

50376
1993
300

THESE

50376
1993
300

Présentée à l'Université des Sciences et Technologies de Lille

pour obtenir le titre de

DOCTEUR DE L'UNIVERSITE
Spécialité : ELECTRONIQUE

par

Véronique SADAUNE

**Effet tunnel résonnant dans des hétérostructures de
matériaux semiconducteurs pour différentes situations
de confinement**



soutenue le 22 Octobre 1993 devant la commission d'examen.

Membres du jury : Mr E. CONSTANT
Mr D. LIPPENS
Mr J.C. PORTAL
Mr Y. GULDNER
Mr M. LANNOO
Mr B. VINTER
Mr F. JULIEN

Président
Directeur de thèse
Rapporteur
Rapporteur
Examineur
Examineur
Examineur

à mes parents,
ma famille,
mes amis.

De cela découle une extraordinaire question. Les
Egyptiens connaissaient-ils l'électricité ?

Umberto Eco

«Le pendule de Foucault»

Remerciements

Ce travail a été effectué au Département Hyperfréquences et Semiconducteurs (DHS) dirigé par Monsieur le Professeur Georges Salmer.

Monsieur le Professeur Eugène Constant, Directeur de l'Institut d'Electronique et de Microélectronique du Nord (IEMN) me fait l'honneur de présider cette commission d'examen. Je l'en remercie sincèrement.

Je tiens à exprimer toute ma reconnaissance envers Monsieur Didier Lippens, Directeur de Recherche au C.N.R.S., qui m'a proposé ce sujet de recherche. Ses conseils, son dynamisme ainsi que ses compétences scientifiques ont permis de mener à bien cette étude.

Je remercie tout particulièrement Monsieur le Professeur Jean Claude Portal de l'INSA-CNRS et du SNCI-CNRS, et Monsieur le Professeur Yves Guldner de l'Ecole Normale Supérieure qui ont accepté de juger ce travail et d'en être les rapporteurs.

J'exprime mes plus vifs remerciements à Monsieur Michel Lannoo, Directeur de Recherche au Département ISEN de l'IEMN, qui me fait l'honneur de participer à la commission d'examen.

Je voudrais aussi remercier Monsieur Borge Vinter, Ingénieur de Recherche au Laboratoire Central de Recherche de Thomson, d'avoir accepté de participer au jury de cette thèse.

Je suis très sensible à la présence de Monsieur François Julien, Directeur de Recherche à l'Institut d'Electronique Fondamentale ; je le remercie pour sa participation à ce jury.

Mes remerciements vont à toute l'équipe du Laboratoire Central de Recherche de Thomson et notamment à Madame Marie-Antoinette di Forte Poisson dont le travail de croissance sur les composants GaInP est à l'origine des études sur les structures de trous.

Je tiens à exprimer ma reconnaissance aux membres du SNCI-CNRS et du département ISEN pour leur collaboration.

Toute ma sympathie va à Mesdames Elisabeth Delos et Sylvie Lepilliet et à Monsieur Edouard Playez, de la Centrale de Caractérisation, pour l'aide précieuse qu'ils m'ont apportée lors de la caractérisation électrique des composants. Je remercie également la Centrale de Technologie pour la croissance et la préparation de ces composants.

Mes remerciements s'adressent à l'ensemble du Centre Interuniversitaire de Traitement de l'Information (C.I.T.I.) pour leur constante disponibilité.

Ce mémoire a été réalisé au C.I.T.I., avec le logiciel de traitement de texte Framemaker, par Madame Mauricette Vandaele. Je lui adresse tous mes remerciements pour la qualité de ce travail et sa patience à toute épreuve.

Merci aussi à Messieurs Jean Pierre Dehorter et Jean Lemaire pour la reprographie de ce mémoire.

Je suis par ailleurs très reconnaissante à Monsieur Olivier Vanbésien pour son aide et ses réponses avisées à toutes mes questions.

J'aimerais enfin exprimer toute ma gratitude à l'ensemble de l'équipe «transport vertical dans les hétérostructures», ainsi qu'à tous mes amis du DHS, pour leur aide et leur sympathie.

Table des matières

Table des matières	i
Introduction générale	1
Bibliographie Introduction générale	5
Chapitre 1	
Structures à effet tunnel résonnant	7
1.1 Introduction	7
1.2 Effet tunnel résonnant	7
1.2.1 Intérêt de l'effet tunnel résonnant pour les applications hyperfréquences	11
1.3 Différentes possibilités d'observation de l'effet tunnel résonnant.....	13
1.3.1 3D - 2D - 3D	13
1.3.2 3D - 2D	15
1.3.3 2D - 3D	16
1.3.4 2D - 2D	17
1.3.5 Le superréseau	19
1.4 Distinction entre charges statiques et dynamiques.....	20
1.4.1 Approximation de Thomas-Fermi	21
1.4.2 Dérivation des composantes de courant	22
1.5 Systèmes de matériaux choisis	23
1.5.1 Structures électroniques à base d'Arsenic adaptées en maille	24
1.5.2 Structures pseudomorphiques.....	27
1.5.3 Structures à effet tunnel résonnant de trous.....	30
1.6 Conclusion.....	32
Bibliographie Chapitre 1	33
Chapitre 2	
Tunnel résonnant dans les structures AlAs/GaAs	39
2.1 Introduction	39
2.2 Problèmes liés au mélange Γ - X dans les doubles barrières AlAs/GaAs	40

2.2.1	Confinement de type Γ	40
2.2.2	Confinement de type X	41
2.2.3	Mélange $\Gamma - X$	42
2.3	Problèmes liés à la définition de la masse effective dans les barrières	42
2.3.1	Calculs du diagramme de dispersion en liaisons fortes	43
2.3.2	Dérivation de la masse	45
2.3.2.1	Masse proposée par Ando et al	46
2.3.2.2	Masse dérivée d'une évolution «quadratique»	47
2.3.3	Implication sur l'effet tunnel résonnant	48
2.3.3.1	Calcul de la transmission	48
2.3.3.2	Calcul du courant	50
2.3.4	Etude expérimentale	51
2.3.4.1	Technologie	51
2.3.4.2	Caractéristiques électriques	52
2.4	Substitution des barrières GaAlAs par des barrières superréseau	54
2.4.1	Motivations	54
2.4.2	Recherche d'équivalence avec une barrière en matériau homogène GaAlAs	54
2.4.2.1	Calcul de la transmission	55
2.4.2.2	Calcul du courant	56
2.4.3	Etude expérimentale des structures à barrière superréseau AlAs/GaAs....	58
2.4.3.1	Technologie	58
2.4.3.2	Caractéristiques statiques entre 4K et 300K	59
2.5	Conclusion	61
Bibliographie Chapitre 2		63
Chapitre 3 Tunnel résonnant dans les structures pseudomorphiques GaInAs/ GaAs/AlAs		67
3.1	Introduction	67
3.2	Modélisation	68
3.2.1	Formalisme	68
3.2.2	Structure pré-puits	69
3.2.3	Structure à puits enterré	72

3.2.4	Structure triple puits - double barrière.....	74
3.3	Conditions d'élaboration.....	79
3.3.1	Rappel des paramètres structuraux.....	79
3.3.2	Fabrication des composants.....	80
3.4	Résultats expérimentaux.....	83
3.5	Conclusion.....	87
Bibliographie Chapitre 3		89
Chapitre 4		
Tunnel résonnant de trous dans les structures GaInP/GaAs		93
4.1	Introduction.....	93
4.2	Elaboration du composant.....	94
4.2.1	Paramètres d'hétérostructure.....	94
4.2.2	Epitaxie du composant par LP-MOCVD.....	94
4.2.3	Fabrication du composant.....	96
4.3	Caractéristiques statiques.....	97
4.4	Analyse des résultats.....	99
4.4.1	Approche simplifiée : trous lourds et trous légers non corrélés.....	99
4.4.2	Mélange trous lourds - trous légers.....	104
4.5	Caractéristiques sous champ magnétique à 4K.....	110
4.5.1	Introduction.....	110
4.5.2	Mesures sous champ magnétique entre 0T et 15T.....	111
4.5.3	Analyse des résultats.....	114
4.6	Conclusion.....	119
Bibliographie Chapitre 4		121
Chapitre 5 Structures à réduction de dimensions		125
5.1	Introduction.....	125
5.2	Détermination du potentiel électrostatique.....	126
5.2.1	Différentes méthodes de simulation.....	127
5.2.2	Résolution de l'équation de Poisson 1D.....	127
5.2.3	Résolution de l'équation de Poisson 2D.....	132
5.2.4	Résolution de l'équation de Poisson cylindrique.....	137
5.3	Description théorique du confinement.....	141

5.3.1	Méthode de résolution	142
5.3.2	Confinement par hétérostructure	143
5.3.3	Confinement électrostatique	144
5.3.4	Boîte quantique.....	146
5.4	Calcul du courant.....	147
5.4.1	Procédure numérique : superposition des confinements	147
5.4.2	Calcul du courant pour des fils quantiques à confinement mixte.....	149
5.5	Conclusion.....	151
Bibliographie Chapitre 5		153
Conclusion générale		157
Bibliographie Conclusion générale		159

Introduction générale

Introduction générale

La maîtrise des procédés technologiques des composés semiconducteurs III-V permet, désormais, de fabriquer des composants de dimensions latérales aussi bien que verticales très faibles. Parallèlement à cette réduction des dimensions, l'utilisation des hétérostructures s'est généralisée. On sait ainsi faire croître des couches dont l'épaisseur se compare à la longueur d'onde des porteurs avec des hétérointerfaces abruptes à l'échelle atomique. D'une part, ceci a conduit à une meilleure intégration et à une plus grande rapidité des dispositifs électroniques. D'autre part, cela a permis le développement d'une électronique quantique qui utilise la nature ondulatoire des électrons comme principe de base.

La diode à effet tunnel résonnant constitue une des structures élémentaires de ces composants quantiques. Le confinement partiel des porteurs est réalisé dans la direction de croissance suite à la rupture de bande interdite aux hétérojonctions. De cette façon, on crée un système puits-barrière de potentiel par alternance de matériaux à petite et grande bande interdite. Le puits peut, par ailleurs, être couplé à des zones de contact à condition que les barrières de potentiel soient suffisamment fines pour que les porteurs aient une probabilité non négligeable de les traverser par effet tunnel. Ce transfert de charges se fait, préférentiellement, aux énergies propres du puits d'où la dénomination d'effet tunnel résonnant.

Au niveau des caractéristiques de conduction, ce phénomène de résonance donne lieu à un effet de Résistance Différentielle Négative (RDN). Cette RDN peut être exploitée en électronique analogique très hautes fréquences. En effet, les temps caractéristiques peuvent être inférieurs à la picoseconde. De surcroît, l'hétérostructure double barrière se révèle très transparente au voisinage de la résonance permettant ainsi d'obtenir une densité de courant très élevée. L'aptitude de ces composants à monter en fréquence a été démontrée pour de nombreuses fonctions non linéaires [1] [2]. Rappelons, à titre d'exemple, le résultat établi par l'équipe du M.I.T. avec la mise en évidence d'une émission fondamentale à la fréquence de 712 GHz [3].

Outre ces réalisations pratiques, des études théoriques ont été menées afin de comprendre les propriétés de transport des différentes structures pour lesquelles on observe un effet tunnel résonnant. A ce propos, nous commencerons par distinguer la dimensionnalité des zones d'injection, de collection et la zone quantique proprement dite. Nous nous intéresserons ensuite au rôle des charges dans les processus d'accumulation - désertion et passage du courant.

Ces éléments nous permettront d'aborder, alors, l'étude de l'effet tunnel résonnant dans les diodes double barrière GaAs/AlAs. Nous discuterons principalement de la définition de la masse effective lorsque les porteurs passent par effet tunnel à des énergies très éloignées du bas de bande de conduction du matériau de barrière. Dans ce but, nous reviendrons à un calcul plus fondamental du diagramme de dispersion, pour un vecteur d'onde purement imaginaire, par la méthode des liaisons fortes. Parallèlement, nous étudierons des structures résonnantes dont les barrières sont constituées de multiples hétérostructures AlAs/GaAs. Nous établirons une équivalence entre ces barrières à «pseudoalliage» et des barrières homogènes.

Par ailleurs, les trous jouant un rôle de plus en plus important dans les processus tunnel, nous présenterons les résultats obtenus pour des structures à effet tunnel de trous GaInP/GaAs. Les phénomènes mis en jeu sont beaucoup plus complexes que ceux intervenant dans un transport par électrons, dans la mesure où deux populations - trous lourds et trous légers - sont en présence. Face à cette difficulté, nous ferons appel à une étude de conduction sous champ magnétique afin de remonter à la nature des porteurs impliqués lors du transfert de charges.

Suite à ces études sur des structures double barrière «conventionnelles», nous améliorerons l'injection bidimensionnelle des porteurs, électrons dans le cas présent, au moyen de structures contraintes GaInAs/GaAs/AlAs. Il s'agit ici d'un effort d'optimisation des caractéristiques courant-tension par adjonction de perturbations locales de potentiel. La conception de ces structures nous amènera à considérer notamment les problèmes de formation de dipôles consécutifs au remplissage des puits et de la fuite des charges par des processus résonnants. Les structures réalisées à partir des calculs ont conduit à des caractéristiques statiques à l'état de l'art pour le système de matériaux considéré.

Enfin, nous évaluerons, théoriquement, de nouvelles structures semiconductrices à dimensions réduites associant le confinement par hétérojonction et/ou par potentiel électrostatique. L'intérêt de ces structures est la possibilité de contrôler extérieurement le confinement des porteurs. Il réside aussi dans la réduction de la dispersion des branches d'énergies, donc par la diminution des transitions entre niveaux. Le schéma d'étude concernera la détermination du profil de potentiel 2D qui s'établit suite à la diffusion, au piégeage et à la désertion latérale des porteurs. Puis nous accéderons aux états propres pour terminer par une première interprétation des caractéristiques de courant en considérant les recouvrements de fonctions d'onde et les probabilités de transmission.

Bibliographie Introduction générale

- [1] T.C.L.G. SOLLNER, W.D. GOODHUE, P.E. TANNENWALD,
C.D. PARKER, D.D. PECK
«Resonant tunneling through quantum wells at frequencies up to
2.5 THz»
Applied Physics Letters 43 (6) (1983) p. 588

- [2] R. BOUREGBA
«Etudes théorique et expérimentale des diodes à effet tunnel résonnant.
Utilisation en oscillation et en multiplication»
Thèse de L'Université de Lille I (1991)

- [3] E.R. BROWN, J.R. SÖDERSTRÖM, C.D. PARKER, L.J. MAHONEY,
K.M. MOLVAR, T.C. Mc GILL
«Oscillations up to 712 GHz in InAs/AlSb resonant-tunneling diodes»
Applied Physics Letters 58(20) (1991) p. 2291

Chapitre 1

Structures à effet tunnel résonnant

Chapitre 1

Structures à effet tunnel résonnant

1.1 Introduction

Dans ce chapitre introductif nous essayerons, tout d'abord, de montrer que l'effet tunnel résonnant est un phénomène physique relativement général qui peut s'observer non seulement dans des structures verticales mais aussi planaires. Nous verrons ensuite en quoi les propriétés de l'effet tunnel résonnant peuvent être intéressantes pour des applications analogiques très hautes fréquences. Nous préciserons alors les différentes situations pour lesquelles on observe cet effet, en faisant des distinctions sur la dimensionnalité des zones où les transferts de charges ont lieu. Par ailleurs, nous considérerons le rôle respectif des charges libres et ionisées dans l'instauration de la densité de courant et l'établissement du profil de potentiel. Nous terminerons cette première partie en étudiant les différents systèmes de matériaux utilisés dans nos études.

1.2 Effet tunnel résonnant

La maîtrise des techniques d'épitaxie permet, à présent, de concevoir des barrières de potentiel - domaines d'énergies classiquement interdits - par modulation de matériaux de quelques monocouches atomiques.

Les porteurs de charge (électrons ou trous), situés majoritairement près du bord de bande de la zone d'injection, vont pouvoir traverser cette barrière par effet tunnel. Citons, par exemple, l'effet tunnel entre bande de conduction et bande de valence (tunnel interbande) mis en évidence dès les années 70 par Esaki et al [1]. En fait, pour cette configuration simple barrière, les probabilités de transmission, bien que significatives, sont encore très faibles - typiquement 1%.

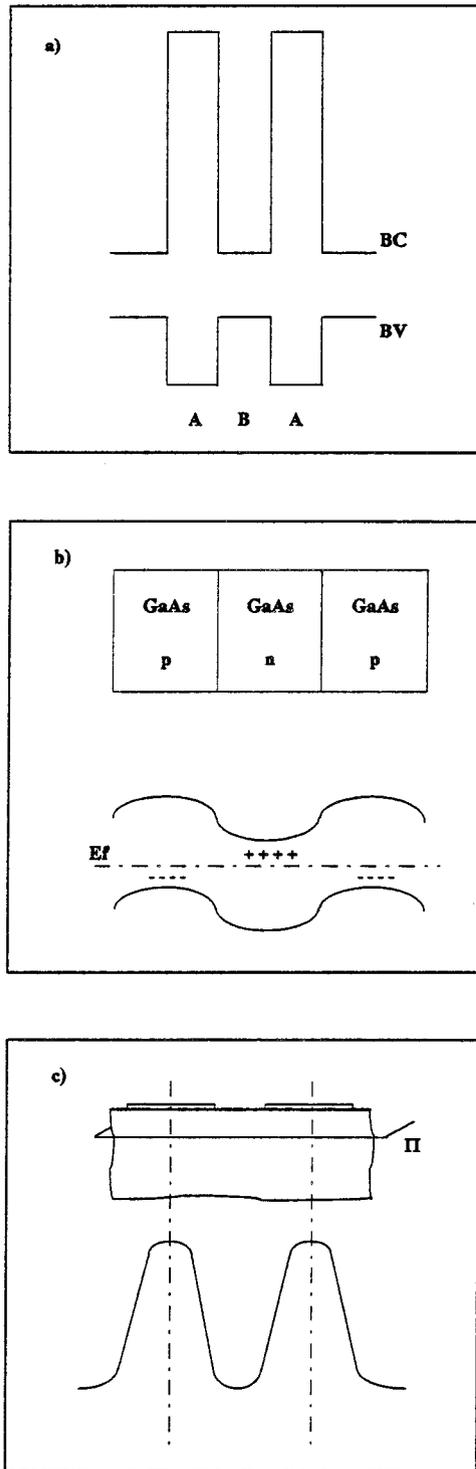


Figure 1.1 Barrières obtenues par :

- a) modulation de matériau
- b) modulation de dopage
- c) application d'une tension sur des électrodes

Si maintenant on crée un puits de potentiel - domaines d'énergies autorisés - à l'aide de deux barrières, comme illustré figure 1.1a, on observe un effet de résonance dans la transmission qui provient de la quantification de l'énergie des porteurs dans la direction de croissance (direction longitudinale). Un exemple de calcul de la probabilité de transmission en fonction de l'énergie longitudinale des porteurs est donné figure 1.2 pour une structure double barrière typique. Aux énergies propres du puits de potentiel, on observe des pics de résonance unitaires. Hors résonance, on peut montrer que l'enveloppe de la transmission est celle des deux simples barrières accolées. Elle est représentée en traits pointillés, pour le domaine d'énergie considéré, sur la figure 1.2.

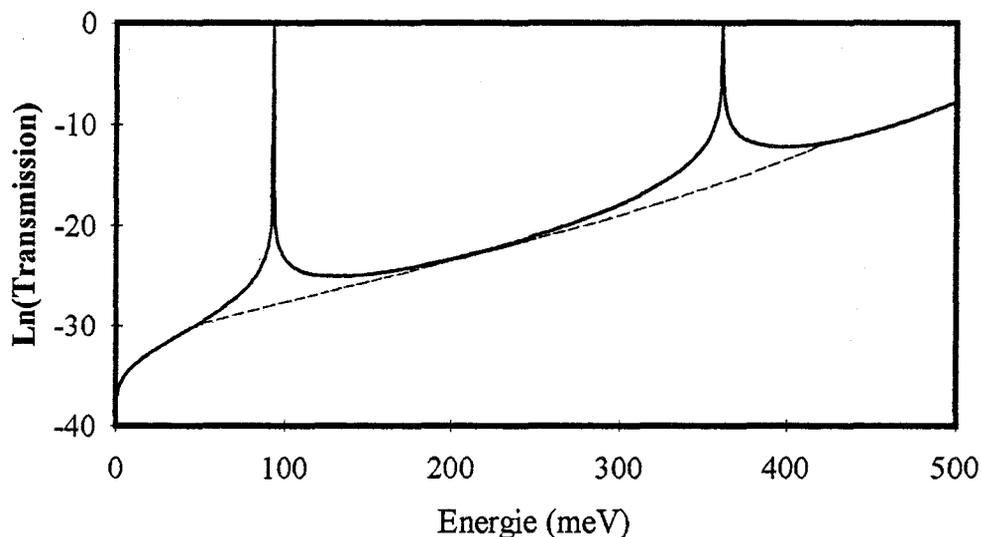


Figure 1.2 Probabilité de transmission en fonction de l'énergie des porteurs incidents d'une double barrière $Ga_{0.4}Al_{0.6}As-70 \text{ \AA}/GaAs-50 \text{ \AA}$. Les pics de transmission correspondent aux niveaux résonnants dans le puits.

De façon plus générale, il y a effet tunnel résonnant à chaque fois que l'on a un confinement de porteurs et une probabilité significative de transmission par effet tunnel. Les figures 1.1b et 1.1c donnent deux exemples pour lesquels les barrières de potentiel sont créées électrostatiquement. Le premier cas représente l'alternance de dopages planaires, respectivement de type p et de type n permettant de créer un système puits-double barrière [1]. Dans le second cas [2], il s'agit d'une structure planaire de type bi-grille présentant, au passage des électrons, dans le plan π , un potentiel semblable à celui schématisé sur cette même figure.

Fondamentalement, la nature résonnante de la transmission peut se comprendre à partir d'un modèle de réflexions multiples emprunté à l'optique. A l'intérieur du puits, les fonctions d'onde associées à chaque valeur d'énergie des porteurs incidents subissent des réflexions et transmissions partielles (figure 1.3). Lorsque le vecteur d'onde égale celui des niveaux propres, la différence de phase sur un aller-retour dans le puits est multiple de 2π . On a alors un phénomène d'interférences constructives entre les ondes partielles. Par opposition, lorsque cette adaptation n'est plus respectée, on a des interférences destructives. Mathématiquement on aboutit, pour la transmission, à l'équation suivante [3] :

$$T_{15} = \frac{T_{13}T_{35}}{1 + R_{13}R_{35} - 2\sqrt{R_{13}R_{35}}\cos 2\phi} \quad (1.1)$$

où ϕ est la différence de phase introduite précédemment. Les coefficients T_{ij} et R_{ij} représentent les probabilités de transmission et de réflexion des porteurs entre les différentes régions notées de 1 à 5.

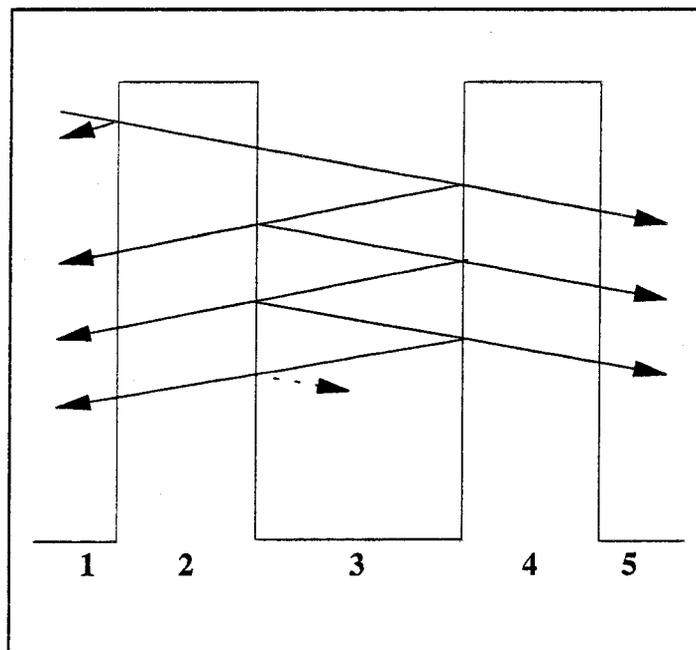


Figure 1.3 Transmissions et réflexions partielles de l'onde incidente sur les barrières à chaque aller et retour dans le puits.

1.2.1 Intérêt de l'effet tunnel résonnant pour les applications hyperfréquences

Depuis la première mise en évidence d'un effet tunnel résonnant, dans des hétérostructures puits-double barrière, par Chang et Esaki en 1974 [4], des améliorations remarquables des propriétés de conduction ont été obtenues. En fait, au niveau des caractéristiques statiques courant-tension on observe, comme nous le verrons par la suite, un effet de Résistance Différentielle Négative (RDN) caractérisé par le rapport entre les composantes de courant résonnant et non résonnant (rapport courant pic sur courant vallée ou PVCR : «Peak to Valley Current Ratio»). Pour illustrer cette évolution des performances au cours du temps, nous avons tracé les rapports pic sur vallée expérimentaux à 300K de 1985, date de la première observation d'une RDN à température ambiante [5], à 1992 (figure 1.4a). Au vu de cette courbe, il est clair que des progrès considérables ont été réalisés dans le contraste en courant avec une valeur record de 50 à 300K, publiée en 1992 [10]. Il est également intéressant de mettre en correspondance l'évolution des densités de courant pic (J_p), sur la même période (figure 1.4b) dans la mesure où ces deux grandeurs, PVCR et J_p , sont antagonistes. Ici encore on note une nette augmentation des densités de courant tunnel avec près de 500 kA/cm^2 à température ambiante [13].

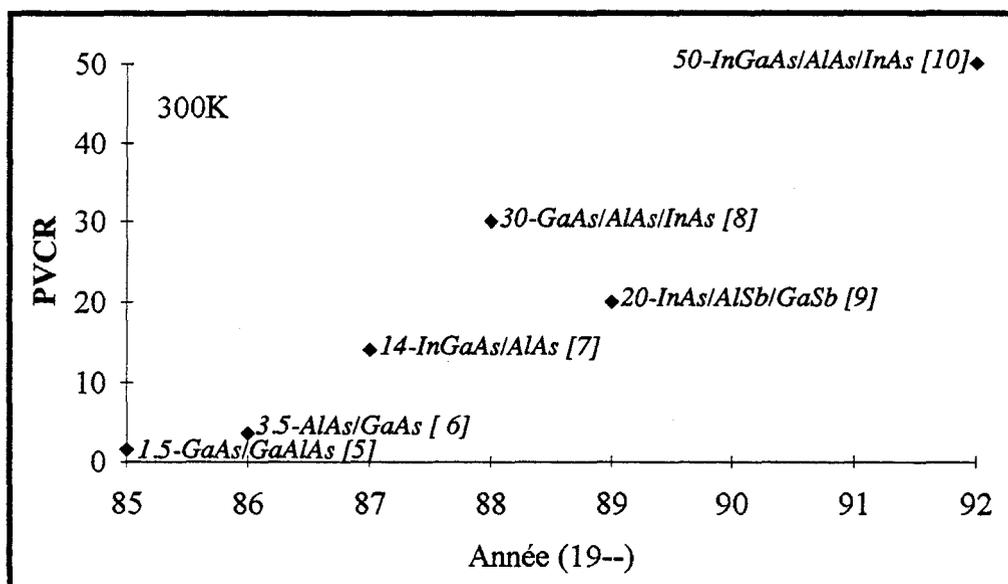


Figure 1.4a Evolution chronologique des rapports courant pic sur (courant) vallée.

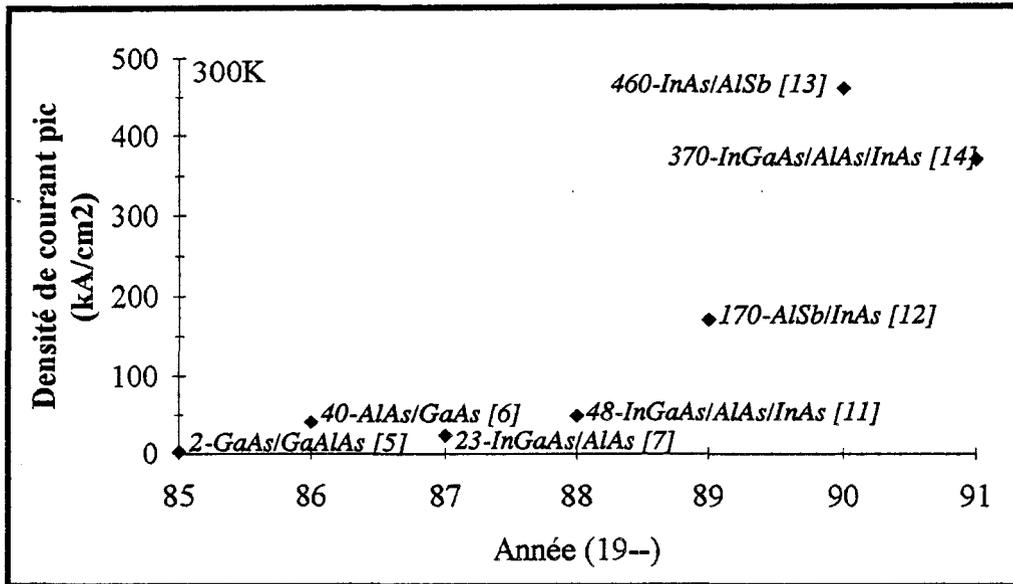


Figure 1.4b Evolution chronologique des courants pics.

Figure 1.4 Résultats repris de la littérature pour des diodes à effet tunnel résonnant à 300K .

Dans l'optique d'applications hyperfréquences, l'analyse de ces courbes montre que l'on peut obtenir un effet de RDN prononcé avec simultanément une densité de courant pic élevée. Il devient donc possible d'envisager une utilisation de ces structures non seulement pour réaliser des oscillateurs, qui constituent l'application la plus immédiate, mais aussi des détecteurs, des multiplicateurs de fréquences et, plus généralement, toutes les fonctions non linéaires de l'électronique classique. Un atout supplémentaire, corrélé avec la notion de densité de courant élevée, est la très faible inertie des phénomènes mis en jeu. On peut montrer en effet que le temps de vie des porteurs sur le niveau quantique fondamental du puits fixe la réponse intrinsèque des composants [15]. En choisissant des barrières de très faible épaisseur on assure, d'une part, une densité de courant élevée et, d'autre part, un temps de résidence très court des porteurs dans la structure puits - double barrière. Pour illustrer ce dernier point, nous avons reporté, figure 1.5, les résultats d'une caractérisation en photoluminescence résolue en temps pour une structure double barrière classique. On obtient couramment un temps de vie de quelques picosecondes, ce qui porte les fréquences de coupure dans le domaine des ondes millimétriques, voire submillimétriques. C'est donc vers les fréquences extrêmement élevées que se situent les applications potentielles pour ce type de composant. A titre d'exemple, citons les oscillateurs à 710 GHz [16], les détecteurs à 2.5THz [17] et les multiplicateurs de fréquences à 320 GHz [18].

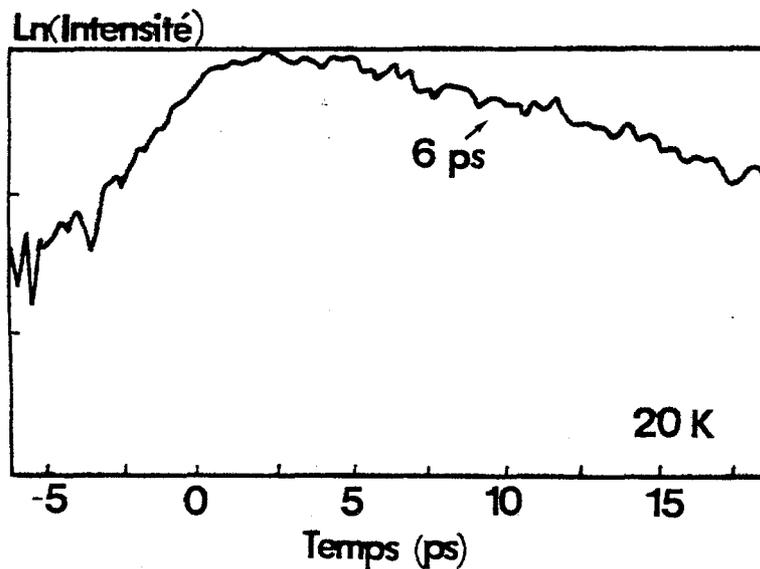


Figure 1.5 Photoluminescence résolue en temps d'une double barrière
 $Ga_{0.7}Al_{0.3}As-70 \text{ \AA} / GaAs-50 \text{ \AA}$

1.3 Différentes possibilités d'observation de l'effet tunnel résonnant

Dans un premier temps, nous allons nous intéresser aux transitions entre un système tridimensionnel (3D) et un système bidimensionnel (2D). Nous étendrons ensuite les notions de transfert de charges résonnant entre deux puits couplés (2D-2D) puis aux hétérostructures multiples.

1.3.1 3D - 2D - 3D

La double barrière est la structure typique pour laquelle les transferts de charges s'effectuent entre un émetteur fortement dopé (3D), le puits de potentiel (2D) et la zone de collecteur (3D). Son principe de fonctionnement peut être compris à l'aide de la figure 1.6a qui schématise la caractéristique de conduction et les profils de potentiel, respectivement, à l'équilibre, à la tension pic et pour une polarisation supérieure à la tension vallée. Pour cet exemple, nous avons supposé des zones émetteur et collecteur très fortement dopées afin que le niveau de Fermi (E_F) soit situé au-dessus du bas de bande de conduction. Dans ces zones tridimensionnelles, on peut supposer qu'à

température nulle, les porteurs se répartissent dans l'espace des \vec{k} selon une sphère de Fermi (figure 1.6b). Considérer une température finie introduira simplement une queue de distribution au-dessus de E_F . A l'équilibre (figure 1.6a), le niveau quantique fondamental (E_0) du puits est au-dessus de E_F . La conduction ne sera effective que lorsque sous l'action d'une polarisation extérieure, on amènera le niveau E_0 en regard des états peuplés d'émetteur.

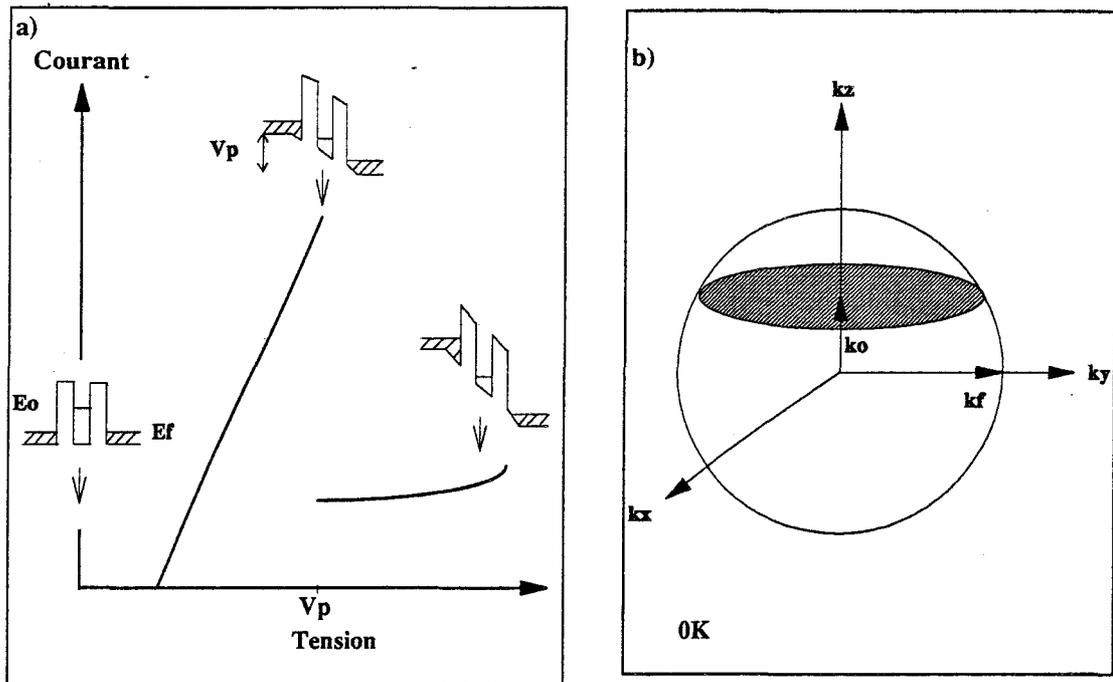


Figure 1.6 a) Principe de l'effet tunnel résonnant dans une double barrière :
à $V=0$, on a le profil de potentiel à l'équilibre.
à $V=V_p$, l'énergie des électrons de l'émetteur est en regard du niveau quantique E_0 .
à $V>V_p$, il n'y a plus correspondance entre les énergies des porteurs et le niveau E_0 .

b) Sphère de Fermi pour un émetteur dégénéré. Le disque hachuré représente les électrons dont le moment k_z égale celui du niveau E_0 .

Si on suppose qu'il y a conservation du moment latéral (direction parallèle aux couches épitaxiées) lors du passage par effet tunnel, seuls les électrons situés dans le disque hachuré sur la figure 1.6b vont participer au flux résonnant de charges. Leur vecteur d'onde k_z s'adapte, en effet, à celui correspondant à l'énergie propre E_0 . Cet effet tunnel résonnant se manifeste tant que la polarisation extérieure positionne E_0 entre E_F et le bas de la bande de conduction (E_c) soit $0 \leq k_0^2 \leq k_F^2$. Au niveau de la caractéristique de courant, qui représente le produit du nombre de porteurs s'appêtant à franchir la barrière par leur probabilité de transmission, on observe une augmentation monotone du courant tunnel car les états situés près de E_c (disque proche de l'équateur) sont plus peuplés que près de E_F . Pour des tensions plus élevées, le niveau E_0 passe en dessous de la bande de conduction de l'émetteur. Dans l'hypothèse d'une composante de courant tunnel purement élastique il n'y a plus d'électron pouvant profiter de l'effet tunnel résonnant, ce qui se traduit par une chute brutale des valeurs de courant. La valeur résiduelle correspond à plusieurs contributions : courant d'origine thermionique, composante tunnel non résonnant . . .

On peut généraliser le raisonnement d'une brusque chute des valeurs de courant à une structure comportant plusieurs niveaux quantiques. Cependant, en pratique, il est souvent difficile d'utiliser une conduction par des niveaux excités. Pour les applications, on utilise donc les non-linéarités de conduction obtenues pour l'état fondamental.

1.3.2 3D - 2D

Au vu de l'analyse précédente, on constate que le point crucial est le mécanisme d'injection dans le puits (3D-2D). Le transfert vers le collecteur (2D-3D) n'apparaît que comme une fuite d'un état bidimensionnel vers des états étendus non peuplés. On a ainsi une image séquentielle des phénomènes injection-fuite, qui a été proposée par Luryi [19]. Pour valider une telle interprétation, des structures semblables à celle décrite figure 1.7 ont été proposées. Par rapport à la figure 1.6, la différence principale réside dans le fait que la composante de courant tunnel est extraite latéralement. La barrière collecteur, opaque aux électrons, ne sert qu'à assurer le confinement. Il a été démontré qu'un effet tunnel résonnant est observé dans ce type de structure qui ouvre par ailleurs la perspective de commander le courant tunnel par une troisième électrode

située après la barrière collecteur. Cette structure est connue, dans la littérature, sous le nom de transistor à base inversée [20]. Des réalisations ont montré la possibilité de la commander avec un courant de base presque nul.

En ce qui concerne le courant pic, Weil et Vinter [21] ont montré qu'une description globale ou séquentielle conduisait à des propriétés identiques.

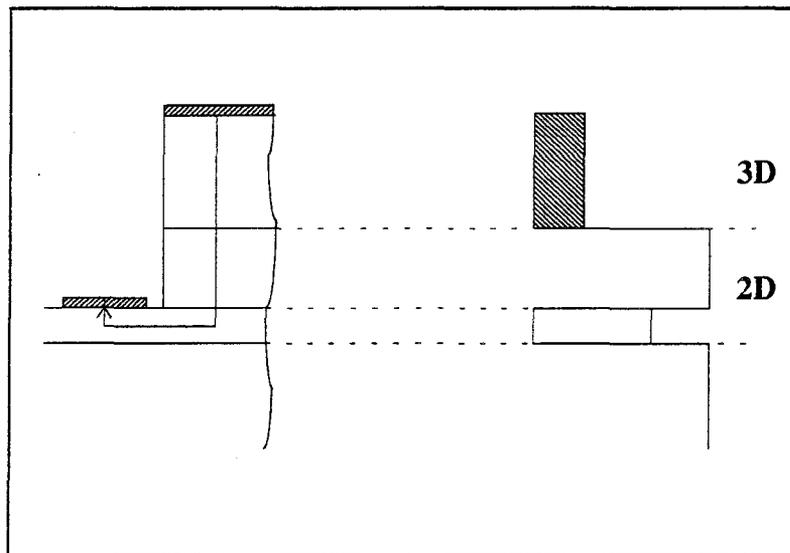


Figure 1.7 Exemple d'une structure pouvant présenter un effet de RDN par transfert 3D-2D. L'adjonction d'une troisième électrode permet de collecter les électrons piégés dans le puits.

1.3.3 2D - 3D

La situation duale à celle décrite précédemment correspond à la fuite d'une population dont le mouvement est restreint longitudinalement. Nous verrons par la suite que ce cas se rencontre dans des structures dites pré-puits pour lesquelles on a accumulation d'un gaz électronique suivie d'une fuite résonnante. Fondamentalement, on peut accéder au temps de fuite par un calcul des densités d'états établi sur la zone de confinement à partir des probabilités de présence [22]. L'exemple le plus simple est donné sur la figure 1.8 qui suppose un système limité par une barrière infinie à gauche et

couplé par une simple barrière à un continuum d'énergie. Dans cette configuration, le tracé de la densité d'états en fonction de l'énergie met en évidence des pics dont la largeur à mi-hauteur permet d'accéder directement aux temps de fuite. Ici encore les pics de résonance se produisent pour des énergies égales aux niveaux quantiques du puits. Les temps de fuite calculés par cette méthode concordent avec ceux déduits des spectres de transmission d'une structure double barrière présentant une barrière amont opaque, ce qui interdit toute fuite vers l'émetteur.

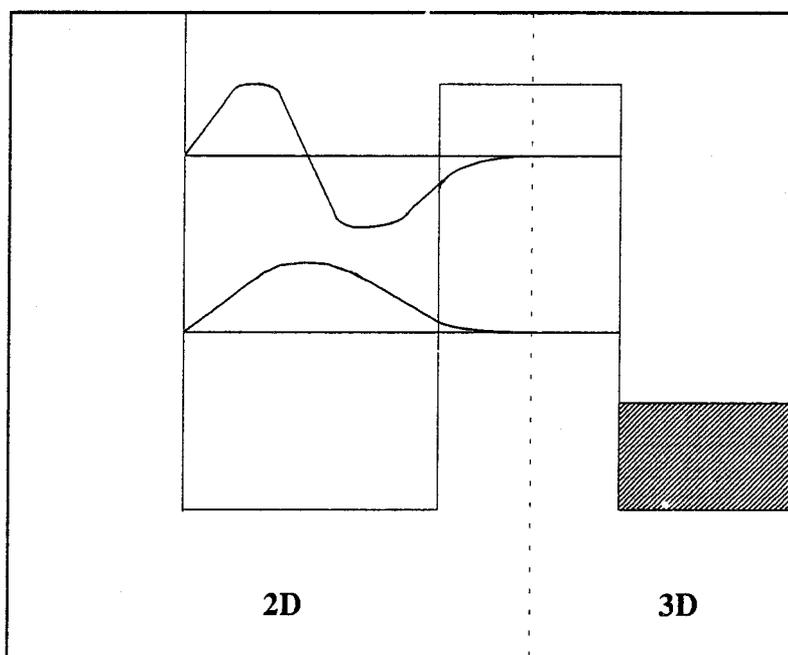


Figure 1.8 Exemple de structure 2D-3D avec les niveaux quasi-liés et les fonctions d'onde associées.

1.3.4 2D - 2D

Un échange de charges entre deux systèmes bidimensionnels se rencontre presque naturellement pour les structures double barrière dans la mesure où il se crée nécessairement, dans la zone d'émetteur, une accumulation de charges qui permet une injection bidimensionnelle [23]. Nous verrons plus tard que ce phénomène d'injection peut être renforcé en insérant un matériau à petite bande interdite afin de quantifier l'énergie des porteurs incidents. Comparativement au raisonnement établi au paragraphe 1.3.1 concernant un émetteur tridimensionnel, on peut s'attendre à une condition supplémentaire sur la distribution des porteurs incidents qui se décompose alors en une série de disques dans la sphère de Fermi, un pour chaque niveau quantique

du système 2D d'émetteur. En première analyse, on peut penser que ces transitions résonnantes soient ici beaucoup plus critiques puisqu'elles mettent en jeu deux niveaux quantiques. En pratique, cependant, il faut rester prudent quant aux conclusions, particulièrement pour des systèmes fortement couplés. Pour bien comprendre cette difficulté, on peut passer progressivement d'un système de deux puits isolés à celui où les deux puits interagissent fortement. Dans le premier cas, chaque puits a son niveau propre et il n'y a aucune difficulté à envisager un alignement parfait entre ces deux niveaux, soit sous l'action d'une tension externe soit par parfaite symétrie des paramètres de structure. Dans ce dernier cas, ils sont alignés à l'équilibre. En revanche, pour un système où il y a un couplage important des fonctions d'onde, on a levée de dégénérescence des niveaux avec un écart en énergie proportionnel au recouvrement de ces fonctions d'onde (figure 1.9a). On conçoit qu'il y ait, de ce fait, impossibilité d'alignement strict, comme nous le verrons dans la suite de cette thèse. Les transitions font, alors, forcément intervenir de l'effet tunnel inélastique avec des transitions assistées par phonons optiques longitudinaux par exemple [24]. Outre l'injection bidimensionnelle, la possibilité d'une structure combinant un transfert latéral et vertical constitue un autre exemple d'application (figure 1.9b).

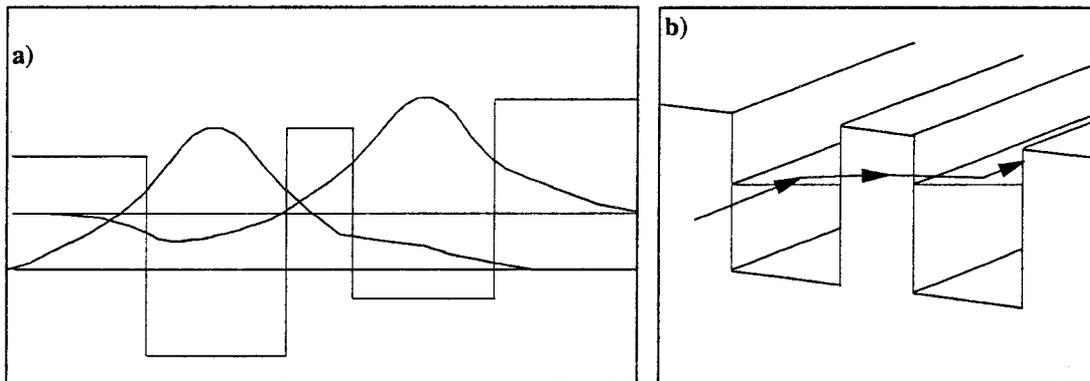


Figure 1.9 a) Exemple d'une structure à double puits couplé avec les deux premiers niveaux et les fonctions d'onde correspondantes.
b) Possibilité de structure combinant un transport latéral et un transport vertical.

