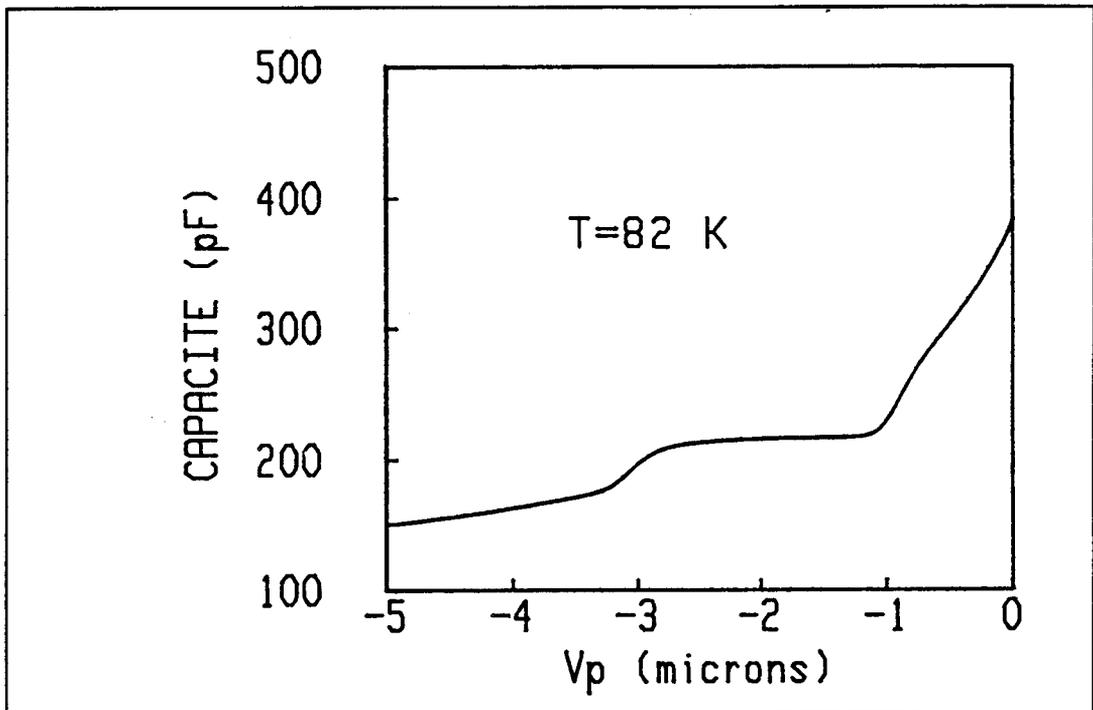


figure I-48:  $C(V)$  expérimental du S.P.Q.

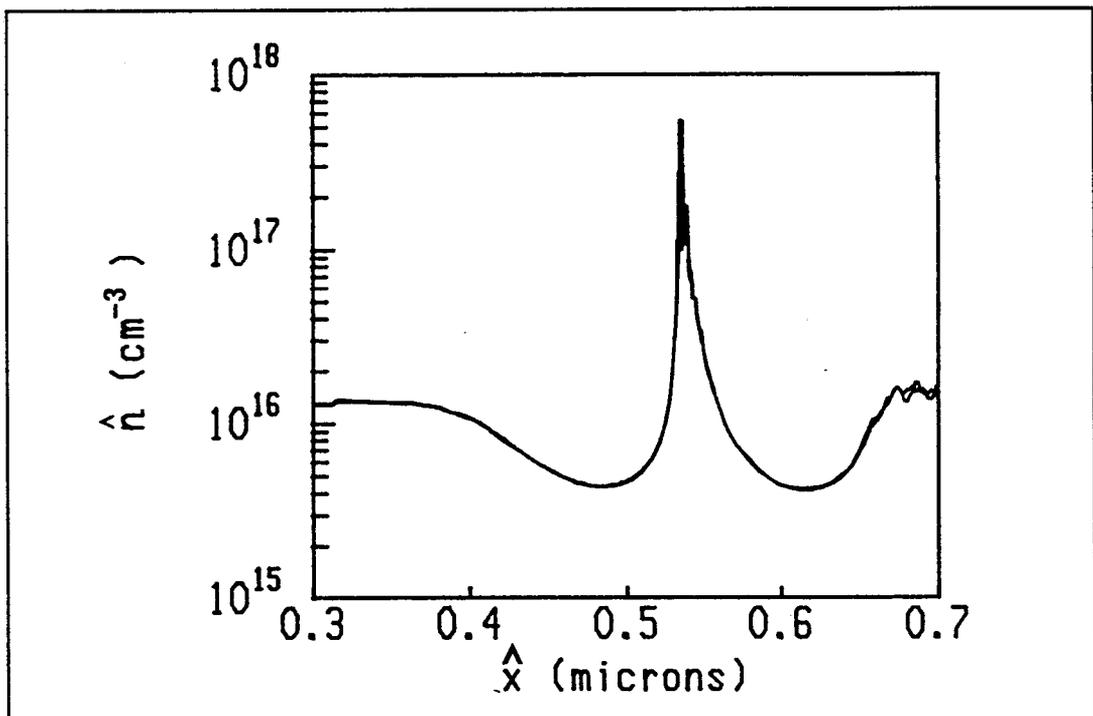


figure I-48: P.A. expérimental du S.P.Q.

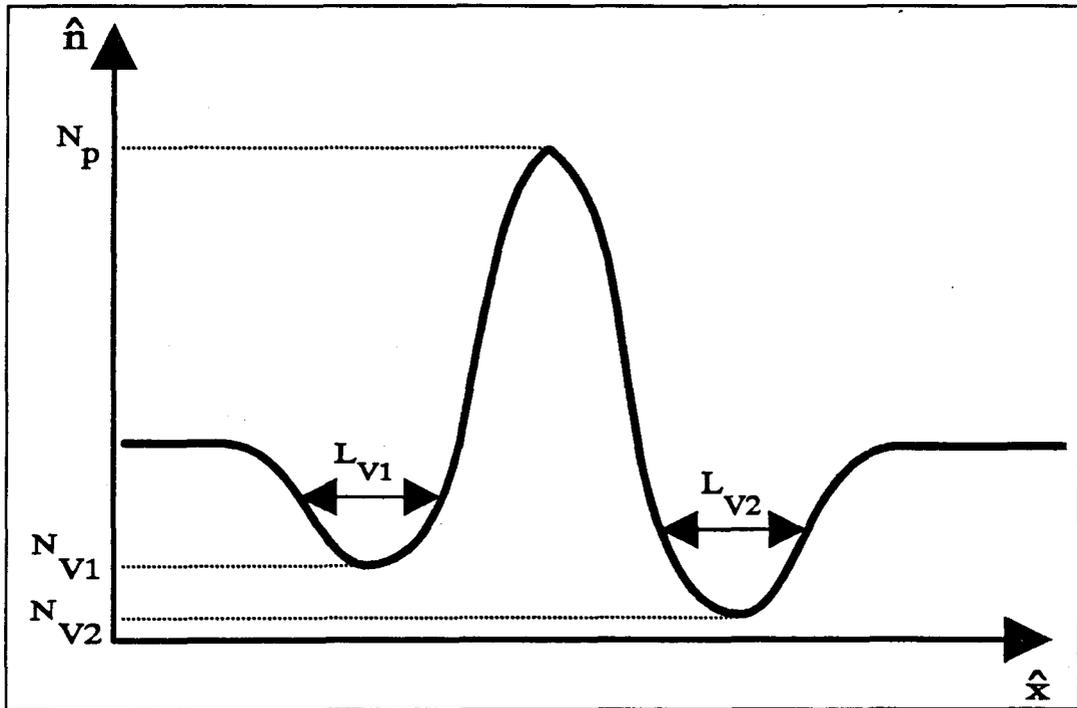


figure I-49: Caractéristiques d'ajustement d'un S.P.Q.

ces résultats et on trouve

$$\Delta E_c = 135 \pm 10 \text{ meV}$$

$$\frac{\sigma_{11}}{e} = (3 \pm 4) \times 10^{10} \text{ cm}^{-2} \quad \text{et} \quad \frac{\sigma_{12}}{e} = (-5 \pm 6) \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$$

On constate que la précision sur les densités superficielles de charges est très mauvaise et qu'on ne peut donc pas déterminer ces paramètres sur une telle structure. Par contre, l'erreur sur la D.B.C. est faible (<10%). La figure I-50 compare, pour deux températures différentes, les P.A. expérimentaux aux P.A. simulés obtenus avec ces paramètres.

#### \* Erreurs dues au modèle

Nous avons vu, dans le paragraphe I-3-d, que les approximations utilisées dans la version quantique du programme de simulation engendraient deux types d'erreurs. Cependant, grâce au modèle analytique du paragraphe I-4 et à l'annexe I-B, nous pouvons estimer

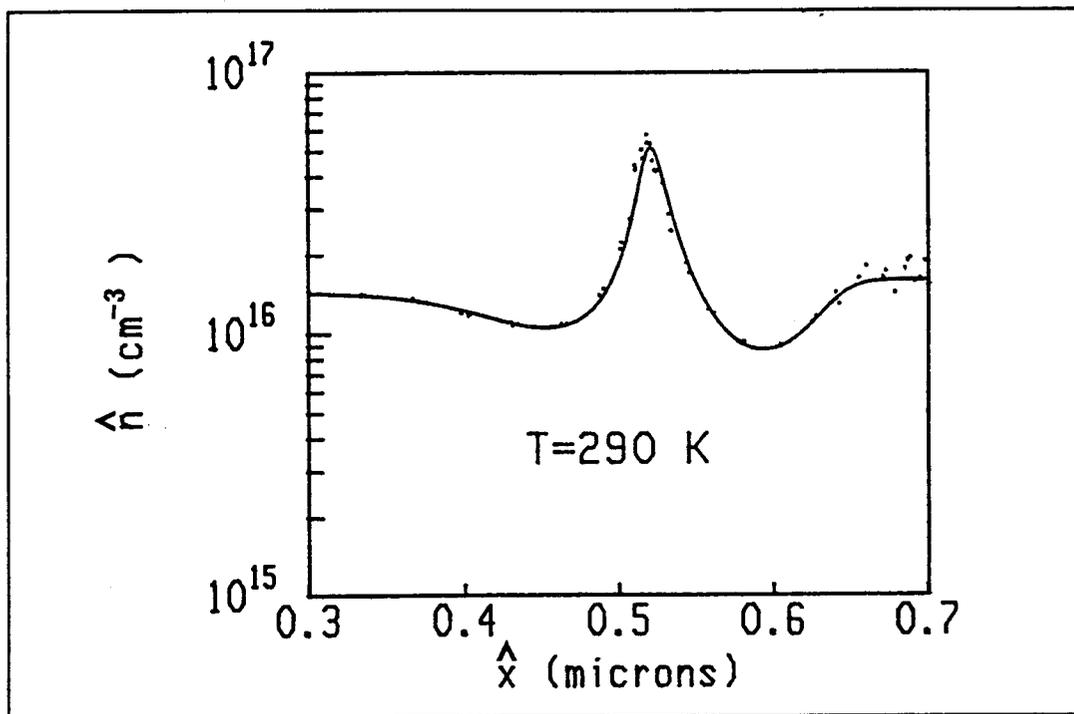


figure I-50: Comparaison entre le P.A. expérimental (...) et le P.A. simulé (—)

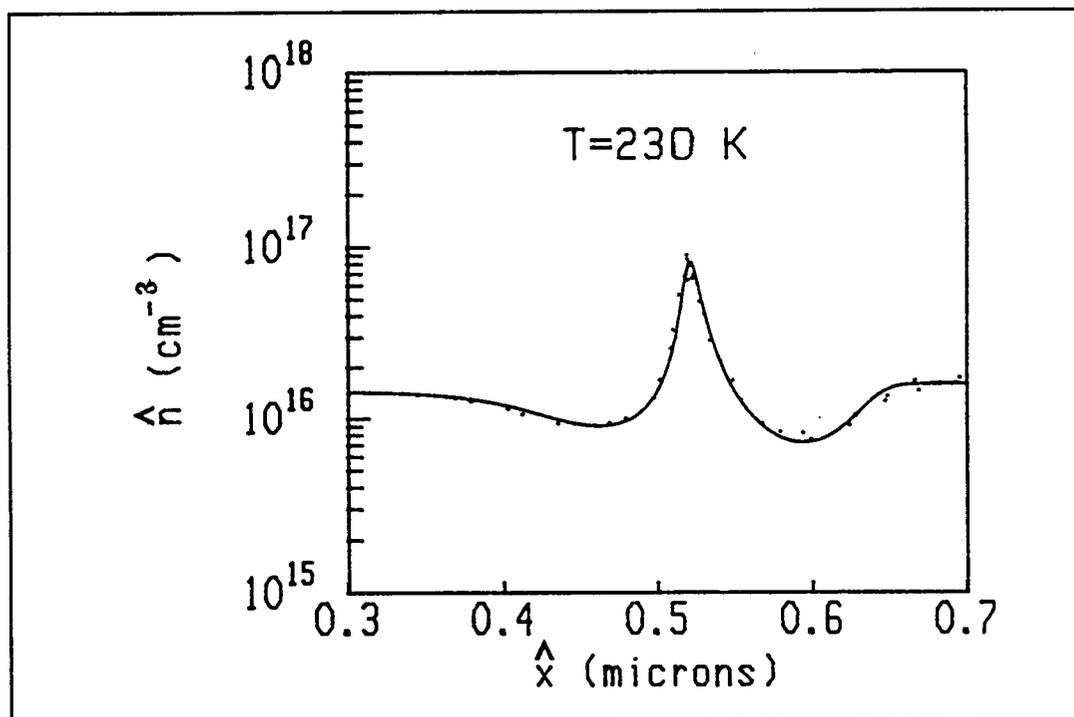


figure I-50: Comparaison entre le P.A. expérimental (...) et le P.A. simulé

simplement ces erreurs. La première, due à l'hypothèse d'une densité de charges constante dans le puits, porte sur la valeur de la capacité calculée. Par l'équation I-53, on calcule:

$$\frac{\delta C}{C} < 0.1\%$$

c'est à dire une valeur tout à fait négligeable. Ce résultat était prévisible, étant donnée la finesse du puits quantique ( $L_p = 95 \text{ \AA}$ ).

La seconde erreur influe sur le calcul des niveaux d'énergie dans le puits et nécessite donc une correction sur la valeur de la D.B.C. . Par l'équation I-52, on obtient:

$$-15 \text{ meV} < \delta E_c < -5 \text{ meV}$$

ce qui nous permet d'affiner le résultat obtenu plus haut. On trouve finalement:

$$\Delta E_c = 145 \pm 15 \text{ meV}$$

Ainsi, on a montré que la technique  $C(V)$ , appliquée à un S.P.Q., permettait de déterminer la discontinuité de bande d'un S.P.Q. avec une bonne précision ( $\sim 10 \%$ ) à condition d'utiliser une méthode systématique pour ajuster les paramètres et de tenir compte des erreurs dues au modèle utilisé.

## I-6 CONCLUSION

Dans ce chapitre, nous avons réalisé une étude systématique des capacités de la technique  $C(V)$  pour déterminer les paramètres d'une hétérostructure. Nous avons notamment montré que la méthode de Kroemer engendrait des erreurs importantes et qu'elle n'était applicable qu'à certains types d'hétérostructures. Nous avons alors développé une autre méthode, utilisant une simulation du  $C(V)$ , qui permet de limiter les erreurs sur les paramètres et qui peut être utilisée pour une plus large gamme de structures. De plus, en prenant en compte au premier ordre la quantification, nous avons pu déterminer la D.B.C. d'un S.P.Q. avec une bonne précision.

Cependant, pour certains types d'hétérostructure, cette méthode est inapplicable (M.P.Q. ...) et il est donc nécessaire de développer d'autres techniques expérimentales. Aussi, dans les deux prochains chapitres, nous étudierons deux méthodes de caractérisation qui nous permettront d'une part de déterminer la D.B.C. d'un M.P.Q. et d'autre part de valider le résultat obtenu sur le S.P.Q. .



BIBLIOGRAPHIE

1. A.R. RIBEN et D.L. FEUCHT, Solid State Electron., 9, 1055 (1966)
2. D.P. KENNEDY et al., IBM J. Res. Dev., 12, 399 (1968)
3. W.C. JOHNSON et P.T. PANOUSIS, IEEE Trans. Electron. Dev., ED-18, 965 (1971)
4. J.E.A. WHITEAWAY, Proc. IEEE, 130, 165 (1983)
5. H. KROEMER et al., Appl. Phys. Lett., 36(4), 295 (1980)
6. L.Y. LEU et S.R. FORREST, J. Appl. Phys., 64(10), 5030 (1988)
7. H. OKUMURA et al., Surface Science, 174, 5030 (1986)
8. M.O. WATANABE et al., J. Appl. Phys., 57(12), 5340(1985)
9. W.C. JOHNSON et PT. PANOUSIS, IEEE Trans. Electron., ED-18, 965 (1971)
10. M. MISSOUS et E.H. RHODERICK, Solid State Electron., 28(3), 233 (1985)
11. Les technologies actuelles permettent de réaliser des dopages très abrupts. A titre d'exemple, citons les TEGFET qui n'utilisent qu'un espaceur de 30 ou 40 Angströms pour séparer une zone dopée à  $10^{18} \text{ cm}^{-3}$  du canal non dopé !
12. J.M. ROGEZ, D.E.A. de sciences des matériaux, Université des sciences et techniques de LILLE-FLANDRES-ARTOIS, 1990
13. X. LETARTRE et al., J. Appl. Phys., 68(1), 116 (1990)
14. S. ADACHI, J. Appl. Phys., 58(3), R1 (1985)



<b>Chapitre II : TECHNIQUES SPECTROSCOPIQUES</b>
--

**A) SPECTROSCOPIE D'ADMITTANCE SUR UN MULTIPUITS QUANTIQUE**II-A-1 IntroductionII-A-2 PrincipeII-A-3 Détermination de la discontinuité de bande

- a) Expression de la conductance
- b) Calcul du niveau de Fermi

II-A-4 Résultats expérimentauxII-A-5 Conclusion**B) D.L.T.S. SUR UN PUIITS QUANTIQUE**II-B-1 IntroductionII-B-2 Comportement d'un puits quantique en D.L.T.S.

- a) Position du problème
- b) Emission thermo-ionique
- c) Emission tunnel
- d) Simulation du spectre D.L.T.S.

II-B-3 Résultats expérimentaux

- a) Détermination de la discontinuité de bande
- b) Discussion

II-B-4 Conclusion



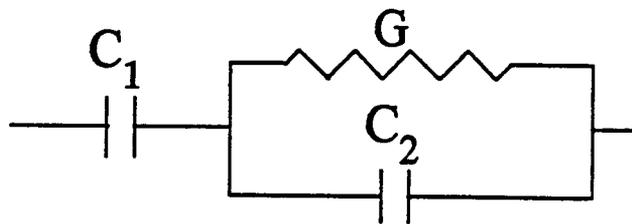
## A) SPECTROSCOPIE D'ADMITTANCE SUR UN MULTIPUITS QUANTIQUE

### I-A-1 INTRODUCTION

Nous avons montré, dans le premier chapitre, que la technique  $C(V)$  était limitée quant à la détermination de la discontinuité de bande d'une hétérostructure. En effet, cette détermination est impossible sur certains types de structure tel que le M.P.Q. . L'objet de cette partie est de présenter une autre technique électrique, la spectroscopie d'admittance ( $G(\omega)$ ), qui, appliquée à un M.P.Q., va permettre une mesure précise de  $\Delta E_c$ .

A l'origine, le  $G(\omega)$  a été développé pour étudier les états d'interface sur des structures M.O.S. (Métal Oxyde Semi-conducteur) [1,2]. Cette technique a ensuite été abandonnée au profit de la D.L.T.S. (Deep Level Transient Spectroscopy) [3] qui s'est montrée beaucoup plus performante pour étudier les défauts présents à l'interface oxyde-semi-conducteur [4].

Le principe de cette technique est de mesurer, en fonction de la température et de la fréquence, l'admittance d'une structure dont le schéma équivalent peut se ramener à:



et d'observer les pics de conductance associés à la résonance électrique de ce circuit.

Le  $G(\omega)$  a vu récemment son champ d'application s'élargir. En effet, Lang a montré que celui-ci permettait la mesure de la D.B. sur un M.P.Q. [5,6,7]. Dans cette partie, nous présentons le modèle permettant d'interpréter les mesures sur un M.P.Q. . Nous montrons notamment que l'on peut améliorer la précision de cette technique en prenant en compte la variation du niveau de Fermi avec la température. Enfin nous exposons les résultats expérimentaux obtenus sur un M.P.Q. GaAs/GaAlAs.

## II-A-2 PRINCIPE

La figure II-1 représente la bande de conduction d'un M.P.Q. (dopé n) soumis à une d.d.p., ainsi que le schéma électrique équivalent correspondant. La zone de charge d'espace créée par la polarisation est assimilée à une capacité  $C_1$  alors que le reste de la structure peut être schématisée par la mise en parallèle d'une capacité  $C_2$  (capacité de cette région si elle était vide de porteurs libres) et d'une conductance  $G$  représentant la conduction dans le M.P.Q. .

