

gen 20006246

THESE

Présentée à

l'Université des Sciences et Technologies de Lille

pour obtenir le titre de

DOCTEUR DE L'UNIVERSITE
Spécialité : ELECTRONIQUE

par Ludovic BURGNIES



**MECANISMES DE CONDUCTION EN REGIME BALISTIQUE DANS
LES DISPOSITIFS ELECTRONIQUES QUANTIQUES**

soutenue le 5 décembre 1997 devant la commission d'examen.

Membres du jury :	M. E. CONSTANT	Président
	M. D. LIPPENS	Directeur de thèse
	M. O. VANBÉSIEN	Co-directeur de thèse
	M. A. KHATER	Rapporteur
	M. C. GLATTLI	Rapporteur
	M. J. F. PALMIER	Examineur
	M. B. VINTER	Examineur

Cher monsieur,

J'ai lu avec tristesse et dégoût dans les journaux le traitement qu'une politique insensée et bestiale vous a infligé.

Paul VALÉRY.

(lettre à A. EINSTEIN, 1933)

REMERCIEMENTS

Ce travail a été effectué au Laboratoire Central de l'Institut d'Electronique et de Microélectronique du Nord dirigé par Monsieur E. CONSTANT qui me fait l'honneur de présider cette commission d'examen. Je l'en remercie.

Je remercie aussi Monsieur G. SALMER de m'avoir accueilli au sein du Département Hyperfréquences et Semiconducteur durant ces quelques années.

Mes sincères remerciements vont à Monsieur D. LIPPENS, directeur de recherche au C.N.R.S., qui dans un premier temps m'a initié à la recherche lors du D.E.A., et qui m'a fait partager sa passion pour la recherche durant les années de thèse. Je pense qu'il est inutile de m'étendre sur ses incontestables qualités scientifiques, et ne le remercierai jamais assez pour les maintes attentions bienfaisantes qu'il a eu l'occasion de montrer à mon égard.

Je dois beaucoup à Monsieur O. VANBÉSIEN qui a influencé grandement et dirigé fortement ce travail. Quelques mots suffiront-ils à le remercier? Je vais y tâcher. Outre les discussions scientifiques desquelles je sortais toujours enrichi intellectuellement, qu'il sache qu'il m'a été fort agréable de discuter de sujets autres, effleurant même à certains moments le domaine philosophique. Me viennent aussi à l'esprit bon nombre de questions et problèmes pour lesquelles il a su trouver rapidement réponses et remèdes. J'espère que ces quelques mots lui indiqueront l'étendue de ma reconnaissance, et que dans un proche avenir il pourra encore plus amplement faire preuve de ses qualités humaines et scientifiques.

Je remercie Monsieur A. KHATER, professeur à l'université du Maine, et Monsieur C. GLATTLI, Ingénieur physicien au Commissariat à l'Energie Atomique, d'avoir accepté de juger et rapporter ce travail.

Je remercie également Monsieur J. F. PALMIER, Ingénieur au Centre National d'Etudes des Télécommunications, et Monsieur B. VINTER, Ingénieur de recherche au Laboratoire Central de Recherche de Thomson, d'avoir accepté d'examiner ce travail.

Durant ce travail, des réflexions technologiques personnelles ont abouti sur des questionnements. Je remercie Messieurs P. MOUNAIX et E. LHEURETTE d'avoir répondu à grand nombre de questions technologiques, et même dans bien des cas, au delà de mes attentes.

Je remercie Monsieur F. MOLLOT, directeur de recherche C.N.R.S. à l'I.E.M.N., pour les composants qu'il a réalisés.

Les mobilités des couches à modulation de dopage ont été mesurées à basse température au C.E.A. de Saclay. Je conserve de très bons souvenirs de l'accueil que m'ont fait Monsieur P. DEBRAY et son équipe durant ces quelques jours passés en leur compagnie, et des discussions enrichissantes que nous avons eu. Qu'ils reçoivent ici toute ma gratitude.

Je remercie Mesdames E. DELOS et S. LEPILLIET, de la centrale de caractérisation, ainsi que J. L. CODRON pour l'aide et les conseils qu'ils m'ont apportés pour les mesures d'effet Hall.

Je voudrais remercier l'ensemble des membres du GdR SPARCH, dirigé par Monsieur P. A. RAVIART, que j'ai rencontrés à plusieurs reprises. Tout particulièrement à Monsieur P. DEGOND, directeur de recherche C.N.R.S., et Monsieur N. BEN ABDALLAH, chargé de recherche C.N.R.S., du laboratoire de Mathématiques pour l'Industrie et la Physique de Toulouse pour l'intérêt qu'ils ont porté sur nos travaux.

Je remercie Monsieur J. C. CARRU, directeur du Laboratoire d'Etude des Matériaux et des Composants pour l'Electronique de Calais, ainsi que Messieurs C. LEGRAND et P. TABOURIER, directeurs d'équipes, de m'avoir permis d'achever ce travail à l'I.E.M.N. au détriment du temps consacré au L.E.M.C.E.L..

En parallèle avec ce travail de thèse, une "charge" d'enseignement en qualité de moniteur a été effectuée à l'Université du Littoral-Côte d'Opale. Je tiens à remercier ici les personnes qui m'ont permises, d'une manière générale, de simplifier la gestion du temps.

Je pense tout d'abord à Monsieur A. BIGAND, directeur de l'IUP département productique de Calais. Je pense ensuite aux directeurs des études qui ont aménagé mon emploi du temps d'enseignement : F. MEHRI, F. SALOMÉ, A. TALEB-AHMED, G. ROUSSEL, et F. DUFRESNOIS. Je remercie aussi Messieurs P. CHRISTIAEN et S. REBOUL qui m'ont agréablement remplacé lors de semaines chargées.

Je remercie enfin toutes les personnes (enseignants, doctorants ...) de l'IUP et de l'IUT de Calais qui ont eu l'occasion de me montrer leur soutien durant ces années. Outre les personnes précitées, ma pensée va en particulier à P. ROUGÉ, F. HURET, P. NIKYEMA, et A. BOUGHRIET, avec qui j'ai partagé de longs kilomètres et de grandes discussions.

La qualité typographique de ce mémoire doit énormément à Monsieur J. P. DEHORTER, je l'en remercie.

Je remercie aussi Madame V. GYSEMBERGH pour sa contribution à la recherche bibliographique et sa rapidité de travail.

Il me tardait de remercier les membres de l'équipe "Composants Quantiques et Dispositifs Terahertz" de l'I.E.M.N.. En premier lieu je pense à V. DUEZ, J. CARBONELL, O. TANGUY, et J. A. LOPEZ VILLANUEVA, avec qui j'ai eu le plaisir de partager le bureau 125 de l'I.E.M.N.. Ensuite ma pensée se tourne vers les probables futurs impétrants : R. HAVART, X. MELIQUE, et O. DUPUIS. Enfin, je pense aux "anciens" : V. SADAUNE, et P. SALZENSTEIN, et au "pseudo" de l'équipe E. GOSSE.

Finalement, je remercie aussi l'ensemble des personnes de l'I.E.M.N. qui ont montré de la sympathie à mon égard, et qui j'en suis sûr se sentiront concernés par ces remerciements.

TABLE DES MATIERES

INTRODUCTION GENERALE	1
CHAPITRE 1 : EFFETS QUANTIQUES DANS LES SEMICONDUCTEURS.....	5
1.1 - CONCEPTION DES HETEROSTRUCTURES	5
1.1.1 - Structure de bandes.....	5
1.1.2 - Paramètres matériaux.....	7
1.2 - LES HETEROSTRUCTURES	9
1.2.1 - Principe	9
1.2.2 - Les différents types	9
1.2.3 - Les filières GaAs et InP	10
1.2.3.1 - Matériaux adaptés en maille.....	10
1.2.3.1.1 - Filière GaAs	10
1.2.3.1.2 - Filière InP.....	12
1.2.3.2 - Croissances pseudomorphiques.....	13
1.2.3.2.1 - Longueur critique.....	13
1.2.3.2.2 - Paramètres structuraux	14
1.2.4 - Modélisation des hétérostructures	15
1.2.4.1 - Réaction de charge d'espace	15
1.2.4.2 - Fonction enveloppe	16
1.3 - CONFINEMENT ELECTRONIQUE	17
1.3.1 - Structures fermées : confinement strict.....	17
1.3.1.1 - Définition.....	17
1.3.1.2 - Structures.....	18
1.3.1.3 - Modélisation.....	19
1.3.1.3.1 - Approximation de l'hétérojonction simple.....	19
1.3.1.3.2 - Approximation de la double hétérojonction	20
1.3.1.3.3 - Modèle numérique	21
1.3.2 - Structures ouvertes : niveaux quasi-liés.....	22
1.3.2.1 - La diode double barrière.....	23
1.3.2.2 - Les structures multipuits	26
1.3.2.3 - Formalisme.....	26
1.3.2.3.1 - Matrices de transfert.....	28
1.3.2.3.2 - Résolution directe	29
1.4 - REDUCTION DE DIMENSIONNALITE (SYSTEMES 1D et 0D)	30
1.4.1 - Fils quantiques - guides d'ondes électroniques	30
1.4.1.1 - La technique de gravure profonde	31
1.4.1.2 - La technique de gravure peu profonde	31
1.4.1.1 - La technique par grille de commande.....	32
1.4.2 - Boîtes quantiques : diodes à effet tunnel résonnant.....	32
1.4.3 - Modélisation	33
1.5 - CONCLUSION	33
BIBLIOGRAPHIE CHAPITRE 1	35

CHAPITRE 2 : INJECTION BIDIMENSIONNELLE DANS LES DIODES

A EFFET TUNNEL RESONNANT	41
2.1 - TRANSPORT PERPENDICULAIRE	41
2.1.1 - Définition	41
2.1.2 - Expression du courant	42
2.1.3 - Courant tridimensionnel	43
2.1.4 - Courant bidimensionnel	45
2.2 - INJECTION BIDIMENSIONNELLE	46
2.2.1 - Principe : approche numérique	46
2.2.2 - Niveaux d'énergie	48
2.2.3 - Temps de résidence	50
2.3 - CALCUL AUTOCOHERENT	52
2.3.1 - Modèle Thomas-Fermi	52
2.3.2 - Modèle quantique	53
2.3.3 - Comparaison des modèles	56
2.3.3.1 - Structure triple puits-double barrière	56
2.3.3.2 - Potentiel et densité de porteurs	58
2.3.3.3 - Charge accumulée et temps de fuite	59
2.3.3.4 - Densités de courant bidimensionnelle et tridimensionnelle	60
2.4 - LIMITATIONS DU MODELE QUANTIQUE	62
2.5 - CONCLUSION	67
BIBLIOGRAPHIE CHAPITRE 2	69

CHAPITRE 3 : CONSTRICTION LATERALE D'UN GAZ

BIDIMENSIONNEL D'ELECTRONS.....	73
3.1 - GAZ BIDIMENSIONNEL A HAUTE MOBILITE	73
3.1.1 - Hétérostructures à modulation de dopage	73
3.1.2 - Influence des paramètres	74
3.1.2.1 - Paramètres de simulation	74
3.1.2.2 - Influence de l'espaceur	75
3.1.2.3 - Influence de la couche GaAlAs dopée	76
3.1.2.4 - Commande de la charge accumulée	77
3.1.3 - Mobilité du gaz 2D	78
3.1.3.1 - Interactions sur phonons acoustiques	79
3.1.3.2 - Interactions coulombiennes	80
3.1.4 - Choix d'une structure	81
3.2 - CARACTERISATION	83
3.2.1 - Effet Hall classique	83
3.2.1.1 - Résistance de Hall et magnétorésistance	83
3.2.1.2 - Caractérisation à 300 K et 77 K	84
3.2.2 - Systèmes bidimensionnels en champ magnétique élevé	85
3.2.2.1 - Niveaux de Landau	85
3.2.2.2 - Effet Hall quantique	87
3.2.2.3 - Effet Shubnikov-de-Haas	87
3.2.2.4 - Conditions d'observation	88
3.2.2.5 - Caractérisation à 4.2 K	88
3.3 - TRANSPORT BALISTIQUE	90
3.3.1 - Caractéristiques de conduction	90
3.3.1.1 - Les régimes de transport	90
3.3.1.1.1 - Régime classique	91

3.3.1.1.2 - Régime quantique cohérent.....	91
$l_e < L < l_\Phi$: régime mésoscopique.....	91
$L < l_e < l_\Phi$: régime balistique.....	92
3.3.1.2 - La conductance.....	93
3.3.1.3 - Quantification de conductance.....	94
3.3.2 - Exemple : constriction d'un gaz 2D.....	96
3.3.2.1 - Potentiel électrostatique 3D.....	96
3.3.2.1.1 - Modèle numérique.....	96
3.3.2.1.2 - Confinement du gaz 2D.....	97
3.3.2.2 - Caractéristique $G(V_g)$	99
3.3.2.3 - Approximation des murs de potentiel infinis.....	101
3.4 - CONCLUSION.....	101
BIBLIOGRAPHIE CHAPITRE 3.....	103

CHAPITRE 4 : CONDUCTION DANS LES GUIDES D'ONDES

ELECTRONIQUES NON UNIFORMES.....	107
4.1 - CONSTRICTION D'UN CANAL 1D.....	108
4.1.1 - Analyse statique.....	108
4.1.1.1 - Modèle numérique.....	108
4.1.1.1.1 - Hypothèses.....	108
4.1.1.1.2 - Méthode du raccordement de modes.....	108
4.1.1.1.3 - Conductance.....	111
4.1.1.1.3 - Règle d'échelles.....	112
4.1.1.2 - Quantification de conductance.....	112
4.1.2 - Analyse temporelle.....	115
4.1.2.1 - Modèle numérique.....	115
4.1.2.2 - Initialisation.....	117
4.1.2.3 - Zones de transitions ("taper").....	117
4.1.2.4 - Filtre énergétique.....	119
4.2 - ELARGISSEMENT D'UN CANAL 1D.....	121
4.2.1 - Généralités - géométrie du dispositif.....	121
4.2.2 - Niveaux liés et quasi-liés.....	122
4.2.2.1 - Détermination.....	122
4.2.2.2 - Influence de la longueur du stub.....	124
4.2.2.3 - Mise en cascade de stubs.....	125
4.2.3 - Conductance.....	126
4.2.3.1 - Influence des paramètres géométriques.....	126
4.2.3.2 - Influence de la température.....	129
4.2.3.3 - Mise en cascade de stubs.....	130
4.2.4 - Conductance différentielle négative.....	131
4.2.4.1 - Calcul du courant.....	132
4.2.4.2 - Transmission sous polarisation.....	133
4.2.4.3 - Caractéristique de conduction.....	133
4.2.5 - Etude en régime transitoire.....	136
4.2.5.1 - Injection continue.....	136
4.2.5.2 - Evolution temporelle de la conductance.....	137
4.2.5.3 - Densités locales d'états et temps caractéristiques.....	139
4.2.5.4 - Analyse spectrale.....	140
4.3 - CONCLUSION.....	142
BIBLIOGRAPHIE CHAPITRE 4.....	145

CHAPITRE 5 : COUPLAGE ENTRE GUIDES D'ONDES

ELECTRONIQUES	149
5.1 - LE COUPLEUR SIMPLE BRANCHE : analyse paramétrique	149
5.1.1 - Généralités	149
5.1.2 - Paramètres géométriques	151
5.1.2.1 - Longueur de la branche de couplage	151
5.1.2.2 - Largeur de la branche de couplage	153
5.1.3 - Energie d'injection	155
5.1.4 - Densité locale d'états et niveaux propres	158
5.2 - LE COUPLEUR SIMPLE BRANCHE : modes de fonctionnement	161
5.2.1 - Transfert latéral vers le port 4 : "backward"	161
5.2.2 - Le transfert latéral vers le port 3	162
5.2.2.1 - Principe.....	162
5.2.2.2 - Approche numérique : conditions aux limites absorbantes.....	163
5.2.2.3 - Evolution temporelle	165
5.2.2.4 - Temps caractéristiques	167
5.2.3 - Coupleur hybride	168
5.2.4 - Système hors-équilibre.....	169
5.2.4.1 - Approche numérique	169
5.2.4.2 - Coefficient de transmission	170
5.3 - STRUCTURES MULTIBRANCHES	172
5.3.1 - Généralités	172
5.3.2 - Coupleur double branche	172
5.3.2.1 - Energie d'injection.....	173
5.3.2.2 - Largeur des ports d'accès.....	174
5.3.3 - Modes de fonctionnement du coupleur double branche	175
5.3.3.1 - Couplage par mode évanescent	175
5.3.3.2 - Coupleur 3 dB	178
5.3.3.3 - Les transferts latéraux.....	179
5.3.4 - Couplage multibranche	180
5.4 - CONCLUSION	181
BIBLIOGRAPHIE CHAPITRE 5	183
CONCLUSION GENERALE	185
ANNEXE A : FONCTION D'ONDE DANS LES SYSTEMES SEMI-OUVERTS.....	187
ANNEXE B : METHODE DU RACCORDEMENT DE MODES.....	189
Regroupements des matrices de répartition	192
Structures deux ports entrée/sortie.....	192
Structures quatre ports entrée/sortie	193
ANNEXE C : INJECTION CONTINUE.....	195
ANNEXE D : CONDITIONS AUX LIMITES ABSORBANTES	197

INTRODUCTION GENERALE

INTRODUCTION GENERALE

Ce travail de thèse s'inscrit dans les différentes actions menées au sein de l'équipe "Composants Quantiques et Dispositifs Terahertz" de l'Institut d'Electronique et de Microélectronique du Nord. A l'heure où la montée en fréquence et l'amélioration de la fonctionnalité des systèmes microélectroniques représentent des axes majeurs de la recherche en électronique, cette association quantique-terahertz montre clairement qu'atteindre les longueurs d'ondes millimétriques et submillimétriques implique la prise en compte des aspects ondulatoires du transport électronique. La miniaturisation des dispositifs, liée à une demande sans cesse croissante d'intégration à grande échelle des composants, renforce cette idée dans la mesure où la longueur d'onde de de Broglie des électrons devenant du même ordre de grandeur que la dimension des zones actives, induit alors la discrétisation des états d'énergie accessibles aux porteurs. Ainsi loin de considérer l'apparition des effets quantiques comme une limite physique des composants à base de semiconducteurs, l'électronique "Quantique" se propose de concevoir des structures dont les principes de fonctionnement sont basés sur les effets quantiques, notamment d'interférences. De plus pour ces composants de faible dimensionnalité, on tire parti de temps de réponse intrinsèques très courts, typiquement de l'ordre ou inférieur à la picoseconde, permettant d'envisager des fréquences de fonctionnement proches du Terahertz.

Si d'un point de vue théorique nombre de travaux ont été consacrés aux aspects quantiques du transport électronique dans les semiconducteurs dès les années soixante, il a fallu attendre les années quatre-vingt pour en observer à température ambiante les premières manifestations. Depuis, la maîtrise de la croissance des matériaux III-V et les progrès des technologies aux petites dimensions ont permis l'émergence d'une nouvelle génération de composants dont le dénominateur commun est la réduction de dimensionnalité du transport dans les zones actives. En effet, selon les filières de matériaux utilisés (Arséniures, Phosphures, Antimoniures et composés dérivés), des situations de confinement et de transport par effet tunnel très différentes peuvent être rencontrées avec un champ très large d'applications potentielles. Citons pour exemples : l'effet de conductance ou de transconductance différentielle négative et les effets de symétrie capacitive - qui peuvent être exploités pour la génération directe de puissance ou la multiplication harmonique à très hautes fréquences en électronique analogique -, ou encore la simplification des circuits aussi bien en électronique analogique que numérique.

Ce travail sera essentiellement consacré aux outils de modélisation des composants quantiques en résolvant notamment les équations de Schrödinger et de Poisson. Dans la mesure du possible nous confronterons les résultats numériques à l'expérience, plus particulièrement pour les diodes à effet tunnel résonnant étudiées en collaboration avec le Laboratoire Central de Recherche de Thomson, et pour les hétérostructures à modulation de dopage caractérisées au Commissariat à l'Energie Atomique de Saclay.

Le rôle des simulations sera double :

- D'une part, elles pourront servir d'outils d'optimisation de structures déjà largement étudiées telles que les diodes double barrière à effet tunnel résonnant. Dans ce cas, on s'attachera par ingénierie de bande interdite d'un coté à améliorer les figures de mérite de ces composants, à savoir les densités de courant admissibles et les contrastes de conduction, et de l'autre à analyser en détail les processus microscopiques à l'origine des évolutions de ces grandeurs mesurables.
- D'autre part, elles serviront d'outil "d'expérimentation numérique" avec pour but une meilleure compréhension du transport balistique dans les structures à base de guides d'ondes électroniques.

C'est dans cette double optique que nous orienterons la rédaction de ce mémoire en envisageant successivement l'étude de structures bidimensionnelles puis unidimensionnelles. Pour cela, nous ferons appel à un certain nombre de techniques numériques, aussi bien en régime statique qu'en régime dépendant du temps, et préciserons à chaque fois les hypothèses de calcul et les domaines de validité des modèles développés. Pour ne pas alourdir l'exposé, les détails des procédures numériques seront reportés dans les annexes.

Dans le premier chapitre, nous présenterons les différentes configurations possibles dans lesquelles les effets quantiques deviennent primordiaux. En partant du semiconducteur massif tridimensionnel pour aller jusqu'à la boîte quantique 0D, cette étude nous permettra non seulement de définir les paramètres fondamentaux nécessaires à la simulation, mais aussi d'établir les équations principales permettant de remonter aux propriétés électriques. Le lecteur familier avec ces notions pourra aborder ce mémoire directement à partir du chapitre 2.

Dans le deuxième chapitre consacré à l'effet tunnel résonnant intra-bande, nous détaillerons un modèle d'injection bidimensionnelle basé sur le couplage des équations de Schrödinger et de Poisson. Nous porterons notre attention plus particulièrement sur la validité de l'approche semi-classique d'accumulation de charges par rapport à une analyse purement quantique. Les origines des non-linéarités de conduction, et particulièrement de l'effet de résistance différentielle négative, seront discutées et les résultats numériques seront confrontés aux caractérisations expérimentales effectuées au laboratoire sur des composants des filières GaAs et InP.

En vue de créer les conditions nécessaires à l'obtention d'un régime balistique unidimensionnel, nous consacrerons le troisième chapitre à l'étude d'hétérostructures semiconductrices à modulation de dopage permettant d'obtenir un gaz bidimensionnel de très haute mobilité. Dans ces structures, nous verrons qu'un confinement latéral additionnel peut être obtenu par le dépôt de grilles Schottky en surface, afin de restreindre par effet de champ le transport électronique dans une seule direction de l'espace. Supportés par une étude expérimentale de mesure de mobilité basse température, les pré-requis nécessaires à l'obtention de mobilités élevées, en termes de paramètres matériaux et structuraux, seront discutés. Enfin, les équations relatives au transport unidimensionnel en régime balistique seront présentées ainsi que les hypothèses simplificatrices utilisées par la suite.

Les deux derniers chapitres seront consacrés aux propriétés de conduction dans des structures à base de guides d'ondes électroniques. Tout d'abord, les spectres de conductance seront étudiés dans des structures monoguide comportant des discontinuités, notamment des

constrictions ou des zones élargies. Une étude paramétrique relativement exhaustive sera effectuée en fonction des dimensions du dispositif et des conditions d'injection. Assimilables dans la plupart des cas à des cavités résonnantes, l'influence des états propres (liés et quasi-liés) sur le fonctionnement de ces dispositifs sera plus particulièrement analysée, notamment par le biais d'une étude temporelle de la conductance du stub électronique en régime de commutation.

Enfin dans le cinquième chapitre, nous envisagerons les jonctions entre guides d'ondes électroniques en focalisant notre attention sur les coupleurs simple et double branche. Nous dégagerons ainsi pour chaque structure différents modes de fonctionnement tels que le couplage par mode évanescent, le transfert latéral avec ou sans changement de direction de propagation, ou le coupleur hybride. Nous montrerons que les principes de fonctionnement reposent soit sur des interférences constructives ou destructives aux croisements des guides en régime de propagation monomode, soit sur des ruptures de symétrie observées en régime multimode.

CHAPITRE 1

EFFETS QUANTIQUES DANS LES SEMICONDUCTEURS

CHAPITRE 1 : EFFETS QUANTIQUES DANS LES SEMICONDUCTEURS

Dans ce chapitre, nous nous proposons de montrer la diversité des phénomènes physiques mis en jeu dans les structures quantiques en accroissant progressivement les degrés de confinement, avec le souci de montrer combien la maîtrise et la compréhension des effets quantiques dépendent de la bonne connaissance des propriétés intrinsèques des matériaux semiconducteurs constitutifs et de leurs agencements. Après un bref rappel sur les règles fondamentales à respecter dans la conception des hétérostructures, nous expliciterons les notions de systèmes fermés et ouverts en nous basant sur les systèmes confinés dans une direction de l'espace - transistors à effet de champ ou diodes à effet tunnel résonnant par exemple -. Ensuite, nous discuterons de la diminution de dimensionnalité aboutissant aux fils et boîtes quantiques dans lesquels l'énergie est quantifiée respectivement dans deux et trois directions de l'espace.

Conjointement, nous présenterons les équations de base indispensables à la simulation des propriétés de confinements électroniques de ces dispositifs. Certains aspects, propres à tel ou tel composant, seront détaillés dans les chapitres suivants.

1.1 - CONCEPTION DES HETEROSTRUCTURES

De manière rigoureuse, l'étude des grandeurs macroscopiques apparaissant dans toute hétérostructure semiconductrice, plus ou moins complexe, nécessite la prise en compte de tous les phénomènes microscopiques intervenant dans la structure complète. Pour des raisons évidentes de simplicité, il est préférable de s'en tenir à la détermination des structures de bandes de chaque matériau constitutif à partir desquelles on peut déduire des propriétés électroniques distinctes. Nous nous intéressons en particulier aux matériaux appartenant à la filière III-V.

1.1.1 - Structure de bandes

Les relations de dispersions $\varepsilon(k)$, entre l'énergie ε et le vecteur d'onde k , peuvent être déterminées par diverses méthodes telles que celles des liaisons fortes ou du pseudopotentiel. Ces méthodes, qui résolvent l'équation de Schrödinger à l'échelle atomique en se basant sur la périodicité et les symétries du cristal semiconducteur, diffèrent principalement dans l'écriture du terme d'énergie potentielle de l'Hamiltonien. Tandis que le milieu ambiant subi par l'électron est, dans le cas des liaisons fortes, décrit par les interactions entre orbitales au premier ou second ordre, la méthode du pseudopotentiel utilise des paramètres de potentiel moyen suivant les directions principales de symétrie du réseau. Selon la méthode et le nombre

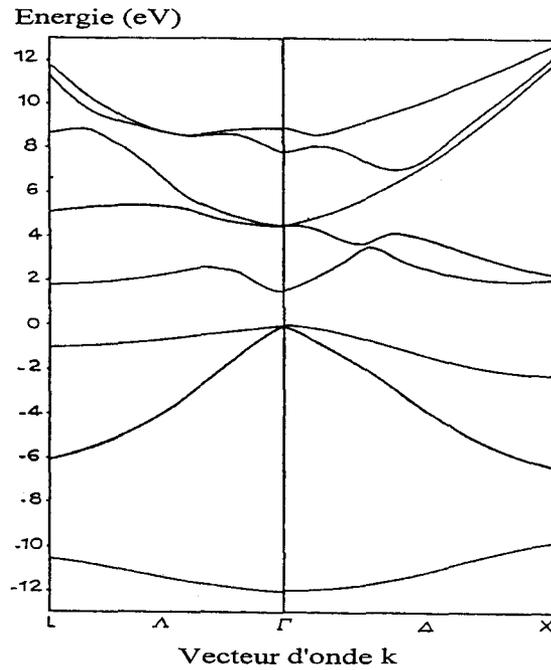


FIGURE 1.1 : Structure de bandes d'énergie du matériau GaAs dans les directions $\Delta(\langle 100 \rangle)$ et $\Delta(\langle 111 \rangle)$ - d'après la référence [1] -.

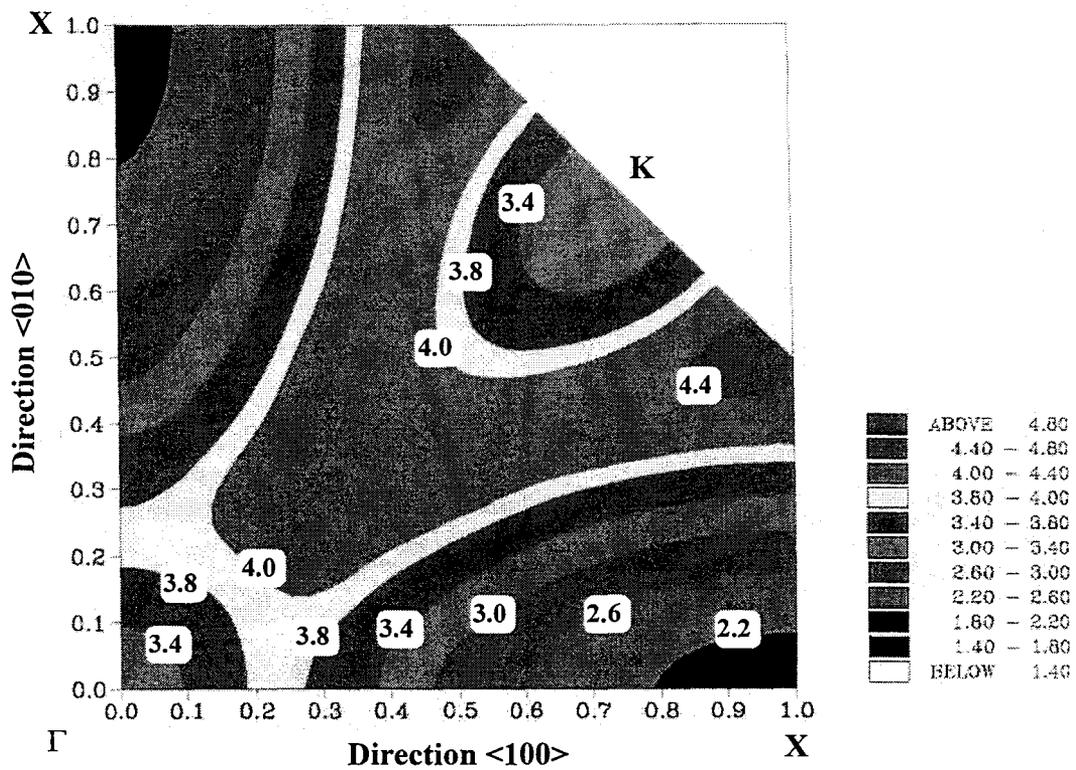


FIGURE 1.2 : Courbe isoénergie de la première bande de conduction du matériau AlAs dans le plan $\Gamma X K$. L'énergie (en eV) est référencée par rapport au maximum de la bande de valence au point Γ - d'après la référence [1] -.

de paramètres utilisés, une précision plus ou moins importante est obtenue pour décrire l'ensemble des relations de dispersion $\epsilon(k)$. Par la suite nous intéresserons exclusivement au transport électronique, nous pouvons utiliser un calcul de structures de bandes par la méthode du pseudopotentiel empirique local qui semble être la plus appropriée pour la description des bandes de conduction. Afin d'illustrer quelques particularités des structures de bandes de semiconducteurs III-V, considérons les binaires GaAs et AlAs comme exemples.

Les figures 1.1 et 1.2 représentent respectivement la structure de bandes du GaAs et la courbe isoénergie de la première bande de conduction du matériau AlAs calculées au laboratoire par la méthode du pseudopotentiel empirique local [1]. Précisons que cette méthode ne décrit pas la levée de dégénérescence trous lourds/trous légers des bandes de valence. On observe, figure 1.1, la présence d'une bande d'énergie interdite de 1.49 eV. De part et d'autre, on définit la bande de valence et la bande de conduction dont les extrêmes se situent au point Γ de la zone de Brillouin (gap direct). Cette définition sous-entend à 0 K, un remplissage complet de la bande de valence en électrons, tandis que la bande de conduction est vide. Les autres minima de la bande de conduction aux points X et L, à des énergies égales respectivement à 2.03 eV et 1.82 eV, correspondent à des vallées satellites dont il faut éventuellement tenir compte suivant les mécanismes de transport considérés. Le gap du binaire AlAs (2.02 eV) est quant à lui déterminé sur la figure 1.2 par un minimum de la bande de conduction au point X (gap indirect). Remarquons la forte anisotropie en ce point X et l'isotropie au point Γ , toutes les deux présentes de la même manière pour le GaAs.

1.1.2 - Paramètres matériaux

En général, dans les logiciels de simulation de composants semiconducteurs, le détail de la structure de bandes est ignoré. On considérera de fait le matériau semiconducteur comme un milieu équivalent dans lequel les porteurs de charges peuvent se propager. Ce milieu est alors caractérisé principalement :

- dans l'espace réel, par le paramètre de maille cristalline (a).
- dans l'espace réciproque, par les extremums de bandes de conduction (Γ , X, L), pour les électrons, qui définissent le type de gap (direct ou indirect) et les différentes vallées satellites. La bande de valence est généralement assimilée à son maximum dégénéré deux fois au point Γ afin de définir les bandes de trous lourds et de trous légers.

Pour chacun de ces extremums une masse équivalente (effective), contenant l'effet global du potentiel cristallin sur l'électron peut être définie. Celle-ci est inversement proportionnelle à la courbure des bandes d'énergie dans l'espace réciproque, et s'écrit dans le cas isotrope :

$$m_e^* = \frac{\hbar^2}{\partial^2 \epsilon / \partial k^2} \quad (1.1)$$

La prise en compte d'une éventuelle anisotropie conduit aux définitions d'une masse effective longitudinale m_{el}^* et d'une masse effective transversale m_{et}^* déterminées en

considérant la courbure de bande dans les directions cristallines $\langle 100 \rangle$ d'une part, $\langle 010 \rangle$ et $\langle 001 \rangle$ d'autre part.

Ces définitions sont aussi valables pour les matériaux ternaires et quaternaires pour lesquels des lois analytiques ont été établies à partir des structures de bandes exactes, en fonction des paramètres matériaux des binaires les constituant. Dans l'optique de mettre en évidence des effets quantiques par l'intermédiaire d'hétérostructures, le choix d'utiliser des semiconducteurs III-V est pleinement justifié par la variété de matériaux possédant des paramètres volumiques adaptés aux applications visées.

La figure 1.3 représente l'évolution du paramètre de maille cristalline (a) en fonction de la largeur de bande interdite (E_g) pour l'ensemble des composés III-V et leurs alliages à la température ambiante. Ainsi comme le montre cette figure, la valeur du gap E_g , l'un des paramètres essentiels, peut varier dans des proportions importantes : de 0.37 eV, pour le binaire InAs jusqu'à 2.2 eV pour le matériau AlAs. Comme nous le verrons ci-dessous, la désadaptation de maille de l'ordre de 7% apparaissant entre ces deux matériaux constitue cependant une limitation pour la réalisation d'une hétérostructure composée par ces binaires.

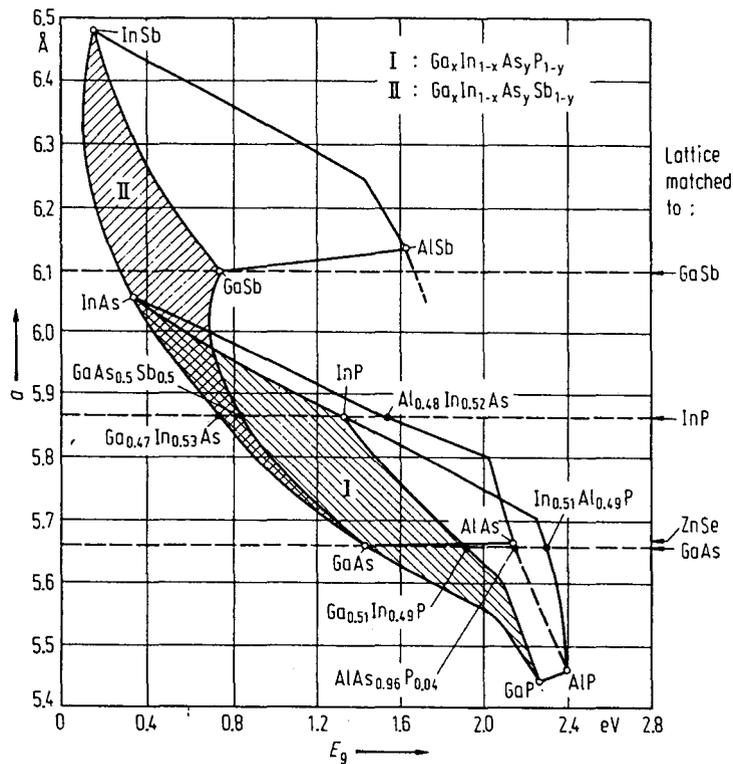


FIGURE 1.3 : Evolution du paramètre de maille (a) en fonction du gap d'énergie (E_g) de l'ensemble des composés III-V - tirée de la référence [2] -.

1.2 - LES HETEROSTRUCTURES

1.2.1 - Principe

Nous avons a priori le choix entre plusieurs types de matériaux III-V possédant des largeurs de bande interdite différentes que nous pouvons juxtaposer de manière à moduler, à grande échelle dans l'espace réel, le potentiel vu par les électrons. Les progrès technologiques toujours croissants permettent quant à eux de réaliser des empilements de semiconducteurs de dimensions bien définies et de bonne qualité, augmentant ainsi les possibilités d'obtenir une multitude d'effets quantiques bien maîtrisés. L'hétérostructure simple, obtenue par empilement de deux matériaux différents, est caractérisée par une répartition de la discontinuité de gap entre la bande de conduction et la bande de valence. Suivant les matériaux utilisés, différents arrangements des bandes peuvent être rencontrés.

1.2.2 - Les différents types

Nous avons représenté schématiquement figure 1.4 les trois types d'hétérostructures existants dans l'hypothèse d'une interface abrupte. Il s'agit d'une représentation schématique qui ne tient aucunement compte des transferts de charges se produisant dans la réalité, et par conséquent ignorant les réactions de charge d'espace à l'interface des deux matériaux.

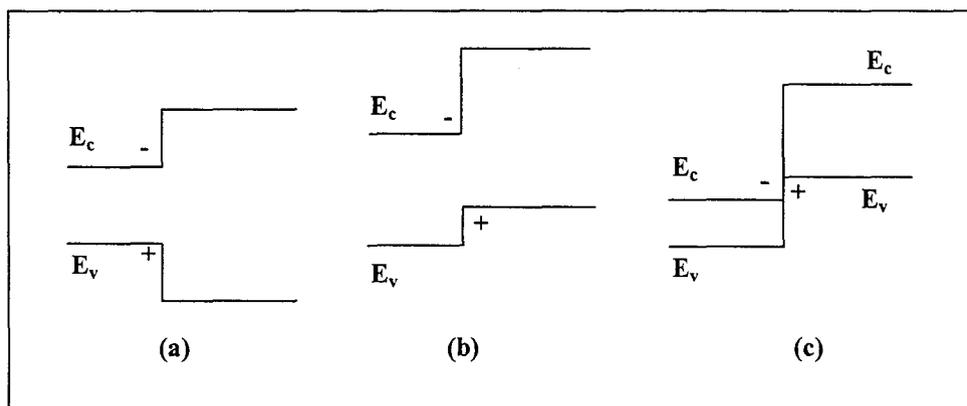


FIGURE 1.4 : Représentation schématique d'hétérostructures :

- de type I : (a), GaAlAs/GaAs par exemple.
- de type II : (b), InAs/AlSb par exemple.
- (c), InAs/GaSb par exemple.

Une hétérostructure de type I est définie par le fait que les extremums d'énergie des bandes de conduction et de valence, et donc les populations d'électrons et de trous, sont situés dans une même région de l'espace. Comme le montre le cas (a), le matériau à grand gap constitue une barrière de potentiel à la fois pour les électrons et les trous situés dans le matériau à plus faible gap. De manière complémentaire, une hétérostructure de type II implique des extremums des bandes de conduction et de valence dans deux régions de l'espace distinctes. Deux cas peuvent se présenter :

- le cas (b) où le matériau à faible gap correspond à une barrière de potentiel pour les trous, la barrière de potentiel électronique étant, comme pour les hétérostructures de type I, réalisée par le matériau à grand gap.

- le cas (c) pour lequel nous avons une rupture de bande interdite. En effet, la bande de conduction du premier matériau et une partie de la bande de valence du second se retrouvent en regard.

Pour ces deux dernières structures des propriétés optiques ou électroniques intéressantes peuvent être obtenues dans la mesure où les densités de porteurs libres sont localisées dans différentes régions de l'espace, cette séparation des différents porteurs introduisant des effets de réaction de charge d'espace prononcés et une diminution notable des effets de recombinaisons radiatives. Soulignons que ces hétérostructures de type II, observées notamment pour des matériaux à base d'antimoine, par exemple l'hétérostructure InAs/AlSb pour le cas (b) et InAs/GaSb pour le cas (c), ne seront pas considérées dans le cadre de ce travail. Nous ne considérerons en effet que des structures unipolaires.

Avant d'étudier plus précisément les différentes utilisations des hétérostructures semiconductrices, il est nécessaire d'envisager leur faisabilité technologique. Comme nous l'avons précédemment remarqué, les matériaux sont caractérisés par leur gap mais aussi par leur paramètre de maille. Celui-ci apporte une contrainte qui limite le nombre de combinaisons possibles des matériaux III-V pour la réalisation d'hétérostructures.

1.2.3 - Les filières GaAs et InP

L'empilement des semiconducteurs est obtenu par croissance de matériaux III-V sur un support que l'on peut considérer comme volumique (substrat) qui impose en général son paramètre de maille à l'ensemble de ces matériaux. Ceci implique d'utiliser, pour la croissance, des matériaux semiconducteurs présentant des paramètres de maille proches de celui du substrat utilisé. Comme précisé sur la figure 1.3, seuls quatre substrats sont disponibles à ce jour. Les substrats GaAs et InP nous intéressent plus particulièrement et constitueront les deux filières envisagées par la suite.

1.2.3.1 - Matériaux adaptés en maille

1.2.3.1.1 - Filière GaAs

Pour la filière GaAs, nous observons, figure 1.3, un bon accord de maille du ternaire $Ga_{1-x}Al_xAs$ pour toute la gamme de concentration en aluminium ($x=0 \rightarrow 1$). Le plus grand désaccord de maille, correspondant au binaire AlAs ($a=5.66 \text{ \AA}$), comparé à la maille du GaAs ($a=5.6532 \text{ \AA}$), nous indique une variation relative de la maille cristalline entre ce matériau et le substrat GaAs inférieure à 0.12% [2]. D'autre part, on observe l'adaptation possible en maille de certains quaternaires $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}$ (zone hachurée I). La maîtrise de la croissance de ce type de matériau est délicate et au vu des dimensions réduites envisagées plus tard, ces matériaux ne seront pas considérés. Pour les composés ternaires GaAlAs, une différence de gap atteignant plus de 0.75 eV peut être envisagée, en considérant les binaires GaAs et AlAs. Rappelons cependant que les gaps de ces matériaux sont donnés pour un minimum de la bande de conduction au centre de la zone de Brillouin (point Γ) pour le binaire GaAs et dans la direction cristallographique $\langle 100 \rangle$ (point X) pour le binaire AlAs. Cette transition Γ -X, correspondant à un changement de vecteur d'onde k , est un obstacle théorique important pour l'étude des phénomènes quantiques. Rappelons aussi qu'au point X, la structure de bandes du matériau AlAs présente une forte anisotropie qui nous contraint à considérer

différents paramètres volumiques suivant les mécanismes de transport mis en jeu [3]. Il résulte de ces remarques une contrainte concernant le taux de concentration en aluminium pour conserver dans le ternaire GaAlAs un gap direct.

Nous avons représenté sur la figure 1.5 les variations de la bande de conduction aux points X et Γ du ternaire $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$, référencée par rapport au haut de la bande de valence (point Γ), à 300 K en fonction du taux d'aluminium (x). Ces variations sont exprimées d'après la référence [4] par :

$$E_c^\Gamma = 1.425 + 1.155x + 0.37x^2 \quad (1.2)$$

$$E_c^X = 1.911 + 0.05x + 0.245x^2$$

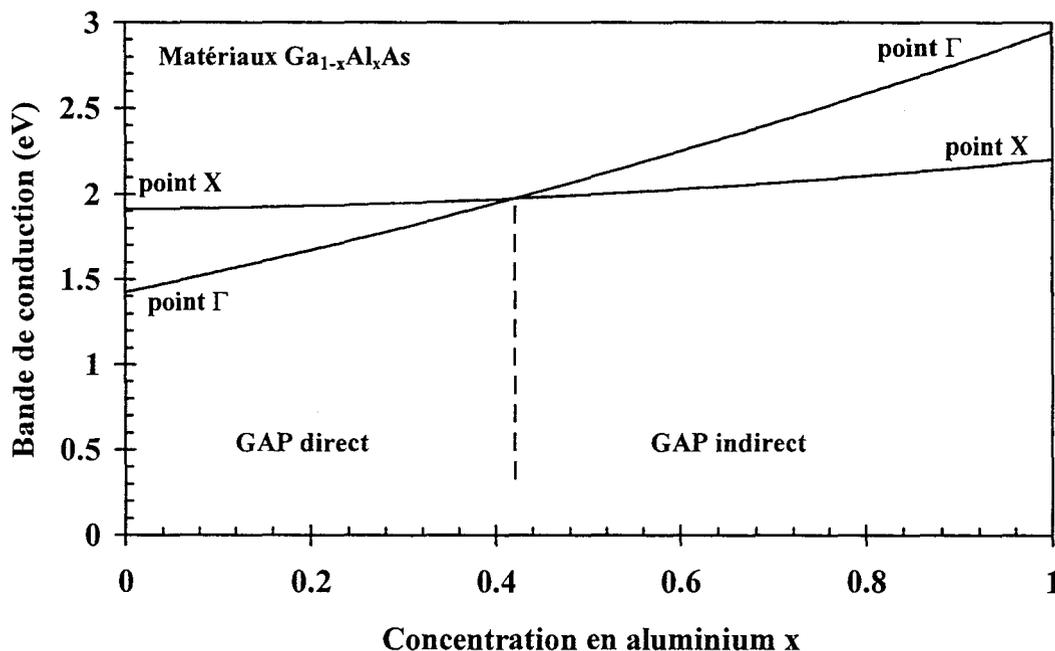


FIGURE 1.5 : Evolutions de la bande de conduction aux points Γ et X du matériau $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ en fonction de la concentration en aluminium (x). L'énergie est référencée par rapport au maximum de la bande de valence au point Γ .

Ainsi comme le montre la figure, nous obtenons un minimum de la bande de conduction au point Γ , correspondant à un matériau à gap direct, lorsque $x < 0.4$. Dans cette gamme de concentration nous avons prédominance du transport par vallée Γ mais limitons la différence de gap entre les matériaux GaAs et GaAlAs à moins de $\Delta E_g = 0.5$ eV. Néanmoins pour des couches de faible épaisseur (< 20 Å), signalons que nous pourrions négliger les transitions Γ -X et ne considérer que le transport par vallée Γ , même pour des matériaux à gap indirect. Dans le cas de l'AlAs, on obtient alors en vallée Γ un ΔE_c maximal de l'ordre de 0.9 eV par rapport au GaAs.

Enfin, nous considérerons que 60% de la discontinuité des largeurs de bande interdite des hétérostructures GaAlAs/GaAs se reporte sur la bande de conduction [5][6] et que la masse effective réduite des l'électrons, définie au point Γ , dans le matériau $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ est donnée par [4] :

$$m^* = 0.067 + 0.083x \quad (1.3)$$

1.2.3.1.2 - Filière InP

Le nombre de matériaux ternaires adaptés en maille sur InP se limite à deux : le $\text{Ga}_{0.47}\text{In}_{0.53}\text{As}$ et l' $\text{Al}_{0.48}\text{In}_{0.52}\text{As}$ (figure 1.3). Pour les mêmes raisons que précédemment, les quaternaires GaInAsP et GaInAsSb ne sont pas exploités ici. L'intérêt que présente la filière InP, comparée à la précédente, réside dans la possibilité de disposer de matériaux à faible bande interdite. En particulier celle du $\text{Ga}_{0.47}\text{In}_{0.53}\text{As}$ est de l'ordre de $E_g=0.75$ eV, soit environ deux fois plus faible que celle du GaAs. A cette diminution de gap correspond une masse effective des électrons plus faible qui implique d'une part une augmentation des vitesses de déplacement des charges et donc a priori des densités de courant importantes, et d'autre part des effets de confinement accrus avec pour corollaire une séparation des niveaux quantiques plus prononcée.

Le tableau 1.1 récapitule les valeurs de gap (E_g) et de masse effective réduite des électrons (m^*) au point Γ des matériaux $\text{Ga}_{0.47}\text{In}_{0.53}\text{As}$ et $\text{Al}_{0.48}\text{In}_{0.52}\text{As}$ à la température ambiante. Ces paramètres ont été déterminés [7] par interpolation des paramètres binaires GaAs, AlAs, et InAs d'après les relations proposées par Adachi [8].

matériau	E_g (eV)	m^*
$\text{Ga}_{0.47}\text{In}_{0.53}\text{As}$	0.77	0.0463
$\text{Al}_{0.48}\text{In}_{0.52}\text{As}$	1.49	0.084

TABLEAU 1.1 : Valeurs de gap (E_g) et de masse effective réduite des électrons (m^*) au point Γ des matériaux ternaires GaInAs et AlInAs adaptés en maille sur substrat InP.

Ainsi on remarque que la masse effective électronique du matériau GaInAs est, comme attendu, inférieure à celle du binaire GaAs (0.067). Enfin, précisons qu'il s'agit de deux matériaux à gap direct et que nous considérerons, de la même façon que précédemment, un report de 60% de la discontinuité de gaps sur la bande de conduction à l'interface des deux matériaux.

Bien que la différence de gap (0.72 eV) entre les deux matériaux soit supérieure à celle que l'on pouvait obtenir dans la filière GaAs, les discontinuités de bandes restent faibles. Pour pallier ce problème, il peut être envisagé d'utiliser des matériaux désadaptés en maille dont la croissance est appelée pseudomorphique.

1.2.3.2 - Croissances pseudomorphiques

Dans ce type de croissance une déformation du réseau cristallin se produit de façon à conserver dans le plan perpendiculaire à la croissance un paramètre de maille constant. Le substrat, qui constitue le matériau le plus volumineux, impose son paramètre de maille aux couches de matériaux désadaptés qui subissent alors soit une compression, cas du matériau GaInAs sur substrat GaAs, soit une tension, cas du binaire AlAs sur substrat InP.

Nous illustrerons les différentes contraintes émanant de ce type de croissance en nous intéressant au cas du matériau GaInAs sur substrat GaAs. Comme le montre la croissance pseudomorphique de ce matériau schématisée en insert de la figure 1.6, la maille cristalline du GaInAs, supérieure à celle du GaAs, s'adapte par compression dans le plan de l'interface. Il en résulte un étirement de la maille du GaInAs dans la direction de croissance.

1.2.3.2.1 - Longueur critique

La modification de la maille cristalline provoque un stockage d'énergie élastique dans la couche contrainte ; si celui-ci devient trop important, une rupture peut intervenir avec l'apparition de dislocations. Afin d'éviter la création de ces dernières, grâce auxquelles le matériau contraint pourrait retrouver son propre paramètre de maille, l'épaisseur de la couche du matériau doit rester inférieure à une longueur critique L_c .

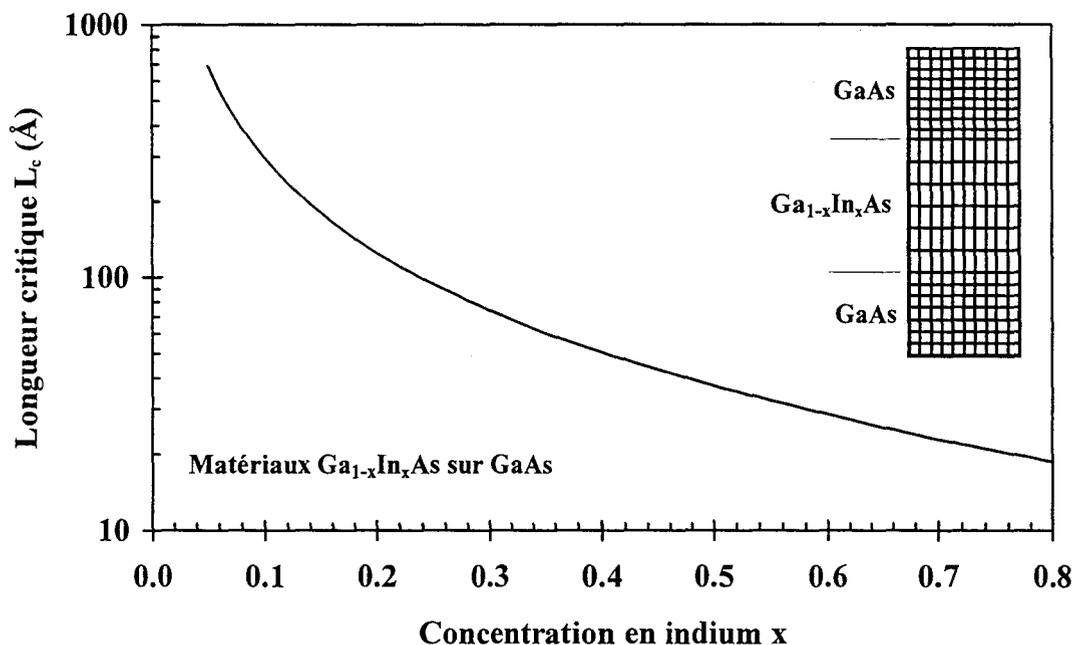


FIGURE 1.6 : Evolution de la longueur critique L_c du matériau $\text{Ga}_{1-x}\text{In}_x\text{As}$ pseudomorphique sur substrat GaAs en fonction de la concentration en indium (x) - d'après la référence [3] -.

L'évolution de la longueur critique (L_c) en fonction du pourcentage d'indium (x) du composé GaInAs désadapté sur substrat GaAs, déterminée par le modèle de Matthews [9], est représentée figure 1.6 [3]. La décroissance monotone de la longueur critique pour x croissant s'explique par la désadaptation de plus en plus marquée du paramètre de maille lorsque le composé ternaire tend vers le matériau InAs ($x=1$). Il en résulte des risques d'apparition de

dislocations plus proches de l'interface et donc une longueur critique pour ces ternaires moindre.

Le modèle de Matthews n'est pas unique pour rendre compte de l'apparition de dislocations. Un désaccord quantitatif important existant entre les divers modèles existants ne nous permet pas de connaître avec exactitude les épaisseurs limites des couches pseudomorphiques [3] qui dépendent fortement des conditions de croissances. Pour cette raison, nous retiendrons que pour des composés GaInAs dont la concentration en indium est d'environ 25%, la longueur critique est de l'ordre de quelques dizaines d'Angströms. Bien qu'au vu de la différence plus importante des mailles cristallines, on puisse s'attendre à ce que la longueur critique du binaire AlAs contraint sur InP soit plus faible que celle du matériau Ga_{0.75}In_{0.25}As sur GaAs, l'expérience montre que des couches de ce type peuvent être épitaxiées sur quelques dizaines d'Angströms sans apparition de dislocations.

1.2.3.2.2 - Paramètres structuraux

Contrairement aux composés GaAlAs, les ternaires GaInAs présentent quelque soit le pourcentage d'indium un gap de type direct : le transport électronique s'effectue par conséquent toujours par vallée Γ . Dans le cas d'un matériau non contraint, les variations du gap en fonction du taux d'indium (x) sont données à $T=300$ K par [8] :

$$E_g(x) = 1.424 - 1.5x + 0.4x^2 \quad (1.4)$$

Pour l'hétérojonction GaInAs/GaAs, pour laquelle le ternaire est contraint, la différence de gap entre les deux matériaux introduit un décalage dans la bande de conduction qui peut être directement exprimée en fonction du taux de concentration en indium x par [10] :

$$\Delta E_c = 0.75x \quad (1.5)$$

Cette relation est déterminée en introduisant le décalage des bandes d'énergie permises engendré par la contrainte du matériau GaInAs pseudomorphique dont le gap à $T=300$ K et pour $x < 0.3$ est exprimé par [10] :

$$E_g(x) = 1.424 - 1.115x \quad (1.6)$$

Le report de la différence de gap entre les deux matériaux sur la bande de conduction correspond alors à 65%.

Par ailleurs, la contrainte subie par la couche pseudomorphique GaInAs introduit une anisotropie de la structure de bande au point Γ . Celle-ci nous oblige en général à distinguer la masse effective perpendiculaire aux couches de la masse effective parallèle. Cependant, les évolutions de ces masses en fonction du taux d'indium montrent que seule la masse effective parallèle est fortement affectée par l'indium [11]. La masse effective réduite perpendiculaire reste quant à elle, pour $x < 25\%$, comprise entre 0.06 et 0.067.

Dans la suite, pour la filière InP, nous focaliserons nos études sur le transport perpendiculaire aux couches dans des structures tunnel et nous négligerons cette anisotropie de masse résultant des contraintes. Nous utiliserons aussi dans ces composants le binaire AlAs

contraint qui nous permettra d'optimiser les discontinuités de potentiel en bande de conduction avec au point Γ , une hauteur de barrière $\Delta E_c = 1.2$ eV par rapport au GaInAs associée à une masse effective réduite perpendiculaire $m_{\perp}^* = 0.11$.

