

N° d'ordre : 1143

50376
1993
226

50376
1993
226

UNIVERSITE

présentée à

L'UNIVERSITE DES SCIENCES ET TECHNOLOGIES DE LILLE

pour obtenir le titre de

DOCTEUR DE L'UNIVERSITE

Spécialité : Electronique

par

Laurent BAUDRY



**"ETUDE THEORIQUE DU TRANSPORT ELECTRONIQUE
DANS DES STRUCTURES A DIMENSIONNALITE REDUITE.
APPLICATION A LA SIMULATION MONTE CARLO
D'HETEROSTRUCTURES PSEUDOMORPHIQUES"**

Soutenue le 7 Juillet 1993 devant la commission d'examen :

Membres du Jury : MM	E. CONSTANT	Président
	R. FAUQUEMBERGUE	Directeur de thèse
	J. ZIMMERMANN	Rapporteur
	P. HESTO	Rapporteur
	H. VERRIELE	Examineur
	A. CAPPY	Examineur
	J. L. THOBEL	Examineur



A mes parents

A Isabelle

Cette thèse est l'aboutissement d'un travail qui a bénéficié du soutien de deux organismes :

- *L'Institut d'Electronique et de Microélectronique du Nord (I.E.M.N.), laboratoire où a été effectué ce travail.*

- *La Direction de Recherche Etudes et Techniques (D.R.E.T.), qui m'a attribué une bourse "jeune chercheur".*

Je remercie Monsieur le Professeur E. Constant, directeur de l'I.E.M.N. de me faire l'honneur de présider ce jury.

Cette thèse a été réalisé sous la direction de Monsieur le Professeur R. Fauquemberg. Je tiens particulièrement à le remercier de la constante attention qu'il a porté au déroulement de cette étude et pour la sympathie qu'il m'a toujours témoigné.

Au cours de ces années de thèse Monsieur J. Zimmermann, directeur de recherche au C.N.R.S. , au LPCS de Grenoble, a manifesté à plusieurs reprises son intérêt pour ce travail. Je le remercie sincèrement d'avoir accepté de participer au jury en tant que rapporteur.

Monsieur P. Hesto, Professeur à l'université de Paris sud Orsay a accepté de juger ce travail et d'en être rapporteur, je lui en suis particulièrement reconnaissant.

Monsieur le Docteur H. Verrièle, ingénieur à la D.R.E.T. , a montré son intérêt pour cette étude dès son origine, en soutenant la demande de bourse "jeune chercheur". Au cours de ces trois années de thèse il a régulièrement suivi l'évolution de ce travail. Pour cela et pour sa participation à ce jury je le remercie sincèrement.

Monsieur le Professeur A. Cappy a fortement contribué, par ses enseignements à l'Ecole Universitaire D'Ingénieurs de Lille (E.U.D.I.L.), à éveiller mon intérêt pour la physique des semiconducteurs et des composants électroniques. Par la suite, il a montré à plusieurs reprises son intérêt pour le travail présenté dans cette thèse. Je lui suis particulièrement reconnaissant d'avoir accepté de participer à ce jury.

Le travail présenté dans cette thèse est le fruit d'une collaboration quotidienne avec Monsieur J. L. Thobel, chercheur au C.N.R.S. . Pendant cette thèse il m'a fait bénéficier de son expérience et de ses précieux conseils. Je tiens à lui témoigner ici ma sympathie et ma plus profonde gratitude.

Je remercie vivement A. Sleiman et F. Dessenne qui ont contribué directement à certains développements de ce travail.

Le travail présenté dans cette thèse a été réalisé dans la salle de calcul de l'équipe semiconducteurs. Une entraide journalière entre les personnes qui travaillaient dans cette salle a favorisé la progression de ce travail. J'adresse donc mes amicaux remerciements à Messieurs M. Badirou, K. Bellashni, P. Bourel, M. Charef, A. Clergeau, O. Mouton, J. Vandecastaele pour leurs collaborations.

Certaines personnes : Y. Ando du laboratoire NEC de Kansai (Japon), J. Alamkan, S. Bollaert, Y. Cordier, H. Happy, D. Lippens et O. Vanbesien de l'I.E.M.N. ont facilité chacune à leur manière, le bon déroulement de ce travail. Je les en remercie sincèrement.

Je remercie également Monsieur J. P. Dehorter, qui a réalisé la reproduction et la reliure de ce mémoire.

INTRODUCTION	1
CHAPITRE I	
Physique des hétérostructures pseudomorphiques, première étude du transport électronique	7
I.1 EVOLUTION DES MATERIAUX ET DES STRUCTURES	9
I.2 LES ETATS ELECTRONIQUES DANS LES HETEROSTRUCTURES	18
<i>I.2.1 Gaz d'électrons bidimensionnels</i>	18
<i>I.2.1.1 Détermination des états électroniques</i>	19
<i>I.2.1.2 Description de la procédure numérique</i>	21
<i>I.2.1.3 Approximation par un modèle analytique</i>	23
<i>I.2.2 Gaz d'électrons unidimensionnels</i>	26
<i>I.2.2.1 Formalisme général</i>	26
<i>I.2.2.2 Approximations analytiques</i>	27
<i>I.2.3 Effets de la réduction de dimension du système</i>	30
I.3 TRANSPORT ELECTRONIQUE	33
<i>I.3.1 Equations de transport</i>	33
<i>I.3.2 Phénomène d'écrantage</i>	34
<i>I.3.3 Mécanismes et probabilités d'interactions</i>	37
<i>I.3.3.1 Nature des mécanismes d'interactions</i>	37
<i>I.3.3.1.1 Interactions avec le réseau</i>	38
<i>I.3.3.1.2 Interactions électron-électron</i>	39
<i>I.3.3.1.3 Interactions avec les imperfections du réseau</i>	39
<i>I.3.3.2 Calcul des probabilités d'interaction</i>	41
<i>I.3.3.2.1 Méthode générale</i>	41
<i>I.3.3.2.2 Influence de la réduction de dimension</i>	42
<i>I.3.4 Approximation du temps de relaxation</i>	42
<i>I.3.5 Calculs de mobilités partielles</i>	43
<i>I.3.6 Méthode de Monte Carlo</i>	44
I.4 LE MATERIAU GaInAs PSEUDOMORPHIQUE	46
<i>I.4.1 Calcul de l'état de contrainte</i>	46

I.4.2	Effets de la contrainte sur le matériau GaInAs (massif)	50
<i>I.4.2.1</i>	<i>Effets qualitatifs</i>	<i>51</i>
<i>I.4.2.2</i>	<i>Effets quantitatifs sur la bande de conduction</i>	<i>52</i>
<i>I.4.2.3</i>	<i>Effets de la contrainte sur certains paramètres physiques</i>	<i>55</i>
I.5	ETUDE PAR LA METHODE DE MONTE-CARLO DU TRANSPORT ELECTRONIQUE EN VOLUME DANS LE GaInAs CONTRAINT	56
I.5.1	Transport à température ambiante	56
<i>I.5.1.1</i>	<i>Substrat GaAs</i>	<i>56</i>
<i>I.5.1.2</i>	<i>Substrat InP</i>	<i>59</i>
I.5.2	Transport à $T=77K$	61
<i>I.5.2.1</i>	<i>Substrat GaAs</i>	<i>61</i>
<i>I.5.2.2</i>	<i>Substrat InP</i>	<i>63</i>
I.5.3	Conclusion	64
I.6	BIBLIOGRAPHIE	65

CHAPITRE II

Etude théorique de l'interaction sur impuretés ionisées dans des gaz électroniques 3D, 2D et 1D	69
--	-----------

II.1	ETUDE DE L'INTERACTION ELECTRONS-IMPURETES DANS UN GAZ D'ELECTRONS 3D	71
<i>II.1.1</i>	<i>Modèle de Conwell-Weisskopf</i>	<i>71</i>
<i>II.1.2</i>	<i>Modèle de Dingle-Brooks-Herring</i>	<i>72</i>
<i>II.1.3</i>	<i>Modèle de Takimoto</i>	<i>74</i>
<i>II.1.4</i>	<i>Mobilités électroniques</i>	<i>75</i>
II.2	ETUDE DE L'INTERACTION ELECTRONS-IMPURETES DANS UN GAZ D'ELECTRONS 2D	78
II.2.1	Etude théorique	78
<i>II.2.1.1</i>	<i>Généralités sur la méthode de Stern-Howard</i>	<i>79</i>
<i>II.2.1.2</i>	<i>Transport monosousbande</i>	<i>81</i>
II.2.2	Etude d'un puits carré infini	82
<i>II.2.2.1</i>	<i>Influence de la largeur de puits</i>	<i>87</i>
<i>II.2.2.2</i>	<i>Influence de la densité</i>	<i>89</i>

II.2.2.3	<i>Influence de la température</i>	91
II.2.2.4	<i>Influence de l'épaisseur de spacer</i>	91
II.2.2.5	<i>Influence de l'épaisseur de zone dopée</i>	91
II.2.2.6	<i>Commentaires</i>	95
II.2.3	<i>Etude d'une structure réelle</i>	95
II.2.3.1	<i>Transport multisousbandes</i>	95
II.2.3.2	<i>Ecrantage secondaire</i>	97
II.2.3.3	<i>Etude d'une structure réelle</i>	98
II.2.3.4	<i>Conclusion</i>	99
II.3 ETUDE DE L'INTERACTION ELECTRONS-IMPURETES DANS DES GAZ D'ELECTRONS 1D		100
II.3.1	<i>Approche théorique</i>	100
II.3.1.1	<i>Méthode de Stern Howard</i>	100
II.3.1.1.1	<i>Cas général</i>	100
II.3.1.1.2	<i>Approximation monosousbande</i>	102
II.3.1.2	<i>Méthode de Lindhard</i>	103
II.3.1.3	<i>Etude de la polarisabilité</i>	104
II.3.2	<i>Approximation de la symétrie cylindrique des fonctions d'onde</i>	106
II.3.3	<i>Etude d'une structure idéale</i>	108
II.3.3.1	<i>Calculs préliminaires</i>	108
II.3.3.2	<i>Résultats</i>	113
II.3.3.2.1	<i>Etude de l'influence du rayon du fil quantique</i>	113
II.3.3.2.2	<i>Influence de la température</i>	115
II.3.3.2.3	<i>Influence de la densité électronique</i>	115
II.3.3.2.4	<i>Influence de l'épaisseur de spacer</i>	115
II.3.3.2.5	<i>Influence de l'épaisseur de la zone dopée</i>	115
II.3.3.2.6	<i>Conclusion</i>	118
II.4 INFLUENCE DU NOMBRE DE DEGRES DE LIBERTE SUR L'INTERACTION ELECTRONS-IMPURETES		119
II.4.1	<i>Généralisation de la Méthode de Stern-Howard</i>	119
II.4.2	<i>Influence des zones d'espacement</i>	124
II.5	BIBLIOGRAPHIE	126

CHAPITRE III**Simulation Monte-Carlo du transport électronique dans des hétérostructures****129**

III.1 MODELE MONTE-CARLO EN VALLEE GAMMA	131
III.1.1 <i>Prise en compte de la non parabolicité</i>	131
III.1.2 <i>Expressions des probabilités d'interactions</i>	134
III.1.2.1 <i>Interaction optique polaire</i>	134
III.1.2.2 <i>Interaction sur impuretés ionisées</i>	135
III.1.2.3 <i>Interaction acoustique</i>	136
III.1.2.4 <i>Interaction d'alliage</i>	136
III.1.2.5 <i>Exemples</i>	136
III.1.3 <i>Détermination du vecteur d'onde après interaction</i>	138
III.1.4 <i>Résultats des premières simulations</i>	139
III.1.4.1 <i>Etude à 300K</i>	139
III.1.4.1.1 <i>Puits carré infini de GaAs</i>	139
III.1.4.1.2 <i>Puits carré infini de Ga(1-x)In(x)As</i>	141
III.1.4.2 <i>Etude à 77K</i>	143
III.1.4.2.1 <i>Puits carré infini de GaAs</i>	143
III.1.4.2.2 <i>Puits carré infini de Ga(1-x)In(x)As</i>	145
III.1.4.3 <i>Conclusion</i>	146
III.2 PRISE EN COMPTE DU PRINCIPE D'EXCLUSION DE PAULI	147
III.2.1 <i>Principe d'exclusion de Pauli</i>	147
III.2.2 <i>méthode adoptée</i>	148
III.2.2.1 <i>Détermination de la fonction de distribution des électrons</i>	148
III.2.2.2 <i>Prise en compte du principe de Pauli</i>	149
III.2.3 <i>Résultats</i>	150
III.2.3.1 <i>Effet du principe de Pauli dans un puits carré infini</i>	150
III.2.3.2 <i>Etude d'une structure à plan de dopage</i>	153
III.2.3.3 <i>Etude d'une structure à deux puits</i>	156
III.3 EXTENSION DU MODELE MONTE CARLO AUX CHAMPS ELEVES	160
III.3.1 <i>Position du problème</i>	160
III.3.2 <i>Détermination des états électroniques des vallées L et X</i>	161
III.3.3 <i>Interactions intervallées 2D-2D</i>	162

<i>III.3.4 Interaction optique non polaire</i>	162
<i>III.3.5 Exemple du puits carré infini</i>	163
<i>III.3.6 Etude d'une structure T.E.G.F.E.T. GaAlAs/GaInAs</i>	164
III.4 ETUDE DE DEUX STRUCTURES T.E.G.F.E.T.	170
<i>III.4.2 Hétérostructure AlInAs/GaInAs/AlInAs</i>	170
<i>III.4.3 Etude d'une structure GaAlAs/GaInAs/GaAlAs comportant un plan de dopage dans le puits</i>	174
III.5 CALCUL AUTOCOHERENT SCHRODINGER POISSON BOLTZMANN	179
<i>III.5.1 Méthode</i>	179
<i>III.5.2 Etude de l'influence du couplage</i>	179
III.6 BIBLIOGRAPHIE	186
CONCLUSION	187
ANNEXES	191

INTRODUCTION

Introduction

Pourquoi étudier le transport électronique dans les matériaux semiconducteurs ?

Donner une réponse complète à cette question, philosophique par nature, nous égarerait de notre sujet. Par contre, pour apporter un élément de réponse nous pouvons citer deux domaines : la physique des solides et la physique des composants électroniques, qui se trouvent régulièrement enrichis par les connaissances nouvelles acquises sur les matériaux semiconducteurs. Ce second domaine est intimement lié aux systèmes actuels de communication. Ainsi l'apparition régulière de composants électroniques fonctionnant à des fréquences de plus en plus élevées est directement en rapport avec l'augmentation de la quantité d'information transmise par satellites et par réseaux de fibres optiques.

L'amélioration des performances des composants est principalement due aux progrès des techniques de croissances de cristaux semiconducteurs. Ces techniques ont permis la réalisation de transistors à effet de champ utilisant des couches de matériaux contraints ou "transistors pseudomorphiques", présentant de très bonnes performances hyperfréquences.

Le coût des réalisations technologiques de composants électroniques étant très élevé, l'optimisation de ces composants par simulations numériques apparaît actuellement comme une étape nécessaire avant toute production à grande échelle. La connaissance des propriétés de transport de charges dans un matériau semiconducteur permet une meilleure compréhension des phénomènes physiques régissant le fonctionnement des composants électroniques. Dans ce contexte, il apparaît crucial d'étudier préalablement à toute simulation numérique d'un composant, le transport électronique dans la structure qui le constitue.

Le but de ce travail étude est l'étude du transport électronique dans des hétérostructures utilisant divers matériaux III-V, en particulier des matériaux pseudomorphiques, ce qui permettra par la suite d'optimiser les transistors à effet de champ qui utilisent ce type de structure. Pour atteindre ce but, nous avons effectué successivement plusieurs études, décrites dans ce mémoire par ordre chronologique. Nous présentons des résultats sur : le transport électronique dans un matériau en volume, l'effet de l'interaction sur impuretés dans des systèmes 3D, 2D, 1D, et finalement, le transport électronique dans une hétérostructure.

Le chapitre I débute par une description générale des composants électroniques qui motivent notre étude. Nous nous attachons particulièrement à décrire les aspects physiques essentiels qui font évoluer les composants comme, par exemple, l'utilisation d'hétérojonctions, et que nous nous proposons de prendre en compte. La quantification des états électroniques et la réduction du nombre de degrés de liberté de mouvement qui jouent un grand rôle dans les

Introduction

propriétés des hétérostructures, font l'objet du paragraphe I-2. Des généralités sur le transport électronique et les mécanismes d'interaction intervenant dans les matériaux semiconducteurs sont présentés dans le paragraphe I-3. Dans ce même paragraphe, nous faisons un rappel sur la théorie de l'écrantage linéaire qui sera appliquée dans la suite du mémoire. C'est également dans ce paragraphe que nous décrivons les deux méthodes utilisées dans cette thèse pour caractériser le transport : La méthode du temps de relaxation appliquée au calcul de la mobilité électronique et la méthode de Monte-Carlo qui est une méthode statistique permettant une description microscopique du transport électronique. Dans le paragraphe I-4, nous étudions l'effet de la contrainte, présente dans les hétérostructures pseudomorphiques à base de GaInAs, sur la structure de bande et les principaux paramètres physiques de ce matériau. Une première étude du transport électronique dans le matériau GaInAs contraint est exposée dans le paragraphe I-5. Dans cette étude préliminaire, les effets de la quantification sont négligés ; en revanche, ils seront largement étudiés par la suite.

L'utilisation d'hétérostructures pour réaliser des transistors à effet de champ a été principalement motivée par la possibilité de séparer spatialement les électrons des impuretés ionisées. Le chapitre II est dédié à l'étude de l'effet de l'interaction sur impuretés ionisées sur le transport électronique. Nous commençons, dans le paragraphe II-1, par un bref rappel sur les modèles d'interaction généralement utilisés dans les matériaux en volume. Nous donnons, pour ces différents modèles, des évaluations de la mobilité limitée par cette interaction dans un matériau en volume. Dans le paragraphe II-2, nous présentons une méthode de calcul de la mobilité limitée par l'interaction sur impuretés ionisées dans des gaz d'électrons bidimensionnels. A l'aide d'un modèle simple qui suppose le puits de potentiel de forme carrée et de hauteur infinie, nous évaluons l'influence des principaux paramètres physiques et géométriques sur la mobilité électronique ; puis, toujours avec la même méthode, nous étudions une hétérostructure réelle et montrons les limites de l'approximation du puits carré infini. En quantifiant les états électroniques dans deux directions, on réduit le nombre de degrés de liberté de mouvement à un. Les structures utilisant des gaz d'électrons unidimensionnels étant de plus en plus étudiées, il nous a semblé intéressant d'étendre nos investigations sur l'interaction sur impuretés ionisées à ce type de structure. Cette étude est présentée dans le paragraphe II-3. Le chapitre II se termine par la présentation d'une méthode simplifiée d'étude de l'interaction électrons-impuretés ionisées dans des gaz 1D, 2D et 3D (paragraphe III-4).

Dans le chapitre III, nous décrivons la construction d'un modèle Monte-Carlo, le plus complet possible, du transport dans les hétérostructures. Nous avons introduit successivement les effets physiques fondamentaux : la non parabolicité, le principe de Pauli, la quantification des vallées L et X. Le calcul des probabilités d'interaction et les premiers résultats de mobilité et de vitesse bas champs sont présentés dans paragraphe III-1. Dans le paragraphe III-2, nous montrons comment il est tenu compte du caractère dégénéré du gaz électronique et donnons des résultats obtenus pour diverses structures. Jusqu'à ce niveau de l'étude, le modèle Monte-Carlo que nous

Introduction

avons construit permet d'étudier le transport aux faibles champs. Dans le paragraphe III-3, nous exposons la méthode choisie pour étendre notre modèle aux champs élevés. Elle consiste à considérer uniquement des états 2D, ce qui implique la détermination d'états 2D dans les vallées L et X. Ensuite, nous utilisons ce modèle pour étudier le transport électronique dans une structure à double hétérojonction constituée de matériaux AlGaAs et GaInAs. Le paragraphe III-4 regroupe deux études de structures à double hétérojonction. La première utilise les matériaux AlInAs et GaInAs, tandis que la seconde est une structure à plan de dopage. Le chapitre III se termine par le couplage du modèle Monte-Carlo et de la résolution des équations de Poisson et Schrödinger. Ce dernier raffinement apporté au modèle est illustré à l'aide d'une étude à champ moyen de la dynamique non stationnaire dans une hétérostructure pseudomorphique.

Enfin, dans la conclusion, nous résumons les principaux résultats acquis, décrivons les possibilités actuelles du modèle Monte-Carlo élaboré et donnons un aperçu des futures études que nous envisageons.

CHAPITRE I

**Physique des hétérostructures
pseudomorphiques, première étude du
transport électronique**

CHAPITRE I

**Physique des hétérostructures
pseudomorphiques, première étude du
transport électronique**

Chapitre I

Le paragraphe I-1 de ce chapitre présente les différents types de transistors qui ont motivé notre étude. C'est ainsi que nous décrivons brièvement le principe de fonctionnement d'un hétérotransistor à effet de champ. Dans le but d'optimiser ce type de structure il est nécessaire de disposer d'outils de simulation permettant de prendre en compte le maximum de phénomènes physiques intervenant dans la dynamique des porteurs.

Les aspects fondamentaux des hétérostructures que nous étudions font l'objet du paragraphe I-2. La quantification des états énergétique, la réduction du nombre de degrés de liberté du mouvement des électrons, les outils numériques permettant la détermination des états électroniques sont décrits dans ce paragraphe.

Dans le paragraphe I-3. Nous rappelons, tout en les justifiant, les différentes méthodes que nous utilisons dans les chapitres suivants. Nous évoquons : L'équation de transport de Boltzmann, la théorie d'écrantage linéaire de Lindhard, les calculs de mobilités et la méthode de Monte Carlo.

Les effets de la contrainte sur le matériau GaInAs sont présentés dans le paragraphe I-4. Les effets généraux sur la structure de bande sont passés en revue. Les influences de la contrainte sur la bande de conduction et sur certains paramètres physiques sont évaluées numériquement à partir de sources bibliographiques

Le contenu du paragraphe I-5 apporte, dans un cadre de validité certes restrictif, une première réponse aux questions posées dans le paragraphe I-1. Nous présentons les résultats d'une étude par la méthode de Monte-Carlo du transport électronique en volume dans le matériau GaInAs contraint.

I.1 EVOLUTION DES MATERIAUX ET DES STRUCTURES

Depuis la découverte de l'effet transistor, les évolutions dans le domaine des composants électroniques à l'état solide ont été nombreuses et variées. Dans le but d'accroître les performances des composants, les efforts des concepteurs se sont principalement portés dans les deux directions suivantes :

- Rechercher des matériaux présentant de meilleures propriétés de transport.
- Améliorer les structures.

Le Silicium est actuellement le matériau semiconducteur dont la technologie est la mieux maîtrisée. Pour cette raison essentielle, il est aujourd'hui le composé le plus utilisé pour réaliser des composants et des circuits. D'autres matériaux ont suscité l'intérêt des scientifiques car ils présentent des propriétés de transport meilleures que celles du Silicium. Dans la famille des matériaux III-V ce sont les composés binaires GaAs et InP puis les alliages ternaires comme GaAlAs et GaInAs qui ont été étudiés le plus largement. A titre d'illustration, nous donnons dans le tableau I-1 les vitesses maximales en champ uniforme et les mobilités dans différents matériaux.

T=300K $N_D=0$	Si	GaAs	Ga(0,47)In(0,53)As
μ ($m^2/V/s$)	0.1	0.8	1.2
V_{max} (10^7 cm/s)	1	2	2,6

Tableau I-1

Comparaison des mobilités et des vitesses électroniques maximales dans différents matériaux semiconducteurs

La possibilité d'obtenir une résistance différentielle négative et l'existence de phénomènes de transport non stationnaires importants (survitesse, balistique) sont des atouts qui ont également contribué à étendre l'emploi des matériaux III-V. La possibilité d'ajuster le gap de GaInAs en faisant varier la fraction d'indium rend également ce matériau très intéressant sur le plan de ses applications en optoélectronique (lasers, photodétecteurs).

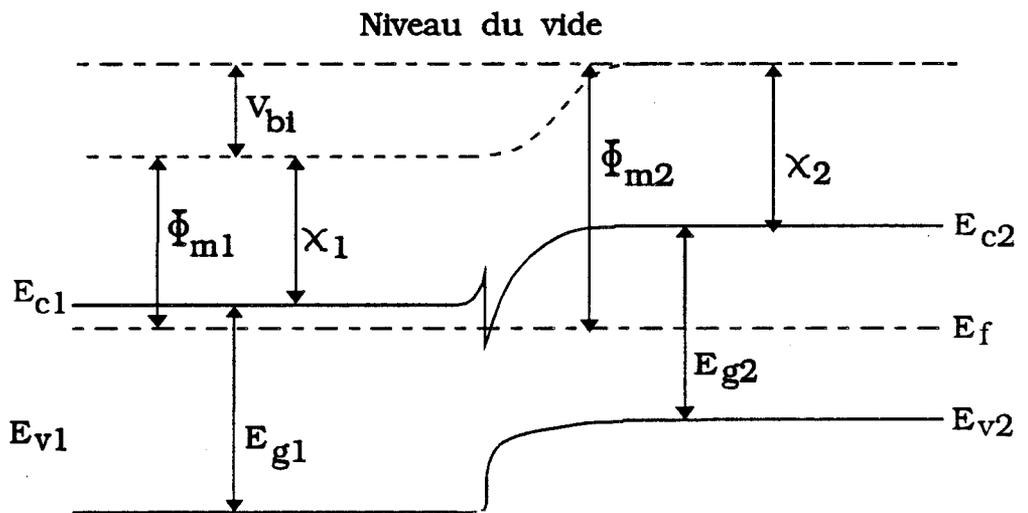
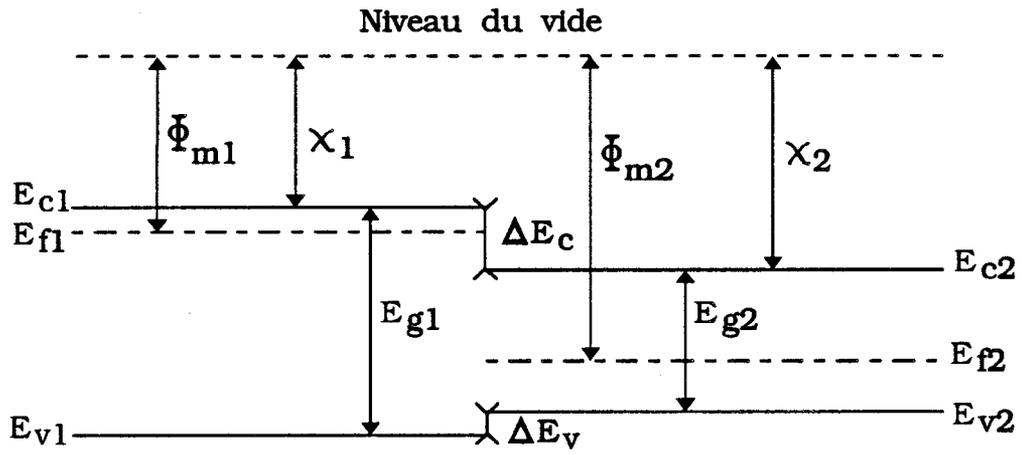


Figure I-1

Modèle d'Anderson d'une hétérojonction

Chapitre I

La présence d'impuretés donneuses ou acceptrices permet d'augmenter la densité de porteurs libres dans un semiconducteur, mais elle est un facteur limitant en ce qui concerne les propriétés de transport. Un des rêves des concepteurs de composants a longtemps été de pouvoir séparer spatialement les porteurs libres des impuretés qui leur ont donné naissance pour pouvoir bénéficier à la fois d'une forte densité de charge et des performances de transport d'un matériau intrinsèque. La réalisation de ce rêve a été rendue possible grâce à l'utilisation d'hétérojonctions.

En juxtaposant un matériau à grand gap fortement dopé et un matériau à petit gap non intentionnellement dopé, on réalise une hétérojonction qui possède des propriétés intéressantes. Par un diagramme d'Anderson, on peut représenter la structure de bande d'une hétérojonction (Fig. I-1). Les électrons transfèrent vers le matériau à petit gap où ils forment une couche d'accumulation. Les électrons accumulés bénéficient alors des conditions de transport qui sont celles d'un matériau non dopé.

Bien que l'intérêt théorique des hétérojonctions soit reconnu depuis environ un quart de siècle [1], leur réalisation a longtemps été problématique. L'obtention d'hétérojonctions de bonne qualité passe par un contrôle précis de la position et de la planéité de l'interface. Si cette condition n'est pas réalisée, l'interface perturbe fortement le cristal, ce qui a pour effet de dégrader le transport. L'évolution des techniques de croissance cristalline a été le facteur essentiel du développement des composants à hétérojonctions. L'épitaxie par jets moléculaires, l'épitaxie par la méthode des organométalliques sont des techniques qui permettent de contrôler la composition et l'épaisseur de chaque couche avec une grande précision. Nombre de matériaux ont ainsi pu être employés dans diverses structures. Le grand nombre d'hétérostructures qui ont pu être réalisées a fait, entre autres, notablement évoluer un des composants les plus utilisés en électronique : le transistor à effet de champ.

Le transistor à effet de champ, dans le cas le plus général, est constitué d'une couche semiconductrice, et de trois électrodes : une grille, une source et un drain. L'intensité du courant dépend de la section du canal conducteur et de la densité de porteurs dans ce canal.

Les transistors à effet de champ de type M.E.S.F.E.T. (MEtal Semiconductor Field Effect Transistor) réalisés en GaAs ont suscité un grand intérêt du fait de leur performances hyperfréquences. Dans ces composants, un contact Schottky sous la grille permet de moduler la section du canal conducteur.

Chapitre I

Vers 1980 une nouvelle génération de transistor à effet de champ est apparue. Ces transistors utilisent les propriétés des hétérojonctions évoquées précédemment. Selon la société qui a déposé le brevet, ce composant a reçu une appellation différente : T.E.G.F.E.T. (Two Electron Gas Field Effect Transistors) pour THOMSON [2] et H.E.M.T. (High Electron Mobility Transistor) pour FUJITSU [3]. Le principe de fonctionnement de ce transistor dont la structure est décrite sur la figure I-2 est sensiblement différent de celui du M.E.S.F.E.T. , la commande de grille modifie la structure de bande et la position du niveau de Fermi, elle agit donc sur la densité de porteurs accumulés. Ce phénomène est illustré qualitativement sur la figure I-3.

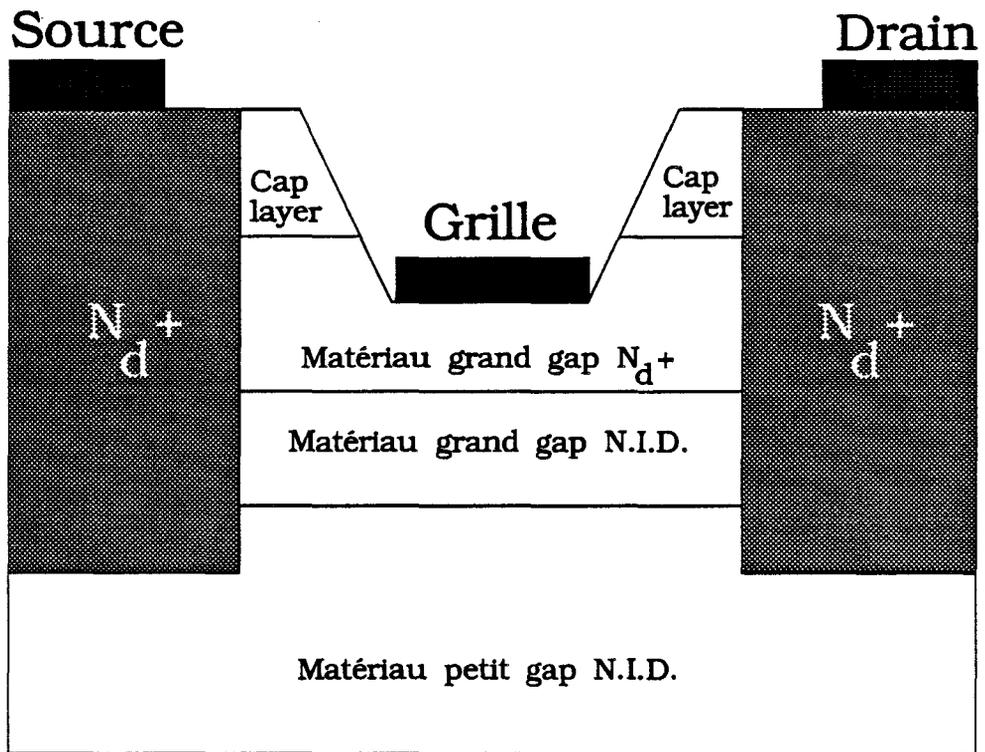


Figure I-2

Structure schématique d'un T.E.G.F.E.T.

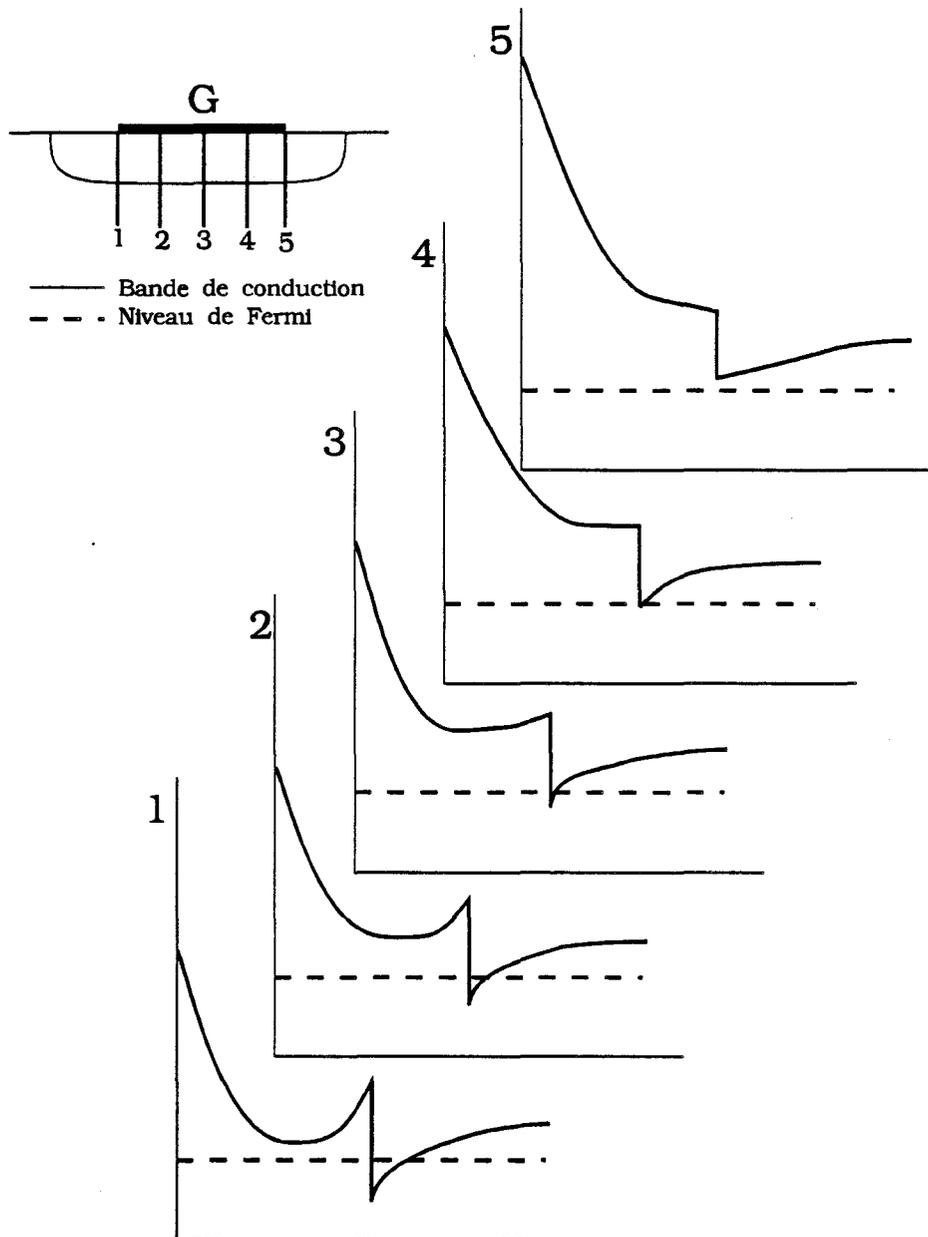


Figure I-3

Effet de la commande de grille sur la bande de conduction

TEGFET Classique

TEGFET Pseudomorphique

Filière GaAs

Grille

$\text{Al}_y \text{Ga}_{1-y} \text{As } N_d^+$
$\text{GaAs } N_d = 0$
$\text{GaAs } \text{SI}$

a)

Grille

$\text{Al}_y \text{Ga}_{1-y} \text{As } N_d^+$
$\text{Ga}_x \text{In}_{1-x} \text{As } N_d = 0$
$\text{GaAs } \text{SI}$

c)

Filière InP

Grille

$\text{Al}_{0,48} \text{In}_{0,52} \text{As } N_d^+$
$\text{Ga}_{0,47} \text{In}_{0,53} \text{As } N_d = 0$
$\text{InP } \text{SI}$

b)

Grille

$\text{Al}_{0,48} \text{In}_{0,52} \text{As } N_d^+$
$\text{Ga}_x \text{In}_{1-x} \text{As } N_d = 0$
$\text{InP } \text{SI}$

d)

Figure I-4

Différentes filières technologiques de T.E.G.F.E.T.

Chapitre I

La séparation spatiale des électrons et des impuretés obtenue par l'utilisation d'hétérojonctions peut être accrue en insérant entre la couche du matériau à grand gap dopée et celle du matériau à petit gap non dopée, une couche de matériau à grand gap non dopée, connue sous le nom d'espaceur.

Le ternaire GaAlAs possède un gap supérieur à GaAs tout en ayant sensiblement le même paramètre de maille. Cette dernière propriété que l'on a longtemps cru indispensable pour obtenir une bonne qualité cristalline, associée à l'expérience de la technologie GaAs a fait que les premiers T.E.G.F.E.T (Fig. I-4a) utilisaient l'hétérojonction GaAlAs/GaAs.

Pour améliorer les performances des T.E.G.F.E.T., on a ensuite cherché à substituer le GaInAs au GaAs. Dans un premier temps, l'hétérojonction $\text{Al}_{0,48}\text{In}_{0,52}\text{As}/\text{Ga}_{0,47}\text{In}_{0,53}\text{As}$ qui croît en accord de maille sur InP a permis la réalisation de T.E.G.F.E.T. bénéficiant de qualités de transport du GaInAs (Fig. I-4b).

D'autres progrès dans la maîtrise des méthodes d'épitaxie ont ensuite permis la réalisation d'hétérojonctions utilisant le GaInAs désadapté en maille sur substrat de GaAs ou d'InP (GaAlAs/GaInAs et AlInAs/GaInAs) sans toutefois provoquer l'apparition de dislocations. Le GaInAs est dans ces conditions mécaniquement contraint. Les structures de ce type sont appelées pseudomorphiques. Les hétérotransistors à effet de champ réalisés à partir de ces structures portent le nom de T.E.G.F.E.T. pseudomorphiques. Des composants de ce type ont été développés dans les deux filières technologiques GaAs et InP (Fig. I-4c et Fig. I-4d).

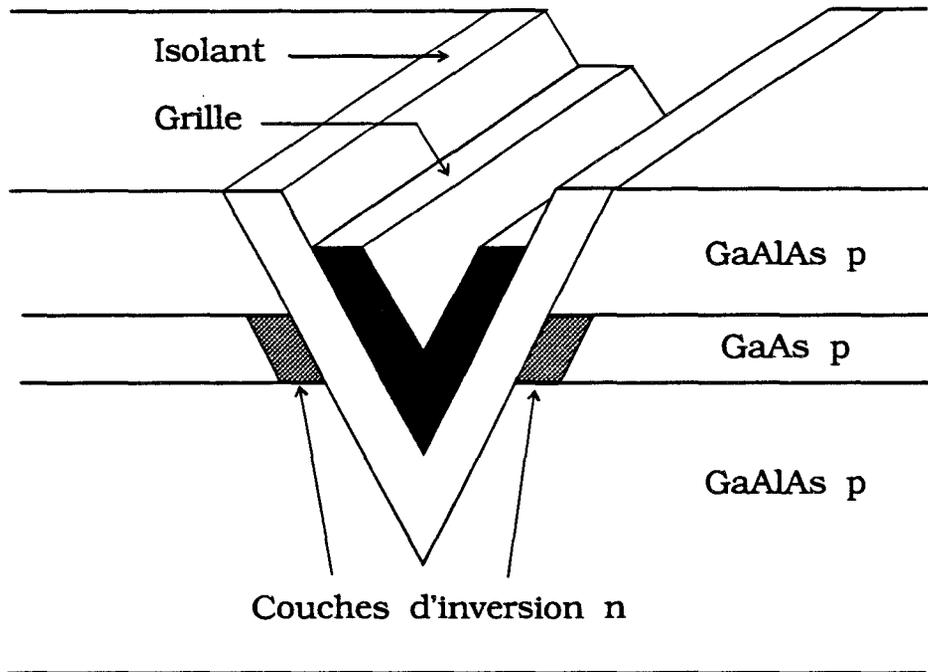


Figure I-5

Structure 1D proposée par Sakaki [5]

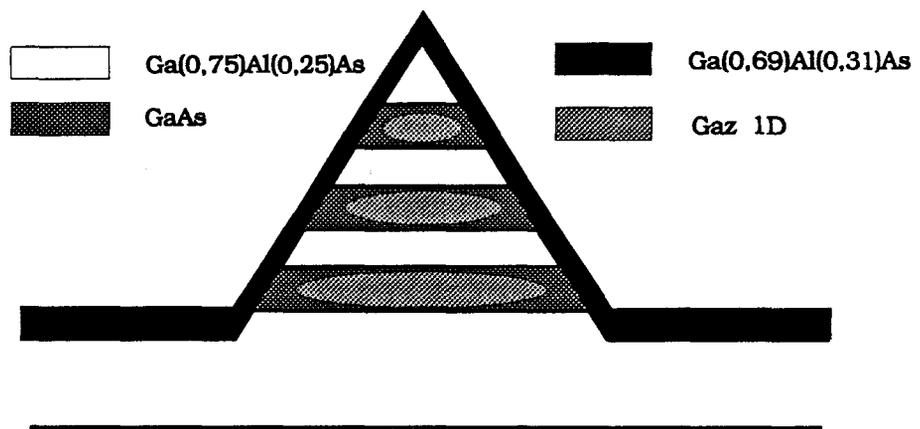


Figure I-6

Structure 1D réalisée par Petroff [6]

Chapitre I

L'intérêt reconnu de quantifier les états électroniques dans une direction pour utiliser des électrons dynamiquement bidimensionnels et obtenir ainsi de meilleures propriétés de transport que dans le matériau en volume a suscité une interrogation légitime de la part des physiciens. En admettant que l'on puisse quantifier les états électroniques dans deux directions et obtenir des électrons dynamiquement unidimensionnels, quelles seront les performances en transport des électrons d'un tel gaz ? Sakaki [4] [5] a proposé une structure permettant d'obtenir un gaz 1D (Fig. I-5) et par un premier calcul simple de mobilité a montré l'intérêt potentiel de ces structures. Petroff [6] a été le premier à réaliser par épitaxie par jets moléculaires des fils quantiques utilisant des hétérojonctions GaAlAs/GaAs (Fig. I-6). La structure réalisée par Petroff est présentée sur la figure I-6. Le motif "triangulaire" est obtenu en utilisant l'effet anisotrope de l'attaque chimique sur GaAs. Yuh et Wang [7] ont proposé par la suite une structure de transistors à effet de champ utilisant des fils quantiques (Fig. I-7).

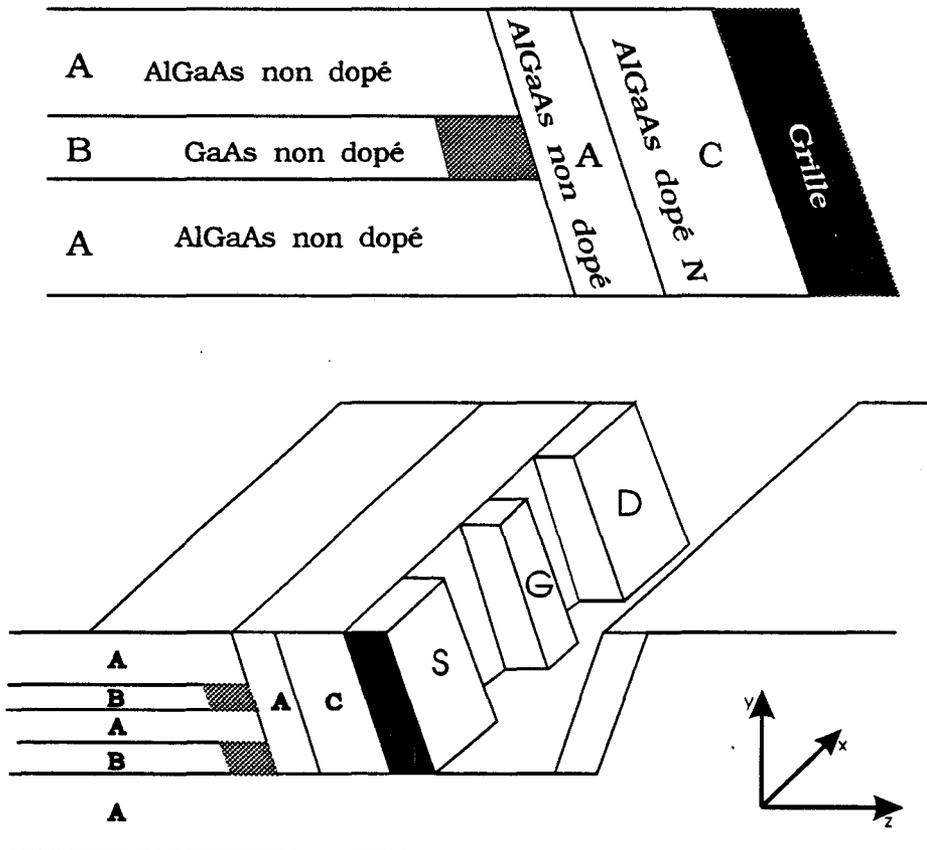


Figure I-7

Structure de transistor à effet de champ proposée par Yuh et Wang [7]

Dans les paragraphes suivants, nous abordons deux aspects importants concernant directement les hétérotransistors pseudomorphiques utilisant des puits ou des fils quantiques comme canal : Les états électroniques dans les hétérostructures et les paramètres physiques du matériau GaInAs contraint.

I.2 LES ETATS ELECTRONIQUES DANS LES HETEROSTRUCTURES

L'utilisation d'hétérojonctions dans les structures semiconductrices a permis d'améliorer sensiblement les performances des composants à effet de champ, d'autres hétérostructures sont également à l'origine de composants de conception récente dont le fonctionnement est basé sur des effets quantiques (composants à effet tunnel résonant), des phénomènes physiques nouveaux tels l'effet hall quantique découvert par Von Klitzing [8] ont pu être mis en évidence grâce aux hétérojonctions.

L'apparition des hétérostructures puis leur développement ont fait progresser l'électronique et la physique. Parallèlement à cette évolution favorable, la complexité de la physique qui régit le fonctionnement de ces composants s'est accrue, ce qui rend plus difficile la prévision quantitative des performances.

La suite de ce paragraphe est consacrée à mettre en évidence deux effets physiques introduits par l'utilisation d'hétérojonctions qu'il est important de prendre en compte : la quantification des états électroniques et, sur le plan de la dynamique, la réduction de la dimensionnalité du système. Nous présenterons une méthode permettant de déterminer le profil de bande de conduction et les états électroniques. Certains calculs, présentés dans le chapitre II de ce mémoire, utilisent pour représenter ces différentes grandeurs, des modèles approximatifs que nous évoquerons également.

I.2.1 Gaz d'électrons bidimensionnels

Dans le paragraphe I.1 nous avons évoqué le procédé qui permettait de séparer spatialement les impuretés donneuses des électrons présents dans le canal conducteur : il consiste à juxtaposer un matériau à grand gap dopé et un matériau à petit gap non dopé. La superposition lors de la phase de croissance de matériaux ayant des affinités électroniques différentes et la condition d'alignement du niveau de Fermi entraînent lors de la construction du diagramme de bande, une courbure de la bande de conduction de chaque côté de l'hétérojonction. Il apparaît ainsi du côté du matériau à faible gap un puits de potentiel de faible largeur.

Dans le cas des hétérojonctions formées par des matériaux III-V que nous étudions, la largeur du puits de potentiel est du même ordre de grandeur que la longueur d'onde de De Broglie des électrons, ceci entraîne une quantification sous forme de sousbandes des états d'énergie dans le puits. Si x et y sont les directions dans le plan de croissance, et z la direction de croissance, les états électroniques sont quantifiés dans la direction z .

I.2.1.1 Détermination des états électroniques

Généralement, ce problème se traite dans le cadre de l'approximation de la masse effective et dans le formalisme de la fonction enveloppe. Celui-ci consiste à séparer la fonction d'onde électronique en une partie variant rapidement dans l'espace ("ondes de Bloch") et une partie variant lentement à l'échelle d'une maille atomique : la fonction enveloppe. Seule cette dernière sera utilisée dans les calculs, tandis que la partie rapidement variable intervient par l'intermédiaire de paramètres effectifs (masse, structure de bande...) [9]. Les états électroniques de la bande de conduction obéissent, dans le puits de potentiel, à l'équation de Schrödinger stationnaire.

Pour un électron en sousbande i on a :

$$(H_0 + V(z))|\psi_i\rangle = E_i|\psi_i\rangle \quad (\text{éq I-1})$$

H_0 : terme d'énergie "cinétique"
 $V(z)$: énergie potentielle dans la structure
 $|\psi_i\rangle$: fonction enveloppe
 E_i : énergie propre

Pour les électrons situés au minimum de la bande de conduction (électrons de la vallée Γ pour le GaInAs) le tenseur des masses effectives est diagonal.

En posant $H_1 = H_0 + V(z)$, H_1 se décompose en $H_1 = H_1^{xy} + H_1^z$:

$$H_1^{xy} = -\frac{\hbar^2}{2} \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{m_{xy}^*} \frac{\partial}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{1}{m_{xy}^*} \frac{\partial}{\partial y} \right) \right] \quad a)$$

$$H_1^z = -\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{1}{m_z^*} \frac{\partial}{\partial z} \right) + V(z) \quad b)$$

(éq I-2)

La fonction d'onde $\psi_i(x, y, z)$ se décompose alors en un produit d'une onde plane $\phi_i(x, y)$ et d'une fonction enveloppe $\xi_i(z)$; quant aux valeurs propres, elles se mettent sous la forme $E = E_{xy}(k_{xy}) + E_i$, où E_i est l'énergie correspondant à l'état i dans le puits. $E_{xy}(k_{xy})$ est l'énergie correspondant au vecteur dans le plan de l'interface. Si $E_{xy}(k_{xy})$ est calculé en supposant une bande parabolique, on obtient la relation classique :

$$E = \frac{\hbar^2 k_{xy}^2}{2m_{xy}^*} + E_i \quad (\text{éq I-3})$$

\hbar : constante de Planck.
 m_{xy}^* : masse effective en sousbande i .

Chapitre I

En raison de la quantification de l'énergie dans la direction perpendiculaire à l'interface, les électrons ne sont libres de se déplacer que dans les deux autres directions et se comportent de ce fait comme un gaz d'électrons bidimensionnels (Figure I-8). Ce caractère bidimensionnel peut être mis en évidence expérimentalement par la méthode de Shubnikov de Haas [10]. Cependant les électrons ne sont bidimensionnels que du point de vue dynamique, et non spatialement, dans la mesure où leur fonction d'onde possède une étendue spatiale, certes réduite dans la troisième dimension. C'est pourquoi, en toute rigueur il faut parler d'un gaz électronique quasi bidimensionnel.

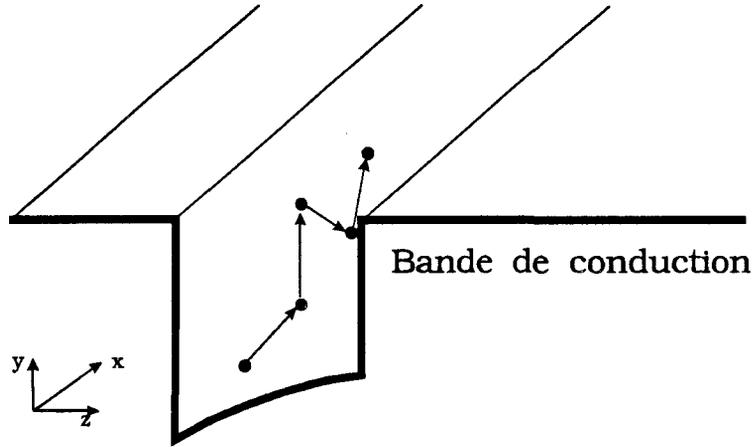


Figure I-8

Représentation schématique du transport bidimensionnel

Perpendiculairement à l'interface, les fonctions d'ondes de l'électron vérifient l'équation de Schrödinger :

$$-\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{1}{m_z^*(z)} \frac{\partial \xi_i}{\partial z} \right) + V(z) \xi_i(z) = E_i \xi_i(z) \quad (\text{éq I-4})$$

(Où les E_i désignent les énergies des minimums de sousbandes)

Pour déterminer les niveaux d'énergie dans le puits et les fonctions d'ondes associées à chaque niveau, il faut résoudre l'équation de Schrödinger (éq I-4) ; mais aussi, comme le potentiel dépend de la densité volumique de charge ρ , l'équation de Poisson (éq I-5) :

$$\frac{\partial^2 V(z)}{\partial z^2} = \frac{-\rho(z)}{\epsilon_0 \epsilon_r} \quad (\text{éq I-5})$$

les équations (I-4) et (I-5) sont donc couplées.

Pour une hétérostructure réelle, il n'existe pas de solutions analytiques à ces équations. Chaque fois que nous étudierons une structure réelle nous aurons donc recours à une procédure numérique qui résoud de façon autocohérente les équations de Schrödinger et Poisson.

I.2.1.2 Description de la procédure numérique

Le code de calcul que nous employons est dérivé de celui élaboré par Cappy [11] et Alamkan [12]. La méthode consiste à résoudre dans la direction perpendiculaire à l'interface les équations de Schrödinger et Poisson. La méthode est déduite de celle proposée par Stern pour les couches d'inversion des M.O.S. [13] [14], elle utilise la technique des différences finies. La procédure est la suivante :

- La position du niveau de Fermi étant prise comme valeur de référence, le potentiel initial $V_0(z)$ est déterminé à partir de la statistique de Fermi-Dirac.

- La résolution de l'équation de Schrödinger permet d'obtenir les niveaux d'énergie des n sousbandes considérées, ainsi que les fonctions d'onde qui leur sont associées.

- Les niveaux d'énergie et les fonctions d'ondes étant connus, il est alors possible de déduire la position du niveau de Fermi et la répartition électronique surfacique n_{2D} dans la structure.

- La résolution de l'équation de Poisson fournit alors une nouvelle valeur du potentiel $V_1(z)$ qui sera utilisée lors de l'itération suivante après utilisation d'un facteur de convergence.

- Tant que la valeur du niveau de Fermi ne satisfait pas le critère de convergence préalablement choisi, une nouvelle itération est effectuée.

Nous avons utilisé ce code de calcul pour déterminer les fonctions d'ondes, les densités surfaciques et les niveaux d'énergie de la structure présentée sur la figure I-9. Les résultats en considérant 3 sousbandes sont présentés sur les figures I-10 a) , I-10 b), I-10 c).

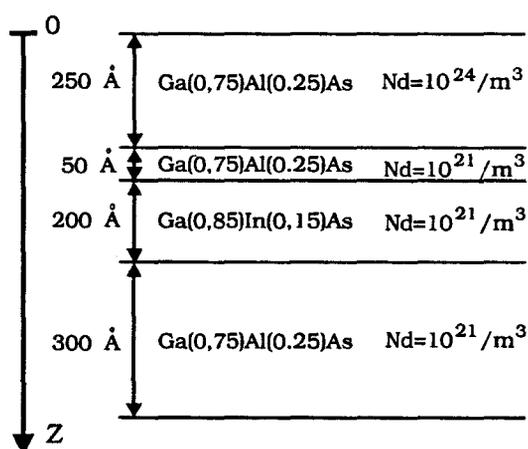
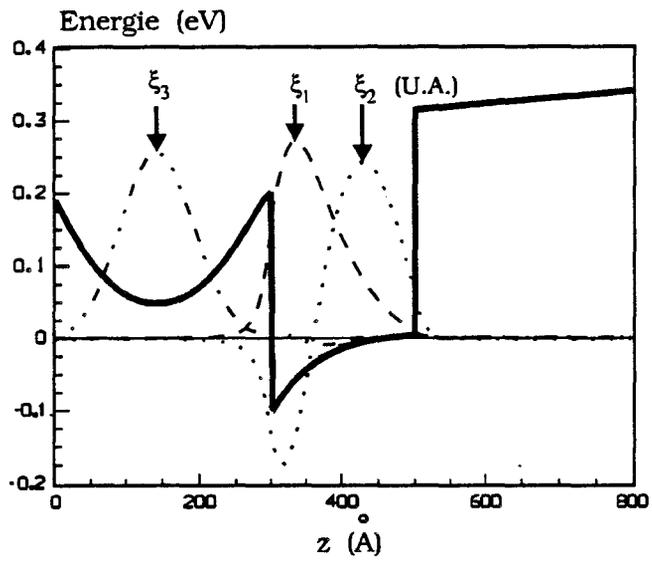
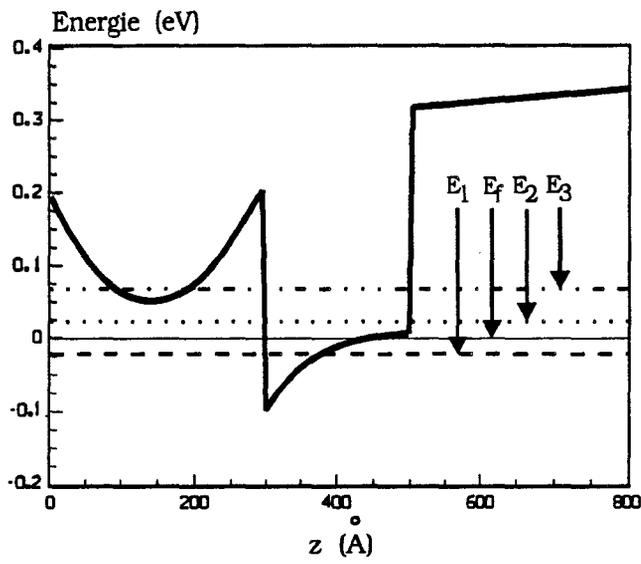


Figure I-9

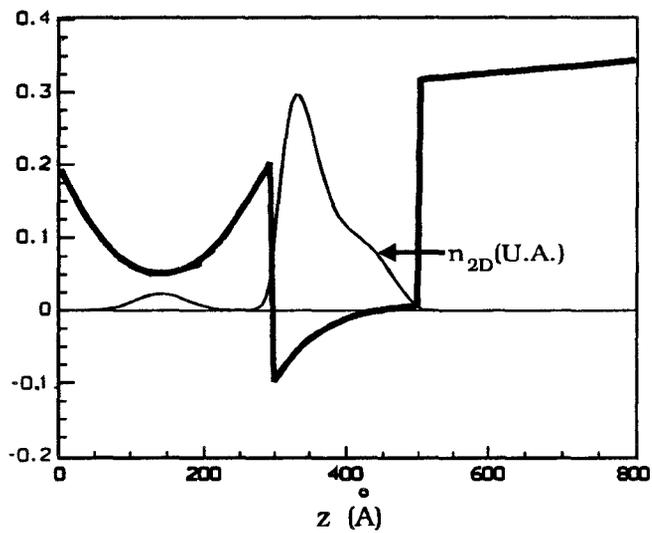
Structure utilisée pour illustrer la procédure numérique de résolution des équations de Schrödinger et Poisson



a)



b)



c)

Figure I-10

Exemples de résultats obtenus par résolution autocohérente des équations de Schrödinger et Poisson (cas de la structure de la figure I-9)

I.2.1.3 Approximation par un modèle analytique

La connaissance des états électroniques est indispensable pour calculer les différentes grandeurs caractéristiques du transport électronique. Par exemple le calcul des probabilités d'interactions et des temps de relaxation du moment dépend directement des fonctions d'ondes. Pour pouvoir conserver un certain caractère analytique dans des calculs de ce type, il est nécessaire d'approximer les fonctions d'ondes par des fonctions mathématiques simples.

Pour représenter de façon simplifiée la bande de conduction dans une couche d'accumulation d'une hétérojonction GaAlAs/GaAs, l'approximation du puits triangulaire infini est souvent utilisée [15]. Le puits de potentiel est formé par une barrière de potentiel infinie en $z=0$ (position de l'hétérojonction) et le champ F_z est supposé constant pour $z>0$. Dans le cas des hétérostructures pseudomorphiques, la présence d'une double hétérojonction nous conduit à considérer l'approximation du puits carré comme mieux adaptée. Nous supposons également que le puits carré est infini ce qui accroît la simplicité (Fig. I-11).

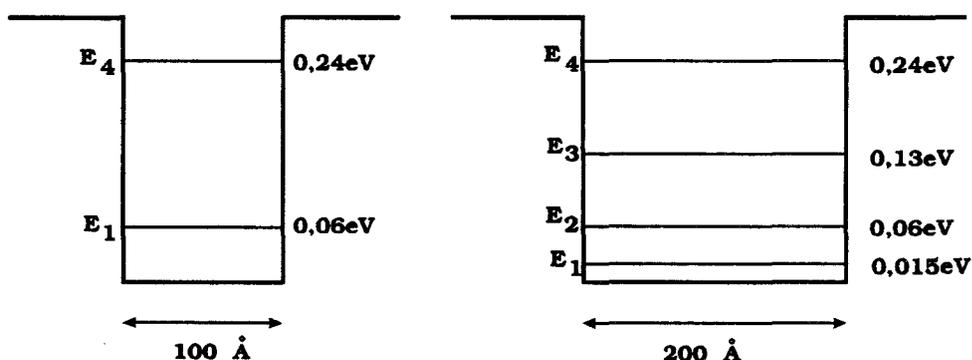


Figure I-11

Niveaux d'énergie dans un puits carré infini de GaAs

Approximation du puits carré infini

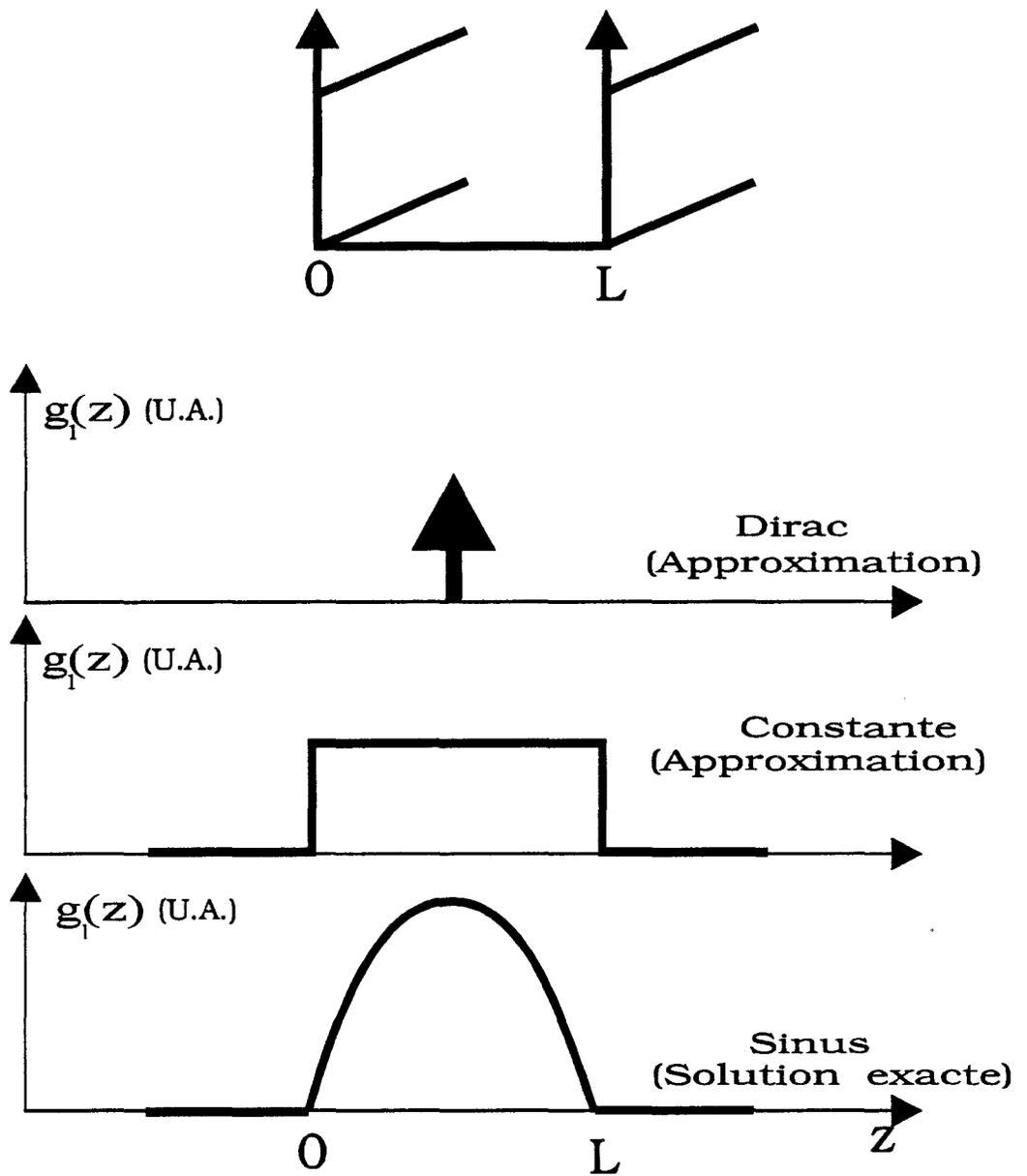
Les fonctions d'ondes d'un puits carré infini sont sinusoïdales [FOS] (éq I-6). Et les niveaux d'énergies sont donnés par l'équation I-7 .

$$\left\{ \begin{array}{l} \xi_i(z) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(i \frac{\pi}{L} z\right) \quad 0 \leq z \leq L \\ \xi_i(z) = 0 \quad z < 0, z > L \end{array} \right. \quad (\text{éq I-6})$$

$$E_i = i^2 \frac{\hbar^2}{2m_z^*} \left(\frac{\pi}{L}\right)^2 \quad (\text{éq I-7})$$

où i est l'indice de sousbande et L la largeur du puits

Puits carré infini



Figures I-12

Modélisation des fonctions d'onde dans un puits carré infini

Chapitre I

La figure I-11 illustre l'importance du confinement sur les niveaux d'énergie dans le puits. Plus le puits est mince, plus l'écart entre deux niveaux consécutifs est important.