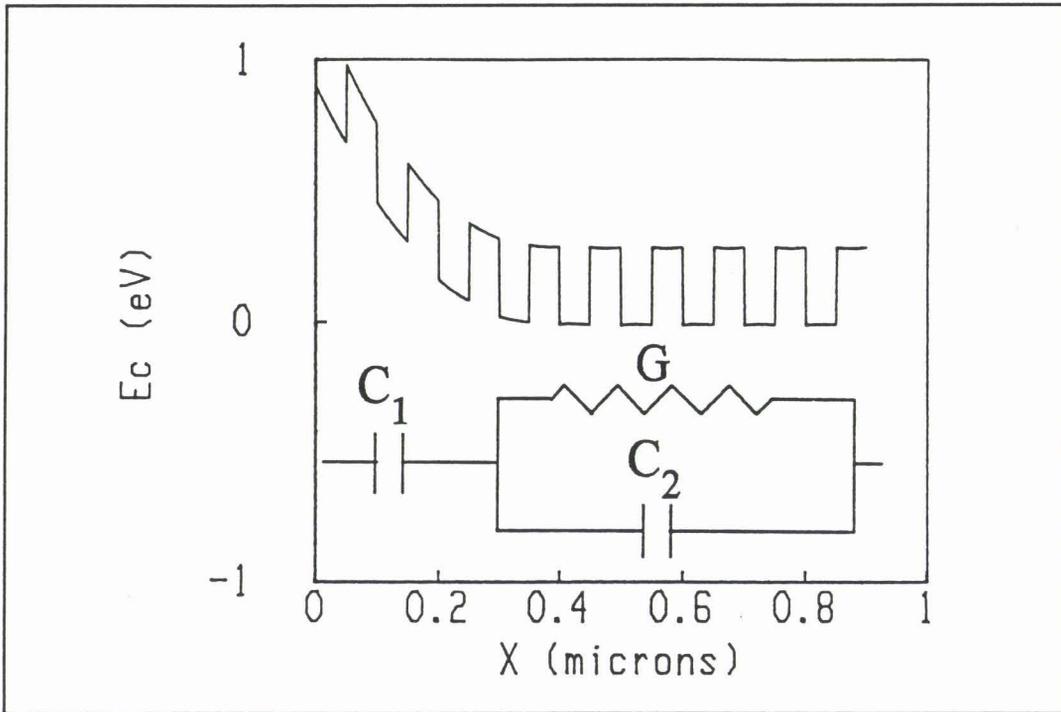


figure II-1: Bande de conduction et schéma équivalent d'un multipuits quantique partiellement déserté

A l'aide d'un impédancemètre, on peut alors mesurer la conductance,  $G_m$ , et la capacité,  $C_m$ , équivalentes à ce circuit. L'identité des admittances complexes impose:

$$G_m = \frac{G C_1^2 \omega^2}{G^2 + (C_1 + C_2)^2 \omega^2} \quad \text{II-1}$$

et:

$$C_m = \frac{G^2 C_1 + C_1 C_2 (C_1 + C_2) \omega^2}{G^2 + (C_1 + C_2)^2 \omega^2} \quad \text{II-2}$$

avec  $\omega = 2\pi f$ ,  $f$  étant la fréquence de mesure.

Le principe de la mesure consiste alors à relever l'évolution de ces grandeurs en fonction de la température, et ceci pour différentes valeurs de la fréquence. Les capacités  $C_1$  et  $C_2$  sont liées aux propriétés diélectriques de la structure et peuvent donc être supposées indépendantes de la température. Pour une fréquence donnée,  $G_m$  ne variera donc que par l'intermédiaire de  $G$ . La dérivée de cette fonction s'écrit:

$$\frac{dG_m}{dT} = \frac{-C_1^2 \omega^2 [G^2 - (C_1 + C_2)^2 \omega^2]}{[G^2 + (C_1 + C_2)^2 \omega^2]^2} \times \frac{dG}{dT}$$

et la fonction  $G_m(T)$  présente donc un maximum quand:

$$G = (C_1 + C_2) \omega \quad \text{II-3}$$

De plus, à basse température ( $G=0$ ), les équations II-1 et II-2 deviennent:

$$G_m = 0 \quad \text{et} \quad C_m = \frac{C_1 C_2}{C_1 + C_2}$$

et le M.P.Q. est alors équivalent à une pure capacité d'isolant de largeur  $L$ . A haute température ( $G=\infty$ ), on trouve:

$$G_m = 0 \quad \text{et} \quad C_m = C_1$$

et on a simplement une zone de charge d'espace de largeur  $W$ .

Cependant, pour connaître  $G_m$  et  $C_m$  à toute température et donc interpréter les mesures, il est nécessaire d'exprimer la conductance  $G$  en fonction de la température en étudiant les mécanismes de conduction dans un M.P.Q. .

### II-A-3 DETERMINATION DE LA DISCONTINUITÉ DE BANDE

#### a) Expression de la conductance

Deux processus physiques régissent les phénomènes de conduction dans un M.P.Q. (figure II-2). Le premier est l'effet tunnel qui n'apparaît de façon significative que si les barrières sont étroites ( $\lesssim 100 \text{ \AA}$ ). En réalité, si cette contribution est importante, la structure n'est plus à proprement parler un M.P.Q. mais un super-réseau; c'est à dire que la conduction est alors gouvernée par la mini-bande associée à cet effet tunnel [8,9]. Le second est l'effet thermo-ionique correspondant au transport des électrons suffisamment activés thermiquement pour franchir les barrières.

Dans notre étude, nous nous limiterons à des M.P.Q. dont les barrières sont assez larges ( $\gtrsim 200 \text{ \AA}$ ) pour que l'on puisse négliger l'effet tunnel. Lorsque le multipuits est soumis à un champ électrique  $F$  (figure II-3), la densité de courant thermo-ionique sera donnée par [10,11]:

$$J = A^* T^2 \exp\left(\frac{E_F - \Delta E_c}{kT}\right) \left[ \exp\left(\frac{e F L_p}{2 kT}\right) - 1 \right] \quad \text{II-4}$$

où  $E_F$  est référencé au bas du puits et où  $A^*$  est la constante de Richardson de la barrière:

$$A^* = \frac{e m_B^* k^2}{2 \pi^2 \hbar^3}$$

La conductivité  $\sigma$  s'obtient alors en dérivant cette expression par rapport à  $F$ . Comme le multipuits est sous champ nul hors de la zone désertée, on obtient:

$$\sigma = \frac{e A^* L_p}{2 k} T \exp\left(\frac{E_F - \Delta E_c}{kT}\right) \quad \text{II-5}$$

Soit pour la conductance:

$$G = \frac{\sigma S}{L} = \frac{e^2 S m_B^* L_p}{4 \pi^2 \hbar^3 L} kT \exp\left(\frac{E_F - \Delta E_c}{kT}\right) \quad \text{II-6}$$

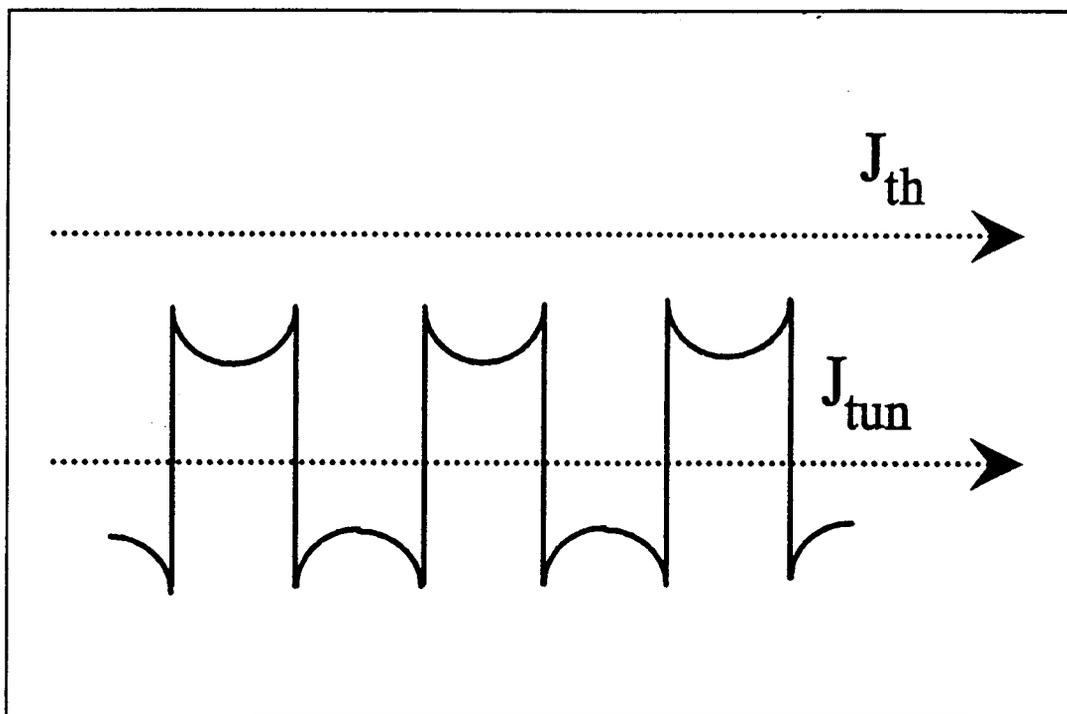


figure II-2: Processus de conduction dans un M.P.Q.

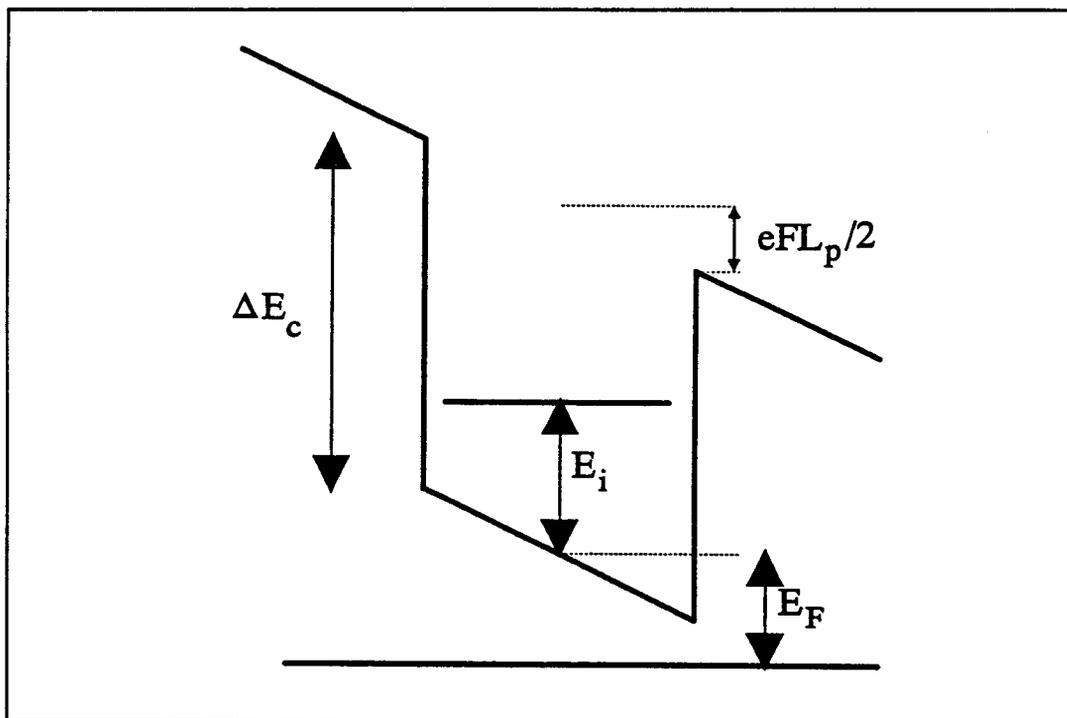


figure II-3: Puits quantique soumis à un champ électrique

où  $S$  est la surface de l'échantillon et  $L$  la longueur de la partie non désertée de la structure. Les équations II-1, II-2 et II-6 permettent, pour un M.P.Q. donné, de calculer la conductance et la capacité équivalentes en fonction de la température et de la fréquence de mesure. Nous avons effectué ce calcul dans le cas d'un M.P.Q. GaAs/GaAlAs de 1000 Å de période (figure II-4). On observe un maximum de  $G_m$  pour une température  $T_{pic}$  dépendant de la fréquence. Les équations II-3 et II-6 imposent:

$$f = \alpha kT_{pic} \exp\left(\frac{E_F - \Delta E_c}{kT_{pic}}\right) \quad \text{II-7}$$

expression qui peut se mettre sous la forme:

$$\text{Log}\left(\frac{f}{kT_{pic}}\right) = \frac{E_F - \Delta E_c}{kT_{pic}} + \text{Log}(\alpha) \quad \text{II-8}$$

où:

$$\alpha = \frac{e^2 S m_B^* L_p}{8 \pi^3 \hbar^3 L} \frac{1}{C_1 + C_2}$$

Pour exploiter leurs résultats, les précédents auteurs [5,6,7] traçaient alors  $\text{Log}(f/kT_{pic})$  en fonction de  $1/kT_{pic}$  et mesuraient la pente  $\lambda$  de cette droite. Ils déterminaient ainsi la D.B.C. par:

$$\Delta E_c = E_{F0} - \lambda \quad \text{II-9}$$

où  $E_{F0}$  est le niveau de Fermi pour une température absolue nulle. Comme nous allons le voir, cette méthode induit des erreurs non négligeables sur la valeur de la discontinuité. En effet, dans l'équation II-8,  $E_F$  est le niveau de Fermi à la température  $T_{pic}$  et non celui à zéro degré Kelvin. La formule II-9 n'est donc valable que si, dans la gamme de température expérimentale, le niveau de Fermi suit une loi linéaire avec la température de la forme:

$$E_F(T) = \mu kT + E_{F0} \quad \text{II-10}$$

où  $\mu$  est une constante.

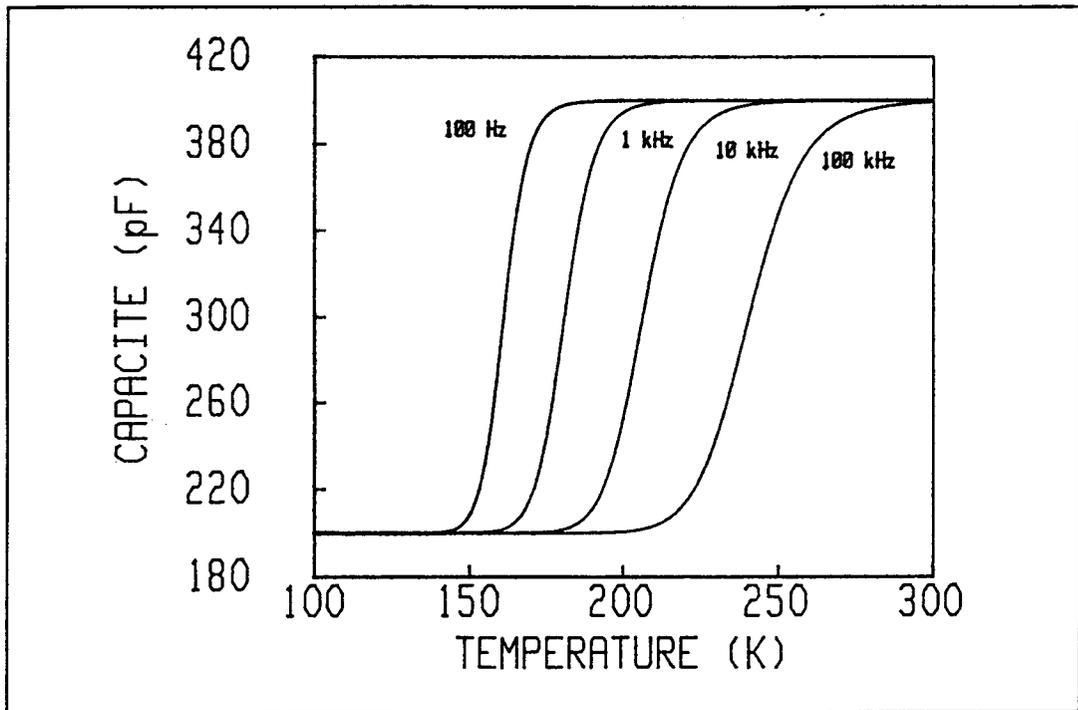


figure II-4: Evolution de la capacité d'un M.P.Q. avec la température pour différentes fréquences de mesure

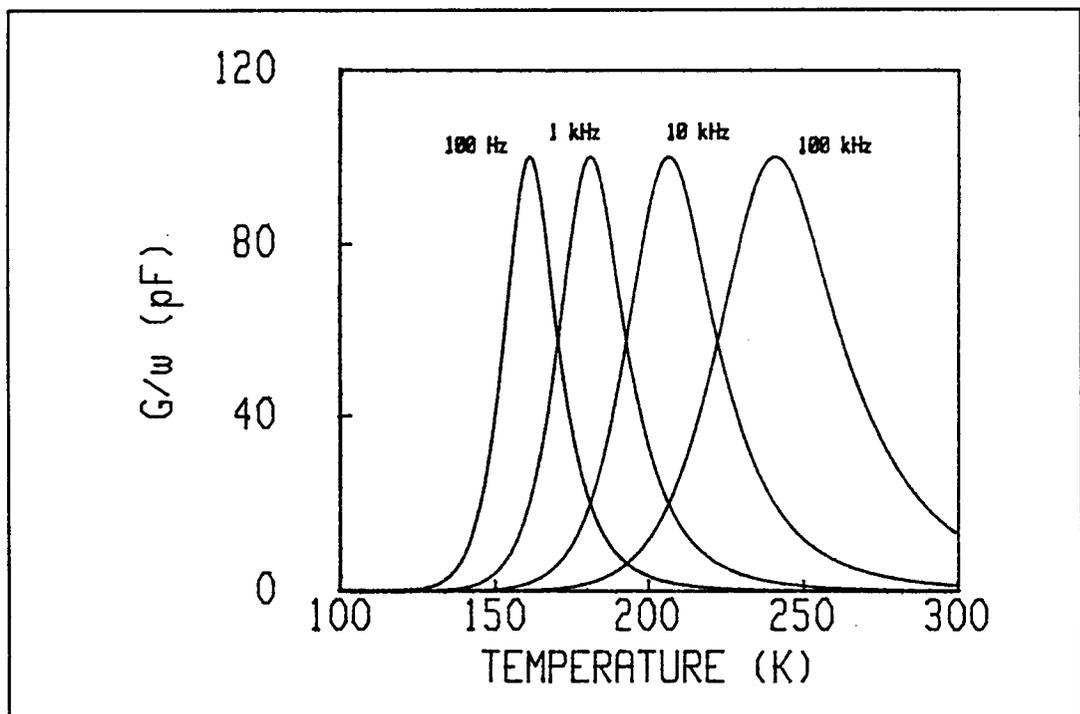


figure II-4: Evolution de la conductance d'un M.P.Q. avec la température pour différentes fréquences de mesure

Nous allons maintenant montrer que cette relation n'est pas vérifiée en calculant exactement le niveau de Fermi dans le M.P.Q. [10].

### b) Calcul du niveau de Fermi

Nous avons vu au paragraphe I-3-c que, pour un "vrai" M.P.Q. ( $L_B$  suffisamment grande), la densité de porteurs dans les barrières était quasiment nulle. De part la périodicité de la structure, la concentration d'électrons dans les puits est alors donnée par:

$$N_p = \frac{N_{DP} L_p + N_{DB} L_B}{L_p} \quad \text{II-11}$$

Ces particules se répartissent entre les niveaux du puits ( $E_i$ ) et le niveau associé aux atomes donneurs ( $E_D$ ), et on a (équation I-59):

$$N_p = \frac{m_p^* kT}{L_p \pi \hbar^2} \sum_{i=1}^M \left[ \text{Log} (1 + e^{u_i}) - u_i \right] + \frac{N_{DP}}{1 + \frac{1}{2} \exp\left(\frac{u_D}{kT}\right)} \quad \text{II-12}$$

avec:

$$u_i = \frac{E_i - E_F}{kT} \quad \text{et} \quad u_D = \frac{E_D - E_F}{kT}$$

Les équations II-11 et II-12 permettent de calculer numériquement le niveau de Fermi en fonction de la température. La figure II-5 montre le résultat de ce calcul pour un M.P.Q. de 1000 Å de période ( $N_D = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$ ). On voit qu'à haute température,  $E_F$  suit localement une loi linéaire:

$$E_F = \mu kT + E_{F0}^*$$

mais que  $E_{F0}^*$  n'est pas égale au niveau de Fermi à 0 K. Aussi, en appliquant la méthode précédemment décrite (équation II-9), on sous-estime la D.B.C. du M.P.Q. de:

$$\delta(\Delta E_c) = E_{F0}^* - E_{F0}$$

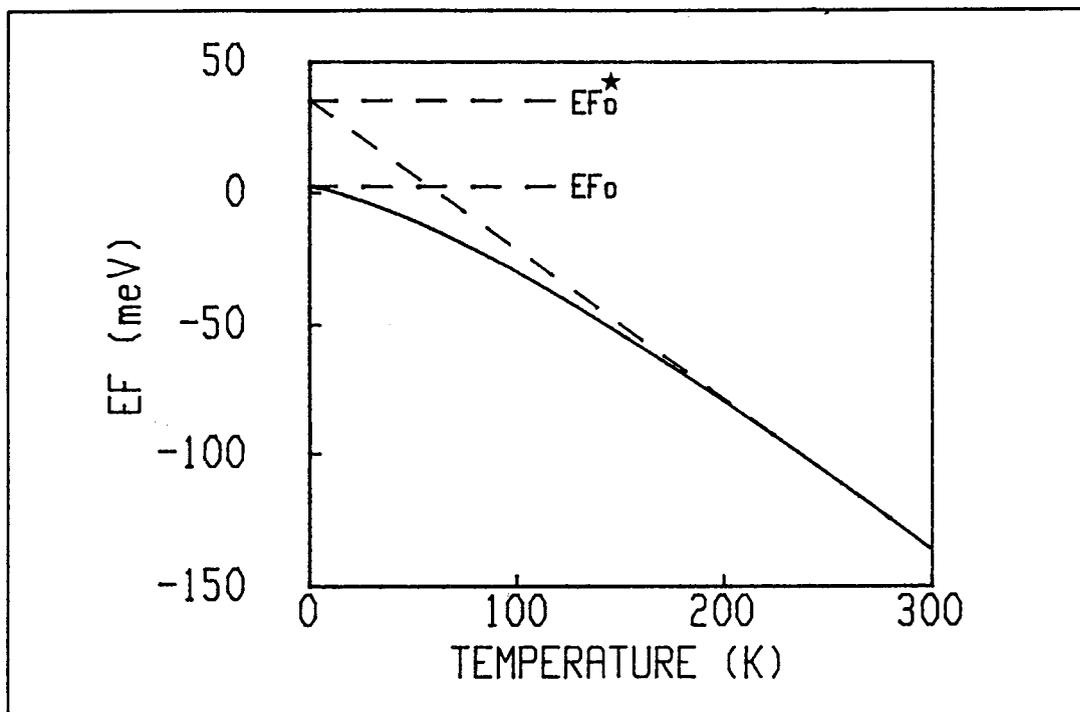


figure II-5: Evolution de la position du niveau de Fermi par rapport à la bande de conduction du puits avec la température (—). Approximation linéaire (---)

La figure II-5 montre que cette erreur peut être importante ( $\sim 50$  meV) et qu'il est donc indispensable de tenir compte de la variation du niveau de Fermi avec la température.

Pour interpréter nos mesures, nous calculerons donc exactement le niveau de Fermi à chaque température  $T_{pic}$  et nous tracerons  $[\text{Log}(f/kT_{pic}) - E_F/kT]$  en fonction de  $1/kT$ , la pente de cette droite nous donnant directement la D.B.C. .