Ainsi, nous disposons de deux filières de matériaux, en accord de maille ou contraints, qui nous permettent d'envisager une ingénierie de bande conduisant à différentes situations de confinements électroniques. Néanmoins, la connaissance des paramètres des matériaux n'est pas suffisante pour l'étude du transport électronique et il est nécessaire de procéder à une phase de simulation des effets de réaction de charge d'espace et de confinement.

1.2.4 - Modélisation des hétérostructures

1.2.4.1 - Réaction de charge d'espace

Une hétérostructure créée par juxtaposition d'un matériau à grand gap dopé et d'un matériau à plus faible gap, également dopé ou non intentionnellement dopé (n. i. d.), donne naissance à un échange électronique entre les matériaux, qui se produit de façon à atteindre un équilibre thermodynamique. Ce dernier, caractérisé par un niveau de Fermi constant à travers la structure, provoque une désertion des porteurs du matériau à grand gap et, par voie de conséquence, un enrichissement du matériau à petit gap : c'est la réaction de charge d'espace. Localement, un potentiel électrostatique V_{Φ} , traduisant la réaction de charge d'espace, est déterminé par l'équation de Poisson :

$$\Delta V_{\Phi} = -\frac{\rho}{\epsilon_s} \quad (1.7)$$

dans laquelle ρ est la densité de charge d'espace et ϵ_s la permittivité du matériau semiconducteur. La densité de charge d'espace ρ correspond au déséquilibre local existant d'une part entre les donneurs ionisés N_D^+ et la charge électronique libre n , et d'autre part entre les accepteurs ionisés N_A^- et les trous libres p . Elle est exprimée par :

$$\rho = q(N_D^+ - N_A^- - n + p) \quad (1.8)$$

où q est la charge électronique, prise positive. Classiquement, lorsque les charges sont libres dans les trois directions de l'espace, les densités électroniques et de trous sont déterminées à partir de la densité d'états et de la statistique de Fermi-Dirac.

La figure 1.7 représente l'évolution schématique du bas de bande de conduction d'une hétérostructure tenant compte de la réaction de charge d'espace. Ainsi, l'existence d'un puits de potentiel à droite de l'interface de dimension caractéristique inférieure à la longueur de de Broglie de l'électron conduit localement à la discrétisation du domaine d'énergie. La détermination des densités de charges nécessite alors la prise en compte du confinement et l'utilisation d'un calcul quantique. Les variations des potentiels électrostatique et cristallin à l'échelle macroscopique impliquent la résolution de l'équation de Schrödinger pour déterminer les états propres et les densités de probabilité électronique sur l'espace. Nous utiliserons pour cela le formalisme de la fonction enveloppe dans l'approximation de la masse effective.

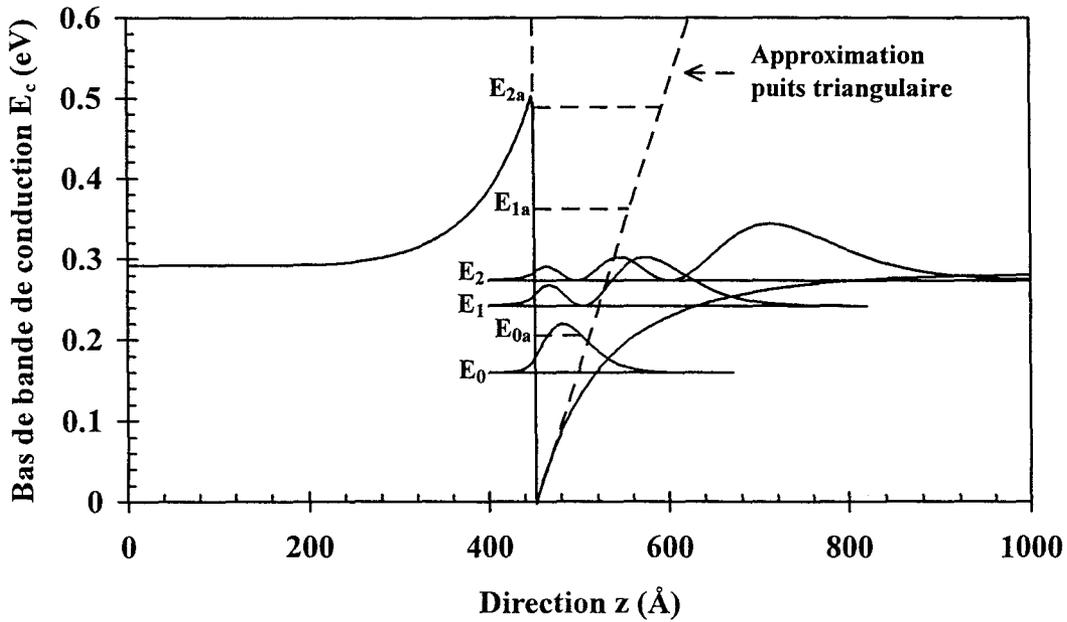


FIGURE 1.7 : Profil de bas de bande de conduction d'une hétérojonction GaAlAs/GaAs (trait plein), et approximation à un puits triangulaire (trait pointillé). Les niveaux quantiques E_i et les probabilités de présences associées sont donnés par un modèle numérique quantique, et les niveaux E_{ia} par l'approximation du puits triangulaire.

1.2.4.2 - Fonction enveloppe

Dans le cas général, l'étude de la quantification en énergie revient à déterminer les solutions stationnaires de l'équation de Schrödinger, qui dans l'espace réel tridimensionnel s'écrit :

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0} \Delta^2 \Psi + V(r) = E\Psi \quad (1.9)$$

dans laquelle m_0 est la masse de l'électron libre, $V(r)$ le potentiel cristallin à l'échelle atomique, E l'énergie de l'électron, et Ψ la fonction d'onde qui lui est associée. Dans le cas d'un matériau volumique, les solutions de cette équation aboutissent aux relations de dispersions générant la structure de bandes du matériau.

Considérons à présent un cas unidimensionnel correspondant à la simple hétérostructure. La quantification intervient dans ce cas dans la direction de croissance des couches semiconductrices (z). En assimilant chaque matériau constitutif à un milieu caractérisé par sa masse effective m_e^* dans lequel l'électron peut se propager, on peut procéder dans l'équation de Schrödinger à une séparation des variables spatiales, et ne s'intéresser qu'à la quantification en énergie dans la direction z . On considère alors un potentiel lentement variable à l'échelle atomique, résultant de la réaction de charge d'espace, et des raccordements d'interfaces. Dans un tel potentiel la fonction d'onde peut se décomposer en un produit d'une onde de Bloch (e^{ikz}), traduisant la périodicité du cristal, et une fonction lentement variable à l'échelle atomique, appelée fonction enveloppe $\phi(z)$. Ainsi, la

quantification en énergie sera donnée par la détermination des solutions de l'équation de Schrödinger à une dimension qui, dans l'approximation de la masse effective, s'écrit :

$$-\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{1}{m_e^*(z)} \frac{\partial}{\partial z} \varphi(z) \right) + V(z)\varphi(z) = E_{\perp} \varphi(z) \quad (1.10)$$

dans laquelle la masse de l'électron m_e^* déterminée d'après la structure de bandes du matériau introduit les variations du potentiel à l'échelle atomique, et où $V(z)$ représente les variations du potentiel à grande échelle. E_{\perp} correspond à l'énergie perpendiculaire aux couches, le mouvement dans les directions parallèles restant libre.

Dans les hétérostructures, suite au changement de matériau semiconducteur, donc de masse effective m_e^* , et à l'apparition de barrières de potentiel cristallines, la détermination des solutions de l'équation de Schrödinger impose des conditions de continuités déduites de la conservation du courant pour la fonction enveloppe et sa dérivée première. Dans l'approximation de la masse effective, celles-ci s'expriment à l'interface située en $z=z_0$ par :

$$\begin{aligned} \varphi(z_0^-) &= \varphi(z_0^+) \\ \text{et } \frac{1}{m_e^*(z_0^-)} \left(\frac{\partial \varphi(z)}{\partial z} \right)_{z_0^-} &= \frac{1}{m_e^*(z_0^+)} \left(\frac{\partial \varphi(z)}{\partial z} \right)_{z_0^+} \end{aligned} \quad (1.11)$$

où les signes "-" et "+" traduisent respectivement les matériaux à gauche et à droite de l'interface. Enfin la probabilité de présence des électrons dans la structure est définie par $|\varphi(z)|^2$. Nous utiliserons indistinctement dans la suite de ce travail les termes de fonction d'onde et de fonction enveloppe, et de plus toutes les résolutions de l'équation de Schrödinger seront obtenues dans l'approximation de la masse effective (équation 1.10).

1.3 - CONFINEMENT ELECTRONIQUE

1.3.1 - Structures fermées : confinement strict

1.3.1.1 - Définition

Considérons la structure composée d'un matériau à faible gap intercalé entre deux matériaux à grand gap dont l'évolution schématique du bas de bande de conduction, qui ne prend pas en compte la réaction de charge d'espace, est représentée figure 1.8.

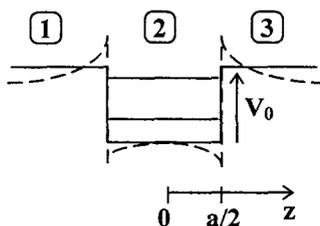


FIGURE 1.8 : Profil de bas de bande de conduction d'une double hétérostructure avec prise en compte de la réaction de charge d'espace (trait pointillé), ou dans l'approximation du puits rectangulaire (trait plein).

Les électrons se trouvant dans le puits de potentiel se déplacent librement dans les directions parallèles aux couches semiconductrices, mais ne peuvent s'échapper du puits par effet tunnel à travers les barrières de potentiel formées par les bandes d'énergie interdite latérales de largeurs supposées infinies. On parle alors d'un confinement strict et nous avons l'apparition de niveaux d'énergie discrets correspondant à des états quantiques liés. Cette restriction du transport électronique à deux dimensions est à la base de très nombreuses applications dans le domaine de la microélectronique et de l'optoélectronique.

1.3.1.2 - Structures

Nous allons nous intéresser principalement aux structures qui sont à la base des composants TEGFET (Two dimensional Electron Gas Field Effect Transistor). Ces transistors ont pour principe d'utiliser le confinement des électrons dans un puits de potentiel afin de créer, par accumulation de porteurs, un gaz bidimensionnel (gaz 2D). Deux principales caractéristiques sont recherchées :

- une densité de charges accumulées dans le puits élevée de manière entre autre à augmenter la puissance d'utilisation du composant.
- une mobilité électronique importante et bien supérieure à celle observée dans un matériau volumique. Ici il s'agit d'augmenter la vitesse des porteurs et donc la fréquence d'utilisation.

La première étude expérimentale de ces composants date de 1980, où Delagebeaudeuf et al [12] ont obtenu des caractéristiques prometteuses en vue de l'utilisation de ces transistors en micro-onde ou logique très rapide. La structure comportait une hétérostructure simple GaAlAs(dopée N_D^{++})/GaAs (non dopée) dont le profil de bas de bande de conduction peut correspondre à celui précédemment représenté figure 1.7. Par réaction de charge d'espace, les électrons sont confinés près de l'interface dans le puits de potentiel électrostatique et composent le gaz 2D. C'est la séparation spatiale du gaz 2D des impuretés lui ayant données naissance qui permet l'obtention de mobilités électroniques supérieures à celles obtenues dans le matériau massif identiquement dopé [13]. Nous reviendrons plus précisément sur les divers mécanismes d'interactions limitant la mobilité du gaz 2D dans le chapitre trois. Nous verrons que cette séparation spatiale est une condition nécessaire mais pas suffisante pour assurer une mobilité très élevée du gaz 2D.

Depuis, de nombreuses structures ont été proposées pour améliorer les caractéristiques de ces transistors. Citons de manière non exhaustive l'utilisation de couches pseudomorphiques et de dopages plans. Dans le premier cas, il s'agit de réaliser une double hétérojonction (figure 1.8) où l'accumulation de porteurs est renforcée par l'insertion d'un matériau de gap plus faible [14]. Dans le second cas, il s'agit d'améliorer conjointement le transfert électronique des couches dopées vers le canal, et la qualité des grilles Schottky déposées alors sur un matériau non dopé.

Soulignons enfin que l'utilisation des confinements stricts en électronique ne se limite pas aux composants de type TEGFET, l'optoélectronique en tire aussi pleinement profit. En particulier pour les diodes LASER, la création d'un puits de potentiel de type carré permet non seulement d'améliorer le confinement électronique dans la couche active mais aussi, par la différence d'indice de diffraction (n) des matériaux constituant la structure, de réaliser un

confinement photonique. Il en résulte une diminution favorable du courant de seuil au delà duquel l'émission radiative stimulée est obtenue [15].

1.3.1.3 - Modélisation

Les systèmes à étudier font intervenir deux phénomènes : le premier est lié à la réaction de charge d'espace et nécessite la résolution de l'équation de Poisson (équation 1.7), le second est relatif à la quantification proprement dite qui est obtenue par la détermination des solutions de l'équation de Schrödinger (équation 1.10). Ces phénomènes sont liés entre eux par la densité de charge d'espace $\rho(z)$, qui modifie le potentiel électrostatique $V_{\Phi}(z)$ créant le confinement, et dont l'évolution spatiale dépend de la probabilité de présence électronique. En effet, dans le cas d'un système bidimensionnel fermé, l'évolution des porteurs libres $n(z)$ est donnée par :

$$n(z) = \sum_i N_i |\varphi_i(z)|^2$$

$$\text{avec } N_i = \frac{m_e^*}{\pi \hbar^2} k_B T \ln \left(1 + \exp \left(\frac{E_F - E_i}{k_B T} \right) \right) \quad (1.12)$$

où $|\varphi_i(z)|^2$ est la probabilité de présence du $i^{\text{ème}}$ niveau quantique d'énergie E_i .

La résolution rigoureuse des équations de Poisson et de Schrödinger est alors obligatoirement autocohérente : imposant un potentiel initial, la détermination des états quantiques de la structure permet d'obtenir la répartition des porteurs libres $n(z)$, donc l'évolution de la charge d'espace $\rho(z)$, et ainsi d'en déduire une nouvelle variation du potentiel électrostatique. Il s'agit alors de réitérer les calculs des états quantiques et du potentiel jusqu'à l'obtention d'une convergence sur le potentiel et la quantification. Dans le cas général à chaque itération de l'équation de Poisson, les solutions exactes de l'équation de Schrödinger doivent être obtenues. Au sein du laboratoire, de nombreuses études ont porté sur la résolution de l'équation de Poisson, autocohérente ou non, mais principalement dans une description classique du transport électronique [16][17]. Nous utiliserons ici les mêmes méthodes numériques, basées sur les différences finies, et focaliserons notre attention sur le couplage nécessaire avec l'équation de Schrödinger pour décrire au mieux les effets de confinement. Néanmoins avant de présenter des modèles généraux mais complexes, nous allons envisager les divers degrés d'approximation que l'on peut envisager pour prendre en compte les effets de quantification et dégager ainsi les principaux phénomènes physiques à la base du transport quantique.

1.3.1.3.1 - Approximation de l'hétérojonction simple

En ce qui concerne l'accumulation de porteurs à l'interface d'une hétérojonction simple, l'approximation la plus couramment rencontrée est celle du puits triangulaire [18]. Elle est à la base de relations phénoménologiques intervenant dans l'étude du transport électronique dans les TEGFET [19].

Comme le montre la figure 1.7 (pointillés), au matériau à grand gap correspond, à gauche de l'interface, un mur de potentiel infini. Dans le second matériau, la réaction de

charge d'espace est approximée par une droite dont la pente correspond au champ électrique maximal de l'hétérojonction situé à l'interface. La résolution analytique de l'équation de Schrödinger mène à une fonction enveloppe de la forme :

$$\varphi_i(z) = A_i \left\{ \left(\frac{2m_{e\perp}^* qF}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{3}} \left(z - \frac{E_i}{qF} \right) \right\} \quad (1.13)$$

pour le niveau quantique i d'énergie référencée par rapport au fond du puits :

$$E_i \approx \left(\frac{\hbar^2}{2m_{e\perp}^*} \right)^{\frac{1}{3}} \left\{ \frac{3}{2} \left(i + \frac{3}{4} \right) \pi qF \right\}^{\frac{2}{3}} \quad (1.14)$$

où A_i est la fonction d'Airy d'ordre i et F est le champ électrique considéré.

D'autres modèles utilisent des méthodes variationnelles [18] ou introduisent des évolutions paraboliques du puits de potentiel [20]. Brièvement rappelons que l'approximation du puits triangulaire sous-évalue la charge accumulée dans le puits. Ceci s'explique par le décalage vers des énergies supérieures des niveaux quantiques (figure 1.7) qui est induit non seulement par la croissance du potentiel à droite de l'interface plus rapide que celle du puits réel, mais aussi par la considération d'un mur de potentiel infini à gauche de celle-ci. Il peut être alors nécessaire de considérer une variation parabolique du potentiel qui montre un meilleur accord en comparaison avec les résultats d'un calcul plus rigoureux [20].

1.3.1.3.2 - Approximation de la double hétérojonction

Dans le cas de la double hétérojonction, le confinement électronique peut être étudié en considérant un puits de potentiel carré. Comme le montre la figure 1.8, cette approximation est valable si la réaction de charge d'espace est moindre, en particulier pour des puits de faibles dimensions.

L'expression de la fonction enveloppe est alors donnée dans chaque zone distincte par :

$$\begin{aligned} \varphi_1(z) &= B_1 \exp(\alpha z) \\ \varphi_2(z) &= A_2 \exp(ikz) + B_2 \exp(-ikz) \\ \varphi_3(z) &= B_3 \exp(-\alpha z) \end{aligned} \quad (1.15)$$

$$\text{avec } \alpha = \sqrt{\frac{2m_{e\perp}^* (V_0 - E)}{\hbar^2}} \quad \text{et} \quad k = \sqrt{\frac{2m_{e\perp}^* E}{\hbar^2}}$$

Les niveaux quantiques sont alors déterminés graphiquement ou numériquement pour les énergies vérifiant les relations :

$$\begin{aligned} & \left| \cos\left(\frac{ka}{2}\right) \right| = \frac{k}{k_0} \quad \text{pour} \quad \tan\left(\frac{ka}{2}\right) > 0 \\ \text{ou} & \left| \sin\left(\frac{ka}{2}\right) \right| = \frac{k}{k_0} \quad \text{pour} \quad \tan\left(\frac{ka}{2}\right) < 0 \end{aligned} \quad (1.16)$$

avec $k_0 = \sqrt{\frac{2m_{e\perp}^* V_0}{\hbar^2}}$

Rappelons qualitativement qu'une diminution de la largeur du puits (a), ou l'augmentation de la hauteur des barrières (V_0), a pour conséquence un décalage des niveaux quantiques vers des énergies supérieures ainsi qu'une séparation des niveaux plus prononcée. A la limite, dans le cas du puits de potentiel infiniment profond, on obtient la relation analytique suivante :

$$E_i = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_{e\perp}^*} \left(\frac{i}{a}\right)^2 \quad (1.17)$$

D'après ces différentes relations analytiques et suivant la structure étudiée, la densité de charges libres $n(z)$ peut être approximée à partir des fonctions d'ondes et des niveaux quantiques ainsi calculés. Les approximations énoncées ci-dessus sont très utiles pour les études préliminaires des phénomènes quantiques dans les structures semiconductrices, et donnent souvent des évolutions qualitatives intéressantes sur les ordres de grandeurs des paramètres caractéristiques des systèmes étudiés. Cependant, elles échouent dès que le confinement intervient dans des systèmes plus complexes, dans lesquels par exemple la réaction de charge d'espace est prépondérante. Il est alors nécessaire d'envisager une modélisation numérique de l'équation de Schrödinger.

1.3.1.3.3 - Modèle numérique

La discrétisation par l'utilisation des différences finies de la dérivée seconde de φ_i par rapport à z permet de transformer l'équation de Schrödinger (équation 1.10) en une relation matricielle du type [17] :

$$[A][\varphi_i] = -\frac{2m_{e\perp}^* \Delta z^2}{\hbar^2} E_i [\varphi_i] \quad (1.18)$$

où $[A]$ est une matrice tridiagonale de dimension $N \times N$, avec N correspondant au nombre total de mailles du système discrétisé, dont les éléments des diagonales secondaires valent l'unité et ceux de la diagonale principale :

$$A_{jj} = -2 - \frac{2m_{e\perp}^* \Delta z^2}{\hbar^2} V_j \quad (1.19)$$

dans lesquels V_j est le potentiel en $z=j\Delta z$, et Δz le pas de discrétisation.

Cette relation matricielle est obtenue en faisant l'hypothèse que la fonction d'onde s'annule aux limites du domaine de simulation : $\varphi(0)=\varphi(N+1)=0$. Ceci implique que l'hétérojonction doit être suffisamment éloignée du bord du domaine étudié afin que la fonction d'onde, évanescence en ces points, puisse être négligée et considérée nulle. Précisons que ces conditions aux limites propres aux systèmes fermés peuvent expliquer à elles seules la différence fondamentale existant entre les études des systèmes fermés et ouverts. Ici elles permettent la normalisation des probabilités de présence en vue du calcul de la densité de charge. Les états quantiques et les fonctions d'ondes qui leur sont associées sont alors déterminés respectivement à partir des valeurs propres et des vecteurs propres de la matrice [A].

On remarque figure 1.7 l'importance d'un traitement numérique de la quantification puisque pour les niveaux d'énergie supérieurs la probabilité de présence électronique se délocalise et présente des maxima en dehors du puits de potentiel considéré dans l'approximation du puits triangulaire. Il apparaît donc nécessaire, pour prendre en compte ces répartitions singulières, d'utiliser un profil de potentiel réaliste pour traduire au mieux la localisation des porteurs dans le puits quantique. Notons cependant que ces niveaux supérieurs n'ont en général qu'une influence secondaire sur la réaction de charge d'espace dans la mesure où ils sont situés au dessus du niveau de Fermi. On montre par conséquent dans ce cas que seuls les deux premiers niveaux jouent un rôle prépondérant même à température ambiante [21].

Si cette approche permet d'interpréter le fonctionnement des transistors TEGFET, notons que leur domaine de validité est plus large. Couplé à une approche multibande, tant au niveau de l'équation de Poisson qu'au niveau de l'équation de Schrödinger, ce modèle numérique permet d'étudier les transitions inter-bandes dans les structures de type I ou II, afin d'interpréter par exemple les spectres de photoluminescence, et d'analyser les propriétés intrinsèques des interfaces entre semiconducteurs [22].

Finalement, nous rappelons que la charge électronique, confinée strictement dans la direction de croissance, ne peut se déplacer librement que dans les directions parallèles à l'interface : le transport s'effectue par conséquent dans ces directions. Dans l'hypothèse où le canal créé est infiniment étendu, la seule possibilité de couplage entre le puits (2D) et le continuum d'énergie (3D) se fait dans la direction perpendiculaire à l'hétérostructure. Le confinement strict se traduit alors par un temps de résidence infini des électrons liés à chaque niveau quantique. Cette notion de transport parallèle n'est pas unique, et nous allons aborder maintenant le cas de structures "ouvertes" dans lesquelles il existe un couplage entre les niveaux d'énergie discrets et le continuum tridimensionnel. On parlera alors de transport perpendiculaire ou vertical.

1.3.2 - Structures ouvertes : niveaux quasi-liés

Comme précédemment les dimensions parallèles aux couches sont considérées infinies de sorte que seules les variations perpendiculaires des potentiels cristallin et électrostatique régissent la quantification électronique. Le couplage entre la zone de confinement et le

1.3.2.1 - La diode double barrière

Cette structure, appelée aussi diode à effet tunnel résonnant ou RTD (Resonant Tunneling Diode), est obtenue dans son principe de base par l'empilement successif de matériaux à grand gap, faible gap, puis de nouveau grand gap, et elle est terminée de chaque côté par un matériau à faible gap. Il en résulte la création d'un puits de potentiel couplé au continuum de part et d'autre par une barrière de potentiel (figure 1.9).

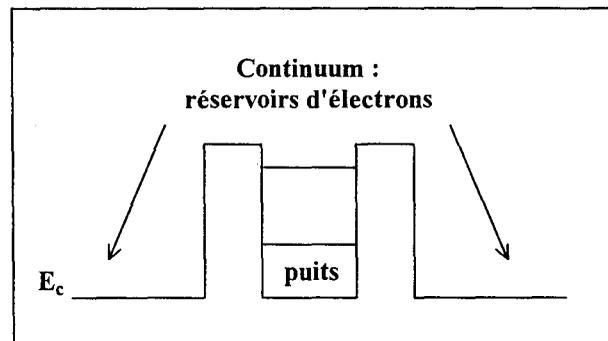


FIGURE 1.9 : Représentation schématique du bas de bande de conduction d'une diode double barrière. Deux niveaux d'énergie quasi-liés prennent place dans le puits de la structure.

Le confinement électronique compris entre ces deux barrières correspond à une énergie préférentielle qui, sous polarisation, se décale relativement à la zone émettrice (émetteur). On explique alors qualitativement (figure 1.10) la croissance du courant, puis la présence d'une résistance différentielle négative dans la caractéristique de conduction $I(V)$, par le passage d'un niveau quantique du puits devant les états peuplés de l'émetteur, qui à $T=0$ K sont compris entre le bas de la bande de conduction et le niveau de Fermi.

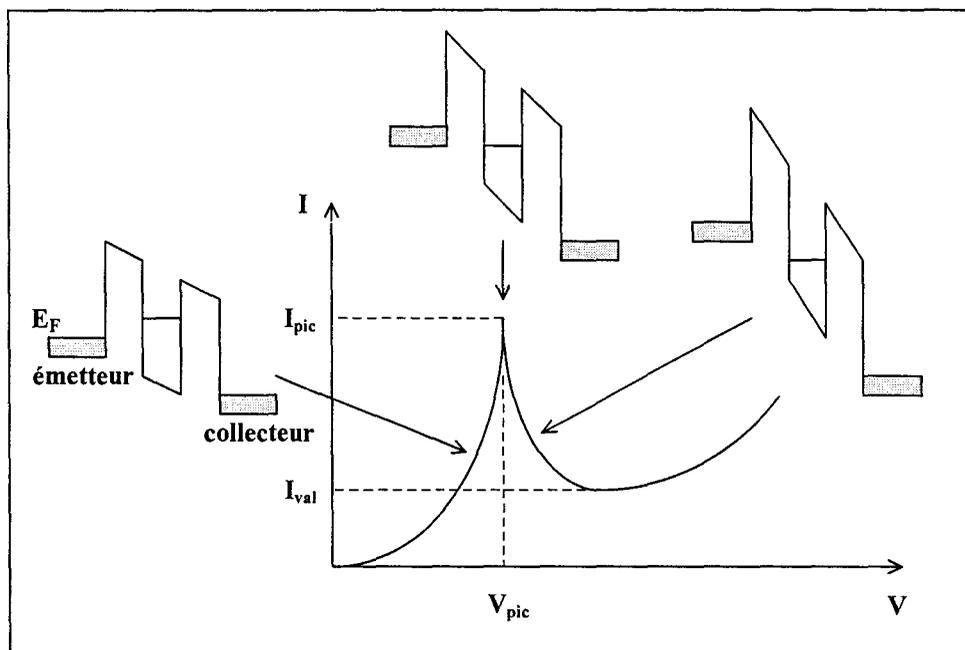


FIGURE 1.10 : Explication qualitative de la caractéristique de conduction $I(V)$ d'une diode double barrière par le passage d'un niveau quantique du puits devant les états peuplés de l'émetteur.

L'obtention de non-linéarités de conduction marquées, même à température ambiante, associées à de faibles temps de réponse intrinsèques, caractéristiques des temps de résidence des porteurs dans le puits, offre des potentialités d'applications intéressantes en électronique analogique telles que la génération, la détection, le mélange et la multiplication de fréquence. En régimes millimétrique et submillimétrique des résultats remarquables ont été obtenus pour les deux premières applications.

Dans le système GaAs/AlAs, des densités de puissance de l'ordre de 1kW/cm^2 pour un composant en oscillation autour d'une fréquence de 100 GHz ont été observées [23]. Néanmoins, il est à noter que la puissance délivrée par un composant, nécessairement de très faible section pour satisfaire aux critères de stabilité, reste limitée par rapport aux composants classiques dans cette gamme de fréquences.

Dans le but d'améliorer leurs performances en fréquence et en puissance, il est donc nécessaire d'optimiser les structures. Pour cela, on cherche à accroître les figures de mérite de ces composants à savoir : la densité de courant pic (J_{pic}) et le rapport des densités de courant pic sur vallée ($J_{\text{pic}}/J_{\text{val}}$). Brown et al [24] ont proposé d'utiliser une hétérostructure de type II utilisant le couple InAs/AlSb. Ils ont observé des oscillations de fréquence 712 GHz, qui reste aujourd'hui la fréquence maximale obtenue avec une source à l'état solide, et ont atteint une densité de puissance à 360 GHz cinquante fois supérieure à celle qu'ils avaient obtenue par ailleurs à 370 GHz avec un composant utilisant le couple GaAs/AlAs.

La forte non-linéarité de la caractéristique de conduction, présente notamment au point J_{pic} , conduit à l'utilisation de ce composant en détection de signal hyperfréquence. Dès 1983, Sollner et al [25] ont estimé une fréquence maximale de fonctionnement en détection de 2.5 THz avec une diode GaAs/AlAs. Puis Mehdi et al [26] ont étudié ce type de fonctionnement à température ambiante en fonction de la tension de polarisation et de la fréquence du signal hyperfréquence. Pour leur structure $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}/\text{In}_{0.48}\text{Al}_{0.52}\text{As}$, ils ont montré notamment l'importance du choix du point de polarisation, et obtenu à 40 GHz un TSS (Tangential Signal Sensitivity) de -37 dBm pour une tension proche de la tension pic. Comparé au TSS=-45 dBm obtenu avec une diode Schottky habituellement utilisée en détection, la diode à effet tunnel résonnant doit être une fois de plus optimisée dans l'optique d'augmenter en valeur absolue cette valeur de TSS.

Diverses études ont aussi porté sur la réalisation de mélangeurs subharmoniques ou automélangeurs pour lesquels sont exploitées à la fois les non-linéarités pour la fonction de mélange, et la zone de résistance différentielle négative pour réaliser l'oscillateur local [27]. Enfin, des résultats en tripleur ou quintupleur de fréquences jusqu'à 320 GHz, par multiplication de type résistive, ont été obtenus sans toutefois atteindre les performances des composants varactors [28].

En électronique digitale, de nombreux efforts visent à intégrer des composants à effet tunnel résonnant pour réaliser des circuits logiques, avec le double but d'augmenter l'intégration des circuits et leurs fréquences de fonctionnement. Ainsi Maezena et al [29] ont proposé une structure, représentée figure 1.11, dans laquelle un contact déposé en surface d'une zone dopée p^+ entourant une diode double barrière permet de moduler la section effective de passage du courant et donc sa caractéristique de conduction. Pour une structure résonnante GaAs/AlAs sur substrat GaAs, ils ont obtenu la fonction inverseur en n'utilisant que deux composants. Précisons qu'il s'agit d'un système logique MOBILE (MONostable Bistable transition Logique Element), dans lequel le changement d'état de la sortie, fonction

de l'état de l'entrée, se produit par la transition "état bas"/"état haut" de la tension de polarisation du circuit.

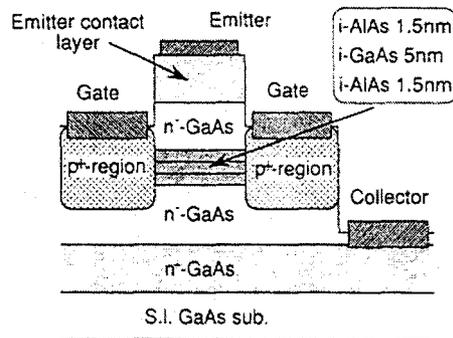


FIGURE 1.11 : Composant à effet tunnel résonnant pour la réalisation de circuits logiques MOBILE - tiré de la référence [29] -. Les zones dopées p⁺ modulent la section de la structure résonnante.

Dans le même domaine, Waho et al [30] ont proposé l'intégration d'une diode double barrière en parallèle avec une structure TEGFET. Par un choix judicieux des largeurs de grilles des transistors TEGFET et des sections des diodes, il est alors possible d'obtenir un comparateur de tension n'utilisant que trois composants comme illustré figure 1.12.

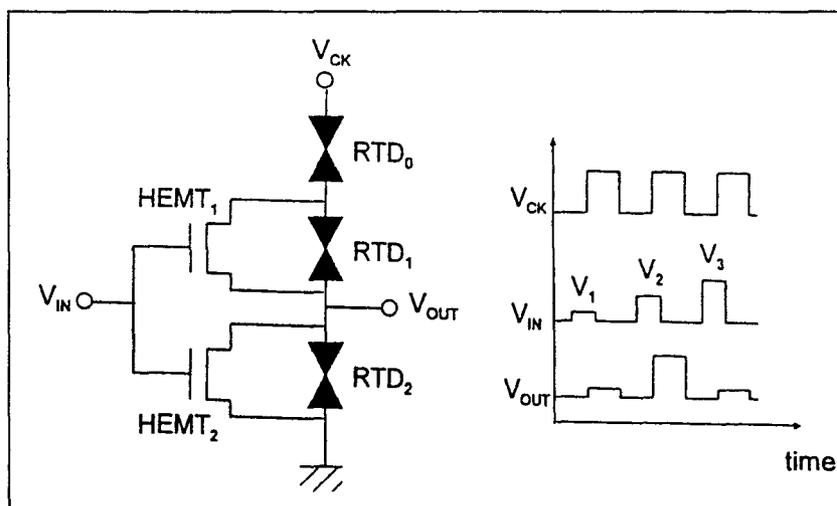


FIGURE 1.12 : Circuit comparateur de tension - tiré de la référence [30] -. La sortie V_{OUT} prend un état logique donné, fonction de la tension V_{IN} à comparer, lorsque le signal V_{CK} présente un front montant.

L'utilisation des transistors RTBT (Resonant Tunneling Bipolar Transistor) peut aussi aboutir à un taux d'intégration de fonctions logiques plus important. Il s'agit d'introduire une structure résonnante dans l'émetteur d'un Transistor Bipolaire à Double Hétérojonction (DHBT). La caractéristique $I_c(V_{be})$ de ces composants présente alors de fortes discontinuités, liées à la structure résonnante, dépendantes du courant de base I_b . Par exemple Seabeaugh et al [31] ont utilisé une structure résonnante GaInAs/AlAs et un transistor DHBT de type

InP/GaInAs sur substrat InP pour réaliser un circuit logique "ou exclusif inversé" ne nécessitant que trois composants actifs et quatre résistances.

Ces quelques exemples ne constituent pas une liste exhaustive des possibilités offertes par les composants double barrière. Les études menées à l'heure actuelle, notamment dans le domaine des convertisseurs analogiques-numériques, sont à la base d'une nouvelle génération de systèmes faisant intervenir la notion de logique multi-états.

1.3.2.2 - Les structures multipuits

Il s'agit ici de remplacer la structure double barrière précédemment évoquée par un empilement plus important de matériaux semiconducteurs faible gap/grand gap. Il en résulte une succession de puits de potentiel séparés entre eux par des barrières. Si les barrières sont suffisamment fines, on obtient un superréseau fini, et un couplage inter-puits coexiste avec le couplage puits-continuum. Celui-ci, plus ou moins fort suivant l'épaisseur des barrières, ne doit en aucun cas être négligé, et l'étude de la quantification énergétique conduit non pas à des valeurs d'énergie discrètes mais à des bandes d'énergies permises dont l'origine - semblable à celle des bandes de conduction, de valence, et interdite des matériaux volumiques - provient du recouvrement des fonctions d'ondes. L'étude du transport non linéaire dans ces minibandes d'énergies permet alors, comme dans le cas de la diode double barrière, de montrer des effets de résistance différentielle négative. Ces derniers sont basés sur la modulation de la mobilité des porteurs en fonction du champ électrique et permettent d'envisager l'utilisation de ces superréseaux pour la génération à très hautes fréquences [32].

De manière complémentaire, en augmentant les épaisseurs des barrières, donc en diminuant le couplage inter-puits, on obtient une structure de type "multipuits quantique". Le domaine d'application privilégié de ces derniers est l'optoélectronique avec par exemple :

- les photodiodes à avalanche qui tirent partie dans le système GaAs/GaAlAs de la supériorité des discontinuités de la bande de conduction par rapport à celle de la bande de valence pour favoriser l'ionisation par choc des électrons [27].
- la majorité des photodétecteurs infrarouges QWIP (Quantum Well Infrared Photodetector) dont les études font appel à la quantification en énergie des puits et aux transitions intra-bandes pour créer le photocourant. La répétition du motif puits/barrière permet ici d'augmenter la valeur de ce dernier [33].

D'un point de vue numérique, l'ouverture de ces systèmes, due à la présence de réservoirs d'électrons de part et d'autre de la zone quantique, nous impose de développer des méthodes de résolution des équations de Poisson et de Schrödinger utilisant des conditions aux limites adaptées (de type ondes planes par exemple) afin de déterminer les énergies préférentielles par lesquelles s'effectuera le transport perpendiculaire.

1.3.2.3 - Formalisme

Comparativement aux structures à confinement strict, l'introduction de la réaction de charge d'espace dans les structures ouvertes est plus complexe. Comme nous le verrons au chapitre deux, la détermination d'un modèle autocohérent prenant en compte l'ensemble des

phénomènes quantiques se heurte à la difficulté de définir une normalisation des probabilités de présence électronique, due aux zones émetteur et collecteur qui entourent la structure. En effet dans ces zones, la propagation libre de l'onde électronique interdit l'utilisation des conditions aux limites nulles aux extrémités de la structure. Aussi dans ce paragraphe, nous négligerons les effets induits par la réaction de charge d'espace pour nous focaliser sur la détermination des états d'énergie quantifiée.

Principalement, les états quantiques sont déterminés par spectroscopie de la transmission calculée entre les zones émetteur et collecteur, qui présente un maximum pour les énergies résonantes. A titre d'exemple, la figure 1.13 montre le spectre de transmission obtenu à l'équilibre et sous polarisation d'une structure double barrière schématisée en insert. Il est visible ici que les énergies préférentielles au sein de la structure sont révélées par un pic de transmission dont la largeur à mi-hauteur est directement liée à la transparence des barrières, et traduit le couplage puits-continuum. Sous polarisation, on observe un décalage des pics de transmission vers les basses énergies, consécutif à l'abaissement du potentiel dans le puits, qui est à l'origine de l'effet de résistance différentielle du composant. Ces résultats seront plus amplement détaillés dans le deuxième chapitre et seront à la base du calcul des caractéristiques de conduction.

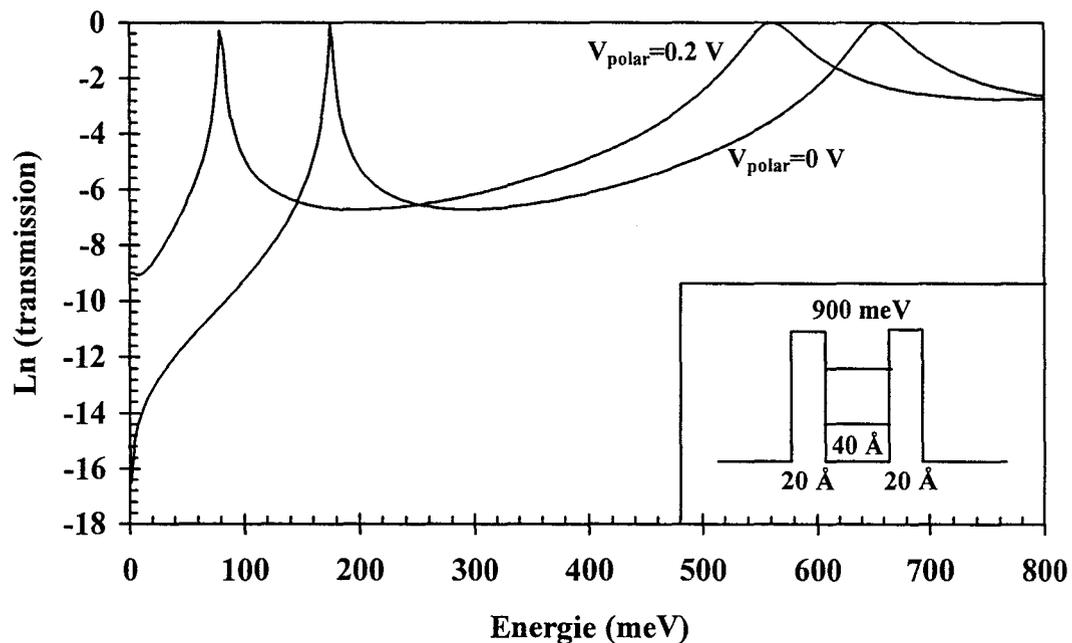


FIGURE 1.13 : Spectre de transmission de la diode double barrière non polarisée ($V_{\text{polar}}=0$) et sous polarisation ($V_{\text{polar}}=0.2$ V). Les paramètres de la structure considérée sont donnés en insert.

Il est aussi possible de déterminer approximativement les niveaux quantiques du puits en le supposant isolé du continuum par des barrières infiniment épaisses. Nous revenons alors dans un cas similaire à celui énoncé pour le confinement strict, à savoir l'approximation d'une double hétérojonction. Cependant, cette approximation présente rapidement des limitations et, dans une configuration double barrière symétrique, celle-ci n'est plus valable par exemple pour des rapports de largeurs de barrière sur puits inférieurs à l'unité [34]. Elle est donc peu appropriée à l'étude de structures où l'on exploite la transparence des barrières de potentiel

pour optimiser les caractéristiques de conduction. De plus, elle ne permet pas de prendre en considération les phénomènes de couplage inter-puits existant dans les structures à multipuits quantiques.

Pour calculer les propriétés de transmission de ces structures, on trouve dans la littérature deux grandes classes d'approches sont basées soit sur un formalisme de type matrice de transfert, soit sur une résolution directe de l'équation de Schrödinger.

1.3.2.3.1 - Matrices de transfert

Cette première approche, initialement proposée par Tsu et al [35], a pour principe la détermination de relations matricielles liant les coefficients complexes des ondes incidentes et réfléchies de chaque zone distincte de la structure. Dans l'hypothèse des bandes plates, ces zones sont caractérisées par un potentiel constant où la fonction d'onde peut être exprimée simplement en une somme de termes soit propagatifs ($A\exp(ikz)$ et/ou $B\exp(-ikz)$) dans les zones de type puits, soit évanescents ($A\exp(\alpha z)$ et/ou $B\exp(-\alpha z)$) dans les barrières. Les variations de potentiel relatives à la réaction de charge d'espace, ou à l'application d'une polarisation extérieure, peuvent être introduites par discrétisation spatiale du potentiel. Le potentiel présente alors des variations abruptes, non seulement à l'interface de chaque hétérojonction mais aussi en chaque pas de discrétisation, qui sont considérés dans les modèles par les conditions de continuités de la fonction d'onde et de sa dérivée première comme indiqué précédemment. Une matrice globale de dimension 2×2 liant les coefficients des ondes incidentes et réfléchies des zones émetteur (C_e^+ et C_e^-) et collecteur (C_c^+ et C_c^-) est exprimée via le produit de matrices élémentaires de dimension 2×2 .

Par exemple, les matrices de Ando [36] ou les matrices de Ricco [37] utilisent ce type de formalisme. Dans le premier cas, chaque matrice élémentaire modélise deux régions de potentiel constant qui englobent une discontinuité. Dans le cas d'une structure double barrière non polarisée schématiquement représentée figure 1.14, la matrice globale T peut être obtenue par le produit des matrices T_j ($j=1$ à 4). Bien que cette méthode s'avère intéressante pour l'étude du tunnel inter-bande, où il est nécessaire de résoudre deux équations de Schrödinger couplées, pour des dimensions importantes (de l'ordre de $0.1 \mu\text{m}$) elle présente l'inconvénient d'apporter des instabilités numériques, qui sont liées à la dépendance exponentielle des éléments des matrices T_j en fonction de la position des discontinuités z_j . Les matrices de Ricco pallient cet inconvénient en distinguant deux types de matrices : des matrices d'interface (M_i, M_o) et des matrices de propagation (M_b, M_p). Dans ces dernières, seule la dimension propre à la région considérée intervient dans les termes exponentiels, ce qui évite les instabilités numériques telles que celles présentes dans les matrices de Ando. Un aperçu de l'utilisation de ce type de formalisme est représenté schématiquement figure 1.14 dans le cas d'une structure de type double barrière non polarisée. Bien que l'on remarque un accroissement du nombre de matrices nécessaires pour décrire une même structure, les temps de calcul sont en général comparables à ceux du modèle utilisant les matrices de Ando.

Suite à la détermination de la matrice globale, il est possible par un choix approprié des coefficients C_e^+ , C_e^- , C_c^+ , et C_c^- aux extrémités de la structure de déterminer la fonction dans les zones émetteur et collecteur. La transmission est alors définie par le rapport entre les modules au carré de l'onde transmise au collecteur C_c^+ et de l'onde incidente à l'émetteur C_e^- , pondéré par le rapport des vitesses.

Ceci mène à la relation :

$$T = \left| \frac{C_c^+}{C_e^-} \right|^2 \frac{k_c m^*(z_e)}{k_e m^*(z_c)} \quad (1.20)$$

où k_e et k_c expriment respectivement les vecteurs d'ondes longitudinaux dans les zones émetteur et collecteur et $m^*(z_e)$, $m^*(z_c)$ les masses effectives réduites dans ces mêmes zones.

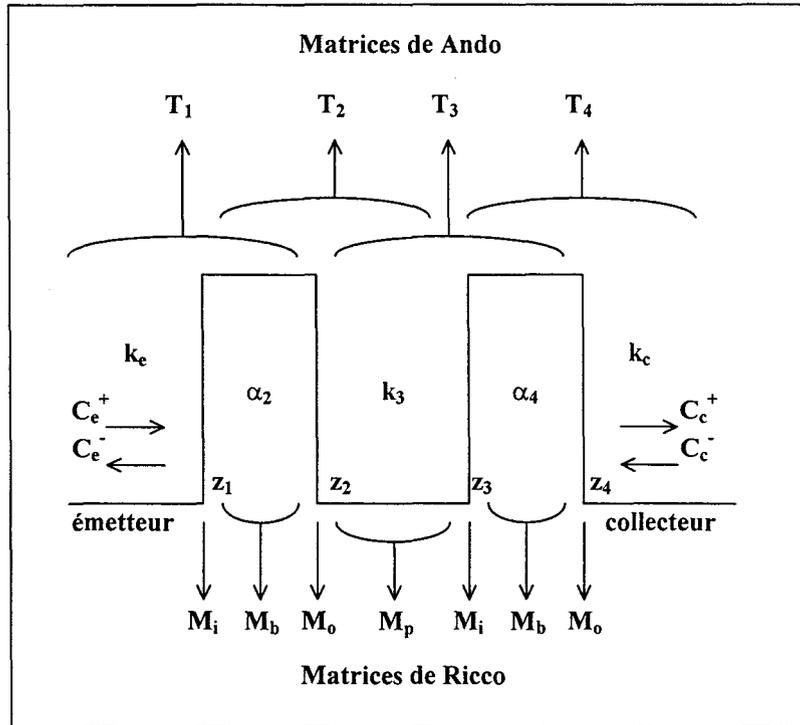


FIGURE 1.14 : Décomposition d'une structure double barrière non polarisée pour un traitement par matrices de Ando (T_i) ou par matrices de Ricco (M_i et M_o pour les interfaces, M_b et M_p pour les zones à potentiel plat).

1.3.2.3.2 - Résolution directe

Une discrétisation du potentiel est souvent nécessaire pour prendre en compte par exemple une tension appliquée à la structure. Nous avons alors la possibilité de résoudre directement l'équation de Schrödinger [34]. Pour cela, on résout un système à deux équations couplées du premier degré, image de l'équation de Schrödinger :

$$\begin{cases} \frac{\partial Y_1(z)}{\partial z} = m^*(z) \frac{\sqrt{2qm_0}}{\hbar} Y_2(z) \\ \frac{\partial Y_2(z)}{\partial z} = m^*(z) \frac{\sqrt{2qm_0}}{\hbar} \frac{V(z) - E}{q} Y_1(z) \end{cases} \quad (1.21)$$

$$\text{dans lesquelles } Y_1(z) = \varphi(z), Y_2(z) = \frac{1}{m^*(z)} \frac{\hbar}{\sqrt{2qm_0}} \frac{\partial \varphi(z)}{\partial z}.$$

En considérant dans la zone collecteur (en $z=z_c$) une onde propagative du type $\varphi(z_c)=\exp(ik_c z_c)$, il est possible de déterminer, par exemple par la méthode de Runge-Kutta, les valeurs de Y_1 et Y_2 en chaque pas de discrétisation, et en particulier leur valeur dans la zone d'émetteur (en $z=z_e$). Ceci aboutit à la détermination des coefficients complexes des ondes incidente C_e^+ et réfléchie C_e^- de l'émetteur soit :

$$\begin{aligned} C_e^+ &= \frac{1}{2} \left(Y_1(z_e) + m^*(z_e) \frac{\sqrt{2qm_0}}{i\hbar k_e} Y_2(z_e) \right) \\ \text{et } C_e^- &= \frac{1}{2} \left(Y_1(z_e) - m^*(z_e) \frac{\sqrt{2qm_0}}{i\hbar k_e} Y_2(z_e) \right) \end{aligned} \quad (1.22)$$

et au coefficient de transmission T exprimé par l'équation 1.20 en considérant une amplitude de l'onde transmise $C_c^+=1$.

Soulignons que cette méthode de résolution directe sera utilisée pour déterminer le courant dit tridimensionnel du chapitre deux. Citons aussi dans le même type d'approche l'existence de la méthode des prédicteurs-correcteurs mise en oeuvre dans la référence [16].

1.4 - REDUCTION DE DIMENSIONNALITE (SYSTEMES 1D et 0D)

Toujours dans le but de miniaturiser les dispositifs électroniques, sont apparues depuis quelques années de nouvelles structures sous les noms de fils et boîtes quantiques dans lesquelles les porteurs sont confinés dans plusieurs directions de l'espace. Réduire ainsi les dimensions des structures à l'échelle nanométrique implique de nombreux défis tant au point de vue fabrication qu'au point de vue compréhension des mécanismes de transport. Si dans un premier temps ces nanostructures ont fait l'objet de nombreuses caractérisations physiques, et notamment optiques, d'intenses efforts de recherches sont encore nécessaires pour passer au stade du composant. Limitées aujourd'hui à un fonctionnement basse température, différentes perspectives s'ouvrent pour utiliser ces nanostructures soit pour la conception d'architectures nouvelles, soit comme élément de commande de composants plus classiques. Comme exemples d'utilisations d'hétérostructures semiconductrices pour réaliser ces fils et boîtes quantiques, nous retiendrons deux aspects en nous limitant à la présentation de quelques techniques de fabrication. Le premier concerne les fils quantiques réalisés à partir d'hétérostructures à haute mobilité, le second les boîtes quantiques obtenues par constriction latérale d'une diode à effet tunnel résonnant.

1.4.1 - Fils quantiques - guides d'ondes électroniques

L'existence à l'interface d'une hétérostructure à haute mobilité de type TEGFET d'un gaz bidimensionnel d'électrons est à la base des différentes techniques de création de fils quantiques. Si des méthodes telles que l'implantation ionique [38] ou la reprise épitaxiale dans

une seconde direction de croissance [39] peuvent être rencontrées, il apparaît que les méthodes de gravure et de dépôt de grilles soient les plus couramment utilisées. Par analogie avec les composants passifs micro-ondes tels que le guide d'ondes rectangulaire, la notion de fil quantique est assimilée à celle de guide d'ondes électroniques sous réserve d'un transport balistique. En effet, l'énergie est quantifiée dans deux directions de l'espace et le transport électronique ne s'effectue plus que dans la direction longitudinale du canal unidimensionnel (1D) ainsi formé. Les trois techniques les plus fréquemment rencontrées pour créer le confinement additionnel sont : la gravure profonde ("deep mesa etching"), la gravure peu profonde ("shallow mesa etching") ou le dépôt de grilles de commande ("split gate").

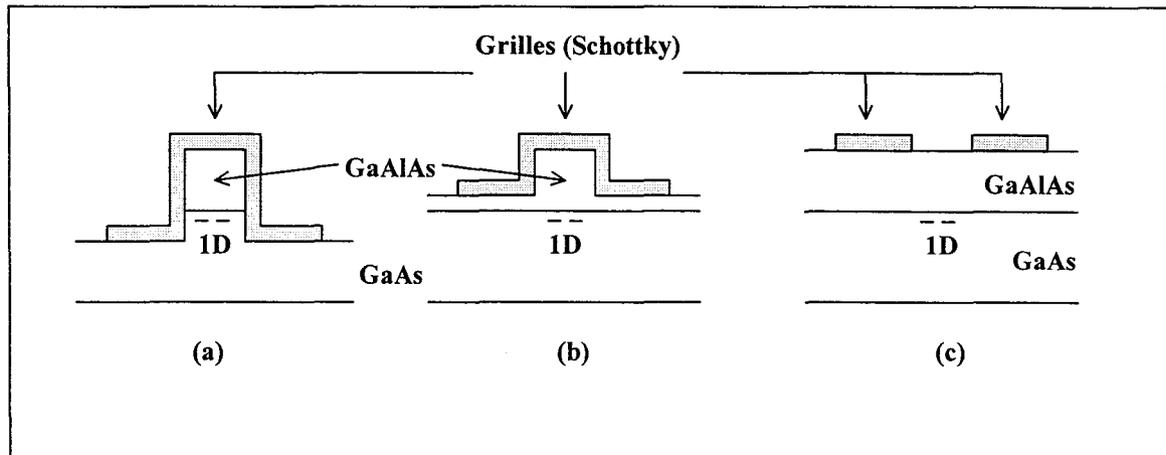


FIGURE 1.15 : Réalisation de fils quantiques à partir d'un gaz 2D d'électrons par les techniques :

- (a), de la gravure profonde ("deep mesa etching").
- (b), de la gravure peu profonde ("shallow mesa etching").
- (c), par grilles de commande ("split gate").

1.4.1.1 - La technique de gravure profonde

Comme l'illustre la figure 1.15a qui représente la section droite du fil obtenu par cette technologie, cette technique repose sur la gravure des couches semiconductrices sur une épaisseur allant au delà du gaz 2D pour créer le fil quantique [40]. Le dépôt d'une grille en surface et sur les parois du fil quantique, représentée par la zone grise de la figure, peut permettre le contrôle de la concentration électronique et de la largeur effective du fil. Signalons qu'en surface du composant les techniques d'attaque provoquent l'apparition de défauts de surface qui peuvent d'une part diminuer la largeur effective du fil, et dans le cas d'une extension trop importante pincer le canal 1D et le rendre isolant, et d'autre part dégrader la mobilité électronique du gaz 1D [40]. Pour ce qui nous concerne, la maîtrise des techniques de gravure visant à améliorer les états de surface est la principale limitation de cette méthode de confinement latéral.

1.4.1.2 - La technique de gravure peu profonde

Pour éviter les inconvénients liés à la gravure profonde, il a été proposé de graver uniquement les couches supérieures du composant sans atteindre le gaz 2D [41]. Cette méthode part du principe que le gaz 2D peut être déserté par une gravure qui se limite à la couche fortement dopée de l'hétérostructure. Van Houten et al [42] ont précisé l'importance de

conserver dans l'hétérostructure l'espaceur non dopé et une partie de la couche fortement dopée afin de limiter la dégradation de la mobilité du gaz 1D. La figure 1.15b représente une section droite d'un fil quantique réalisé par cette technique. Les électrons sont confinés sous la partie non gravée du composant, et le dépôt d'une grille de commande Schottky en surface permet de contrôler la création du gaz 1D. Remarquons qu'en utilisant cette méthode, Ismail et al [43] ont évalué une largeur de leur canal 1D de 35 nm.

1.4.1.1 - La technique par grille de commande

C'est la technique la plus communément adoptée lorsque l'on envisage la fabrication de composants à base de guides d'ondes électroniques. Elle consiste uniquement à déposer en surface d'une hétérostructure à haute mobilité des grilles de commande Schottky [41]. Le gaz 2D sous les grilles peut être déserté en appliquant sur celles-ci une tension négative. Un fil quantique est alors réalisé par le dépôt de deux grilles proches l'une de l'autre comme représenté figure 1.15c, et le canal 1D est formé électrostatiquement entre les deux grilles par un potentiel de confinement latéral de forme parabolique. L'intérêt de la méthode réside ici dans sa simplicité. En effet, les tensions pour lesquelles le gaz 2D est déserté peuvent être facilement ajustées expérimentalement, et la forme du canal peut être déterminée par la géométrie des grilles de commande. Dans la réalité, la conception de structures complexes pose de nombreux problèmes technologiques, par exemple de proximité des grilles, et nous reviendrons au chapitre trois sur les problèmes liés au confinement par potentiel électrostatique et aux faibles dimensions mises en jeu.