Dans le calcul des probabilités de transition et des temps de relaxation intrasousbandes, la quantité mathématique qui intervient est la probabilité de présence par sousbande $g_1(z) = |\xi_1(z)|^2$. Si l'on suppose qu'une seule sousbande est peuplée (ce qui est d'autant plus probable que la température est basse et que L et n_{2D} sont faibles) on utilisera :

$$\begin{cases} g_1(z) = \frac{2}{L} \sin^2\left(\frac{\pi z}{L}\right) & 0 \leq z \leq L \\ g_1(z) = 0 & z < 0, z > L \end{cases} \quad (\text{éq I-8})$$

Approximations de la fonction d'onde

Il peut être intéressant, dans le but de simplifier davantage les calculs, d'utiliser des fonctions $g_1(z)$ approximées par une constante [FOC] ou fonction de Dirac [FOD].

Dans le cas de la fonction constante :

$$\begin{cases} g_1(z) = \frac{1}{L} & 0 \leq z \leq L \\ g_1(z) = 0 & z < 0, z > L \end{cases} \quad (\text{éq I-9})$$

Dans le cas de la fonction de Dirac :

$$g_1(z) = \delta\left(z - \frac{L}{2}\right) \quad (\text{éq I-10})$$

Les probabilités de présence $g_1(z)$ correspondant à ces différentes approximations sont représentées schématiquement sur la figure I-12.

I.2.2 Gaz d'électrons unidimensionnels

Dans le paragraphe I.1, nous avons décrit sommairement comment il était technologiquement possible de réaliser des fils quantiques. Ce paragraphe est dédié aux états électroniques dans de tels systèmes, ils sont quantifiés dans deux directions. En conséquence le mouvement des électrons n'est possible que dans une seule direction et l'angle de déviation du vecteur d'onde lors d'une interaction ne peut prendre que deux valeurs 0° et 180° (Fig. I-13).

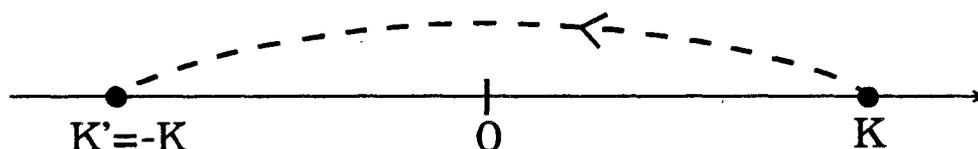


Figure I-13

Effet d'une interaction dans un gaz 1D

I.2.2.1 Formalisme général

La démarche est similaire à celle exposée dans le cas des puits quantiques. Dans l'approximation de la masse effective, nous écrivons la fonction d'onde électronique $\psi(x, y, z)$ comme le produit d'une onde plane $\varphi(x)$ et d'une fonction $\xi(y, z)$. En appliquant la méthode décrite dans I.2.1.1, on aboutit au système d'équations couplées :

$$-\frac{\hbar^2}{2} \left[\frac{\partial}{\partial y} \frac{1}{m_y^*} \frac{\partial \xi_{ij}(y, z)}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{m_z^*} \frac{\partial \xi_{ij}(y, z)}{\partial z} \right] + V(y, z) \xi_{ij}(y, z) = E_{ij} \xi_{ij}(y, z) \quad (\text{éq I-11})$$

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) V(y, z) = -\frac{\rho(y, z)}{\epsilon_0 \epsilon_r} \quad (\text{éq I-12})$$

L'énergie d'un électron de la sousbande d'indices i-j s'écrit alors :

$$E = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_x^*} + E_{ij} \quad (\text{éq I-13})$$

La résolution bidimensionnelle des équations de Schrödinger et de Poisson couplées est un problème délicat. Les méthodes numériques sont plus difficiles à mettre en oeuvre et semblent numériquement moins stables que dans le cas d'une résolution unidimensionnelle. Les publications à ce sujet [16] [17] sont peu nombreuses. Nous serons donc amenés à utiliser des approximations analytiques dans nos calculs ultérieurs.

I.2.2.2 Approximations analytiques

L'approximation qui apparaît naturellement est celle du fil de section carrée et de hauteur de barrière infinie. Dans un tel puits les fonctions d'ondes sont sinusoïdales.

$$\left\{ \begin{array}{l} \xi_{ij}(y, z) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{\pi i}{L_y} y\right) \left(\frac{\pi j}{L_z} z\right) \\ \xi_{ij}(y, z) = 0 \end{array} \right. \left\{ \begin{array}{l} 0 \leq y \leq L_y \\ 0 \leq z \leq L_z \\ y < 0, y > L_y \\ z < 0, z > L_z \end{array} \right. \quad (\text{éq I-14})$$

Cette approximation présente néanmoins l'inconvénient majeur de dépendre de deux variables y et z . En utilisant les coordonnées polaires (r, θ) et en supposant une symétrie cylindrique, on simplifie le problème car la fonction enveloppe ne dépend que de r : $\xi_{ij}(r)$.

Nous utiliserons donc les fonctions d'ondes d'un fil cylindrique de hauteur de barrière infinie :

$$\left\{ \begin{array}{l} \xi_{ij}(r) = \frac{J_{i-1}(\alpha_{i-1j}r)}{\sqrt{\pi R^2 J_i(\alpha_{i-1j}R)}} \\ \xi_{ij}(r) = 0 \end{array} \right. \left\{ \begin{array}{l} r \leq R \\ r > R \end{array} \right. \quad (\text{éq I-15})$$

J_i est la fonction de Bessel de première espèce et d'ordre i
 α_{ij} est tel que $\alpha_{ij}R$ soit le i ème zéro de la fonction de Bessel J_i

Nous supposons dans le chapitre II que seule la première sousbande 1-1 est peuplée. La quantité intervenant dans l'expression du temps de relaxation est la probabilité de présence $g_{11}(r) = |\xi_{11}(r)|^2$. Pour un cylindre infini, La solution exacte est :

$$\left\{ \begin{array}{l} g_{11}(r) = \frac{1}{\pi R^2} \frac{J_0^2(\alpha_{01}r)}{J_1^2(\alpha_{01}R)} \\ g_{11}(r) = 0 \end{array} \right. \left\{ \begin{array}{l} r \leq R \\ r > R \end{array} \right. \quad (\text{éq I-16})$$

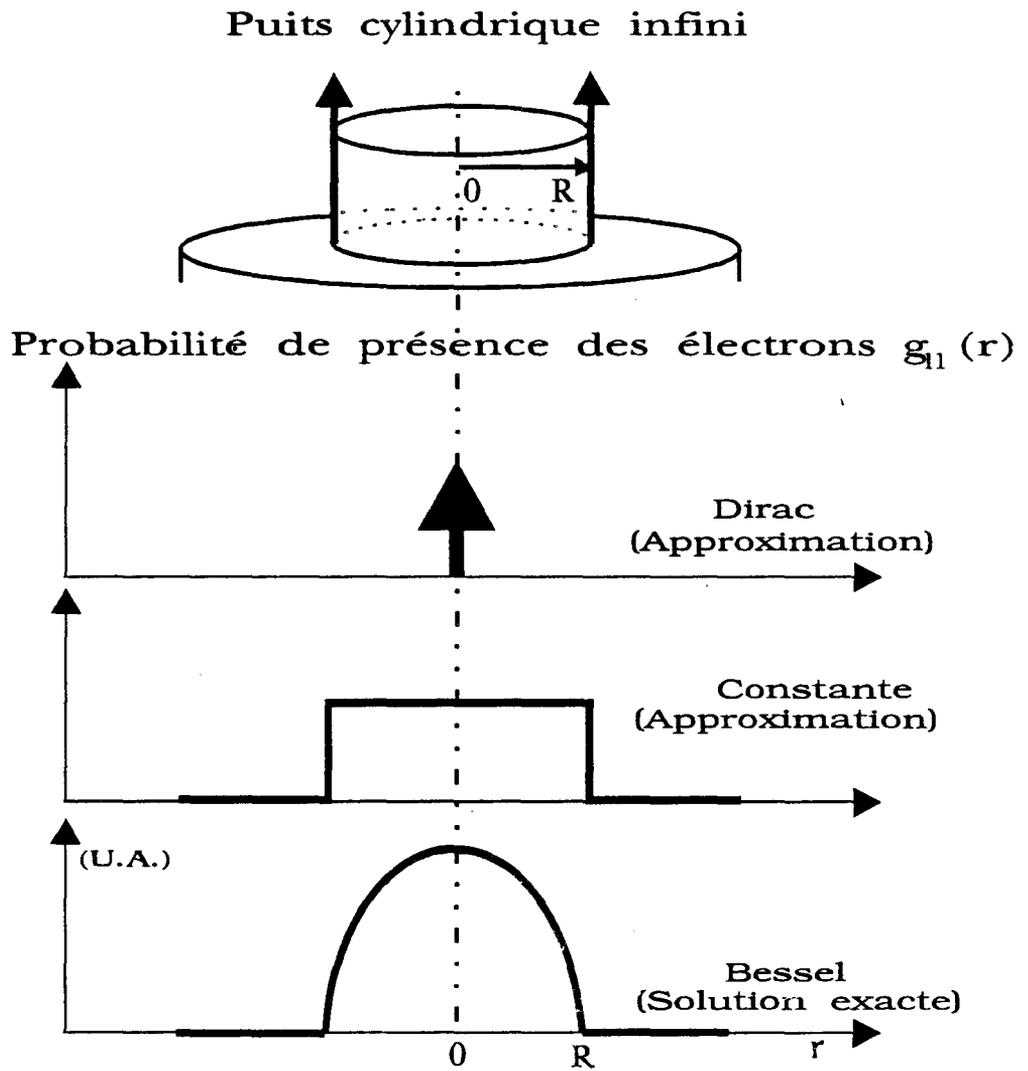


Figure I-14

Modèles de fonctions d'ondes dans un fil cylindrique infini

Chapitre I

Pour simplifier davantage les calculs, on aura parfois intérêt à supposer que la probabilité de présence est constante dans le puits ou représentée par un pic de Dirac (Fig. I-14). Selon le cas, on aura alors.

Approximation constante :

$$\left\{ \begin{array}{ll} g_{11}(r) = \frac{1}{\pi R^2} & r \leq R \\ g_{11}(r) = 0 & r > R \end{array} \right. \quad (\text{éq I-17})$$

Approximation du Dirac :

$$g_{11}(r) = \frac{\delta(r)}{r} \quad (\text{éq I-18})$$

I.2.3 Effets de la réduction de dimension du système

Nous venons de montrer que la quantification des états électroniques dans une ou deux directions avait comme conséquence directe de réduire le nombre de degrés de liberté du mouvement. Lors de l'étude de gaz bidimensionnels et unidimensionnels, il faut donc considérer les densités d'états correspondantes. La densité d'états dans l'espace réciproque N_k s'écrit en tenant compte de la dégénérescence de spin :

$$N_k = \frac{2}{(2\pi)^d} \quad (\text{éq I-19})$$

d : dimensionnalité

La densité d'état dans l'espace des énergies D_E est obtenue en explicitant k en fonction de E à partir des relations de dispersion. Dans le cas d'une relation de dispersion parabolique, on obtient les expressions de la densité d'état ci-après, elles dépendent de la dimension (tableau I-2).

Dimension	1	2	3
D_E	$\frac{1}{\pi^2} \left(\frac{2m^*}{\hbar^2} \right)^{1/2} (E - E_0)^{-1/2}$	$\frac{m^*}{\pi\hbar^2}$	$\frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m^*}{\hbar^2} \right)^{3/2} (E - E_0)^{1/2}$

E_0 : Energie de fond de bande ou de sousbande

Tableau I-2

Expressions des densités d'état selon la dimensionnalité (pour $E > E_0$)

La densité d'état est donc constante en 2D (Fig. I-15b) et présente une singularité en 1D (Fig. I-15c)

Le nombre d'électrons à l'équilibre thermodynamique dépend aussi de la dimension.

$$n = \int D_E(E) f_{FD}(E) dE \quad (\text{éq I-20})$$

Où f_{FD} est la fonction de distribution de Fermi Dirac.

$$f_{FD}(E) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - E_F}{kT}\right)} \quad (\text{éq I-21})$$

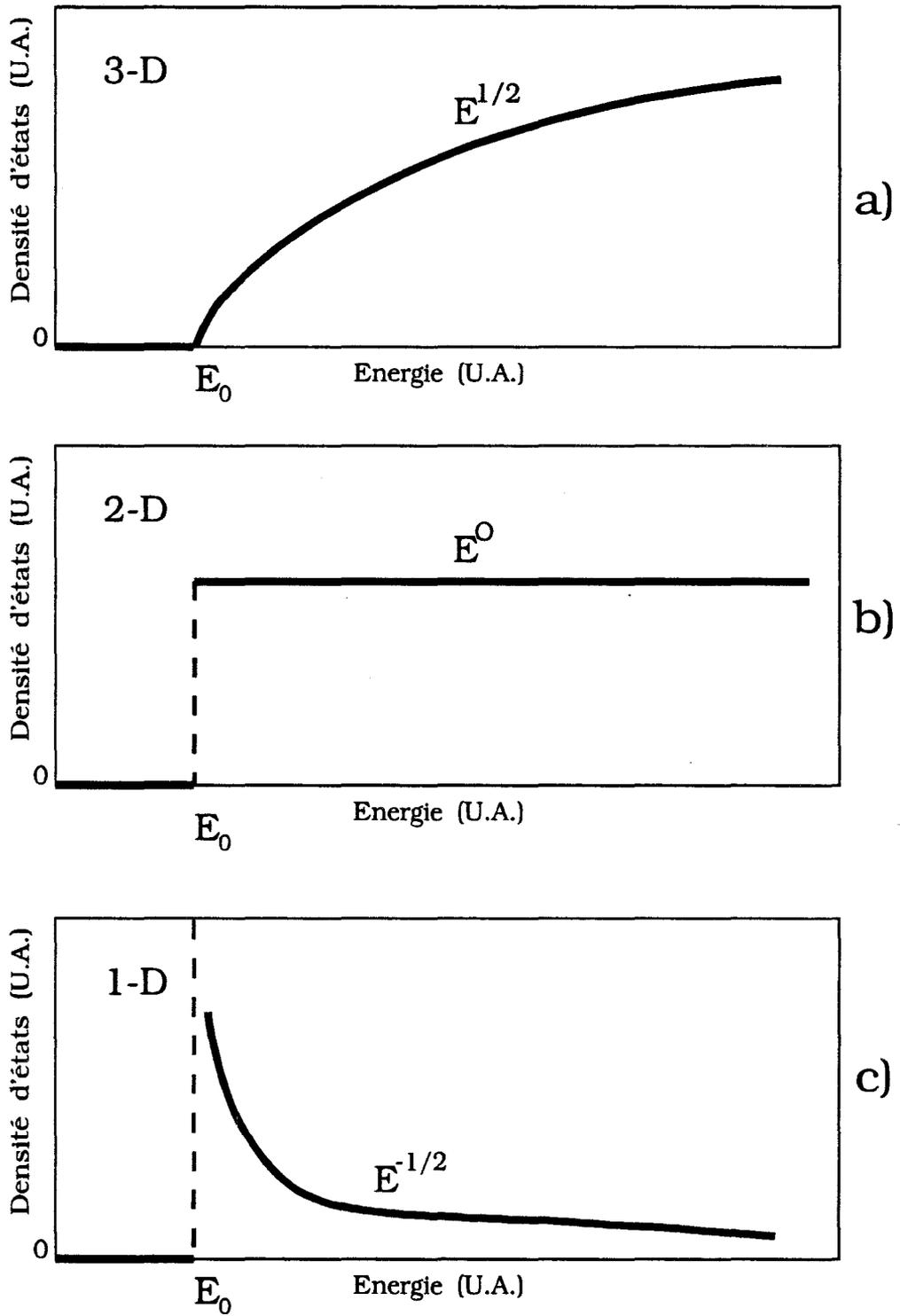


Figure I-15
Densités d'état en 3D 2D 1D

Chapitre I

Pour un système tridimensionnel, la densité volumique n_{3D} d'électrons est :

$$n_{3D} = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m^*kT}{\hbar^2} \right)^{3/2} F_{1/2}(\eta) \quad \text{avec} \quad \eta = \frac{E_F - E_c}{kT} \quad (\text{éq I-22})$$

E_c : énergie du fond de bande de conduction.

F_n désigne l'intégrale de Fermi d'ordre n , Les définitions et quelques propriétés des intégrales de Fermi sont présentés en annexe I.

Dans le cas d'un système bidimensionnel, la densité surfacique n_{2D} d'électrons est la somme des densités surfaciques d'électrons dans chaque sousbande.

$$n_{2D} = \sum_i n_{2D}^i \quad (\text{éq I-23})$$

$$n_{2D}^i = \frac{m_i^*kT}{\pi\hbar^2} F_0(\eta_i) \quad \text{avec} \quad \eta_i = \frac{E_F - E_i}{kT} \quad \text{et} \quad \frac{\hbar^2 k_{xy}^2}{2m_i^*} = E \quad (\text{éq I-24})$$

Des relations du même type sont obtenues pour la densité linéique n_{1D} dans un système unidimensionnel.

$$n_{1D} = \sum_{ij} n_{1D}^{ij} \quad (\text{éq I-25})$$

$$n_{1D}^{ij} = \frac{1}{\pi} \left(\frac{2m_{ij}^*kT}{\hbar^2} \right)^{1/2} F_{-1/2}(\eta_{ij}) \quad \text{avec} \quad \eta_{ij} = \frac{E_F - E_{ij}}{kT} \quad \text{et} \quad \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_{ij}^*} = E \quad (\text{éq I-26})$$

La relation entre le vecteur d'onde de Fermi k_F et la densité électronique qui joue entre autre un rôle important dans l'étude du phénomène d'écrantage, dépend également de la dimension. En utilisant un relation de dispersion parabolique, on obtient à $T=0K$ (c.a.d. lorsque la fonction de distribution de Fermi-Dirac se réduit à une fonction échelon) les expressions données dans le tableau I-3. Pour $T \neq 0K$ ces relations simples ne sont plus valables et la détermination de k_F nécessite la résolution numérique des équations I-22, I-23, I-25.

Dimension	1	2	3
k_F	$k_F = \frac{\pi n_{1D}}{2}$	$k_F = (2\pi n_{2D})^{1/2}$	$k_F = (3\pi n_{3D})^{1/3}$

Tableau I-3

Expression des vecteurs d'onde de Fermi selon la dimensionnalité

I.3 TRANSPORT ELECTRONIQUE

I.3.1 Equations de transport

L'étude du transport de charge dans un semiconducteur revêt une importance capitale, à la fois sur le plan de la physique de base et du point de vue de son application aux composants électroniques. Le comportement d'un porteur dans un semiconducteur est complexe et peut engendrer des phénomènes de nature variée (ionisation par choc, émission d'un photon, par exemple) qui conduisent à de multiples applications. Dans cette partie nous chercherons à comprendre la réponse d'un électron à un champ électrique constant \vec{F} en déterminant certaines grandeurs caractérisant le transport : vitesse, mobilité, énergie.

L'étude rigoureuse du transport électronique en présence d'un champ électrique requiert la résolution d'équations de transport qui prennent en compte le caractère quantique des phénomènes mis en jeu dans un système ouvert loin de l'équilibre. Plusieurs auteurs [18] ont proposé des équations de transport quantiques adaptées à ce problème. La résolution de ces équations est très difficile à mettre en oeuvre et nécessite des moyens de calculs énormes.

Dans beaucoup d'études concernant les propriétés de transport dans un semiconducteur, c'est une équation "classique" que Boltzmann a introduit initialement dans sa théorie microscopique des gaz qui est utilisée. C'est cette approche que nous avons adoptée. Nous supposons donc que pour décrire le comportement d'un électron dans un semiconducteur, il suffit de connaître la fonction de distribution électronique $f(\vec{r}, \vec{k}, t)$. Cette grandeur physique obéit à une équation d'évolution connue sous le nom d'équation de transport de Boltzmann.

$$\frac{df(\vec{r}, \vec{k}, t)}{dt} = -\vec{\nabla}_{\vec{r}} f \cdot \vec{v} - \frac{1}{\hbar} \vec{\nabla}_{\vec{k}} f \cdot \vec{F} + \left[\frac{\partial f}{\partial t} \right]_{\text{collisions}} \quad (\text{éq I-27})$$

Le troisième terme du membre de droite de cette équation est très complexe ; il traduit les variations de la fonction de distribution dues aux différentes interactions. D'un point de vue mathématique ce second terme dépend d'intégrales de collisions, cette équation est donc de type intégral-différentielle.

L'équation de transport de Boltzmann de par sa nature "classique" souffre de plusieurs limitations concernant son application à l'étude du transport électronique en raison du caractère quantique de l'électron. A titre d'exemple, le principe d'incertitude d'Heisenberg qui stipule que la position et le vecteur d'onde d'un électron ne peuvent être connus au même instant t est incompatible avec le formalisme de Boltzmann.

Dans la mesure où les conditions de transport quantique ne sont pas atteintes dans nombre de problèmes, l'équation de transport de Boltzmann est souvent utilisée pour étudier le transport dans un semiconducteur. L'adéquation de cette méthode à retrouver de nombreux résultats expérimentaux contribue à l'utiliser largement.

I.3.2 Phénomène d'écrantage

Lorsque l'on souhaite étudier les phénomènes de transport dans un gaz d'électrons soumis à un potentiel de collision, il ne suffit pas de calculer la probabilité d'interaction d'un électron isolé avec ce potentiel de collision et de simuler le transport. En effet, si l'on procède de la sorte, on néglige l'influence du potentiel de collision sur la distribution des électrons. Pour s'en convaincre, il suffit de considérer un gaz d'électrons à l'équilibre mis en présence d'un potentiel perturbateur. Pour retrouver son équilibre, il est nécessaire que le gaz d'électrons se réarrange spatialement, entraînant ainsi une augmentation du nombre d'électrons aux endroits où l'énergie potentielle est la plus faible et une diminution du nombre d'électrons, là où l'énergie potentielle est la plus forte. Cette modification de la distribution électronique est d'autant plus importante que la concentration en électrons est élevée ; elle a pour effet de modifier l'expression du potentiel perturbateur intervenant dans le calcul des probabilités de transitions. On dit que le potentiel de collision est "écranté" par le gaz d'électrons.

Initialement le phénomène d'écrantage a été étudié dans les plasmas, son introduction en physique du solide date du début des années 50 [19] [20]. Au cours des années 50 de nombreux travaux théoriques ont été réalisés, ils sont les bases des études actuelles et passées du phénomène d'écrantage dans les semiconducteurs. Nous résumons ci-après, les principaux résultats de ces études nécessaires à la compréhension de la suite de l'exposé.

La fonction diélectrique de Lindhard [21] permet le calcul du potentiel écranté à partir du potentiel non écranté compte tenu des caractéristiques électroniques du système considéré. On considère un gaz d'électron caractérisé par sa densité $n_n(r,t)$ soumis au potentiel $V_n(r,t)$ appelé potentiel nu ou non écranté. Le phénomène d'écrantage induit des variations de ces quantités de $n_i(r,t)$ et $V_i(r,t)$ de sorte que l'on doit considérer les valeurs $n_e(r,t)$ et $V_e(r,t)$ qui prennent en compte ce phénomène. On a :

$$n_e(r,t) = n_n(r,t) + n_i(r,t) \quad (\text{éq I-28})$$

$$V_e(r,t) = V_n(r,t) + V_i(r,t) \quad (\text{éq I-29})$$

Les vecteurs déplacement $D(r,t)$, polarisation $P(r,t)$ et champ électrique $F(r,t)$ dérivent respectivement des potentiels $V_n(r,t), V_i(r,t), V_e(r,t)$.

Chapitre I

Les fonctions diélectriques $\varepsilon(q, \omega)$ et de polarisabilité $\kappa(q, \omega)^*$ sont définies à partir des composantes de Fourier : $D(q, \omega), P(q, \omega), F(q, \omega)$ par la relation suivante :

$$D(q, \omega) = \varepsilon_0 \varepsilon_r F(q, \omega) + P(q, \omega) = \varepsilon_0 \varepsilon_r \varepsilon(q, \omega) F(q, \omega) \quad (\text{éq I-30})$$

ce qui conduit à :

$$\begin{aligned} \varepsilon(q, \omega) &= \frac{D(q, \omega)}{F(q, \omega)} & a) \\ \kappa(q, \omega) &= \frac{P(q, \omega)}{F(q, \omega)} & b) \\ \varepsilon(q, \omega) &= 1 + \frac{\kappa(q, \omega)}{\varepsilon_0 \varepsilon_r} & c) \end{aligned} \quad (\text{éq I-31})$$

En fonction du potentiel, on a :

$$\varepsilon(q, \omega) = \frac{V_n(q, \omega)}{V_e(q, \omega)} = \frac{V_n(q, \omega)}{V_i(q, \omega) + V_n(q, \omega)} \quad (\text{éq I-32})$$

Pour obtenir cette relation, on a supposé que la réponse $V_i(r, t)$ était une fonction linéaire du potentiel nu $V_n(r, t)$; ceci est justifié quand le potentiel nu est suffisamment faible. Cette situation est celle de la théorie de l'écrantage linéaire. Certains auteurs [22][23] ont développé des approches non linéaires du phénomène d'écrantage. Dans ces conditions, la mise en oeuvre est plus complexe. Nous bornerons l'étude de ce phénomène à une approche linéaire.

$P(q, \omega)$ est relié à $n_i(q, \omega)$ par la transformée de Fourier de l'équation de Poisson et $F(q, \omega)$ dérive du potentiel $V_e(q, \omega)$. L'équation I-31 c) donne les expressions suivantes.

$$\begin{aligned} \varepsilon(q, \omega) &= 1 - \frac{e^2}{\varepsilon_0 \varepsilon_r q^2} \frac{n_i(q)}{V_e(q, \omega)} & a) \\ \kappa(q, \omega) &= - \frac{e^2}{q^2} \frac{n_i(q)}{V_e(q, \omega)} & b) \end{aligned} \quad (\text{éq I-33})$$

Le potentiel pouvant se décomposer en série de Fourier, on envisage pour $V_n(r, t)$ une dépendance du type $\exp(i\omega t) \cdot \exp(i\alpha t)$ ($\alpha \rightarrow 0^+$ correspond à une perturbation adiabatique).

* Dans le chapitre II, nous utiliserons la quantité $\Pi(q, \omega) = \kappa(q, \omega) q^2$ que nous appellerons terme de polarisabilité.

Chapitre I

En supposant une même dépendance temporelle pour $V_e(r, t)$ Lindhard a montré par un calcul de perturbation du premier ordre que :

$$n_i(q, \omega) = \lim_{\alpha \rightarrow 0^+} \sum_k \frac{f(E_{k+q}) - f(E_k)}{E_{k+q} - E_k - \hbar\omega + i\hbar\alpha} \left(\int \psi_k^* e^{iqr} \psi_{k+q} d^3r \right)^2 \quad (\text{éq I-34})$$

$$\Pi_L(q, \omega) = \frac{-e^2}{q^2} \lim_{\alpha \rightarrow 0^+} \sum_k \frac{f(E_{k+q}) - f(E_k)}{E_{k+q} - E_k - \hbar\omega + i\hbar\alpha} \left(\int \psi_k^* e^{iqr} \psi_{k+q} d^3r \right)^2 \quad (\text{éq I-35})$$

On pourra trouver les démonstrations rigoureuses de cette équation dans plusieurs articles [24][25][26]. Différentes méthodes permettent d'arriver à ce résultat (approximation de la phase aléatoire, approximation du champ self consistant, approximation de Hartree et Fock dépendant du temps). La fonction diélectrique $\varepsilon(q, \omega)$ dépend de la fréquence et du vecteur d'onde, elle permet de déterminer nombre de propriétés physiques des solides. Par exemple $\varepsilon(q, \omega)$ permet de déterminer le spectre de plasmons et $\varepsilon(q, 0)$ l'écrantage électrostatique.

Calcul de la fonction diélectrique.

De manière générale, la détermination de la fonction diélectrique est un problème très ardu. Dans le cas d'une perturbation statique ($\omega = 0$), le terme $i\hbar\alpha$ étant négligeable devant la différence $E_{k+q} - E_k$ la fonction diélectrique statique est toujours réelle.

Deux hypothèses couramment utilisées sont à l'origine de simplifications du calcul.

Cas de l'électron libre dans un cristal.

Dans ce cas, les fonctions d'ondes électroniques sont des ondes planes et le terme intégral vaut 1.

$$\int \psi_k^* e^{iqr} \psi_{k+q} d^3r = 1 \quad (\text{éq I-36})$$

Cas d'une faible perturbation (q petit).

$$\begin{aligned} f(k+q) - f(k) &= \bar{q} \cdot \bar{\nabla}_k E(k) \frac{\partial f}{\partial E} & a) \\ E(k+q) - E(k) &= \bar{q} \cdot \bar{\nabla}_k E(k) & b) \end{aligned} \quad (\text{éq I-37})$$

$$\frac{f(k+q) - f(k)}{E(k+q) - E(k)} = \frac{\partial f}{\partial E} \quad (\text{éq I-38})$$

$$\sum_k \frac{\partial}{\partial E} = \int_0^{+\infty} n(E) \frac{\partial}{\partial E} dE \quad (\text{éq I-39})$$

Maldague [27] a montré que l'on pouvait déterminer la polarisabilité d'un gaz à l'équilibre à une température T à partir de la polarisabilité à T=0K.

$$\Pi_L(T, q, \omega) = \int_0^{+\infty} \frac{\Pi_L(T=0, q, \omega)}{4kTch^2 \left(\frac{E - E_F}{2kT} \right)} dE \quad (\text{éq I-40})$$

I.3.3 Mécanismes et probabilités d'interactions

I.3.3.1 Nature des mécanismes d'interactions

Pour espérer décrire correctement le transport électronique à l'échelle microscopique, il faut dans un premier temps, recenser les différentes interactions que peut subir l'électron (Fig. I-16) et dans un second temps, déterminer les effets de ces interactions sur les paramètres de transport. Il est commode pour présenter les principaux mécanismes d'interaction de les classer en trois catégories.

- Les interactions avec le réseau.
- Les interactions avec les électrons.
- Les interactions avec les imperfections du cristal.

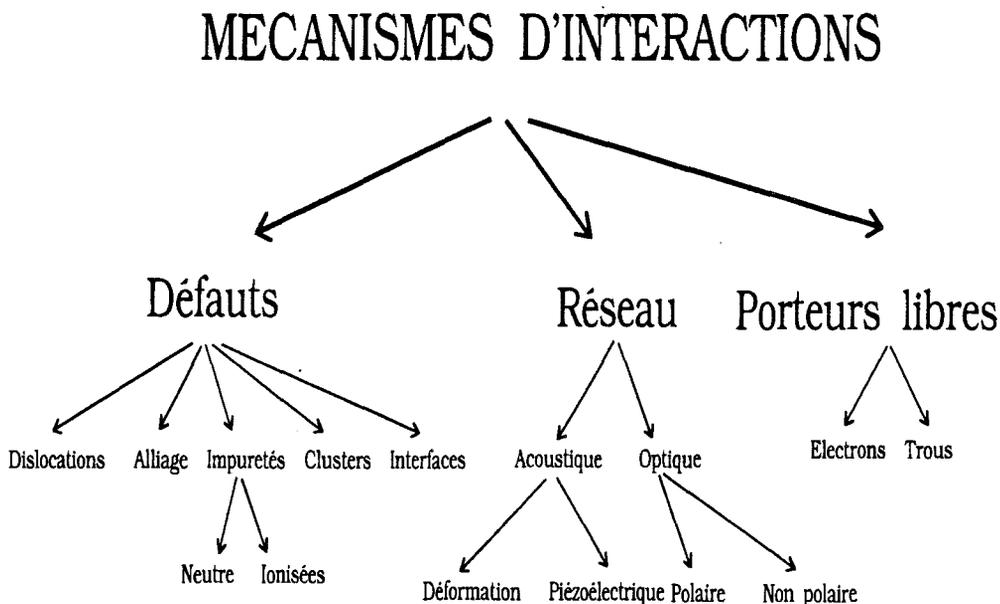


Figure I-16

Différents mécanismes d'interaction

Chapitre I

I.3.3.1.1. Interactions avec le réseau

Les atomes d'un cristal oscillent autour de leur position d'équilibre. Ce phénomène engendre un certain nombre de modes vibratoires dans le cristal, caractérisés par leur pulsation ω . A ces modes vibratoires sont associés des particules nommées phonons qui obéissent à la statistique de Bose-Einstein. Les phonons interagissent avec les électrons et obéissent aux principes de conservation de l'énergie et du moment. Pour les semiconducteurs III-V, les phonons sont les suivants :

Modes optiques

Les modes de vibrations correspondant à des atomes vibrant en opposition de phase sont associés à des phonons optiques.

Phonons optiques polaires.

Si les deux atomes voisins sont d'une nature ionique opposée, il apparaît un moment dipolaire qui varie dans le temps et l'espace, du fait des vibrations atomiques. Il en résulte une perturbation de potentiel qui interagit avec les électrons. Ce mécanisme est appelé interaction optique polaire, il est dominant à température ambiante.

Phonons optiques non-polaires.

Indépendamment de l'ionicté des atomes, les phonons optiques déforment le potentiel cristallin. Ces perturbations dépendent fortement des directions cristallographiques. C'est dans la direction cristallographique [111] pour laquelle deux atomes voisins sont identiques correspondant à la vallée L que cette interaction optique non polaire est la plus importante.

Modes Acoustiques

Aux modes de vibrations correspondant à des atomes voisins vibrant en phase sont associés les phonons acoustiques.

Phonons acoustique de déformation

Les phonons acoustiques déforment le potentiel cristallin, ce qui engendre l'interaction acoustique de déformation.

Phonons acoustique piézoélectrique

Le mode de vibration acoustique dans un cristal ayant un certain caractère ionique produit un effet piézoélectrique. Le potentiel de perturbation qui en résulte est responsable de l'interaction "piézoélectrique" qui affecte le semiconducteur essentiellement à très basse température.

Interaction intravallées et intervallées

Toutes les interactions avec les phonons que nous venons d'évoquer peuvent être intravallées et intervallées dans la mesure où les conditions de conservation sont vérifiées. L'interaction intravallée correspond à des phonons de faibles longueurs d'onde (le vecteur d'onde après interaction est toujours dans la zone de Brillouin). Quand le vecteur d'onde du phonon est suffisamment grand, le vecteur d'onde change facilement de direction cristallographique et l'électron peut ainsi se déplacer vers une autre vallée (équivalente ou non équivalente). L'interaction intervallée n'est importante pour GaAs qu'aux champs élevés.

1.3.3.1.2. Interactions électron-électron

Lorsque la densité électronique est élevée, les potentiels coulombiens des électrons libres sont sources d'interactions électron-électron. Ce phénomène est très complexe car il dépend de la fonction de distribution des électrons.

1.3.3.1.3. Interactions avec les imperfections du réseau

Alliage

Dans les alliages ternaires, comme GaInAs par exemple, l'ordre du réseau cristallin est perturbé par des substitutions aléatoirement réparties d'atomes de Gallium et d'Indium. Ce qui se traduit par des variations locales du potentiel cristallin. L'interaction qui en résulte est appelée interaction d'alliage.

"Alloy clustering"

Lors de la phase de croissance, il peut également se former des agrégats composés des différents constituants de l'épitaxie (inhomogénéité de composition à une échelle supérieure à l'échelle atomique). La perturbation de potentiel qui en résulte est la cause d'une interaction connue sous le nom "d'alloy clustering".

Impuretés

Bien que les techniques de purification de matériaux ne cessent de progresser, il est toujours impossible d'obtenir un matériau parfaitement pur. Souvent, il est au contraire nécessaire d'introduire des impuretés pour accroître la densité de porteurs libres.

Impuretés neutres

A très basse température (4K) les atomes d'impuretés donneuses ne sont pas ionisés, elles sont donc à considérer, ainsi que les atomes d'impuretés résiduelles, comme des impuretés neutres. L'interaction avec les impuretés neutres n'a pas fait l'objet de beaucoup d'études.

Impuretés ionisées

Quand la température s'élève, le taux d'ionisation augmente et les atomes d'impuretés ionisées interagissent fortement avec les électrons par le biais du potentiel coulombien. Cette interaction est prédominante à basse température et diminue ensuite avec la température. L'interaction sur impuretés ionisées fera l'objet d'une étude détaillée dans le chapitre II.

Dislocations

Les dislocations qui peuvent apparaître lors de la croissance d'un cristal sont autant de perturbations du potentiel cristallin. Les dislocations sont généralement faiblement présentes, leur effet sur le transport est donc négligeable.

Phénomènes intervenant dans les hétérostructures :

Dans les hétérostructures, il existe des modes de vibrations de phonons localisés au voisinage de l'interface. Nous négligerons ce phénomène dans notre étude. Un autre phénomène connu sous le nom suivant : "interface roughness" (rugosité d'interface) a été mis en évidence expérimentalement [28][29][30] dans les hétérostructures. Ces phénomènes auraient pour origine la phase de croissance des couches actives. En particulier, la méthode de croissance (MBE) ou (MOCVD) pourrait avoir une influence sur la qualité des hétérostructures obtenues.

Interaction d'interface

La "rugosité d'interface" a fait l'objet de plusieurs études théoriques et expérimentales. Une étude expérimentale [31] a notamment mis en évidence ce phénomène en analysant des structures épitaxiées par MBE GaInAs/InP et GaAlAs/GaAs par la méthode de réflectivité aux faibles angles des rayons X mous. Les auteurs de cette publication ont montré l'existence d'une interface rugueuse entre deux couches d'une hétérostructure. Ils ont, par ailleurs, constaté que l'amplitude de ce phénomène était fortement influencée par la qualité de surface du substrat et les conditions de croissance (température, pression,...). Ils ont également constaté que la contrainte (pour les hétérostructures pseudomorphiques) et les dislocations dans la couche épitaxiée avaient une moindre influence sur la qualité de l'interface.

Une interface rugueuse s'accompagne donc d'une perturbation locale du potentiel cristallin qui peut contribuer à dégrader les propriétés de transport.

Chapitre I

I.3.3.2 Calcul des probabilités d'interaction

I.3.3.2.1 Méthode générale

Dans ce paragraphe nous rappelons les principales hypothèses et la méthode permettant le calcul des probabilités de collision d'un électron avec un potentiel perturbateur $V(r)$. Nous chercherons également à mettre en évidence les spécificités des systèmes 2D et 1D.

A partir des fonctions d'ondes électroniques $\psi(r)$ et du potentiel perturbateur on peut calculer l'élément de matrice de transition (éq I-41).

$$M(k, k') = \langle \psi_{k'}^*(r) | V(r) | \psi_k(r) \rangle = \int \psi_{k'}^*(r) V(r) \psi_k(r) dr \quad (\text{éq I-41})$$

On suppose que $V(r)$ est suffisamment faible pour que la fonction d'onde après interaction ait la même forme mathématique que celle avant interaction. Ceci constitue l'approximation de Born [32].

La théorie des perturbations dépendantes du temps permet de déterminer la densité de probabilité de collision $s(k, k')$. Si l'on ne retient que le premier terme du développement asymptotique et que l'on suppose que le temps entre deux collisions est grand devant la durée d'une collision, on aboutit à une relation connue sous le nom de règle d'or de Fermi.

$$s(k, k') = \frac{2\pi}{\hbar} |M(k, k')|^2 \delta(E_k - E_{k'}) \quad (\text{éq I-42})$$

Le terme $\delta(E_k - E_{k'})$ traduit la conservation de l'énergie et tient compte du caractère élastique ou non du mécanisme de collision mis en jeu.

Pour qu'il y ait transition de l'état k vers l'état k' il faut que ce dernier soit libre (principe d'exclusion de Pauli). La probabilité de collision est donné par :

$$\lambda(k) = \frac{1}{(2\pi)^d} \int s(k, k') (1 - f(k')) dk' \quad (\text{éq I-43})$$

Dans notre étude Monte-Carlo nous négligerons toujours le principe de Pauli lors du calcul des probabilités d'interactions ($f(k')=0$) puis nous utiliserons la relation de dispersion $E(k)$ pour obtenir $\lambda(E)$. Dans le chapitre III nous décrirons comment le principe de Pauli sera pris en compte.

I.3.3.2.2 *influence de la réduction de dimension*

La dimensionalité du système joue un rôle primordial sur la complexité des probabilités d'interactions. A. Kazinski [33] et J.L. Thobel [34] ont déterminé les probabilités d'interaction pour la plupart des phénomènes dans un matériau en volume en tenant compte de la non parabolicité, ils aboutissent à des expressions calculables analytiquement.

Pour les systèmes de dimension réduite, l'élément de matrice fait apparaître des intégrales de recouvrement.

$$I_{1D}^r = \int \xi_{ij}(y, z) \xi_{i'j'}(y', z') V(q_x, y, y', z, z') dy dy' dz dz' \quad a)$$

(éq I-44)

$$I_{2D}^r = \int \xi_i(z) \xi_{i'}(z') V(q_{xy}, z, z') dz dz' \quad b)$$

La présence des intégrales de recouvrement complique le calcul des probabilités et lui fait perdre son caractère analytique. On notera, d'autre part, que l'étape du calcul qui fait passer de $s(k, k')$ à $\lambda(E)$ nécessite deux intégrations en 3D, une en 2D et aucune en 1D.

I.3.4 **Approximation du temps de relaxation**

Il est fort difficile de trouver une solution générale à l'équation de transport de Boltzmann, cette tâche est cependant notablement allégée lorsqu'on introduit le temps de relaxation de chaque mécanisme de collision. Pour introduire cette quantité physique, il suffit de considérer un gaz d'électrons hors d'équilibre et de supposer que l'on supprime l'action du champ à $t=0$; la variation de la fonction de distribution est alors due au seul terme de collisions. Ce sont ces différentes collisions qui assurent le retour à l'état d'équilibre. Si l'on suppose que la perturbation appliquée au système est assez faible, on admet que la vitesse de retour à l'équilibre est proportionnelle à l'écart $f(r, k, t) - f_0(r, k, t=0)$. Le facteur de proportionnalité ayant la dimension de l'inverse d'un temps, on écrit :

$$\frac{\partial f}{\partial t} = - \frac{f(r, k, t) - f_0(r, k, t=0)}{\tau} \quad (\text{éq I-45})$$

τ est appelé temps de relaxation et indique à quelle vitesse se rétablit l'état d'équilibre.

On détermine le temps de relaxation du moment à partir de la densité de probabilité de collision. Si on note $\theta = (\bar{k}, \bar{k}')$, on montre que pour une interaction élastique indicée i on a :

$$\frac{1}{\tau_i(k)} = \frac{2}{(2\pi)^d} \int_{\text{espace } d} s_i(k, k') (1 - \cos \theta) dk' \quad (\text{éq I-46})$$

Chapitre I

$\tau_i(k)$ dépend de l'énergie des électrons par l'intermédiaire de la relation $E(k)$. Pour obtenir un temps de relaxation caractéristique de l'ensemble d'un gaz électronique, il faut pondérer $\tau_i(k)$ par l'importance relative des différents états énergétiques.

$$\bar{\tau}_i = \frac{\int \tau_i(E) E^{d/2} \frac{\partial f_{FD}(E)}{\partial E} dE}{\int E^{d/2} \frac{\partial f_{FD}(E)}{\partial E} dE} \quad (\text{éq I-47})$$

d : dimensionnalité

Pour un gaz dégénéré f_{FD} tendant vers une fonction échelon on a :

$$\bar{\tau}_i = \tau(E_F) \quad (\text{éq I-48})$$

Dans un semiconducteur, de nombreux mécanismes de collision affectent le transport. Il est important de connaître l'influence respective de chaque phénomène sur une grandeur caractérisant le transport. On peut associer un temps de relaxation $\bar{\tau}_i$ à chaque processus de collision i et obtenir un temps de relaxation $\bar{\tau}_t$ caractéristique de l'ensemble des processus de collision par la loi de Matthiesen.

$$\frac{1}{\bar{\tau}_t} = \sum_i \frac{1}{\bar{\tau}_i} \quad (\text{éq I-49})$$

I.3.5 Calculs de mobilités partielles

Quand le champ électrique appliqué est faible, la vitesse d'entraînement des électrons est proportionnelle au champ, le facteur de proportionnalité est par définition la mobilité électronique.

$$\bar{v} = -\mu \bar{E} \quad (\text{éq I-50})$$

La relation suivante relie la mobilité et le temps de relaxation du moment.

$$\mu_t = \frac{e \bar{\tau}_t}{m} \quad (\text{éq I-51})$$

La mobilité et le temps de relaxation étant reliés simplement, il est possible de définir une mobilité partielle correspondant à chaque mécanisme d'interaction.

$$\mu_i = \frac{e \bar{\tau}_i}{m} \quad (\text{éq I-52})$$

Chapitre I

La mobilité partielle étant une des composantes de la mobilité totale μ_t , qui est la seule grandeur accessible à l'expérience, on a :

$$\frac{1}{\mu_t} = \sum_i \frac{1}{\mu_i} \quad (\text{éq I-53})$$

I.3.6 Méthode de Monte Carlo

L'équation de transport de Boltzmann, en raison de sa forme mathématique complexe, n'admet pas de solution analytique sauf dans un nombre limité de cas, moyennant des hypothèses simplificatrices qui restreignent le domaine de validité des résultats obtenus (domaine des faibles champs pour l'approximation du temps de relaxation).

Il existe plusieurs méthodes qui permettent la résolution numérique de l'équation de transport de Boltzmann sans souffrir de fortes limitations, on citera la méthode itérative employée par Rode [35] et Nougier [36] et la méthode de Monte Carlo [37] qui est certainement la plus fréquemment employée. Notre choix s'est porté sur la méthode de Monte Carlo qui est utilisée depuis environ quinze ans dans notre laboratoire. Des études de matériaux en volume [33], d'hétérojonctions [38] ainsi que la simulation de transistors à effet de champ [34] [39] [40] [41] ont pu être menées à bien.

Le principe de cette méthode est de suivre un ensemble de porteurs simultanément dans l'espace géométrique et dans l'espace réciproque, en tenant compte de l'effet déterministe des forces appliquées et de l'effet stochastique des interactions (supposées instantanées). Dans notre cas, le temps est discrétisé en pas réguliers dt .

L'action du champ extérieur \vec{F} entre t et $t+dt$ se traduit par une variation $d\vec{k}$ du vecteur d'onde qui s'exprime sous la forme :

$$\frac{d\vec{k}}{dt} = \frac{q\vec{F}}{\hbar} \quad (\text{éq I-54})$$

Une procédure de tirage aléatoire permet de déterminer s'il y a lieu de faire intervenir ou non une interaction parmi celles introduites dans ce modèle. Alors une procédure de tirage aléatoire permet de déterminer l'état final de l'électron. Ainsi, connaissant l'évolution de k au cours du temps et la structure de bande $E(k)$, on peut accéder aux grandeurs importantes de la dynamique électronique telles l'énergie et la vitesse. La vitesse instantanée est déterminée par la relation I-55, et sa position par intégration de la vitesse (I-56).

$$\vec{v} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E(\vec{k})}{\partial \vec{k}} \quad (\text{éq I-55})$$

Chapitre I

$$\bar{r} = \int_0^t \bar{v}(t') dt' + \bar{r}_0 \quad (\text{éq I-56})$$

La méthode de Monte Carlo permet une description microscopique de la dynamique électronique. Elle permet d'étudier des phénomènes non stationnaires et de calculer les coefficients de diffusion. La procédure de tirage aléatoire utilise l'algorithme décrit par Jacoboni [37]. Au chapitre III, nous chiffrerons la précision de la méthode en étudiant l'incidence de la fonction aléatoire sur les résultats obtenus.

I.4 LE MATERIAU GaInAs PSEUDOMORPHIQUE

Pour étudier le transport dans des hétérostructures utilisant le GaInAs pseudomorphique, nous avons besoin d'un jeu de paramètres caractéristiques de ce matériau. P Bourel [41] pendant sa thèse, a étudié par la méthode de Monte Carlo les phénomènes de transport dans le matériau GaInAs non contraint. Pour ce faire il a déterminé, à partir de nombreuses sources bibliographiques d'origines expérimentales et théoriques, un jeu de paramètres qu'il a ensuite introduit dans un modèle Monte Carlo. Ce sont ces paramètres que nous avons adopté.

Quand la fraction d'indium dans le ternaire GaInAs augmente, la bande de conduction devient fortement non parabolique et la prise en compte de ce phénomène est particulièrement nécessaire. On utilise alors la relation de dispersion généralement utilisée pour les matériaux III-V :

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m_v^*} = E(1 + \alpha_v E) \quad (\text{éq I-57})$$

α_v : coefficient de non parabolicité en vallée v
 m_v^* : masse effective en volume au fond de la vallée v

I.4.1 Calcul de l'état de contrainte

Le paramètre de maille de $\text{Ga}_{1-x}\text{In}_x\text{As}$ varie de 5,65Å ($x=0$) à 6,06Å ($x=1$) et donc diffère en général de celui du substrat. Les compositions correspondant à l'accord de maille sont $x=0$ sur GaAs, $x=0,53$ sur InP (ou $\text{Al}_{0,52}\text{In}_{0,48}\text{As}$). Pour assurer une croissance de bonne qualité, l'épitaxie doit être cohérente, c'est à dire que GaInAs doit, par une déformation tétragonale de la maille, adopter dans le plan de croissance le paramètre de maille du substrat pour assurer la continuité cristalline (Fig. I-17). Sur un substrat de GaAs, le GaInAs est en compression, sur un substrat d'InP le GaInAs est en extension pour $x < 0,53$ et en compression pour $x > 0,53$.

Dans la suite nous considérerons que la direction de croissance est [001].

La théorie de l'élasticité permet un calcul complet de l'état de contrainte. Les tenseurs des contraintes σ_{ij} et des déformations ε_{ij} sont reliés par la loi de Hooke :

$$\sigma_{ij} = c_{ijkl} : \varepsilon_{ij} \quad (\text{éq I-58})$$

c_{ijkl} : tenseur de compliances élastiques.

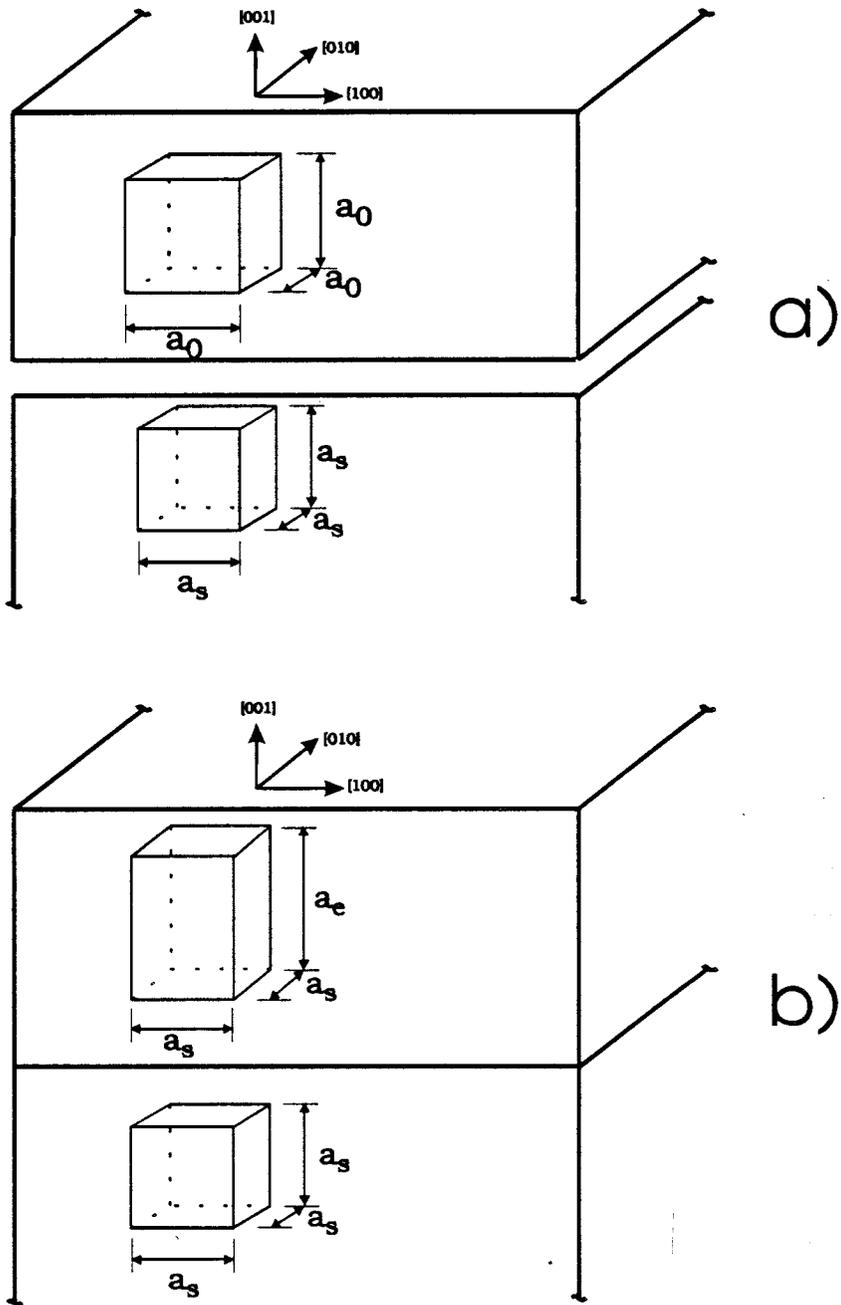


Figure I-17

Épitaxie pseudomorphique

a) avant épitaxie

b) après épitaxie

a_s : paramètre de maille du substrat

a_0 : paramètre de maille de l'épitaxie à l'état libre

a_e : paramètre de maille transverse de l'épitaxie à l'état contraint

Chapitre I

Dans le cas d'un cristal cubique, la relation tensorielle précédente est équivalente à la relation matricielle ci-après :

$$\begin{pmatrix} \sigma_{xx} \\ \sigma_{yy} \\ \sigma_{zz} \\ \sigma_{xy} \\ \sigma_{xz} \\ \sigma_{yz} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{12} & 0 & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{11} & c_{12} & 0 & 0 & 0 \\ c_{12} & c_{12} & c_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & c_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & c_{44} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varepsilon_{xx} \\ \varepsilon_{yy} \\ \varepsilon_{zz} \\ \varepsilon_{xy} \\ \varepsilon_{xz} \\ \varepsilon_{yz} \end{pmatrix} \quad (\text{éq I-59})$$

Le type de déformation est tel que $\varepsilon_{xy} = \varepsilon_{xz} = \varepsilon_{yz} = 0$ ce qui entraîne $\sigma_{xy} = \sigma_{xz} = \sigma_{yz} = 0$

Si l'on suppose l'état de contrainte plan, on a $\sigma_{zz} = 0$.

L'état de déformation dans le plan xOy est caractérisé par :

$$\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} = \frac{a_{\text{substrat}} - a_{\text{Ga}_{1-x}\text{In}_x\text{As}}}{a_{\text{Ga}_{1-x}\text{In}_x\text{As}}} \quad (\text{éq I-60})$$

a_{substrat} : paramètre de maille du substrat à l'état libre.

$a_{\text{Ga}_{1-x}\text{In}_x\text{As}}$: paramètre de maille de GaInAs à l'état libre.

Pour des raisons de symétrie cristalline $\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy}$ et $\sigma_{xx} = \sigma_{yy}$, l'équation matricielle précédente se ramène au système d'équations ci-dessous.

$$\begin{cases} \sigma_{xx} = (c_{11} + c_{12})\varepsilon_{xx} + c_{12}\varepsilon_{zz} \\ 0 = 2\varepsilon_{xx} + c_{12}\varepsilon_{zz} \end{cases} \quad (\text{éq I-61})$$

La seconde équation donne ε_{zz}

$$\varepsilon_{zz} = -\frac{2c_{12}}{c_{11}}\varepsilon_{xx} \quad (\text{éq I-62})$$

Puis la première permet de déterminer σ_{xx}

La connaissance des paramètres de maille du substrat et du ternaire GaInAs à l'état non contraint et des constantes élastiques du GaInAs suffit à déterminer les tenseurs des contraintes σ_{ij} et des déformations ε_{ij} .

$$\sigma_{xx} = \left(c_{11} + c_{12} - 2\frac{c_{12}^2}{c_{11}} \right) \frac{a_{\text{substrat}} - a_{\text{Ga}_{1-x}\text{In}_x\text{As}}}{a_{\text{Ga}_{1-x}\text{In}_x\text{As}}} \quad (\text{éq I-63})$$

$$\bar{\bar{\sigma}} = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & \sigma_{xx} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{éq I-64})$$

Chapitre I

Dans le cas d'une contrainte quelconque, il est intéressant de scinder le tenseur des contraintes en deux parties, une partie hydrostatique $\bar{\bar{\sigma}}_h$ et une partie non hydrostatique $\bar{\bar{\sigma}}_{nh}$. On introduit alors la pression P définie par :

$$P = -\frac{1}{3} \text{tr}(\bar{\bar{\sigma}}) \quad (\text{éq I-65})$$

$\bar{\bar{\sigma}}$ s'écrit alors $\bar{\bar{\sigma}} = \bar{\bar{\sigma}}_{nh} + \bar{\bar{\sigma}}_h$

$$\bar{\bar{\sigma}} = \begin{pmatrix} -P & 0 & 0 \\ 0 & -P & 0 \\ 0 & 0 & -P \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \frac{\sigma_{xx}}{3} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\sigma_{xx}}{3} & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{2\sigma_{xx}}{3} \end{pmatrix} \quad (\text{éq I-66})$$

la figure I-18 présente l'évolution de la pression hydrostatique P en fonction de la composition de l'épitaxie.

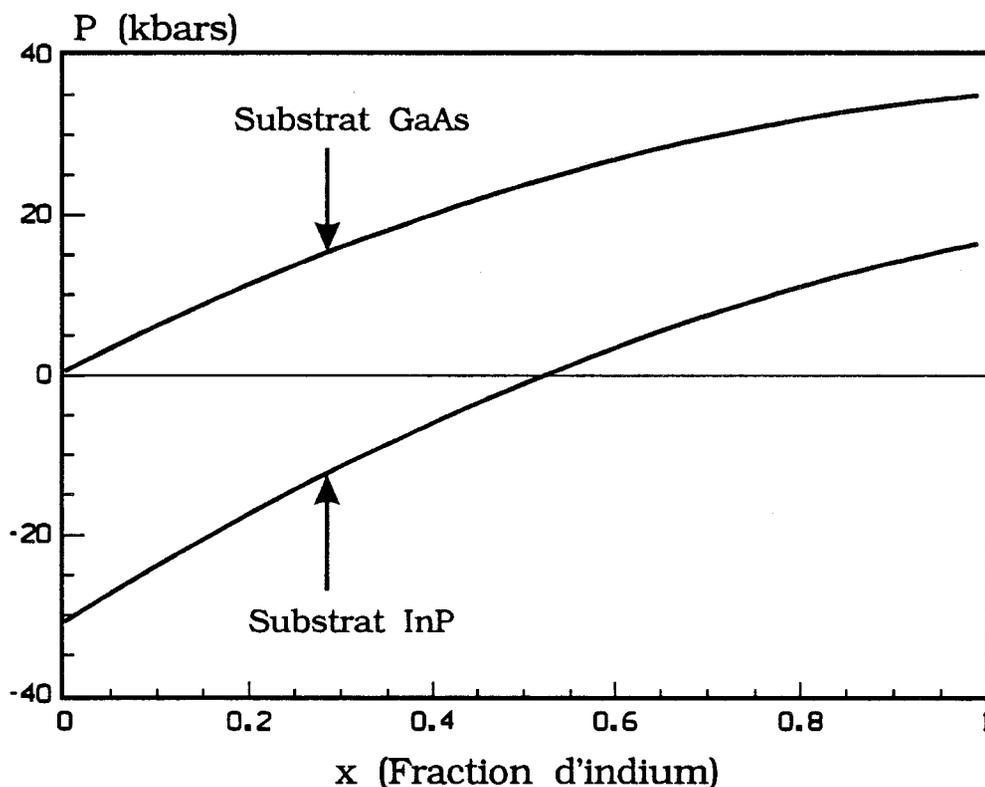


Figure I-18

Contrainte hydrostatique dans Ga(1-x)In(x)As

Chapitre I

Les valeurs des coefficients élastiques du GaInAs sont interpolées linéairement entre les valeurs des binaires GaAs et InAs (tableau I-4)

C_j (Mbar)	C_{11}	C_{12}
GaAs	1,223	0,571
InAs	0,833	0,453

Tableau I-4

Coefficients élastiques de GaInAs et InAs

La contrainte a pour effet d'emmagasiner de l'énergie élastique dans le GaInAs. L'énergie élastique par unité de surface est donnée, en fonction de l'épaisseur e de la couche contrainte, par la relation :

$$\frac{E}{S} = \left(c_{11} + c_{12} - 2 \frac{c_{12}^2}{c_{11}} \right) (\varepsilon_{xx})^2 e \quad (\text{éq I-67})$$

Au delà d'une certaine valeur de e , nommée épaisseur critique et notée e_c , l'énergie emmagasinée se relaxe en formant des dislocations. C'est donc en dessous de cette valeur qu'un matériau pseudomorphique exempt de défaut pourra être épitaxié.

Les dislocations dégradent le transport électronique et sont donc néfastes au bon fonctionnement des composants ; il est donc essentiel de maîtriser l'épaisseur des couches et leur composition. La détermination de l'épaisseur critique est importante, plusieurs modèles permettent de calculer ce paramètre. On trouvera des résultats obtenus avec différents modèles dans la thèse de Y Cordier [42].

I.4.2 Effets de la contrainte sur le matériau GaInAs (massif)

La contrainte dans une couche pseudomorphique modifie la structure de bande du matériau ainsi que d'autres paramètres physiques. Dans ce paragraphe, nous étudions les variations des principaux paramètres nécessaires à la suite de cette étude.

Par des méthodes numériques, il est possible d'évaluer l'influence de la contrainte sur la structure de bande. Nous rapportons ici les résultats essentiels connus à ce jour.

I.4.2.1 Effets qualitatifs

Une compression hydrostatique ($P < 0$) de la maille provoque un accroissement du gap interbande et une tension hydrostatique ($P > 0$) l'effet inverse. Les gaps intervallés sont également modifiés. La composante non hydrostatique abaisse le degré de symétrie de la maille ce qui produit des effets anisotropes :

- Les masses effectives des électrons et des trous en $k=0$ sont anisotropes.
- La dégénérescence des vallées X est levée.
- La dégénérescence des bandes de trous lourds et légers en $k=0$ est levée.

Une compression de la maille cristalline entraîne une déformation de la bande de valence. Avec une contrainte de cette nature, au voisinage de $k=0$ et dans le plan de croissance c'est la bande de trous légers qui est principalement peuplée (Fig. I-19). La possibilité de diminuer la masse des trous en utilisant l'effet de la contrainte [43] et donc d'améliorer la dynamique des trous rend le GaInAs pseudomorphique intéressant du point de vue de la réalisation de circuits logiques complémentaires.

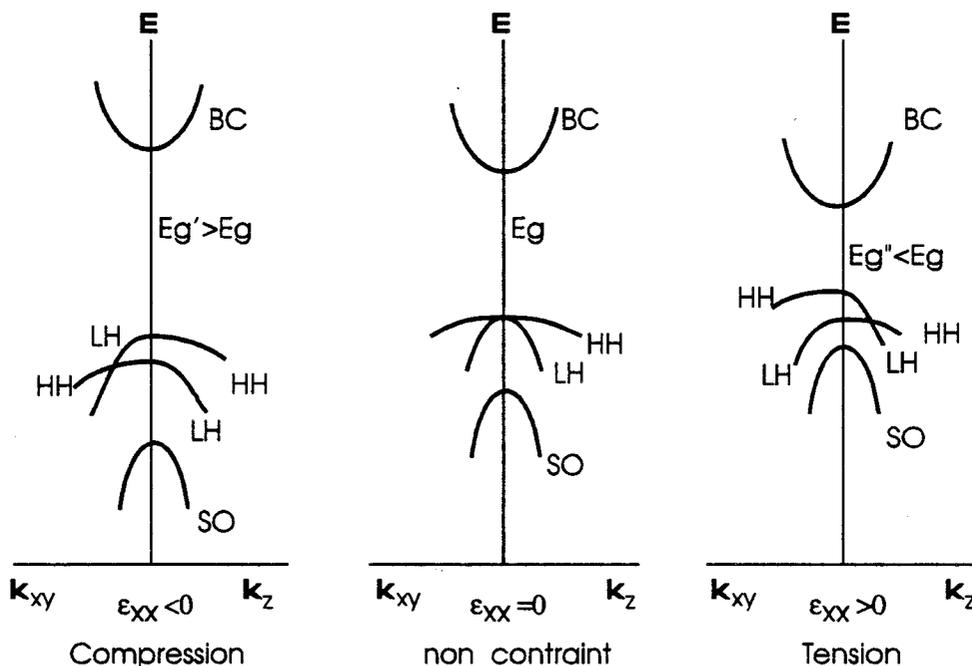


Figure I-19

Evolution de la structure de GaInAs contraint

LH : Bande de trous légers

HH : Bande de trous lourds

BC : bande de conduction

Eg : gap interbande

I.4.2.2 Effets quantitatifs sur la bande de conduction

L'objet de cette thèse étant l'étude du transport électronique, nous nous bornerons à utiliser uniquement les évolutions des paramètres de la bande de conduction.