#### II-A-4 RESULTATS EXPERIMENTAUX

Nous avons appliqué la spectroscopie d'admittance aux M.P.Q. du paragraphe I-5-a. La figure II-6 montre la conductance et la capacité mesurées pour des fréquences allant de 100 Hz à 100 kHz, et ceci pour une polarisation  $V_p = 0$ . En premier lieu, on constate que l'on retrouve bien l'allure des courbes théoriques de la figure II-4. De plus, à partir des tracés d'Arrhenius correspondants à deux d.d.p. différentes

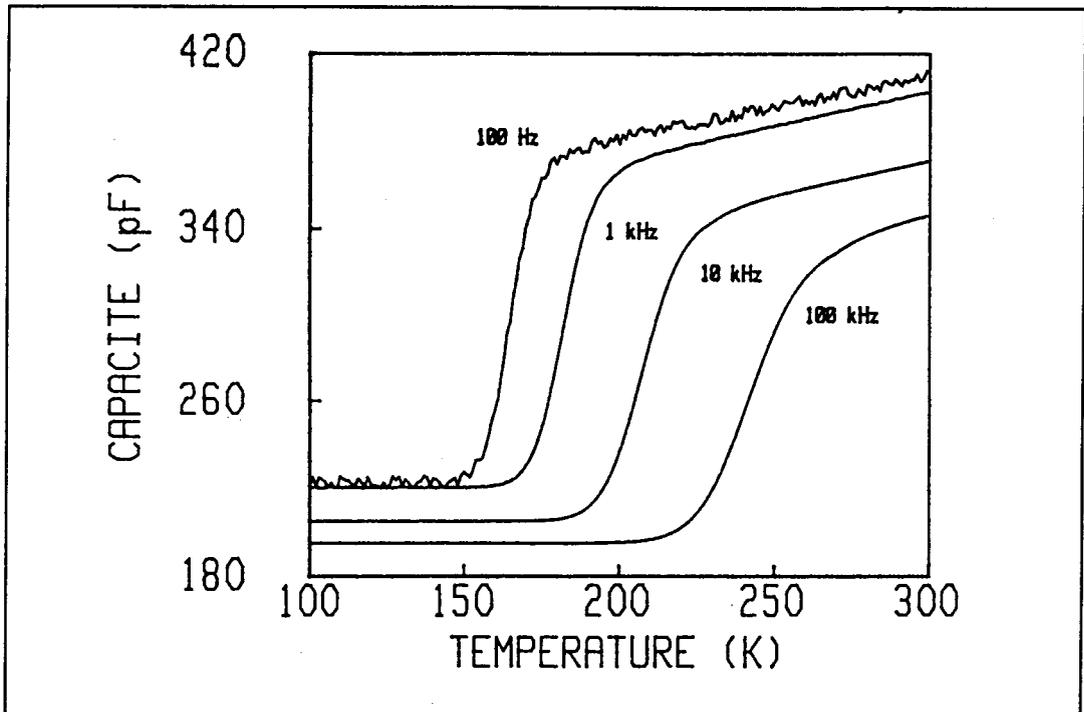


figure II-6: Evolution de la capacité du M.P.Q. avec la température pour différentes fréquences de mesure

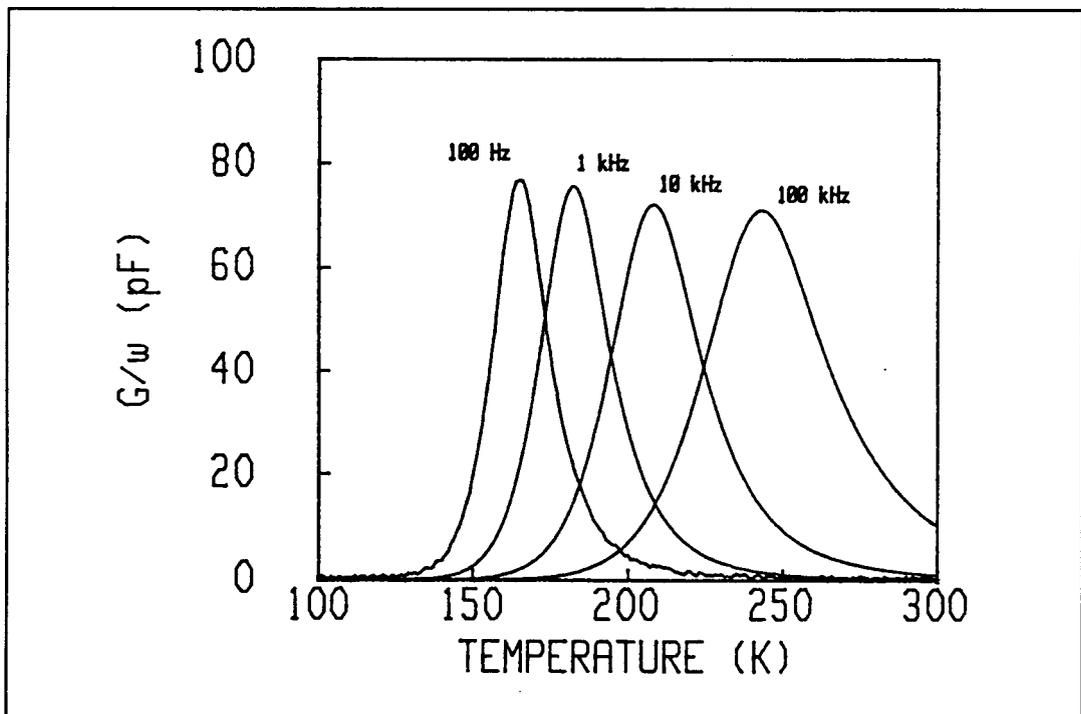


figure II-6: Evolution de la conductance du M.P.Q. avec la température pour différentes fréquences de mesure

(figure II-7), on détermine:

$$\left\{ \begin{array}{l} \Delta E_{cm} = 300 \pm 10 \text{ meV} \\ \alpha = (1 \pm 0.7) \times 10^{33} \text{ J}^{-1} \text{ s}^{-1} \end{array} \right. \quad \text{pour } V_p = 0 \text{ V}$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \Delta E_{cm} = 300 \pm 10 \text{ meV} \\ \alpha = (2.8 \pm 0.7) \times 10^{33} \text{ J}^{-1} \text{ s}^{-1} \end{array} \right. \quad \text{pour } V_p = -3 \text{ V}$$

On voit, sur la figure II-8, que, par la technique précédente, on aurait commis une erreur de l'ordre de:

$$E_{F0}^* - E_{F0} = 25 \text{ meV}$$

valeur supérieure à la précision expérimentale.

Le fait que la D.B.C. mesurée soit indépendante de la d.d.p. appliquée valide la méthode que nous avons utilisée. De plus, la variation du paramètre  $\alpha$  est facilement interprétable. En effet, quand la polarisation augmente, la zone déplétée s'accroît et la capacité  $C_1$  diminue suivant une loi en  $(V_{D0} - V_p)^{-0.5}$ , où  $V_{D0}$  est la hauteur de barrière Schottky. En prenant  $V_{D0} \approx 1 \text{ V}$ , on calcule:

$$\frac{\alpha(-3)}{\alpha(0)} \approx 2$$

ce qui correspond bien à l'ordre de grandeur obtenu expérimentalement.

La valeur de  $\Delta E_c$  obtenue doit être encore corrigée par deux effets (figure II-9). Tout d'abord, un effet tunnel peut se produire vers le puits parabolique situé au sommet de la barrière, ce qui aura pour effet de diminuer  $\Delta E_{cm}$  d'une valeur  $\delta$ . De plus, dans les calculs précédents, nous avons négligé le léger bombement de potentiel,  $\beta$ , créé par la charge électronique au bas du puits : le niveau de Fermi et donc  $\Delta E_{cm}$  ont ainsi été sous-estimés de  $\beta$ . La discontinuité du M.P.Q. est alors donnée par:

$$\Delta E_c = \Delta E_{cm} + \beta + \delta \quad \text{II-13}$$

Dans notre cas, on peut estimer:

$$\delta \approx 1 \text{ meV [5]} \quad \text{et} \quad \beta = 4 \text{ meV}$$

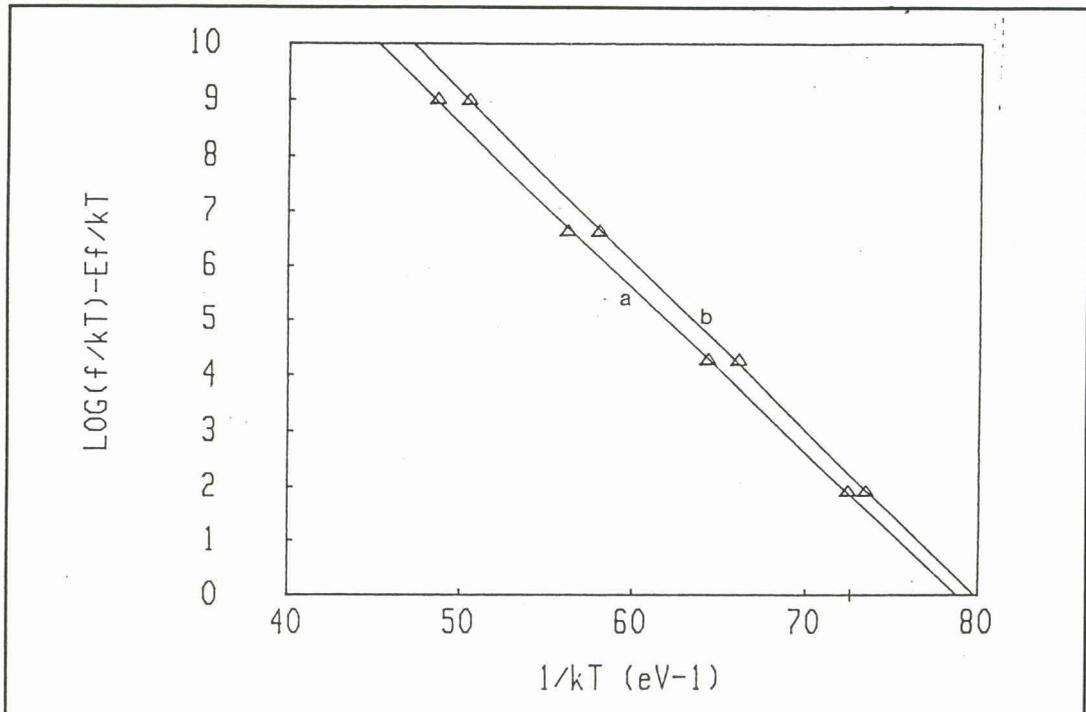


figure II-7: Tracés d'Arrhenius pour deux polarisations différentes, a: 0 V, b: -3 V

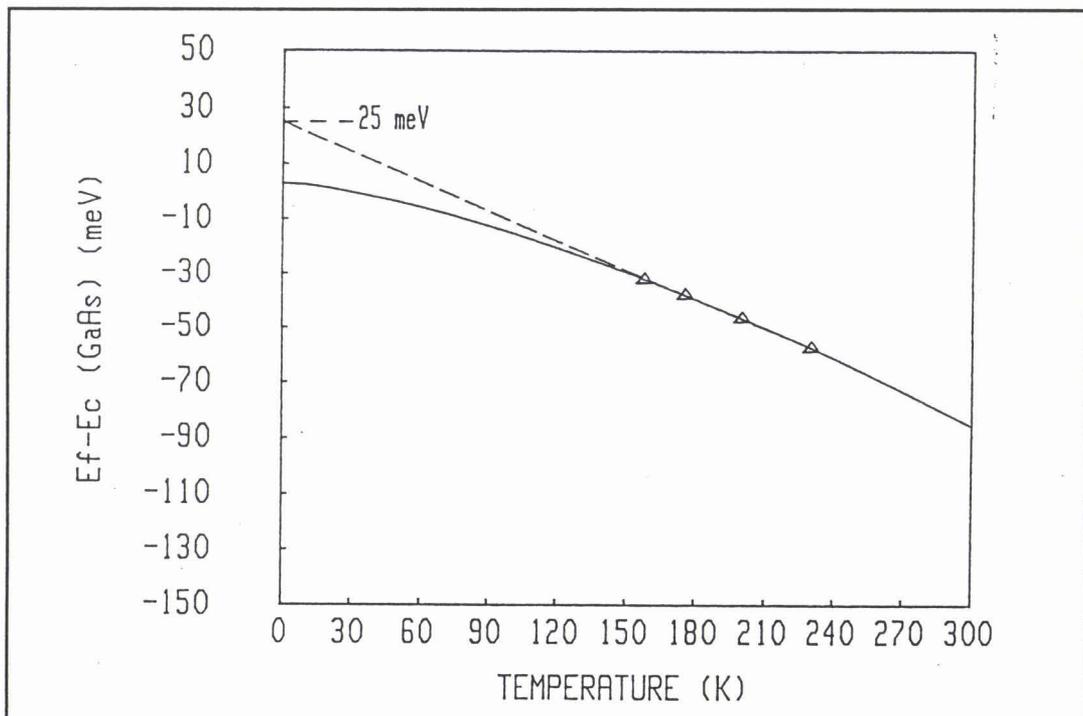


figure II-8: Erreur sur le niveau de Fermi due à l'approximation linéaire

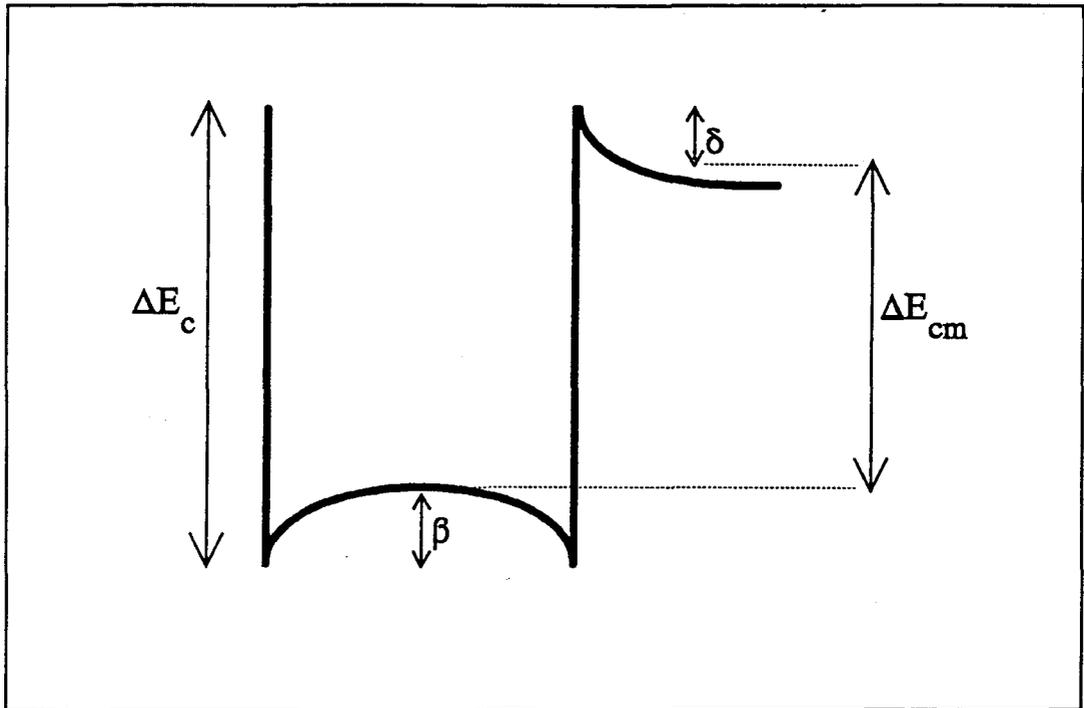


figure II-9: Corrections à apporter à la D.B.C. mesurée

soit finalement:

$$\Delta E_c = 305 \pm 10 \text{ meV}$$

On constate que, pour notre échantillon, les corrections sont faibles puisqu'inférieures à la précision expérimentale. Cependant, pour des structures plus fortement dopées, celles-ci peuvent devenir plus importantes. En effet, plus le dopage sera grand et plus la barrière à franchir par effet tunnel sera étroite. De même,  $\beta$  peut être calculé en supposant une densité de charges constante dans le puits:

$$\rho = e (N_{Dp} - N_p) = - e N_{DB} \frac{L_B}{L_p}$$

En intégrant l'équation de Poisson, on obtient:

$$\beta = \frac{e^2 N_{DB} L_B L_p}{8 \epsilon_p}$$

ce qui montre que  $\beta$  augmente linéairement avec le dopage. Bien

entendu, si le dopage, et donc  $\beta$ , sont trop importants, on ne pourra plus considérer que la densité de porteurs dans les barrières est faible devant celle dans les puits et le modèle développé ici n'est plus valide. La structure n'est alors plus ce que nous avons défini comme un "vrai M.P.Q." (paragraphe I-3-c).

Enfin, la valeur de D.B.C. déterminée est en bon accord avec les résultats précédemment obtenus. En effet, Langer et al. [12] ont effectué une revue des valeurs de discontinuité, mesurées par différentes techniques (C(V), photoémission, caractéristiques courant-tension ou courant-température, courant induit par faisceau d'électrons), sur le système GaAs/Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As. Ils montrent ainsi que:

$$\Delta E_c = (0.79 \pm 0.02) x$$

Dans notre cas  $x = 0.39 \pm 0.01$  et on trouve:

$$\Delta E_c = 308 \pm 16 \text{ meV}$$

valeur qui confirme parfaitement notre résultat expérimental.

## II-A-5 CONCLUSION

Dans ce chapitre nous avons montré que l'on pouvait déterminer la D.B.C. d'un M.P.Q. avec grande précision par spectroscopie d'admittance. Cependant, pour obtenir une erreur si faible (< 10%), nous avons vu qu'il était nécessaire de calculer précisément le niveau de Fermi en fonction de la température, ce qu'avait négligé les précédents auteurs. Ainsi, nous avons fortement amélioré la sensibilité de cette méthode qui semble bien être, à ce jour, la technique électrique la plus précise pour déterminer les discontinuités de bande.

Il serait donc souhaitable d'étendre la spectroscopie d'admittance à d'autres hétérostructures (S.P.Q. notamment). Dans ce but, il faudrait concevoir les schémas équivalents à ces structures et exprimer les différents courants qui les parcourent. Une telle étude [13,14], à laquelle nous avons participé, a été réalisée sur un S.P.Q. GaAs/GaAlAs et a permis de mesurer une valeur de la discontinuité en accord avec celle que nous avons déterminée



ci-dessus. Cependant, cette dernière structure ne bénéficiant pas de la périodicité d'un M.P.Q., la modélisation et l'interprétation des résultats sont plus ardues. Aussi avons-nous mis en oeuvre une autre technique spectroscopique, la D.L.T.S., mieux adaptée à un S.P.Q., et que nous allons présenter dans la seconde partie de ce chapitre.



## B) D.L.T.S. SUR UN PUIITS QUANTIQUE

### II-B-1 INTRODUCTION

La D.L.T.S. [3] est une des techniques les plus couramment utilisées pour l'étude des défauts dans les semi-conducteurs. Elle consiste à mesurer, en fonction de la température, les transitoires électriques, de capacité le plus souvent, dus à l'émission et à la capture de porteurs par un défaut.

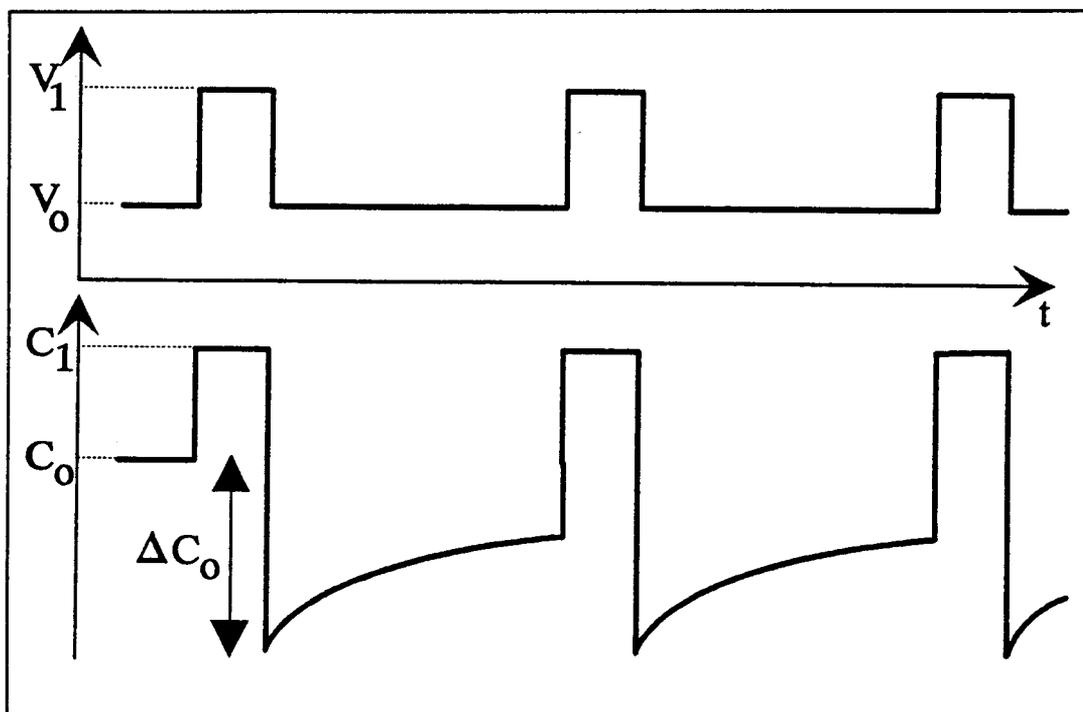


figure II-10: Séquence de polarisation appliquée et transitoire de capacité observé en D.L.T.S.

On applique, à une diode Schottky par exemple, la séquence de polarisation de la figure II-10. Dans le cas d'un défaut localisé en volume, le transitoire de capacité résultant peut s'écrire:

$$\Delta C(t) = \Delta C_0 \exp(-e_n t) \quad \text{II-14}$$

où  $e_n$  est le taux d'émission du défaut. Dans le cas d'un piège à électrons dans un semi-conducteur de type n, la variation de  $e_n$  avec la température est donnée par:

$$e_n(T) = \gamma_n \sigma_n T^2 \exp\left(\frac{-\Delta E}{kT}\right)$$

où  $\gamma_n$  est un paramètre ne dépendant que du matériau,  $\Delta E$  est l'énergie d'ionisation du défaut, et  $\sigma_n$  sa section de capture. La réponse D.L.T.S.,  $\mathfrak{R}$ , est alors le résultat d'une opération de filtrage sur le signal périodique ainsi obtenu. Celle-ci est maximum pour une température  $T_0$  telle que:

$$e_n(T_0) = e_{n0} \quad \text{II-15}$$

où  $e_{n0}$  est la fenêtre du filtre utilisé pour la mesure D.L.T.S. . En faisant varier  $e_{n0}$ , on peut donc mesurer l'évolution du taux d'émission avec la température, ce qui permet de remonter à l'énergie d'ionisation du défaut.