1.3.5 Le superréseau

Pour être tout à fait complet, on peut étendre le raisonnement précédent à une structure multi-puits fortement couplés qui constitue un superréseau. On montre que l'on obtient une fenêtre de transmission qui présente autant de pics de résonance que de puits. En fait, la définition des pics est détériorée par un élargissement collisionnel. On obtient donc, pratiquement, une minibande comme pour un superréseau infini. Sous l'action d'une tension de polarisation, on passe progressivement d'un régime de minibande à un régime de multi-puits quantiques qui présente, par opposition, des états discrets. Au niveau de la fonction d'onde, cela correspond à la transition entre des probabilités de présence réparties sur l'ensemble de la structure à des probabilités localisées dans chaque puits où l'effet tunnel résonnant peut être observé sous réserve d'alignement de deux niveaux de puits adjacents (figure 1.10).

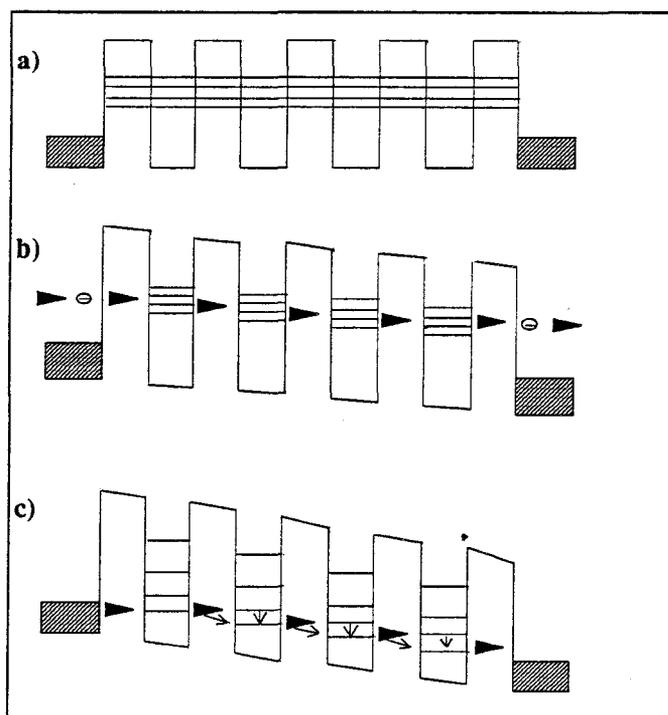


Figure 1.10 Diagramme de bande schématisé d'un superréseau
a) à l'équilibre.
b) pour une tension inférieure à la largeur de la minibande, le couplage entre puits permet une conduction par cette minibande.
c) à polarisation élevée, on a destruction de la minibande et une conduction séquentielle par niveau discret. Celle-ci peut être assistée par des phénomènes diffusifs.

1.4 Distinction entre charges statiques et dynamiques

Dans les structures décrites jusqu'à présent, nous n'avons pas pris en compte les espaceurs situés de part et d'autre de la zone active. A l'origine, ces espaceurs étaient prévus pour s'affranchir de la diffusion des dopants dans le système puits-double barrière pendant la croissance. Cependant, ils se sont généralisés car ils permettent d'obtenir de meilleures performances électriques. Si l'espaceur, au niveau collecteur, n'a pour effet que d'assurer la décroissance du champ électrique, au niveau émetteur on a conjugaison des phénomènes de diffusion des zones fortement dopées et d'accumulation des porteurs incidents désadaptés en énergie. Pour illustrer l'ensemble de ces effets, nous avons reporté sur la figure 1.11 le profil de la bande de conduction d'une double barrière typique comportant des espaceurs étendus. Près des zones n^+ , qui constituent des réservoirs d'électrons, il se forme une barrière de potentiel électrostatique qui s'oppose à la diffusion. On remarque que des charges libres s'accumulent en amont de la double barrière tandis que l'on observe une forte désertion en aval. Dans la zone d'accumulation, on a alors restriction du mouvement électronique et donc quantification de l'énergie des porteurs, qui peuvent franchir la barrière électrostatique, entre autre, par effet tunnel.

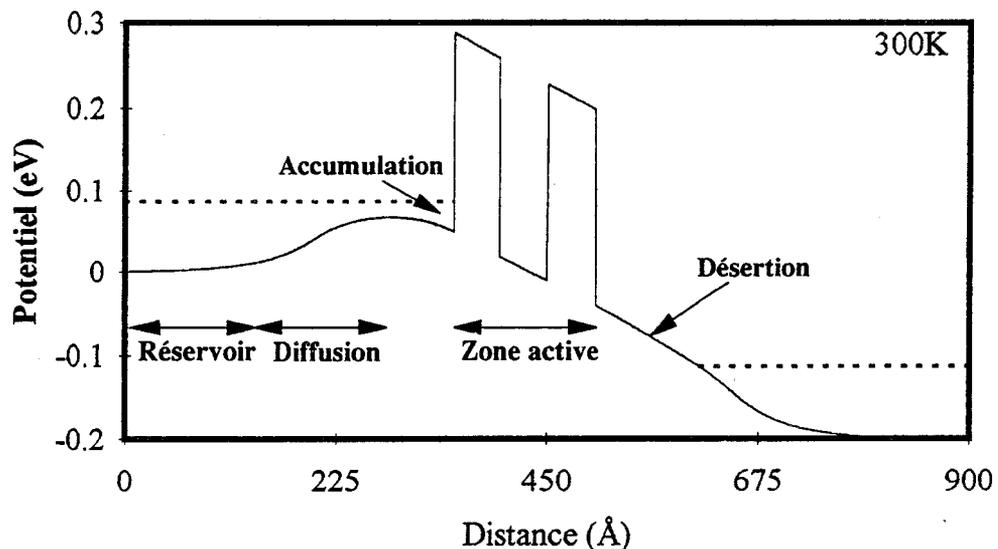


Figure 1.11 Profil de bande de conduction caractéristique d'une diode double barrière pour une tension de 0.2V.

1.4.1 Approximation de Thomas-Fermi

Cependant, un traitement purement quantique de ces zones n'est pas trivial compte tenu du caractère ouvert des systèmes traités. Ce problème a particulièrement été étudié par Frensley [25] qui a montré qu'un traitement simultané des effets de quantification et de réaction de charge d'espace dans ces systèmes était délicat. En effet, cet auteur a considéré le transport quantique en termes de fonction de distribution de Wigner et a prouvé qu'il était impératif d'introduire les interactions sur phonons dans l'espaceur pour obtenir une variation de potentiel physiquement acceptable. Dans ce cas, les courbures de bande trouvées sont comparables à celles calculées par une approche semi-classique de Thomas-Fermi, procédure que nous utiliserons en pratique et sur laquelle nous aurons l'occasion de revenir. Précisons, dès à présent, que les variations spatiales du bas de bande de conduction sont obtenues par résolution auto-cohérente de l'équation de Poisson :

$$\frac{\partial^2 V(z)}{\partial z^2} = \frac{q}{\epsilon} (N_D(z) - n(z)) \quad (1.2)$$

où $N_D(z)$ est le niveau de dopage, et de l'équation de Thomas-Fermi :

$$n(z) = N_c \int_0^{\infty} \frac{\left(\frac{E - E_C(z)}{k_b \theta} \right)^{1/2}}{1 + \exp\left(\frac{E - E_F}{k_b \theta} \right)} dE \quad (1.3)$$

où θ est la température, N_c la densité effective d'état en bande de conduction, $E_C(z)$ la bande de conduction locale égale au potentiel d'hétérostructure ajouté au potentiel électrostatique $V(z)$. C'est à l'aide de cette méthode que nous avons calculé le profil donné figure 1.11. Ce calcul, purement statique, est fait en l'absence de courant quelle que soit la polarisation. A partir du profil de potentiel obtenu, nous déduisons l'état quantique du système : valeurs propres, probabilité de transmission, durée de vie sur les niveaux quantiques (états quasi-liés) . . . Ces données nous permettent de dériver la composante de courant.

1.4.2 Dérivation des composantes de courant

Dans la plupart des calculs qui seront présentés, nous nous mettrons toujours dans la situation d'une zone active encadrée par des zones tridimensionnelles. En d'autres termes, les caractères bidimensionnels mentionnés dans le paragraphe 1.3.1 vont se repercuter au travers de la transmission. En revanche, l'évaluation de la répartition en énergie des porteurs incidents se fera dans les zones réservoirs pour lesquelles on peut définir des propriétés volumiques. Le courant s'exprime alors par l'intégrale suivante :

$$J(V_a) = \frac{qm^* k_b \theta}{2\pi^2 \hbar^3} \int_0^\infty T(E_z, V_a) \cdot F(E_z, V_a) dE_z \quad (1.4)$$

où θ est la température.

La fonction $F(E_z, V_a)$ est appelée fonction d'alimentation. Si on suppose un même dopage côté émetteur et côté collecteur, donc le même niveau de Fermi E_F , elle a pour expression [26] :

$$F(E_z, V_a) = \text{Ln} \left[\frac{1 + \exp\left(\frac{E_F - E_z}{k_b \theta}\right)}{1 + \exp\left(\frac{E_F - E_z - qV_a}{k_b \theta}\right)} \right] \quad (1.5)$$

V_a est la tension appliquée aux bornes de la structure.

Le rôle joué par la fonction d'alimentation se révèle en pratique très important, notamment pour les caractéristiques de conduction en fonction de la température. Elle conditionne aussi la montée de courant, tant au voisinage de E_F qu'à celui de E_c . De manière plus précise on montre que, à faible polarisation, les distributions d'émetteur - représentée par le numérateur de $F(E_z, V_a)$ - et de collecteur - représentée par le dénominateur - sont en concurrence (figure 1.12). Lorsque la tension appliquée augmente on favorise un sens de conduction.

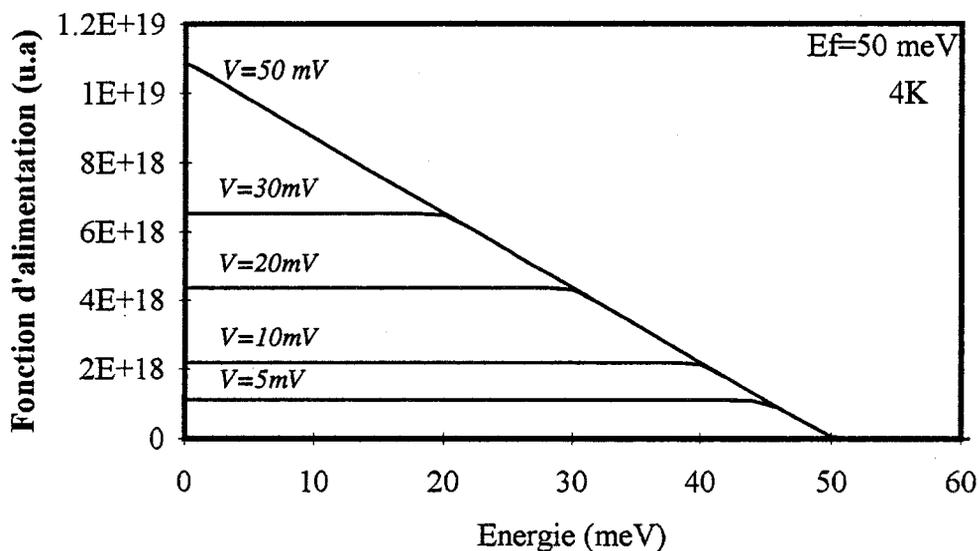


Figure 1.12 Evolutions de la fonction d'alimentation en fonction de la polarisation appliquée.

1.5 Systèmes de matériaux choisis

Pour définir les systèmes de matériaux qui apparaissent les plus favorables pour la conception d'hétérostructures résonnantes, nous avons reporté sur la figure 1.13 le diagramme paramètre de maille en fonction de la bande interdite pour les composés binaires III-V les plus utilisés ainsi que pour leurs alliages [27]. On constate que de nombreuses associations de matériaux binaires et ternaires peuvent être retenues. Des discontinuités de bande interdite de plus de 1 eV peuvent être réalisées, sous réserve d'adaptation en maille.

C'est pour cette raison que nous avons scindé cette partie en deux : le premier paragraphe traite des structures adaptées en maille et le second concerne les structures pseudomorphiques pour lesquelles il est nécessaire d'introduire la notion de longueur critique. Par ailleurs, nous avons également envisagé le cas d'une structure résonnante de trous, sujet qui sera abordé au chapitre 4.

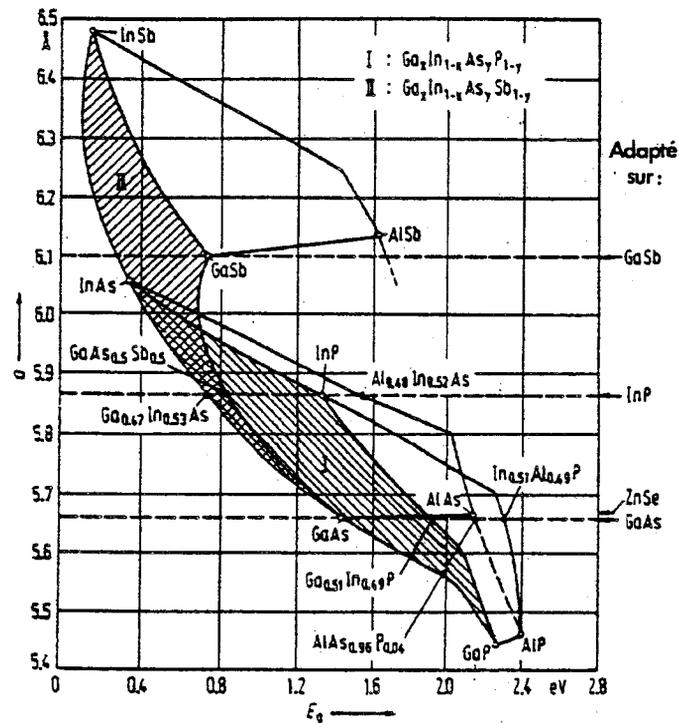


Figure 1.13 Paramètre de maille en fonction de la bande interdite pour différents matériaux III-V.

1.5.1 Structures électroniques à base d'Arsecenic adaptées en maille

Parmi les systèmes de matériaux à base d'Arsecenic, on peut distinguer les composés adaptés en maille sur GaAs de ceux adaptés sur InP. En ce qui concerne ces derniers, seules les structures GaInAs/AlInAs ont conduit à des résultats concluants [11] dans la mesure où le maximum de discontinuité se situe dans la bande de conduction. Il n'en est pas de même pour les hétérostructures GaInAs/InP.

Pour le système GaAlAs/GaAs, système retenu dans notre étude, une difficulté majeure vient de la transition entre gap direct et gap indirect. Pour souligner ce point, nous avons reporté, figure 1.14, les structures de bande du GaAs et de l'AlAs calculées en liaisons fortes dans la base sp^3s^* , en négligeant les interactions spin-orbite [28]. Les paramètres utilisés pour ces calculs sont ceux proposés par Ando [29]. Le minimum d'énergie pour le bas de bande de conduction se situe au point Γ pour le GaAs et au point X pour l'AlAs. Ce passage au gap indirect constitue une difficulté théorique importante pour le traitement de l'effet tunnel dans ce matériau et ne peut être traité

simplement par une théorie de type fonction enveloppe. Nous verrons cependant, au chapitre 2, que des traitements plus exacts permettent de conclure que, compte tenu de la faible largeur des barrières dans nos applications, le transport par vallée Γ est prédominant.

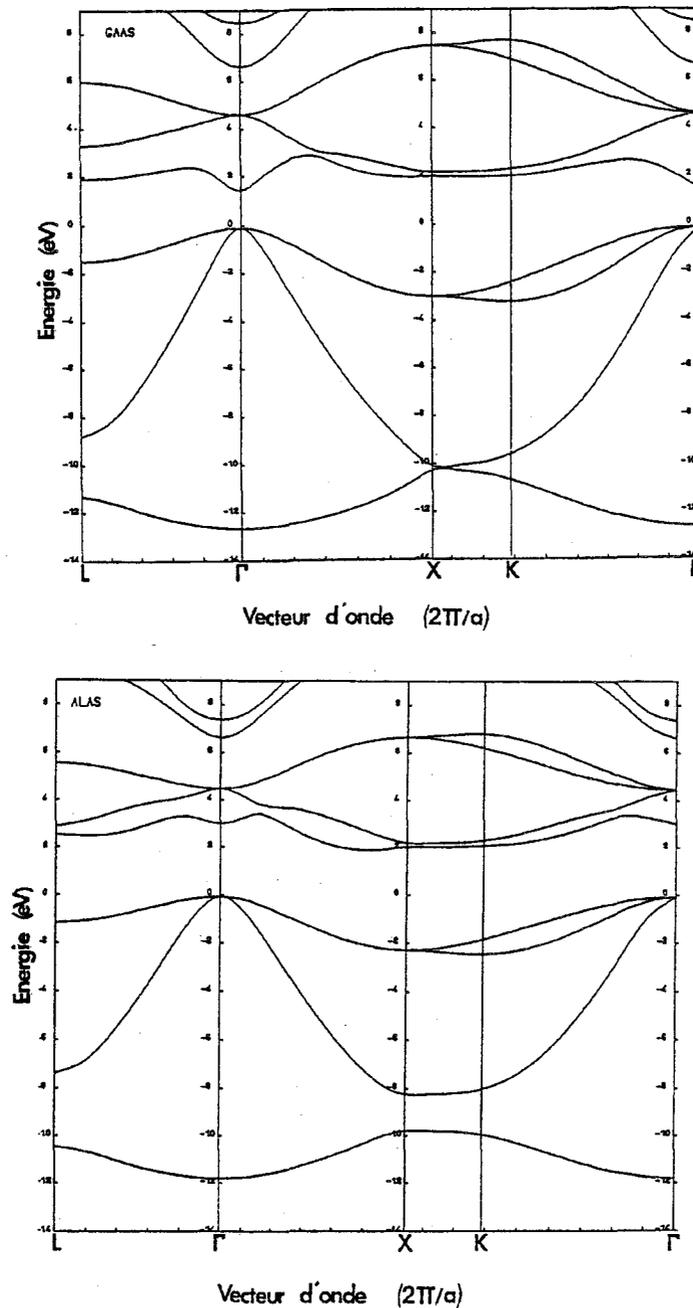


Figure 1.14 Structures de bande de l'AlAs et du GaAs calculées par la méthode des liaisons fortes dans la base sp^3s^* . Les interactions spin-orbite sont négligées.

Pour le ternaire $Ga_{1-x}Al_xAs$, le calcul de la structure de bande s'effectue dans l'hypothèse du cristal virtuel. L'électron est alors soumis à un potentiel moyen obtenu par pondération des potentiels des matériaux binaires par la concentration x de l'élément de substitution. La figure 1.15 montre l'évolution en énergie des minima Γ et X de la bande de conduction du $Ga_{1-x}Al_xAs$, référencée à partir du haut de la bande de valence. Le passage gap direct-gap indirect, correspondant au croisement entre les points Γ et X , se produit par une concentration d'Aluminium d'environ 0.4.

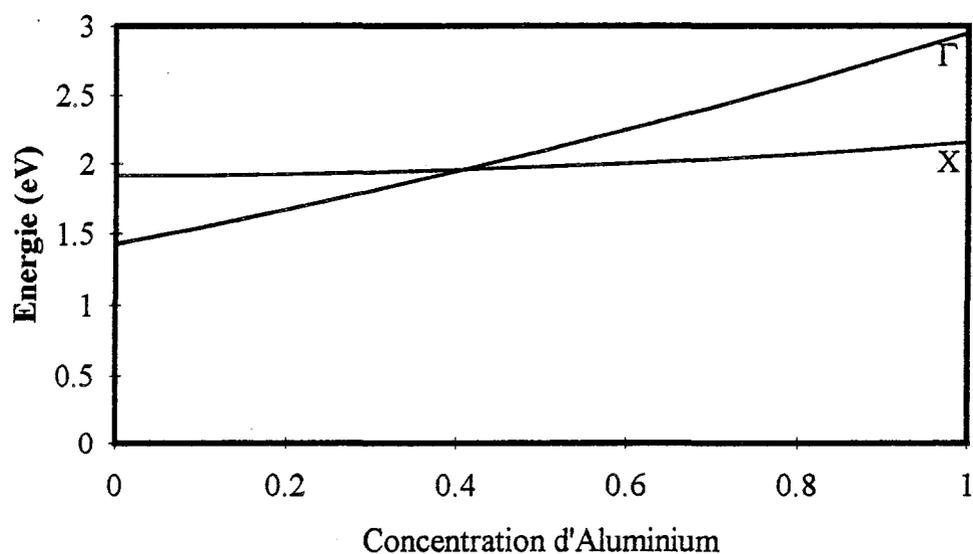


Figure 1.15 Evolution de l'énergie aux minima Γ et X de la bande de conduction pour la $Ga_{1-x}Al_xAs$ mesurée à partir du haut de la bande de valence.

Ces variations de la bande interdite en fonction du pourcentage d'Aluminium x ont été données par Adachi [30] :

$$\begin{aligned} E_g^\Gamma &= 1.425 + 1.155x + 0.37x^2 \\ E_g^X &= 1.911 + 0.005x + 0.245x^2 \end{aligned} \quad (1.6)$$

Pour la discontinuité de bande de conduction, au point Γ entre les matériaux GaAs et GaAlAs, nous prendrons 60% de la discontinuité de bande interdite quelle que soit la concentration en Aluminium.

Il nous reste à définir les masses effectives qui constituent l'autre paramètre clé pour les caractéristiques de courant. Pour le GaAs, la masse effective de bas de bande de conduction est prise égale à $0.067m_0$ et pour l'AlAs, au point Γ , à $0.15 m_0$. En ce qui concerne les matériaux ternaires, nous adopterons la formule d'Adachi [30] :

$$m_{\Gamma}^* = 0.067 + 0.083x \quad (1.7)$$

Nous aurons cependant l'occasion de remettre en cause l'utilisation d'une masse de bas de bande de conduction pour les hétérostructures à discontinuités élevées.

1.5.2 Structures pseudomorphiques

L'étude que nous allons faire se limitera aux structures GaInAs/GaAs avec des concentrations d'Indium inférieures à 25%.

L'intérêt des structures pseudomorphiques vient, essentiellement, de la petite bande interdite de ces matériaux donc d'une masse effective en vallée Γ faible. En association avec des matériaux à grande bande interdite, cela se traduit par des discontinuités plus importantes. On acquiert alors une liberté supplémentaire dans la conception avec l'espérance d'une meilleure cohérence dans le mécanisme de transport et l'obtention de densités de courant élevées suite à la diminution de la masse effective.

Le passage entre les valeurs de bande interdite de l'InAs (0.36 eV) et du GaAs (1.42eV), illustré figure 1.16, se fait suivant une loi faiblement quadratique de type [27] :

$$E_g(x) = 1.424 - 1.5x + 0.4x^2 \quad \text{à } 300\text{K} \quad (1.8)$$

La variation de la constante de réseau est quasi-linéaire (figure 1.16), ce qui provoque une désadaptation en maille rapidement croissante avec le pourcentage d'Indium x . Il en résulte un compromis entre l'épaisseur du ternaire et sa composition afin d'éviter la création de dislocations par relaxation de l'énergie élastique.

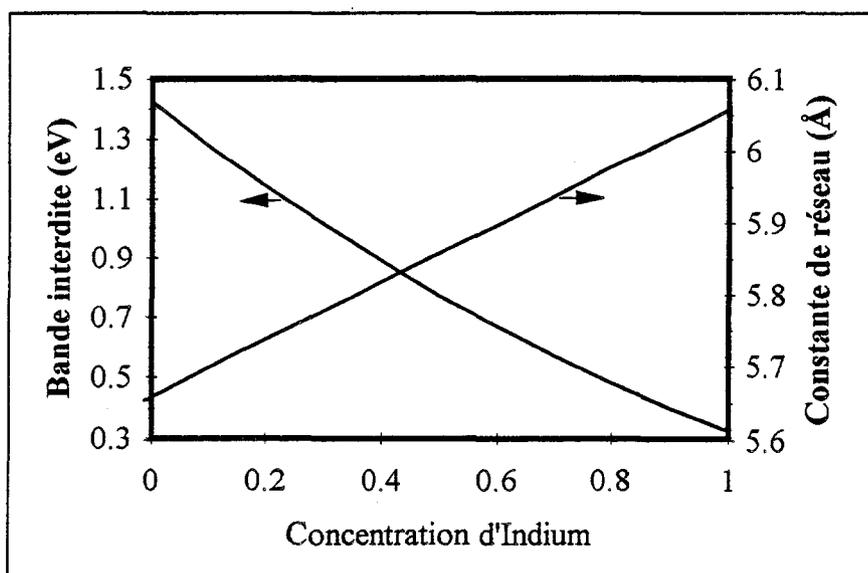


Figure 1.16 Evolution de la bande interdite et de la constante de réseau du matériau $Ga_{1-x}In_xAs$ en fonction de la concentration x en Indium d'après Sakaki [31]

En effet, il est possible d'épitaxier des structures contraintes, ou pseudomorphiques, à condition de ne pas dépasser l'épaisseur critique, dont l'évolution, calculée avec le modèle de Matthews [31], en fonction de la composition d'Indium x , est donnée figure 1.17 [32], pour une croissance de $Ga_{1-x}In_xAs$ sur GaAs. Dans ce cas, on peut avoir adaptation de maille par compression dans le plan de croissance compensée par une extension dans la direction perpendiculaire comme schématisée figure 1.18. Pour des épaisseurs supérieures à cette longueur critique, L_c , il y a généralement formation de dislocations aux interfaces. Pour un pourcentage d'Indium $x = 0.15$, on peut évaluer L_c à 200 Å, cette valeur tombe à 30 Å pour $x = 0.25$, ce qui constituera la limite dans l'application tunnel résonnant basée sur les structures GaInAs. Dans cette gamme de concentration, le report des discontinuités de bande interdite en bande de conduction est de 65% [33].

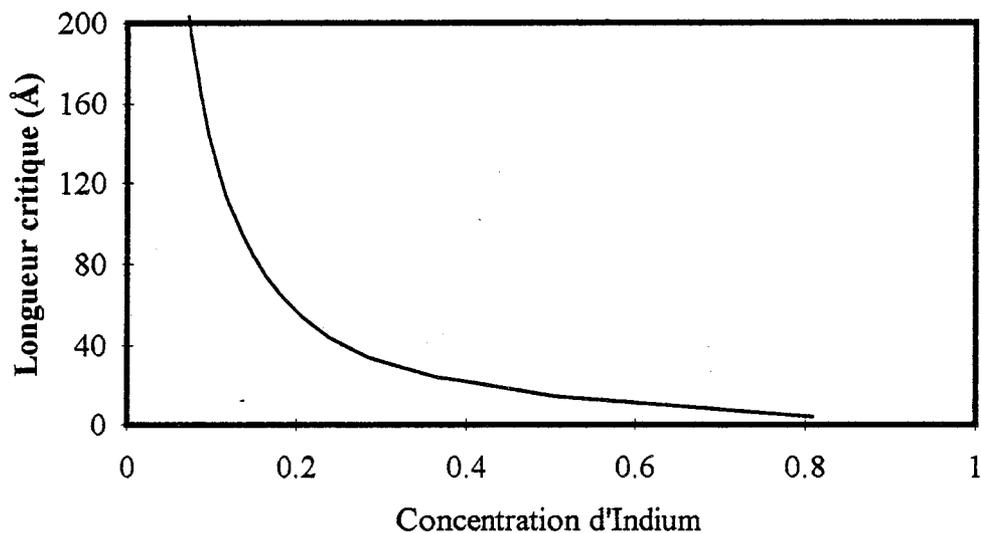


Figure 1.17 Evolution de l'épaisseur critique du $Ga_{1-x}In_xAs$ en fonction du pourcentage d'Indium dans le cas de l'hétérostructure $Ga_{1-x}In_xAs/GaAs$.

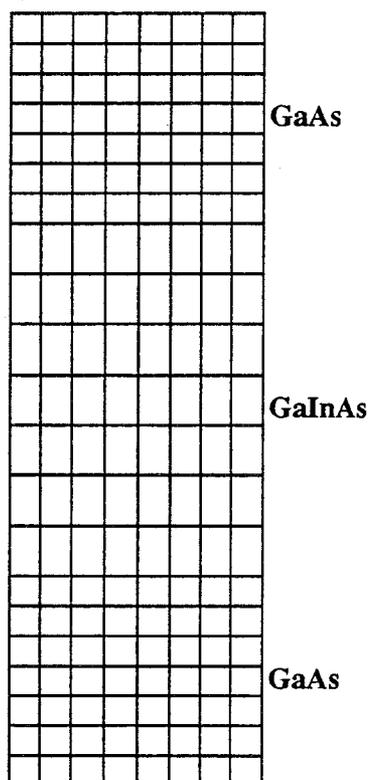


Figure 1.18 Schématisation d'une croissance pseudomorphique de $GaInAs$ sur un substrat $GaAs$.

En ce qui concerne les masses effectives, les écarts par rapport à celle du GaAs sont suffisamment faibles pour que l'on puisse négliger la variation de masse consécutive à l'introduction d'Indium.

1.5.3 Structures à effet tunnel résonnant de trous

Le fait de s'intéresser à des structures plus favorables à l'observation d'un effet tunnel de trous provient de deux remarques : d'une part le développement rapide de l'optoélectronique, qui fait souvent intervenir des populations d'électrons et de trous, d'autre part, la volonté de réaliser une électronique complémentaire.

Parmi les couples de matériaux possibles, nous avons retenu le système $\text{Ga}_{1-x}\text{In}_x\text{P}/\text{GaAs}$, dont le report en bande de valence est prépondérant. En effet ce ternaire, adapté en maille sur GaAs pour $x = 0.49$, présente une discontinuité de bande de valence de ~ 0.3 eV. De surcroît, il est possible de doper p les zones d'émetteurs GaAs par du carbone sans polluer les barrières.

Pour les études préliminaires, nous nous sommes cantonnés à la concentration d'Indium de 0.49 qui, outre le fait qu'elle permet de s'affranchir des contraintes liées à la désadaptation, évite le problème complexe de levée de dégénérescence des bandes de trous lourds et de trous légers ainsi que l'anisotropie induite par la contrainte. Il est cependant certain qu'à plus long terme il pourrait être intéressant d'utiliser ces effets de contrainte pour alléger la masse perpendiculaire, inverser la population majoritaire et ainsi favoriser une conduction par trous légers.

La variation de bande interdite autour de cette concentration de 0.49 est linéaire (figure 1.19) [35] et son expression est :

$$E_g = 2.446 - 1.151x \quad \text{pour } x \in [0.47 - 0.5] \quad (1.9)$$

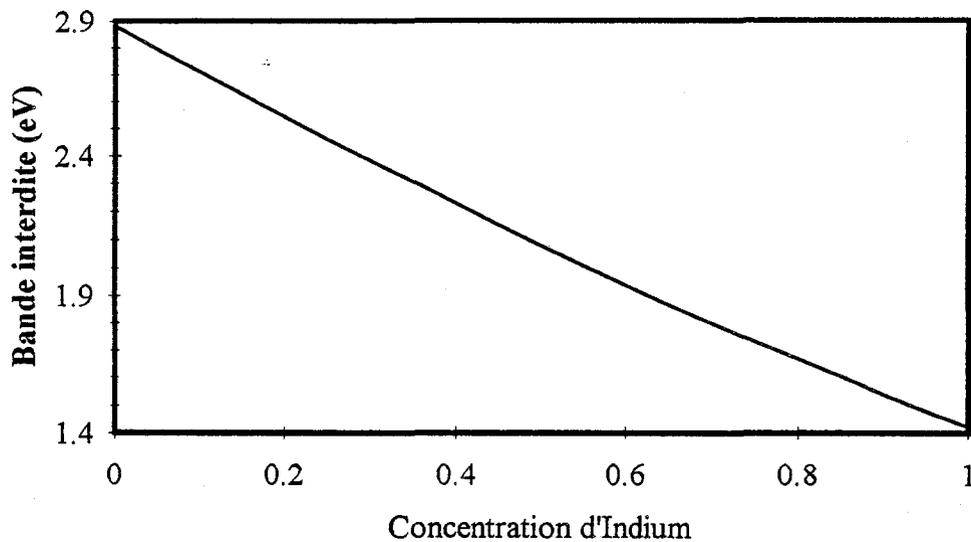


Figure 1.19 Discontinuité de bande interdite au point Γ en fonction de la concentration d'Indium x .

Références	[36]	[37]	[38]	[39]	[40]	[41]
ΔE_c (meV)	198	190	220	221	60	130
ΔE_v (meV)	285	300	240	262	400	320

Tableau 1.1 : Tableau résumant les reports de discontinuité ΔE_c et ΔE_v parus dans la littérature pour le $Ga_{0.51}In_{0.49}P/GaAs$.

Le report respectif en bande de conduction, ΔE_c , et en bande de valence, ΔE_v , est encore sujet à discussion compte-tenu de la relative nouveauté de ce matériau. On peut le constater au vu du tableau 1.1 qui résume les valeurs ΔE_c et ΔE_v trouvées dans la littérature et mesurées par diverses techniques expérimentales telles que D.L.T.S. et C(V).

Pour notre part, nous avons pris pour nos simulations les discontinuités proposées par Biswas [36] car les reports en bande de conduction et de valence ont été déterminés séparément.

Pour les valeurs de masses effectives de trous lourds (hh) et légers (lh), mal connues car difficiles à mesurer, nous avons choisi les masses calculées par Chen [35] :

$$\begin{aligned}
 m_{hh}^* &= 0.488 m_0, \quad m_{lh}^* = 0.122 m_0 && \text{pour le GaInP} \\
 &&& \text{et} \\
 m_{hh}^* &= 0.449 m_0, \quad m_{lh}^* = 0.087 m_0 && \text{pour le GaAs}
 \end{aligned}
 \tag{1.10}$$

1.6 Conclusion

Dans ce premier chapitre, nous nous sommes efforcés de regrouper les éléments nécessaires à une première approche de l'effet tunnel résonnant. Nous avons vu que cet effet intervient dès que l'on a quantification de l'énergie des porteurs, suite à une restriction de leur mouvement, et passage par effet tunnel. Ces transferts de charges résonnants peuvent s'établir entre des systèmes de dimensionnalité différente. Par ailleurs, nous avons vu que les propriétés intrinsèques des phénomènes mis en jeu donnent à ces structures la capacité à être utilisées dans des applications analogiques travaillant aux fréquences millimétriques et submillimétriques. Nous avons ensuite abordé les problèmes relatifs au calcul du profil de bande de conduction et au calcul de courant. Cela nous a amené à faire une distinction entre charges statiques et dynamiques. Enfin nous avons reporté les paramètres matériaux de trois configurations, respectivement les structures adaptées en maille GaAs/GaAlAs, pseudomorphiques GaAs/GaInAs et enfin GaAs/GaInP dopées p pour une étude sur l'effet tunnel de trous. Nous n'y avons fait figurer que les données essentielles à l'étude de la conduction par effet tunnel. Nous allons à présent porter notre attention sur l'étude de l'effet tunnel résonnant dans les structures GaAs/AlAs.

Bibliographie Chapitre 1

- [1] R. TSU, L. ESAKI
«Tunneling in a finite superlattice»
Applied Physics Letters 22 (11) (1973) p. 562
- [2] M.A. KASTNER
«The single-electron transistor»
Review of Modern Physics 64 (3) (1992) p. 849
- [3] M. JONSON, A. GRINCWAJG
«Effect of inelastic scattering on resonant and sequential tunneling in double barrier heterostructures»
Applied Physics Letters 51 (21) (1987) p. 1729
- [4] L.L. CHANG, L. ESAKI, R. TSU
«Resonant tunneling in semiconductor double barriers»
Applied Physics Letters 24 (12) (1974) p. 593
- [5] T.J. SHEWCHUK, P.C. CHOPIN, P.D. COLEMAN, W. KOPP,
R. FISHER, H. MORKOÇ
«Resonant tunneling oscillation in a GaAs-Al_xGa_{1-x}As heterostructure at room temperature»
Applied Physics Letters 46 (5) (1985) p. 508
- [6] W.D. GOODHUE, T.C.L. G. SOLLNER, H.Q. LE, E.R. BROWN,
B.A. VOJAK
«Large room-temperature effects from resonant tunneling through AlAs barriers»
Applied Physics Letters 49 (17) (1986) p. 1086
- [7] T. INATA, S. MUTO, Y. NAKATA, S. SASA, T. FUJII, S. HIYAMIZU
«A pseudomorphic In_{0.53}Ga_{0.47}As/AlAs resonant tunneling barrier with a peak to valley ratio of 14 at room temperature»
Japanese Journal of Applied Physics 26 (8) (1987) p. L1332

- [8] T.P.E. BROEKAERT, W. LEE, C.G. FONSTAD
«Pseudomorphic $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}/\text{AlAs}/\text{InAs}$ resonant tunneling diodes with peak-to-valley current ratios of 30 at room temperature»
Applied Physics Letters 53 (16) (1988) p. 1545
- [9] J.R. SÖDERSTRÖM, D.H. CHOW, T.C. Mc GILL
«New negative differential resistance device based on resonant interband tunneling»
Applied Physics Letters 55 (11) (1989) p. 1094
- [10] J.H. SMET, T.P.E. BROEKAERT, C.G. FONSTAD
«Peak-to-valley current ratios as high as 50:1 at room temperature in pseudomorphic $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}/\text{AlAs}/\text{InAs}$ resonant tunneling diodes»
Journal of Applied Physics 71(5) (1992) p. 2475
- [11] Y. SUGIYAMA, T. INATA, S. MUTO, Y. NAKATA, S. HIYAMIZU
«Current-voltage characteristics of $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}/\text{In}_{0.52}\text{Al}_{0.48}\text{As}$ resonant tunneling barrier structures grown by molecular beam epitaxy»
Applied Physics Letters 52(4) (1988) p. 314
- [12] J.R. SÖDERSTRÖM, D.H. CHOW, T.C. Mc GILL
«Observation of large peak-to-valley current ratios and large peak current densities in $\text{AlSb}/\text{InAs}/\text{AlSb}$ double-barrier tunnel structures»
Journal of Applied Physics 66(10) (1989) p. 5106
- [13] T.P.E. BROEKAERT, C.G. FONSTAD
« $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}/\text{AlAs}$ resonant tunneling diodes with peak current densities in excess of $450 \text{ kA}/\text{cm}^2$ »
Journal of Applied Physics 68 (8) (1990) p. 4310
- [14] J.R. SÖDERSTRÖM, E.R. BROWN, C.D. PARKER, L.J. MAHONEY, J.Y. YAO, T.G. ANDERSSON, T.C. Mc GILL
«Growth and characterization of high current density, high-speed InAs/AlSb resonant tunneling diodes»
Applied Physics Letters 58(3) (1991) p. 275
- [15] L. de SAINT POL
«Modélisation de l'effet tunnel résonnant dans les hétérostructures double barrière en vue d'applications analogiques très hautes fréquences»
Thèse de l'Université de Lille I (1990)

- [16] E.R. BROWN, J.R. SÖDERSTRÖM, C.D. PARKER, L.J. MAHONEY, K.M. MOLVAR, T.C. Mc GILL
«Oscillations up to 712 GHz in InAs/AlSb resonant-tunneling diodes»
Applied Physics Letters 58(20) (1991) p. 2291
- [17] T.C.L.G. SOLLNER, W.D. GOODHUE, P.E. TANNENWALD, C.D. PARKER, D.D. PECK
«Resonant tunneling through quantum wells at frequencies up to 2.5 THz»
Applied Physics Letters 43 (6) (1983) p. 588
- [18] R. BOUREGBA, D. LIPPENS, L. PALMATEER, E. BOCKENHOFF, M. BOGEY, J.L. DESTOMBES, A. LECLUSE
«Frequency multiplication using resonant tunneling diode with output at submillimetre wavelengths»
Electronics Letters 26 (21) (1990) p. 1804
- [19] S. LURYI
«Frequency limit of double-barrier resonant tunneling oscillators»
Applied Physics Letters 47(5) (1985) p. 490
- [20] A.R. BONNEFOI, D.H. CHOW, T.C. Mc GILL
«Inverted base-collector tunnel transistors»
Applied Physics Letters 47 (8) (1985) p. 888
- [21] T. WEIL, B. VINTER
«Equivalence between resonant tunneling and sequential tunneling in double-barrier diodes»
Applied Physics Letters 50(18) (1987) p. 1281
- [22] R. LASSNIG, W. BOXLEITNER
«Tunneling from quasi two-dimensional space charge layers»
Solid State Communications 64(6) (1987) p. 979
- [23] P. MOUNAIX, O. VANBÉSIEN, D. LIPPENS
«Effect of cathode spacer layer on the current-voltage characteristics of resonant tunneling diodes»
Applied Physics Letters 57(15) (1990) p. 1517

- [24] T. WEIL, B. VINTER
«Calculation of phonon-assisted tunneling between two quantum wells»
Journal of Applied Physics 60(9) (1986) p. 3227
- [25] W.R. FRENSELY
«Effect of inelastic processes on the self consistent potential in the resonant tunneling diode»
Solid-State Electronics 32(12) (1989) p. 1235
- [26] S.Y. CHOU, E. WOLAK, J.S. HARRIS
«Resonant tunneling of electrons of one or two degrees of freedom»
Applied Physics Letters 52 (8) (1988) p. 657
- [27] Semiconductors Groups IV elements and III-V compounds
Data in Science and Technology
Springer Verlag
- [28] V. SADAUNE
«Approche en liaisons fortes d'une hétérojonction GaAs/GaAlAs et simulation d'une double barrière GaAs/GaAlAs dans l'approximation de la masse effective»
D.E.A. de l'Université de Lille I (Juillet 1990)
- [29] T. ANDO, H. AKERA
«Connection of envelope functions at semiconductor heterointerfaces. II. Mixings of Γ and X valleys in GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ »
Physical Review B 40(17) (1989) p. 11619
- [30] S. ADACHI
«GaAs, AlAs and $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ material parameters for use in research and device applications»
Journal of Applied Physics 58(3) (1985) p. R1
- [31] J.W. MATTHEWS, A.C. BLAKESLEE
«Defects in epitaxial multilayers»
Journal of Crystal Growth 27 (1974) p. 118

- [32] D.J. ARENT, K. DENEFFE, C. VAN HOOFF, J. De BOECK, G. BORGHS
«Strain effects and band offsets in GaAs/InGaAs strained layered quantum structures»
Journal of Applied Physics 66(4) (1989) p. 1739
- [33] S. NIKI, C.L. LIN, W.S.C. CHANG, H.H. WIEDER
«Band edge discontinuities of strained-layer $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ heterojunctions and quantum wells»
Applied Physics Letters 55(13) (1989) p. 1339
- [34] H. SAKAKI, L.L. CHANG, R. LUDEKE, C.A. CHANG, G.A. SAIHALASZ, L. ESAKI
« $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}-\text{GaSb}_{1-y}\text{As}_y$ heterojunctions by molecular beam epitaxy»
Applied Physics Letters 31(3) (1977) p. 211
- [35] A.B. CHEN, A. SHER
«Electronic structure of pseudobinary alloys $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, $\text{GaP}_x\text{As}_{1-x}$ and $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{P}$ »
Physical Review B 23(10) (1981) p. 5360
- [36] D. BISWAS, N. DEBBAR, P. BHATTACHARYA, M. RAZEGHI, M. DUFOUR, F. OMNES
«Conduction and valence band offsets in $\text{GaAs}/\text{Ga}_{0.51}\text{In}_{0.49}\text{P}$ single quantum wells grown by metalorganic chemical vapor deposition»
Applied Physics Letters 55(9) (1990) p. 833
- [37] M.O. WATANABE, Y. OHBA
«Interface properties for $\text{GaAs}/\text{InGaAlP}$ heterojunctions by the capacitance voltage profiling technique»
Applied Physics Letters 50(14) (1987) p. 906
- [38] M.A. RAO, E.J. CAINE, H. KROEMER, S.I. LONG, D.I. BABIC
«Determination of valence and conduction band discontinuities at the $(\text{Ga},\text{In})\text{P}/\text{GaAs}$ heterojunction by C-V profiling»
Journal of Applied Physics 61 (2) (1987) p. 643

- [39] S.D. GUNAPALA, B.F. LEVINE, R.A. LOGAN, T. TANBUN-*Ek*,
D.A. HUMPHREY
«GaAs/GaInP multiquantum well long-wavelength infrared detector
using bond to continuum state absorption»
Applied Physics Letters 57(17) (1990) p. 1802
- [40] J. CHEN, J.R. SITES, I.L. SPAIN, M.J. HAFICH, G.Y. ROBINSON
«Band offset of GaAs/In_{0,48}Ga_{0,52}P measured under hydrostatic
pressure»
Applied Physics Letters 58(7) (1991) p. 744
- [41] G. ARNAUD, P. BORING, B. GIL, J.C. GARCIA, J.P. LANDESMAN,
M. LEROUX
«Determination of the valence band offset of GaAs-(Ga,In)P quantum
wells by photoreflectance spectroscopy»
Physical Review B 46(3) (1992) p. 1886

Chapitre 2

Tunnel résonnant dans les structures AlAs/GaAs

Chapitre 2

Tunnel résonnant dans les structures AlAs/GaAs

2.1 Introduction

En règle générale, pour des structures à effet tunnel résonnant destinées aux applications analogiques très hautes fréquences ou de logique rapide, il est préférable que les caractéristiques courant-tension présentent des contrastes en courant et des densités de courant élevés à température ambiante. Concrètement, cela veut dire qu'il est nécessaire que les barrières élémentaires, constituant la structure résonnante, aient une transparence maximale. Cela s'obtient en faisant varier l'épaisseur et la hauteur des barrières de potentiel. Le choix qui s'impose est d'utiliser des hétérostructures avec des discontinuités de bande de conduction, ΔE_c , importantes. On assure, alors, une transparence maximale par une réduction drastique de l'épaisseur de barrière. Intuitivement cette démarche se comprend car on minimise ainsi les contributions non résonnantes de courant thermoionique. On augmente, également, l'écart entre les niveaux quantiques du puits par un renforcement du potentiel de confinement. Pour le système de matériaux GaAs/GaAlAs, des discontinuités de bande de conduction élevées peuvent être obtenues pour des structures à forte concentration d'Aluminium. Mais la simulation de tels matériaux pose, entre autre, deux difficultés théoriques. D'un côté, le choix de la discontinuité de potentiel est ambigu car la transition gap direct-gap indirect intervient dès que le pourcentage d'Aluminium dépasse 40%. D'autre part, les porteurs, électrons dans le cas présent, interagissent avec la barrière à des énergies éloignées du bord de bande. Il devient donc problématique de leur affecter une masse effective de bas de bande de conduction.

Le premier de ces points a donné lieu à une abondante littérature. A l'aide de celle-ci, nous essayerons d'évaluer les contributions respectives d'une conduction par vallée

Γ et par vallées satellites X , qui constituent ici les minima de la bande de conduction du matériau de barrière. En revanche, le problème de la détermination de la masse effective des porteurs traversant par effet tunnel des barrières élevées est encore peu abordé. Or nous verrons que le choix de cette masse effective a une influence considérable sur les valeurs de courant. Nous nous appuyerons sur cette forte sensibilité pour valider, par l'expérience, les valeurs théoriques calculées. Par ailleurs, nous étudierons des structures résonnantes dont les barrières sont constituées de multiples hétérostructures AlAs/GaAs (barrières hétérogènes) dans le but de moduler la hauteur effective du potentiel de confinement par ajustement des paramètres géométriques.

2.2 Problèmes liés au mélange Γ - X dans les doubles barrières AlAs/GaAs

Bien que, en toute rigueur, il faille considérer la structure de bandes de l'ensemble de l'hétérostructure, nous allons, dans ce qui suit, considérer successivement les problèmes en se référant aux structures de bandes élémentaires des matériaux constitutifs. Dans cette optique, nous traiterons d'abord des confinements de type Γ puis de type X . Enfin nous aborderons le problème du mélange intervenant entre ces deux sites d'énergie minimale et discuterons de l'importance de ce transfert intervallée en fonction de la largeur de barrière.