Nous adoptons les mêmes lois d'évolution pour les paramètres du GaInAs avec la pression hydrostatique que celles, d'origines expérimentales, présentées pour le GaAs. Dans la mesure où les quelques valeurs isolées publiées concernant GaInAs sont très proches de celles calculées à partir des lois relatives au GaAs, cette approche semble justifiée.

Nous considérons donc les écarts énergétiques E_v (exprimés en eV) entre la bande de valence et les vallées Γ , L et X sont donnés [44] par les relations :

$$\begin{cases} E_{\Gamma}(P) = E_{\Gamma}(P=0) + 10,73 \cdot 10^{-3} P & a) \\ E_L(P) = E_L(P=0) + 5,58 \cdot 10^{-3} P & b) \\ E_X(P) = E_X(P=0) - 1,34 \cdot 10^{-3} P & c) \end{cases} \quad (\text{éq I-68})$$

Où P est la pression hydrostatique exprimée en kbar

La figure I-20 illustre l'influence de la contrainte sur les écarts énergétiques intervallées quand le matériau $\text{Ga}(1-x)\text{In}(x)\text{As}$ est épitaxié sur GaAs.

Dans les conditions de croissance décrites sur la figure I-17, la contrainte lève la dégénérescence des vallées X : les minimums énergétiques des deux vallées X situées perpendiculairement au plan de croissance (notées X^+) augmentent, alors que les minimums énergétiques des quatres vallées X situées parallèlement au plan de croissance (notées X^-) diminuent. Les écarts énergétiques entre les vallées X^+ , X^- et la vallée X correspondant au matériau contraint hydrostatiquement sont donnés par les relations suivantes [45].

$$\begin{aligned} \Delta(X^+, X) &= \frac{2}{3} \Phi [\varepsilon_{zz} - \varepsilon_{xx}] & a) \\ \Delta(X^-, X) &= -\frac{1}{3} \Phi [\varepsilon_{zz} - \varepsilon_{xx}] & b) \end{aligned} \quad (\text{éq I-69})$$

Où Φ : est le potentiel de déformation du matériau considéré.

Φ est interpolé pour x quelconque entre les valeurs données par Vandevallé [45] pour les binaires GaAs ($\Phi=8,61\text{eV}$) et InAs ($\Phi=4,5\text{eV}$). L'évolution des gaps intervallées avec la composition est représentée sur la figure I-20.

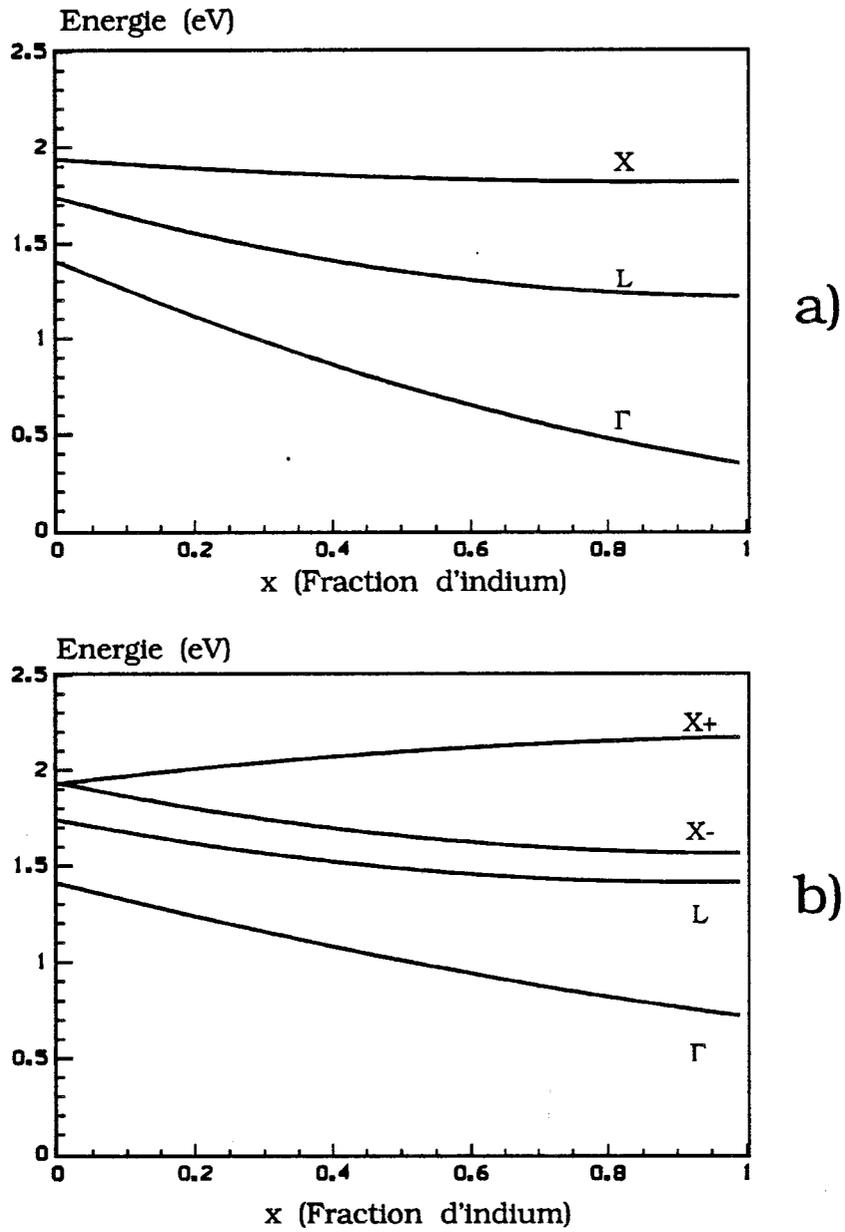


Figure I-20

Evolution des gaps dans $Ga(1-x)In(x)As$ avec x

a) non contraint

b) contraint sur GaAs

Comme nous l'avons évoqué précédemment, la masse effective en vallée gamma qui est isotrope dans le GaInAs non contraint devient anisotrope dans le matériau GaInAs pseudomorphique. La relation de dispersion fait alors intervenir les masses effectives transverse m_{xy}^* et perpendiculaires m_z^* . Les valeurs de m_{xy}^* et m_z^* que nous avons adoptées sont celles publiées par Jaffe [46], déterminées par le calcul de la structure de bande du GaInAs pseudomorphique avec la méthode des liaisons fortes (Fig. I-21).

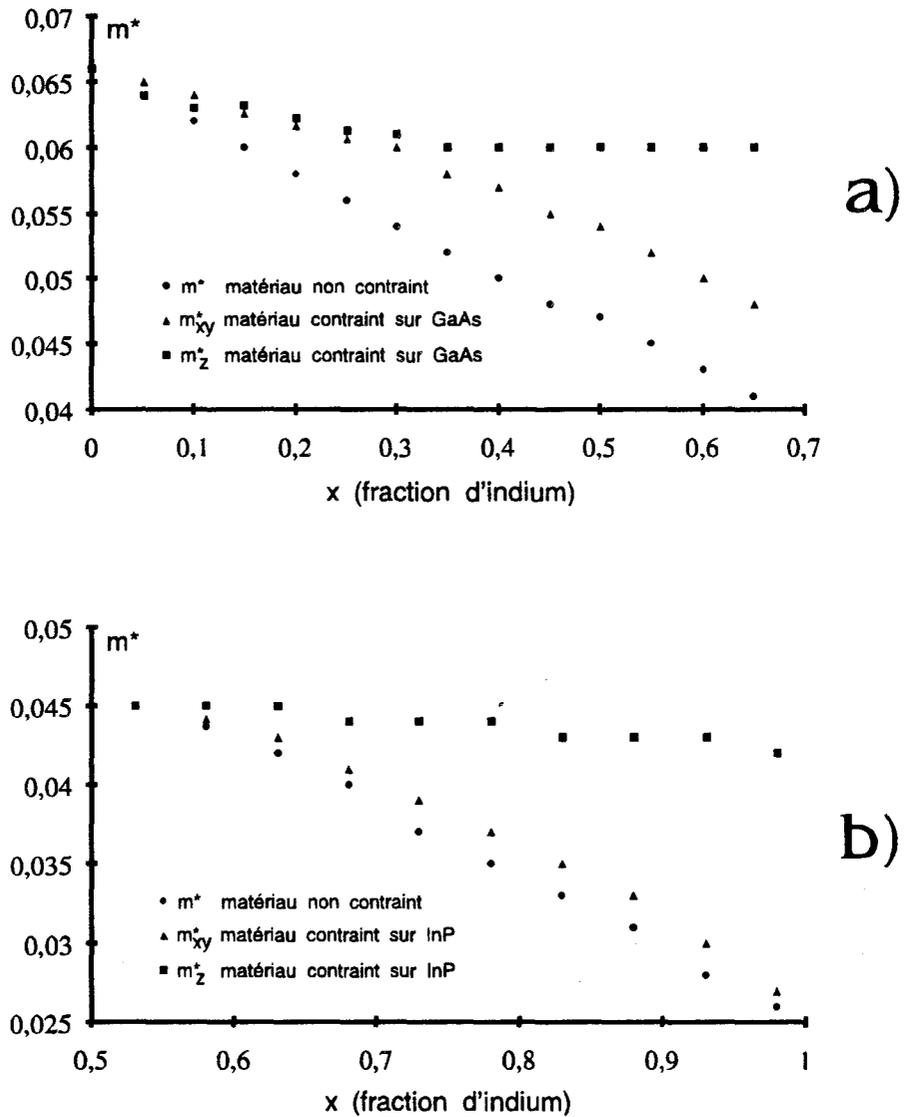


Figure I-21

Influence de la contrainte sur la masse en fond de bande de conduction dans $Ga(1-x)In(x)As$

- a) substrat GaAs
- b) substrat InP

Chapitre I

I.4.2.3 Effets de la contrainte sur certains paramètres physiques

Comme nous venons de le voir, le paramètre de maille du GaInAs pseudomorphique est différent du GaInAs à l'état libre. Ceci a naturellement pour effet de changer les modes de vibration du réseau et donc l'énergie d'émission des phonons optiques polaires ; nous avons utilisé l'expression donnée par Saxena [47].

$$\hbar\omega_{LO} (eV) = 0,03536 + 5,39.10^{-5}P \quad (\text{éq I-70})$$

Les constantes diélectriques relatives sont également affectées par la contrainte ; nous avons adopté les expressions suivantes qui ont été publiées par Samara [48].

$$\begin{cases} \varepsilon_s(P) = \varepsilon_s(P=0). \exp(-17,3.10^{-4}P) & a) \\ \varepsilon_\infty(P) = \varepsilon_\infty(P=0). \exp(-14.10^{-4}P) & b) \end{cases} \quad (\text{éq I-71})$$

Où P est la pression hydrostatique exprimée en kbar

I.5 ETUDE PAR LA METHODE DE MONTE-CARLO DU TRANSPORT ELECTRONIQUE EN VOLUME DANS LE GaInAs CONTRAINT

La contrainte et le transport bidimensionnel rendent l'étude du transport électronique dans une hétérostructure pseudomorphique particulièrement complexe, c'est pourquoi, dans un premier temps nous avons cherché à évaluer l'effet de la contrainte pseudomorphique sur un matériau en supposant que le transport était tridimensionnel. Cette hypothèse nous conduit donc à étudier le transport électronique en volume dans un matériau fictif dont les paramètres sont ceux du matériau contraint de façon à n'analyser que l'effet de la contrainte. Pour ce faire, nous avons utilisé le modèle Monte Carlo décrit par A. Kaszynski [33] et les paramètres de GaInAs donnés par P. Bourel [41]. Les effets d'une contrainte pseudomorphique ont été présentés dans la quatrième partie de ce chapitre.

Dans ce paragraphe, nous présentons les principaux résultats obtenus avec ce modèle. Des caractéristiques de vitesses obtenues en considérant des fractions d'indium du même ordre de grandeur que celles utilisées dans les réalisations technologiques seront présentées. Nous avons supposé que l'épitaxie de GaInAs sur GaAs ou InP était toujours cohérente, ceci nous permettra d'examiner les cas où la contrainte est forte. De cette manière, nous avons pu étudier l'évolution de paramètres importants tels la vitesse pic et la mobilité sur une large gamme de composition.

Nous avons supposé que le matériau GaInAs était non dopé et que le champ électrique était parallèle au plan de croissance. Nous présenterons successivement les résultats obtenus pour les filières technologiques GaAs et InP à 300K et 77K.

I.5.1 Transport à température ambiante

I.5.1.1 Substrat GaAs

L'épaisseur critique pour une couche de $\text{Ga}_{0,75}\text{In}_{0,25}\text{As}$ contrainte sur GaAs est de l'ordre de 100\AA , valeur optimale pour l'obtention de densités surfaciques élevées. L'étude des phénomènes de transport dans $\text{Ga}_{0,75}\text{In}_{0,25}\text{As}$ (Fig. I-22) est donc particulièrement intéressante dans l'optique de l'application T.E.G.F.E.T. .

L'influence de la contrainte sur la mobilité bas champs (Fig I-23) apparaît différemment selon que l'on se place à faible ou à forte composition d'indium. Jusqu'à des fractions d'indium de l'ordre de 25%, l'effet de la composition est faible, de même que celui de la contrainte. Au delà d'un seuil voisin de 25%, l'augmentation d'indium entraîne une nette amélioration de la mobilité dans le matériau non contraint ; la contrainte s'oppose de façon sensible à cet effet. A titre de comparaison, nous reportons dans le tableau I-5 les mobilités électroniques dans $\text{Ga}_{(0,35)}\text{In}_{(0,65)}\text{As}$ et $\text{Ga}_{(0,75)}\text{In}_{(0,25)}\text{As}$.

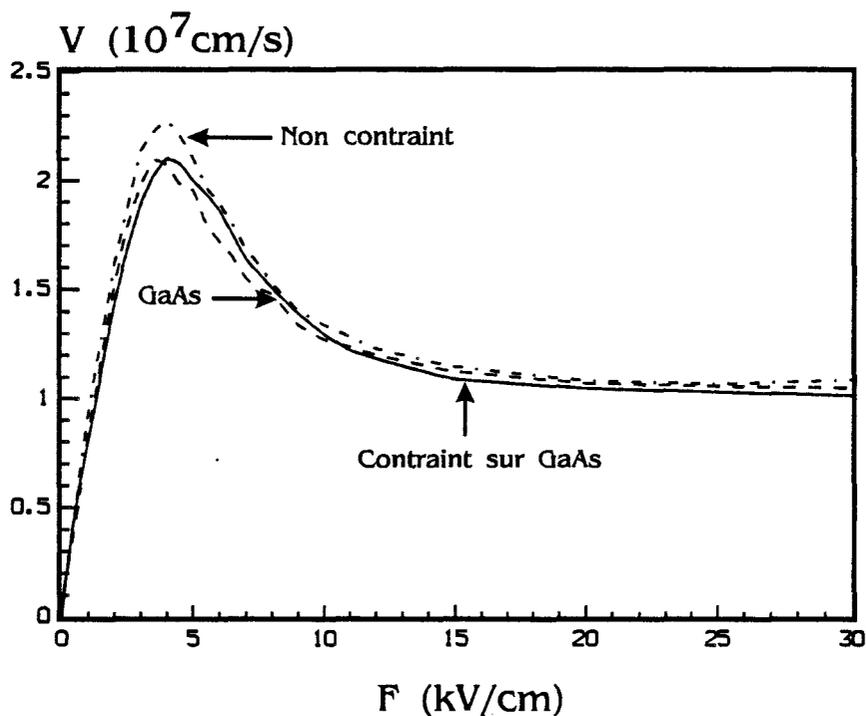


Figure I-22

Vitesse moyenne dans $Ga(0,75)In(0,25)As$ à $T=300K$

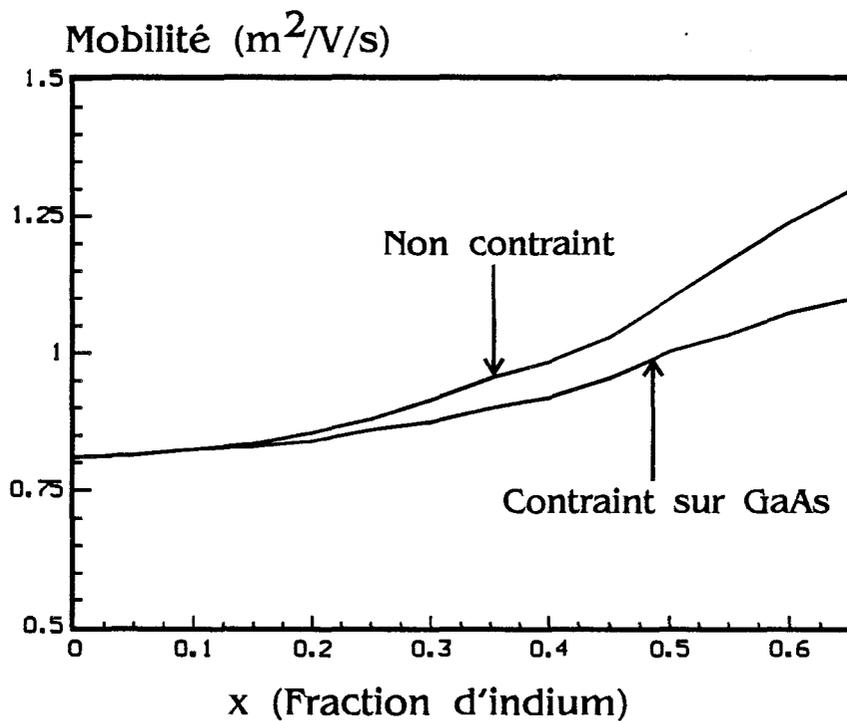


Figure I-23

Mobilité électronique dans $Ga(1-x)In(x)As$ à $T=300K$

Chapitre I

μ ($m^2/V/s$)	$Ga_{0,35}In_{0,65}As$	$Ga_{0,75}In_{0,25}As$
non contraint	1,3	0,88
contraint	1,1	0,86

Tableau I-5

Mobilités dans différents matériaux

Quand la contrainte est très forte (65% d'indium), elle dégrade notablement les performances de transport dans le GaInAs aux champs moyens, mais ce phénomène est en valeur relative moins important que pour une faible contrainte. La vitesse pic dans le matériau contraint ($V_{pic} = 2,5 \cdot 10^7$ cm/s) reste nettement supérieure à celle dans GaAs (Fig. I-24). Cependant rappelons qu'une composition si élevée ne peut être obtenue que sur des épaisseurs très faibles (éq. I-67).

La contrainte dégrade les propriétés de transport électronique dans le GaInAs, cet effet est sensible aux champs moyens (1-4kV/cm). On observe une vitesse pic du même ordre de grandeur que celle de l'AsGa ($V_{pic} = 2,1 \cdot 10^7$ cm/s) et intervenant pour un champ électrique légèrement plus élevé. L'effet de la contrainte tend donc à annihiler l'effet bénéfique de l'augmentation de la fraction d'indium.

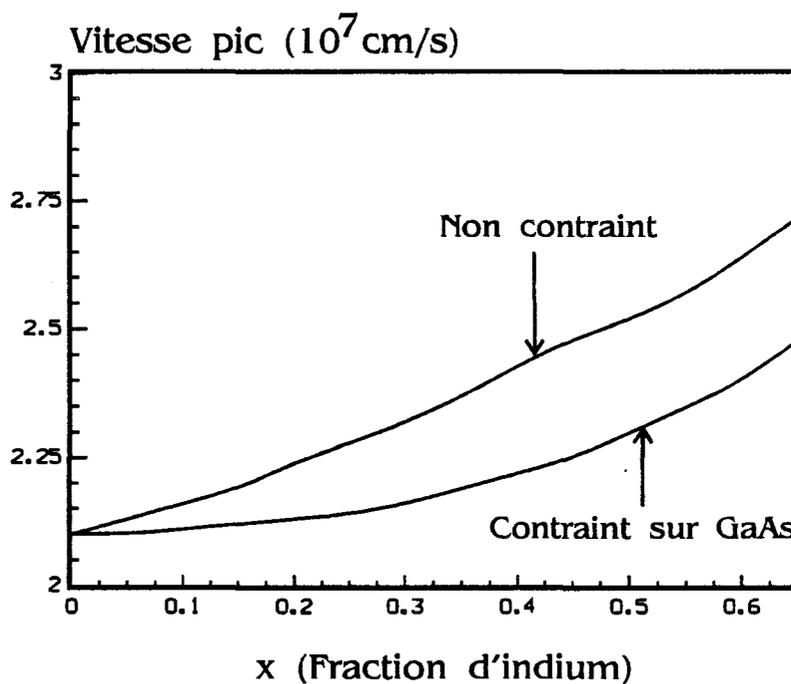


Figure I-24

Vitesse pic dans $Ga(1-x)In(x)As$ à $T=300K$

Chapitre I

I.5.1.2 Substrat InP

L'étude du matériau $\text{Ga}_{0,32}\text{In}_{0,68}\text{As}$ contraint par croissance sur InP, nous a permis de constater que, contrairement à ce que l'on observait avec un substrat de GaAs et une contrainte du même ordre de grandeur, l'effet de la composition n'est pas masqué par l'effet de la contrainte ; on obtient pour la vitesse pic les valeurs suivantes :

	$\text{Ga}_{0,32}\text{In}_{0,68}\text{As}$ non contraint	$\text{Ga}_{0,32}\text{In}_{0,68}\text{As}$ contraint	$\text{Ga}_{0,47}\text{In}_{0,53}\text{As}$
V_{pic} (cm/s)	$2,8 \cdot 10^7$	$2,7 \cdot 10^7$	$2,6 \cdot 10^7$

Tableau I-6

Vitesse pic dans différents matériaux

Dans les figures I-25 et I-26 nous présentons les évolutions des mobilités électroniques et des vitesses pics dans $\text{Ga}(1-x)\text{In}(x)\text{As}$ sur toute la gamme de composition.

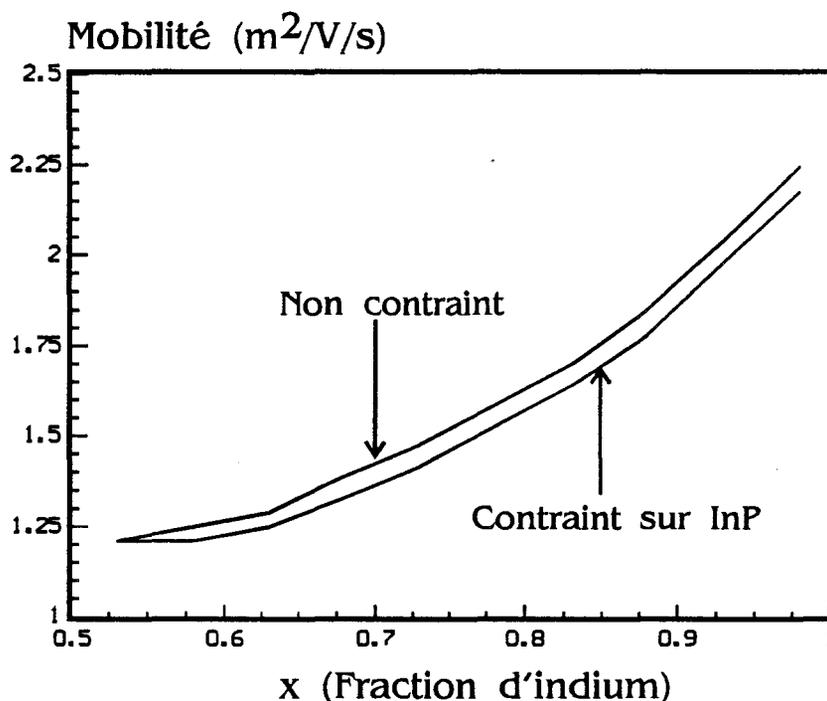


Figure I-25

Mobilité électronique dans $\text{Ga}(1-x)\text{In}(x)\text{As}$ à $T=300\text{K}$

Chapitre I

La figure I-26 présente l'évolution de la vitesse pic avec la composition pour les deux filières InP (adaptée en maille et pseudomorphique). On constate que l'effet de la contrainte sur la mobilité et la vitesse (Fig. I-25, I-26) pic est sensiblement le même en valeur absolue pour toutes les compositions ; il apparaît négligeable devant celui occasionné par l'augmentation du taux d'indium. Ce phénomène est profondément différent de celui observé avec un substrat de GaAs. Les résultats obtenus pour les taux d'indium élevés doivent être considérés avec prudence dans la mesure où la méthode de simulation ne prend pas en compte les phénomènes d'ionisation dans le semiconducteur. L'énergie à laquelle se produit l'ionisation et le gap diminuent quand le pourcentage d'indium augmente, ainsi dans InAs ce phénomène physique devrait théoriquement ne pas être négligé [48]. Dans les conditions de la simulation, nous aboutissons à une vitesse pic très élevée (Fig. I-26).

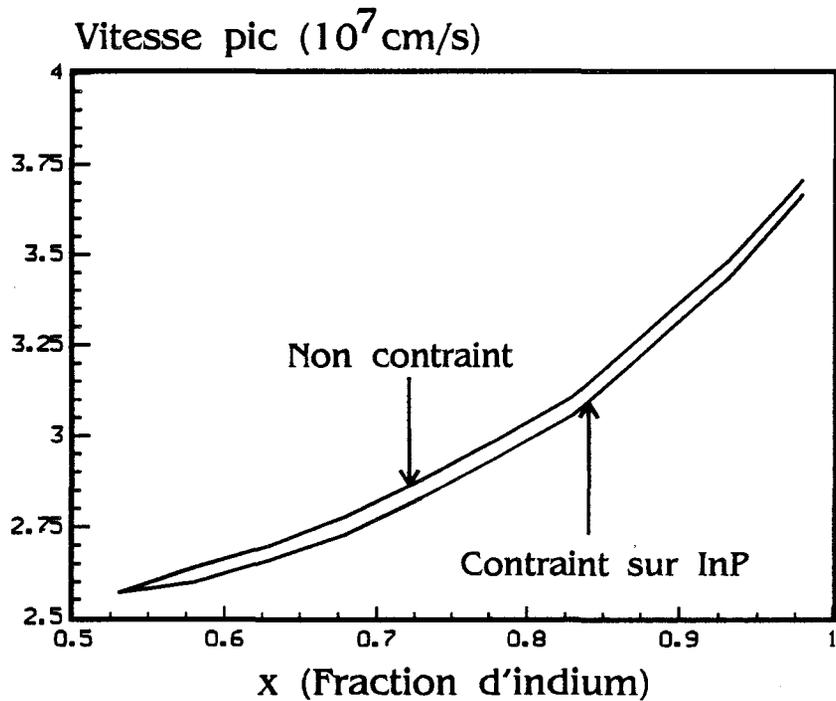


Figure I-26

Vitesse pic dans $Ga(1-x)In(x)As$ à $T=300K$

I.5.2 Transport à $T=77K$

I.5.2.1 Substrat GaAs

A $T=77K$ les matériaux $Ga_{0,75}In_{0,25}As$ et GaAs présentent quasiment les mêmes caractéristiques de transport aux faibles et moyens champs (Fig. I-27). Ce phénomène est différent de celui observé à 300K, où l'effet d'indium était sensible (Fig. I-22). De même qu'à 300K l'effet de la contrainte contribue à diminuer la vitesse pic.

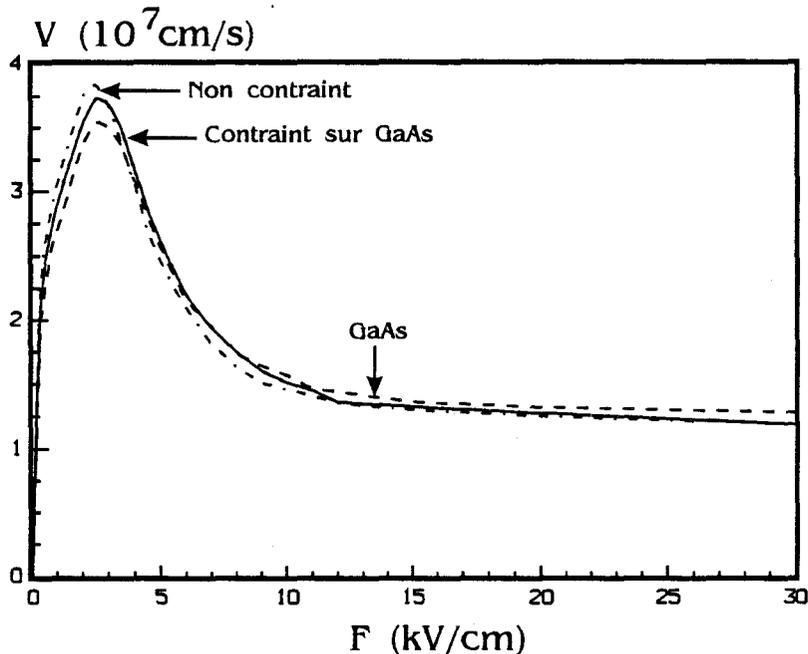


Figure I-27

Vitesse dans $Ga(0,75)In(0,25)As$ à $T=77K$

En ce qui concerne l'évolution de la mobilité (Fig. I-28), on observe des phénomènes identiques à ceux observés à 300K. Sur la figure I-29 qui représente l'évolution de la vitesse pic avec la fraction d'indium, on constate, contrairement à ce que l'on observait à 300K, l'existence d'une gamme de compositions ($x=0 - x=0,15$) où la vitesse pic est inférieure à celle de l'AsGa. Ce phénomène s'explique par le fait qu'à des compositions de cet ordre, l'interaction d'alliage, non négligeable à basse températures, augmente avec x .

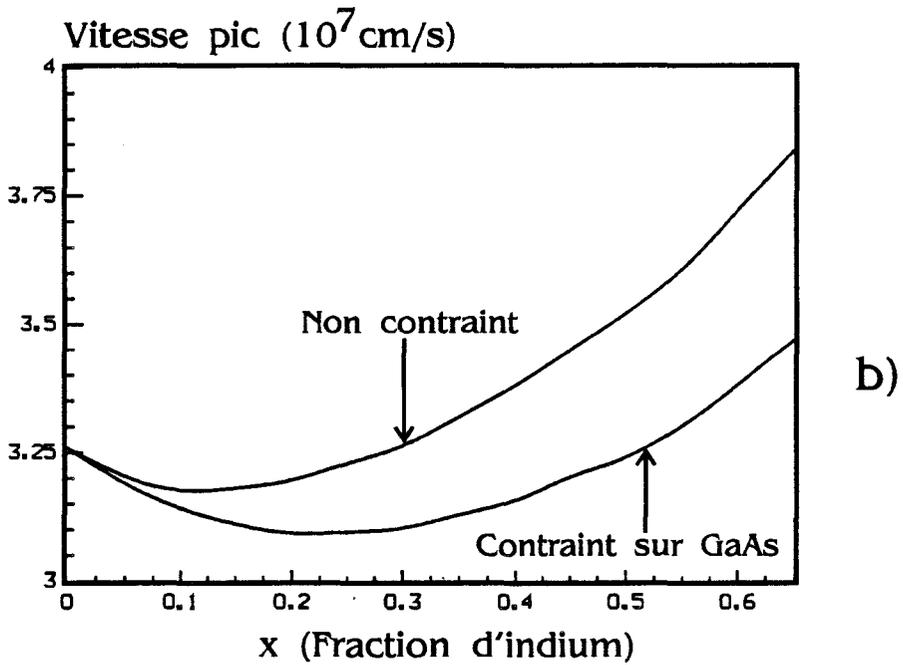
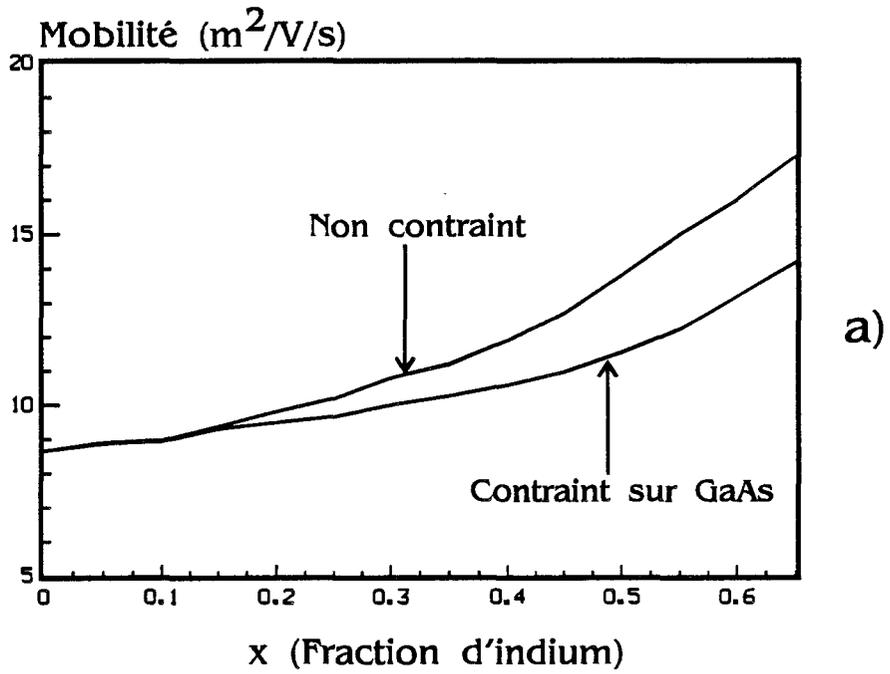


Figure I-28

Mobilité électronique et vitesse pic dans $\text{Ga}(1-x)\text{In}(x)\text{As}$ à $T=77\text{K}$

I.5.2.2 Substrat InP

Les résultats sont présentés sur la figure I-29, les phénomènes physiques rencontrés sont de nature identique à ceux observés à 300K. L'effet de l'interaction d'alliage est maximum pour x voisin de 0.5, pour $x > 0.53$ il décroît avec x . Cette tendance, caractéristique de la filière InP, contribue à donner une pente de la courbe $\mu(x)$ plus forte que dans le cas de la filière GaAs.

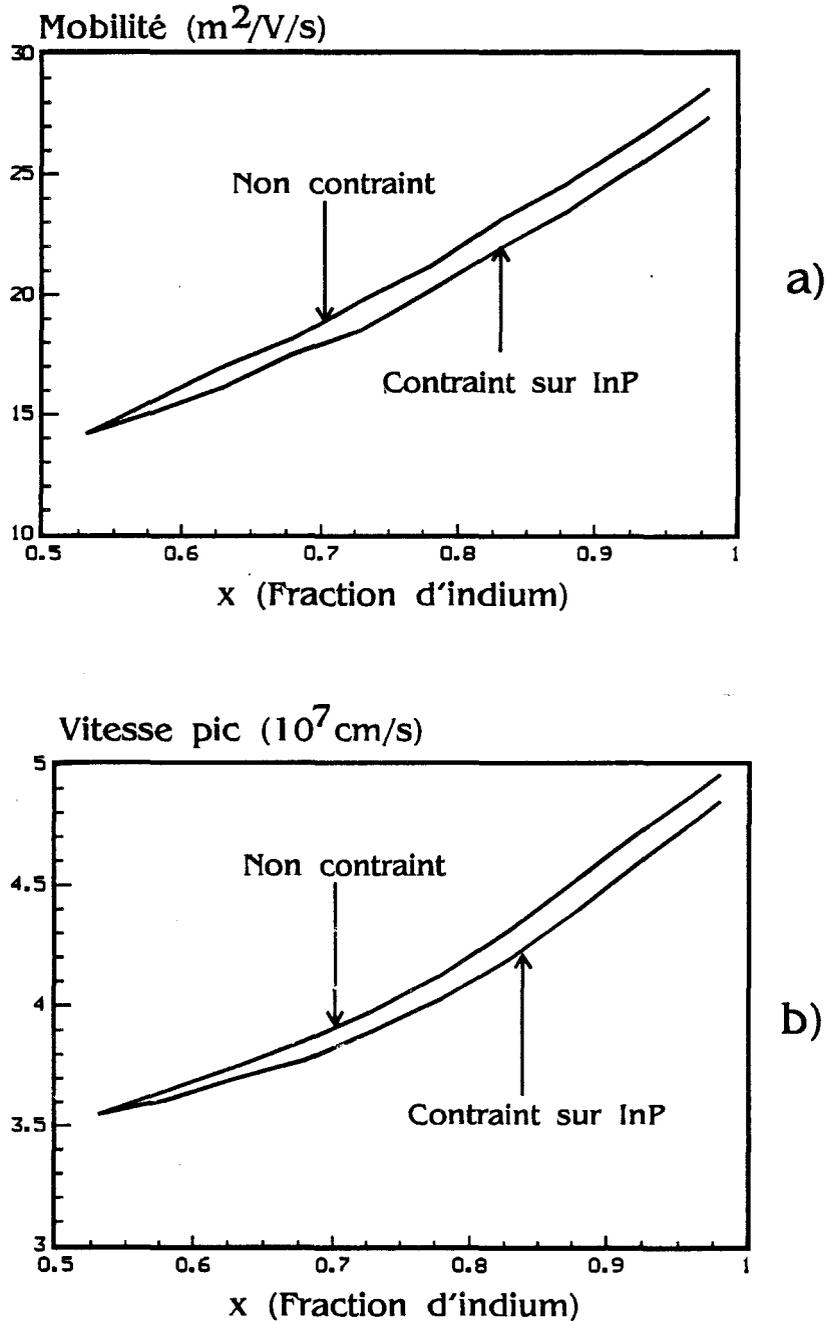


Figure I-29

Mobilité et vitesse pic dans $Ga(1-x)In(x)As$ à $T=77K$

I.5.3 Conclusion

Le modèle Monte Carlo que nous venons de décrire permet d'étudier le transport électronique dans un matériau contraint "en volume" (GaInAs). Des effets hydrostatiques (variations des gaps) et non hydrostatiques (anisotropie de la masse effective en vallée gamma, levée de dégénérescence des vallées X) modifient les conditions de transport. Au vu des résultats obtenus, on constate que l'excès d'indium par rapport à la composition adaptée en maille améliore sensiblement les propriétés de transport dans le GaInAs quand le substrat est de l'InP. Cet effet est moins prononcé quand le substrat est en GaAs (l'effet d'indium n'est marqué qu'au delà de 25%). La supériorité du T.E.G.F.E.T. pseudomorphique AlGaAs/GaInAs peut donc difficilement se justifier par l'amélioration des propriétés de transport. Cependant, il présente d'autres avantages qui sont déterminants : absence de centres DX, existence d'une barrière de potentiel à l'interface plus importante, densité électronique plus élevée. Cette première approche du transport électronique du matériau pseudomorphique ne prend pas en compte le caractère bidimensionnel de la dynamique des électrons. L'élaboration d'un modèle Monte Carlo 2D nécessite la détermination de probabilités d'interactions spécifiques du transport bidimensionnel, ce qui entraîne un travail théorique préalable. Dans le chapitre II, nous nous attacherons particulièrement à montrer l'influence du nombre de degrés de liberté du mouvement sur la mobilité électronique limitée par l'interaction sur impuretés ionisées. Dans le chapitre III, pour introduire l'interaction sur impuretés ionisées dans un modèle Monte Carlo 2D, nous utiliserons des calculs voisins de ceux développés dans le chapitre II.

I.6 BIBLIOGRAPHIE

- [1] **L ESAKI, R. TSU**
IBM. Res. Intern. Report. RC2418. 26 Mars 1969
- [2] **DELAGEBEAUDEUF, P. DELESCLUSE, P. ETIENNE, J. CHAPLART and N. P. LINH**
Electron. Lett. 16, 667 (1980)
- [3] **T. MIMURA S. HIAMIZU, T. FUJI, K NANBU**
Jpn. J. Appl. Phys. 19, 1 (1980)
- [4] **H. SAKAKI**
Jpn. J. Appl. Phys. 19, 12, (1980)
- [5] **H. SAKAKI**
J. Vac. Sci. Technol. 19, 148 (1981)
- [6] **P. M. PETROFF, A. C. GOSSARD, R. A. LOGAN and W. WIEGMANN**
Appl. Phys. Lett. 41 (7) (1982)
- [7] **P F. YUH, K. L. WANG**
Appl. Phys. Lett. 49 (25), (1982)
- [8] **K. VON KLITZING, G. DORDA, M. PEPPER**
Phys. Rev. Lett. 45, 494 (1980)
- [9] **G. BASTARD and J. BRUM IEEE**
J.Quantum Electron. QE-22, 1625 (1986)
- [10] **H. L. STORMER and Al**
Solid State Communication 29, 705(1979)
- [11] **A. CAPPY**
Thèse de doctorat d'état, Lille (1986)
- [12] **J. ALAMKAN, H. HAPPY, Y. CORDIER and A. CAPPY**
European Trans. on Telecom. and rel. tech. 1,429 (1990)
- [13] **F. STERN**
Phys. Rev. B. 5 12 4891 (1972)
- [14] **F. STERN**
Jour. Comp. Phys. 6, 56 (1970)
- [15] **F. F. FANG and W. E. HOWARD**
Phys. Rev. Lett. 16, 797 (1966)
- [16] **G. L. SNIDER, I. H. TAN and E. L. HU**
J. Appl. Phys. 68 (6) (1990)
- [17] **S. E. LAUX and F. STERN**
Appl. Phys. Lett. 49(2), (1986)

- [18] **B. Y. K. HU, S.K.SARKER and J.W.WILKINS**
Phys. Rev. B. **39**, 8468 (1989)
- [19] **D. PINES and D. BOHM**
Phys. Rev. **85**, 338 (1952)
- [20] **D. PINES and D. BOHM**
Phys. Rev. **92**, 609 (1953)
- [21] **J. LINDHARD**
Kgl. Danske Videnskab. Selskab, Mat. Fys. Medd. **28**, No. 8 (1954)
- [22] **J. R. BARKER**
Solid State Communications, **32** 1013 (1954)
- [23] **B. K. HU and J. W. WILKINS**
Phys. Rev. B **39** 464 (1989)
- [24] **H. EHRENREICH and M. H. COHEN**
Phys. Rev. **106** 86 (1959)
- [25] **D. PINES**
Elementary excitations in solids, BENJAMIN, New York (1963)
- [26] **C. KITTEL**
Quantum theory of solids, WILEY, New York (1963)
- [27] **P. F. MALDAGUE**
Surf. Sci. **73** 296 (1978)
- [28] **A. KROL**
J.Appl.phys **62** (2) (1991)
- [29] **P .K. BHATTACHARYA**
J.Appl.phys **58** (7) (1985)
- [30] **K. HESS**
Phys. Lett. **45**, 21 (1980)
- [31] **W. P. HONG**
IEEE Electron Device Letter **7**, 8 (1986)
- [32] **A. MESSIAH**
Mécanique Quantique tome II DUNOD Paris (1964)
- [33] **A. KAZYNSKI**
Thèse de docteur Ingénieur Lille (1979)
- [34] **J. L. THOBEL**
Thèse de l'université Lille, (1988)
- [35] **D. L. RODE**
Phys. Rev. B **2** 1012 (1970)
- [36] **J. P. NOUGIER**
Phys. Rev. B **8** 5728 (1973)

[37] **C. JACOBONI and L. REGGIANI**

Reviews of Modern Physics, **55**, 3, (1983)

[38] **W. YEN**

Thèse de l'université, Lille, (1988)

[39] **M. PERNISEK**

Thèse de troisième cycle, Lille (1983)

[40] **K. BELLASHNI**

Thèse de l'université, Lille (1991)

[41] **P. BOUREL**

Thèse de l'université, Lille (1991)

[42] **Y. CORDIER**

Thèse de l'université, Lille (1992)

[43] **G. C. OSBOURN**

Superlattices and Microstructures, **13** (1985)

[44] **D. J. WOLFORD**

Solid State Communications, **23** 12 1069 (1985)

[45] **G. G. VANDEVALLE**

Summer course on advanced semiconductor physics for microdevice, June 13-16 1988 Lewen Belgium.

[46] **M. JAFFE**

J. Appl.Phys **65**(1) (1989)

[47] **A. K. SAXENA**

J. Appl. phys **58** (7) (1985)

[48] **G.A. SAMARA**

Phys. Rev. B. **27** 6 3494 (1983)

[49] **O. MOUTON**

DEA d'électronique Lille, (1992)

CHAPITRE II

**Etude théorique de l'interaction sur
impuretés ionisées dans des gaz
électroniques 3D, 2D et 1D**

CHAPITRE II

**Etude théorique de l'interaction sur
impuretés ionisées dans des gaz
électroniques 3D, 2D et 1D**

Chapitre II

Nous abordons dans ce chapitre l'étude d'un des phénomènes physiques les plus importants en physique des semiconducteurs : l'interaction électrons-impuretés ionisées. La présence d'impuretés dans un semiconducteur peut être qualifiée de "mal nécessaire" dans la mesure où : d'une part, elle permet d'augmenter le nombre d'électrons libres et donc les courants mis en jeu ; d'autre part, elle diminue les performances en transport en introduisant une interaction supplémentaire. L'effet de cette interaction est surtout important à basse température. Des astuces technologiques ont permis de réduire sensiblement son effet néfaste. Elles consistent à séparer spatialement les électrons et les impuretés, ceci a été rendu possible par l'utilisation de puits quantiques ; il en résulte une complication sensible de l'étude théorique de ce phénomène. L'étude de l'interaction sur impuretés ionisées a fait et continue de faire l'objet de nombreux travaux auxquels il sera fait référence dans la suite de ce chapitre.

Le premier paragraphe de ce chapitre consiste en un rappel de modèles relativement simples d'interaction électrons-impuretés souvent utilisés dans l'étude de matériaux en volume mais qui se révèlent inadaptés aux hétérostructures où le transport est bidimensionnel. Pour traiter ce cas nous utiliserons une méthode exposée dans le paragraphe II-2. Dans le contexte actuel d'évolution des structures électroniques, il nous a semblé également intéressant d'étudier ce phénomène dans un gaz unidimensionnel d'électrons. Cette étude est présentée dans le paragraphe II-3. Le dernier paragraphe de ce chapitre montre l'influence de la réduction du nombre de degrés de liberté sur l'interaction électrons-impuretés dans les structures électroniques.

Dans les différentes études présentées, nous introduisons l'effet d'écran. Pour les systèmes quantifiés, nous considérons l'extension spatiale des fonctions d'onde, ce qui nous amène à calculer des intégrales de recouvrement, conduisant ainsi à des calculs plus importants que dans un matériau en volume.

L'interaction sur impuretés étant surtout importante aux basses énergies, nous avons choisi d'évaluer son influence sur la mobilité qui est une grandeur physique caractéristique du transport bas champs. La mobilité est calculée par la méthode du temps de relaxation du moment (Cf. I-3.4 et I.3.5) et la plupart des calculs numériques ont été effectués à 77K. Dans ce chapitre, la structure de bande est supposée parabolique (ce qui est légitime aux faibles énergies). Sauf quand cela sera précisé, les paramètres physiques utilisés dans les calculs sont ceux de GaAs.

II.1 ETUDE DE L'INTERACTION ELECTRONS-IMPURETES DANS UN GAZ D'ELECTRONS 3D

Nous déterminons l'énergie potentielle d'interaction $V_{n3D}(r)$, entre un électron de charge $-e$ et un ion de charge Ze séparés par une distance r , à partir du potentiel coulombien nu, ainsi nous avons :

$$V_{n3D}(r) = \frac{-Ze^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r r} \quad (\text{éq II-1})$$

Notons $V_{n3D}(q)$, sa transformée de Fourier dans l'espace réciproque 3D.

$$V_{n3D}(q) = \frac{-Ze^2}{\epsilon_0\epsilon_r q^2} \quad (\text{éq II-2})$$

Dans le cas de l'interaction électrons-impuretés, le potentiel perturbateur ne dépend pas de la fréquence parce que les impuretés sont immobiles. L'effet d'écran sera donc introduit par l'intermédiaire d'une fonction diélectrique statique $\epsilon(q)$. Le potentiel écranté $V_{e3D}(q)$ s'écrit alors :

$$V_{e3D}(q) = \frac{V_{n3D}(q)}{\epsilon(q)} \quad (\text{éq II-3})$$

Le but de ce paragraphe est de décrire brièvement différents modèles d'interaction électrons-impuretés dans un matériau en volume, et de déterminer les temps de relaxation qui leur sont associés. Les différentes approches utilisent comme potentiel nu la transformée de Fourier du potentiel coulombien $V_{n3D}(q)$. La densité électronique est supposée constante, égale au nombre d'impuretés ionisées. Les approches diffèrent par la façon d'introduire l'effet d'écran. Dans tous les cas, l'écrantage a pour effet de diminuer la portée du potentiel coulombien.

II.1.1 Modèle de Conwell-Weisskopf

Conwell et Weisskopf [1] considèrent que le potentiel perturbateur est le potentiel nu $V_{n3D}(q)$. En notant N_{i3D} la densité volumique d'impuretés, supposée uniforme et en intégrant sur le nombre de centres diffuseurs, on obtient le temps de relaxation :

$$\frac{1}{\tau(k)} = \frac{N_{i3D} Z^2 e^4}{16\sqrt{2}\pi\epsilon_0\epsilon_r (m^*)^{1/2}} [E(k)]^{1/2} \int_{-1}^{+1} \frac{dz}{1-z} \quad (\text{éq II-4})$$

L'intégrale ci-dessus diverge et conduit au résultat non physique d'une mobilité nulle. Si l'on admet qu'il existe un angle de déviation minimum θ_m correspondant au passage d'un électron à mi-distance entre deux impuretés voisines.

On montre que :

$$\tan\left(\frac{\theta_m}{2}\right) = \frac{Ze^2(N_{i3D})^{1/3}}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r E(k)} \quad (\text{éq II-5})$$

La présence d'impuretés ionisées infléchit la trajectoire des porteurs. Les collisions sur impuretés ne sont pas isotropes, la diffusion aux petits angles est favorisée.

$$\frac{1}{\tau_{[CW]}(k)} = \frac{N_{i3D}Z^2e^4}{16\sqrt{2}\pi\epsilon_0\epsilon_r(m^*)^{1/2}} [E(k)]^{1/2} \int_{-1}^{\cos\theta_m} \frac{dz}{1-z} \quad (\text{éq II-6})$$

$$\frac{1}{\tau_{[CW]}(k)} = \frac{N_{i3D}Z^2e^4}{16\sqrt{2}\pi\epsilon_0\epsilon_r(m^*)^{1/2}} E(k)^{3/2} \text{Log}\left(1 + \frac{16\pi^2\epsilon_0\epsilon_r E(k)^2}{N_{i3D}^{3/2}Z^2e^4}\right) \quad (\text{éq II-7})$$

L'effet d'écran est introduit par un artifice mathématique qui consiste à interrompre brutalement le potentiel coulombien.

II.1.2 Modèle de Dingle-Brooks-Herring

D'après Dingle [2] la concentration électronique $n_{3D}(r)$ à une distance r d'une impureté ionisée est :

$$n_{3D}(r) = \frac{1}{\sqrt{2}\hbar^3} \left(\frac{m^*kT}{\pi}\right)^{3/2} F_{1/2}\left(\frac{E_F}{kT} + \frac{eV(r)}{kT}\right) \quad (\text{éq II-8})$$

$V(r)$ satisfait à l'équation de Poisson :

$$\nabla^2 V(r) = e \frac{\Delta n_{3D}(r)}{\epsilon_0\epsilon_r} \quad (\text{éq II-9})$$

En supposant $eV(r)$ petit devant E_F et en développant au premier ordre l'équation II-8, on transforme l'équation de Poisson :

$$\nabla^2 V(r) - \frac{16\pi^2e^2(m^*)^{3/2}(2\pi\hbar kT)^{1/2}}{\hbar^3} F_{-1/2}\left(\frac{E_F}{kT}\right) V(r) = 0 \quad (\text{éq II-10})$$

La résolution de cette équation à symétrie sphérique est classique, en imposant les conditions aux limites suivantes :

$$\begin{cases} V(r) \rightarrow \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r r} & \text{quand } r \rightarrow 0 \\ V(r) \rightarrow 0 & \text{quand } r \rightarrow +\infty \end{cases} \quad (\text{éq II-11})$$

Chapitre II

On obtient le potentiel d'interaction écranté.

$$V_{\epsilon_{3D}}(r) = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r r} \exp(-\sqrt{S_{3D}}r) \quad (\text{éq II-12})$$

$$\text{avec} \quad S_{3D} = \frac{n_{3D}e^2}{\epsilon_0\epsilon_r kT} \frac{F_{-1/2}\left(\frac{E_F}{kT}\right)}{F_{1/2}\left(\frac{E_F}{kT}\right)} \quad (\text{éq II-13})$$

S_{3D} est appelé facteur d'écran. Dans la littérature [2] $S_{3D} = \beta^2$ est le paramètre généralement employé, et $1/\beta$ est appelé longueur d'écran. Dans le but de faire un parallèle entre les différentes expressions du potentiel d'interaction selon la dimensionnalité du système, nous continuerons d'utiliser le paramètre S_{3D} .

Notons que la transformée de Fourier du potentiel écranté s'écrit alors :

$$V_{\epsilon_{3D}}(q) = \frac{Ze^2}{\epsilon_0\epsilon_r(q^2 + S_{3D})} = \frac{V_{n_{3D}}(q)}{1 + \frac{S_{3D}}{q^2}} \quad (\text{éq II-14})$$

La fonction diélectrique vaut donc :

$$\epsilon_{3D[DBH]} = 1 + \frac{S_{3D}}{q^2} \quad (\text{éq II-15})$$

Remarquons que le terme de polarisabilité s'exprime simplement à l'aide du facteur d'écran $\Pi_{3D[DBH]} = S_{3D} \epsilon_0 \epsilon_r$.

On obtient des expressions simples de S_{3D} dans les cas limites suivants :

Gaz dégénéré ($E_F \gg kT$)

On obtient le facteur d'écran qui correspond à l'approximation de Thomas-Fermi [3].

$$S_{3D[TF]} = \frac{3n_{3D}e^2}{2\epsilon_0\epsilon_r E_F} \quad (\text{éq II-16})$$

Gaz non dégénéré ($E_F \ll kT$)

On obtient le facteur d'écran qui correspond à l'approximation de Debye-Huckel [3].

$$S_{3D[DH]} = \frac{n_{3D}e^2}{\epsilon_0\epsilon_r kT} \quad (\text{éq II-17})$$

Chapitre II

Le temps de relaxation est alors donné par :

$$\frac{1}{\tau_{[DBH]}(k)} = \frac{N_{i3D} Z^2 e^4}{16\sqrt{2}\pi\epsilon_0\epsilon_r(m^*)^{1/2}} E^{-3/2} \left[\text{Log}(1+b) - \frac{b}{1+b} \right] \quad (\text{éq II-18})$$

$$\text{avec } b = \frac{8m^*E}{\hbar S_{3D}}$$

Dingle, Brooks et Herring ont mené le calcul de mobilité jusqu'à son terme en considérant un gaz non dégénéré, ils ont obtenu une expression analytique de la mobilité.

$\epsilon_{3D[DBH]}(q)$ constitue une approximation de la constante diélectrique de Lindhard $\epsilon_{3D[L]}(q)$ [4]. Dans le paragraphe suivant, nous résumons une méthode se rapprochant davantage de cette dernière.

II.1.3 Modèle de Takimoto

Takimoto [5] a montré que le terme de polarisabilité de la fonction diélectrique de Lindhard ne se réduisait à une constante que pour les faibles valeurs de q . En réalité, le nuage électronique se polarise sous l'effet de l'électron incident ; ce phénomène est d'autant plus important que q est élevé. Takimoto a calculé, avec la méthode de Lindhard, le terme de polarisabilité à $T=0K$ en tenant compte de la dépendance en q . Pour toute température, nous écrivons le potentiel d'interaction sous la forme :

$$V_{\epsilon 3D[T]}(q) = \frac{V_{\pi 3D}(q)}{1 + \frac{\Pi_{3D[L]}(q, T)}{\epsilon_0\epsilon_r q^2}} \quad (\text{éq II-19})$$

L'expression ci-dessus diffère de celle de Dingle-Brooks-Herring par la présence d'un facteur Π qui introduit la dépendance en q du terme de polarisabilité de la fonction diélectrique. Nous déduisons le facteur Π à température T de celui déterminé à température nulle par Takimoto (éq. II-20) par l'intermédiaire de la relation (éq I-40) donnée par Maldague [6].

$$\Pi_{3D[L]}(q, T=0) = S_{3D[TF]} \epsilon_0\epsilon_r \frac{1}{2} \left(1 + \frac{1}{2w} (1-w^2) \log \left| \frac{1+w}{1-w} \right| \right) \quad (\text{éq II-20})$$

$$\text{avec } w = \frac{q}{2k_F}$$

Pour $q = 2k_F$ la polarisabilité présente une singularité connue sous le nom d'effet Kohn. A $T=0K$, on notera que, quand q tend vers 0, la polarisabilité est identique au facteur d'écran de Dingle-Brooks-Herring. Le modèle proposé par Takimoto ne conduit à des expressions analytiques du temps de relaxation que pour $T=0K$, il est donc relativement complexe à mettre en oeuvre.

II.1.4 Mobilités électroniques

Nous venons de présenter différents modèles d'interaction électrons-impuretés susceptibles d'être appliqués à des structures semiconductrices où le transport est tridimensionnel. Ces modèles se différencient par la manière dont le phénomène d'écrantage est pris en compte. Entre le modèle de Conwell-Weisskopf relativement simple et le modèle de Takimoto qui prend en compte la variation de la polarisabilité avec q , on trouve le modèle de Dingle-Brooks-Herring qui est certainement le plus utilisé en pratique. Pour évaluer l'influence du modèle d'écrantage dans l'étude de l'interaction sur impuretés ionisées, nous avons choisi d'étudier un paramètre caractérisant le transport électronique : la mobilité électronique limitée par l'interaction sur impuretés. La méthode qui permet de déterminer la mobilité électronique à partir du potentiel d'interaction est exposée dans le chapitre I. Nous supposons que toutes les impuretés donneuses sont ionisées, ce qui revient à poser $n_{3D} = N_{i3D}$. La relation entre le niveau de Fermi et la densité électronique (éq. II-22) est prise en compte dans nos calculs. Pour une densité électronique $n_{3D} = 10^{24} m^{-3}$ nous avons étudié la variation de la mobilité avec la température. Les résultats présentés sur la figure II-1-a) montrent une augmentation de la mobilité avec la température. L'étalement de la distribution énergétique des électrons qui s'amplifie avec la température est responsable de cette tendance. Aux très faibles températures, les modèles de Takimoto et de Dingle-Brooks-Herring conduisent à des résultats très proches. Quand la température augmente, la mobilité calculée avec le modèle de Takimoto stagne alors que celle donnée par le modèle Dingle-Brooks-Herring continue de croître, A T=300K l'écart entre les deux modèles avoisine 20%.

Sur la figure II-1-b), nous montrons l'évolution de la mobilité avec la densité électronique à une température de 77K. Les modèles de Dingle-Brooks-Herring et Conwell-Weisskopf indiquent respectivement les bornes maximales et minimales des mobilités électroniques que l'on peut déterminer par le calcul. Pour ces deux modèles le calcul des probabilités d'interaction est rapide, ils peuvent être inclus aisément dans un modèle Monte Carlo d'étude du transport. Le modèle de Conwell-Weisskopf donne des valeurs de mobilité faibles, il semble surestimer l'effet de l'interaction sur impuretés. Quant au modèle de Takimoto dont la mise en oeuvre est complexe, il donne des résultats intermédiaires. Aux densités électroniques élevées, il semble que la prise en compte du phénomène d'écrantage nécessite de tenir compte de la dépendance en q de la fonction diélectrique.

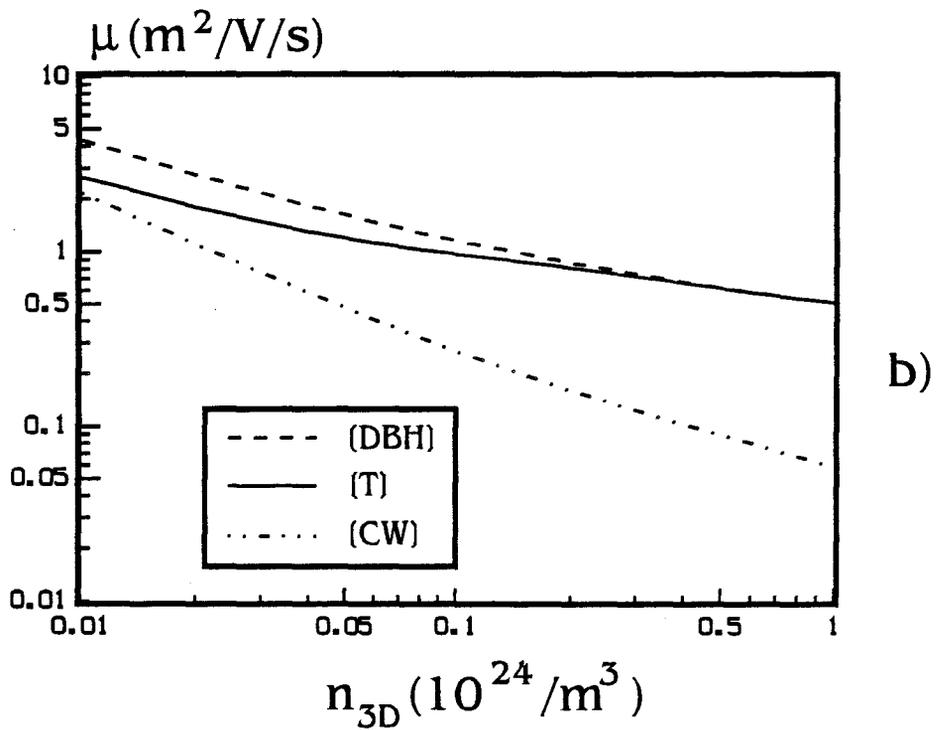
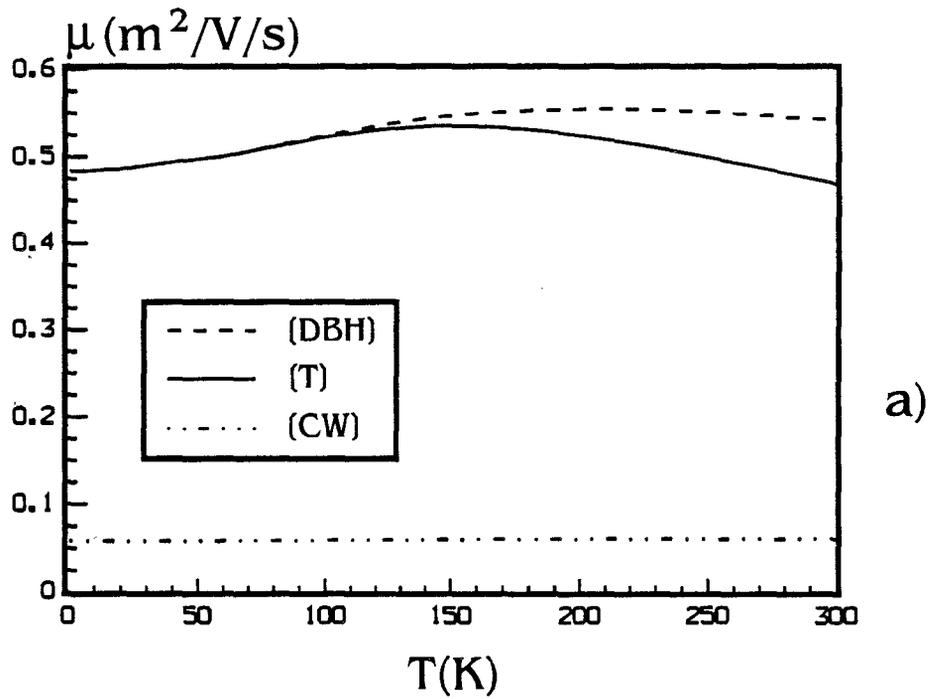


Figure II-1

Evolution de la mobilité sur impuretés dans GaAs en volume

pour différents modèles : Conwell-Weisskopf (CW),

Dingle-Brooks-Herring (DBH), Takimoto (T)

a) En fonction de la température avec $n_{3D} = 10^{24} / \text{m}^3$

b) En fonction de la densité électronique à $T=77\text{K}$

Chapitre II

Les modèles que nous venons de décrire sont souvent utilisés [7] [8], cependant ils souffrent d'une limitation commune : ils supposent que les distributions d'impuretés et d'électrons sont uniformes dans la structure. La notion d'éloignement spatial entre les particules ne peut être prise en compte à l'aide de ces trois modèles. Perri [9] a proposé une méthode qui permet de s'affranchir de ces problèmes dans le cas des matériaux où le transport est tridimensionnel. Pour ce faire, il utilise une simulation Monte-Carlo, ce qui permet de connaître la position de l'électron à chaque instant et de déterminer la probabilité d'interaction avec l'ion le plus proche qui peut ainsi être calculée. Dans le cas de structures à modulation de dopage où le transport est bidimensionnel, il est fondamental de tenir compte de l'éloignement spatial électrons-impuretés. Ceci est possible si l'on connaît la fonction enveloppe des électrons. L'étude de l'interaction électrons-impuretés dans des structures à modulation de dopage fait l'objet des deux paragraphes à venir.