Ces dernières années, plusieurs auteurs ont utilisé la D.L.T.S. pour mesurer la discontinuité de bande d'une hétérojonction [15-19]. Pour interpréter leurs résultats expérimentaux, ils considèrent qu'un puits quantique se comporte comme un "piège géant" pouvant, en effet, émettre ou capturer des porteurs. Les modèles qu'ils utilisent consistent donc, soit à reprendre intégralement celui développé pour les défauts, soit à interpréter l'émission par un effet thermo-ionique. Cependant, tous supposent que, comme pour un défaut de volume, le transitoire de capacité a la forme de l'équation II-14, avec un taux d'émission ne dépendant que de la température.

En réalité, bien que l'analogie entre un puits quantique et un défaut soit attractive par sa simplicité, elle mène à une mauvaise interprétation des résultats. En effet, pour des défauts de volume uniformément répartis dans le semi-conducteur, on peut faire l'hypothèse que la cinétique de capture ou d'émission de ces défauts est indépendante de l'état de charge des autres; ce qui permet d'affirmer que le taux d'émission reste constant. Par contre, pour un puits quantique, les porteurs sont tous localisés dans le même "piège géant". L'émission ou la capture de porteurs va donc modifier le potentiel vu par les porteurs dans le puits et donc le taux d'émission de ceux-ci. D'une certaine façon, utiliser, pour un puits quantique, le modèle introduit pour les défauts, revient à confondre un seul piège contenant un grand nombre de places avec un grand nombre de pièges ne possédant qu'une seule place.

Pour interpréter le comportement d'un puits quantique en

D.L.T.S., nous avons donc étudié les processus spécifiques qui gouvernent l'émission et la capture de porteurs par un puits [20,21]. Dans cette partie, nous appliquons ce modèle à un S.P.Q. et montrons que le taux d'émission varie fortement durant le transitoire. Cette technique nous permet de déterminer la discontinuité de bande sur le S.P.Q. déjà étudié et de trouver une valeur proche de celle obtenue au paragraphe I-5. Enfin, nous mettons en évidence l'existence d'une émission tunnel des électrons à partir du puits quantique.

## II-B-2 COMPORTEMENT D'UN Puits QUANTIQUE EN D.L.T.S.

### a) Position du problème

On considère un S.P.Q., localisé dans la zone de charge d'espace d'une diode Schottky, à l'équilibre sous une polarisation  $V_1$ , la densité de porteurs dans le puits étant  $n_{p1}$ . Si on applique brutalement une d.d.p.  $V_0$  ( $V_0 < V_1$ ), les électrons du puits vont être émis pour que la concentration de porteurs  $n_p$  atteigne sa valeur à l'équilibre  $n_{p0}$ . Cependant, ce retour à l'équilibre ne se fait pas instantanément, la barrière qui jouxte le puits limitant le courant d'électrons. On observe alors un transitoire de capacité associé à la cinétique d'émission de ces porteurs.

Sur la figure II-11, on a représenté le S.P.Q. à un instant  $t$  durant ce transitoire. La structure est ici hors équilibre et le niveau de Fermi dans le puits ( $E_{FP}$ ) est différent de celui dans la barrière ( $E_{FB}$ ). Pour rejoindre une situation d'équilibre, le puits va devoir émettre ses électrons soit par effet thermo-ionique ( $J_{TH}$ ), soit par effet tunnel ( $J_{TUN}$ ).

Notre propos est ici de calculer les courants thermo-ionique et tunnel et, grâce au modèle analytique du paragraphe I-4, d'en déduire l'expression du transitoire de capacité. Ainsi, en faisant varier la température, nous serons à même de simuler le spectre D.L.T.S. associé à ce transitoire.

### b) Emission thermo-ionique

Le courant thermo-ionique est donné par la différence des flux

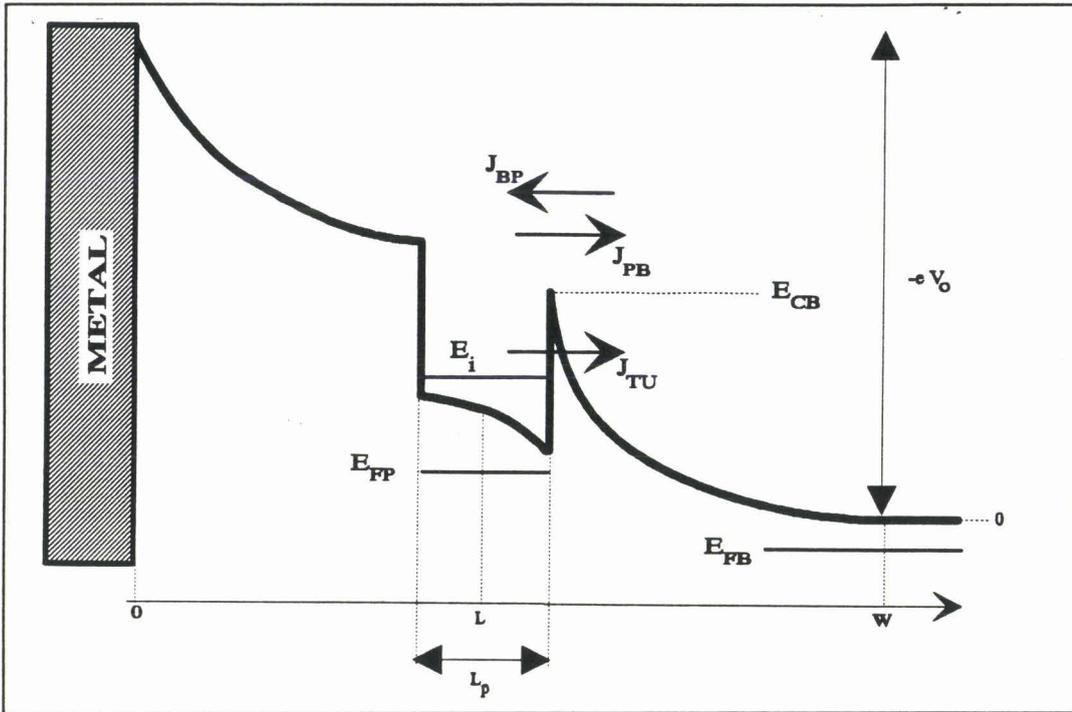


figure II-11: Puits quantique dans une zone de charge d'espace

d'électrons allant du puits vers la barrière et de la barrière vers le puits (figure II-11), soit:

$$J_{TH} = J_{PB} - J_{BP} \quad \text{II-16}$$

On aura donc [10]:

$$J_{TH} = A^* \left[ \exp\left(\frac{E_{FP} - E_{CB}}{kT}\right) - \exp\left(\frac{E_{FB} - E_{CB}}{kT}\right) \right] \quad \text{II-17}$$

où:

$$A^* = \frac{e m_B^* k^2}{2 \pi^2 \hbar^3}$$

En intégrant l'équation de poisson dans la zone déplétée située entre le puits et W, on obtient:

$$E_{CB} = \frac{e^2 N_D}{2 \epsilon} \left[ W - \left( L + \frac{L_p}{2} \right) \right]^2 \quad \text{II-18}$$

De plus, le niveau de Fermi dans la barrière s'obtient directement à partir de la statistique de Boltzmann:

$$E_{FB} = kT \text{Log} \left( \frac{N_D}{N_{CB}} \right) \quad \text{II-19}$$

où  $N_{CB}$  est la densité effective d'états dans la barrière:

$$N_{CB} = 2 \left( \frac{2 \pi m_B^* kT}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}}$$

Enfin, le niveau de Fermi dans le puits est donné par l'équation I-59:

$$n_p = \frac{m_p^* kT}{\pi \hbar^2} \sum_{i=1}^M \left[ \text{Log}(1 + e^{u_i}) - u_i \right] \quad \text{II-20}$$

avec:

$$u_i = \frac{E_i - E_{FP}}{kT}$$

Il suffit ensuite d'utiliser les résultats du paragraphe I-4. Ainsi, connaissant  $n_p$  et  $V_0$ , on peut déterminer  $W$  (équation I-55), puis  $E_1$  (I-60) et donc  $E_{FP}$  par l'équation II-20; quant à  $E_{CB}$ , il se calcule par l'équation II-18. La valeur du courant est alors donnée par la formule II-17.

### c) Emission tunnel

Pour calculer le courant tunnel à travers la barrière de potentiel de la figure II-12, nous utilisons la théorie des perturbations dépendantes du temps [22] (les bases de cette méthode

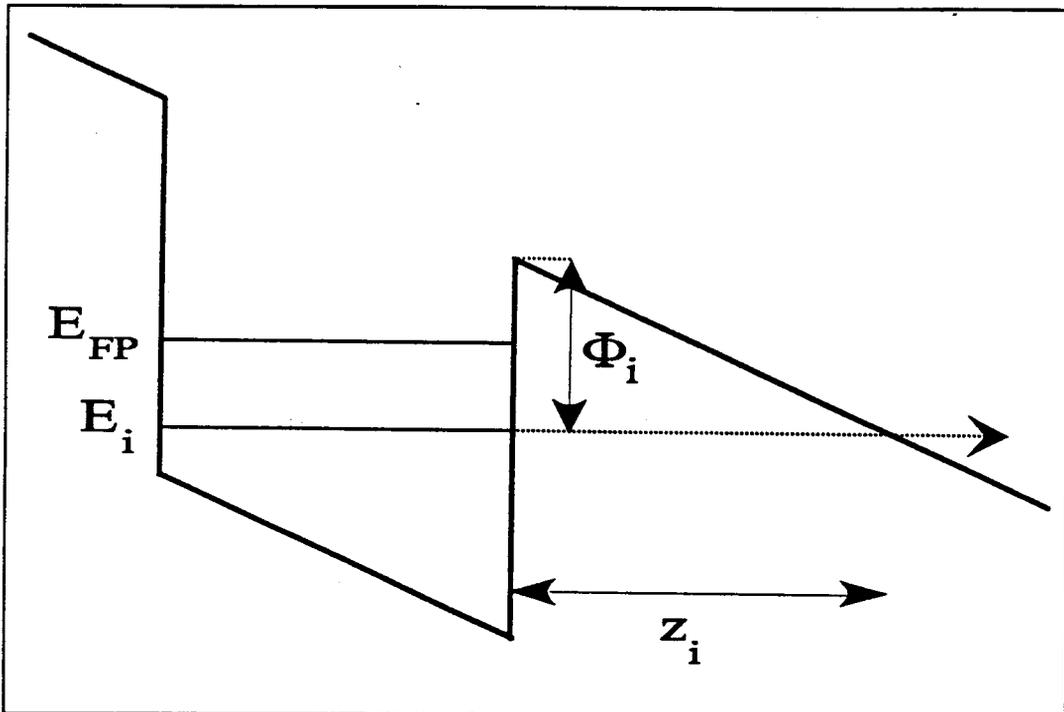


figure II-12: Effet tunnel à partir d'un puits quantique

sont rappelées dans l'annexe II). Dans ce cadre, on peut écrire:

$$J_{TUN} = \frac{2e}{S} \sum_{\vec{k}_g, \vec{k}_d} W_{\vec{k}_g, \vec{k}_d} (f_g(\mathcal{E}_g) - f_d(\mathcal{E}_d)) \quad \text{II-21}$$

- où: -  $\vec{k}_g$  et  $\vec{k}_d$  représentent des états quantiques d'énergie  $\mathcal{E}_g$  et  $\mathcal{E}_d$ , localisés respectivement à droite et à gauche de la barrière
- $f_g$  et  $f_d$  sont les fonctions de Fermi à gauche et à droite.
  - $W_{\vec{k}_g, \vec{k}_d}$  est la probabilité de transition par unité de temps de l'état  $\vec{k}_g$  vers l'état  $\vec{k}_d$ .

Si l'on néglige l'effet tunnel assisté par phonons, la règle d'or de Fermi impose [22]:

$$W_{\vec{k}_g, \vec{k}_d} = \frac{2\pi}{\hbar} |V_{\vec{k}_g, \vec{k}_d}|^2 \delta(\mathcal{E}_g - \mathcal{E}_d) \quad \text{II-22}$$

où  $V_{\vec{k}_g, \vec{k}_d}$  est l'élément de matrice résultant du recouvrement des fonctions d'ondes dans la barrière.

Dans notre cas, le potentiel ne varie que dans la direction  $z$ . L'hamiltonien correspondant est donc à variables séparées et l'effet tunnel est élastique, soit:

$$V_{\vec{k}_g \vec{k}_d} = \delta_{\vec{k}_g \vec{k}_d} V_{\vec{k}_{gz} \vec{k}_{dz}}$$

Les vecteurs  $\vec{k}_{gz}$  et  $\vec{k}_{dz}$  représentent les solutions de la partie de l'hamiltonien ne dépendant que de  $z$  et correspondent aux valeurs propres  $E_g$  et  $E_d$ . On a alors:

$$\vec{k} = \vec{k}_{\parallel} + \vec{k}_z \quad \text{et} \quad \mathcal{E} = \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m} + E$$

où  $m$  est la masse effective supposée constante sur toute la structure, ces relations se comprenant avec l'indice  $g$  ou  $d$ .

Dans le cas d'un S.P.Q.,  $E_d$  appartient à un continuum d'énergie alors que  $E_g$  fait partie d'un spectre discret. Ainsi, en tenant compte des considérations précédentes, l'équation II-21 devient:

$$J_{\text{TUN}} = \frac{4\pi e}{\hbar} \int \frac{2\pi k_{\parallel} dk_{\parallel}}{(2\pi)^2} \left\{ \sum_i \left[ |V_{k_{gz} k_{dz}}|^2 (f_g(\mathcal{E}) - f_d(\mathcal{E})) n_{dz}(E_i) \right] \right\} \quad \text{II-23}$$

où:-  $k_{\parallel} = k_{g\parallel} = k_{d\parallel}$  (tunnel élastique).

-  $k_{gz}$  et  $k_{dz}$  correspondent maintenant à la valeur  $E_i$  respectivement de  $E_{gz}$  et  $E_{dz}$ , l'entier  $i$  indiquant les niveaux d'énergie du puits.

-  $n_{dz}$  est la densité d'états à une dimension à droite de la barrière.

L'élément de matrice  $V_{k_{gz} k_{dz}}$  est calculé dans l'annexe II en utilisant l'approximation WKB [23] et on obtient:

$$J_{\text{TUN}} = \frac{e \hbar}{\pi m} \sum_i \left\{ A_i^2 \exp \left[ -\frac{4}{3} K_1 z_1 \right] \int k_{\parallel} dk_{\parallel} (f_g(\mathcal{E}) - f_d(\mathcal{E})) \right\} \quad \text{II-24}$$

où:-  $A_i$  est une fonction de  $E_i$  dépendant de la forme de la barrière de potentiel.

$$- K_1 = \sqrt{2m \Phi_1 / \hbar^2}$$

-  $z_1$  et  $\Phi_1$  sont respectivement la largeur et la hauteur de la barrière à traverser (figure II-12).

Cette expression se simplifie en tenant compte du fait que la fonction de Fermi à droite en  $E_1$  est nulle ( $E_1 - E_{FP} \gg kT$ ). Nous faisons de plus l'hypothèse que  $f_g(\mathcal{E})$  est une fonction en escalier:

$$f_g(\mathcal{E}) = 1 \quad \text{si } \mathcal{E} < E_{FP}$$

$$f_d(\mathcal{E}) = 0 \quad \text{si } \mathcal{E} > E_{FP}$$

Cette approximation, valable à basse température, est cohérente avec celle qui consiste à négliger l'effet tunnel assisté par phonons. De plus, de par la concentration de porteurs dans le puits que nous considérons ( $< 5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ ) et l'écartement entre les deux premiers niveaux ( $\sim 100 \text{ meV}$ ), on montre que:

$$E_1 < E_{FP} < E_2$$

Dans ce cas, la densité de porteurs par unité de surface dans le puits s'écrit:

$$n_p = 2 \frac{n_{\parallel}}{S} (E_{FP} - E_1)$$

où  $n_{\parallel}$  est la densité d'états à deux dimensions:

$$n_{\parallel} = \frac{m S}{2\pi \hbar^2}$$

On obtient alors une expression analytique compacte du courant tunnel:

$$J_{TUN} = \frac{e \hbar}{m} n_p A_1^2 \exp\left[-\frac{4}{3} K_1 z_1\right] \quad \text{II-25}$$

Ainsi, toujours en calculant le potentiel en tout point à l'aide du modèle du paragraphe I-4, nous pouvons calculer simplement le courant tunnel provenant du puits.

#### d) Simulation du spectre D.L.T.S.

La variation de la densité de porteurs dans le puits est directement reliée aux courants précédemment calculés:

$$\frac{dn_p}{dt} = - (J_{TH} + J_{TUN})/e \quad \text{II-26}$$

On peut ainsi définir les taux d'émission thermo-ionique et tunnel par:

$$e_{TH} = \frac{J_{TH}}{e n_p} \quad \text{et} \quad e_{TUN} = \frac{J_{TUN}}{e n_p}$$

Il faut cependant noter que ces derniers dépendent de la forme du potentiel et donc de la densité de charges dans le puits. Ainsi, contrairement au cas d'un défaut de volume, le taux d'émission varie durant le transitoire qui n'est donc pas exponentiel.

Pour calculer ce transitoire de capacité, nous ne pouvons pas utiliser directement l'expression obtenue au paragraphe I-4 (équation I-64). En effet, nous supposons ici que les constantes de temps d'émission des porteurs sont détectables par le filtre utilisé en D.L.T.S., c'est à dire qu'elles doivent correspondre à des fréquences de l'ordre de quelques dizaines de Hertz. Aussi, puisque la capacité est mesurée à des fréquences beaucoup plus hautes ( $\sim 1$  MHz), la variation de charges dans le puits n'intervient pas dans la valeur de celle-ci. Ainsi, l'expression de la capacité mesurée se réduit à:

$$C(t) = \frac{\epsilon S}{W(t)} \quad \text{II-27}$$

De plus, le S.P.Q. étant soumis à une d.d.p. constante durant le transitoire, l'équation I-55 devient:

$$W(t) = \sqrt{-\frac{2 \epsilon V_p}{e N_D} - \frac{e L_p}{\epsilon} n_p(t)} \quad \text{II-28}$$

$V_p$  étant négatif (déplétion).

Les équations II-26 à II-28 permettent donc de calculer le transitoire de capacité et par conséquent la réponse D.L.T.S. à une température et pour un cycle de polarisation donnés. Nous avons simulé, à titre d'illustration, les spectres D.L.T.S. du S.P.Q. étudié au paragraphe I-5 en prenant comme valeur de la D.B.C. celle déterminée par  $C(V)$ . La figure II-13 montre, dans un cas typique, les variations des taux d'émission thermo-ionique et tunnel durant le

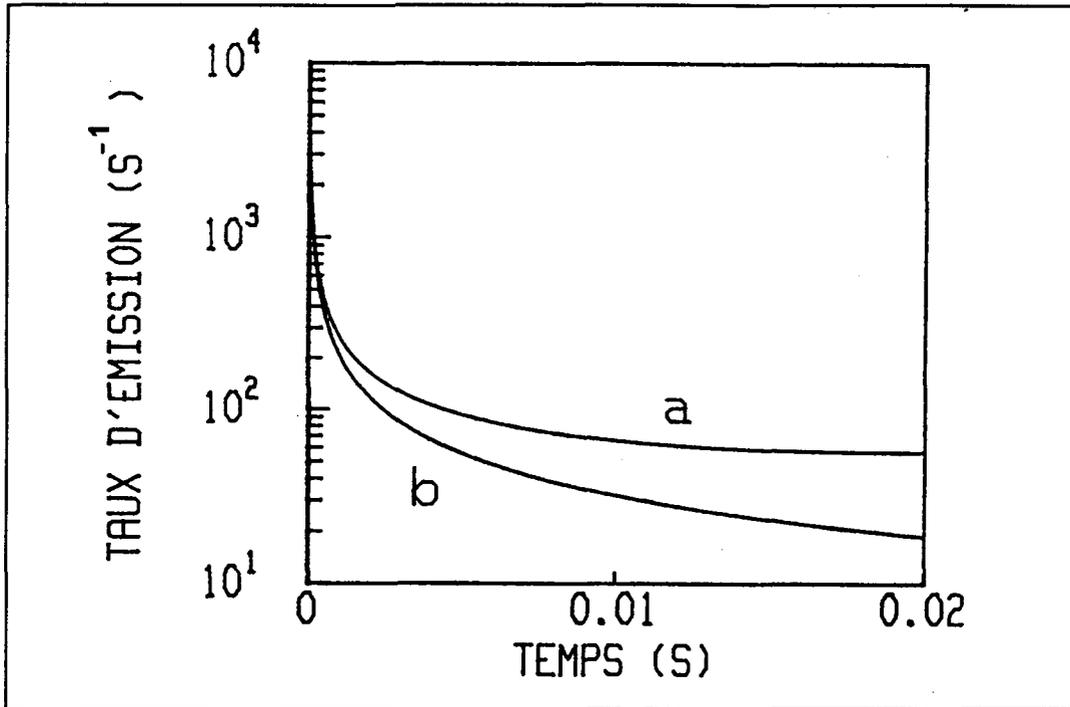


figure II-13: Evolution des taux d'émission thermo-ionique (a) et tunnel (b)

transitoire. Cet exemple démontre bien l'inadéquation d'un modèle à taux d'émission constant puisque celui-ci varie d'environ deux décades durant le transitoire. Dans le cas d'une émission purement thermo-ionique, la réponse D.L.T.S. présente un pic à une température qui dépend de la fréquence du filtre (figure II-14a). Par contre, pour un effet tunnel pur, le signal varie très peu avec la température (figure II-14b), ce qui était prévisible puisque nous n'avons pas tenu compte de l'activation thermique de l'effet tunnel (approximation basse température). L'allure du spectre D.L.T.S. dépendra donc des intensités respectives des deux taux d'émission. Physiquement, l'effet tunnel sera plus important si le puits quantique est soumis à un fort champ électrique, c'est à dire si la tension  $V_0$  est grande, ou si le puits contient initialement plus de charges. Sur la figure II-15, nous avons simulé le spectre D.L.T.S. pour deux séquences de polarisation différentes. Le spectre 1 ( $F \approx 10$  kV/cm,  $n_p \approx 1 \times 10^{10} \text{ cm}^{-2}$ ) présente une réponse purement thermo-ionique; par contre, dans le cas du spectre 2 ( $F \approx 30$  kV/cm,  $n_p \approx 3 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ ), le plateau correspondant à l'effet tunnel apparaît, puis, quand l'émission thermo-ionique augmente, la constante de temps du transitoire sort de la fenêtre du filtre et la réponse