2.2.1 Confinement de type Γ

Pour des structures GaAs/GaAlAs dont la concentration en Aluminium, x , est inférieure à 40%, la concordance entre valeurs théoriques et expérimentales, du point de vue tension pic et courant pic, est satisfaisante. Pour ces études, on pourra se reporter aux thèses précédentes qui traitent du cas de double barrière GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs avec $x \sim 0.3$ [1] [16]. Rappelons que la tension seuil pour l'observation d'un effet de RDN est reliée à la position en énergie du niveau fondamental. Quant à la densité de courant pic, elle est fonction de la transparence des barrières qui varie exponentiellement en fonction de la racine de ΔE_c . Donc, pour des pourcentages d'Aluminium inférieurs à 40%, la description de la conduction peut se faire en considérant un confinement de type Γ . Par ailleurs, on trouve des effets de non parabolicité peu marqués. Par contre, près de la transition $x = 0.4$, et a fortiori pour des concentrations supérieures, des divergences importantes entre les caractéristiques $I(V)$ expérimentales et théoriques sont mises en évidence. Celles-ci sont attribuées, entre autre, à un transport par vallée X .

Une manière d'étudier ce phénomène est d'effectuer des mesures sous pression hydrostatique. On diminue ainsi l'écart en énergie entre les vallées Γ_{GaAs} et X_{GaAlAs} . Cette diminution provoque une augmentation du courant due à un effet tunnel par vallée X [2].

2.2.2 Confinement de type X

Lorsque l'on cherche à prendre en compte le transport par vallée X , on se heurte au problème de l'anisotropie fortement marquée de la structure de bandes en ce point. On peut le constater sur la figure 2.1 qui donne les isoénergies calculées par la méthode du pseudopotentiel empirique local pour l'AlAs dans le plan $\Gamma X K$ [1]. Plusieurs auteurs ont alors montré que, dans ce cas, on peut avoir deux types d'effet tunnel :

- Un processus direct qui fait intervenir la vallée X dans la direction $\langle 100 \rangle$ correspondant à la direction de croissance [3]. C'est alors la masse longitudinale de la vallée X qui doit intervenir, théoriquement, dans le calcul des probabilités de transmissions. Pour l'AlAs, elle est de $1.1 m_0$.
- Un transport assisté par interactions inélastiques qui permet des transferts dans les vallées X équivalentes. Dans ce cas, la masse transversale ($0.19 m_0$) fixe les valeurs de transmission.

Parallèlement à ces transferts entre vallées équivalentes, il existe des effets de mélange entre vallées Γ et X par transfert intervallée.

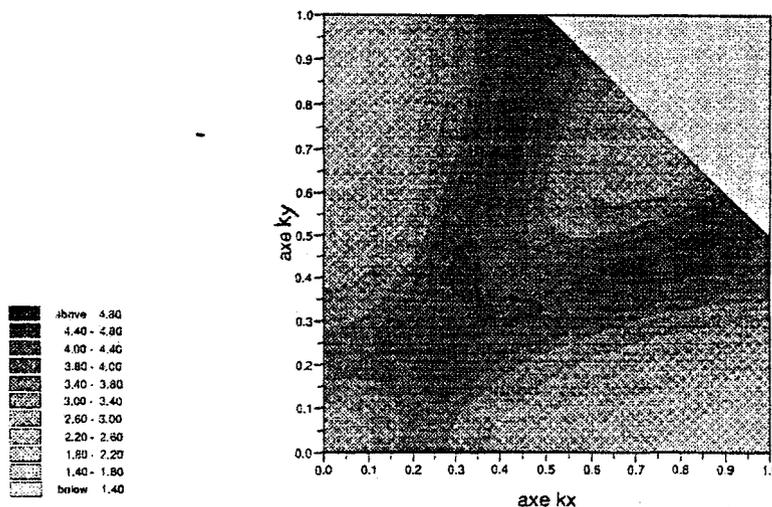


Figure 2.1 Courbes isoénergies pour la première bande de conduction de l'AlAs dans le plan $\Gamma X K$ calculées par la méthode du pseudopotentiel

2.2.3 Mélange $\Gamma - X$

Différentes démarches sont possibles pour apprécier les effets de mélange $\Gamma - X$. La plus simple, adoptée notamment par Mendez et al [4] et par Cheng et al [5], consiste à considérer les différents chemins possibles pour les porteurs. Ceux-ci sont établis à partir des situations élémentaires les plus probables, par exemple, un transfert de charges pour des électrons initialement situés en vallée Γ_{GaAs} , via les vallées X_{AlAs} - Γ_{GaAs} - X_{AlAs} , suivi d'un processus de relaxation vers la vallée Γ du collecteur. Une telle approche se heurte, néanmoins, à la difficulté de chiffrer l'importance relative de chaque processus. Il est alors nécessaire d'utiliser des modèles plus élaborés tel que celui de Ando et al [6], de Marsch [7] ou de Ko et Inkson [8] qui font référence à un calcul de structure de bandes par liaisons fortes ou par pseudopotentiel empirique. Ces études permettent de déduire les variations de la probabilité de transmission en fonction de l'énergie pour différentes épaisseurs de barrière L_B . Nous en retiendrons que tant que $L_B < 20 \text{ \AA}$, les valeurs de transmission calculées en incluant les effets de mélange ou en supposant un transport par vallée Γ prédominant sont pratiquement équivalentes. Seule, la présence de résonances et d'anti-résonances dans le premier cas les distingue. Cependant celles-ci n'influent pas sur les valeurs de courant car elles sont extrêmement sélectives. Ces résultats ont été corroborés expérimentalement par Landheer et al. [9]. Pour une situation plus réaliste, on peut toutefois noter que les états de barrière X peuvent être plus rapidement mis à contribution dans la mesure où il se forme une couche d'accumulation en amont de la structure résonnante dont la profondeur est typiquement de 50 meV. Il en résulte une diminution de la hauteur de barrière apparente entre les états d'émetteur de type Γ et de barrière de type X [10].

En résumé, nous concevons des structures AlAs/GaAs avec des largeurs de barrière inférieures à 20 \AA afin de conserver un transport par vallée Γ prédominant.

2.3 Problèmes liés à la définition de la masse effective dans les barrières

Pour des hétérostructures à grande discontinuité de potentiel, les porteurs, électrons dans notre cas, ont une probabilité non négligeable de pénétrer profondément dans la bande interdite du matériau de barrière. Il devient alors problématique de leur affecter une masse de bord de bande. Or une question cruciale dans l'approximation de la fonction enveloppe, que nous utilisons dans ce travail, est de définir une masse

électronique appropriée pour un électron traversant les barrières par effet tunnel [11].

A priori, on peut supposer un allègement de la masse électronique dans la mesure où le passage par effet tunnel se fait pour un écart entre l'énergie de la particule et la bande de valence bien inférieur à la bande interdite du matériau de barrière. Un autre argument pouvant être avancé est qu'il est difficile de concevoir une adaptation instantanée du porteur à son environnement. En d'autres termes, il conserve les caractéristiques de transport, dont la masse effective, qu'il a au moment de son interaction avec la barrière. En fait, cette discussion est beaucoup plus générale. Elle concerne même la validité de la notion de masse effective pour des hétérostructures très fines. Cependant, cette renormalisation de la masse a été validée par des mesures de masse effective par résonance cyclotron analysées en termes de modèle k-p par Brozak et al [12]. Expérimentalement, ils trouvent une masse de $0.09 m_0$ pour l'AlAs alors que, pour ce matériau, la masse de bas de bande de conduction est comprise entre $0.15 m_0$ et $0.22 m_0$ suivant les auteurs. De surcroît, des calculs à l'aide de modèle k-p [13] ou de liaisons fortes [14] ont abouti également à des valeurs de masse effective plus faibles. Pour notre part, nous allons aussi essayer de dériver les valeurs de masse effective pour des énergies comprises dans la bande interdite de l'AlAs. Pour cela, nous nous baserons sur un calcul du diagramme de dispersion en liaisons fortes effectué au Département ISEN.

2.3.1 Calculs du diagramme de dispersion en liaisons fortes

L'approximation des liaisons fortes est une méthode utilisée dans de nombreux domaines. Elle est basée sur la méthode CLOA (Combinaison Linéaire d'Orbitales Atomiques) qui consiste à prendre pour fonction d'onde une combinaison de fonctions atomiques. Pour notre calcul, nous nous sommes limités aux premiers voisins, dans la base sp^3s^* en négligeant les interactions spin-orbite. Les paramètres ont été choisis de manière à retrouver le schéma des structures de bandes volumiques des matériaux constitutifs de l'hétérostructure. De ces calculs de structures de bandes, nous avons extrait l'information de non-parabolicité pour la bande de conduction - \vec{k} purement réel - et pour la bande interdite - \vec{k} purement imaginaire. Ce dernier cas correspond à la situation d'une onde évanescence dans la barrière dont la décroissance dépend, entre autre, de la masse effective. Les paramètres utilisés sont ceux proposés par Ando et al [6] pour l'AlAs et le GaAs. Ceux-ci sont résumés dans le tableau 2.1.

Paramètres	GaAs(eV)	AlAs(eV)
E_{s_0}	-8.457	-7.6201
E_{s_1}	-2.7788	-1.1786
E_{p_0}	0.9275	0.8905
E_{p_1}	3.5547	3.4939
E^*	8.4775	7.3905
E^{s_0*}	6.6247	6.6339
V^{s_1}	-6.4513	-6.6642
$V^{s_0s_1}$	4.48	5.1106
$V^{s_0p_1}$	0.0	0.0
$V^{s_0s_1*}$	7.85	6.3
$V^{s_1p_0}$	0.0	0.0
$V^{s_1s_0*}$	1.9546	1.878
$V^{p_1p_1}$	7.05	7.2
$V^{p_0s_1*}$	4.7922	4.5216
$V^{p_1s_0*}$	0.0	0.0
$V^{s_0* s_1*}$	5.0779	4.2919
$p_{i_1}p_{j_0}$		

Tableau 2.1 : Paramètres du calcul par la méthode des liaisons fortes dans la base sp^3s^* pour le GaAs et l'AlAs. Les interactions spin-orbite sont négligées ($i,j=x,y$ ou z)

Les résultats de simulations, dans la direction $\langle 100 \rangle$ sont reportés figures 2.2a et 2.2 b, pour l'AlAs et le GaAs respectivement. La référence d'énergie est prise en haut de la bande de valence. On constate que pour \vec{k} purement imaginaire, la bande issue du bas de bande de conduction rejoint celle issue du haut de bande de valence en un point situé au milieu du gap. Sur la figure 2.2a, qui reprend les résultats obtenus pour l'AlAs, on note que le raccordement avec la bande de conduction se fait à une énergie d'environ 3 eV avec conservation de la dérivée première de part et d'autre de Γ_{1C} . Pour la bande de valence, ce raccordement a lieu en Γ_{15V} avec la bande de trous légers. Les principaux paramètres déduits de ces calculs, pour le GaAs et l'AlAs, sont présentés dans le tableau 2.2. Les énergies E_{Γ} , E_{X1C} donnent les valeurs de bande interdite au point, Γ , X et m_{Γ} , m_{X1C} les masses effectives correspondantes. Dans cette direction, $\langle 100 \rangle$, la vraie vallée X d'énergie E_X , se situe à une distance k_0 du point X .

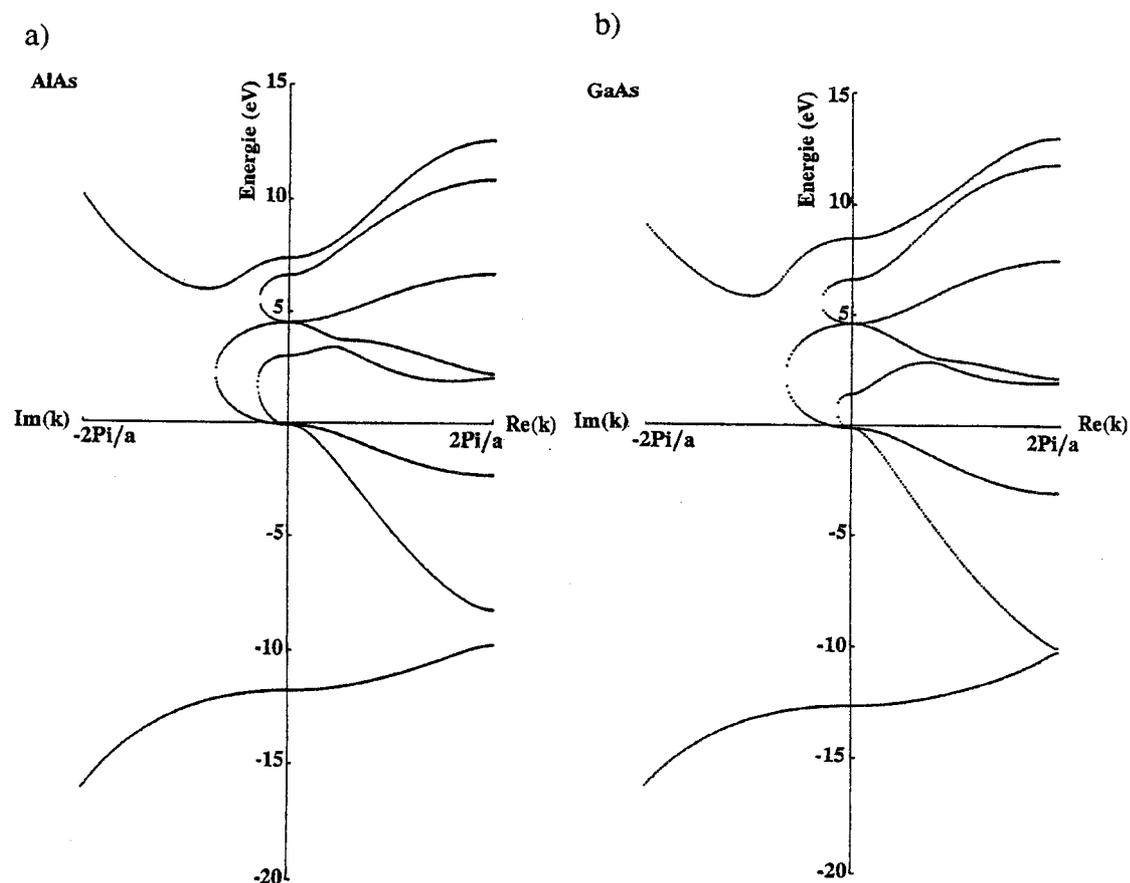


Figure 2.2 Structures de bandes de l'AlAs et du GaAs calculées par la méthode des liaisons fortes pour \vec{k} réel et \vec{k} imaginaire. Les énergies sont référencées à partir du haut de la bande de valence en Γ .
«a» représente le paramètre de maille.

2.3.2 Dérivation de la masse

Nous allons proposer successivement deux expressions pour le calcul de la masse effective. La première a été proposée par Ando et al dans la référence [6]. La seconde est définie afin de prendre en compte la courbure réelle des bandes et ainsi répercuter la non parabolicité sur la masse effective.

Paramètres		GaAs	AlAs
E_{Γ}	(eV)	1.544	3.095
E_{XIC}	(eV)	2.073	2.119
m_{Γ}	(m_0)	0.0679	0.222
m_{XIC}	(m_0)	1.35	1.117
k_0	($2\pi/a$)	0.123	0.209
E_X	(eV)	2.056	1.973

Tableau 2.2 : Paramètres de masses effectives pour les vallées Γ et X , calculés par la méthode des liaisons fortes. L'origine des énergies est prise en haut de la bande de valence. Le vecteur d'onde k_0 est la distance entre le point X et la vraie vallée X , E_X est la valeur d'énergie correspondante. « a » est le paramètre de maille

2.3.2.1 Masse proposée par Ando et al

Cette masse effective est définie par :

$$m^*(E) = \frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial k^2}{\partial E} \quad (2.1)$$

Cette relation a été appliquée sur l'ensemble des valeurs d'énergie comprises dans la bande interdite du $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$, $x \in [0-1]$. Les variations de masse effective obtenues en fonction de l'énergie sont données figure 2.3. La référence d'énergie est prise en haut de la bande de valence du composé. La valeur limite d'énergie correspond au bas de bande de conduction en Γ . L'évolution de la masse effective entre la masse de trous légers - qui varie de $0.052 m_0$ pour $x = 0$ à $0.11 m_0$ pour $x = 1$ - et la masse électronique - comprise entre $0.067 m_0$ pour $x = 0$ et $0.22 m_0$ pour $x = 1$ - est continue. L'inversion de signe intervient au milieu de la bande interdite. Au vu de ces courbes, on peut également noter que la masse devient considérablement plus faible que la masse de bord de bande lorsque le porteur est «profond» dans le gap. Des calculs similaires peuvent être menés pour les bandes permises. On obtient alors le résultat, plus classique, d'une augmentation de la masse effective équivalente lorsque le porteur devient chaud, c'est-à-dire lorsqu'il accroît son énergie. Ces deux évolutions antagonistes, l'une correspondant à la bande interdite l'autre aux bandes permises, devront être prises en compte lors du calcul des caractéristiques de conduction.

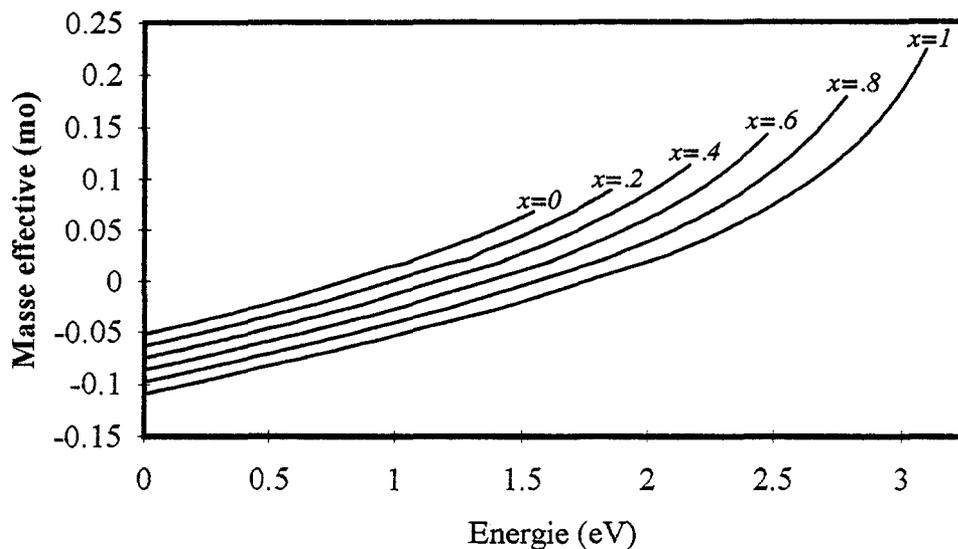


Figure 2.3 Masses effectives de $Ga_{1-x}Al_xAs$, calculées dans le modèle de liaisons fortes, en fonction de l'énergie référencée à partir du haut de la bande de valence, par la formule (2.1).

2.3.2.2 Masse dérivée d'une évolution «quadratique»

Une autre manière de calculer la masse effective, évoquée en introduction de ce paragraphe, est de considérer la courbure de bande réelle calculée par la méthode des liaisons fortes et de reporter la non-parabolicité par l'intermédiaire de la masse. De part et d'autre du milieu du gap, la masse effective est alors définie par :

$$m^*(E) = \frac{1}{2} \cdot \frac{\hbar^2 k^2}{E - E_0} \quad (2.2)$$

où E_0 désigne respectivement la bande de conduction ou de valence pour le vecteur d'onde nul. Les variations de masse obtenues, pour le GaAs et l'AlAs, sont données figure 2.4. Le saut de masse caractérise le changement de bande au milieu du gap. Cette simulation a été faite en modifiant les paramètres de liaisons fortes afin de se rapprocher de la valeur $m_{\Gamma}^*(AlAs) = 0.15 m_0$, de plus en plus largement admise pour ce matériau. On constate que les variations de masse avec l'énergie sont moins marquées

que précédemment. Cependant, la masse électronique équivalente, dans l'AlAs, pour un porteur injecté à l'énergie de Fermi correspondant au GaAs dopé $2 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ est de $\sim 0.078 m_0$. Tandis que l'effet de la non-parabolicité donne une masse de $\sim 0.073 m_0$ dans le GaAs. Cela souligne la possibilité d'une faible différence entre la masse du GaAs volumique et la masse tunnel de l'électron.

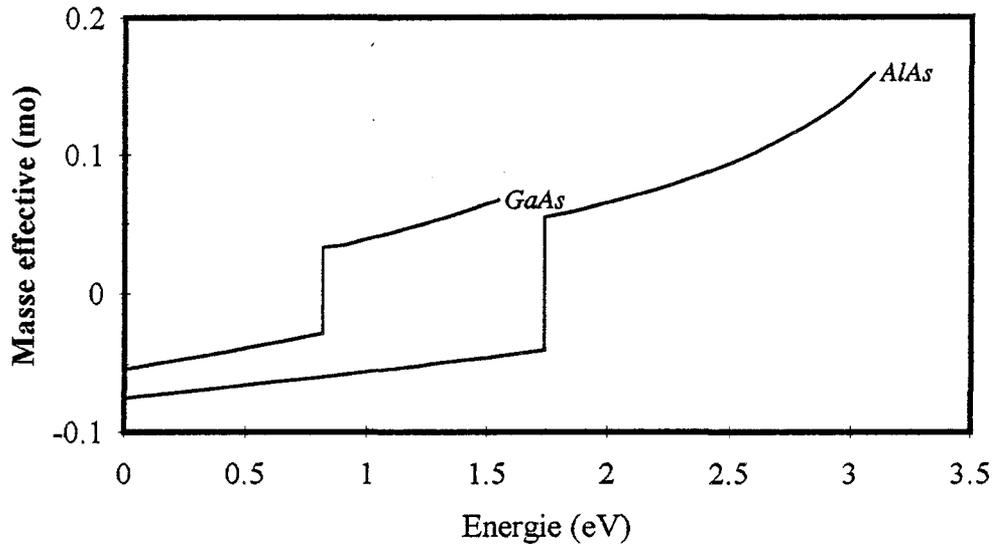


Figure 2.4 Masses effectives de l'AlAs et du GaAs en fonction de l'énergie référencée à partir du haut de la bande de valence, obtenues dans le modèle des liaisons fortes dans la base sp^3s^* , par la formule (2.2).

2.3.3 Implication sur l'effet tunnel résonnant

Nous allons, à présent, étudier les répercussions du choix de la masse effective sur les caractéristiques de transport d'un composant double barrière en nous plaçant dans les deux cas suivants :

- une masse effective de barrière égale à la masse de bas de bande de conduction en Γ .
- une masse de «bande interdite» conformément à l'analyse précédente.

2.3.3.1 Calcul de la transmission

Sur la figure 2.5 nous avons reporté la courbe de transmission en fonction de

l'énergie pour la structure expérimentale qui servira à la comparaison théorie/expérience. Il s'agit d'une hétérostructure à double barrière AlAs de 17 Å séparée par un puits GaAs de 45 Å. La courbe en traits continus représente le calcul effectué à masse constante en dépit de la distribution en énergie des porteurs incidents. Par contre, le saut de masse entre les matériaux GaAs et AlAs est décrit au niveau des dérivés premières. Dans ces conditions, on obtient deux états résonnants, le fondamental apparaissant relativement sélectif. L'introduction d'une masse effective variable, calculée par la formule 2.2, a donné le résultat visualisé en traits pointillés. Tout d'abord on constate l'apparition d'un troisième niveau résonnant lié à l'alourdissement de masse dans le puits pour les transferts de charges à haute énergie. Quant au niveau fondamental, l'écart en énergie par rapport à la situation précédente est faible (237 meV au lieu des 226 meV précédent). On note également une augmentation de la probabilité de passage par effet tunnel hors résonance ainsi qu'un élargissement du pic de transmission attribuables à l'allègement de la masse de bande interdite. Ce couplage accru avec le continuum va se traduire par une augmentation très importante des valeurs de courant qui vont à présent être calculées.

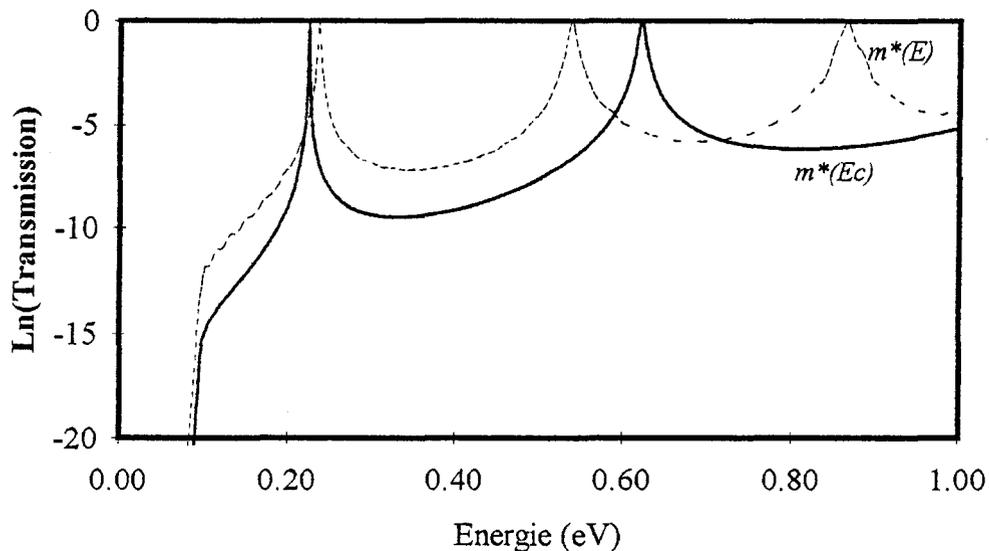


Figure 2.5 Probabilités de transmission en fonction de l'énergie des porteurs incidents pour une structure double barrière AlAs-17 Å / GaAs-45 Å. La courbe en trait plein est calculée à masse effective constante : $m^*(\text{GaAs})=0.067 m_0$ et $m^*(\text{AlAs})=0.15 m_0$. La courbe en pointillés considère une masse fonction de l'énergie suivant la formule (2.2).

2.3.3.2 Calcul du courant

Les calculs de courant ont été menés à masse constante ($0.067 m_0$ pour le GaAs ; $0.15 m_0$ pour l'AlAs) et avec les deux approches de masse effective déterminées au paragraphe 2.3.2. Le résultat le plus significatif, figure 2.6, est la très grande dispersion des valeurs de courant pic lorsque l'on passe d'une hypothèse de masse constante à celle d'une masse fonction de l'énergie. On a ainsi une augmentation de J_p de presque une décade en utilisant la masse de Ando et al et de plus d'un facteur 4 en utilisant la notion de non-parabolicité introduite par la formule 2.2. Par ailleurs, la tension seuil se déplace consécutivement au décalage de l'énergie de résonance vu au paragraphe 2.3.3.1. Le caractère approximatif de la masse effective pour des hétérostructures de petites dimensions a déjà été souligné. Aussi, afin de valider nos calculs, nous avons reporté figure 2.7 la caractéristique courant-tension calculée directement à partir des diagrammes de dispersion. Ce travail, basé sur le modèle de Kane, a été mené parallèlement au sein de l'équipe. Il est reporté dans la référence [15]. Hormis un décalage en tension de l'ordre de 100 mV, on obtient, par les deux méthodes, des densités de courant pic de $\sim 85 \text{ kA/cm}^2$.

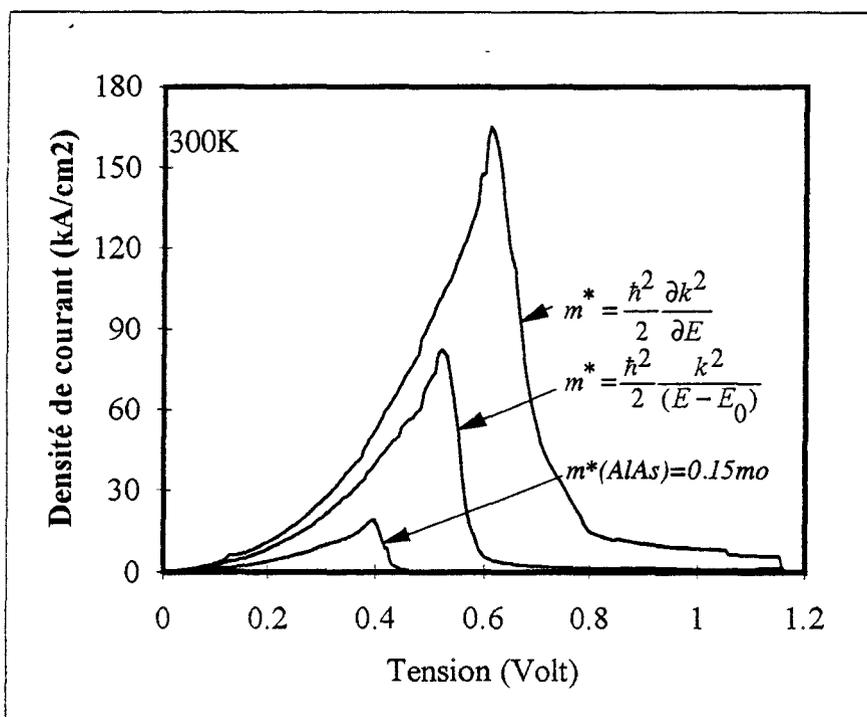


Figure 2.6 Caractéristiques $I(V)$ d'une double barrière AlAs-17 Å / GaAs-45 Å avec un espaceur GaAs de 500 Å dopé $2.10^{17} \text{ cm}^{-3}$ calculées à masse constante et variable.

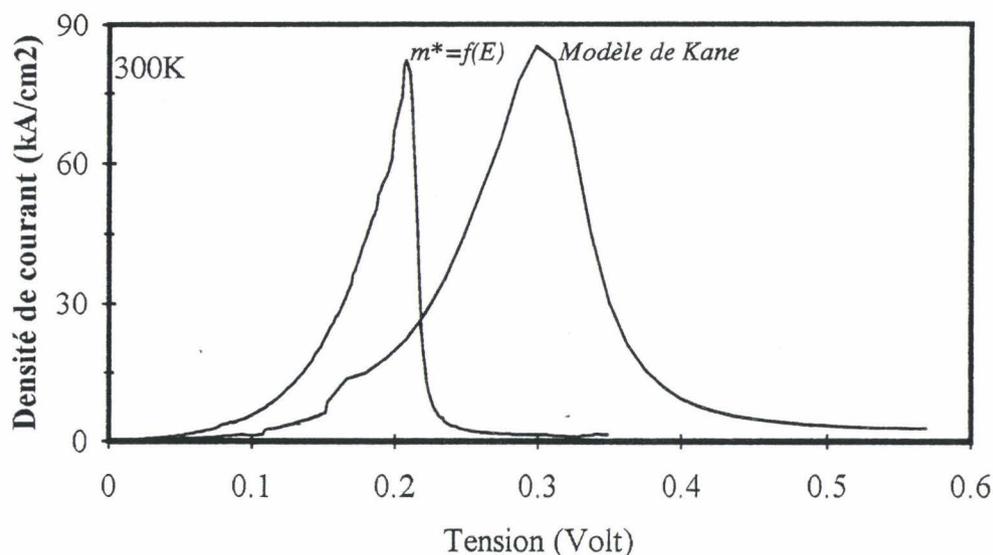


Figure 2.7 Caractéristiques $I(V)$ d'une double barrière AlAs-17 Å / GaAs-45 Å avec un espaceur GaAs de 500 Å dopé $2 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ calculées dans le modèle de Kane à 2 bandes et avec une masse effective variable (formule (2.2)). La zone de déplétion n'est pas prise en compte.

2.3.4 Etude expérimentale

2.3.4.1 Technologie

Afin de valider nos calculs, nous avons caractérisé l'échantillon double barrière AlAs/GaAs schématisé figure 2.8. La largeur des barrières est de 17 Å et celle du puits de 45 Å. De part et d'autre de cette zone active se trouvent deux espaceurs d'épaisseur 500 Å dopés n au Silicium à $2 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$. La prise en compte de ces couches lors des simulations des caractéristiques de conduction est décrite dans les thèses précédentes [1] [16]. La transition entre la double barrière et ces espaceurs est constituée de couches non intentionnellement dopées. Leur rôle est de limiter la diffusion du Silicium dans la zone active. Enfin, en vue de réaliser un contact ohmique peu résistif face avant et d'assurer la prise d'épitaxie sur substrat n^+ , on a fait croître une couche en tête de 3900 Å et une couche tampon de 5000 Å dopées à $2 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$.

GaAs	$2.10^{18} \text{ cm}^{-3}$	5000Å
GaAs	$2.10^{17} \text{ cm}^{-3}$	500Å
GaAs	Nid	50Å
AlAs	Nid	17Å
GaAs	Nid	45Å
AlAs	Nid	17Å
GaAs	Nid	50Å
GaAs	$2.10^{17} \text{ cm}^{-3}$	500Å
GaAs	$2.10^{18} \text{ cm}^{-3}$	5000Å
Substrat n^+ GaAs		

Figure 2.8 Représentation schématique de la séquence de croissance de la double barrière AlAs/GaAs (Nid : non intentionnellement dopé).

Les structures ont été réalisées au Laboratoire Central de Recherches (LCR) de Thomson par épitaxie par jets moléculaires. Les composants ont été fabriqués par une technologie standard incluant le dépôt d'AuGeNi allié pour les contacts ohmiques et l'isolation par méso réalisée par RIE [17].

2.3.4.2 Caractéristiques électriques

Une caractéristique statique mesurée à température ambiante est montrée figure 2.9 pour une diode de section $\sim 10 \mu\text{m}^2$ (soit un diamètre de $3.5 \mu\text{m}$). Compte tenu du faible diamètre, la prise de contact s'est faite au moyen de pointes extrêmement fines. Le courant pic présenté par l'échantillon est de 14 mA pour une tension d'environ 2V. Cela correspond à une densité de courant pic (J_p) très élevée de 145 kA/cm^2 . Une dispersion, relativement importante, de l'ordre de 25% a été relevée autour de cette valeur. Le rapport courant pic sur courant vallée (PVCR) est de 2.5. Il est important de noter que cela correspond à un composant de très bonne qualité. En effet, plusieurs études théoriques et expérimentales [18] ont montré qu'il existe un compromis entre J_p et PVCR qui fait qu'un échantillon double barrière GaAlAs/GaAs ayant une densité de courant supérieure à 100 kA/cm^2 a un PVCR typiquement de 3.

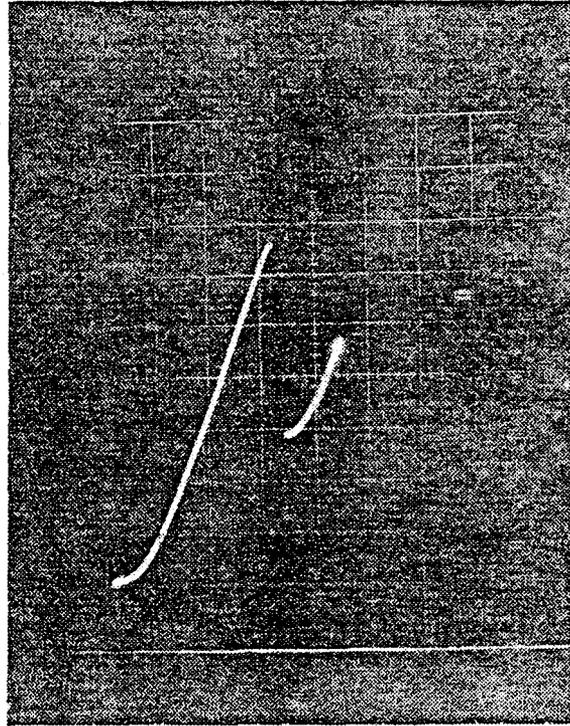


Figure 2.9 Caractéristique de conduction d'une diode double barrière GaAs-45Å AlAs-17 Å de 3 μm de diamètre à 300K. $J_p \sim 145 \text{ kA/cm}^2$ à 2V environ $J_p/J_v \sim 2.5$.
 division horizontale : 0.5V/div
 division verticale : 2 mA/div.

Au vu de ces résultats courant-tension, il est évident qu'un calcul de densité de courant effectué avec une masse effective de $0.15 m_0$, pour l'AlAs, ne permet pas de décrire la densité de courant pic expérimentale. Dans ce cas, nous avons trouvé une densité de courant pic de 20 kA/cm^2 , soit près d'un ordre de grandeur en dessous des valeurs limites de la fenêtre de dispersion. Une différence aussi grande ne peut s'expliquer par une variation non intentionnelle de l'épaisseur de barrière car une simulation faite dans les mêmes conditions, mais avec des barrières de 15 Å, donne $J_p \sim 40 \text{ kA/cm}^2$. En revanche, l'introduction d'une masse effective fonction de l'énergie conduit à des valeurs de 85 kA/cm^2 et de 165 kA/cm^2 , selon la définition choisie, beaucoup plus proche de la réalité expérimentale.

2.4 Substitution des barrières GaAlAs par des barrières superréseau

2.4.1 Motivations

Nous venons de voir qu'il est possible de réaliser des échantillons AlAs/GaAs de bonne qualité dans des conditions de barrières de faible épaisseur. On s'affranchit ainsi des problèmes liés à la transition gap direct-gap indirect. Dans cette partie, nous nous proposons d'étudier la possibilité d'abaisser le potentiel de confinement apparent tout en conservant une hétérostructure constituée des matériaux binaires GaAs/AlAs. La solution consiste en l'élaboration de barrières inhomogènes formées par l'alternance d'un motif puits-barrière de très faible dimension. Par abus de langage, nous l'appellerons barrière superréseau. Cette idée a, initialement, été proposée par Reed et al [19].

A priori, l'utilisation de matériaux binaires peut conduire à une meilleure maîtrise des états d'interfaces. Par ailleurs, l'absence d'une distribution aléatoire d'Aluminium, intervenant pour les composés GaAlAs peut être plus favorable à l'observation d'un effet tunnel cohérent. Des problèmes similaires s'observent pour les propriétés de transport dans les ternaires où l'interaction d'alliage dégrade sensiblement la mobilité des porteurs de charges [1].

La substitution d'un matériau homogène par des structures hétérogènes tend à être de plus en plus utilisée. On peut citer, par exemple, la réalisation de barrières très épaisses qui se révèlent difficiles à épitaxier en structure homogène ainsi que la fabrication de puits contraints larges [20].

A présent, nous allons chercher à établir l'équivalence d'une barrière superréseau avec une barrière homogène. Nous aborderons ensuite les propriétés de conduction théorique et expérimentale.

2.4.2 Recherche d'équivalence avec une barrière en matériau homogène GaAlAs

La structure à barrières hétérogènes réalisée expérimentalement, et simulée, comporte pour chaque barrière trois couches d'AlAs de 8.5 \AA séparées par deux couches

de GaAs de 8.5 Å également. La largeur du puits quantique est de 50 Å. La concentration x d'Aluminium équivalent, donné par le rapport entre le nombre de barrières et le nombre total de couches formant le superréseau, est de 0.6. Nous allons vérifier cette équivalence en comparant d'abord les spectres de transmission des deux types de structures puis les caractéristiques courant-tension.

2.4.2.1 Calcul de la transmission

Dans un premier temps, nous allons considérer le cas d'une simple barrière, soit homogène soit superréseau. Le résultat obtenu pour différentes fractions d'Aluminium est tracé figure 2.10 puis comparé à la transmission d'une barrière hétérogène. On constate que sur pratiquement l'ensemble des valeurs d'énergie, la transmission obtenue pour les barrières homogènes encadre celle de la barrière superréseau. Cependant, pour des énergies plus élevées, la courbe de transmission pour la triple barrière devient supérieure aux autres car la présence de niveaux quasi-liés dans le superréseau, respectivement à 520 meV et 810 meV, provoque une résonance. Cette comparaison entre barrière homogène et hétérogène est effectuée en considérant que seuls les porteurs en vallée Γ participent au transport, en accord avec l'analyse faite précédemment. Ce premier calcul confirme l'estimation $x = 0.6$ proposée initialement. Les différences mises en évidence à haute énergie influenceront peu puisque le nombre de porteurs se situant dans ce domaine est faible.

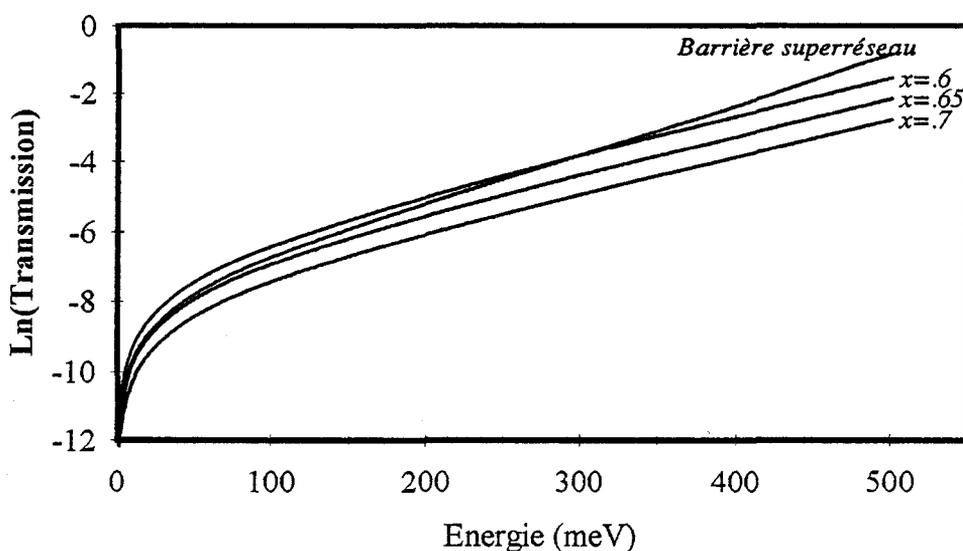


Figure 2.10 Transmissions d'une barrière homogène, pour $x=0.6$, 0.65 et 0.7 et d'une barrière superréseau.

Considérons maintenant les aspects de confinement caractérisés par les fonctions d'onde pour les structures double barrière reportées sur la figure 2.11. On obtient une assez bonne concordance sur des niveaux d'énergie propre (niveau fondamental à 106 meV au lieu de 92 meV et premier niveau excité à 413 meV au lieu de 363 meV, respectivement pour une structure hétérogène et une structure homogène). L'équivalence des potentiels de confinement effectif est donc retrouvée. On note également la présence attendue d'états très peu liés correspondant aux états propres des triples barrières.

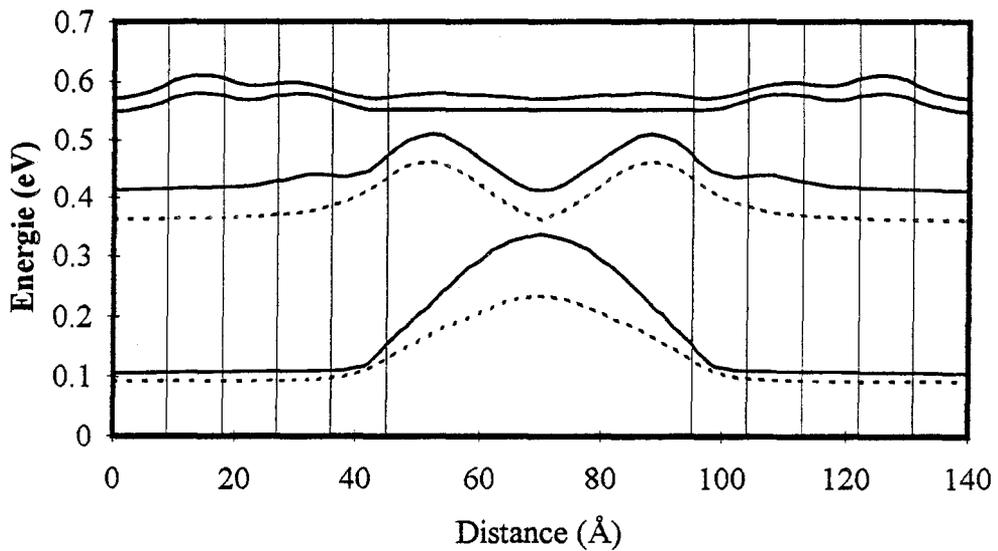


Figure 2.11 Fonctions d'onde correspondant aux différents niveaux liés de la structure double barrière $x=0.6$ (pointillés) et de la structure double barrière superréseau (trait plein).

2.4.2.2 Calcul du courant

Le calcul de courant présenté figure 2.12 est fait pour une concentration d'Aluminium $x = 0.65$. La simulation a été faite à 300K avec un niveau de Fermi de 50 meV et une masse de $0.067 m_0$ sur l'ensemble de la structure. Les caractéristiques $I(V)$ calculées dans les deux cas conduisent à des évolutions semblables. Les valeurs nominales de densité de courant pic sont d'environ 3.5 kA/cm^2 pour les deux structures. Le décalage des niveaux propres se retrouve sur les tensions pics. A présent, si on calcule la caractéristique statique de la structure homogène en incluant les couches dopées encadrant la zone active, on obtient le résultat donné figure 2.13. La prise en compte de ces zones provoque une chute drastique de la valeur de courant pic, qui est désormais de

$\sim 950 \text{ A/cm}^2$. On note aussi l'apparition d'un second pic dû au croisement du niveau propre du puits avec le niveau de puits triangulaire provoqué par l'accumulation des charges devant la double barrière.

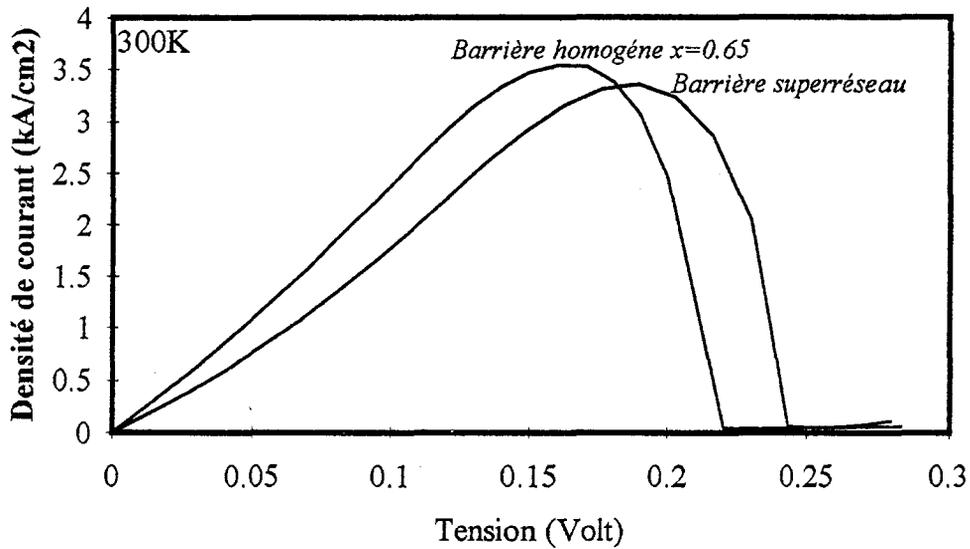


Figure 2.12 Caractéristiques courant-tension calculées pour la structure double barrière $x=0.65$ et la structure double barrière superréseau, à température ambiante.

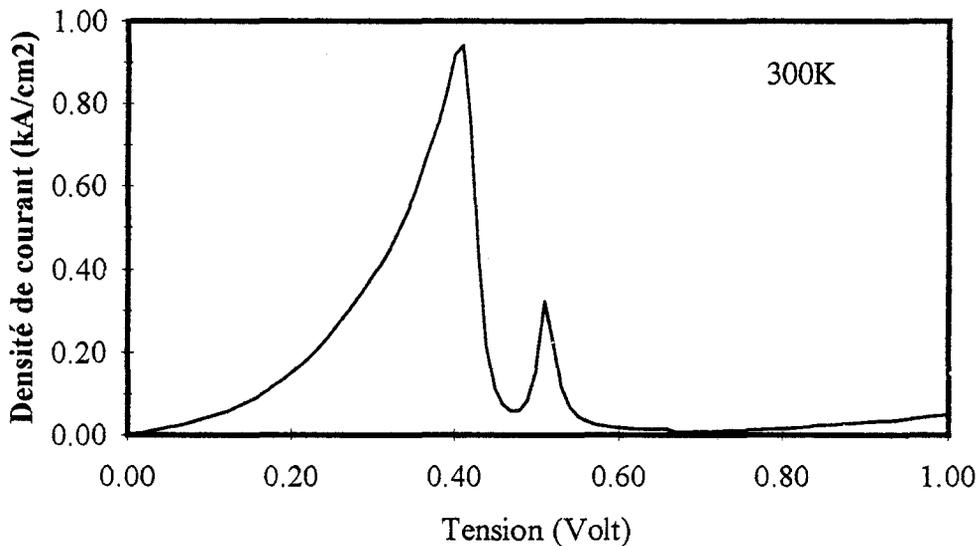


Figure 2.13 Caractéristique $I(V)$ calculée sur l'ensemble de la structure double barrière avec $x=0.65$.