1.4.2 - Boîtes quantiques : diodes à effet tunnel résonnant

La réduction des dimensions latérales des zones actives, qui s'accompagne d'une diminution de la capacité intrinsèque des composants, permet d'envisager une augmentation de la fréquence de fonctionnement des dispositifs. Les progrès de la technologie ont aussi permis la fabrication de composants à l'échelle submicronique. Néanmoins à ces dimensions, des effets quantiques nouveaux apparaissent et l'on peut obtenir une boîte quantique. Par exemple, ces effets ont été mis en évidence expérimentalement par Randall et al [44] sur des diodes à effet tunnel résonnant de diamètre 0.1 μm . Les électrons sont alors confinés dans les trois directions de l'espace (figure 1.16), d'une part par les deux barrières de la structure résonnante, et d'autre part par l'accrochage du niveau de Fermi en surface qui induit par désertion une variation radiale du potentiel de confinement latéral de forme parabolique. La boîte quantique ainsi créée présente dans la caractéristique de conduction une succession de pics de courant reflétant les états électroniques discrets introduits par la quantification latérale. Afin d'étudier plus précisément ce type de confinement, il est nécessaire de traiter les réactions de charge d'espace par l'intégration de l'équation de Poisson qui, au vu de la forme du composant représenté figure 1.16, sera transposée en coordonnées cylindriques. D'autres auteurs proposent de confiner latéralement des structures résonnantes GaAlAs/GaAs par implantation ionique de Gallium [45]. Cette implantation a pour but de convertir le matériau de type n en matériau fortement résistif de type p, et à pour conséquence une variation latérale du potentiel, une fois de plus, de forme parabolique.

Ainsi par ces techniques, on réalise, dans le cas où l'on considère un transport vertical, une zone de confinement de type boîte quantique (0D) reliée au circuit extérieur par deux fils quantiques (1D) pour lesquels ne subsiste qu'un seul degré de liberté pour le transport

électronique. Suivant la dimensionnalité des zones d'injection et de collection, et des réactions de charge d'espace induites, les caractéristiques de conduction sont notablement modifiées et font apparaître une spectroscopie des états quantifiés de la boîte, ou privilégient des transitions entre états discrets 1D et 0D.

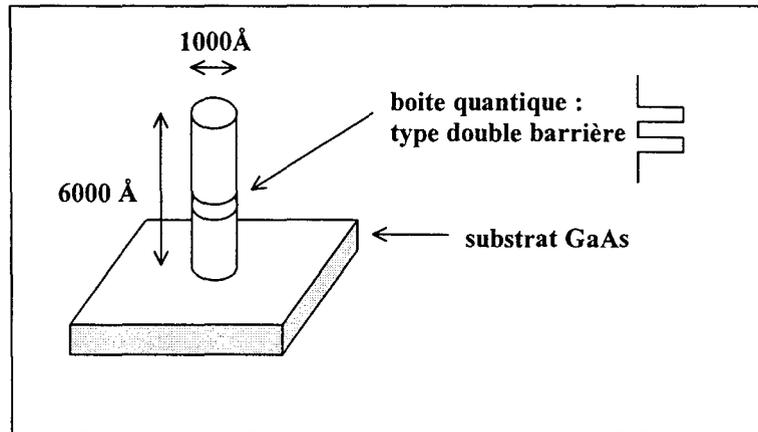


FIGURE 1.16 : Réalisation d'une boîte quantique (0D) à partir d'une structure double barrière par gravure profonde des couches du composant - d'après la référence [44] -.

1.4.3 - Modélisation

Contrairement aux paragraphes précédents, il est délicat de dégager une méthode générale permettant de simuler le fonctionnement de ces dispositifs à réduction de dimensionnalité. Si toutes les approches sont basées sur la résolution autocohérente des équations de Schrödinger et de Poisson à plusieurs dimensions, les approximations et les algorithmes utilisés sont très nombreux et dépendent de la géométrie du dispositif étudié [16].

Pour ce qui nous concerne plus particulièrement, les guides d'ondes électroniques, l'utilisation de méthodes basées sur les matrices de répartition ("scattering"), par analogie avec la propagation électromagnétique dans les guides d'ondes classiques, apparaît comme la plus naturelle pour traiter les phénomènes liés au transport balistique. Ces dernières méthodes font appel généralement à la notion de raccordement de modes (niveaux d'énergie quantifiée au sein de la structure) et présupposent que l'on sache sous certaines hypothèses écrire localement de manière analytique les fonctions d'ondes. Plusieurs méthodes, indépendante et dépendante du temps, ont été envisagées dans le cadre de ce travail, et seront détaillées dans les chapitres ultérieurs.

1.5 - CONCLUSION

Ce chapitre illustre l'évolution des composants de la microélectronique vers les dimensions réduites, motivée notamment par l'augmentation des fréquences de fonctionnement des dispositifs. Ces réductions ont fait de la mécanique quantique un passage obligé pour la compréhension des phénomènes physiques à la base de leur fonctionnement. L'apparition de ces effets nouveaux a nécessité simultanément le développement d'outils

numériques de complexité croissante afin d'être capable de rendre compte à la fois des mécanismes de transport classique et des modifications de densités d'états. De l'hétérojonction à modulation de dopage permettant la formation d'un gaz électronique bidimensionnel à la boîte quantique, où l'énergie est quantifiée dans les trois directions de l'espace, une gradation dans la difficulté de simuler cette nouvelle génération de composants a été mise en évidence. La difficulté majeure réside de fait dans la notion de systèmes ouverts, mélangeant dans une même structure des zones de dimensionnalités différentes. Nous verrons par la suite comment résoudre ces problèmes soit par principe de superposition, soit par la mise en place de conditions aux limites spécifiques.

BIBLIOGRAPHIE CHAPITRE 1

- [1] O. VANBÉSIEN
"Simulation et caractérisation électrique des diodes double barrière à effet tunnel résonnant"
Thèse de l'Université des Sciences et Technologies de Lille, 3 avril 1991.
- [2] Semiconductors group IV elements and III-V compounds
Data in Science Technologie
Spinger Verlag.
- [3] P. MOUNAIX
"Hétérostructures double barrière pour la réalisation de diodes et de transistors à effet tunnel résonnant"
Thèse de l'Université des Sciences et Technologies de Lille, 7 avril 1992.
- [4] S. ADACHI
"GaAs, AlAs, and $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$: Material parameters for use in research and device applications"
J. Appl. Phys. 58 (3), 1985, pp R1-R29.
- [5] D. Y. K. KO and J. C. INKSON
"Matrix method for tunneling in heterostructure : Resonant tunneling in multilayer systems"
Phys. Rev. B 38 (14), 1988, pp 9945-9951.
- [6] H. KROEMER, WU-YI CHIEN, J. S. HARRIS, and D. D. EDWALL
"Measurement of isotype heterojunction barriers by C-V profiling"
Appl. Phys. Lett. 36 (4), 1980, pp 295-297.
- [7] K. BRENNAN
"Theoretical study of multiquantum well avalanche photodiodes made from the GaInAs/AlInAs material system"
IEEE Transactions on Electron Devices ED-33 (10), 1986, pp 1502-1510.
- [8] S. ADACHI
"Material parameters of $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}_y\text{P}_{1-y}$ and related binaries"
J. Appl. Phys. 53 (12), 1982, pp 8775-8792.
- [9] S. W. MATTHEWS, and A. C. BLAKESLEE
"Defection epitaxial multilayers"
Journal of crystal growth 27, 1974, pp 118-125.
- [10] S. NIKI, C. L. LIN, W. S. C. CHANG, and H. H. WIEDER
"Band-edge discontinuities of strained-layer $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ heterojunctions and quantum wells"
Appl. Phys. Lett. 55 (13), 1989, pp 1339-1341.

- [11] L. BAUDRY
"Etude théorique du transport électronique dans les structures à dimensionnalité réduite.
Application à la simulation MONTE CARLO d'hétérostructures pseudomorphiques"
Thèse de l'Université des Sciences et Technologies de Lille, 7 juillet 1993.
- [12] D. DELAGEBEAUDEUF, P. DELESCLUSE, P. ETIENNE, M. LAVIRON,
J. CHAPLART, and NUYEN T. LINH
"Two-dimensionnal electron gas M.E.S.F.E.T. structure"
Electronics letters 16 (17), 1980, pp 667-668.
- [13] R. DINGLE, H. L. STÖRMER, A. C. GOSSARD, and W. WIEGMANN
"Electron mobilities in modulation-doped semiconductor heterojunction superlattices"
Appl. Phys. Lett. 33 (7), 1978, pp 665-667.
- [14] M. Y. KAO, P. M. SMITH, P. HO, P.C. CHAO, K. H. G. DUH, A. A. JABRA, and
J. M. BALLINGALL
"Very high power-added efficiency and low-noise 0.15- μ m gate-length pseudomorphic
HEMT's"
IEEE Electron Device Letters 10 (12), 1989, pp580-582.
- [15] H. MATHIEU
"Physique des semiconducteurs et des composants électroniques"
ed. Masson.
- [16] V. SADAUNE
"Effet tunnel résonnant dans les hétérostructures de matériaux semiconducteurs pour
différentes situations de confinement"
Thèse de l'Université des Sciences et Technologies de Lille, 22 octobre 1993.
- [17] A. CAPPY
"Propriétés physiques et performances potentielles des composants submicroniques à
effet de champ : structures conventionnelles et à gaz d'électrons bidimensionnel"
Thèse de l'Université des Sciences et Technologies de Lille, 19 décembre 1986.
- [18] F. STERN
"Self-consistent results for n-type Si inversion layers"
Phys. Rev. B 5 (12), 1972, pp 4891-4899.
- [19] D. DELAGEBEAUDEUF, and N. T. LINH
"Metal-(n) AlGaAs-GaAs two dimensional electron gas FET"
IEEE Transactions on Electron devices ED-29 (6), 1982, pp 955-960.
- [20] C. VERSNAEYEN
"Etude théorique et expérimentale du transistor à effet de champ à hétérojonction
AlGaAs/GaAs"
Thèse de l'Université des Sciences et Technologies de Lille, 9 juillet 1985.
- [21] B. VINTER
"Subbands and charge control in a two-dimensional electron gas field-effect transistor"
Appl. Phys. Lett. 44 (3), 1984, pp 307-309.

- [22] V. DUEZ
 "Etudes des transitions interbandes dans les hétérostructures $\text{In}_{0.52}\text{Al}_{0.48}\text{As}/\text{InAs}/\text{InP}$ "
 D.E.A. de l'Université des Sciences et Technologies de Lille, juin 1997.
- [23] R. BOUREGBA, O. VANBÉSIEN, P. MOUNAIX, D. LIPPENS, L. PALMATEER, J. C. PERNOT, G. BEAUDIN, P. ENCRENAZ, E. BOCKENHOFF, J. NAGLE, P. BOIS, F. CHEVOIR, AND B. VINTER
 "Resonant tunneling diodes as sources for millimeter and submillimeter wavelengths"
 IEEE transactions on microwave theory and techniques 41(11), 1993, pp 2025-2027.
- [24] E. R. BROWN, J. R. SÖDERSTRÖM, C. D. PARKER, L. J. MAHONEY, K. M. MOLVAR, and T. C. MCGILL
 "Oscillations up to 712 GHz in InAs/AlSb resonant -tunneling diodes"
 Appl. Phys. Lett. 58 (20), 1991, pp 2291-2293.
- [25] T. C. L. G. SOLLNER, W. D. GOODHUE, P. E. TANNENWALD, C. D. PARKER, and D. D. PECK
 "Resonant tunneling through quantum wells at frequencies up to 2.5 THz"
 Appl. Phys. Lett. 43 (6), 1983, pp 588-590.
- [26] I. MEHDI, C. KIDNER, J. R. EAST, and G. I. HADDAD
 "Millimeter-wave detection using resonant tunneling diodes"
 Microwave and Optical Technology Letters 3 (1), 1990, pp 1-4.
- [27] P. BEDU
 "Non linéarités de conduction dans les hétérostructures résonnantes. Application en détection et mélange"
 Thèse de l'Université des Sciences et Technologies de Lille, juin 1992.
- [28] R. BOUREGBA, D. LIPPENS, L. PALMATEER, E. BOCKENHOFF, M. BOGEY, J. L. DESTOMBES, and A. LECLUSE
 "Frequency multiplication using resonant tunneling diode with output at submillimeter wavelengths"
 Electronics letters 26(21), 1990, pp 1804-1805.
- [29] K. MAEZAWA, and T. MIZUTANI
 "A new resonant tunneling logic gate employing monostable-bistable transition"
 Jpn. J. Appl. Phys. 32 part 2 (1A/B), 1993, pp L 42-L 44.
- [30] T. WAHO, K. J. CHEN, and M. YAMAMOTO
 "A novel multiple-valued logic gate using resonant tunneling devices"
 IEEE Electron Device Letters 17 (5), 1996, pp 223-225.
- [31] A. C. SEABAUGH, E. A. BEAM III, A. H. TADDIKEN, J. N. RANDALL, and Y. C. KAO
 "Co-integration of resonant tunneling and double heterojunction bipolar transistors on InP"
 IEEE Electron Device Letters 14 (10), 1993, pp 472-474.

- [32] J. F. PALMIER, C. MINOT, H. LE PERSON, J. C. HARMAND, N. BOUADMA, J. C. ESNAULT, D. ARQUEY, F. HELIOT, and J. P. MEDUS
"Reflection gain up to 6 dB at 65 GHz in GaInAs/AlInAs superlattice oscillators"
Electronics letters 32(16), 1996, pp 1506-1507.
- [33] B. F. LEVINE
"Quantum-well infrared photodetectors"
J. Appl. Phys. 74 (8), 1993, pp R1-R81.
- [34] 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 des Sciences et Technologies de Lille, 27 février 1990.
- [35] R. TSU, and L. ESAKI
"Tunneling in a finite superlattice"
Appl. Phys. Lett. 22 (11), 1973, pp 562-564.
- [36] Y. ANDO, and T. ITOH
"Calculation of transmission tunneling current across arbitrary potential barriers"
J. Appl. Phys. 61 (4), 1987, pp 1497-1502.
- [37] B. RICCO, and M. Y. AZBEL
"Physics of resonant tunneling. The one dimensional double-barrier case"
Phys. Rev. B 29 (4), 1984, pp 1970-1981.
- [38] T. HIRAMOTO, K. HIRAKAWA, and T. IKOMA
"Fabrication of one-dimensional GaAs wires by focused ion beam implantation"
J. Vac. Sci. Technol. B 6 (3), 1988, pp 1014-1017.
- [39] J. H. BURROUGHES, M. L. LEADBEATER, M. P. GRIMSHAW, R. J. EVANS, D. A. RITCHIE, G. A. C. JONES, and M. PEPPER
"Electronic properties of a one-dimensional channel field effect transistor formed by molecular beam epitaxial regrowth on patterned GaAs"
Appl. Phys. Lett. 63 (16), 1993, pp 2219-2221.
- [40] T. DEMEL, D. HEITMANN, P. GRAMBOW, and K. PLOOG
"Far-infrared response of one-dimensional electronic systems in single- and two-layered quantum wires"
Phys. Rev. B 38 (17), 1988, pp 12732-12735.
- [41] R. E. BEHRINGER, P. M. MANKIEWICH, G. TIMP, R. E. HOWARD, H. U. BARANGER, J. CUNNINGHAM, and S. SAMPERE
"One-dimensional ballistic transport in AlGaAs/GaAs electron waveguides"
J. Vac. Sci. Technol. B 7 (6), 1989, pp 2039-2043.
- [42] H. VAN HOUTEN, B. J. VAN WEES, M. G. J. HEIJMAN, and J. P. ANDRÉ
"Submicron conducting channels defined by shallow mesa etch in GaAs-AlGaAs heterojunctions"
Appl. Phys. Lett. 49 (26), 1986, pp 1781-1783.

- [43] K. ISMAIL, D. A. ANTONIADIS, and H. I. SMITH
"One-dimensional subbands and mobility modulation in GaAs/AlGaAs quantum wires"
Appl. Phys. Lett. 54 (12) , 1989, pp 1130-1132.
- [44] J. N. RANDALL, M. A. REED, R. J. MATYI, and T. M. MOORE
"Nanostructure fabrication of zero-dimensional quantum dot diodes"
J. Vac. Sci. Technol. B 6 (6), 1988, pp 1861-1864.
- [45] S. TARUCHA Y. HIRAYAMA T. SAKU and 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"
Phys. Rev. B 41 (8), 1990, pp 5459-5462.

CHAPITRE 2

INJECTION BIDIMENSIONNELLE DANS LES DIODES A EFFET TUNNEL RESONNANT

CHAPITRE 2 : INJECTION BIDIMENSIONNELLE DANS LES DIODES A EFFET TUNNEL RESONNANT

Depuis les travaux de Esaki et Tsu [1] sur les structures semiconductrices à multipuits quantiques et l'observation d'un effet de résistance différentielle négative sur une structure double barrière par Chang et al [2], de nombreux travaux aussi bien théoriques qu'expérimentaux ont visé l'optimisation de ces composants pour une utilisation en électronique non linéaire très hautes fréquences. Si grâce aux progrès incessants des techniques de croissances épitaxiales les épaisseurs de la zone puits-double barrière de quelques monocouches atomiques peuvent être obtenues, une véritable ingénierie de bande interdite est apparue pour optimiser l'ensemble de la structure [3]. Ainsi, l'insertion de zones tampons dopées et d'espaceurs non intentionnellement dopés (n. i. d.), entre les contacts (émetteur et collecteur) et la zone active double barrière, s'est généralisée en vue d'une augmentation des densités de courant pic (J_p) et des rapports de densités de courant pic sur vallée (J_p/J_v). Pour les longueurs d'espaceurs supérieures à quelques centaines d'Angströms, il a été démontré que la zone d'accumulation apparaissant en amont de la première barrière du côté de l'émetteur devient la principale source d'électrons intervenant dans le transport résonnant [4][5]. En parallèle, d'autres travaux concernant la filière GaAs ont montré que l'utilisation du matériau contraint GaInAs d'une part, pour réaliser le puits quantique, permet d'abaisser la tension pic indépendamment des autres paramètres structuraux, et d'autre part pour réaliser un pré-puits remplaçant la zone d'accumulation créée électrostatiquement, améliore aussi les caractéristiques de conduction [6]. Dans ces dernières configurations, le pré-puits ou la zone d'accumulation joue le rôle d'injecteur bidimensionnel d'électrons. Ce sont précisément ces conditions d'injection et de fuite à travers la zone quantique que nous nous proposons d'étudier dans ce chapitre.

A cette fin, nous préciserons tout d'abord les différents mécanismes de conduction impliqués et les principales hypothèses utilisées pour décrire le transport électronique. Un modèle numérique autocohérent de résolution des équations de Schrödinger et de Poisson permettant de prendre en compte à la fois les aspects bidimensionnel et tridimensionnel du transport sera présenté. Les caractéristiques de conduction ainsi obtenues seront ensuite discutées et comparées aux résultats expérimentaux sur différents types de composants.

2.1 - TRANSPORT PERPENDICULAIRE

2.1.1 - Définition

Afin de discerner les différents mécanismes considérés ici, nous avons représenté figure 2.1 un profil de bas de bande de conduction type des composants étudiés. Il s'agit d'une diode double barrière sous polarisation possédant, de part et d'autre de la zone active, des espaceurs au sens large du terme (zones dopées et n. i. d.) de longueur L_B et une zone d'accumulation de

longueur L_A . Les zones grises "3D" et "2D" schématisent respectivement les occupations des états d'énergie du continuum de l'émetteur et du collecteur, et des niveaux d'énergie quantifiée du gaz quasi-bidimensionnel de la zone d'accumulation.

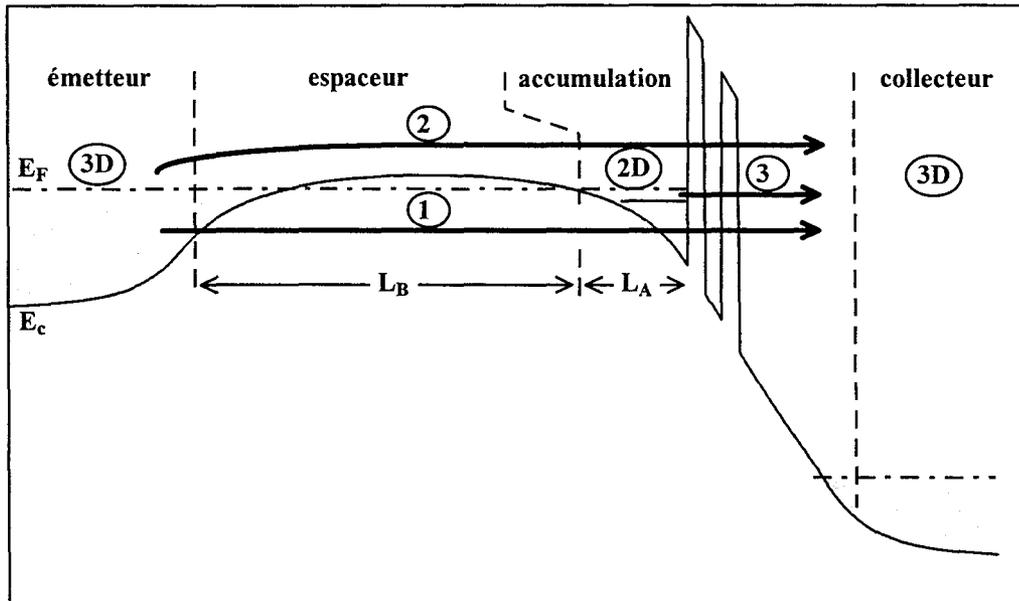


FIGURE 2.1 : Profil de bas de bande de conduction type des composants étudiés. Trois contributions au courant sont envisagés : les chemins 1 et 2 correspondent au courant dit tridimensionnel (transition 3D-3D), et le chemin 3 au courant dit bidimensionnel (transition 2D-3D).

Cette figure montre les différents chemins possibles à l'origine de la conduction dans ces composants. Ainsi, il est possible de définir deux contributions distinctes mettant en jeu des zones de dimensionnalité différente. Un courant "tridimensionnel" (J_{3D}) résulte en effet du transport électronique par effet tunnel de la zone émetteur directement vers la zone collecteur (transition 3D-3D) ; celui-ci correspond aux chemins 1 et 2. Nous définissons ensuite le courant "bidimensionnel" (J_{2D}) par le transfert de charges de la zone d'accumulation vers le collecteur via la structure résonnante (transition 2D-3D) qui correspond au chemin 3. Selon le type de composant simulé, nous étudierons l'importance relative de ces différentes contributions, qui dépendra non seulement des conditions de polarisation, mais aussi de l'ensemble des paramètres structuraux du composant. Nous allons à présent établir les expressions de chacune de ces contributions.

2.1.2 - Expression du courant

D'une manière générale, le courant peut être vu comme étant la résultante de deux flux électroniques : l'un allant de l'émetteur vers le collecteur, l'autre du collecteur vers l'émetteur.

Dans une telle vision, la densité de courant s'exprime :

$$J = \frac{2q}{S} \left\{ \sum_{k_e} f_e(k_e) W_{e-c}(k_e) - \sum_{k_c} f_c(k_c) W_{c-e}(k_c) \right\} \quad (2.1)$$

où $f_e(k_e)$ et $f_c(k_c)$ sont les probabilités d'occupations de Fermi-Dirac respectivement de l'émetteur et du collecteur, et dans laquelle W_{e-c} (W_{c-e}) représente la probabilité par unité de temps qu'un électron de l'émetteur (collecteur) de vecteur d'onde k_e (k_c) atteigne le collecteur (émetteur) par un mécanisme quelconque. S est la section du composant et le facteur 2 tient compte de la dégénérescence de spin.

Les termes W_{e-c} et W_{c-e} peuvent être exprimés par la sommation de probabilités de transition entre états, soit :

$$W_{e-c}(k_e) = \sum_{k_c} W(k_e, k_c) \{1 - f_c(k_c)\} \quad (2.2)$$

$$\text{et } W_{c-e}(k_c) = \sum_{k_e} W(k_c, k_e) \{1 - f_e(k_e)\}$$

Les deux sommations de l'équation 2.1 se regroupent alors sous une même double sommation sur les états k_e et k_c de l'émetteur et du collecteur ; le vecteur d'onde k_e (k_c) peut être séparé en une composante longitudinale k_{ze} (k_{zc}) et transversale K_e (K_c), et la double sommation décomposée en une quadruple sommation. Cependant si l'on considère uniquement le transport balistique par effet tunnel et que la conservation du vecteur d'onde transversal est imposé, seuls les termes pour lesquels $K_e=K_c=K$ sont conservés dans les sommations. De plus, la conservation de l'énergie durant le transport se traduit par $k_{ze}=k_{zc}=k_z$, et on peut prendre en compte la réversibilité des probabilités de transition - comme pour tout traitement de processus élastiques -. Dans ces conditions, on obtient une expression de la densité de courant plus simple :

$$J = \frac{2q}{S} \sum_{k_z} \sum_K W(k_z, K) \{f_e(k) - f_c(k)\} \quad (2.3)$$

avec $k=(k_z, K)$. On notera que dans cette expression la probabilité de transition est indépendante du vecteur d'onde transversal.

2.1.3 - Courant tridimensionnel

Toute les valeurs de k_z sont permises et les mouvements longitudinal et transversal peuvent être représentés par un continuum d'énergie.

Les deux sommations discrètes de l'équation 2.3 se transforment en intégrales continues, soit :

$$\sum_{\mathbf{K}} \rightarrow S \int \frac{d^2K}{(2\pi)^2} = S \frac{m_e^*}{2\pi\hbar^2} \int dE_{//} \quad (2.4)$$

et $\sum_{k_z} \rightarrow L \int \frac{dk_z}{2\pi}$

où L est une longueur de normalisation. De l'intégration des probabilités d'occupations de Fermi-Dirac sur l'énergie transversale $E_{//}$, on obtient la fonction d'alimentation :

$$F(E_z, E_{FE}, E_{FC}) = \ln \left(\frac{1 + \exp\left(\frac{E_{FE} - E_z}{k_B T}\right)}{1 + \exp\left(\frac{E_{FC} - E_z}{k_B T}\right)} \right) \quad (2.5)$$

avec E_{FE} et E_{FC} les niveaux de Fermi respectifs de l'émetteur et du collecteur, et où la tension de polarisation de la structure V_p est prise en compte dans l'expression du niveau de Fermi coté collecteur $E_{FC} = E_{FE} - qV_p$ dans notre cas. Cette fonction d'alimentation, basée sur les distributions de Fermi-Dirac des porteurs dans l'émetteur et le collecteur, traduit le nombre d'électrons issus de ces régions qui participent à la conduction à travers la zone quantique, celle-ci n'étant effective que si partant d'un état occupé, une place libre existe dans le réservoir opposé.

La probabilité de transition par unité de temps peut être exprimé par :

$$W(k_z) = \frac{1}{L} v_z T(E_z) = \frac{1}{L} \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E_z}{\partial k_z} T(E_z) \quad (2.6)$$

où $T(E_z)$ est le coefficient de transmission de la structure évalué à l'énergie E_z . Ainsi, on obtient la relation habituellement utilisée :

$$J_{3D}(V_p) = \frac{qm_e^* k_B T}{2\pi^2 \hbar^3} \int T(E_z) F(E_z, E_{FE}, E_{FC}) dE_z \quad (2.7)$$

La densité de courant tridimensionnel est donc directement liée à la transmission $T(E_z)$ à travers la structure. Pour notre part, l'évolution de cette transmission sera déterminée par le formalisme de Runge-Kutta discuté au chapitre 1. Remarquons que plus cette transmission est faible, et la résonance étroite - épaisseur des barrières importantes par exemple -, moins important est le courant. Pour obtenir des densités de courant de fortes valeurs, il est donc nécessaire de réduire l'épaisseur des couches de matériaux à grand gap de la structure.

Sous l'action de la tension V_p , on peut montrer que rapidement le terme au dénominateur de la fonction d'alimentation devient négligeable devant le terme du numérateur, signifiant alors que le courant à travers la structure dépend principalement d'un transport électronique allant de l'émetteur vers le collecteur. Ainsi, un calcul global de la densité de courant peut revenir à considérer l'émetteur tridimensionnel comme unique

injecteur de porteurs, et le reste de la structure, double barrière et espaceurs compris, comme une boîte noire caractérisée par son spectre de transmission. Dans ce cas, l'importance relative des contributions 1 et 2 dépendra à la fois de la température, de la longueur L_B (figure 2.1), et de la position relative du niveau de Fermi par rapport à la bande de conduction dans l'espaceur.

Même si à basse température, on tend à privilégier la contribution par effet purement tunnel, car seuls les états situés sous le niveau de Fermi sont peuplés, la transmission peut devenir très faible dans le cas d'une barrière électrostatique épaisse. Par contre si la température augmente, il apparaît que le système peut privilégier le transport électronique par la composante de courant 2 via la queue de distribution de la fonction d'alimentation vers les hautes énergies. Cette approche tendrait à minimiser fortement la contribution au courant des états bidimensionnels de la zone d'accumulation si le processus par effet tunnel était le seul mécanisme d'alimentation de ces états. Cependant, le peuplement de la zone d'accumulation est en général assuré par la relaxation de porteurs de hautes énergies vers les états bidimensionnels en amont de la zone double barrière qui présente hors-résonance une faible transparence.

Sans considérer précisément les différents processus d'alimentation de la zone d'accumulation, qui apparaissent cependant peu dépendants de la largeur de la barrière électrostatique L_B , nous allons nous intéresser maintenant à la composante bidimensionnelle du courant provenant des états localisés de la zone d'accumulation.

2.1.4 - Courant bidimensionnel

En supposant la structure à l'équilibre thermodynamique, c'est à dire caractérisée par un niveau de Fermi constant de l'émetteur jusqu'à la première barrière, il est possible d'envisager un processus d'injection non plus à partir de l'émetteur mais directement de la zone d'accumulation. Dans ce cas, le courant total sera la somme de deux contributions : la première, tridimensionnelle, correspondant aux états étendus (chemin 2), et la seconde, bidimensionnelle, provenant des états localisés (chemin 3).

Pour la contribution bidimensionnelle, le mouvement longitudinal des électrons est quantifié, et seules quelques valeurs du vecteur d'onde correspondant ($k_z=k_i$) sont autorisées. L'équation 2.3 peut alors être exprimée par [7] :

$$J = \frac{qm_e * k_B T}{\pi \hbar^2} \sum_i W(E_i) F(E_i, E_{FE}, E_{FC}) \quad (2.8)$$

où E_i est le $i^{\text{ème}}$ niveau d'énergie quantifiée présent dans la région d'accumulation, $F(E_i, E_{FE}, E_{FC})$ la fonction d'alimentation exprimée par l'équation 2.5 pour $E_z=E_i$, et $W(E_i)$ la probabilité de transition d'un électron du gaz quasi-bidimensionnel vers le continuum d'énergie du collecteur par unité de temps. Cette probabilité de transition peut être considérée inversement proportionnelle au temps de résidence τ_i des électrons sur le $i^{\text{ème}}$ niveau quantique de la zone d'accumulation, soit :

$$W(E_i) = \frac{1}{\tau_i} \quad (2.9)$$

Pour une structure sous polarisation, le niveau de Fermi au collecteur peut se situer suffisamment au dessous du niveau de Fermi à l'émetteur E_{FE} et des niveaux quasi-liés E_i , pour que le terme exponentiel faisant intervenir E_{FC} dans la fonction d'alimentation tende vers zéro. La densité de courant bidimensionnel se réduit alors à :

$$J_{2D}(V) = q \sum_i \frac{n_{si}}{\tau_i} \quad (2.10)$$

où

$$n_{si} = \frac{m_e^*}{\pi \hbar^2} k_B T \ln \left(1 + \exp \left(\frac{E_{FE} - E_i}{k_B T} \right) \right) \quad (2.11)$$

représente la densité de charges sur le $i^{\text{ème}}$ niveau quantique de la zone d'accumulation et τ_i le temps de résidence des électrons sur celui-ci.

Ainsi, la densité de courant bidimensionnel induite par chaque niveau quantique présent dans la zone d'accumulation peut être interprétée comme le produit de la densité de charges électroniques par unité de surface et de la probabilité de fuite de cette densité par unité de temps. Cette approximation n'est valable que dans le cas où tout flux électronique du collecteur vers l'émetteur peut être considéré négligeable. Nous verrons par la suite que l'aspect résonnant du courant bidimensionnel provient des évolutions respectives de la densité de charges accumulées et du temps de résidence, sous l'influence d'une polarisation extérieure.

Nous allons à présent développer la méthode utilisée pour déterminer dans ce système semi-ouvert les états d'énergie localisés ainsi que les temps de résidence correspondants.

2.2 - INJECTION BIDIMENSIONNELLE

2.2.1 - Principe : approche numérique

Afin de mettre en évidence les grandeurs physiques intervenant dans les mécanismes du transport bidimensionnel, nous nous proposons dans un premier temps d'étudier qualitativement les phénomènes de résonance entre la région d'accumulation (ou le pré-puits) et le collecteur. Pour cela, nous considérons un puits de potentiel couplé d'un côté au continuum d'énergie via une structure double barrière, et confiné de l'autre côté par une barrière de hauteur finie mais d'épaisseur infinie ; la variation de potentiel correspondante est représentée figure 2.2. Le potentiel (zone 0) à gauche du puits traduit la présence de la barrière électrostatique d'émetteur, et on retrouve la structure puits-double barrière à droite de celui-ci. La zone d'injection notée zone 1 correspond au pré-puits tandis que la zone 3 correspond, par analogie avec les composants étudiés, au puits central de la structure double barrière. Dans un but évident de simplification, nous considérons des zones à potentiel plat (approximation des bandes plates), et par conséquent négligeons tout effet de réaction de charge d'espace. La méthode sera généralisée ultérieurement pour prendre en compte les courbures de bandes introduites par ces transferts de charges.

Une première approche des phénomènes de résonance peut cependant être obtenue en considérant la polarisation de la structure. Pour cela, nous appliquons au profil de potentiel

initial une variation négative ($\Delta V_i < 0$) constante dans chaque zone, linéairement croissante dans la direction $z > 0$. Toute la zone du pré-puits est prise comme référence ($V_1 = 0$) quelque soit la polarisation, et le continuum d'énergie situé à $z > z_4$ sera abaissé de la tension de polarisation totale V_p .

Ainsi les différents potentiels sous polarisation valent :

$$\begin{aligned} V_0 &= V_{00}, V_1 = 0 \text{ V} \\ V_i &= V_{i0} + \Delta V_i \quad \text{pour } i = 2 \text{ à } 4 \\ \text{et } V_5 &= V_p \end{aligned} \quad (2.12)$$

où le sous-indice 0 indique la valeur du potentiel sans polarisation, et où la variation ΔV_i est donnée par :

$$\Delta V_i = -\frac{z_i + z_{i+1}}{2(z_4 - z_1)} V_p \quad (2.13)$$

La méthode de résolution utilisée est une généralisation des travaux de Lassnig et al [8] et permet de calculer la fonction d'onde pour toute énergie en chaque point de la structure. On peut déduire les niveaux d'énergie quantifiée E_i de la structure, ainsi que les temps de vie τ_i qui leur sont associés, à partir de la densité locale d'états :

$$D(E) = \int_{z \in \Omega} \varphi \varphi^* dz \quad (2.14)$$

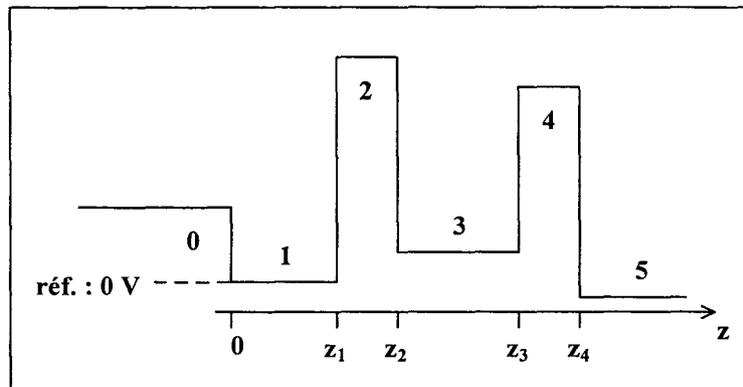


FIGURE 2.2 : Représentation schématique de la variation du potentiel considérée pour traiter l'injection bidimensionnelle d'électrons du pré-puits (zone 1) dans les composants étudiés. La zone 0 s'étend jusqu'à $-\infty$, et la zone 5 correspond au collecteur du composant.

La densité locale d'états est définie dans la plage d'énergie d'existence du pré-puits, c'est à dire entre l'énergie du fond du pré-puits (V_1), et le premier potentiel définissant le pré-puits (minimum entre V_0 et V_2 de la figure 2.2). L'espace d'intégration Ω utilisé peut n'inclure que la zone de pré-puits, ou s'étendre sur une zone incluant la globalité de la structure double barrière et la longueur d'évanescence de l'onde dans la barrière de confinement à gauche du pré-puits (les résultats présentés par la suite seront déterminés par une intégration sur le pré-puits). Dans la gamme d'énergie étudiée, la fonction d'onde est exprimée :

- dans le cas d'une zone i permise par :

$$\varphi_i(z) = A_i \sin(k_i z) + B_i \cos(k_i z) \text{ avec } k_i = \sqrt{\frac{2m_{ei}^*(E - V_i)}{\hbar^2}} \quad (2.15)$$

- dans le cas d'une zone i interdite par :

$$\varphi_i(z) = A_i \exp(-\alpha_i z) + B_i \exp(\alpha_i z) \text{ avec } \alpha_i = \sqrt{\frac{2m_{ei}^*(V_i - E)}{\hbar^2}} \quad (2.16)$$

Dans ces relations les coefficients A_i et B_i sont complexes, et sont déterminés par la continuité de la fonction d'onde et de sa dérivée première aux interfaces en $z=z_i$, et par les conditions aux limites :

$$\begin{aligned} \varphi_0(z) &= A_0 \exp(\alpha_0 z) \\ \text{et } \varphi_5(z) &= \sin(k_5 z + \delta) \end{aligned} \quad (2.17)$$

Ces conditions tiennent compte de l'évanescence de l'onde quand z tend vers $-\infty$ à gauche du pré-puits, et conservent la liberté de propagation à l'extrême droite de la structure correspondant au continuum d'énergie. Enfin, nous obtenons ainsi un système d'équations liant les coefficients complexes A_i et B_i de chaque zone. Suivant la procédure étendue au cas de potentiels quelconques donnée en annexe A, le problème se résume alors à la résolution d'un système de $2(N-1)$ équations à $2(N-1)$ inconnues, N étant le nombre de zones distinctes (6 dans le cas présent).

2.2.2 - Niveaux d'énergie

Pour cette première étude, nous avons choisi une structure type, proche du composant réel qui sera étudié ultérieurement. Celle-ci est constituée d'un pré-puits (zone 1) de largeur 50 Å et d'un puits central (zone 3) de 40 Å. Les barrières de potentiel (zones 2 et 4) ont une épaisseur de 17 Å chacune pour une hauteur de 900 meV, et la fermeture à gauche du système est assurée par une barrière de potentiel (zone 0) de hauteur 100 meV. La référence de potentiel est prise à 0, pour la structure non polarisée, dans les zones 1,3, et 5, et une masse effective correspondant à celle du GaAs $m_e^*=0.067m_0$ est prise constante dans toute la structure.

La figure 2.3 représente la densité locale d'états dans le pré-puits en fonction de l'énergie pour trois polarisations V_p de la structure respectivement 160 mV, 200 mV, et 300 mV. La quantification du système est mise ici en évidence par les pics de densité locale d'états. Pour la polarisation de 160 mV, deux pics correspondant à deux niveaux quantiques sont apparents : l'un à une énergie de 72.7 meV, l'autre à 95 meV. Un tracé des fonctions d'ondes associées à chacune de ces énergies montre que le premier niveau est attaché au pré-puits et le second au puits central. En outre, cette localisation apparaît clairement par un calcul du barycentre des charges à partir des probabilités de présence calculées à ces énergies, soit :

$$(z)_{\text{moy}} = \int_{\Omega} z |\varphi(z)|^2 dz \quad (2.18)$$

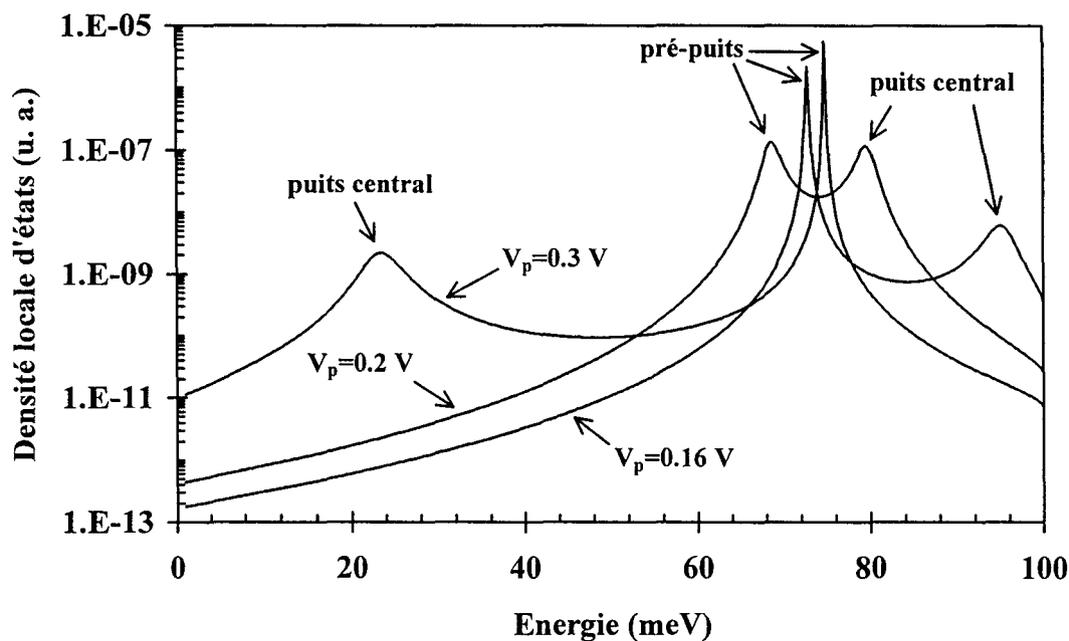


FIGURE 2.3 : Evolutions de la densité locale d'états en fonction de l'énergie calculées pour trois tensions de polarisation $V_p=0.16$ V, 0.2 V, et 0.3 V. La structure considérée est celle schématiquement représentée figure 2.2.

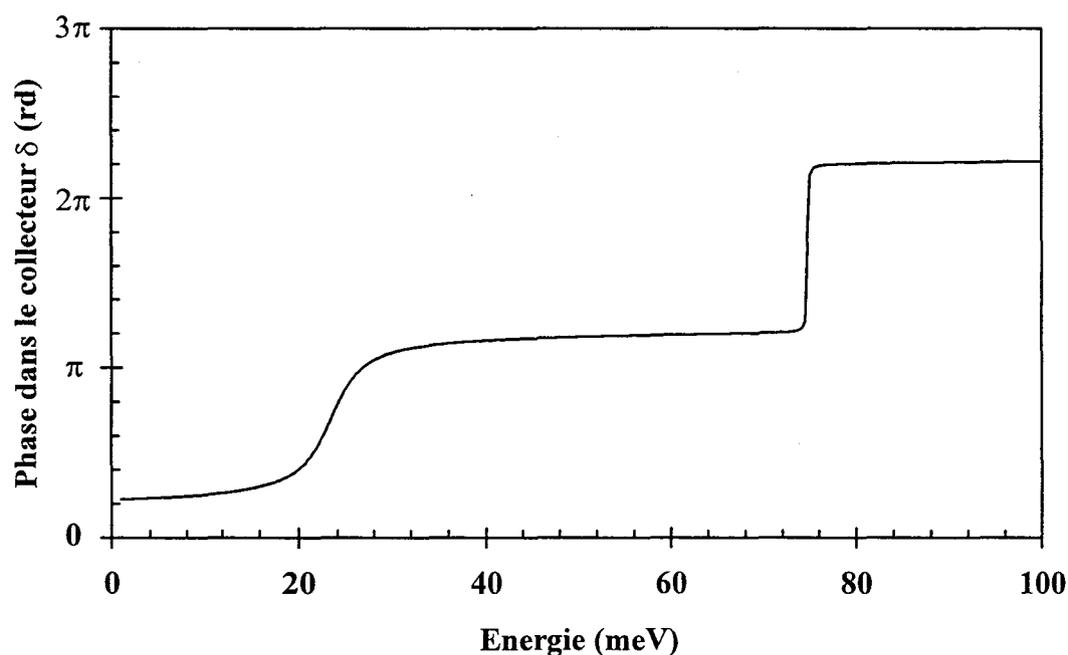


FIGURE 2.4 : Evolution de la phase dans le collecteur (zone 5 figure 2.2) lorsque la structure est polarisée à $V_p=0.3$ V. Pour chaque niveau quantique de la structure un saut de phase de π est observé.

Si l'on s'intéresse à présent à l'évolution des niveaux sous l'effet de la polarisation, on remarque que, du fait des hypothèses utilisées, le niveau du pré-puits n'est que peu perturbé par la tension appliquée. Les faibles différences observées traduisent alors une légère augmentation de la transparence due à l'abaissement de la zone double barrière. Au contraire, le second niveau balaie le domaine énergétique proportionnellement à la tension appliquée comme si il était attaché au fond du puits central, le confinement global ne variant dans cette zone qu'au second ordre.

Une particularité de la méthode est qu'elle permet de déterminer la phase δ dans le continuum. D'autres méthodes basées sur l'étude de cette phase permettent elles aussi de déterminer la quantification dans les systèmes semi-ouverts [9][10]. Ainsi pour la structure précédente polarisée à 300 mV, l'évolution de la phase δ de la fonction d'onde dans le continuum de la zone de collection, en fonction de l'énergie incidente des porteurs (figure 2.4), présente un saut de phase à chaque niveau d'énergie quantifiée. La valeur du saut de phase (π) provient directement des différentes formes que prennent les fonctions d'ondes associées à chaque niveau, et qui correspondent à l'adaptation de la demi-longueur d'onde électronique à la géométrie des puits. Cependant, la détermination des durées de vie par ces méthodes n'est pas triviale, et nous préférons par la suite considérer uniquement la densité locale d'états pour déterminer les propriétés de conduction de la structure.

2.2.3 - Temps de résidence

L'analyse des pics de la densité d'états et leur élargissement nous permettent d'accéder aux temps de résidence, ou durée de vie, des porteurs sur les différents niveaux d'énergie. En effet, ce temps caractéristique s'exprime par :

$$\tau_i = \frac{\hbar}{\Gamma_i} \quad (2.19)$$

où Γ_i est la largeur à mi-hauteur du pic correspondant au niveau i d'énergie E_i .

Ainsi, à l'équilibre, le temps de résidence des porteurs du pré-puits est de 300 ps tandis que celui du puits central est estimé à environ 0.2 ps. La différence de trois ordres de grandeur entre ces deux temps s'explique simplement par le degré d'ouverture et la force de confinement aux énergies considérées. En effet dans le puits central, seules les deux barrières de 17 Å assurent le confinement, alors que les électrons sont fortement piégés dans le pré-puits par une barrière d'épaisseur infinie à gauche, et par l'ensemble puits-double barrière, opaque à l'énergie considérée, à droite. Sur la figure 2.3, l'effet le plus marquant est la modulation du temps de résidence des porteurs, principalement de ceux liés au pré-puits, par la polarisation. C'est cette modulation en fonction de la tension appliquée qui est à l'origine des effets de résistance différentielle négative dans ces structures. Ainsi pour une polarisation de 200 mV, le pic lié au pré-puits s'élargit très fortement, et nous obtenons un temps de résidence minimal dans le pré-puits de 0.3 ps.

Ceci est confirmé par la figure 2.5 qui représente (a) l'évolution des niveaux d'énergie en fonction de la tension de polarisation, et (b) l'évolution des temps de vie qui leur sont associés. Nous obtenons une résonance du temps de vie des porteurs du pré-puits très marquée avec une dynamique très importante (0.3 ps à 300 ps), ainsi que la valeur minimale à 200 mV.

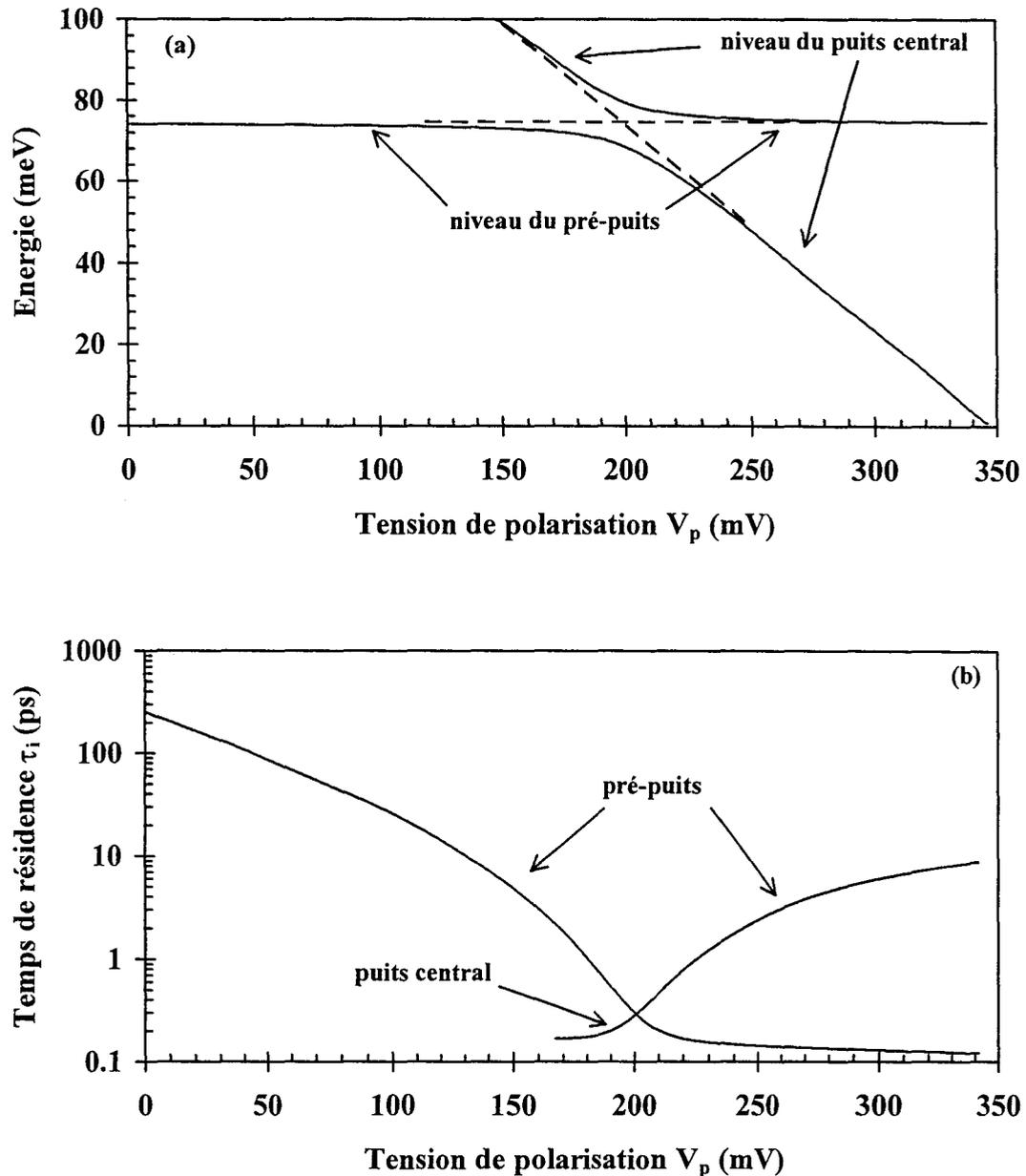


FIGURE 2.5 : Evolutions en fonction de la tension appliquée à la structure : (a) des énergies des niveaux du pré-puits et du puits central, et (b) des temps de résidence associés. A l'anticroisement des deux niveaux quantiques, on observe une résonance du temps de résidence des porteurs liés au pré-puits.

Comme l'indique la figure 2.5a, cette tension correspond à un alignement du niveau du puits central et du niveau du pré-puits. En réalité, le couplage fort puits/pré-puits, provenant de la faible opacité de la barrière de 17 Å, ne permet plus de discerner lors de cet anticroisement l'appartenance des niveaux à l'un ou l'autre des puits. Néanmoins comme le montre la figure 2.5b, la localisation des états quantiques pourra être indirectement déduite car nous avons en- et hors-résonance $\tau_{\text{puits}} \leq \tau_{\text{pré-puits}}$. Aussi, le temps de résidence des porteurs liés au pré-puits est au minimum équivalent à celui des porteurs du puits central ; ceci s'explique par le couplage de ce dernier au continuum par l'unique barrière qui les sépare. Globalement, la zone double barrière joue donc le rôle d'un filtre énergétique, qui à la résonance est transparent ($T \approx 1$), et fixe le temps de transfert vers le collecteur. En première

approximation, cet aspect résonnant du temps de résidence permet d'espérer un contraste en courant important puisqu'en théorie le courant est inversement proportionnel à τ_1 .

Fort de cette analyse qualitative obtenue dans l'approximation des bandes plates, nous allons à présent nous intéresser aux réactions de charge d'espace induites dans la structure afin d'étudier plus précisément ses caractéristiques de conduction. Ceci nécessite en particulier une résolution adaptée de l'équation de Poisson.

2.3 - CALCUL AUTO-COHERENT

La détermination des courbures de bandes introduites par réaction de charge d'espace demande de connaître la répartition spatiale de la densité de charges $n(z)$ le long de la structure. On se heurte alors au problème du traitement simultané de zones tridimensionnelles (contacts) et d'une zone bidimensionnelle (zone de confinement), dont la solution est complexe. Pour de tels systèmes, on pourrait développer un modèle cinétique quantique décrit généralement en termes de distribution de Wigner. Néanmoins dans un pareil cas, pour éviter l'apparition d'aberrations sur l'évolution du profil de potentiel, il semble qu'il soit nécessaire d'une part d'introduire des processus d'interactions inélastiques sur phonons, et d'autre part de prendre en compte la modification de la fonction de distribution électronique dans les zones de contacts, introduite par leur résistivité [11]. Cependant, ces difficultés peuvent être surmontées par l'approximation de Thomas-Fermi qui est discutée ci-dessous. Précisons que ce modèle a fait partie d'un travail de thèse de l'équipe [12], que la méthode numérique de résolution de l'équation de Poisson est basée sur la méthode du double balayage de Choleski, que nous l'avons utilisé principalement pour décrire les zones tridimensionnelles, et qu'il a été adapté pour traiter les problèmes liés à l'injection bidimensionnelle.

2.3.1 - Modèle Thomas-Fermi

Dans le modèle Thomas-Fermi on considère que la densité électronique est localement fonction de la différence entre le bas de la bande de conduction et le niveau de Fermi. Ainsi la répartition des porteurs est exprimé par :

$$n(z) = N_c F_{1/2} \left(\frac{E_F - E_c(z)}{k_B T} \right) \quad (2.20)$$

où $N_c(z) = 2 \left(\frac{m_e^*(z) k_B T}{2\pi^2 \hbar^2} \right)^{3/2}$ est la densité d'états effective de bande de conduction et

$$F_{1/2}(\eta) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty \frac{\varepsilon^{1/2}}{1 + \exp(\varepsilon - \eta)} d\varepsilon, \text{ avec } \varepsilon = \frac{E - E_c(z)}{k_B T}, \text{ l'intégrale de Fermi-Dirac.}$$

Il est important de noter qu'il s'agit d'un modèle à l'équilibre thermodynamique. Son utilisation dans des situations hors-équilibre suppose que l'on puisse diviser la structure en régions localement à l'équilibre, séparées par des barrières de potentiel dans lesquelles la densité électronique est négligée. Elle suppose de plus un courant de conduction nul. Ainsi dans les structures étudiées, les régions s'étendant des zones de contacts à la première barrière

de potentiel cristallin rencontrée seront considérées à l'équilibre. Le modèle permet alors de déterminer la densité électronique dans cet espace, alors qu'elle est supposée nulle dans la région puits central-double barrière.

Comme nous le confirmerons par la suite, bien que ce modèle donne un profil de potentiel correct, il ne peut pas décrire de manière réaliste la répartition électronique. En effet, cette dernière présente d'après ce modèle des discontinuités importantes à chaque interface de matériau qui sont physiquement inacceptables. L'effet de répulsion sur les porteurs consécutif à la présence de barrières de potentiel cristallin nécessite donc une approche quantique, et ne peut pas être traduit dans le cadre de l'approche semi-classique. Ce modèle reste cependant très efficace, et permet par exemple à Choi et al [13] d'étudier l'influence des paramètres structuraux sur le courant et la tension pic dans une structure double barrière dont la zone d'accumulation est renforcée par un pré-puits. Pour cela, les auteurs considèrent le caractère bidimensionnel du pré-puits en le traitant de manière quasi-tridimensionnelle, soit en calculant la répartition de la densité de charges par l'approximation de Thomas-Fermi dans laquelle l'énergie minimale considérée se situe au 2/3 de la profondeur du pré-puits. Ainsi, en diminuant la charge accumulée, ils obtiennent un bon accord théorie expérience sur les valeurs du courant et de la tension pic.

2.3.2 - Modèle quantique

Ce modèle a pour objectif de tenir compte de la quantification en énergie dans la région d'accumulation et se base sur la distinction de deux zones d'énergie distinctes comme le montre la figure 2.6. La première englobe les états étendus d'énergie supérieure à E_{cmax} et peut être traitée, comme un continuum d'énergie, par une approche semi-classique tridimensionnelle. La seconde comprise entre le fond de la zone d'accumulation et E_{cmax} présente des états quantifiés, et nécessite une approche bidimensionnelle.