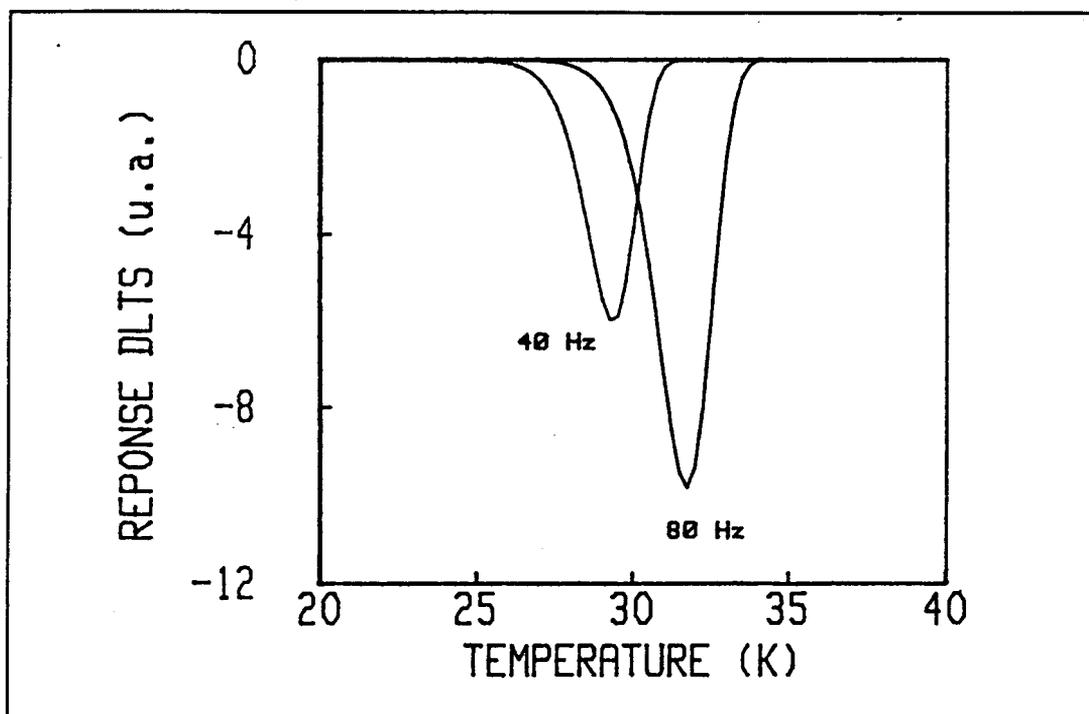


figure II-14a: Simulations du spectre D.L.T.S. (effet thermo-ionique pur)

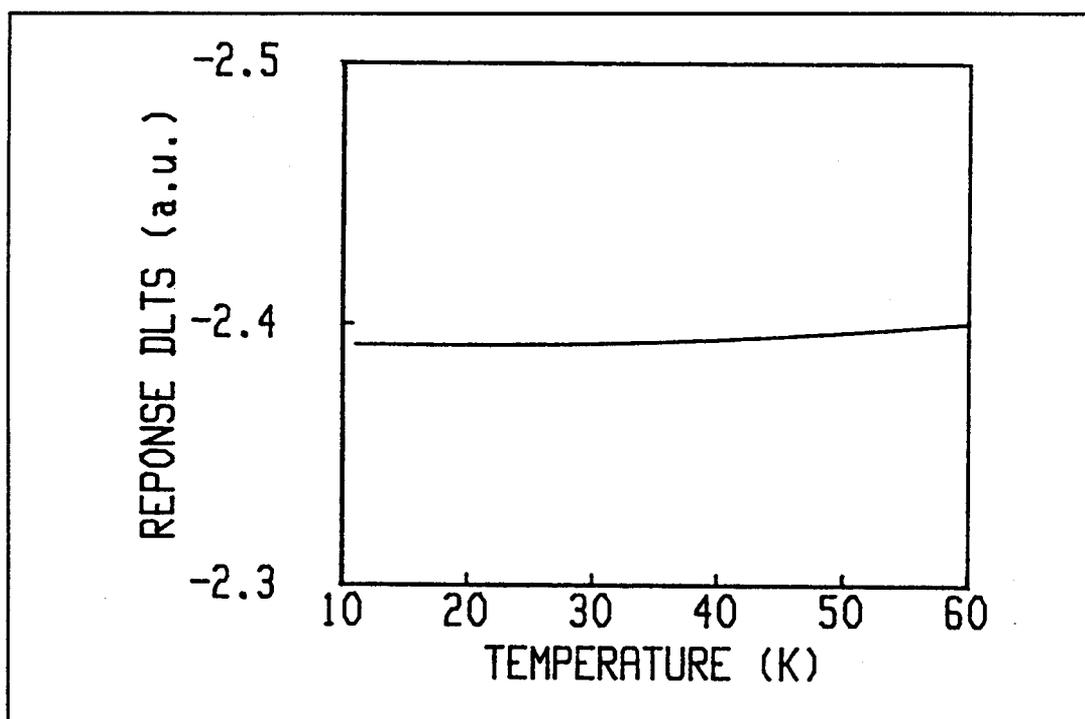


figure II-14b: Simulation du spectre D.L.T.S. (effet tunnel pur)

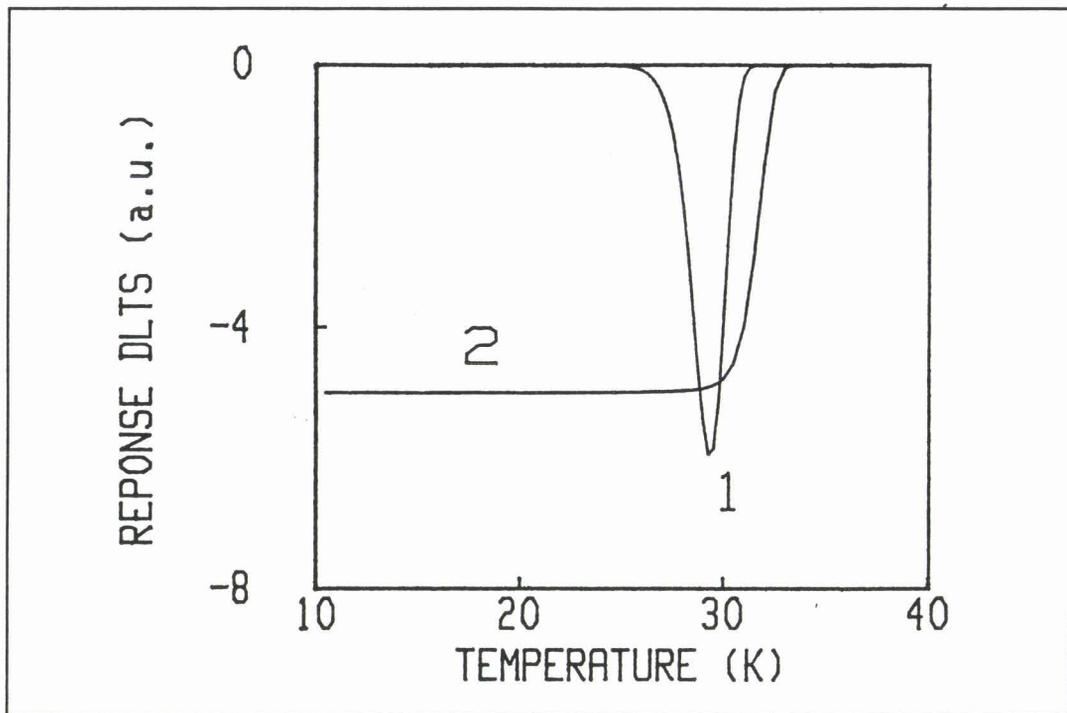


figure II-15: Simulations du spectre D.L.T.S. pour deux séquences de polarisation

D.L.T.S. s'annule.

Nous allons maintenant montrer que notre modèle permet d'interpréter les résultats expérimentaux obtenus sur un S.P.Q. et de déterminer précisément la discontinuité de bande.

### I-B-3 RESULTATS EXPERIMENTAUX

#### a) Détermination de la discontinuité de bande

Nous avons appliqué la technique D.L.T.S. au S.P.Q. déjà étudié dans le paragraphe I-5. Afin de mettre en évidence les deux processus d'émission, nous avons choisi deux séquences de polarisation différentes (spectre a:  $V_1=0$  V et  $V_0=-3$  V; spectre b:  $V_1=-2.9$  V et  $V_0=-3$  V). Ainsi, pour le spectre a, le puits contient initialement un grand nombre d'électrons et l'effet tunnel est important. Par contre, dans le cas du spectre b, la tension  $V_1$  est trop faible pour remplir notablement le puits et l'effet thermo-ionique prédomine. La figure

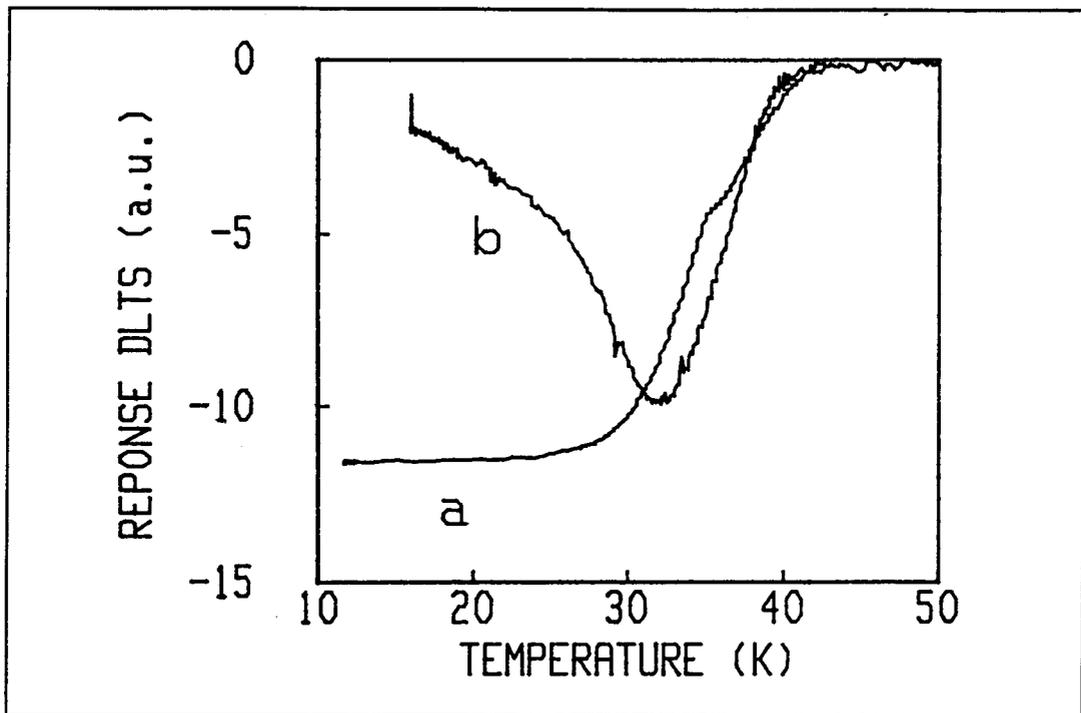


figure II-16: Spectres D.L.T.S. expérimentaux obtenus pour deux séquences de polarisation

II-16 montre les spectres obtenus et l'on retrouve bien les deux comportements décrits précédemment. Pour déterminer la D.B.C., la méthode la plus précise consiste à ajuster la température des pics D.L.T.S. sur les spectres de type a. Puisque  $\Delta E_c$  est le seul paramètre d'entrée de notre modèle, cette opération permet d'obtenir sa valeur. Pour deux fréquences différentes du filtre nous obtenons le même résultat (figure II-17):

$$\Delta E_c = 142 \pm 6 \text{ meV}$$

La précision sur cette valeur est directement déterminée à partir de l'incertitude sur la température. On montre en effet par simulation qu'un décalage de 2 K de la température du pic (précision de notre mesure) induit une variation de 6 meV de la D.B.C. .

De plus, nous avons simulé le spectre b en utilisant cette même valeur et obtenu une réponse théorique en bon accord avec le spectre expérimental (figure II-18). Ainsi, pour des conditions de polarisations très différentes, la même valeur de D.B.C. permet d'interpréter les mesures, ce qui valide le résultat obtenu et le

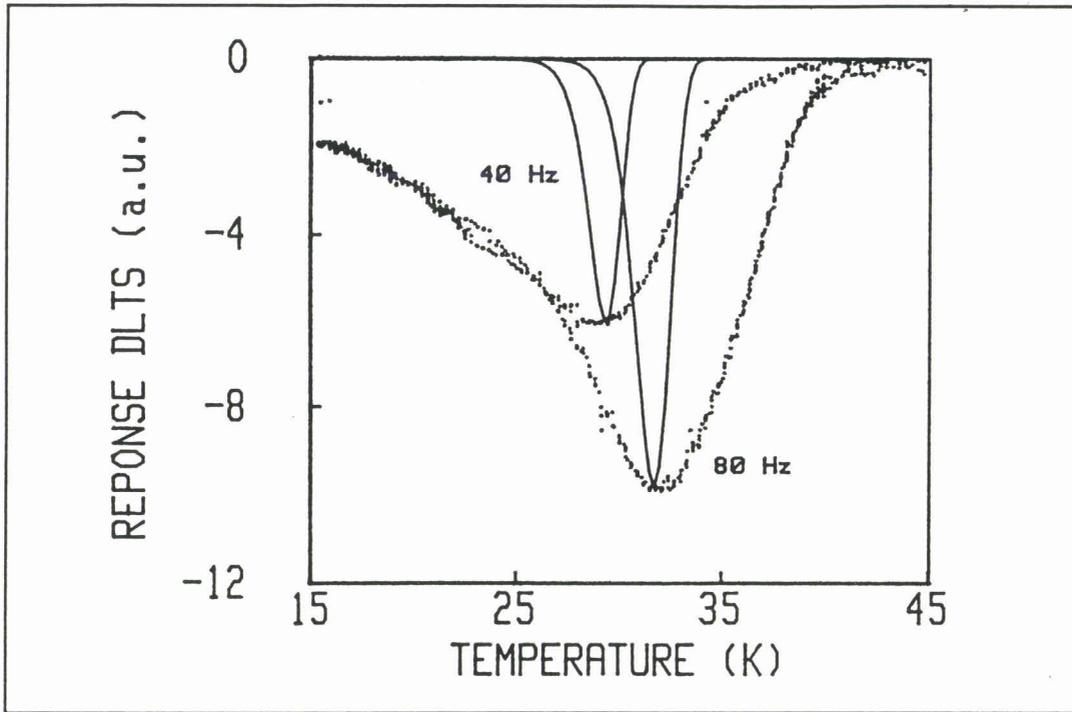


figure II-17: Ajustement des températures des pics (—:simulation, ...:expérience)

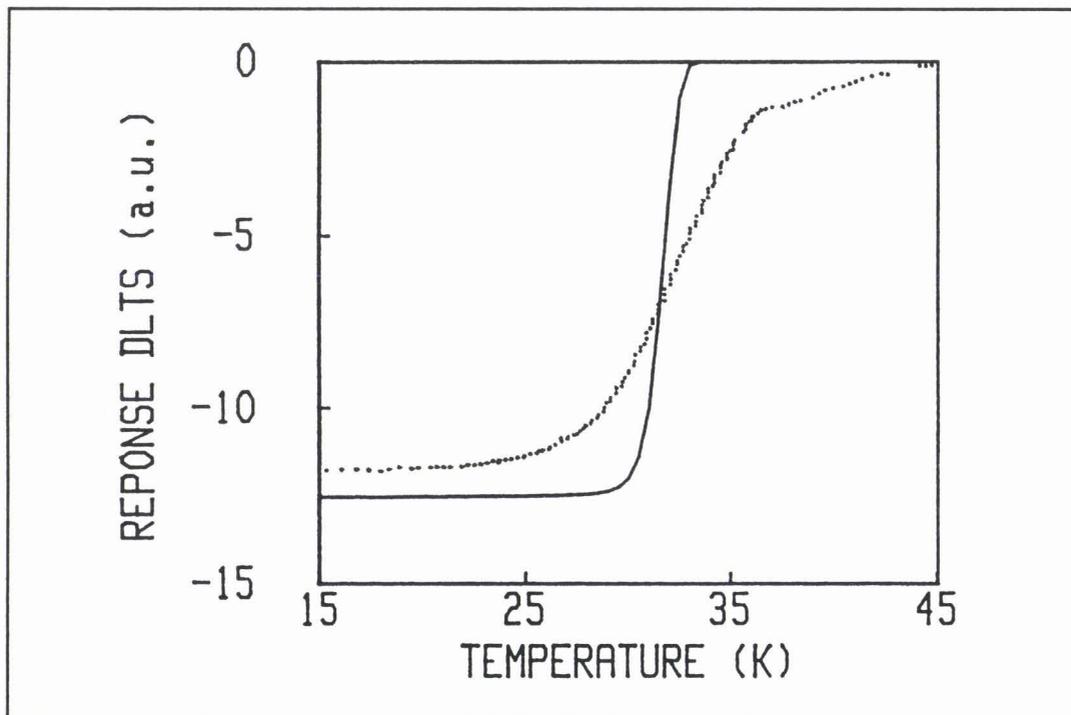


figure II-18: Comparaison entre le spectre simulé (—) et le spectre expérimental (...)

modèle utilisé.

La D.B.C. doit cependant être corrigée, comme dans le cas du C(V), de l'erreur commise sur le calcul des niveaux. On doit, de plus, augmenter l'incertitude de celle que l'on a sur cette correction (corrections d'ordres supérieurs). On obtient finalement:

$$\Delta E_c = 150 \pm 10 \text{ meV}$$

### b) Discussion

Nous venons de montrer que notre modèle interprète bien la variation de la température du pic avec la fréquence de mesure. Cependant, on observe sur les figures II-17 et II-18 que les spectres simulés sont plus abrupts que les spectres expérimentaux. Notamment, les pics obtenus expérimentalement sont plus larges que les pics théoriques. Cette différence peut s'expliquer par le fait que, dans notre modèle, nous ne tenons pas compte de l'activation thermique de l'effet tunnel. Aussi, dès que le niveau de Fermi passe sous le premier niveau du puits, notre calcul donne un taux d'émission tunnel nul. En réalité, celui-ci diminue continûment et donne donc lieu à une distribution de constantes de temps dépendante de la température, ce qui aura pour effet d'élargir le pic D.L.T.S. .

De plus, nos simulations ne permettent pas de retrouver l'amplitude des spectres D.L.T.S. . Dans la plupart des cas nous calculons, en effet, des valeurs plus importantes que le signal expérimental. Outre que ce fait peut s'expliquer, en partie, par la remarque précédente, nous pouvons invoquer aussi les approximations utilisées dans notre modèle. Notamment, dans le calcul du courant tunnel, nous considérons des masses effectives constantes dans la structure. En réalité, cette approximation est valable en ce qui concerne la masse effective dans la direction  $k_z$  car, puisque le puits de GaInAs est contraint au GaAs, il tend à avoir les mêmes propriétés que dans cette direction et l'effet tunnel est donc bien élastique. Par contre, dans le plan orthogonal à cette direction, les masses effectives des deux matériaux sont différentes d'environ 15% [24]. Aussi, pour respecter la conservation de l'énergie totale (voir paragraphe II-B-2), les énergies  $E_{gz}$  et  $E_{dz}$  seront maintenant différentes, ce qui aura pour conséquence de modifier l'amplitude du courant tunnel.

Malgré les limites de notre modèle, celui-ci a l'avantage de ne pas nécessiter de lourds calculs numériques et d'interpréter l'essentiel du comportement d'un puits quantique en D.L.T.S. . En outre, il faut noter que la valeur de D.B.C. déterminée est identique à celle mesurée par C(V) alors que les processus physiques mis en jeu sont fondamentalement différents. En effet, par C(V) nous observons la variation de densité de charges dans le puits à l'équilibre en fonction de la tension appliquée alors qu'en D.L.T.S. on a accès à la cinétique qui permet le retour à l'équilibre.

Enfin, la D.B.C. mesurée est en bon accord avec les résultats obtenus par des techniques optiques [25,26] ainsi qu'avec les calculs les plus récents [27]. En effet, pour une concentration d'indium de 25%, les résultats tendent vers l'encadrement suivant:

$$130 \text{ meV} < \Delta E_c (\text{GaInAs/GaAs}) < 190 \text{ meV}$$

#### II-B-4 CONCLUSION

Dans cette partie, nous avons montré que la D.L.T.S. était une méthode efficace pour déterminer la discontinuité de bande sur un S.P.Q. . De plus, nous avons démontré l'importance de développer un modèle adapté à cette structure qui prenne en compte la variation du taux d'émission durant le transitoire. Grâce à un tel modèle, nous avons pu calculer les cinétiques d'émission des porteurs à partir du puits et retrouver l'allure des spectres expérimentaux. Nous avons notamment interpréter le comportement du puits dans des conditions de polarisation différentes en utilisant la même valeur de  $\Delta E_c$ . En outre, la valeur obtenue pour cette dernière confirme le résultat trouvé par C(V) et reste cohérente avec celles déterminées par d'autres auteurs.

Enfin, pour affiner le calcul de l'effet tunnel, il serait intéressant de prendre en compte l'activation thermique de celui-ci ainsi que les variations de masse effective le long de la structure. Cette dernière correction pourrait aussi intégrer la variation énergétique de la masse effective dont l'importance a été démontrée par les calculs de structure de bande sur les matériaux contraints [28]. Un modèle ainsi amélioré permettrait de mieux rendre compte de l'amplitude du signal D.L.T.S. et d'étudier l'évolution de celle-ci avec le champ électrique, ce qui constituerait une autre méthode de

détermination de la discontinuité de bande.