2.4.3 Etude expérimentale des structures à barrière superréseau AlAs/GaAs

2.4.3.1 Technologie

La séquence de croissance de l'échantillon, réalisé au L.C.R., est donnée figure 2.14. Il se compose d'une zone active, décrite au paragraphe 2.4.2 et de couches d'accès dopées respectivement à $2.10^{16} \text{ cm}^{-3}$ et $2.10^{18} \text{ cm}^{-3}$.

La réalisation du composant suit le schéma décrit précédemment (§ 2.3.4.1) mais avec des motifs de section beaucoup plus importante typiquement de l'ordre de $40 \times 40 \mu\text{m}^2$.

GaAs	$2.10^{18} \text{ cm}^{-3}$	5000Å
GaAs	$2.10^{16} \text{ cm}^{-3}$	500Å
GaAs	Nid	25Å
AlAs	Nid	8.5Å
GaAs	Nid	8.5Å
AlAs	Nid	8.5Å
GaAs	Nid	8.5Å
AlAs	Nid	8.5Å
GaAs	Nid	50Å
AlAs	Nid	8.5Å
GaAs	Nid	8.5Å
AlAs	Nid	8.5Å
GaAs	Nid	8.5Å
AlAs	Nid	8.5Å
GaAs	Nid	25Å
GaAs	$2.10^{16} \text{ cm}^{-3}$	500Å
GaAs	$2.10^{18} \text{ cm}^{-3}$	5000Å
Substrat n^+ GaAs		

Figure 2.14 Représentation schématique de la séquence de croissance d'un échantillon à barrière superréseau AlAs/GaAs (Nid : non intentionnellement dopé).

2.4.3.2 Caractéristiques statiques entre 4K et 300K

- Recherche d'équivalence par le niveau quasi-lié

La détermination du niveau quasi-lié est beaucoup moins directe par une étude électrique que par une méthode optique. Néanmoins nous allons mesurer l'écart entre le niveau fondamental E_0 et l'énergie de Fermi de l'émetteur E_F en utilisant la montée en courant de la caractéristique $I(V)$. Cette zone correspond au mode de conduction assisté thermiquement. En effet, on peut montrer que le courant, dont l'expression est donnée au chapitre 1, varie, en première approximation, exponentiellement avec l'inverse de la température à condition que la tension appliquée soit faible et que $(E_0 - E_F) \gg k_b \Theta$ [18]. Donc, si on trace le logarithme népérien en fonction de l'inverse de la température, Θ , pour plusieurs valeurs de tension, V_a , on doit obtenir des droites dont la pente est reliée à l'énergie d'activation $(E_0 - E_F)$. De ce tracé, on peut déduire la courbe $(E_0 - E_F) = f(V_a)$ qui traduit la commande du niveau résonnant par la tension appliquée. A polarisation nulle, on a une estimation du niveau lié à l'équilibre.

Pour la mise en oeuvre de cette méthode, nous avons relevé les valeurs de courant assisté thermiquement dans la plage de température 173K-223K pour les sens de polarisation directe et inverse (la polarisation directe exprime le fait que les électrons sont injectés côté substrat). La figure 2.15 donne les variations de $(E_0 - E_F)$ en fonction de la tension appliquée pour un composant de section $1600 \mu\text{m}^2$. On constate que la commande du niveau résonnant par la tension collecteur-émetteur est bien linéaire entre 0.15 V et 0.3V. On note par ailleurs une légère dissymétrie entre les polarisations inverse-directe. En insert sont reportées les variations de courant assisté thermiquement en fonction de la température pour le sens direct. Les valeurs de tensions s'échelonnent entre $\sim 0.26\text{V}$ et $\sim 0.5\text{V}$.

L'écart d'énergie $(E_0 - E_F)$ mesuré dans ces conditions est d'environ 120 meV. Des caractérisations similaires effectuées sur un autre échantillon ont donné 87 meV soit une estimation à 20%. Ces valeurs expérimentales sont en rapport avec la valeur théorique qui, rappelons-le, est de $E_0 - E_c \approx 105 \text{ meV}$ pour la barrière superréseau, si on considère que le niveau de Fermi de l'espaceur d'émetteur est environ 15 meV en dessous de la bande de conduction.

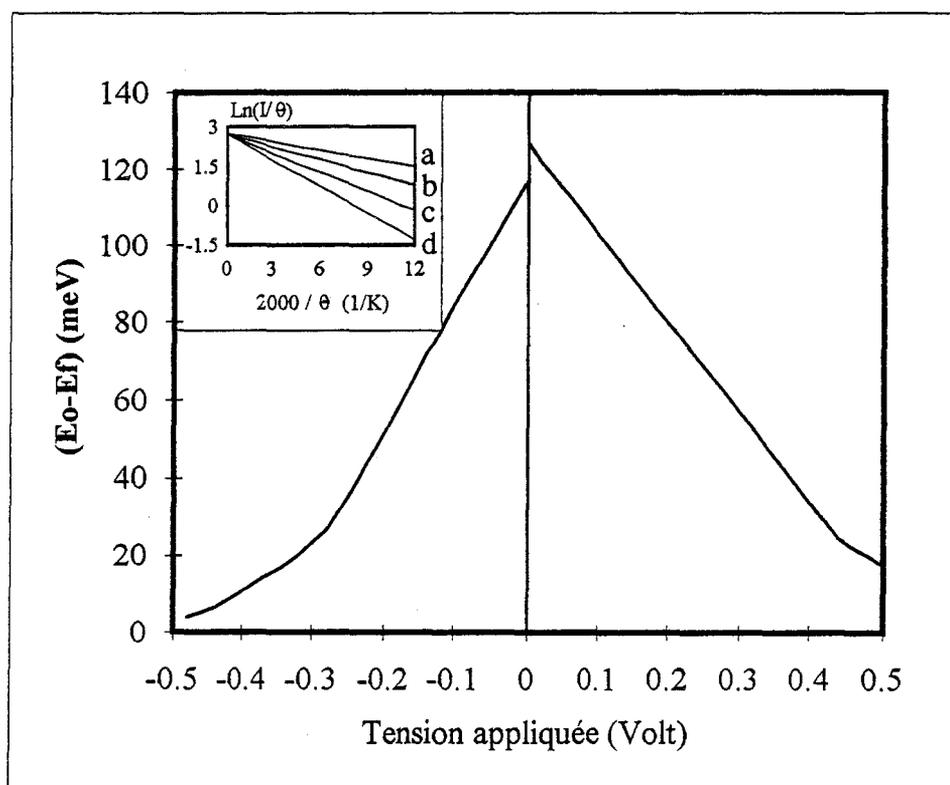


Figure 2.15 Variation de l'énergie d'activation (E_0-E_f) en fonction de la tension appliquée. En insert sont données les valeurs de courant assisté thermiquement en fonction de la température pour une polarisation directe $a : V_a=0.5V$, $b : 0.42V$, $c : 0.34V$, $d : 0.26V$ pour un échantillon à double barrière superréseau de section $1600 \mu\text{m}^2$.

- Caractéristiques courant-tension

La figure 2.16 présente les caractéristiques statiques $I(V)$ mesurées à température ambiante, à 77K et à 4K pour une polarisation directe. Cette structure possède d'excellents rapports courant pic sur courant vallée de 3.5 (300K), 15.9 (77K) et 18.9 (4K). La densité de courant pic varie entre 1.95 kA/cm^2 et 1.25 kA/cm^2 lorsque la température passe de 4K à 300K. Cette dernière valeur est en accord avec la valeur théorique trouvée pour une barrière homogène équivalente. En zone de RDN, on note de fortes instabilités dans la caractéristique $I(V)$ qui sont la conséquence d'oscillations parasites qui se développent spontanément aux bornes de l'échantillon. Dans le cas présent, ces instabilités sont dues au niveau d'impédance qui résulte de la section importante. De plus, nous n'avons pas essayé d'optimiser les éléments d'accès. On trouvera dans la

référence [21] une discussion de ces aspects ainsi que la définition des critères de stabilité.

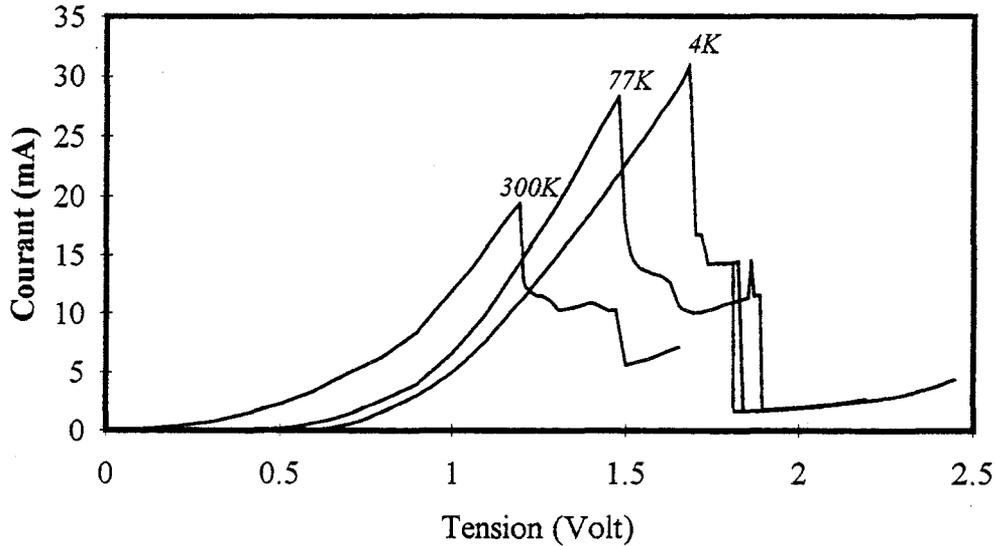


Figure 2.16 Caractéristiques $I(V)$ mesurées à 4K, 77K et 300K sur un échantillon à barrière superréseau de $40 \times 40 \mu\text{m}^2$.

2.5 Conclusion

Nous avons, en premier lieu, défini une condition sur l'épaisseur de barrière AlAs afin de minimiser la composante de courant inélastique par des processus de transport via la vallée X qui entraîne une augmentation préjudiciable des valeurs non résonnantes de courant.

Ensuite, nous avons montré qu'il était nécessaire de renormaliser la masse effective du matériau de barrière à une valeur très inférieure à celle du bas de bande de conduction pour décrire correctement la composante de courant pic.

Enfin, nous avons étudié une structure à double barrière superréseau constituée de matériaux binaires AlAs/GaAs permettant de retrouver les caractéristiques de confinement d'une barrière $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$.

Nous allons, à présent, étudier l'influence de l'ajout de puits profonds sur les caractéristiques de conduction des diodes à effet tunnel résonnant.

Bibliographie Chapitre 2

- [1] O. VANBÉSIEN
«Simulation et caractérisation électrique des diodes double barrière à effet tunnel résonnant»
Thèse de l'Université de Lille I (Avril 1991)
- [2] E.E. MENDEZ, E. CALLEJA, W.I. WANG
«Tunneling through indirect gap semiconductor barriers»
Physical Review B 34 (8) (1986) p. 6026
- [3] A.R. BONNEFOI, T.C. Mc GILL, R.D. BURNHAM
«Resonant tunneling through GaAs quantum-well energy levels confined by $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ Γ - and X - point barriers»
Physical Review B 37(15) (1988) p. 8754
- [4] E.E. MENDEZ, W.I. WANG, E. CALLEJA, C.E.T. GONÇALVES DA SILVA
«Resonant tunneling via X - point states in AlAs-GaAs-AlAs heterostructures»
Applied Physics Letters 50 (18) (1987) p. 1263
- [5] P. CHENG, B.G. PARK, S. KIM, J.S. HARRIS
«The X -valley transport in GaAs/AlAs triple barrier structures»
Journal of Applied Physics 65 (12) (1989) p. 5199
- [6] T. ANDO, H. AKERA
«Connection of envelope functions at semiconductor heterointerfaces.
II. Mixings of Γ and X valleys in GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ »
Physical Review B 40 (17) (1989) p. 11619
- [7] A.C. MARSH
«Electron tunneling in GaAs/AlGaAs heterostructures»
IEEE Journal of Quantum Electronics QE-23 (4) (1987) p. 371

- [8] D.Y.K. KO, J.C. INKSON
«Matrix method for tunneling in heterostructures : Resonant tunneling in multilayer systems»
Physical Review B 38 (14) (1988) p. 9945
- [9] D. LANDHEER, H.C. LIU, M. BUCHANAN, R. STONER
«Tunneling through AlAs barriers : Γ - X transfer current»
Applied Physics Letters 54 (18) (1989) p. 1784
- [10] T.B. BOYKIN, J.S. HARRIS
«X-valley tunneling in single AlAs barriers»
Journal of Applied Physics 72 (3) (1992) p. 988
- [11] D.J. BENDANIEL, C.B. DUKE
«Space-charge effects on electron tunneling»
Physical Review 152 (2) (1966) p. 683
- [12] G. BROZAK, E.A. de ANDRADA e SILVA, L.J. SHAM, F. DEROSA, P. MICELI, S.A. SCHWARZ, J.P. HARBISON, L.T. FLOREZ, S.J. ALLEN Jr.
«Tunneling cyclotron resonance and the renormalised effective mass in semiconductor barriers»
Physical Review Letters 64 (4) (1990) p. 471
- [13] R. LASSNIG
«Tunneling through semiconductor heterojunction barriers»
Solid State Communications 61 (9) (1987) p. 577
- [14] K.V. ROUSSEAU, K.L. WANG, J.N. SCHULMAN
« Γ and X state influences on resonant tunneling current in single and double barrier GaAs/AlAs structures»
Applied Physics Letters 54 (14) (1989) p. 1341
- [15] H. LEROUX
«Effet tunnel intrabande et interbande dans les hétérostructures III-V de complexité croissante»
Thèse de L'Université de Lille I (1992)

- [16] P. MOUNAIX
«Hétérostructures double barrière pour la réalisation de diodes et de transistors à effet tunnel résonnant»
Thèse de L'Université de Lille I (1992)
- [17] R. BOUREGBA, D. LIPPENS, L. PALMATEER, E. BOCKENHOFF, M. BOGEY, J.L. DESTOMBES, A. LECLUSE
«Frequency multiplication using resonant tunneling diode with output at submillimetre wavelenghs»
Electronics Letters 26 (21) (1990) p. 1804
- [18] L. de SAINT POL
«Modélisation de l'effet tunnel résonnant dans les hétérostructures double barrière en vue d'applications analogiques très hautes fréquences»
Thèse de L'Université de Lille I (1990)
- [19] M.A. REED, J.W. LEE, H.L. TSAI
«Resonant tunneling through a double GaAs/AlAs superlattice barrier, single quantum well heterostructure»
Applied Physics Letters 49 (3) (1986) p. 158
- [20] R.M. KAPRE, A. MADHUKAR, S. GUHA
«Highly strained GaAs/InGaAs/AlAs resonant tunneling diodes with simultaneously high peak current densities and peak-to-valley ratios at room temperature»
Applied Physics Letters 58 (20) (1991) p. 2255
- [21] R. BOUREGBA
«Etudes théorique et expérimentale des diodes à effet tunnel résonnant. Utilisation en oscillation et en multiplication»
Thèse de L'Université de Lille I (1991)

Chapitre 3
**Tunnel résonnant dans les structures
pseudomorphiques GaInAs/GaAs/AlAs**

Chapitre 3 Tunnel résonnant dans les structures pseudomorphiques GaInAs/GaAs/AlAs

3.1 Introduction

Nous avons déjà souligné la potentialité des diodes à effet tunnel résonnant à être utilisées en très hautes fréquences ce qui permet d'envisager des applications analogiques et digitales [1]. Ainsi pour un dispositif multiplicateur de fréquence, on tire parti de l'antisymétrie de la caractéristique courant-tension par rapport à l'origine pour ne générer que des harmoniques impairs en absence de polarisation [2]. Cela implique de soumettre la diode à une puissance hyperfréquence de pompe suffisamment importante pour atteindre la zone de Résistance Différentielle Négative (RDN) et ainsi profiter de cet effet. De ce point de vue, des composants présentant une tension pic élevée ne sont pas favorables. Par ailleurs, il est impératif, comme pour toute autre application, de réaliser des échantillons ayant un contraste en courant (PVCR) et une densité de courant pic (J_p) les plus élevés possibles. Le travail exposé dans ce chapitre a pour objectif essentiel d'améliorer ces trois aspects en utilisant des hétérostructures $\text{Ga}_{1-x}\text{In}_x\text{As}/\text{AlAs}/\text{GaAs}$ contraintes. Pour cela, nous avons conçu une structure en nous basant sur les deux idées illustrées par la figure 3.1.

La première (figure 3.1a) tire avantage d'une structure de type «pré-puits» située dans la région d'émetteur. En effet, placer un pré-puits juste devant la double barrière devrait permettre d'améliorer le PVCR car la RDN survient au croisement de deux niveaux confinés.

Quant à la figure 3.1b, elle décrit le cas d'un puits enterré intercalé entre les deux barrières. Dans ce dernier cas nous verrons qu'utiliser un puits de GaInAs à la place du matériau GaAs, tout en réduisant sa largeur, devrait permettre d'abaisser le niveau

fondamental sans modifier la position du premier niveau excité. La séparation entre ces niveaux quantiques est alors augmentée au bénéfice d'un meilleur PVCR.

Par la combinaison de ces deux idées, nous obtenons la structure triple-puits double barrière réalisée expérimentalement.

Les étapes de la conception de cette structure contrainte feront l'objet de la première partie de ce chapitre. Cette étude se fera à l'aide de simulations. Nous exposerons ensuite les aspects spécifiques des technologies de fabrication. Enfin, le dernier paragraphe sera consacré aux mesures statique et dynamique des échantillons les plus probants.

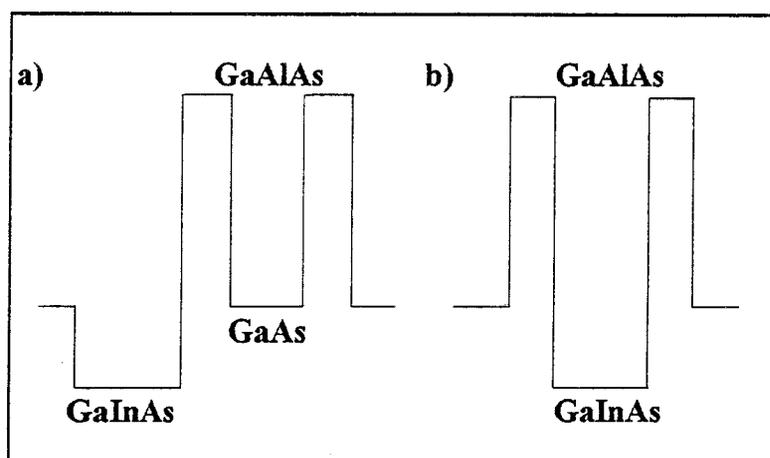


Figure 3.1 Profil de bande de conduction schématisé pour un
a) pré-puits
b) puits enterré.

3.2 Modélisation

3.2.1 Formalisme

La spécificité des structures étudiées dans ce chapitre vient du nombre important de charges accumulées soit dans les pré-puits, soit dans les puits enterrés. Il en résulte des processus de réaction de charge d'espace qui modifient fortement le profil de potentiel. Ceux-ci avaient déjà été évoqués au chapitre 1, mais ils sont ici amplifiés par

la présence d'un matériau à plus faible bande interdite qui entraîne des états de confinement quasi-permanents. Ces effets de piégeage ne peuvent être pris en compte que dans un traitement simultané des processus corrélés de peuplement - désertion et de leur action sur le champ électrique interne. Nous ne reviendrons pas sur les difficultés d'une telle analyse dans une approche rigoureuse.

Pratiquement, pour obtenir le profil de la bande de conduction, nous avons donc résolu de manière auto-cohérente les équations de Poisson et de Thomas-Fermi par une méthode de double balayage qui sera explicitée en détail au chapitre 5. A partir de ce profil de potentiel, modifié par les charges mobiles, la fonction d'onde électronique est obtenue en résolvant l'équation de Schrödinger indépendante du temps par un algorithme de type Runge Kutta [3]. La composante de courant correspondant à un intervalle d'énergie est alors calculée, pour chaque valeur de tension, en multipliant la probabilité de transmission par la fonction d'alimentation. Rappelons que cette dernière décrit la répartition en énergie des porteurs incidents en supposant une distribution de Fermi-Dirac. Ce produit est ensuite intégré sur le domaine des états d'énergies possibles.

3.2.2 Structure pré-puits

La première idée sur laquelle nous nous sommes basés pour concevoir le composant final est la structure pré-puits. Celle-ci peut, concrètement, être réalisée en insérant une couche de GaInAs d'une dizaine d'Angströms en amont d'une hétérostructure double barrière GaAlAs/GaAs.

Depuis la première mesure par Lear et al en 1989 [4], l'étude de ces composants a, en effet, montré que la densité de courant pic ainsi que le contraste en courant sont améliorés par rapport à une structure conventionnelle. Citons, par exemple, les résultats de Brugger et al [5] qui ont obtenu un PVCR de 7.2 avec un J_p de 10 kA/cm^2 pour une structure $\text{Ga}_{0.85}\text{In}_{0.15}\text{As}/\text{Ga}_{0.3}\text{Al}_{0.7}\text{As}/\text{GaAs}$ à 300 K ou ceux de Riechert et al [6] qui rapportent un J_p de 17 kA/cm^2 associé à un PVCR de 5.9 à température ambiante pour une structure $\text{Ga}_{0.85}\text{In}_{0.15}\text{As}/\text{Ga}_{0.4}\text{Al}_{0.6}\text{As}/\text{GaAs}$. Pour notre part, nous avons obtenu un PVCR de l'ordre de 5 avec un J_p compris entre 30 et 40 kA/cm^2 pour une structure $\text{Ga}_{0.85}\text{In}_{0.15}\text{As}/\text{Ga}_{0.4}\text{Al}_{0.6}\text{As}/\text{GaAs}$ à 300 K [7].

Pour étudier l'influence du pré-puits, nous avons simulé deux structures ayant un puits GaAs de 50 Å compris entre deux barrières d'AlAs de 17 Å. Cette zone active est

encadrée par des couches GaAs dopées à 10^{17} cm^{-3} suivies d'espaceurs GaAs de 50 Å non dopés. Pour l'une des structures un pré-puits $\text{Ga}_{0.9}\text{In}_{0.1}\text{As}$ de 50 Å a été inséré tandis qu'il a été omis sur la seconde. Les réservoirs d'électrons sont dopés à $3 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$.

Les résultats des simulations faites pour ces diodes sont donnés figure 3.2. La figure 3.2a donne les caractéristiques $I(V)$ calculées tandis que la figure 3.2b représente les profils de potentiel correspondant aux tensions pics respectives. On constate, sur la figure 3.2a, que la tension et la densité de courant pic sont plus élevées pour la structure avec que sans pré-puits. Plusieurs effets tendent à expliquer l'augmentation de la tension pic. Le premier est le phénomène d'accumulation de charges contrebalancé par une désertion locale qui réhausse le niveau moyen de la double barrière. Il est alors nécessaire d'appliquer une tension d'anode supérieure pour réaliser l'alignement entre les niveaux. En second lieu, le fait que le pré-puits soit chargé entraîne de faibles variations de son niveau quantique sous l'action de la polarisation. Il faut donc appliquer une tension plus importante pour obtenir la condition d'alignement entre états confinés entraînant l'effet de résonance. Une autre constatation que l'on peut faire au vu de la figure 3.2a concerne la finesse du pic de courant pour la structure pré-puits. Cette évolution est en accord avec l'analyse précédente. En effet, pendant la montée de courant, la structure étant relativement opaque, il y a amplification de l'accumulation de charges dans le pré-puits. Au voisinage de la tension pic, la double barrière devient transparente, donnant ainsi la possibilité aux porteurs de fuir vers le collecteur. Quant à la structure conventionnelle, elle présente des variations plus étalées en tension ainsi qu'une tension et un pic de courant plus faibles. En fait bien qu'il y ait, ici aussi, un phénomène d'injection bidimensionnelle, celui-ci intervient plus tardivement car il faut une certaine tension pour obtenir un effet de quantification dans le puits de potentiel électrostatique créé en amont.

A ce niveau, il nous semble important de rappeler que nos calculs de courbure de bande sont effectués dans une approche semi-classique par une statistique de Thomas-Fermi. En fait, et c'est une des limitations du modèle, cette hypothèse induit une surestimation de la charge piégée. Ceci est particulièrement flagrant pour des structures à espaceur très long où la charge accumulée dans le puits ne peut être prise que dans cette zone d'espaceur. Il s'ensuit un relèvement non physique de la bande de conduction qui peut rejeter, dans les cas limites, le niveau quantique du pré-puits bien au-dessus du niveau de Fermi. Il est certain que, dans ces conditions, il ne peut y avoir accumulation

de charges. Cependant, dans le cas d'espaces de $\sim 100 \text{ \AA}$ accolés à des zones réservoirs dopées à quelques 10^{18} cm^{-3} , les charges calculées par une statistique quantique et semi-classique sont du même ordre de grandeur. Afin d'améliorer la modélisation choisie, une solution possible consiste à superposer une distribution de charges 2D et 3D. Les premiers essais dans ce sens ont été proposés par Fiig et al [8] dans le cas d'un puits électrostatique.

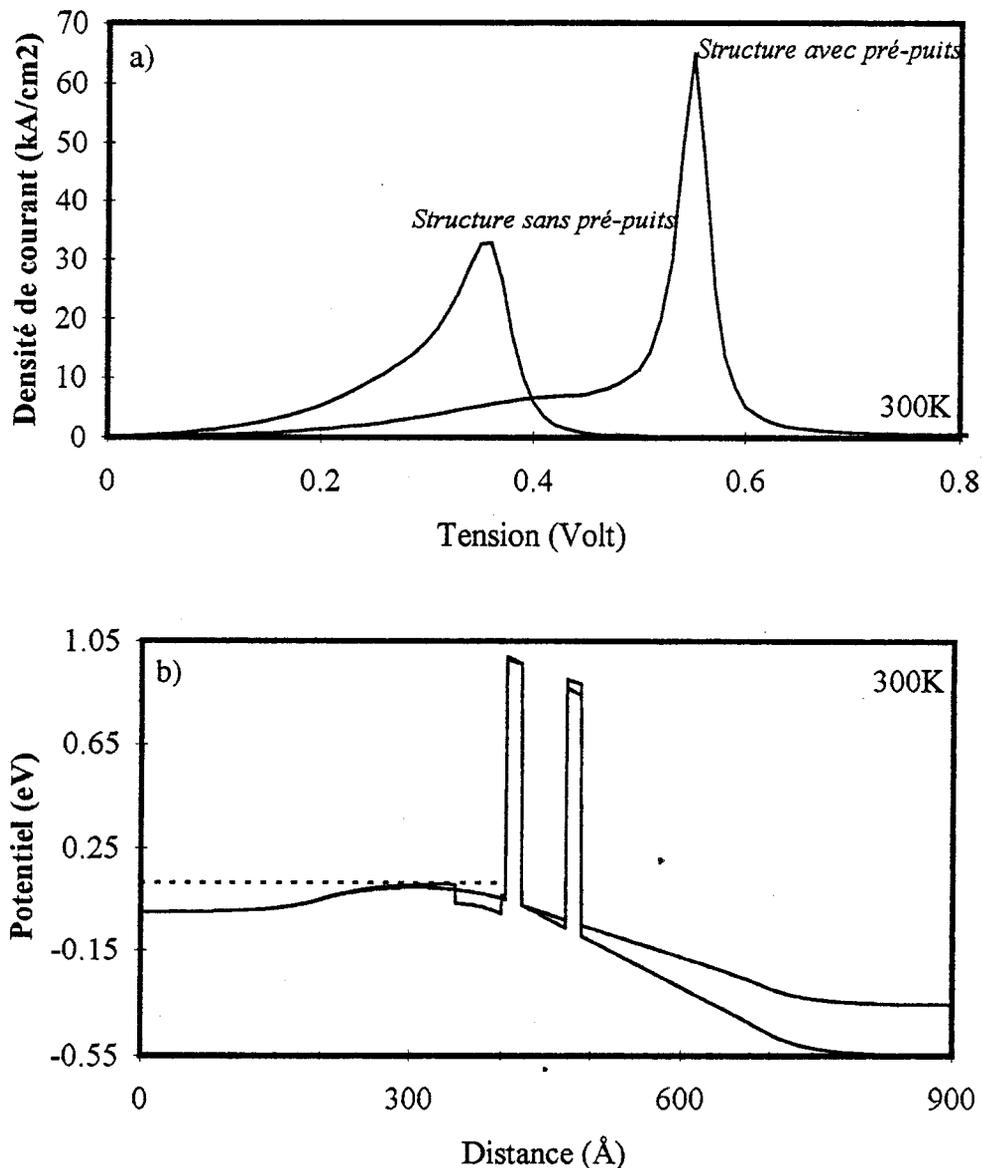


Figure 3.2 a) Caractéristiques $I(V)$ théoriques à 300K pour les structures : $200\text{\AA-GaAs-}3.10^{18}/100\text{\AA-GaAs-}10^{17}/50\text{\AA-GaAs}/50\text{\AA-(GaAs ou Ga}_{0.9}\text{In}_{0.1}\text{As)}/17\text{\AA-AlAs}/50\text{\AA-GaAs/symétrique}$
 b) Profils de potentiel à V_{pic} correspondant.

3.2.3 Structure à puits enterré

Initialement, une structure à puits enterré sert à décaler vers les tensions basses, la tension de seuil de l'effet de RDN. Un simple élargissement du puits GaAs va également dans ce sens. Cela a toutefois, l'inconvénient majeur de rapprocher le niveau fondamental et le premier niveau excité, ce qui est préjudiciable à l'obtention d'un contraste en courant élevé. Pour réaliser ce puits profond, la première idée est de créer une perturbation de potentiel au milieu du puits à l'aide d'un matériau à petite bande interdite tel que le GaInAs [9]. Si la couche de GaInAs est très fine, on peut modifier l'énergie de l'état fondamental sans modifier l'énergie du premier état excité. En effet, au centre du puits, la probabilité de présence est maximale pour le premier niveau tandis qu'elle s'annule pour le deuxième niveau. Cette ingénierie du niveau résonnant est illustrée figure 3.3.

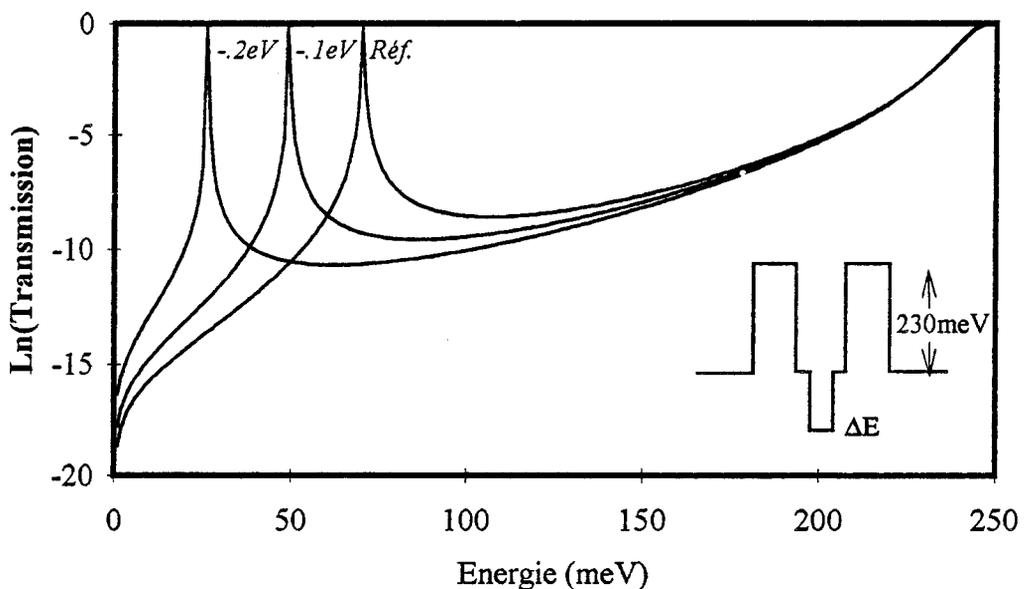


Figure 3.3 Courbes de transmission pour 2 valeurs négatives de ΔE
 $\Delta E = 0$: structure de référence (Réf.)
 $\Delta E = -0.2 \text{ eV}, -0.1 \text{ eV}$: structures à puits enterré.

Celle-ci représente les probabilités de transmission en fonction de l'énergie pour deux perturbations de potentiel, respectivement de -100 meV et -200 meV , sur une

largeur de 10 Å. On constate que l'on modifie la valeur de l'énergie de l'état fondamental, E_0 , en fonction de la perturbation. Quant au deuxième niveau, E_1 , il reste inchangé. On peut donc ajuster non seulement la tension pic qui correspond au croisement entre E_0 et la bande de conduction de l'émetteur, mais aussi l'écartement entre les niveaux E_0 et E_1 . L'influence de ces perturbations sur les caractéristiques courant-tension est donnée figure 3.4. Le PVCR a été multiplié par 3, par rapport à la structure de référence, pour $\Delta E = -200$ meV. Pour cette valeur, la tension pic est fortement diminuée car la conduction est quasi-instantanée, le niveau fondamental étant à ~ 23 meV. La densité de courant pic diminue également, le pic de transmission étant très étroit. En pratique, cependant, la croissance d'une couche centrée de GaInAs de très faible épaisseur à fort pourcentage d'Indium reste encore problématique car la diffusion de celui-ci déforme le potentiel. La solution qui a donc été adoptée, et qui conduit à des résultats similaires, consiste à faire une croissance à concentration d'Indium limitée, sur l'ensemble de la zone de puits mis à part deux zones de transition aux interfaces puits-barrière d'environ 5 Å.

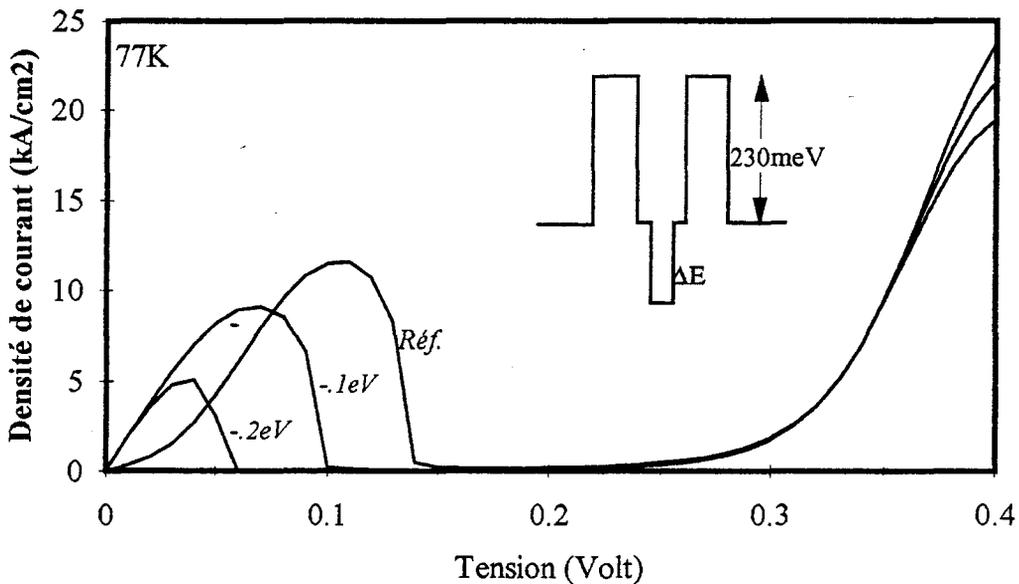


Figure 3.4 Calcul de la caractéristique statique à 77K pour les 3 valeurs de ΔE précédentes.

3.2.4 Structure triple puits - double barrière

Par combinaison des deux idées précédentes, on obtient un système triple puits - double barrière. Cette configuration permet d'allier les avantages des deux structures de base :

- Effet de RDN survenant au croisement de deux niveaux confinés, ce qui accroît J_p et PVCR.
- Diminution des contributions hors résonance par écartement des niveaux, ce qui augmente PVCR.

En outre, la présence du puits enterré compense la forte tension pic obtenue avec un pré-puits.

Ces effets sont illustrés figure 3.5 où sont représentées les courbes courant-tension simulées à 300K pour les trois systèmes cités. On constate que la caractéristique $I(V)$ de la structure triple puits présente une tension pic de 0.3 V. Elle s'intercale donc entre celle calculée pour une structure à puits central enterré de 40 Å et celle obtenue pour une hétérostructure ayant un pré-puits de 50 Å. Quant à l'évolution de la densité de courant pic entre les trois structures, elle n'est pas monotone puisque J_p est sensiblement équivalent pour les systèmes à triple et à pré-puits. Ce résultat n'est pas encore parfaitement expliqué. Sur la base de ces simulations, la structure triple puits - double barrière apparaît comme un bon compromis entre les grandeurs de courant et tension pic. Pour le contraste en courant, il faut rester prudent car il est difficile de statuer sur l'une ou l'autre des structures dans la mesure où les valeurs sont largement surestimées.

Pour mieux comprendre comment s'établit le transfert de charges entre les zones d'émission et de collection, nous avons tracé figure 3.6 le profil de potentiel de la structure triple puits - double barrière à la tension pic ainsi que la probabilité de présence pour l'énergie de résonance. Les traits pointillés indiquent la position des niveaux de Fermi en zones d'émetteur et de collecteur, supposées en quasi-équilibre. A cette polarisation les états fondamentaux du puits de cathode et du puits central s'alignent. La probabilité de présence se partage alors entre ces deux derniers. Le puits dans l'espace collecteur, vide à cette tension, sert à conserver la symétrie de la double barrière en vue d'une utilisation en multiplication de fréquence. Avant d'aborder le contrôle des niveaux quantiques par la tension appliquée, il nous paraît intéressant de revenir sur

l'hypothèse d'un remplissage classique des puits profonds, soit une densité de charges calculée à partir d'une densité d'état 3D. Cela engendre deux difficultés :

- la non continuité de la charge aux interfaces des hétérostructures ;
- la surestimation de la charge piégée.

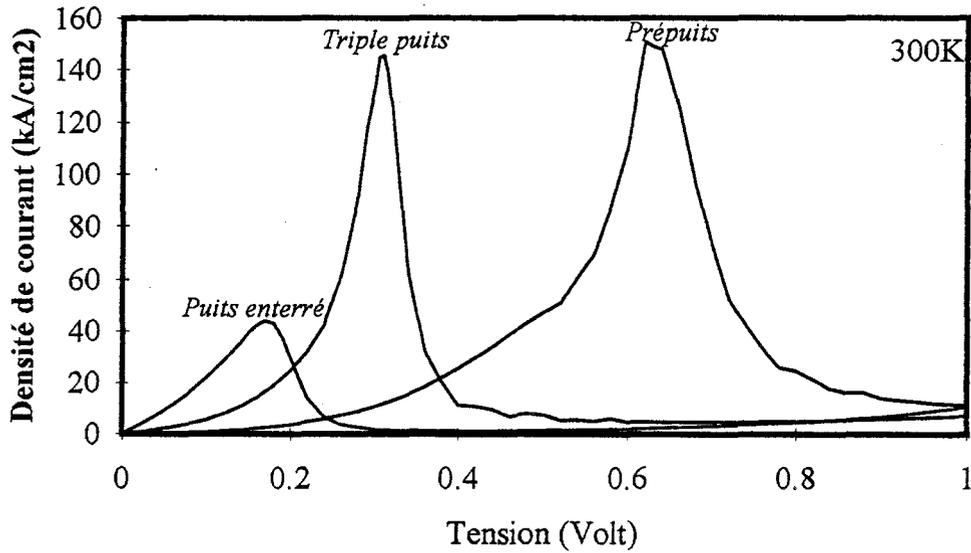


Figure 3.5 Caractéristiques $I(V)$ calculées à 300K pour les structures à puits enterré, triple puits et pré-puits.

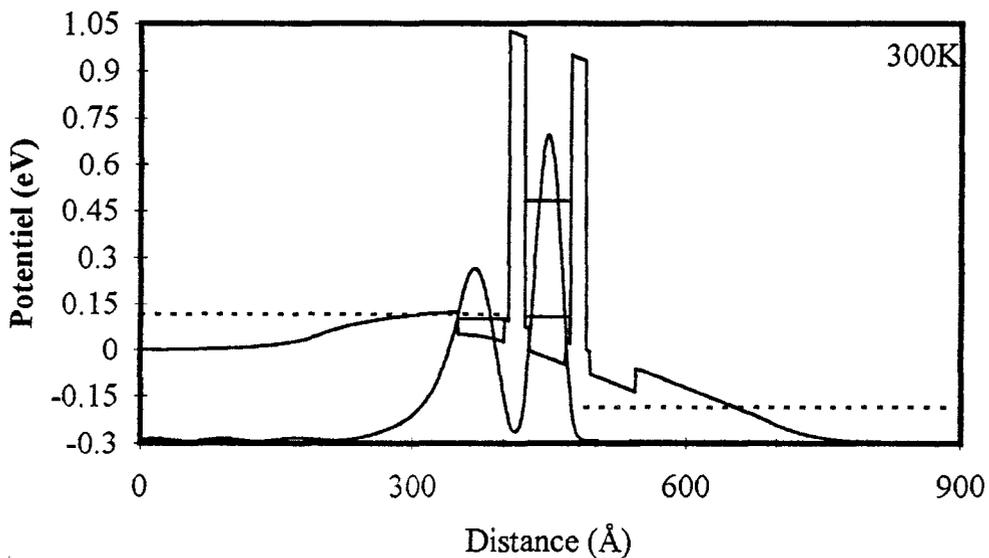


Figure 3.6 Profil de potentiel de la structure triple puits à la tension pic. Les pointillés indiquent la position du niveau de Fermi. La fonction d'onde est donnée en unités arbitraires.

Cependant un des problèmes auquel on se trouve confronté, si l'on désire conserver un caractère quantique, est la normalisation de la fonction d'onde pour les états faiblement liés. Nous avons déjà évoqué au paragraphe 3.2.2, la solution qui consiste à superposer les états étendus et localisés, chaque système ayant sa statistique propre. Un exemple de calcul à l'équilibre fait dans le cadre de cette hypothèse est donné figure 3.7 [10]. On constate que la courbure de bande est moins marquée dans ce cas que lors du calcul précédent. Ceci correspond à une charge piégée plus faible. Les artefacts précédents n'existent plus. De plus il y a, à présent, continuité de la densité volumique de charges $n(z)$ avec un maximum centré dans le pré-puits et non plus à l'hétérojonction GaInAs/GaAs. En conclusion, bien que plus exact, le modèle quantique conduit à des résultats comparables à ceux calculés par un modèle semi-classique qui se révèle en revanche, beaucoup plus facile à mettre en oeuvre.

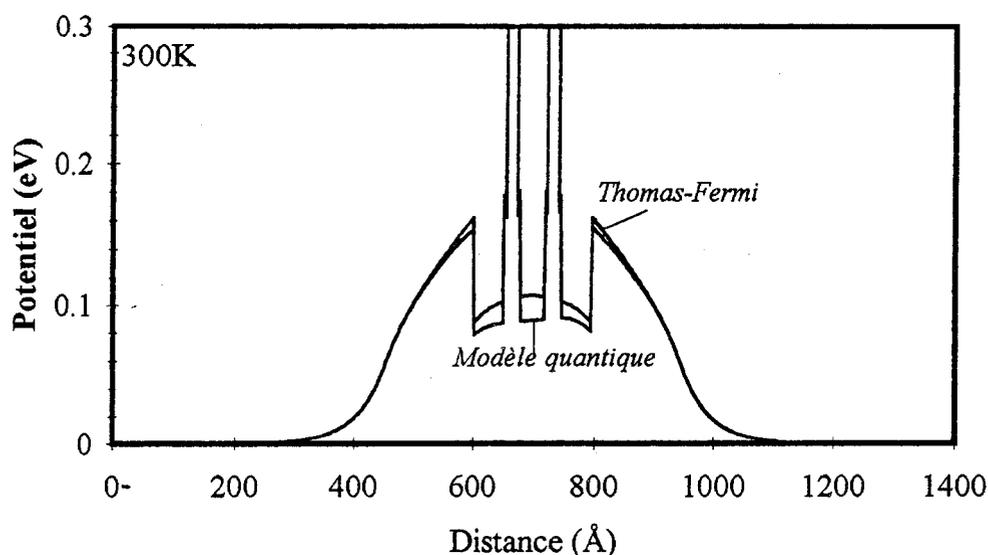


Figure 3.7 Comparaison entre les profils de potentiel obtenus dans une approximation de Thomas-Fermi et un modèle quantique [10].

Si on étudie maintenant la commande des niveaux quantiques par la tension appliquée, donnée figure 3.8, on note une légère non linéarité de commande due à la prise en compte de la courbure de bande. Par ailleurs, on constate que la tension pic est obtenue au croisement des niveaux quantiques de pré-puits et de puits central. Le fait que nous n'observons pas un croisement rigoureux des deux niveaux provient de la

situation de fort couplage entre puits qui entraîne pratiquement une équi-répartition de la fonction d'onde. Ceci se traduit par deux états quantiques très peu résolus en énergie. Leur écart peut être estimé à environ 5 meV, d'après l'évolution donnée en insert de la figure 3.8.

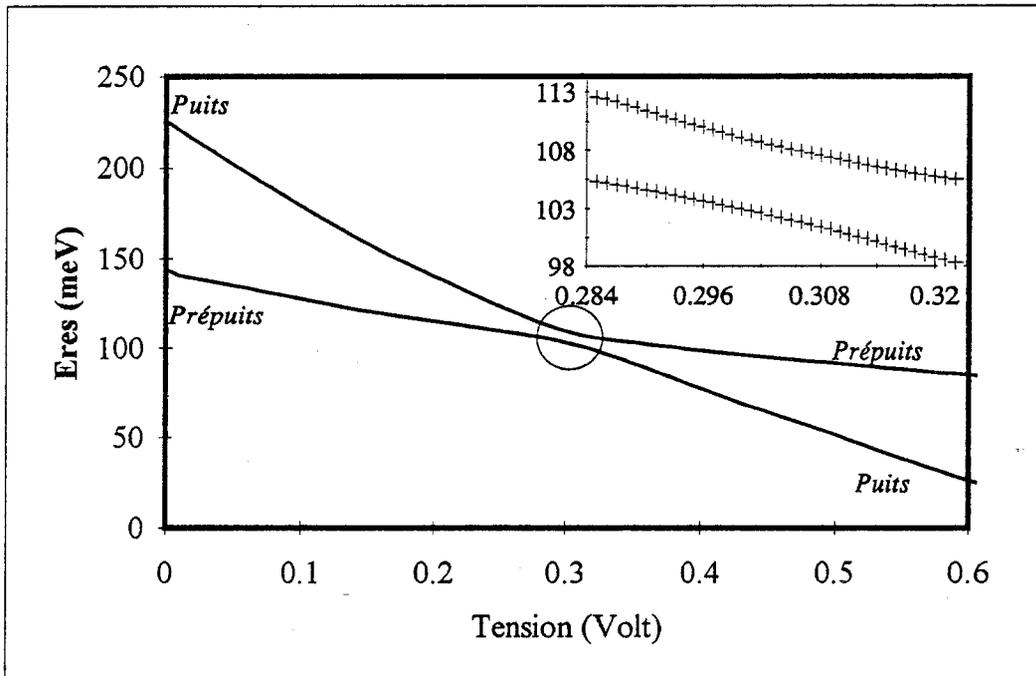


Figure 3.8 Commande des niveaux quantiques de puits et de prépuits en fonction de la tension appliquée pour la structure triple puits - double barrière.