II.2 ETUDE DE L'INTERACTION ELECTRONS-IMPURETES DANS UN GAZ D'ELECTRONS 2D

II.2.1 Etude théorique

Précédemment nous avons décrit plusieurs approches possibles de l'interaction électrons-impuretés ionisées dans un semiconducteur considéré comme un matériau en volume. Pour étudier cette interaction dans des hétérostructures, il faut tenir compte du caractère bidimensionnel du transport électronique. Les premières études dans ce domaine ont été menées par F. Stern et W. E. Howard [10] et concernaient les couches d'inversion de jonctions Métal-Oxyde-Silicium. Plusieurs auteurs [11][12][13] ont emprunté la même démarche. Les résultats obtenus étant parfois contradictoires, il était donc important de reprendre cette étude à sa base et d'en développer certains aspects.

Le calcul de la transformée de Fourier du potentiel coulombien 3D par rapport aux variables x et y donne :

$$V_{n2D}(q_{xy}, z) = \frac{Ze^2 \exp(-q_{xy}|z|)}{\epsilon_0 \epsilon_r 2q_{xy}} \quad (\text{éq II-21})$$

F. Stern [14], suivant la même démarche que Lindhard [4], a montré que l'on pouvait définir une fonction diélectrique longitudinale pour prendre en compte le phénomène d'écrantage dans un gaz purement bidimensionnel. Par la méthode du champ auto-cohérent, il a déterminé, à température nulle et dans l'approximation de Thomas-Fermi, la fonction diélectrique $\epsilon_{2D}(q_{xy}, \omega)$ d'un gaz strictement 2D.

Nous reportons ici les résultats concernant la fonction diélectrique statique, cette fonction présente comme en 3D une singularité quand le vecteur q_{xy} est égal au double du vecteur de Fermi (k_F).

$$\begin{aligned} \epsilon(q_{xy}) &= 1 + \frac{S_{2D[TF]}}{q_{xy}} & q \leq 2k_F \\ \epsilon(q_{xy}) &= 1 + \frac{S_{2D[TF]}}{q_{xy}} \left(1 - \left(1 - \left(\frac{2k_F}{q_{xy}} \right)^2 \right)^{1/2} \right) & q > 2k_F \end{aligned} \quad (\text{éq II-22})$$

$S_{2D[TF]}$ est le facteur d'écran dans l'approximation de Thomas-Fermi (gaz dégénéré)

La détermination de la fonction diélectrique est plus complexe lorsque l'on étudie un système quasi-bidimensionnel. En effet, l'extension spatiale des fonctions d'ondes dans la direction z entraîne une augmentation de la complexité des calculs, le terme intégral de l'équation I-34 est difficile à évaluer, il correspond à la contribution au phénomène d'écrantage des électrons se trouvant dans le plan xy .

II.2.1.1 Généralités sur la méthode de Stern-Howard

Stern et Howard [10] ont proposé une méthode permettant de déterminer le potentiel d'interaction électrons-impuretés à partir de l'équation de Poisson. Cette méthode permet de prendre en compte le caractère quasi bidimensionnel du gaz d'électrons et nécessite la connaissance de la fonction enveloppe. Nous commençons par rappeler les fondements de la méthode :

On suppose que l'effet d'écran induit une variation de potentiel $-e\delta V(r_{xy}, z)$. Si l'on néglige l'effet sur les fonctions d'onde devant l'effet sur les niveaux d'énergie, on obtient par un calcul de perturbation au premier ordre :

$$dE_i(r_{xy}) = -e\bar{V}_i(r_{xy}) = -e \int \delta V(r_{xy}, z) g_i(z) dz \quad (\text{éq II-23})$$

Où $g_i(z) = |\xi_i(z)|^2$ est la probabilité de présence d'un électron de la sousbande i . On exprime alors la charge induite à l'aide de la charge à l'équilibre :

$$\rho = -e dn_{2D} \quad (\text{éq II-24})$$

$$n_{2D} = \sum_i n_{2D}^i g_i(z) \quad (\text{éq II-25})$$

En utilisant la relation (éq II-23) on obtient :

$$dn_{2D} = \sum_i dn_{2D}^i g_i(z) = \sum_i \frac{\partial n_{2D}^i}{\partial E_i} g_i(z) dE_i \quad (\text{éq II-26})$$

et finalement

$$\rho = \sum_i \frac{\partial n_{2D}^i}{\partial E_i} g_i(z) \int \delta V(r_{xy}, z) g_i(z) dz \quad (\text{éq II-27})$$

La charge induite et la charge à l'équilibre sont ensuite introduites dans l'équation de Poisson en supposant que la constante diélectrique est homogène dans la structure étudiée.

$$\Delta V(r_{xy}, z) - \sum_i \frac{e}{\epsilon_0 \epsilon_r} \frac{\partial n_{2D}^i}{\partial E_i} g_i(z) \bar{V}_i(z) = -\frac{Ze}{\epsilon_0 \epsilon_r} \delta(r_{xy} - r_{0,xy}) \delta(z - z_0) \quad (\text{éq II-28})$$

On introduit le paramètre S_{2D}^i qui détermine l'effet d'écran induit par les électrons de la sousbande i

$$S_{2D}^i = \frac{e}{\epsilon_0 \epsilon_r} \frac{\partial n_{2D}^i}{\partial E_i} \quad (\text{éq II-29})$$

Chapitre II

L'équation I-24 nous permet de calculer S_{2D}^i ,

$$S_{2D}^i = \frac{n_{2D}^i e^2}{\epsilon_0 \epsilon_r kT} \frac{F_{-1}(\eta_i)}{F_0(\eta_i)} \text{ avec } \eta_i = \frac{E_F - E_i}{kT} \quad a) \quad (\text{éq II-30})$$

soit encore

$$S_{2D}^i = \frac{m_i^* e^2}{\epsilon_0 \epsilon_r \pi \hbar^2} \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E_i - E_F}{kT}\right)} \quad b)$$

$$\Delta V(r_{xy}, z) - \sum_i S_{2D}^i g_i(z) \bar{V}_i(r_{xy}) = \frac{-Ze}{\epsilon_0 \epsilon_r} \delta(r_{xy} - r_{0,xy}) \delta(z - z_0) \quad (\text{éq II-31})$$

En prenant la transformée de Fourier de l'équation précédente, on obtient :

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial z^2} + q_{xy}^2\right) V(q_{xy}, z) - \sum_i S_{2D}^i g_i(z) \bar{V}_i(q_{xy}) = \frac{-Ze}{\epsilon_0 \epsilon_r} \delta(z - z_0) \quad (\text{éq II-32})$$

Pour déterminer le potentiel solution de l'équation autocohérente consistante ci-dessus, Yokoyama [15] a utilisé une méthode numérique. Wu [16] a employé des transformations de Fourier, associées à des produits de convolution. Nous avons choisi la technique des fonctions de Green (Cf. annexe II) dont le formalisme tout à fait général semble bien adapté à la résolution de l'équation précédente. On pose :

$$\rho(q_{xy}, z, z_0) = \sum_i S_{2D}^i g_i(z) \bar{V}_i(q_{xy}) - \frac{Ze}{\epsilon_0 \epsilon_r} \delta(z - z_0) \quad (\text{éq II-33})$$

L'équation II-32 devient :

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial z^2} + q_{xy}^2\right) V(q_{xy}, z) = \rho(q_{xy}, z, z_0) \quad (\text{éq II-34})$$

La résolution de l'équation précédente passe alors par la détermination de la fonction de Green, solution de l'équation ci-dessous :

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial z^2} + q_{xy}^2\right) G_{2D}(q_{xy}, z, z_0) = \delta(z - z_0) \quad (\text{éq II-35})$$

L'annexe IV décrit comment on obtient la fonction de Green :

$$G_{2D}(q_{xy}, z, z_0) = \frac{\exp(-q_{xy}|z - z_0|)}{2q_{xy}} \quad (\text{éq II-36})$$

Chapitre II

La détermination du potentiel d'interaction est alors immédiate :

$$V(q_{xy}, z, z_0) = \int_{-\infty}^{+\infty} G_{2D}(q_{xy}, z, z') \rho(q_{xy}, z', z_0) dz' \quad (\text{éq II-37})$$

L'équation différentielle II-32 se trouve transformée en équation fonctionnelle :

$$V(q_{xy}, z, z_0) - \sum_i S_{2D}^i \bar{V}_i(q_{xy}, z_0) \int_{-\infty}^{+\infty} G_{2D}(q_{xy}, z, z') g_i(z') dz' = \frac{-e}{\epsilon_0 \epsilon_r} G_{2D}(q_{xy}, z, z_0) \quad (\text{éq II-38})$$

II.2.1.2 Transport monosousbande

Nous supposons maintenant que les électrons occupent une seule sousbande, cette condition est d'autant mieux vérifiée que la température est basse et la densité faible. La résolution de l'équation II-38 donne le potentiel écranté.

$$V_{e2D}(q_{xy}, z) = e \bar{V}_1(q_{xy}, z) = \frac{-Ze^2}{\epsilon_0 \epsilon_r} \frac{A_{2D}(q_{xy}, z)}{1 + S_{2D} C_{2D}(q_{xy})} \quad (\text{éq II-39})$$

$$A_{2D}(q_{xy}, z) = \int_{-\infty}^{+\infty} G_{2D}(q_{xy}, z, z') g_1(z') dz' \quad (\text{éq II-40})$$

Où $eA_{2D}(q_{xy}, z) / \epsilon_0 \epsilon_r$ est le terme qui correspond au potentiel non écranté, et où le facteur $C_{2D}(q_{xy})$, appelé facteur de forme, est donné par :

$$C_{2D}(q_{xy}) = \int_{-\infty}^{+\infty} A_{2D}(q_{xy}, z) g_1(z) dz \quad a)$$

soit encore

$$C_{2D}(q_{xy}) = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} G_{2D}(q_{xy}, z, z') g_1(z) g_1(z') dz dz' \quad b)$$

On détermine le carré de l'élément de matrice de transition en intégrant sur la distribution d'impuretés $N_{i3D}(z)$.

$$M^2(q_{xy}) = \frac{Z^2 e^4}{(\epsilon_0 \epsilon_r)^2} \frac{B_{2D}(q_{xy})}{(1 + S_{2D} C_{2D}(q_{xy}))^2} \quad (\text{éq II-42})$$

Chapitre II

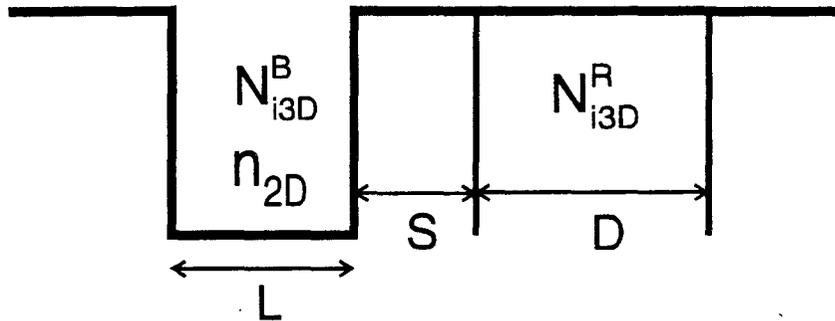
$$\text{avec } B_{2D}(q_{xy}) = \int_{\text{Zone Dopée}} N_{i3D}(z) [A_{2D}(q_{xy}, z)]^2 dz \quad (\text{éq II-43})$$

Par intégration, on obtient le temps de relaxation du moment.

$$\frac{1}{\tau_m(E)} = \frac{4 m^*}{\pi \hbar^3} \int_0^{\pi/2} M^2(2k \sin \theta) \sin^2 \theta d\theta \quad (\text{éq II-44})$$

II.2.2 Étude d'un puits carré infini

Dans une première approche nous avons supposé que les électrons étaient confinés dans un puits carré infini et qu'ils occupaient une seule sousbande. Ce modèle simple permet d'étudier aisément l'influence des principaux paramètres physiques et technologiques sur l'interaction électrons-impuretés ionisées. Nous avons successivement considéré les fonctions d'ondes sinusoïdales [FOS], solutions de l'équation de Schrödinger dans un puits carré infini, et pour simplifier les calculs, des approximations par un pic de Dirac [FOD] ou une fonction constante [FOC]. Ces différents cas [FOS], [FOC] et [FOD] sont présentés dans le chapitre I. La structure étudiée est représentée sur la figure II-2.



$$\text{Valeurs utilisées pour les calculs numériques} \left\{ \begin{array}{ll} D=300\text{\AA} & n_{2D}=10^{16}/\text{m}^2 \\ L=100\text{\AA} & N_{i3D}^R=10^{24}/\text{m}^3 \\ S=0\text{\AA} & N_{i3D}^B=10^{21}/\text{m}^3 \end{array} \right.$$

Température $T=77\text{K}$

Matériau : GaAs

Figure II-2

Structure de puits carré infini étudiée

Chapitre II

Pour faciliter la discussion nous évaluons séparément les mobilités liées aux impuretés locales ("Background", notées B) et celles liées aux impuretés distantes ("Remote", notées R). Les termes A_{2D} et B_{2D} seront donc distingués par l'exposant B ou R selon le type d'impuretés auquel ils se rapportent. Nous avons déterminé les coefficients permettant de calculer le temps de relaxation, les expressions des coefficients A_{2D}, B_{2D}, C_{2D} sont résumées dans les tableaux II-1, II-2, II-3. En considérant la quantité sans dimension $Q_{xy} = q_{xy}L$, le coefficient B_{2D} est calculé de la façon suivante.

$$B_{2D}^B(Q_{xy}) = \int_0^L N_{i3D}^B(z) [A_{2D}^B(Q_{xy}, z)]^2 dz \quad a)$$

(éq II-45)

$$B_{2D}^R(Q_{xy}) = \int_{L+S}^{L+S+D} N_{i3D}^R(z) [A_{2D}^R(Q_{xy}, z)]^2 dz \quad b)$$

Le dopage dans les différentes zones est supposé homogène

$$N_{i3D}^B(z) = \begin{cases} N_{i3D}^B & 0 \leq z \leq L \\ 0 & \text{ailleurs} \end{cases}$$

$$N_{i3D}^R(z) = \begin{cases} N_{i3D}^R & L+S \leq z \leq L+S+D \\ 0 & \text{ailleurs} \end{cases} \quad (\text{éq II-46})$$

Nous consacrons la suite de ce paragraphe à l'étude de l'influence de différents paramètres physiques (densité électronique, température) et géométriques (dimension des différentes zones) sur la mobilité électronique limitée par l'interaction sur impuretés. Nous avons choisi de faire varier successivement chacun de ces paramètres. Sauf quand cela sera spécifié sur les figures, les paramètres des calculs sont ceux de la figure II-2. Nous discutons également de l'influence du modèle de fonction d'onde et de l'importance de l'effet d'écran. Les résultats obtenus pour les impuretés Background et Remote seront présentés en parallèle.

Fonction d'onde approximée par un dirac [FOD]	
Impuretés "Background"	
	$A_{2D[FOD]}^B(Q_{xy}, z) = \frac{1}{2Q_{xy}} \exp\left(-Q_{xy} \left \frac{z}{L} - \frac{1}{2} \right \right)$
	$B_{2D[FOD]}^B(Q_{xy}) = N_{i3D}^B L \left[\frac{1 - \exp - Q_{xy}}{4Q_{xy}^3} \right]$
Impuretés "Remote"	
	$A_{2D[FOD]}^R(Q_{xy}, z) = \frac{1}{2Q_{xy}} \exp\left(-Q_{xy} \left \frac{z}{L} - \frac{1}{2} \right \right)$
	$B_{2D[FOD]}^R(Q_{xy}) = N_{i3D}^R L \left[\frac{\exp - Q_{xy}}{8Q_{xy}^3} \right] \left[\exp\left(-2Q_{xy} \frac{S}{L}\right) - \exp\left(-2Q_{xy} \frac{S+D}{L}\right) \right]$
Facteur C_{2D}	
	$C_{2D[FOD]}(Q_{xy}) = \frac{1}{2Q_{xy}}$

Tableau II-1

Coefficients A_{2D} B_{2D} C_{2D} pour le modèle [FOD]

Fonction d'onde approximée par une constante [FOC]	
Impuretés "Background"	
$A_{2D[FOC]}^B(Q_{xy}, z) = \frac{1}{2Q_{xy}^3} \left[2 - \exp\left(-\frac{Q_{xy}z}{L}\right) - \exp\left(Q_{xy}\left(\frac{z}{L} - 1\right)\right) \right]$	
$B_{2D[FOC]}^B(Q_{xy}) = N_{i3D}^B L \left[\frac{16(\exp(-Q_{xy}) - 1) + 2(1 - \exp(-2Q_{xy})) + 4Q_{xy}(2 - \exp(-Q_{xy}))}{8Q_{xy}^5} \right]$	
Impuretés "Remote"	
$A_{2D[FOC]}^R(Q_{xy}, z) = \left[\frac{\exp(Q_{xy}) - 1}{2Q_{xy}^2} \right] \exp\left(-\frac{Q_{xy}z}{L}\right)$	
$B_{2D[FOC]}^R(Q_{xy}) = N_{i3D}^B L \left[\frac{\exp - Q_{xy} - 1}{2Q_{xy}^2} \right]^2 \left[\frac{\exp - 2Q_{xy}}{2Q_{xy}} \right] \left[\exp\left(-2Q_{xy} \frac{S}{L}\right) - \exp\left(-2Q_{xy} \frac{S+D}{L}\right) \right]$	
Facteur C_{2D}	
$C_{2D[FOC]}(Q_{xy}) = \frac{1}{2Q_{xy}^2} \left[1 + \frac{\exp(-Q_{xy}) - 1}{Q_{xy}} \right]$	

Tableau II-2

Coefficients A_{2D} B_{2D} C_{2D} pour le modèle [FOC]

Fonction d'onde d'un puits carré infini [FOS]
Impuretés "Background"
$A_{2D[FOS]}^B(Q_{xy}, z) = \frac{2\pi^2}{Q_{xy}^2(Q_{xy}^2 + 4\pi^2)} \left[\frac{Q_{xy}^2}{\pi^2} \sin^2\left(\frac{\pi z}{L}\right) + 2 - \exp\left(\frac{Q_{xy}z}{L}\right) - \exp\left(\frac{Q_{xy}z}{L}\right) \exp(Q_{xy}) \right]$
$B_{2D[FOS]}^B(Q_{xy}) = N_{i3D}^B L \left[\frac{4\pi^4}{Q_{xy}^4(Q_{xy}^2 + 4\pi^2)^2} \right] \times$ $\left[\frac{3Q_{xy}^4}{8\pi^4} + \frac{2Q_{xy}^2}{\pi^2} - \frac{8(1 - \exp - Q_{xy})(2Q_{xy}^2 + 4\pi^2)}{Q_{xy}(Q_{xy}^2 + 4\pi^2)} + \frac{1 - \exp - 2Q_{xy}}{Q_{xy}} + 4 + 2 \exp - Q_{xy} \right]$
Impuretés "Remote"
$A_{2D[FOS]}^R(Q_{xy}, z) = \frac{2\pi^2}{Q_{xy}^2(Q_{xy}^2 + 4\pi^2)} \left[\exp(Q_{xy}) - 1 \right] \exp\left(-\frac{Q_{xy}z}{L}\right)$
$B_{2D[FOS]}^R(Q_{xy}) = N_{i3D}^R L^3 \left[\frac{4\pi^4}{Q_{xy}^4(Q_{xy}^2 + 4\pi^2)^2} \right] \times$ $\frac{(\exp - Q_{xy} - 1)^2}{2Q_{xy}} \left[\exp\left(-Q_{xy} \frac{S}{L}\right) - \exp\left(-Q_{xy} \frac{S+D}{L}\right) \right]$
facteur C_{2D}
$C_{2D[FOS]} = \frac{2\pi^2}{Q_{xy}^3(Q_{xy}^2 + 4\pi^2)^2} \left[Q_{xy}(3Q_{xy}^2 + 8\pi^2)(Q_{xy}^2 + 4\pi^2) - 32\pi^4(1 - \exp(-Q_{xy})) \right]$

Tableau II-3

Coefficients A_{2D} B_{2D} C_{2D} pour le modèle [FOS]

II.2.2.1 Influence de la largeur de puits

A $T=77K$ pour une densité électronique de $10^{16} m^{-2}$ nous avons tracé la mobilité en fonction de la largeur du puits quantique L (Fig. II-3). Quand L tend vers 0, nous constatons que les différents modèles de fonction d'onde donnent les mêmes résultats. En revanche, les écarts peuvent être importants quand la largeur de puits est grande. Quand L augmente, la mobilité fait de même en raison de l'accroissement de la distance moyenne électrons-impuretés. Les résultats obtenus sont en contradiction avec ceux obtenus par Lee [17] et mis en doute par ailleurs [18]. Nous avons montré [19] que les résultats publiés par Lee étaient erronés. La mobilité dûe aux impuretés Remote calculée en négligeant l'écrantage a été tracée sur la figure II-3 a). On observe que $\mu_{[FOC]}^R < \mu_{[FOS]}^R < \mu_{[FOD]}^R$, l'ordonnement des courbes s'explique par le fait que l'éloignement moyen électrons-impuretés augmente dans ce même ordre. En particulier l'approximation [FOC] qui rend possible la présence des électrons très près des zones dopées donne la plus faible mobilité.

Contrairement à la mobilité Remote, la mobilité Background diminue avec la largeur de puits du fait de l'augmentation du nombre d'électrons présents dans le puits. Si l'on omet l'effet d'écran, le classement des mobilités est inversé par rapport à celui observé pour l'interaction Remote : $\mu_{[FOD]}^B < \mu_{[FOS]}^B < \mu_{[FOC]}^B$ parce que l'ordonnement des distances moyennes est également inversé. Si l'on tient compte de l'effet d'écran on remarque que la courbe $\mu_{[FOD]}^B$ se situe au-dessus de la courbe $\mu_{[FOS]}^B$. Ce phénomène vient du fait que le facteur $C_{2D[FOS]}(Q_{xy})$ intervenant au dénominateur du potentiel écranté a un comportement opposé à celui du potentiel nu. En effet sur la figure II-3 b) on observe que $C_{2D[FOD]}(Q_{xy}) > C_{2D[FOS]}(Q_{xy}) > C_{2D[FOC]}(Q_{xy})$. Quand Q_{xy} tend vers 0, les différentes approches donnent le même résultat : $C_{2D}(Q_{xy})$ tend vers $+\infty$.

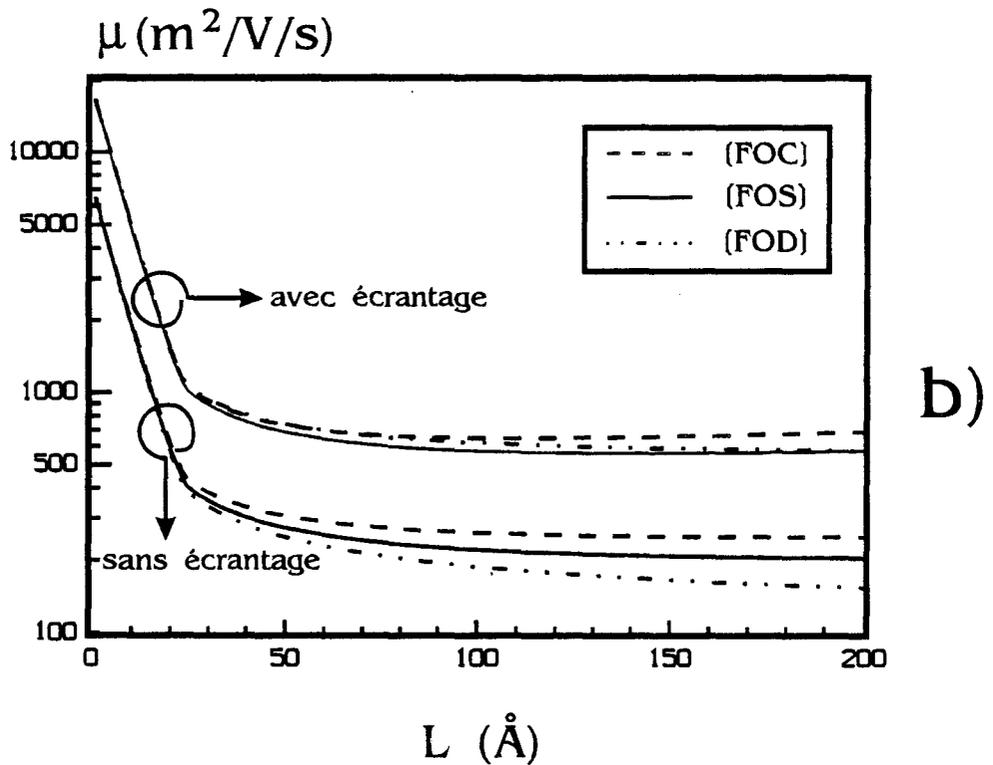
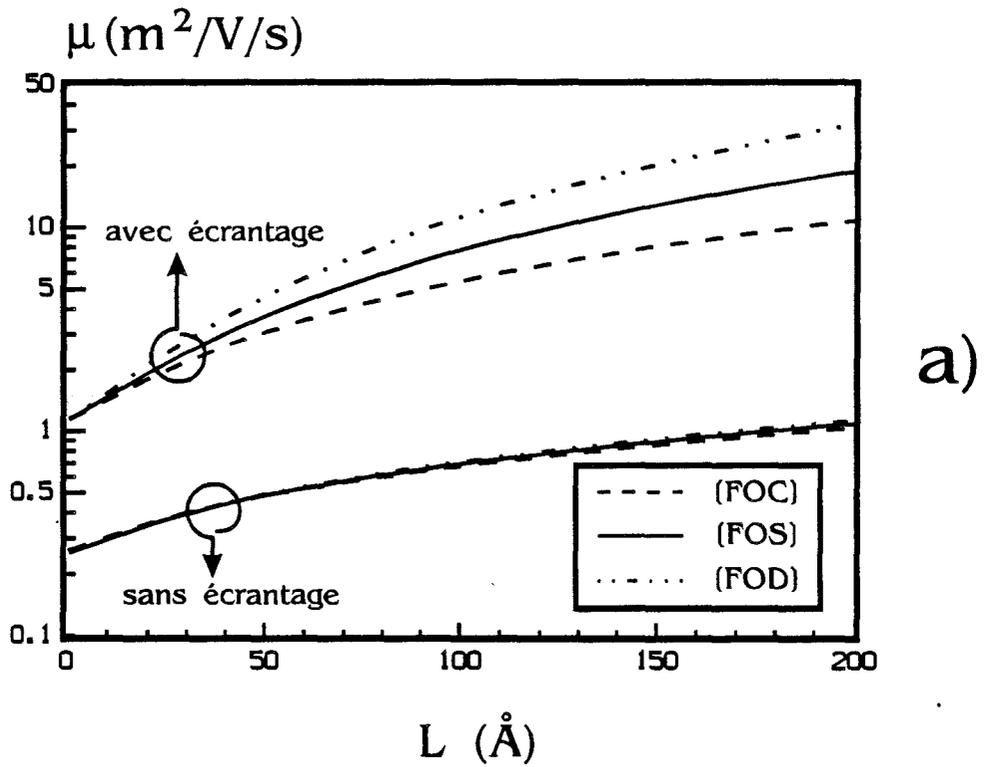


Figure II-3

Evolution des mobilités avec la largeur de puits

a) Remote

b) Background

II.2.2.2 Influence de la densité

Nous avons étudié l'effet de la densité électronique sur la mobilité (Fig. II-5 a) et II-5 b)). On observe que la mobilité augmente toujours avec la densité. Si l'on considère les cas où l'écrantage est négligé, cette évolution est due à la variation de la position du niveau de Fermi. Ce paramètre physique est très important car il intervient à plusieurs niveaux dans le calcul de la mobilité.

L'effet d'écran a pour effet de diminuer le potentiel d'interaction électrons-impuretés. Il contribue donc à augmenter la mobilité. Le facteur d'écran S_{2D} , qui donne l'amplitude de l'effet d'écran, augmente avec la densité électronique (Fig. II-4). Ceci explique que l'écart entre les courbes "écrantée" et "non écrantée" soit faible quand la densité est peu élevée et qu'il augmente quand la densité croît. La figure II-4 montre également une saturation du facteur d'écran aux fortes densités. Notons encore que, pour les fortes densités, la température joue peu sur la valeur de S_{2D} .

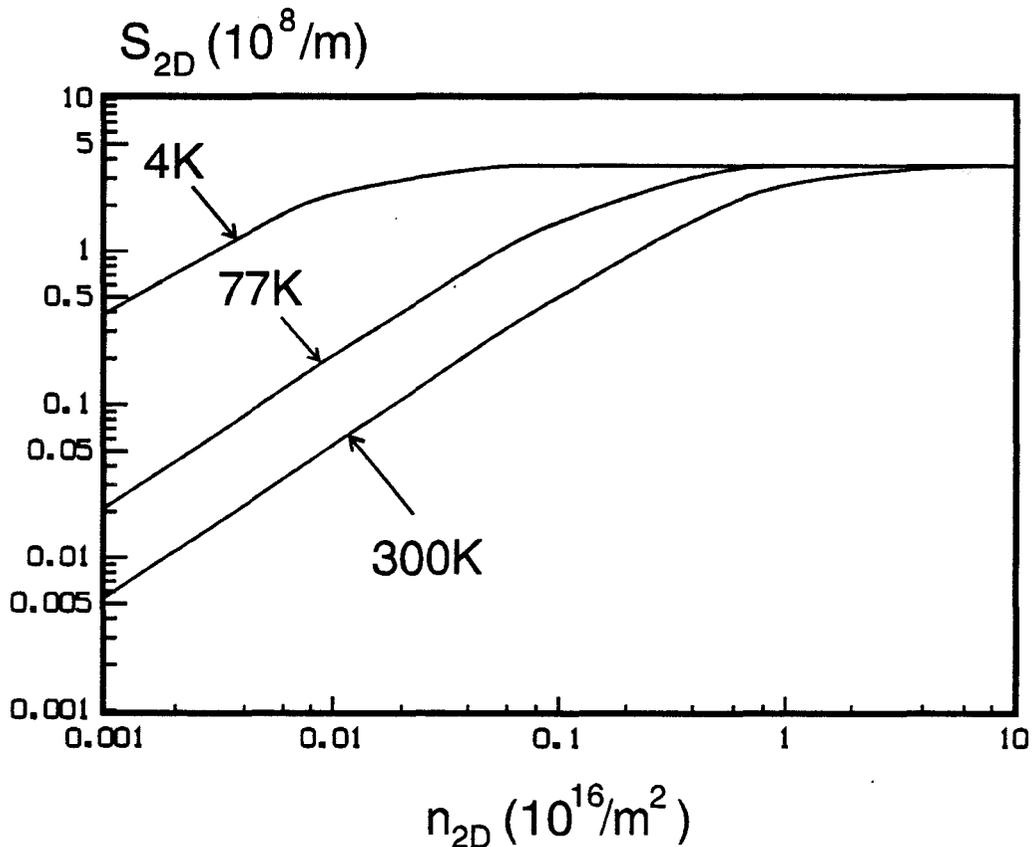


Figure II-4

Evolution du facteur d'écran avec la densité

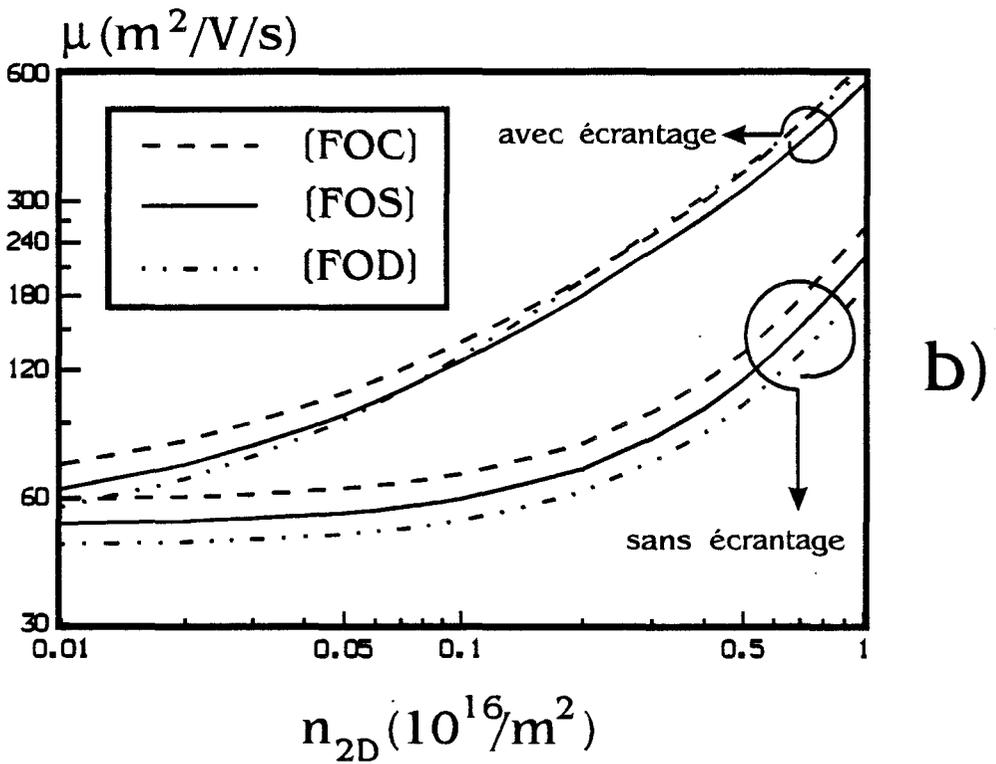
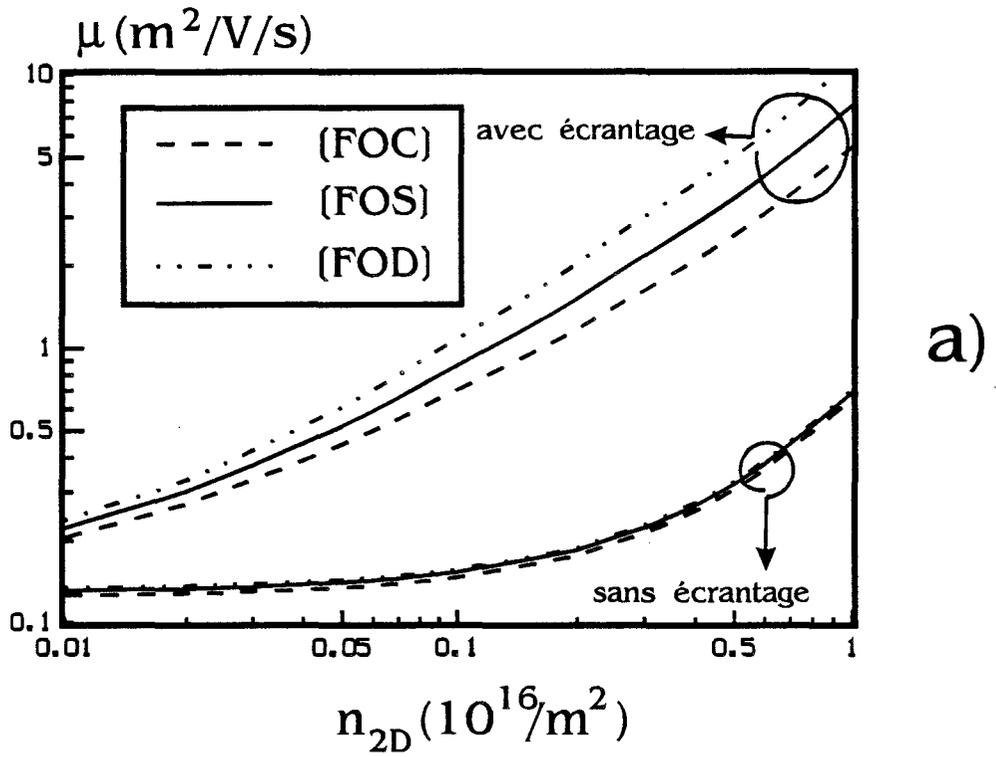


Figure II-5

Evolution des mobilités avec la densité électronique

a) Remote

b) Background

Chapitre II

II.2.2.3 Influence de la température

Les figures II-6 a) et II-6 b) présentent l'évolution avec la température des mobilités Remote et Background d'un gaz d'électrons de densité $n_{2D} = 10^{16} \text{ m}^{-2}$. Hirakawa et Sakaki [20] ont observé expérimentalement ce phénomène. En l'absence d'écrantage, le seul effet de l'accroissement de l'énergie moyenne des électrons avec la température entraîne une augmentation de la mobilité. La figure II-4 montre que le facteur d'écran diminue lorsque la température augmente. C'est donc à basse température que l'écrantage est le plus fort ; nous observons ceci sur les figures II-6 a) et II-6 b), les courbes correspondant aux mobilités "écrantées" et "non écrantées" se rapprochent quand T augmente.

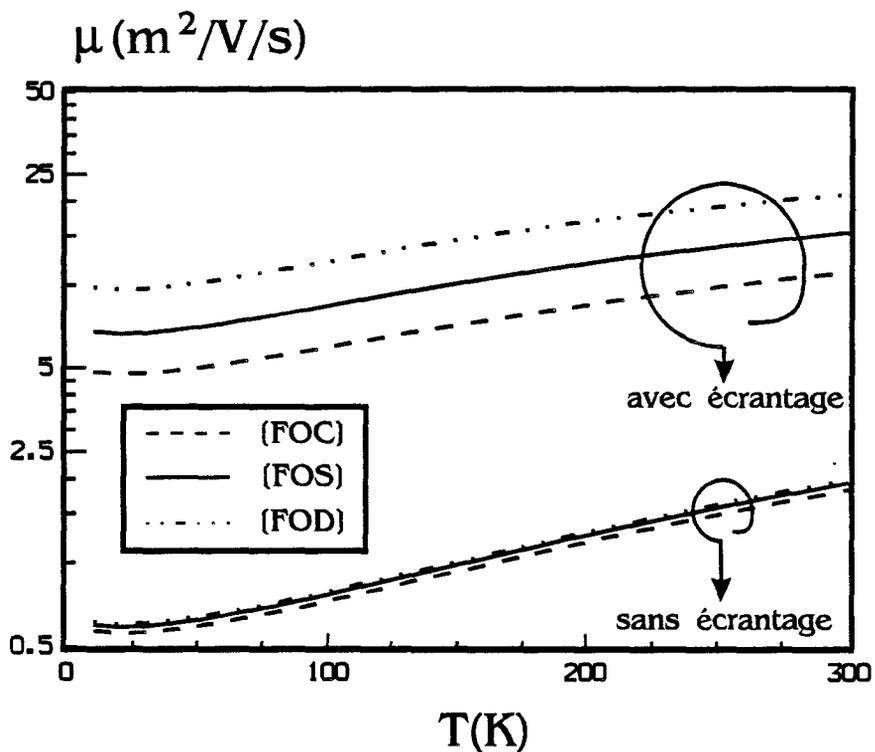
Nous supposons maintenant que la densité électronique vaut $n_{2D} = 10^{14} \text{ m}^{-2}$, les autres paramètres conservant les mêmes valeurs que précédemment. Nous observons (Fig. II-7 a) Fig. II-7 b)) que la mobilité non écrantée augmente avec T en raison de l'accroissement de l'énergie moyenne. En revanche, le comportement de la mobilité écrantée est quelque peu différent. Bien que la densité électronique soit faible, l'effet d'écran joue un rôle important aux très basses températures. Comme l'écrantage diminue avec la température, on observe, dans la première partie de la courbe, une décroissance de la mobilité avec T. Quand la température atteint environ 20K, l'effet d'écran devient alors négligeable devant celui de l'énergie moyenne, ce qui entraîne une augmentation de la mobilité.

II.2.2.4 Influence de l'épaisseur de spacer

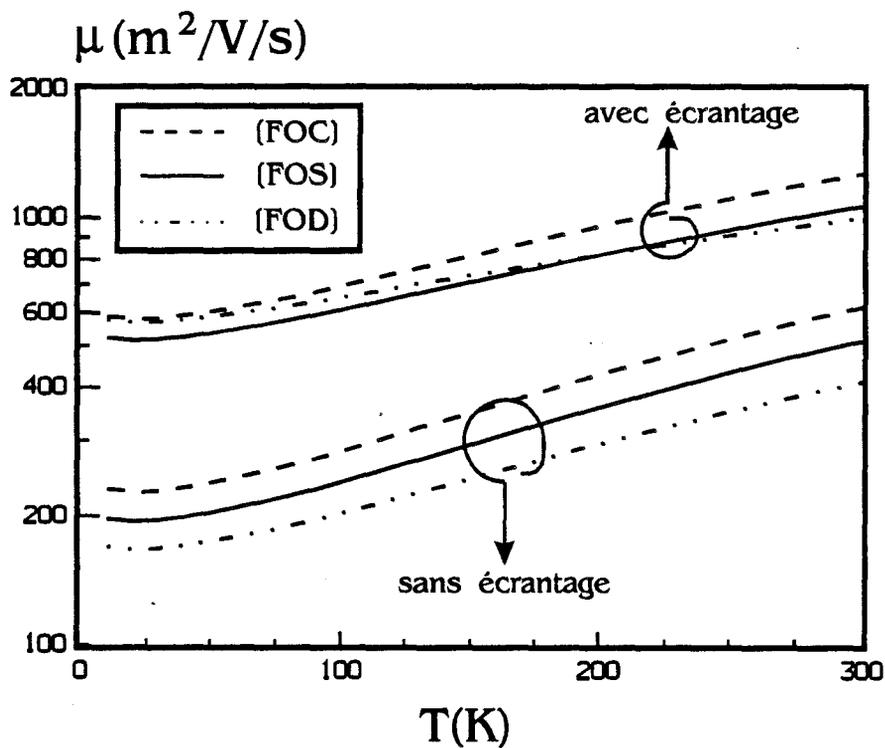
L'introduction d'un spacer contribue à éloigner les électrons des impuretés, ce qui entraîne une augmentation de la mobilité. L'évolution de la mobilité avec ce paramètre fait l'objet de la figure II-8. Nous constatons quantitativement l'interêt de la couche d'espacement dans les structures à modulation de dopage. Ceci renforce la conviction que nous avons initialement, de l'importance de tenir compte de l'effet d'éloignement dans nos calculs.

II.2.2.5 Influence de l'épaisseur de zone dopée

Quand l'épaisseur de la zone dopée augmente, le nombre d'impuretés croît, entraînant ainsi une diminution de la mobilité. Au delà d'une certaine épaisseur, les impuretés les plus éloignées finissent par ne plus jouer aucun rôle et la mobilité sature.



a)



b)

Figure II-6

Evolution des mobilités avec la température pour $n_{2D} = 10^{16} \text{m}^{-2}$

a) Remote

b) Background

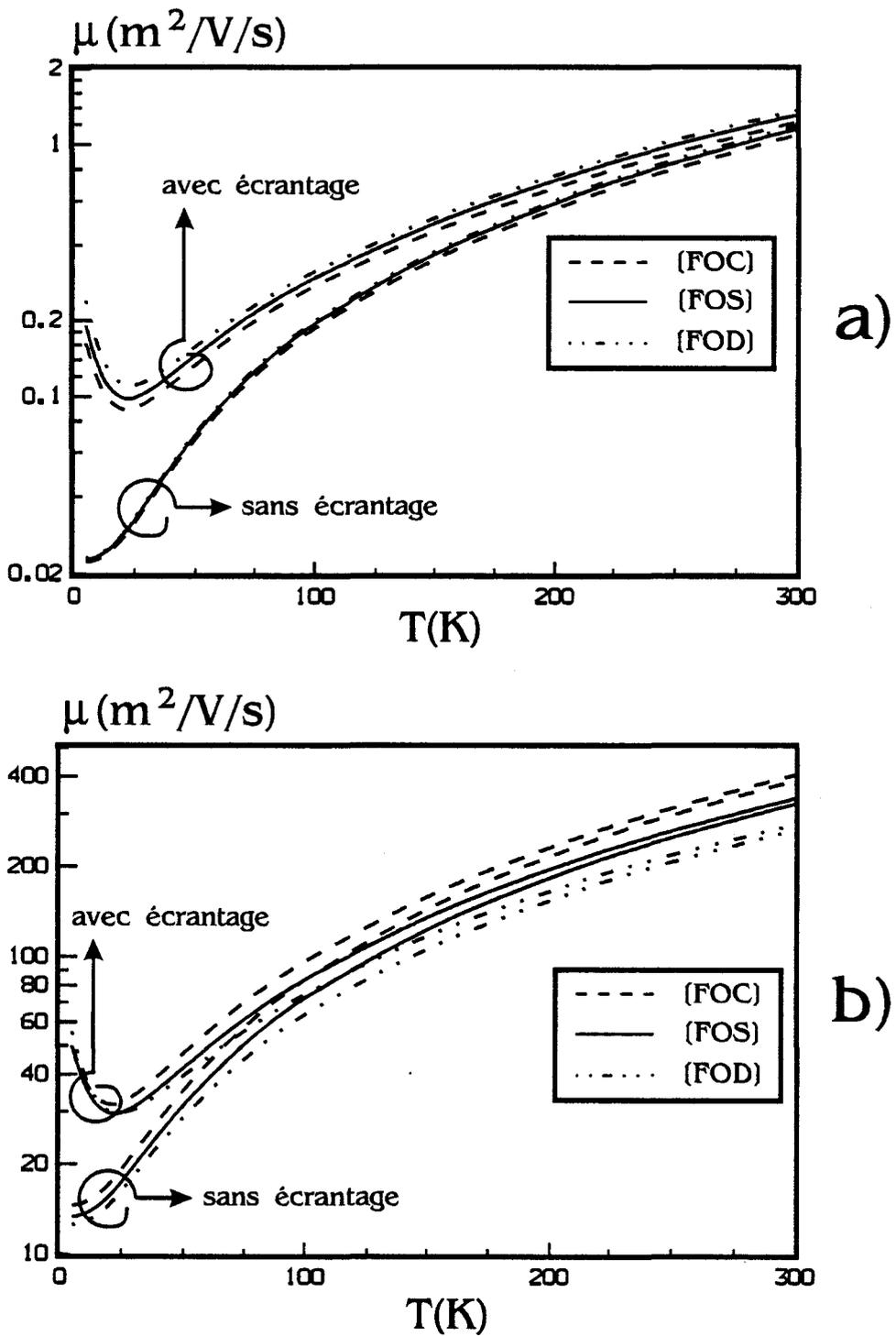


Figure II-7

Evolution des mobilités avec la température pour $n_{2D} = 10^{14} \text{ m}^{-2}$

a) Remote

b) Background

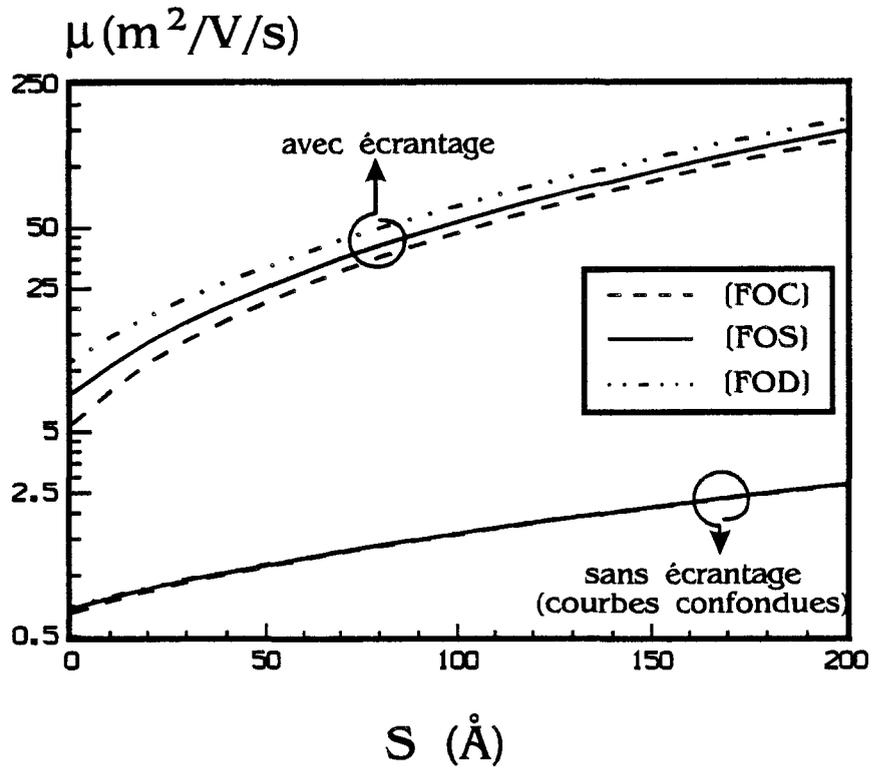


Figure II-8

Evolution de la mobilité Remote avec l'épaisseur de spacer

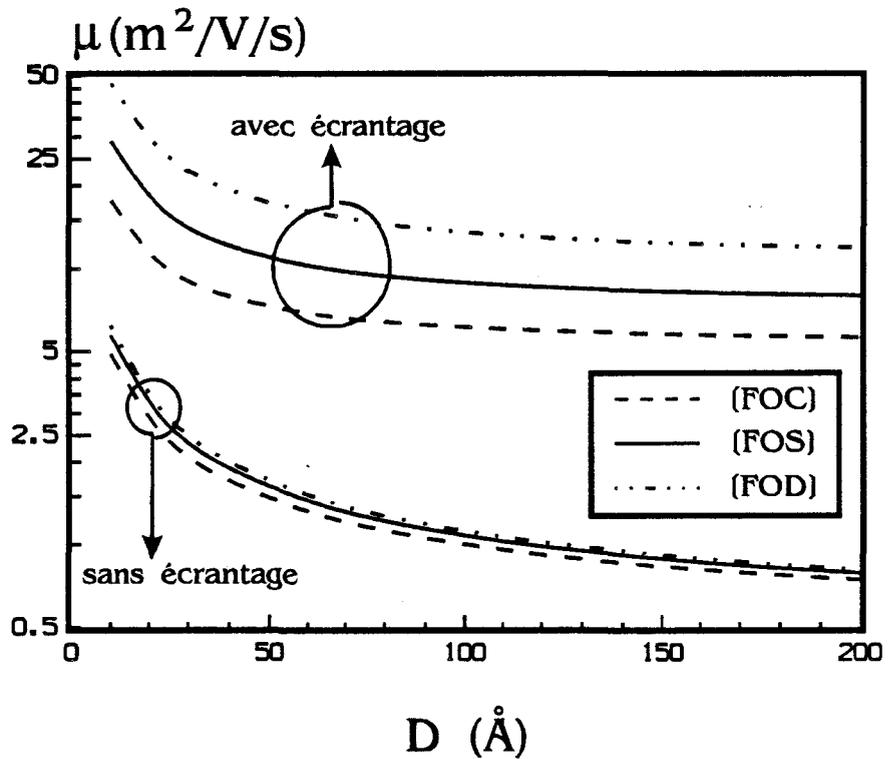


Figure II-9

Evolution de la mobilité Remote avec l'épaisseur de la zone dopée

II.2.2.6 Commentaires

Lee [21] a effectué le calcul de la fonction diélectrique de Lindhard dans un gaz quasi bidimensionnel en considérant la fonction enveloppe d'un puits carré infini. Ses résultats comparés à ceux obtenus par la méthode de Stern-Howard donnent : Pour q faible un bon accord entre les deux méthodes alors que pour q élevé la méthode de Stern-Howard surestime l'écrantage. Dans un gaz 2D le temps de relaxation du moment $\tau_m(E)$ décroît avec l'énergie. Ce sont donc les faibles valeurs de q qui apportent la plus forte contribution à la mobilité, ce qui explique pourquoi l'approximation de Stern-Howard donne des résultats satisfaisants. Dans ce qui suit, nous continuerons à utiliser cette méthode dont la mise en oeuvre est plus simple que celle de Lindhard et qui donne des résultats satisfaisants dans les cas pratiques.

II.2.3 Etude d'une structure réelle

Les résultats obtenus pour un puits carré infini en utilisant des fonctions d'onde approchées [FOD] et [FOC] ne conduisent pas systématiquement à des erreurs très importantes. Ce qui suggère que la mobilité n'est pas trop sensible au détail des fonctions d'onde. Nous montrons qu'en dépit de sa simplicité l'approximation [FOD] reproduit correctement certains aspects importants de la répartition des électrons comme la distance moyenne avec les impuretés distantes. L'approximation du puits carré infini doit être considérée comme une première approche. C'est une approximation grossière des systèmes réalistes, dans la mesure où elle n'autorise pas la présence d'électrons hors du puits quantique. Dans cette partie, nous évaluons numériquement sur un exemple les conséquences de cette approximation. Comme il n'existe pas dans le cas d'une hétérostructure réelle de solution analytique aux équations de Schrödinger et Poisson couplées, nous avons utilisé la procédure numérique décrite au chapitre I pour obtenir les fonctions d'ondes. Le calcul des coefficients A_{2D}, B_{2D}, C_{2D} est alors entièrement numérique. Cette manière de procéder augmente sensiblement la durée de calcul du temps de relaxation.

II.2.3.1 Transport multisousbandes

Interaction intrasousbande

Dans un puits quantique, il est rare, même à champ nul, qu'une seule sousbande soit peuplée. Il est alors important de connaître la population dans les différentes sousbandes pour évaluer la validité de l'approximation monosousbande. Quand l'aspect multisousbande ne peut être négligé, une première approche consiste à calculer par la méthode exposée précédemment une mobilité par sousbande et obtenir une mobilité globale par pondération.

Interaction intersousbande

Si l'on considère plusieurs sousbandes les électrons ont, théoriquement, la possibilité de changer de sousbande lors d'une interaction avec une impureté ionisée. Nous avons précédemment démontré que le potentiel d'interaction électron-impureté était proportionnel à la fonction de Green G_{2D} . Cette fonction décroissant rapidement avec Q , il en va donc de même pour le potentiel d'interaction et pour l'élément de matrice de transition. Dans le cas de l'interaction intersousbande le vecteur d'onde de déviation minimum vaut $q_{min} = 0$, la principale contribution vient donc des valeurs de q proches de 0. Pour l'interaction intersousbande l'énergie minimale échangée au cours de l'interaction d'une sousbande i vers une sousbande j vaut $E_{min} = E_j - E_i$. Le vecteur d'onde minimal d'interaction vaut dans ces conditions $q_{min} = \sqrt{2m^* E_{min} / \hbar^2}$, il est donc supérieur à 0 et la contribution au temps de relaxation sera inférieure à celle de l'interaction intrasousbande. Ceci explique que l'interaction intersousbande soit généralement négligeable devant l'interaction intrasousbande.

D'autre part Yokoyama et Hess [15] ont montré que l'interaction intersousbande due aux impuretés ionisées ne jouait un rôle que lorsque l'énergie des électrons est élevée. Or dans ces conditions les collisions optiques polaires sont prépondérantes. Nous négligerons donc l'interaction intersousbande.

La mise en équation du phénomène d'écrantage se trouve fortement compliquée par la prise en compte de plusieurs sousbandes. Siggia et Kwok [22] ont proposé une généralisation de la méthode de Lindhard aux systèmes multisousbandes. Dans l'approximation de la phase aléatoire, ils ont montré que le potentiel écranté pouvait être obtenu à partir d'une matrice diélectrique :

$$V_{n_y}(q_{xy}) = \sum_{kl} \epsilon_{klj}(q_{xy}) V_{e_n}(q_{xy}) \tag{éq II-47}$$

$$\epsilon_{klj}(q_{xy}) = \delta_{kl} \delta_{ij} + \frac{\Pi_{[L]}^{kl}(q_{xy}) F_{klj}(q_{xy})}{\epsilon_0 \epsilon_r} \tag{a)}$$

$$F_{klj}(q_{xy}) = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \xi_k(z) \xi_l(z) \xi_i(z') \xi_j(z') G_{2D}(q_{xy}, z, z') dz dz' \tag{b)}$$

Où $\Pi_{[L]}^{kl}(q_{xy})$ est la polarisabilité calculée dans l'approximation de la phase aléatoire (Lindhard) pour une transition de la sousbande k vers la sousbande l .

II.2.3.2 Ecrantage secondaire

Le formalisme de Siggia et Kwok, bien que d'écriture relativement simple, est difficile à intégrer dans une simulation Monte-Carlo. En effet, il nécessite l'inversion d'un tenseur d'ordre 4, ce qui conduit à des temps de calculs très importants. En suivant l'approche de Stern et Howard, Price [23] a proposé une méthode simplifiée permettant de prendre en compte l'écrantage multisousbandes. Nous exposons cette méthode en considérant deux sousbandes. Pour évaluer l'effet d'écran des électrons des sousbandes i et j sur le potentiel d'interaction des électrons de la sousbande j , nous considérons l'équation II-38, que nous écrivons pour deux sousbandes i et j . On obtient ainsi le système d'équations :

$$\begin{cases} V_i = \frac{e}{\epsilon_0 \epsilon_r} A_{2D}^i - S_{2D}^i C_{2D}^{ii} V_i - S_{2D}^j C_{2D}^{ij} V_j \\ V_j = \frac{e}{\epsilon_0 \epsilon_r} A_{2D}^j - S_{2D}^j C_{2D}^{jj} V_j - S_{2D}^i C_{2D}^{ji} V_i \end{cases} \quad (\text{éq II-49})$$

avec

$$\begin{aligned} A_{2D}^i(q_{xy}, z) &= \int_{-\infty}^{+\infty} G_{2D}(q_{xy}, z, z') g_i(z') dz' & a) \\ C_{2D}^{ij}(q_{xy}) &= \int_{-\infty}^{+\infty} A_{2D}^i(q_{xy}, z) g_j(z) dz & b) \\ C_{2D}^{ij}(q_{xy}) &= \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} G_{2D}(q_{xy}, z, z') g_i(z) g_j(z') dz dz' & c) \end{aligned} \quad (\text{éq II-50})$$

La résolution de ce système donne le potentiel d'interaction d'un électron de la sousbande j avec une impureté. Ce potentiel tient compte des effets d'écran induits par les électrons des sousbandes i et j .

$$V_j = \frac{e}{\epsilon_0 \epsilon_r} \left[A_{2D}^j - \frac{S_{2D}^i C_{2D}^{ij}}{1 + S_{2D}^i C_{2D}^{ii}} A_{2D}^i \right] \left[\frac{1 + S_{2D}^i C_{2D}^{ii}}{(1 + S_{2D}^i C_{2D}^{ii})(1 + S_{2D}^j C_{2D}^{jj}) - S_{2D}^i S_{2D}^j (C_{2D}^{ij})^2} \right] \quad (\text{éq II-51})$$

L'effet d'écran sur une sousbande j , induit par les électrons des autres sousbandes, est connu sous le nom d'écrantage secondaire, par opposition à l'écrantage dû aux électrons de la sousbande j appelé écrantage primaire. L'écrantage induit par la sousbande i est en général d'autant plus faible que i est élevé puisque le nombre d'électrons par sousbande diminue avec i ; pour cette raison, nous ne

considérons le phénomène d'écrantage secondaire que quand il est induit par les électrons de la sousbande fondamentale.

II.2.3.3 Etude d'une structure réelle

Nous avons considéré la structure décrite sur la figure II-10, le dopage résiduel dans le puits étant faible, l'interaction avec les impuretés locales est négligeable. Seules les impuretés distantes contribuent à la mobilité, et cela d'autant plus que la structure étudiée ne comporte pas de spacer.

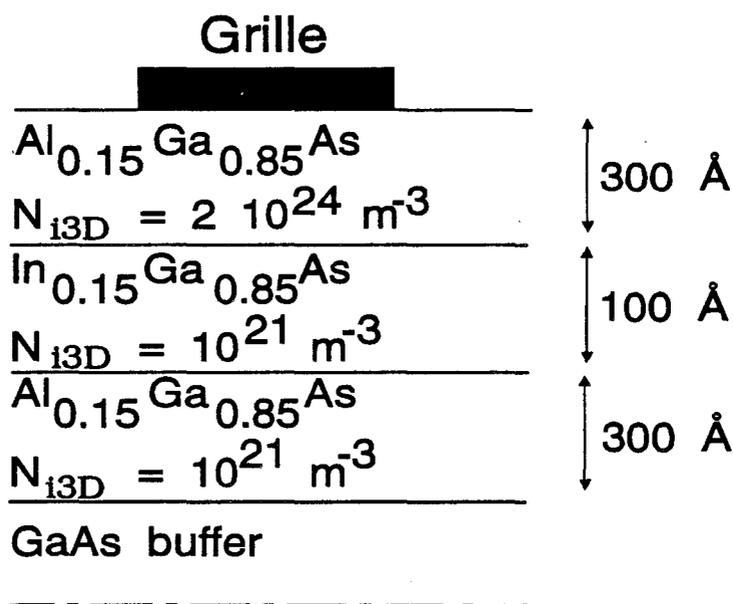


Figure II-10

Structure réelle étudiée

La mobilité calculée prend en compte le transport multisousbandes en considérant le formalisme de l'écrantage secondaire et l'interaction intersousbandes est négligée. Nous comparons les mobilités obtenues avec, d'une part, les fonctions d'ondes autocohérentes et, d'autre part, les fonctions d'ondes [FOS] du puits carré infini (absence d'électrons dans la zone dopée). La température est fixée à 77K, les calculs ont été effectués pour deux densités électroniques $n_{2D} = 3 \cdot 10^{15} \text{ m}^{-2}$, $n_{2D} = 10^{16} \text{ m}^{-2}$. Sur la figure II-11 nous avons représenté les évolutions de la mobilité et de la proportion d'électrons dans la zone dopée en fonction de la hauteur de barrière ΔE_c . Quand ΔE_c est faible, le confinement est peu important et nombre d'électrons se trouvent dans la zone dopée. Il en résulte une forte interaction avec les impuretés et une faible mobilité. Au fur et à mesure que ΔE_c croît, la séparation spatiale entre les électrons et les impuretés augmente et entraîne une forte amélioration de la mobilité. C'est ainsi que pour $\Delta E_c = 0.23\text{eV}$, valeur réelle de la hauteur de barrière [24] l'approximation du puits carré infini surestime la mobilité de 35% pour une densité $n_{2D} = 3 \cdot 10^{15} \text{ m}^{-2}$ et de 100% pour $n_{2D} = 10^{16} \text{ m}^{-2}$.

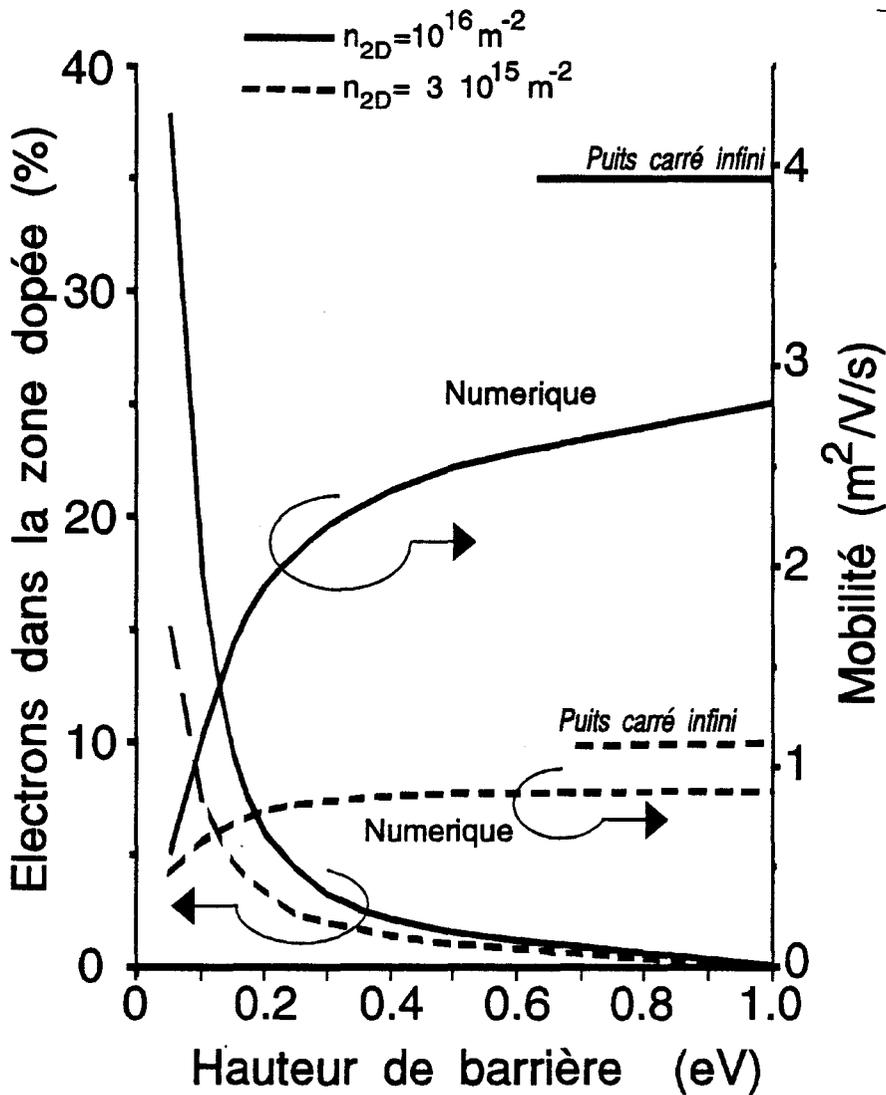


Figure II-11

Evolution de la mobilité avec la hauteur de barrière

II.2.3.4 Conclusion

Dans ce paragraphe nous avons étudié l'influence des fonctions d'ondes sur la mobilité limitée par l'interaction sur impureté dans des puits quantiques. Dans un premier temps, nous avons considéré le cas idéal d'un puits carré infini et nous avons montré que les résultats obtenus avec les fonctions d'ondes exactes et approchées conduisaient qualitativement aux mêmes résultats. Ce qui suggère que la mobilité n'est pas trop sensible au détail de la fonction d'onde. Ensuite nous avons montré que le nombre d'électrons dans la zone dopée variait avec la hauteur de barrière et que cela peut influencer fortement la mobilité. La méthode d'étude de l'interaction sur impuretés dans des structures réelles, développée dans ce paragraphe, sera utilisée dans le modèle Monte-Carlo présenté dans le chapitre III.