BIBLIOGRAPHIE

1. E.H. NICOLLIAN et A. GOETZBERGER, Bell Syst. Tech., J. 46, 1055 (1967)
2. E.H. NICOLLIAN et J.R. BREWS, MOS Physics and Technology, Wiley (1982)
3. D.V. LANG, J. Appl. Phys., 45, 3023 (1974)
4. D. VUILLAUME et J.C. BOURGOIN, J. Appl. Phys., 58(5), 2077 (1985)
5. D.V. LANG et al., Appl. Phys. Lett., 50(12), 736 (1987)
6. D.V. LANG et al., J. Vac. Sci. Techno., B5(4), 1215 (1987)
7. R.E. CAVICCHI et al., Appl. Phys. Lett., 54(8), 739 (1989)
8. L. ESAKI, R.TSU, IBM J. Res. Develop., 14, 61 (1970)
9. R. de L. KRONIG, W.J. PENNEY, Proc. Roy. Soc., A130, 499 (1930)
10. S.M. SZE, Physics of Semiconductor Devices (Wiley, New York, 1981), pp. 255-258.
11. X. LETARTRE et al., J. Appl. Phys., 68(1), 116 (1990)
12. J.M. LANGER et al., Phys. Rev., B38, 7723 (1988)
13. S. ABABOU et al., accepté au congrès SOTAPOCS 1991
14. S. ABABOU, Thèse, Institut National des Sciences Appliquées de Lyon, 1991
15. P.A. MARTIN et al., J. Appl. Phys., 54, 4689 (1983)
16. B. HAMILTON et al., Inst. Phys. Conf. Ser., N79, chap. 4, 241 (1985)
17. N. DEBBAR et P. BHATTACHARYA, J. Appl. Phys., 62, 3845 (1987)
18. N. DEBBAR et al., Phys. Rev. B, 40, 1058 (1989)
19. G. GRUMMT et al., Solid State Commun., 73, 257 (1990)
20. X. LETARTRE et al., Appl. Phys. Lett., 58(10), 1049 (1991)
21. X. LETARTRE et al., J. Appl. Phys. 69(10), 7336 (1991)
22. J.R. OPPENHEIMER, Phys. Rev., 31, 66 (1928).
23. A. MESSIAH, Mécanique Quantique, Dunod édition (1959), p. 194.
24. Y. FOULON, communication privée.
25. J.Y. MARZIN et al., Phys. Rev., B31, 8298 (1985).
26. Y. ZOU et al., Appl. Phys. Lett., 58(6), 601 (1991).
27. C. PRIESTER et al., Phys. Rev., B38, 9870 (1988).
28. Y. FOULON et C. PRIESTER, Phys. Rev., B44(11), 5889 (1991)



**CONCLUSION**

Le but de ce travail était de démontrer que l'utilisation de techniques de caractérisation électrique permettait de déterminer précisément la discontinuité de bande d'une hétérojonction.

Nous avons tout d'abord réalisé une étude détaillée de la technique  $C(V)$ . Celle-ci nous a permis de sélectionner les hétérostructures les mieux adaptées à la détermination de la discontinuité de bande par  $C(V)$ . Pour ces dernières, nous avons mis au point une méthode systématique permettant une mesure précise de ce paramètre. D'autre part, nous avons amélioré le modèle utilisé pour l'interprétation de la spectroscopie d'admittance sur un multipuits quantique et augmenté ainsi la précision de cette technique. Enfin, nous avons élaboré un modèle original du comportement d'un puits quantique en D.L.T.S. . Nous avons montré ainsi la pertinence de cette technique d'une part pour mettre en évidence les phénomènes de conduction dans une hétérostructure et, d'autre part, pour mesurer la discontinuité de bande.

Ces trois techniques nous ont permis de déterminer les discontinuités de bande des systèmes GaAs/GaAlAs et GaAs/GaInAs. Cependant, cette étude présente un autre intérêt. En effet, les techniques que nous avons mis en oeuvre sont couramment utilisées pour l'étude des défauts dans les semi-conducteurs, et il serait donc particulièrement intéressant de les appliquer aux défauts, notamment d'interface, présents dans les hétérostructures. Pour ce faire, il est nécessaire de faire la distinction entre le comportement global de la structure et celui, d'ordre inférieur, d'un éventuel défaut. Il était donc indispensable d'étudier d'abord, de façon détaillée, les phénomènes essentiels que l'on observe sur une hétérostructure soumise à de tels processus expérimentaux.



<b>ANNEXES</b>
----------------

**ANNEXE I-A : DEMONSTRATION DES FORMULES DE KROEMER**

- I-A-1 Résolution de l'équation de Poisson
- I-A-2 Egalité des moments
- I-A-3 Obtention des paramètres
- I-A-4 Généralisation pour une permittivité diélectrique variable

**ANNEXE I-B : VALIDITE DES SIMULATIONS QUANTIQUES**

- I-B-1 Erreur sur les niveaux d'énergie
  - a) Niveaux du "puits plat"
  - b) Erreur due à un champ électrique constant
  - c) Perturbation due à une densité de charges
  - d) Conclusion
- I-B-2 Hypothèse d'une densité de charges constante

**ANNEXE II : CALCUL DE L'EFFET TUNNEL PAR LA METHODE D'OPPENHEIMER**

- II-1 La méthode d'Oppenheimer
- II-2 Résolution du problème non perturbé: méthode WKB
- II-3 Calcul du couplage par effet tunnel
- II-4 Validité du calcul



## ANNEXE I-A : DEMONSTRATION DES FORMULES DE KROEMER

Nous allons ici établir les expressions de la D.B.C. et de la densité superficielle de charges fixes à l'interface en fonction du profil apparent (équations I-3 et I-4). Cette annexe se justifie par le fait qu'à notre connaissance, aucune démonstration complète des formules de Kroemer n'a été publiée. Pour simplifier l'exposé, on se placera dans le cas où les deux matériaux ont la même constante diélectrique, puis nous verrons comment les résultats peuvent se généraliser.

I-A-1 Résolution de l'équation de Poisson

Soit l'H.J. du paragraphe I-2a aux bornes de laquelle on applique une différence de potentiel  $V_p$  (d.d.p.) (figure I-A-1). L'équation de Poisson s'écrit alors:

$$\frac{d^2V}{dx^2} = -\frac{e}{\epsilon} (N_D(x) - n(x)) + \frac{\sigma_1}{\epsilon} \delta(x-x_1) \quad \text{I-A-1}$$

où  $V(x)$  et  $n(x)$  sont respectivement le potentiel électrostatique et la concentration d'électrons au point  $x$ , et  $\sigma_1$  la densité de charges à l'interface localisée en  $x=x_1$ . Une double intégration donne:

-  $x > x_1$  :

$$V(x) = -\frac{e}{\epsilon} \int_x^{\infty} (u-x)(N_D(x) - n(x)) dx \quad \text{I-A-2}$$

-  $x < x_1$  :

$$V(x) = -\frac{e}{\epsilon} \int_x^{\infty} (u-x)(N_D(x) - n(x)) dx - \frac{\sigma_1}{\epsilon} x_1 + \frac{\Delta E_c}{e} \quad \text{I-A-3}$$

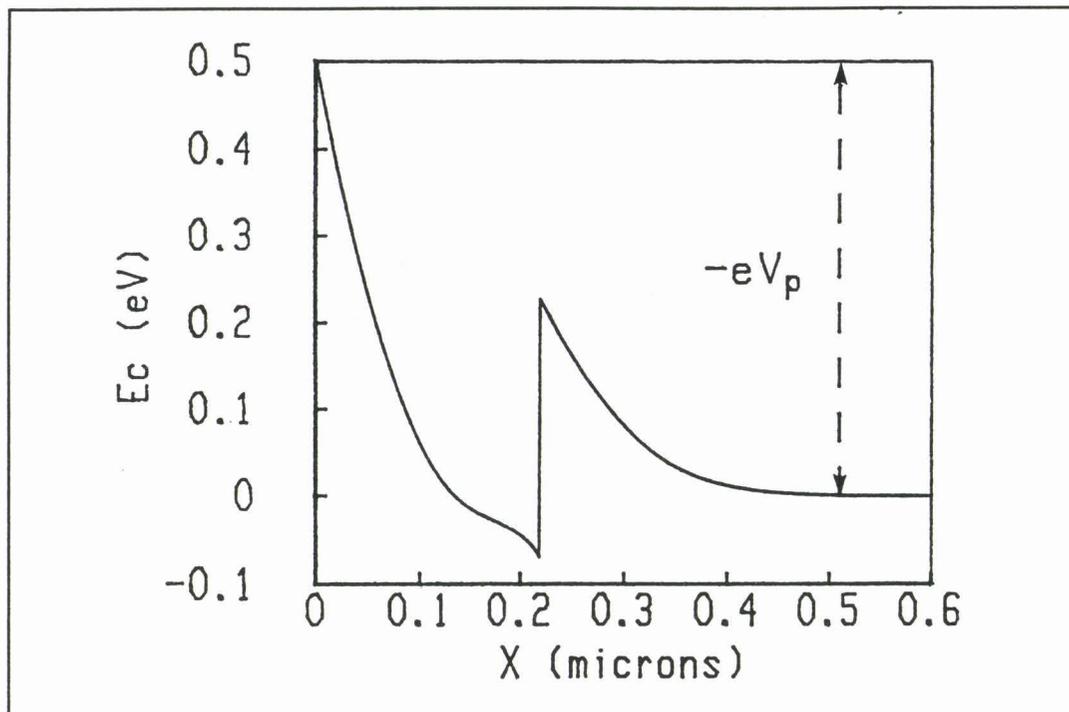


figure I-A-1: Bande de conduction d'une S.H.J. soumise à une d.d.p.

La d.d.p. aux bornes de l'H.J. peut donc s'écrire :

$$V_p = -\frac{e}{\epsilon} \int_0^{\infty} x (N_D(x) - n(x)) dx - \frac{\sigma_1}{\epsilon} x_1 + \frac{\Delta E_c}{e} \quad \text{I-A-4}$$

De même, la charge stockée dans l'H.J. est donnée par :

$$Q = eS \int_0^{\infty} (N_D(x) - n(x)) dx + \sigma_1 \quad \text{I-A-5}$$

#### I-A-2 Egalité des moments

Soit le profil apparent obtenu sur cette H.J. (figure I-5).  $\hat{x}$  et  $\hat{n}$  sont définis par :

$$\hat{x} = \frac{\epsilon S}{C} \quad \text{I-A-6}$$

et:

$$\widehat{n}(\widehat{x}) = \frac{-2}{e\epsilon S^2} \left[ \frac{dC^{-2}}{dV_p} \right]^{-1} \quad \text{I-A-7}$$

où C est la capacité mesurée :

$$C = - \frac{dQ}{dV_p} \quad \text{I-A-8}$$

Les formules I-A-6 à I-A-8 entraînent :

$$dV_p = - \frac{e}{\epsilon} \widehat{x} \widehat{n}(\widehat{x}) d\widehat{x} \quad \text{I-A-9}$$

$$dQ = S e \widehat{n}(\widehat{x}) d\widehat{x} \quad \text{I-A-10}$$

et donc :

$$\frac{e}{\epsilon} \int_{\widehat{x}_1}^{\widehat{x}_2} \widehat{x} \widehat{n}(\widehat{x}) d\widehat{x} = V_p(\widehat{x}_1) - V_p(\widehat{x}_2) \quad \text{I-A-11}$$

et :

$$S e \int_{\widehat{x}_1}^{\widehat{x}_2} \widehat{n}(\widehat{x}) d\widehat{x} = Q(\widehat{x}_2) - Q(\widehat{x}_1) \quad \text{I-A-12}$$

Les notations  $V_p(\widehat{x})$  et  $Q(\widehat{x})$  signifient la d.d.p. appliquée et la charge stockée lorsqu'on mesure  $\widehat{x}$ . Il reste alors à préciser la répartition des charges dans l'H.J. pour  $\widehat{x}=\widehat{x}_1$  et pour  $\widehat{x}=\widehat{x}_2$ .

\* Situation  $\widehat{x}=\widehat{x}_1$  : On suppose ici que le potentiel appliqué se résout sur une zone déplétée  $\widehat{x}_1$  et que l'hétérojonction reste à l'équilibre. Les relations I-A-4 et I-A-5 donnent alors :

$$V_p(\widehat{x}_1) = - \frac{e}{\epsilon} \int_0^{\widehat{x}_1} \widehat{x} N_D(\widehat{x}) d\widehat{x} - \frac{e}{\epsilon} \int_{\widehat{x}_1}^{\infty} \widehat{x} (N_D(\widehat{x}) - n_0(\widehat{x})) d\widehat{x} \quad \text{I-A-13}$$

$$- \frac{\sigma_1}{\epsilon} \widehat{x}_1 + \frac{\Delta E_c}{e}$$

$$Q(\widehat{x}_1) = eS \int_0^{\widehat{x}_1} N_D(x) dx + eS \int_{\widehat{x}_1}^{\infty} (N_D(x) - n_0(x)) dx + \sigma_1 \quad \text{I-A-14}$$

\* Situation  $\widehat{x}=\widehat{x}_2$  : Dans ce cas on suppose que l'hétérojonction est totalement désertée jusque  $\widehat{x}_2$ . Donc :

$$V_p(\widehat{x}_2) = -\frac{e}{\epsilon} \int_0^{\widehat{x}_2} x N_D(x) dx - \frac{e}{\epsilon} \int_{\widehat{x}_2}^{\infty} x (N_D(x) - n_0(x)) dx \quad \text{I-A-15}$$

$$-\frac{\sigma_1}{\epsilon} x_1 + \frac{\Delta E_c}{e}$$

$$Q(\widehat{x}_2) = eS \int_0^{\widehat{x}_2} N_D(x) dx + eS \int_{\widehat{x}_2}^{\infty} (N_D(x) - n_0(x)) dx + \sigma_1 \quad \text{I-A-16}$$

Les équations I-A-11 à I-A-16 permettent d'obtenir l'égalité des moments :

$$\int_{\widehat{x}_1}^{\widehat{x}_2} x \widehat{n}(x) dx = \int_{\widehat{x}_1}^{\widehat{x}_2} x n_0(x) dx \quad \text{I-A-17}$$

$$\int_{\widehat{x}_1}^{\widehat{x}_2} \widehat{n}(x) dx = \int_{\widehat{x}_1}^{\widehat{x}_2} n_0(x) dx \quad \text{I-A-18}$$

### I-A-3 Obtention des paramètres

Les définitions de  $\hat{x}_1$  et de  $\hat{x}_2$  permettent d'affirmer qu'au delà de ces points on a  $N_D(x) = n_0(x)$  (figures I-4 et I-5). Alors, l'électroneutralité de l'H.J. à l'équilibre et la relation I-A-5 donnent :

$$\sigma_1 = eS \int_{\hat{x}_1}^{\hat{x}_2} (N_D(x) - n_0(x)) dx \quad \text{I-A-19}$$

Les relations I-A-4 et I-A-19 permettent alors d'écrire :

$$V_{p0} = - \frac{e}{\epsilon} \int_{\hat{x}_1}^{\hat{x}_2} (x - x_1) (N_D(x) - n_0(x)) dx + \frac{\Delta E_c}{e} \quad \text{I-A-20}$$

De plus la d.d.p. aux bornes de l'H.J. à l'équilibre est imposée par la statistique de Boltzmann :

$$V_{p0} = \frac{E_c(\hat{x}_2) - E_c(\hat{x}_1)}{e} = \frac{kT}{e} \text{Log} \left[ \frac{N_c(\hat{x}_2) N_D(\hat{x}_1)}{N_c(\hat{x}_1) N_D(\hat{x}_2)} \right] \quad \text{I-A-21}$$

L'introduction des égalités de moments dans ces relations permet la détermination de :

- la D.B.C. :

$$\Delta E_c = kT \text{Log} \left[ \frac{N_D(\hat{x}_1) N_c(\hat{x}_2)}{N_D(\hat{x}_2) N_c(\hat{x}_1)} \right] + \frac{e^2}{\epsilon} \int_{\hat{x}_1}^{\hat{x}_2} (x - x_1) (N_D(x) - \hat{n}(x)) dx \quad \text{I-A-22}$$

- la densité superficielle de charges fixes :

$$\sigma_1 = eS \int_{\hat{x}_1}^{\hat{x}_2} (N_D(x) - \hat{n}(x)) dx \quad \text{I-A-23}$$

I-A-4 Généralisation pour une permittivité diélectrique variable  $\epsilon(x)$ 

On présente ici une extension de la méthode de Kroemer, proposée par Babic et Kroemer [1].

L'équation de Poisson est dans ce cas :

$$\frac{d}{dx} \left[ \epsilon(x) \frac{dV}{dx} \right] = -e (N_D(x) - n(x)) \quad \text{I-A-24}$$

On choisit arbitrairement une constante diélectrique  $\epsilon_m$  pour obtenir le profil apparent :

$$\hat{x} = \frac{\epsilon_m S}{C} \quad \text{I-A-25}$$

$$\hat{n}(\hat{x}) = \frac{-2}{\epsilon_m e S^2} \left[ \frac{dC^{-2}}{dV} \right]^{-1} \quad \text{I-A-26}$$

On définit alors les nouvelles variables :

$$\chi = \epsilon_m \int_0^x \frac{dy}{\epsilon(y)} \quad \text{I-A-27}$$

$$\eta(\chi) = \frac{\epsilon(x)}{\epsilon_m} n(x) \quad \text{I-A-28}$$

$$\mu(\chi) = \frac{\epsilon(x)}{\epsilon_m} N_D(x) \quad \text{I-A-29}$$

$$\eta_c(\chi) = \frac{\epsilon(x)}{\epsilon_m} N_C(x) \quad \text{I-A-30}$$

L'équation de Poisson I-A-22 peut alors se réécrire :

$$\frac{d^2 V}{d\chi^2} = -\frac{e}{\epsilon_m} (\mu(\chi) - \eta(\chi)) \quad \text{I-A-31}$$

qui est identique à l'équation I-A-1. Il suffit donc de suivre la même démonstration que précédemment pour déterminer les paramètres :

$$\Delta E_c = kT \operatorname{Log} \left[ \frac{\mu(\hat{x}_1) \eta_c(\hat{x}_2)}{\mu(\hat{x}_2) \eta_c(\hat{x}_1)} \right] + \frac{e^2}{\epsilon_m} \int_{\hat{x}_1}^{\hat{x}_2} (x - x_1) (\mu(x) - \eta(x)) dx \quad \text{I-A-32}$$

$$\sigma_i = eS \int_{\hat{x}_1}^{\hat{x}_2} (\mu(x) - \eta(x)) dx \quad \text{I-A-33}$$

$$\left( \text{avec } x_1 = \int_0^{x_1} \frac{dy}{\epsilon(y)} \right)$$



## ANNEXE I-B : VALIDITE DES SIMULATIONS "QUANTIQUES"

L'objet de cette annexe est d'évaluer les erreurs dues aux approximations utilisées dans la version "quantique" du programme de simulation de C(V). Rappelons d'abord la teneur de ces approximations:

1) On suppose que les niveaux d'énergie du puits peuvent se calculer comme pour un "puits plat", c'est à dire qu'on néglige l'effet des variations de potentiel dans le puits.

2) On considère que la densité de porteurs libres dans le puits est constante, c'est à dire qu'on néglige l'effet des fonctions d'onde associées aux niveaux d'énergie.

### I-B-1 Erreur sur les niveaux d'énergie

#### a) Niveaux du "puits plat"

Soit le puits quantique de la figure I-B-1. La résolution de l'équation de Schroedinger permet de calculer les niveaux et les fonctions d'onde associés à cette forme de potentiel [2]. Les valeurs propres,  $E_n^{(0)}$ , de l'énergie sont alors solutions des équations:

$$\cos\alpha_n = \gamma\alpha_n \text{ et } \operatorname{tg}\alpha_n > 0 \text{ pour } n=1 \text{ modulo } 4$$

$$\sin\alpha_n = \gamma\alpha_n \text{ et } \operatorname{tg}\alpha_n < 0 \text{ pour } n=2 \text{ modulo } 4$$

I-B-1

$$\cos\alpha_n = \gamma\alpha_n \text{ et } \operatorname{tg}\alpha_n > 0 \text{ pour } n=3 \text{ modulo } 4$$

$$\sin\alpha_n = \gamma\alpha_n \text{ et } \operatorname{tg}\alpha_n < 0 \text{ pour } n=4 \text{ modulo } 4$$

La fonction propre associée au  $n^{\text{ième}}$  niveau s'écrit:

$$\text{pour } x < 0 : \psi_n^{(0)}(x) = \gamma \alpha_n C_n \exp(-K_n x)$$

$$\text{pour } 0 < x < a : \psi_n^{(0)}(x) = C_n \sin\left(n\pi/2 + k_n\left(x - \frac{a}{2}\right)\right)$$

I-B-2

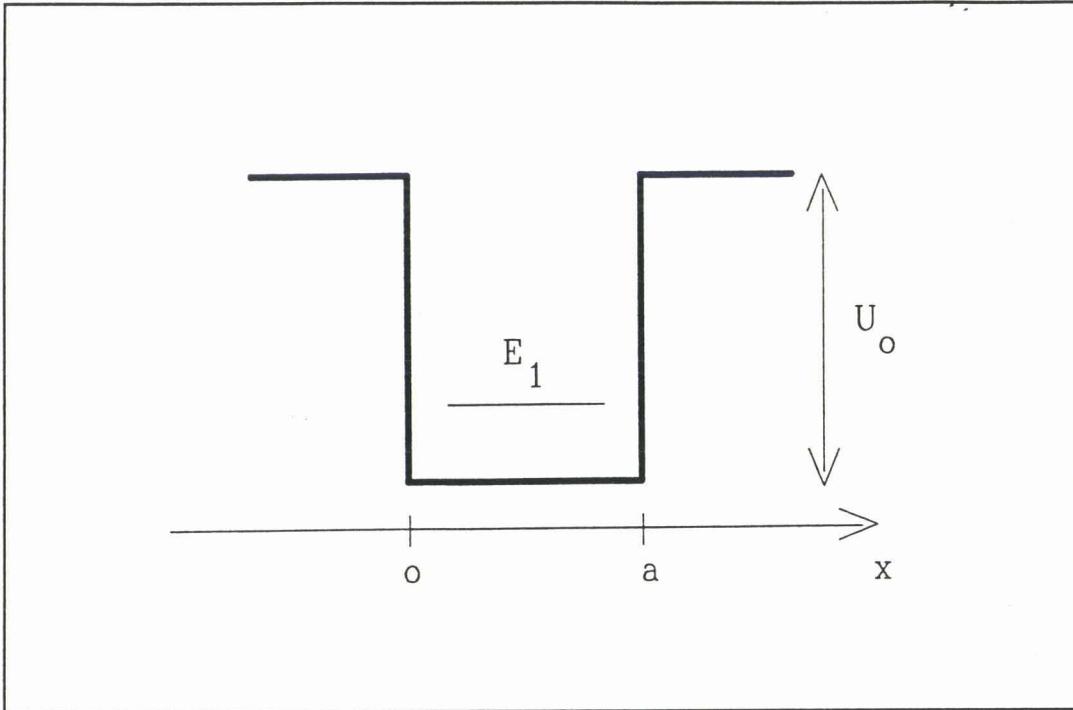


figure I-B-1: Représentation schématique d'un puits quantique

$$\text{pour } x > a : \psi_n^{(0)}(x) = (-1)^{n+1} \gamma \alpha_n C_n \exp(-K_n(x-a))$$

où on a défini:

$$k_n = \sqrt{\frac{2mE_n^{(0)}}{\hbar^2}}, \quad K_n = \sqrt{\frac{2m(U_0 - E_n^{(0)})}{\hbar^2}}, \quad \alpha_n = k_n \frac{a}{2}, \quad \gamma = \sqrt{\frac{2\hbar^2}{ma^2 U_0}}$$

De plus, la condition de normalisation impose:

$$C_n = \sqrt{\frac{2}{a}} \left[ 1 + \frac{\gamma}{\sqrt{1 - \gamma^2 \alpha_n^2}} \right]^{-1/2} \quad \text{I-B-3}$$

On peut remarquer que, si  $\gamma=0$ , on retrouve les solutions du puits infini. De façon générale, plus  $\gamma$  est petit, c'est à dire plus le puits est profond et large, plus les niveaux obtenus seront proches de ceux du puits infini.