Des études théoriques complémentaires ont montré que l'on pouvait encore améliorer les performances en augmentant la concentration d'Indium ou en faisant varier la largeur du puits central L_w . Ces résultats sont résumés sur la figure 3.9. On peut voir que la diminution de L_w , de 45 Å à 35 Å, provoque un accroissement continu du courant pic mais aussi de la tension pic, conformément à l'analyse précédente. Quant à l'augmentation du pourcentage d'Indium x , il influence peu la tension pic et multiplie la densité de courant par un facteur ~ 2 lorsque l'on passe de $x = 0.15$ à $x = 0.1$. C'est sur la base de ces calculs que nous avons choisi une largeur de puits central de 40 Å qui semble représenter un bon compromis tension pic-courant pic et une concentration d'Indium de 0.1 afin de limiter les risques de dislocation. Expérimentalement, une structure ayant des puits profonds en matériau hétérogène équivalent à 33% d'Indium,

permettant de résoudre le problème de la longueur critique, a été réalisée par Kapre [11]. Elle a donné un $J_p \sim 125 \text{ kA/cm}^2$ pour un PVCR de 4.7 à 300K. Technologiquement, cependant, ces structures se révèlent difficiles à épitaxier. Des difficultés similaires se rencontrent lorsque l'on veut un deuxième niveau dans le pré-puits, ceci afin d'obtenir des transitions multiples. En effet, dans ce cas, le puits doit être élargi jusqu'à des dimensions de l'ordre de 100 \AA , ce qui introduit des contraintes sévères sur les pourcentages d'Indium admissibles.

Nous allons à présent nous intéresser aux structures expérimentales en faisant dans un premier temps, un bref rappel sur les conditions d'élaboration.

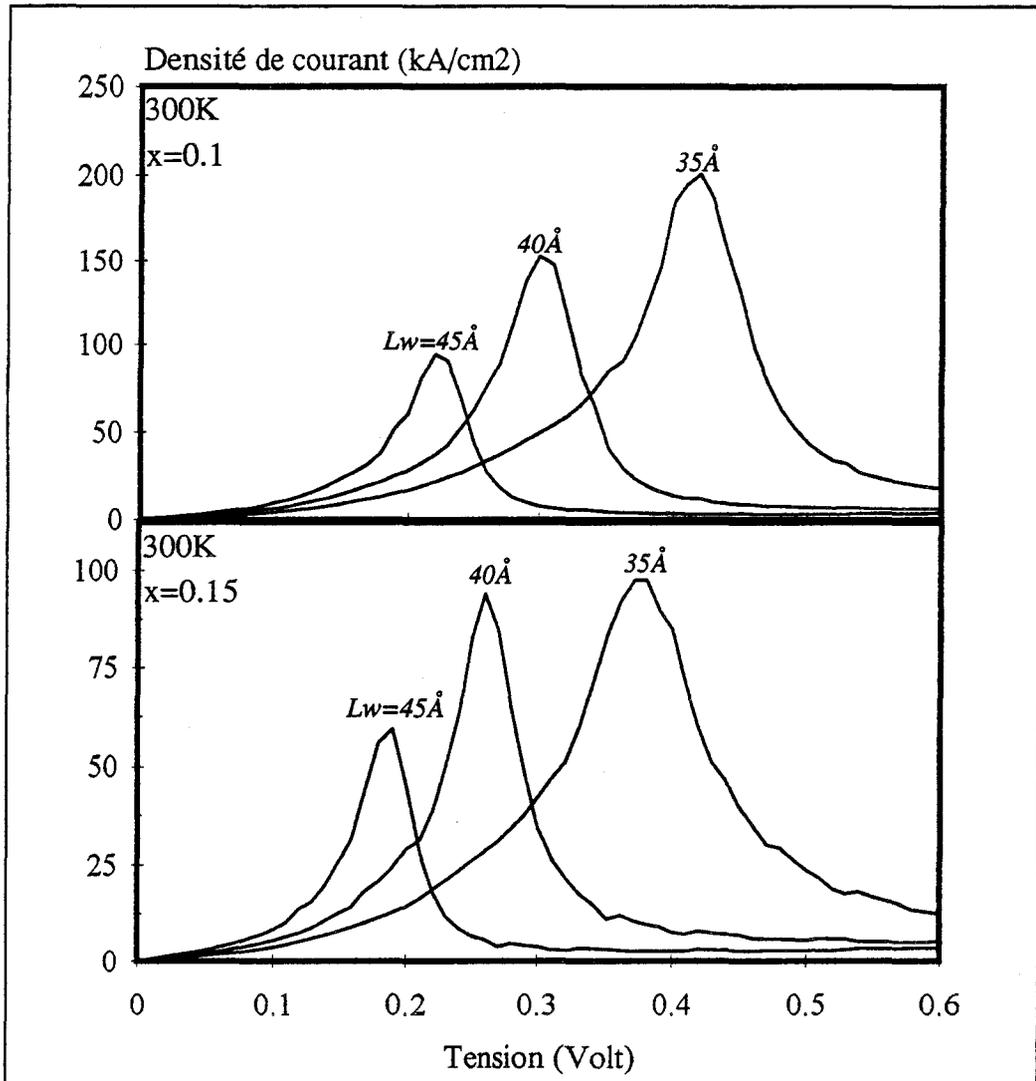


Figure 3.9 Caractéristiques $I(V)$ de la structure triple puits pour différentes largeurs de puits central à $x=0.1$ et 0.15 .

3.3 Conditions d'élaboration

3.3.1 Rappel des paramètres structuraux

Si la notion de longueur critique est, maintenant, communément admise, en revanche les valeurs quantitatives sont encore sujettes à controverse. Par exemple, cette longueur a été calculée dans le cadre des modèles de Matthews et Blakeslee [12], d'une part, et de People et Beans [13], d'autre part, pour du GaInAs épitaxié sur du GaAs. Le résultat est donné figure 3.10. On peut noter des écarts relativement importants entre ces estimations qui nous ont amené à toujours nous placer dans le cas le plus contraignant, soit une épaisseur de GaInAs inférieure à 100 Å pour un pourcentage d'Indium limité à 25%. Dans ces conditions, la discontinuité de bande de conduction pour des hétérojonctions $\text{Ga}_{1-x}\text{In}_x\text{As}/\text{GaAs}$ est linéaire et vaut [14] :

$$\Delta E_c = 0.75x \text{ eV} \quad (3.1)$$

Quant à la masse effective, sa variation en fonction de la concentration d'Indium est faible pour $x < 25\%$ [15].

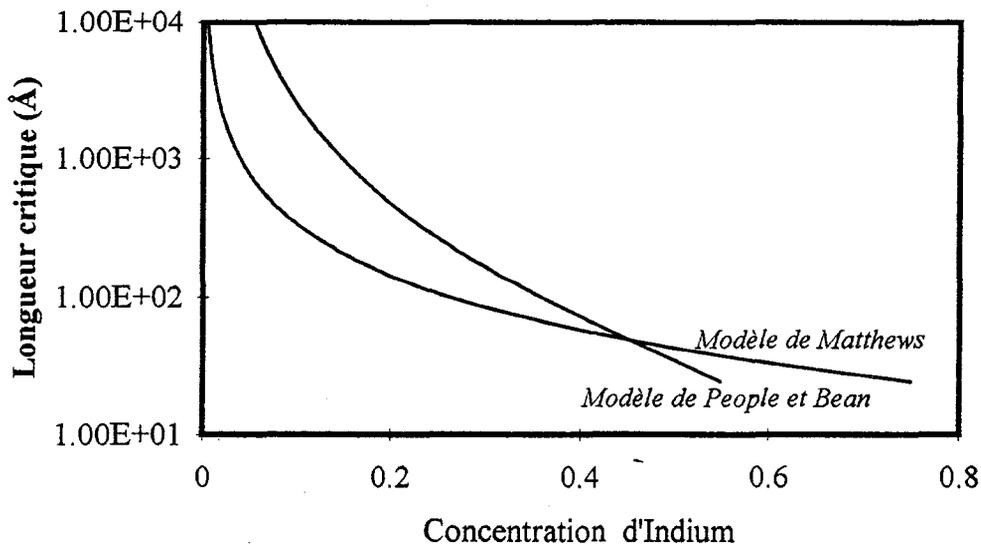


Figure 3.10 Evolutions de la longueur critique de $\text{Ga}_{1-x}\text{In}_x\text{As}$ sur GaAs en fonction de la concentration d'Indium calculée par les modèles de Matthews [12], People et Bean [13].

Si on s'intéresse aux conditions de croissance, on constate de grandes différences dans les températures optimales de croissance de chaque composé. A titre d'exemple, la température optimale pour faire croître du GaAs est de l'ordre de 600°C alors qu'elle est de 700°C pour l'AlAs. Quant à la température de réévaporation de l'Indium, elle est d'environ 550°C. Le second problème auquel on se heurte est celui, déjà évoqué, de la diffusion d'Indium qui tend à déformer le potentiel. Enfin, selon les conditions de croissance, il peut se produire une croissance 3D avec formation d'îlots.

Compte tenu de ces contraintes, la croissance du GaInAs a été réalisée pour une température de substrat comprise entre 530°C et 580°C. En raison de la faible épaisseur des barrières d'AlAs, il n'y a pas eu d'augmentation de la température pour leur croissance qui s'est donc faite à la température optimale du GaAs. Les couches ont été épitaxiées au L.C.R. Thomson dans le cadre d'un contrat M.R.T. (Ministère de la Recherche et de la Technologie).

3.3.2 Fabrication des composants

- Epitaxie

La figure 3.11 résume l'ensemble des paramètres structuraux des échantillons épitaxiés par jets moléculaires sur substrat GaAs semi-isolant (SI) orienté [100]. La structure tunnel résonnant comprend les couches non dopées suivantes : un puits enterré $\text{Ga}_{0.9}\text{In}_{0.1}\text{As}$ de 40 Å inséré entre deux barrières AlAs de 17 Å. Ceci est complété, de façon symétrique, par un pré-puits (post-puits) en $\text{Ga}_{0.9}\text{In}_{0.1}\text{As}$ de 50 Å et un espaceur GaAs de 50 Å. Pour chaque transition puits-barrière, une couche GaAs de 5 Å a été placée afin de retrouver un bon état de surface. Cette zone active est encadrée par deux couches épaisses de 5000 Å en GaAs dopé à $3 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ suivies par 100 Å de GaAs dopé 10^{17} cm^{-3} .

- Technologie de fabrication

La fabrication de composants pour des applications très hautes fréquences a été faite dans le cadre plus général de recherche sur l'intégration des structures tunnel résonnant en technologie planaire [16][17]. Nous ne donnerons, dans ce qui suit, qu'un bref aperçu des techniques développées au sein de l'équipe. Le dénominateur commun de ces études, outre l'aspect planaire, est l'obtention d'échantillons de très petites dimensions latérales. On peut ainsi caractériser des composants à forte densité de courant

mais aussi augmenter leur niveau d'impédance intrinsèque. Ce dernier point permet d'obtenir une meilleure stabilité. En pratique, cela nécessite de se contacter sur des plots métalliques dont les dimensions sont trop faibles ($<10\ \mu\text{m}$) pour pouvoir utiliser des techniques classiques de type thermo-compression. Nous avons donc retenu deux solutions : un report de métallisation après passivation diélectrique et une connexion par pont à air.

GaAs	$3.10^{18}\ \text{cm}^{-3}$	5000Å
GaAs	$1.10^{17}\ \text{cm}^{-3}$	100Å
GaAs	Nid	50Å
$\text{Ga}_{0.9}\text{In}_{0.1}\text{As}$	Nid	50Å
GaAs	Nid	5Å
AlAs	Nid	17Å
GaAs	Nid	5Å
$\text{Ga}_{0.9}\text{In}_{0.1}\text{As}$	Nid	40Å
GaAs	Nid	5Å
AlAs	Nid	17Å
GaAs	Nid	5Å
$\text{Ga}_{0.9}\text{In}_{0.1}\text{As}$	Nid	50Å
GaAs	Nid	50Å
GaAs	$1.10^{17}\ \text{cm}^{-3}$	100Å
GaAs	$3.10^{18}\ \text{cm}^{-3}$	5000Å
Substrat Semi-Isolant		

Figure 3.11 Séquence de croissance schématique de la structure triple puits - double barrière. Epitaxie réalisée sur substrat semi-isolant.

La première de ces techniques est illustrée sur la figure 3.12 qui donne une vue au microscope électronique à balayage d'un composant de section $16 \times 16\ \mu\text{m}^2$. Le composant est situé au centre du cliché. Il est raccordé à une ligne coplanaire de $50\ \Omega$ permettant de caractériser les échantillons directement sur tranche. Ces lignes hyperfréquences sont implantées sur le substrat SI faible perte grâce à une configuration double méso. L'accès à la ligne centrale se fait par un ruban métallique déposé sur du Nitrure de Silicium (Si_3N_4) qui apparaît en noir sur la photographie. Les deux mésas sont gravés par attaque chimique et le contact ohmique est réalisé à partir d'un dépôt d'AuGeNi allié par un recuit rapide. Cette technique d'intégration planaire minimise les valeurs des éléments parasites, en particulier les termes selfique et

capacitif dus aux connexions. Ceci a été vérifié par des mesures d'impédance sous pointes jusqu'à des fréquences de 40 GHz.



Figure 3.12 Vue au microscope électronique à balayage d'une diode de section $16 \times 16 \mu\text{m}^2$. La descente de méso est réalisée par passivation diélectrique.

La figure 3.13 donne une photographie d'ensemble d'une structure contactée par pont à air. La technologie utilisée reprend les étapes de fabrication précédentes pour la définition des contacts d'anode et de cathode et la déposition des lignes coplanaires. Cependant cette technique est relativement délicate à mettre en oeuvre sur des composants de faibles sections. En effet, la prise de contact entre le haut du méso et le pilier situé à l'extrémité de la ligne centrale se fait par un enjambement métallique obtenu par évaporation de TiAu. Les échantillons sont ici configurés sous forme de doigt de $2 \times 10 \mu\text{m}^2$.

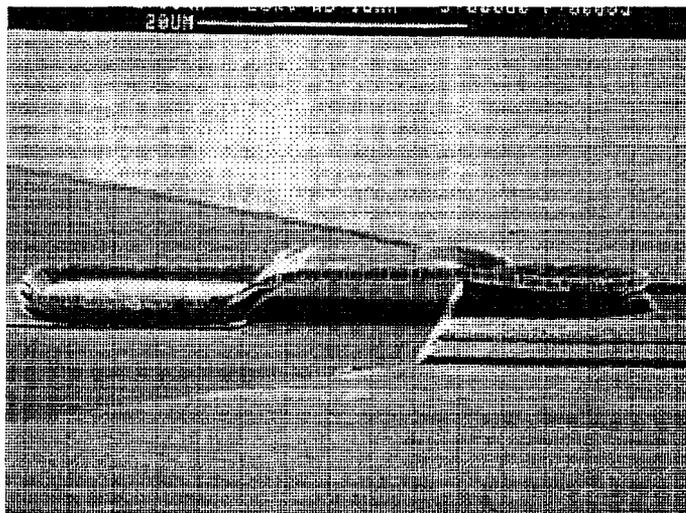


Figure 3.13 Photographie prise au microscope électronique à balayage d'une diode à effet tunnel résonnant de section de $2 \times 10 \mu\text{m}^2$ contactée par pont à air.

3.4 Résultats expérimentaux

Une caractéristique courant-tension mesurée à 300 K pour un échantillon triple puits-double barrière de section efficace $14 \mu\text{m}^2$, contacté par pont à air, est donnée figure 3.14. Cette diode présente un courant pic de $\sim 7 \text{ mA}$, ce qui correspond à une densité de courant pic d'environ 50 kA/cm^2 . Le contraste en courant est compris entre 5 et 7 [18]. Ces valeurs sont comparables aux meilleurs résultats publiés concernant les structures pseudomorphiques InGaAs/AlGaAs [5][6][11][19]. La tension de seuil mesurée est de $\sim 600 \text{ mV}$ ce qui, après soustraction de la chute de tension dans la résistance série, donne une tension pic de $\sim 500 \text{ mV}$, proche de la valeur calculée. On peut également noter la très bonne symétrie de la courbe $I(V)$ qui souligne la qualité des interfaces.

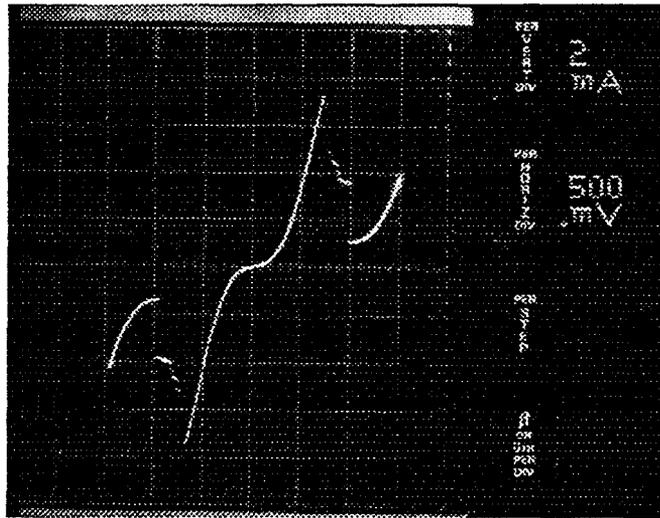


Figure 3.14 Caractéristique courant-tension à 300K d'une diode triple puits - double barrière de section efficace $14 \mu\text{m}^2$.

Ces excellents résultats statiques sont confirmés par l'étude des impédances réactive et résistive des composants en fonction de la fréquence dans la gamme 50 MHz-40 GHz [20]. Comme les valeurs des éléments extrinsèques introduits par la technique de planarisation et de connexion sont très faibles, on peut effectuer une mesure relativement directe des paramètres intrinsèques qui caractérisent le composant. A titre d'exemple, la capacité parasite C_p mesurée est de l'ordre de 50 fF pour un report de métallisation après passivation diélectrique et de 13 fF pour une technique à pont à air alors que l'inductance parasite L_p est de l'ordre de 60 pH dans les deux cas. Les variations fréquentielles de l'impédance petit signal sont reportées sur l'abaque de Smith de la figure 3.15. La polarisation a été ajustée en zone de RDN, à la limite de stabilité. Celle-ci est obtenue pour un niveau d'impédance supérieure à -150Ω . On peut voir que le coefficient de réflexion est supérieur à 1 sur toute la gamme de mesure ce qui équivaut à une partie réelle négative. Si on représente séparément les parties réelles $Re(Y)$ et imaginaires $Im(Y)$ de l'admittance, données figure 3.16, on constate que leur évolution est très proche de celle d'un dipôle comportant une résistance dynamique R_d en parallèle avec une capacité C_d . Ces relevés s'analysent à l'aide d'un schéma équivalent de type diode tunnel d'Esaki. Outre le dipôle $R_d C_d$, celui-ci fait intervenir une résistance série totale R_s et les éléments parasites L_p, C_p . Les valeurs déduites pour ces termes, qui dépendent de la section, sont : $C_d = 37 \text{ fF}$, $R_d = -180 \Omega$, $R_s = 9 \Omega$. Cela

donne une constante de temps de l'ordre de la picoseconde donc une fréquence de coupure supérieure à 100 GHz. Rappelons que nous ne sommes pas à la condition de fréquence de coupure maximale puisque celle-ci s'obtient au point d'inflexion de la zone de RDN.

En résumé, on retiendra que les structures triple puits-double barrière pseudomorphiques permettent d'obtenir de très bonnes caractéristiques $I(V)$ qui se conservent jusqu'à des fréquences très élevées.

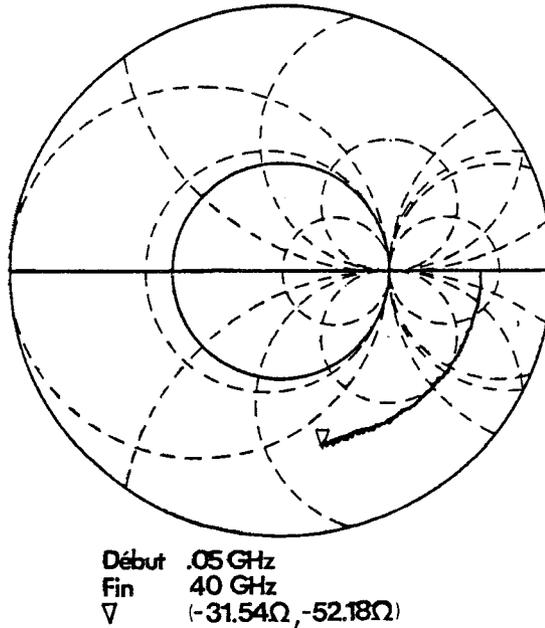


Figure 3.15 Abaque de Smith à 300K de la diode triple puits - double barrière de section efficace $14 \mu\text{m}^2$ connectée par pont à air. La mesure est faite entre 50 MHz et 40 GHz. La polarisation correspond à la limite de stabilité.

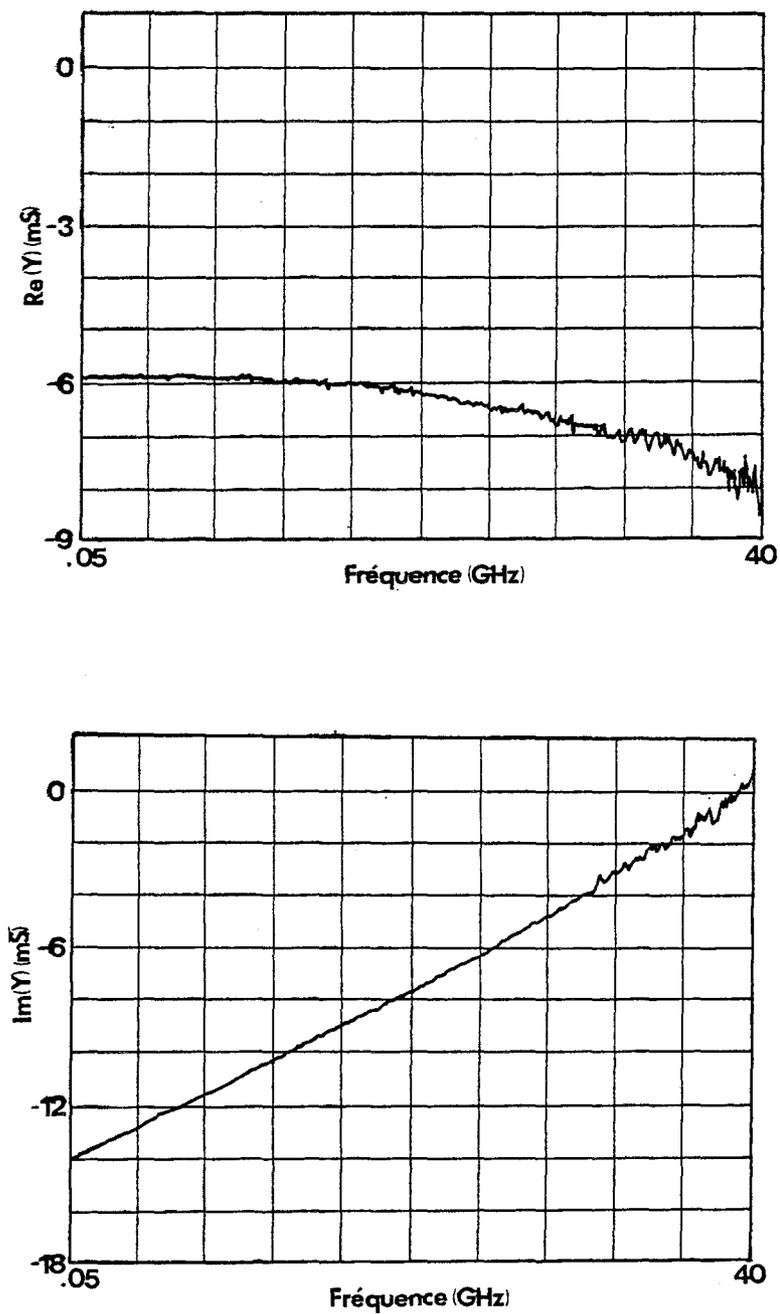


Figure 3.16 Relevés des admittances complexes effectués pour un composant de $14 \mu\text{m}^2$ à 300K. L'excursion fréquentielle s'étend de 50 MHz à 40 GHz. Le point de polarisation correspond à la limite de stabilité.

3.5 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons étudié les potentialités offertes par les structures à puits localisés de GaInAs contraint. Nous avons exploré trois voies de recherche complémentaires. Il en ressort que la structure triple puits-double barrière est la plus prometteuse car elle allie densité de courant et contraste en courant élevés.

L'optimisation des structures s'est faite à l'aide d'un programme résolvant de manière auto-cohérente les équations de Poisson et de Thomas-Fermi. Il s'est révélé que le remplissage du pré-puits se faisait en prélevant la charge équivalente dans les zones réservoirs. Il s'avère donc impératif de limiter l'extension des zones modérément dopées situées entre ce pré-puits et les zones de contact. Par ailleurs, l'analyse des transferts de charges entre niveaux de pré-puits et de puits central a montré la possibilité de contrastes de conduction élevés à des tensions pics relativement faibles.

Sur la base de ces calculs, des composants ont été fabriqués dans une technologie intégrée. Ceux-ci ont présenté d'excellentes caractéristiques continues et fréquentielles, à 300K, avec des PVCR pouvant atteindre 7, un J_p de $\sim 50 \text{ kA/cm}^2$ ainsi qu'une fréquence de coupure supérieure à 100 GHz.

Ce travail constitue une première approche des calculs des profils de potentiel dans des systèmes ouverts alliant des états étendus et quasi-liés. Les prolongements de cette étude sont, d'une part, de considérer une statistique de remplissage bidimensionnelle, d'autre part, d'analyser la fuite de cette charge piégée par la double barrière, non seulement dans des conditions de cohérence mais aussi en faisant intervenir des processus d'effet tunnel assistés par phonons.

Bibliographie Chapitre 3

- [1] L.L. CHANG, E.E. MENDEZ, C. TEJEDOR
Resonant tunneling in Semiconductors : Physics and applications.
Plenum Press, New York, (1991)
- [2] R. BOUREGBA, D. LIPPENS, L. PALMATEER, E. BOCKENHOFF,
M. BOGEY, J.L. DESTOMBES, A. LECLUSE
«Frequency multiplication using resonant tunneling diode with output at
submillimetre wavelenghts»
Electronics Letters 26 (21) (1990) p. 1804
- [3] L. de SAINT POL
«Modélisation de l'effet tunnel résonnant dans les hétérostructures dou-
ble barrière en vue d'applications analogiques très hautes fréquences.»
Thèse de L'Université de Lille I (1990)
- [4] K.L. LEAR, W.S. LEE, J.S. HARRIS
«Experimental dependence of resonant tunnel diode current on accumu-
lation layer band profiles»
Proceeding of 47th Annual Device Research Conference, IEEE, Cam-
bridge, (1989), p. VA-2
- [5] H. BRUGGER, U. MEINERS, C. WÖLK, R. DEUFEL, J. SCHROTH,
A. FÖRSTER, H. LÜTH
«High quality GaAs-based resonant tunneling diodes for high frequency
device applications»
Actes de la 13th IEEE/Cornell Conference on Advanced Concepts in
High Speed Semiconductor Devices and Circuits (1991)
- [6] H. RIECHERT, D. BERNKLAU, J.P. REITHMAIER, R.D. SCHNELL
«High performance resonant tunneling structures on GaAs substrates»
Electronic letters 26 (5) (1990), p. 340

- [7] P. MOUNAIX
«Hétérostructures double barrière pour la réalisation de diodes et de transistors à effet tunnel résonnant»
Thèse de L'Université de Lille I (1992)
- [8] T. FIIG, A.P. JAUHO
«Self-consistent model for two dimensional accumulation layer states in resonant tunneling devices»
Applied Physics Letters 59 (18) (1991) p. 2245
- [9] O. VANBÉSIEN
«Simulation et caractérisation électrique des diodes double barrière à effet tunnel résonnant»
Thèse de l'Université de Lille I (Avril 1991)
- [10] L. BURGNIES
«Mécanismes d'injection et de fuite dans les hétérostructures résonnantes»
D.E.A. de l'Université de Lille I, (Juillet 1993)
- [11] R.M. KAPRE, A. MADHUKAR, S. GUHA
«Highly strained GaAs/InGaAs/AlAs resonant tunneling diodes with simultaneously high peak current densities and peak-to-valley ratios at room temperature»
Applied Physics Letters 58 (20) (1991) p. 2255
- [12] J.W. MATTHEWS, A.C. BLAKESLEE
«Defects in epitaxial multilayers»
Journal of Crystal Growth 27 (1974) p. 118
- [13] R. PEOPLE, J.C. BEAN
«Calculation of critical layer thickness versus lattice mismatch for $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}/\text{Si}$ strained layer heterostructures»
Applied Physics Letters 47(3) (1985) p. 322
- [14] S. NIKI, C.L. LIN, W.S.C. CHANG, H.H. WIEDER
«Band-edge discontinuities of strained-layer $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ heterojunctions and quantum wells»
Applied Physics Letters 55 (13) (1989) p. 1339

- [15] L. BAUDRY
«Etude des phénomènes de transport électronique dans le GaInAs pseudomorphique par la méthode de Monte Carlo»
D.E.A. de l'Université de Lille I (1989)
- [16] P. MOUNAIX, A. FATTORINI, J.L. LORRIAUX, M. FRANÇOIS, M. MIENS, J. VANBREMEERSCH, D. LIPPENS
«Integration of a resonant tunneling structure for microwave applications»
Journal de Physique III 1(4) (1991) p. 539
- [17] E. LHEURETTE, B. GRIMBERT, M. FRANÇOIS, P. TILMANT, D. LIPPENS, J. NAGLE, B. VINTER
«In_{0.1}Ga_{0.9}As/GaAs/AlAs pseudomorphic resonant tunneling diodes integrated with airbridge»
Electronics Letters 28 (10) (1992) p. 937
- [18] V. SADAUNE, E. LHEURETTE, P. MOUNAIX, O. VANBÉSIEN, D. LIPPENS
«Pseudomorphic In_xGa_{1-x}As/Al_yGa_{1-y}As resonant tunneling structures tailored for high peak current densities and peak to valley current ratios»
Actes du Colloque ISSSE 92 (1992) p. 204
- [19] R.M. KAPRE, A. MADHUKAR, K. KAVIANI, S. GUHA, K.C. RAJKUMAR
«Realization and analysis of GaAs/AlAs/In_{0.1}Ga_{0.9}As based resonant tunneling diodes with high peak to valley ratios at room temperature»
Applied Physics Letters 56(10) (1990) p. 922
- [20] P. MOUNAIX, P. BEDU, D. LIPPENS, E. BARBIER
«Measurement of negative differential conductance to 40 GHz for vertically integrated resonant tunneling diodes»
Electronics Letters 27 (15) (1991) p. 1358

Chapitre 4
 Tunnel résonnant de trous dans les structures
 GaInP/GaAs

Chapitre 4

Tunnel résonnant de trous dans les structures GaInP/GaAs

4.1 Introduction

L'émergence des structures à effet tunnel interbande, notamment à rupture de bande interdite [1] et à effet tunnel intrabande sous excitation optique [2] faisant intervenir des populations de trous et d'électrons, se traduit actuellement par un effort de recherche sur l'effet tunnel de trous.

La première observation d'un effet tunnel résonnant de trous a été reportée par Mendez et al [3] en 1985 pour des structures double barrière AlAs/GaAs dopées p, à basse température. Depuis, ce phénomène a été observé dans les structures Si/Si_{1-x}Ge_x [4], AlSb/GaSb [5] et AlAs/In_{0,1}Ga_{0,9}As [6]. Parallèlement, dès 1991, nous avons effectué cette étude sur une double barrière GaInP/GaAs, en collaboration avec le Laboratoire Central de Recherche (L.C.R.) de Thomson et le Service National des Champs Intenses (S.N.C.I.) [7] [8]. Fondamentalement, ce système de matériaux se révèle favorable à l'observation d'un transport de trous car la discontinuité de bande interdite se reporte principalement en bande de valence.

Dans ce chapitre, nous nous proposons d'exposer nos derniers résultats concernant l'effet de résonance dans un transport perpendiculaire, obtenus à partir des caractéristiques de conduction relevées sous fort champ magnétique. Dans la première partie, nous décrirons brièvement les techniques d'élaboration des échantillons, en particulier les choix effectués pour l'épitaxie par MOCVD. Nous nous intéresserons ensuite aux mesures I(V) à 4K, 77K et 300 K. Ces relevés seront alors analysés sur la base de calculs de profils de potentiel et de probabilités de transmission. Ces derniers seront d'abord effectués dans l'hypothèse de populations de trous lourds et légers non corrélées puis les effets de mélange seront introduits.

4.2 Elaboration du composant

4.2.1 Paramètres d'hétérostructure

Pour cette étude, nous avons choisi une structure $\text{Ga}_{1-x}\text{In}_x\text{P}/\text{GaAs}$ adaptée en maille, soit une concentration d'Indium de 49%. L'absence d'effets de contrainte qui modifient, entre autres, la structure de bande de valence, apparaît en effet plus favorable pour une première expérience. Dans ces conditions d'adaptation, des mesures récentes de discontinuité de bande confirment le report majoritaire de la discontinuité de bande interdite en bande de valence. Cependant, compte tenu de la relative nouveauté de ce système de matériaux, la valeur de cette discontinuité de bande de valence ΔE_v ainsi que celle des masses effectives de trous lourd (m_{hh}^*) et léger (m_{lh}^*) sont mal connues. Pour notre part, nous avons utilisé la valeur $\Delta E_v = 285 \text{ meV}$ proposée par Biswas et al [9] car les mesures de ΔE_c et ΔE_v ont été faites séparément. Pour les masses effectives, nous avons pris celles calculées par Chen et al [10] :

$$\begin{aligned} m_{hh}^* &= 0.488 m_0 & \text{et} & & m_{lh}^* &= 0.122 m_0 & \text{pour le GaInP} \\ m_{hh}^* &= 0.449 m_0 & \text{et} & & m_{lh}^* &= 0.087 m_0 & \text{pour le GaAs.} \end{aligned}$$

4.2.2 Epitaxie du composant par LP-MOCVD

Les échantillons ont été épitaxiés au LCR Thomson par épitaxie à basse pression aux organo-métalliques en phase vapeur (LP-MOCVD : «Low Pressure Metal Organic Chemical Vapor Deposition»). Cette technique permet de faire croître des semiconducteurs de très grande qualité à base de Phosphore. On peut citer pour exemple l'obtention de mobilités extrêmement élevées dans des gaz 2D à l'hétérojonction GaInP/GaAs [11] ainsi que la réalisation de transistors bipolaires à hétérojonctions très performants [12].

La croissance des échantillons sur substrat semi-isolant $\langle 100 \rangle$ a été faite à une pression de 100 mbar et à une température optimale de 600°C . Les gaz précurseurs utilisés sont du triéthylindium (TEI), du triéthylgallium (TEG), de la phosphine pure (PH_3) et de l'arsine (AsH_3) dans un flux d'hydrogène. Le dopage p au carbone a été obtenu par du tétrachlorure de carbone (CCl_4).

La séquence épitaxiale est schématisée figure 4.1. La zone active, non dopée, est constituée de deux barrières de $\text{Ga}_{0.51}\text{In}_{0.49}\text{P}$ de 30 Å encadrant un puits de GaAs de largeur L_w . Trois structures ont été fabriquées avec L_w respectivement de 30 Å, 50 Å et 70 Å. De part et d'autre, deux zones espaceurs de 100 Å en GaAs non dopées favorisent la formation d'une couche d'accumulation marquée permettant un effet d'injection 2D. Les zones adjacentes, d'épaisseurs respectives 1000 Å, sont en GaAs dopées $5.10^{17} \text{ cm}^{-3}$. Le choix d'un faible dopage pour ces zones d'injection est motivé par des études théoriques des effets de mélange dans les structures AlAs/GaAs [13]. Celles-ci mettent en évidence des effets de résonance dans les caractéristiques de courant mieux résolues à faible niveau de Fermi. On peut noter que cela est en accord avec les études fines de multiples transitions faiblement espacées en énergie. Enfin, la séquence de croissance comporte deux zones fortement dopées à $3.10^{19} \text{ cm}^{-3}$ afin d'optimiser la prise de contact.

GaAs-p ⁺	$3.10^{19} \text{ cm}^{-3}$	10000Å
GaAs-p	$5.10^{17} \text{ cm}^{-3}$	1000Å
GaAs	Nid	100Å
GaInP	Nid	30Å
GaAs	Nid	70Å
GaInP	Nid	30Å
GaAs	Nid	100Å
GaAs-p	$5.10^{17} \text{ cm}^{-3}$	1000Å
GaAs-p ⁺	$3.10^{19} \text{ cm}^{-3}$	10000Å
Substrat S.I.		

Figure 4.1 Séquence épitaxiale de la double barrière GaAs/ $\text{Ga}_{0.51}\text{In}_{0.49}\text{P}$ épitaxiée par LP-MOCVD.

Le profil de dopage moyen a été contrôlé par technique polaron. Sur le graphe obtenu, donné figure 4.2, on retrouve les concentrations désirées pour les zones de contact et d'espaceur. On relève, par ailleurs, la présence de deux minima qui caractérisent les barrières. Rappelons que le carbone a l'avantage de très peu diffuser dans le GaAs et qu'il ne dope pas le GaInP.

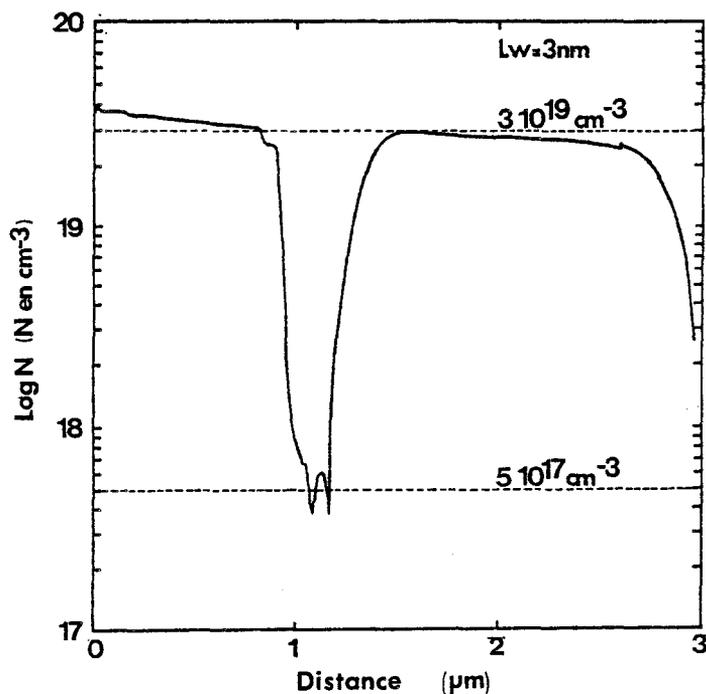


Figure 4.2 Profil de dopage mesuré par technique polaron d'un échantillon puits-double barrière $\text{GaAs}/\text{Ga}_{0.51}\text{In}_{0.49}\text{P}$ dopé p de largeur de puits $L_w = 30 \text{ \AA}$. Unité arbitraire sur l'axe x.

4.2.3 Fabrication du composant

La fabrication du composant suit la procédure, à présent bien maîtrisée au laboratoire, d'une configuration planaire. La section des composants varie de $3 \times 3 \mu\text{m}^2$ à $50 \times 50 \mu\text{m}^2$. Les contacts sur matériau dopé p ont été réalisés par évaporation de TiPtAu avec un recuit à 430°C pendant 30s. La principale difficulté rencontrée concerne l'isolation par méso des diodes. Les premiers essais de gravure chimique par $\text{NH}_4\text{OH}:1/\text{H}_2\text{O}_2:1/\text{H}_2\text{O}:200$ ont, en effet, mis en évidence un arrêt de la gravure sur le GaInP. Il en résulte un phénomène d'attaque latérale pouvant conduire à la destruction des composants de faibles sections. Pour pallier ce problème, le GaInP a été gravé par une solution $\text{HCL}:1/\text{H}_3\text{PO}_4:1$ et les couches GaAs ont été attaquées à l'aide de la solution basique.

4.3 Caractéristiques statiques

Les échantillons ainsi fabriqués ont été caractérisés entre 300K et 4K. A température ambiante, pour un composant de $15 \times 15 \mu\text{m}^2$ et de largeur de puits 70 \AA , la caractéristique courant-tension obtenue a une évolution monotone, comme on peut le constater figure 4.3a. Si maintenant, on relève les courbes $I(V)$ de cette diode, sous pointes, à 77K, on obtient les graphes donnés figure 4.3b pour des polarisations directe et inverse respectivement. Les valeurs des courants et tensions pics sont résumées dans les tableaux correspondants. Pour une polarisation inverse, soit une tension négative sur le contact supérieur, trois inflexions sont observables avec l'existence d'une RDN pour une tension de $\sim -1.1 \text{ V}$. Dans le cas de diodes de sections plus importantes, il y a apparition d'oscillations spontanées résultant de l'abaissement du niveau d'impédance. Dans l'autre sens de polarisation, on détecte quatre inflexions dont trois sont définies par l'étude de la dérivée seconde. Une telle asymétrie de la caractéristique $I(V)$ peut s'expliquer par la non équivalence des interfaces directe et inverse. A 4K, on retrouve les mêmes évolutions, pour la courbe $I(V)$, que précédemment. Ceci est illustré figure 4.3c pour les deux sens de polarisation. On constate néanmoins que les accidents de conduction sont un peu plus marqués avec la diminution de la température.

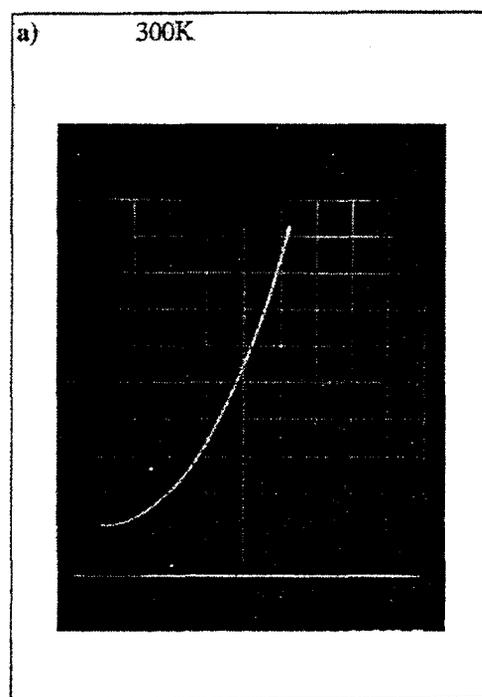
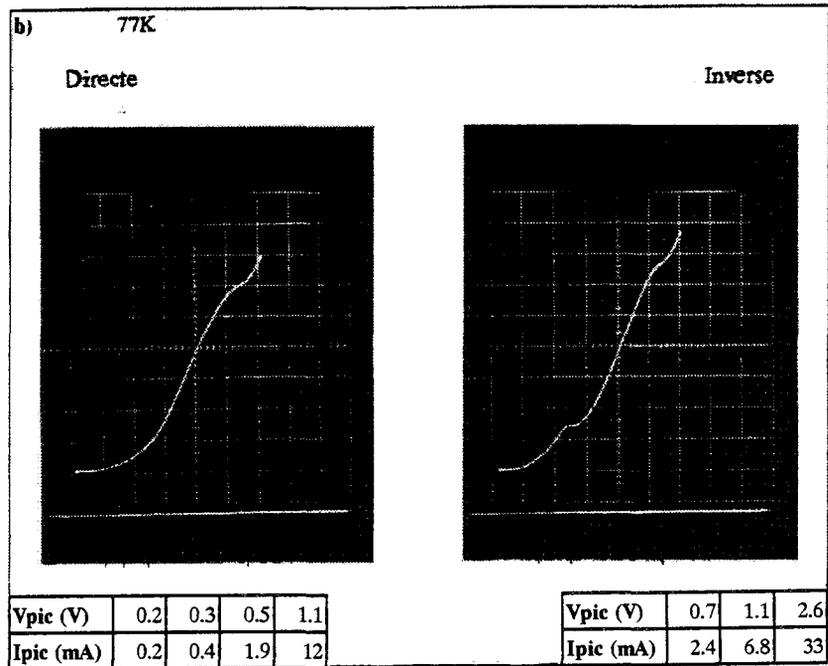


Figure 4.3a : 200 mV / div. hor. et 0.5 mA / div. vert.



Directe : 200 mV / div. hor. et 2 mA / div. vert.

Inverse : 500 mV / div. hor. et 5 mA / div. vert.

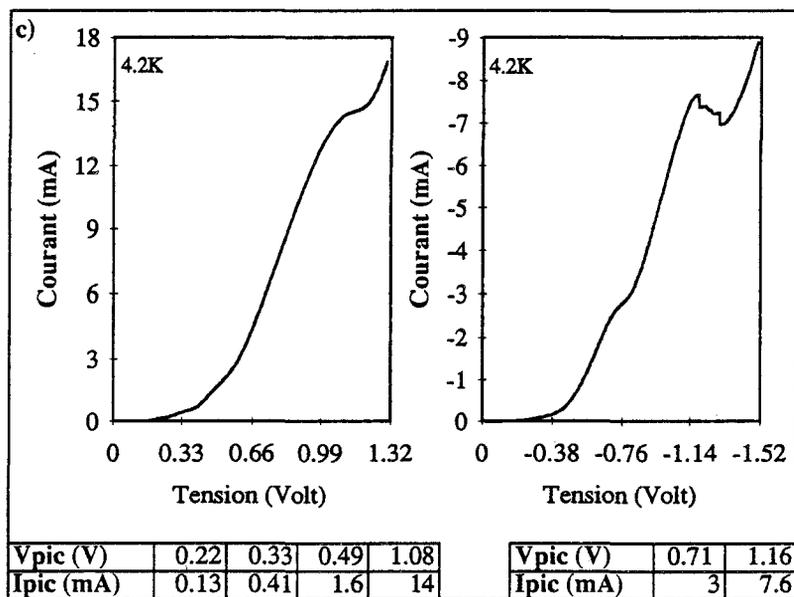


Figure 4.3 Caractéristiques $I(V)$ expérimentales d'un échantillon de section $15 \times 15 \mu\text{m}^2$ et de largeur de puits de 70 \AA mesurées à :
a) 300 K ; b) 77 K ; c) 4 K

D'autre part, des mesures effectuées sur des échantillons de différentes largeurs de puits ont montré que le nombre d'accidents de conduction tend à augmenter suite à l'élargissement du puits, comme cela était prévisible. Pour cette raison, nous avons choisi d'étudier le composant ayant une largeur de puits de 70 Å. Cependant, nous verrons que plusieurs transitions se situent dans des gammes d'énergie très proches et que certaines n'ont pas été observées.

4.4 Analyse des résultats

4.4.1 Approche simplifiée : trous lourds et trous légers non corrélés

En première analyse, nous allons déterminer les caractéristiques de transmission en négligeant le mélange trous lourds-trous légers. Bien qu'a priori, cette hypothèse puisse paraître restrictive, nous verrons par la suite qu'elle affecte principalement l'amplitude des transmissions.