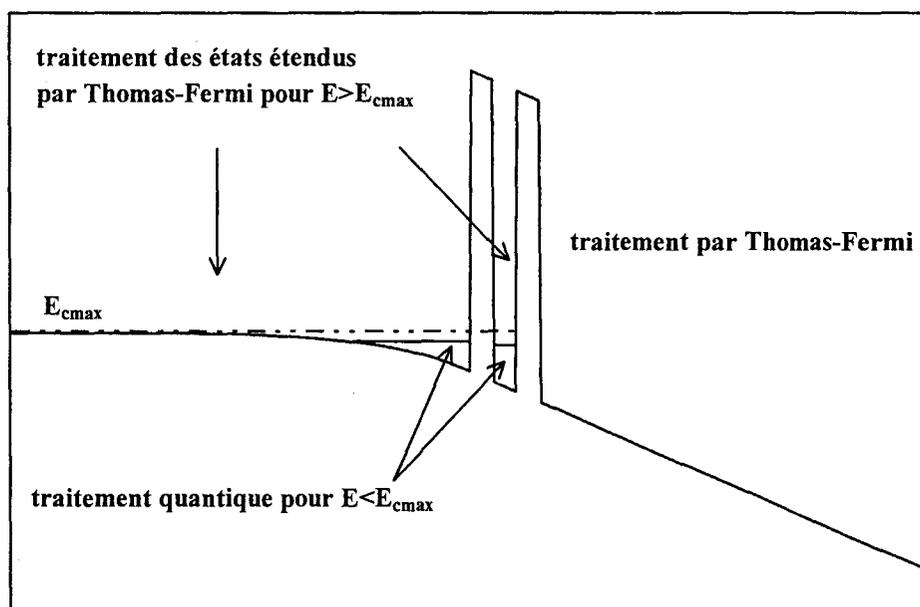


FIGURE 2.6 : Distinction des zones d'énergie pour le traitement autocohérent par le modèle quantique.

Ainsi, la répartition de porteurs dans la zone d'accumulation est exprimée par :

$$\begin{aligned}
 n(z) &= n_{2D}(z) + n_{3D}(z) \\
 \text{avec } n_{2D}(z) &= \frac{m_e^*}{\pi \hbar^2} k_B T \sum_i \ln \left(1 + \exp \left(\frac{E_F - E_i}{k_B T} \right) \right) |\varphi_i(z)|^2 \\
 \text{et } n_{3D}(z) &= N_c(z) F_{1/2} \left(\frac{E_F - E_{c \max}}{k_B T} \right)
 \end{aligned} \tag{2.21}$$

où E_i représente l'énergie du $i^{\text{ième}}$ niveau quantique et $|\varphi_i(z)|^2$ la probabilité de présence qui lui est associée.

Ce modèle a été proposé par Fiig et al [14] pour traiter la zone d'accumulation dans des structures de type double barrière, mais peut aussi être rencontré dans les études d'accumulation de charges dans les canaux de transistors TEGFET [15]. En ce qui nous concerne, nous déterminons les niveaux d'énergie quantifiée, et les probabilités de présence qui leur sont associées, par le modèle présenté précédemment. Soulignons cependant que dans les structures étudiées ici le couplage du pré-puits au continuum se fait en toute rigueur d'un coté par la structure double barrière, mais aussi de l'autre coté par une barrière de potentiel électrostatique. Nous supposons donc ici que les structures réelles sont semi-ouvertes. En première approche, on peut concevoir que cette approximation sera d'autant plus raisonnable que la longueur de l'espaceur d'émetteur sera grande.

Afin de déterminer un domaine de validité de cette approximation, nous avons représenté sur la figure 2.7 la variation du temps de vie des porteurs confinés dans un puits de 100 Å de large par deux barrières de hauteur 900 meV, l'une d'épaisseur 20 Å et l'autre d'épaisseur L_B variable. Dans cette configuration double barrière dissymétrique, trois niveaux quantiques existent. Leur temps de vie respectif présente tout d'abord une forte dépendance pour des épaisseurs de barrière L_B faibles, puis plus faible lorsque l'épaisseur de la barrière L_B devient de l'ordre de 30 à 40 Å. Ensuite, ces temps caractéristiques s'établissent sur des valeurs finies. Par ailleurs, il a été vérifié que la quantification en termes d'énergie n'est pas modifiée par l'épaisseur L_B ; la variation des temps de vie ne résulte alors que d'une modification du couplage puits-continuum [16]. La notion de fuite à gauche et de fuite à droite peut être dans ce cas introduite, et permet d'expliquer cette variation. Ainsi, l'inverse du temps de résidence dans le puits (τ_{DB}) peut être exprimé par une somme de l'inverse de deux temps de fuite : l'un à gauche via L_B (τ_G), le second à droite à travers la barrière d'épaisseur fixe (τ_D), soit :

$$\frac{1}{\tau_{DB}} = \frac{1}{\tau_G} + \frac{1}{\tau_D} \tag{2.22}$$

Plus la barrière de gauche devient opaque, plus le temps de fuite τ_G est important, et donc $1/\tau_G$ négligeable devant $1/\tau_D$ qui reste constant, le temps de résidence dans le puits traduit alors l'unique couplage puits continuum par la barrière de droite ($\tau_{DB} \rightarrow \tau_D$). Finalement, nous retiendrons que l'approximation du système semi-ouvert est valable pour une longueur d'espaceur supérieure au double de l'épaisseur équivalente de la structure assurant le couplage du pré-puits au continuum [17]. Dans le cas d'un couplage par double

barrière, cette épaisseur équivalente sera considérée comme résultant de la juxtaposition des deux barrières. Ceci traduit l'équivalence des valeurs de transmission hors-résonance des structures double barrière d'épaisseur L_{B1} et L_{B2} , et celles obtenues pour une structure simple barrière d'épaisseur $L_B=L_{B1}+L_{B2}$.

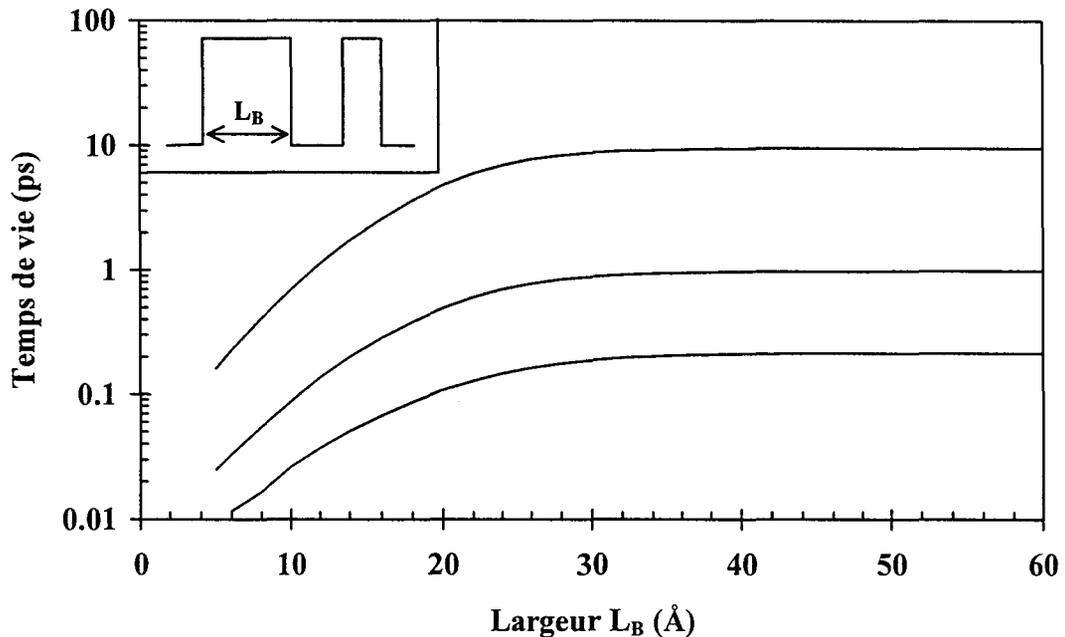


FIGURE 2.7 : Evolution des temps de vie des niveaux quantiques d'une structure double barrière dissymétrique (représentée en insert) à l'équilibre ($V_p=0$), en fonction de la largeur L_B d'une des barrières de potentiel. Les barrières ont une hauteur de 900 meV, la seconde barrière une épaisseur de 20 Å, et le puits une largeur de 100 Å.

Il reste à souligner le problème important de la normalisation des probabilités de présence dans les systèmes ouverts, qui est nécessaire dans le cas présent pour évaluer quantitativement la répartition spatiale des charges piégées dans le pré-puits. Le modèle utilisé considérant une évanescence complète de la fonction d'onde à gauche du pré-puits, ce problème se réduit à déterminer une zone limite à droite, au delà de laquelle on considère le porteur libre et appartenant au continuum. Une étude portant sur les probabilités de présence dans les types de structures étudiées montre une probabilité de présence majoritaire dans les zones de pré-puits et de puits à la résonance, et nous permet de définir la limite de la zone de normalisation à l'extrême droite de la structure double barrière (interface barrière/collecteur). Finalement, la dérivation des caractéristiques de conduction suit la procédure suivante :

- le potentiel est initialisé par le résultat obtenu dans l'approximation de Thomas-Fermi.
- la densité de charges bidimensionnelle $n_{2D}(z)$ est obtenue par résolution de l'équation de Schrödinger dans l'approximation du système semi-ouvert défini précédemment, et la composante tridimensionnelle $n_{3D}(z)$ est calculée classiquement à partir des fonctions de distribution de Fermi-Dirac.

- un nouveau potentiel est alors calculé en considérant la densité de porteurs libres totale $n(z)=n_{2D}(z)+n_{3D}(z)$.
- les deux dernières étapes sont répétées jusqu'à convergence du potentiel en chaque point de la structure. La condition d'arrêt est fixée par l'obtention d'une différence sur le potentiel entre deux itérations inférieure à une valeur relative qui vaut dans notre cas $\epsilon=10^{-6}$.
- une fois le profil de potentiel calculé, les composantes de courant J_{3D} et J_{2D} sont obtenus à partir respectivement des relations 2.7 et 2.10.

Il est à noter que ce modèle, qui par rapport au modèle habituellement envisagé revient à transférer la zone d'injection de l'émetteur vers la zone d'accumulation, suppose implicitement que l'alimentation en porteurs de cette zone est indépendante du transfert de charges vers le collecteur. Ceci suppose que les processus d'alimentation, par effet tunnel et par relaxation d'états 3D vers des états 2D, sont suffisamment efficaces pour maintenir un quasi-équilibre dans la région d'accumulation. Selon les structures envisagées, nous verrons par la suite le domaine de validité de ces hypothèses.

2.3.3 - Comparaison des modèles

2.3.3.1 - Structure triple puits-double barrière

La séquence de croissance du composant étudié, représenté figure 2.8, a été réalisée par Epitaxie par Jets Moléculaires au Laboratoire Central de Recherches de Thomson CSF. Il s'agit d'une diode à effet tunnel résonnant pseudomorphique sur substrat GaAs semi-isolant dans une configuration triple puits-double barrière. Rappelons que le pré-puits accentue le caractère bidimensionnel de l'injection, et que le puits central permet de contrôler le processus de fuite électronique du pré-puits vers le collecteur. Le post-puits quant à lui préserve la symétrie de la structure, donc de la caractéristique de conduction.

GaAs	$3 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$	5000 Å
GaAs	10^{17} cm^{-3}	100 Å
GaAs	n. i. d.	50 Å
Ga _{0,9} In _{0,1} As	n. i. d.	50 Å
GaAs	n. i. d.	5 Å
AlAs	n. i. d.	17 Å
GaAs	n. i. d.	5 Å
Ga _{0,9} In _{0,1} As	n. i. d.	40 Å
Couches symétriques		

FIGURE 2.8 : Séquence de croissance épitaxiale de la diode triple puits-double barrière. Les trois puits sont obtenus par le matériau GaInAs pseudomorphique sur GaAs, et les barrières par le binaire AlAs.

Afin de mieux discerner la structure notons que :

- Les puits de potentiel sont réalisés dans le matériau GaInAs pseudomorphique sur substrat GaAs dont la teneur en indium est limitée à 10% afin d'éviter l'apparition de dislocations. Le pré-puits et le post-puits ont une épaisseur de 50 Å chacun, et le puits central une épaisseur de 40 Å.
- les faibles épaisseurs de barrières d'AlAs de 17 Å nous permettent d'obtenir des densités de courant élevées en vue d'applications hyperfréquences, et des fines couches de 5 Å de GaAs à chaque transition GaInAs/AlAs sont utilisées pour retrouver un bon état de surface avant la croissance d'une nouvelle couche de semiconducteur.
- les réservoirs électroniques de l'émetteur et du collecteur sont réalisés par les couches de GaAs fortement dopées ($3 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$), et les espaceurs sont formés par les couches de GaAs dopées 10^{17} cm^{-3} (100 Å) et non intentionnellement dopées (50 Å) limitant la diffusion des espèces dopantes dans la zone active.
- le coeur du composant, à savoir la zone triple puits-double barrière, est non intentionnellement dopé pour ne pas dégrader le transport par effet tunnel.

La caractéristique de conduction I-V d'un composant de section $14 \mu\text{m}^2$ mesurée à la température ambiante est donnée figure 2.9. Le premier effet marquant, bien qu'attendu, est la symétrie de la caractéristique qui dénote une grande qualité de la structure épitaxiée et une bonne maîtrise des interfaces. Pour une polarisation autour de 0.6-0.7 V on obtient une densité de courant pic de 50 kA/cm^2 , pour un rapport de courants pic sur vallée de 7:1. A ces bonnes caractéristiques statiques, s'ajoutent de bonnes performances hyperfréquences. En effet grâce à l'utilisation d'une technique de connexion planaire par pont à air, permettant l'obtention d'un environnement faiblement parasité, une fréquence de coupure de la résistance différentielle négative supérieure à 200 GHz a pu être déduite de mesures d'impédances [18] ; ces résultats constituent l'état de l'art dans cette filière de matériaux.

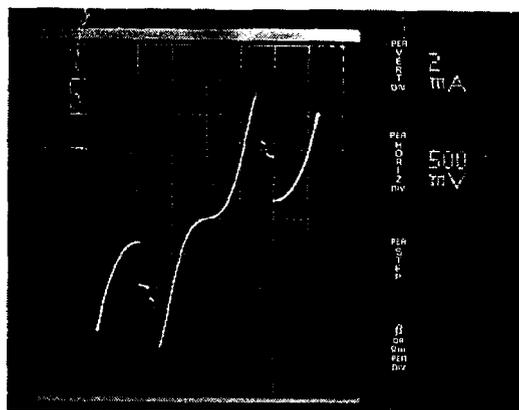


FIGURE 2.9 : Caractéristique de conduction I-V de la structure triple puits-double barrière mesurée à 300 K sur un composant de section $14 \mu\text{m}^2$. On obtient une densité de courant pic de l'ordre de 50 kA/cm^2 à $V_{\text{pic}} \approx 0.6 \text{ V}$, pour un rapport des courants pic sur vallée de 7:1.

Pour la modélisation, nous avons considéré les paramètres (m_e^* , ΔE_c) déterminés d'après les références énoncées au chapitre 1. Précisons que les barrières d'AlAs de 17 Å permettent d'envisager un transport prépondérant par vallée Γ [19][20], et qu'ainsi nous ignorons les effets de mélange par vallée X qui résultent du caractère indirect du gap de l'AlAs.

2.3.3.2 - Potentiel et densité de porteurs

La figure 2.10 représente le profil de bas de bande de conduction à l'équilibre calculé par le modèle Thomas-Fermi (TF) et par le modèle quantique (MQ). L'allure générale est identique mais nous observons une surestimation des effets de réaction de charge d'espace par le modèle de Thomas-Fermi qui se traduit par une élévation globale de la zone active de l'ordre de 5 meV. La principale conséquence de ce décalage en énergie est la modification des énergies quantifiées.

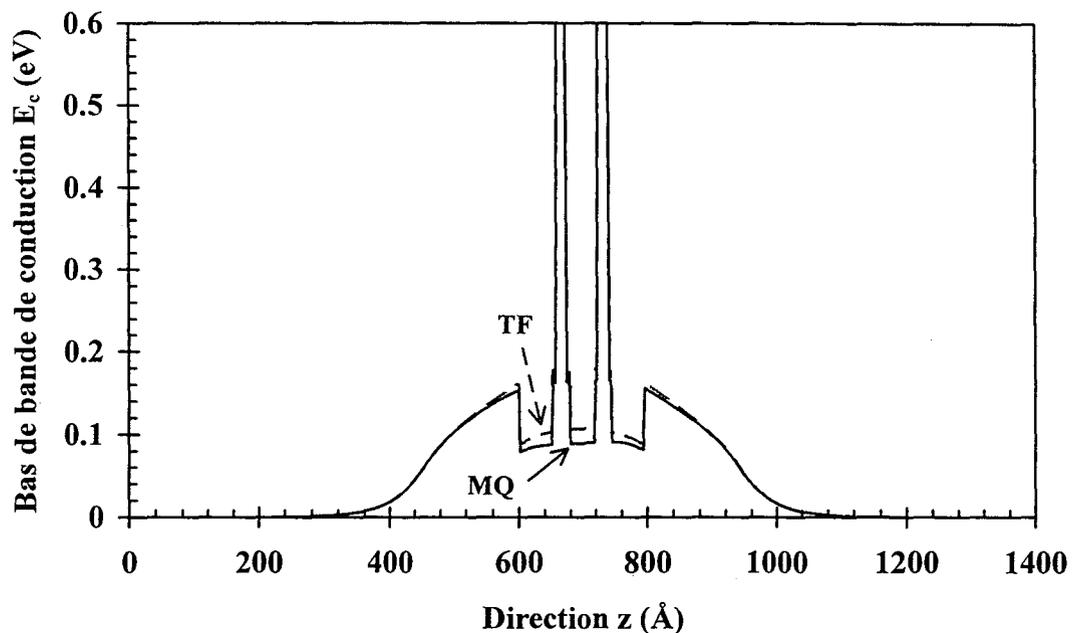


FIGURE 2.10 : Profils de bas de bande de conduction de la structure triple puits-double barrière calculés à l'équilibre, et à $T=300$ K, dans l'approximation de Thomas-Fermi (trait pointillé), et par le modèle quantique (trait plein).

La différence entre ces profils reste tout de même négligeable dans le cas présent, et la spécificité de chaque modèle réside essentiellement dans l'évolution de la densité de porteurs dans la structure. Pour cela, nous avons représenté sur la figure 2.11 les répartitions électroniques obtenues par le modèle Thomas-Fermi et le modèle quantique pour une tension de polarisation de 1 V à 300 K. Comme mentionné précédemment, le modèle Thomas-Fermi introduit des sauts de densité de porteurs à chaque interface, qui traduisent la non prise en compte de la pénétration des porteurs dans les barrières classiquement interdites. Ainsi à cette

polarisation, la densité de charges présente un maximum au niveau de l'interface pré-puits première barrière de l'ordre de $5 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ largement surestimé par rapport au modèle quantique pour lequel on obtient $3.8 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ rejeté à une distance de l'ordre de 30 \AA de l'interface. De plus, le modèle quantique prévoit une variation continue de la densité de charges dont l'allure générale s'apparente à la probabilité de présence de type premier niveau dans le pré-puits. De cette allure mais aussi quantitativement, on observe la prédominance du peuplement bidimensionnel au détriment des états étendus [21].

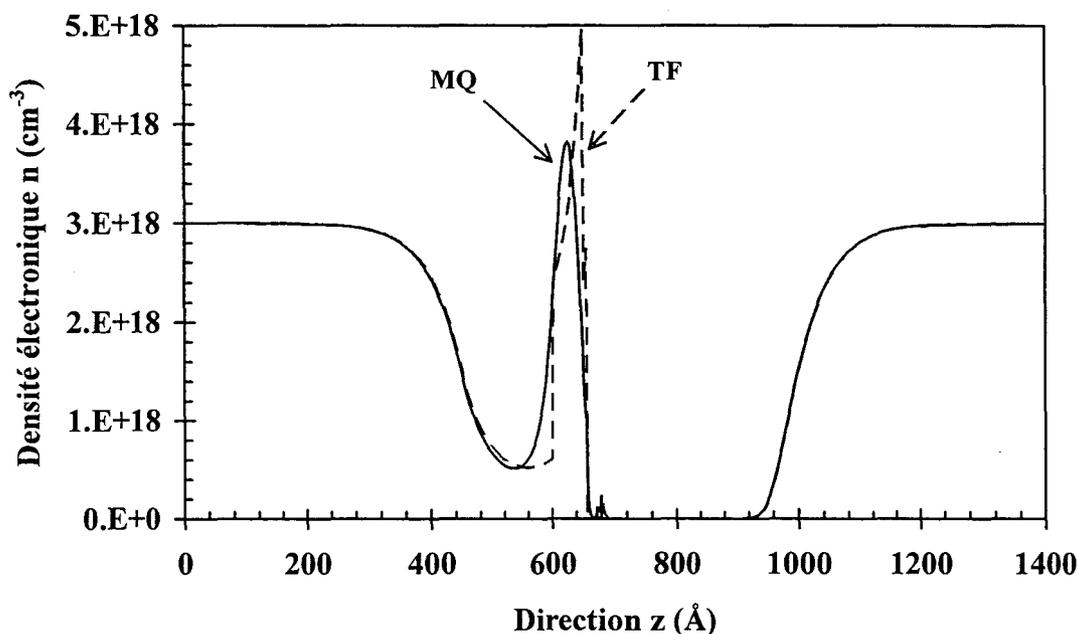


FIGURE 2.11 : Répartitions de la densité de porteurs libres dans la structure triple puits-double barrière polarisée à $V_p=1\text{V}$ calculées à 300 K dans l'approximation de Thomas-Fermi (trait pointillé), et par le modèle quantique (trait plein).

2.3.3.3 - Charge accumulée et temps de fuite

La densité surfacique de charges n_s piégée dans le pré-puits a été déterminée pour chaque modèle par intégration de la densité de porteurs sur la largeur du pré-puits. Comme le montre la figure 2.12, où l'évolution de la charge accumulée en fonction de la tension de polarisation est donnée, la densité de charges surfacique augmente de façon monotone pour les deux modèles, et atteint rapidement des valeurs de l'ordre de 10^{12} cm^{-2} . En outre, la surestimation de l'accumulation obtenue par le modèle de Thomas-Fermi est encore vérifiée. Pour une polarisation de 0.5 V par exemple le modèle quantique évalue une charge accumulée de $9 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ alors que pour le second modèle nous avons $n_s=10^{12} \text{ cm}^{-2}$. Cette différence relativement faible de l'ordre de 10% résulte principalement de la nouvelle répartition spatiale bidimensionnelle des charges, et donc de l'évolution du profil de bas de bande de conduction calculé par le modèle quantique.

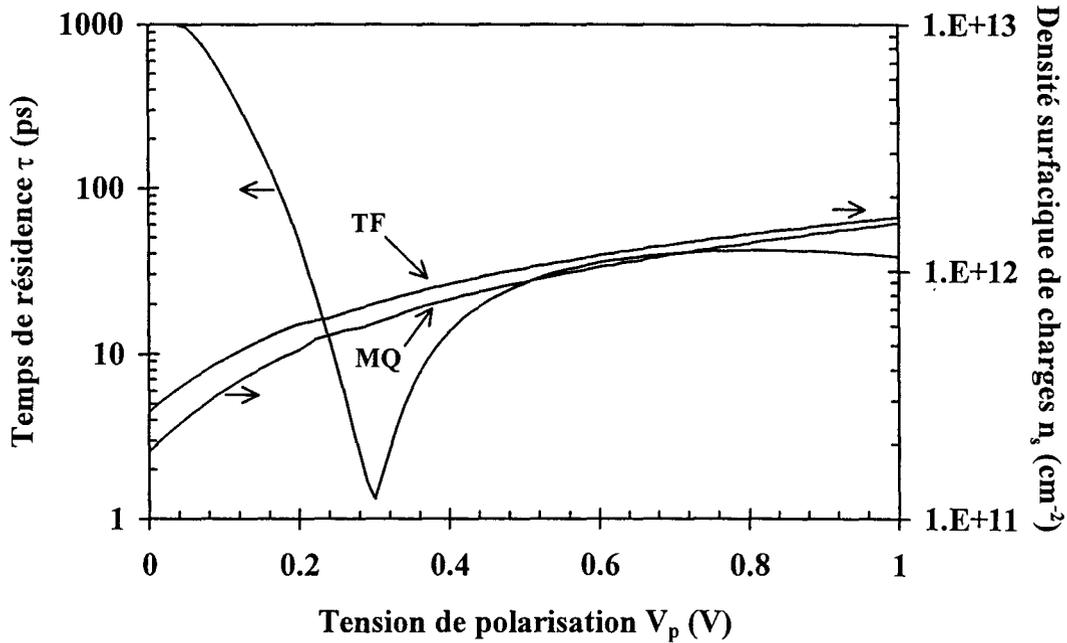


FIGURE 2.12 : Evolutions du temps de résidence des porteurs dans le pré-puits, et de la densité surfacique de charges qui s'y est accumulée. Cette dernière a été calculée dans l'approximation de Thomas-Fermi (TF) et par le modèle quantique (MQ).

La figure 2.12 donne aussi l'évolution du temps de résidence des porteurs accumulés dans le pré-puits. Comme dans l'approximation des bandes plates, nous retrouvons le caractère résonnant de ce dernier avec un minimum pour $V_p=0.3$ V correspondant à l'anticroisement des niveaux quantiques du pré-puits et du puits central. Ainsi à la résonance, quand le couplage du pré-puits au continuum n'est quasiment assuré que par la seconde barrière de potentiel, un temps de fuite de l'ordre de 1 ps est obtenu. Hors-résonance pour des tensions plus élevées, alors que le niveau quantique du puits central se trouve à des énergies situées sous le niveau du pré-puits, le couplage du pré-puits au continuum est fortement diminué et on obtient un temps de fuite de l'ordre de 50 ps. Cette dynamique importante aura, nous le verrons dans le paragraphe suivant, tendance à surestimer les contrastes en courant, laissant augurer l'existence de plusieurs autres mécanismes de conduction.

2.3.3.4 - Densités de courant bidimensionnelle et tridimensionnelle

La figure 2.13 donne les caractéristiques courant-tension calculées en utilisant nos deux modèles, soit respectivement un calcul tridimensionnel obtenu par le modèle de Thomas-Fermi et la relation 2.7, et un calcul bidimensionnel déduit des évolutions de n_s et τ estimées par le modèle quantique.

Au vu des résultats, les trois figures de mérites des diodes à effet tunnel résonnant, à savoir la densité de courant pic, la tension pic, et le rapport des courants pic sur vallée, peuvent être discutées :

- Pour la première, le modèle bidimensionnel évalue la densité de courant maximale à 75 kA/cm² et surestime par conséquent la valeur expérimentale de

50 kA/cm². Cette différence de 33% apparaît néanmoins satisfaisante puisqu'une variation de 20% de la densité de courant pic peut être imputée à une variation de seulement 0.3 monocouches de l'épaisseur des barrières d'AlAs [22]. A l'inverse, l'importante surestimation globale obtenue par le calcul tridimensionnel, et notamment la valeur de 160 kA/cm² de la densité de courant pic, est difficilement explicable par les seules variations des paramètres structuraux liés à la croissance technologique.

- Concernant la tension pic, les deux modèles prédisent une valeur de 0.3 V sous estimée par rapport à la valeur expérimentale de 0.6 V. La prise en compte d'une résistance d'accès de l'ordre de 3 à 5. 10⁻⁶ Ωcm², qui peut être déduite de la caractérisation hyperfréquence [18], pour une densité de courant pic de 50 kA/cm² mène à un décalage de la tension pic de 200 mV vers les valeurs supérieures. Ainsi par cette considération, la tension pic théorique peut être amenée à la valeur de 500 mV en bon accord avec la valeur expérimentale.

- Finalement, on peut remarquer que les deux modèles surestiment très largement le contraste de courant. Les valeurs obtenues, 17:1 par le modèle Thomas-Fermi et 16:1 par le modèle quantique, sont en effet très éloignées du résultat expérimental de l'ordre de 7:1. Ceci provient du fait que le courant vallée est très fortement sous estimé par ces approches cohérentes. En effet il a été montré que hors-résonance, la conduction est dominée par les mécanismes d'interactions élastiques (rugosité d'interface) et inélastiques (interactions sur phonons optiques) [23]. Soulignons qu'expérimentalement on observe toujours un compromis entre la densité de courant pic et le rapport des courants pic sur vallée. Aussi, pour des densités de courant supérieures à quelques dizaines de kA/cm², il apparaît difficilement concevable d'obtenir des contrastes en courant supérieurs à 10 à température ambiante, valeurs qui sont néanmoins suffisantes pour envisager l'utilisation des composants dans des applications non linéaires.

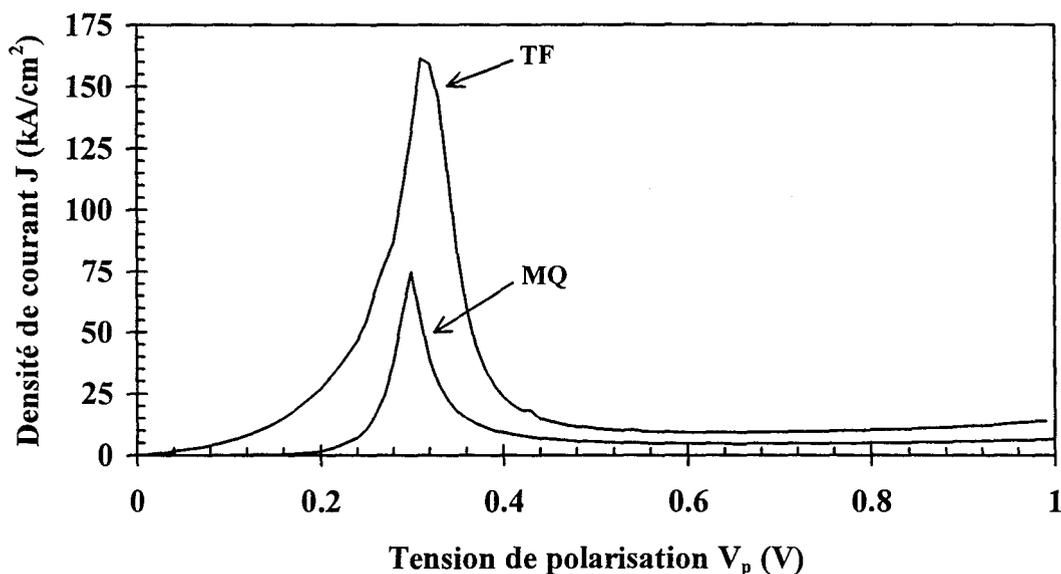


FIGURE 2.13 : Caractéristiques de conduction de la structure triple puits-double barrière calculées en considérant une injection tridimensionnelle (TF, équation 2.7), et en considérant une injection bidimensionnelle (MQ, équation 2.10).

En résumé, nous retiendrons donc que notre modèle quantique est capable, dans le cas d'une injection bidimensionnelle prépondérante, de prédire correctement l'ordre de grandeur des densités de courant pic ainsi que les tensions pics intrinsèques [24].

2.4 - LIMITATIONS DU MODELE QUANTIQUE

Les figures 2.14 et 2.16 proposent une comparaison théorie-expérience des caractéristiques de conduction effectuée sur deux structures à effet tunnel résonnant épitaxiées sur substrat InP : la première (figure 2.14) semblable à une structure ORTD (Optically controled Résonant Tunneling Diode) de la littérature [25], la seconde (figure 2.16) fabriquée au sein du laboratoire. A priori défavorable, cette comparaison nous permet cependant de cerner les limites de validité des modèles que nous avons développés, et permet proposer des solutions pour y remédier.

Avant d'analyser en détail l'origine des désaccords observés, les figures 2.15 et 2.17 donnent respectivement pour chaque composant les séquences de croissances ainsi que les profils de bas de bande de conduction calculés sous polarisation. Quand bien même les applications visées par ces deux dispositifs ne sont pas les mêmes, leur point commun est de présenter un effet d'injection bidimensionnelle marqué, caractérisé par une répartition des porteurs de charge sur plusieurs niveaux dans la zone d'accumulation.

D'un point de vue pratique, la première structure a été étudiée plus particulièrement pour être contrôlée optiquement, c'est à dire pour présenter un décalage en énergie des phénomènes de résonance en fonction d'une puissance optique appliquée. L'injecteur bidimensionnel, formé par les couches GaInAs de 300 Å et de 20 Å respectivement dopée $N_D=10^{18} \text{ cm}^{-3}$ et n. i. d. (figure 2.15), est entouré d'une part par une zone d'AlInAs dopée $N_D=10^{19} \text{ cm}^{-3}$ permettant aussi de limiter les recombinaisons inter-bandes dans l'émetteur, et d'autre part par une zone puits-double barrière AlAs(27 Å)/GaInAs(50 Å)/AlAs(25 Å). La zone de collection est constituée d'une homojonction GaInAs (n. i. d., 1000 Å) ($N_D=10^{18} \text{ cm}^{-3}$, >5000 Å). La large zone n. i. d. permet sous polarisation d'absorber la puissance optique et ainsi de créer une concentration de trous non négligeable qui viennent s'accumuler en aval de la double barrière. Par réaction de charge d'espace et en fonction de la puissance optique appliquée, une modulation des phénomènes de conduction peut être observée.

Comme le montre le résultat expérimental (figure 2.14a), ce composant présente sous obscurité une série de petites zones de résistance différentielle négative. Celles ci sont caractéristiques des croisements des niveaux d'énergie de la zone de pré-puits et des états étendus avec le niveau quantique de la zone double barrière. On retrouve avec une très bonne précision la position en tension de ces pics sur la caractéristique simulée soit à 0.6 V pour les états étendus, et à 1.4 V, et 1.8 V pour les niveaux quantifiés. Néanmoins, quelque soit le modèle utilisée, Thomas-Fermi ou quantique, le calcul présente une succession de pics de conduction séparés les uns des autres en contradiction avec l'expérience. De plus, le modèle quantique prédit des pics dramatiquement plus étroits que le modèle tridimensionnel.

Deux raisons principales peuvent être invoquées pour expliquer ces désaccords. Tout d'abord il faut noter que l'hypothèse du système semi-ouvert avec un confinement strict à gauche du pré-puits n'est pas exactement vérifiée. En effet pour les énergies supérieures, la

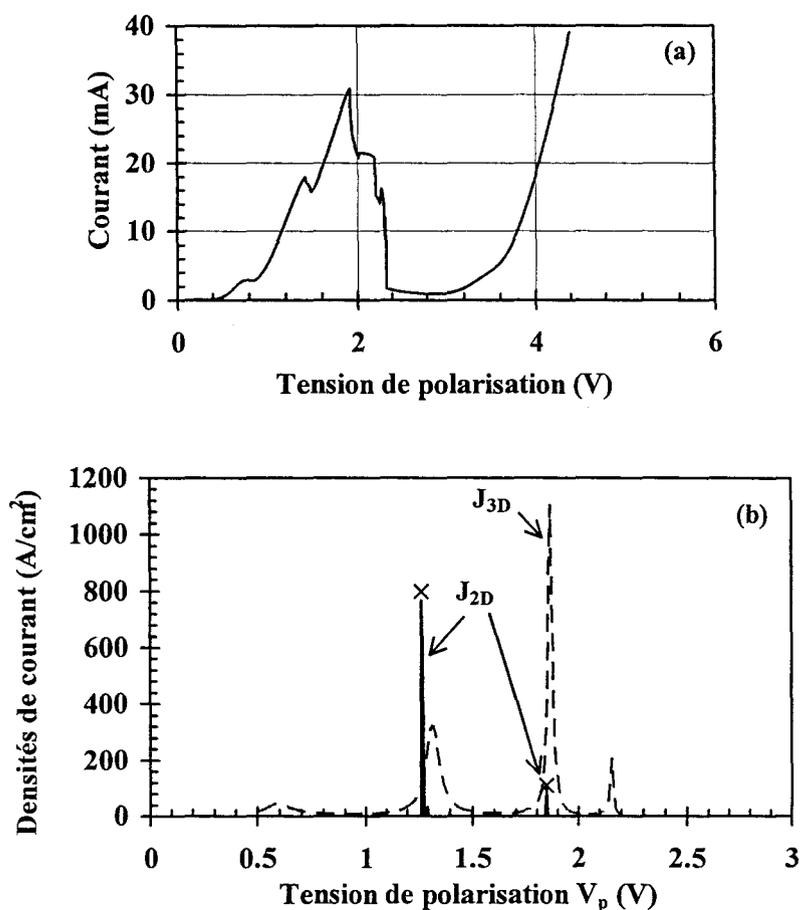


FIGURE 2.14 : Caractéristique de conduction à 300 K d'une ORTD de 60 μm de diamètre mesurée (a) dans l'obscurité, et calculée (b) d'après nos deux modèles.

$\text{Al}_{0.48}\text{In}_{0.52}\text{As}$	10^{19} cm^{-3}	2000 Å
$\text{Ga}_{0.47}\text{In}_{0.53}\text{As}$	10^{18} cm^{-3}	300 Å
$\text{Ga}_{0.47}\text{In}_{0.53}\text{As}$	n. i. d.	20 Å
AlAs	n. i. d.	27 Å
$\text{Ga}_{0.47}\text{In}_{0.53}\text{As}$	n. i. d.	50 Å
AlAs	n. i. d.	25 Å
$\text{Ga}_{0.47}\text{In}_{0.53}\text{As}$	n. i. d.	1020 Å
$\text{Ga}_{0.47}\text{In}_{0.53}\text{As}$	10^{18} cm^{-3}	5300 Å
substrat InP Semi-Isolant		(a)

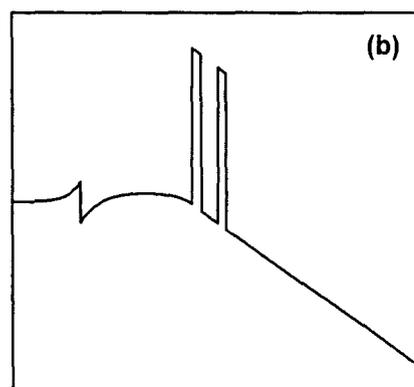


FIGURE 2.15 : Séquence de croissance (a) et profil de bas de bande de conduction (b) de la structure ORTD.

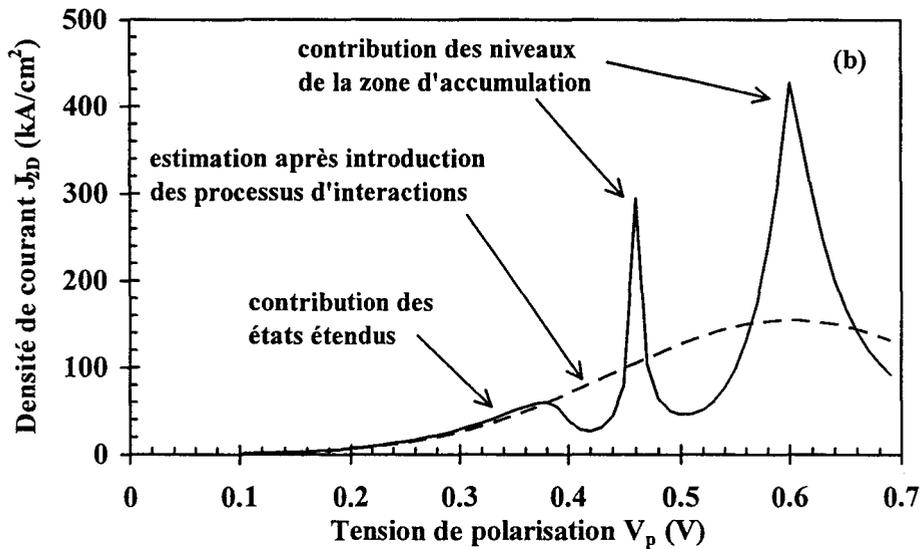
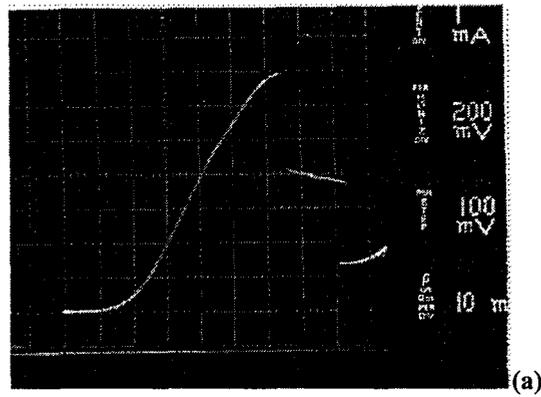


FIGURE 2.16 : Caractéristique de conduction en inverse à 300 K d'une diode à effet tunnel résonnant sur substrat InP de section $4 \mu\text{m}^2$ mesurée (a) et calculée (b) par notre modèle quantique.

Ga _{0.47} In _{0.53} As	$2 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$	1000 Å
Ga _{0.47} In _{0.53} As	10^{18} cm^{-3}	500 Å
Ga _{0.47} In _{0.53} As	n. i. d.	50 Å
AlAs	n. i. d.	15 Å
Ga _{0.47} In _{0.53} As	n. i. d.	40 Å
AlAs	n. i. d.	15 Å
Ga _{0.47} In _{0.53} As	n. i. d.	50 Å
Ga _{0.47} In _{0.53} As	10^{17} cm^{-3}	1000 Å
Ga _{0.47} In _{0.53} As	$2 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$	5000 Å
substrat InP Semi-Isolant		(a)

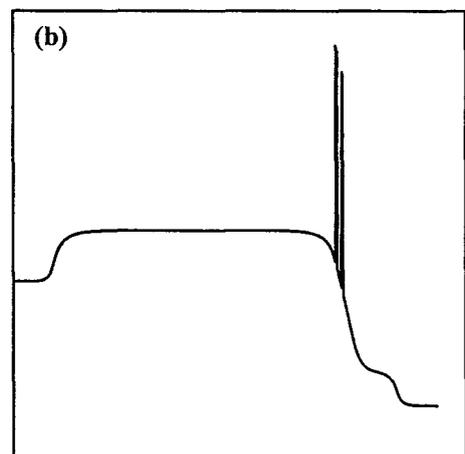


FIGURE 2.17 : Séquence de croissance (a) et profil de bas de bande de conduction (b) de la diode à effet tunnel résonnant sur substrat InP.

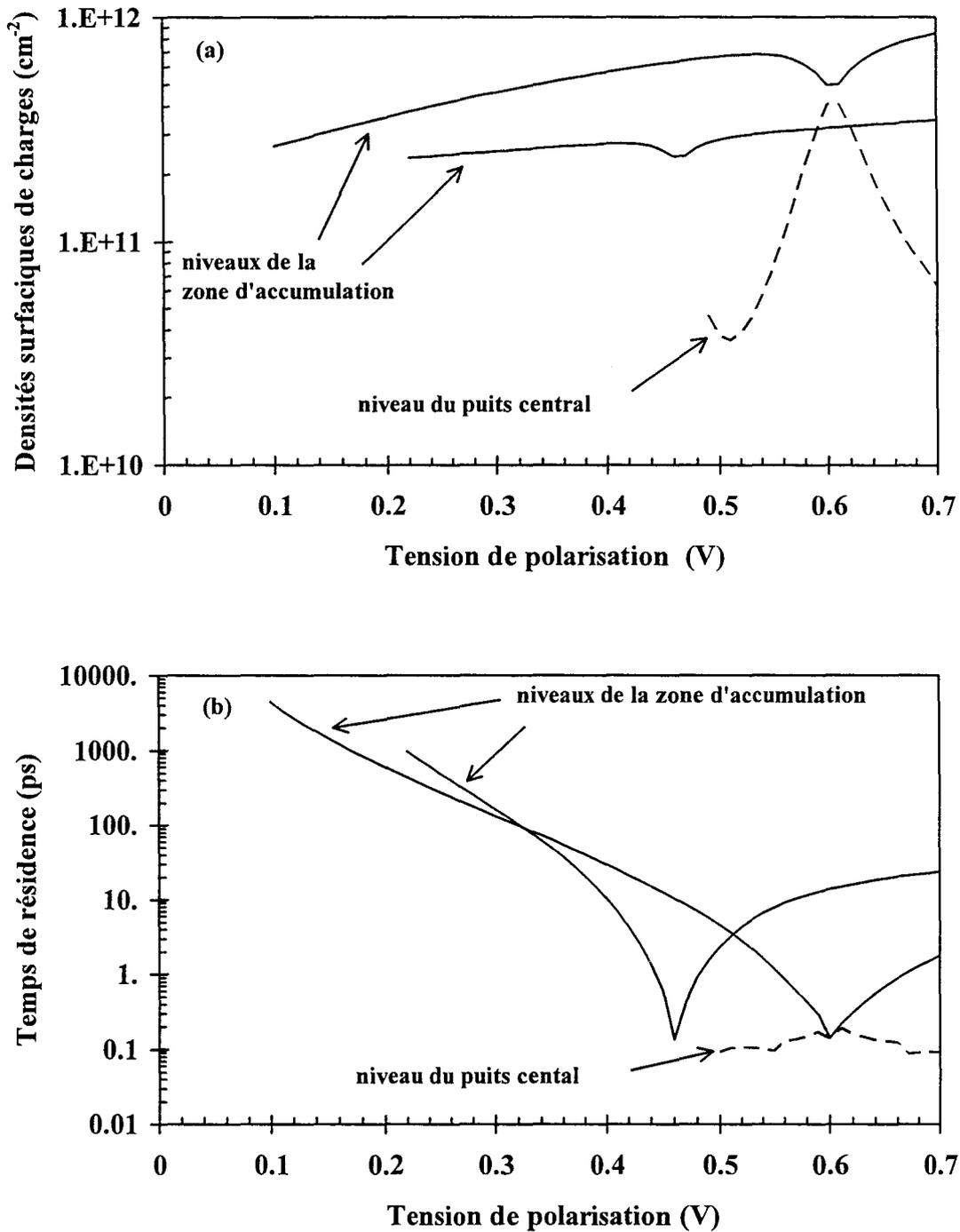


FIGURE 2.18 : Evolutions (a) des densités surfaciques de charges de chaque niveaux quantiques de la zone d'accumulation, et (b) de leur temps de vie respectif, en fonction de la tension appliquée sur la diode à effet tunnel résonnant sur substrat InP.

barrière de confinement de gauche devient de plus en plus fine, et l'hypothèse d'un temps de résidence régi par la fuite à travers la double barrière n'est plus vérifiée. On tend alors à sous-estimer la fuite, et donc à limiter l'ouverture des pics de la densité locale d'états, avec pour conséquence des effets de résonance très étroits et une surestimation du courant traversant la structure. La deuxième raison, déjà évoquée pour la sous estimation du courant vallée dans le paragraphe précédent, est l'aspect diffusif du transport dans l'émetteur avec par exemple l'existence de recombinaisons 3D-2D (états étendus/états quantiques) et inter-sous-bandes dans le pré-puits. De plus, l'aspect de perte de cohérence de phase lors du transport à travers la double barrière, ici relativement épaisse, mérite une étude plus approfondie.

Ce deuxième aspect se retrouve pour la seconde structure (figure 2.17), dissymétrique, qui a été conçue en vue d'applications très hautes fréquences avec pour but d'augmenter conjointement la densité de courant pic admissible et le contraste en courant, mais aussi de diminuer la capacité intrinsèque du composant. Pour cela, précédemment à la zone double barrière AlAs(15 Å)/GaInAs(40 Å)/AlAs(15 Å), la zone constituée d'une homojonction GaInAs(1000 Å, $N_D=210^{19}$ cm⁻³)/(500 Å, $N_D=10^{18}$ cm⁻³) permet de renforcer, grâce aux niveaux de dopages élevés, l'injection des porteurs. En aval, la zone collecteur est formée d'un espaceur GaInAs (1000 Å) dopé $N_D=10^{17}$ cm⁻³ qui permet par désertion de diminuer la capacité intrinsèque de la diode, et donc d'augmenter en théorie sa fréquence de coupure.

Ce composant n'a pas pu être jusqu'ici caractérisé en direct avec des densités de courant attendues de l'ordre de 800 kA/cm². De plus dans ce sens de polarisation et par le fort dopage de l'injecteur, l'aspect bidimensionnel du transport est négligeable. Si l'on s'intéresse à l'autre sens de polarisation, ce qui revient à considérer l'espaceur dopé 10^{17} cm⁻³ comme injecteur, l'aspect bidimensionnel redevient prépondérant comme le montre la simulation (figure 2.16b). Ici encore, on retrouve une caractéristique de conduction avec plusieurs résonances qui ne sont pas observées expérimentalement. Hormis le premier pic caractéristique des états étendus, deux anticroisements entre les deux niveaux quantifiés de la zone d'accumulation et le niveau du puits central sont observés.

Les évolutions de la densité surfacique de charges de chaque niveau quantique, ainsi que leur temps de résidence respectif, en fonction de la tension de polarisation sont reportées figure 2.18a et b. On s'aperçoit que ces deux résonances sont dans leur principe équivalentes à celles rencontrées précédemment, c'est à dire une résonance des temps de résidence des porteurs liés à chaque niveau du pré-puits, accompagnée par une résonance des densités de charges qui s'y rattachent. Comparativement à la structure triple puits-double barrière, on remarquera ici que les densités surfaciques de charges sont du même ordre de grandeur, alors que les valeurs des temps de résidence à la résonance sont plus faibles. Les plus fortes valeurs des densités de courant pic s'expliquent alors par la diminution importante des temps de résidence des porteurs dans la zone d'accumulation, qui est observée dans les composants de la filière InP dans lesquels les électrons ont une masse effective plus faible.

Une approche phénoménologique des processus d'interactions traités dans leur globalité pour introduire la notion de perte de cohérence de phase a été développé dans l'équipe dans le passé [26]. Cette étude a montré que les interactions tendent à élargir les phénomènes de résonance en diminuant leur intensité et en augmentant les contributions non résonantes, tout en conservant le produit largeur-hauteur du pic de transmission. Si l'on procède avec ce même type de technique sur la figure 2.16b en conservant l'intégrale du courant, on obtient une caractéristique de courant lissée. La densité de courant pic obtenue alors, de l'ordre de 150 kA/cm² pour une polarisation de 0.6 V est en bon accord avec les valeurs expérimentales qui se situent dans une gamme de 135 à 175 kA/cm² sur l'ensemble de l'échantillon.

Il est clair que cette approche qualitative des processus d'interactions n'est pas suffisante car elle ne donne pas d'ordre de grandeur des phénomènes mis en jeu. Il apparaît cependant, au vu de cette étude que le modèle quantique constitue une base nécessaire pour des développements ultérieurs.

2.5 - CONCLUSION

Nous avons étudié les composantes tridimensionnelle et bidimensionnelle du courant dans des diodes à effet tunnel résonnant. La première, classiquement utilisée, considère le passage des électrons de l'émetteur au collecteur par effet tunnel, le reste de la structure n'étant caractérisé que par son spectre de transmission. La seconde, considère des sources électroniques bidimensionnelles créées électrostatiquement ou renforcées par la création d'un pré-puits de potentiel cristallin. Dans ce cas, il a été montré le caractère résonnant des temps de résidence des charges électroniques accumulées dans ces injecteurs bidimensionnels, qui est à l'origine de la présence d'une résistance différentielle négative dans la caractéristique de conduction du composant.

D'autres aspects liés à la considération des réactions de charge d'espace ont été vérifiées. Il s'agissait de valider les profils de potentiel déterminés par le modèle de Thomas-Fermi bien que celui-ci présente des sauts de densités de porteurs physiquement inacceptables. Un modèle quantique différenciant les états localisés et les états étendus a permis de remédier à ce problème, et d'obtenir des évolutions correctes des densités de porteurs. Ce modèle a pu être appliqué avec succès à une structure triple puits-double barrière avec de très bonnes descriptions de la densité de courant pic et de la tension correspondante, par comparaison aux valeurs expérimentales.

Des études complémentaires ont montré que sur la base de ce modèle, plusieurs voies de recherche peuvent être envisagées pour en augmenter la fiabilité et traduire la complexité des phénomènes de transport. Si l'hypothèse d'un transport cohérent semble la plus restrictive, un effort pour introduire les processus d'interactions s'avère nécessaire. De plus, les phénomènes liés au peuplement de la zone d'injection constituent un autre axe de recherche, comme par exemple l'étude de la dynamique des porteurs de charge conduisant à la situation de quasi-équilibre de la structure sous polarisation (définition d'un quasi-niveau de Fermi). Des études dans ce sens sont actuellement entreprises au sein de l'équipe. Notons enfin que ces nombreux problèmes liés à l'ouverture des systèmes et aux conditions de raccordement entre zones de dimensionnalités différentes restent ouverts et largement étudiés.

BIBLIOGRAPHIE CHAPITRE 2

- [1] L. ESAKI, and R. TSU
"Superlattice and negative differential conductivity in semiconductors"
IBM J. RES. DEVELOP. 14, 1970, pp 61-65.
- [2] L. L. CHANG, L. ESAKI, and R. TSU
"Resonant tunneling in semiconductor double barriers"
Appl. Phys. Lett. 24(12), 1974, pp 593-595.
- [3] C. I. HUANG, M. J. PAULUS, C. A. BOZADA, S. C. DUDLEY, K. R. EVANS,
C. E. STUTZ, R. L. JONES, and M. E. CHENEY
"AlGaAs/GaAs double barrier diodes with high peak-to-valley current ratio"
Appl. Phys. Lett. 51(2), 1987, pp 121-123.
- [4] P. MOUNAIX, O. VANBÉSIEN, and D. LIPPENS
"Effect of cathode spacer layer on the current-voltage characteristics of resonant tunneling diodes"
Appl. Phys. Lett. 57(15), 1990, pp 1517-1519.
- [5] E. T. KOENIG, C. I. HUANG, and B. JOGAI
"Independence of peak current from emitter spacer layer width in AlGaAs/GaAs resonant tunneling diodes"
J. Appl. Phys. 68(11), 1990, pp 5905-5907.
- [6] H. RIECHERT, D. BERNKLAU, J.-P. REITHMAIER, R. D. SCHNELL
"High performance resonant tunneling structures on GaAs Substrates"
Electronic letters 26(5), 1990, pp 340-342.
- [7] J. A. LOPEZ VILLANUEVA
"Analysis of an optically controlled resonant tunneling diode"
Human Capital and Mobility Programme, European Community
Research Report, IEMN, 1995.
- [8] R. LASSNIG, and W. BOXLEITNER
"Tunneling from quasi two dimensional space charge layers"
Solid States Communications 64(6), 1987, pp 979-982.
- [9] A. C. SEABAUGH, Y.-C. KAO, W. R. FRENSLEY, J. N. RANDALL, and
M. A. REED
"Resonant transmission in the base/collector junction of a bipolar quantum-well resonant-tunneling transistor"
Appl. Phys. Lett. 59(26), 1991, pp 3413-3415.
- [10] F. CHEVOIR
"Effet tunnel résonnant assisté par diffusion dans les diodes double-barrière"
Thèse de l'université de Paris XI Orsay, 2 avril 1992.

- [11] W. R. FRENSLEY
"Effect of inelastic processes on the self-consistent potential in the resonant-tunneling diode"
Solid States Electronics 32(12), 1989, pp 1235-1239.
- [12] V. SADAUNE
"Effet tunnel résonnant dans les hétérostructures de matériaux semiconducteurs pour différentes situations de confinement"
Thèse de l'université des Sciences et Technologies de Lille, 22 octobre 1993.
- [13] Y. W. CHOI, and C. R. WIE
"Increased peak current in AlAs/GaAs resonant tunneling structures with GaInAs emitter spacer"
J. Appl. Phys. 71(4), 1992, pp1853-1859.
- [14] T. FIIG, and A. P. JAUHO
"Self-consistent model for two-dimensional accumulation layer states in resonant tunneling devices"
Appl. Phys. Lett. 59(18), 1991, pp 2245-2247.
- [15] M. JAFFE, and J. SINGH
"Band structure and charge control studies of n- and p- type pseudomorphic modulation-doped field-effect transistors"
J. Appl. Phys. 65(1), 1989, pp329-338.
- [16] L. BURGNIES
"Mécanismes d'injection et de fuite dans les hétérostructures résonnantes"
D. E. A. de l'université des Sciences et Technologies de Lille, 7 juillet 1993.
- [17] G. GARCIA-CALDERÓN, A. RUBIO, and R. ROMO
"Decay widths for double-barrier resonant tunneling"
J. Appl. Phys. 69(6), 1991, pp 3612-3615.
- [18] E. LHEURETTE, B. GRIMBERT, M. FRANCOIS, P. TILMANT, D. LIPPENS, J. NAGLE, and B. VINTER
"In_{0,1}Ga_{0,9}As/GaAs/AlAs pseudomorphic resonant tunneling diodes integrated with airbridge"
Electronics letters 28(10), 1992, pp 937-938.
- [19] A. C. MARSH
"Electron tunneling in GaAs/AlGaAs heterostructures"
IEEE Journal of Quantum Electronics QE23(4), 1987, pp 371-376.
- [20] D. Z.-Y. TING, M. K. JACKSON, D. H. CHOW, J. R. SÖDERSTRÖM, D. A. COLLINS, and T. C. MCGILL
"X-point tunneling in AlAs/GaAs double barrier heterostructures"
Solid-States Electronics 32(12), 1989, pp 1513-1517.