Dans les simulations de  $C(V)$ , nous utilisons les niveaux d'énergie déterminés par les équations I-B-1, quelles que soient les

conditions de polarisation, en prenant pour hypothèse que l'écart entre un niveau et la valeur du potentiel au centre du puits reste constant. Nous allons maintenant évaluer, par un calcul en perturbation, l'erreur due à cette approximation. Pour simplifier, on peut envisager deux types de potentiels perturbateurs:

- celui correspondant à un champ électrique constant le long de la structure
- celui dû à une densité de charges dans le puits.

En outre, nous nous intéresserons uniquement au niveau d'énergie le plus bas dans le puits car l'occupation des énergies supérieures est négligeable. En effet, pour les structures qui nous concernent, le niveau de Fermi se situe relativement bas dans le puits (dopages faibles) et les écarts entre les niveaux sont supérieurs à quelques  $kT$  (puits fins). Cependant, les calculs qui suivent permettent d'évaluer l'erreur pour toutes les valeurs d'énergie.

#### b) Erreur due à un champ électrique constant

Cette situation correspond à la figure I-B-2, le potentiel perturbateur s'écrivant:

$$\varphi_p(x) = eFx \quad \text{où } F \text{ est le champ électrique}$$

De part la symétrie des fonctions d'onde du "puits plat", la correction au premier ordre en perturbation,  $E_n^{(1)}$ , est nulle, c'est à dire:

$$E_n^{(1)} = \varphi_p(a/2) = eFa/2 \quad \text{I-B-4}$$

Pour évaluer l'erreur commise, il faut donc calculer la correction au second ordre. Celle-ci s'exprime:

$$E_n^{(2)} = \sum'_m \frac{|V_{nm}|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \quad \text{I-B-5}$$

où le signe "prime" indique que la somme exclut le cas  $n=m$ , et où  $V_{nm}$

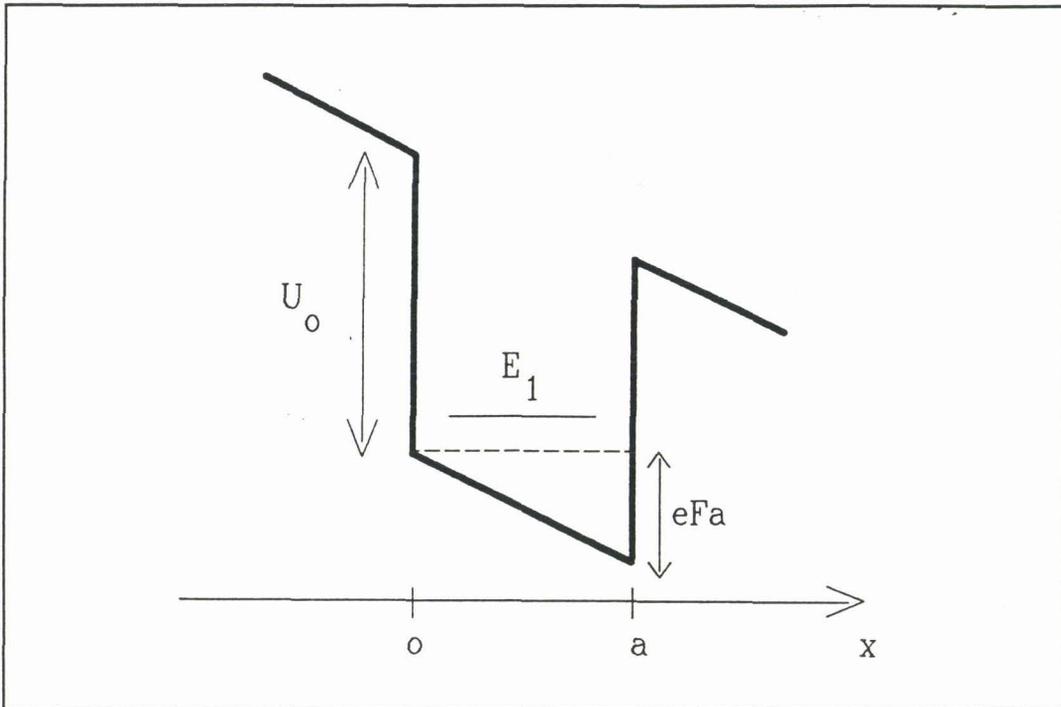


figure I-B-2: Puits quantique soumis à un champ électrique constant

est l'élément de matrice:

$$V_{nm} = \langle \psi_n^{(0)} | \varphi_p | \psi_m^{(0)} \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n^{(0)}(x) \varphi_p(x) \psi_m^{(0)}(x) dx \quad \text{I-B-6}$$

En calculant cette intégrale et en utilisant les relations I-B-1, on obtient:

$$V_{nm} = 0 \quad \text{si } n+m \text{ est pair}$$

$$V_{nm} = eFaT_{nm} \quad \text{si } n+m \text{ est impair}$$

avec:

$$T_{nm} = \left(1 + \frac{\gamma}{r_n}\right)^{-1} \left(1 + \frac{\gamma}{r_m}\right)^{-1} \alpha_n \alpha_m \left\{ \frac{\gamma(\alpha_n^2 - \alpha_m^2)(r_m - r_n) - 2r_n r_m - \gamma^2(\alpha_n^2 + \alpha_m^2)}{\alpha_n^2 - \alpha_m^2} - \frac{\gamma^3}{r_n + r_m} \left(1 + \frac{\gamma}{r_n + r_m}\right) \right\}$$

et:

$$r_n = \sqrt{1 - \gamma^2 \alpha_n^2}$$

Il est alors intéressant de faire tendre  $\gamma$  vers zéro dans cette expression de manière à retrouver le cas du puits infini:

$$V_{nm} = - \frac{8eFa}{\pi^2} \cdot \frac{nm}{(n^2 - m^2)^2}$$

On peut alors facilement calculer la correction:

$$E_n^{(2)}(\gamma=0) = \frac{128 e^2 F^2 m a^4}{\pi^6 \hbar^2} \sum_m^* \frac{n^2 m^2}{(n^2 - m^2)^5} \quad \text{I-B-7}$$

Dans cette expression, la somme sur  $m$  doit évidemment être étendue à l'infini, le signe "\*" signifiant qu'on se limite aux valeurs de  $m$  telles que la somme  $m+n$  soit impaire. Pour  $n=1$ , on obtient:

$$E_1^{(2)}(\gamma=0) \simeq - 2.2 \times 10^{-3} \cdot \frac{e^2 F^2 m a^4}{\hbar^2} \quad \text{I-B-8}$$

La correction pour un puits fini peut alors s'écrire:

$$E_1^{(2)} = f(\gamma) E_1^{(2)}(\gamma=0) \quad \text{I-B-9}$$

où  $f(\gamma)$  est une fonction du seul paramètre  $\gamma$ , calculée à partir des formules précédentes. La figure I-B-3 donne l'évolution de cette fonction. Pour des valeurs de  $\gamma > 0.6$ , on observe une décroissance puis une annulation de  $f(\gamma)$  et donc de  $E_1^{(2)}$ . En réalité, notre calcul n'est plus juste dans cette zone car elle correspond à des puits très peu profonds pour lesquels il faut tenir compte de l'interaction avec le continuum d'énergie situé au dessus du puits.

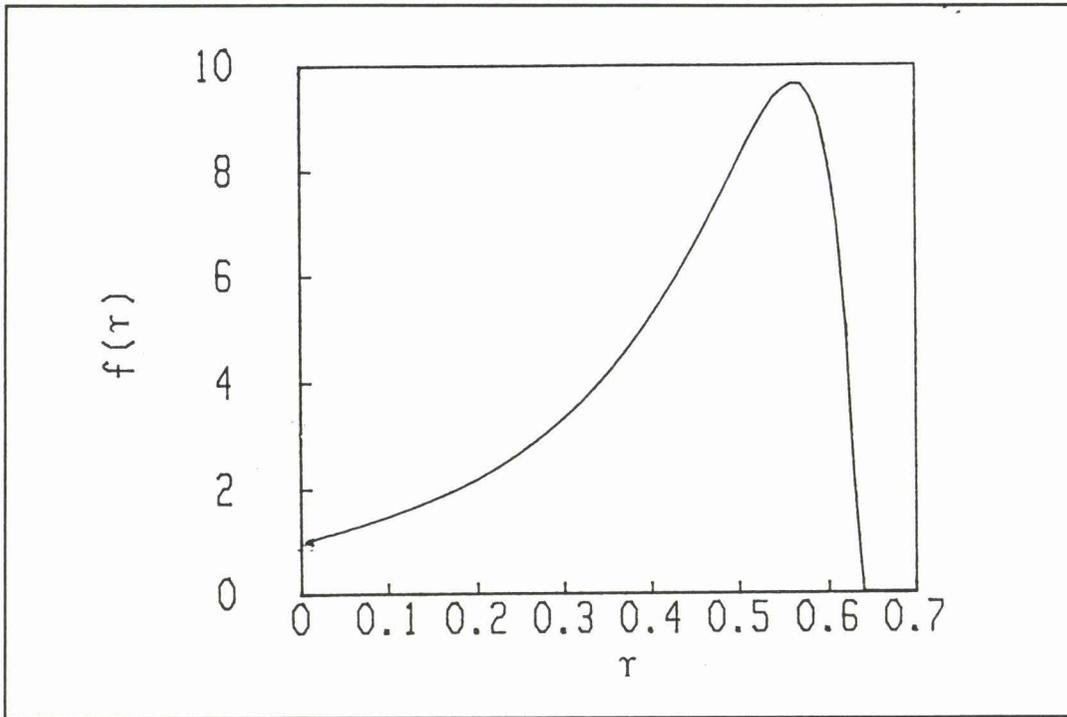


figure I-B-3

Finalement, l'erreur commise sur le premier niveau s'écrit:

$$\delta(E_1) = E_1^{(1)} + E_1^{(2)} - \varphi_p(a/2) \quad \text{I-B-10}$$

soit:

$$\delta(E_1) = E_1^{(2)} \quad \text{I-B-11}$$

### c) Perturbation due à une densité de charges

Dans ce paragraphe, on fait l'hypothèse d'une densité de charges,  $eN_p$ , constante dans le puits, la validité de cette approximation étant discutée par la suite. Le potentiel perturbateur qui en résulte

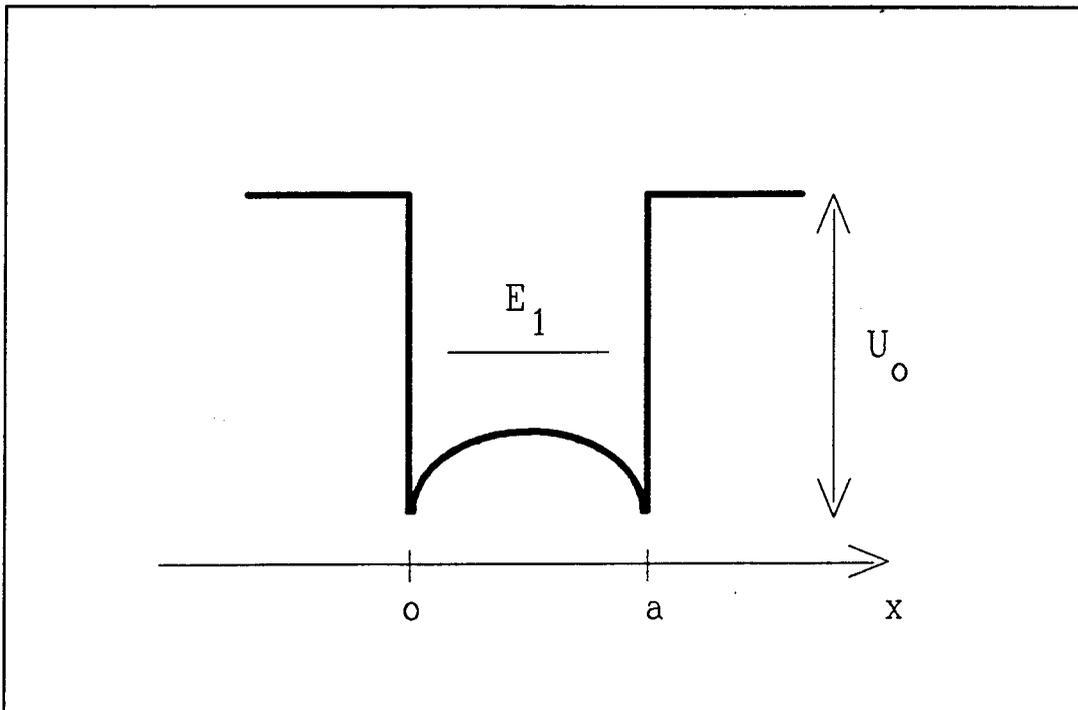


figure I-B-4: Puits quantique contenant une densité de charges constante

(figure I-B-4) s'écrit:

$$\varphi_p(x) = \frac{e^2 N_p}{2\epsilon} x(x-a) \quad \text{si } 0 < x < a$$

I-B-12

$$\varphi_p(x) = 0 \quad \text{si } x < 0 \text{ ou } x > a$$

On néglige donc ici l'effet d'un potentiel parabolique hors du puits. En effet, les densités de charges  $y$  sont données par les dopages des matériaux, de l'ordre de quelques  $10^{16} \text{ cm}^{-3}$  pour les structures adaptées aux techniques capacitives. Elles sont donc faibles par rapport à celles qu'on peut obtenir dans le puits ( $\sim$  quelques  $10^{18} \text{ cm}^{-3}$ ). De plus, hors du puits, les fonctions d'onde sont exponentiellement décroissantes, ce qui atténuera encore l'effet de cette perturbation.

Au premier ordre, la correction sera donc:

$$E_n^{(1)} = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n^{(0)}(x) \varphi_p(x) \psi_n^{(0)}(x) dx$$

I-B-13

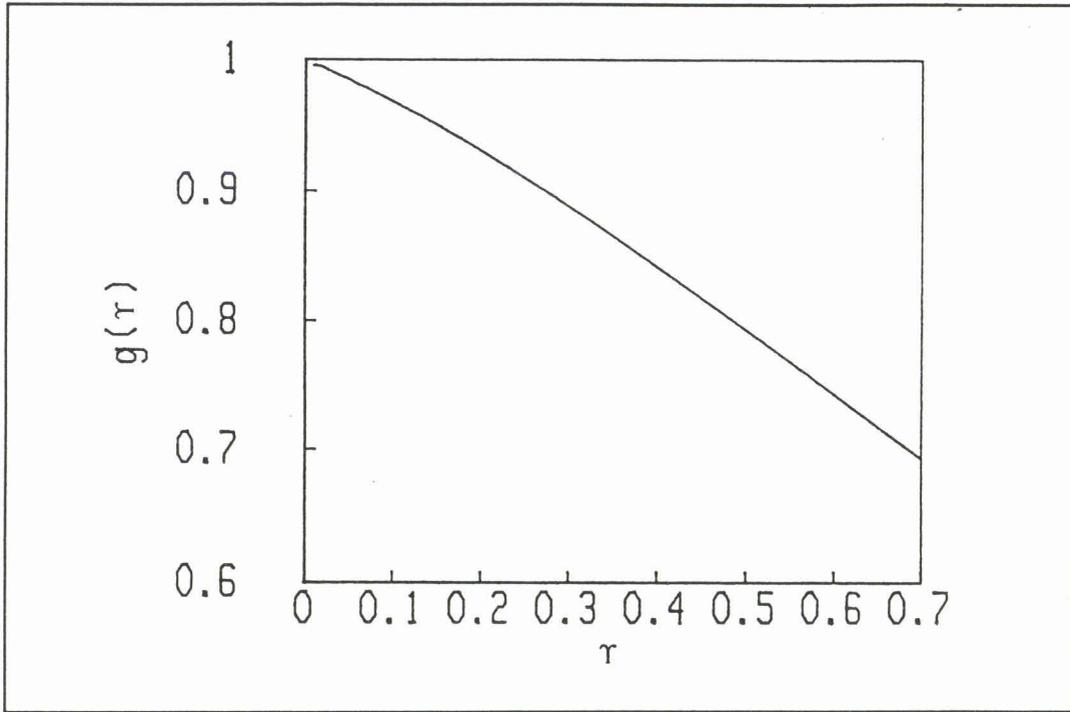


figure I-B-5

En effectuant l'intégrale on aboutit à l'expression:

$$E_n^{(1)} = \frac{-e^2 N_p a^2}{4\epsilon} \left(1 + \frac{\gamma}{r_n}\right)^{-1} \left\{ \frac{1}{3} + \frac{1}{4\alpha_n^2} (1 - 2\gamma^2 \alpha_n^2 + \gamma r_n) \right\} \quad \text{I-B-14}$$

Dans le cas du puits infini, on a:

$$E_n^{(1)}(\gamma=0) = \frac{-e^2 N_p a^2}{4\epsilon} \left( \frac{1}{3} + \frac{1}{n^2 \pi^2} \right) \quad \text{I-B-15}$$

On peut alors écrire la correction pour le puits fini, dans le cas du premier niveau, sous la forme:

$$E_1^{(1)} = g(\gamma) E_1^{(1)}(\gamma=0) \quad \text{I-B-16}$$

où  $g(\gamma)$  est une fonction du seul paramètre  $\gamma$ , prenant des valeurs peu différentes de un pour  $\gamma < 0.6$  (figure I-B-5).

Finalement, l'erreur commise sur le premier niveau s'exprime:

$$\delta(E_1) = E_1^{(1)} - \varphi_p(a/2) = \frac{-e^2 N_p a^2}{4\epsilon} \left[ g(\gamma) \left( \frac{1}{3} + \frac{1}{\pi^2} \right) - \frac{1}{2} \right] \quad \text{I-B-17}$$

#### d) Conclusion

Les calculs que nous venons de présenter ne sont valables que dans le cas d'une faible interaction avec le continuum situé au-dessus du puits, c'est à dire, pour le premier niveau, si  $\gamma \lesssim 0.6$  (voir paragraphe c). Rappelons que  $\gamma$  est un paramètre sans dimension qui peut se mettre sous la forme:

$$\gamma = \frac{3.91}{\sqrt{\frac{m}{m_0} a^2 (\text{\AA}) U_0 (\text{eV})}} \quad \text{I-B-18}$$

où  $m_0$  est la masse de l'électron libre. En prenant comme valeurs minimums:

$$\frac{m}{m_0} = 0.05, \quad a = 80 \text{ \AA}, \quad U_0 = 0.1 \text{ eV}$$

on obtient:

$$\gamma_{\max} = 0.69$$

On voit donc que la condition  $\gamma < 0.6$  sera très souvent réalisée. Dans ce cas, si le puits contient une densité de charges  $eN_p$  et s'il est soumis à un champ  $F$ , l'erreur commise sur le premier niveau est:

$$\delta(E_1) = -2.2 \times 10^{-3} \cdot f(\gamma) \frac{e^2 F^2 m a^4}{\hbar^2} + \frac{e^2 N_p a^2}{8\epsilon} \left[ 1 - g(\gamma) \left( \frac{2}{3} + \frac{2}{\pi^2} \right) \right] \quad \text{I-B-19}$$

Soit, en utilisant les unités habituelles:

$$\delta(E_1)_{(\text{meV})} = - 2.88 \times 10^{-11} \cdot f(\gamma) \left( F^2 (\text{kV/cm}) \frac{m}{m_0} a^4 (\text{\AA}) \right) + 2.26 \times 10^{-20} \cdot \frac{N_p (\text{cm}^{-3}) a^2 (\text{\AA})}{\frac{\epsilon}{\epsilon_0}} (1 - 0.87g(\gamma)) \quad \text{I-B-20}$$

où  $\epsilon_0$  est la permittivité diélectrique du vide. A titre d'illustration, prenons pour le puits:

$$\frac{m}{m_0} = 0.1, \quad \frac{\epsilon}{\epsilon_0} = 10, \quad U_0 = 0.2 \text{ eV}, \quad a = 100 \text{ \AA}$$

$$\Rightarrow \gamma = 0.276, \quad f(\gamma) = 3.0, \quad g(\gamma) = 0.90$$

et pour les perturbations:

$$F = 50 \text{ kV/cm}, \quad N_p = - 5 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3} \quad (\text{confinement d'électrons dans le puits})$$

On obtient alors:

$$\delta(E_1) = (-2.2) + (-2.4) = -4.6 \text{ meV} \quad \text{pour } E_1^{(0)} \simeq 23 \text{ meV}$$

### I-B-2 Hypothèse d'une densité de charges constante

L'hypothèse que nous voulons discuter ici consiste à supposer que la densité de charges due au puits s'écrit:

$$\rho_0(x) = eN_p \quad \text{si } 0 < x < a$$

$$\rho_0(x) = 0 \quad \text{sinon}$$

alors qu'en réalité elle est donnée par:

$$\rho(x) = eN_p a |\psi_1(x)|^2 \quad \forall x$$

en supposant que seul le premier niveau est occupé.

Il faut alors évaluer l'erreur que cette approximation va occasionner dans la simulation du C(V), c'est à dire quel écart elle va provoquer sur le calcul de la charge stockée  $Q_w$  et de la d.d.p.  $V_w$  dues au

puits. Posons alors:

$$Q_{w_0} = \int_{-\infty}^{+\infty} \rho_0(x) dx \quad \text{et} \quad Q_w = \int_{-\infty}^{+\infty} \rho(x) dx$$

$$V_{w_0} = \frac{1}{\epsilon} \int_{-\infty}^{+\infty} x \rho_0(x) dx \quad \text{et} \quad V_w = \frac{1}{\epsilon} \int_{-\infty}^{+\infty} x \rho(x) dx$$

Les grandeurs  $Q_w$  et  $Q_{w_0}$  étant à l'évidence égales, il nous reste à estimer la différence entre  $V_w$  et  $V_{w_0}$ . Etudions donc de façon générale l'intégrale:

$$I = \int_{-\infty}^{+\infty} x |\psi_1(x)|^2 dx$$

Celle-ci représente la valeur moyenne de l'opérateur  $x$  dans l'état  $\psi_1$ . Donc, si  $\psi_1$  est une fonction symétrique ou antisymétrique par rapport au centre du puits, on a:

$$I = \frac{a}{2} \quad \text{et donc} \quad V_w = V_{w_0}$$

Cette condition sera réalisée si le potentiel est lui-même symétrique par rapport au point  $x = \frac{a}{2}$ , et notamment dans le cas du "puits plat" ou dans celui d'une densité de charges constante (figure I-B-1 et I-B-4).