Pour accéder aux niveaux résonnants, nous devons commencer par calculer le profil de la bande de valence. Ici encore, nous avons utilisé l'algorithme de résolution auto-cohérente des équations de Poisson et de Thomas-Fermi mis au point pour les électrons et adapté aux trous. Par ailleurs, nous avons supposé que le profil de potentiel était majoritairement fait par les trous lourds puisqu'ils représentent 93% de la densité d'états. De surcroît, nous avons considéré que le champ électrique dans la double barrière était constant. Cette approximation se justifie par le fait que le courant traversant la structure est faible et que les barrières sont de mêmes largeurs ce qui minimise l'accumulation des porteurs dans le puits. En outre, nous n'avons pas relevé de phénomène d'hystérésis sur les courbes $I(V)$ expérimentales. Un exemple de profil de potentiel calculé à 4K pour une polarisation de $\sim 1V$ est donné sur la figure 4.4. L'échelle des énergies est inversée. On constate que la diffusion entre les zones fortement dopées et les espaceurs se fait sur de faibles distances. Cette situation d'équilibre au voisinage de la barrière permet de restreindre la zone simulée à la double barrière encadrée des seuls espaceurs. Ce calcul du profil de potentiel nous permet également d'accéder à la distribution des tensions entre les zones d'accumulation, de désertion et la structure double barrière.



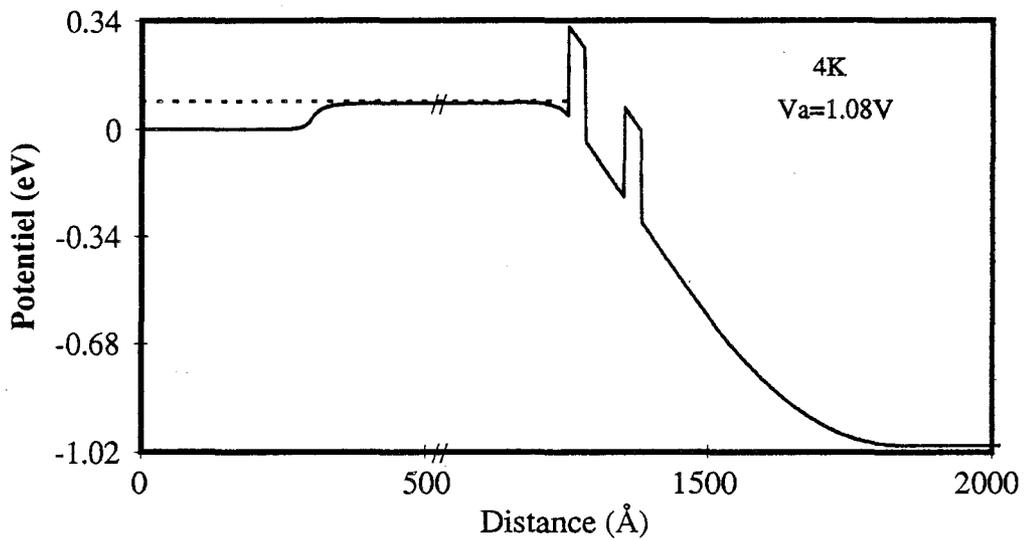


Figure 4.4 Profil de potentiel d'une diode puits - double barrière $GaAs/Ga_{0.51}In_{0.49}P$ calculé à 4K pour une tension appliquée de 1.08 V. L'échelle des énergies est inversée. Le trait pointillé représente le niveau de Fermi.

Dans notre cas, on note que le puits triangulaire formé à gauche par l'accumulation de trous lourds est peu profond, même pour une tension relativement élevée de ~ 1 V. Cette répartition des tensions est visualisée figure 4.5. L'utilisation de cet abaque pour déduire les différentes tensions locales à une polarisation donnée nécessite, toutefois, quelques précautions. En effet, il faut d'abord vérifier que la tension relevée expérimentalement correspond à la chute de potentiel aux bornes de la diode. Cela implique que la tension $R_s I$, où R_s est la résistance parasite d'accès, soit négligeable. Or nous ne disposons pas, à l'heure actuelle, de mesures précises, à 4K, de la résistivité de contact de l'alliage TiPtAu déposé sur GaAs dopé p. Cependant R_s peut être estimée par la résistance de conduction minimale déduite de la courbe $I(V)$ ($R_s \leq (\frac{dI}{dV})^{-1}$). Donc, à partir de la chute de potentiel sur la double barrière nue, V_{db} , on peut remonter au niveau résonnant correspondant en supposant que V_{db} à la résonance est égale à deux fois l'énergie propre E_{res} .

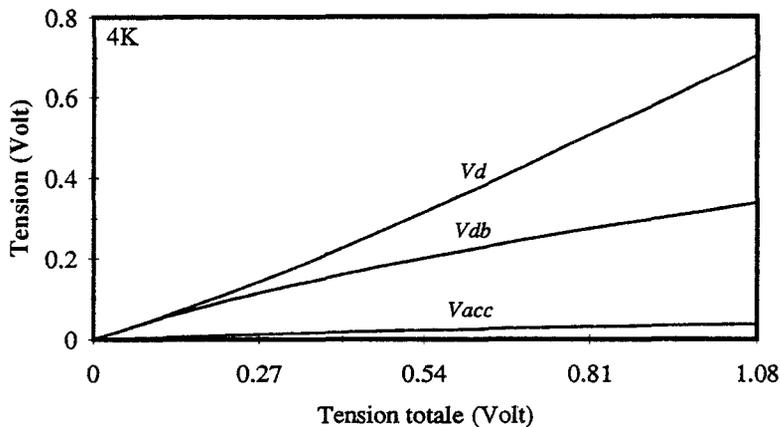


Figure 4.5 Répartition des tensions locales d'accumulation (V_{acc}), de double barrière (V_{db}) et de désertion (V_d) en fonction de la tension totale appliquée aux bornes de la structure décrite figure 4.1.

Afin de comparer les énergies résonnantes expérimentales aux états propres de la double barrière, nous avons résolu l'équation de Schrödinger liée à la bande de valence en considérant respectivement une population incidente de trous lourds puis de trous légers. Les probabilités de transmission, à l'équilibre, sont données figure 4.6. Les indices lh_i («light hole») repèrent les trous légers et hh_i («heavy hole») les trous lourds, i indiquant l'ordre de la résonance. La première constatation qui s'impose est la relative proximité des transitions hh_2 et lh_1 qui complique l'interprétation des résultats. Cette difficulté est cependant levée grâce aux études sous champ magnétique. Dans une moindre mesure, une situation analogue se retrouve pour les résonances lh_2 et hh_4 .

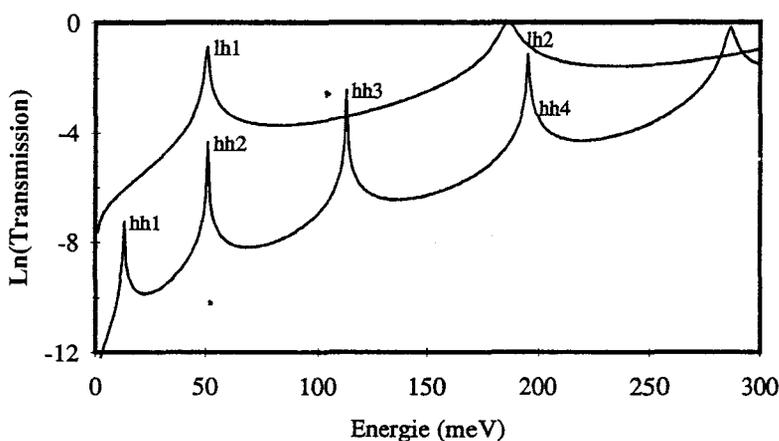


Figure 4.6 Probabilités de transmission en fonction de l'énergie pour des populations incidentes de trous lourds (hh) et de trous légers (lh) non corrélées d'une structure $GaAs-70\text{\AA}/Ga_{0.51}In_{0.49}P-30\text{\AA}$

Si on réitère ce calcul des états propres pour une double barrière à l'équilibre, mais en faisant varier la largeur du puits L_w de 10 à 100 Å, on obtient le graphe de la figure 4.7. Ce résultat montre qu'un élargissement du puits ne se traduit pas automatiquement par une augmentation du nombre de transitions résonnantes, compte tenu des rapprochements qui s'opèrent. Pour le puits de 70 Å les résultats obtenus par ces calculs sont résumés dans le tableau 4.1 où sont reportées les énergies calculées et celles déduites des mesures. En les comparant, on remarque que la première résonance de trous lourds (hh_1) n'a pas été observée. La difficulté d'avoir une injection bidimensionnelle à faible polarisation associée à une probabilité de transmission très sélective peut expliquer que le courant résonnant associé à hh_1 soit masqué par la composante non résonnante de courant. Les deux premières anomalies sont attribuées à un effet tunnel résonnant par les états hh_2 et lh_1 avec, pour le moment, une incertitude sur les positionnements relatifs. Les deux résonances suivantes sont interprétées comme des transitions par les niveaux hh_3 et lh_2 .

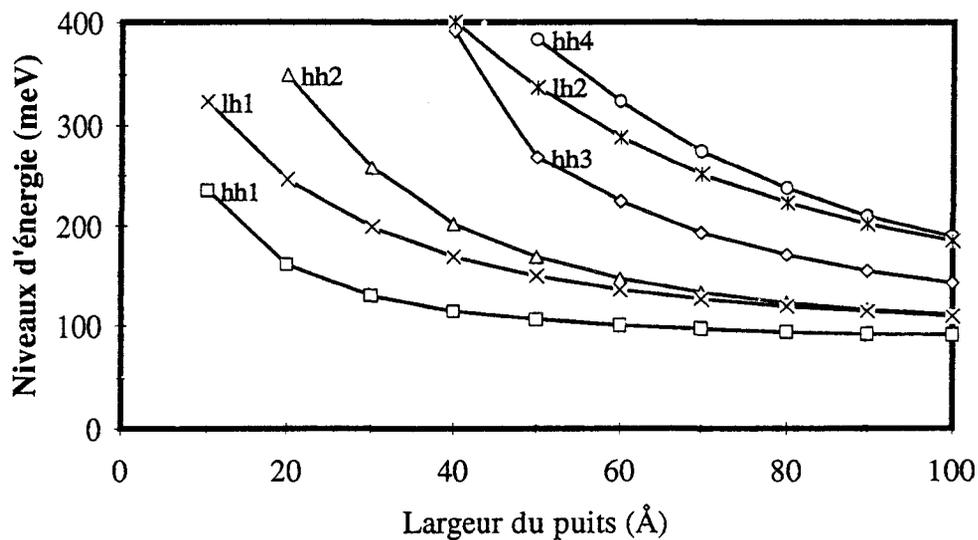


Figure 4.7 Evolutions des niveaux résonnants en fonction de la largeur du puits pour une structure $GaAs-L_w/Ga_{0.51}In_{0.49}P-30\text{\AA}$

	hh1	hh2	lh1	hh3	lh2	hh4
Théorie (meV)	13	51	51	113	186	195
Mesures (meV)		48	68	93 124	170 186	
Remarques	Non			$m^* < 0$	RDN	

Tableau 4.1 : Energies de résonance calculées et déduites des caractéristiques $I(V)$ expérimentales.

Si maintenant on revient à l'amplitude des transitions visibles figure 4.6, on constate, comme attendu, que les niveaux de transmission des trous légers sont bien plus importants que ceux des trous lourds. Ainsi, bien que minoritaires, les trous légers peuvent passer par effet tunnel au travers des barrières beaucoup plus facilement que les trous lourds. Afin de quantifier les différentes valeurs de courant, nous avons donc effectué, dans l'hypothèse de populations non corrélées, l'intégration sur l'énergie des termes de transmission pondérés par la fonction d'alimentation, comme explicitée au chapitre 1. Les densités de courant théoriques en fonction de la tension appliquée sont données figure 4.8. Pour visualiser les transitions hh_1 et hh_2 nous avons dû, respectivement, introduire des coefficients multiplicatifs de $5 \cdot 10^4$ et 500. Ceci est attribuable aux valeurs de transmission très faibles associées aux particules lourdes. Il faut toutefois tempérer cette conclusion car les effets de mélange vont, nous allons le voir, renforcer les transmissions des trous lourds.

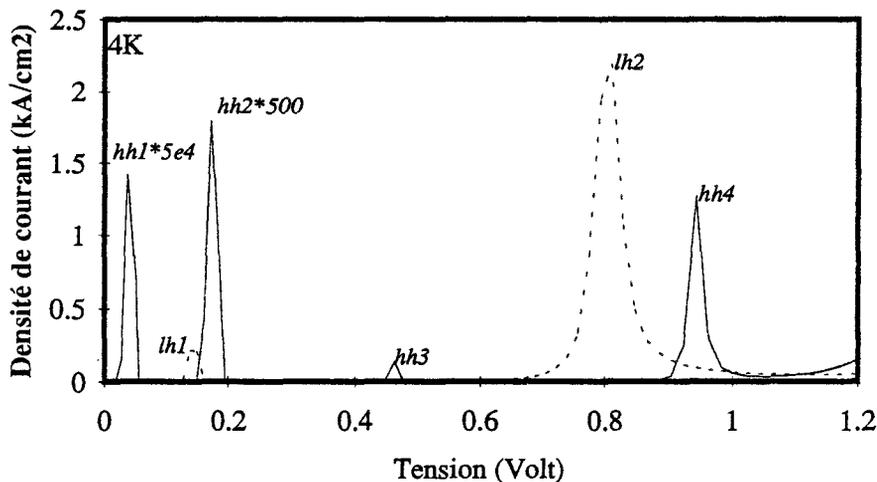


Figure 4.8 Caractéristiques $I(V)$ théoriques à 4K pour des populations de trous lourds (hh) et de trous légers (lh) non corrélées.

4.4.2 Mélange trous lourds - trous légers

Le modèle que nous avons développé est basé sur le formalisme de Xia [14]. La bande de valence est décrite par l'Hamiltonien de Luttinger-Kohn dans la base des fonctions d'onde de trous lourds et de trous légers et en considérant les deux états de spin. Pour simplifier le calcul, cet Hamiltonien est transformé, par une transformation unitaire, en deux matrices (2×2) indépendantes :

$$H = \begin{bmatrix} H_1 & 0 \\ 0 & H_2 \end{bmatrix} \quad (4.1)$$

Dans ce travail, nous ne présenterons que les calculs relatifs au sous-espace supérieur gauche.

$$H_1 = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} P_1 & +i|Q| - |R| \\ -i|Q| - |R| & P_2 \end{bmatrix} \quad (4.2)$$

avec :

$$\begin{cases} P_1 = (\gamma_1 + \gamma_2) p_{//}^2 + (\gamma_1 - 2\gamma_2) p_z^2 \\ P_2 = (\gamma_1 - \gamma_2) p_{//}^2 + (\gamma_1 + 2\gamma_2) p_z^2 \\ Q = -2i\sqrt{3} \gamma_3 p_z (p_x - ip_y) \\ R = \sqrt{3} [\gamma_2 (p_x^2 - p_y^2) - 2i \gamma_3 p_x p_y] \end{cases} \quad (4.3)$$

γ_1 , γ_2 et γ_3 sont les paramètres de Luttinger [15]. Dans une approximation isotrope $\gamma_2 = \gamma_3$

$$\begin{cases} \gamma_1 = \frac{1}{2} \left[\frac{1}{m_l^*} + \frac{1}{m_h^*} \right] \\ \gamma_2 = \frac{1}{4} \left[\frac{1}{m_l^*} - \frac{1}{m_h^*} \right] \end{cases} \quad (4.4)$$

où m_l^* est la masse effective de trou léger et m_h^* celle de trou lourd.

On peut noter que pour un moment $p_{//}$ nul, H_I est diagonale. Il n'existe donc pas de mélange entre les trous lourds et les trous légers car ce sont les termes extra-diagonaux qui couplent les deux états.

Concrètement, pour déterminer les états propres de la structure double barrière, nous avons à résoudre l'équation matricielle :

$$(H_I + V(z)) \psi(z) = E\psi(z) \quad (4.5)$$

où H_I correspond à la matrice (4.2), $V(z)$ représente le potentiel global et $\psi(z)$ est la fonction d'onde. Celle-ci est de la forme :

(4.6a)

$$\psi(z) = \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} e^{ik_{//}r + ik_z z} \quad (4.6)$$

dans l'émetteur et le collecteur. Dans le système puits-double barrière, le potentiel $V(z)$ n'étant plus constant, la fonction d'onde s'écrit :

(4.6b)

$$\psi(z) = \begin{bmatrix} U_1(z) \\ U_2(z) \end{bmatrix} e^{ik_{//}r}$$

Les relations de dispersion, dans l'émetteur, pour les états de trous lourds et de trous légers se déduisent alors de la diagonalisation de H_I :

$$\begin{cases} E = \frac{\hbar^2 k^2}{2} (\gamma_1 \pm 2\gamma_2) \\ k^2 = k_{//}^2 + k_z^2 \end{cases} \quad (4.7)$$

le signe \pm correspond au cas des trous lourds (signe -) ou des trous légers (signe +).

On initialise ensuite les fonctions d'onde de trous lourds ou de trous légers dans le collecteur. La détermination des états propres se fera alors pas à pas du collecteur vers l'émetteur. Le système d'équations que nous avons à résoudre découle de l'équation matricielle (4.5) dans le système puits-double barrière. Pour des fonctions d'onde,

de type (4.6b), il s'écrit :

$$\begin{cases} U_1'' = \frac{\hbar^2 k_{//}^2 (\gamma_1 + \gamma_2) U_1 + 2\sqrt{3}\gamma_2 \hbar^2 k_{//} U_2' - \sqrt{3}\gamma_2 \hbar^2 k_{//}^2 U_2 - 2(E - V) U_1}{(\gamma_1 - 2\gamma_2) \hbar^2} \\ U_2'' = \frac{\hbar^2 k_{//}^2 (\gamma_1 - \gamma_2) U_2 - 2\sqrt{3}\gamma_2 \hbar^2 k_{//} U_1' - \sqrt{3}\gamma_2 \hbar^2 k_{//}^2 U_1 - 2(E - V) U_2}{(\gamma_1 + 2\gamma_2) \hbar^2} \end{cases} \quad (4.8)$$

où (U_1'', U_2'') et (U_1', U_2') sont respectivement les dérivées secondes et premières par rapport à z des amplitudes (U_1, U_2) de la fonction d'onde dans le système puits-barrière. L'intégration de ces équations se fait par une procédure numérique soit de type Runge Kutta d'ordre 4 soit de type prédicteur correcteur d'ordre 4. Les résultats obtenus sont identiques dans les deux cas. On obtient ainsi les valeurs des fonctions d'onde (U_1, U_2) et de leurs dérivées (U_1', U_2') dans la structure puits-double barrière.

Pour établir à présent les coefficients de transmission, on exprime les fonctions d'onde globales dans les zones émettrice et collectrice comme une combinaison linéaire des états de trous lourds (notés h) et légers (l), pour un vecteur d'onde incident ($k > 0$) et réfléchi ($k < 0$), soit :

(4.9a)

$$\psi(z) = \alpha \psi_{h, k_h} + \beta \psi_{h, -k_h} + \gamma \psi_{l, k_l} + \delta \psi_{l, -k_l} \quad (4.9)$$

dans l'émetteur et :

(4.9b)

$$\psi(z) = \alpha' \psi_{h, k'_h} + \beta' \psi_{h, -k'_h} + \gamma' \psi_{l, k'_l} + \delta' \psi_{l, -k'_l}$$

dans le collecteur.

Comme il y a raccordement de la fonction d'onde et de sa dérivée à la première hétérointerface, on obtient le système suivant :

$$\left\{ \begin{array}{l} a_{h, k_h} \alpha + a_{h, -k_h} \beta + a_{l, k_l} \gamma + a_{l, -k_l} \delta = U_1 \\ b_{h, k_h} \alpha + b_{h, -k_h} \beta + b_{l, k_l} \gamma + b_{l, -k_l} \delta = U_2 \\ ik_h a_{h, k_h} \alpha - ik_h a_{h, -k_h} \beta + ik_l a_{l, k_l} \gamma - ik_l a_{l, -k_l} \delta = U'_1 \\ ik_h b_{h, k_h} \alpha - ik_h b_{h, -k_h} \beta + ik_l b_{l, k_l} \gamma - ik_l b_{l, -k_l} \delta = U'_2 \end{array} \right. \quad (4.10)$$

où (a_{h, k_h}, b_{h, k_h}) et (a_{l, k_l}, b_{l, k_l}) sont les coefficients des fonctions d'onde (4.6a) pour les trous lourds et légers respectivement. Ils sont déterminés par la résolution de l'équation de Schrödinger dans l'émetteur. La résolution du système (4.10) permet d'obtenir les coefficients linéaires de la fonction d'onde dans l'émetteur $(\alpha, \beta, \gamma, \delta)$. Ces coefficients sont reliés à ceux de la fonction d'onde dans le collecteur $(\alpha', \beta', \gamma', \delta')$ par une matrice de transfert M .

$$\begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \\ \gamma \\ \delta \end{pmatrix} = (M) \begin{pmatrix} \alpha' \\ \beta' \\ \gamma' \\ \delta' \end{pmatrix} \quad (4.11)$$

Les différents éléments M_{ij} , $i, j \in (1,4)$ utilisés pour le calcul des transmissions, sont déduits en initialisant dans le collecteur une onde de trous lourds se propageant vers la droite. Il vient :

(4.12a)

$$M_{11} = \alpha; M_{21} = \beta; M_{31} = \gamma; M_{41} = \delta \quad (4.12)$$

De même, si on fait l'hypothèse d'une onde de trous légers, on a :

(4.12b)

$$M_{13} = \alpha; M_{23} = \beta; M_{33} = \gamma; M_{43} = \delta$$

On peut alors calculer les coefficients de transmission et de réflexion en sachant que lorsqu'on divise les deux membres de l'équation (4.11) par α -trous lourds incidents- on obtient :

(4.13a)

$$\begin{pmatrix} 1 \\ R_{hh} \\ 0 \\ R_{hl} \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} T_{hh} \\ 0 \\ T_{hl} \\ 0 \end{pmatrix} \quad (4.13)$$

Le premier indice désigne le type de la particule incidente et le second celui de la particule en sortie.

Par ailleurs, si on divise les deux membres de (4.11) par γ -trous légers incidents-on a :

$$(4.13b) \quad \begin{pmatrix} 0 \\ R_{lh} \\ 1 \\ R_{ll} \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} T_{lh} \\ 0 \\ T_{ll} \\ 0 \end{pmatrix}$$

De ces relations matricielles, on déduit :

$$\begin{aligned} T_{hh} &= \frac{M_{33}}{M_{11}M_{33} - M_{13}M_{31}}; & T_{ll} &= \frac{M_{11}}{M_{11}M_{33} - M_{13}M_{31}} \\ T_{hl} &= \frac{-M_{31}}{M_{11}M_{33} - M_{13}M_{31}}; & T_{lh} &= \frac{-M_{13}}{M_{11}M_{33} - M_{13}M_{31}} \end{aligned} \quad (4.14)$$

T_{hh} décrit le processus de passage par effet tunnel n'impliquant que des trous lourds en entrée et en sortie. T_{hl} donne l'amplitude des trous légers qui sortent côté collecteur pour une onde incidente de trous lourds dans l'émetteur. La définition de T_{ll} et T_{lh} est identique pour des trous incidents légers.

Calcul des probabilités de transmission

A l'aide de ce modèle, nous avons simulé une double barrière Ga_{0,51}In_{0,49}P-30Å/GaAs-70Å. Nous nous sommes placés dans le cas limite de notre expérimentation correspondant à un champ magnétique de 15T. La valeur de $k_{//}$ est alors de $\sim 2 \cdot 10^8 \text{ m}^{-1}$. Les probabilités de transmission calculées sont reportées figure 4.9. La figure 4.9a donne le logarithme népérien de T_{hh} et T_{ll} en fonction de l'énergie. Si on compare ces résultats à ceux obtenus quand on ne considère pas l'effet de mélange, on constate que tous les pics de résonance, sans distinction de particules lourdes ou légères, sont

présents dans chaque transmission. Ceci traduit les corrélations existant entre les deux populations. Le fait de retrouver les résonances de T_{ll} dans T_{hh} a pour effet d'augmenter, de façon significative, le niveau de transmission des particules lourdes par rapport au cas sans mélange. Au niveau des caractéristiques de courant, ce renforcement des transmissions provoque une augmentation des valeurs de courant associées. Cela introduit une difficulté à identifier les résonances observées dans les caractéristiques courant-tension expérimentales. De surcroît, le fait qu'une partie de la population subisse des transitions correspondant à un changement de nature entre les particules incidentes et transmises, complique encore la situation. Ainsi, nous avons tracé, sur la figure 4.9b, les probabilités de transmission T_{lh} et T_{hl} afin d'illustrer ces cas. Nous avons, ici aussi, un effet de mélange marqué donnant, comme précédemment, des résonances multiples mais également des anti-résonances. Par exemple, pour l'énergie 115 meV, on observe juste après la résonance une chute brutale et très sélective des valeurs de transmission. D'un autre côté, on peut noter un décalage des énergies de résonance par rapport à la situation de décorrélation.

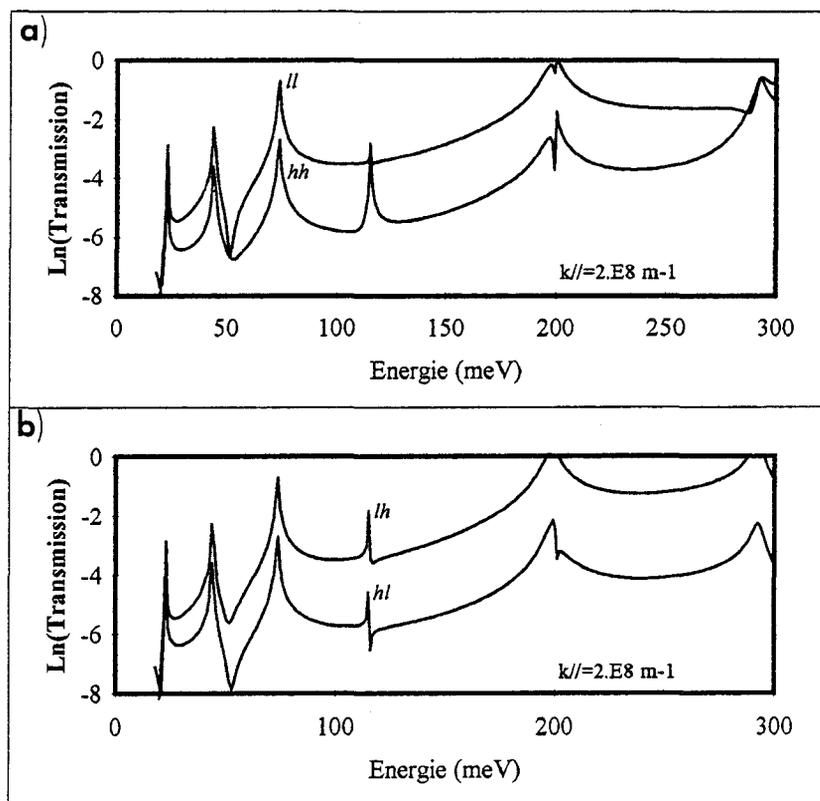


Figure 4.9 Probabilités de transmission en fonction de l'énergie pour une structure $Ga_{0.51}In_{0.49}P-30\text{\AA}/GaAs-70\text{\AA}$ pour un vecteur d'onde de 2.10^8 m^{-1}

Pour identifier, sans équivoque, les porteurs impliqués lors des transitions résonnantes, nous allons nous intéresser à présent aux caractéristiques de conduction sous fort champ magnétique.

4.5 Caractéristiques sous champ magnétique à 4K

4.5.1 Introduction

L'effet d'un champ magnétique B appliqué dans le plan des couches, peut se comprendre à l'aide de la figure 4.10 qui schématise la bande de valence avec l'axe des énergies inversé. Pour les états dans la zone d'accumulation, à gauche sur le dessin, et dans le puits nous avons représenté les diagrammes de dispersion pour un vecteur d'onde parallèle aux couches. Si, sur cette structure, on applique un champ magnétique perpendiculairement au courant, la force de Lorentz induite par ce champ dévie les porteurs d'une quantité :

$$\Delta k_z = \Delta k_{//} = \frac{qB \langle d \rangle}{\hbar} \quad (4.15)$$

sur la distance moyenne $\langle d \rangle$ de l'effet tunnel. Or comme l'énergie totale doit être conservée durant le processus tunnel, cette variation du moment provoque un décalage des positions résonnantes de :

$$\Delta V = \frac{qB^2 \langle d \rangle^2}{m^*} \quad (4.16)$$

On constate que ce décalage en tension est proportionnel à $1/m^*$. Donc le relevé de ΔV en fonction de B permet de distinguer les résonances de trous lourds et de trous légers. En outre, dans la mesure où ΔV reflète l'énergie de résonance et B le moment parallèle, une étude sous champ magnétique permet d'accéder aux branches de dispersion dans le plan des couches [16] ainsi qu'à l'information de non parabolicité.

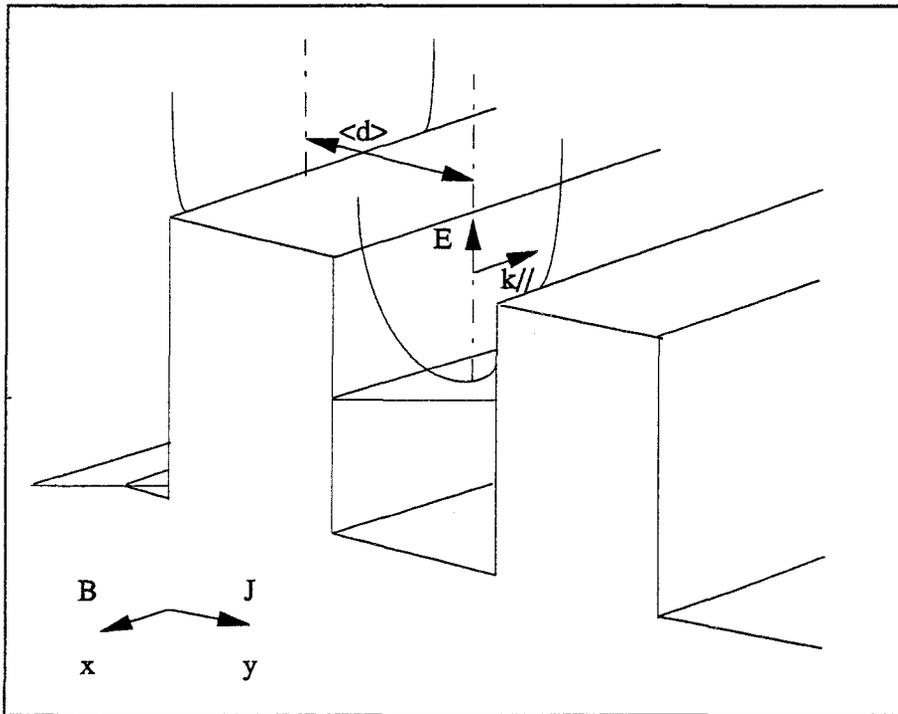


Figure 4.10 Bande de valence schématique (axe des énergies inversé) sous polarisation décrivant l'action du champ magnétique lors du passage par effet tunnel.

4.5.2 Mesures sous champ magnétique entre 0T et 15T

Les mesures sous champ magnétique, à 4K, ont été effectuées au SNCI sur des échantillons de largeur de puits 70 Å et de section $15 \times 15 \mu\text{m}^2$. Les caractéristiques $I(V, B)$ ont été systématiquement relevées pour B variant de 0T à 15T en polarisations directe et inverse. Les résultats, pour un des composants étudiés, sont reportés figure 4.11. Celle-ci donne l'évolution de la courbe courant-tension en fonction du champ magnétique en polarisation inverse (figure 4.11b). Dans ce cas, on observe des décalages en tension pic pouvant atteindre 100 mV. Pour l'autre sens de polarisation, nous avons tracé la dérivée seconde du courant afin de suivre l'évolution en fonction de B des anomalies les moins marquées de la caractéristique $I(V)$ (figure 4.11a). On note également, de façon générale, que les accidents de conduction tendent à s'estomper à champ magnétique très élevé. Ainsi l'effet de RDN, présent à 0T, a disparu à 15T et on ne peut relever sans ambiguïté la position du premier pic en polarisation directe au-dessus de 10T.

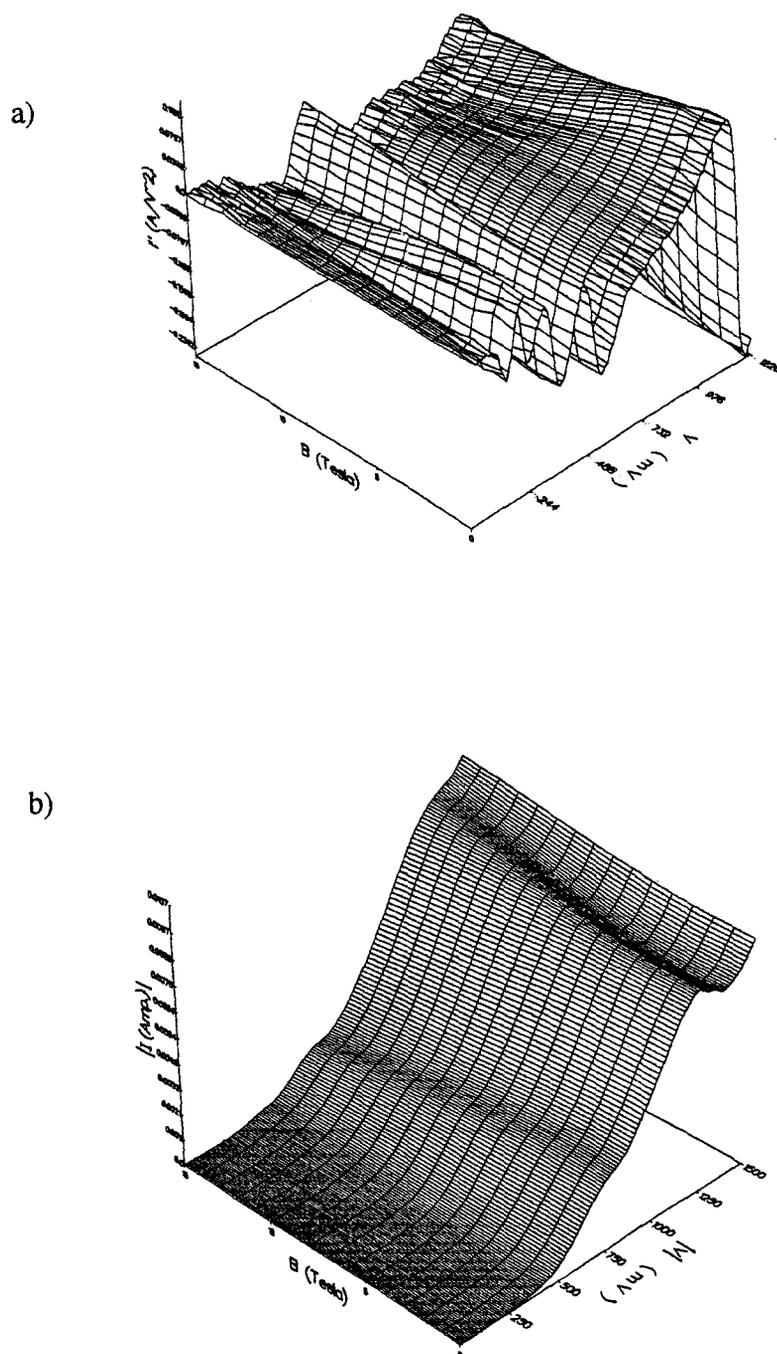


Figure 4.11 Evolutions à 4K des caractéristiques $I(V)$ sous champ magnétique pour une polarisation inverse (b) et de sa dérivée seconde pour une polarisation directe (a).

De ces mesures, nous avons extrait les positions des tensions pics en fonction du champ magnétique. Celles-ci ont été déduites des courbes de dérivées secondes. Le résultat est reporté figure 4.12 pour les deux sens de polarisation. Rappelons que ces graphes reflètent le diagramme de dispersion dans le plan des couches. Or, pour la polarisation inverse, on constate que la résonance d'ordre supérieure se décale vers les tensions croissantes quand B augmente tandis que la résonance inférieure varie en sens opposé. Cela équivaut à une inversion de masse. En revanche, en polarisation directe, les évolutions sont monotones.

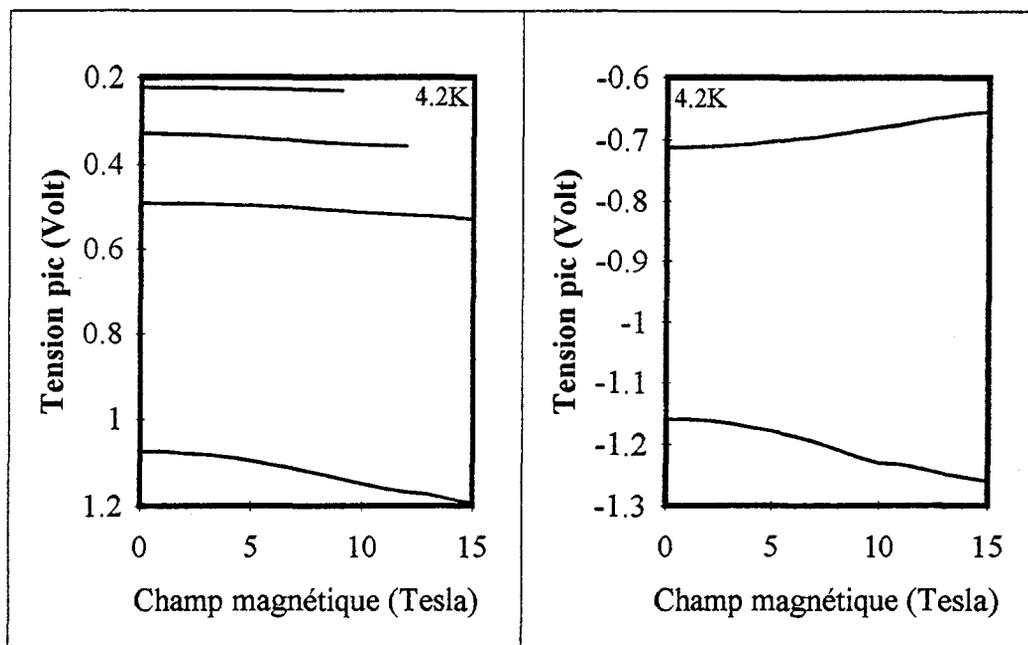


Figure 4.12 Tensions pics expérimentales en fonction du champ magnétique à 4K pour les polarisations directe et inverse.

Par ailleurs, pour mettre en évidence la non parabolicité du diagramme de dispersion, nous avons tracé les écarts en tension ΔV en fonction de B^2 soit $E_{||}(k_{||}^2)$. Ces évolutions sont reportées figure 4.13 pour les polarisations directe et inverse. Dans le premier cas, seules les variations $\Delta V(B^2)$ des deux premiers accidents de conduction sont représentées. On constate que ces courbes présentent un comportement linéaire, soit une dépendance quadratique entre $E_{||}$ et $k_{||}$, jusqu'à un champ magnétique de $\sim 10T$. D'après la figure 4.13, le rapport des pentes est de 3.85 pour une polarisation directe et de 3.2 pour une polarisation inverse. Ces valeurs peuvent être définies comme le rapport entre les masses effectives des particules mises en jeu, conformément à la relation (4.16). Pour un champ magnétique supérieur à 10T, il apparaît un effet de non

parabolicité, la relation $\Delta V(B^2)$ n'est plus linéaire. Celui-ci n'a pu être observé pour la première résonance en polarisation directe car elle n'est plus mesurable.

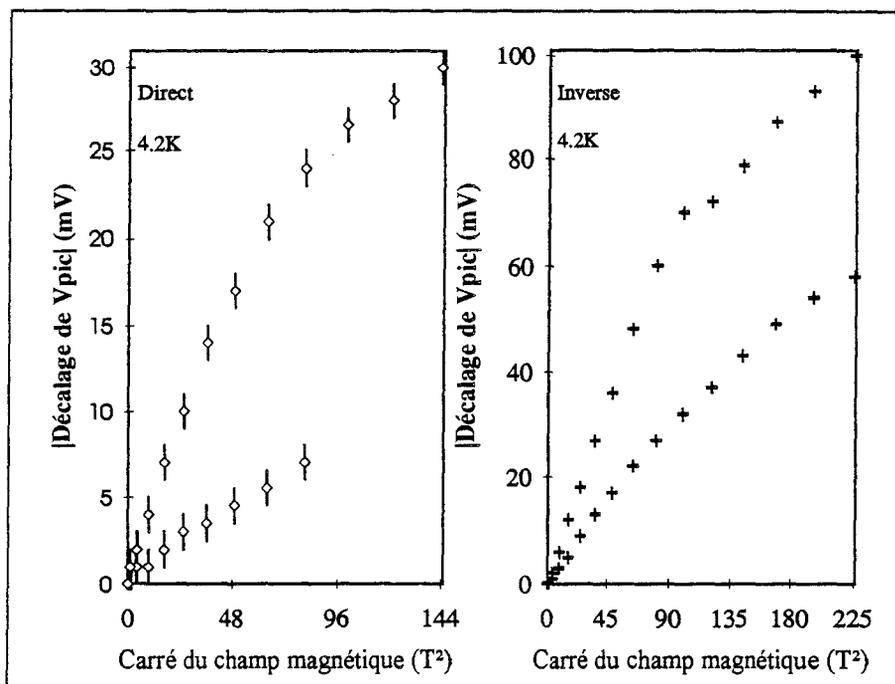


Figure 4.13 Evolution du décalage de tension pic avec le carré du champ magnétique pour les polarisations directe et inverse. Dans le premier cas, seuls les deux premiers pics sont représentés.

4.5.3 Analyse des résultats

Afin d'analyser les résultats précédents, nous avons effectué une étude des états propres de l'hétérostructure. Cela nous a permis d'évaluer la distance $\langle d \rangle$ qui intervient dans les relations (4.15) et (4.16), l'importance de l'effet Stark ainsi qu'étudier les conditions de résonance. Pour cela, nous avons résolu l'équation de Schrödinger, sur l'ensemble de la structure, en considérant le profil de potentiel calculé au paragraphe 4.4.1 et ce pour chaque valeur de polarisation correspondant à une transition résonnante à $B = 0\text{T}$. Cette approximation se justifie par le fait que le champ magnétique ne perturbe pas les états quantiques résultant de l'effet de taille dans la direction perpendiculaire aux couches [16]. Des exemples de fonctions d'onde de trous lourds obtenues dans le puits quantique et la zone d'accumulation sont donnés figure 4.14 pour une tension appliquée de $\sim 1\text{V}$. On note l'existence d'un effet Stark important pour les niveaux quantiques les plus bas tandis que celui-ci peut être négligé pour les états quantiques d'ordres supérieurs. Par ailleurs, une valeur moyenne de 95\AA , relativement peu

dépendante de la tension, a été trouvée pour $\langle d \rangle$. Une estimation par le modèle de Fang et Howard permet d'aboutir aux mêmes conclusions [17].

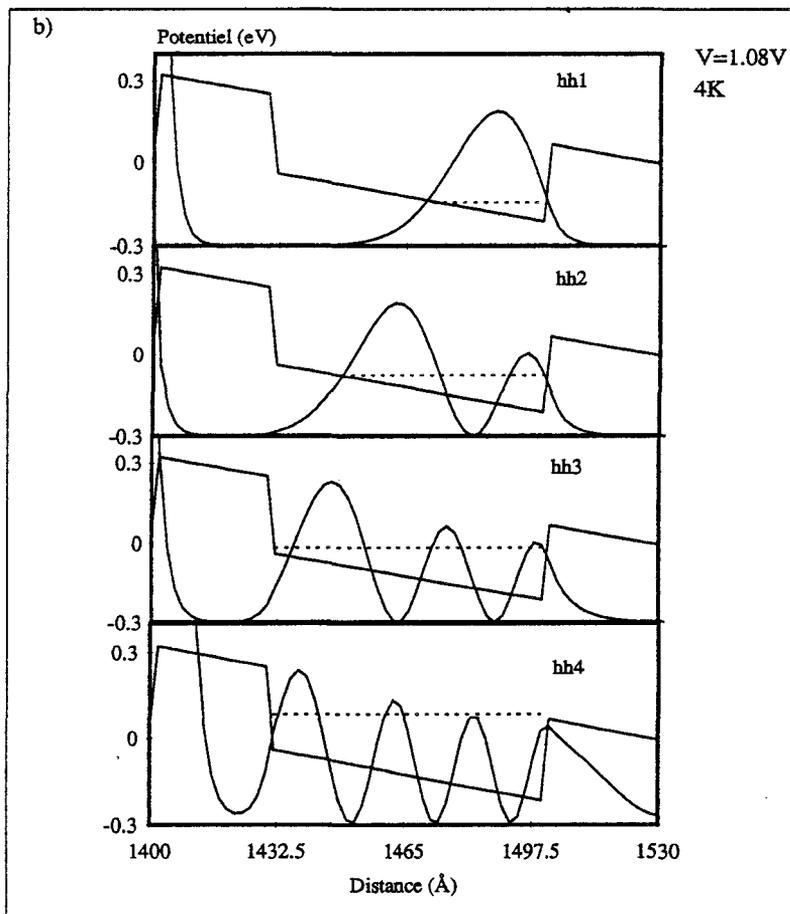
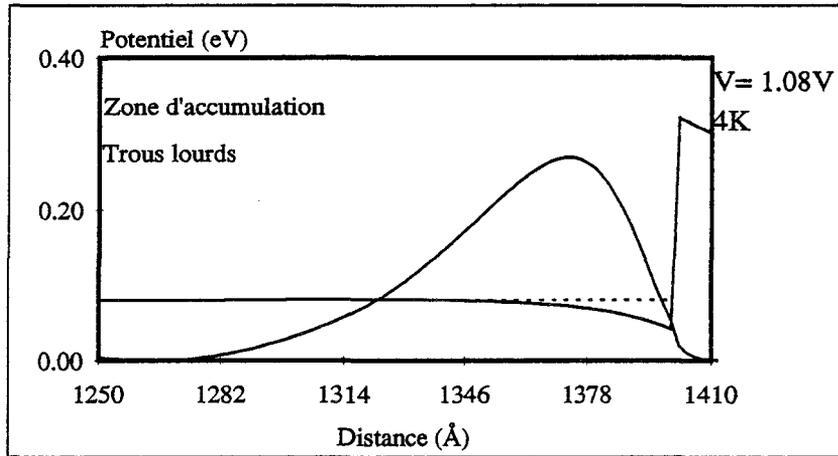


Figure 4.14 Probabilités de présence, calculées pour $V \sim 1V$ et une population incidente de trous lourds, dans la zone d'accumulation et dans le puits.

Rappelons que cette distance $\langle d \rangle$ correspond à la distance entre le maximum de la fonction d'onde dans l'émetteur et le barycentre de la probabilité de présence dans le puits. L'effet Stark étant négligeable pour les niveaux considérés, ce barycentre correspond au milieu du puits.