- [21] O. VANBÉSIEN, L. BURGNIES, V. SADAUNE, D. LIPPENS, J. NAGLE, and B. VINTER
"Supply and escape mechanisms in $\text{In}_{0.1}\text{Ga}_{0.9}\text{As}/\text{GaAs}/\text{AlAs}$ resonant tunneling hétérostructures in a triple well configuration"
Gallium Arsenide and Related Compounds, Freiburg 1993
Inst. Conf. Ser. n°136 chapter 4, pp 227-232.
- [22] D. E MARS, L. YANG, M. R. T. TAN, and S. J. ROSNER
"Reproducible growth and application of AlAs/GaAs double barrier resonant tunneling diodes"
J. Vac. Sci. Technol. B 11(3), 1993, pp 965-968.
- [23] F. CHEVOIR, and B. VINTER
"Scattering-assisted tunneling in double-barrier diodes : Scattering rates and valley current"
Phys. Rev. B 47(12), 1993, pp 7260-7274.
- [24] L. BURGNIES, O. VANBÉSIEN, V. SADAUNE, D. LIPPENS, J. NAGLE, and B. VINTER
"Resonant tunneling structures with local potential perturbations"
J. Appl. Phys. 75(9), 1994, pp 4527-4532.
- [25] G. KLIMECK, R. LAKE, R. C. BOWEN, W. R. FRENSLEY, and T. S. MOISE
"Quantum device simulation with a generalised tunneling formula"
Appl. Phys. Lett. 67(17), 1995, pp 2539-2541.
- [26] 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 des Sciences et Technologies de Lille, 27 février 1990.

CHAPITRE 3

CONSTRICTION LATÉRALE D'UN GAZ BIDIMENSIONNEL D'ELECTRONS

CHAPITRE 3 : CONSTRICTION LATÉRALE D'UN GAZ BIDIMENSIONNEL D'ELECTRONS

La notion de composants à base de guides d'ondes électroniques, par analogie avec les composants micro-ondes, est apparue il y a une dizaine d'années grâce aux progrès conjoints des techniques de croissance épitaxiale et de lithographie électronique, qui ont permis de confiner un gaz d'électrons dans deux ou trois dimensions de l'espace. Ainsi dès 1988, Van Wees et al [1] ont mis en évidence une quantification de conductance dans un fil quantique (transport 1D) connecté à deux réservoirs à 4.2 K. L'observation de ces phénomènes nécessite à la fois la réalisation de zones actives de faibles dimensions (quelques dizaines de nanomètres), et l'obtention d'un transport balistique, autrement dit des mobilités de porteurs très élevées. Si dans ce travail un effort important a été consacré à la simulation de dispositifs à base de guides d'ondes électroniques (voir chapitres suivants), une première étude expérimentale a été entreprise, en parallèle, sur les hétérostructures à hautes mobilités à partir desquelles un gaz d'électrons unidimensionnel peut être obtenu par un confinement électrostatique additionnel.

Dans ce chapitre nous discuterons tout d'abord de l'optimisation d'une hétérostructure à modulation de dopage afin d'obtenir une mobilité très élevée, puis nous développerons les techniques de caractérisation sous champ magnétique permettant de la mesurer. Ensuite, nous présenterons les relations fondamentales liées au transport balistique unidimensionnel. Enfin dans un cas simple, ces différents aspects seront illustrés par un calcul réaliste des profils de potentiel tridimensionnels permettant d'étudier la réalisation de dispositifs de type guide d'ondes électroniques.

3.1 - GAZ BIDIMENSIONNEL A HAUTE MOBILITE

3.1.1 - Hétérostructures à modulation de dopage

Dans les matériaux volumiques, la mobilité des porteurs à la température de l'hélium liquide est principalement limitée par les interactions sur impuretés ionisées. C'est pour cette raison qu'il a été envisagé de séparer spatialement les porteurs de charge des impuretés en réalisant une hétérostructure à modulation de dopage.

Nous avons représenté figure 3.1 la séquence de croissance générique des structures que nous considérerons par la suite. Le confinement électronique se produit dans le GaAs n. i. d., à l'interface avec l'espaceur GaAlAs n. i. d. qui permet une meilleure séparation des porteurs et des impuretés par ajustement de l'épaisseur de la couche L_g . La couche GaAlAs fortement dopée apporte deux degrés d'optimisation supplémentaires : le dopage N_D et l'épaisseur L_D . Enfin, la couche GaAs fortement dopée ($N_c^{++} = 2 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$) de 50 Å, appelée "cap layer", permet d'une part d'éviter l'oxydation en surface de la couche GaAlAs, et d'autre part par le

fait qu'elle soit fortement dopée, permet d'obtenir des contacts ohmiques peu résistifs. Aux trois paramètres de croissances L_S , L_D , et N_D , il faut ajouter la concentration en aluminium des couches GaAlAs que nous fixerons identique dans l'espaceur et la couche dopée.

GaAs	N_c^{++}	50 Å
$Ga_{1-x}Al_xAs$	N_D	L_D
$Ga_{1-x}Al_xAs$	n. i. d.	L_S
GaAs	n. i. d.	>1000Å

FIGURE 3.1 : Séquence de croissance générique des hétérostructures GaAlAs/GaAs à dopage volumique que nous désirons optimiser via les paramètres de couches : L_S , L_D , N_D , x .

L'une des caractéristiques essentielles des hétérostructures concerne la densité surfacique de charges n_s du gaz bidimensionnel. Dans le cas des transistors TEGFET, rappelons que cette densité détermine directement la densité de courant transportable par le canal 2D ($J=qn_s v$). Dans l'optique d'une optimisation de la structure, l'étude de cette charge accumulée est incontournable. C'est pourquoi, nous allons à présent étudier l'influence des différents paramètres de la structure sur l'accumulation de charges.

3.1.2 - Influence des paramètres

Comme nous le verrons ci-dessous, divers mécanismes d'interactions outre celui sur impuretés ionisées énoncé précédemment, ont pour conséquence une limitation de la mobilité (μ) des porteurs du gaz 2D. Il a été montré théoriquement que le désordre d'alliage de l'espaceur GaAlAs est dans le cas de faibles concentrations en aluminium (x) un mécanisme d'interaction prédominant [2].

Notre choix s'est porté sur une concentration de 30% en accord avec l'étude expérimentale de Saito et al [3] qui ont observé pour cet ordre de grandeur un maximum dans leur relevé $\mu(x)$. Soulignons que cette valeur se trouve sous le pourcentage de transition Γ -X du matériau GaAlAs et qu'en conséquence nous sommes en présence d'un matériau à gap direct. D'autre part, à cette valeur correspond un décalage de la bande de conduction d'environ 230 meV qui est suffisant pour obtenir une accumulation de charges de l'ordre de 10^{11} à 10^{12} cm⁻².

3.1.2.1 - Paramètres de simulation

Les différentes évolutions de la densité surfacique de charges du gaz 2D ont été calculées à $T=4.2$ K. Nous prenons en compte la réaction de charge d'espace, par résolution de l'équation de Poisson (équation 1.7) avec une répartition de la densité de porteurs libres $n(z)$ donnée par la distribution de Fermi-Dirac. Par ailleurs, nous considérons que la bande de conduction est accrochée sur la surface du composant à une énergie $q\Phi_F$ au dessus du niveau de Fermi par les états de surface du "cap layer" GaAs. Ceci signifie qu'il y a une barrière de

potentiel ($\Phi_F=0.7$ eV) pour les électrons à la surface. De plus, nous supposons que le champ électrique dans le GaAs n. i. d. s'annule quand $z \rightarrow \infty$. Enfin, nous considérons un décalage de la bande de conduction de 230 meV à l'interface GaAs/GaAlAs, ainsi qu'une masse effective réduite $m^*=0.092$ dans le ternaire, correspondant à un taux d'aluminium $x=0.3$. Le taux d'impuretés résiduelles dans les couches n. i. d. est pris à $5 \cdot 10^{13} \text{ cm}^{-3}$, qui correspond à un cas de figure relativement idéal.

L'emploi d'une méthode semi-classique de résolution de l'équation de Poisson ne se justifie que par sa souplesse d'utilisation et sa rapidité d'exécution, même si il est bien établi que celle-ci tend à surestimer les densités de charges accumulées. Afin de quantifier cet écart sur une structure test, nous avons comparé nos résultats à ceux issus d'un modèle purement quantique développé au sein de l'équipe "composants actifs micro-ondes" du laboratoire [4]. A l'issue de ces comparaisons, il est apparu en tendance que les évolutions de la densité surfacique de charges en fonction des paramètres de longueur et de dopage sont conservés. En outre, les profils de potentiel de la structure calculés par les deux modèles sont quasiment identiques. Quantitativement si pour de faibles valeurs de dopage de la couche GaAlAs dopée, l'écart de la densité de charges accumulées peut dépasser les 50%, celui-ci tend à diminuer pour des valeurs plus importantes. Aussi, l'approche classique peut nous permettre par comparaisons successives d'optimiser en longueurs et dopages associés l'hétérostructure étudiée, tout en conservant à l'esprit qu'une détermination précise de la densité surfacique de charges du gaz 2D nécessite un calcul quantique.

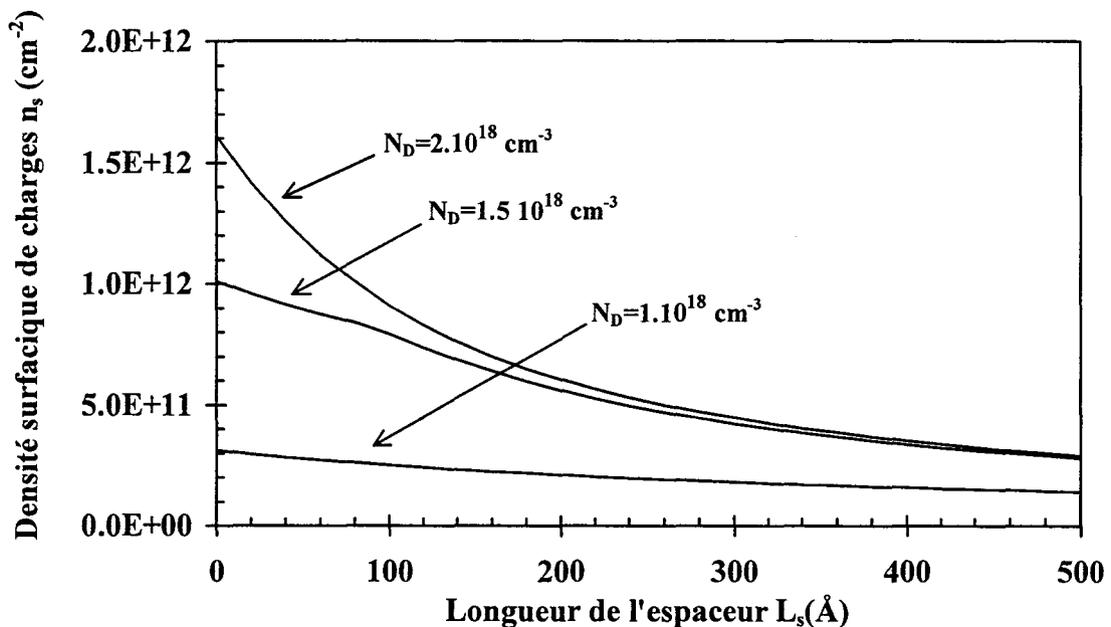


FIGURE 3.2 : Evolutions des densités surfaciques de charges n_s en fonction de la longueur d'espaceur L_s , calculées pour trois dopages volumiques de la couche dopée de longueur $L_D=300$ Å : $N_D=10^{18} \text{ cm}^{-3}$, $N_D=1.5 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, et $N_D=2. \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$.

3.1.2.2 - Influence de l'espaceur

Nous avons représenté figure 3.2, pour trois niveaux de dopage N_D de la couche GaAlAs, l'évolution de la charge accumulée n_s en fonction de la longueur L_s de l'espaceur de l'hétérostructure générique représenté figure 3.1. La longueur de la couche dopée est fixée à $L_D=300$ Å, les autres paramètres étant ceux cités précédemment. La décroissance monotone

de ces courbes traduit la diminution successive du taux de charges transférées de la couche dopée vers le gaz 2D pour des espaces d'épaisseurs plus importantes.

Outre le fait prévisible d'une augmentation de la charge accumulée pour les dopages N_D plus élevés, nous observons que pour une largeur d'espaceur supérieure à 200 Å, la différence entre les charges transférées par une couche dopée $N_D=1.5 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ ou $N_D=2 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ est inférieure à 8%. Par conséquent, il n'est pas avantageux d'augmenter le dopage N_D au delà de $1.5 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, ce qui par ailleurs permet de limiter les interactions coulombiennes des porteurs du gaz 2D avec les charges ionisées. Soulignons aussi les faibles valeurs de n_s consécutives à un dopage $N_D=10^{18} \text{ cm}^{-3}$, qui semblent trop faibles pour envisager de mettre en évidence expérimentalement des effets quantiques dans les structures à base de guides d'ondes électroniques.

3.1.2.3 - Influence de la couche GaAlAs dopée

La figure 3.3 représente l'évolution de la charge accumulée n_s en fonction de la longueur L_D de la couche GaAlAs dopée. Les évolutions repérées par les points noirs correspondent à une couche GaAlAs dopée $N_D=1.5 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, et sont paramétrées par la longueur de l'espaceur : $L_s=200 \text{ Å}$ (cercles) et $L_s=600 \text{ Å}$ (carrés). Une valeur intermédiaire de l'espaceur $L_s=300 \text{ Å}$ est représentée par les courbes repérées par les points blancs pour trois dopages de la couche GaAlAs : $N_D=10^{18} \text{ cm}^{-3}$ (losanges), $N_D=1.5 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ (triangles), et $N_D=2 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ (carrés).

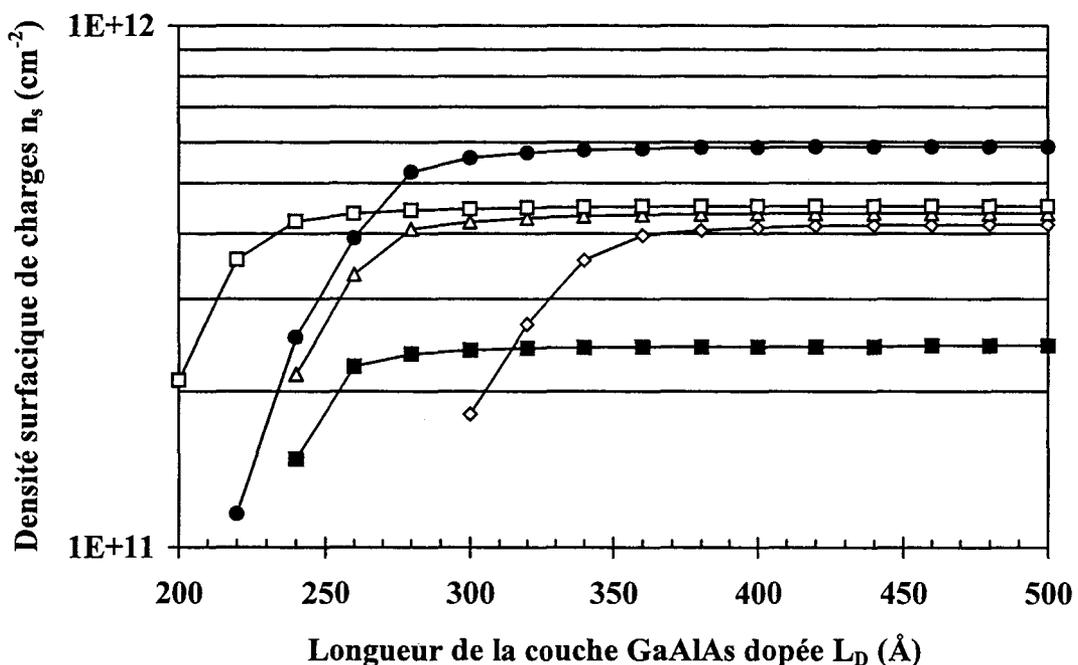


FIGURE 3.3 : Evolutions de la densité surfacique de charges n_s en fonction de la longueur L_D de la couche GaAlAs dopée, calculées pour : $N_D=1.5 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ et $L_s=200 \text{ Å}$ (cercles noirs), ou $L_s=600 \text{ Å}$ (carrés noirs), et pour $L_s=300 \text{ Å}$ et $N_D=10^{18} \text{ cm}^{-3}$ (losanges blancs), $N_D=1.5 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ (triangles blancs), ou $N_D=2 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ (carrés blancs)

On vérifie de nouveau la diminution de la charge accumulée pour L_s croissant à N_D constant (ici $1.5 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$), ainsi que pour N_D décroissant à L_s constant (ici 300 \AA). Hormis la croissance tardive de l'évolution de n_s dans la structure à $N_D=10^{18} \text{ cm}^{-3}$ ($L_s=300 \text{ \AA}$), il est mis en évidence que pour $L_D>300 \text{ \AA}$ un effet de saturation se produit dans tous les cas de figure. Cet effet s'explique par le fait qu'au dessus de cette limite, la couche dopée n'est plus complètement désertée et le transfert de charges atteint un maximum.

En outre pour ces longueurs, nous avons l'apparition d'un puits de potentiel (effet "MESFET parasite") dans la couche GaAlAs fortement dopée. Il s'agit de l'augmentation de porteurs libres localisés dans le puits de potentiel créé entre les réactions de charge d'espace liées d'une part à la barrière Schottky, et d'autre part à l'échange électronique qui se produit à l'interface de l'hétérojonction GaAlAs/GaAs. Nous avons alors un second canal parallèle au gaz 2D, dont la mobilité électronique à basse température, limitée par les interactions sur impuretés ionisées, est très faible.

D'un point de vue caractérisation, il résultera de cet effet une mesure par effet Hall de la mobilité correspondant à la moyenne des mobilités du gaz 2D et du canal parasite. Il sera alors nécessaire d'utiliser l'effet Shubnikov-de-Haas pour déterminer la mobilité du gaz 2D seule.

3.1.2.4 - Commande de la charge accumulée

Afin d'estimer la tension de commande nécessaire pour confiner latéralement le gaz 2D par désertion sous la grille, nous avons représenté figure 3.4 l'évolution de la charge accumulée n_s en fonction de la tension V_g appliquée sur une grille de commande Schottky, pour une structure que nous avons épitaxiée au laboratoire. Il s'agit d'une hétérostructure comportant : un "cap layer" GaAs dopé $2 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ de 50 \AA , une couche $\text{Ga}_{0.7}\text{Al}_{0.3}\text{As}$ dopée $1.5 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ d'épaisseur 300 \AA , un espaceur n. i. d. de 300 \AA et une couche GaAs n. i. d. d'épaisseur importante (quelques milliers d'Angströms).

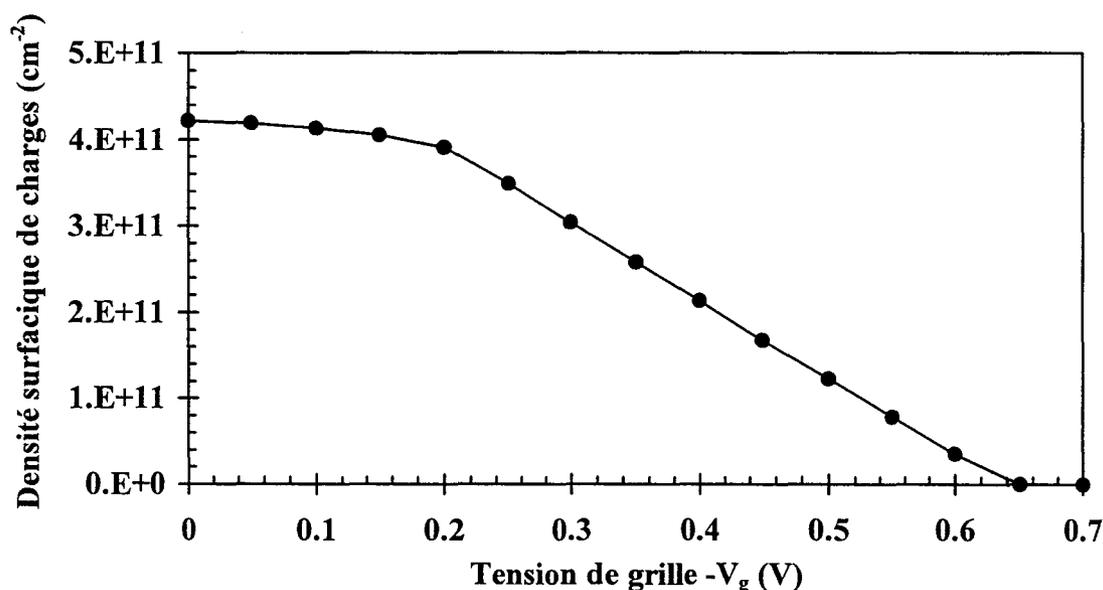


FIGURE 3.4 : Evolution de la densité surfacique de charges n_s en fonction de la tension V_g appliquée sur une grille Schottky déposée en surface du composant. La structure est composée d'une couche GaAlAs de longueur $L_D=300 \text{ \AA}$ dopée $N_D=1.5 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ et d'un espaceur n. i. d. de longueur $L_s=300 \text{ \AA}$.

On observe sur la figure une brusque diminution de la charge accumulée pour des tensions de grille $V_g < -0.2$ V précédant une désertion presque totale du gaz 2D pour une tension $V_g \approx -0.6$ V. Soulignons qu'un calcul de la longueur de désertion, dans l'hypothèse de dopages du "cap layer" et de la couche dopée identiques ($N_D = 1.5 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$), aboutit à la relation [5] :

$$(\Phi_F - V_{gs}) = \frac{qN_D}{2\epsilon_s} (L_c + L_D)^2 \quad (3.1)$$

qui dans le cas présent prévoit une tension de désertion du gaz 2D $V_{gs} = -0.64$ V, en bon accord avec les calculs.

3.1.3 - Mobilité du gaz 2D

Si la tendance actuelle en microélectronique est d'optimiser la valeur de la densité surfacique de charges n_s pour augmenter les densités de courant admissibles, dans notre cas la priorité absolue est l'obtention d'une mobilité élevée, dans le meilleur des cas supérieure à $10^6 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ à 4.2 K. En contre partie, les valeurs de n_s pourront être relativement faibles de l'ordre de quelques 10^{11} cm^{-2} . Cette approche nécessite donc une connaissance approfondie des mécanismes d'interactions à basse température.

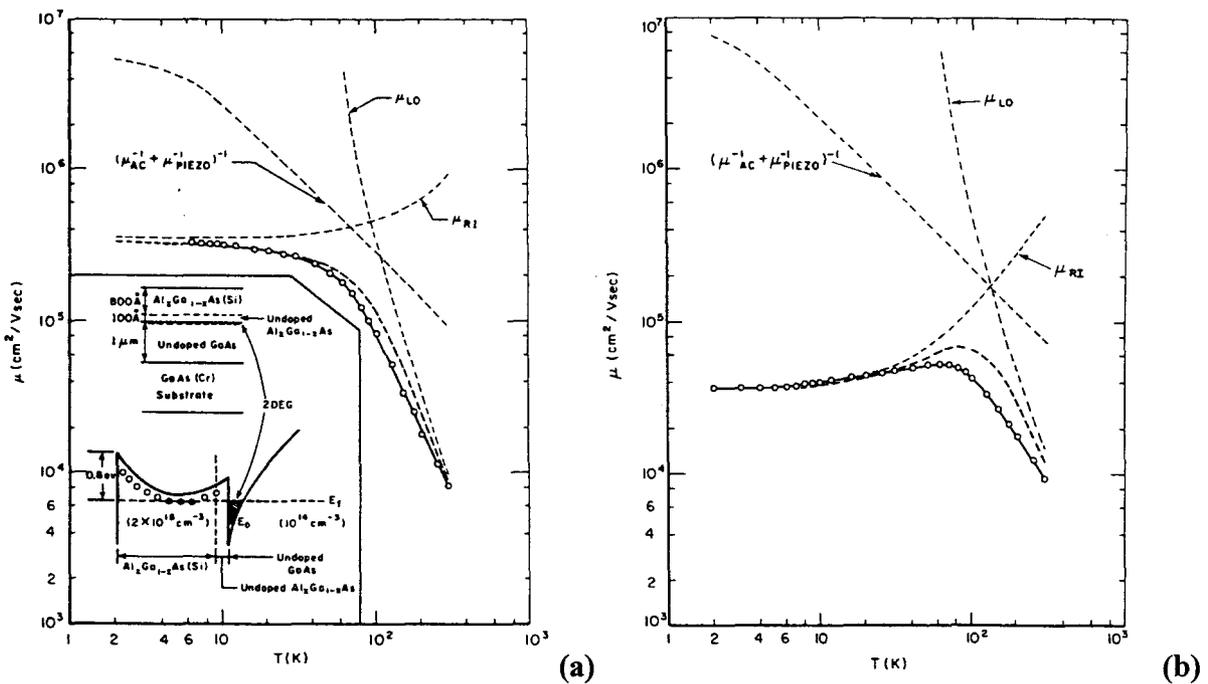


FIGURE 3.5 : Evolutions de la mobilité électronique d'un gaz 2D confiné à l'interface d'une hétérostructure GaAlAs/GaAs en fonction de la température pour des structures (a) à haute mobilité, (b) à mobilité moindre - tirées de la référence [10] -. Sont aussi données les différentes contributions des mécanismes d'interactions : $(\mu_{AC} + \mu_{PIEZO})^{-1}$ et (μ_{LO}) sur phonons respectivement acoustiques et optiques, (μ_{RI}) sur impuretés ionisées.

Comme énoncé précédemment, les interactions des porteurs du gaz 2D sur les impuretés de la couche GaAlAs dopée ne sont pas les seuls phénomènes limitatifs de la mobilité à basse température. Par exemple, pour de faibles concentrations en aluminium de l'espaceur, pour lesquelles il y a pénétration plus importante du gaz 2D dans cette couche, le mécanisme d'interaction lié au désordre d'alliage de l'espaceur n'est plus négligeable, et devient de plus en plus important pour des densités de charges accumulées croissantes.

Néanmoins pour une concentration en aluminium de 30% et pour les faibles densités de charges accumulées que nous envisageons, ce mécanisme peut être négligé. Il en est de même pour la rugosité d'interface de l'hétérojonction, qui ne devient déterminante que pour des accumulations importantes [2]. Par ailleurs, soulignons que dans le cas des guides d'ondes électroniques, seul le peuplement de la première sous-bande de la zone d'accumulation sera effectif. Aussi, ignorerons nous les mécanismes relatifs aux transitions inter-sous-bandes. Enfin, nous négligerons les interactions sur phonons optiques polaires, celles-ci n'ayant d'influence sur la mobilité qu'au dessus d'une température de l'ordre de 40 à 60 K.

Finalement trois types d'interactions fixent la mobilité à basse température dans nos structures : les interactions sur phonons acoustiques, sur impuretés ionisées de la couche dopée, et sur impuretés résiduelles (canal et espaceur) ; ces deux dernières représentant l'ensemble des interactions coulombiennes.

3.1.3.1 - Interactions sur phonons acoustiques

Nous ne distinguerons pas ici les deux mécanismes d'interactions, piézo-électrique ou lié au potentiel de déformation, regroupés dans le terme "interactions sur phonons acoustiques". D'après les études théoriques, il semble que l'influence de ce mécanisme n'intervient que pour des mobilités électronique du gaz 2D atteignant quelques $10^6 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ [6][7].

Il apparaît difficile dans le cas présent de mettre en évidence un lien direct entre les paramètres de l'hétérostructure et l'intensité de cette interaction. Aussi, ne retiendrons nous de la littérature qu'il s'agit probablement du phénomène limitant l'augmentation des mobilités. En effet, ceci explique vraisemblablement qu'après l'augmentation exponentielle des mobilités électroniques obtenues expérimentalement dans ce type d'hétérostructure jusqu'en 1983, les mobilités maximales se soient stabilisées autour de $10^6 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ [6][8]. A notre connaissance, la plus haute valeur pour des hétérostructures à dopage volumique GaAlAs/GaAs sous éclairage est de $3.10^6 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ [9].

L'importance de ce mécanisme peut être révélée par l'étude de la mobilité en fonction de la température [10][11]. En effet pour les hétérostructures de bonne qualité ($\mu > 10^6 \text{ cm}^2/\text{Vs}$), on peut observer dans la gamme de température 4-40 K une dépendance linéaire de l'inverse de la mobilité ($\mu_{ac}^{-1} = \mu_0^{-1} + \alpha T$) caractéristique du mécanisme d'interaction sur phonon acoustique. La pente α est alors croissante pour une charge accumulée n_s croissante, indépendamment de la mobilité à température nulle μ_0 [11]. D'autre part en considérant les interactions sur porteurs ionisés, on détermine une dépendance du type $\mu_i^{-1} = \mu_{0i}^{-1}(1 + \beta T^2)$ avec $\beta < 0$ à très basse température qui traduit l'augmentation de la mobilité à température croissante.

Notons que ces deux types d'évolutions de la mobilité en fonction de la température corroborent les deux cas de figures représentés figure 3.5 et observés par Lin et al [10], à savoir :

- pour une hétérostructure à mobilité élevée, pour μ supérieure à quelques 10^5 cm²/Vs cas (a), on observe uniquement une décroissance de la mobilité qui à basse température est liée aux interactions sur phonons acoustiques, puis pour $T > 70$ K, aux interactions sur phonons optiques pour lesquelles la décroissance est plus marquée.
- pour une hétérostructure à moindre mobilité, pour μ inférieure à quelques 10^5 cm²/Vs cas (b), la croissance de la mobilité indique la prédominance des interactions sur impuretés ionisées à basse température, qui est suivie à nouveau pour $T > 70$ K d'une décroissance due aux phonons optiques.

Il est donc clair que l'influence des interactions sur phonons acoustiques est loin d'être négligeable pour des hétérostructures à mobilité supérieures à 10^6 cm²/Vs. Cependant, l'obtention de telles valeurs passe nécessairement par une diminution des interactions coulombiennes.

3.1.3.2 - Interactions coulombiennes

De prime abord, on peut distinguer trois contributions aux interactions coulombiennes qui sont liées respectivement au canal bidimensionnel (GaAs n. i. d.), à l'espaceur, et à la couche dopée à proximité de l'hétérojonction GaAlAs/GaAs.

Considérons une structure dans laquelle le taux d'interactions sur impuretés ionisées a été réduit par l'utilisation d'une longueur d'espaceur importante. Théoriquement, il a été démontré la prépondérance du mécanisme d'interaction sur impuretés résiduelles dans le canal pour de faibles charges accumulées n_s , alors que les interactions sur impuretés ionisées n'ont à nouveau d'effet limitatif sur la mobilité qu'au dessus de $n_s \approx 2-3 \cdot 10^{11}$ cm⁻² [12]. De plus, en considérant un dopage résiduel dans l'espaceur GaAlAs identique à celui du canal, le taux d'interactions y est d'un ordre de grandeur inférieur à celui lié au canal. Par conséquent, ce type d'interactions liées à l'espaceur semble être négligeable dans le cas présent.

Pour illustrer ce point, la figure 3.6 (tirée de Stern et al [12]) donne l'évolution de l'inverse de la mobilité, ainsi que les différentes contributions, en fonction de la charge accumulée n_s à 0 K. La structure considérée comporte trois couches : la couche dopée Ga_{0.7}Al_{0.3}As (BARRIER), l'espaceur Ga_{0.7}Al_{0.3}As (SPACER), et le canal GaAs (CHANNEL), l'accrochage du niveau de Fermi sur la surface du composant n'étant pas pris en compte. Le dopage résiduel dans le canal et l'espaceur est estimé à $N_{RES} = 10^{14}$ cm⁻³, le dopage de la couche GaAlAs à $N_D = 7 \cdot 10^{17}$ cm⁻³, et la longueur de l'espaceur est ajustée pour obtenir la charge n_s désirée.

L'importance des impuretés résiduelles dans le canal est évidente, et on observe pour $n_s \approx 1-2 \cdot 10^{11}$ cm⁻² une mobilité maximale $\mu \approx 2.2 \cdot 10^6$ cm²/Vs. Soulignons qu'en considérant un taux d'impuretés résiduelles légèrement plus élevé de $3 \cdot 10^{14}$ cm⁻³, ce qui reste technologiquement optimiste, ces auteurs déterminent une mobilité maximale

$\mu=9.10^5$ cm²/Vs pour $n_s \approx 2.10^{11}$ cm⁻² mettant ainsi clairement en évidence la nécessité de réaliser des couches non dopées de très bonne qualité pour obtenir des mobilités élevées.

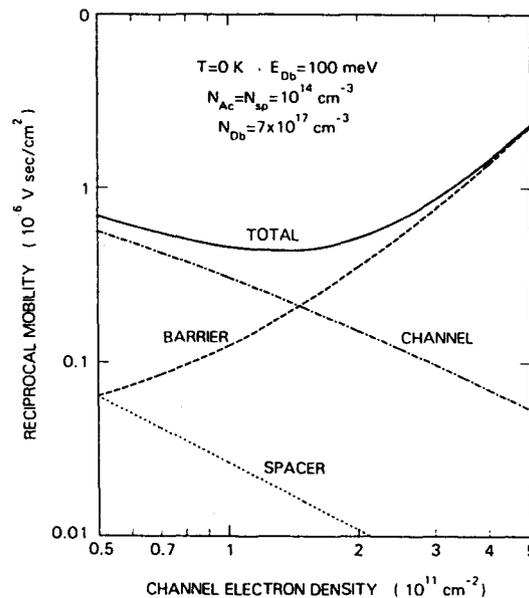


FIGURE 3.6 : Evolution de l'inverse de la mobilité électronique d'un gaz 2D en fonction de la densité surfacique de charges accumulées - tirée de la référence [12] -. Les différentes contributions des mécanismes d'interactions sur impuretés résiduelles (SPACER et CHANNEL), et ionisées (BARRIER) sont aussi données.

Expérimentalement Hwang et al [13] ont aussi conclu que, dans les structures où l'influence des impuretés ionisées est négligeable, la mobilité devient extrêmement sensible aux impuretés résiduelles dans le canal, et que l'augmentation de l'allongement de l'espaceur n'est plus alors une condition suffisante pour obtenir une mobilité très élevée. Il est donc primordial de prendre soin de diminuer au maximum les impuretés résiduelles de la couche GaAs n. i. d. formant le canal.

Notons aussi que l'origine des interactions sur impuretés ionisées provient non seulement de la zone de désertion à proximité de l'espaceur, mais aussi du côté de la surface du composant où l'accrochage du niveau de Fermi provoque une forte désertion. La prise en compte de cette dernière mène à une augmentation considérable des interactions sur impuretés ionisées, en particulier si la zone de réaction de charge d'espace de la surface rejoint celle de l'hétérojonction [14].

La réalisation d'hétérostructures à plan de dopage permet alors de réduire significativement cette dernière contribution, en isolant la zone de désertion du canal 2D de la surface [15]. Par ce biais, des mobilités supérieures à 10^7 cm²/Vs ont été obtenues [16].

3.1.4 - Choix d'une structure

Le tableau 3.1 donne par ordre chronologique un récapitulatif non exhaustif d'hétérostructures GaAlAs/GaAs à modulation de dopage volumique présentant expérimentalement des mobilités de l'ordre de 10^6 cm²/Vs. Sont données respectivement la

séquence de croissance ("cap layer", couche dopée, espaceur, et canal) avec longueurs et dopages associés, puis les mobilités mesurées sous obscurité ou après illumination à 4.2 K. Précisons qu'à un éclairage de l'échantillon correspond une augmentation de la charge accumulée à l'interface de l'hétérojonction (effet de photoconductivité persistante) [17]. Cet effet est utilisé par certains auteurs pour étudier l'évolution de la mobilité en fonction de la charge accumulée n_s , et dont la variation en $\mu \approx n_s^{3/2}$ traduit la prédominance du mécanisme d'interaction coulombienne au sein de la structure.

	"cap layer" GaAs	couche dopée Ga _{1-x} Al _x As	espaceur n. i. d.	canal n. i. d. GaAs	dans l'obscurité $n_s(\text{cm}^{-2})$ $\mu(\text{cm}^2/\text{Vs})$	sous éclairage $n_s(\text{cm}^{-2})$ $\mu(\text{cm}^2/\text{Vs})$	ref.
1983	/	x=0.3 $N_D=2.10^{18}$ $L_D=1000 \text{ \AA}$	$L_s=200 \text{ \AA}$	$L=8000 \text{ \AA}$	$n_s=3.10^{11}$ $\mu=1.25 \cdot 10^6$	$n_s=5.04 \cdot 10^{11}$ $\mu=2.12 \cdot 10^6$	[8]
1984	/	x=0.3 $N_D=2.10^{18}$ $L_D=400 \text{ \AA}$	$N_{res} < 10^{13}$ $L_s \approx 230 \text{ \AA}$	$L \approx 1 \mu\text{m}$	$n_s=2.4 \cdot 10^{11}$ $\mu \approx 6 \cdot 10^5$	$\mu \approx 1.6 \cdot 10^6$	[13]
1984	$N_c=10^{18}$ $L_c=100 \text{ \AA}$	x=0.3 $N_D \approx 7.10^{17}$ $L_D=400 \text{ \AA}$	$N_{res} \approx 10^{14}$ $L_s=180 \text{ \AA}$	$L \approx 1 \mu\text{m}$	$n_s=2.25 \cdot 10^{11}$ $\mu=1.06 \cdot 10^6$	$n_s=3.9 \cdot 10^{11}$ $\mu=1.7 \cdot 10^6$	[11][14]
1987	n. i. d. $L_c=170 \text{ \AA}$	x=0.32 $N_D=1.3 \cdot 10^{18}$ $L_D=500 \text{ \AA}$	$L_s=400 \text{ \AA}$	$L \approx 4 \mu\text{m}$	/	$n_s=3.1 \cdot 10^{11}$ $\mu=3.1 \cdot 10^6$	[9]
1994	dopée N_c $L_c=50 \text{ \AA}$	x=0.26 $L_D=500 \text{ \AA}$	$L_s=400 \text{ \AA}$	$L \approx 6000 \text{ \AA}$	$n_s=3.1 \cdot 10^{11}$ $\mu=1.1 \cdot 10^6$	/	[21]

Tableau 3.1 : Synthèse de différents résultats expérimentaux concernant les densités surfaciques de charges et les mobilités électroniques mesurées à $T=4.2 \text{ K}$, entre 1983 et 1994, pour des hétérostructures à modulation de dopage volumique.

Les indications relatives aux taux d'impuretés résiduelles, pouvant atteindre des valeurs aussi faibles que 10^{13} cm^{-3} dans le canal et l'espaceur, montrent clairement que l'épitaxie de couches non dopées de très bonne qualité est une condition nécessaire à l'obtention d'une mobilité très élevée. Ainsi Harris et al [9] ont montré que sous illumination, des mobilités supérieures au million de cm^2 par volt seconde peuvent être obtenues pour $L_D=400 \text{ \AA}$, et des longueurs d'espaceur comprises entre 200 \AA et 1600 \AA , avec un maximum de l'ordre de $2.10^6 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ pour $L_s=800 \text{ \AA}$.

Pour notre étude expérimentale, nous avons opté pour la structure suivante :

- une couche "cap layer" de GaAs d'épaisseur 50 \AA dopée $N_c=2.10^{18} \text{ cm}^{-3}$.
- une couche Ga_{0.7}Al_{0.3}As dopée $N_D=1.5 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, d'épaisseur 300 \AA .
- un espaceur Ga_{0.7}Al_{0.3}As n. i. d. de 300 \AA d'épaisseur.
- une couche GaAs n. i. d. pour la création du gaz 2D.

Cette hétérostructure a été réalisée au laboratoire par Epitaxie par Jet Moléculaire. En utilisant le modèle semi-classique de calcul de potentiel, la charge accumulée à 4.2 K est évaluée à $4.2 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, ce qui compte tenu de la surestimation induite par le modèle correspond à une charge réelle attendue de l'ordre de 2 à $3 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$; la tension de pincement du canal est d'environ -0.6V. Nous nous proposons à présent de caractériser cette structure de 4.2 K à 300 K.

3.2 - CARACTERISATION

La caractérisation d'une hétérostructure consiste à déterminer expérimentalement deux paramètres : la charge accumulée n_s , et sa mobilité μ . Ces paramètres peuvent être déduits soit de mesures à faible champ magnétique par effet Hall classique, soit de mesures à champ magnétique élevé par effet Hall quantique via l'effet Shubnikov-de-Haas. Cette dernière méthode présente l'avantage de ne caractériser que le gaz 2D alors que la précédente donne une information concernant l'ensemble de l'échantillon. Par conséquent, dans le cas d'une hétérostructure où l'effet "MESFET parasite" est présent, les mesures par effet Hall classique donnent la densité totale des électrons libres du gaz 2D et du canal parasite, et la mobilité moyenne des mobilités des canaux conducteurs. La mobilité du canal parallèle au gaz 2D situé dans un matériau fortement dopé étant médiocre, la mobilité moyenne mesurée sera bien inférieure à celle du gaz 2D seul. Pour des mesures de l'effet Hall quantique, il y a quantification de la densité d'état bidimensionnelle. Ainsi, les résultats ne concernent que le gaz 2D.

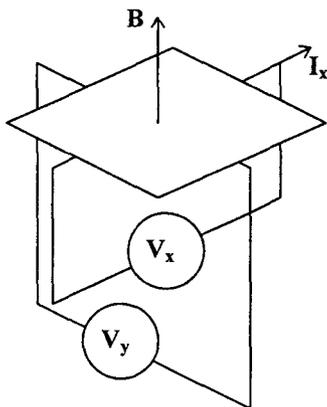


FIGURE 3.7 : Principe de mesure de l'effet Hall sur un film conducteur. Le champ magnétique est appliqué perpendiculairement au film, et un courant I_x est injecté dans l'échantillon. On mesure les tensions V_x et V_y .

3.2.1 - Effet Hall classique

3.2.1.1 - Résistance de Hall et magnétorésistance

La figure 3.7 représente schématiquement le principe de mesure par effet Hall où l'échantillon d'épaisseur faible est assimilé à un film conducteur (système bidimensionnel). Un champ magnétique B est appliqué perpendiculairement à ce film qui est traversé par un courant I_x dans la direction longitudinale.

Les mesures des tensions longitudinales et transverses, respectivement V_x et V_y , permettent de déterminer la résistance de Hall R_{xy} et la magnétorésistance R_{xx} exprimées par :

$$R_{xy} = \frac{V_y}{I_x} = \frac{B}{qn_s} \quad (3.2)$$

et $R_{xx} = \frac{V_x}{I_x} = \frac{1}{qn_s\mu}$

avec n_s correspondant à la densité surfacique de charges dans le film. Soulignons qu'il s'agit en réalité de résistivités qui dans le cas d'un système bidimensionnel sont exprimées en Ω (et non en Ωm comme dans un système 3D), et que nous les assimilons à des résistances par souci de clarté.

Ainsi à faible champ magnétique, la résistance de Hall dépend linéairement de B, alors que la magnétorésistance est constante. La méthode consiste à déterminer R_{xy} à B donné pour en déduire la charge n_s , puis pour B=0 à déterminer R_{xx} pour obtenir la mobilité μ connaissant n_s .

3.2.1.2 - Caractérisation à 300 K et 77 K

Un échantillon carré de largeur 5 mm a été prélevé de la couche à haute mobilité décrite précédemment. Les contacts situés à chaque angle de l'échantillon ont été réalisés par dépôt de billes d'indium formées sous flux d'argon hydrogéné en maintenant la température de l'échantillon à T=470 K durant une minute. Des fils de cuivre sont ensuite utilisés pour connecter l'échantillon vers le support du banc de mesures. L'échantillon a été caractérisé par effet Hall classique en utilisant la méthode de Van der Pauw pour les températures T=77 K et T=300 K. Les résultats des mesures dans l'obscurité, pour un courant injecté dans l'échantillon de 0.1 mA, sont reportés dans le tableau 3.2.

	R_{xy} B=0-0.5T	R_{xx}	facteur de Van der Pauw f	n_s (cm^{-2})	μ (cm^2/Vs)
T=300 K	1177.2 Ω	3669 Ω	0.95	$2.65 \cdot 10^{11}$	$6.42 \cdot 10^3$
T=77 K	790.1 Ω	128.1 Ω	0.965	$3.95 \cdot 10^{11}$	$1.23 \cdot 10^5$

Tableau 3.2 : Résultats des mesures par effet Hall de la densité surfacique de charges et de la mobilité à T=77 K et T=300 K, sur un échantillon de forme carrée d'après la méthode de Van der Pauw.

On remarque la dissymétrie de l'échantillon qui se traduit par un coefficient de Van der Pauw légèrement inférieur à l'unité. Les valeurs de mobilité obtenues à 300 K et 77 K, respectivement $6400 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ et $125000 \text{ cm}^2/\text{Vs}$, montrent la bonne qualité de l'hétérostructure mais ne présagent pas de la valeur de la mobilité à 4.2 K, dans la mesure où dans cette gamme de température (T>70 K) les mécanismes d'interactions sur phonons optiques dominent le transport.

A ce titre la figure 3.8 tirée de Pfeiffer et al [16] est riche d'enseignement. Si les deux courbes supérieures correspondent à des hétérostructures à dopage plan permettant l'obtention de mobilités records à 4.2 K, les autres courbes forment à haute température un faisceau relativement serré avec des variations de mobilités mesurées à 77 K relativement faibles, généralement entre $10^5 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ et $2 \cdot 10^5 \text{ cm}^2/\text{Vs}$. A l'opposé à basse température, l'écart peut devenir très important (supérieur à $7 \cdot 10^5 \text{ cm}^2/\text{Vs}$), ce qui montre que les mesures de mobilités à 77 K ne permettent pas de conclure quant à la qualité de l'hétérostructure à plus basse température.

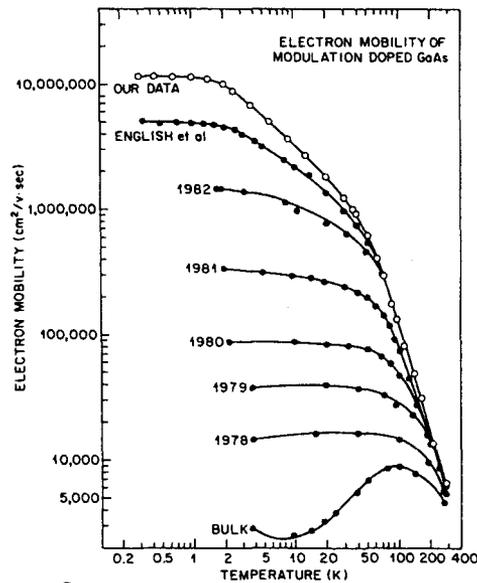


FIGURE 3.8 : Evolution dans le temps des caractéristiques de mobilités en fonction de la température des hétérostructures à haute mobilité entre 1978 et 1989 - tirée de la référence [16] -.

3.2.2 - Systèmes bidimensionnels en champ magnétique élevé

3.2.2.1 - Niveaux de Landau

En présence d'un champ magnétique B parallèle à la direction z de la quantification énergétique du gaz 2D, les électrons exécutent un mouvement circulaire de fréquence angulaire, appelée aussi fréquence cyclotron :

$$\omega_c = \frac{qB}{m_e} \quad (3.3)$$

Dans le plan perpendiculaire à la direction du champ, le domaine énergétique est alors discrétisée en niveaux de Landau exprimés par :

$$E_n = \hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad (3.4)$$

L'énergie est donc quantifiée dans les trois directions de l'espace. La densité d'états du gaz 2D sous champ magnétique est représentée figure 3.9a. Les niveaux de Landau sont

représentés par des raies verticales séparées les unes des autres par une énergie $\Delta E_n = \hbar\omega_c$ qui contiennent chacune, en tenant compte du spin de l'électron, $2N_L = 2qB/h$ états.

Nous avons aussi représenté pour mémoire, la densité d'états d'un gaz bidimensionnel sans champ magnétique, qui entre les deux premières sous-bandes du puits de potentiel quasi-triangular dans la direction z perpendiculaire aux couches est égale à $\frac{m_e^*}{\pi\hbar^2}$. Ainsi, nous pouvons vérifier que la moyenne de la densité d'états est la même avec ou sans champ magnétique $\left(\frac{2N_L}{\hbar\omega_c} = \frac{m_e^*}{\pi\hbar^2}\right)$.

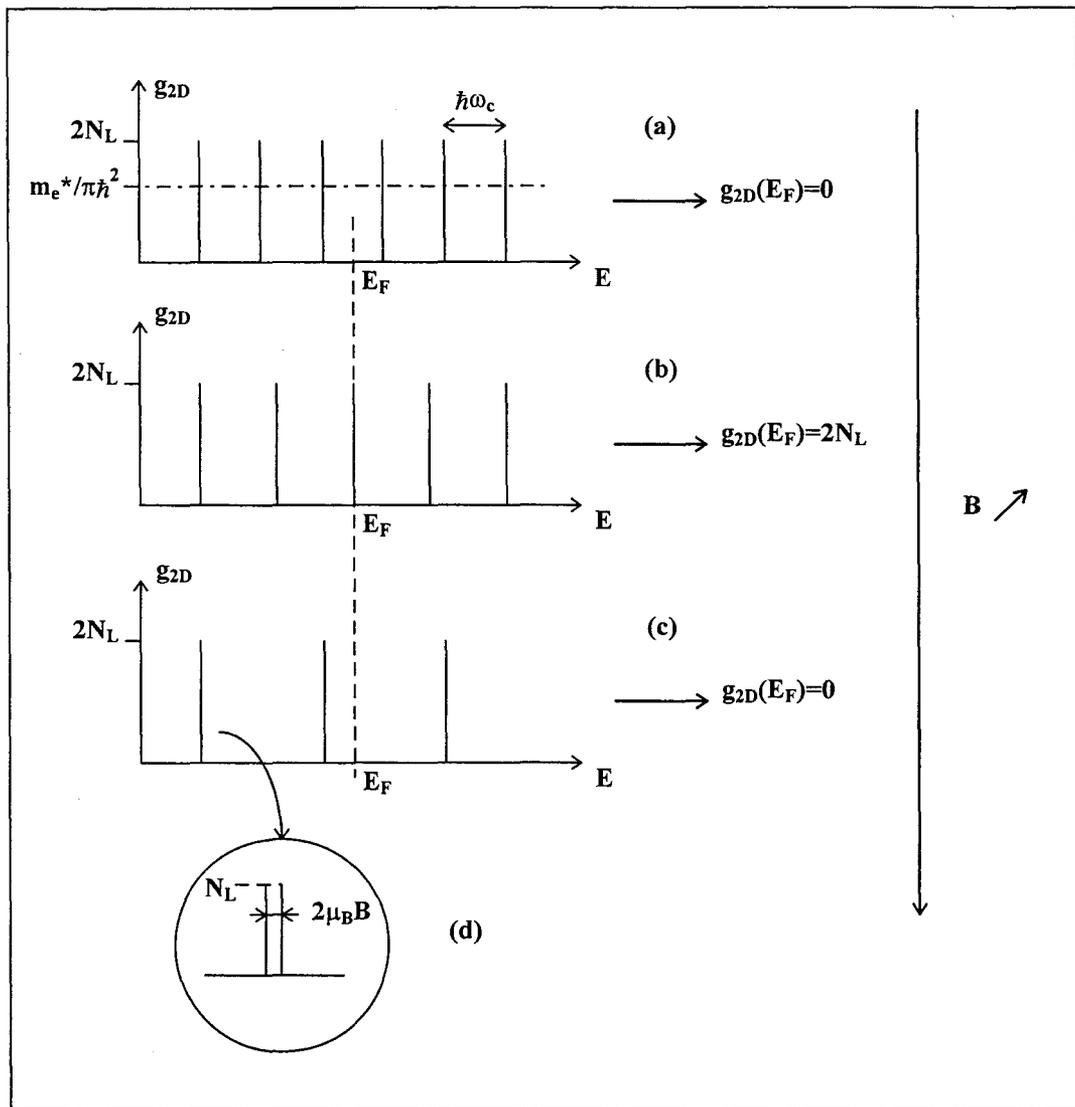


FIGURE 3.9 : Quantification en niveaux de Landau et principe de l'effet Hall quantique et de l'effet Shubnikov-de-Haas. Les niveaux de Landau balaient tour à tour le niveau de Fermi (a, b, c), se dépeuplent, et la densité d'états du gaz 2D (g_{2D}) oscille de 0 à $2N_L$ à champ croissant. En champ magnétique intense, on observe une levée de dégénérescence des niveaux due au spin de l'électron (d).

3.2.2.2 - Effet Hall quantique

L'augmentation du champ magnétique a deux conséquences : la première est l'augmentation du nombre d'états de chaque niveau de Landau avec pour corollaire une diminution du nombre de niveaux nécessaire pour accommoder la densité électronique, la seconde est la séparation plus prononcée des niveaux et explique en partie l'effet Hall quantique.

Nous avons représenté figure 3.9a, b, c l'évolution de la densité d'états du système bidimensionnel à champ magnétique croissant. Lorsque le champ augmente, les niveaux balayent tour à tour le niveau de Fermi fixé par le milieu environnant. Lors de son passage au dessus du niveau de Fermi, un niveau de Landau se dépeuple et il en résulte une diminution brutale de la densité électronique n_s correspondant aux $2N_L$ états du niveau qui ne sont plus accessibles.

Pour un champ B donné, seuls i niveaux de Landau sous le niveau de Fermi sont peuplés, on a $n_s = 2iN_L$ et la résistance de Hall, exprimée alors par $R_{xy} = h/2iq^2$, présente une variation en marche d'escalier à chaque dépeuplement d'un niveau de Landau. Notons que le terme 2 au dénominateur est introduit par la dégénérescence des niveaux de Landau due au spin de l'électron (voir paragraphe 3.2.2.4).

3.2.2.3 - Effet Shubnikov-de-Haas

Sur la figure 3.9 on peut remarquer que la densité d'états au niveau de Fermi $g(E_F)$ évolue avec le champ magnétique, présente un maximum lorsqu'un niveau de Landau coïncide avec le niveau de Fermi, et s'annule lorsque ce dernier se situe entre deux niveaux. Ceci explique d'une part la forme oscillatoire en fonction du champ magnétique de la magnétorésistance, qui est proportionnelle à $g(E_F)$, et d'autre part indique qu'elle s'annule lorsque le niveau de Fermi se situe entre deux niveaux de Landau, soit lorsque la résistance de Hall présente un plateau. C'est l'effet Shubnikov-de-Haas qui permet alors de déterminer la densité surfacique de charges du gaz 2D.

En effet pour un maximum de la magnétorésistance obtenu à $B=B_n$ lorsque le $n^{\text{ième}}$ niveau de Landau croise le niveau de Fermi, on a :

$$E_F = E_n = \frac{q\hbar B_n}{m_e} \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad (3.5)$$

La période en $1/B$ des oscillations de la magnétorésistance est alors donnée par :

$$\Delta \frac{1}{B} = \frac{1}{B_{n+1}} - \frac{1}{B_n} = \frac{q\hbar}{m_e * E_F} \quad (3.6)$$

et la densité surfacique de charges est exprimée par :

$$n_s = \frac{k_F^2}{2\pi} = \frac{2q}{h} \left(\Delta \frac{1}{B} \right)^{-1} \quad (3.7)$$

Ainsi, nous pouvons déterminer la densité de charges n_c par la périodicité en $1/B$ de la magnétorésistance, puis par la relation 3.2 la mobilité du gaz 2D.

3.2.2.4 - Conditions d'observation

L'effet Hall quantique et l'effet Shubnikov-de-Haas ne s'observent que sous certaines conditions :

- la température doit être suffisamment basse de manière à ce que l'excitation thermique d'un électron d'un niveau de Landau à un autre, séparé de $\hbar\omega_c$, ne puisse pas avoir lieu. On doit donc satisfaire la condition : $k_B T \ll \hbar\omega_c$.
- les défauts et impuretés dans le canal 2D introduisent un élargissement des niveaux qui doit alors rester inférieur à l'espacement $\hbar\omega_c$ entre ceux-ci. Il résulte une condition du type : $\omega_c \tau_q \gg 1$, où τ_q est le temps de vie correspondant aux niveaux de Landau. Par rapprochement avec le temps de relaxation de Boltzmann, cette condition est souvent résumée par $\mu B \gg 1$.

Par conséquent nous retiendrons que l'effet Hall quantique et l'effet Shubnikov-de-Haas ne sont observables qu'au dessus d'un certain champ magnétique tel que les niveaux de Landau soient suffisamment séparés les uns des autres, et qu'à basse température.

Enfin, soulignons que pour des champs magnétiques très élevés, on observe une levée de la dégénérescence des niveaux due au spin de l'électron. En effet, en tenant compte de ce dernier, les niveaux de Landau sont exprimés par :

$$E_n = \hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right) \pm \mu_B B \quad (3.8)$$

où μ_B est le magnéton de Bohr. Les niveaux de Landau se dédoublent donc, figure 3.9d, pour donner deux énergies discrètes séparées l'une de l'autre par $\Delta E = 2\mu_B B$ et supportant chacune $N_L = qB/h$ états.

Ceci explique l'expression de la résistance de Hall quantique généralement rencontrée, à savoir $R_{xy} = h/iq^2$, et dont l'évolution en fonction de B n'est effectivement observée que pour des valeurs de champ magnétique intense, permettant de satisfaire la condition $2\mu_B B \gg k_B T$.