Reste donc à évaluer l'erreur pour le puits soumis à un champ électrique constant. Pour cela, supposons que l'approximation discutée dans le paragraphe I-B-1 soit satisfaite et donc que la correction au second ordre en perturbation soit négligeable. La fonction d'onde peut alors se calculer au premier ordre:

$$\psi_1(x) = \psi_1^{(0)}(x) + \sum_m' \frac{V_{1m}}{E_1^{(0)} - E_m^{(0)}} \psi_m^{(0)}(x) \quad \text{I-B-21}$$

Si on néglige les termes du second ordre de  $|\psi_1|^2$ , l'intégrale  $I$  peut se mettre sous la forme:

$$I = \frac{a}{2} + \frac{2}{eF} \sum_m \frac{|V_{1m}|^2}{E_i^{(0)} - E_m^{(0)}} \quad \text{I-B-22}$$

expression dans laquelle on reconnaît la perturbation au second ordre de l'énergie. On obtient donc:

$$I = \frac{a}{2} + \frac{2}{eF} E_1^{(2)} \quad \text{I-B-23}$$

Par l'équation I-B-8, on calcule alors l'erreur:

$$V_w - V_{w_0} = - 4.4 \times 10^{-3} \cdot f(\gamma) \cdot \frac{e^2 m F N_p a^5}{\epsilon \hbar^2} \quad \text{I-B-24}$$

Soit, avec les unités habituelles:

$$\delta(V_w) \text{ (Volt)} = V_w - V_{w_0} = 1.05 \times 10^{-30} \times f(\gamma)$$

$$\times \frac{\frac{m}{m_0} F(\text{kV/cm}) N_p (\text{cm}^{-3}) a^5 (\text{\AA})}{\frac{\epsilon}{\epsilon_0}} \quad \text{I-B-25}$$

Avec les données numériques de la fin du paragraphe I-B-1, on obtient:

$$\delta(V_w) = 7.9 \text{ mV}$$

valeur faible devant les tensions appliquées lors du C(V) ( de l'ordre de quelques volts).

ANNEXE II : CALCUL DE L'EFFET TUNNEL PAR  
 LA METHODE D'OPPENHEIMER

### II-1 La méthode d'Oppenheimer

Historiquement, la première approche utilisée pour calculer l'effet tunnel fut celle d'Oppenheimer [3,4]. Elle consiste en une adaptation de la théorie des perturbations dépendantes du temps. Rappelons d'abord comment s'applique cette dernière dans le cas de la désintégration d'un niveau discret vers un continuum d'états. Soit un système dont l'hamiltonien s'écrit:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \Phi$$

où  $\mathcal{H}_0$  est l'hamiltonien non perturbé qui a pour solution:

- un état  $|0\rangle$  correspondant à un niveau discret  $E_0$ .
- un continuum d'états  $|\nu\rangle$  correspondant aux énergies  $E_\nu$ .

$\Phi$  est un potentiel perturbateur indépendant du temps. La probabilité de transition de l'état  $|0\rangle$  vers le continuum s'écrit alors:

$$W = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\nu} |\langle \nu | \Phi | 0 \rangle|^2 \delta(E_\nu - E_0) \quad \text{II-1}$$

Considérons maintenant le potentiel unidimensionnel de la figure II-1. Nous voulons calculer l'effet tunnel des états localisés du puits vers le continuum situé à droite de la barrière. Remarquons tout d'abord que ceci présuppose que les états du puits restent localisés, ce qui n'est évidemment plus vrai s'il y a transmission à travers la barrière par effet tunnel. Cette apparente incohérence est la base même de la méthode d'Oppenheimer. En effet, si l'effet tunnel reste faible, on peut considérer que le système non perturbé est constitué de deux régions indépendantes situées à gauche et à droite de la barrière, et qui ont chacune un hamiltonien propre prenant en compte l'effet du champ électrique (figures II-2 et II-3). La perturbation est alors l'effet tunnel lui-même, c'est à dire l'interaction, dans la barrière, des fonctions d'onde de ces deux systèmes indépendants. Dans notre

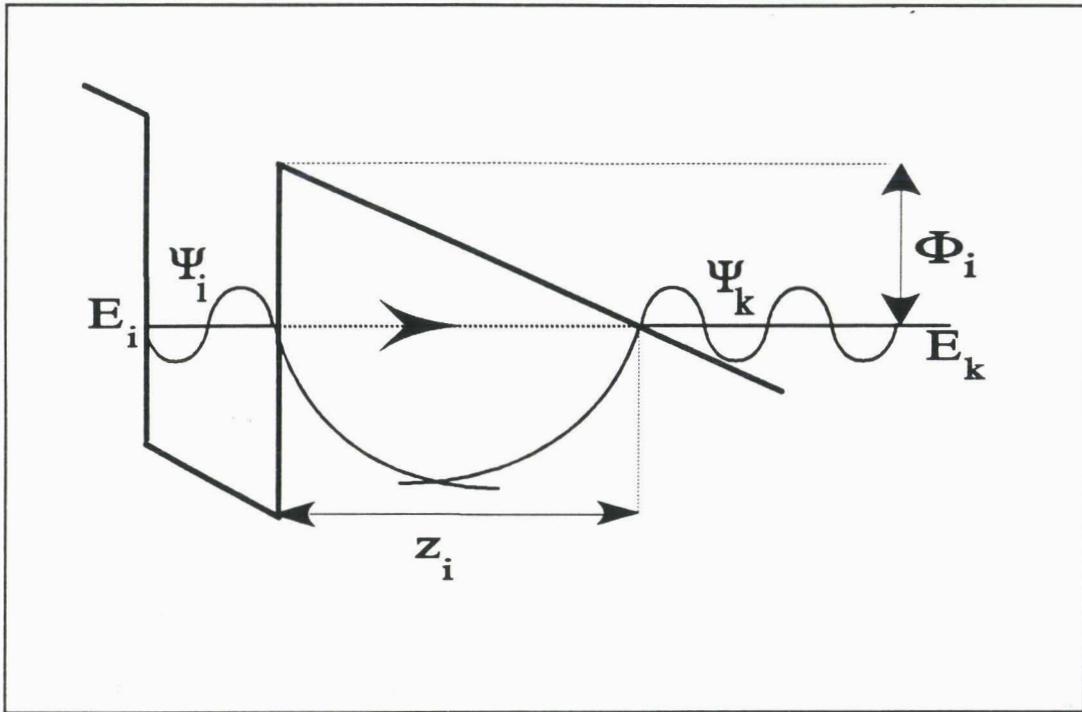


figure II-1: Recouvrement des fonctions d'onde dans la barrière de potentiel

cas, l'hamiltonien est celui d'un puits quantique soumis à un champ électrique qui permet l'effet tunnel et la probabilité de transition sera donnée par:

$$W = \frac{2}{\hbar} \pi \sum_k |\langle k | -eFz | i \rangle|^2 \delta(E_k - E_i) \quad \text{II-2}$$

où  $F$  est le champ électrique,  $|k\rangle$  est un état du continuum de la région de droite et  $|i\rangle$  l'un des états localisés du puits. On remarque que, contrairement à la formulation classique de la méthode des perturbations, les états  $|k\rangle$  et  $|i\rangle$  sont ici les solutions de deux hamiltoniens différents. Reste alors à calculer l'élément de matrice:

$$V_{ki} = \langle k | -eFz | i \rangle$$

Pour cela, il faut d'abord résoudre l'équation de Schroedinger à gauche et à droite de la barrière.

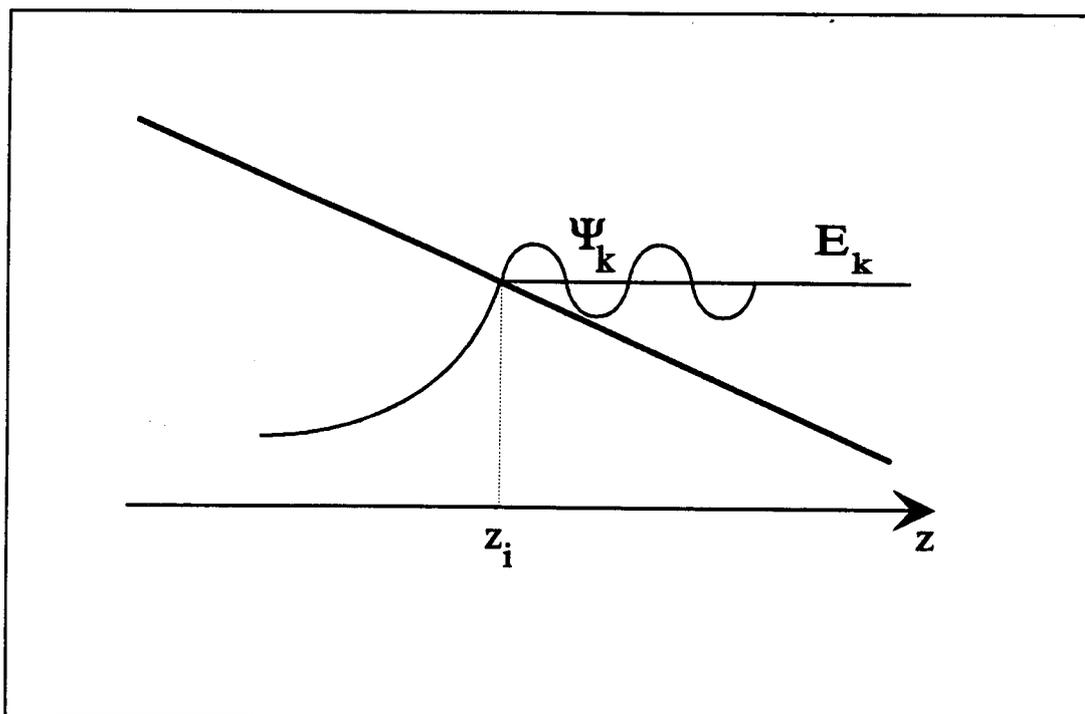


figure II-2: Potentiel de la région de droite

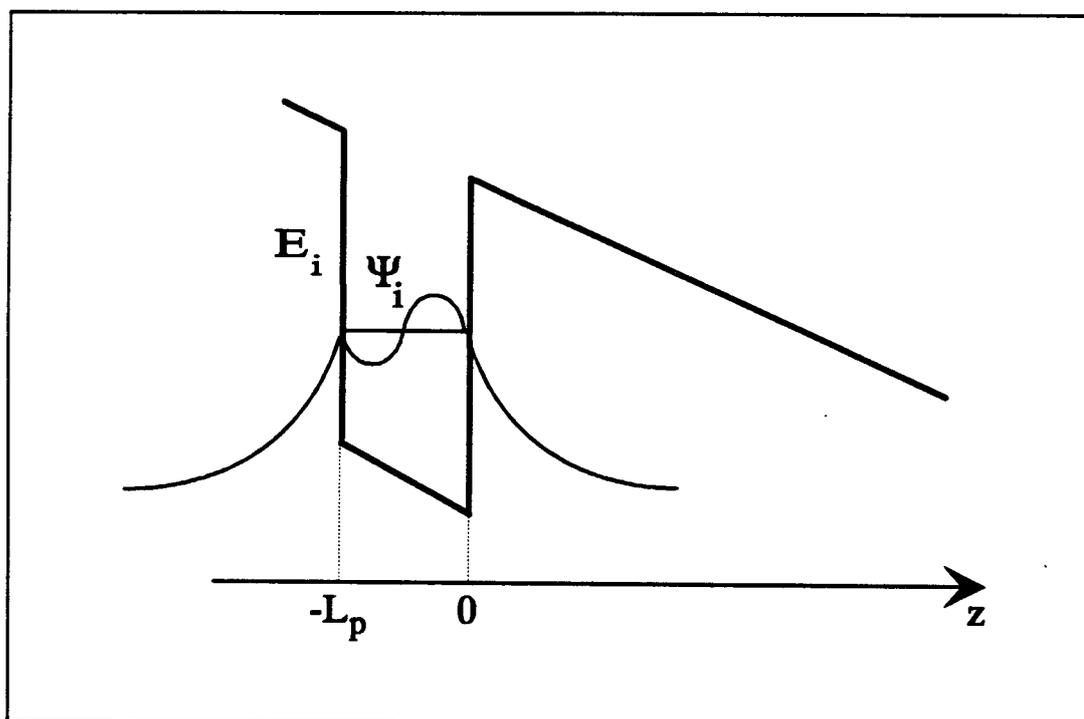


figure II-3: Potentiel de la région de gauche

## II-2 Résolution du problème non perturbé: méthode WKB

La méthode WKB [5], dérivée de l'approximation quasi-classique, permet d'écrire directement les fonctions d'onde si l'on connaît le potentiel  $\Phi(z)$ . Pour la région de droite (figure II-2) on trouve:

$$\psi_k(z) = \frac{2 A_k}{\sqrt{\alpha(z)}} \cos \left[ \int_{z_1}^z \alpha(x) dx - \frac{\pi}{4} \right] \quad \text{pour } z > z_1$$

$$\psi_k(z) = \frac{A_k}{\sqrt{K(z)}} \exp \left[ \int_{z_1}^z K(x) dx \right] \quad \text{pour } z < z_1$$

où:

$$\alpha(z) = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E_k - \Phi(z))} \quad \text{et} \quad K(z) = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (\Phi(z) - E_k)}$$

On remarque qu'au point  $z=z_1$   $\alpha$  et  $K$  s'annulent et les fonctions d'onde divergent. En réalité, ces expressions ne sont valables que pour  $|z - z_1|$  suffisamment grand et le raccordement entre les deux fonctions est réalisé de façon asymptotique [6]. La constante  $A_k$  doit se calculer par normalisation. Cependant, la région soumise à un champ électrique est de faible extension comparée à la dimension de l'échantillon, et on peut donc écrire:

$$A_k = \sqrt{\frac{\alpha_1}{2L}} \quad \text{où} \quad \alpha_1 = \alpha(z_1) = \sqrt{\frac{2mE_k}{\hbar^2}}$$

$L$  étant approximativement la longueur du cristal de GaAs situé à droite du puits.

Pour la région de gauche (figure II-3), la fonction d'onde de l'état  $|i\rangle$  est donnée par:

$$\psi_1(z) = \frac{C_1}{\sqrt{K(z)}} \exp \left[ \int_{-L_p}^z K(x) dx \right] \quad \text{pour } z < -L_p$$

$$\psi_1(z) = \frac{B_1}{\sqrt{\alpha(z)}} \cos \left[ \int_{-L_p}^z \alpha(x) dx + \varphi_1 \right] \quad \text{pour } -L_p < z < 0$$

$$\psi_1(z) = \frac{A_1}{\sqrt{K(z)}} \exp \left[ - \int_0^z K(x) dx \right] \quad \text{pour } z > 0$$

où  $K$  et  $\alpha$  sont définis comme précédemment. La continuité de la fonction d'onde et de sa dérivée en  $-L_p$  et en  $0$  imposent:

$$\begin{cases} K_1 = -\alpha_1 \tan(\varphi_1) \\ \text{et} \\ K_0 = \alpha_0 \tan(I + \varphi_1) \end{cases} \quad \text{avec } I = \int_{-L_p}^0 \alpha(x) dx$$

où  $K_1 = K(-L_p)$ ,  $\alpha_1 = \alpha(-L_p)$ ,  $K_0 = K(0)$  et  $\alpha_0 = \alpha(0)$ . Ce système d'équations permet de déterminer les niveaux d'énergie  $E_1$  du puits ainsi que les phases  $\varphi_1$  correspondantes. On obtient de plus:

$$B_1^2 = \frac{\alpha_0}{K_0} (1 + \tan^2(I + \varphi_1)) A_1^2$$

et:

$$C_1^2 = \frac{\alpha_0/K_0 + K_0/\alpha_0}{\alpha_1/K_1 + K_1/\alpha_1} A_1^2$$

$A_1^2$  est alors déterminé par normalisation. En tenant compte de la décroissance rapide des fonctions d'onde de part et d'autre du puits, on trouve:

$$A_1^2 = 2 \left[ \frac{\alpha_0/K_0 + K_0/\alpha_0}{\alpha_1/K_1 + K_1/\alpha_1} K_1^{-2} + K_0^{-2} + \bar{\alpha}^{-2} + \left( \frac{\alpha_0}{K_0} + \frac{K_0}{\alpha_0} \right) L_p \bar{\alpha}^{-1} \right]^{-1}$$

où:

$$\bar{\alpha} = \frac{1}{L_p} \int_{-L_p}^0 \alpha(x) dx$$

### II-3 Calcul du couplage par effet tunnel

L'effet tunnel peut être vu comme un flux d'électrons de la gauche vers la droite, et on montre alors que [7]:

$$V_{ki} = \frac{\hbar^2}{2m} \left( \psi_i \frac{d\psi_k^*}{dz} - \psi_k \frac{d\psi_i^*}{dz} \right)$$

expression dans laquelle on doit utiliser les expressions de  $\psi_i$  et  $\psi_k$  obtenues pour  $0 < z < z_0$ . On obtient alors:

$$V_{ki} = \frac{\hbar^2}{m} A_i A_k \exp \left[ - \int_0^{z_1} K(x) dx \right]$$

Dans notre cas,  $\Phi(z) = -eFz$  et l'expression précédente devient:

$$V_{ki} = \frac{\hbar^2}{m} A_i A_k \exp \left( - \frac{2}{3} K_i z_1 \right) \quad \text{II-3}$$

résultat qui justifie l'expression du courant tunnel obtenue au paragraphe II-B-2.

### II-4 Validité du calcul

Nous devons vérifier d'une part la validité de l'utilisation de la méthode d'Oppenheimer et d'autre part celle de l'approximation WKB.

En ce qui concerne la méthode d'Oppenheimer, nous avons vu qu'elle était valable si l'on pouvait considérer indépendantes les deux régions situées de part et d'autre de la barrière, c'est à dire si les états du puits restaient localisés. Pour évaluer l'erreur commise, on peut estimer l'élargissement  $\Delta E$ , dû à l'effet tunnel, des niveaux discrets du puits. La relation d'incertitude d'Heisenberg donne:

$$\Delta E \cdot \Delta t \simeq \hbar$$

II-4

où  $\Delta t$  représente le "temps de séjour" de l'électron dans le puits. Celui-ci est égal à l'inverse de la probabilité de transition, c'est à dire du taux d'émission tunnel  $e_{\text{TUN}}$  (voir paragraphe I-B-2). Pour être détecté en D.L.T.S.,  $e_{\text{TUN}}$  doit être inférieur à quelques centaines de Hertz, soit:

$$\Delta t \simeq 10^{-3} \text{ s}$$

La relation II-4 donne alors:

$$\Delta E \simeq 6 \times 10^{-10} \text{ meV} \quad \text{II-5}$$

c'est à dire un élargissement tout à fait négligeable. Ce dernier résultat montre donc bien la validité de la méthode d'Oppenheimer dans notre cas. Un calcul numérique exact du coefficient de transmission confirme d'ailleurs la relation II-5 [8].

La limite de validité de l'approximation WKB peut s'exprimer de la façon suivante [5]:

$$P(z) = \frac{|\text{Im } \hbar \Phi'(z)|}{|2 m (E_1 - \Phi(z))|^{3/2}} \ll 1 \quad \text{où } \Phi' = \frac{d\Phi}{dz}$$

Ce critère n'est évidemment pas vérifié autour du point  $z=z_1$  où le terme  $E_1 - \Phi(z)$  s'annule. Cependant, nous avons calculé que la contribution à  $e_{\text{TUN}}$  de la région où  $P(z)$  est supérieur à 1 % est inférieure à 0.6% du taux d'émission total. Nous montrons ainsi que l'approximation WKB est bien adaptée à notre problème.



BIBLIOGRAPHIE

1. D.I. BABIC et H. KROEMER, Solid State Electron., 9, 1015 (1985)
2. L. LANDAU et E. LIFCHITZ, Mécanique Quantique, Editions MIR, 1974
3. J.R. OPPENHEIMER, Phys. Rev. 31, 66 (1928)
4. pour une justification complète de la méthode d'Oppenheimer: C.B. DUKE, Tunneling in solids, Solid State Physics supplement 10, Academic Press (1969), p. 207
5. pour plus de détails, consulter, par exemple, A. MESSIAH, Mécanique quantique, édition Dunod (1959), p. 194
6. R.E. LANGER, Phys. Rev. 51, 669 (1937)
7. J. BARDEEN, Phys. Rev. Lett. 6, 57 (1961)
8. G. ALLAN, communication privée



100

100

GLOSSAIRE

Pour alléger les inévitables répétitions émaillant le texte, nous avons utilisé des abréviations dont nous donnons ici la signification.

D.B.: Discontinuité de Bande

D.B.C.: Discontinuité de Bande de Conduction

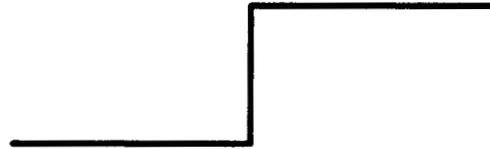
d.d.p.: différence de potentiel

H.J.: Hétérojonction

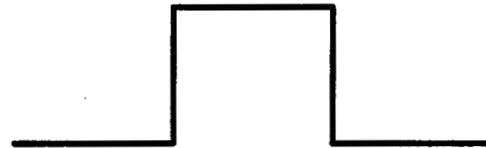
P.A.: Profil Apparent

Dénominations des échantillons

S.H.J.: Simple Hétérojonction



S.B.: Simple Barrière



S.P.Q.: Simple Puits Quantique



M.P.Q.: Multipuits Quantique



RESUME

L'objectif de ce travail est de démontrer que l'utilisation de techniques de caractérisation électrique permet de déterminer, avec une bonne précision, la discontinuité de bande d'une hétérojonction. En premier lieu, une étude détaillée de la technique C(V) permet de sélectionner les hétérostructures les mieux adaptées à la détermination de la discontinuité de bande par cette technique. Pour ces dernières, une méthode systématique est présentée, permettant une mesure précise de ce paramètre. D'autre part, l'interprétation de la spectroscopie d'admittance sur un multipuits quantique est améliorée et la précision de cette technique en est notablement augmentée. Enfin, un modèle original du comportement d'un puits quantique en D.L.T.S. est élaboré. Celui-ci démontre la pertinence de cette technique d'une part pour mettre en évidence les phénomènes de conduction dans une hétérostructure (effets thermo-ionique et tunnel) et , d'autre part, pour mesurer la discontinuité de bande. L'application de ces trois techniques aux systèmes GaAs/GaAlAs et GaAs/GaInAs permet la mesure de leur discontinuité de bande respective.

MOTS-CLES

- Hétérostructure
- Hétérojonction
- Discontinuité de bande
- Courant thermo-ionique
- Courant tunnel