Si on considère maintenant l'action du champ magnétique sur les particules, on sait que les trous passent par effet tunnel d'un état d'émetteur (E, k_x, k_z) à un état de puits $(E, k_x, k_z - \Delta k_z)$. Cependant, comme on a conservation de l'énergie totale durant le processus tunnel, la variation d'énergie, due à Δk_z , doit être compensée par un décalage de la condition de résonance. Cela s'écrit :

$$E_{acc} - \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m^*} - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m^*} = E_0 - \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m^*} - \frac{\hbar^2}{2m^*} (k_z - \Delta k_z)^2 \quad (4.17)$$

où E_{acc} est le niveau dans la zone d'accumulation et E_0 l'état quantique du puits. La variation du niveau résonnant qui permet d'assurer la condition de conservation est alors :

$$\Delta E = \frac{\hbar^2}{2m^*} (\Delta k_z^2 - 2k_z \Delta k_z) \quad (4.18)$$

A basse température, seuls les états situés sous le niveau de Fermi sont occupés. Or il a été montré [16] que ceux-ci sont centrés autour de $k_z = 0$. Cette valeur correspond à une densité d'états maximale dans l'émetteur, donc au pic de courant. On obtient alors un décalage quadratique du niveau résonnant avec le champ magnétique :

$$\Delta E = \frac{\hbar^2 \Delta k_z^2}{2m^*} = \frac{qB^2 \langle d \rangle^2}{2m^*} eV \quad (4.19)$$

Autour de cette valeur de k_z , la dispersion des trous, qui est fonction du niveau de Fermi, provoque un élargissement de la résonance et tend à faire disparaître la RDN. Ce phénomène peut se comprendre à l'aide de la figure 4.15 qui représente schématiquement les diagrammes de dispersion dans l'émetteur et dans le puits avec l'axe des énergies inversé. Les états occupés d'émetteur sont compris entre $\Delta k_z - k_F$ et $\Delta k_z + k_F$. L'effet tunnel résonnant survient lorsque ces états croisent les niveaux vides

du puits. A $B = 0T$, les paraboles ont la même origine et les états ne sont en regard que pour une valeur de tension. On obtient alors un pic de résonance étroit. Pour $B \neq 0T$, les deux paraboles sont séparées de Δk_z et on constate que l'effet tunnel peut avoir lieu de $\Delta k_z - k_F$ à $\Delta k_z + k_F$ produisant une résonance plus large.

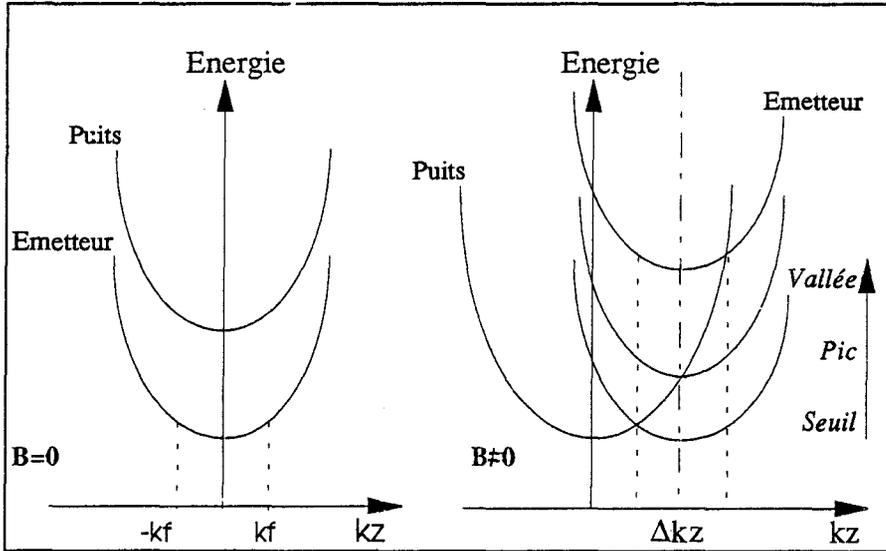


Figure 4.15 Diagrammes de dispersion schématisés illustrant les conditions de conservation lors de l'effet tunnel en présence d'un champ magnétique (axe des énergies inversé).

Quant à la variation de tension correspondant à ΔE , elle est obtenue en supposant que l'énergie de résonance est la moitié de la tension appliquée sur la double barrière. Elle vaut :

$$\Delta V = \frac{qB^2 \langle d \rangle^2}{m^*} \quad (4.20)$$

Il faut ici noter que le décalage des tensions pics expérimentales sera proportionnel à B^2/m^* si le rapport des tensions aux bornes de la double barrière et des tensions totales est conservé lorsque l'on considère deux pics successifs. Cette hypothèse est vérifiée par les calculs de profil de potentiel illustrés figure 4.5. Donc le rapport entre pentes de deux résonances consécutives donne le rapport des masses effectives des porteurs associés. En polarisation directe, on avait trouvé une valeur de 3.85 pour les deux premiers accidents. Or le rapport de masse entre trous lourds et trous légers est de 4 pour du GaInP massif. Celui du GaAs est de ~ 5.2 .

Si à présent on calcule l'évolution des niveaux résonnants en fonction de $k_{||}$, par la procédure décrite au paragraphe 4.4.2, on obtient le diagramme de dispersion visualisé figure 4.16a pour une double barrière nue. Le moment parallèle utilisé est relié au champ magnétique expérimental par la relation (4.15). La figure 4.16b rappelle les variations des énergies de résonance expérimentales en fonction du champ magnétique. Ces énergies sont déduites, selon la procédure décrite au paragraphe 4.4.1, à partir des tensions pics relevées sur les courbes de dérivée seconde. On remarque que ces deux graphes présentent des évolutions similaires. Les différences majeures proviennent de l'absence de dégénérescence expérimentale à $B = 0T$ entre $hh2$ et $lh1$ et de la dispersion théorique plus marquée de ce dernier. Cependant, étant donné la relative nouveauté de ce matériau, la valeur des différents paramètres est encore mal connue, ce qui rend délicat l'interprétation de ces écarts. On note également que cette étude nous permet de lever l'incertitude du paragraphe 4.4.1 sur la nature de certaines résonances. Ainsi les deux premières résonances observées ont été attribuées, respectivement, comme un effet tunnel résonnant par les états $hh2$ et $lh1$.

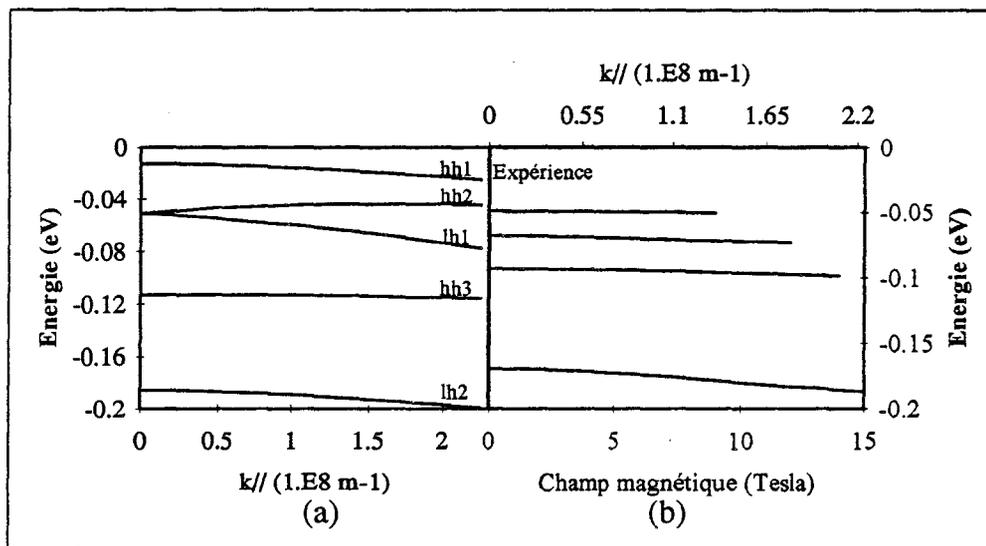


Figure 4.16 a) Diagramme de dispersion pour une structure $Ga_{0.51}In_{0.49}P-30\text{\AA}/GaAs-70\text{\AA}$ à l'équilibre et pour $B = 0T$.

b) Variation de la tension pic en fonction de B . La valeur de $k_{||}$ est calculée par l'équation (4.15). L'énergie de résonance est déduite en adoptant la même démarche qu'au paragraphe 4.4.1.

4.6 Conclusion

En conclusion, nous avons fabriqué une structure double barrière $\text{Ga}_{0.51}\text{In}_{0.49}\text{P}/\text{GaAs}$ dopée p pour observer un effet tunnel résonnant de trous. Les mesures des caractéristiques $I(V)$ à 77K et 4K ont révélé plusieurs anomalies de conduction pour les deux sens de polarisation. Une analyse de ces résultats en négligeant les mélanges trous lourds-trous légers a permis d'interpréter ces pics en tant que transitions résonnantes de trous lourds et de trous légers. Cette étude a été, par ailleurs, suivie par des mesures sous fort champ magnétique. Le décalage des tensions pics avec le champ magnétique, des effets de non parabolicité et d'inversion de masse ont été observés. Un rapport de masse effective de 3.85 a été trouvé. Enfin, nous avons évalué l'importance de l'effet Stark ainsi que la distance moyenne de l'effet tunnel intervenant dans les relations sous champ magnétique par une étude des états propres du système.

Bibliographie Chapitre 4

- [1] H. LEROUX
«Effets tunnel intrabande et interbande dans les hétérostructures III-V de complexité croissante»
Thèse de l'Université de Lille I (1992)
- [2] N. VODJDANI, F. CHEVOIR, D. THOMAS, D. COTE, P. BOIS, E. COSTARD, S. DELAITRE
«Photoluminescence and space charge distribution in a double barrier diode under operation»
Applied Physics Letters 55 (15) (1989) p. 1528
- [3] E.E. MENDEZ, W.I. WANG, B. RICCO, L. ESAKI
«Resonant tunneling of holes in AlAs-GaAs-AlAs heterostructures»
Applied Physics Letters 47 (4) (1985) p. 415
- [4] U. GENNSER, V.P. KESAN, S.S. IYER, T.J. BUCELOT, E.S. YANG
«Resonant tunneling of holes through silicon barriers»
Journal of Vacuum Science and Technology B8 (2) (1990) p. 210
D. X. XU, G.D. SHEN, M. WILLANDER, G.V. HANSSON, J.F. LUY, F. SCHÄFFLER
«Variations of resonant tunneling properties with temperature in strained Si_{1-x}Ge/Si double barrier structures»
Applied Physics Letters 58 (22) (1991) p. 2500
- [5] R. BERESFORD, L.F. LUO, W.I. WANG
«Resonant tunneling of holes in AlSb/GaSb/AlSb double barrier heterostructures»
Applied Physics Letters 55 (7) (1989) p. 694
- [6] S.Y. LIN, A. ZASLAVSKY, K. HIRAKAWA, D.C. TSUI
«Subband dispersion of holes in AlAs/In_{0.1}Ga_{0.9}As/AlAs strained layer quantum wells measured by resonant magnetotunneling»
Applied Physics Letters 60(5) (1992) p. 601

- [7] D. LIPPENS, P. MOUNAIX, V. SADAUNE, M.A. POISSON, C. BRYLINSKI
«Resonant tunneling of holes in Ga_{0.51}In_{0.49}P/GaAs double barrier heterostructures»
Journal of Applied Physics 71 (4) (1992) p. 2057
- [8] V. SADAUNE, D. LIPPENS, F. ARISTONE, D.K. MAUDE, J.C. PORTAL, M.A. di FORTE POISSON, C. BRYLINSKI
«Resonant magneto-tunneling of holes in GaAs-Ga_{0.51}In_{0.49}P quantum well heterostructures»
Actes de la 5th International Conference on Indium Phosphide and Related Materials (1993) p. 723
- [9] D. BISWAS, N. DEBBAR, P. BHATTACHARYA, M. RAZEGHI, M. DEFOUR, F. OMNES
«Conduction and valence band offsets in GaAs/Ga_{0.51}In_{0.49}P single quantum wells grown by metalorganic chemical vapor deposition»
Applied Physics Letters 56 (9) (1990) p. 833
- [10] A.B. CHEN, A. SHER
«Electronic structure of pseudobinary semiconductor alloys Al_xGa_{1-x}As, GaP_xAs_{1-x} and Ga_xIn_{1-x}P»
Physical Review B 23 (10) (1981) p. 5360
- [11] M. RAZEGHI, M. DEFOUR, F. OMNES, M. DOBERS, J.P. VIEREN, Y. GULDNER
«Extremely high electron mobility in a GaAs-Ga_xIn_{1-x}P heterostructure grown by metalorganic chemical vapor deposition»
Applied Physics Letters 55 (5) (1989) p. 457
- [12] S.L. DELAGE, M.A. di FORTE POISSON, H. BLANCK, C. BRYLINSKI, E. CHARTIER, P. COLLOT
«First microwave characterisation of LP-MOCVD grown GaInP/GaAs self-aligned HBT»
Electronics Letters 27 (3) (1991) p. 253
- [13] C.Y.P. CHAO, S.L. CHUANG
«Resonant tunneling of holes in the multiband effective mass approximation»
Physical Review B 43 (9) (1991) p. 7027

- [14] J.B. XIA
«Theory of hole resonant tunneling in quantum well structures»
Physical Review B 38 (12) (1988) p. 8365
- [15] J.M. LUTTINGER
«Quantum theory of cyclotron resonance in semiconductors : General theory»
Physical Review 102 (4) (1956) p. 1030
- [16] R.K. HAYDEN, D.K. MAUDE, L. EAVES, E.C. VALADARES, M. HENINI, F.W. SHEARD, O.H. HUGHES, J.C. PORTAL, L. CURY
«Probing the hole dispersion curves of a quantum well using resonant magnetotunneling spectroscopy»
Physical Review Letters 66 (13) (1991) p. 1749
- [17] F. STERN, W.E. HOWARD
«Properties of semiconductor surface inversion layers in the electric quantum limit»
Physical Review 163 (3) (1967) p. 816

Chapitre 5

Structures à réduction de dimensions

Chapitre 5 Structures à réduction de dimensions

5.1 Introduction

Les progrès dans les technologies de fabrication permettent désormais de réaliser des composants à hétérostructures de très faibles dimensions latérales, ce qui provoque des effets de quantification de l'énergie dans ces directions. Ainsi, on peut obtenir des fils quantiques pour lesquels ne subsiste qu'un degré de liberté, mais aussi des boîtes quantiques où le gaz de porteurs est confiné dans les trois directions de l'espace.

Cette recherche de systèmes à dimensions réduites vise à modifier la densité d'états. Dans le cas d'une boîte quantique, que l'on nomme aussi super-atome, celle-ci se présente sous forme d'un peigne de Diracs correspondant aux états propres. Cette modification de la densité d'états se répercute sur les propriétés de transitions inter-sousbandes. En effet, une quantification additionnelle supprime les branches de dispersion qui favorisaient ces transitions. Par ailleurs, la réduction de dimensions entraîne un changement de fonction d'alimentation. Cela existait déjà pour les systèmes 1D possédant un prépuits quantique discrétisant l'énergie longitudinale des porteurs incidents. Il a été montré [1] que cette distribution en énergie des charges, à très basse température, était uniforme entre le bord de bande et le niveau de Fermi pour un fil quantique et linéaire pour un système 3D.

Enfin, si l'on garde une cohérence suffisante de la phase des ondes associées aux porteurs, il devient possible de réaliser à l'état solide, les fonctions de l'électronique hyperfréquence qui font intervenir les notions de guidage, de couplage, d'interférence, d'atténuation et de déphasage. Quelques exemples de réalisation sont donnés dans les articles de Reed et al [2] et de Weisbuch [3].

Technologiquement, ces structures à réduction de dimensions sont réalisées en confinant latéralement un gaz d'électrons 2D obtenu par hétérojonction à modulation de dopage, par dopage planaire ou par hétérostructure double barrière. Le confinement latéral peut être fait par un champ électrostatique induit par des grilles à la surface de l'hétérostructure [4] [5] [6], par une zone de désertion créée par accrochage du niveau de Fermi à la surface libre du semiconducteur [7] [8] ou par implantation [9].

Pour modéliser ces nouveaux composants, il nous a fallu étendre les algorithmes développés pour les structures unidimensionnelles. Dans ce but, nous avons calculé le profil de potentiel de ces systèmes. Parallèlement, nous avons déterminé les états propres et estimé l'allure des caractéristiques de courant de ces structures.

5.2 Détermination du potentiel électrostatique

La première difficulté à laquelle nous sommes confrontés est la description simultanée des zones quantiques et des zones d'accès. En effet, nous considérons ici des systèmes ouverts au sens où des transferts de charges peuvent s'instaurer entre les zones de confinement et leur environnement. Certains auteurs ont choisi de traiter ces zones séparément [10]. Pour notre part, nous avons opté pour une résolution auto-cohérente de l'équation de Poisson dans l'approximation de Thomas-Fermi. Cette méthode, outre sa simplicité, garantit notamment la neutralité des charges aux limites et donne des profils de potentiel réalistes, comme l'a démontré Frenley [11]. Par ailleurs des calculs effectués par Poisson-Schrödinger ont montré que, même pour des systèmes fortement quantifiés où l'on a peu de niveaux sous l'énergie de Fermi, les écarts sur le potentiel obtenu par un calcul semi-classique ou par un traitement quantique sont faibles [12]. D'autre part, nous garderons comme précédemment, l'hypothèse de zones d'accès en quasi-équilibre.

Nous allons à présent décrire les techniques de modélisation utilisées pour résoudre numériquement l'équation de Poisson dans des systèmes à un, deux ou trois degrés de confinement. Pour cela, nous allons d'abord commencer par un bref descriptif des différentes méthodes de simulation numérique.

5.2.1 Différentes méthodes de simulation

Pour résoudre numériquement l'équation de Poisson, nous avons le choix entre la méthode des éléments finis et celle des différences finies. Comme les contours des zones actives des structures simulées sont relativement simples, nous avons choisi la méthode des différences finies. Ce choix nous amène à résoudre un système d'équations linéaires. Là encore, nous avons la possibilité d'utiliser deux types de méthodes :

- Les méthodes itératives comme par exemple celle de la relaxation qui consiste, à chaque itération, à calculer la nouvelle valeur de la fonction de manière à annuler le résidu. Elles sont simples à programmer avec toutefois des problèmes de convergence dans certains cas.
- Les méthodes directes telle que la FACR («Fast Fourier Analysis and Cyclic Reduction») [13]. Le système d'équations matricielles est alors transformé par décomposition en série de Fourier en un nouveau système d'équations arithmétiques des harmoniques. L'algorithme correspondant est complexe et manque de flexibilité, le maillage devant être uniforme avec un nombre de points puissance de deux. Il existe aussi la technique du double balayage matriciel développée au laboratoire pour résoudre l'équation de Poisson couplée à l'équation de Boltzmann [14]. A partir de la charge en tout point du maillage, on détermine le potentiel correspondant en effectuant deux séries d'opérations sur le système matriciel.

Dans la suite de ce chapitre, nous allons successivement utiliser cette dernière méthode, double balayage matriciel, ainsi que celle de la relaxation pour déterminer le profil de potentiel de structures de complexité croissante.

5.2.2 Résolution de l'équation de Poisson 1D

Précédemment, un algorithme permettant la résolution de l'équation de Poisson 1D avait été réalisé au sein de l'équipe [15]. La détermination du profil de potentiel dans la zone d'émetteur se faisait en supposant que celui-ci était égal à la superposition des potentiels d'accumulation et de diffusion, calculés par traitement séparé. Cette méthode s'est révélée adaptée au cas des espaceurs étendus. Néanmoins, elle trouve sa limitation lorsqu'on réduit la taille de ces derniers ou quand on insère un prépuits. Nous

avons donc développé un programme calculant le profil de potentiel sur l'ensemble de la structure par double balayage matriciel.

- **Procédure numérique**

La densité de porteurs libres, $n(z)$, est donnée, dans l'approximation de Thomas-Fermi, par :

$$n(z) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{m^* k_b \theta}{\pi \hbar^2} \right)^{3/2} \int_0^{\infty} \frac{\left(\frac{E - E_c(z)}{k_b \theta} \right)^{1/2}}{1 + \exp\left(\frac{E - E_F}{k_b \theta} \right)} dE \quad (5.1)$$

où θ est la température et $E_c(z) = qV(z) + \Delta E_c(z)$ la bande de conduction locale égale au potentiel électrostatique $V(z)$ et à la discontinuité de bande de conduction $\Delta E_c(z)$. Le potentiel électrostatique $V(z)$ est obtenu par intégration de l'équation de Poisson :

$$\frac{\partial^2 V(z)}{\partial z^2} = \frac{q}{\epsilon} (N_D(z) - n(z)) \quad (5.2)$$

où $N_D(z)$ est la distribution spatiale de donneurs. Cette équation est discrétisée au moyen d'un développement en série de Taylor de $V(z)$. En chaque point du maillage, on obtient :

$$V_{i+1} - 2V_i + V_{i-1} = Q_i \quad \text{avec} \quad Q_i = \frac{q\Delta z^2}{\epsilon} (N_{D_i} - n_i) \quad (5.3)$$

où Δz représente la distance entre deux noeuds du maillage. L'ensemble de ces équations donne un système à matrice tridiagonale que l'on peut résoudre par la méthode du pivot également appelée méthode du double balayage ou de Choleski. Les conditions aux limites de la structure, en $i = 1$ ou N , sont fixées par le potentiel appliqué sur les électrodes. La première valeur V_1 est donc connue et peut être reportée dans la seconde équation. On obtient ainsi V_2 en fonction de V_3 . De la même manière, on exprime chaque inconnue en fonction de la suivante. On a alors :

$$V_{i-1} = A_{i-1} V_i + B_{i-1} \quad (5.4)$$

Si on reporte cette valeur dans la $i^{\text{ème}}$ équation, on détermine les expressions de A_i et B_i :

$$\begin{cases} A_i = -(A_{i-1} - 2)^{-1} \\ B_i = -(Q_i - B_{i-1}) A_i \end{cases} \quad (5.5)$$

(A_1, B_1) étant donnés par les conditions aux limites, on peut calculer les couples (A_i, B_i) , $i = 2$ à $N-1$, de proche en proche. On effectue ensuite un second balayage de $i = N-1$ à 2 pour déterminer V_i , sachant que V_N est fixé par la valeur du potentiel sur l'électrode de droite.

Le profil de potentiel obtenu permet de recalculer la densité d'électrons $n(z)$. Cette dernière va, à son tour, redéfinir une valeur du potentiel. La procédure s'arrête lorsque la différence entre deux itérations successives est inférieure à la précision désirée.

C'est par ce programme que nous avons calculé les profils de potentiel des structures puits-double barrière présentés dans cette thèse. A titre de dernier exemple, nous allons à présent l'appliquer au calcul de potentiel dans la direction perpendiculaire à la surface d'une hétérostructure de type transistor MODFET.

- **Accès à un gaz d'électrons bidimensionnel**

Il est désormais possible de connecter un gaz 2D, qui se crée à l'hétérojonction d'un transistor à modulation de dopage, par des contacts ohmiques peu diffusants [16]. Les longueurs de diffusion sont alors de quelques dizaines de nanomètres, ce qui repose le problème de l'accès au canal. Lors de cette injection, dans la direction de croissance, les porteurs doivent traverser différentes régions ayant chacune leur résistance propre. Il s'agit d'abord de la résistance parasite de contact qui dépend du matériau utilisé pour la réalisation de la couche en tête et de la qualité de la métallisation. Elle ne sera pas considérée ici. On a ensuite une résistance tunnel qui correspond à la barrière que doivent franchir les porteurs pour accéder au canal. C'est cette dernière que l'on va tenter d'optimiser.

L'accès au canal au travers d'une barrière dopée a, jusqu'ici, été traité comme un processus séquentiel à travers deux doubles hétérojonctions séparées [17]. Or pour les

largeurs de barrières utilisées, on constate que le système est semblable à une structure double barrière - puits parabolique donnant lieu à un effet tunnel résonnant. Afin d'illustrer ce phénomène, nous allons dans un premier temps calculer les variations de la bande de conduction dans la direction perpendiculaire aux couches.

La structure étudiée est constituée d'une couche en tête de 500 Å dopée $3.10^{18} \text{ cm}^{-3}$ en $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$ suivie d'une barrière en $\text{Al}_{0.48}\text{In}_{0.52}\text{As}$, de même dopage, de 250 Å plus 25 Å non dopé. Ceci est complété par une couche formant le canal de 5000 Å en $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$ non dopé. Les masses effectives sont prises égales à $0.083 m_0$ pour l' InAlAs et à $0.042 m_0$ pour l' InGaAs [18] et la discontinuité de bande de conduction à 0.5 eV [19]. Le résultat de la simulation est donné figure 5.1. On constate que la diffusion des charges conduit à la formation de zones d'accumulation et de désertion fortement marquées. Dans notre cas, cela provoque la formation d'un puits quasi-parabolique dans la barrière, légèrement dissymétrique de par la conception du composant. A partir de ce profil de potentiel, nous avons calculé la probabilité d'accéder au gaz 2D par un transport perpendiculaire en résolvant l'équation de Schrödinger. Le spectre de transmission obtenu est visualisé figure 5.2. On observe que celui-ci est fondamentalement différent de celui d'une simple barrière. Un mécanisme d'effet tunnel résonnant est clairement mis en évidence. Chaque pic de transmission (149 meV, 193 meV, 241 meV, 293 meV) correspond à un état propre du puits parabolique avec un espacement peu différent de celui d'un oscillateur harmonique. Afin de déterminer la conductivité, il nous faut à présent calculer le courant tunnel. Pour cela nous utilisons la procédure décrite précédemment au chapitre 1. Les densités de courant obtenues indiquent que le système est fortement conducteur. Pour quantifier cet état de forte conduction nous avons défini, quand la tension tend vers zéro, la résistivité. Les variations de celle-ci sont données figure 5.3 pour différentes largeurs de barrière L_B . La résistivité augmente dans un premier temps. Cela se comprend par le fait que la barrière est totalement désertée. De ce fait, on est dans le cas d'une simple barrière traversée par effet tunnel. Si L_B augmente, des niveaux apparaissent alors dans le puits parabolique qui se crée. On a alors un effet tunnel résonnant qui fait chuter la résistivité. Pour des barrières plus larges, on obtient une condition de bande plate au milieu du puits. Les niveaux se resserrent avec, cependant, conservation des propriétés de conductivité et une résistivité quasi constante avec L_B . Ce résultat montre qu'il existe une largeur de barrière limite (250 Å pour la structure considérée), afin que l'accès au gaz se fasse dans de bonnes conditions.

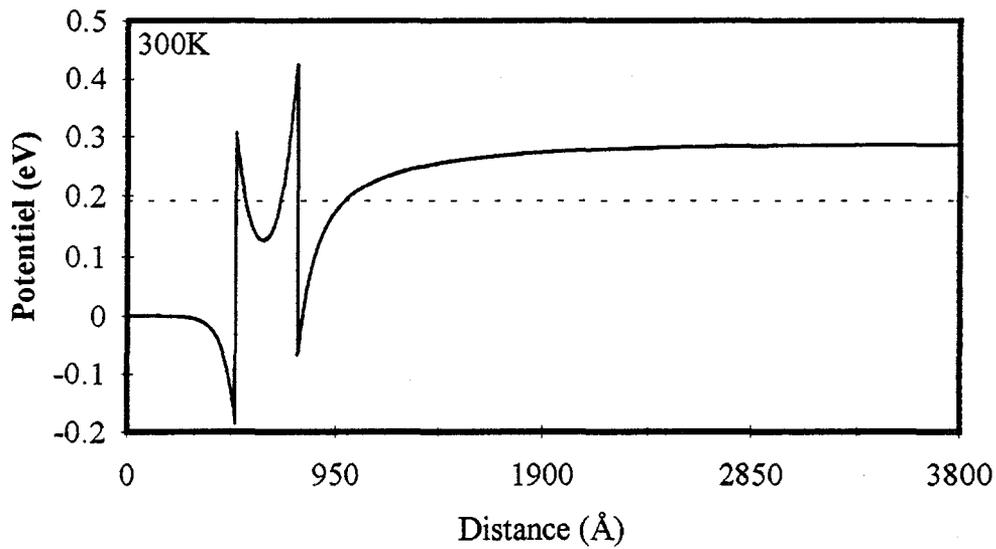


Figure 5.1 Profil de potentiel à 300K dans la direction perpendiculaire aux couches de la structure : $500\text{\AA}-\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}-3.10^{18}\text{ cm}^{-3}/250\text{\AA}-\text{In}_{0.52}\text{Al}_{0.48}\text{As}-3.10^{18}\text{ cm}^{-3}/25\text{\AA}-\text{In}_{0.52}\text{Al}_{0.48}\text{As}/5000\text{\AA}-\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$. Le trait pointillé représente le niveau de Fermi.

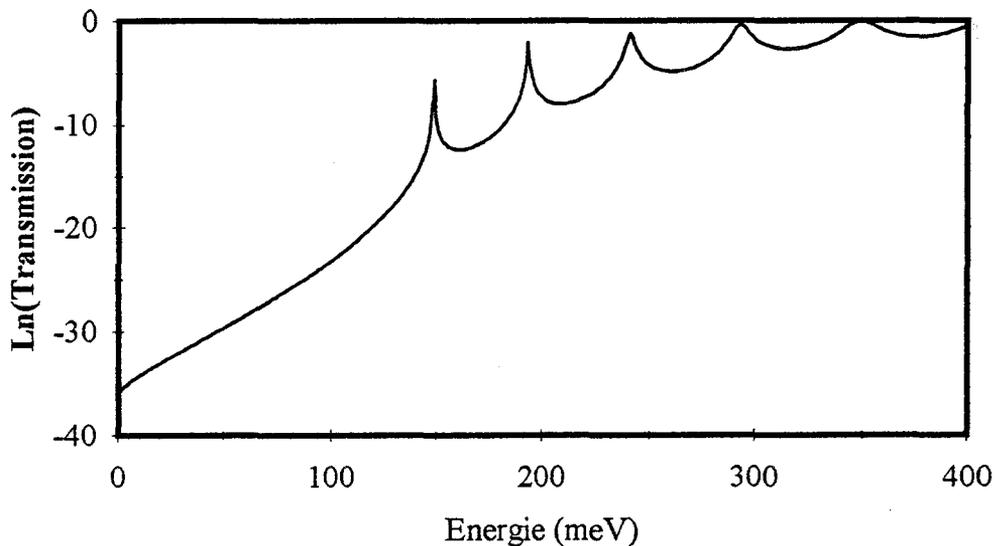


Figure 5.2 Probabilité de transmission en fonction de l'énergie à travers la barrière d' $\text{In}_{0.52}\text{Al}_{0.48}\text{As}$ dopée.

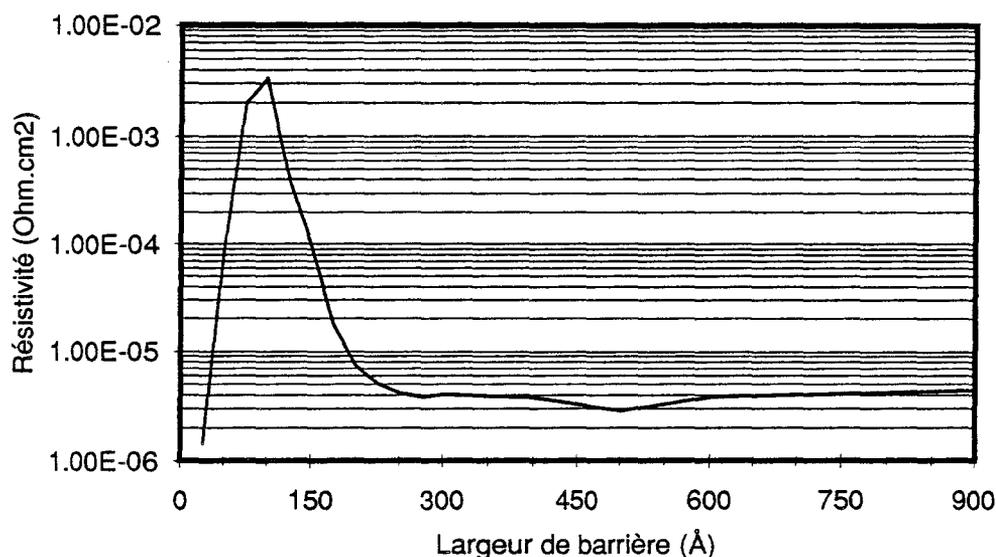


Figure 5.3 Evolution de la résistivité tunnel en fonction de la largeur de barrière pour la structure précédemment décrite.

En conclusion, nous avons mis en évidence que le transport vertical à travers une double barrière épaisse dopée pouvait être assisté par un mécanisme d'effet tunnel résonnant. Pour cela, il faut que la barrière ait une largeur suffisante pour que l'on puisse obtenir un profil de potentiel de type double barrière-puits de potentiel électrostatique.

5.2.3 Résolution de l'équation de Poisson 2D

Plusieurs possibilités existent pour accroître le degré de confinement des électrons. En outre, dans les transistors à effet tunnel latéral, les porteurs sont confinés par une hétérostructure à modulation de dopage dans une configuration bigrille. On profite, alors de la formation d'un gaz électronique à haute mobilité. Des grilles, de dimensions nanométriques, y induisent un système puits-double barrière électrostatique. La polarisation appliquée sur ces grilles permet de contrôler extérieurement la hauteur des barrières. Ce confinement électrostatique peut être réalisé dans plusieurs directions de l'espace créant ainsi des structures comparables à des fils et boîtes quantiques. Pour notre part, nous allons étudier ici des systèmes 2D. De ce fait, la détermination du profil de potentiel de ces structures passe par l'intégration de l'équation de Poisson bidimensionnelle.

Pour effectuer cette résolution, nous avons pris les mêmes hypothèses qu'au paragraphe 5.2.1, à savoir que la densité de charges mobiles est approximée par une distribution de type Thomas-Fermi 2D. Les structures que nous allons traiter ayant une configuration rectangulaire, nous travaillerons en coordonnées cartésiennes :

$$\frac{\partial^2 V(x,y)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 V(x,y)}{\partial y^2} = \frac{q}{\epsilon} [N_D(x,y) - n(x,y)] \quad (5.6)$$

où $V(x,y)$ est le potentiel électrostatique, $N_D(x,y)$ le profil de dopage et $n(x,y)$ la densité de charges en chaque point du maillage. La modélisation numérique devra prendre en compte, ici, deux types de conditions aux limites :

- la présence d'électrodes portées à une polarisation donnée (Condition de Dirichlet) ;
- l'existence de surfaces libres où la valeur du champ électrique est fixée (Conditions de Neumann).

Pour résoudre l'équation (5.6), nous la discrétisons au moyen d'un développement en série de Taylor de $V(x,y)$ limité aux dérivées secondes. Le potentiel au point (i,j) peut alors être relié à ses quatre plus proches voisins. On en déduit l'équation aux différences finies de l'équation de Poisson 2D :

$$V_{i,j+1} + tV_{i+1,j} - 2(1+t)V_{i,j} + tV_{i-1,j} + V_{i,j-1} = Q_{i,j} \quad (5.7)$$

avec

$$t = \left(\frac{\Delta x}{\Delta y}\right)^2, \quad Q_{i,j} = \frac{q}{\epsilon} [N_{D,i,j} - n_{i,j}] \Delta x^2$$

où Δx et Δy sont respectivement la distance entre deux noeuds du maillage suivant l'axe x ou y . Cette équation est valable pour tout (x,y) dans le contour choisi. D'autre part, les valeurs du potentiel sont fixées sur les bords du composant simulé par les conditions aux limites. On obtient donc un système matriciel que l'on va résoudre par la méthode du double balayage matriciel [14]. Nous allons, dans ce qui suit, expliquer brièvement cette procédure.

Si l'on écrit l'équation (5.7) à une abscisse j donnée, on définit un vecteur $[V_j]$ qui dépend du vecteur colonne en $j+1$. On peut donc écrire, comme dans le cas 1D :

$$[V_j] = [D_j] [R_j] [V_{j+1}] + [C_j] \quad (5.8)$$

où $[R_j]_{N \times N}$ est analogue à une matrice identité, mis à part les premier et dernier éléments de la diagonale qui sont nuls. $[R_j]_{N \times N}$ est de dimension $N \times N$, N étant le nombre de mailles dans la direction verticale. $[D_j]_{N \times N}$ est une matrice dont les éléments sont calculés à partir de la géométrie du système. $[C_j]_N$ est un vecteur colonne, fonction de $[C_{j-1}]_N$ et de la densité de charges ionisées et libres. En pratique, le programme calcule, à chaque itération, les vecteurs $[C_j]_N$ pour $j \in [1, N]$ puis détermine $[V_j]_N$ pour j variant de N à 1, ce qui fixe une nouvelle distribution des porteurs. On réitère ce calcul jusqu'à la convergence du potentiel.

Pour valider notre procédure de calcul, nous avons simulé le transistor à effet tunnel résonnant latéral $\text{In}_{0.52}\text{Al}_{0.48}\text{As}/\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$ fabriqué par Randall et al [6]. Les paramètres de l'hétérostructure sont résumés figure 5.4. La séparation entre les contacts de source et de drain est de 20 μm . Les barrières électrostatiques latérales sont créées au moyen de deux grilles de longueur 600 Å espacées également de 600 Å.

$\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$	$1.10^{18} \text{ cm}^{-3}$	80 Å
$\text{In}_{0.52}\text{Al}_{0.48}\text{As}$	$1.10^{18} \text{ cm}^{-3}$	300 Å
$\text{In}_{0.52}\text{Al}_{0.48}\text{As}$	Nid	50 Å
$\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$	Nid	300 Å
$\text{In}_{0.52}\text{Al}_{0.48}\text{As}$	Nid	6000 Å
Substrat InP Semi-Isolant		

Figure 5.4 Séquence de croissance de l'hétérostructure $\text{InGaAs}/\text{InAlAs}$ du transistor à effet tunnel résonnant latéral.

Le profil de potentiel, calculé à l'équilibre, pour cette structure est visualisé figure 5.5. Les conditions aux limites adoptées sont les suivantes.

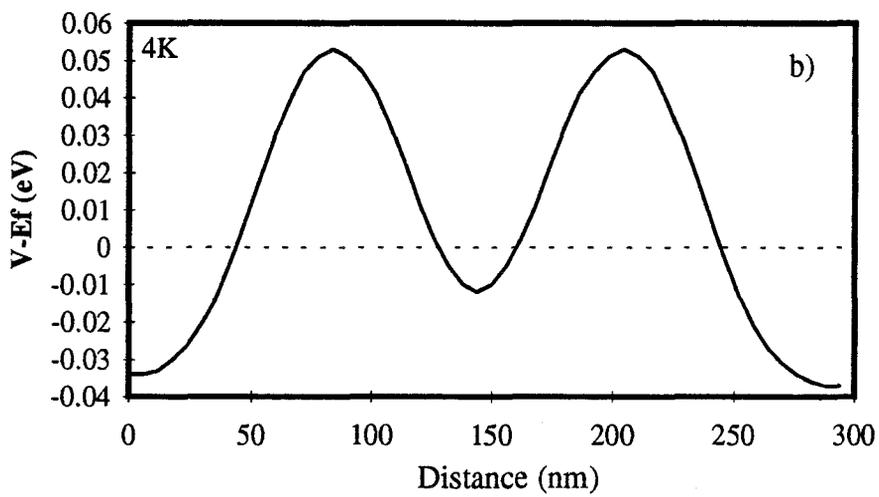
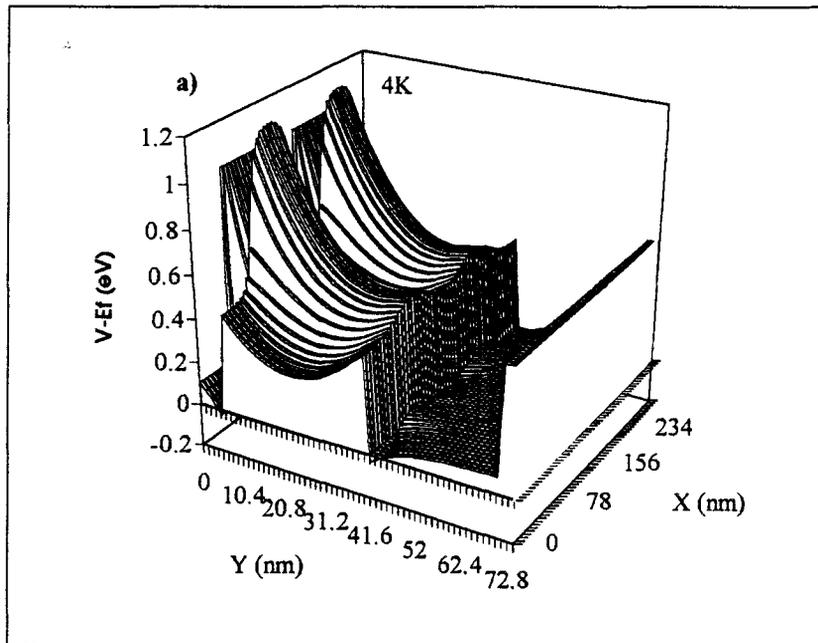


Figure 5.5 a) Profil de potentiel auto-cohérent d'un transistor à effet tunnel résonnant latéral à 4K.
 b) Profil de potentiel latéral à $\sim 40 \text{ \AA}$ de l'interface AlInAs/GaInAs.

Le potentiel de grille est de 1 V. Sur les surfaces extérieures, le potentiel est fixé par le niveau d'accrochage de Fermi et vaut 0.2 eV. Sur les bordures latérales et inférieures, nous avons choisi une condition de champ nul car on est loin de la zone active.

On constate, figure 5.5a, que l'accrochage du niveau de Fermi provoque une courbure de bande en surface, soit une zone de charge d'espace supplémentaire. Cet effet est à prendre en compte car il peut désertir le canal d'électrons. Par ailleurs, on note que les grilles ont induit, dans le canal, un système double barrière-puits quasi-parabolique. Ces variations latérales du potentiel, à une distance de ~ 40 Å de l'hétéro-interface, sont reproduites figure 5.5b. On remarque également que la courbure latérale du potentiel est rapidement nulle. Cela justifie, a posteriori, la définition de l'espace de simulation.

Si maintenant on s'intéresse aux états propres, il nous faut résoudre l'équation de Schrödinger 2D pour un profil de potentiel relativement complexe. En l'absence d'une telle solution, on peut évaluer les niveaux quantiques en supposant que l'état du système résulte des potentiels vertical et latéral pris séparément. Les états propres sont alors égaux à la somme des niveaux quantiques de l'hétérostructure et de la double barrière électrostatique. Pour déterminer ces derniers, nous avons effectué le calcul de la transmission sur le profil de potentiel existant à ~ 40 Å de l'interface AlInAs/GaInAs. Cette distance équivaut à la profondeur où la fonction d'onde du niveau fondamental de l'hétérostructure, et ainsi la densité de porteurs libres, est maximale. Dans ce cas, on trouve un espacement ΔE entre les niveaux de ~ 9 meV. Or Randall et al [6] ont mesuré, à 4.2K, des pics dans le courant drain-source, en fonction de la tension drain-source, caractéristique d'un effet tunnel résonnant. Ces pics sont expérimentalement espacés de 17 meV soit $\sim 2 \Delta E$. Ceci est conforme à l'hypothèse que, pour des structures symétriques, à champ uniforme, les tensions de résonance sont séparées de deux fois l'écart entre les niveaux.

Après avoir présenté un algorithme de résolution de l'équation de Poisson en coordonnées cartésiennes, nous allons, dans ce qui suit, nous intéresser à des systèmes à symétrie cylindrique.

5.2.4 Résolution de l'équation de Poisson cylindrique

Une autre façon d'introduire un potentiel de confinement latéral est de fabriquer des hétérostructures double barrière ayant des mésas d'isolation de très faibles dimensions. Ces systèmes sont généralement cylindriques. Ils utilisent l'accrochage du niveau de Fermi aux surfaces libres du composant pour confiner latéralement un gaz d'électrons [7] [8]. Si le principe est simple, on se sert du potentiel de désertion à l'interface air-semiconducteur, en pratique la conception pose un certain nombre de problèmes. En premier lieu, le diamètre des structures doit obéir aux deux critères contraires suivant : amplifier les effets quantiques par une réduction des longueurs tout en évitant la désertion totale par des dimensions trop petites. D'autre part, on se heurte au fait que l'on jouxte des zones de dimensionnalité et de dopage différents. Ainsi la double barrière est assimilable à une boîte quantique tandis que les zones d'accès sont comparables à des fils quantiques.

La détermination du profil de potentiel dans ce type de système se fait par résolution de l'équation de Poisson en coordonnées cylindriques. L'équation à résoudre, sachant que l'on a une symétrie de révolution, s'écrit :

$$\frac{\partial^2 V}{\partial z^2} + \frac{\partial^2 V}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial V}{\partial r} = \frac{q}{\epsilon} [N_D(r,z) - n(r,z)] \quad (5.9)$$

où r représente la composante radiale et z la composante perpendiculaire à l'hétérostructure. Les autres variables gardent leur définition antérieure. Pour déterminer numériquement la solution de l'équation (5.9), nous quadrillons comme précédemment le plan (r, z) par des lignes et des colonnes indexées respectivement I et J . Cela nous permet de transcrire l'expression (5.9) en une équation aux différences finies :

$$V(I, J-1) + V(I, J+1) + s \frac{2I-1}{2I-2} V(I+1, J) + s \frac{2I-3}{2I-2} V(I-1, J) - 2(s+1)V(I, J) - Q(I, J) = 0 \quad (5.10)$$

avec $Q(I, J) = \frac{q}{\epsilon} [N_D(I, J) - n(I, J)] \Delta z^2$, $s = \left(\frac{\Delta z}{\Delta r}\right)^2$, Δz et Δr étant les dimensions de la maille élémentaire suivant les directions z et r . Sachant que les valeurs de V sont connues sur les limites et que l'équation (5.10) est valable pour tout autre noeud, nous avons résolu le système par la méthode de la relaxation. Nous

commençons par initialiser le système à des valeurs supposées proches de la solution finale. Dans notre cas, ceci est réalisé à l'aide d'un calcul 1D selon r . Puis on parcourt le réseau selon un ordre invariable. En chaque noeud, on détermine le résidu, valeur donnée par l'équation (5.9) quand le potentiel est différent de la solution et on corrige V de manière à l'annuler. On réitère ce calcul jusqu'à ce que le résidu soit inférieur à la précision désirée.

Cet algorithme a été appliqué à une hétérostructure, confinée latéralement par accrochage du niveau de Fermi, constituée d'un puits en GaAs de 40 Å intercalé entre deux barrières de $\text{Ga}_{0.6}\text{Al}_{0.4}\text{As}$ de 60 Å. Cette zone active est encadrée par deux espaces de 96 Å en GaAs. Toutes ces couches sont non dopées. Enfin une zone en GaAs dopée $2 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ termine la structure. Le diamètre du méssa est de 1000 Å. Les conditions aux limites prises pour ce problème sont les suivantes :

- Au centre de la colonne, on suppose que le champ électrique est nul de par la symétrie cylindrique du système.
- Au niveau des contacts, nous devons prendre en compte l'accrochage du niveau de Fermi. Cela introduit une variation radiale du potentiel. De ce fait, les conditions aux limites sont données par la résolution de l'équation de Poisson 1D en coordonnées cylindriques.
- Sur la surface extérieure, interface air/semiconducteur, nous avons imposé la valeur du niveau d'accrochage de Fermi, plus la discontinuité de bande de conduction dans les barrières, pour un calcul à tension appliquée nulle. Sous polarisation, nous avons supposé que le champ électrique, supportant la charge surfacique, restait identique à celui trouvé à l'équilibre.

Le profil de potentiel calculé à tension nulle et pour une température de 4K est donné figure 5.6. Le confinement latéral sur des structures de faible dimension entraîne des évolutions radiales du potentiel qui peuvent modifier de façon significative les variations déjà existantes dans la direction de croissance. Pour illustrer cette amplification de la courbure de bande verticale, nous avons représenté figure 5.7 les profils de potentiel suivant l'axe central de la colonne, pour un rayon de 500 Å et pour l'hétérostructure non confinée latéralement. Dans le premier cas, la désertion latérale réhausse le système puits-double barrière bien au-dessus du niveau de Fermi d'émetteur E_F , représenté en trait pointillé. Il faut alors polariser fortement le système pour amener les niveaux quantiques du puits en regard de E_F . Figure 5.8, nous avons représenté le

profil de potentiel de la structure confinée à une polarisation de 0.5 V. A cette tension, les états peuplés d'émetteur et de double barrière sont alignés. Cet effet explique que les pics de courant pour de tels composants aient été observés à polarisation relativement élevée [7] [8]. On trouvera, par ailleurs, une analyse des conditions de résonance dans les références [20] et [21].