II.3 ETUDE DE L'INTERACTION ELECTRONS-IMPURETES DANS DES GAZ D'ELECTRONS 1D

Dans la première partie du chapitre I nous nous sommes attachés à décrire les tendances d'évolution des structures utilisées pour réaliser des composants électroniques. Des réalisations expérimentales ont montré que l'on pouvait imposer un mouvement unidimensionnel aux électrons. Dans ce contexte, il nous est apparu intéressant d'étendre notre étude de l'interaction électrons-impuretés ionisées au cas des gaz électroniques unidimensionnels. Sakaki [25] a déterminé la mobilité électronique limitée par l'interaction sur impuretés dans un gaz strictement 1D à température nulle. Par ce calcul simple, où l'effet d'écran et les paramètres géométriques de la structure ne sont pas introduits, Sakaki a prédit la possibilité de supprimer presque totalement, à basse température, l'effet de l'interaction sur impuretés ionisées. Par la suite, plusieurs auteurs [26] [27] [28] [29] se sont également intéressés à ce sujet. Fishmann [30] a développé un modèle analytique, Lee [27] a étudié les propriétés de la fonction diélectrique à température nulle, Weng [31] a pris en compte plusieurs sousbandes. Notre objectif est de développer un modèle de calcul de mobilité qui nous permette d'étudier l'influence des principaux paramètres physiques et géométriques. L'expérience que nous avons des systèmes bidimensionnels nous a incité à emprunter la même démarche, en adoptant la méthode de Stern-Howard.

II.3.1 Approche théorique

Le potentiel nu 1D est obtenu par transformation de Fourier du potentiel d'interaction coulombien 3D. Si l'on choisit y et z comme directions de quantification, l'électron est susceptible de se déplacer dans la direction x et le potentiel d'interaction vaut :

$$V_{n1D}(q_x, y, z) = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon_r} 2K_0(q_x\sqrt{y^2+z^2}) \quad (\text{éq II-52})$$

Où K_i est la fonction de Bessel modifiée de seconde espèce d'ordre i .

C'est ce potentiel que Sakaki a utilisé dans son approche. On notera l'existence d'une singularité logarithmique à l'origine ($V \rightarrow +\infty$ quand $(x, y) \rightarrow (0, 0)$).

II.3.1.1 Méthode de Stern Howard

II.3.1.1.1 Cas général

Dans le but de prendre en compte l'effet d'écran nous avons adapté la méthode de Stern-Howard au cas des gaz d'électrons 1D. On calcule donc l'effet d'une variation du potentiel sur les niveaux d'énergie et sur la charge totale.

$$\delta E_{ij}(x) = -e\bar{V}_{ij}(x) = -e \int \int \delta V(x, y, z) g_{ij}(y, z) dy dz \quad (\text{éq II-53})$$

Où $g_{ij}(y, z)$ représente la probabilité de présence d'un électron de la sousbande d'indices i - j .

Chapitre II

La variation de densité électronique est alors donnée par :

$$dn_{1D} = \sum_{ij} dn_{1D}^{ij} g_{ij}(y, z) = \sum_{ij} \frac{\partial n_{1D}^{ij}}{\partial E_{ij}} g_{ij}(y, z) dE_{ij} \quad (\text{éq II-54})$$

Le potentiel électrostatique est solution de l'équation suivante :

$$\Delta V(x, y, z) - \sum_{ij} \frac{e}{\epsilon_0 \epsilon_r} \frac{\partial n_{1D}^{ij}}{\partial E_{ij}} g_{ij}(y, z) \bar{V}_{ij}(x) = \frac{-Ze}{\epsilon_0 \epsilon_r} \delta(x - x_0) \delta(y - y_0) \delta(z - z_0) \quad (\text{éq II-55})$$

Nous définissons le facteur d'écran pour un gaz 1D,

$$S_{1D}^{ij} = \frac{e}{\epsilon_0 \epsilon_r} \frac{\partial n_{1D}^{ij}}{\partial E_{ij}} \quad (\text{éq II-56})$$

qui s'exprime à l'aide de fonctions de Fermi (annexe I) :

$$S_{1D}^{ij} = \frac{n_{1D} e^2}{\epsilon_0 \epsilon_r kT} \frac{F_{-3/2}(\eta_{ij})}{F_{-1/2}(\eta_{ij})} \text{ avec } \eta_{ij} = \frac{E_F - E_{ij}}{kT} \quad (\text{éq II-57})$$

En introduisant le facteur d'écran, l'équation de Poisson prend la forme suivante :

$$\Delta V(x, y, z) - \sum_{ij} S_{1D}^{ij} g_{ij}(y, z) \bar{V}_{ij}(x) = \frac{-Ze}{\epsilon_0 \epsilon_r} \delta(x - x_0) \delta(y - y_0) \delta(z - z_0) \quad (\text{éq II-58})$$

Par transformation de Fourier nous aboutissons à l'équation ci dessous :

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} - q_x^2 \right) V(q_x, y, z) = \rho(q_x, y, y_0, z, z_0) \quad (\text{éq II-59})$$

avec

$$\rho(q_x, y, y_0, z, z_0) = \sum_{ij} S_{1D}^{ij} g_{ij}(y, z) \bar{V}_{ij}(q_x) - \frac{Ze}{\epsilon_0 \epsilon_r} \delta(y - y_0) \delta(z - z_0) \quad (\text{éq II-60})$$

L'équation précédente est résolue par la méthode des fonctions de Green (Cf. annexe II). Le potentiel s'exprime alors à l'aide de la fonction de Green G_{1D} déterminée dans l'annexe V.

$$V(q_x, y, z) = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} G_{1D}(q_x, y, y_0, z, z_0) \rho(q_x, y, y_0, z, z_0) dy_0 dz_0 \quad (\text{éq II-61})$$

Chapitre II

II.3.1.1.2 Approximation monosousbande

Dans le cas d'un nombre quelconque de sousbandes, le potentiel électrostatique est très complexe à déterminer. Par contre, si l'on suppose qu'une seule sousbande est occupée, l'expression du potentiel écranté est relativement simple ; il peut s'écrire sous la même forme que dans un gaz 2D :

$$V_{e1D}(q_x, y, z) = e\bar{V}_{11}(q_x, y, z) = \frac{-Ze^2}{\epsilon_0\epsilon_r} \frac{A_{1D}(q_x, y, z)}{\epsilon_{1D[SH]}} \quad (\text{éq II-62})$$

Avec

$$A_{1D}(q_x, y, z) = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} G_{1D}(q_x, y, y_0, z, z_0) g_{11}(y_0, z_0) dy_0 dz_0 \quad (\text{éq II-63})$$

La fonction diélectrique obtenue par la méthode de Stern-Howard dépend d'un facteur d'écran $S_{1D} = S_{1D}^{11}$ et d'une intégrale de recouvrement C_{1D} :

$$\epsilon_{1D[SH]} = 1 + S_{1D} C_{1D}(q_x) \quad (\text{éq II-64})$$

Avec

$$C_{1D}(q_x) = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} A_{1D}(q_x, y, z) g_{11}(y, z) dy dz \quad a)$$

ou encore

$$C_{1D}(q_x) = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} G_{1D}(q_x, y, y_0, z, z_0) g_{11}(y, z) g_{11}(y_0, z_0) dy dz dy_0 dz_0 \quad b) \quad (\text{éq II-65})$$

Nous pouvons en déduire le carré de l'élément de matrice de transition.

$$M^2(q_x) = \frac{Z^2 e^4}{(\epsilon_0 \epsilon_r)^2} \frac{B_{1D}(q_x)}{(\epsilon_{1D[SH]})^2} \quad (\text{éq II-66})$$

avec

$$B_{1D}(q_x) = \int \int_{\text{zonedopée}} N_{i3D}(y, z) [A_{1D}(q_x, y, z)]^2 dy dz \quad (\text{éq II-67})$$

La détermination du temps de relaxation du moment, contrairement à ce qui se passe en 3D et 2D ne nécessite pas d'intégration.

Chapitre II

$$\frac{1}{\tau_m(E)} = \frac{2}{\hbar^3} \frac{m^*}{k_x(E)} M^2(2k_x) \quad (\text{éq II-68})$$

Pour déterminer la mobilité, nous utilisons ensuite L'équation I-52.

II.3.1.2 Méthode de Lindhard

Une alternative à la méthode présentée ci-dessus consiste à adopter l'approche de Lindhard et à considérer la dépendance en q_x de la polarisabilité. La détermination de la fonction diélectrique de Lindhard dans un système monosousbande donne :

$$\epsilon_{1D[L]}(q_x) = 1 + \frac{\Pi_{1D[L]}(q_x) C_{1D}(q_x)}{\epsilon_0 \epsilon_r} \quad (\text{éq II-69})$$

Lee [27] a déterminé la polarisabilité à T=0K :

$$\Pi_{1D[L]}(T=0, q_x) = \frac{2m^* e^2}{\pi \hbar^2} \frac{1}{q_x} \text{Log} \left| \frac{q_x + 2k_F}{q_x - 2k_F} \right| \quad (\text{éq II-70})$$

Nous obtenons la polarisabilité à une température T en utilisant la formule de Madauge [6] (équation I-40). La fonction diélectrique de Lindhard est ensuite introduite dans l'équation II-66 et le calcul de mobilité peut être mené jusqu'à son terme.

II.3.1.3 Etude de la polarisabilité

Dans un gaz unidimensionnel, le vecteur d'onde $k_x = k_F$ joue un rôle particulièrement important à basse température sur différentes grandeurs comme la polarisabilité et le temps de relaxation du moment. Les électrons ayant l'énergie de Fermi et subissant une interaction voient leur vecteur d'onde varier de $q_x = 2k_F$. Pour cette valeur de q_x , Lee a montré que le terme de polarisabilité de la fonction diélectrique présentait une divergence à $T=0K$. Ce phénomène caractéristique du transport 1D peut être observé sur la figure II-12. A température non nulle, la courbe présente un maximum pour $q = 2k_F$. Quand la température s'accroît, ce maximum tend à disparaître. Nous avons comparé les polarisabilités obtenues par les méthodes de Stern-Howard et de Lindhard à $T=4K$ et à $T=77K$ (Fig. II-13). Sur ces deux figures, nous constatons que, dans la première partie de la courbe, la méthode de Stern-Howard sous-estime la polarisabilité ; dans la seconde partie, nous observons la situation inverse. A $T=4K$ l'écart entre les deux méthodes est surtout important pour $q = 2k_F$. Ce n'est plus le cas pour $T=77K$ où l'écart est maximal pour $q > 2k_F$.

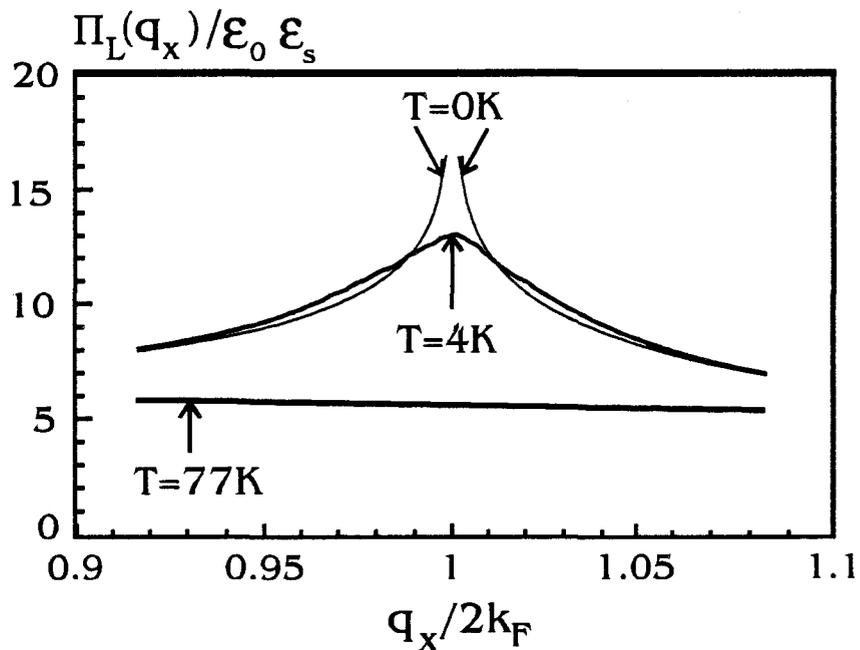


Figure II-12

Evolution de la polarisabilité avec $q_x / 2k_F$ pour différentes températures

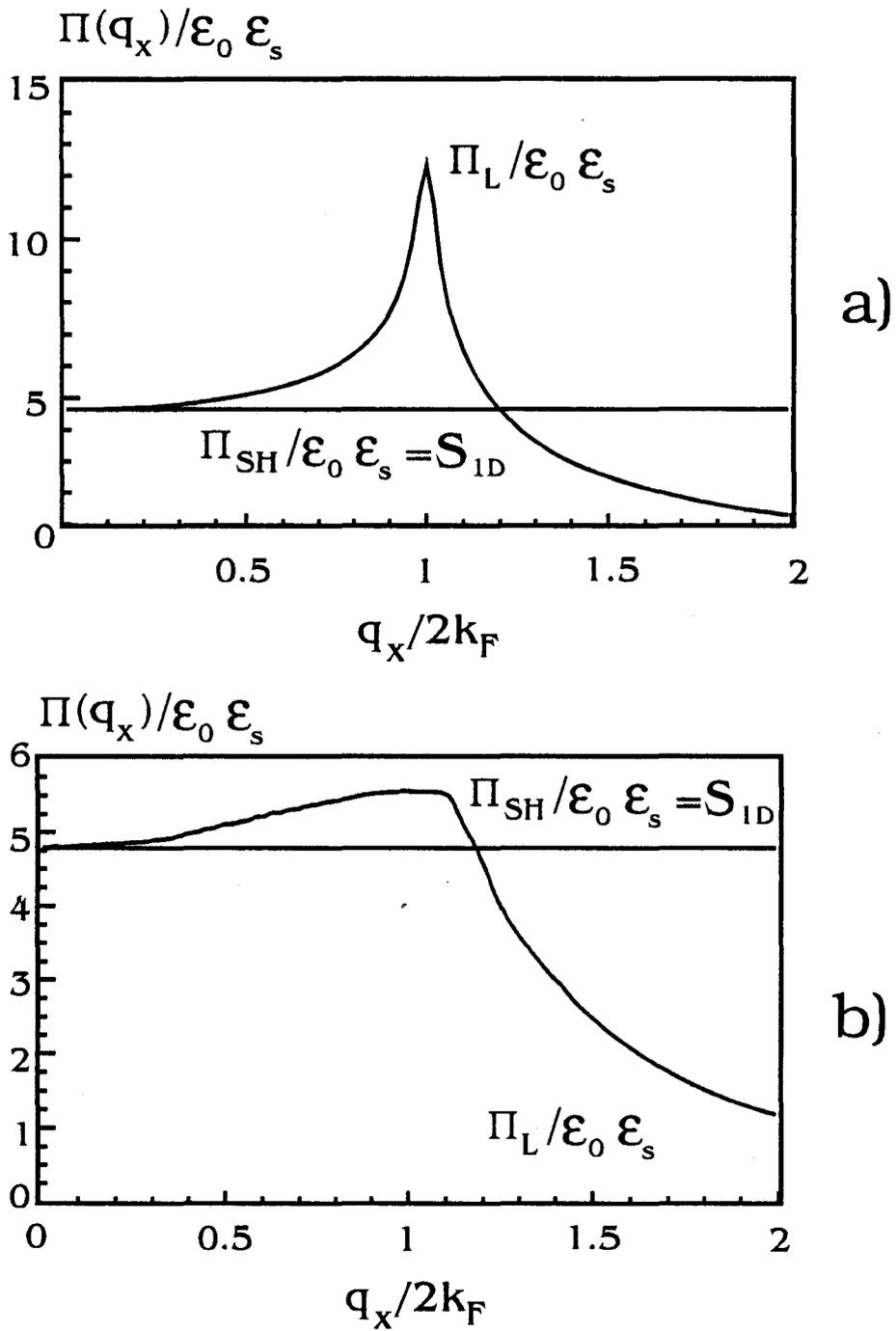


Figure II-13

Comparaison des polarisabilités
calculées par les méthodes de Stern-Howard et Lindhard

a) $T=4K$

b) $T=77K$

II.3.2 Approximation de la symétrie cylindrique des fonctions d'onde

Pour déterminer les coefficients A_{1D}, B_{1D}, C_{1D} qui interviennent dans le calcul du temps de relaxation, nous devons connaître la fonction de Green G_{1D} . Cette fonction dépend dans le plan $y\theta z$ de quatre variables y, y_0, z, z_0 . Nous montrons qu'une hypothèse de symétrie permet de réduire à deux le nombre de variables. Pour ce faire, nous utilisons les coordonnées polaires r et θ et cherchons la fonction de Green G_{1D} solution de :

$$\left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial}{\partial r} \right) - q_x^2 \right) G_{1D}(q_x, r, r_0, \theta, \theta_0) = \frac{\delta(r - r_0)}{r} \delta(\theta - \theta_0) \quad (\text{éq II-71})$$

L'annexe V donne l'expression suivante de G_{1D} :

$$G_{1D}(q_x, r, r_0, \theta, \theta_0) = \frac{1}{2\pi} I_0(q_x r^<) K_0(q_x r^>) + \frac{1}{\pi} \sum_{m=1}^{+\infty} \cos[m(\theta - \theta_0)] I_m(q_x r^<) K_m(q_x r^>) \quad (\text{éq II-72})$$

Où I_i est la fonction de Bessel modifiée de première espèce et d'ordre i , $r^<$ et $r^>$ désignent respectivement le minimum et le maximum du couple (r_0, r)

L'expression précédente de G_{1D} étant très complexe et constituant la première étape d'un long enchaînement de calculs, il nous est apparu judicieux de faire l'hypothèse que la fonction d'onde est de symétrie cylindrique, ce qui nous permet d'utiliser la propriété suivante :

$$\int_0^{2\pi} G_{1D}(q_x, r, r_0, \theta, \theta_0) d\theta = I_0(q_x r^<) K_0(q_x r^>) = \tilde{G}_{1D}(q_x, r, r_0) \quad (\text{éq II-73})$$

Avec cette hypothèse, c'est la fonction \tilde{G}_{1D} définie ci-dessus qui intervient dans le calcul des coefficients A_{1D} et C_{1D} .

La fonction \tilde{G}_{1D} qui joue un rôle important dans l'intensité de l'interaction présente un maximum en fonction de r pour $r = r_0$. L'évolution de ce maximum, qui vaut $I_0(qr_0)K_0(qr_0)$, est représentée sur la figure II-14. La décroissance du maximum de la fonction \tilde{G}_{1D} observée sur la courbe II-14 montre que l'intensité de l'interaction diminue avec la distance au centre de symétrie.

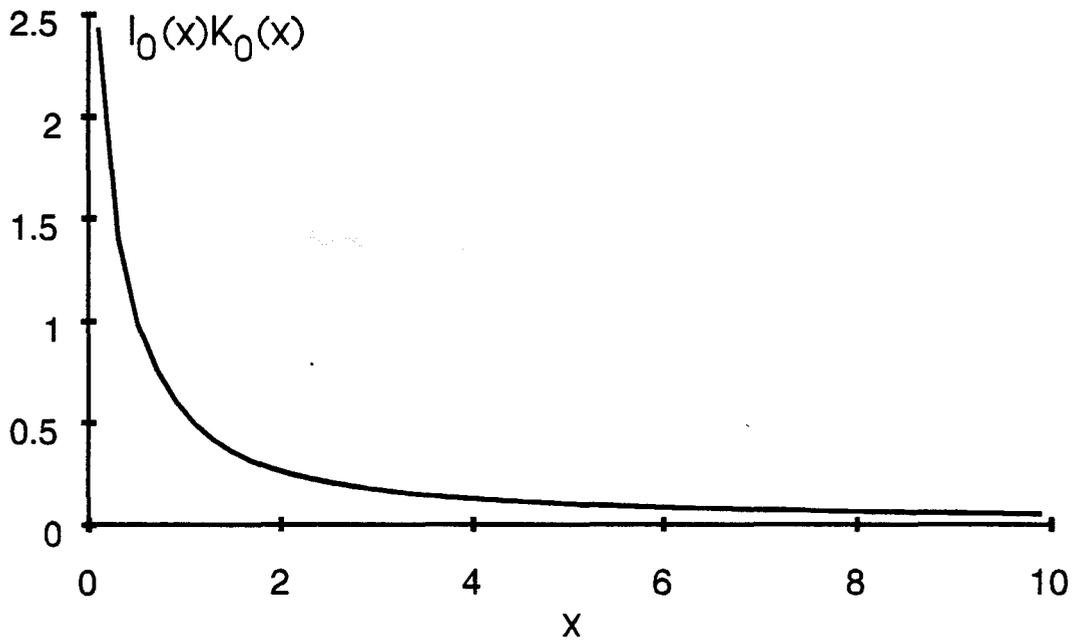


Figure II-14

Evolution du maximum de la fonction $\tilde{G}_{1D}(q_x, r, r_0)$, ce maximum vaut : $I_0(q_x r_0)K_0(q_x r_0)$

En utilisant la fonction \tilde{G}_{1D} , les facteurs A_{1D} et C_{1D} ont une expression simplifiée.

$$A_{1D}(q_x, r) = \int_0^{+\infty} \tilde{G}_{1D}(q_x, r, r_0) g_{11}(r_0) r_0 dr_0 \quad (\text{éq II-74})$$

$$C_{1D}(q_x) = 2\pi \int_0^{+\infty} A_{1D}(q_x, r_0) g_{11}(r_0) r_0 dr_0 \quad a)$$

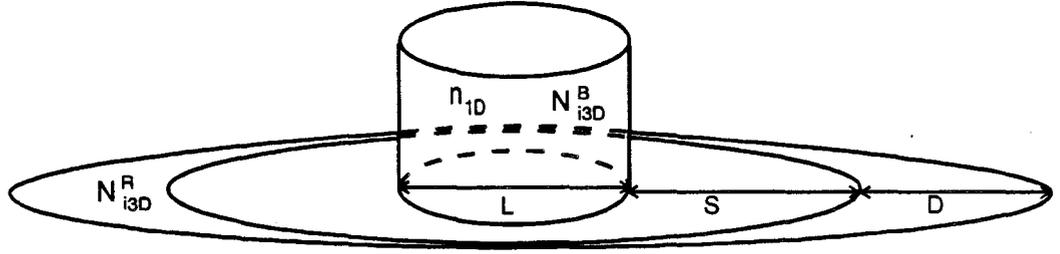
ou encore

$$C_{1D}(q_x) = 2\pi \int_0^{+\infty} \int_0^{+\infty} \tilde{G}_{1D}(q_x, r, r_0) g_{11}(r_0) g_{11}(r) r_0 r dr_0 dr \quad b) \quad (\text{éq II-75})$$

II.3.3 Étude d'une structure idéale

II.3.3.1 Calculs préliminaires

Dans le but de déterminer les mobilités électroniques dans un fil quantique, nous avons adopté la même méthode que pour les hétérostructures à gaz 2D. Nous avons utilisé une structure de référence (figure II-15) où les différents paramètres sont susceptibles de varier indépendamment les uns des autres.



Valeurs utilisées pour les calculs numériques

D=300Å	$n_{1D}=10^8/\text{m}$
L=100Å	$N_{i3D}^R=10^{24}/\text{m}^3$
S=0Å	$N_{i3D}^B=10^{21}/\text{m}^3$

Température T=77K
Matériau : GaAs

Figure II-15

Structure de référence pour l'étude de la mobilité sur impuretés en 1D

Les contributions à la mobilité des impuretés locales (Background) et distantes (Remote) seront évaluées séparément, nous devons donc déterminer les facteurs B_{1D} suivants :

$$B_{1D}^B(q_x) = 2\pi \int_0^R N_{i3D}^B(r) [A_{1D}^B(q_x, r)]^2 r dr \quad a)$$

(éq II-76)

$$B_{1D}^R(q_x) = 2\pi \int_{R+S}^{R+S+D} N_{i3D}^R(r) [A_{1D}^R(q_x, r)]^2 r dr \quad b)$$

Nous considérons des dopages homogènes dans les différentes couches de la structure.

$$N_{i3D}^B(r) = \begin{cases} N_{i3D}^B & r \leq R \\ 0 & \text{ailleurs} \end{cases}$$

$$N_{i3D}^R(r) = \begin{cases} N_{i3D}^R & R+S \leq r \leq R+S+D \\ 0 & \text{ailleurs} \end{cases} \quad (\text{éq II-77})$$

Chapitre II

Les fonctions d'ondes solutions de l'équation de Schrödinger dans un puits de potentiel infini, de symétrie cylindrique sont des fonctions de Bessel [FOB] (Cf. I.2.2.2). Pour simplifier les calculs nous utiliserons également des fonctions d'onde approximées par un pic de Dirac [FOD] ou par une fonction constante [FOC] (Cf. I.2.2.2). Dans le cas des approximations [FOD] et [FOC] les calculs des coefficients A_{1D} , B_{1D} , C_{1D} sont analytiques. Nous utilisons les quantités réduites $Q_x = q_x R$ $\gamma = 1 + S/R$ $\lambda = 1 + S/R + D/R$ pour exprimer les différents facteurs. Les expressions obtenues sont résumées dans les tableaux II-4 et II-5. Le facteur $C_{1D[FOD]}(Q_x)$ est infini pour toute valeur de Q_x . Ce modèle de fonction d'onde conduit donc à une mobilité infinie si l'on prend en compte le phénomène d'écrantage, il est donc impropre pour étudier ce phénomène. L'évolution du facteur C_{1D} avec Q_x pour les modèles [FOC] et [FOB] est présentée sur la figure II-16. Pour ces deux modèles le facteur C_{1D} n'est infini que pour $Q_x = 0$ et décroît avec Q_x .

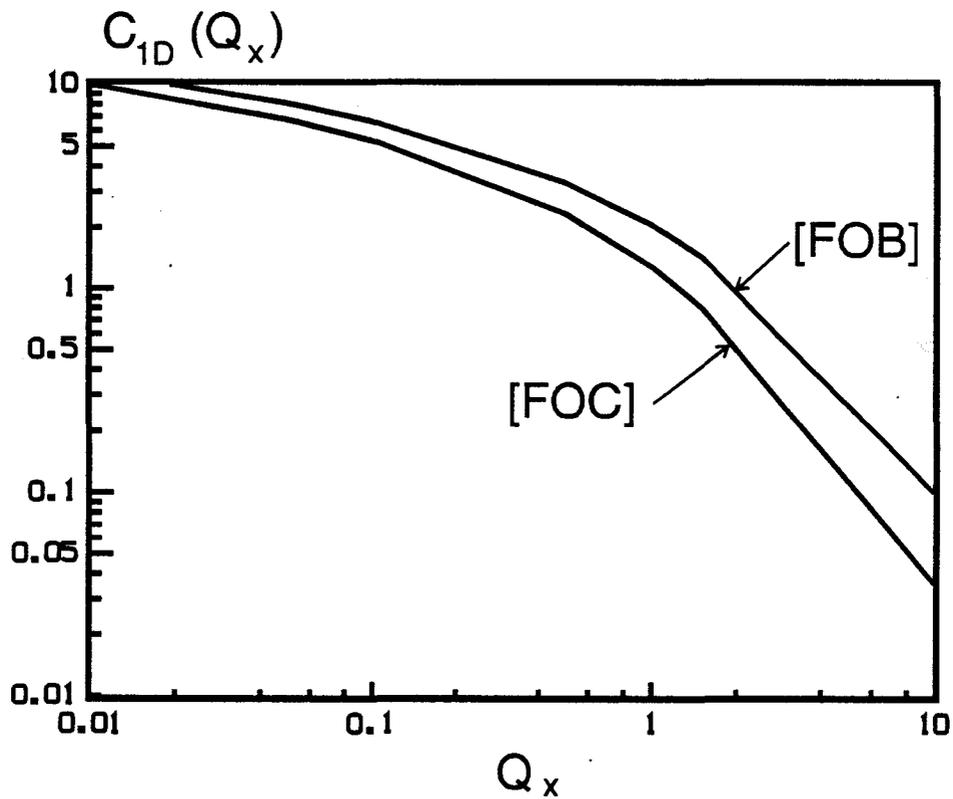


Figure II-16

Evolution du facteur $C_{1D}(Q_x)$

Fonction d'onde approximée par un Dirac [FOD]	
Impuretés "Background"	
$A_{1D[FOD]}^B(Q_x) = \frac{1}{2\pi} K_0\left(\frac{Q_x r}{R}\right)$	
$B_{1D[FOD]}^B(Q_x) = N_{i3D}^B \frac{1}{4\pi^2 Q_x^2} \left\{ 1 - Q_x^2 [K_1^2(Q_x) - K_0^2(Q_x)] \right\}$	
Impuretés "Remote"	
$A_{1D[FOD]}^R(Q_x) = \frac{1}{2\pi} K_0\left(\frac{Q_x r}{R}\right)$	
$B_{1D[FOD]}^R(Q_x) = N_{i3D}^R \frac{1}{4\pi^2 (\lambda^2 - \gamma^2)} \gamma^2 [K_1^2(Q_x \gamma) - K_0^2(Q_x \gamma)] - \lambda^2 [K_1^2(Q_x \lambda) - K_0^2(Q_x \lambda)]$	
facteur C_{1D}	
$C_{1D[FOD]}(Q_x) = +\infty$	

Tableau II-4

Coefficients A_{1D} , B_{1D} , C_{1D} pour l'approximation [FOD]

Fonction d'onde approximée par une constante [FOC]	
Impuretés "Background"	
$A_{1D[FOC]}^B(Q_x, r) = \frac{1}{\pi Q_x^2} \left[1 - Q_x K_1(Q_x) I_0 \left(Q_x \frac{r}{R} \right) \right]$	
$B_{1D[FOC]}^B(Q_x) = N_{i3D}^B \left(\frac{1}{\pi Q_x^2} \right)^2 \left(1 - 4 K_1(Q_x) I_1(Q_x) + Q_x^2 K_1^2(Q_x) [I_0^2(Q_x) - I_1^2(Q_x)] \right)$	
Impuretés "Remote"	
$A_{1D[FOC]}^R(Q_x, r) = \frac{1}{\pi Q_x} \left[I_1(Q_x) K_0 \left(Q_x \frac{r}{R} \right) \right]$	
$B_{1D[FOC]}^R(Q_x) = N_{i3D}^R \left(\frac{I_1(Q_x)}{\pi Q_x} \right)^2 \frac{\gamma^2 [K_1^2(Q_x \gamma) - K_0^2(Q_x \gamma)] - \lambda^2 [K_1^2(Q_x \lambda) - K_0^2(Q_x \lambda)]}{\lambda^2 - \gamma^2}$	
facteur C_{1D}	
$C_{1D[FOC]}(Q_x) = \frac{1}{\pi Q_x^2} [1 - 2 K_1(Q_x) I_1(Q_x)]$	

Tableau II-5

Coefficients A_{1D} , B_{1D} , C_{1D} pour l'approximation [FOC]

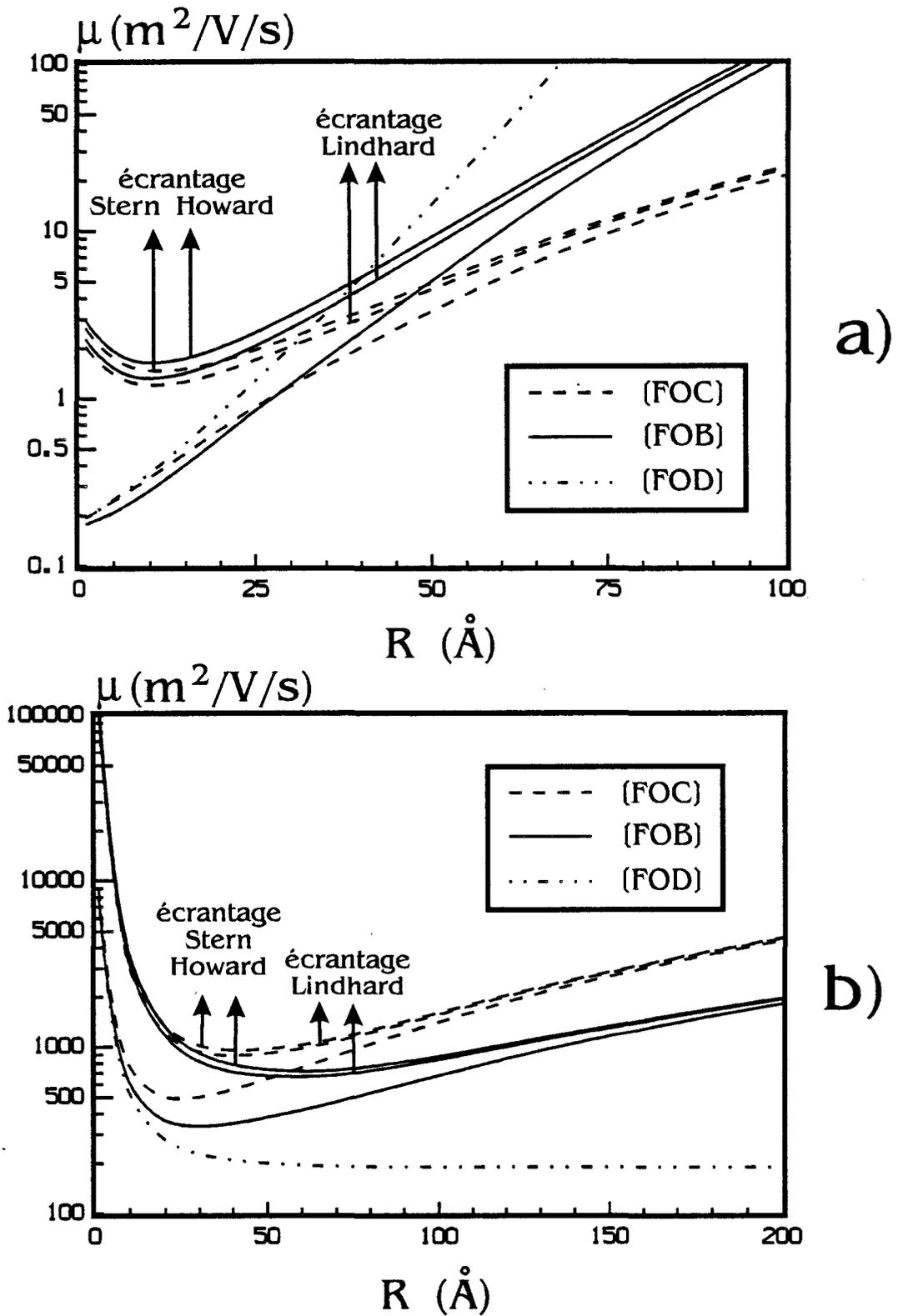


Figure II-17

Evolution des mobilités écrantées et non écrantées avec le rayon du fil quantique

a) Remote

b) Background

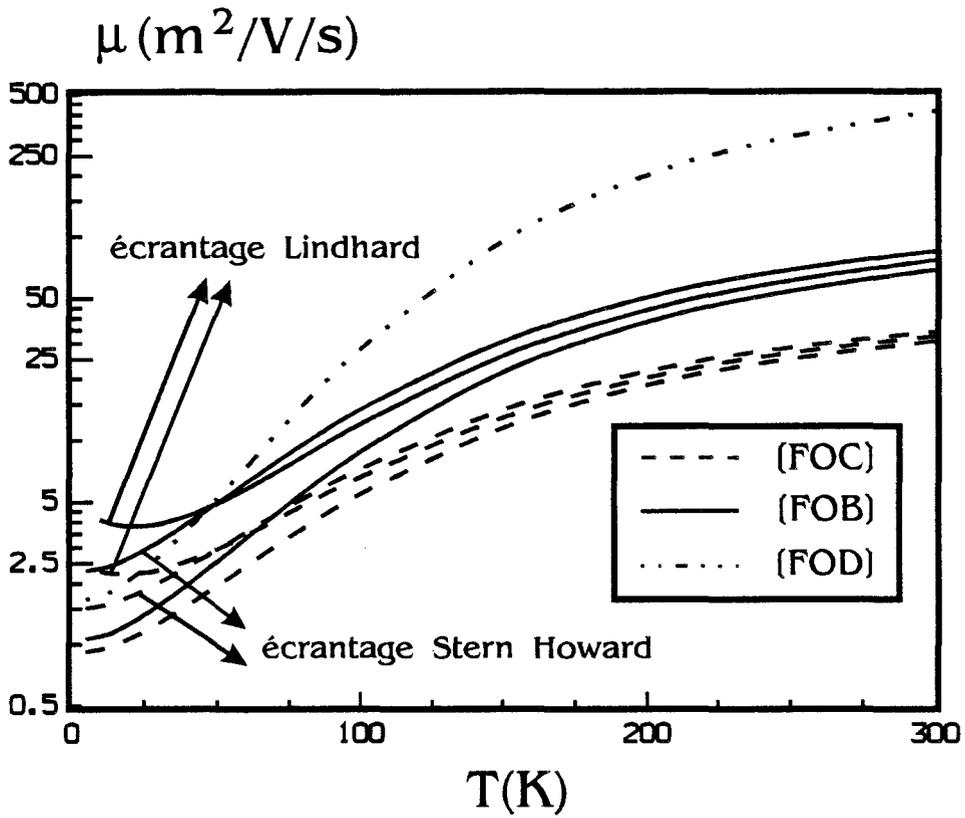
II.3.3.2 Résultats

Nous avons effectué des calculs de mobilité électronique pour la structure présentée sur la figure II-15 en supposant que les électrons occupaient une seule sousbande. Dans cette structure, le puits de potentiel est supposé de symétrie cylindrique et de hauteur infinie ; les calculs seront effectués avec les fonctions d'onde exactes [FOB] et avec des approximations [FOD] et [FOC]. Ceci nous permettra de discuter de l'influence du modèle de fonction d'onde sur la mobilité électronique. Le phénomène d'écrantage sera introduit quand cela sera possible ([FOB] et [FOC]) par l'intermédiaire des fonctions diélectriques statiques de Lindhard ou de Stern-Howard, et nous comparerons ces différents modèles. Les évolutions avec la température, la densité électronique et les principaux paramètres géométriques seront également présentées. Comme dans le paragraphe précédent, les contributions des impuretés locales et éloignées seront présentées en parallèle.

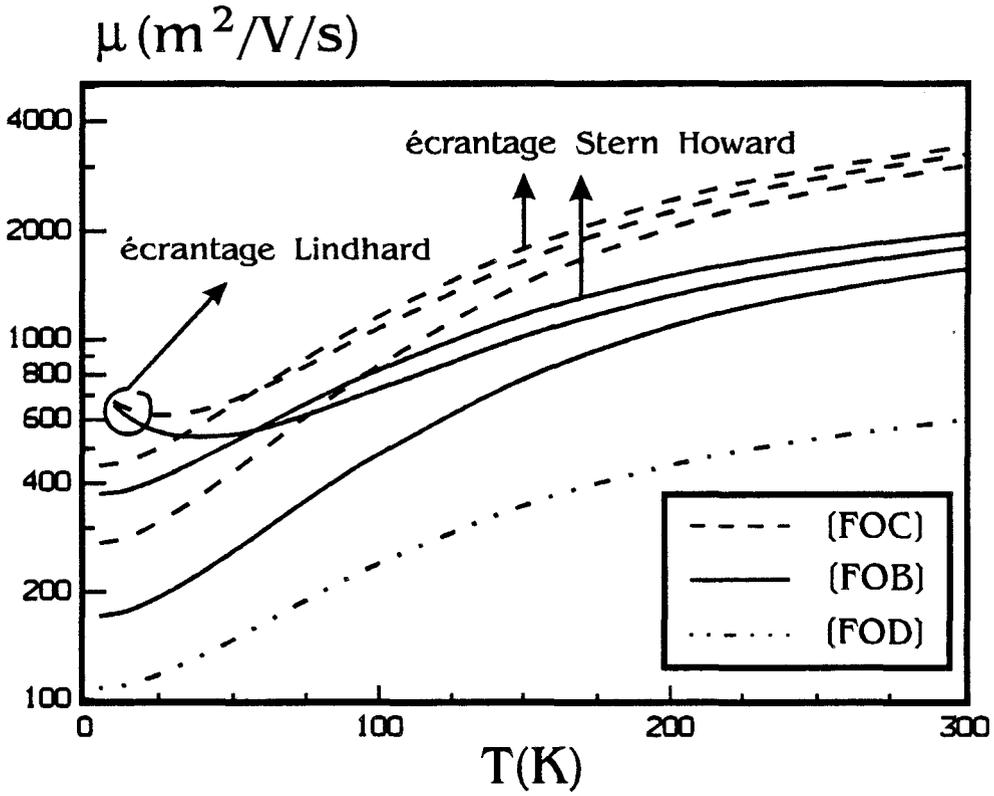
II.3.3.2.1 Etude de l'influence du rayon du fil quantique

La figure II-17-a) montre l'influence du rayon R du puits sur la mobilité Remote. La mobilité non écrantée augmente avec R parce que la distance entre électrons et impuretés croît. Si l'on introduit l'effet d'écran, le comportement des courbes change, particulièrement pour les faibles rayons. Dans le cas extrême d'un rayon nul, la mobilité écrantée diverge parce que, dans ces conditions, le facteur C_{1D} tend vers l'infini quel que soit le modèle de fonction d'onde. Les mobilités sont classées dans l'ordre suivant $\mu_{[FOD]}^B > \mu_{[FOB]}^B > \mu_{[FOC]}^B$. Le modèle [FOD] prédit la plus grande mobilité Remote parce qu'il n'autorise pas la présence d'électrons près de la barrière. Au contraire, le modèle [FOC] pour lequel des électrons se situent très près des impuretés donne la plus faible mobilité.

L'évolution de la mobilité Background avec le rayon du puits, comme cela est montré sur la figure II-17-b) est très différente. La densité d'impuretés est maintenue constante, le nombre de centres diffuseurs varie donc avec le rayon du puits. Cette dépendance explique que, dans le cas non physique d'un puits de rayon nul, la mobilité non écrantée soit infinie puisqu'il n'y a pas d'impuretés. Quand le rayon augmente, le nombre de centres diffuseurs croît et tend à réduire la mobilité, l'efficacité des impuretés est d'autant plus faible que le puits est grand. Nous observons ce phénomène avec le modèle [FOD], pour R supérieur à 50\AA la mobilité sature. Un effet supplémentaire apparaît dans le cas des modèles [FOC] et [FOB] : quand R augmente, le nombre d'électrons dans la région centrale du puits diminue. Le déplacement vers le bords du puits de ces électrons qui contribuaient fortement à réduire l'interaction tend alors à augmenter la mobilité. Comme cela est montré sur la figure II-17-b) ce second effet domine pour R supérieur à 30\AA . Cet argument peut également être invoqué pour expliquer l'ordonnement des mobilités Background calculées avec les différents modèles $\mu_{[FOC]}^B > \mu_{[FOB]}^B > \mu_{[FOD]}^B$. On constate que, plus la densité d'électrons au centre du puits est grande, plus la mobilité Background est faible.



a)



b)

Figure II-18

Evolution des mobilités écrantées et non écrantées avec la température

a) Remote b) Background

Chapitre II

Comme nous pouvions nous y attendre, les trois modèles [FOD] [FOB] [FOC] donnent le même résultat quand R tend vers 0. Pour de grands rayons nous avons observé que la mobilité pouvait varier de plusieurs ordres de grandeurs selon le type de fonction d'onde.

II.3.3.2.2 Influence de la température

Sur les figures II-18-a) et II-18-b) nous présentons l'évolution des mobilités Remote et Background avec la température. La mobilité non écrantée croît avec la température parce que la distribution énergétique des électrons s'étale. Aux faibles températures, l'effet d'écran est principalement déterminé par $\varepsilon(2k_F)$ et par conséquent $\mu_{[L]} > \mu_{[SH]}$. Quand la température augmente les énergies au delà de E_F contribuent à la mobilité. Ceci tend à réduire la mobilité calculée avec la méthode de Lindhard et explique que pour $T > 50K$ on a $\mu_{[SH]} > \mu_{[L]}$.

II.3.3.2.3 Influence de la densité électronique

L'évolution de la mobilité avec la densité électronique est présentée sur les figures II-19-a) et II-19-b). Elle dépend principalement de la position du niveau de Fermi et de l'effet d'écran. Nous observons que la mobilité non écrantée croît avec la température en raison de l'augmentation du niveau de Fermi. Comme cela était prévisible, l'effet d'écran contribue lui aussi à cette tendance. La méthode de Stern-Howard surestime la mobilité au plus de 45% par rapport au modèle plus exact de Lindhard.

II.3.3.2.4 Influence de l'épaisseur de spacer

Nous avons introduit une couche d'espacement représentée par une couronne d'épaisseur S. La figure II-20-a) montre une évolution exponentielle de la mobilité avec le paramètre S. On constate par exemple que pour un spacer de 50Å, la mobilité Remote est 100 fois plus grande que quand il n'y a pas de spacer. L'introduction d'une couche d'espacement a donc pour effet d'augmenter fortement la mobilité Remote.

II.3.3.2.5 Influence de l'épaisseur de la zone dopée

L'influence de l'épaisseur de la zone intentionnellement dopée (D) sur la mobilité Remote est montrée sur la figure II-20-b). Dans le cas extrême $D=0\text{Å}$, la mobilité calculée est infinie puisqu'il n'y a pas d'impuretés. Quand D croît, la mobilité diminue et finit par saturer à partir de $D \approx 50\text{Å}$. Ceci est une conséquence du phénomène observé sur la figure II-14 : en effet, au-delà d'une certaine distance des électrons, les impuretés ne contribuent plus à limiter la mobilité.

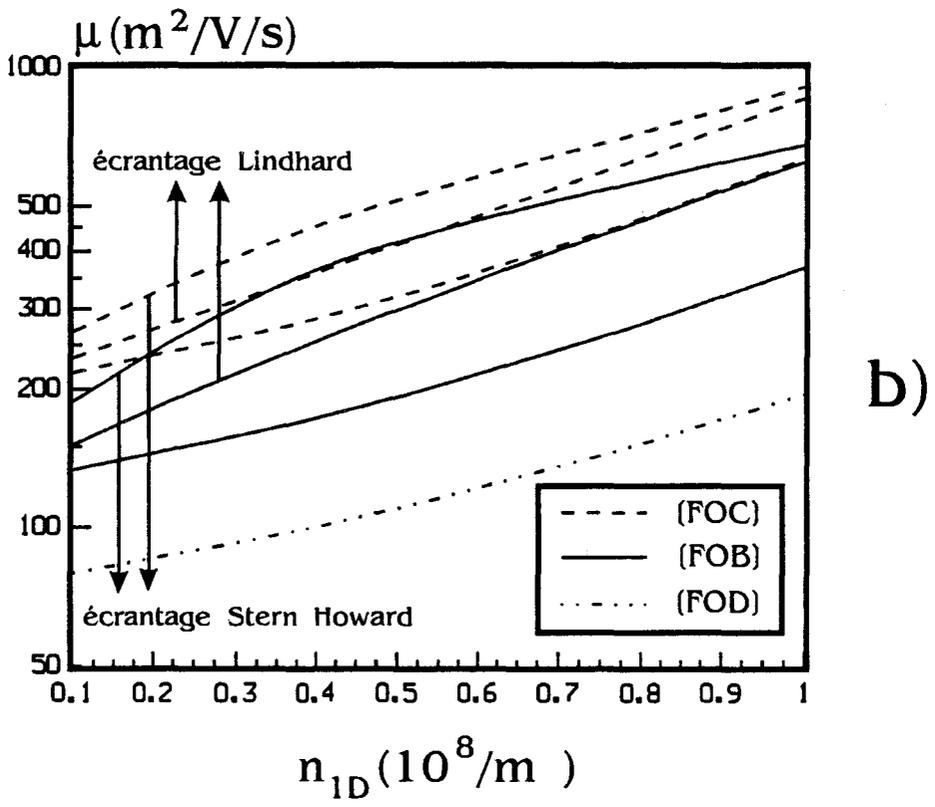
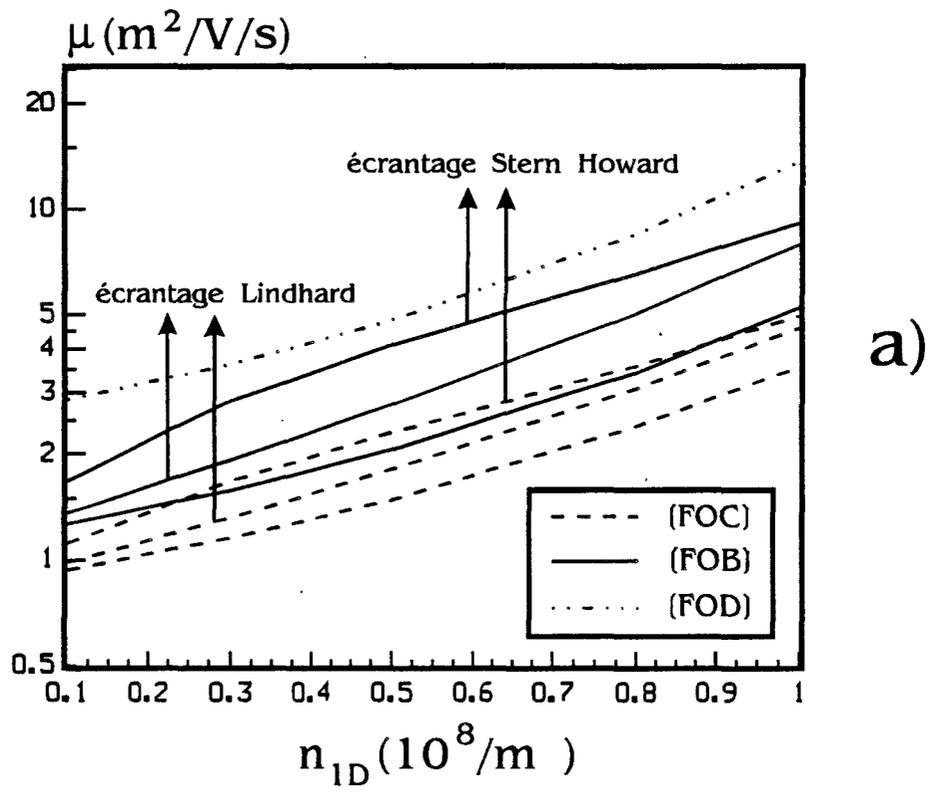
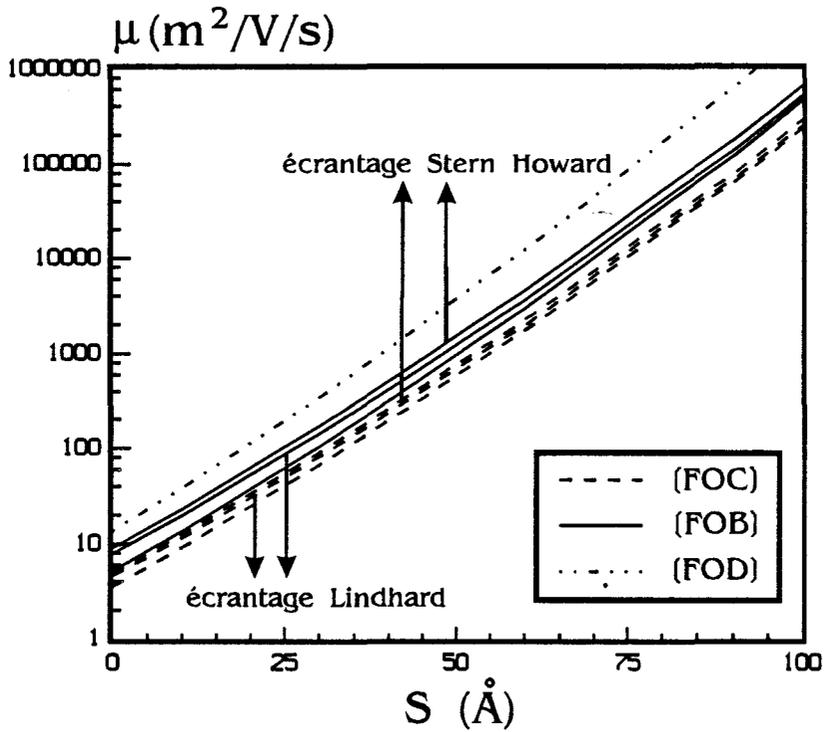


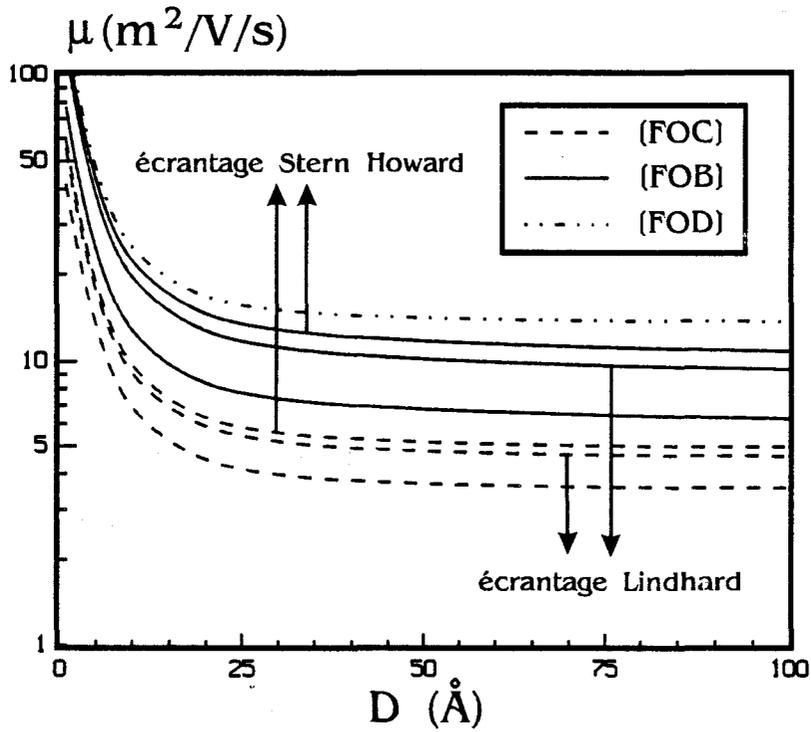
Figure II-19

Evolution des mobilités écrantées et non écrantées avec la densité électronique

a) Remote b) Background



a)



b)

Figure II-20

Evolution des mobilités Remote écrantées et non écrantées avec :

- a) la largeur de spacer.
- b) la largeur de zone dopée.

II.3.3.2.6 Conclusion

A l'aide d'une structure relativement simple (fil cylindrique infini), nous avons abordé l'étude de la mobilité électronique dans un fil quantique. Les évolutions de la mobilité avec les principaux paramètres physiques et géométriques ont pu être déterminées et interprétées. Nous avons montré que la forme de la fonction d'onde jouait un rôle important sur les valeurs de mobilité que l'on pouvait obtenir. Pour espérer déterminer la mobilité électronique dans un fil quantique, il semble crucial de connaître précisément les fonctions d'ondes électroniques. Ceci n'est guère aisé puisque cela nécessite la résolution autocohérente des équations de Schrödinger et Poisson. L'étude du modèle d'écrantage nous a permis de montrer que les modèles de Lindhard et de Stern-Howard conduisaient aux mêmes évolutions. Cependant, aux très faibles températures et aux fortes densités, les mobilités calculées peuvent varier de plusieurs ordres de grandeurs selon le type de modèle d'écran choisi.

II.4 INFLUENCE DU NOMBRE DE DEGRES DE LIBERTE SUR L'INTERACTION ELECTRONS-IMPURETES

Les performances des composants électroniques ont fortement progressé depuis qu'il est possible de réaliser des puits quantiques. Les transistors à effet de champs ont bénéficié de l'émergence de ces nouvelles structures qui ont permis de diminuer l'importance de l'interaction sur impuretés. Dans les transistors à effet de champ classiques tel le M.E.S.F.E.T. où le transport électronique est tridimensionnel, la conduction a lieu dans une zone souvent très dopée, il en résulte une forte interaction avec les impuretés. Dans le T.E.G.F.E.T. où le transport est bidimensionnel, cette interaction est réduite parce qu'une hétérojonction sépare les électrons de leurs donneurs. Cet effet peut être amplifié par l'utilisation d'une couche d'espacement (Cf. I.1). Dans ce paragraphe, nous chercherons à comparer l'influence d'une telle couche dans des structures 1D et 2D. Pour ce faire, il est important d'adopter une approche théorique similaire et d'employer des paramètres comparables. Nous commençons par décrire l'approche théorique.

II.4.1 Généralisation de la Méthode de Stern-Howard

Au cours de l'étude du phénomène d'écrantage, nous avons constaté qu'il existait certaines similitudes dans les expressions des potentiels écrantés pour les différentes dimensions. En particulier, l'approche de Dingle en 3D comporte de nombreux points communs avec l'approche de Stern-Howard en 2D et 1D. Nous montrons, dans cette partie, qu'il est possible dans l'hypothèse du transport monosousbande, d'obtenir une expression simple du potentiel écranté qui dépend directement de la dimension. Notons d ($=1,2$ ou 3) le nombre de degrés de liberté. La dimension des vecteurs r et q est donnée par leur indice qui vaut soit d , soit $3-d$. Le potentiel nu V_{ndD} dépend d'une fonction enveloppe ξ_{dD} et d'une fonction de Green G_{dD} , solution de l'équation de Poisson en d dimensions.

$$V_{ndD}(q_d) = \frac{Ze^2}{\epsilon_0 \epsilon_r} A_{dD}(q_d, r_{3-d}) \quad (\text{éq II-78})$$

avec

$$A_{dD}(q_d, r_{3-d}) = \int G_{dD}(q_d, r_{3-d}, r'_{3-d}) \xi_{3-d}^2(r'_{3-d}) dr'_{3-d} \quad (\text{éq II-79})$$

Chapitre II

En divisant le potentiel nu par la fonction diélectrique ε_{dD} on obtient le potentiel écrané :

$$V_{edD}(q_d) = \frac{Ze^2}{\varepsilon_0 \varepsilon_r} \frac{A_{dD}(q_d, r_{3-d})}{\varepsilon_{dD}(q_d)} \quad (\text{éq II-80})$$

avec

$$\varepsilon_{dD}(q_d) = 1 + S_{dD} C_{dD}(q_d) \quad (\text{éq II-81})$$

La fonction diélectrique dépend de la dimension par l'intermédiaire de deux quantités :

- un facteur de forme C_{dD} dépendant de la fonction enveloppe ξ_{dD} et la fonction de Green G_{dD} .

$$C_{dD}(q_d) = \int G_{dD}(q_d, r_{3-d}, r'_{3-d}) \xi_d^2(r_{3-d}) \xi_d^2(r'_{3-d}) dr_{3-d} dr'_{3-d} \quad (\text{éq II-82})$$

- un facteur d'écran qui prend en compte la densité électronique n_{dD} .

$$S_{dD} = \frac{n_{dD} e^2}{\varepsilon_0 \varepsilon_r kT} \frac{F_{(d-4)/2}(\eta)}{F_{(d-2)/2}(\eta)} \quad (\text{éq II-83})$$

Dans cette formule η désigne la différence entre l'énergie de Fermi et l'énergie de la bande ou de la sousbande occupée, divisée par kT .

Dans les cas limites extrêmes de gaz dégénérés et non dégénérés, nous avons respectivement :

$$S_{dD[TF]} = \frac{dn_{dD} e^2}{2 \eta \varepsilon_0 \varepsilon_r kT} \quad (\text{Thomas Fermi}) \quad (\text{éq II-84})$$

$$S_{dD[DH]} = \frac{n_{dD} e^2}{\varepsilon_0 \varepsilon_r kT} \quad (\text{Debye Huckel}) \quad (\text{éq II-85})$$

d	Cas Général	Dégénéré (Thomas-Fermi)	Non dégénéré (Debye-huckel)
1	$S_{1D} = \frac{n_{1D}e^2}{\epsilon_0 \epsilon_r kT} \frac{F_{-3/2}(\eta)}{F_{-1/2}(\eta)}$	$S_{1D[TF]} = \frac{n_{1D}e^2}{2\eta \epsilon_0 \epsilon_r kT}$	$S_{1D[DH]} = \frac{n_{1D}e^2}{\epsilon_0 \epsilon_r kT}$
2	$S_{2D} = \frac{n_{2D}e^2}{\epsilon_0 \epsilon_r kT} \frac{F_{-1}(\eta)}{F_0(\eta)}$	$S_{2D[TF]} = \frac{n_{2D}e^2}{\eta \epsilon_0 \epsilon_r kT}$	$S_{2D[DH]} = \frac{n_{2D}e^2}{\epsilon_0 \epsilon_r kT}$
3	$S_{3D} = \frac{n_{3D}e^2}{\epsilon_0 \epsilon_r kT} \frac{F_{-1/2}(\eta)}{F_{1/2}(\eta)}$	$S_{3D[TF]} = \frac{3n_{3D}e^2}{2\eta \epsilon_0 \epsilon_r kT}$	$S_{3D[DH]} = \frac{n_{3D}e^2}{\epsilon_0 \epsilon_r kT}$

Tableau II-6

Expressions des facteurs d'écran pour différentes dimensions.

Chapitre II

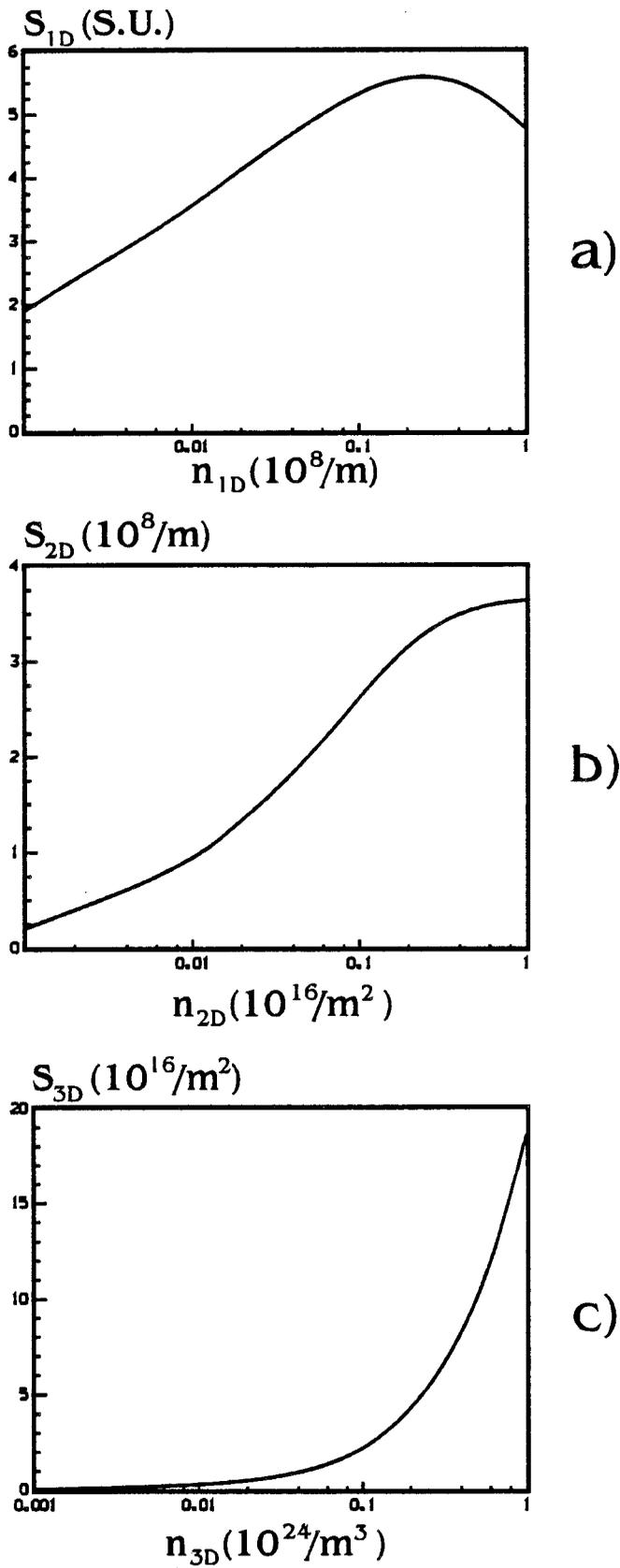


Figure II-21

Evolution des facteurs d'écran avec la densité électronique

a) 1D b) 2D c) 3D

Chapitre II

Nous avons étudié à $T=77\text{K}$ l'influence de la densité électronique sur les facteurs d'écran pour $d=1,2,3$. L'évolution du facteur d'écran avec la densité électronique est différente selon la dimension (Fig. II-21). En 3D le facteur d'écran ne cesse de croître, en 2D il sature aux fortes densités et en 1D il atteint un maximum pour $n_{1D} \approx 0.23 \cdot 10^8 \text{ m}^{-1}$. Ce n'est pas pour autant que la mobilité maximale est obtenue pour cette densité (Fig. II-19). En effet, l'accroissement de la densité modifie la position du niveau de Fermi et l'étalement de la distribution énergétique des électrons ; ces deux phénomènes influent fortement sur la mobilité.