3.2.2.5 - Caractérisation à 4.2 K

L'hétérostructure épitaxiée a été caractérisée à température de l'hélium liquide par la méthode de Van der Pauw, sur le même échantillon de mesure utilisé à 77 K et 300 K. Les mesures ont été effectuées au Laboratoire de la Matière Condensée du Commissariat à l'Energie Atomique de Saclay. Le dispositif expérimental, comprenant entre autre un cryostat permettant de descendre la température de mesure à quelques 10 mK, est précisément décrit dans la référence [18]. Les mesures ont été réalisées dans l'obscurité sous champ magnétique lentement variable (vitesse de balayage $V_{bal} = 1.365$ T/h) et pour un courant injecté dans l'échantillon de 1 μA .

Les évolutions de la magnétorésistance et de la résistance de Hall en fonction du champ B sont données figure 3.10. L'effet Hall quantique apparaît pour un champ magnétique supérieur à environ 0.6 T pour lequel on observe d'une part la variation en marche d'escalier de la résistance de Hall, et d'autre part les oscillations de la magnétorésistance. Au dessus de $B=2$ T, la levée de dégénérescence des niveaux de Landau due au spin de l'électron est clairement visible avec notamment le dédoublement des maxima de la magnétorésistance. On remarque aussi pour ces valeurs de champ élevées, des sauts de la résistance de Hall de type $h/4q^2$, alors qu'entre $B=0.6$ T et $B=2$ T ceux-ci sont divisés par 2, ce qui traduit la dégénérescence des niveaux de Landau dans cette gamme de champ.

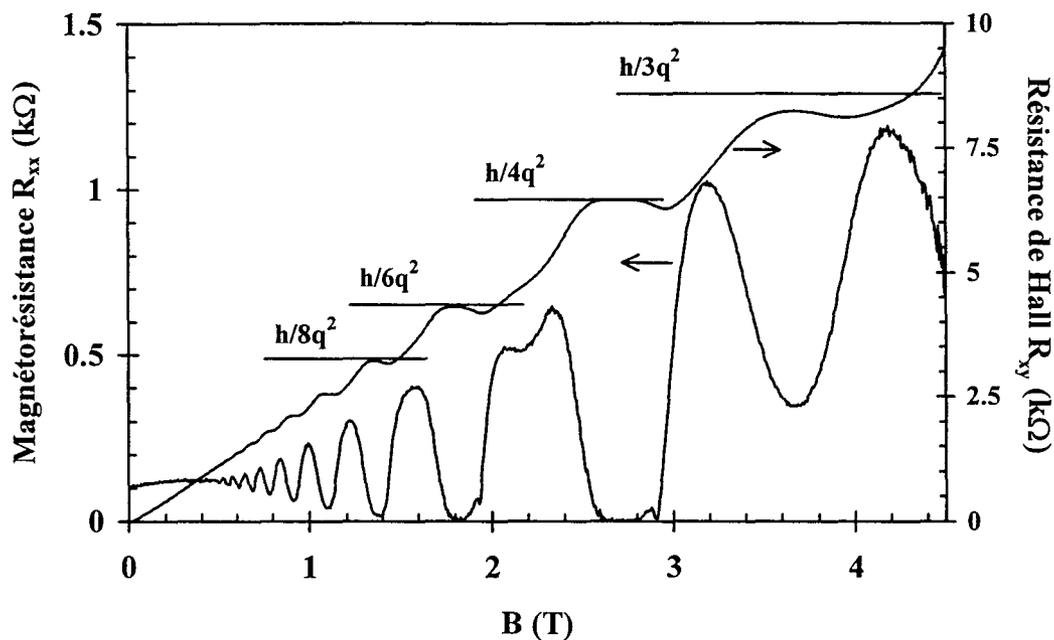


FIGURE 3.10 : Evolution de la magnétorésistance R_{xx} et de la résistance de Hall R_{xy} en fonction du champ magnétique B mesurée à $T=4.2$ K pour une hétérostructure à modulation de dopage volumique.

En outre, la décroissance des minima de la magnétorésistance, puis la présence d'une magnétorésistance nulle dans des plages de champ magnétique où les plateaux de résistance de Hall sont observés, permettent de conclure à l'inexistence d'un canal conducteur parallèle au gaz 2D de type "MESFET parasite" [19].

Enfin, nous avons représenté figure 3.11 l'évolution de la magnétorésistance en fonction de l'inverse du champ magnétique. Comme attendu, la magnétorésistance présente une périodicité de ces maxima en $1/B$ dont la période moyenne est : $\Delta \frac{1}{B} = 0.1823 \text{ T}^{-1}$. De cette valeur, nous déduisons une densité surfacique de charges $n_s = 2.65 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ en bon accord avec la valeur théorique estimée précédemment, et la mobilité du gaz 2D à 4.2 K $\mu = 2.25 \cdot 10^5 \text{ cm}^2/\text{Vs}$.

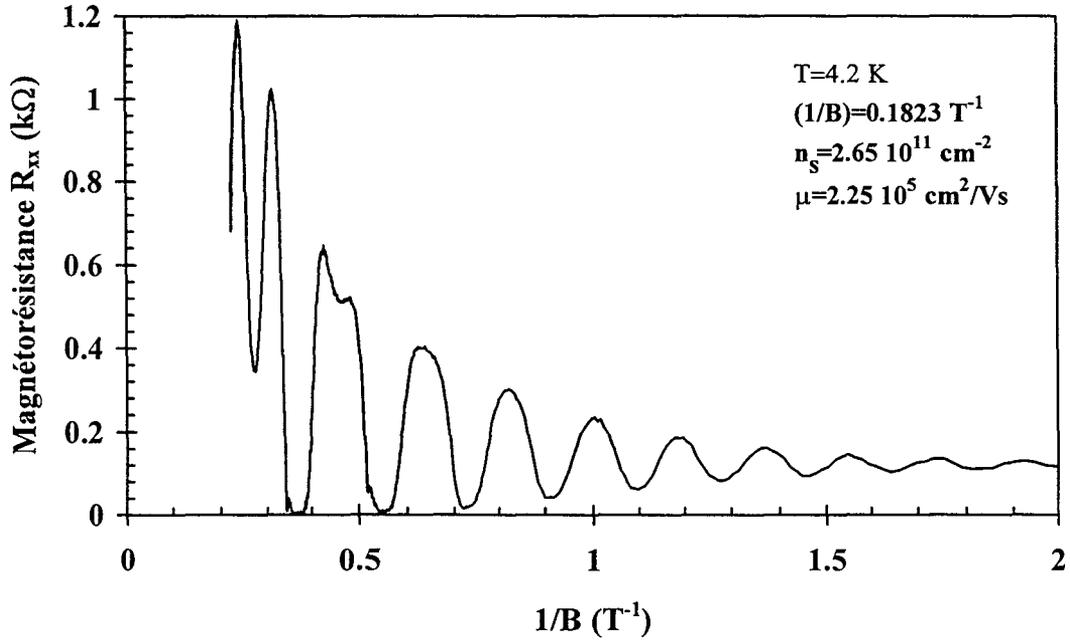


FIGURE 3.11 : Evolution de la magnétorésistance R_{xx} en fonction de l'inverse du champ magnétique mesurée à $T=4.2$ K pour une hétérostructure à modulation de dopage volumique.

Ces valeurs de mobilité et de densité surfacique de charges peuvent être utilisées pour une première évaluation des dimensions des dispositifs basés sur un transport balistique. En effet, le libre parcours moyen élastique peut être calculé par la relation :

$$l_e = \frac{\hbar\mu}{q} (2\pi n_s)^{1/2} \quad (3.9)$$

On obtient ici une valeur proche de $2 \mu\text{m}$, fixant ainsi une limite dans l'extension des structures à base de guides d'ondes électroniques qui seront simulés par la suite.

Il nous semble à présent intéressant pour clore ce chapitre de faire un certain nombre de rappels sur le transport unidimensionnel relatifs notamment aux différents régimes de conduction.

3.3 - TRANSPORT BALISTIQUE

3.3.1 - Caractéristiques de conduction

3.3.1.1 - Les régimes de transport

Dans les systèmes unidimensionnels, différents régimes de transport peuvent être rencontrés. Ceux-ci se différencient les uns des autres par le type d'interaction que les électrons subissent durant leurs déplacements.

On peut regrouper les différentes interactions en deux grandes catégories caractérisées chacune par une longueur critique :

- La première, caractérisée par le libre parcours moyen élastique l_e , correspond à l'ensemble des collisions élastiques pour lesquelles seule la direction du vecteur d'onde de l'électron est modifiée, alors que son énergie est conservée. Dans le cas d'une hétérostructure à haute mobilité, ces collisions élastiques sont dominées par les interactions sur impuretés résiduelles dans le canal.
- La seconde catégorie, caractérisée par la longueur de cohérence de phase l_Φ , correspond aux collisions inélastiques pour lesquelles l'électron, tout en changeant de direction, modifie son énergie. Les mécanismes d'interactions inélastiques concernent les collisions sur phonons optiques et acoustiques, et les collisions entre porteurs.

Pour des températures basses telles que $l_e < l_\Phi$, suivant l'échelle du parcours électronique L considérée, on peut rencontrer trois régimes de transport différents. Dans le cas où $L > l_\Phi$, on se trouve en présence d'un régime de transport diffusif classique pour lequel l'électron subit l'ensemble des collisions élastiques et inélastiques. Dans le cas où $L < l_\Phi$, seules les interactions élastiques peuvent être rencontrées. Il s'agit alors d'un régime quantique cohérent, appelé aussi régime mésoscopique, qui pour $L < l_e$ devient un régime de transport balistique.

3.3.1.1.1 - Régime classique

Dans ce régime, les équations classiques du transport diffusif fixent les grandeurs macroscopiques telles que la vitesse et l'énergie moyennes du gaz d'électrons. Ainsi, le transport est généralement caractérisé par la mobilité électronique dont l'évolution en température varie en fonction de la prédominance de tel ou tel mécanisme d'interaction. A titre d'exemple pour un matériau volumique, on peut déterminer une loi d'évolution de la mobilité en $T^{3/2}$ à basse température où dominent les interactions sur impuretés, puis à plus haute température, l'augmentation de la probabilité d'interactions sur phonons acoustiques induit une dépendance en $T^{-3/2}$ [6]. Situé hors du cadre de ce travail, nous ne nous attarderons pas davantage sur ce régime pour lequel de nombreux travaux, utilisant notamment la méthode particulière de Monte-Carlo, peuvent être trouvés dans la littérature [20].

3.3.1.1.2 - Régime quantique cohérent

A l'inverse du régime précédent, l'aspect ondulatoire de l'électron devient ici prépondérant. L'électron ne subissant statistiquement aucune interaction inélastique, garde la mémoire de sa phase et les phénomènes d'interférences quantiques régissent le transport électronique.

$l_e < L < l_\Phi$: régime mésoscopique

Lorsque les dimensions caractéristiques du composant, par exemple la longueur d'un fil quantique L , sont supérieures au libre parcours moyen élastique l_e , les collisions élastiques sur les impuretés se traduisent par un déphasage des ondes électroniques comme l'illustre la figure 3.12a. Les ondes liées à des électrons ayant suivi des chemins différents, et donc subi des

collisions différentes, ont des phases différentes et interfèrent de manière cohérente. La conductance du dispositif est alors principalement liée à la configuration des impuretés et indépendante de la géométrie du système [18]. On peut s'attendre dans un tel régime, à observer des fluctuations de conductance dans les composants suite par exemple à un réarrangement des impuretés dans le composant par excitation thermique.

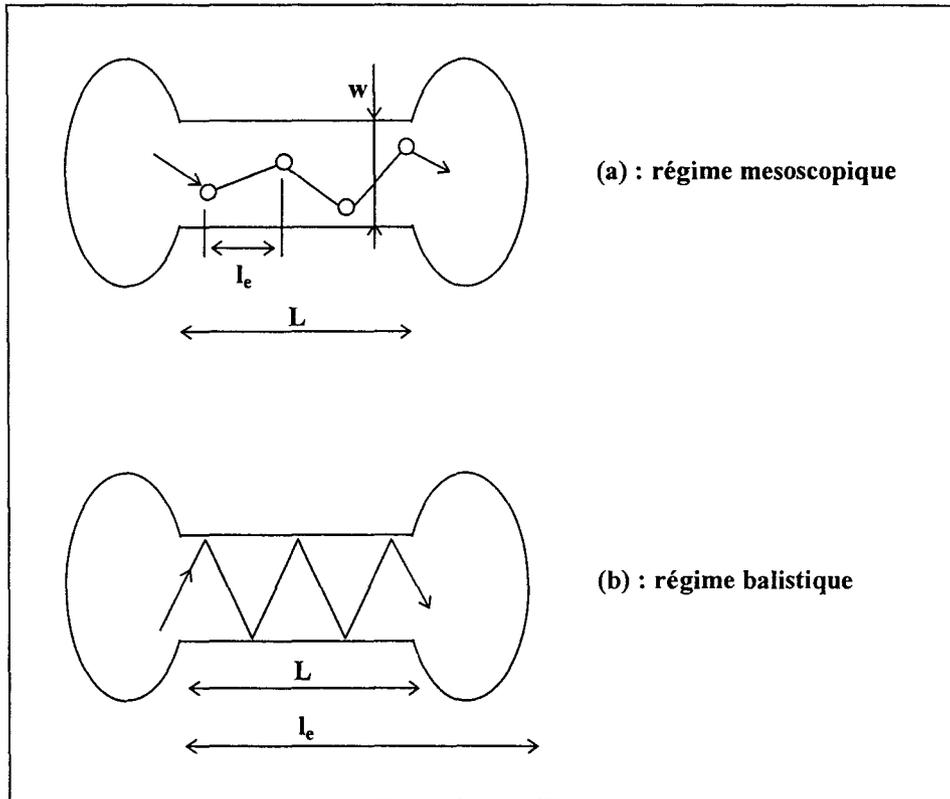


FIGURE 3.12 : Représentations schématiques des régimes (a) mésoscopique et (b) balistique du transport dans un fil quantique de longueur L et de largeur w . Dans le cas (a), l'électron a une probabilité non négligeable de subir une interaction élastique (cercles blancs). Dans l'autre cas l'onde électronique est réfléchi sur les bords du fil quantique.

$L < l_e < l_\Phi$: régime balistique

Statistiquement dans ce régime, l'électron traverse la structure unidimensionnelle en ne subissant aucune collision. La figure 3.12b représente schématiquement le parcours d'une onde électronique traversant un fil quantique dans ce régime de transport. L'onde électronique subit une réflexion lorsqu'elle atteint le potentiel de confinement latéral délimitant la structure. Les déphasages entre les ondes introduits par ces réflexions produisent alors des interférences quantiques cohérentes. Ici, le régime est dit balistique, et la conductance du composant est uniquement déterminée par sa géométrie.

Obtenir un régime balistique impose de sévères conditions sur la réalisation des structures. Tout d'abord, privilégier les mécanismes d'interactions élastiques par rapport aux chocs inélastiques ($l_e < l_\Phi$) implique de travailler à basse température. Ensuite, il faut que les dimensions de la structure unidimensionnelle soient bien inférieures, généralement au moins un ordre de grandeur en dessous [21], au libre parcours moyen élastique l_e qui peut atteindre

la dizaine de microns dans une hétérostructure à haute mobilité (relation 3.9 pour $\mu \approx 10^6 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ et $n_s \approx 5 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$).

Enfin, il faut veiller lors de la réalisation technologique à minimiser toute sorte de fluctuations structurales telles que la rugosité d'interface, variations de dopages, inhomogénéité des grilles de commandes, etc... Ces fluctuations peuvent en effet provoquer des variations aléatoires du potentiel de confinement dont la longueur de corrélation peut être du même ordre de grandeur que la longueur d'onde de Fermi λ_F . Dans ce cas les réflexions des ondes électroniques sur les bords de la structure sont diffusives, ce qui provoque une redistribution équiprobable des directions des ondes après chaque réflexion, et donc le transport n'est plus balistique.

Nixon et al [21] ont étudié ce phénomène en tenant compte des fluctuations du potentiel introduites par les donneurs ionisés dans un fil quantique. Pour un fil de 600 nm, longueur trois fois supérieure à la longueur de corrélation du potentiel aléatoire, ils ont observé une déformation de l'évolution caractéristique de la conductance en marche d'escalier, voire même une disparition de la quantification de conductance pour les fils de largeur importante.

3.3.1.2 - La conductance

La dérivation du terme de conductance peut être comprise à partir du schéma donné figure 3.13. Le bloc central repéré par S correspond à la structure unidimensionnelle (plus ou moins complexe) dans laquelle se produisent les collisions élastiques. Celle-ci est connectée aux réservoirs d'électrons via deux conducteurs 1D identiques et parfaits, c'est à dire dans lesquels aucune collision n'a lieu. Ces conducteurs sont caractérisés par N canaux conducteurs indépendants qui correspondent aux N niveaux d'énergie quantifiée latéralement (sous-bandes 1D). Les réservoirs émettent chacun des électrons dans les conducteurs parfaits jusqu'à leur niveau de Fermi respectif. Ces réservoirs sont incohérents, ils émettent des ondes électroniques n'ayant aucune relation de phase entre elles. Notons que ces réservoirs constituent les seuls endroits où les électrons subissent des collisions inélastiques, celles-ci permettant d'assurer l'absorption des ondes sortant du système 1D.

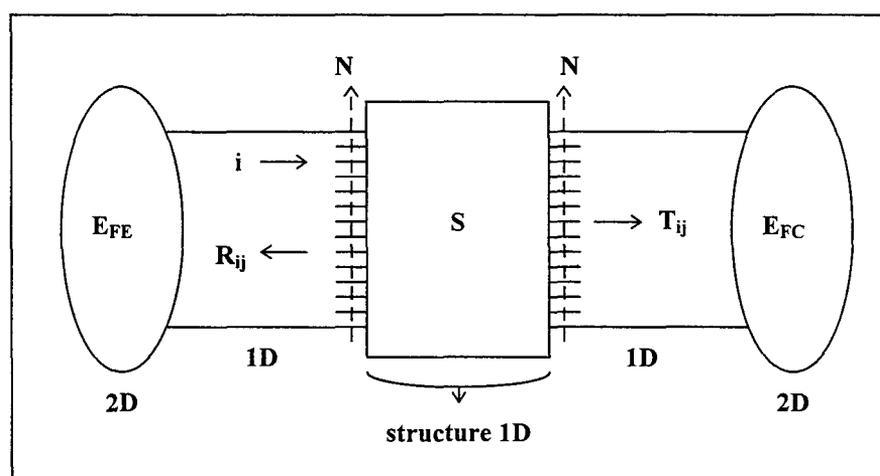


FIGURE 3.13 : Représentation schématique des systèmes unidimensionnels (S) reliés à des réservoirs d'électrons 2D par des canaux 1D supposés idéaux (sans interactions). Ces derniers sont caractérisés par N sous-bandes 1D (niveaux d'énergie quantifiée latéralement) - d'après la référence [24] -.

En dérivant un concept qu'il développa en 1957 [22], et qui traite de la résistivité résiduelle dans un métal, Landauer [23] a déterminé l'expression de la conductance d'un fil quantique due aux chocs élastiques subies par les électrons, dans l'hypothèse où seule une sous-bande 1D contribue au transport. Par la suite, Büttiker et al [24] ont généralisé la formulation de la conductance d'une structure 1D dans un régime mésoscopique, lorsque plusieurs sous-bandes 1D sont impliquées dans le transport.

Cette formulation, connue sous le nom de relation de Landauer-Büttiker est exprimée à 0 K par :

$$G = \frac{2q^2}{h} \sum_i \sum_j T_{ij} \quad (3.10)$$

où T_{ij} est le coefficient de transmission entre la sous-bande i du canal 1D d'injection et la sous-bande j du canal de collection - il est à noter que cette définition englobe tout naturellement le transport balistique qui n'est qu'un cas particulier du transport mésoscopique -. De manière plus générale, une onde incidente liée au $i^{\text{ème}}$ niveau du fil conducteur d'émission à une probabilité T_{ij} d'être transmise vers le niveau j du fil conducteur de collection, et une probabilité R_{ij} d'être réfléchie vers le niveau j du fil conducteur d'émission.

Ces probabilités peuvent être regroupées en une matrice de répartition de dimension $2N \times 2N$:

$$[S] = \begin{bmatrix} R_e & T_c \\ T_e & R_c \end{bmatrix} \quad (3.11)$$

où les indices (e) et (c) indiquent l'incidence de l'onde respectivement du coté émetteur et collecteur. Cette matrice vérifie les conditions : $[S].[S]^* = 1$ et $[S] = [S]^T$ où $[S]^*$ est la matrice $[S]$ conjuguée, et $[S]^T$ la matrice $[S]$ transposée.

Finalement, la conductance est obtenue par les sommations des coefficients de transmission T_{ij} concernant uniquement les ondes propagatives de part et d'autre du système 1D (S). C'est à dire que l'on ne considère que les niveaux d'énergie situés au dessous des niveaux de Fermi E_{FE} pour l'indice i et E_{FC} pour l'indice j .

Soulignons que la relation 3.10 est obtenue dans l'hypothèse d'une température nulle pour laquelle la fonction de distribution, de type Fermi-Dirac présente un saut situé à l'énergie du niveau de Fermi. Pour une température finie, la probabilité de remplissage des états situés au dessus du niveau de Fermi devient non nulle, et le calcul de la conductance identique dans le principe se complique légèrement [24].

3.3.1.3 - Quantification de conductance

En étudiant l'évolution de la conductance d'un fil quantique suivant sa largeur w , il a été observé expérimentalement pour la première fois la présence de sauts de conductance de valeur fixe $2q^2/h$ [1][25]. Cette évolution singulière de la conductance en marche d'escalier est caractéristique du confinement unidimensionnel.

Afin de l'expliquer, on peut théoriquement considérer que chaque sous-bande i unidimensionnelle, située sous le niveau de Fermi E_F , transporte la même quantité de courant I_i . Pour déterminer cette quantité, on suppose comme pour la relation de Landauer-Büttiker que le fil quantique est relié à deux réservoirs d'électrons caractérisés chacun par un niveau de Fermi propre E_{FE} et E_{FC} où $E_{FC} = E_{FE} - qV_p$ introduit la légère polarisation V_p de la structure. Dans ce cas on a :

$$I_i = \int_{E_{FC}}^{E_{FE}} q N_i(E) v_i(E) dE \quad (3.12)$$

où $v_i(E) = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E_i(k)}{\partial k}$ représente la vitesse de groupe des électrons,

et $N_i(E) = \frac{1}{\pi} \left(\frac{\partial k}{\partial E_i(k)} \right) = \frac{1}{\pi v_i(E)}$ la densité d'états 1D.

Le produit $N_i(E) * v_i(E)$ étant indépendant de la sous-bande i considérée et de l'énergie E , on obtient :

$$I_i = \frac{2q}{h} (E_{FE} - E_{FC}) = \frac{2q^2}{h} V_p \quad (3.13)$$

Ainsi, les N sous-bandes situées sous le niveau de Fermi transportent une quantité de courant identique, la conductance est alors exprimée par :

$$G = \frac{\sum_{i=1}^N I_i}{V_p} = \frac{2q^2}{h} N \quad (3.14)$$

Lorsque le fil quantique est élargi, l'énergie de l'ensemble des niveaux quantiques diminue. Le passage d'une sous-bande 1D sous le niveau de Fermi apporte brutalement sa contribution au courant total, la conductance G présente alors un saut de valeur $2q^2/h$. Nous utiliserons ce raisonnement simple dans le paragraphe suivant pour étudier l'évolution de la conductance d'un fil quantique dans un potentiel réel.

Remarquons que la quantification de conductance est directement prévisible par la relation de Landauer-Büttiker. En effet dans le cas du fil quantique, aucune transition entre les sous-bandes 1D ne peut avoir lieu. Dans ce cas, on a $T_{ij} = \delta(i-j)$ qui est unitaire pour $i=j$, et on retrouve la conductance exprimée par la relation 3.14.

Par ailleurs, cette évolution de conductance en marche d'escalier est déterminée dans l'hypothèse d'une température nulle. Expérimentalement, il semble qu'une température de l'ordre de 0.5 K soit nécessaire pour observer des plateaux de conductance réguliers. Au dessous de cette température, on peut voir apparaître des sur-oscillations [18] qui, nous le verrons, sont liées aux phénomènes d'interférences des ondes dans la direction longitudinale du fil. Au dessus de cette température, la queue de distribution de la fonction de Fermi-Dirac introduit un lissage des sauts de conductance. Ceci s'explique par l'étalement au dessus de E_F de la fonction de distribution (évaluée à $4k_B T$) qui augmente linéairement avec la température. Si l'écart d'énergie entre deux sous-bandes 1D successives est de l'ordre de $4k_B T$, la

contribution au transport de chaque sous-bande augmente petit à petit, et les sauts de la conductance, droits à $T=0$ K, prennent une pente finie de moins en moins prononcée à mesure que la température augmente. Si l'écart entre les sous-bandes devient inférieur à $4k_B T$, la conductance ne présente plus aucun plateau et son évolution linéaire s'apparente à celle d'un système 2D [1].

Ainsi, pour pouvoir observer ces plateaux de conductances et plus généralement les effets d'interférences quantiques à plus haute température, l'enjeu futur consistera à savoir à la fois réduire les dimensions des confinements latéraux pour augmenter l'écartement entre niveaux, et maintenir un taux d'interactions suffisamment faible pour préserver l'aspect balistique du transport.

3.3.2 - Exemple : constriction d'un gaz 2D

Pour illustrer la réalisation de structures à base de guides d'ondes électroniques par confinement électrostatique, nous nous proposons d'étudier à partir d'un calcul tridimensionnel le profil de potentiel au sein d'une hétérostructure GaAlAs/GaAs. Une approche simplifiée de la quantification de conductance nous permettra d'énoncer l'hypothèse que nous utiliserons dans les chapitres suivants, à savoir des murs de potentiel infinis.

3.3.2.1 - Potentiel électrostatique 3D

3.3.2.1.1 - Modèle numérique

Nous considérons la structure représentée figure 3.14 qui réalise un fil quantique sans discontinuité, par dépôt de deux grilles de commande Schottky à la surface de l'hétérostructure à haute mobilité du paragraphe 3.1.4. Les grilles de dimensions submicroniques $84 \times 174 \text{ nm}^2$ sont séparées latéralement l'une de l'autre de 66 nm .

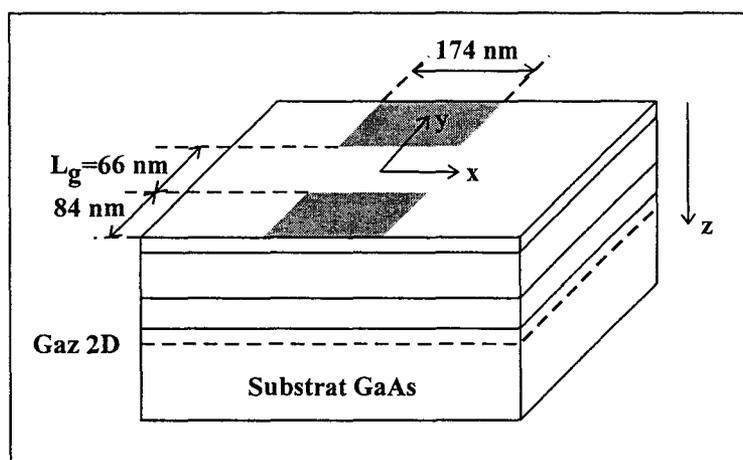


FIGURE 3.14 : Réalisation d'un fil quantique par la technique de la grille de commande. Deux grilles Schottky déposées en surface, de dimension $84 \times 174 \text{ nm}^2$ et séparées l'une de l'autre de 66 nm , permettent de désorber le gaz 2D créé à l'interface de l'hétérostructure pour former le fil quantique.

Dans l'objectif de déterminer l'évolution de la conductance en fonction de la tension appliquée sur les grilles, nous déterminons pour plusieurs valeurs de tension la répartition du potentiel dans la structure à $T=4.2$ K, en utilisant un modèle numérique de résolution de l'équation de Poisson à trois dimensions. Ce modèle a été développé au sein de l'équipe et nous en rappelons ici quelques points essentiels :

- l'équation de Poisson à trois dimensions (équation 1.7) est discrétisée en utilisant les différences finies, et sa résolution numérique est obtenue par la méthode itérative de relaxation.
- la répartition des porteurs libres $n(x,y,z)$ est calculée dans l'approximation de Thomas-Fermi (équation 2.20). La quantification en énergie dans la structure n'est donc pas ici précisément prise en compte dans l'évaluation de n .
- les conditions aux limites sur les bords du domaine de simulation sont :
 - de type Dirichlet (valeur du potentiel fixée), sur la surface du composant où les grilles sont déposées. L'accrochage du niveau de Fermi à la surface libre correspond à une hauteur de barrière $\Phi_F=0.7$ eV alors que le potentiel au niveau des grilles Schottky polarisée à $-V_g$ vaut $\Phi_S=0.7+V_g$ eV.
 - de type Neumann (champ électrique nul), sur les quatre surfaces latérales et à l'extrémité du substrat GaAs.

Le pas de discrétisation est fixé à $\Delta z=1$ nm dans la direction perpendiculaire à l'hétérojonction, et à $\Delta x=\Delta y=6$ nm dans les directions parallèles. Enfin, l'évolution du potentiel dans chaque plan situé en $x=i\Delta x$, est initialisé en utilisant une méthode de résolution de l'équation de Poisson à deux dimensions développée par ailleurs dans l'équipe [26].

3.3.2.1.2 - Confinement du gaz 2D

La figure 3.15 donne le profil de bas de bande de conduction dans le plan du gaz 2D pour une tension appliquée sur les grilles $V_g=-1.4$ V. Ce profil est extrait à une distance de 50 Å de l'hétérojonction GaAlAs/GaAs où se situe pratiquement le maximum de probabilité de présence des électrons dans la direction de croissance des couches.

Pour cette valeur de tension, le motif de grille se retrouve reproduit dans le plan du gaz 2D, avec des dimensions effectives du fil différentes des espaces entre les grilles : celui-ci apparaît plus long et plus étroit. Ceci est dû à la redistribution des charges au sein de la structure et aux longueurs d'écrantage du champ électrique interne. La détermination des dimensions effectives de la zone active n'est donc pas immédiate et nécessite une optimisation des motifs de grille par calculs successifs. Approximativement, on trouve une largeur effective du canal 1D trois fois plus faible que l'écart inter-grille en surface. Ce facteur 3 a aussi été mis en évidence par Davies [5] pour une hétérostructure comparable.

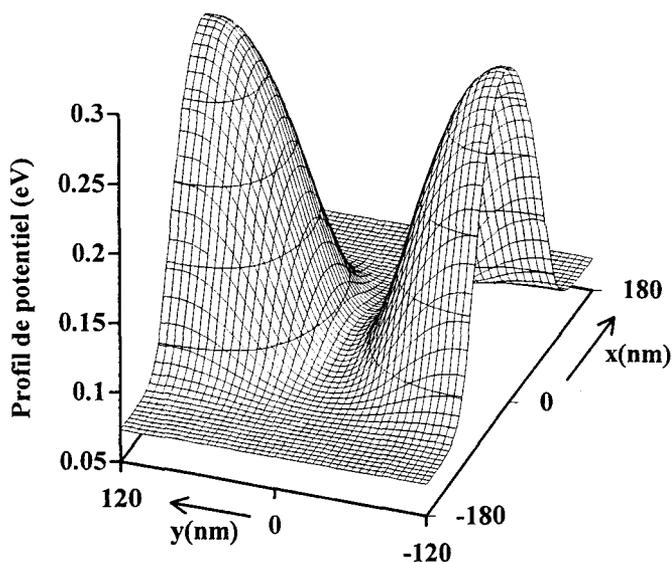


FIGURE 3.15 : Profil de potentiel vu par les électrons du gaz 2D situés majoritairement à 50 Å de l'interface de l'hétérojonction GaAlAs/GaAs. Le confinement électronique latéral est obtenu ici par la polarisation des grilles déposées en surface du composant à $V_g = -1.4$ V, pour $T = 4.2$ K.

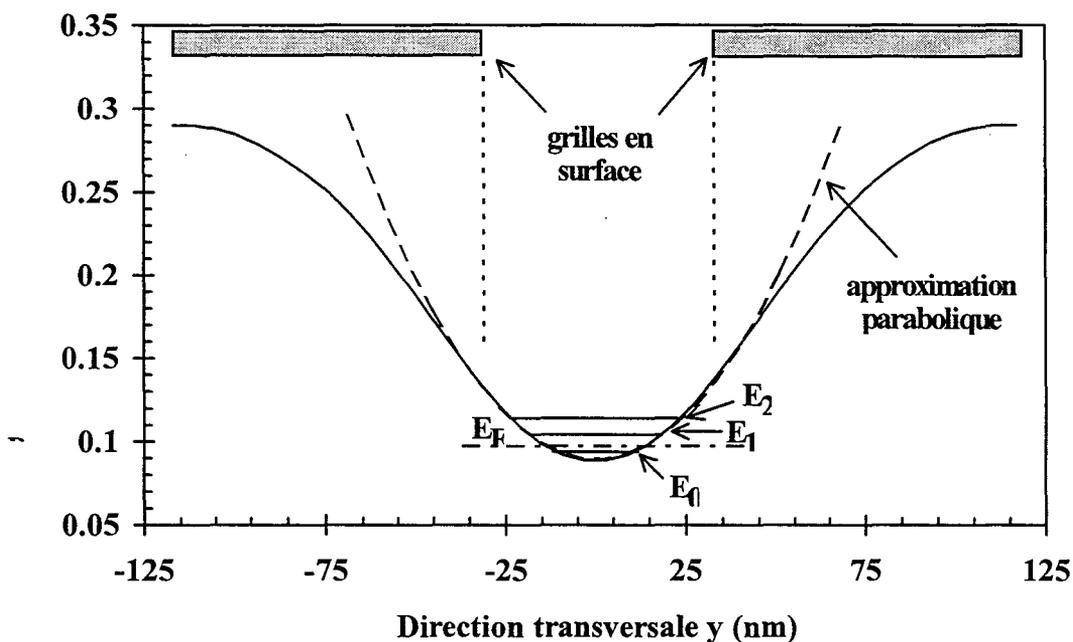


FIGURE 3.16 : Profil de potentiel dans la direction transversale (y), et approximation parabolique du confinement transverse. Ici, seul un niveau quantique (E_0), situé sous le niveau de Fermi E_F , est peuplé à $T = 4.2$ K.

L'allure du potentiel dans la direction transverse du fil quantique dépend typiquement de la densité électronique du gaz 2D (n_s) mais aussi de l'espace entre les grilles L_g . Dans notre cas L_g et n_s étant relativement faibles, on obtient un potentiel de confinement parabolique comme le montre la figure 3.16 qui représente le potentiel réel et une approximation polynomiale de type $V(y)=\alpha y^2$. En revanche pour n_s ou L_g plus important, le fond du puits s'aplatit et l'approximation du puits rectangulaire apparaît plus appropriée [27].

3.3.2.2 - Caractéristique $G(V_g)$

En première approximation, la conductance G du fil quantique peut être déterminée d'après la relation 3.14, ceci nous demande de connaître la quantification dans la direction latérale, et la position relative du niveau de Fermi. L'approximation de l'évolution du potentiel de confinement latéral à un puits de forme parabolique

$$V(y) = \frac{1}{2} m_e \omega^2 y^2 \quad (3.15)$$



obtenue au centre du fil quantique en $x=0$, permet d'évaluer les niveaux d'énergie quantifiée équidistants dans la direction transversale :

$$E_i = \left(i + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega \quad (3.16)$$

La figure 3.16 montre les niveaux obtenus dans cette approximation pour $V_g = -1.4$ V. Le premier est situé à $E_0 = 5.07$ meV par rapport au fond du puits parabolique (E_p) et chaque niveau supérieur est éloigné du précédent de $\hbar\omega = 10.14$ meV. Ensuite, nous déterminons les positions des niveaux E_i par rapport au niveau de Fermi (constant dans la structure) situé dans le cas présent à $E_F = 6.17$ meV par rapport à E_p . Pour $V_g = -1.4$ V on trouve donc un seul niveau sous E_F et la conductance vaut $(2q^2/h)$. Cette procédure est répétée pour toutes les valeurs de V_g , car l'écart entre le fond du puits et E_F , et la forme du puits parabolique (donc des niveaux E_i) dépendent de V_g .

La figure 3.17a représente la position du niveau de Fermi et des différents niveaux quantiques d'énergie E_i référencée par rapport au fond du puits parabolique en fonction de la tension V_g appliquée sur les grilles de commande. La figure 3.17b donne la courbe de conductance associée.

Pour $V_g < -1.45$ V, le niveau de Fermi est situé à une énergie inférieure au fond du puits parabolique E_p , et le canal 1D est pincé. Jusqu'à une tension de -1.42 V, E_F est supérieur à E_p mais aucun niveau du puits parabolique n'est présent sous le niveau de Fermi ; la conductance reste nulle.

A partir de $V_g = -1.42$ V, l'écart entre E_F et E_p augmente, le puits parabolique s'évase, et un premier niveau apparaît sous E_F provoquant le premier plateau de conductance. Plus V_g augmente, plus l'écart entre les niveaux E_i diminue, et leur nombre sous E_F augmente. La conductance présente alors une série de plateaux de plus en plus étroits jusqu'à la tension $V_g = -0.75$ V pour laquelle $G = 8 \cdot (2q^2/h)$. Au delà le transport redevient bidimensionnel.

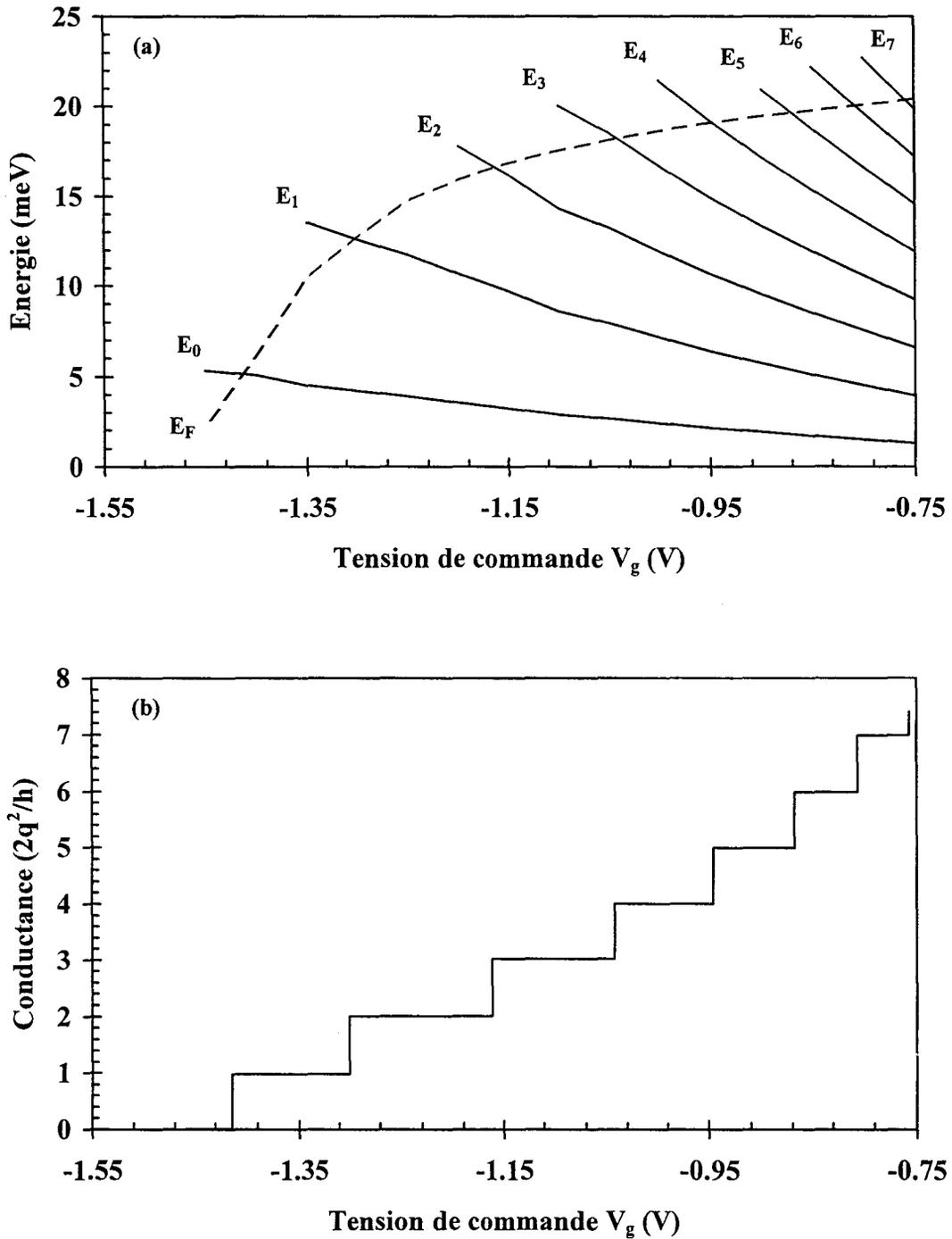


FIGURE 3.17 : Quantification de la conductance d'un fil quantique: (a) les niveaux d'énergie quantifiée latéralement balaient tour à tour le niveau de Fermi fixé par l'environnement du fil, et (b) la conductance présente un saut de $2q^2/h$ à chaque croisement entre un niveau quantique et le niveau de Fermi.

Ce calcul montre aussi la nécessité de savoir maîtriser à la fois le dépôt de grilles de taille submicronique, qui fixe la longueur du fil, et de faible espacement inter-grilles, qui imposent les dimensions transverses et donc la quantification. La largeur des marches de conductance n'exécède pas ici 150 mV pour un espace inter-grille de 66 nm. Tout

accroissement de ce dernier affaiblirait la force de confinement, réduirait l'écart entre niveaux, et par conséquent la plage de tension d'une valeur de conductance donnée.

3.3.2.3 - Approximation des murs de potentiel infinis

Dans le calcul simplifié précédent, nous n'avons considéré le potentiel qu'au milieu du fil quantique en ignorant les variations longitudinales. Or comme nous le verrons dans le chapitre suivant, toute variation du potentiel peut engendrer des modifications des interférences quantiques, et la détermination de la conductance via la formule de Landauer-Büttiker nécessite alors de déterminer de la manière la plus exacte possible les coefficients de transmission à travers la structure.

Néanmoins, la résolution de l'équation de Schrödinger bidimensionnelle dans de tels potentiels, et par extension dans des structures plus complexes incluant par exemple des jonctions entre guides parallèles, est une tâche difficile. C'est pourquoi par la suite, dans un souci de simplification, nous utiliserons l'hypothèse de potentiels de confinement de forme carré et de hauteur infinie.

La conséquence principale de l'utilisation de puits rectangulaires par rapport au potentiel réel de forme parabolique est une distribution différente des niveaux d'énergie quantifiée. Equidistants dans le second cas, ils sont proportionnels à $(n/w)^2$ dans le premier, avec (n) l'indice du niveau et (w) la largeur du puits. Ainsi, seuls les domaines d'apparition en tension des niveaux seront modifiés, les principes physiques restant inchangés. En outre, nous avons vérifié que si l'approximation des murs infinis rend plus simple l'observation des effets d'interférences, ces derniers persistent quand un potentiel réaliste est pris en compte [26].

3.4 - CONCLUSION

Ce chapitre pose les bases de l'étude du transport dans des dispositifs de type guide d'ondes électroniques en considérant d'une part l'hétérojonction à modulation de dopage assurant des mobilités électroniques élevées, et d'autre part les différents régimes de transports.

Sur le premier point par une étude relativement systématique des paramètres de structure, nous avons précisé les conditions d'obtention d'une mobilité élevée. Nous nous sommes ensuite intéressés à l'étude d'une hétérostructure GaAs/GaAlAs épitaxiée au laboratoire et caractérisée au CEA. Si les premiers résultats obtenus sont encourageants, ils montrent aussi toute la difficulté de réaliser des composants de faible dimensionnalité dans le contexte technologique actuel.

Sur le second aspect, nous avons classifié les différents régimes de transport électronique, pour nous intéresser ensuite aux techniques de confinement électrostatique par des grilles Schottky déposées en surface du composant. Les équations de base relatives au transport unidimensionnel ont été présentées et appliquées au calcul de la quantification de conductance d'un fil quantique.

BIBLIOGRAPHIE CHAPITRE 3

- [1] B. J. VAN WEES, H. VAN HOUTEN, C. W. J. BEENAKKER, J. G. WILLIAMSON, L. P. KOUWENHOVEN, D. VAN DER MAREL, and C. T. FOXON
"Quantized conductance of point contact in a two-dimensional electron gas"
Phys. Rev. Lett. 60(9), 1988, pp 848-850.
- [2] T. ANDO
"Self-consistent results for a GaAs/Al_xGa_{1-x}As heterojunction. II. Low temperature mobility"
J. Phys. Soc. Jpn. 51(12), 1982, pp 3900-3907.
- [3] J. SAITO, K. NANBU, T. ISHIKAWA, and S. HIYAMIZU
"Dependence of the mobility and the concentration of two-dimensional electron gas in selectively doped GaAs/N-Al_xGa_{1-x}As heterostructure on the AlAs mole fraction"
Jpn. J. Appl. Phys. 22(2), 1983, pp L79-L81.
- [4] J. ALAMKAN
"Etude théorique des couches actives AlGaAs/InGaAs/GaAs à l'aide d'un modèle de résolution autocohérente des équations de Schrödinger et de Poisson"
Thèse de l'université des Sciences et Technologies de Lille, 18 février 1993.
- [5] J. H. DAVIES
"Electronic states in narrow semiconducting wires near threshold"
Semicond. Sci. Technol. 3, 1988, pp 995-1009.
- [6] K. HIRAKAWA, and H. SAKAKI
"Mobility of the two-dimensional electron gas at selectively doped n-type Al_xGa_{1-x}As/GaAs heterojunctions with controlled electron concentrations"
Phys. Rev. B 33(12), 1986, pp 8291-8303.
- [7] W. WALUKIEWICZ, H. E. RUDA, J. LAGOWSKI, and H. C. GATOS
"Electron mobility in modulation-doped heterostructures"
Phys. Rev. B 30(8), 1984, pp 4571-4582.
- [8] S. HIYAMIZU, J. SAITO, K. NANBU, and T. ISHIKAWA
"Improved electron mobility higher than 10⁶ cm²/Vs in selectively doped GaAs/N-AlGaAs heterostructures grown by MBE"
Jpn. J. Appl. Phys. 22(10), 1983, pp L609-L611.
- [9] J. J. HARRIS, C. T. FOXON, K. W. J. BARNHAM, D. E. LACKLINSON, J. HEWETT, and C. WHITE
"Two-dimensional electron gas structures with mobilities in excess of 3x10⁶ cm²V⁻¹s⁻¹"
J. Appl. Phys. 61(3), 1987, pp 1219-1221.
- [10] B. J. F. LIN, D. C. TSUI, M. A. PAALANEN, and A. C. GOSSARD
"Mobility of the two-dimensional electron gas in GaAs-Al_xGa_{1-x}As heterostructures"
Appl. Phys. Lett. 45(6), 1984, pp 695-697.

- [11] E. E. MENDEZ, P. J. PRICE, and M. HEIBLUM
"Temperature dependence of the electron mobility in GaAs-GaAlAs heterostructures"
Appl. Phys. Lett. 45(3), 1984, pp 294-296.
- [12] F. STERN
"Doping considerations for heterojunctions"
Appl. Phys. Lett. 43(10), 1983, pp 974-976.
- [13] J. C. M. HWANG, A. KASTALSKY, H. L. STÖRMER, and V. G. KERAMIDAS
"Transport properties of selectively doped GaAs-(AlGa)As heterostructures grown by molecular beam epitaxy"
Appl. Phys. Lett. 44(8), 1984, pp 802-804.
- [14] M. HEIBLUM, E. E. MENDEZ, and F. STERN
"High mobility electron gas in selectively doped n:AlGaAs/GaAs heterojunctions"
Appl. Phys. Lett. 44(11), 1984, pp 1064-1066.
- [15] B. ETIENNE and E. PARIS
"Two-dimensional electron gas of very high mobility in planar doped heterostructures"
J. Physique 48(12), 1987, pp 2049-2052.
- [16] L. PFEIFFER, K. W. WEST, H. L. STÖRMER, and K. W. BALDWIN
"Electron mobilities exceeding 10^7 cm²/Vs in modulation-doped GaAs"
Appl. Phys. Lett. 55(18), 1989, pp 1888-1890.
- [17] H. L. STÖRMER, R. DINGLE, A. C. GOSSARD, W. WIEGMANN, and M. D. STURGE
"Two-dimensional electron gas at a semiconductor-semiconductor interface"
Solid State Communications 29(10), 1979, pp 705-709.
- [18] J. BLANCHET
"Transport balistique et effets quantiques dans les nanostructures unidimensionnelles de semiconducteurs"
Thèse de l'Université de Paris XI, 21 octobre 1994.
- [19] E. F. SCHUBERT, K. PLOOG, H. DÄMBKES, and K. HEIME
"Selectively doped n-Al_xGa_{1-x}As/GaAs heterostructures with high-mobility two-dimensional electron gas for Field Effect Transistors"
Appl. Phys. A 33, 1984, pp 63-76.
- [20] 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 des Sciences et Technologies de Lille, 5 décembre 1993.
- [21] J. A. NIXON, J. H. DAVIES, and H. U. BARANGER
"Breakdown of quantized conductance in point contacts calculated using realistic potentials"
Phys. Rev. B 43(15), 1991, pp 12638-12641.

- [22] R. LANDAUER
"Spatial variation of currents and field due to localised scatterers in metallic conduction"
IBM J. Res. Dev. 1, 1957, pp 223-231.
- [23] R. LANDAUER
"Electrical resistance of disordered one-dimensional lattices"
Philosophical Magazine 21, 1970, pp 863-867.
- [24] M. BÜTTIKER, Y. IMRY, R. LANDAUER, and S. PINHAS
"Generalized many-channel conductance formula with application to small rings"
Phys. Rev. B 31(10), 1985, pp 6207-6215.
- [25] D. A. WHARAM, T. J. THORNTON, R. NEWBURY, M. PEPPER, H. AHMED,
J. E. F. FROST, D. G. HASKO, D. C. PEACOCK, D. A. RITCHIE, and
G. A. C. JONES
"One-dimensional transport and the quantisation of the ballistic resistance"
J. Phys C 21, 1988, pp L209-L214.
- [26] O. VANBÉSIEN, D. WOJCIECHOWSKI, V. SADAUNE, and D. LIPPENS
"Modelling of resonant tunneling effects in laterally confined heterostructures at
nanometer scales"
Physics of Semiconductor Devices, ed. Krishan Lal, New Delhi, 1993, pp 637-639.
- [27] G. L. SNIDER, I. H. TAN, and E. L. HU
"Electron states in mesa-etched one-dimensional quantum well wires"
J. Appl. Phys. 68(6), 1990, pp 2849-2853.

CHAPITRE 4

CONDUCTION DANS LES GUIDES D'ONDES ELECTRONIQUES NON UNIFORMES

CHAPITRE 4 : CONDUCTION DANS LES GUIDES D'ONDES ELECTRONIQUES NON UNIFORMES

De nombreux travaux théoriques et expérimentaux ont été consacrés ces dernières années à l'étude du transport balistique dans les structures à base de guides d'ondes électroniques. Par analogie avec les systèmes micro-ondes, nous classerons ces nouveaux composants en deux grandes catégories : les quadripôles incluant la constriction et l'élargissement d'un fil quantique que nous étudierons ici, et les octopôles permettant l'étude de couplages entre guides distincts que nous aborderons dans le dernier chapitre.

Les principaux résultats expérimentaux rencontrés dans la littérature concernent la première catégorie, avec comme points communs l'utilisation d'hétérostructures à haute mobilité, et un confinement additionnel assuré par la technique de la grille de commande qui a été exposée dans le chapitre précédent. Par exemple, Eugster et al [1] ont montré dans un premier temps (1990) la persistance d'un transport balistique dans un fil quantique jusqu'à une température $T=10$ K. Un peu plus tard (1991), Snider et al [2] ont observé une quantification de conductance jusqu'à $T=30$ K, puis (1993) Wu et al [3] ont confronté les résultats issus d'un calcul théorique de conductance à des mesures réalisées sur une structure à double discontinuité à angle droit, montrant ainsi la faisabilité de structures unidimensionnelles complexes. Citons aussi, les résultats obtenus sous champ magnétique, liés à l'observation d'interférences quantiques dans une structure en anneau ("Aharonov-Bohm effect") [4].

Enfin en théorie, Sols et al [5] ont proposé la réalisation d'un transistor quantique dont la modulation de la conductance entre source et drain est assurée par l'adjonction d'un fil quantique, perpendiculairement au guide principal, dont la longueur finie est modifiable par une tension de commande - stub électronique par analogie avec les composants hyperfréquences -. Expérimentalement, des variations prononcées de la conductance ont confirmé la présence d'interférences dans ce type de structure [6][7].

Dans ce chapitre, nous nous proposons d'analyser tant en régime statique qu'en régime dépendant du temps les phénomènes d'interférences quantiques dans ces structures à deux ports d'entrée/sortie. Nous avons pour cela développé différents outils numériques permettant de résoudre l'équation de Schrödinger à deux dimensions soit indépendante, soit dépendante du temps. Nous les appliquerons successivement au cas de la constriction d'un guide d'ondes électroniques (fil quantique connecté à deux réservoirs bidimensionnels) pour définir la notion de filtrage énergétique, puis au cas du stub électronique (élargissement d'un canal 1D) avec une attention particulière sur le régime de commutation.

4.1 - CONSTRICTION D'UN CANAL 1D

4.1.1 - Analyse statique

Pour analyser les variations de conductance dans les structures unidimensionnelles et les phénomènes d'interférences qui leur sont associées, nous avons tout d'abord développé un modèle de résolution de l'équation de Schrödinger à deux dimensions indépendante du temps. Ce modèle, que nous allons détailler dans un cas simple par souci de clarté, est néanmoins généralisable à des structures plus complexes incluant les structures multicanaux que nous aborderons dans le chapitre suivant.

4.1.1.1 - Modèle numérique

4.1.1.1.1 - Hypothèses

Le modèle de résolution de l'équation de Schrödinger à deux dimensions indépendante du temps que nous avons développé permet globalement d'étudier le transport balistique dans des structures multicanaux à ports d'entrée/sortie multiples. Basé sur la méthode, bien connue en électromagnétisme, du raccordement de modes, il s'agit d'une extension des travaux de Weisshaar et al [8], dont le développement général est donné en annexe B.

Les principales hypothèses du calcul sont les suivantes :

- nous nous plaçons dans le plan du canal bidimensionnel d'une hétérostructure à haute mobilité, la référence en énergie est prise au bas de la première sous-bande du canal, et ignorons ensuite la variation de potentiel dans la direction (z) perpendiculaire à l'hétérojonction.
- le potentiel de confinement latéral dans les deux autres directions (x,y) est assimilé à des murs infinis ("hardwall"), dont la géométrie définit les guides d'ondes électroniques dans lesquels les fonctions d'ondes sont calculées. De plus, l'intersection de deux guides d'ondes sera considérée à coins carrés. Soulignons cependant que l'introduction d'un potentiel de confinement fini, et donc la prise en compte de l'évanescence de la probabilité de présence dans les barrières de potentiel, n'apporte pas de modifications notables des caractéristiques calculées [9].
- une variation du potentiel dans les directions de propagation peut être introduite pour traduire par exemple la polarisation de la structure entre les différents ports d'entrée/sortie.
- nous nous plaçons toujours dans l'hypothèse de la masse effective, et utiliserons par la suite celle du GaAs : $m_e^* = 0.067m_0$.

4.1.1.1.2 - Méthode du raccordement de modes

La figure 4.1a représente la forme générale d'une structure à multiples discontinuités que nous désirons modéliser : les zones grises correspondent aux zones interdites (potentiel infini)

délimitant le canal unidimensionnel dans lequel les ondes électroniques peuvent se propager dans la direction (x).

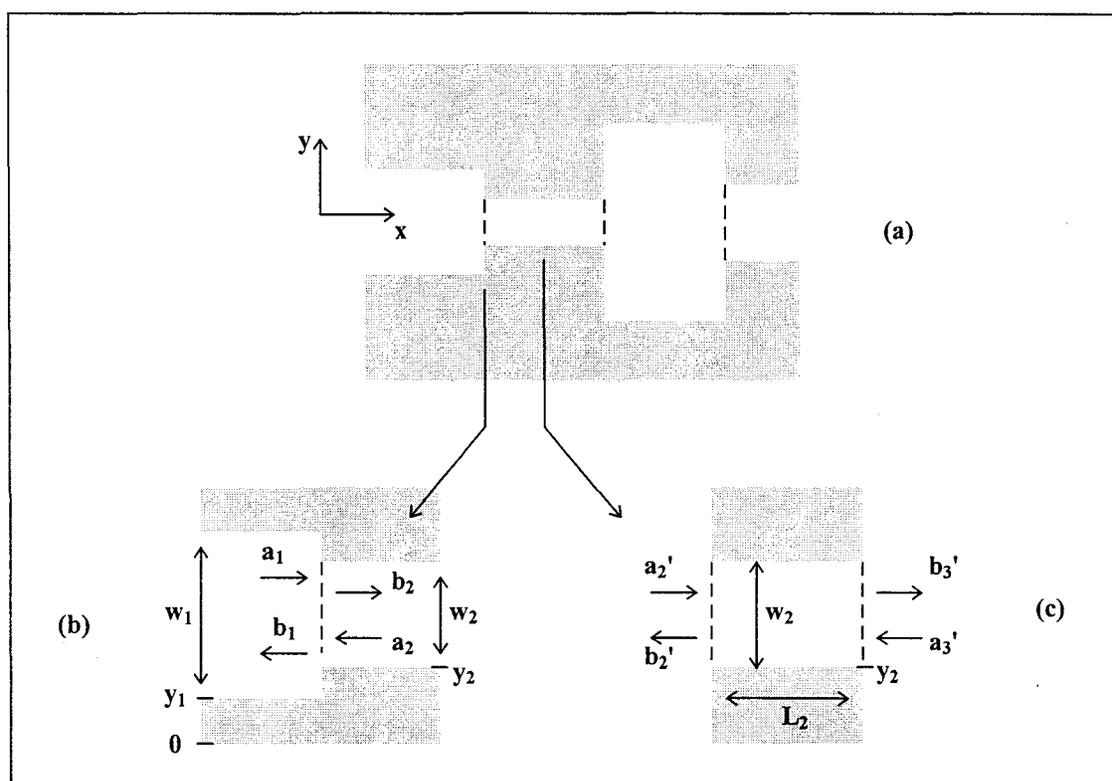


FIGURE 4.1 : Représentation schématique d'une structure de type guide d'ondes électroniques non uniforme (a). La structure est décomposée en (b) jonctions et en (c) sections pour le traitement numérique statique.