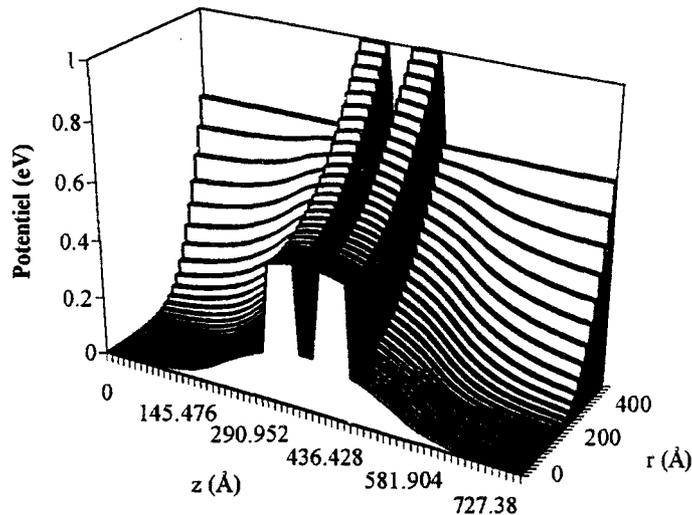


Figure 5.6 Profil de potentiel d'une boîte quantique confinée latéralement par accrochage du niveau de Fermi, à l'équilibre et pour une température de 4K.

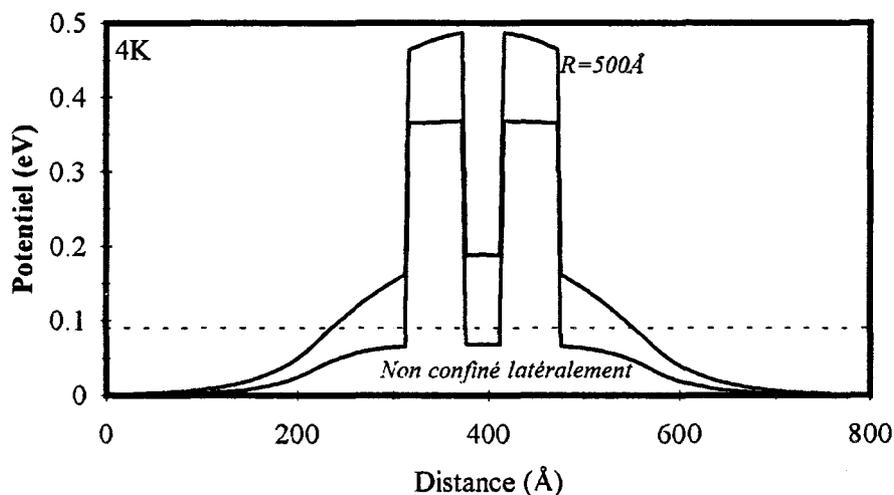


Figure 5.7 Profils de potentiel d'un système confiné latéralement par accrochage du niveau de Fermi de la figure 5.6, en $r=0$, et pour un système puits-double barrière non confiné. Le niveau de Fermi dans l'émetteur est représenté en trait pointillé.

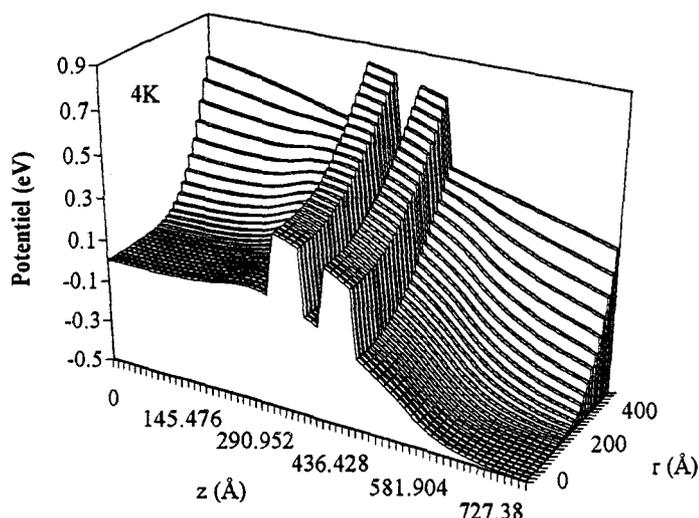


Figure 5.8 Profil de potentiel à 4K de la boîte quantique décrite précédemment pour une polarisation de 0.5V.

Les structures décrites ici utilisent le phénomène de désertion latérale. Or, celui-ci peut à la limite, conduire à un étranglement excluant tout peuplement des zones de contact. Il existe donc un rayon minimum en deça duquel on a extinction totale des mécanismes de conduction. Cette dimension dépend du niveau de dopage mais aussi de grandeurs difficilement contrôlables comme l'accrochage du niveau de Fermi. De ce fait, il est certain qu'un confinement latéral par hétérojonction est préférable. On doit alors faire appel à des techniques de reprise d'épitaxie qui ne sont pas encore tout à fait maîtrisées. On peut noter, à ce propos, les travaux de Notomi et al [22] sur les fils quantiques GaInAs/InP. Ces derniers ont obtenu des échantillons d'excellente qualité leur permettant de mettre en évidence, sans ambiguïté, des effets de confinement additionnel par mesure de photoluminescence.

En résumé, nous avons déterminé le profil de potentiel de structures confinées latéralement par accrochage du niveau de Fermi. La procédure numérique s'est révélée stable même si on multiplie le nombre d'hétérojonctions, comme illustrée figure 5.9 pour une hétérostructure triple puits-double barrière. Cependant, ce calcul ne constitue que le point de départ pour l'analyse des propriétés de conduction dans des systèmes de faibles dimensions. Dans ce qui suit, nous allons nous intéresser à la détermination des états propres par résolution de l'équation de Schrödinger. Nous donnerons également une première estimation des variations de courant en fonction de la tension.

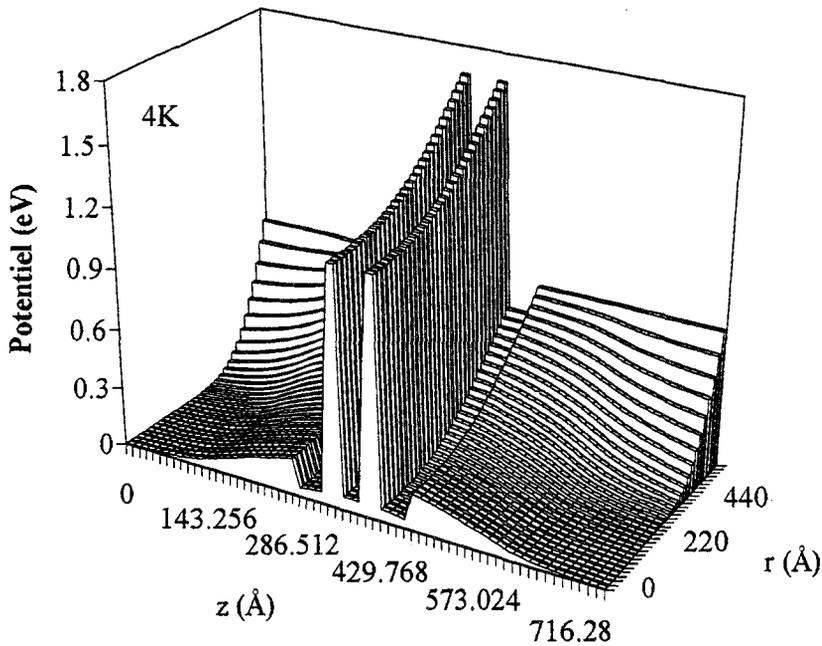


Figure 5.9 Profil de potentiel à l'équilibre à 4K d'une boîte quantique ayant une hétérostructure de type triple puits-double barrière $44\text{\AA}\text{-Ga}_{0.9}\text{In}_{0.1}\text{As}/20\text{\AA}\text{-AlAs}/44\text{\AA}\text{-Ga}_{0.9}\text{In}_{0.1}\text{As}$ /symétrique avec des espaceurs GaAs dopés $2.10^{18}\text{ cm}^{-3}/2.10^{16}\text{ cm}^{-3}$. La structure a un rayon de 600\AA .

5.3 Description théorique du confinement

En toute rigueur, le calcul des états propres dans les fils et boîtes quantiques nécessite la résolution de l'équation de Schrödinger à plusieurs dimensions. Pour cette première approche, nous avons adopté le formalisme de Gershoni et al [23]. Celui-ci est basé sur la décomposition en série de Fourier de la fonction d'onde dans chaque direction de l'espace. Nous appliquerons cette méthode au cas de systèmes bi- et tri-dimensionnels et pour différentes situations de confinement. Nous la décrirons dans un cas de confinement 2D.

5.3.1 Méthode de résolution

L'équation de Schrödinger à deux dimensions s'écrit :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \Delta + V(x, y) \right] \psi(x, y) = E\psi(x, y) \quad (5.11)$$

où les différentes variables ont leur signification habituelle. La fonction d'onde $\psi(x, y)$ est exprimée dans une base de fonctions orthonormées :

$$\psi(x, y) = \sum_l a_l \Phi_l(x, y) \quad (5.12)$$

où $\Phi_l(x, y)$ est un produit de sinus et de cosinus s'annulant aux limites de la structure de dimension L_t ($t=x$ ou y). Ces limites sont prises suffisamment loin de la zone active pour que leur choix n'influe pas sur les valeurs propres. On a donc :

$$\Phi_l(x, y) = u_{N_x}(x) u_{N_y}(y) \quad (5.13)$$

avec

$$u_p(t) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{L_t}} \sin\left(\frac{p\pi t}{2L_t}\right), & p \text{ pair} \\ \frac{1}{\sqrt{L_t}} \cos\left(\frac{p\pi t}{2L_t}\right), & p \text{ impair} \end{cases} \quad (5.14)$$

Une correspondance univoque permet de relier l'indice l au couple (N_x, N_y) .

En injectant (5.12) dans l'équation (5.11), en multipliant à gauche par Φ_l et en intégrant, sachant que $\int \Phi_l \Phi_l^* dx dy = \delta_{ll'}$, on transforme l'équation différentielle en une équation matricielle de type :

$$(M_{ll'} - E\delta_{ll'}) a_l = 0 \quad (5.15)$$

avec

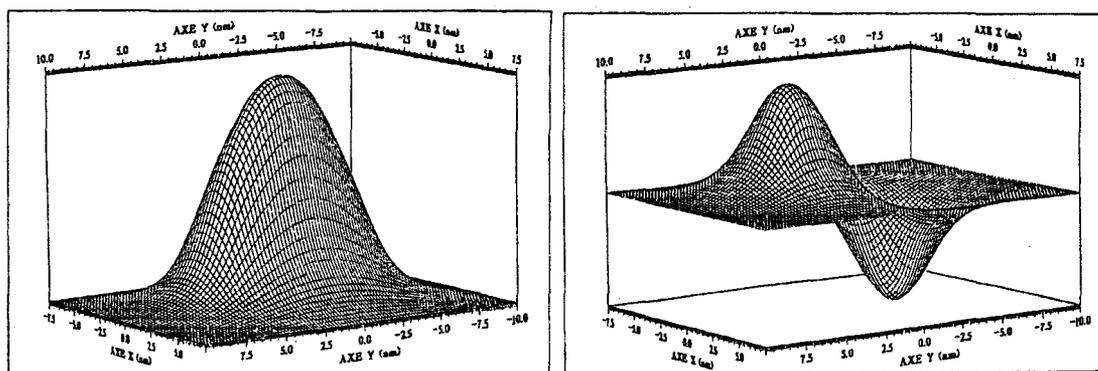
$$M_{ll'} = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \int \Phi_l \Delta \Phi_{l'} dx dy + \int \Phi_l V \Phi_{l'} dx dy \quad (5.16)$$

Les valeurs propres de l'équation matricielle (5.15) donnent les niveaux d'énergie solutions de l'équation de Schrödinger (5.11). Les vecteurs propres permettent d'obtenir les fonctions d'onde par la détermination des termes a_l . On peut noter que dans les cas simples, potentiels constant ou quadratique dans une direction par exemple, toutes les intégrales peuvent être résolues analytiquement. En pratique, nous avons utilisé quinze fonctions d'onde dans chaque direction.

Nous allons, à présent, appliquer cette méthode pour étudier différents types de confinement, en supposant qu'aucune polarisation n'est appliquée.

5.3.2 Confinement par hétérostructure

Cette situation correspond à une structure de type fil quantique. Concrètement, on peut la réaliser par reprise d'épitaxie mettant en jeu un matériau à grand gap. Pour le cas traité ici, nous avons considéré des hétérojonctions GaAs - Ga_{0.6}Al_{0.4}As, soit une hauteur de barrière de 0.3eV. Les dimensions du puits sont prises égales à 50 Å pour L_x et 100 Å pour L_y . L'espace de simulation est limité, dans chaque direction, par une barrière de 50 Å. La masse effective est prise constante et égale à $0.067 m_0$. Compte tenu de ces données on trouve le niveau fondamental, correspondant à $N_x=N_y=1$, à 122.39 meV. Quant au second niveau ($N_x=1, N_y=2$), il est à 216.19 meV. Les fonctions d'onde correspondantes sont représentées figure 5.10.



$$N_x = N_y = 1$$

$$N_x = 1, N_y = 2$$

Figure 5.10 Fonctions d'onde calculées pour un fil quantique de largeur de puits $50 \times 100 \text{Å}$.

Pour comprendre l'évolution des niveaux d'énergie en fonction des dimensions latérales du puits rectangulaire, nous avons fixé L_x à 50 Å et fait varier L_y de 50 Å à 1500 Å. La hauteur du potentiel de confinement et la valeur de la masse effective sont les mêmes que précédemment. Les résultats sont reportés figure 5.11 où sont tracées les dix premières énergies associées à N_y pour $N_x=1$ et 2. Comme attendu, on constate que l'augmentation de L_y diminue l'écart entre les niveaux d'indice N_y . A l'inverse, lorsque le confinement est plus marqué - diminution de L_y - les niveaux s'écartent puis ceux correspondants à $N_x=1$ et $N_x=2$ se croisent.

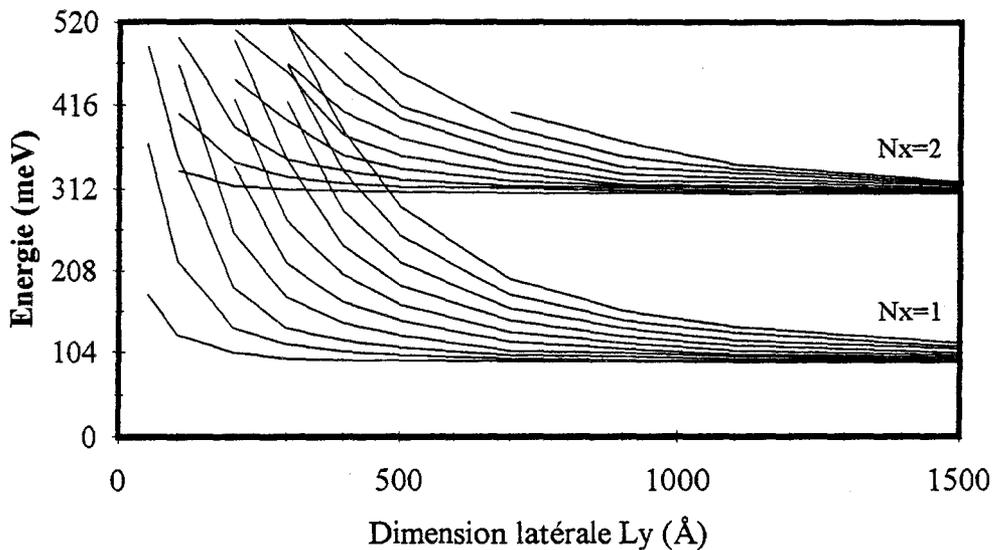
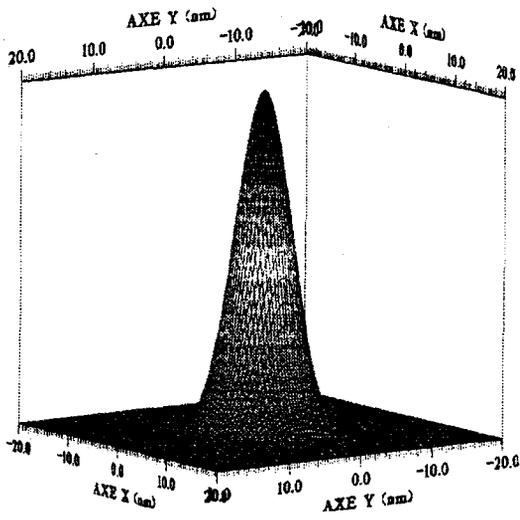


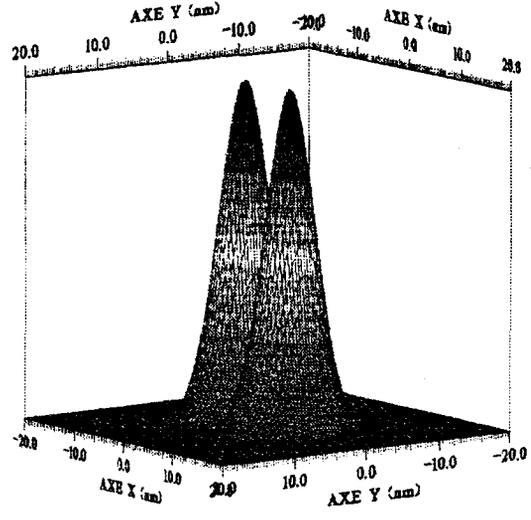
Figure 5.11 Energies propres calculées en fonction de L_y pour les états $N_x=1,2$ et $N_y \in [1,10]$. L_x est prise égale à 50Å.

5.3.3 Confinement électrostatique

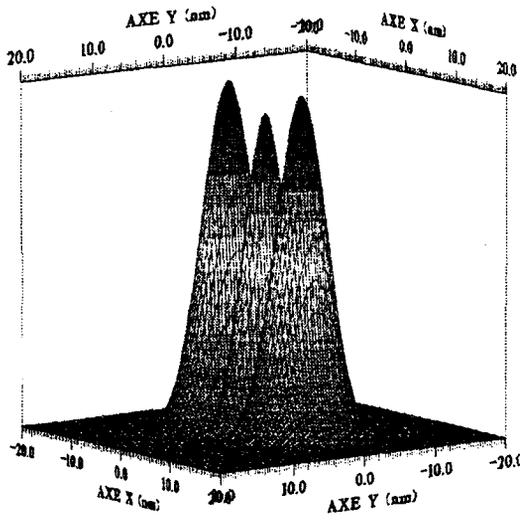
Ceci peut être rattaché au cas des zones d'accès à la boîte quantique décrite au paragraphe 5.2.4. Le potentiel de confinement est alors parabolique. Dans notre exemple, sa hauteur est de 0.3 eV et il s'annule au centre de la parabole. Le rayon est de 150 Å. Ceci équivaut, approximativement, à un dopage de $\sim 2 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$. Les niveaux calculés sont à peu près équi-répartis en fonction de $N_x + N_y$ ($\Delta E \sim 54.6$ à 54.9 meV) comme pour un oscillateur harmonique 2D. La figure 5.12 donne les probabilités de présence respectives sur les niveaux 1,2,5,6. Pour cette structure, à température ambiante, il n'y a qu'un seul état situé sous le niveau de Fermi.



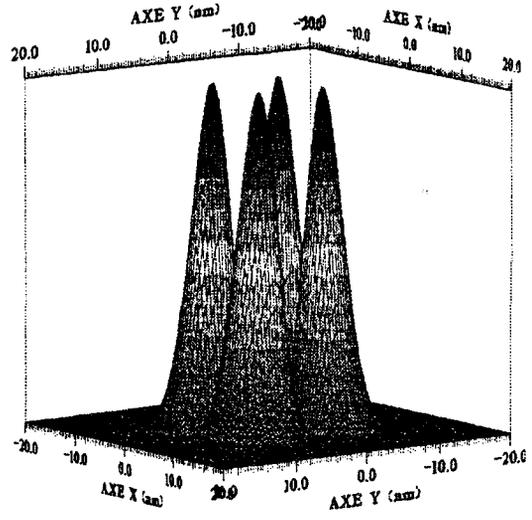
$$N_x = N_y = 1$$



$$N_x = 1, N_y = 2$$



$$N_x = 3, N_y = 1$$



$$N_x = N_y = 2$$

Figure 5.12 Probabilité de présence sur les niveaux 1,2,5,6 dans un puits parabolique 2D de rayon 150Å et de potentiel de confinement 0.3eV.

5.3.4 Boîte quantique

Pour ce dernier système, nous avons considéré le cas d'un confinement 3D par mur de potentiel de 0.3 eV. La boîte ainsi créée est un cube de 400 Å d'arête à l'intérieur duquel il y a un puits cubique de 300 Å de côté. Technologiquement, cette structure pourrait être obtenue par des techniques de reprise d'épitaxie.

Pour la détermination des états d'énergie, nous avons étendu à 3D la méthode de résolution précédemment décrite.

Etant donnée la largeur assez importante du puits, la boîte contient un grand nombre de niveaux relativement proches ($\Delta E \sim 5$ à 16 meV). Certains d'entre eux, à $N_x + N_y + N_z$ fixé, sont dégénérés. La représentation des probabilités de présence 3D associées à ces états étant délicate, nous avons choisi de nous placer dans les plans de section droite définis suivant les axes y et x - y . Le résultat pour le premier ($N_x = N_y = N_z = 1$) et le cinquième ($N_x = N_y = N_z = 2$) niveau est donné figure 5.13. On observe que le maximum de la fonction d'onde, pour l'état fondamental est localisé au centre de la boîte.

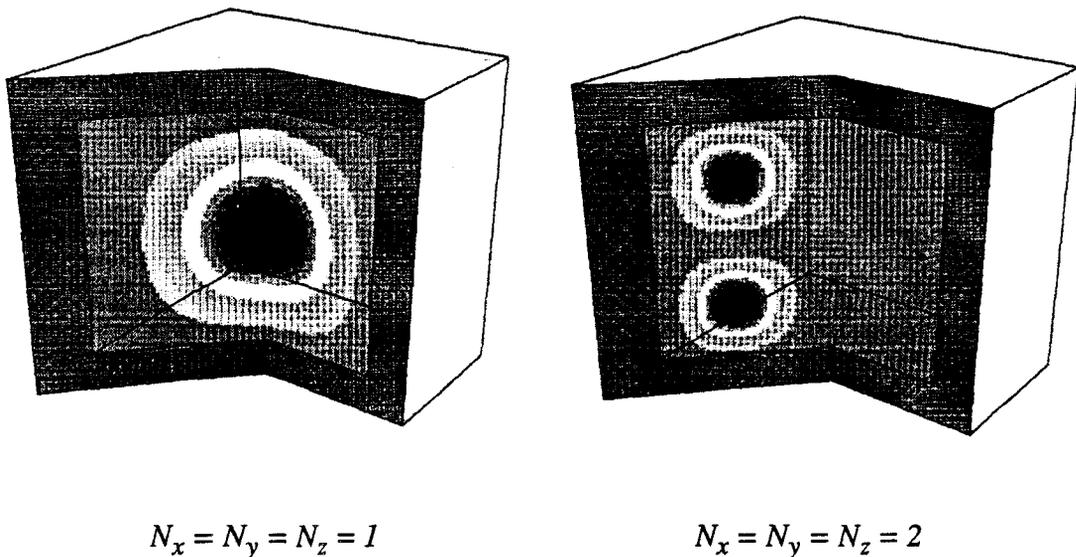


Figure 5.13 Probabilités de présence, dans les plans (yz) et $(x,-y,z)$ dans des boîtes quantiques ayant un puits de 300Å d'arête confiné par une barrière de potentiel de 50Å de large et 0.3 eV de hauteur.

Dans ce paragraphe, nous avons calculé les états propres pour différentes situations de confinement rencontrées dans les structures quantiques de faibles dimensions. Nous allons, à présent, nous intéresser au problème de la détermination du courant.

5.4 Calcul du courant

Dans cette partie, nous allons traiter des composants où le potentiel de confinement transversal est créé par hétérostructure alors qu'il est parabolique dans la direction latérale. Cette situation de confinement mixte correspond à celle rencontrée par Tarucha et al [9].

5.4.1 Procédure numérique : superposition des confinements

Afin d'effectuer le calcul du courant, ou plus exactement donner l'allure qualitative de celui-ci, nous avons repris les hypothèses de Tarucha et al [24]. Ainsi la densité totale de courant est exprimée comme étant la somme de composantes élémentaires J_{mn} . Celles-ci décrivent les transferts de charges entre les niveaux quantiques d'émetteur, d'indice m , et de puits, d'indice n :

$$J = \sum_{m,n} J_{m,n} \quad (5.17)$$

où chaque composante de courant $J_{m,n} \propto (S\eta T)_{m,n}$. S représente la fonction d'alimentation d'émetteur, η le recouvrement latéral des fonctions d'onde et T la probabilité de transmission suivant la direction du courant. Nous allons maintenant décrire ces trois paramètres.

- **Fonction d'alimentation S**

Elle définit la façon dont les porteurs incidents sont distribués en énergie. Pour un gaz d'électrons 2D, cette fonction est approximée à très basse température et en supposant connu le niveau de Fermi E_F de l'émetteur. Elle s'exprime comme [1] :

$$S\alpha \begin{cases} \sqrt{1 - \frac{E}{E_F}} & E \leq E_F \\ 0 & E > E_F \end{cases} \quad (5.18)$$

En fait, la conduction ne s'établira que par les niveaux du puits E_n qui fixeront les valeurs d'énergie E . Le courant démarrera alors lorsque E_n coïncidera avec E_F et sera maximum quand E_n égalera le niveau d'émetteur F_m .

- **Recouvrement latéral η_{nm}**

Ce terme traduit l'intensité du couplage entre les fonctions d'onde d'émetteur $\Phi_m(x)$ et de puits $\psi_n(x)$ dans la direction latérale. Il est défini par :

$$\eta_{mn} = \int dx \Phi_m^*(x) \psi_n(x) \quad (5.19)$$

De par les propriétés de symétrie des fonctions d'onde, on constate que seules les intégrales où m et n ont la même parité sont non nulles. Dans ce cas, un électron sur un niveau d'émetteur peut transférer par effet tunnel vers tout niveau de puits de même parité. En pratique, nous pouvons donc limiter le calcul du courant à $(m+n)$ pair.

- **Transmission T**

Pour la structure qui nous intéresse, la tension est appliquée selon la direction de croissance. De ce fait, les électrons vont traverser par effet tunnel le système puits-double barrière. Il nous faut donc déterminer la probabilité de transmission dans cette direction, en tenant compte de la quantification latérale. Pour cela, nous allons utiliser notre connaissance des diodes double barrière classiques. En première approximation, nous faisons l'hypothèse que les niveaux associés au confinement latéral se superposent aux états discrets de puits, E_1 et E_2 , dans la direction de croissance. Sous une polarisation V , les niveaux E_1 et E_2 doivent être décalés de $\frac{qV}{2}$. On suppose que les niveaux d'émetteur restent invariants par rapport à E_1 et E_2 . Cela équivaut à restreindre la chute de potentiel à la double barrière.

En résumé, pour accéder à l'information de courant, on détermine d'abord la transmission à l'équilibre de la double barrière ainsi que les niveaux et fonctions propres d'émetteur et de puits. Pour une polarisation donnée, nous calculons les composantes de courant liées aux niveaux de F_m et E_n tel que $(m+n)$ soit pair et pour un niveau de Fermi d'émetteur E_F connu. On a alors :

$$J \propto \sum_{\substack{m,n \\ (m+n) \text{ pair}}} \int \Phi_m^*(x) \psi_n(x) dx \int_{F_m}^{E_F} dE \sqrt{1 - \frac{E}{E_F}} T(E + \frac{qV}{2}) \quad (5.20)$$

Nous allons à présent étudier l'influence du confinement latéral sur le courant.

5.4.2 Calcul du courant pour des fils quantiques à confinement mixte

De manière générale, deux situations différentes peuvent se présenter en fonction de la dimension latérale. Pour un confinement important, l'écart entre les niveaux d'émetteur est grand. Il y a donc peu d'états sous E_F et on peut distinguer dans la courbe J-V l'ensemble des pics relatifs aux niveaux d'émetteur et de double barrière. A l'inverse, pour un confinement d'émetteur faible, les énergies sont très rapprochées. On n'observe alors dans la courbe J-V que les pics relatifs à la double barrière. Nous allons étudier ces deux cas de confinement latéral d'émetteur qui peuvent être, technologiquement, créés par variation de dopage et/ou de dimension latérale. Précisons dès à présent que pour l'exemple choisi, les longueurs de désertion sont fixées arbitrairement. Quant à l'hétérostructure, elle se compose d'un puits GaAs de 50 Å encadré par des barrières en $\text{Ga}_{0,6}\text{Al}_{0,4}\text{As}$ de 50 Å d'épaisseur. La hauteur de barrière et la masse effective gardent leurs valeurs précédentes. Les niveaux quantiques de cette structure sont $E_1 \approx 84$ meV et E_2 quasi-virtuel (~ 300 meV). Le potentiel de confinement latéral est pris égal à 0.7 eV. Le niveau de Fermi d'émetteur vaut 50 meV.

- **Confinement latéral d'émetteur important**

La dimension latérale L_x est fixée à 700 Å. La longueur de désertion est prise égale à 350 Å dans le puits soit $L_x/2$, et à 300 Å dans l'émetteur où subsiste par conséquent une zone centrale de 100 Å non désertée. On met alors en évidence deux niveaux F_m

sous E_F dans l'émetteur, respectivement à 8.43 meV et 30.96 meV. Dans la double barrière, les états latéraux sont écartés de 35.92 meV ($\sim \hbar \omega$) avec un niveau fondamental à 17.96 meV du fond du puits. Les recouvrements η_{nm} calculés pour cette structure sont maxima pour $m=n$. L'allure de la densité de courant correspondante est donnée figure 5.14. On observe un pic de courant pour chaque croisement de niveau d'émetteur et de puits. Seuls les pics (1,5) et (2,6) sont cachés par la remontée vers E_2 . Les écarts entre (1,1), (1,3), (1,5) sont compris entre 140 meV et 150 meV soit $\sim 4 \hbar \omega$. Il en est de même, pour les écarts (2,2), (2,4) et (2,6). Ceci résulte du fait que les niveaux de même parité sont séparés de $2 \hbar \omega$ amplifié pour la tension d'un facteur deux. L'écartement entre les niveaux (1,x) et (2,x+1) est ici de 20 à 30 meV soit deux fois l'espacement entre les états d'émetteur et de puits.

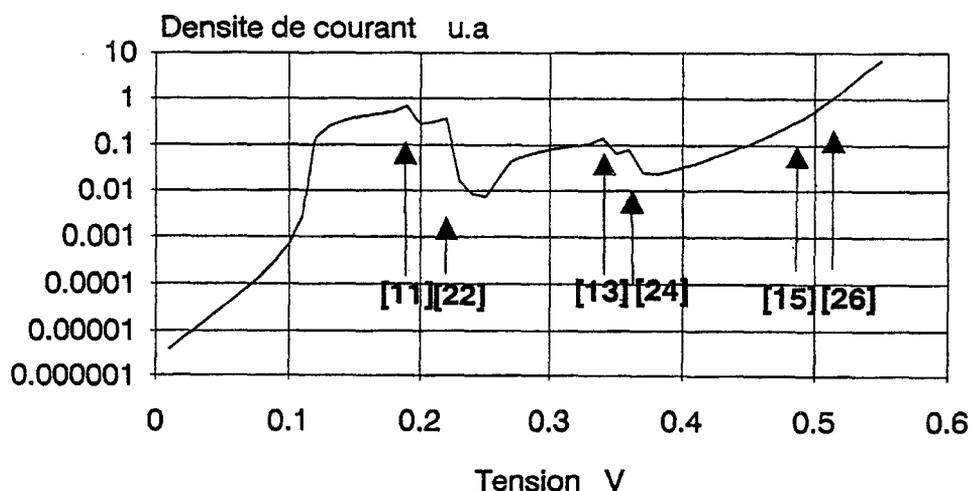


Figure 5.14 Densité de courant calculée pour une structure à fil quantique de $L_x=700\text{\AA}$ dans le cas d'un confinement latéral d'émetteur fort. Les flèches repèrent les niveaux émetteur-puits mis en jeu.

- Confinement latéral d'émetteur faible

La taille latérale du fil quantique est désormais de 1500 Å. La longueur de désertion dans l'émetteur reste inchangée afin de diminuer l'intensité du confinement latéral. En revanche, celle du puits passe à 750 Å soit, comme précédemment, $L_x/2$. Dans cette configuration, on obtient dix niveaux sous E_F dans l'émetteur. Leur écartement est très faible avec des valeurs comprises entre 1.5 meV et 8.5 meV. Quant au puits, le niveau

fondamental se situe à 8.38 meV et l'écart est de 16.76 meV. A l'opposé du cas précédent, l'évolution des recouvrements η_{nm} en fonction des nombres quantiques ne présente plus de particularité dans la mesure où les fonctions d'onde d'émetteur et de puits n'ont pas le même espace pour se développer. Le résultat du calcul de la caractéristique de conduction est illustré figure 5.15. On observe ici un pic pour chaque niveau quantifié de la zone puits-double barrière (1 à 10). L'écart entre les pics de courant est de 30 à 40 meV soit deux fois l'espacement entre les niveaux du puits. Compte tenu du nombre important de niveaux d'émetteur, la contribution respective de chacun d'entre eux n'est plus discernable.

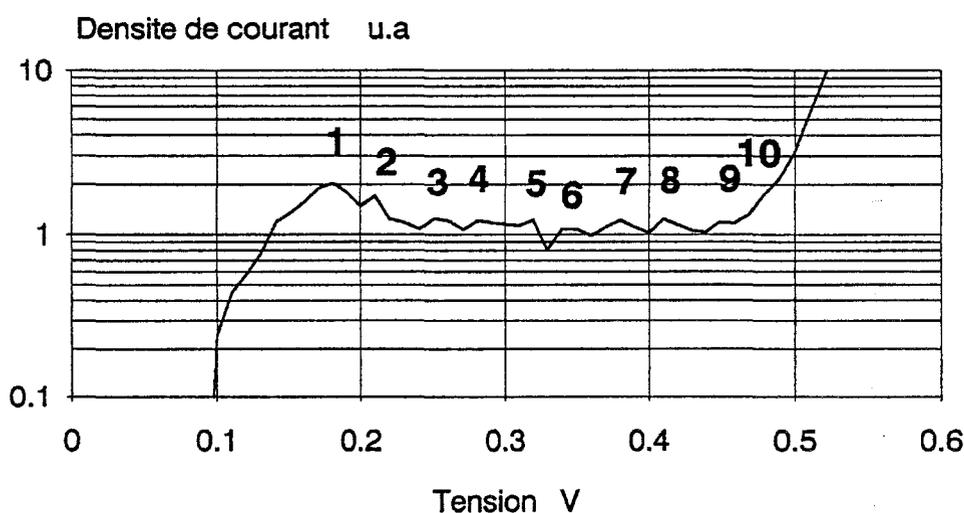


Figure 5.15 Densité de courant calculée pour un fil quantique de $L_x=1500\text{\AA}$ et dans le cas d'un confinement latéral d'émetteur faible. Les nombres repèrent les niveaux de puits.

5.5 Conclusion

Dans ce chapitre consacré aux systèmes nanométriques, nous avons étudié dans quelle mesure les accidents de conduction des caractéristiques I-V pouvaient s'expliquer en termes de transitions résonnantes entre niveaux quantiques. Dans ce but, nous avons développé deux types de logiciel. D'une part, des algorithmes qui visent à donner une image du potentiel électrostatique vu par les électrons. D'autre part, ceux qui

déterminent les états propres des structures par résolution de l'équation de Schrödinger.

En ce qui concerne le premier point, le calcul a été effectué dans l'approximation de Thomas-Fermi. Nous avons ainsi décrit deux exemples de confinement latéral, l'un de configuration rectangulaire, l'autre de symétrie cylindrique.

Nous avons ensuite déterminé les fonctions propres à partir d'une décomposition en série de Fourier sur l'espace. Les états d'énergie discrets résultants ont pu être déduits pour des fils et boîtes quantiques.

Enfin, nous avons calculé les allures des caractéristiques de courant. Nous avons précisé dans quelles conditions les transitions entre états d'émetteur et de puits pouvaient être observées. Notamment en ce qui concerne les espacements entre pics de courant.

Ceci ne constitue qu'une première approche des phénomènes puisque ces calculs ont été faits sous des hypothèses quelquefois restrictives. Sans revenir sur l'approximation de Thomas-Fermi déjà commentée dans les chapitres précédents, les calculs ont été exclusivement menés en absence de réaction de charge d'espace. On peut, en effet, supposer qu'en affinant les évolutions spatiales du potentiel, on modifierait le recouvrement des états propres.

Dans le but d'améliorer ces formalismes, il nous semblerait intéressant de résoudre, de manière auto-cohérente, les équations de Poisson et de Schrödinger. Le calcul des caractéristiques de courant pour un système 1D - 0D - 1D mériterait également d'être considéré. Enfin, dans une perspective à plus long terme, il nous semblerait nécessaire d'envisager des formes de transition entre niveaux quantiques autres que celles mettant en jeu des effets de tunnel pur.

Bibliographie Chapitre 5

- [1] S.Y. CHOU, E. WOLAK, J.S. HARRIS
«Resonant tunneling of electrons of one or two degrees of freedom»
Applied Physics Letters 52 (8) (1988) p. 657
- [2] J.N. RANDALL, M.A. REED, G.A. FRAZIER
«Nanoelectronics : Fanciful physics or real devices ?»
Journal of Vacuum Science and Technology B7 (6) (1989) p. 1398
- [3] C. WEISBUCH
«Composants quantiques à semiconducteurs : vers des propriétés ultimes»
L'onde électrique 71 (2) (1991) p. 42
- [4] S.Y. CHOU, D.R. ALLEE, R. FABIAN PEASE, J.S. HARRIS
«Lateral resonant tunneling transistors employing field-induced quantum wells and barriers»
Proceedings of the IEEE 79 (8) (1991) p. 1131
- [5] K.E. ISMAIL, P.F. BAGWELL, T.P. ORLANDO, D.A. ANTONIADIS, H.I. SMITH
«Quantum phenomena in Field-Effect-Controlled semiconductor nanostructures»
Proceedings of the IEEE 79 (8) (1991) p. 1106
- [6] J.N. RANDALL, A.C. SEABAUGH, J.H. LUSCOMBE
«Fabrication of lateral resonant tunneling devices»
Journal of Vacuum Science and Technology B10 (6) (1992) p. 2941
- [7] J.N. RANDALL, M.A. REED, R.J. MATYI, T.M. MOORE
«Nanostructure fabrication of zero dimensional quantum dot diodes»
Journal of Vacuum Science and Technology B6 (6) (1988) p. 1861

- [8] A. RAMDANE, G. FAINI, H. LAUNOIS
«Resonant tunnelling in OD systems»
Zeitschrift für Physik B-Condensed Matter 85 (1991) p. 389
- [9] S. TARUCHA, Y. HIRAYAMA, T. SAKU, T. KIMURA
«Resonant tunneling through one- and zero- dimensional states constricted by $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ heterojunctions and high resistance regions induced by focused Ga ion-beam implantation»
Physical Review B 41 (8) (1990) p. 5459
- [10] R.K. MAINS, J.P. SUN, G.I. HADDAD
«Observation of intrinsic bistability in resonant tunneling diode modeling»
Applied Physics Letters 55 (4) (1989) p. 371
- [11] W.R. FRENSLEY
«Effect of inelastic processes on the self consistent potential in the resonant tunneling diode»
Solid-State Electronics 32 (12) (1989) p. 1235
- [12] J.H. LUSCOMBE, A.M. BOUCHARD, M. LUBAN
«Electron confinement in quantum nanostructures : self-consistent Poisson-Schrödinger theory»
Physical Review B46 (16) (1992) p. 10262
- [13] M. PERNISEK
«Simulation bidimensionnelle de composants submicroniques. Application à l'étude de transistor à modulation d'injection»
Thèse de l'Université de Lille I (1983)
- [14] M.M. IBRAHIM SAADOUN
«Two dimensional simulation of microwave Gallium Arsenide submicronic gate field-effect transistor»
MSC Thesis, Caire (1983)
- [15] P. MOUNAIX
«Hétérostructures double barrière pour la réalisation de diodes et de transistors à effet tunnel résonnant»
Thèse de l'Université de Lille I (1992)

- [16] T.C. SHEN, G.B. GAO, H. MORKOÇ
«Recent developments in ohmic contacts for III-V compound semiconductors»
Journal of Vacuum Science Technology B10 (5) (1992) p. 2113
- [17] S.J. LEE, C.R. CROWELL
«Parasitic source and drain resistance in high electron mobility transistors»
Solid-State Electronics 28 (7) (1985) p. 659
- M.D. FEUER
«Two layer model for source resistance in selectively doped heterojunction transistors»
IEEE Transactions on Electron Devices ED32 (1) (1985) p. 7
- [18] P. BOUREL
«Simulation Monte-Carlo bidimensionnelle et étude expérimentale de transistors à effet de champ à hétérojonctions AlInAs/GaInAs adaptés en maille sur InP»
Thèse de l'Université de Lille I (1991)
- [19] H. LEROUX
«Effets tunnel intrabande et interbande dans des hétérostructures III-V de complexité croissante»
Thèse de l'Université de Lille I (1992)
- [20] Y. GALVAO GOBATO, J.M. BERROIR, Y. GULDNER, G. FAINI, H. LAUNOIS
«Quantum box resonant tunneling spectroscopy : experiments and modelisation»
Superlattices and Microstructures 12(4) (1992) p. 473
- [21] G.W. BRYANT
«Understanding quantum-box resonant-tunneling spectroscopy : Fine structure at Fermi-level crossings»
Physical Review B 44 (8) (1991) p. 3782

- [22] M. NOTOMI, T. TAMAMURA
«High quality InGaAs/InP quantum wires fabricated by electron beam lithography»
Actes de la 5th International Conference on Indium Phosphide and Related Materials. (1993) p. 715
- [23] D. GERSHONI, H. TEMKIN, G.J. DOLAN, J. DUNSMUIR, S.N.G. CHU, M.B. PANISH
«Effects of two-dimensional confinement on the optical properties of InGaAs/Inp quantum wire structures»
Applied Physics Letters 53(11) (1988) p. 995
- [24] S. TARUCHA, Y. TOKURA, Y. HIRAYAMA
«Resonant tunneling of three-dimensional electrons into degenerate zero-dimensional levels»
Physical Review B 44 (24) (1991) p. 13815

Conclusion générale

Conclusion générale

Au terme de ce travail où nous avons considéré des structures à confinement croissant, de la structure générique GaAs/AlAs aux effets de résonance dans une boîte quantique, nous retiendrons les points suivants :

- Pour les structures à grande discontinuité de potentiel, il nous semble important, pour une modélisation des propriétés de conduction dans l'approximation de la masse effective, de renormaliser la masse du matériau de barrière. Ainsi pour des hétérostructures GaAs/AlAs, nous avons obtenu un facteur de renormalisation d'environ 2 pour une injection des porteurs à l'énergie de Fermi. A cette condition, les caractéristiques de courant pic sont correctement décrites, alors qu'elles sont largement sous estimées quand on utilise la masse de bas de bande de conduction.
- En ce qui concerne les composants pseudomorphiques GaInAs/AlAs/GaAs, nous avons vu que l'adjonction de puits telle que la structure ait une configuration triple puits - double barrière, permet de modifier très fortement les caractéristiques d'injection et la condition de résonance en tension. Dans cet effort d'optimisation, la détermination du profil de potentiel s'avère importante, compte tenu de la réaction de charge d'espace et dans la mesure où les transferts de charges mettent en jeu des transitions entre niveaux. Ces calculs ont permis de concevoir une structure expérimentale dont les performances sont comparables aux meilleurs résultats reportés dans la littérature avec notamment une fréquence maximale d'oscillation dans le domaine millimétrique.

- Par ailleurs, lors de l'étude des structures à effet tunnel de trous GaInP/GaAs, nous avons mis en évidence des effets de mélange marqués entre les populations de trous lourds et de trous légers au cours du transfert résonnant à travers la double barrière. Pour interpréter ces résultats, nous avons dû effectuer des mesures sous fort champ magnétique. Ces études nous ont permis de remonter à des valeurs de masse effective apparente et d'obtenir une image du diagramme de dispersion dans la direction perpendiculaire au courant.

- Enfin, pour les structures à réduction de dimensions, nous avons mis en évidence des conditions pour observer des effets de quantification prononcés tout en assurant un peuplement des zones quantiques. Ce compromis vient principalement de l'extension spatiale des potentiels. De ce fait, un confinement «tout hétérostructure» est préférable. L'outil numérique développé s'avère capable de rendre compte de telles situations.

Le prolongement de ces études concerne plusieurs points relatifs à la description des mécanismes de transport. En premier lieu, des difficultés subsistent dans la façon dont s'établit la charge dans une zone quantique. Ceci est particulièrement vrai pour une alimentation à partir d'états étendus et la définition de la probabilité de transition entre états délocalisé et localisé. C'est aussi le cas de la charge piégée dans la double barrière où il est difficile de définir un pseudo-niveau de Fermi et donc une statistique de peuplement. Le traitement par le formalisme de la fonction de Wigner est une première réponse à cette question car, par son traitement global, il permet d'assurer la continuité entre les zones classique et quantique. La contrepartie réside dans sa mise en oeuvre qui nécessite des temps de calcul et des capacités mémoire très importants, donc peu adaptés à des outils d'optimisation. En dernier lieu, une structure quantique, malgré tous les progrès réalisés, est encore bien imparfaite. La surestimation quasi systématique des contrastes en courant en est la preuve. Il semble que ce désaccord est lié plus aux conditions d'élaboration des structures qu'aux paramètres intrinsèques eux-mêmes. Sur la description de cet aspect touchant à la qualité des matériaux et des interfaces, beaucoup reste à faire, notamment en ce qui concerne la description des mécanismes de conduction assistés par défauts [1].

Bibliographie Conclusion générale

- [1] D. STIEVENARD, X. LETARTRE, M. LANNOO
«Defect-assisted resonant tunneling : A theoretical model»
Applied Physics Letters 61(13) (1992) p. 1582

Résumé

Le dénominateur commun des travaux présentés est l'effet tunnel résonnant, étudié pour différentes situations de confinement obtenues soit par hétérostructure soit par potentiel électrostatique. En règle générale, le transport de charges est perpendiculaire aux interfaces avec une prédominance des effets quantiques. Pour comprendre ces processus de transport, nous les avons modélisés. Les logiciels de simulation uni et bi-dimensionnels développés nous ont permis de déterminer le profil de potentiel et les caractéristiques de conduction, par ailleurs mesurées. Ces algorithmes ont été appliqués à l'optimisation des non-linéarités de conduction et à la conception de nouvelles structures.

Nous avons d'abord essentiellement étudié les propriétés de pénétration des fonctions d'onde électronique à travers des barrières de potentiel élevées - cas du système AlAs/GaAs.

Nous avons considéré, ensuite, les mécanismes d'injection bidimensionnelle au moyen d'hétérostructures à couches contraintes GaInAs/AlAs/GaAs dans une configuration triple puits. Les structures ainsi fabriquées ont présenté des performances à l'état de l'art en termes de densité et de contraste en courant.

Ces études ont été suivies par un travail sur des hétérostructures double barrière GaInP/GaAs. Un effet tunnel résonnant de trous par les niveaux propres liés à la bande de valence a été, pour la première fois, observé dans ce système de matériaux.

Enfin, nous avons entrepris une action plus exploratoire sur les structures à réduction de dimensionnalité, notamment les fils et boîtes quantiques. Cette partie concerne plus spécialement la détermination du profil de potentiel, en particulier pour des transistors multi-grille, et l'évaluation des états propres de ces systèmes.

Mots clés

- Tunnel résonnant
- Caractéristiques de conduction
- Masse effective tunnel
- Système contraint $\text{Ga}_{1-x}\text{In}_x\text{As}/\text{AlAs}/\text{GaAs}$
- Profil de potentiel
- Système GaInP/GaAs
- Réduction de dimensionnalité