II.4.2 Influence des zones d'espace

Pour évaluer l'intérêt de réduire la dimension d'un gaz d'électrons, nous avons étudié la mobilité en faisant varier la largeur des zones d'espace, le phénomène d'écrantage étant pris en compte par la méthode présentée ci-dessus. Nous avons considéré des fonctions enveloppes, des densités électroniques et des paramètres géométriques comparables. La figure II-22 décrit les conditions de la simulation. Nous avons utilisé les fonctions enveloppes suivantes :

- En 3D une onde plane
- En 2D la fonction enveloppe d'un puits carré infini [FOS]
- En 1D la fonction enveloppe d'un puits cylindrique infini [FOB]

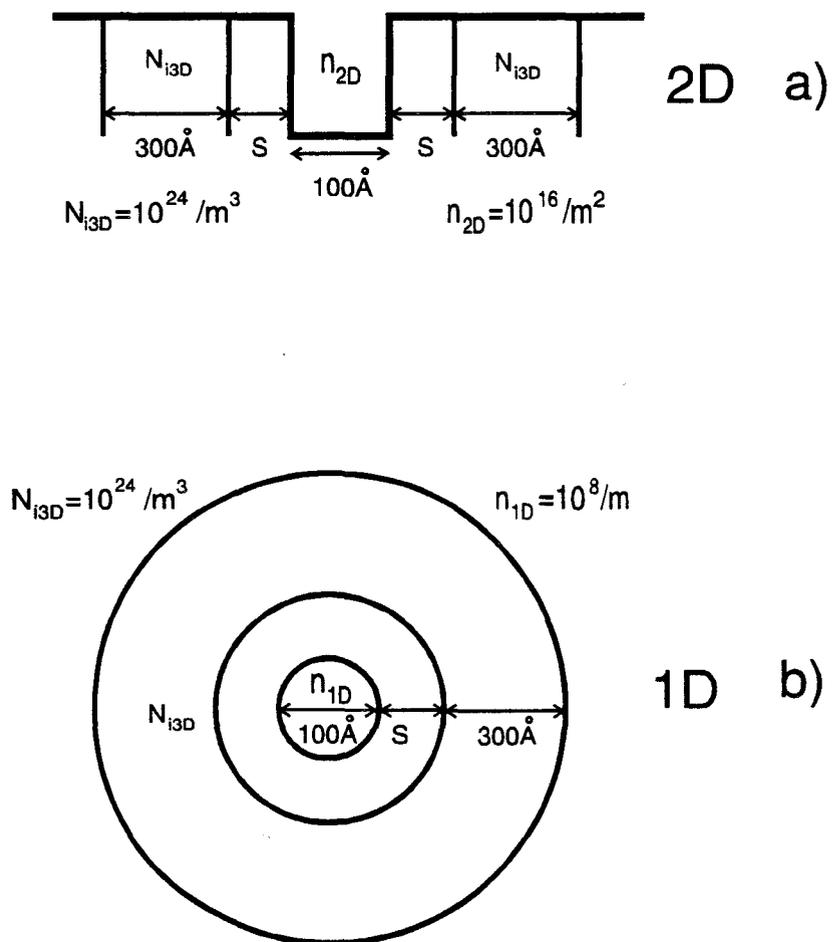


Figure II-22
Structures étudiées

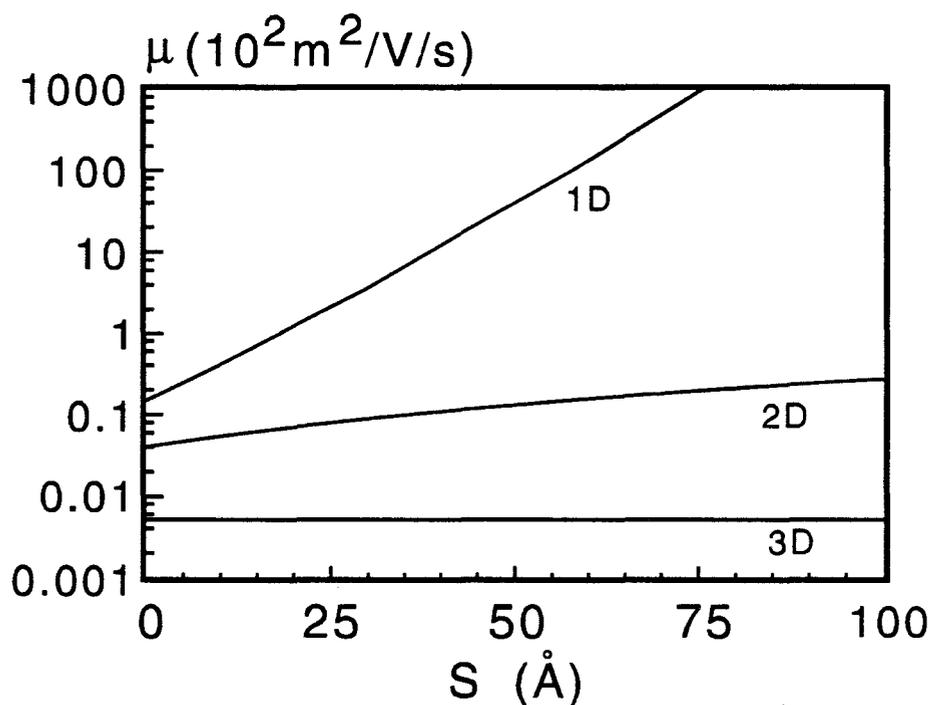


Figure II-23

Evolution de la mobilité sur impuretés avec la largeur de la couche d'espacement

Notons qu'en 3D les électrons et les impuretés qui interagissent se situent dans la même région (Cf. II-1). Dans ces conditions, la notion de couche d'espacement n'a pas de sens. C'est la valeur de mobilité calculée avec $N_{i3D} = n_{3D} = 10^{24} m^{-3}$ qui a été utilisée pour effectuer une comparaison. Les résultats présentés sur la figure II-23 montrent que, plus le degré de liberté est petit, plus la mobilité est grande. Ceci confirme le résultat prédit par Sakaki [26]. Nous remarquons également que l'effet induit par l'éloignement est plus marqué en 1D ce qui conduit à l'obtention de très grandes mobilités. La possibilité de supprimer dans un gaz 1D l'effet de l'interaction sur impuretés ionisées à basse température est conditionnée par l'introduction d'un spacer important. Cette étude confirme donc le grand intérêt des fils quantiques sur le plan de la dynamique électronique. Dans de telles structures, à basse température, il semble important d'étudier d'autres phénomènes comme l'interaction sur phonons et l'interaction d'alliage. En effet, du fait de la possible suppression de l'interaction sur impuretés ionisées, ces phénomènes pourraient être ceux qui déterminent la mobilité à basse température. Une des premières études publiées concernant l'interaction sur phonons [32] va d'ailleurs dans ce sens.

II.5 BIBLIOGRAPHIE

- [1] **E. CONWELL AND V. F. WEISSKOPF**
Phys Rev, 77, 398 (1950)
- [2] **R. B. DINGLE**
Phil. Mag, 46, 831 (1955)
- [3] **D. PINES**
Elementary excitations in solids, BENJAMIN, New York (1963)
- [4] **J. LINDHARD**
Kgl. Danske Videnskab. Selskab, Mat. Fys. Medd. 28, No. 8 (1954)
- [5] **N. TAKIMOTO**
Journal of the Physical Society of Japan, Vol. 14, No. 9 (1959)
- [6] **P. F. MALDAGUE**
Surf. Sci. 73 296 (1978)
- [7] **D. CHATTOPADHYAY and H. J. QUEISSER**
Reviews of Modern Physics, Vol. 53, No. 4, 745 (1981)
- [8] **B. K. RIDLEY**
J. Phys. C. : Solid State Phys ; Vol. 10, 1589 (1977)
- [9] **F. PERRI**
Thèse de 3ième cycle, Université de Lille 1986
- [10] **F. STERN, W. E. HOWARD**
Phys. Rev. 163, 816 (1967)
- [11] **A. A. GRINBERG, M. S. SHUR**
J. Appl. Phys. 58, 382 (1985)
- [12] **S. MORI, T. ANDO**
J. Phys. Soc. Jpn. 48, 865 (1980)
- [13] **K. HESS**
Appl. Phys. Lett. 35, 484 (1979)
- [14] **F. STERN**
Phys. Rev. Lett. 18, 14 (1967)
- [15] **K. YOKOYAMA, K. HESS**
Phys. Rev. B 33, 5595 (1986)
- [16] **W. YEN**
Thèse de l'université, Lille (1987)
- [17] **J. LEE, H. N. SPECTOR, V. K. ARORA**
J. Appl. Phys. 54, 6995 (1983)

Chapitre II

- [18] **B. K. RIDLEY**
Solid State Electronics, **34**, 111(1991)
- [19] **J. L. THOBEL, L. BAUDRY, F. DESSENNE, M. CHAREF and R. FAUQUEMBERGUE**
J. Appl. Phys. **73**, 233 (1993)
- [20] **K. HIRAKAWA, H. SAKAKI**
Phys. Rev. B **33**, 8291 (1986)
- [21] **J. LEE, H. N. SPECTOR**
J. Appl. Phys. **54**, 6989 (1983)
- [22] **E. D. SIGGIA, P. C. KWOK**
Phys. Rev. B **33**, 1024 (1970)
- [23] **P. J. PRICE**
J. Vac. Sci. Technol. **19**, 599 (1981)
- [24] **J. ALAMKAN, H. HAPPY, Y. CORDIER and A. CAPPY**
European Trans. on Telecom. and rel. tech. **1**, 429 1990
- [25] **H. SAKAKI**
J. Vac. Sci. Technol. **19**, 148 (1981)
- [26] **H. SAKAKI**
Jpn. J. Appl. Phys. **19**, L735 (1980)
- [27] **J. LEE, M. O. VASSEL**
J. Phys. C : Solid State Phys. **17**, 2525 (1984)
- [28] **J. LEE, H. N. SPECTOR**
J. Appl. Phys. **57**, 366 (1984)
- [29] **J. LEE, H. N. SPECTOR**
J. Appl. Phys. **54**, 3921 (1983)
- [30] **G. FISHMAN**
Phys. Rev. B **34**, 2394 (1986)
- [31] **Y. WENG, J. P. LEBURTON**
J. Appl. Phys. **65**, 4983 (1989)
- [32] **G. FISHMAN**
Phys. Rev. B **36**, 7448 (1987)

CHAPITRE III

Simulation Monte-Carlo du transport électronique dans des hétérostructures

Chapitre III

Nous avons étudié, dans le chapitre II, la mobilité limitée par l'interaction sur impuretés ionisées dans des gaz bidimensionnels d'électrons. Pour donner une description complète du transport, nous devons tenir compte de l'ensemble des mécanismes d'interactions. Nous chercherons maintenant à décrire de façon détaillée les conditions de transport dans une hétérostructure, ce qui nécessite de tenir compte de l'ensemble des mécanismes d'interactions. Afin d'étudier une large gamme de champ nous utilisons la méthode de Monte-Carlo.

Contrairement au modèle du paragraphe I-5, les effets quantiques seront inclus. Dans ce chapitre, nous donnons une description détaillée d'un modèle Monte-Carlo prenant en compte des effets liés à la quantification ainsi que les principaux aspects physiques : la non parabolicité, la dégénérescence, les transitions intervallées et les modifications de la structure de bande dues aux transferts de charges.

Nous présentons au fur et à mesure du développement du modèle, des résultats obtenus pour le modèle du puits carré infini et pour des structures réalistes.

III.1 MODELE MONTE-CARLO EN VALLEE GAMMA

Dans la partie I.2.1.2, nous avons décrit une méthode permettant de déterminer les états électroniques de la vallée Γ dans une hétérostructure. Pour étudier les propriétés de transport d'un gaz électronique bidimensionnel, nous avons choisi la méthode de Monte-Carlo (I.3.6). Le but de ce paragraphe est d'exposer les différents points clés nécessaires à la mise en oeuvre de cette méthode.

III.1.1 Prise en compte de la non parabolicité

L'étude du transport électronique dans une hétérostructure nécessite, entre autres, la connaissance : du profil de bande de conduction, des fonctions d'ondes, des énergies propres et de la relation de dispersion $E(k)$. Dans la partie I.2.1.2, nous avons décrit la méthode employée pour déterminer les états électroniques. Dans cette méthode l'équation de Schrödinger est résolue en supposant la bande parabolique. Dans cette partie, nous montrons comment prendre en compte la non parabolicité dans l'étude du transport. Rappelons que, si l'on néglige la non parabolicité (en faisant $\alpha = 0$ dans la relation I-57), l'équation de Schrödinger pour les électrons s'écrit* :

$$H_0 \xi_i^0 = E_i^0(k) \xi_i^0 \quad (\text{éq III-1})$$

avec :

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \left[\frac{1}{m^*(z)} \frac{\partial}{\partial z} \right] + V(z) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*(z)} \quad (\text{éq III-2})$$

Une très bonne approximation est :

$$E_i^0(k) = E_i^0(k=0) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_i^*} \quad (\text{éq III-3})$$

Où m_i^* est définie de la façon suivante :

$$\frac{1}{m_i^*} = \int \frac{|\xi_i^0(z)|^2}{m^*(z)} dz \quad (\text{éq III-4})$$

Si maintenant on prend en compte la non parabolicité, on introduit une masse dépendant de l'énergie :

$$M^*(E_i^\alpha(k), z) = m^*(z) \left[1 + \alpha(z) [E_i^\alpha(k) - V(z)] \right] \quad (\text{éq III-5})$$

* Dans ce chapitre, nous considérons uniquement des systèmes bidimensionnels ; pour simplifier les notations, nous supprimons les indices x et y correspondant aux directions de quantification. Par exemple, le vecteur d'onde parallèle, noté jusqu'alors k_{xy} , est désormais noté k .

Chapitre III

Où $\alpha(z)$ désigne le coefficient de non parabolicité (Cf. éq I-57) à la coordonnée z de la structure.

et l'on doit alors résoudre :

$$H_\alpha \xi_i^\alpha = E_i^\alpha(k) \xi_i^\alpha \quad (\text{éq III-6})$$

avec :

$$H_\alpha = \frac{-\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \left[\frac{1}{M^*(E_i^\alpha(k), z)} \frac{\partial}{\partial z} \right] + V(z) + \frac{\hbar^2 k^2}{2M^*(E_i^\alpha(k), z)} \quad (\text{éq III-7})$$

La résolution de cette équation pour toutes les valeurs de k nécessite des moyens de calculs très importants. Si l'on suppose que la non parabolicité n'est pas trop forte, on peut utiliser la méthode des perturbations et n'en retenir que le terme de premier ordre. Nous notons E_i^α l'énergie propre, ainsi nous obtenons :

$$H_\alpha = H_0 - \frac{\alpha(z)(E_i^\alpha - V(z))}{1 + \alpha(z)(E_i^\alpha - V(z))} (H_0 - V(z)) - \frac{\hbar^2}{2m^*(z)} \left[\frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{-\alpha(z)(E_i^\alpha - V(z))}{1 + \alpha(z)(E_i^\alpha - V(z))} \right) \right] \frac{\partial}{\partial z} \quad (\text{éq III-8})$$

qui s'écrit également sous la forme :

$$H_\alpha = H_0 - \alpha(z)[E_i^\alpha - V(z)][H_\alpha - V(z)] + W(E_i^\alpha) \quad (\text{éq III-9})$$

où :

$$W(E_i^\alpha) = \frac{\hbar^2}{2m^*(z)} (1 + \alpha(z)(E_i^\alpha - V(z))) \left[\frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\alpha(z)(E_i^\alpha - V(z))}{1 + \alpha(z)(E_i^\alpha - V(z))} \right) \right] \frac{\partial}{\partial z} \quad (\text{éq III-10})$$

Nous négligeons la modification de la fonction d'onde $\xi_i^\alpha \approx \xi_i^0$ et l'on obtient une estimation de E_i^α en prenant l'élément de matrice $\langle \xi_i^0 | H_\alpha | \xi_i^0 \rangle$.

$$E_i^\alpha = E_i^0 - \langle \alpha(z)(E_i^0 - V(z))^2 \rangle + \langle W(E_i^\alpha) \rangle \quad (\text{éq III-11})$$

Où la notation $\langle \rangle$ signifie que l'on prend l'élément de matrice diagonal pour l'état ξ_i^0 . Nous utilisons une approximation au premier ordre de $W(E_i^\alpha)$, valide quand $\alpha(z)(E_i^\alpha - V(z)) \ll 1$:

$$\langle W(E_i^\alpha) \rangle = A_i E_i^\alpha + B_i \quad (\text{éq III-12})$$

Chapitre III

avec :

$$A_i = \frac{\hbar^2}{2} \int \frac{\partial \alpha(z)}{\partial z} \xi_i^0(z) \frac{1}{m^*(z)} \frac{\partial \xi_i^0(z)}{\partial z} dz \quad (\text{éq III-13})$$

$$B_i = \frac{-\hbar^2}{2} \int \frac{\partial (\alpha(z)V(z))}{\partial z} \xi_i^0(z) \frac{1}{m^*(z)} \frac{\partial \xi_i^0(z)}{\partial z} dz \quad (\text{éq III-14})$$

La principale contribution à ces intégrales vient des discontinuités de α et V aux interfaces. En introduisant l'équation III- 12 dans l'équation III-11 on obtient :

$$E_i^0 = E_i^\alpha \left(1 + \overline{\alpha(z)} \Big|_i E_i^\alpha - 2 \overline{\alpha(z)V(z)} \Big|_i - A_i \right) + \overline{\alpha(z)V(z)^2} \Big|_i - B_i \quad (\text{éq III-15})$$

Où nous avons utilisé la notation suivante

$$\overline{u(z)} \Big|_i = \int u(z) |\xi_i^0(z)|^2 dz \quad (\text{éq III-16})$$

La relation de dispersion est obtenue à partir de l'équation précédente en écrivant que l'énergie est la somme de l'énergie cinétique E et de l'énergie potentielle E_i^α en se souvenant que E_i^0 dépend de k par l'intermédiaire d'une relation parabolique.

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m_i^*} = E \left(1 + \overline{\alpha(z)} \Big|_i (E + 2E_i^\alpha) - 2 \overline{\alpha(z)V(z)} \Big|_i - A_i \right) \quad (\text{éq III-17})$$

Le phénomène de non parabolicité est introduit dans l'équation de Schrödinger en supposant qu'il n'affecte pas les fonctions d'ondes mais uniquement les énergies propres qui peuvent être déterminées moyennant la résolution de l'équation III-15. La relation de dispersion $E(k)$ est également modifiée par la prise en compte de la non parabolicité (équation III-17). Sur le plan pratique, la prise en compte de ce phénomène se décompose en plusieurs étapes.

- Calculs des grandeurs $\overline{\alpha(z)} \Big|_i$, $\overline{\alpha(z)V(z)} \Big|_i$, $\overline{\alpha(z)V(z)^2} \Big|_i$, A_i , B_i à partir des valeurs E_i^0 et ξ_i^0 obtenues par résolution auto cohérente des équations de Schrödinger et Poisson.
- Détermination des énergies propres E_i^α en employant la relation III-15
- Utilisation de la relation de dispersion III-17 dans le calcul des probabilités d'interactions et dans la simulation Monte Carlo.

III.1.2 Expressions des probabilités d'interactions

L'interaction sur phonons piézoélectriques n'intervenant que très rarement, il ne nous est pas paru indispensable de l'inclure dans ce modèle. En ce qui concerne les interactions d'interface, de dislocation, de cluster qui sont également absentes de ce modèle, leurs probabilités respectives dépendent de paramètres physiques difficilement accessibles, ce qui nous a incité à les omettre dans un premier temps.

Pour mettre en oeuvre la méthode de Monte-Carlo (Cf. I.3.6) nous devons connaître les différentes probabilités d'interaction et leurs effets. Nous résumons dans cette partie les expressions mathématiques des probabilités d'interactions et exposons la manière dont est déterminé l'angle de déviation du vecteur d'onde lors de l'interaction. Rappelons que les fonctions d'ondes que nous utilisons sont celles calculées sans tenir compte de la non parabolicité ($\xi_i = \xi_i^0$).

III.1.2.1 Interaction optique polaire

Nous considérons le potentiel d'interaction du phonon optique polaire 3D et utilisons une méthode proposée par Price [1] pour déterminer la probabilité d'interaction. Cette méthode également utilisée par de nombreux auteurs [2] [3] [4] permet d'aboutir à l'expression suivante :

$$\lambda(E) = C_{op} \left(N_0 + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) \gamma_i(E') \int_{-\pi}^{+\pi} \frac{H_{ij}(q)}{q} d\beta \quad (\text{éq III-18})$$

avec $q = |\bar{k} - \bar{k}'|$ $\beta = (\bar{k}, \bar{k}')$ et $E' = E \mp \hbar\omega_{op}$

Dans cette formule, C_{op} représente la constante d'interaction optique polaire, N_0 le nombre de phonons à l'équilibre :

$$C_{op} = \frac{m^* e^2 \hbar \omega_{op}}{8 \pi \hbar^3 \epsilon_0} \left(\frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_r} \right) \quad a)$$

$$N_0 = \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar \omega_{op}}{kT}\right) - 1} \quad b) \quad (\text{éq III-19})$$

$$\gamma_i(E) = 1 + 2 \overline{\alpha(z)} \Big|_i (E - E_i) - 2 \overline{\alpha(z)V(z)} \Big|_i - A_i \quad c)$$

Où ω_{op} désigne la pulsation du phonon optique polaire.

$$H_{ij}(q) = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \xi_i^*(z) \xi_j(z) \xi_i(z') \xi_j^*(z') \exp(-q|z - z'|) dz dz' \quad (\text{éq III-20})$$

H_{ij} est appelé facteur de forme

Chapitre III

Dans la mesure où les fonctions enveloppes sont connues sous forme numérique, le calcul du facteur de forme est prohibitif en temps de calcul. Price [1] a montré que pour un puits carré infini, le facteur de forme pouvait s'exprimer relativement simplement en utilisant des formules d'interpolation différentes pour des interactions intersousbandes et intrasousbandes.

Pour un puits de potentiel de forme quelconque Price a supposé que les formules du puits carré infini restaient valables à condition d'y inclure un paramètre appelé largeur effective b_{ij} caractéristique du puits de potentiel.

$$\begin{aligned} \text{cas intrasousbande } H_{ii}(q) &= \frac{1}{1 + b_{ii}q} & a) \\ \text{cas intersousbande } H_{ij}(q) &= \frac{q}{b_{ij}q^2 + F_{ij}} & b) \end{aligned} \quad (\text{éq III-21})$$

$$\begin{aligned} F_{ij} &= \frac{\pi^2 [i^2 - j^2]^2}{4b_{ij} [i^2 + j^2]^2} \\ b_{ij} &= \frac{1}{2 \int_{-\infty}^{+\infty} |\xi_i(z)|^2 |\xi_j(z)|^2 dz} \end{aligned} \quad (\text{éq III-22})$$

Dans le cas d'une hétérostructure quelconque constituée de plusieurs couches réalisées avec des matériaux différents, nous introduisons dans les équations précédentes une largeur effective b_{ij}^h caractéristique de l'hétérostructure, calculée à partir des largeurs effectives caractéristiques de chaque couche b_{ij}^c :

$$\frac{1}{b_{ij}^h} = \sum_c \frac{1}{b_{ij}^c} \quad \text{avec} \quad b_{ij}^c = \frac{1}{2 \int_{\text{couche } c} |\xi_i(z)|^2 |\xi_j(z)|^2 dz} \quad (\text{éq III-23})$$

III.1.2.2 Interaction sur impuretés ionisées

La détermination de l'état final étant complexe, c'est l'inverse du temps de relaxation du moment et non la probabilité d'interaction qui est introduite dans le modèle Monte-Carlo. Le temps de relaxation du moment est calculé en utilisant la méthode de Stern et Howard [5] exposée au chapitre précédent (Cf. II.2.1.1). L'écrantage secondaire (II.2.3.2) prend en compte l'écrantage multisousbandes selon la méthode proposée par Price [6] et les interactions intersousbandes sont négligées. Les différents coefficients sont définis dans le chapitre II et sont évalués à partir des fonctions d'onde ξ_i , les facteurs

Chapitre III

d'écran sont déterminés à partir des niveaux d'énergie E_i^{α} . Enfin la relation de dispersion III-17 est utilisée dans l'équation II-44 pour déterminer $\tau_m(E)$.

III.1.2.3 Interaction acoustique

Ridley [7] a calculé la probabilité d'interaction acoustique dans un gaz 2D en supposant que cette interaction était élastique. Nous introduisons la non parabolicité dans l'expression donnée par Ridley et obtenons :

$$\lambda(E) = \frac{m_i^* kT \gamma_i(E)}{2\hbar^3} \sum_{c \text{ couches}} \frac{(\Phi_{ac}^c)^2}{\rho_c s_c^2 b_{ij}^c} \quad (\text{éq III-24})$$

Φ_{ac}^c : potentiel de déformation acoustique du matériau de la couche c.

ρ_c : densité volumique du matériau de la couche c.

s_c : vitesse du son dans le matériau de la couche c.

III.1.2.4 Interaction d'alliage

La probabilité d'interaction d'alliage est calculée en introduisant la non parabolicité dans l'expression donnée par Dessenne [8].

$$\lambda(E) = \frac{3\pi^2 m_i^* \gamma_i(E)}{128\hbar^3} \sum_{c \text{ couches}} \frac{x_c(1-x_c)a_c^3(\Phi_{al}^c)^2}{b_{ii}^c} \quad (\text{éq III-25})$$

Φ_{al}^c : potentiel d'alliage du matériau $A_{1-x_c}B_{x_c}C$ de la couche c.

a_c : paramètre de maille du matériau de la couche c.

III.1.2.5 Exemples

Les probabilités d'interaction que nous venons d'expliciter ont une forme mathématique très différente de celles données par Kazynski [9] dans le cas du matériau en volume. La quantification des niveaux énergétiques engendre des discontinuités des probabilités d'interaction. Pour visualiser ce phénomène, nous présentons sur les figures III-1 les évolutions des probabilités d'interaction avec l'énergie, dans un gaz 2D en considérant 3 sousbandes. La structure est un puits carré infini de GaAs avec dopage résiduel $N_{i3D} = 10^{21} m^{-3}$ et une densité électronique de $n_{2D} = 10^{16} m^{-2}$, la température est fixée à 300K. Comme le montre la figure III-1 c) l'interaction sur impuretés ionisées décroît fortement avec l'énergie. Pour les matériaux ternaires, la probabilité d'interaction d'alliage présente une allure semblable à celle de l'interaction acoustique.

Chapitre III

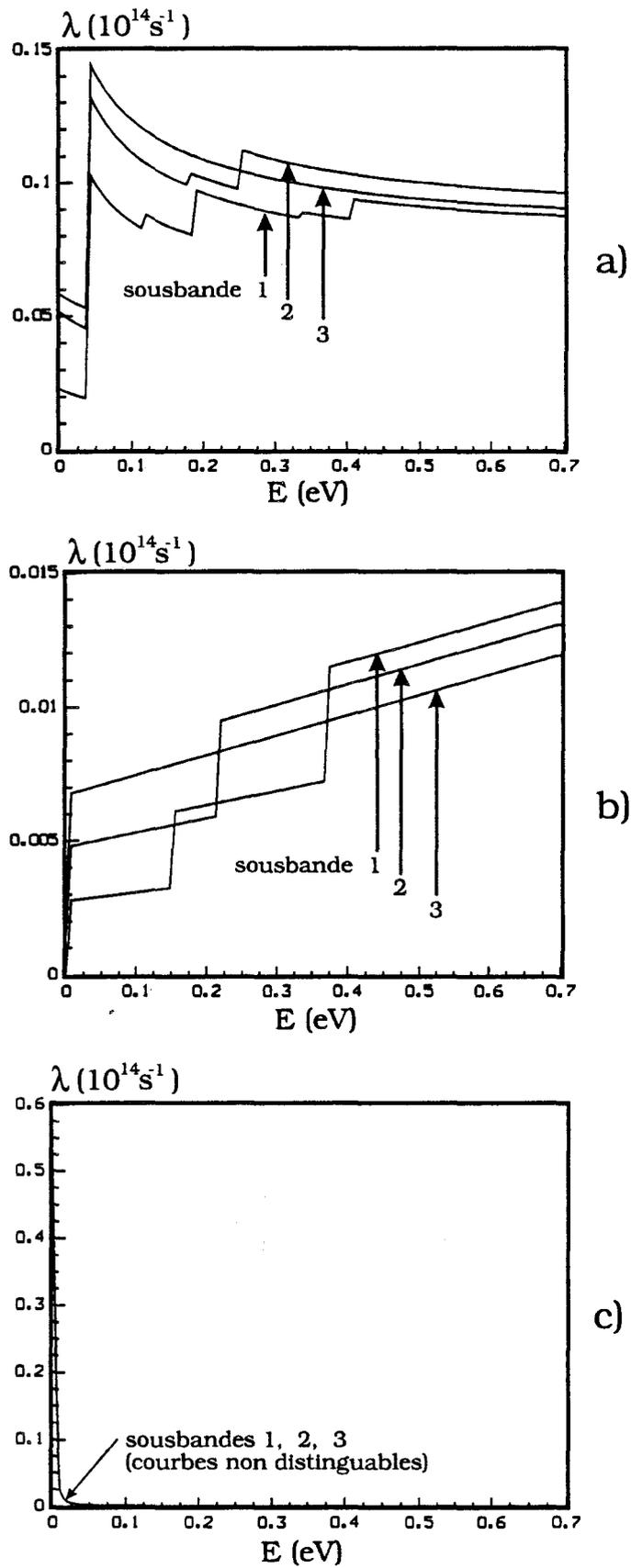


Figure III-1

Evolution des probabilités d'interactions à 300K dans un puits carré infini de GaAs dopé $N_{i3D} = 10^{21} \text{ m}^{-3}$ a) optique polaire b) acoustique c) impuretés ionisées

III.1.3 Détermination du vecteur d'onde après interaction

Sous l'effet d'une interaction, le vecteur d'onde de l'électron "passe" de \vec{k} à \vec{k}' , Pour déterminer l'angle β entre ces deux vecteurs, nous procédons de la manière suivante :

Nous calculons β en résolvant l'équation :

$$r = \frac{\int_0^\beta f_E(\beta') d\beta'}{\int_0^\pi f_E(\beta') d\beta'} \quad (\text{éq III-26})$$

Où $f_E(\beta')$ est la fonction de distribution d'angle β' . et r un réel tiré aléatoirement entre 0 et 1.

Dans le cas général, la résolution de l'équation III-26 nécessite d'employer une méthode numérique. Il est alors souvent plus avantageux de recourir à la méthode de Von Neumann décrite par Nougier [10] et appliquée à la méthode de Monte Carlo par plusieurs auteurs [2] [9]. Si $f_E(\beta')$ est indépendant de β' la distribution de β est uniforme entre 0 et π .

Pour l'interaction optique polaire intersousbande, l'angle de déviation est donné par la relation suivante où r_1 est nombre réel aléatoire entre 0 et 1 et r_2 nombre entier aléatoire valant -1 ou 1.

$$\beta = 2r_2 \arctan \left[\sqrt{\frac{Y+X}{Y-X}} \tan \left(r_1 \frac{\pi}{2} \right) \right]$$

$$\text{avec } X = \frac{b_{ij}^2}{F_{ij}^2} |\vec{k}|^2 |\vec{k}'|^2 \quad (\text{éq III-27})$$

$$\text{et } Y = \left(1 + \frac{b_{ij}}{F_{ij}} (|\vec{k}| + |\vec{k}'|) \right)^2$$

Dans le cas de l'interaction optique polaire intrasousbande, nous utilisons la méthode de rejection de Von Neumann.

Les autres interactions sont traitées comme étant randomisantes, β est donc tiré au sort aléatoirement entre 0 et 2π .

III.1.4 Résultats des premières simulations

Pour étudier le transport dans une hétérostructure, il faut préalablement connaître la structure de bande, les fonctions d'onde et les niveaux d'énergies caractéristiques de l'hétérostructure. Dans le cas d'un puits carré infini, on utilise les expressions données par les équations I-6 et I-7. Pour une structure réaliste, nous utilisons la procédure numérique décrite dans la partie I.2.1.2. Nous avons choisi de suivre un électron dans l'espace réciproque et d'accéder aux grandeurs caractéristiques du transport en faisant des moyennes sur le temps. A $t=0$, l'électron est sur la sousbande fondamentale, il acquiert de l'énergie sous l'effet du champ électrique et ne change de sousbande que si une interaction l'y contraint. Nous avons utilisé un pas de temps $dt = 10^{-14} s$. La durée de la simulation varie de 10ns à 100ns selon la valeur du champ électrique imposé. Plusieurs changements du générateur de la fonction aléatoire nous ont permis d'évaluer la précision de la méthode à 4%.

III.1.4.1 Etude à 300K

III.1.4.1.1 Puits carré infini de GaAs

Pour tester notre modèle, nous avons choisi d'étudier le transport électronique à 300K d'un gaz bidimensionnel d'électrons confiné dans un puits carré infini de GaAs. Sur la figure III-2, nous présentons l'évolution de la vitesse moyenne d'un gaz d'électrons de densité $10^{16} m^{-2}$ dans un puits de largeur 100Å avec une densité d'impuretés de $10^{21} m^{-3}$. Les valeurs de vitesses coïncident dans le régime de mobilité avec celles obtenues pour un matériau non dopé. Pour les champs supérieurs à 1kV/cm, nous observons que la présence d'un dopage résiduel réduit légèrement la vitesse.

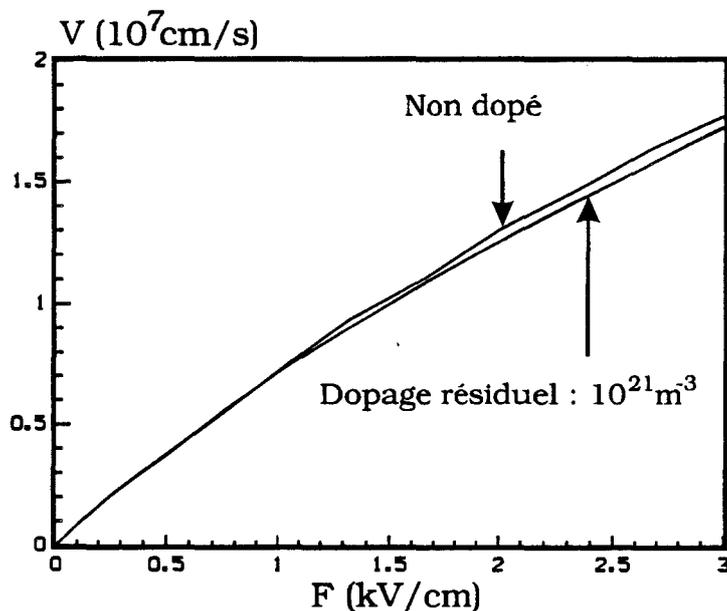


Figure III-2

Evolution de la vitesse avec le champ électrique dans un puits carré infini de GaAs à 300K ($n_{2D} = 10^{16} m^{-2}$)

Chapitre III

Quand le champ électrique croît, la vitesse ne cesse d'augmenter ; en effet, dans ce modèle, il n'existe pas de mécanisme comme le transfert intervallées dans le matériau en volume qui permette de réduire la vitesse. Avec ce modèle, nous nous limiterons donc à l'étude du transport électronique à champ faible en régime de mobilité. La mobilité est calculée à partir de la vitesse obtenue par Monte Carlo à l'aide de la relation I-50, ceci pour un champ électrique de 0.5kV/cm.

A une température de 300K et pour un puits carré infini de GaAs. non dopé, nous avons étudié l'influence de la largeur du puits L sur la mobilité électronique (Fig. III-3). Pour les largeurs inférieures à 150Å, l'écart énergétique entre les différentes sousbandes est suffisamment important pour que les transitions intersousbandes soient négligeables. Quand L croît, les probabilités de transfert intrasousbande diminuent, ce qui entraîne une augmentation de la mobilité. A partir de $L=150\text{Å}$, les interactions intersousbandes ne sont plus négligeables tandis que les transferts intrasousbandes continuent de diminuer. La conjugaison de ces deux phénomènes a pour effet de réduire la mobilité, ainsi que le pourcentage d'électrons en sousbande fondamentale. La dépendance asymptotique en $1/L$ tend à diminuer la probabilité de ces événements, ce qui fait tendre la mobilité vers une valeur constante égale à celle du matériau en volume. L'étude de l'influence de la largeur de puits sur la mobilité électronique a montré qu'il existait une largeur optimale de puits permettant d'obtenir des mobilités électroniques supérieures à celle du matériau en volume.

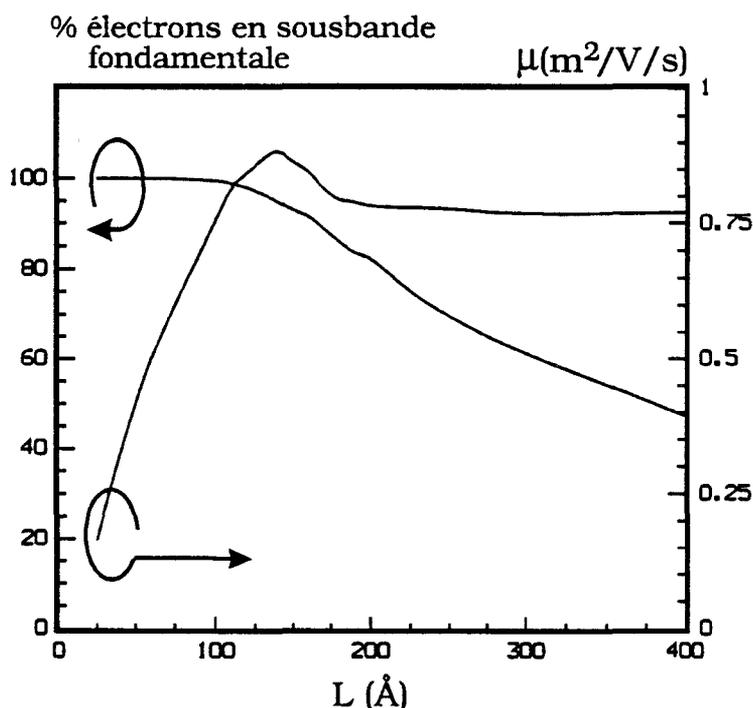


Figure III-3

Evolution de la mobilité dans un puits carré infini de GaAs à 300K avec la largeur de puits ($n_{2D} = 10^{16} \text{m}^{-2}$)

Chapitre III

III.1.4.1.2 Puits carré infini de $Ga(1-x)In(x)As$

Dans cette partie, nous supposons que les électrons sont confinés dans un puits carré de largeur $L=100\text{\AA}$ constitué du matériau $Ga(1-x)In(x)As$ non dopé. Successivement, nous avons étudié les propriétés de transport de ce matériau quand il est épitaxié sur du GaAs ou de l'InP. Les résultats obtenus pour les matériaux contraints et non contraints sont présentés simultanément. La figure III-5 a) montre l'évolution de la mobilité avec la fraction d'indium dans le cas de la filière GaAs. Le comportement des courbes de mobilité est profondément différent de celui observé dans le cas d'un matériau en volume (Fig. I-23). Dans la première partie de la courbe, la mobilité décroît. A partir d'un certain seuil, la courbe stagne, puis amorce une remontée sensible. L'allure de cette courbe s'explique principalement par le comportement de la constante optique polaire C_{op} (Fig. III-4). La masse effective, quant à elle, diminue ce qui tend à améliorer la mobilité. Dans la première portion de la courbe ces deux effets s'opposent, celui du phonon l'emporte et la mobilité diminue. Alors que dans la seconde portion les deux effets vont dans le même sens, ce qui tend à améliorer la mobilité.

Nous avons également étudié l'évolution de la mobilité avec la fraction d'indium x dans le cas de la filière InP. La figure III-5 b) montre que la mobilité croît toujours avec x , ce phénomène s'explique par le raisonnement suivant : Au delà de $x=0.45$, la constante d'interaction optique polaire et la masse décroissent avec x . La superposition de ces deux effets favorables engendre une amélioration de la mobilité quand la fraction d'indium croît. Comme dans le cas de la filière GaAs, la contrainte a pour effet de dégrader la mobilité ; cependant ce phénomène n'est sensible qu'à partir de $x=0.7$.

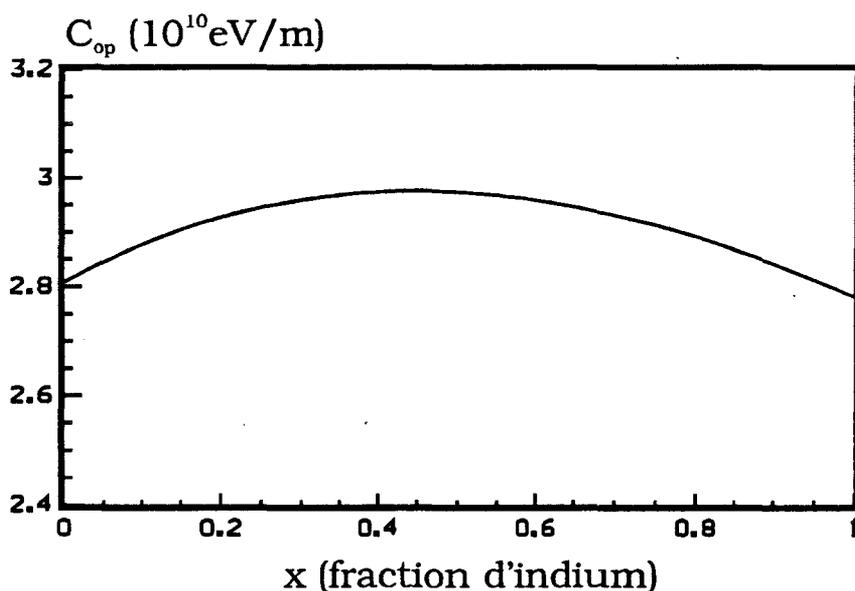


Figure III-4

Evolution à 300K de la constante optique polaire C_{op} avec la fraction d'indium

Chapitre III

Il est important de remarquer que les courbes des figures III-5 a) et III-5 b) obtenues à partir d'un modèle de transport 2D donnent des résultats sensiblement différents de ceux obtenus avec un modèle de transport en volume (Cf. I-5). En particulier, nous avons constaté que les évolutions avec la fraction d'indium n'étaient pas similaires. Globalement, les mobilités obtenues avec le modèle 2D sont plus faibles que celles caractéristiques du matériau en volume. L'effet de la contrainte est plus ou moins marqué selon le type de filière étudié, cependant il va toujours dans le même sens et dégrade la mobilité.

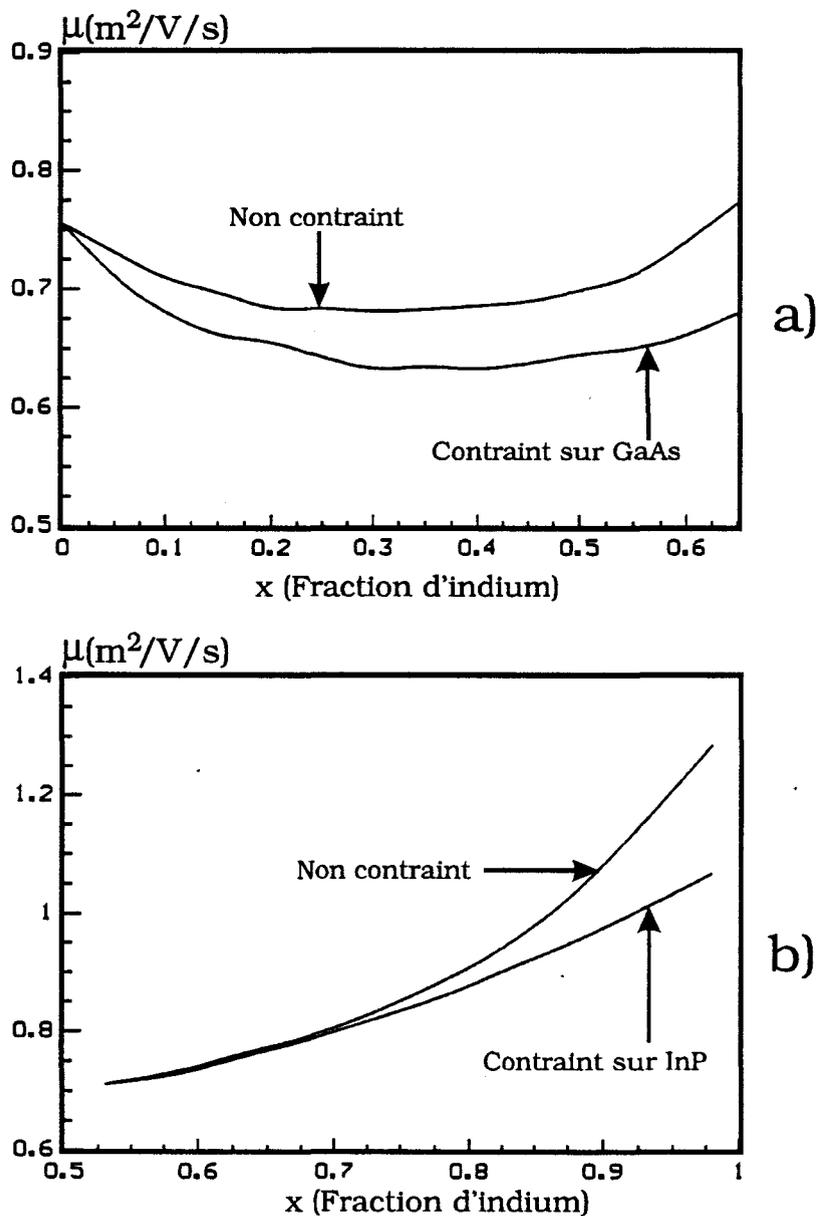


Figure III-5

Evolution de la mobilité à 300K avec la fraction d'indium dans un puits carré infini de GaInAs

($L=100\text{\AA}$ et $n_{2D} = 10^{16} \text{m}^{-2}$)

a) filière GaAs

b) filière InP

III.1.4.2 Etude à 77K

III.1.4.2.1 Puits carré infini de GaAs

Nous montrons sur la figure III-6 qu'à basse température l'effet de l'interaction sur impuretés ionisées sur le transport électronique est important. La présence d'un dopage résiduel de $10^{21} m^{-3}$ dans le puits suffit à dégrader fortement la vitesse moyenne, cet effet est d'autant plus important que le champ électrique est faible.

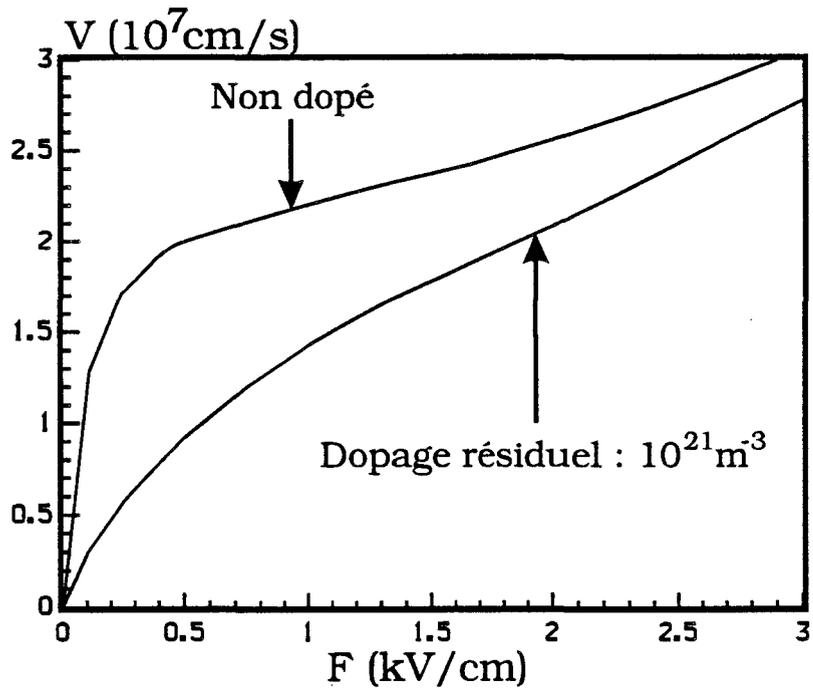


Figure III-6

Evolution de la vitesse avec le champ électrique dans un puits carré infini de GaAs à 77K
 ($L=100\text{\AA}$ et $n_{2D} = 10^{16} m^{-2}$)

Chapitre III

Dans l'étude de la mobilité à 0.2kV/cm présentée ci dessous, nous prenons en compte l'interaction avec les impuretés ionisées. L'évolution de la mobilité dans un puits carré infini de GaAs avec la largeur de puits est présentée sur la figure III-7. La mobilité croît avec la largeur de puits et tend vers une valeur asymptotique. Ce comportement, différent de celui observé à 300K, s'explique par le fait que, même pour des largeur de puits de l'ordre de 200Å, le transport s'effectue principalement en sousbande fondamentale, et que, dans ces conditions, l'interaction intersousbandes joue un rôle mineur.

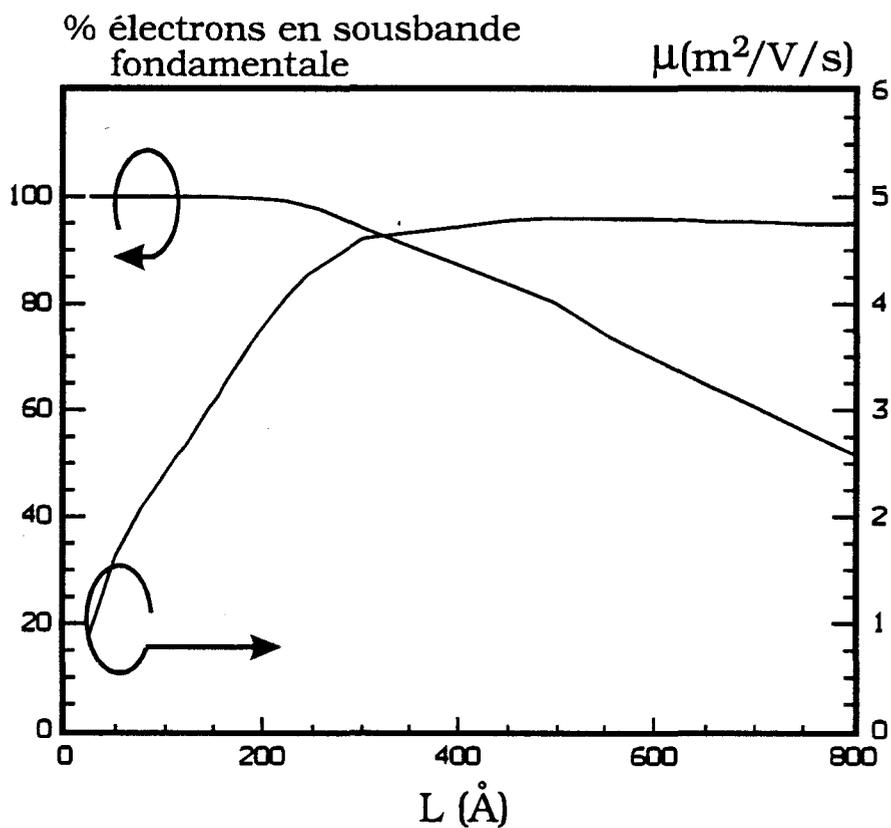


Figure III-7

Evolution de la mobilité dans un puits carré infini de GaAs à 77K avec la largeur de puits ($n_{2D} = 10^{16} \text{ m}^{-2}$)

Chapitre III

III.1.4.2.2 Puits carré infini de $Ga(1-x)In(x)As$

En considérant un gaz électronique de densité $n_{2D} = 10^{16} m^{-2}$ dans le puits de potentiel de largeur 100\AA comportant un dopage résiduel $10^{21} m^{-3}$, nous trouvons des mobilités électroniques (Fig III-8 a) et III-8 b)) nettement inférieures à celles obtenues par Dessenne [8] en négligeant l'interaction sur impuretés ionisées. La contrainte tend, comme à 300K, à dégrader la mobilité. Toutefois, l'évolution avec la fraction d'indium montre que l'effet de la contrainte est de moindre importance qu'à 300K.

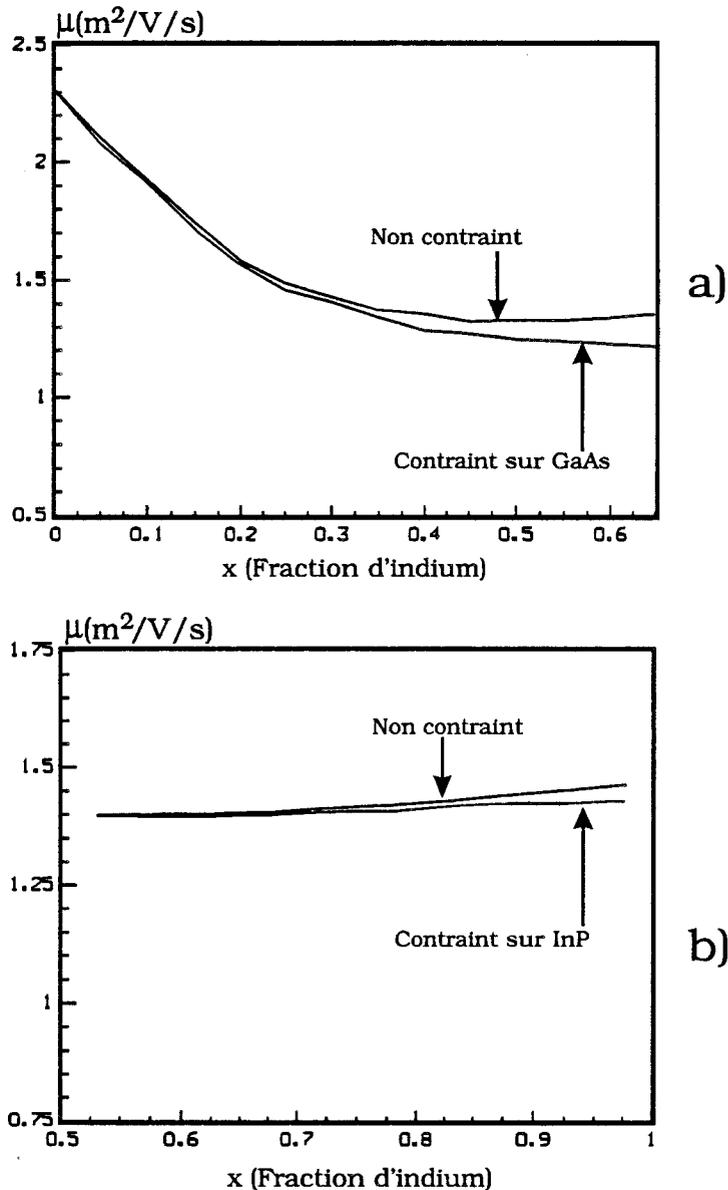


Figure III-8

Evolution de la mobilité à 77K avec la fraction d'indium dans un puits carré infini de $GaInAs$

($L=100\text{\AA}$ et $n_{2D} = 10^{16} m^{-2}$)

a) filière GaAs

b) filière InP

III.1.4.3 Conclusion

A l'aide d'un modèle de transport électronique prenant en compte le caractère bidimensionnel du gaz électronique dans des hétérostructures, nous avons étudié pour la structure idéale d'un puits carré infini, l'influence sur la mobilité des paramètres essentiels que sont la largeur de puits et le taux d'indium. Nous avons montré l'existence d'une largeur de puits optimale pour l'obtention de mobilités élevées. En comparant les deux filières GaAs et InP, nous avons constaté comme dans le cas du transport en volume (Cf. I-5) que, dans la mesure où l'effet de la contrainte était moins important, la filière InP semblait la plus prometteuse aussi bien à 77K qu'à 300K. D'autre part, l'étude de l'interaction sur impuretés ionisées a permis de montrer que ce phénomène jouait un rôle particulièrement important à basses températures. Cette interaction dépend fortement de la distribution énergétique des électrons. Pour la décrire correctement, il est important de tenir compte de l'état de dégénérescence du gaz électronique.

III.2 PRISE EN COMPTE DU PRINCIPE D'EXCLUSION DE PAULI

A champs faibles, pour les faibles densités de porteurs (typiquement $< 10^{15} m^{-2}$) toutes les sousbandes sont situées suffisamment au dessus du niveau de Fermi pour que l'on puisse utiliser la statistique de Maxwell Boltzmann au lieu de la statistique de Fermi Dirac. Cette approximation cesse d'être valable si l'on étudie des gaz fortement dégénérés, en effet, généralement au delà de $10^{16} m^{-2}$, plusieurs sousbandes se situent au dessous du niveau de Fermi.

III.2.1 Principe d'exclusion de Pauli

Dans le but d'expliquer les différentes possibilités permettant d'inclure le principe d'exclusion de Pauli dans une simulation Monte-Carlo, Il est nécessaire de faire un retour sur les fondements de la méthode. Dans le chapitre I nous avons brièvement décrit comment, à partir de $M(k, k')$, élément de matrice de transition de l'état k de la sousbande i vers l'état k' de la sousbande i' par l'intermédiaire d'un potentiel perturbateur, on pouvait déterminer, par l'utilisation de la règle d'or de Fermi la densité de probabilité de transition $s(k, k')$.

L'étude des propriétés de transport de gaz d'électrons dégénérés nécessite l'emploi de la statistique de Fermi-Dirac. Nous avons constaté que l'utilisation des Statistiques de Maxwell-Boltzmann ou Fermi-Dirac lors de la phase d'initialisation des électrons conduisait aux mêmes résultats car le système "oublie" les conditions initiales. Pour tenir compte de la dégénérescence, il est nécessaire de d'inclure le principe de Pauli dans le modèle Monte-Carlo utilisé.

Nous avons également décrit (I.3.3.2.1) la méthode permettant de calculer les probabilités d'interaction $\lambda(E)$. L'équation I-42 tient compte du fait que pour qu'il y ait transition de l'état k vers l'état k' il est nécessaire que l'état final soit libre (ce qui est d'autant moins probable que la densité électronique est élevée). Un modèle Monte-Carlo où les probabilités de transition seraient calculées avec cette équation tiendraient compte implicitement du principe de Pauli. Mais ceci suppose que l'on connaisse la fonction de distribution instantanée des électrons, puisque la fonction de distribution varie dans le temps, il faudrait donc recalculer à chaque pas de temps les probabilités de transition, ce qui est prohibitif en temps de calcul et en occupation mémoire.

Il existe deux méthodes moins pénalisantes qui permettent de prendre en compte le principe de Pauli :

La première méthode [11] consiste à supposer que le champ électrique est faible et à approximer la fonction de distribution par celle correspondant à l'équilibre thermodynamique (Fermi Dirac), on peut donc tabuler les probabilités d'interaction $\lambda(E)$:

$$\lambda(E) = \frac{1}{4\pi^2} \int s(k, k')(1 - f_{FD}(k')) dk' \quad (\text{éq III-28})$$

Chapitre III

Cette méthode, de par son approximation fondamentale, se limite donc aux champs très faibles.

La seconde méthode ne présente pas cet inconvénient ; c'est pour cette raison que nous l'avons choisie. Nous la présentons dans le paragraphe suivant.

III.2.2 Méthode adoptée

Lugli [12] a proposé en 1985 une méthode originale pour tenir compte du principe de Pauli dans l'étude des phénomènes de transport électronique dans l'Arséniure de Gallium dégénéré (considéré comme un matériau en volume). Nous avons suivi la même démarche et adapté de la même manière que Mouis [13], la méthode au cas des gaz bidimensionnels.

Comme nous l'avons exposé précédemment, le principe de Pauli joue un rôle à l'instant où l'on détermine la probabilité de transition vers l'état final, par l'intermédiaire du terme $1-f(k')$ qui traduit la probabilité que l'état final soit libre. Le principe de Pauli n'affecte pas la phase de vol libre.

Si, par ailleurs, on connaît la distribution $f(k')$, un nombre aléatoire tiré entre 0 et 1 peut être utilisé pour accepter ou rejeter la transition selon que ce nombre est plus grand ou plus petit que $f(k')$.

Le problème délicat de cette méthode est la détermination de la fonction de distribution des électrons.

III.2.2.1 Détermination de la fonction de distribution des électrons.

La méthode que nous adoptons pour déterminer la fonction de distribution des électrons est dérivée de celle de Lugli. Elle consiste à discrétiser l'espace réciproque en cellules élémentaires et à compter le nombre d'électrons par cellule.

On détermine, dans un premier temps, le nombre d'états quantiques disponibles par unité de surface de l'espace réel, en tenant compte de la dégénérescence de spin.

$$N_d = 2 \cdot \frac{1}{4\pi^2} \quad (\text{éq III-29})$$

Quand on simule N électrons représentant un gaz bidimensionnel de densité n_{2D} , la densité d'états disponibles est :

$$N_d = 2 \cdot \frac{1}{4\pi^2} \frac{N}{n_{2D}} \quad (\text{éq III-30})$$

Une cellule C_{ki} de l'espace réciproque, de dimension $\Delta k_x \Delta k_y$, dispose donc d'un nombre d'états défini par :

Chapitre III

$$N_{dC_k} = 2 \cdot \frac{1}{4\pi^2} \frac{N}{n_{2D}} \Delta k_x \Delta k_y \quad (\text{éq III-31})$$

Si l'on choisit de représenter l'état k , non plus par le couple de variables (k_x, k_y) mais par les variables (E, θ) , où E est l'énergie cinétique de l'électron, et θ l'angle entre le vecteur \vec{k} et le champ électrique. On fait intervenir le jacobien $J = m_i^* \gamma_i(E) / \hbar^2$ de ce changement de variable :

Le nombre d'états disponibles dans une cellule élémentaire $\Delta E \Delta \theta$ est :

$$N_{dC_k} = \frac{m_i^* N \gamma_i(E)}{2\pi^2 \hbar^2 n_{2D}} \Delta E \Delta \theta \quad (\text{éq III-32})$$

Pour connaître la fonction de distribution des électrons, on adopte la méthode suivante : On discrétise l'espace réciproque en cellules C_{k_i} . Pour chaque électron de l'ensemble, on connaît à chaque instant sa position (E, θ) . On peut ainsi accéder au nombre entier d'électrons par cellules $N_{C_{k_i}}$ et par là même déterminer la fonction de distribution instantanée des électrons.

Si l'on choisit de fixer N et N_{dC_k} , et de déterminer ensuite ΔE et $\Delta \theta$, le taux d'occupation par cellule $T_{C_{k_i}}$ de la cellule est :

$$T_{C_{k_i}} = \frac{N_{C_{k_i}}}{N_{dC_k}} \quad (\text{éq III-33})$$

Comme $N_{C_{k_i}}$ est un entier, il faut que N_{dC_k} soit suffisamment grand pour que l'on n'introduise pas une erreur statistique importante lors du calcul de $T_{C_{k_i}}$; nous adoptons $N_{dC_k} = 8$ (valeur préconisée par Lugli)

III.2.2.2 Prise en compte du principe de Pauli

Quand une interaction est tirée au sort, on détermine l'état final k' et la cellule $C_{k'}$ qui contient l'état k' . Le nombre d'électrons présents dans la cellule k' avant la détermination de l'état final, est normalisé par rapport au nombre maximum d'électrons par cellule N_{dC_k} . On obtient ainsi $T_{C_{k'}}$ le taux d'occupation de la cellule $C_{k'}$ avant l'interaction. La probabilité que l'état final soit disponible est donc $1 - T_{C_{k'}}$. En tirant un nombre aléatoire r entre 0 et 1 et en le comparant à $T_{C_{k'}}$ on peut déterminer si l'état final est possible ou non.

Si $r > T_{C_{k'}}$ la transition est acceptée et l'on affecte à l'électron l'état k' .

Si $r < T_{C_{k'}}$ la transition est refusée et l'électron reste dans l'état k .

Chapitre III

Cette procédure de rejet peut donc être considérée comme un mécanisme d'interaction auxiliaire caractérisé par la probabilité $1 - T_{C_{in}}$. Toutes les interactions sont traitées de cette manière ; la probabilité qu'une interaction soit réalisée apparaît naturellement comme le produit de deux probabilités : celle que l'interaction soit choisie et celle que l'état final soit disponible.

III.2.3 Résultats

III.2.3.1 Effet du principe de Pauli dans un puits carré infini

Dans le but de montrer l'effet du principe de Pauli sur le transport électronique dans un gaz bidimensionnel, nous avons choisi comme première illustration le cas simple d'un puits carré infini de GaAs de largeur 100\AA comportant un dopage résiduel de $10^{21} m^{-3}$ et effectué l'étude du transport à 77K. Dans ces conditions l'interaction sur impuretés ionisées joue un rôle important.

Trois cas ont successivement été examinés :

(1) Initialisation des électrons selon la distribution de Maxwell Boltzmann (dans ce cas on n'applique pas le principe de Pauli au cours de la simulation).

(2) Initialisation des électrons selon la distribution de Fermi Dirac et non prise en compte du principe de Pauli au cours de la simulation.

(3) Initialisation des électrons selon la distribution de Fermi Dirac et prise en compte du principe de Pauli au cours de la simulation.

Nous avons observé que les deux premiers cas conduisaient quasiment aux mêmes résultats sur les principales grandeurs, ce qui montre que l'état final du système est indépendant de l'état initial. Sur les figures, seul le second cas sera présenté.

Chapitre III

La prise en compte du principe de Pauli a pour effet de réduire le nombre d'électrons occupant les états de faible énergie, l'énergie moyenne des électrons se trouve ainsi sensiblement augmentée. Sur la figure III-9, nous observons l'effet du principe de Pauli sur la caractéristique énergie-champ ($n_{2D} = 10^{16} m^{-2}$ et $n_{2D} = 2 \cdot 10^{16} m^{-2}$). Quand le champ accélérateur croît, le nombre d'interactions augmente et le test de rejection est effectué de plus en plus fréquemment.