Le modèle numérique utilisé consiste à décomposer dans un premier temps la structure non uniforme en jonctions (figure 4.1b) et en sections (guides d'ondes uniformes, figure 4.1c). Dans chaque section p où le potentiel est supposé constant, la fonction d'onde $\varphi_p(x,y)$ est exprimée par une somme infinie de fonctions modales $\xi_n^p(x,y)$. Par le principe de séparation des variables, ces fonctions peuvent être écrites comme le produit d'une fonction $\Phi_p(n)$, traduisant le confinement transversal du mode n , et d'ondes planes propagatives ou évanescentes selon l'énergie considérée. On obtient alors :

$$\xi_n^p(x,y) = \Phi_p(n) \left\{ a_p(n) e^{ik_p(n)x} + b_p(n) e^{-ik_p(n)x} \right\}$$

$$\text{avec } \Phi_p(n) = \sqrt{\frac{2}{w_p}} \sin\left(\frac{n\pi}{w_p}(y - y_p)\right) \quad (4.1)$$

qui traduit l'adaptation en n demi-longueurs d'ondes sur la largeur de la section (fonctions propres du puits carré infiniment profond).

Dans laquelle on a :

$$k_p(n) = \sqrt{\frac{2m_e^*}{\hbar^2} (E - V_p) - \left(\frac{n\pi}{w_p}\right)^2} \quad (4.2)$$

avec w_p la largeur de la section, V_p son énergie potentielle (généralement nulle), et y_p sa position latérale par rapport à la référence $y=0$ (figure 4.1). La fonction d'onde est alors obtenue en prenant la somme de ces fonctions modales indicées par n , somme théoriquement infinie que nous limiterons en pratique à N modes significatifs (typiquement $N=30$ modes, mais jusqu'à $N=60$ modes peuvent être utilisés pour les structures de sections plus larges, pour traiter les contacts 2D par exemple), soit :

$$\phi_p(x, y) = \sum_{j=1}^N \xi_j^p(x, y) \quad (4.3)$$

Le raccordement des modes est obtenu ensuite en utilisant les propriétés orthonormales des fonctions $\Phi_p(n)$. Dans le plan de chaque jonction, les conditions de continuité de la fonction d'onde, et de sa dérivée première suivant la direction longitudinale, permettent d'aboutir à l'expression d'une matrice de répartition ("Scattering") liant l'ensemble des ondes incidentes (a_p) et réfléchies (b_p) de part et d'autre de la jonction. Aussi pour la jonction représentée figure 4.1b, on a :

$$\begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \end{bmatrix} \quad (4.4)$$

où a_i et b_i sont des vecteurs à N éléments. Les matrices S_{ij} qui ne dépendent que de la géométrie de la jonction sont donc de dimension $N*N$. De plus, chaque section de longueur L_p est caractérisée par une matrice P diagonale qui traduit soit le déphasage, soit l'atténuation, des ondes (respectivement propagatives ou évanescentes) de chacun des modes. Par exemple pour la section représenté figure 4.1c, on a les relations :

$$\begin{aligned} b'_2 &= P a'_3 \\ \text{et } b'_3 &= P a'_2 \end{aligned} \quad (4.5)$$

dans lesquelles les éléments diagonaux de la matrices P sont donnés par

$$P_{jj} = \exp(ik_p(j)L_p) \quad (4.6)$$

avec $k_p(j)$ exprimé par la relation 4.2. Une matrice de répartition pour l'ensemble de la structure peut alors être obtenue par combinaisons successives des matrices élémentaires de répartition S et de propagation P . Le détail analytique des matrices et leurs combinaisons pour obtenir la matrice globale S^G sont donnés en annexe B, aussi bien pour des structures de type quadripôle (dimension de la matrice $2N*2N$) que pour les structures multicanaux (octopôles par exemple, dimension $4N*4N$).

4.1.1.1.3 - Conductance

De la matrice S^G on peut déduire les caractéristiques de transmission et de réflexion de la structure. Le coefficient de transmission pour un mode incident (n) à l'entrée (e) vers tous les modes de la sortie (s) est donné par :

$$T_n(E) = \frac{\sum_{m=1}^N b_s(m)b_s^*(m)(k_s(m) + k_s^*(m))}{a_e(n)a_e^*(n)(k_e(n) + k_e^*(n))} \quad (4.7)$$

en tenant compte de N modes, qui en termes de paramètres S^G devient :

$$T_n(E) = \frac{\sum_{m=1}^N |S_{21}^G(m,n)|^2 (k_s(m) + k_s^*(m))}{k_e(n) + k_e^*(n)} \quad (4.8)$$

où k_e et k_s sont exprimés par la relation 4.2.

De la même manière le coefficient de réflexion du n^{ième} mode incident vers l'ensemble des modes de l'entrée (e) est donné par :

$$R_n(E) = \frac{\sum_{m=1}^N b_e(m)b_e^*(m)(k_e(m) + k_e^*(m))}{a_e(n)a_e^*(n)(k_e(n) + k_e^*(n))} \quad (4.9)$$

et

$$R_n(E) = \frac{\sum_{m=1}^N |S_{11}^G(m,n)|^2 (k_e(m) + k_e^*(m))}{k_e(n) + k_e^*(n)}$$

Finalement, la conductance de la structure est exprimée, d'après la relation 3.10 vue au chapitre précédent, par :

$$G = \frac{2q^2}{h} \sum_{n=1}^K T_n(E_F) \quad (4.10)$$

où la somme porte uniquement sur les K modes propagatifs de l'entrée situés sous l'énergie E_F (niveau de Fermi) à laquelle on évalue le coefficient de transmission T_n . Rappelons que cette relation n'est valable que sous deux conditions, à savoir :

- à très basse température pour éviter tout étalement des fonctions de distribution en entrée et sortie au dessus de E_F .
- pour une faible polarisation entre l'entrée et la sortie. Dans ce cas dans l'hypothèse du transport balistique, seuls les électrons situés à l'énergie E_F en entrée peuvent trouver des états disponibles en sortie et participer à la

conduction. Les évolutions de conductance ou de transmission ne dépendront alors que des variations de l'énergie d'injection, ou des variations de géométrie du dispositif.

4.1.1.1.3 - Règle d'échelles

D'une manière générale dans les études des systèmes à base de guides d'ondes électroniques, on s'intéresse à l'évolution de la conductance entre deux contacts de la structure soit en fonction de l'énergie d'injection E_F , soit en fonction d'une dimension caractéristique (largeur ou longueur d'une zone particulière). Ces évolutions restent cependant inchangées si l'on respecte certaines règles de transformations d'échelles. D'après les relations ci-dessus, et en particulier l'expression des vecteurs d'ondes liés à chaque mode, on peut déduire que l'ensemble des coefficients de réflexion et de transmission sont invariants suivant les transformations suivantes :

- $L'=\alpha L$ et $\lambda'=\alpha\lambda$, où λ représente globalement les longueurs d'ondes transversale et longitudinale dans la structure, et L ses dimensions géométriques. En outre si l'on considère une masse effective fixe, on obtient par modification de la relation sur les longueurs d'ondes, la transformation suivante : $L'=\alpha L$ et $E'=E/\alpha^2$.

- $m_e^*=\alpha m_e^*$ et $E'=E/\alpha$. Dans ce cas les longueurs d'ondes sont inchangées.

Nous verrons par la suite que la transformation reliant les dimensions et les énergies est très pratique pour représenter des abaques de conductance comme par exemple dans le stub électronique.

Par ailleurs, il est important aussi de se fixer un ordre de grandeur des dimensions et des énergies d'injection (E_F) que nous allons utiliser. Pour cela, rappelons que le niveau de Fermi E_F est fixé par les zones extérieures du système unidimensionnel, et en particulier par les contacts bidimensionnels. Ainsi dans l'hypothèse où seule la première sous-bande du gaz 2D est peuplée, le niveau de Fermi référencé par rapport au bas de cette sous-bande s'exprime en fonction de la densité surfacique de charges (n_s) du gaz 2D par :

$$E_F = \frac{\hbar}{4m_e^* \pi} n_s \quad (4.11)$$

Typiquement pour $10^{11} \text{ cm}^{-2} \leq n_s \leq 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ on obtient $3.6 \text{ meV} \leq E_F \leq 36 \text{ meV}$. Cette gamme d'énergie nous impose des dimensions transversales (w) de guides d'ondes électroniques de l'ordre de quelques dizaines de nanomètres pour pouvoir obtenir une propagation monomode.

4.1.1.2 - Quantification de conductance

En première approche, la quantification de conductance peut être obtenue par la simple considération du confinement latéral dans la constriction. Cependant afin de prendre en compte l'ensemble des interférences, il est nécessaire d'inclure les zones bidimensionnelles d'injection et de collection. Pour cela, nous considérons la structure illustrée en insert de la

figure 4.2 : la constriction de largeur w et de longueur L est insérée entre deux guides d'ondes électroniques de largeur plus importante fixée à $d=600$ nm. Cette largeur suffit pour assimiler ces zones à des réservoirs bidimensionnels pour des largeurs de constriction de quelques dizaines de nanomètres [8].

La figure 4.2 représente l'évolution de la conductance G en fonction de la largeur w de la constriction calculée à une énergie $E_F=15$ meV. Il a été supposé ici que la largeur w est modulée par le biais de grilles de commande en surface du composant, et que les régions de désertion ont la même extension dans les directions transversale et longitudinale. Il en résulte un allongement de la constriction proportionnel à son rétrécissement. Dans le cas présent, nous avons pris les dimensions initiales $w_{\max}=100$ nm et $L_{\min}=50$ nm, et lorsque la largeur w décroît la longueur de la constriction, valant $L=L_{\min}+(w_{\max}-w)$, augmente.

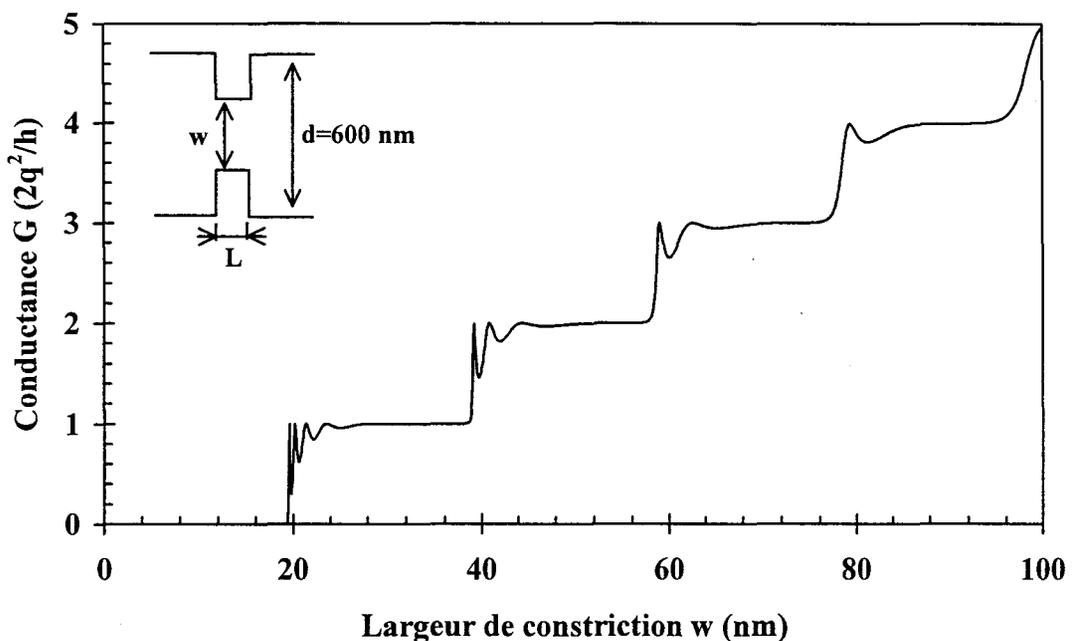


FIGURE 4.2 : Evolution de la conductance G en fonction de la largeur w de la constriction schématisée en insert. A mesure que la constriction s'élargit, sa longueur L diminue suivant la relation : $L=150-w$ (nm).

Comme attendu, on observe une évolution de la conductance en marche d'escalier de hauteur $2q^2/h$, exprimant le nombre croissant de sous-bandes 1D impliqués dans le transport lorsque la constriction s'élargit. A cela s'ajoutent, après chaque saut de conductance, des sur-oscillations qui proviennent d'interférences liées aux multiples réflexions de l'onde à chaque discontinuité de canal. Ceci se traduit par l'adaptation en demi-longueur d'onde longitudinale de la fonction d'onde sur la longueur de la constriction. On remarquera le nombre décroissant des sur-oscillations quand w augmente, c'est à dire pour des longueurs L plus faibles. Pour étudier plus en détail ces phénomènes, il est avantageux d'étudier l'évolution de la conductance en fonction de l'énergie d'injection pour une géométrie donnée.

Pour cela, nous avons représenté sur la figure 4.3 le spectre de transmission d'une constriction composée de deux guides d'ondes de largeur importante ($d=600$ nm) reliés entre eux par un guide plus étroit ($w=20$ nm) de longueur $L=56$ nm.

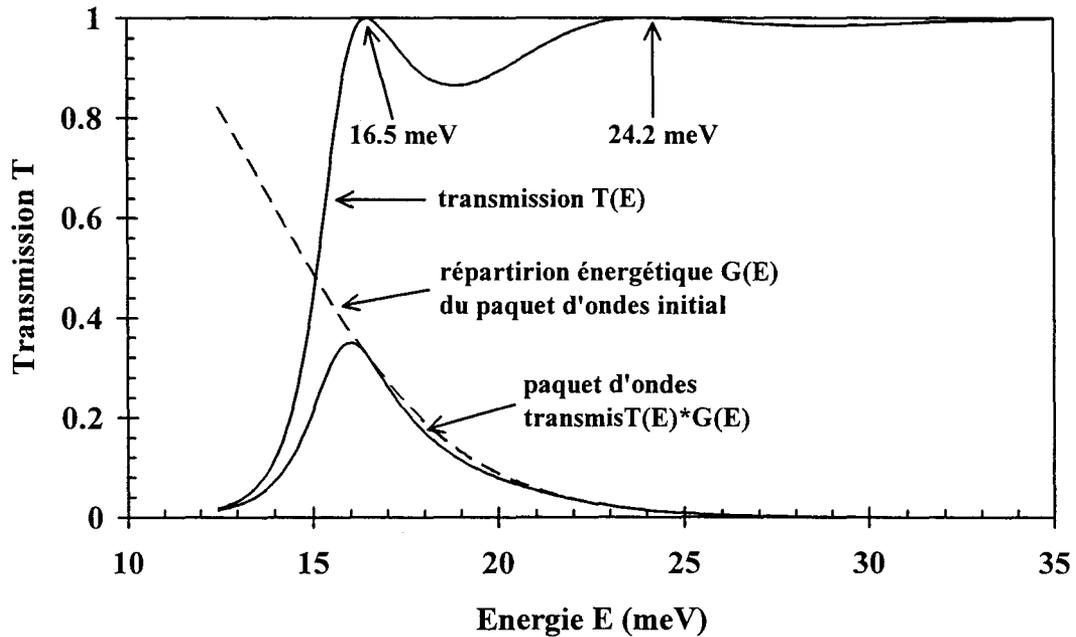


FIGURE 4.3 : Spectre de transmission $T(E)$ d'une constriction, de largeur 20 nm et de 56 nm de long, insérée entre deux guides d'ondes de largeur 600 nm (contacts 2D). Les répartitions en énergie des paquets d'ondes initial ($G(E)$) et transmis ($T(E)*G(E)$) sont aussi représentées.

On s'est limité ici à l'apparition du premier plateau de conductance qui apparaît à une énergie de 14 meV correspondant à l'énergie du premier niveau transverse de la région centrale. On observe à nouveau les ondulations du plateau avec deux maxima distincts : l'un à 16.5 meV, et l'autre à 24.2 meV. Ces énergies peuvent être approximativement déterminées par la relation :

$$E_{nm} = \frac{\hbar^2}{2m_e} * \left(\left(\frac{m\pi}{L} \right)^2 + \left(\frac{n\pi}{w} \right)^2 \right) \quad (4.12)$$

qui donne les énergies des états résonnants (m) pour le niveau transverse (n), calculées en considérant un confinement strict dans un puits de potentiel carré de profondeur infinie suivant la direction longitudinale. Notons que dans le cas présent en prenant $n=1$, on déduit par cette relation une longueur effective $L_{\text{eff}}=47.3$ nm pour la première résonance ($m=1$), et $L_{\text{eff}}=46.9$ nm pour la seconde ($m=2$). Ces longueurs supérieures à la longueur réelle du fil traduisent l'ouverture du système dans la direction de propagation. On pourra aussi remarquer la forte analogie entre la relation précédente et les relations de dispersion rencontrées en hyperfréquences dans les guides d'ondes rectangulaires. Par ailleurs, ce phénomène a aussi été mis en évidence par Kirczenow [10] dans le cas de variations transversales du potentiel paraboliques.

Globalement quelque soit le potentiel de confinement latéral considéré, on s'aperçoit que la séparation en énergie des états résonnants est inversement proportionnelle à la longueur de la constriction. Cela signifie que pour des longueurs plus importantes, le système s'apparentant alors à un fil quantique, les états résonnants sont très rapprochés. Rappelons que nous sommes dans l'hypothèse d'une température nulle, et que l'augmentation de la température a un effet de lissage sur l'évolution de la conductance. Par conséquent à cause de l'étalement thermique des fonctions de distribution, on pourra s'attendre à n'observer expérimentalement ces phénomènes d'interférences longitudinales que pour des températures très faibles (de l'ordre de 100 mK), et dans des constriction de faibles longueurs pour lesquelles la séparation énergétique est plus importante [10].

Cependant, il est à noter que le confinement réalisé par désertion ne permet pas d'avoir des variations de potentiel abruptes. Le passage de la constriction aux zones bidimensionnelles de contacts se fait alors graduellement, et comme souligné par Escapa et al [11], les résonances ont tendance à disparaître. Cette réalité expérimentale correspond de fait à l'existence de zones de transitions ("taper") souvent utilisées en technologie micro-ondes pour éviter des ruptures brutales d'impédance, optimiser la propagation des ondes électromagnétiques, et diminuer le coefficient de réflexion. Ici, ces zones canalisent le flux électronique des contacts vers la constriction, et correspondent à un élargissement progressif du canal 1D vers les zones 2D. Ces zones de transition ont pour conséquence directe la disparition des phénomènes d'interférences longitudinales, permettant ainsi de faciliter l'observation des plateaux de conductance des constriction [12]. Elles sont caractérisées par l'angle d'ouverture θ référencé par rapport à la normale de la section droite du canal 1D, dont une simulation de Monte-Carlo a montré l'importance du choix [13]. Par exemple, pour un angle $\theta=62^\circ$ seulement un électron sur 10 de la zone d'injection entre dans la constriction, ce rapport devient inférieur à 1 pour 60 pour un angle $\theta=85^\circ$. Finalement, il semble qu'un angle d'ouverture $\theta=50^\circ$ représente un bon compromis pour obtenir une transition suffisamment progressive du gaz 2D vers le canal 1D [1].

L'analyse temporelle développée ci-dessous va nous permettre d'illustrer ces différents effets.

4.1.2 - Analyse temporelle

4.1.2.1 - Modèle numérique

En reprenant les mêmes hypothèses de calcul que celles utilisées pour l'analyse statique (paragraphe 4.1.1), nous résolvons l'équation de Schrödinger à deux dimensions dépendante du temps qui dans l'approximation de la masse effective peut se mettre sous la forme :

$$\frac{\partial \varphi(x, y, t)}{\partial t} = -iH\varphi(x, y, t) \quad (4.13)$$

avec
$$H = \frac{\hbar^2}{2m_e} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + \frac{V(x, y)}{\hbar}$$

Comme l'indique cette équation, nous supposons que le potentiel $V(x, y)$ est indépendant du temps. La résolution numérique de cette équation est basée sur les travaux de Goldberg et al [14] que nous avons étendus de manière à pouvoir traiter les systèmes à deux dimensions.

Pour cela, nous discrétisons le système en utilisant les notations suivantes :

$$\begin{aligned} t &= n\Delta t \\ x &= j\Delta x \\ y &= k\Delta y \end{aligned} \quad (4.14)$$

La fonction d'onde au point (x,y) à l'instant t s'écrit alors :

$$\varphi(x, y, t) = \varphi_{j,k}^n \quad (4.15)$$

La solution à l'instant t+Δt est obtenu par la relation :

$$\varphi_{j,k}^{n+1} = \exp(-iH\Delta t)\varphi_{j,k}^n \quad (4.16)$$

dans laquelle nous exprimons l'opérateur d'évolution par le développement de Caley :

$$\exp(-iH\Delta t) = \frac{1 - iH\Delta t}{1 + iH\Delta t} \quad (4.17)$$

Soulignons que ce développement n'est pas unique mais il présente l'avantage de conserver une fonction d'onde unitaire durant son évolution dans le temps [14]. Enfin les développements en séries de Taylor de la fonction d'onde dans les directions x et y permettent de discrétiser les dérivées secondes de φ à l'instant t dans ces deux directions, ainsi que l'opérateur d'évolution qui en découle. Par ces expressions et les relations 4.16 et 4.17 nous obtenons finalement la relation :

$$\begin{aligned} &\left\{ A_x \varphi_{j-1,k}^{n+1} + B_x \varphi_{j,k}^{n+1} + A_x \varphi_{j+1,k}^{n+1} \right\} + \left\{ A_y \varphi_{j,k-1}^{n+1} + B_y \varphi_{j,k}^{n+1} + A_y \varphi_{j,k+1}^{n+1} \right\} = \\ &- \left\{ A_x \varphi_{j-1,k}^n + C_x \varphi_{j,k}^n + A_x \varphi_{j+1,k}^n \right\} - \left\{ A_y \varphi_{j,k-1}^n + C_y \varphi_{j,k}^n + A_y \varphi_{j,k+1}^n \right\} \end{aligned} \quad (4.18)$$

$$\begin{aligned} \text{avec } A_\eta &= \frac{1}{\Delta\eta^2}, \quad B_\eta = \left(-\frac{1}{\Delta\eta^2} - \frac{m_e^*}{2\hbar^2} V_{j,k} + i \frac{m_e^*}{\hbar\Delta t} \right) \\ \text{et } C_\eta &= \left(-\frac{1}{\Delta\eta^2} - \frac{m_e^*}{2\hbar^2} V_{j,k} - i \frac{m_e^*}{\hbar\Delta t} \right) \end{aligned}$$

de laquelle on dérive numériquement la fonction d'onde φ en tout point de la structure à l'instant t+Δt par la méthode itérative de Gauss-Seidel. D'un point de vue numérique pour augmenter la rapidité de convergence, nous utilisons un facteur de surrelaxation optimal calculé à chaque itération [15]. Cette procédure numérique sera utilisée dans l'ensemble des analyses temporelles présentées par la suite. Seules l'initialisation du système et les conditions aux limites absorbantes seront adaptées au type d'étude envisagée (paquet d'ondes gaussien ou injection continue).

4.1.2.2 - Initialisation

Dans cette partie, nous étudions l'injection des porteurs répartis autour d'une énergie centrale E_{F0} . Nous supposons pour cela que la répartition des porteurs s'apparente à un paquet d'ondes gaussien. Pour considérer la bidimensionnalité des contacts nous initialiserons celui-ci par :

$$\varphi(x, y, t = 0) = \frac{1}{(\pi\sigma^2)^{1/2}} e^{(ik_{x0}x + ik_{y0}y)} e^{-\frac{(x-x_0)^2 + (y-y_0)^2}{2\sigma^2}} \quad (4.19)$$

où k_{x0} et k_{y0} sont les vecteurs d'ondes centraux du paquet d'ondes dans les directions respectivement x et y , et σ son étalement spatial isotrope. Le coefficient précédant les termes exponentiels permet quant à lui d'assurer un paquet d'ondes unitaire.

Dans le cas présent, les ouvertures du domaine au niveau des zones d'injection et de collection sont présentes dans les directions x et y , et ne semblent pas permettre la définition de conditions aux limites absorbantes simples. Aussi dans cette partie, nous nous contenterons d'éviter la réflexion du paquet d'ondes sur les bords du domaine, en choisissant ce dernier suffisamment grand selon l'intervalle de temps considéré. Enfin, les conditions d'injection sont les suivantes :

- y_0 est choisi de façon à centrer, dans la direction transversale, le paquet d'ondes face à la constriction.
- l'injection du paquet est longitudinale, nous imposons donc $k_{y0}=0$.

4.1.2.3 - Zones de transitions ("taper")

Afin de tester le modèle développé, nous avons étudié l'influence de l'angle d'ouverture θ des zones de transitions sur les propriétés de transmission d'une constriction. De largeur 20 nm et de longueur 56 nm, celle-ci est insérée entre deux contacts modélisés par deux guides d'ondes de largeur 600 nm (insert figure 4.4). La structure est délimitée par un potentiel infini, et le paquet d'ondes évolue dans des canaux à potentiel nul.

Le domaine de simulation s'étend sur 600 nm dans la direction transverse, et sur 1200 nm dans la direction longitudinale. La discrétisation ($\Delta x=4$ nm, $\Delta y=2$ nm) permet de ramener le système en une matrice de dimension 300×300 , et le pas temporel est fixé à $\Delta t=3.5$ fs, de manière à assurer la convergence du paquet d'ondes à l'instant $t+\Delta t$. Les porteurs sont injectés à $E_{F0}=35$ meV correspondant à l'énergie centrale du domaine énergétique d'existence du premier plateau de conductance - pour une largeur de constriction de 20 nm, ce domaine est compris entre 14 meV et 56 meV -. Le paquet d'ondes est donc initialisé d'après l'équation 4.19 au centre du contact émetteur, soit en $x_0=300$ nm et $y_0=300$ nm, pour un vecteur d'onde de composantes $k_{x0}=2.48 \cdot 10^8$ m⁻¹ et $k_{y0}=0$, et pour un étalement spatial $\sigma=40$ nm correspondant à un étalement énergétique :

$$\delta E = \sqrt{\frac{2\hbar^2 E_{F0}}{m_e}} \frac{1}{\sigma} = 7 \text{ meV} \quad (4.20)$$

Chaque zone de transition s'étend d'un bord de la constriction à l'abscisse où sa largeur égale celle des contacts (600 nm). La longueur de ces zones est donc variable et vaut 0, 288 nm, et 384 nm pour les angles d'ouvertures $\theta=90^\circ$, 45° , et 37° respectivement.

La figure 4.4 donne la répartition du paquet d'ondes, dans la constriction (ρ) et dans la zone de collection (c), en fonction du temps dans ces trois cas. Ces répartitions sont obtenues par intégration, dans chaque zone distincte, de la probabilité de présence à l'instant t . Pour la clarté de la représentation, nous n'avons pas reporté la répartition du paquet dans la zone d'injection qui peut être déduite par complémentarité. Pour $\theta=90^\circ$, angle correspondant à une constriction sans zone de transition, nous observons que seulement 22% du paquet d'ondes initial est transmis. A mesure que l'angle d'ouverture diminue, le taux transféré augmente et atteint environ 45% pour $\theta=37^\circ$.

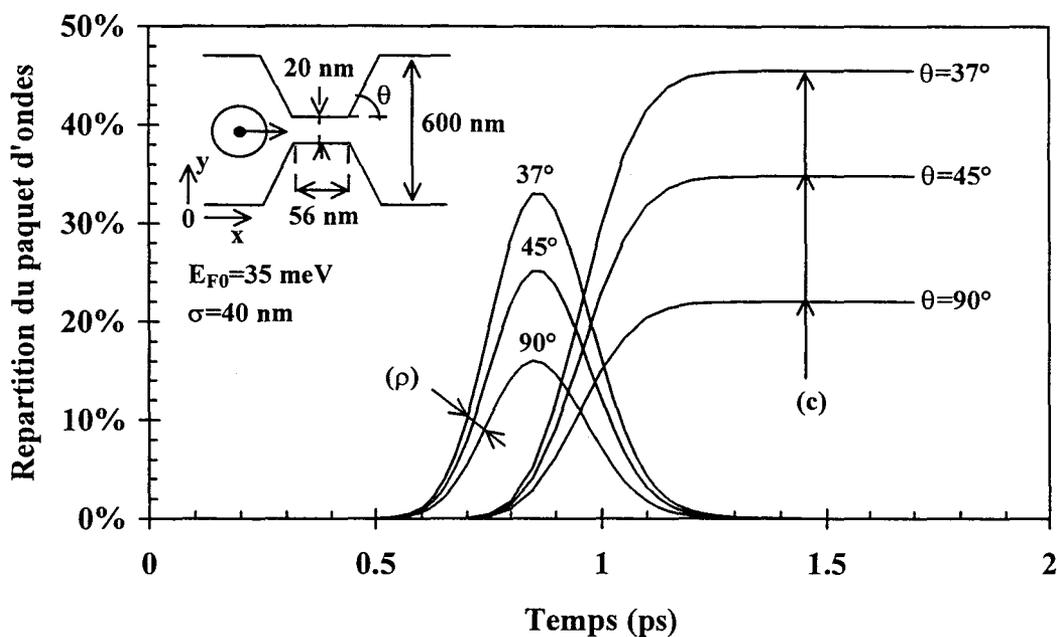


FIGURE 4.4 : Evolution temporelle de la répartition d'un paquet d'ondes gaussien dans la zone de collection (c) et dans la constriction (ρ) en fonction de l'angle d'ouverture des zones de transitions $\theta= 37^\circ, 45^\circ, 90^\circ$. La structure étudiée et les paramètres d'initialisation du paquet d'ondes sont donnés en insert

Cette étude montre que les zones de transitions facilitent l'injection des porteurs dans la constriction en diminuant notablement les réflexions à l'entrée. Ceci est aussi confirmé ici par l'augmentation du maximum du taux de présence dans la constriction pour θ décroissant. Ces conclusions sont similaires à celles obtenues par la méthode de Monte-Carlo [13].

D'après ces relevés nous pouvons de plus déduire un temps de traversée de la constriction subpicoseconde, $\tau_T=0.25$ ps, indépendant de l'angle d'ouverture. Soulignons cependant que ce temps n'est pas caractéristique de la constriction et qu'il dépend essentiellement de la vitesse initiale à laquelle on injecte le paquet d'ondes.

4.1.2.4 - Filtre énergétique

Les états résonnants longitudinaux et la notion de filtrage énergétique peuvent être clairement mis en évidence en injectant un paquet d'ondes situé majoritairement sous l'énergie de seuil du premier mode propagatif de la constriction [16]. Ainsi pour $k_{x0}=1.32 \cdot 10^8 \text{ m}^{-1}$ et $k_{y0}=0$, pour un étalement spatial $\sigma=40 \text{ nm}$ ($\delta E \approx 300 \text{ meV}$), et pour une constriction de 40 nm de long et de 20 nm de large (les autres paramètres de simulation restant inchangés), on obtient le paquet d'ondes lors de son interaction avec la constriction à $t=1.875 \text{ ps}$, représenté figure 4.5a. On peut noter la réflexion importante du paquet à l'entrée et sa reconstruction progressive dans la zone de collection.

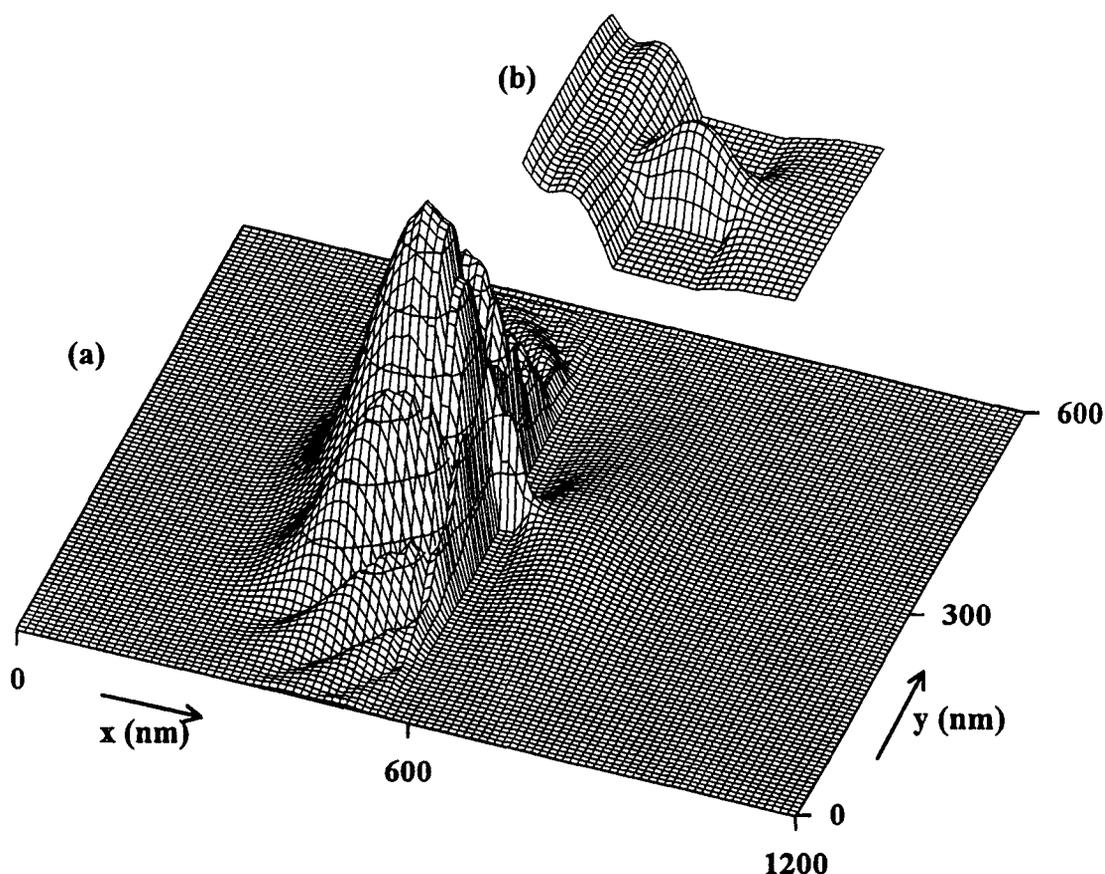


FIGURE 4.5 : Instantané du paquet d'ondes gaussien ($t=1.875 \text{ ps}$), injecté majoritairement sous le premier mode propagatif de la constriction, lors de son interaction avec la constriction : vue générale (a) et agrandissement sur la zone quantique (b).

La figure 4.5b montre un agrandissement du paquet dans la constriction où l'on observe bien une adaptation de la fonction d'onde dans les deux directions. Ceci est conforme à l'analyse statique des états résonnants longitudinaux avec une longueur effective dans la direction x supérieure à la zone de resserrement. En première approche, la répartition observée peut être comprise en effectuant à l'instant initial le produit de la dispersion énergétique du paquet d'ondes incident et du spectre de transmission (figure 4.3). On observe en effet que seule une faible partie du paquet sera transmise, la constriction jouant le rôle d'un filtre en énergie centré autour d'une énergie proche du premier maximum de transmission. Ainsi, on

peut expliquer par cette simple analyse la forte réflexion du paquet à l'entrée, ainsi que son adaptation sur la longueur de la constriction. Par cette initialisation sous le seuil de propagation, il est possible de restreindre à la queue de distribution les valeurs d'énergie effectivement transmises par la zone d'étranglement, qui agit alors comme un filtre d'énergie passe haut.

Afin d'obtenir des informations plus qualitatives portant sur la répartition énergétique des porteurs transmis, nous pouvons déterminer l'évolution du paquet d'ondes dans l'espace des k . Pour cela, nous calculons la transformée de Fourier du paquet exprimée par [17] :

$$F(k_x, k_y, t) = \frac{1}{2\pi} \iint \varphi(x, y, t) e^{-i(k_x x + k_y y)} dx dy \quad (4.21)$$

L'intégration, numériquement calculée par la méthode des trapèzes, peut être effectuée dans chaque zone distincte du système. Nous nous limitons ici à la zone de collection dont le module de la transformée de Fourier à l'instant $t=1.875$ ps est représenté figure 4.6. Ce dessin nous donne en sortie de la constriction la répartition en k_x et k_y du paquet d'ondes transmis. La pureté de la transformée de Fourier nous indique que la diffraction par la zone de resserrement se manifeste par une émission radiale. L'équation du cercle principal observé nous donne une valeur du vecteur d'onde k de l'ordre de $1.7 \cdot 10^8 \text{ m}^{-1}$, équivalente au premier maximum du spectre de transmission ($E=16.5 \text{ meV}$), montrant ainsi sans ambiguïté le rôle de filtre de la constriction [18]. Notons aussi que l'amplitude est maximale en $k_y=0$, et montre ensuite une dispersion vers les autres valeurs de k_y traduisant l'étalement du paquet d'ondes dans la zone de collection.

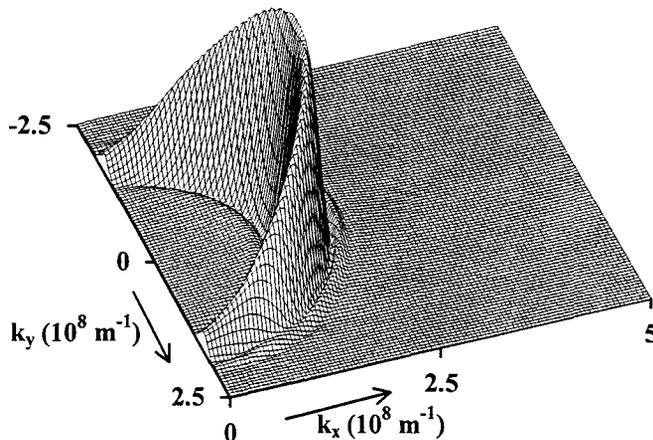


FIGURE 4.6 : Module de la transformée de Fourier du paquet d'onde transmis à travers la constriction à l'instant $t=1.875$ ps.

La pureté spectrale observée est le reflet direct de l'aspect résonnant du transfert d'un réservoir à l'autre, via la localisation momentanée des porteurs sur le niveau virtuel quasi-0D de la zone d'étranglement qui est induit par la présence des discontinuités en amont et en aval.

De plus, ceci est confirmé par le fait que cette répartition spectrale est indépendante de l'angle d'incidence du paquet d'ondes initial. Enfin, le second cercle d'amplitude bien moindre est quant à lui attribué au deuxième maximum du spectre de transmission au alentour de $E=24.2$ meV.

Les résultats précédents illustrent les possibilités offertes par les modèles numériques développés. Grâce à ces derniers, nous allons pouvoir nous intéresser à des structures plus complexes afin de mettre en évidence les fonctionnalités potentielles de composants à base de guides d'ondes électroniques.

4.2 - ELARGISSEMENT D'UN CANAL 1D

4.2.1 - Généralités - géométrie du dispositif

Il est possible de concevoir une multitude de structures présentant localement un élargissement de canal 1D (symétrique ou non, abrupte ou non...). Néanmoins dans tous les cas de figure, celui-ci s'apparente à une cavité résonante dans laquelle l'adaptation de la fonction d'onde aux dimensions de la cavité provoque une modification notable des parcours préférentiels des électrons : ceci se traduit par des évolutions prononcées du coefficient de transmission, donc de la conductance. L'intérêt de ces structures est alors relatif aux fonctions de l'électronique non linéaire. Nous allons analyser en détail les propriétés du stub électronique, dit simple, qui consiste en l'insertion d'un guide d'ondes électroniques de longueur finie perpendiculairement au canal 1D principal.

Comme le montre la figure 4.7, cette structure est caractérisée par trois dimensions : la largeur w du canal 1D principal, la longueur L_s du stub, et w_s sa largeur. Des structures plus complexes telles que le double stub ou la mise en cascade de stubs ne seront pas étudiées de manière aussi détaillée, mais évoquées ponctuellement pour leur capacité à réaliser des dispositifs électroniques à haute fonctionnalité tels que des convertisseurs analogique-numérique par exemple.

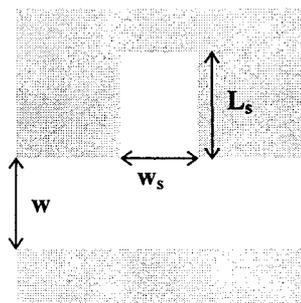


FIGURE 4.7 : Représentation schématique d'un stub électronique de largeur w_s et de longueur L_s . Les guides d'accès sont caractérisés par leur largeur w .

4.2.2 - Niveaux liés et quasi-liés

Avant de s'intéresser au transport électronique, nous allons par spectroscopie de la densité locale d'états analyser le stub électronique en termes d'états liés et quasi-liés. La présence de ces états dans un système 1D, ne présentant pas matériellement de barrières de potentiel de confinement supplémentaire, a été révélée par les travaux de Schult et al [19] dans une structure à base de guides d'ondes électroniques en forme de croix. Ces auteurs ont montré non seulement l'existence d'un niveau lié situé sous le premier mode transverse des canaux 1D, mais aussi la présence d'un niveau quasi-lié situé entre les deux premiers modes. Par ailleurs, il ont souligné que ces états se localisent à l'intersection des canaux 1D.

4.2.2.1 - Détermination

La dérivation de l'ensemble des états quantiques dans la structure est obtenue par l'évolution de la densité locale d'états en fonction de l'énergie. Cette densité est calculée par l'intégration de la probabilité de présence sur un domaine Ω , défini dans le cas présent par la branche du stub et son intersection avec le guide d'ondes principal :

$$D(E) = \iint_{\Omega} |\varphi(x, y, E)|^2 dx dy \quad (4.22)$$

La figure 4.8 représente l'évolution de la densité locale d'états $D(E)$ pour un stub de longueur $L_s=32$ nm et de largeur $w_s=20$ nm, inséré entre deux guides d'accès de largeur et de longueur 20 nm chacun. Quelque soit l'énergie, ce calcul suppose qu'une onde incidente (propagative ou évanescente) d'amplitude unitaire est présente à l'extrémité du canal d'entrée.

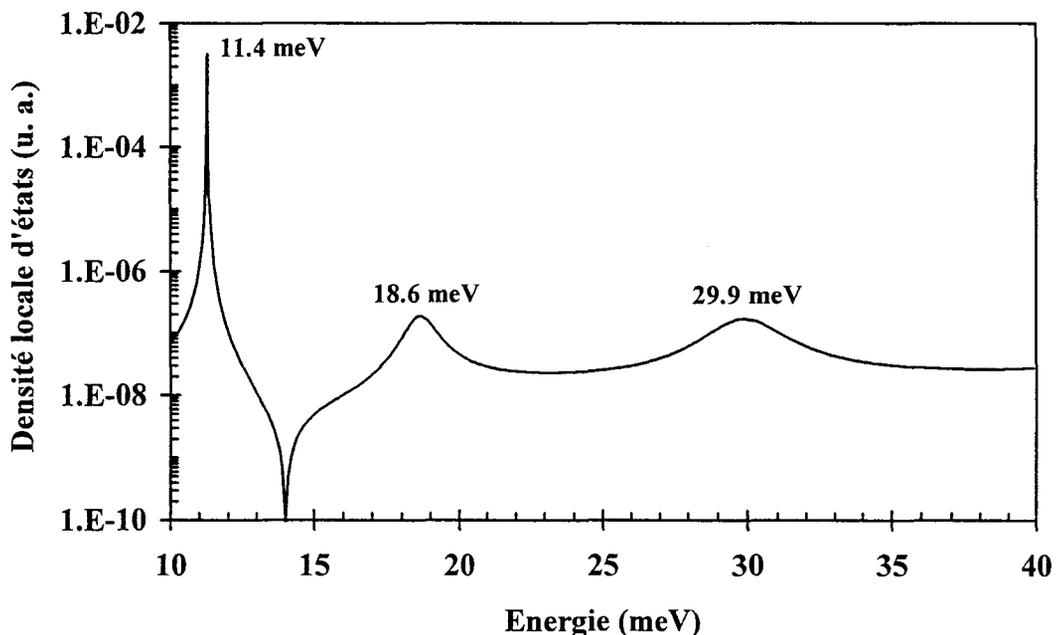


FIGURE 4.8 : Evolution de la densité locale d'états en fonction de l'énergie, calculée dans un stub de longueur 32 nm et de largeur 20 nm, inséré entre deux guides d'accès de 20 nm de large.

Le minimum situé à $E=14$ meV correspond au premier mode transverse du canal incident. Le couplage par mode évanescent à travers celui-ci permet de détecter un niveau lié à une énergie $E_0=11.4$ meV pour laquelle la densité locale d'états présente un pic fortement marqué. Deux autres maxima situés à des énergies supérieures au premier mode transverse, nous donnent deux niveaux quasi-liés : l'un à $E_1=18.6$ meV, et l'autre à $E_2=29.9$ meV. Il peut paraître surprenant de situer des états quasi-liés du système à des énergies où les ondes peuvent se propager librement le long du canal principal.

Afin de mieux comprendre ce phénomène, nous donnons sur la figure 4.9 les modules des fonctions d'ondes calculées pour les trois valeurs d'énergies : (a) $E_0=11.4$ meV, (b) $E_1=18.6$ meV, et (c) $E_2=29.9$ meV. La figure 4.9a montre bien la localisation de l'état quantique à l'intersection du stub et du canal principal où un maximum de probabilité de présence est observé. Pour cette énergie, le premier mode transverse des canaux d'accès joue le rôle d'une barrière de potentiel dans laquelle l'onde est évanescente. Ceci est confirmé par l'évolution de la probabilité de présence qui s'atténue exponentiellement dans chaque canal.

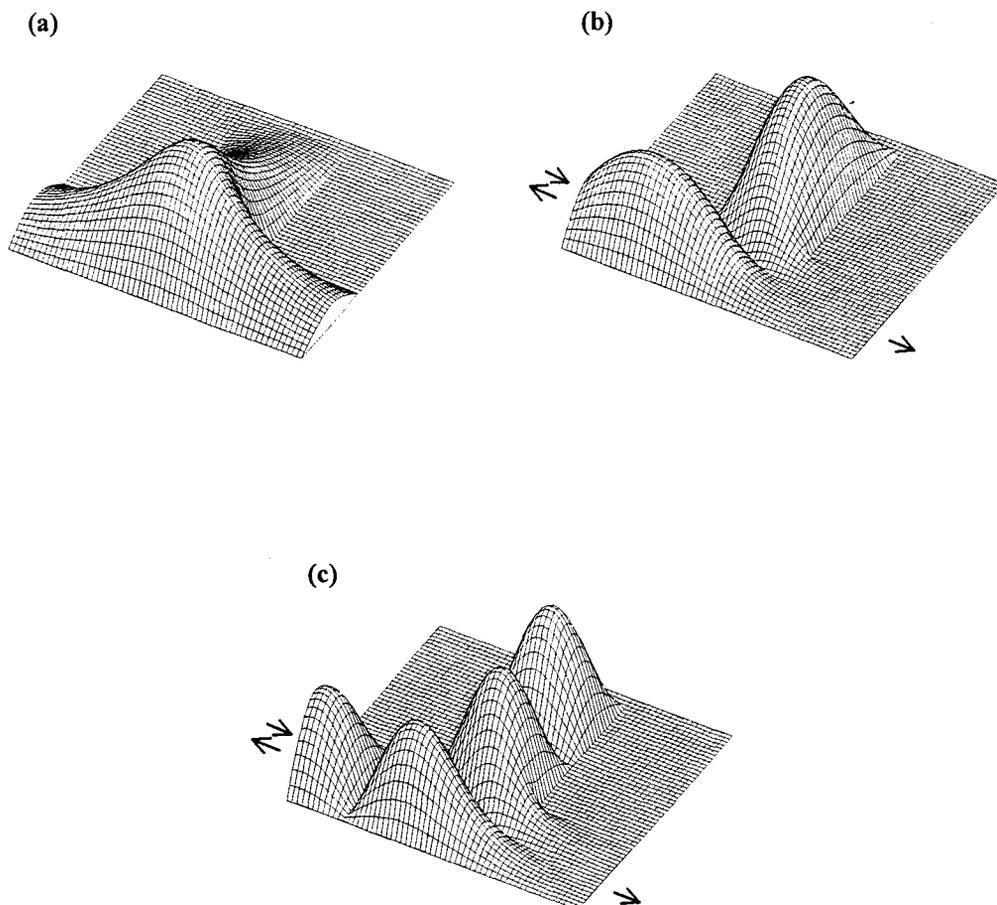


FIGURE 4.9 : Répartitions de la fonction d'onde dans un stub électronique de longueur 32 nm et de 20 nm de large, inséré entre deux guides d'accès de 20 nm de large pour des énergies correspondant au niveau lié (a/ $E=11.4$ meV), et aux deux premiers niveaux quasi-liés (b/ $E=18.6$ meV, et c/ $E=29.9$ meV).

Pour les énergies des niveaux quasi-liés, la probabilité de présence présente un noeud à l'entrée du canal de sortie qui s'apparente à l'évolution type du premier mode excité transverse des canaux d'accès. Par l'orthogonalité des modes, l'onde ne peut pas se propager sur le premier mode : le deuxième mode transverse qui est situé à une énergie de 56 meV joue à son tour le rôle de barrière de potentiel, et l'onde est évanescence le long du canal de sortie. C'est pourquoi ces énergies correspondent à des états du système qui sont quasi-liés. De plus comme le montre clairement la figure 4.9c, on obtient une onde stationnaire dans le canal d'entrée, caractérisée par un passage à 0 de $|\varphi|$, significatif d'une réflexion totale de l'onde incidente. L'évolution de $|\varphi|$ dans le canal de sortie montre que les niveaux quasi-liés pourront aussi être déterminés sur le spectre de transmission (réflexion) qui vaudra 0 (1) pour chaque niveau quasi-lié.

4.2.2.2 - Influence de la longueur du stub

Nous avons calculé les énergies des cinq premiers niveaux quasi-liés et du niveau lié en fonction de la longueur du stub, l'ensemble des autres dimensions de la structure étant égales à 20 nm. Comme le montre la figure 4.10, les niveaux quasi-liés apparaissent au fur et à mesure que le stub s'allonge, à une énergie voisine du deuxième mode transverse de la branche latérale (56 meV), et tous tendent à rejoindre le premier mode transverse. Dans la limite où le stub est remplacé par un canal ouvert ($L_s \rightarrow \infty$) de même largeur, ces niveaux se confondent avec le premier mode transverse du stub, et donc disparaissent.

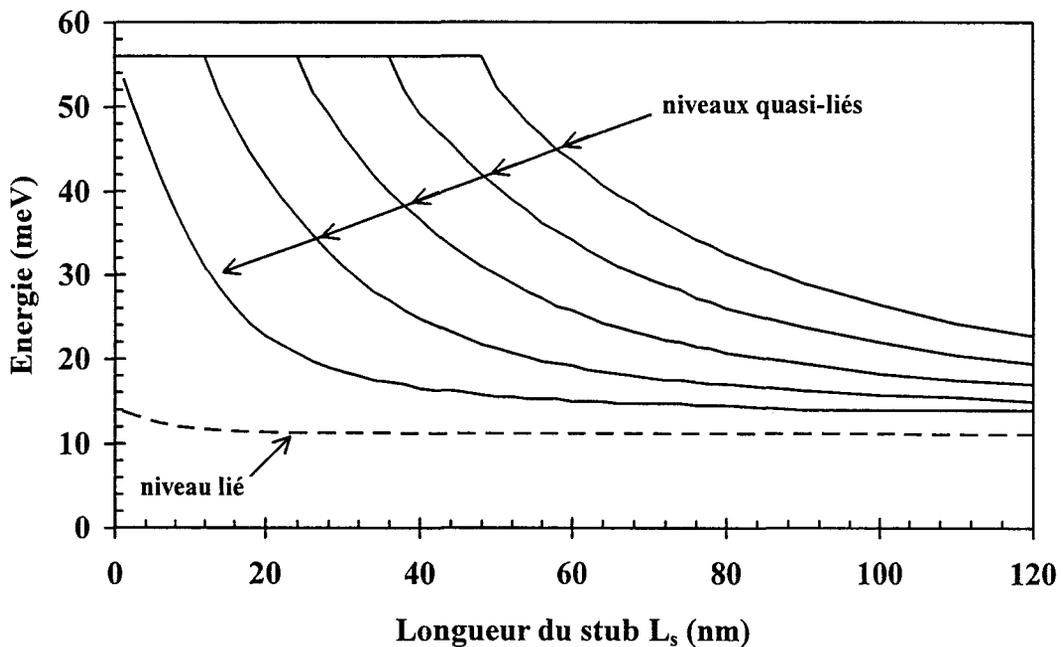


FIGURE 4.10 : Evolution du niveau lié et des cinq premiers niveaux quasi-liés en fonction de la longueur L_s d'un stub de largeur 20 nm inséré entre deux guides d'accès de 20 nm de large.

Par contre, l'unique niveau lié existe quelque soit la longueur du stub ($L_s \neq 0$), et son énergie est proche de celle du premier mode transverse du guide principal pour de faibles longueurs de stub - à la limite pour $L_s \rightarrow 0$, un guide uniforme ne possède pas de niveau lié -. Pour les valeurs plus élevées de L_s , l'énergie du niveau lié tend vers une valeur finie, montrant

caractéristique de la présence d'états. Suivant les dimensions (L_s , w_s) respectives des stubs mis en cascade, nous verrons dans le paragraphe 4.2.3.3 qu'une véritable ingénierie de la conductance devient alors possible [20].

4.2.3 - Conductance

Les évolutions de la transmission (ou de la conductance) peuvent être envisagées de deux manières différentes : en fonction de l'énergie incidente pour une géométrie de la structure fixée, ou en fonction d'une dimension caractéristique de la structure à une énergie d'injection E_F donnée. Remarquons que ce dernier type d'évolution se rapproche davantage des conditions expérimentales où la conductance est modulée par une tension appliquée sur les grilles déposées en surface du composant, lorsqu'une faible polarisation est appliquée entre les canaux d'entrée/sortie.

Une étude paramétrée relativement exhaustive a déjà été publiée dans la littérature [20]. Nous reproduisons ici un certain nombre de résultats obtenus par notre méthode de traitement et les expliquons brièvement. Dans un premier temps, nous allons nous intéresser à l'importance relative des dimensions L_s et w_s du stub sur l'évolution de la conductance, lorsque la largeur w et l'énergie E_F sont fixées.

4.2.3.1 - Influence des paramètres géométriques

Pour cela, nous avons calculé la conductance en utilisant le modèle statique du paragraphe 4.1.1. Dans ce calcul, les transitions 2D-1D entre les contacts et la structure ont été ignorées, et nous avons fixé E_F de manière à toujours se placer dans le cas d'une propagation monomode dans le canal incident.

Grâce à la règle d'échelles énoncée précédemment, nous avons représenté figure 4.12 les contours de l'évolution de la conductance, sous forme d'abaque, suivant la longueur L_s et la largeur w_s du stub. Les paramètres de simulation en variables réduites sont les suivants : la largeur du guide principal $w=\alpha$ nm, et $E_F=15.6/\alpha^2$ eV ; ce qui correspond à un niveau de Fermi situé à $10/\alpha^2$ eV au dessus du premier mode propagatif du canal incident. A titre d'exemple, si on considère un stub de dimension $w=20$ nm ($\alpha=20$), alors la figure 4.12 correspond à l'évolution de la conductance obtenue à $E_F=39$ meV pour L_s et w_s inférieurs à 60 nm. Suivant la valeur w_s , on peut discerner trois zones de fonctionnement distinctes :

- La première pour $w_s < 0.6\alpha$ nm ($w_s < 12$ nm pour $w=20$ nm) est caractérisée par une transmission unitaire. Cela signifie que la longueur du stub L_s n'a aucune influence sur la conductance. Ceci s'explique facilement en remarquant que, dans cette gamme de largeurs, l'énergie du premier mode dans le stub se situe au dessus de E_F . Dans un tel cas, aucun phénomène d'interférence n'est introduit par le stub, et la structure se comporte comme un fil quantique simple.
- Pour la deuxième zone correspondant à 0.6α nm $\leq w_s \leq 1.2\alpha$ nm (12 nm $\leq w_s \leq 24$ nm pour $\alpha=20$), le premier mode transverse dans le stub devient propagatif et l'évolution de la conductance révèle une périodicité suivant la longueur L_s . Cette évolution de conductance traduisant l'adaptation

de n demi-longueurs d'onde sur la longueur du stub L_s , est observée que pour une propagation monomode dans la branche du stub.