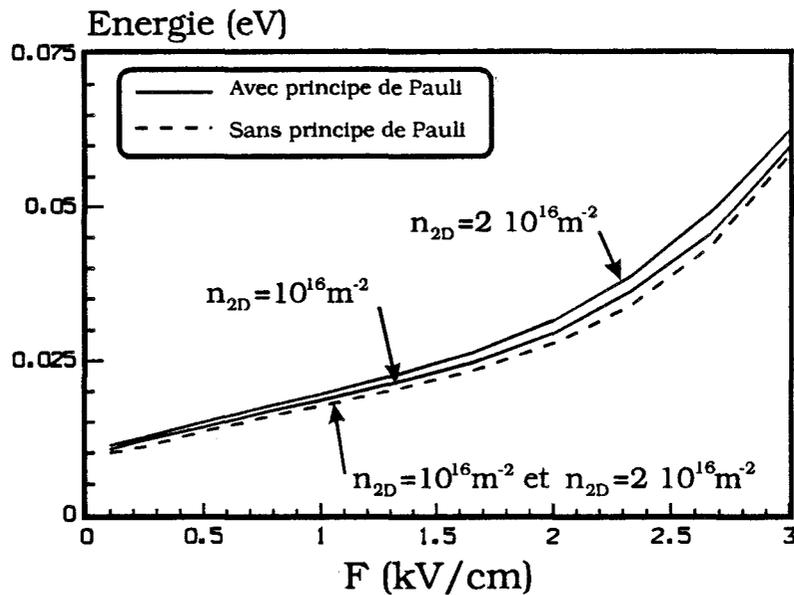


Figure III-9

Evolution de l'énergie avec le champ électrique

Pour les plus forts champs étudiés, l'effet du principe de Pauli est moindre puisqu'un plus grand nombre d'états énergétiques est naturellement occupé. Il faut cependant se souvenir que pour les champs de l'ordre de 3kV/cm, le modèle que nous utilisons atteint sa limite de validité. L'augmentation de l'énergie moyenne due à la prise en compte du principe de Pauli est plus importante pour la densité électronique la plus élevée ($2 \cdot 10^{16} m^{-2}$ dans le cas présent).

Nous avons également étudié l'influence de la densité électronique sur l'énergie et la vitesse. Quand la densité croît, l'effet d'écran augmente et le nombre d'interactions diminue. Ceci a pour conséquence l'accroissement de l'énergie et de la vitesse avec la densité électronique. Si l'on néglige le principe de Pauli, on observe une saturation de l'énergie et de la vitesse à partir de $n_{2D} = 8 \cdot 10^{15} m^{-2}$. Ce phénomène est directement lié à l'évolution du facteur d'écran avec la densité électronique (Fig. III-10). Le principe de Pauli, tout comme l'effet d'écran, diminue le nombre d'interactions. Ceci n'est perceptible

Chapitre III

sur les courbes d'énergie et de vitesse que lorsque la densité est élevée. Comme cela a déjà été constaté sur la figure III-9, l'effet du principe de Pauli est plus important à 2kV/cm qu'à 1kV/cm.

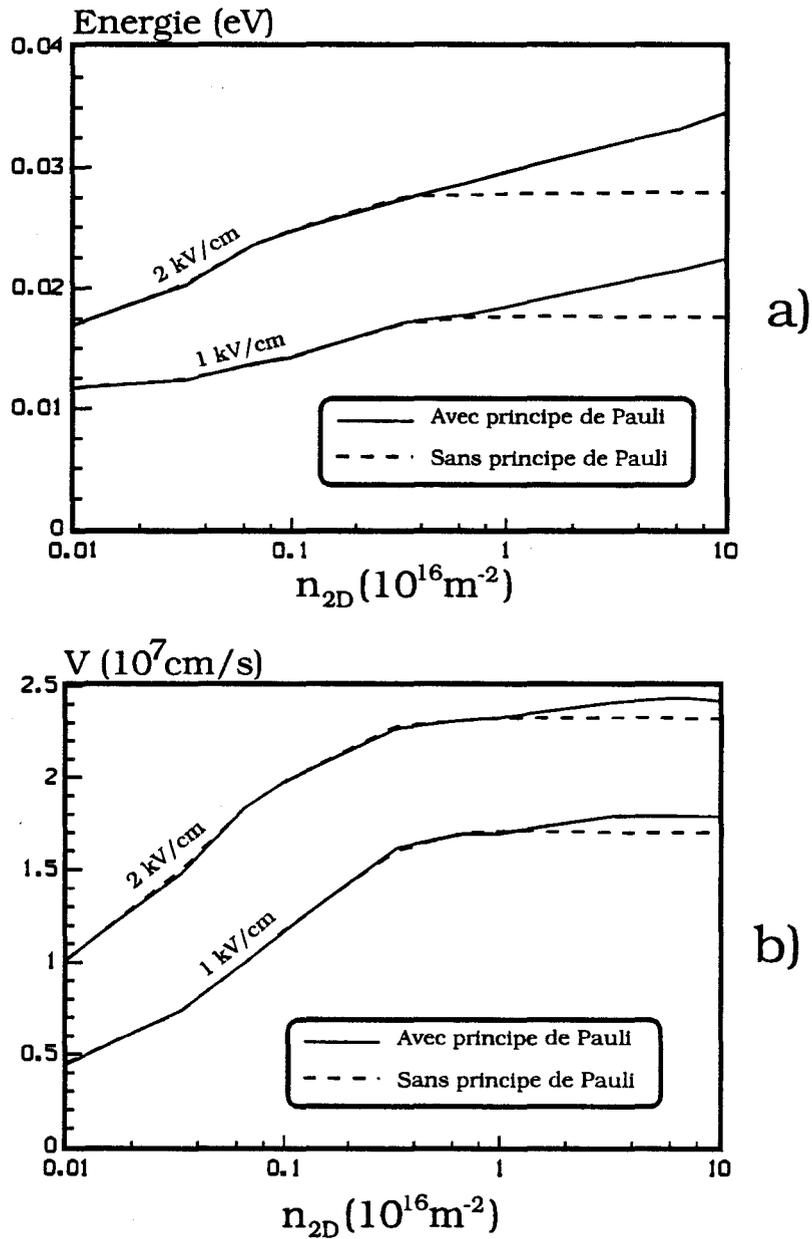


Figure III-10

Evolution de l'énergie a) et de la vitesse b) avec la densité électronique

Après l'étude d'un puits carré infini, nous allons nous intéresser à des structures où l'interaction sur impuretés ionisées est forte.

III.2.3.2 Etude d'une structure à plan de dopage

Les composants électroniques utilisent de plus en plus des hétérostructures comprenant des plans de dopage. Ce dernier terme désigne des zones de faible épaisseur où la densité électronique est très élevée. Nous avons étudié deux structures classiques (Fig. III-11) qui ne diffèrent que par la présence dans l'une d'elles d'un plan de dopage d'impuretés de densité $2 \cdot 10^{25} m^{-3}$ de largeur 8 \AA . Pour une densité électronique $n_{2D} = 10^{16} m^{-2}$ et une température de $77K$, le profil de la bande de conduction dans ces deux structures est très différent.

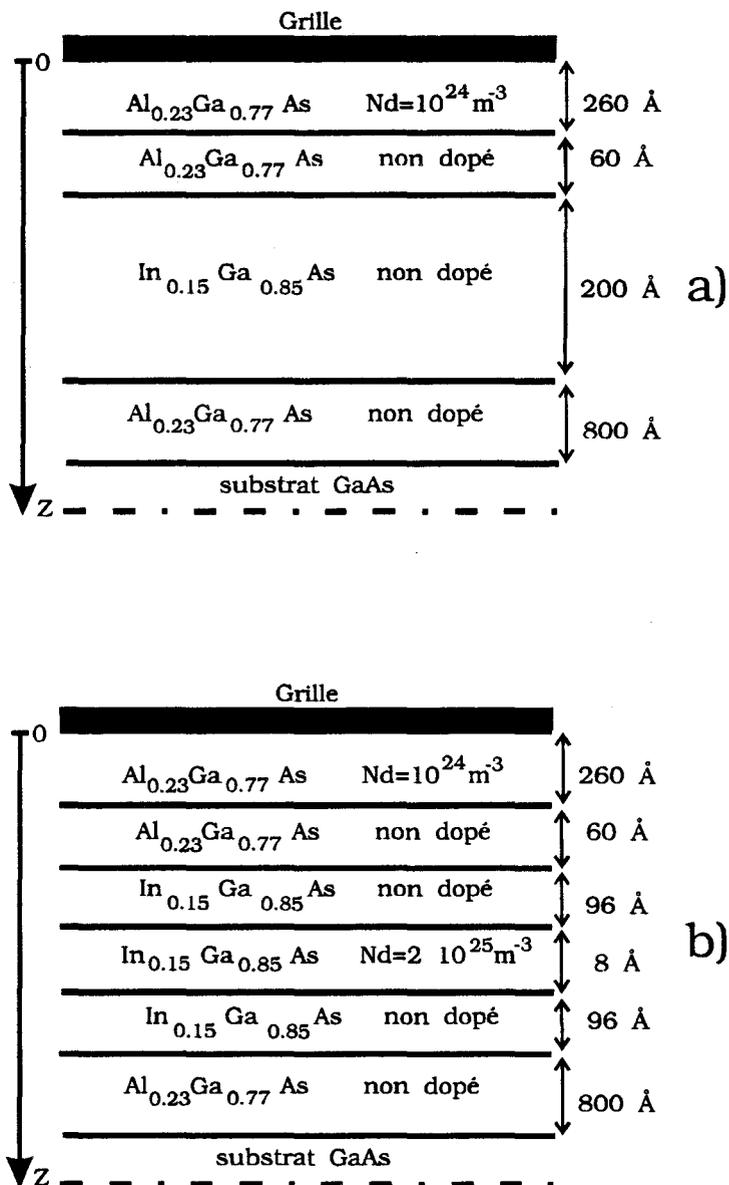


Figure III-11

Structures étudiées :
 a) sans plan de dopage
 b) avec plan de dopage

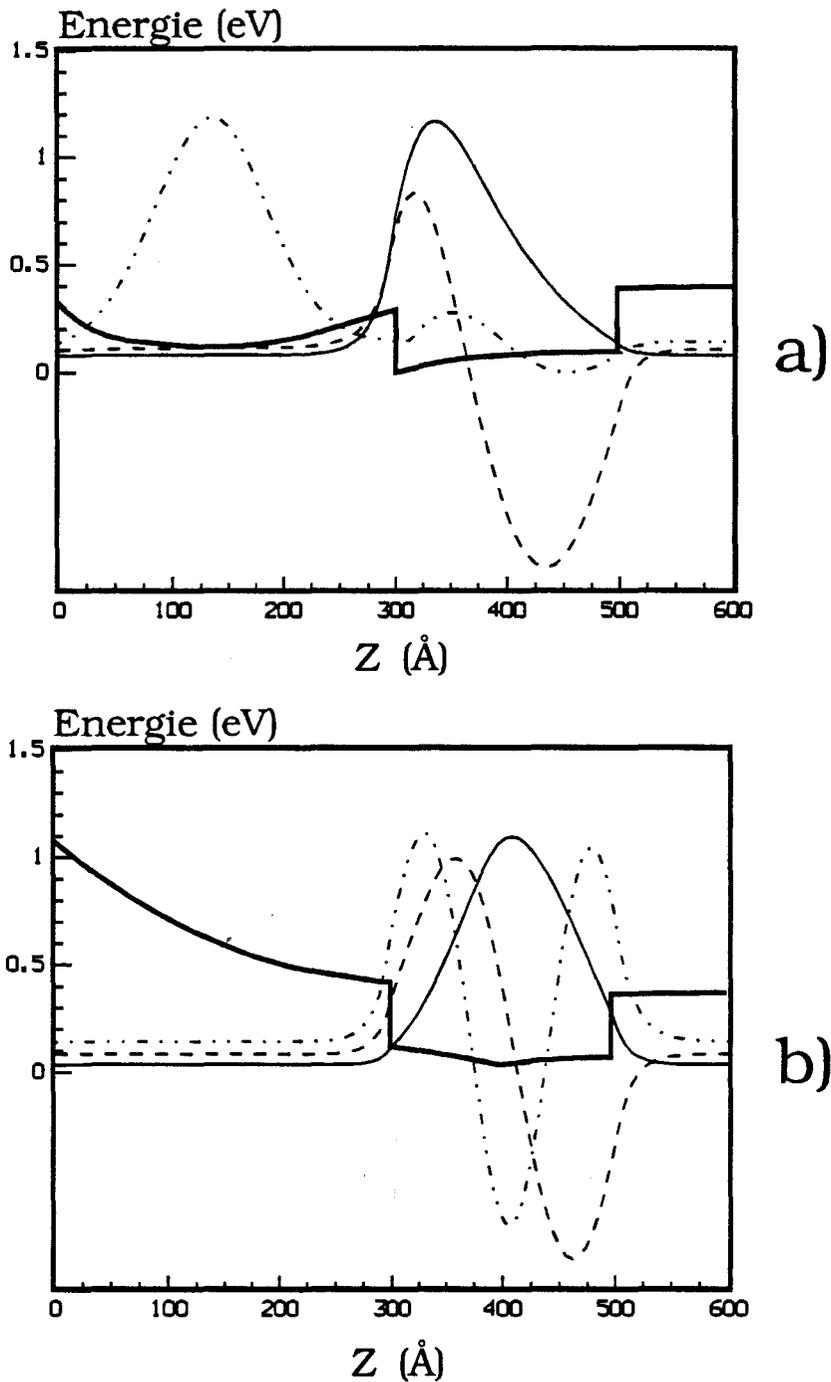


Figure III-12

Bande de conduction et états électroniques pour les deux structures étudiées :

a) sans plan de dopage (Fig. III-11 a))

b) avec plan de dopage (Fig. III-11 b))

La valeur 0 de la fonction d'onde, lue sur l'axe des ordonnées indique le niveau énergétique de la sousbande correspondante

Chapitre III

La présence d'un plan de dopage a pour effet de creuser le puits de potentiel en son centre (Fig. III-12), et de mieux localiser les sousbandes dans le puits de potentiel. Ce dernier phénomène n'a que peu d'importance dans cette partie puisque le transport est monosousbande. Sur les figures III-13 a) et III-13 b), nous présentons l'évolution de l'énergie et de la vitesse pour les deux structures étudiées. Sans plan de dopage, l'interaction sur impuretés est négligeable et, de ce fait, le principe de Pauli ne joue pas un rôle important. L'utilisation d'un plan de dopage entraîne un grand nombre d'interactions entre les électrons et les impuretés ionisées, ce qui dégrade fortement la vitesse et l'énergie. Ce phénomène est si important que la concavité de la courbe vitesse-champ électrique s'en trouve inversée.

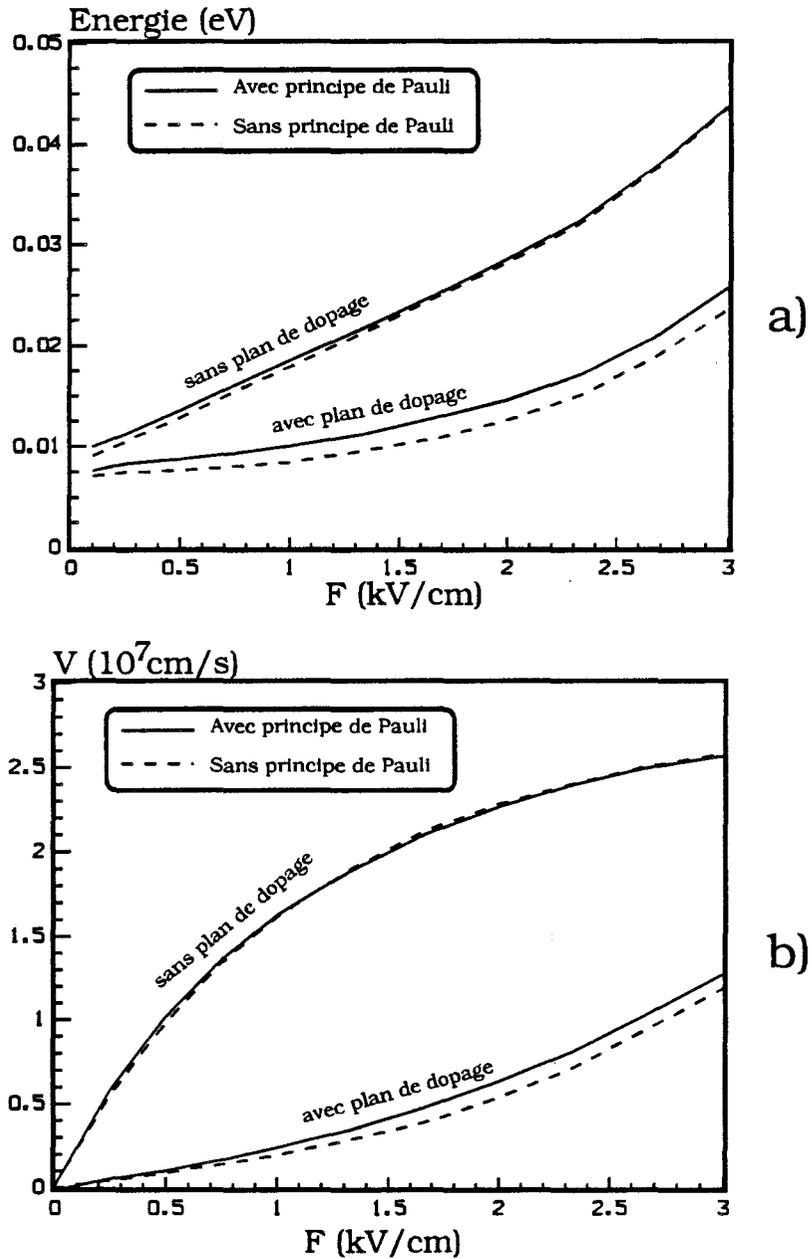


Figure III-13

Evolution de l'énergie a) et de la vitesse b) avec le champ électrique

III.2.3.3 Etude d'une structure à deux puits

La structure présentée sur la figure III-14 comporte deux puits de potentiel constitués de Ga(0.85)In(0.15)As non dopé. Le puits le plus proche de la grille est entouré de deux couches de Ga(0.85)Al(0.15)As dopé à $2 \cdot 10^{24} m^{-3}$, tandis que le second est entouré de deux couches du même matériau mais non dopé. La tension appliquée sur la grille permet de contrôler la densité électronique et la position des électrons dans la structure. A 77K, la plupart des électrons sont situés sur la sousbande fondamentale et la position des électrons dans la structure est donnée par la probabilité de présence des électrons en sousbande fondamentale $\xi_1^2(z)$. Pour $n_{2D} = 10^{14} m^{-2}$ les électrons sont localisés dans le puits situé entre deux matériaux non dopés (Fig. III-15 a)) alors que pour $n_{2D} = 10^{16} m^{-2}$ les électrons sont localisés dans le puits situé entre deux matériaux dopés (Fig. III-15 b)).

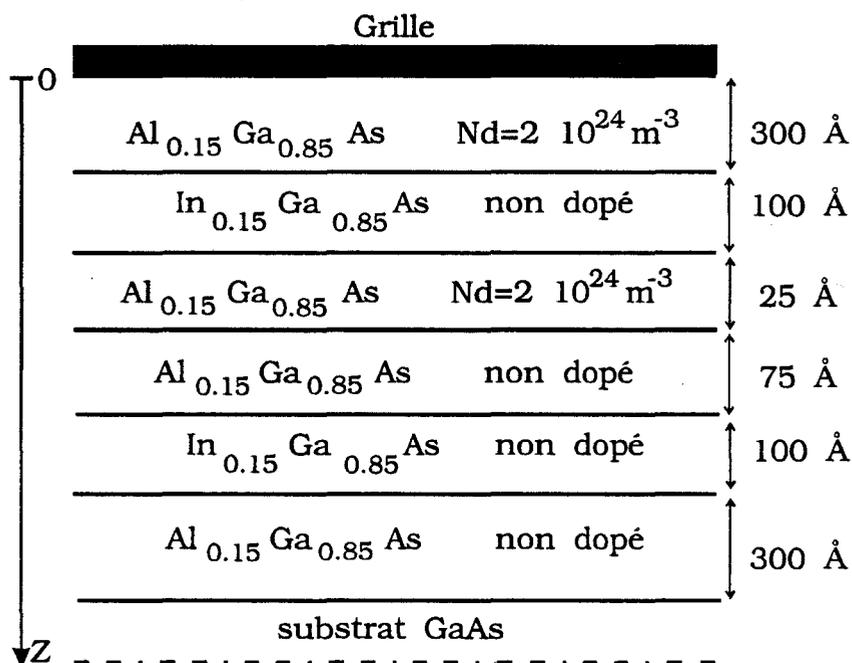


Figure III-14
Structure double puits étudiée

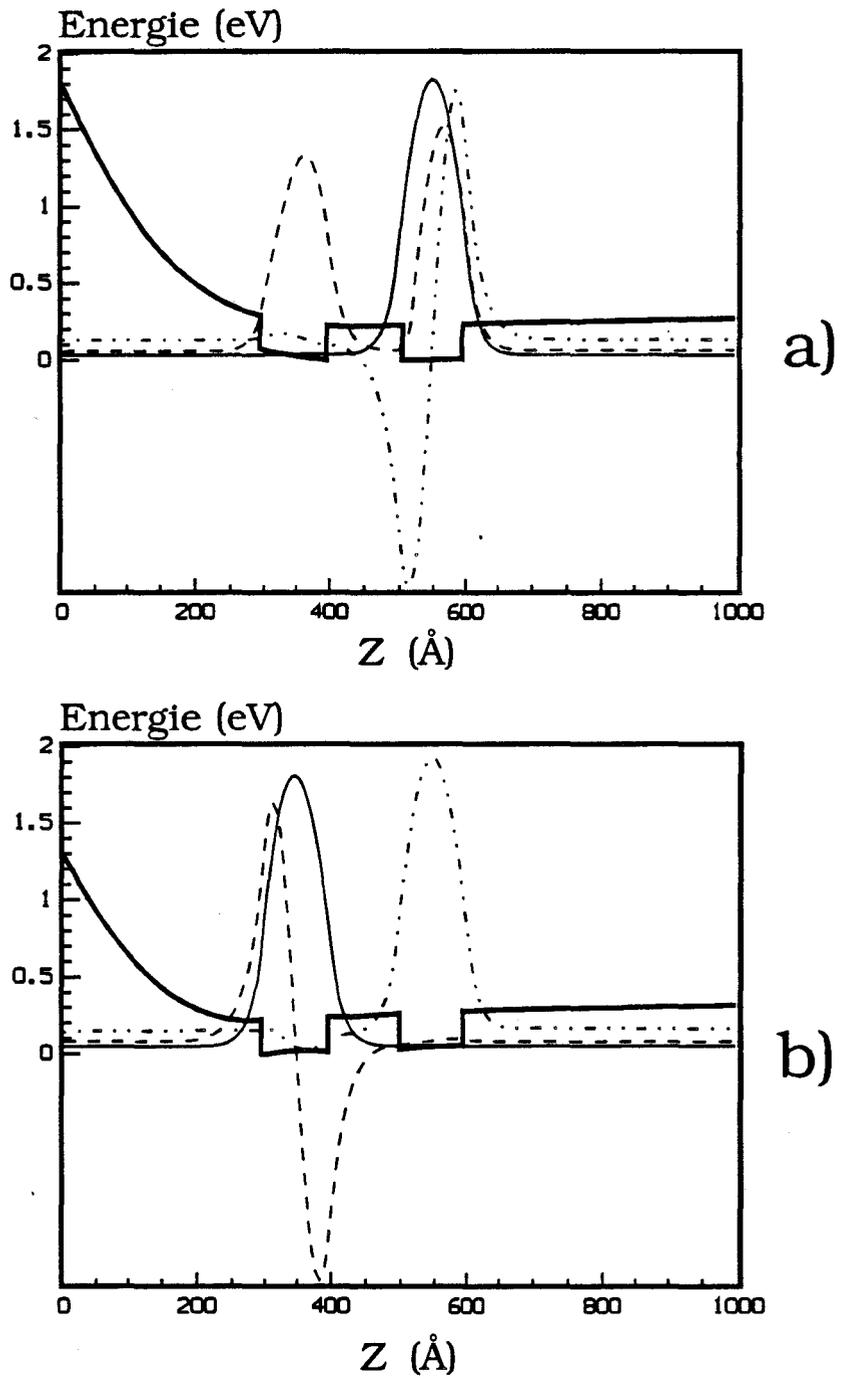


Figure III-15

Bande de conduction et fonction d'onde de la structure double puits (Fig. III-14)

a) $n_{2D} = 10^{14} \text{ m}^{-2}$

b) $n_{2D} = 10^{16} \text{ m}^{-2}$

La valeur 0 de la fonction d'onde, lue sur l'axe des ordonnées, indique le niveau énergétique de la sousbande correspondante

Chapitre III

Les caractéristiques énergie-champ électrique et vitesse-champ électrique pour ces deux configurations sont présentées sur les figures III-16 a) et III-16 b). Si l'on néglige le principe de Pauli (courbes en trait pointillé), la première partie des courbes, les énergies et vitesses obtenues avec $n_{2D} = 10^{16} m^{-2}$ et $n_{2D} = 10^{14} m^{-2}$ sont très proches. Pour $n_{2D} = 10^{16} m^{-2}$ nous obtenons des énergies et vitesses plus faibles que pour $n_{2D} = 10^{14} m^{-2}$ puisque la distance moyenne avec les impuretés est plus faible. Notons que l'effet d'écran qui est important pour $n_{2D} = 10^{16} m^{-2}$ ne parvient pas à compenser l'effet de proximité des impuretés. Au delà d'une certaine valeur du champ électrique, les courbes se croisent. Ce phénomène est dû à l'importance relative de l'interaction sur impuretés qui décroît avec le champ électrique puisque l'énergie moyenne des électrons augmente. Si l'on prend en compte le principe de Pauli (courbes en trait plein), l'énergie moyenne des électrons est plus élevée et l'importance relative de l'interaction sur impuretés ionisées est moindre. Les énergies et les vitesses obtenues avec $n_{2D} = 10^{16} m^{-2}$ sont plus élevées que pour $n_{2D} = 10^{14} m^{-2}$.

Le modèle Monte-Carlo utilisé jusqu'à ce stade de l'exposé prend en compte les principaux phénomènes physiques intervenant à faibles champs. Dans le paragraphe suivant, nous proposons de le compléter pour décrire une plus large gamme de champs.

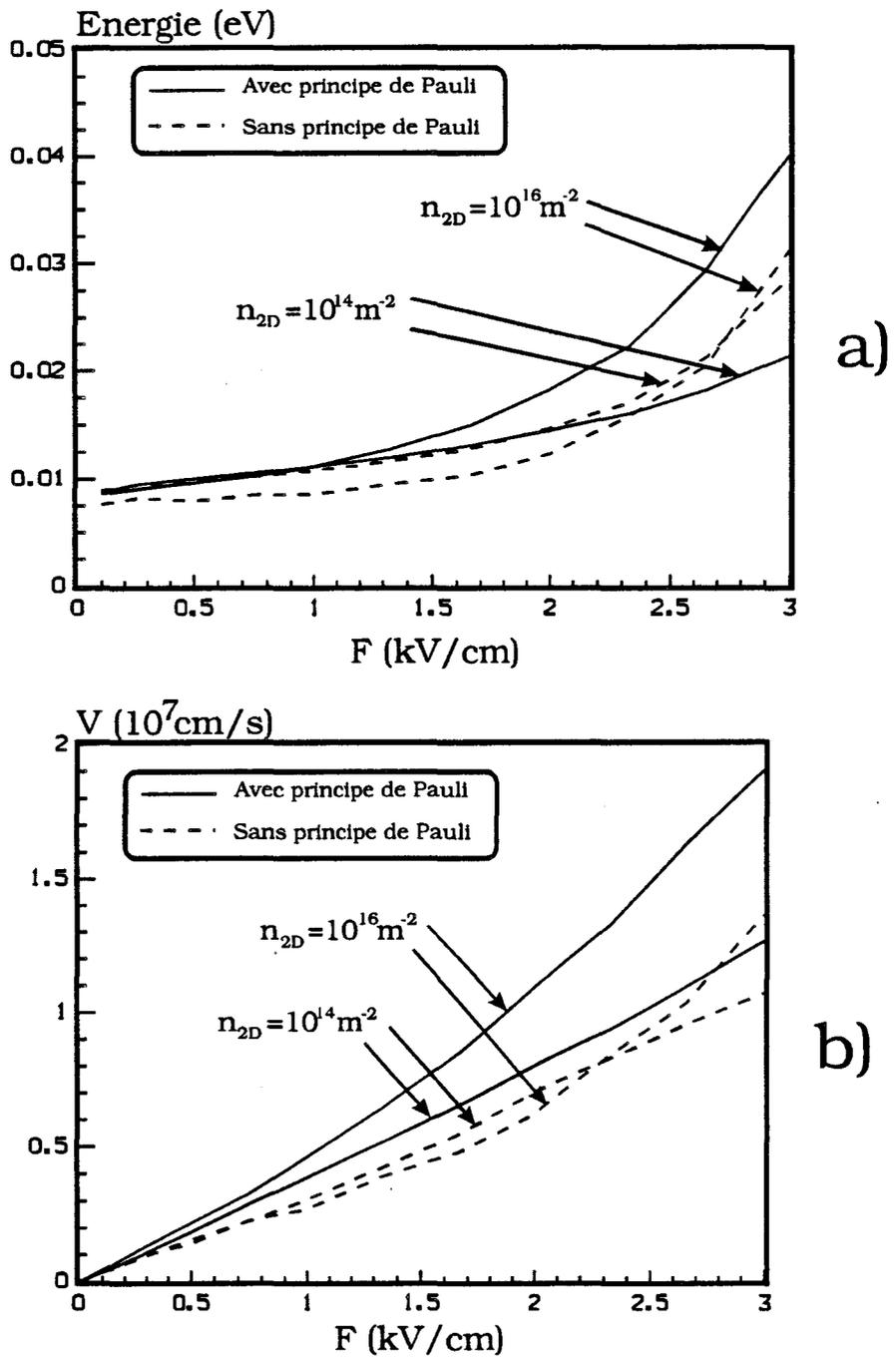


Figure III-16

Evolution de l'énergie a) et de la vitesse b) avec le champ électrique

III.3 EXTENSION DU MODELE MONTE CARLO AUX CHAMPS ELEVES

III.3.1 Position du problème

Dans la partie I de ce chapitre, nous avons présenté un modèle Monte Carlo permettant d'étudier le transport électronique dans une hétérostructure. Dans ce modèle, les électrons occupent les états électroniques quantifiés de la vallée Γ et ont un mouvement bidimensionnel. Quand le champ électrique appliqué croît, l'énergie et la vitesse des électrons ne cessent d'augmenter, conduisant ainsi à des résultats "non physiques". Des phénomènes classiques observés dans les matériaux III-V tels la mobilité différentielle négative et la vitesse pic ne peuvent être décrits par le modèle présenté dans le paragraphe III-1. Le domaine de validité de ce modèle est donc celui des faibles champs.

Une première méthode permet de lever cette limitation : elle suppose l'existence dans toute la structure d'un continuum d'états électroniques 3D situés à des énergies supérieures aux niveaux liés du puits de potentiel. Pour un électron occupant ces états 3D, le déplacement dans la direction z est autorisé. Dans ces conditions, la dynamique électronique peut être décrite par un modèle Monte-Carlo 3D du type de celui utilisé dans le cinquième paragraphe du chapitre I. Les transferts intervalles permettent de retrouver les effets de vitesse pic et de mobilité différentielle négative. Le point délicat de cette méthode réside dans le traitement des transferts d'états 2D vers les états 3D. Cette méthode proposée par Wu [2] et Zimmerman [14] suppose que la probabilité qu'un électron de la sousbande i s'échappe de la vallée Γ_{2D} est d'autant plus grande que l'électron se situe près d'un lobe de la fonction d'onde $\xi_i(z)$. L'expression suivante de la probabilité de transition de la sousbande i de la vallée Γ_{2D} vers une vallée V_{3D} a été utilisée.

$$\lambda_{i\Gamma_{2D} \rightarrow V_{3D}}(E, z) = \lambda_{\Gamma_{3D} \rightarrow V_{3D}}(E + E_i) 3b_{ii} |\xi_i(z)|^2 \quad (\text{éq III-34})$$

Où b_{ii} est la largeur effective, définie par l'équation III-23

Pour déterminer la probabilité d'interaction, il est donc nécessaire de connaître la position de l'électron. S'il y a interaction, la condition de conservation de l'énergie totale détermine l'énergie après interaction et donc le vecteur \vec{k} . A un même instant, on est donc amené à connaître z et k_z simultanément, ce qui ne respecte pas le principe d'incertitude d'Heisenberg.

Un électron de la vallée Γ peut être soit bidimensionnel, soit tridimensionnel, ce qui ne simplifie pas son traitement. L'algorithme de la méthode de Monte-Carlo est sensiblement compliqué par la prise en compte des transferts 2D-3D. La coexistence d'un modèle Monte-Carlo bidimensionnel de transport en vallée Γ et d'un modèle Monte-Carlo tridimensionnel incluant les vallées Γ, L et X nuit à la clarté du code de calcul.

Tanimoto [15] a suggéré une approche totalement différente de l'étude du domaine des champs élevés. Cette méthode considère uniquement des états 2D, y compris pour les vallées satellites ce qui constitue son aspect original. Sur la base des travaux de Tanimoto nous avons développé une méthode d'étude qui est présentée en détail dans le paragraphe suivant.

III.3.2 Détermination des états électroniques des vallées L et X

Nous supposons que les états de hautes énergies localisés dans les vallées L et X sont quantifiés. Pour les déterminer, nous procédons de la façon suivante :

A partir du potentiel électrostatique en vallée Γ obtenu à partir du calcul autocohérent à l'équilibre, et de la connaissance des gaps intervallées des différents matériaux, nous déterminons dans toute l'hétérostructure le potentiel en vallées L ; ce potentiel est ensuite introduit dans l'équation de Schrödinger qui est résolue par la méthode des différences finies. Les vallées L sont ainsi représentées par un ensemble de sousbandes auxquelles sont associées des fonctions d'ondes et des niveaux d'énergie. On répète ce procédé pour déterminer les états des vallées X. Les probabilités d'interaction intravallées pour les sousbandes des vallées L et X sont calculées à l'aide des expressions données dans la partie III.1.2 en tenant compte du fait qu'un certain nombre de paramètres (masse, coefficient de non parabolicité, potentiel électrostatique par exemple) dépendent de la vallée.

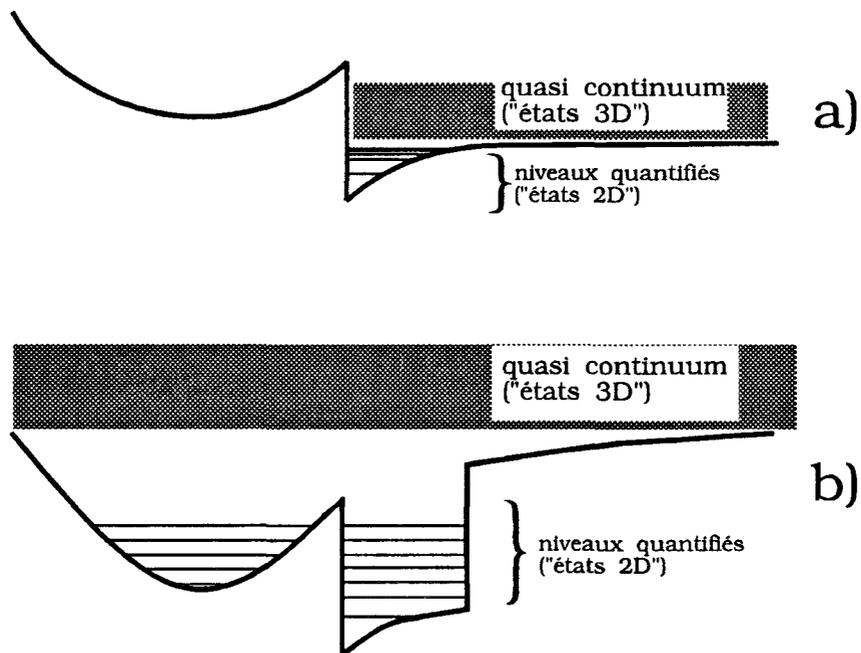


Figure III-17

Etats 2D et 3D dans une hétérostructure

III.3.3 Interactions intervalées 2D-2D

A partir du potentiel d'interaction intervalées 3D-3D, nous avons déterminé la probabilité d'interaction intervalées 2D-2D en adoptant la même méthode que dans le partie III.1.2 . La probabilité de transfert de la sousbande i de la vallée v_i vers la sousbande j de la vallée v_j est donnée par l'expression suivante :

$$\lambda(E) = \frac{m_i^* k T \gamma_i(E)}{2 \hbar^3} \sum_{c \text{ couches}} \frac{z_{v_j} (\Phi_{v_i, v_j}^c)^2}{\rho_c \omega_{v_i, v_j} b_{ij}^c} \quad (\text{éq III-35})$$

ω_{v_i, v_j} : phonon d'interaction intervalées.

Φ_{v_i, v_j}^c : potentiel de déformation intervalées du matériau de la couche c .

ρ_c : densité volumique du matériau de la couche c .

z_{v_j} : nombre de vallées équivalentes pour la vallée v_j .

Nous supposons que l'effet de cette interaction sur la direction du vecteur d'onde est randomisant.

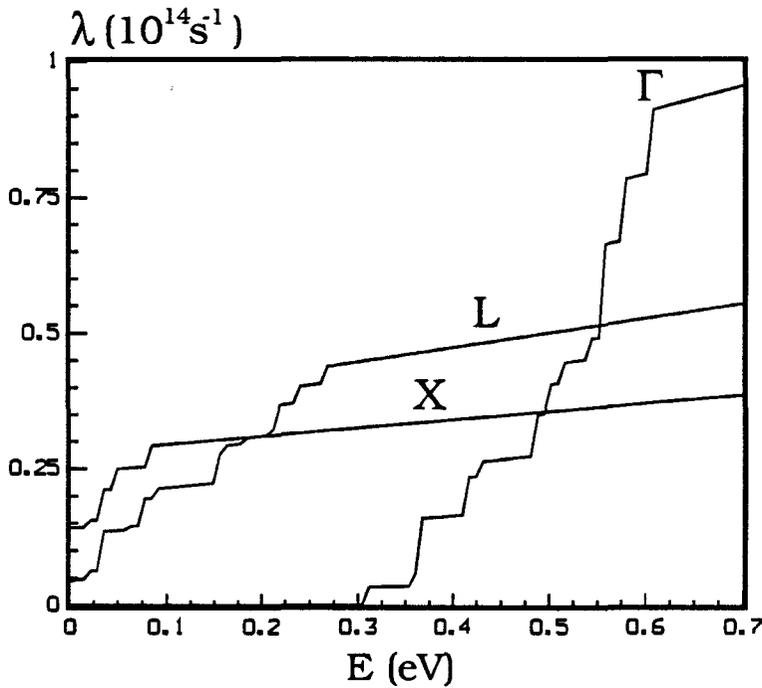


Figure III-18

Probabilité d'interaction intervalées à 300K pour un puits carré infini de GaAs en considérant 3 sousbandes par vallées

III.3.4 Interaction optique non polaire

L'interaction optique non polaire qui affecte principalement les électrons situés sur des sousbandes de la vallée L est prise en compte dans notre modèle. La probabilité de transition correspondante est calculée à partir du potentiel optique non polaire 3D.

$$\lambda(E) = \frac{m_i^* kT \gamma_i(E)}{2\hbar^3} \sum_{c \text{ couches}} \frac{(\Phi_{opn}^c)^2}{\rho_c \omega_{opn} b_{ij}^c} \quad (\text{éq III-36})$$

ω_{opn} : phonon d'interaction intervalées.

Φ_{opn}^c : potentiel de déformation intervalées du matériau de la couche c.

ρ_c : densité volumique du matériau de la couche c.

L'effet de cette interaction sur la direction du vecteur d'onde est supposé randomisant.

III.3.5 Exemple du puits carré infini

Pour illustrer ce qui précède, nous avons supposé que les fonctions d'onde associées aux sousbandes des vallées Γ, L et X étaient celles d'un puits carré infini. Le matériau étudié est le GaAs et la température est fixée à 300K, nous comparons sur la figure III-19 les caractéristiques vitesse-champ électrique dans des puits quantiques de 50Å, 100Å, et 200Å et dans un matériau massif. On observe dans les structures 2D, les mêmes phénomènes de mobilité différentielle négative et saturation de vitesse, que dans le matériau massif. Pour des puits dont la largeur est comprise entre 100Å et 200Å, les courbes sont proches de celles correspondant au matériau massif, légèrement supérieure pour $L=200\text{Å}$, légèrement inférieure pour $L=100\text{Å}$. Pour un puits de largeur 50Å, la vitesse pic est fortement réduite et le phénomène de mobilité différentielle négative est de moindre importance. L'évolution des caractéristiques de vitesse avec la largeur de puits a pour origine l'augmentation des probabilités d'interaction quand la largeur du puits décroît.

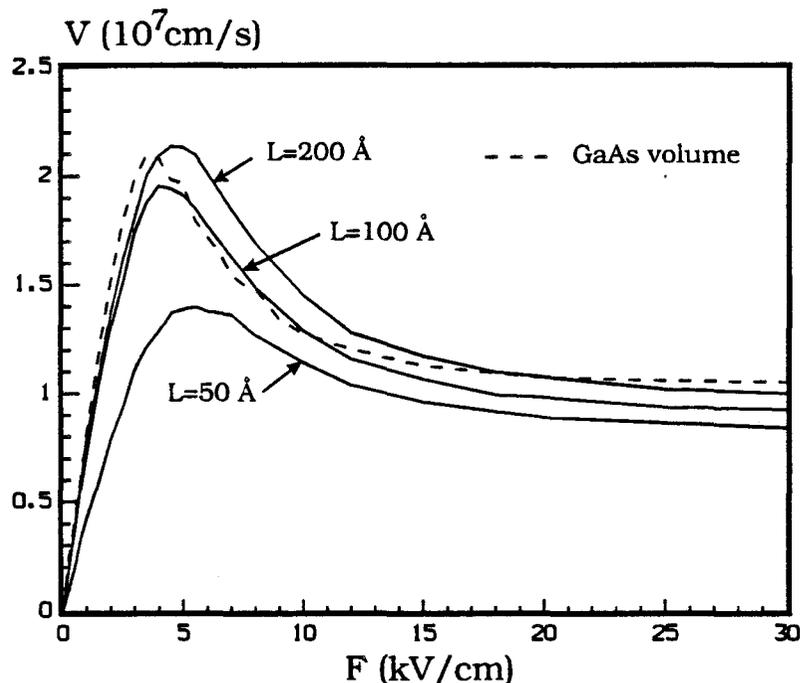


Figure III-19

Evolution de la vitesse avec le champ électrique dans un puits carré infini de GaAs à 300K pour différentes largeurs de puits

III.3.6 Etude d'une structure T.E.G.F.E.T. GaAlAs/GaInAs

Nous nous intéressons maintenant à une hétérostructure pseudomorphique Ga(1-x)Al(x)As/Ga(0.85)In(0.15)As/Ga(1-x)Al(x)As. Les différentes caractéristiques de la structure sont décrites sur la figure III-20. Nous avons effectué les calculs pour différentes fractions molaires d'aluminium ($x=0.15, 0.25, 0.32$), tout en maintenant constante la densité de porteurs $n_{2D} = 8.10^{15} m^{-2}$ et la température ($T=300K$). Pour la variation de la hauteur de barrière ΔE_c avec x nous utilisons celle donnée par Alamkan [16].

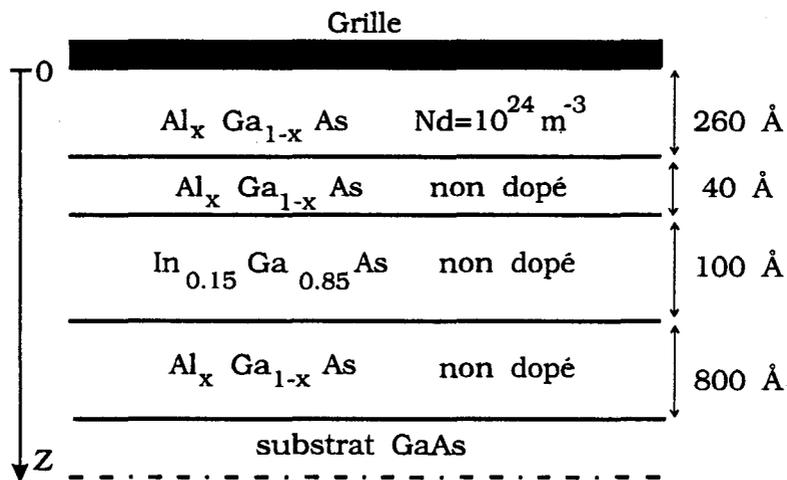


Figure III-20

Structure GaAlAs/GaInAs/GaAlAs étudiée

La résolution autocohérente des équations de Schrödinger et Poisson nous permet d'obtenir les fonctions d'ondes et les niveaux d'énergies. Sur la figure III-21 nous avons représenté le profil de potentiel "vu" par les électrons dans les différentes vallées et les différentes fonctions d'onde correspondant aux trois premiers niveaux. On constate l'existence d'un deuxième puits dans la couche supérieure de GaAlAs. Pour les vallées X, le minimum de ce second puits est plus bas que celui du puits situé dans le GaInAs. En conséquence, la plupart des électrons situés en vallée X sont localisés dans GaAlAs. Ce phénomène, qui est particulièrement important pour $x=0.32$, montre une relation étroite entre le mécanisme de transfert intervallées et le transfert d'électrons dans l'espace réel vers la couche supérieure.

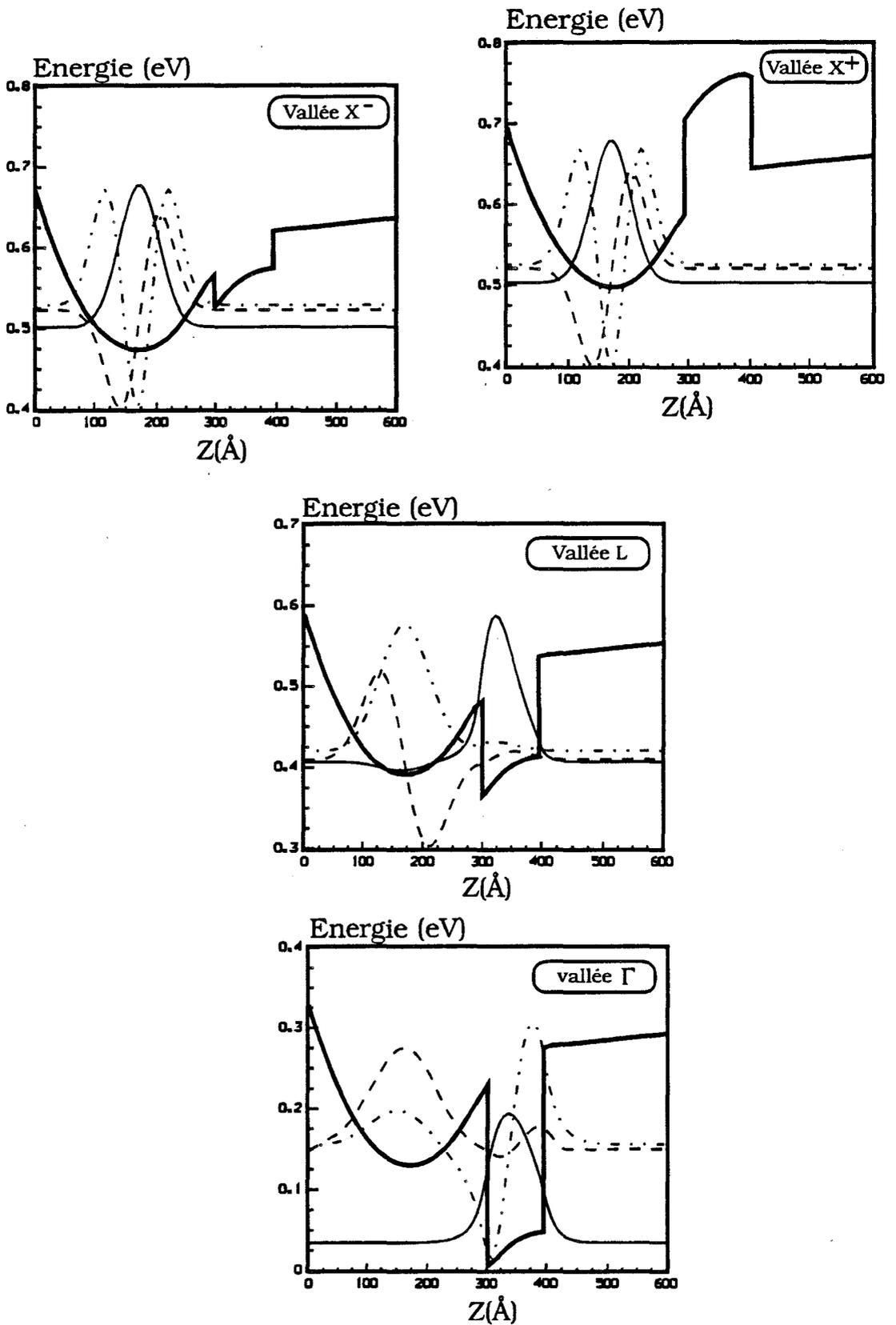


Figure III-21

Potentiel et états électroniques dans différentes vallées pour la structure de la figure III-20 avec $x=0.15$. La valeur 0 de la fonction d'onde, lue sur l'axe des ordonnées indique le niveau énergétique de la sousbande correspondante ($T=300\text{K}$, $n_{2D} = 8 \cdot 10^{15} \text{m}^{-2}$).

Chapitre III

Les caractéristiques vitesse-champ électrique sont présentées sur la figure III-22 pour $x=0.15$, 0.25 , 0.32 . Nous observons que le principal effet de l'accroissement de la fraction d'aluminium x est la réduction de la vitesse dans le domaine de champ correspondant à la mobilité différentielle négative et à la vitesse de saturation.

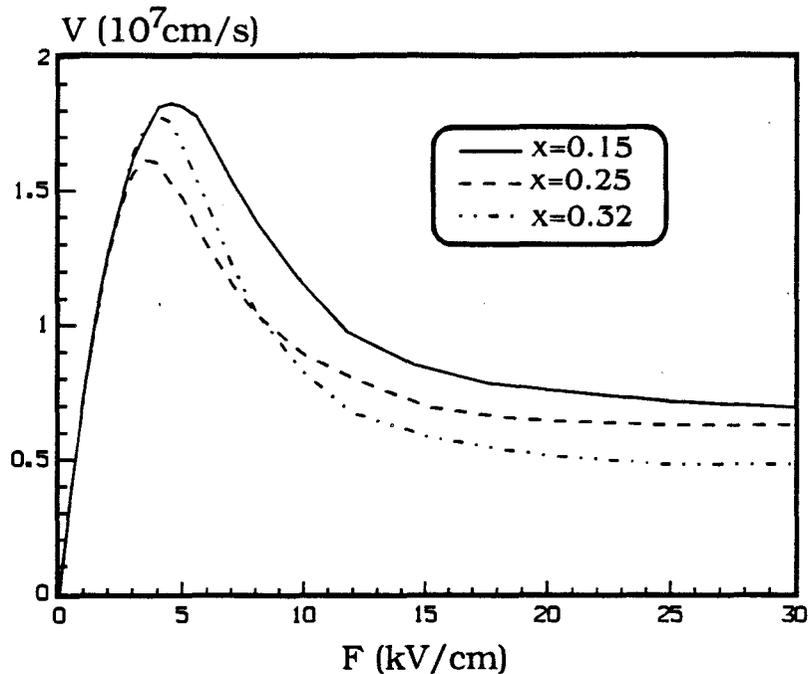


Figure III-22

Evolution de la vitesse avec le champ pour différentes valeurs de la fraction d'aluminium

La figure III-23 a) montre l'évolution du pourcentage d'électrons dans la couche supérieure de GaAlAs avec le champ électrique. Nous observons que pour des champs élevés, typiquement au delà de 12kV/cm , plus de la moitié des électrons sont localisés dans cette couche ; et que cette proportion tend à augmenter avec x . Les propriétés de transport de $\text{Ga}(1-x)\text{Al}(x)\text{As}$ se dégradent quand x augmente, ce qui permet d'expliquer le comportement de la vitesse dans cette gamme de champs. Nous observons sur la figure III-23 a) que pour les champs inférieurs à 3kV/cm , le taux d'occupation de la couche N_D^+ décroît avec x . Ceci est la conséquence de l'augmentation de la hauteur de barrière avec x et donc de l'amélioration du confinement des électrons en vallée Γ (Fig. III-23 b)).

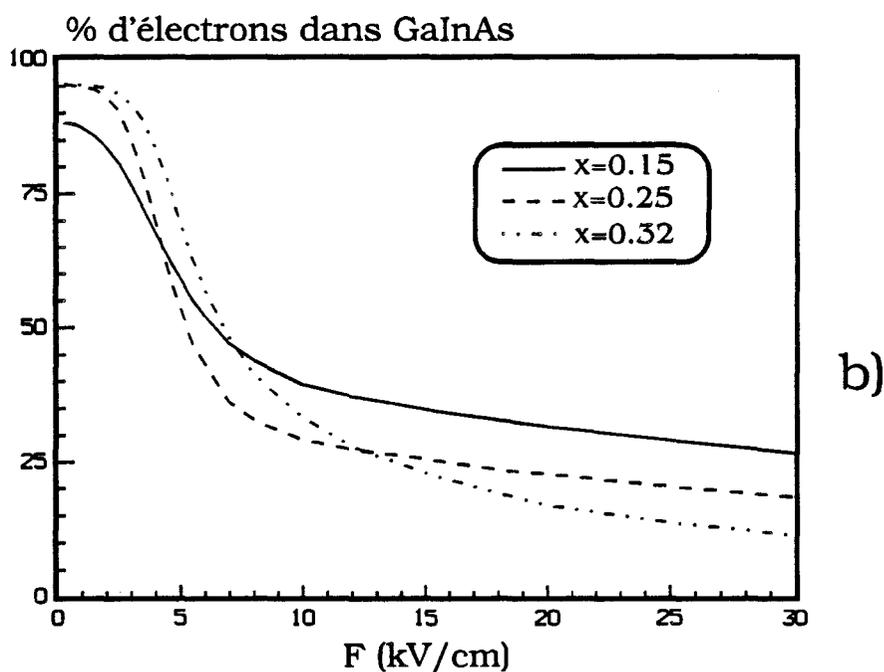
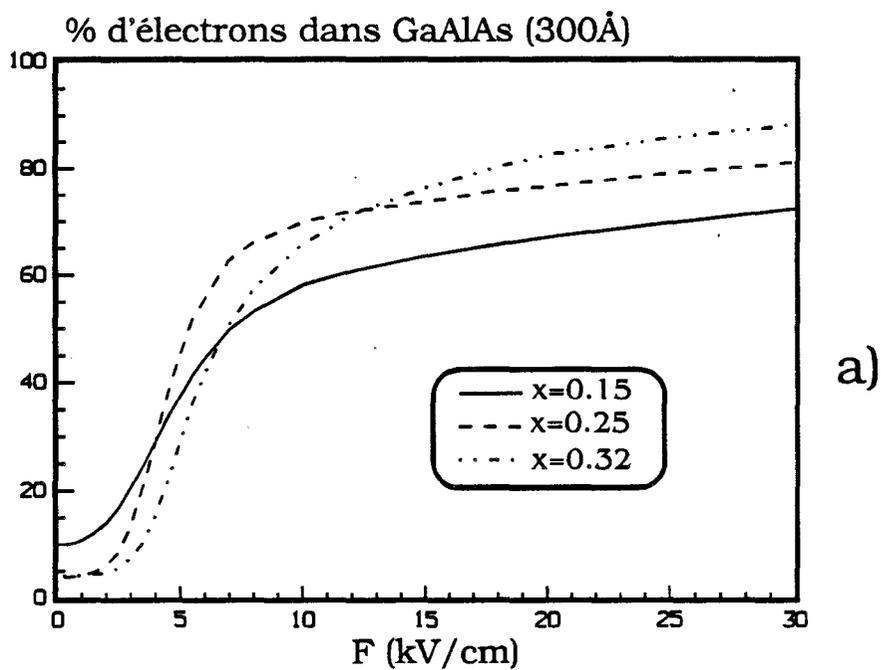


Figure III-23

Evolution du pourcentage d'électrons par couches avec le champ électrique pour différentes fractions d'aluminium

Chapitre III

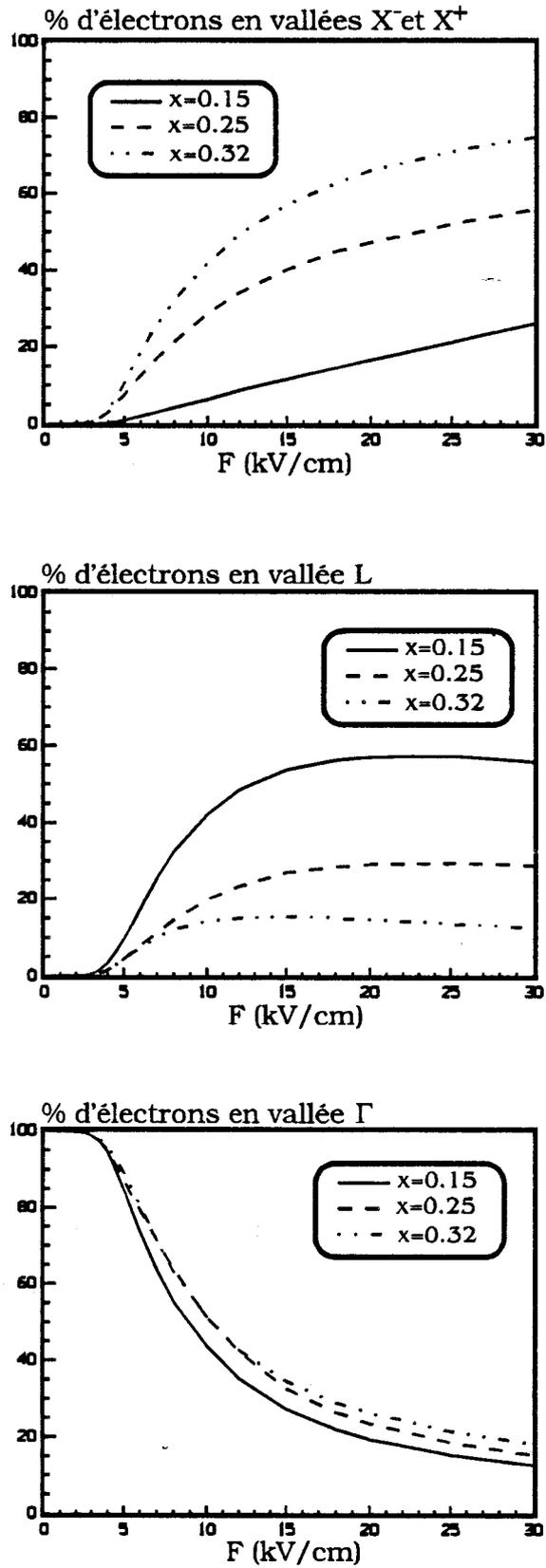


Figure III-24

Evolution du pourcentage d'électrons par vallées avec le champ électrique pour différentes fractions d'aluminium

Chapitre III

Pour les champs élevés, la situation est totalement différente parce que les électrons occupent majoritairement les vallées satellites. Ceci est illustré sur la figure III-24 qui présente l'évolution du taux d'occupation des vallées avec le champ électrique. Nous constatons que la population des états de la vallée X, fortement localisés dans GaAlAs, augmente avec la fraction d'aluminium x. Ceci est une conséquence de l'évolution de la structure de bande de GaAlAs avec x qui entraîne une réduction du gap intervallées Γ -X dans l'hétérostructure étudiée, facilitant ainsi le transfert Γ -X.

Il est important de remarquer que la répartition des électrons dans les différentes vallées dépend de mécanismes compliqués mettant en jeu toutes les sousbandes. Par exemple, aucun transfert direct de la sousbande fondamentale de la vallée Γ vers une sousbande de la vallée X ne peut avoir lieu si les fonctions d'onde correspondantes ne se recouvrent pas. Cette étude nous a permis de montrer que l'influence de la structure de bande sur les propriétés de transport dans une hétérostructure est très complexe. Nous avons mis en évidence que le couple GaAlAs/GaInAs, en raison de sa hauteur de barrière, permettait un bon confinement des électrons de la vallée Γ . En revanche pour les vallées X, la configuration de la structure de bande ne permet pas le confinement dans le GaInAs.

III.4 ETUDE DE DEUX STRUCTURES T.E.G.F.E.T.

Le modèle présenté dans le paragraphe précédent est particulièrement bien adapté à l'étude de divers types d'hétérostructures. Nous en apportons une illustration dans ce paragraphe.

III.4.2 Hétérostructure AlInAs/GaInAs/AlInAs

Dans cette partie nous étudions une hétérostructure utilisant les matériaux AlInAs et GaInAs adaptés en maille sur InP (Fig. III-25). Nous avons gardé le maximum de paramètres identiques à ceux de la structure précédemment étudiée, la densité électronique $n_{2D} = 8.10^{15} m^{-2}$ et la température (300K) sont elles aussi inchangées.

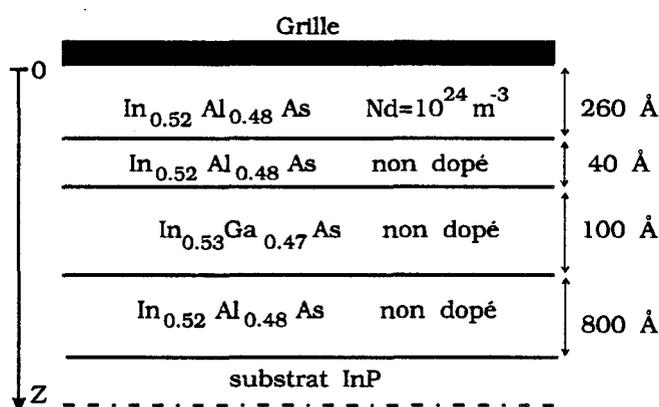


Figure III-25

Structure AlInAs/GaInAs/AlInAs étudiée

Le potentiel et les fonctions d'ondes dans cette structure sont représentés sur la figure III-26. La principale différence avec l'hétérostructure précédemment étudiée est la hauteur de barrière en vallée L qui vaut 0.91eV. Les états de la vallée X sont virtuellement inaccessibles tant que l'énergie de l'électron n'excède pas 1.1eV. Ce système assure donc un bon confinement des électrons chauds dans le puits principal. Ceci est confirmé par la figure III-27 b) qui montre l'évolution de la probabilité de trouver un électron dans la couche supérieure en fonction du champ. Nous observons que cette quantité est nettement inférieure à celle observée pour le système AlGaAs/InGaAs, de plus elle décroît avec le champ électrique dans le domaine 7-20kV/cm. Ce comportement est en rapport avec le transfert vers les états de la vallée L qui sont fortement localisés dans le puits de GaInAs. L'évolution de la population en vallée Γ et L, qui est représentée sur la figure III-27 a), confirme cette explication. La caractéristique vitesse-champ électrique est représentée sur la figure III-28 et comparée à celle du matériau GaInAs en volume. Notons que la mobilité et la vitesse pic sont quelque peu plus faibles dans l'hétérostructure que dans le matériau en volume. Ceci est probablement dû au choix d'un puits de largeur 100Å qui n'est certainement pas le plus favorable (Cf. III.3.5).

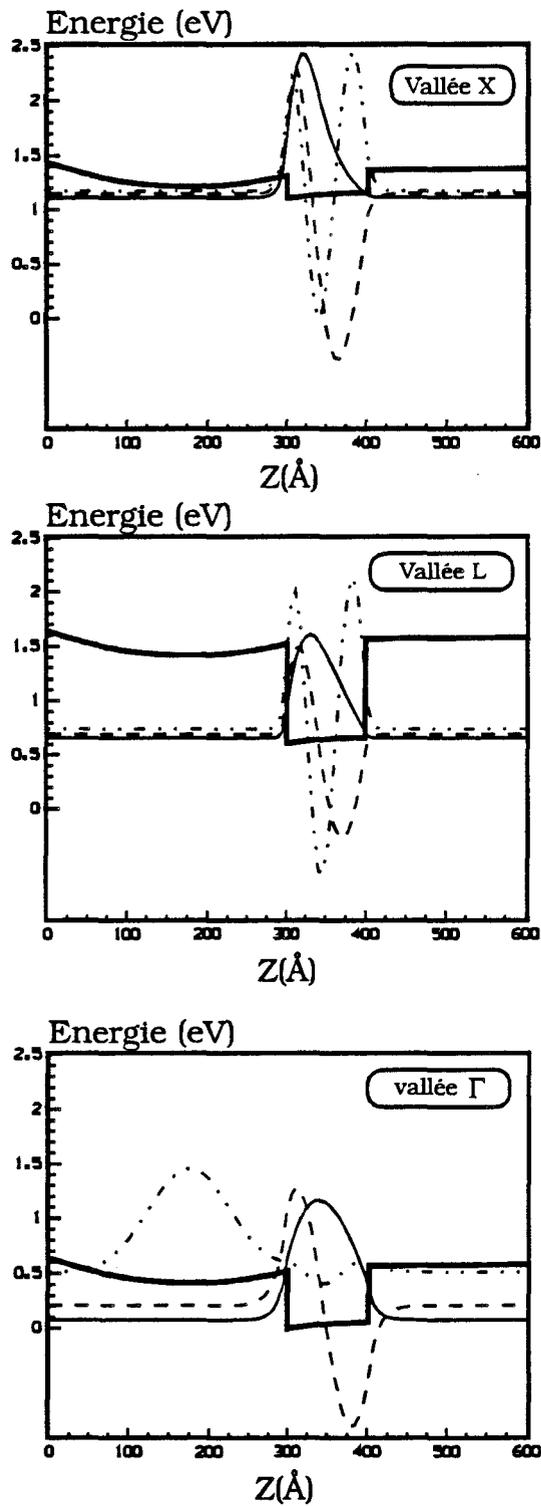


Figure III-26

Potential et états électroniques dans les différentes vallées pour la structure de la figure III-25. La valeur 0 de la fonction d'onde, lue sur l'axe des ordonnées indique le niveau énergétique de la sousbande correspondante ($T=300\text{K}$, $n_{2D} = 8 \cdot 10^{15} \text{ m}^{-2}$)

Chapitre III

Nous avons montré que le choix d'une hétérostructure réalisée dans la filière InP permettait, par un meilleur confinement des électrons chauds, de réduire considérablement le transfert dans l'espace réel. La possibilité de supprimer presque totalement ce phénomène est très intéressante du point de vue de la réalisation de composants à effet de champs, car il est à l'origine d'une dégradation importante des performances à fréquence élevée [17]

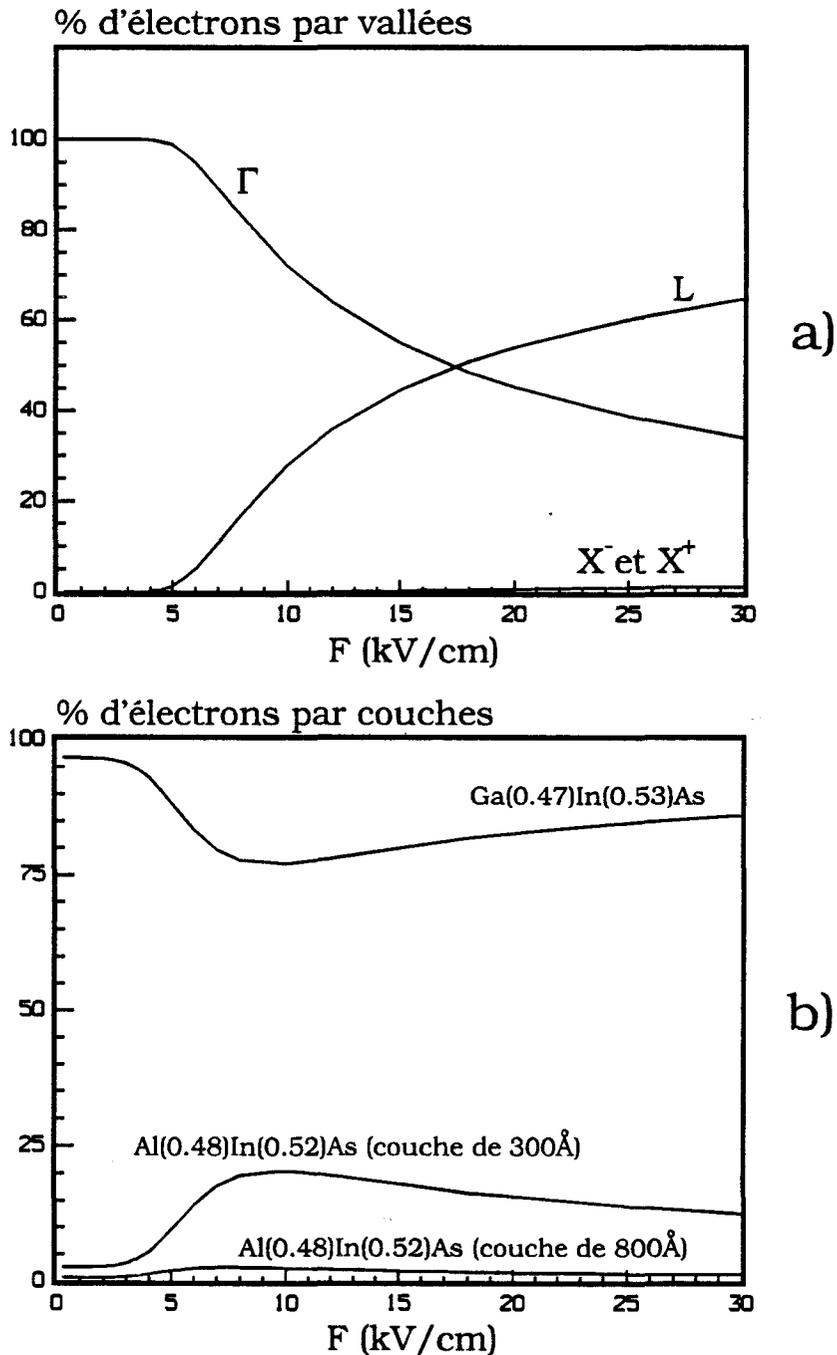


Figure III-27

Pour la structure représentée sur la figure III-25

a) pourcentage d'électrons par vallées

b) pourcentage d'électrons par couches

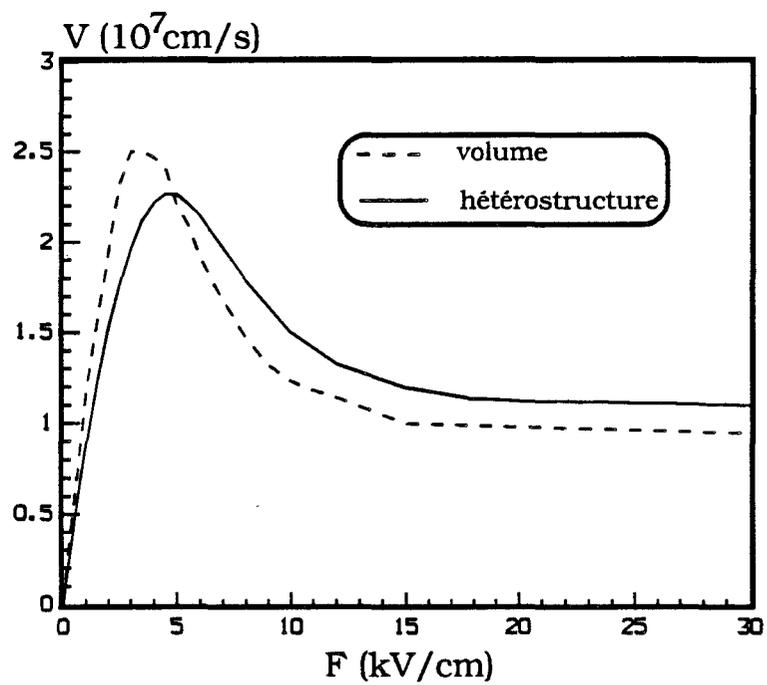


Figure III-28

Evolution de la vitesse moyenne avec le champ électrique pour la structure représentée sur la figure III-25

III.4.3 Etude d'une structure GaAlAs/GaInAs/GaAlAs comportant un plan de dopage dans le puits

Dans cette partie, nous nous proposons d'étudier l'influence de la présence d'un plan de dopage dans un puits de potentiel sur les propriétés de transport à 300K. Nous introduisons un plan de dopage de concentration $2 \cdot 10^{25} m^{-3}$ et de largeur 8 \AA dans la structure GaAlAs/GaInAs précédemment étudiée (Fig. III-20).

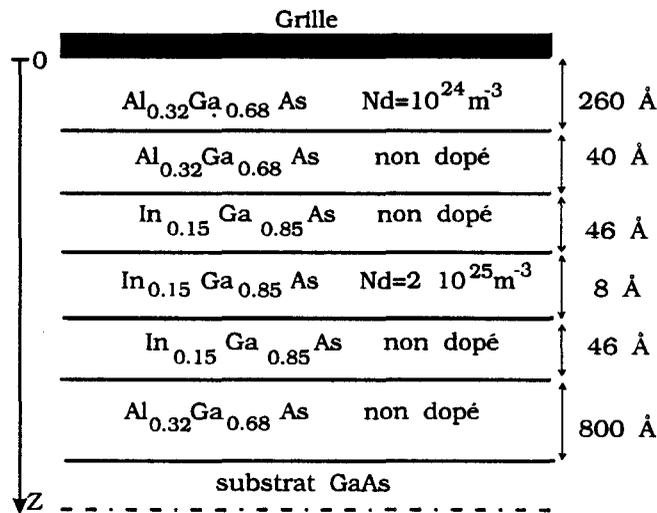


Figure III-29

Structure GaAlAs/GaInAs/GaAlAs à plan de dopage

Pour une densité électronique identique $n_{2D} = 8 \cdot 10^{15} m^{-2}$, la présence d'un plan de dopage a pour effet de creuser le puits de potentiel en son centre et de relever le potentiel du côté de la grille ; il n'existe pas de puits de potentiel dans le GaAlAs (Fig. III-29) Qualitativement, nous pouvons prévoir :

- Que le transfert d'électrons du puits vers la couche de GaAlAs sous la grille doit être réduit.
- Que l'interaction sur impuretés ionisées doit être importante.

Les résultats obtenus par simulation Monte-Carlo confirment ces prévisions et permettent de quantifier les différents phénomènes.

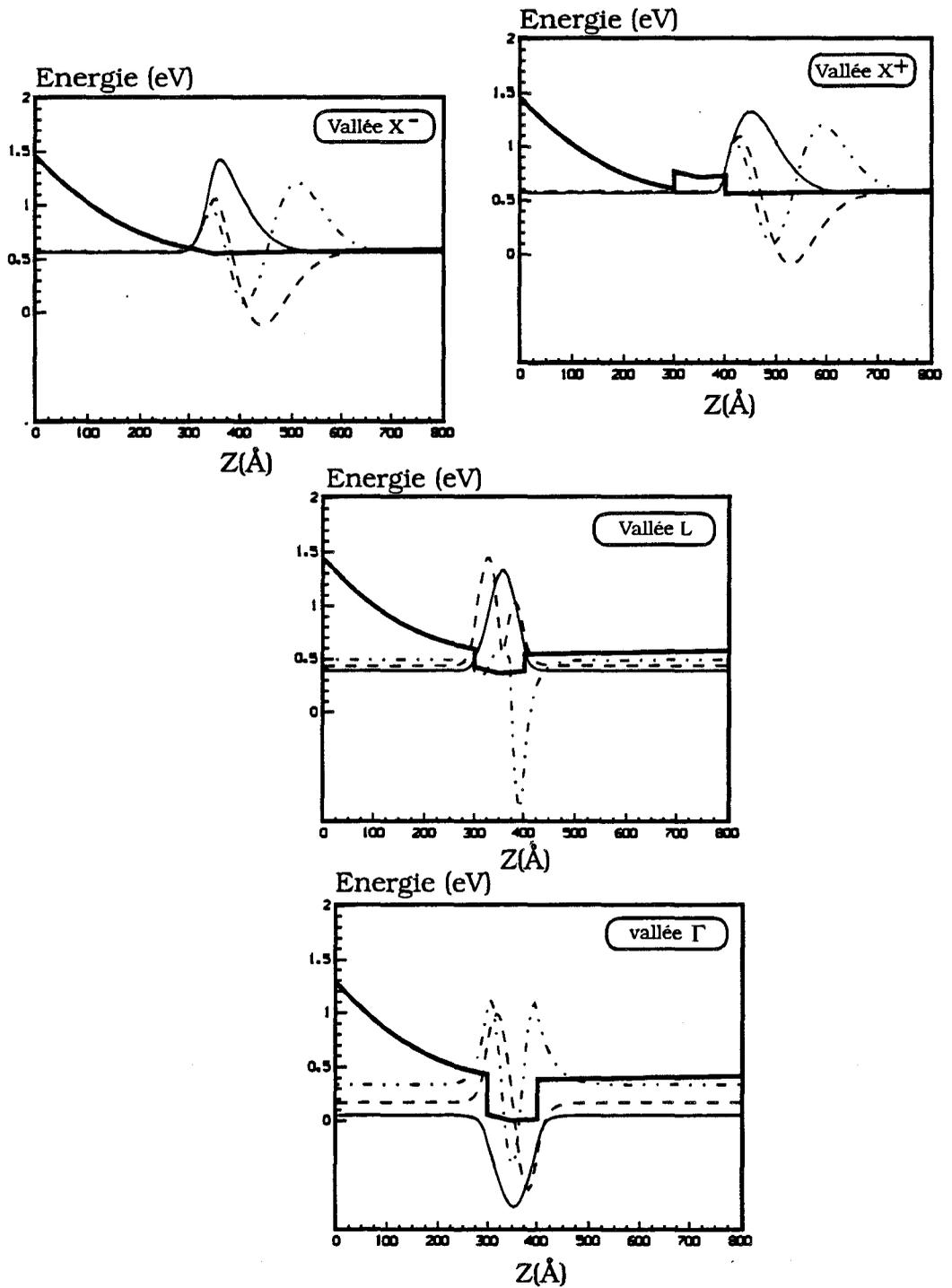


Figure III-30

Potentiels et états électroniques dans les différentes vallées pour la structure représentée sur la figure III-29. La valeur 0 de la fonction d'onde, lue sur l'axe des ordonnées indique le niveau énergétique de la sousbande correspondante ($T=300\text{K}$, $n_{2D} = 8 \cdot 10^{15} \text{ m}^{-2}$).

Chapitre III

Sur la figure III-31 a), nous observons l'évolution du pourcentage d'électrons par vallées avec le champ électrique ; la présence d'un plan de dopage entraîne une réduction du dépeuplement de la vallée Γ . Ce phénomène profite aux états de la vallée L qui sont davantage peuplés ; en contrepartie les états de la vallée X le sont moins. Le pourcentage d'électrons par couche est un paramètre significatif des changements occasionnés par l'introduction d'un plan de dopage dans le puits. Le meilleur confinement des états Γ et L dans le GaInAs observé sur le figure III-31 b) a pour effet de maintenir, même à champs élevés la majorité des électrons dans le GaInAs. En ce qui concerne le pourcentage d'électrons dans les couches de GaAlAs, le relèvement du potentiel du côté de la grille supprime presque totalement le transfert d'électrons vers le GaAlAs dopé. En contrepartie, les électrons transfèrent vers la couche de GaAlAs située à l'arrière du substrat.

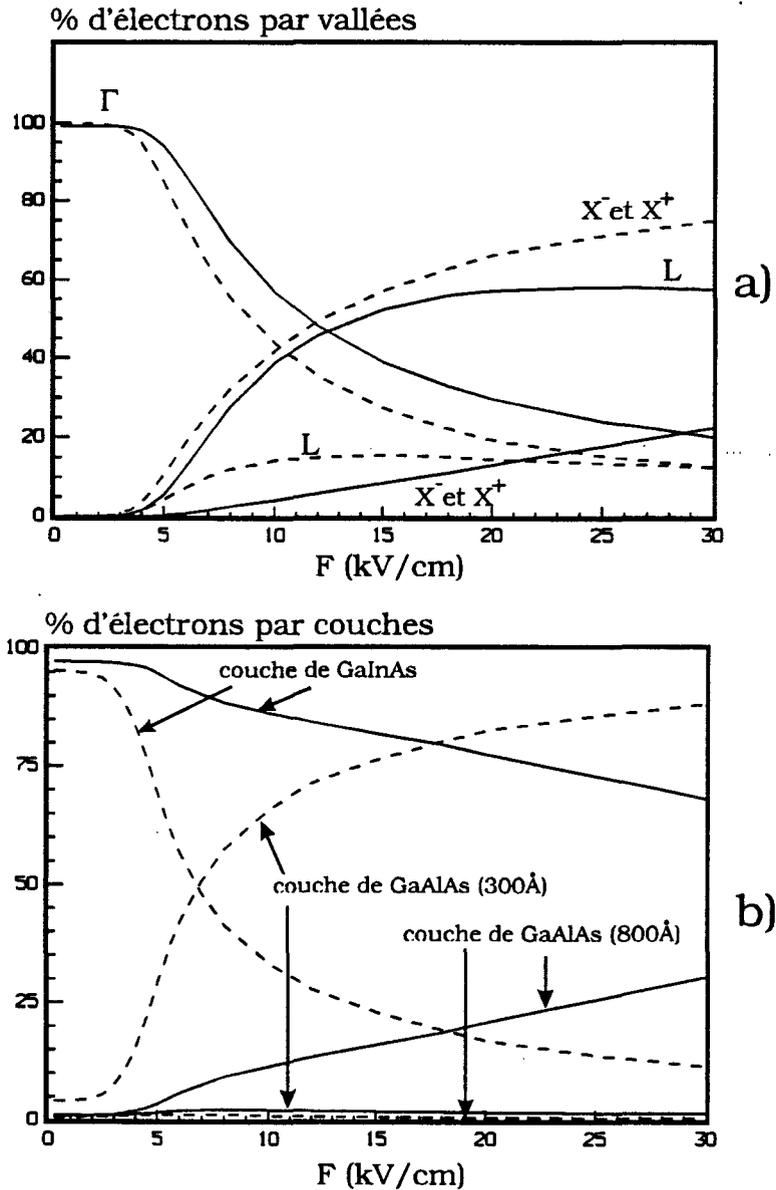


Figure III-31

Evolution du pourcentage d'électrons par vallées a) et par couche b) avec le champs électrique.
 En trait plein : avec plan de dopage (Fig. III-29). En trait pointillé : sans plan de dopage (Fig. III-20)

Chapitre III

Les caractéristiques vitesse-champ, énergie-champ présentées sur la figure III-32 sont fortement modifiées par la présence d'un plan de dopage dans le puits de potentiel. Pour les faibles champs, les électrons sont majoritairement situés dans le GaInAs et interagissent fortement avec les impuretés du plan de dopage ce qui dégrade fortement la vitesse et l'énergie. Pour les champs élevés, la réduction du transfert dans les vallées X entraîne des vitesses et des énergies supérieures à celles observées quand il n'y a pas de plan de dopage.

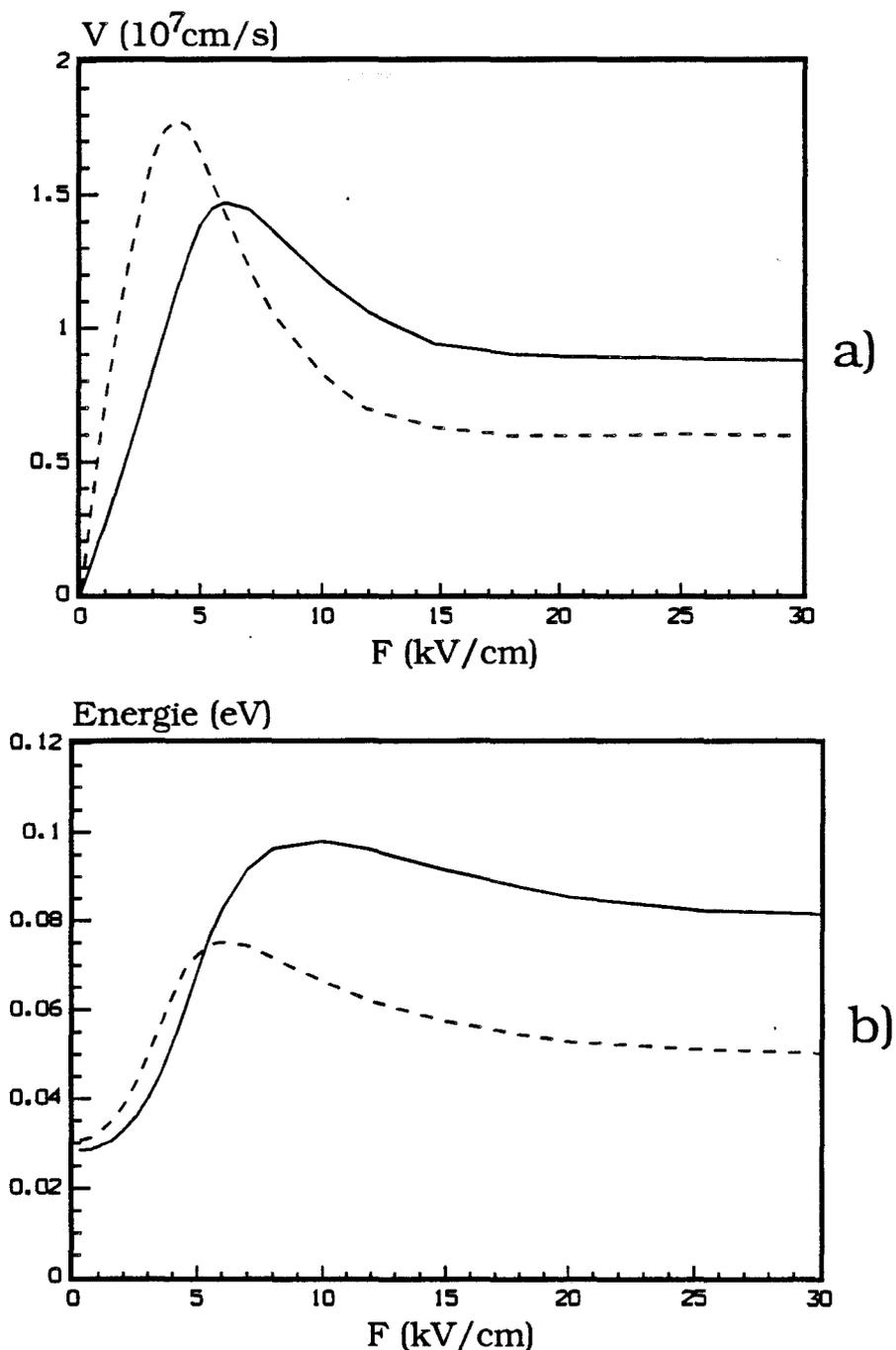


Figure III-32

*Evolution de la vitesse a) et de l'énergie b) avec le champ électrique
En trait plein : avec plan de dopage (Fig. III-29)
En trait pointillé : sans plan de dopage (Fig. III-20)*

Chapitre III

Dans ces différentes études relatives aux champs élevés, nous avons constaté que sous l'effet du champ électrique, une partie plus ou moins importante des électrons s'échappait du puits de potentiel. Ce transfert de charge doit évidemment modifier le potentiel dans la structure. Dans le paragraphe suivant, nous montrons comment tenir compte de ce phénomène et évaluons ses conséquences sur le transport électronique.

III.5 CALCUL AUTO-COHERENT SCHRODINGER POISSON BOLTZMANN

Dans le paragraphe précédent, nous avons montré que dans le cas de la structure GaAlAs/GaInAs étudiée et pour des champs suffisamment élevés, une grande partie des électrons transférait dans un puits secondaire situé dans le GaAlAs. Ce déplacement de charges doit naturellement modifier le potentiel électrostatique dans la structure et, par conséquent, les états électroniques et les probabilités d'interactions. Dans cette partie, nous montrons comment prendre en compte ce phénomène dans la simulation et évaluons son effet sur le transport électronique.

III.5.1 Méthode

Jusqu'alors, les simulations effectuées étaient constituées de deux étapes distinctes. Dans un premier temps, nous résolvions de façon auto-cohérente les équations de Schrödinger et Poisson. Ceci permettait d'obtenir le potentiel électrostatique et les différentes grandeurs caractéristiques des états électroniques à l'équilibre thermodynamique. Par la suite, ces quantités étaient supposées constantes. Dans un second temps, la méthode de Monte-Carlo les utilisait pour différents calculs (probabilités d'interaction, relation de dispersion, par exemple).

Dans ce qui suit, nous proposons de tenir compte de la modification de potentiel sous l'effet du champ électrique accélérateur. Pour cela nous devons résoudre périodiquement l'équation de Poisson. Le potentiel électrostatique ainsi déterminé est ensuite introduit dans l'équation de Schrödinger qui est résolue à son tour. La "nouvelle" structure de bande et les "nouveaux" états électroniques sont pris en compte dans la simulation Monte-Carlo.

Dans la pratique, nous étudions le comportement d'un ensemble de 10000 particules au cours du temps. Les équations de Schrödinger et Poisson sont résolues toutes les $5 \cdot 10^{-15} s$ à partir de la valeur instantanée de la densité de porteurs $n_{2D}(z)$ déterminée à l'aide de la population par sous-bande donnée par Monte-Carlo et des fonctions d'onde ξ_i calculées de la précédente itération.

III.5.2 Etude de l'influence du couplage

Pour évaluer l'effet du couplage des équations de Schrödinger, Poisson et Boltzmann, nous avons repris l'étude de la structure décrite sur la figure III-20 avec $x=0.32$ et un champ de 15kV/cm. Nous avons choisi d'étudier l'évolution d'un ensemble de 10000 particules pendant 5 picosecondes, durée suffisante pour atteindre la situation d'équilibre. Les résultats obtenus avec le calcul auto-cohérent (trait plein) et sans calcul auto-cohérent (trait pointillé) seront présentés sur les mêmes figures.

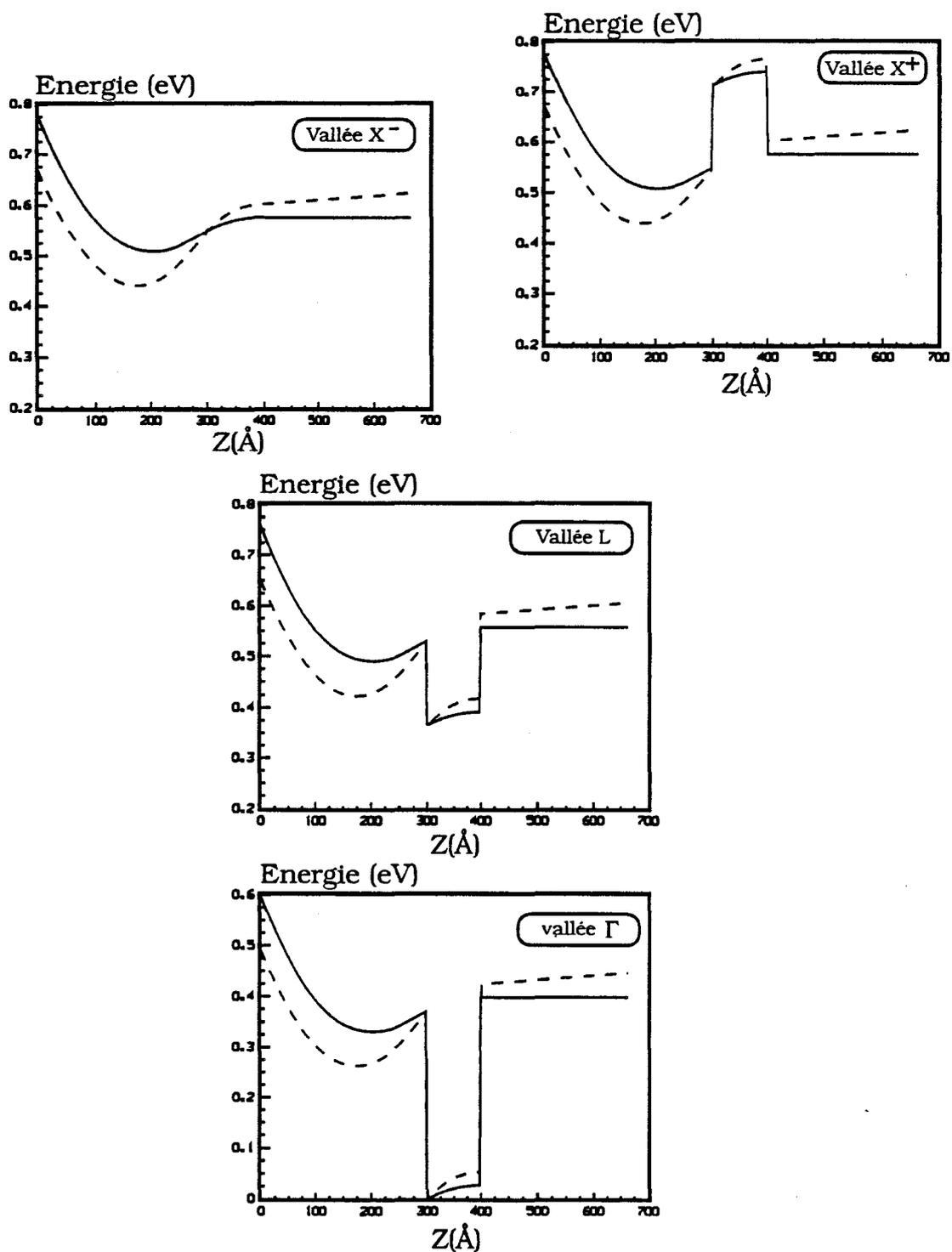


Figure III-33

Structure de bande dans l'hétérojonction représentée sur la figure III-20 ($x=0.32$)

($T=300K$, $n_{2D} = 8 \cdot 10^{15} m^{-2}$)

en trait pointillé : à l'équilibre thermodynamique

en trait plein : à l'équilibre sous 15kV/cm

Chapitre III

Sur la figure III-33, nous comparons la structure de bande à l'équilibre thermodynamique et en régime stationnaire avec un champ accélérateur de 15kV/cm. L'application d'un champ électrique tend à diminuer la profondeur du puits secondaire, ce phénomène agit à son tour en réduisant le transfert de charge dans l'AlInAs dopé. Cette tendance est observée sur la figure III-34 qui présente l'évolution de la population électronique par couche. Avec le calcul autocohérent, on obtient un meilleur confinement des électrons chauds dans le matériau GaInAs que précédemment.

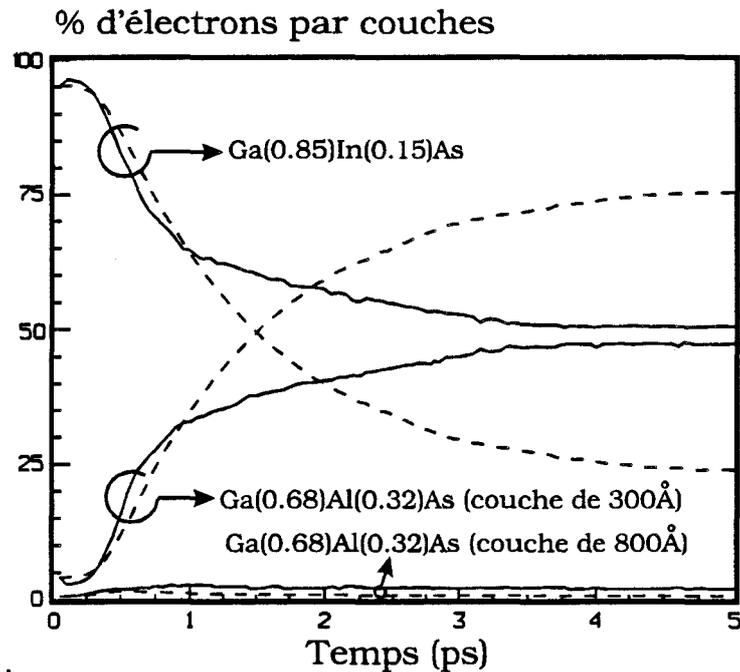


Figure III-34

*Evolution du pourcentage d'électrons par couche au cours du temps
en trait pointillé : sans calcul autocohérent
en trait plein : avec calcul autocohérent*

Chapitre III

La figure III-35 montre l'évolution du pourcentage d'électrons par vallées, le traitement autocohérent a pour effet de diminuer le pourcentage d'électrons en vallées X. Ce résultat était prévisible puisque la plupart des états X sont localisés dans la couche N_D^+ , pour laquelle nous avons montré que l'autocohérence tend à diminuer la population.

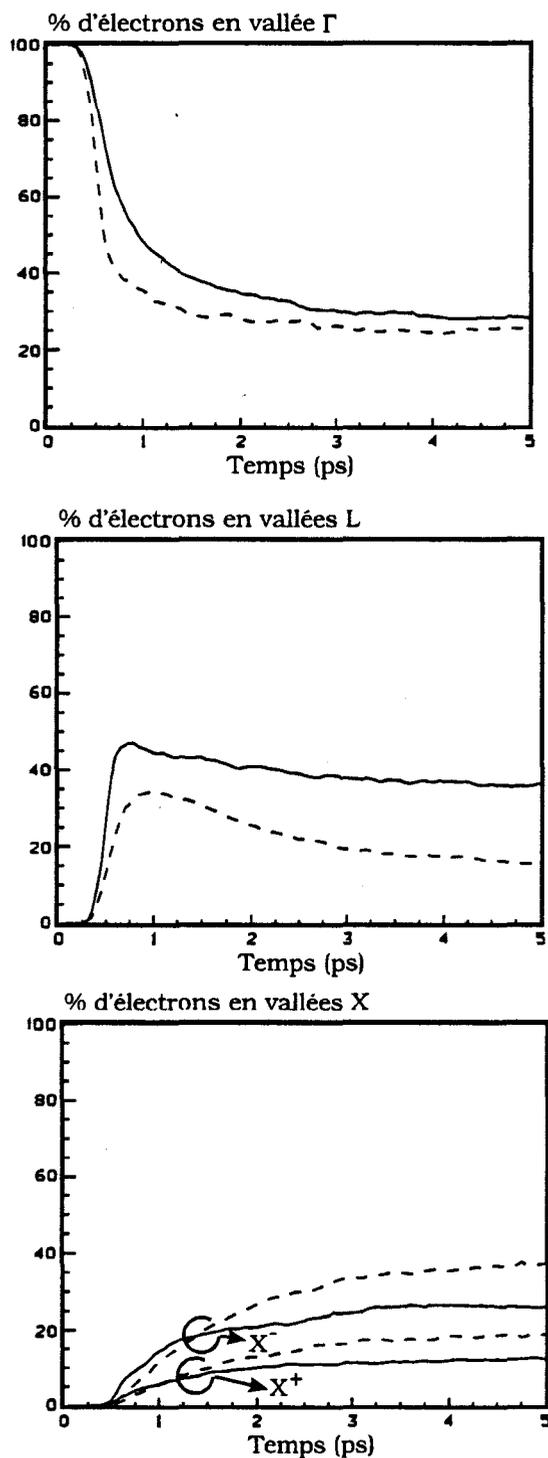


Figure III-35

Evolution du nombre d'électrons par vallée au cours du temps
en trait pointillé : sans calcul autocohérent
en trait plein : avec calcul autocohérent

Chapitre III

Nous avons suivi l'évolution au cours du temps de la distance moyenne du paquet d'électrons par rapport à la grille (Fig. III-36). La variation de cette grandeur montre clairement la tendance des électrons à transférer dans l'espace réel et à se rapprocher de la grille. Le calcul autocohérent permet de montrer que l'amplitude de ce phénomène est moindre que ce que prévoyait le modèle plus simple.

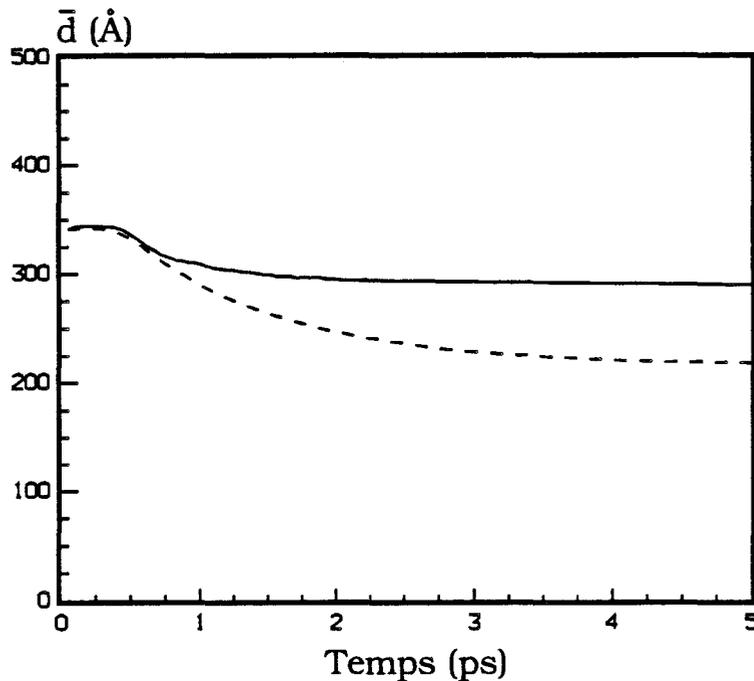


Figure III-36

*Evolution de la distance moyenne entre les électrons et la grille au cours du temps
en trait pointillé : sans calcul autocohérent
en trait plein : avec calcul autocohérent*

Cette étude, par la méthode de Monte-Carlo, du régime non stationnaire nous a permis de mettre en évidence des effets de survitesse (figure III-37 a)) et de surénergie (figure III-37 b)). A $t=0$, les électrons sont localisés sur les sousbandes de la vallée Γ , ils possèdent donc une faible masse et subissent principalement l'interaction optique polaire dont l'effet anisotrope favorise la direction du champ électrique : dans ces conditions, sous l'effet d'un champ fort les électrons acquièrent de l'énergie et accroissent leur vitesse. Les transferts vers les sousbandes des vallées L et X où la masse est plus élevée permettent aux électrons de perdre de l'énergie et de diminuer leur vitesse. Il existe une phase transitoire pendant laquelle un grand nombre d'électrons de la vallée Γ ont des énergies et des vitesses supérieures à celles de l'équilibre. Progressivement, les électrons transfèrent vers les vallées satellites et la situation d'équilibre s'établit. Au bout de 5ps, on obtient les valeurs d'énergie et de vitesse caractéristiques de l'état stationnaire correspondant au champ appliqué.

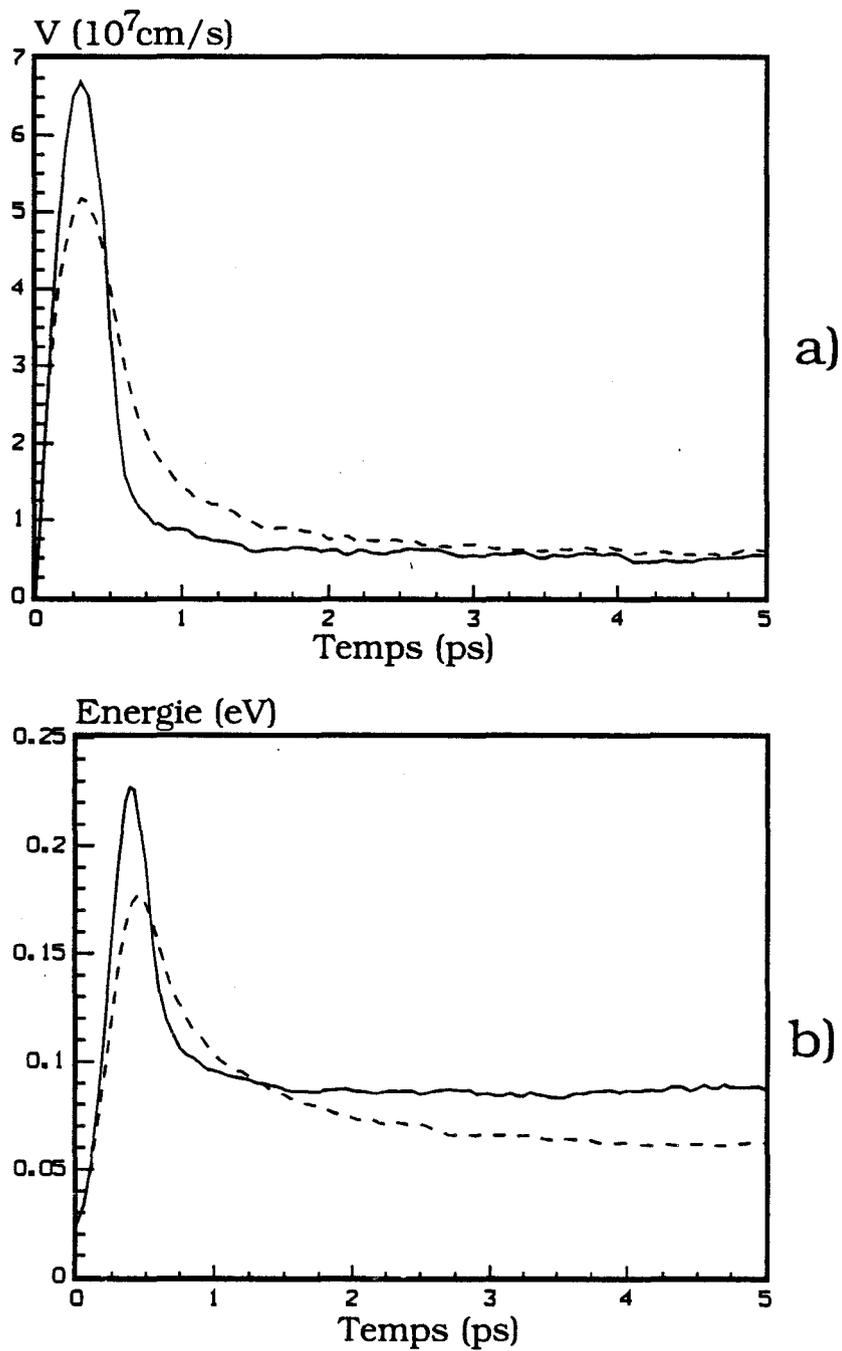


Figure III-37

*Evolution de la vitesse a) et de l'énergie b) au cours du temps
en trait pointillé : sans calcul autocohérent
en trait plein : avec calcul autocohérent*

Chapitre III

Comme nous l'avons déjà constaté, la réaction du potentiel aux transferts de charges a pour effet de retarder le transfert de la vallée gamma vers la vallée L. Cette tendance se retrouve dans l'amplitude des phénomènes de survitesse et de surénergie qui sont plus importants quand la résolution autocohérente des équations de Schrödinger-Poisson-Boltzmann est effectuée. Les vitesses à l'état stationnaire, obtenues par les deux types de calcul sont comparables, alors que l'énergie est plus élevée avec le calcul autocohérent.

Le calcul autocohérent nécessite, bien entendu, plus de temps CPU que la seule simulation Monte-Carlo. Cependant, c'est principalement le calcul des probabilités d'interaction qui est pénalisant et non la résolution des équations de Poisson et Schrödinger.

La méthode que nous venons d'exposer constitue une première approche d'un calcul autocohérent des équations de Schrödinger-Poisson-Boltzmann. Nous résolvons l'équation de Schrödinger pour un système stationnaire, ce qui est une approximation dont il n'est pas immédiat d'évaluer les conséquences. Le modèle développé constitue un premier pas vers une approche plus générale incluant l'évolution dans le temps des différents termes de l'équation de Schrödinger.

Dans ce programme écrit en langage Fortran, les communications entre procédures se font par passage de paramètre et non par "common", ce qui permet de le faire évoluer plus aisément. L'utilisation de stations de travail avec terminaux graphiques offre un confort de travail qui facilite le développement de tels programmes qui gardent des temps d'exécution raisonnables. Ces différentes considérations basement matérielles mais ô combien indispensables à l'évolution de tels programmes étant aujourd'hui réunies, il nous apparaît que de futurs développements pourront être réalisés dans de bonnes conditions.

III.6 BIBLIOGRAPHIE

- [1] **P. J. PRICE**
Surface Science, **113**, 199 (1982)
- [2] **W. YEN**
Thèse de l'université, Lille (1988)
- [3] **P. J. PRICE**
Phys. Rev. B, **30**, 2234, (1984)
- [4] **B. K. RIDLEY**
J. Phys. C. : Solid State Phys. , **15**, 5899 (1982)
- [5] **F. STERN, W. E. HOWARD**
Phys. Rev. **163**, 816 (1967)
- [6] **P. J. PRICE**
Annals of physics, **133**, 217, (1981)
- [7] **B. K. RIDLEY**
J. Phys. C. : Solid State Phys. , **16**, 6971 (1983)
- [8] **F. DESSENNE**
mémoire de DEA, Université de Lille, (1990)
- [9] **A. KAZYNSKI**
Thèse de docteur Ingénieur, Lille (1979)
- [10] **J. P. NOUGIER**
Méthodes de calcul numérique, MASSON (1987)
- [11] **C. K. WILLIAMS**
Superlattices and Microstructures, Vol.2, No3, (1986)
- [12] **P. LUGLI**
IEEE, Transactions on Electronics Devices, Vol.32, No11, (1985)
- [13] **M. MOUIS**
Thèse de doctorat d'état, Université de Paris-Sud, (1988)
- [14] **J. ZIMMERMAN, W. YEN, AND F. PERRI**
Physica **129B**, 385 (1985)
- [15] **H. TANIMOTO, N. YASUDA, K. TANIGUCHI and C. HAMAGUSCHI**
Jpn. J. Appl. Phys. **27**, 563 (1988)
- [16] **J. ALAMKAN, H. HAPPY, Y. CORDIER and A. CAPPY**
European Trans. on Telecom. and rel. tech. **1**,429 (1990)
- [17] **P. BOUREL**
Thèse de l'université, Lille, (1991)

CONCLUSION

Conclusion

Dans ce mémoire, nous avons présenté un certain nombre de résultats concernant les propriétés de transport électronique dans des matériaux en volume où le transport est tridimensionnel, ainsi que dans des gaz d'électrons bidimensionnels et unidimensionnels.

Pour les trois types de transport évoqués précédemment, nous avons étudié séparément l'interaction sur impuretés ionisées. Nous avons utilisé la méthode du temps de relaxation du moment pour calculer la mobilité électronique limitée par cette interaction. Ceci nous a permis de mettre en évidence l'influence d'un certain nombre de paramètres physiques comme la température, la densité électronique, sur la mobilité. Nous avons également montré l'importance du nombre de degrés de liberté de mouvement dans la manière de mener l'approche théorique et sur les valeurs de mobilités calculées.

L'influence de la contrainte qui règne dans les structures pseudomorphiques a également été introduite. A l'aide d'un modèle Monte-Carlo de transport en volume, nous avons montré que la contrainte réduisait sensiblement les performances en terme de transport dans le matériau GaInAs, et que cette tendance était plus sensible lorsque la croissance s'effectuait sur du GaAs plutôt que sur de l'InP.

Dans le but de décrire de la façon la plus réaliste possible, le transport dans les hétérostructures, nous avons développé un modèle Monte-Carlo tenant compte de la quantification des états électroniques qui différencie les hétérostructures du matériau en volume. Un certain nombre d'aspects essentiels comme la non parabolicité et la dégénérescence du gaz électronique ont été inclus dans ce modèle.

Nous avons montré l'importance de l'interaction sur impuretés ionisées à basse température en étudiant différents types d'hétérostructures. La dégénérescence du gaz électronique n'a un effet important que pour des densités électroniques très élevées et rarement rencontrées. Pour traiter les hautes énergies, nous avons proposé une méthode qui ne tient compte que d'états bidimensionnels et qui, de ce fait, nécessite la détermination des états quantifiés des vallées L et X.

Les résultats obtenus ont permis de mettre en évidence une forte corrélation entre le phénomène de transfert dans l'espace réel et le transfert intervallées. En faisant varier la fraction d'aluminium dans une hétérostructure $\text{Ga}(1-x)\text{Al}(x)\text{As}/\text{Ga}(0.85)\text{In}(0.15)\text{As}/\text{Ga}(1-x)\text{Al}(x)\text{As}$, nous avons étudié l'influence de la structure de bande sur les propriétés de transport électronique. Puis nous avons montré que l'introduction d'un plan de dopage dans le puits de potentiel ou l'utilisation d'autres matériaux comme $\text{Al}(0.48)\text{In}(0.52)\text{As}$ et $\text{Ga}(0.47)\text{In}(0.53)\text{As}$ permet de réduire le transfert d'électrons vers la couche située sous la grille, ce qui est favorable aux performances des composants.

Conclusion

En résolvant périodiquement les équations de Poisson et Schrödinger, nous avons montré que la dynamique électronique modifie la structure de bande, ce qui tend à réduire l'importance du transfert de charge dans le matériau situé sous la grille.

En étudiant des structures utilisant différents matériaux et constituées de simples puits, de puits multiples, de plans de dopage, nous avons voulu montrer que le code informatique développé revêtait un caractère très général. Nous pensons donc que le modèle mis au point est promis à un bel avenir et qu'il pourra être utilisé dans de nombreuses études. Citons celles que nous envisageons dans un proche avenir :

- L'optimisation de divers types de T.E.G.F.E.T. utilisant des hétérojonctions
- L'étude des phénomènes de diffusion dans des gaz d'électrons bidimensionnels

ANNEXES

Annexe 1

Fonctions de Fermi.

De nombreux problèmes de physique statistique font intervenir les intégrales ou fonctions de Fermi. Nous utiliserons la définition suivante des fonctions de Fermi d'ordre j .

$$F_j(x) = \frac{1}{\Gamma(j+1)} \int_0^{+\infty} \frac{u^j}{1 + \exp(u-x)} du \quad (\text{éq A1-1})$$

Où Γ est la fonction d'Euler.

Une autre définition est fréquente :

$$f_j(x) = \int_0^{+\infty} \frac{u^j}{1 + \exp(u-x)} du \quad (\text{éq A1-2})$$

F_j présente davantage de propriétés remarquables que f_j , et pour cette raison est plus commode à utiliser.

Propriété de dérivation de F_j :

$$\frac{dF_j(x)}{dx} = F_{j-1}(x) \quad (\text{éq A1-3})$$

Dans le cas d'un gaz d'électrons non dégénéré $x \ll 1$ la fonction de distribution de Fermi Dirac est souvent approximée par celle de Maxwell Boltzmann. Dans ce cas nous avons :

$$F_j(x) \approx \exp(x) \quad (\text{éq A1-4})$$

Pour un gaz d'électrons fortement dégénéré $x \gg 1$ la fonction de Fermi est équivalente à une fonction puissance :

$$F_j(x) \approx \frac{x^{j+1}}{\Gamma(j+2)} \quad (\text{éq A1-5})$$

F_j est une fonction qui s'exprime à l'aide de fonctions usuelles pour $j = -1$ et $j = 0$; on a, pour tout x .

$$F_{-1}(x) = \frac{1}{1 + \exp(-x)} \quad (\text{éq A1-6})$$

$$F_0(x) = \text{Log}(1 + \exp(x)) \quad (\text{éq A1-7})$$

Annexes

Pour $j \neq -1$ et $j \neq 0$, nous calculons les valeurs des fonctions de Fermi par interpolation linéaire entre les valeurs tabulées données par Blackmore¹, obtenues à l'aide de développement en série.

¹ J.S.BLACKMORE, Semiconductor statistics Pergamon Press 1962.

Annexe 2

méthode des fonctions de Green

Nous exposons dans ce court texte une justification, plus intuitive que rigoureuse, du formalisme des fonctions de Green.

En physique mathématique, les propriétés d'un système sont déduites de l'analyse théorique du système et non de l'expérience. L'application des lois fondamentales de la physique à un problème particulier conduit souvent à des relations du type :

$$d_f v = s \quad (\text{éq A2-1})$$

Où d_f est un opérateur linéaire différentiel au sens des fonctions.

L'équation (éq A2-1) caractérise le champ v , réponse du système à l'excitation de la source s . La résolution d'équations du type (éq A2-1) apparaît donc comme un problème crucial en physique.

Il est souvent difficile de représenter des grandeurs physiques par des fonctions (par exemple : la position d'une charge ponctuelle dans l'espace). Cette difficulté peut être surmontée en utilisant des distributions (au sens mathématique du terme). Depuis longtemps, les physiciens utilisent la "fonction delta" de Dirac et ses dérivées, mais il a fallu attendre 1950 (L. Schwartz²) pour disposer d'une théorie mathématique des distributions. L'utilisation de cette théorie, même à un niveau élémentaire, est bien adaptée à de nombreux systèmes physiques.

Grâce aux distributions, la convolution devient un outil mathématique très puissant. Dans ce qui suit, nous présentons un aspect très restreint de cette théorie appliquée à la physique, qui nous permettra de résoudre le problème exposé au travers de l'équation (éq A2-1) : les fonctions de Green³.

Si le système que l'on étudie est linéaire, continu et invariant par translation, il peut être décrit par un opérateur de convolution agissant sur les distributions V et S . Ceci signifie qu'il existe une distribution G caractéristique du système telle que le champ V , réponse à une excitation source S , soit donné par :

$$V = S \otimes G \quad (\text{éq A2-2})$$

\otimes opérateur de convolution

Si l'on applique au système une excitation source de Dirac δ , la réponse correspondante est :

$$V_\delta = \delta \otimes G = G \quad (\text{éq A2-3})$$

²L.Schwartz, Méthodes mathématiques pour les sciences physiques, Herman Paris 1979

³F.Rodier, Distributions et transformation de Fourier, Ediscience Paris 1971

$$D_d G = \delta \quad (\text{éq A2-4})$$

G est donc la distribution, solution de l'équation différentielle au sens des distributions $D_d G = \delta$.

G est appelée "fonction de Green du système" ou "fonction de Green de l'opérateur D_d ".

Pour résoudre le problème posé par l'équation (éq A2-1), il faut connaître la fonction de Green du système et l'opérateur de convolution.

Remarques :

☛ D_d dans l'équation (éq A2-2) désigne l'opérateur au sens des distributions, de sorte que V diffère de v par des distributions singulières.

☛ v , comme nous le verrons dans l'annexe III, inclut systématiquement les conditions aux limites du système, cela dans la mesure où G est déterminée en utilisant les conditions aux limites.

La puissance de la technique des fonctions de Green fait d'elles un outil utilisé pour résoudre un grand nombre d'équations fondamentales de la physique⁴. Les équations de Laplace, Poisson, Helmholtz, Schrödinger, par exemple, sont potentiellement résolubles en utilisant la technique des fonctions de Green. Selon le type d'équation et les géométries du système, les fonctions de Green peuvent être ou non déterminées analytiquement. Dans l'annexe III, nous considérerons l'équation de Poisson, qui, dans nombre de cas simples, admet des solutions analytiques.

⁴P.M.Morse et H.Feshbach, *Methods of theoretical physics*, New York McGRAW-HILL 1973

Annexe 3

Application des fonctions de Green à la résolution de l'équation de Poisson^{5 6} :

$$\Delta V(x, y, z) = -\rho(x, y, z) \quad (\text{éq A3-1})$$

Dans cette annexe, on pose $\varepsilon_0 \varepsilon_r = 1$

Dans une première phase, nous déterminons la fonction de Green G_p telle que :

$$\Delta G_p = -\delta \quad (\text{éq A3-2})$$

Le problème est de déterminer le potentiel G_p créé en un point \vec{r} par une charge située en \vec{r}_0 .

$$\Delta G_p = -\delta(\vec{r} - \vec{r}_0) \quad (\text{éq A3-3})$$

S'il n'y a pas de charge en r_0 , l'équation (éq A3-2) se réduit à l'équation de Laplace :

$$\Delta G_l = 0 \quad (\text{éq A3-4})$$

Supposons que l'on connaisse G_l (qui est la solution mathématique de (éq A3-4) satisfaisant à des conditions aux limites que l'on se donne [potentiel nul à l'infini, ou, par exemple, condition de Dirichlet, Neumann, Mixte...]).

Comme (éq A3-4) est une équation différentielle du second ordre, il faut deux conditions aux limites (deux par variable, si G_l est une fonction de plusieurs variables). Pour déterminer G_p , on part de G_l et l'on fait un certain nombre de considérations.

Si l'on permute les positions de la charge et du point d'observation, le potentiel ne change pas ; on a donc :

$$G_p(\vec{r}, \vec{r}_0) = G_p(\vec{r}_0, \vec{r}) \quad (\text{éq A3-5})$$

Le Laplacien du champ doit être nul en tout point d'une surface fermée sauf là où se trouve la charge. Soit r_s un point de la surface et r_{0s} le point de la surface où se trouve la charge. Pour $r_{0s} = r_s$ la fonction de Green doit se comporter comme la distribution δ . Pour satisfaire à cela, on doit avoir :

$$\Delta G_p(\vec{r}_s, \vec{r}_{0s}) = \delta(\vec{r}_s - \vec{r}_{0s}) \quad (\text{éq A3-6})$$

Ce qui permet de définir la solution générale pour des conditions aux limites données.

⁵E. Durand, Electrostatique, Masson Paris 1964

⁶J.D. Jackson, Classical electrodynamics, Wiley New York 1962

$$\int_{r_{0s}-\varepsilon}^{r_{0s}+\varepsilon} \Delta G_p(r, r_{0s}) dr = - \int_{r_{0s}-\varepsilon}^{r_{0s}+\varepsilon} \delta(r - r_{0s}) dr \quad a)$$

$$[\nabla G_p(r, r_{0s})]_{r_{0s}-\varepsilon}^{r_{0s}+\varepsilon} = -1 \quad b) \quad (\text{éq A3-7})$$

$$\left. \frac{\partial G_p}{\partial r} \right]_{r_{0s}+\varepsilon} - \left. \frac{\partial G_p}{\partial r} \right]_{r_{0s}-\varepsilon} = -1 \quad c)$$

En passant à la limite on obtient la condition :

$$\left. \frac{\partial G_p}{\partial r} \right]_{r_{0s}^+} - \left. \frac{\partial G_p}{\partial r} \right]_{r_{0s}^-} = -1 \quad (\text{éq A3-8})$$

En appliquant ces conditions, on détermine $G_p(r, r_0)$. Pour obtenir le champ créé par une distribution de sources, on calcule les effets de chaque portion élémentaire de source et on les superpose. La solution de l'équation (éq A3-1) s'écrit alors comme l'intégrale sur l'espace contenant les charges du produit de la densité de charge $\rho(r_0)$ par la fonction des Green.

$$V_p(r) = \int_{\text{charges}} G_p(r, r_0) \cdot \rho(r_0) dr_0 \quad (\text{éq A3-10})$$

On constate que $G_p(r, r_0)$ est le noyau d'une équation intégrale définissant la solution de l'équation (éq A3-1). La solution intégrale (éq A3-10) contient les conditions aux limites et l'entière physique du problème sous une forme très compacte. Dans bien des cas, cette forme est plus pratique qu'une équation différentielle traditionnelle. En conséquence, on obtient la solution d'une équation non homogène pour un champ créé par une distribution de charges en intégrant sur l'espace le produit de la densité de charge par la fonction de Green de l'équation de Poisson. De même, la solution de l'équation de Laplace (homogène) ayant les valeurs imposées sur la surface est le produit de ces valeurs par la même fonction de Green. Les conditions aux limites sur une surface peuvent être considérées comme équivalentes à une distribution de charges sur cette surface. Il y a une sorte de dualité entre les charges et les conditions aux limites ; ainsi on remarque que l'équation en présence de source est inhomogène $\Delta V = -\rho$. Si l'on impose la nullité du champ de Laplace sur une surface : type Dirichlet (potentiel nul), type Neumann (dérivée du potentiel nulle), mixte par exemple et si l'on impose $V = V_0$ au champ de Poisson sur la même surface, cela est équivalent à des conditions de Dirichlet, Neumann, Mixte qui seraient non homogènes. La dualité que nous venons d'évoquer entraîne le résultat suivant : La fonction de Green de l'équation de Poisson est solution de l'équation de Laplace exceptée au point où se trouve la charge. Nous retrouvons ce résultat dans notre étude lors de la résolution de l'équation de Stern-Howard pour déterminer le potentiel moyen d'interaction électrons-impuretés dans l'espace réciproque $\bar{V}(q)$.

Annexe 4

Détermination de la fonction de Green de l'équation de Poisson 2D

En appliquant à l'équation de Poisson 3D une transformation de Fourier dans le plan xOy , on aboutit à l'équation définissant la fonction de Green 2D :

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial z^2} - q^2 \right) G(z, z') = \delta(z - z') \quad (\text{éq A4-1})$$

Pour $z \neq z'$, on obtient une équation homogène

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial z^2} - q^2 \right) \Phi = 0 \quad (\text{éq A4-2})$$

L'équation précédente admet deux solutions linéairement indépendantes : $\frac{e^{-qz}}{q}$ et $\frac{e^{+qz}}{q}$. Par combinaison linéaire de ces deux solutions, on construit les solutions de l'équation initiale.

$$\left\{ \begin{array}{l} \Phi^<(z) = A^< \frac{e^{-qz}}{q} + B^< \frac{e^{+qz}}{q} \quad z < z' \\ \Phi^>(z) = A^> \frac{e^{-qz}}{q} + B^> \frac{e^{+qz}}{q} \quad z > z' \end{array} \right. \quad (\text{éq A4-3})$$

Pour déterminer les constantes, on utilise les conditions aux limites du potentiel à l'infini.

$$\begin{aligned} \lim_{z \rightarrow -\infty} \Phi^<(z) = 0 &\Rightarrow A^< = 0 \\ \lim_{z \rightarrow +\infty} \Phi^>(z) = 0 &\Rightarrow B^> = 0 \end{aligned} \quad (\text{éq A4-4})$$

Ainsi :

$$\left\{ \begin{array}{l} \Phi^<(z) = B^< \frac{e^{+qz}}{q} \quad z < z' \\ \Phi^>(z) = A^> \frac{e^{+qz}}{q} \quad z > z' \end{array} \right. \quad (\text{éq A4-5})$$

Par définition la fonction de Green $G(z, z')$ doit être symétrique, en posant $C = B^< A^>$ on obtient :

$$G(z, z') = C \Phi^<(z^<) \Phi^>(z^>) \quad (\text{éq A4-6})$$

Annexes

$$\begin{cases} G(z, z') = C \frac{e^{+qz} e^{-qz'}}{q^2} & z < z' \\ G(z, z') = C \frac{e^{-qz} e^{+qz'}}{q^2} & z > z' \end{cases} \quad (\text{éq A4-7})$$

Pour déterminer la constante, on fait intervenir la continuité de la fonction de Green en $z=z'$.

$$\left(\frac{dG}{dz} \right)_{z'-\varepsilon} - \left(\frac{dG}{dz} \right)_{z'+\varepsilon} = \delta(z - z') \quad (\text{éq A4-8})$$

Et l'on montre que $C = \frac{q}{2}$

$$\begin{cases} G(z, z') = \frac{e^{+qz} e^{-qz'}}{2q} & z < z' \\ G(z, z') = \frac{e^{-qz} e^{+qz'}}{2q} & z > z' \end{cases} \quad (\text{éq A4-9})$$

Finalement on obtient la fonction de Green :

$$G(z, z') = \frac{e^{+qz} e^{-qz'}}{2q} = \frac{e^{-q|z-z'|}}{2q} \quad (\text{éq A4-10})$$

Annexe 5

Détermination de la fonction de Green de l'équation de Poisson 1D

L'écriture de l'équation de Poisson en coordonnées cylindriques et une transformation de Fourier dans la direction de l'axe de symétrie permettent d'aboutir à l'équation qui définit la fonction de Green 1D

$$\left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial \theta} - q^2 \right) G(r, r', \theta, \theta') = -\frac{\delta(r-r')}{r} \delta(\theta-\theta') \quad (\text{éq A5-1})$$

Pour déterminer la fonction de Green, on utilise la propriété suivante

$$\delta(\theta-\theta') = \frac{1}{2\pi} \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \exp[im(\theta-\theta')] \quad (\text{éq A5-2})$$

Et l'on cherche la fonction de Green $g_m(r, r')$ solution de l'équation radiale

$$\left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial}{\partial r} \right) - q^2 \right) g_m(r, r') = \frac{\delta(r-r')}{r} \quad (\text{éq A5-3})$$

Pour $r \neq r'$, nous obtenons une équation différentielle classique

$$\left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial}{\partial r} \right) - q^2 \right) \Phi = 0 \quad (\text{éq A5-4})$$

dont deux solutions linéairement indépendantes sont les fonctions de Bessel modifiées de première et de seconde espèce d'ordre m : $I_m(qr)$ et $K_m(qr)$.

$$\begin{cases} \Phi^<(r) = A^< I_m(qr) + B^< K_m(qr) & r < r' \\ \Phi^>(r) = A^> I_m(qr) + B^> K_m(qr) & r > r' \end{cases} \quad (\text{éq A5-5})$$

Nous déterminons les constantes en écrivant les conditions aux limites au bord de l'espace.

$$\begin{aligned} \lim_{r \rightarrow 0} \Phi^<(r) = L \text{ (finie)} & \Rightarrow B^< = 0 \\ \lim_{r \rightarrow +\infty} \Phi^>(r) = 0 & \Rightarrow A^> = 0 \end{aligned} \quad (\text{éq A5-6})$$

Ainsi :

$$\begin{cases} \Phi^<(r) = A^<I_m(qr) & r < r' \\ \Phi^>(r) = B^>K_m(qr) & r > r' \end{cases} \quad (\text{éq A5-7})$$

On pose $C = A^<B^>$ et on écrit que la fonction de Green radiale doit être symétrique. Et l'on déduit la solution générale du potentiel radial.

$$g_m(r, r') = CI_m(qr^<)K_m(qr^>) \quad (\text{éq A5-8})$$

La condition de continuité de la dérivée de la fonction de Green nous permet de déterminer C . En utilisant une propriété de l'opérateur Wronskien des fonctions de Bessel modifiées, on montre que $C=1$.

$$\left(\frac{dg_m}{dr}\right)_{r'+\varepsilon} - \left(\frac{dg_m}{dr}\right)_{r'-\varepsilon} = W[I_m(qr'), K_m(qr')] = \frac{1}{r'} \quad (\text{éq A5-9})$$

La fonction de Green radiale et la fonction de Green solution de l'équation initiale sont alors entièrement déterminées.

$$g_m(r, r') = I_m(qr^<)K_m(qr^>) \quad (\text{éq A5-10})$$

$$G(r, r', \theta, \theta') = \frac{1}{2\pi} \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \exp[im(\theta - \theta')] I_m(qr^<)K_m(qr^>) \quad (\text{éq A5-11})$$

On obtient alors la fonction de Green réelle.

$$G(r, r', \theta, \theta') = \frac{1}{2\pi} \left[I_m(qr^<)K_m(qr^>) + 2 \sum_{m=1}^{+\infty} \cos[m(\theta - \theta')] I_m(qr^<)K_m(qr^>) \right] \quad (\text{éq A5-12})$$