- Au delà pour des largeurs w_s supérieures ($w_s > 2\alpha$ nm), la propagation multimode dans le stub ne permet plus d'observer une périodicité unique de la conductance. En effet dans cette configuration, les ondes électroniques se propagent sur les différents modes du stub à des vitesses différentes, les interférences inter-modes rendent alors plus complexe l'évolution de la conductance suivant L_s .

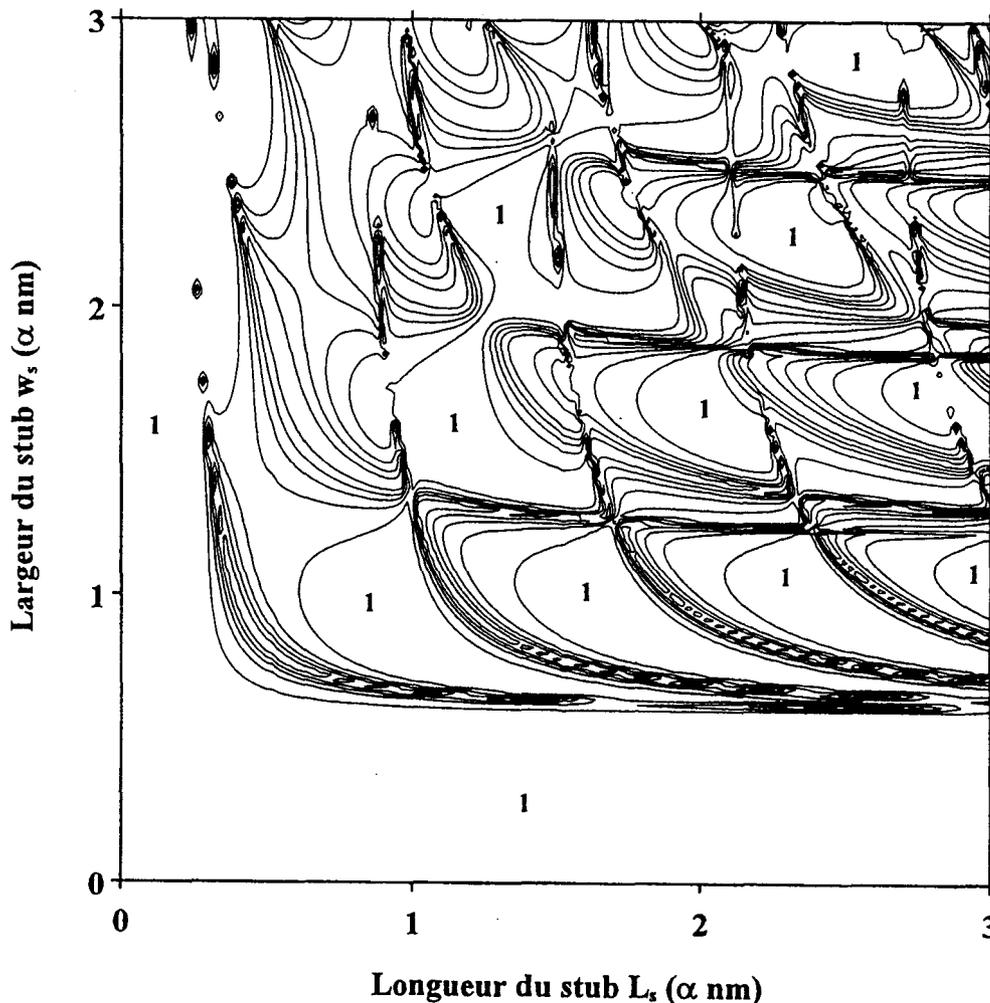


FIGURE 4.12 : Abaque de conductance en fonction de la largeur w_s et de la longueur L_s d'un stub inséré entre deux guides d'accès de α nm de large. L'énergie d'injection est $E_F = 15.6/\alpha^2$ eV. La conductance évolue de 0 à $1 \cdot 2q^2/h$, et les contours de conductance sont donnés à 0.1, 0.3, 0.5, 0.7, et $0.9 \cdot 2q^2/h$.

Comme souligné précédemment, l'évolution périodique de la conductance et son passage par zéro sont caractéristiques des niveaux quasi-liés de la zone quasi-0D constituée par le stub et son intersection avec le guide d'ondes principal. Cependant, l'observation expérimentale d'une telle périodicité implique une dimension transverse du stub comparable à celle du canal incident pour préserver une propagation monomode dans la structure. En

particulier, nous allons considérer à présent le cas où la largeur du stub est identique à celle du canal incident ($w=w_s$).

Nous avons représenté figure 4.13 les contours de l'évolution de la conductance, sous forme d'abaque, en fonction la longueur L_s du stub et de l'énergie d'injection E_F . L'énergie minimale considérée ($E_F=6.6/\alpha^2$ eV) correspond à une énergie située à $1/\alpha^2$ eV au dessus du premier mode propagatif dans le canal incident de largeur $w=w_s=\alpha$ nm, et nous nous limitons ici au domaine énergétique régissant une propagation monomode dans toute la structure.

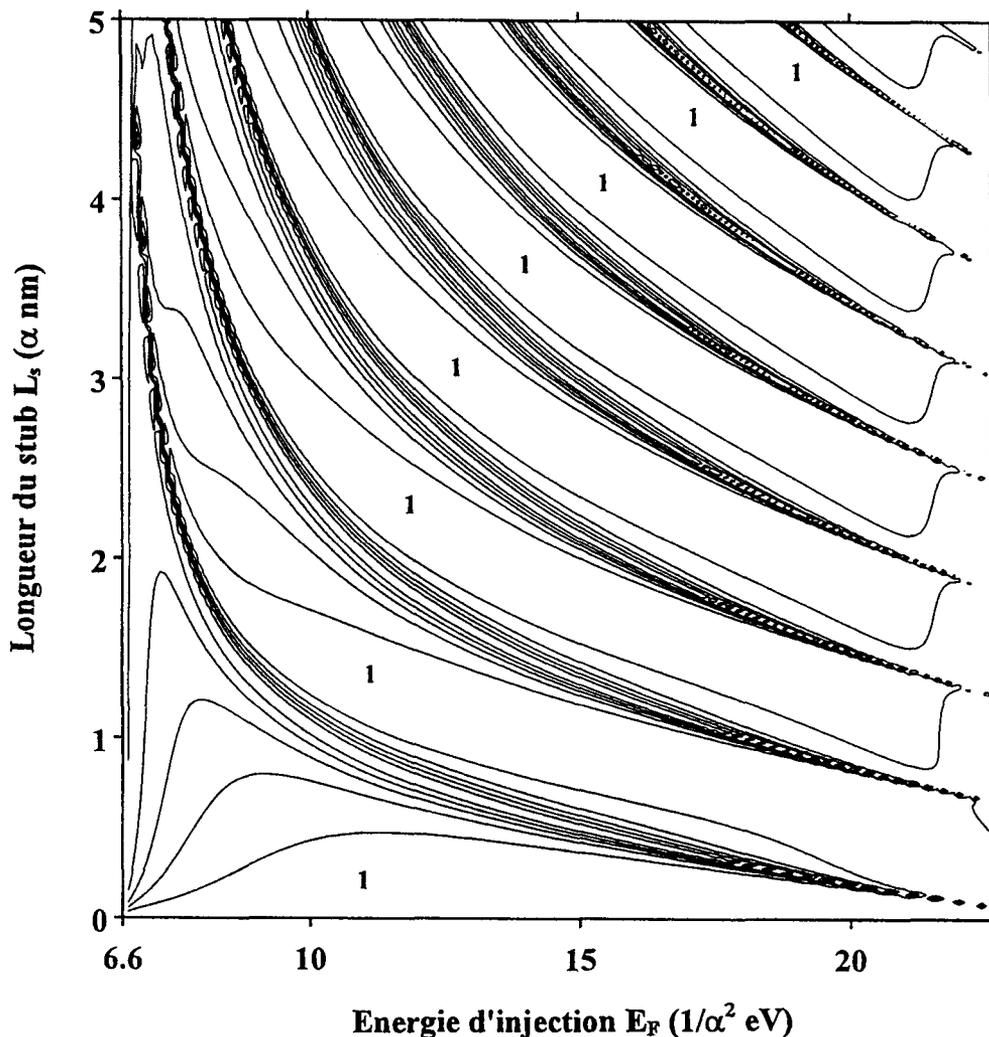


FIGURE 4.13 : Abaque de conductance en fonction de la longueur L_s d'un stub et de l'énergie d'injection E_F des porteurs. La largeur du stub et du canal principal sont identiques $w=w_s=\alpha$ nm. La conductance évolue de 0 à $1*2q^2/h$, et les contours de conductance sont donnés à 0.1, 0.3, 0.5, 0.7, et 0.9 $2q^2/h$.

On observe à nouveau clairement une conductance périodique suivant la longueur du stub dont la période diminue avec E_F croissant. En effet pour une énergie élevée, la longueur d'onde longitudinale dans le stub, qui dans le cas présent est identique à celle du canal incident, diminue. Ainsi pour une longueur L_s constante, un plus grand nombre de demi-longueurs d'onde peuvent s'adapter sur la longueur du stub pour les énergies plus importantes, et il en résulte une période plus faible. Enfin pour les énergies s'approchant du deuxième

mode transverse des guides d'ondes, les variations de la conductance séparant des plateaux de conductance proche de $2q^2/h$ sont plus abruptes. On cherchera donc en général à s'écarter de cette zone de distorsion, en choisissant une énergie E_F bien inférieure à l'énergie du deuxième mode transverse des guides.

Ces caractéristiques sont résumées sur la figure 4.14, où nous avons reporté les évolutions de la conductance en fonction de la longueur du stub pour trois énergies significatives, à savoir : (a) $E_F=6.6/\alpha^2$ eV, (b) $13.1/\alpha^2$ eV, et (c) $20.4/\alpha^2$ eV. La période de la conductance apparaît bien inversement proportionnelle à l'écart entre E_F et l'énergie correspondant au premier mode propagatif de la structure. De plus son allure dépend de la proximité d'apparition d'un mode propagatif supérieur. D'évolution régulière entre 0 et $2q^2/h$ pour une énergie située au milieu des deux premiers modes du canal incident (courbe b), une distorsion importante s'observe dans les deux autres cas. Juste au dessus du premier mode (courbe a), la conductance présente une évolution douce entre $2q^2/h$ et 0 avant de reprendre sa valeur initiale, le système présentant en moyenne une réflexion importante dans le canal d'entrée. A l'inverse pour une énergie proche du deuxième mode, le flux électronique est majoritairement transmis (courbe c), avec des plateaux de conductance proche de $2q^2/h$ séparés par des transitions abruptes vers 0 aux énergies caractéristiques des niveaux quasi-liés de la structure.

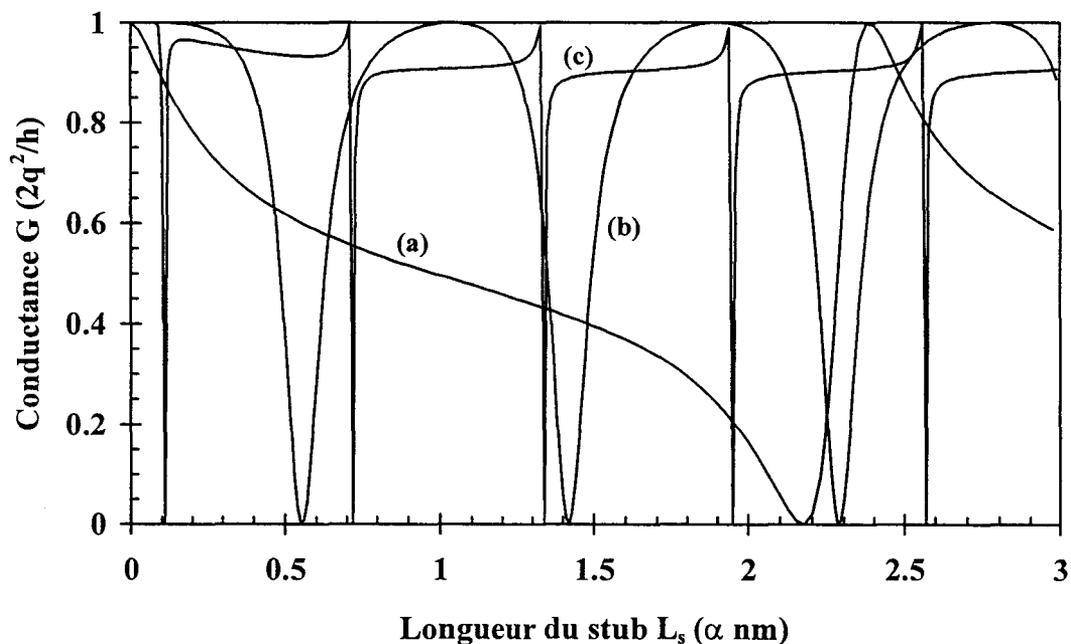


FIGURE 4.14 : Evolutions de la conductance d'un stub en fonction de sa longueur L_s calculées pour une injection des porteurs à une énergie $E_F=6.6/\alpha^2$ eV (a), $13.1/\alpha^2$ eV (b), $20.4/\alpha^2$ eV (c). La largeur du stub et des canaux d'accès est identique $w=w_s=\alpha$ nm.

4.2.3.2 - Influence de la température

En pratique pour une température finie, à l'étalement des fonctions de distributions des porteurs dans les contacts correspond un moyennage de la conductance autour de E_F . Celui-ci

est introduit en considérant un transport balistique qui s'effectue dans une gamme d'énergie de l'ordre de $4k_B T$ autour de E_F , alors qu'à $T=0$ K, le transport est monoénergétique. Dans ces conditions, on exprime la conductance par [21] :

$$G(E_F, T) = \int_0^{\infty} G(E, T=0) \left\{ -\frac{\partial f(E)}{\partial E} \right\} dE \quad (4.24)$$

avec $f(E) = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E - E_F}{k_B T}\right)}$ la fonction de Fermi-Dirac.

On peut ainsi montrer que si la périodicité de la conductance est conservée à 4.2 K, ses minima (nuls à $T=0$ K) augmentent avec la température ; cet effet étant d'autant plus prononcé que la longueur du stub est grande [21]. Ceci se conçoit aisément dans la mesure où le zéro de conductance à $T=0$ K correspond à une énergie propre du système. La zone de conductance nulle est donc très étroite, et toute intégration autour de cette énergie provoque une augmentation non négligeable des minima de conductance à température finie. A l'opposé les plateaux de conductance à $2q^2/h$ étant à $T=0$ K plus larges, la diminution de la conductance sous $2q^2/h$ n'interviendra qu'à plus hautes températures. La persistance d'une modulation marquée de la conductance, à température croissante, passe donc par une optimisation de la structure et par un élargissement du domaine d'existence d'une conductance quasi-nulle. L'une des solutions possibles consiste à mettre en cascade plusieurs stubs électroniques.

4.2.3.3 - Mise en cascade de stubs

La mise en cascade de stubs a été initialement étudiée par Sols et al [20] qui ont dans un premier temps suggéré d'utiliser des stubs de longueurs différentes. De prime abord, on peut considérer que la conductance globale de la structure peut être déduite par le simple produit des conductances de chaque stub. Dans ce cas, une conductance nulle pour un stub suffit à rendre la conductance globale nulle. Ainsi en faisant varier simultanément les longueurs de tous les stubs, légèrement différentes les unes des autres pour que les minima de conductances élémentaires soient décalés, on observe un élargissement de la zone de conductance quasi-nulle. Par ailleurs dans les canaux 1D de liaison entre deux stubs consécutifs, les ondes subissent de multiples réflexions. Ces réflexions se traduisent alors par l'apparition de résonances dans la zone de conductance globale quasi-nulle.

D'autres auteurs ont proposé la structure double stub asymétrique pour rendre symétrique l'évolution de la conductance [21]. La structure schématisée figure 4.11b se compose de deux stubs de longueurs différentes situés de part et d'autre du guide d'onde principal. La grandeur caractéristique est ici la distance (d) qui sépare le centre de l'élargissement correspondant au double stub ($2L_s$) et le centre du guide principal. En déplaçant transversalement la position du stub relativement au canal incident, la conductance calculée à $T=4.2$ K présente des ondulations quasi-sinusoïdales en fonction de d . Bien que l'amplitude de ces oscillations reste faible, les propriétés de symétrie ont permis à ces auteurs d'envisager la conception de convertisseur analogique-numérique.

Pour illustrer la mise en cascade de stubs, considérons la structure représentée sur la figure 4.11a, composée de trois stubs de même largeur, identique à celle du canal incident $w_s=w=10$ nm, et dont les longueurs pour deux stubs consécutifs séparés de $L=9.5$ nm sont différentes de $\Delta L_s=1$ nm.

Pour cette configuration, nous avons représenté l'évolution de conductance sur la figure 4.15 pour $E_F=140$ meV en fonction de la plus petite longueur de stub L_s . Les résonances dues aux réflexions dans les canaux de liaison des stubs sont apparentes sur les plateaux de conductance nulle qui s'étendent maintenant sur une plage de longueur de 2.3 nm. En outre, on notera un rapport cyclique de la conductance de l'ordre de 60% alors qu'il était de 94 % dans le cas du stub simple.

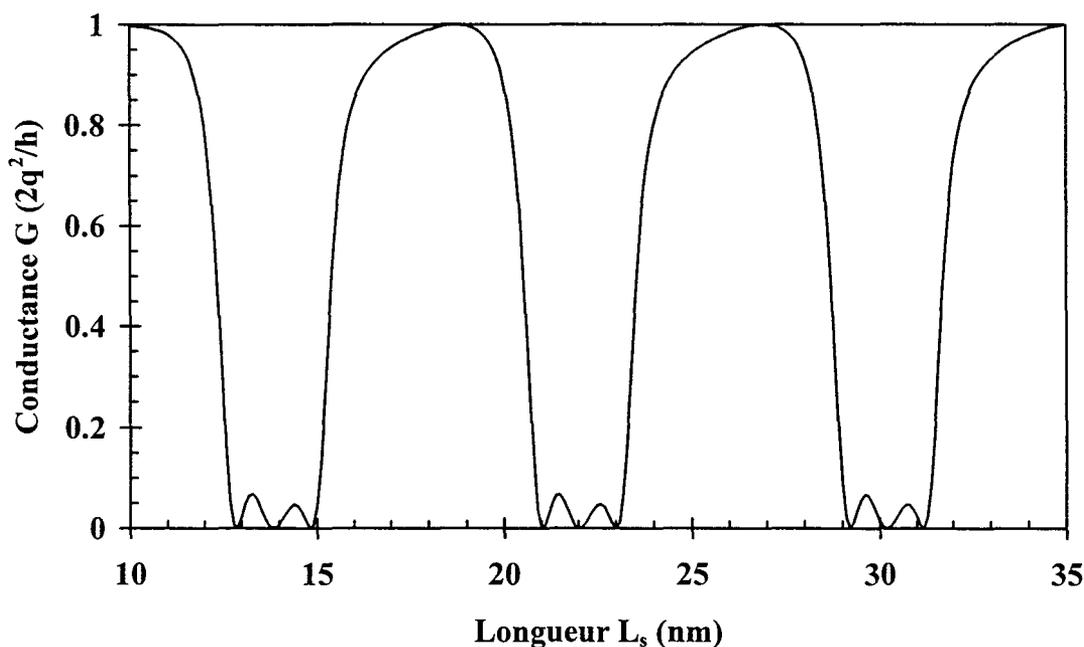


FIGURE 4.15 : Evolution de la conductance d'une structure triple stub en fonction de la plus petite longueur de stub, calculée pour une énergie d'injection de 140 meV. Les stubs de largeur 10 nm sont séparés les uns des autres d'une distance $L=9.5$ nm, les longueurs de chaque stub sont différentes de $\Delta L_s=1$ nm, et le canal incident à une largeur $w=10$ nm.

4.2.4 - Conductance différentielle négative

Dans le cas du stub simple un fonctionnement de type "transistor" pour lequel un régime de conductance différentielle négative peut être mis en évidence. Nous avons jusqu'à présent supposé une injection monoénergétique des porteurs dans la structure, obtenue pour de faibles tensions de polarisation (V_p) entre les contacts d'entrée/sortie. Ici, nous allons considérer des tensions plus élevées pour lesquelles on cherchera à déterminer le courant transporté dans une bande d'énergie qV_p située sous le niveau de Fermi de l'émetteur.

4.2.4.1 - Calcul du courant

Pour une température finie, le courant pour une tension V_p est donnée par [8] :

$$I(V_p) = \frac{2q}{h} \int_0^\infty \{f(E) - f(E + qV_p)\} T(E, V_p) dE \quad (4.25)$$

où $f(E)$ est la fonction de Fermi-Dirac. Asymptotiquement pour une température nulle l'expression du courant se réduit simplement à :

$$I(V_p) = \frac{2q}{h} \int_{E_F - qV_p}^{E_F} T(E, V_p) dE \quad (4.26)$$

Nous devons donc introduire la variation de potentiel à travers la structure pour en déduire le spectre de transmission $T(E, V_p)$ à la tension V_p . Celui-ci est calculé par le biais du modèle numérique développé pour l'analyse statique, dans lequel la zone de décroissance de l'énergie potentielle est décomposée en différentes sections où celle-ci est prise constante. Comme pour les jonctions, on impose la continuité de la fonction d'onde et de sa dérivée première entre deux sections voisines caractérisées ici par une modification du vecteur d'onde longitudinal.

Dans le cas présent, la décroissance linéaire de l'énergie potentielle est limitée sur la largeur du stub, le canal incident étant fixé au potentiel de référence, et le canal de sortie à V_p . Nous découpons le stub en dix sections (figure 4.16), ce qui donne une variation du potentiel dans la structure en marche d'escalier. Pour la gamme de tensions envisagées, ce nombre de sections semble être un bon compromis entre une bonne description du potentiel et un temps de calcul raisonnable. Par ailleurs pour conserver une propagation monomode le long de la structure, on impose une largeur du stub identique à celle du canal incident.

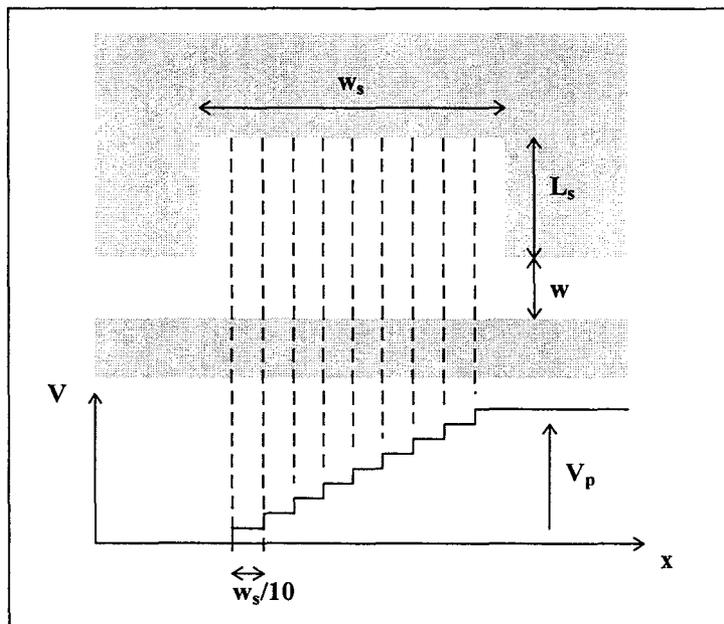


FIGURE 4.16 : Décomposition de la structure pour l'introduction d'une polarisation appliquée sur un stub électronique. Ici, on découpe la zone centrale en dix sections de guides d'ondes uniformes à potentiel constant.

4.2.4.2 - Transmission sous polarisation

Nous considérons la structure composée d'un guide d'ondes principal de largeur $w=20$ nm, et d'un stub de largeur et de longueur identiques $w_s=L_s=20$ nm.

Le spectre de transmission, calculé en fonction du niveau de Fermi E_F d'émetteur et de la tension de polarisation V_p est représenté figure 4.17. On remarque qu'à mesure que la tension de polarisation augmente, les évolutions de la transmission sont globalement décalées vers les basses énergies. En effet, l'augmentation de V_p induit un abaissement des énergies propres (niveaux liés et quasi-liés) du stub où se produisent les interférences des ondes électroniques. Cette effet provoque une diminution en amplitude et en énergie du premier maximum de transmission qui est ainsi repoussé vers le premier mode propagatif, et disparaît pour une tension $V_p=17$ mV.

Globalement, ce tracé montre que la transmission subit un décalage en énergie correspondant à la moitié de la polarisation V_p , signifiant que les phénomènes d'interférences sont principalement liés à l'énergie potentielle située au centre du stub. Nous allons maintenant voir que l'évolution de ce premier maximum de transmission permet d'obtenir une zone de conductance différentielle négative dans la caractéristique de conduction du composant.

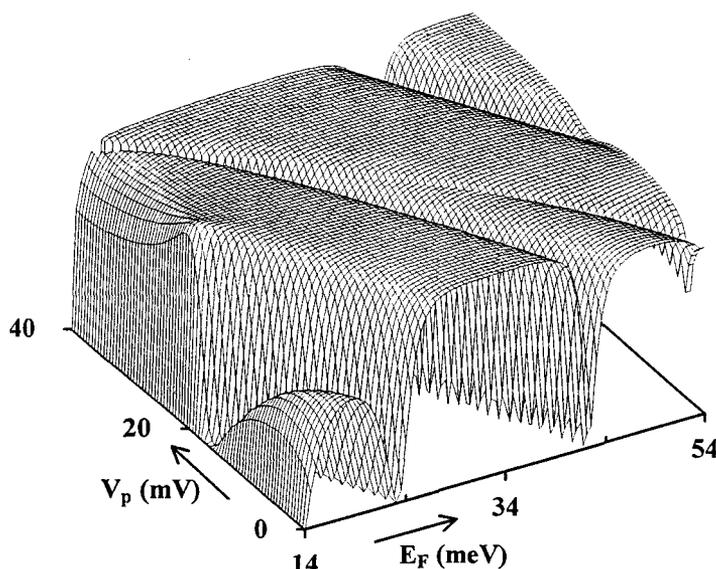


FIGURE 4.17 : Evolution du coefficient de transmission en fonction de l'énergie E_F d'injection des porteurs et de la tension de polarisation V_p appliquée aux bornes d'un stub de 20 nm de long et de large, inséré entre deux guides d'accès de largeur $w=20$ nm.

4.2.4.3 - Caractéristique de conduction

Sordan et al [22] ont montré que la caractéristique de conduction du stub électronique peut présenter sous certaines conditions une zone de conductance différentielle négative semblable à celle observée pour la diode à effet tunnel résonant. Cette zone de conductance différentielle négative est provoquée par la diminution, puis la disparition, du premier maximum de transmission. Intuitivement on peut alors estimer que, plus ce maximum est

important et large en énergie, plus le courant pic sera important. Par ailleurs, plus la gamme d'énergie de transmission nulle est large plus faible sera le courant vallée.

Dans le but d'optimiser le rapport des courants pic sur vallée, on peut utiliser l'abaque de conductance représenté figure 4.13 pour fixer les dimensions d'une structure optimale. En effet, cet abaque nous donne (au coefficient $2q^2/h$ près) l'évolution de la transmission calculée dans un stub non polarisé, dont la largeur est identique à celle du canal incident, en fonction de sa longueur L_s et de l'énergie d'injection E_F . L'optimisation suivant les paramètres définis précédemment nous donne une longueur de stub $L_s=0.65\alpha$ nm pour laquelle on obtient d'une part une bande d'énergie où la transmission est inférieure à 10% d'environ $0.6/\alpha^2$ eV, et d'autre part un premier maximum de transmission de l'ordre de 80%. Ainsi en fixant les largeurs du guide principal et du stub à 20 nm, nous obtenons pour une longueur de stub $L_s=13$ nm un élargissement du minimum de transmission de 1.5 meV ($T<0.1$) autour de 29.5 meV.

L'évolution du courant est représentée figure 4.18 en fonction de la tension de polarisation V_p et de l'énergie d'injection des porteurs E_F . Pour une énergie d'injection E_F donnée inférieure à 24 meV, le domaine énergétique d'intégration du courant augmente quand la tension de polarisation croît. Ainsi, le courant augmente pour atteindre une valeur maximale I_p en $V_p=E_F-E_{th}$, avec $E_{th}=14$ meV correspondant au premier mode transverse dans le canal incident. Lorsque V_p augmente davantage, l'intervalle d'intégration reste inchangé car le coefficient de transmission est nul sous le premier mode transverse du canal principal. Le courant diminue alors progressivement puisque globalement le premier maximum de la transmission s'affaiblit à V_p croissant. On voit donc apparaître une conductance différentielle négative. Ensuite, le courant minimum est atteint lorsque la tension V_p positionne le premier point de transmission nulle sous l'énergie d'injection E_F . La croissance du courant pic avec E_F provient de la compensation de l'élargissement du domaine d'intégration du courant par la diminution du coefficient de transmission à V_p croissant. Pour des énergies d'injection $E_F>24$ meV, la décroissance de la transmission n'est plus compensée par l'élargissement du domaine d'intégration, et la zone de conductance différentielle négative disparaît.

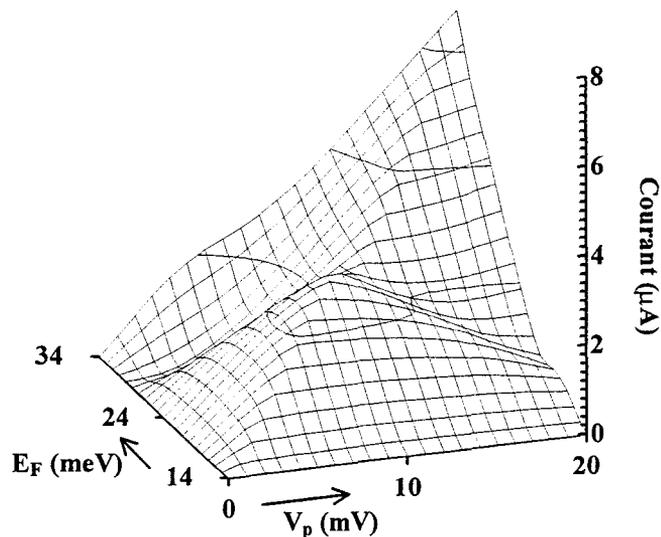


FIGURE 4.18 : Evolution du courant de conduction en fonction de l'énergie E_F d'injection des porteurs et de la tension de polarisation V_p . La largeur du guide principal et du stub est 20 nm, et le stub est long de 13 nm.

Le meilleur rapport de courants pic sur vallée est obtenu pour une énergie d'injection $E_F=22$ meV. La caractéristique de conduction correspondante, reportée figure 4.19, nous donne des courants pic (I_p) et vallée (I_v) respectivement de $2.54\mu\text{A}$ et $1.16\mu\text{A}$. Le rapport I_p/I_v est donc de 2.2:1 pour un domaine d'existence de la conductance différentielle négative de 10 mV.

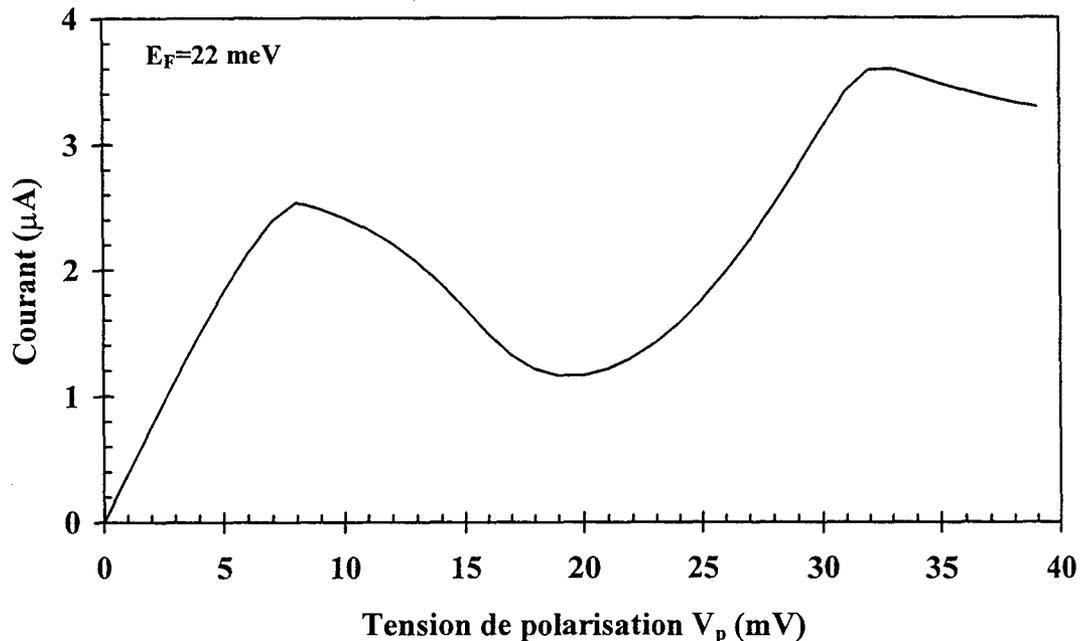


FIGURE 4.19 : Caractéristique de conduction optimale tirée de la figure 1.18 pour $E_F=22$ meV.

De prime abord dans le cadre de cette approche simplifiée de la description de la polarisation, les résultats obtenus apparaissent insuffisants pour espérer une persistance de l'effet de conductance différentielle négative à température finie. En fait, il ressort d'un certain nombre d'études qu'il est préférable pour obtenir des effets plus marqués de se baser sur l'existence dans ces structures d'un niveau lié plutôt que sur un niveau quasi-lié (transmission nulle) comme ci-dessus. Ceci nécessite néanmoins de prendre en compte dans le calcul les réservoirs d'électrons ainsi que les canaux d'accès qui peuvent eux aussi, comme la cavité, supporter des variations de potentiel non négligeables.

Citons à titre d'exemple les travaux de la référence [8] où un rapport de courant pic sur vallée de 80:1 à $T=0$ K est obtenu, ainsi que la persistance de l'effet de conductance différentielle négative jusqu'à $T=80$ K. Dans ce cas la zone active est une cavité résonante (équivalente à un double stub symétrique, figure 4.11b avec $d=0$) séparée des réservoirs d'électrons par deux canaux 1D (constriction). Le couplage entre les états propres de la cavité et les états de l'émetteur et du collecteur se fait alors par effet tunnel à travers les canaux d'accès sous l'énergie du premier mode transverse. L'existence du niveau lié au croisement du guide central et du stub, démontrée précédemment, permet d'envisager un mode de fonctionnement équivalent à celui d'une diode à effet tunnel résonant.

Il apparaît néanmoins que la description correcte de ces effets implique la connaissance de la répartition des charges au sein de la structure. En effet sous certaines conditions, les variations de potentiel ont lieu plutôt dans les canaux d'accès que dans la cavité résonnante [8]. Ces effets induits par la réaction de charge d'espace sortent du cadre de ce travail et nécessitent le développement d'outils de simulation incluant un couplage avec l'équation de Poisson.

4.2.5 - Etude en régime transitoire

Pour conclure ce passage en revue des différentes applications potentielles du stub électronique, nous allons nous intéresser à ses propriétés de commutation. Cette étude est originale [23] sur un sujet relativement peu traité dans la littérature compte tenu de la difficulté de résoudre l'équation de Schrödinger à deux dimensions dépendante du temps en injection continue.

Par ajustement de la longueur du stub, on peut moduler la résistance du système de $12.9 \text{ k}\Omega$ ($G=2q^2/h$) à l'infini ($G=0$). Bien que la valeur minimale de la résistance soit élevée, on peut envisager l'utilisation du stub comme interrupteur électronique commandé en tension. Nous nous proposons d'en étudier le fonctionnement transitoire, et en particulier le passage circuit ouvert - circuit fermé.

4.2.5.1 - Injection continue

Pour déterminer l'évolution de la conductance dans le temps, nous cherchons à résoudre l'équation de Schrödinger à deux dimensions dépendante du temps (équation 4.13), dans l'hypothèse d'une injection continue de porteurs. Cela signifie que globalement les paramètres extérieurs au stub sont indépendants du temps, et qu'en particulier le nombre d'électrons dans les contacts 2D, et donc le niveau de Fermi E_F , est constant. Nous resterons aussi dans les limites de validité de la relation de Landauer-Büttiker exprimant la conductance, c'est à dire une température nulle et une faible polarisation de la structure. De plus, nous nous limiterons à un transport monomode dans les canaux d'accès. Nous réutilisons ici la méthode de résolution présentée dans le paragraphe 4.1.2.1 pour l'étude de la propagation d'un paquet d'ondes gaussien. Cependant nous modifions l'écriture des conditions aux limites du domaine de simulation pour tenir compte de l'injection continue des porteurs.

Pour les conditions aux limites absorbantes, plusieurs méthodes présentant différents degrés de complexité peuvent être rencontrées [24][25]. Pour notre part, nous avons choisi d'étendre la procédure développée par Mains et al [26] pour étudier les caractéristiques temporelles des diodes à effet tunnel résonnant. Il s'agit d'un traitement numérique semi-implicite qui considère des interpolations linéaires des amplitudes de l'onde incidente à l'entrée, et de l'onde transmise à l'autre extrémité de la structure (Annexe C).

D'un point de vue pratique, la fonction d'onde est initialisée par l'état stationnaire calculé par la méthode du raccordement de modes pour une énergie d'injection E_F et une géométrie données. Les variations temporelles de la fonction d'onde, consécutives à une modification de géométrie du dispositif, sont calculées itérativement par la méthode de Gauss-Seidel aux

points intérieurs de la structure par l'équation 4.18, et aux extrémités ouvertes, en $j=1$ et $j=N$, par :

$$(1+A_e)\varphi_{1,k}^{n+1} - B_e\varphi_{2,k}^{n+1} = (C-A_e)\varphi_{1,k}^n + B_e\varphi_{2,k}^n + A(1+C)D_e$$

et

$$(1+A_s)\varphi_{N,k}^{n+1} - B_s\varphi_{N-1,k}^{n+1} = (C-A_s)\varphi_{N,k}^n + B_s\varphi_{N-1,k}^n$$
(4.27)

avec

$$A_\eta = \frac{\hbar k_\eta}{2m_e} \frac{\Delta t}{\Delta x} \quad B_\eta = A_\eta \exp(ik_\eta \Delta x)$$

$$C = \exp(-iE\Delta t/\hbar) \quad D_e = (1 - \exp(2ik_e \Delta x)) \exp(ik_e \Delta x)$$

où les vecteurs d'ondes longitudinaux dans les canaux d'entrée/sortie (k_η) sont donnés par la relation 4.2.

4.2.5.2 - Evolution temporelle de la conductance

La figure 4.20 donne l'évolution de la conductance d'un stub en fonction du temps, calculée lorsque sa longueur L_s (initialement $L_{s1}=32$ nm) est brutalement augmentée à $t=0$ s de 8.5 nm ($L_{s2}=40.5$ nm), pour une énergie d'injection de 30 meV. Les largeurs du stub et du guide principal sont identiques ($w=w_s=20$ nm) et les guides d'accès ont une longueur de 40 nm chacun. Le système est discrétisé dans l'espace réel de manière homogène ($\Delta x=\Delta y=0.5$ nm) et les variations de la fonction d'onde sont estimées toutes les $\Delta t=0.25$ fs. A l'allongement du stub de 32 nm à 40.5 nm correspond le passage d'une conductance quasi-nulle à une conductance normalisée quasi-unitaire.

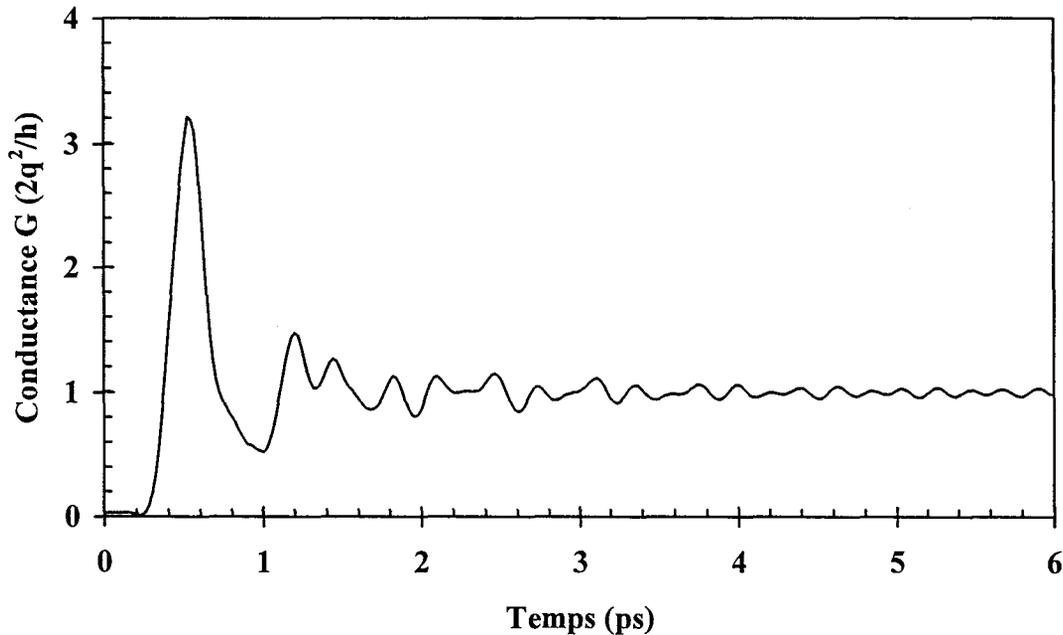


FIGURE 4.20 : Transitoire de la conductance d'un stub en régime de commutation. L'énergie d'injection est $E_F=30$ meV, la largeur du stub et du guide principal est 20 nm, et le stub de longueur initial 32 nm est allongé à 40.5 nm à $t=0$.

Par rapport au temps initial ($t=0$ s) où la géométrie du dispositif est modifiée, il apparaît un retard d'environ 200 fs de la réponse du système. En effet, la conductance étant estimée à l'extrémité du canal de sortie, la propagation de l'onde à travers ce dernier introduit un retard entre l'instant où se modifie l'adaptation de la fonction d'onde dans le stub, et l'instant où la conductance en subit effectivement les conséquences en sortie. Après ce retard, la conductance croît très rapidement et dépasse de plus d'un facteur de trois la valeur de la conductance finale attendue ($G_0=2q^2/h$). Ensuite durant tout le transitoire, la conductance présente un régime d'oscillations amorties autour de la référence G_0 puis, aux temps plus longs, présente une oscillation harmonique auto-entretenu.

Les raisons pour lesquelles la variation vers la valeur finale n'est pas monotone peuvent être en première approche expliquées par l'évolution temporelle de la répartition de la fonction d'onde dans la structure. En effet à $t=0$ s, la fonction d'onde s'étend de manière à remplir l'espace libéré par l'allongement du stub, l'onde est alors réfléchi au bout de celui-ci et revient à l'intersection avec le guide principal. Durant ce temps très court de "remplissage" du stub, le régime passant n'est pas encore établi. Ainsi, le stub emmagasine de la probabilité de présence en excès qu'il libère par la suite : ceci explique le premier dépassement observé dans la conductance. En d'autres termes, le stub se comporte temporairement comme une source d'alimentation supplémentaire, et vient ajouter son propre flux de probabilité à celui du canal d'entrée.

Ces points sont illustrés par les quatre instantanés de la fonction d'onde que nous avons représenté figure 4.21 (a) à $t=0$ s, (b) à $t=50$ fs, (c) à $t=250$ fs, et (d) à $t=650$ fs. L'instant $t=0$ s représente le condition initiale pour laquelle les interférences donnent naissance à un noeud au milieu du canal de sortie, et où la fonction d'onde est fortement réfléchi à l'entrée par la région du stub. Après 50 fs (figure 4.21b), la région de la branche latérale initialement désertée est remplie, et l'onde retourne à l'entrée du stub. Alors que la transmission unitaire n'est pas établi, on voit apparaître à l'intersection du stub et du canal principal un excès de fonction d'onde (figure 4.21c) qui, par la suite, est évacué par le canal de sortie (figure 4.21d). Enfin, les allers et retours successifs de la fonction d'onde dans le stub, consécutifs aux réflexions de l'onde soit à l'intersection avec les guides d'accès, soit à l'extrémité du stub, produisent les oscillations amorties observées dans l'évolution de la conductance.

Signalons que cette première approche peut être complétée par une explication basée sur les énergies propres du stub, avant et après commutation. L'évolution de la conductance peut être alors expliquée par trois événements :

- un effet mémoire aux temps courts, impliquant d'une part les densités locales d'états initiale et finale, et d'autre part des phénomènes de mélange entre les niveaux liés et quasi-liés initiaux et finaux.
- un processus de fuite de la probabilité de présence stockée en excès sur les niveaux quasi-liés du stub.
- un piégeage d'une partie de la probabilité de présence sur le niveau lié du stub.

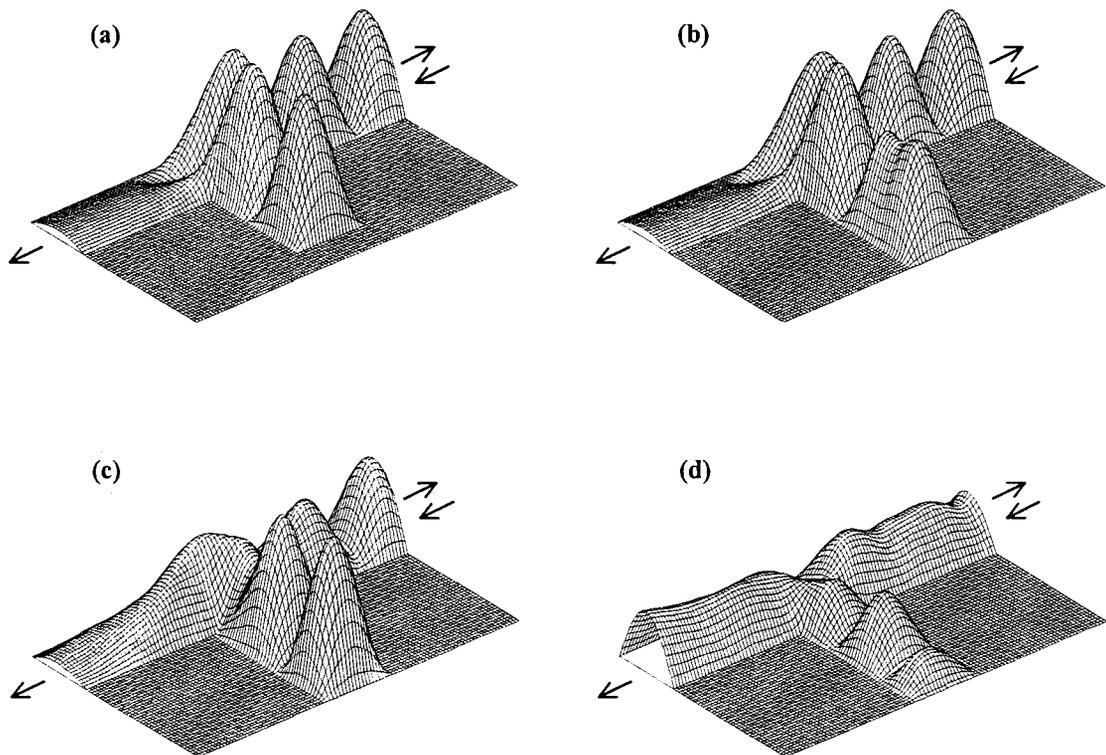


FIGURE 4.21 : Instantanés du module de la fonction d'onde lors du transitoire de conductance de la figure 4.20 : (a) à $t=0$ ps, (b) à $t=50$ fs, (c) à $t=250$ fs, et (d) à $t=650$ fs.

Pour détailler ci-dessous ces différents processus, nous procéderons en deux temps : nous calculerons tout d'abord les densités locales d'états initiale et finale, puis proposerons une analyse du transitoire de la conductance dans le domaine fréquentiel.

4.2.5.3 - Densités locales d'états et temps caractéristiques

De la même manière qu'au paragraphe 4.2.2, nous avons calculé la densité locale d'états dans le stub entre l'énergie du premier mode propagatif des canaux d'entrée/sortie et l'énergie d'injection ici fixée à 30 meV, pour les deux configurations : $L_{si}=32$ nm et $L_{sf}=40.5$ nm. Dans les deux cas, nous détectons la présence de deux niveaux quasi-liés dont les énergies sont reportées dans le tableau 4.1. Sont également reportés, les temps de résidence des porteurs sur chacun de ces niveaux propres. En effet, chaque pic observé dans la densité locale d'états peut être caractérisé par sa largeur à mi-hauteur Γ_i , et le temps de résidence correspondant est alors déterminé par la relation $\tau_i=\hbar/\Gamma_i$ pour chaque énergie propre [27]. De manière identique, nous déterminons un niveau lié dans chaque structure avec un temps τ_i considéré infini.

Etat initial ($L_{si}=32$ nm)	Etat final ($L_{sf}=40.5$ nm)
$E_{i0}=11.36$ meV ($\tau=\infty$)	$E_{f0}=11.34$ meV ($\tau=\infty$)
$E_{i1}=18.6$ meV ($\tau=550$ fs)	$E_{f1}=17.1$ meV ($\tau=970$ fs)
$E_{i2}=29.9$ meV ($\tau=235$ fs)	$E_{f2}=25.05$ meV ($\tau=315$ fs)

TABLEAU 4.1 : Energies des niveaux quantiques de la structures et temps de vie associés. Les indices i et f indiqués respectivement les états de la structure initiale et ceux de la structure finale.

Notons que les temps de résidence des niveaux quasi-liés sont en général très faibles (de l'ordre de quelques centaines de femtosecondes), ce qui traduit l'aspect ouvert du système. Néanmoins comme on peut le vérifier ici, l'allongement du stub qui provoque un abaissement des énergies propres, a pour conséquence un accroissement global de ces temps de résidence.

Nous allons voir à présent que les rôles respectifs de chacun des niveaux peuvent être mis clairement en évidence par une analyse spectrale de la conductance.

4.2.5.4 - Analyse spectrale

Le spectre fréquentiel du transitoire est obtenu par transformation de Fourier discrète utilisant un fenêtrage de Blackman. Ainsi, on calcule :

$$G(\nu) = \frac{\Delta t}{2\pi} \sum_{n=1}^N (G(n\Delta t) - G_{\text{moy}}) F(n) \exp(-i2\pi\nu n\Delta t) \quad (4.27)$$

où $F(n)$ représente la fenêtre temporelle de Blackman, Δt le pas d'échantillonnage de l'évolution temporelle, et G_{moy} la valeur moyenne de la conductance dans l'intervalle de temps $N\Delta t$ considéré. Dans le cas présent, nous utilisons un pas $\Delta t=2.5$ fs permettant une analyse fréquentielle sans recouvrement pour des fréquences allant de 0 à 200 THz. Dans le domaine fréquentiel, la multiplication des fonctions temporelles se traduit par un produit de convolution des fonctions fréquentielles respectives, et la fonction de fenêtrage est alors caractérisée par l'étalement en fréquence de son lobe principal qui détermine la résolution de l'analyse spectrale, et par l'atténuation du premier lobe secondaire. La fenêtre de Blackman exprimé par :

$$F(n) = a_0 + 2a_1 \cos\left(\frac{\pi}{N}(2n - N)\right) + 2a_2 \cos\left(\frac{2\pi}{N}(2n - N)\right) \quad (4.28)$$

avec $a_0 = 0.42$ $a_1 = 0.25$ $a_2 = 0.04$

est caractérisée par une largeur de base, correspondant à l'étalement du premier lobe, de $6/N\Delta t$, et une atténuation des lobes secondaires supérieure à 59 dB. Le choix de la fenêtre de Blackman s'étendant sur 5 ps utilisée ci-dessous, résulte d'un compromis entre la réjection des lobes secondaires et la résolution en fréquence, mais permet aussi d'obtenir un aperçu de la densité spectrale de $G(t)$ aux temps courts. Signalons enfin que le calcul fait sur $(G(t)-G_{\text{moy}})$ permet de s'affranchir de la composante continue dans le spectre, composante qui pourrait masquer les raies de plus basses fréquences du spectre, de l'ordre du GHz.

Nous avons représenté figure 4.22 la densité spectrale $|G(\nu)|^2$ calculée sur les cinq premières picosecondes de l'évolution de la conductance $G(t)$. Plusieurs raies correspondant aux maxima de la densité spectrale sont clairement visibles. La raie à 4.66 THz peut être attribuée à l'état lié d'après la relation $(E_F - E_{0f}) = h\nu$. En effet par décalage temporel de la fenêtre de Blackman, sa densité spectrale est quasiment invariante avec le temps en bon accord avec l'hypothèse qu'il n'y a pas de processus dissipatifs dans la région quantique. En outre, ceci explique les oscillations d'amplitude constante de la conductance aux temps longs qui traduisent le battement de la fonction d'onde entre l'énergie du niveau lié final E_{0f} et l'énergie d'injection E_F .

Les autres raies de fréquences inférieures peuvent être attribuées aux états quasi-liés, non seulement de la structure finale mais aussi de la structure initiale. Pour étayer cette interprétation, nous avons exprimé les fréquences de ces raies en termes d'énergie équivalente. Les deux fréquences 1.15 THz et 3.16 THz donnent des énergies respectives de 4.75 meV et de 13.1 meV qui correspondent à la différence entre l'énergie d'injection et l'énergie de chaque état quasi-lié du stub final (respectivement E_{f2} et E_{f1}). Par contre, les fréquences de 230 GHz et 1.63 THz donnent des énergies que l'on peut attribuer aux différences d'énergie respectivement entre le premier état quasi-lié initial et le premier final, et entre le deuxième état quasi-lié final et le premier initial. Ceci démontre que le système quantique n'atteint pas instantanément son état final, et que des effets de mélange prononcés entre les états quantiques de la structure initiale et finale régissent le régime transitoire de la conductance. Soulignons cependant que le système perd rapidement la mémoire de l'état initial, typiquement en moins d'une picoseconde. En conséquence pour des temps juste supérieurs, seules les trois raies correspondant aux états finaux subsistent. Ensuite, l'importance des raies relatives aux états quasi-liés diminuent exponentiellement avec le temps, avec une constante de temps caractéristique du temps de résidence du niveau impliqué. La raie de fréquence la plus élevée, caractéristique du niveau lié, est quant à elle conservée aux temps très longs.

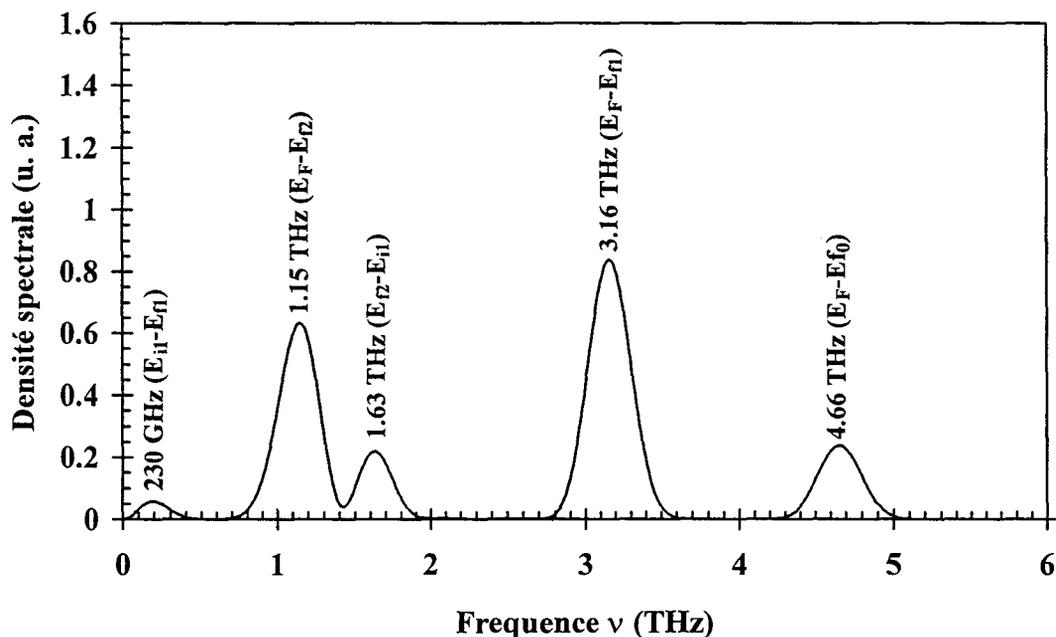


FIGURE 4.22 : Densité spectrale calculée sur les cinq premières picosecondes du transitoire de conductance de la figure 4.20. Les différentes raies observées sont reliées aux différents états quantiques initiaux et finaux.

En résumé, on peut donc décomposer l'évolution de la conductance en trois zones distinctes : la première qui conserve la mémoire des états de la structure initiale dans les temps très courts, la deuxième qui constitue une grande partie de la réponse transitoire pour laquelle les interférences quantiques dans le stub ne sont pas encore totalement établies dans la structure finale, et enfin la réponse permanente qui ici est caractérisée par des oscillations harmoniques non amorties car nous ne prenons pas en compte de processus dissipatifs dans la région quantique.

Au vu de la complexité des phénomènes mis en jeu, il est difficile de donner avec précision un temps de commutation. De manière arbitraire en considérant le temps nécessaire pour passer de 10 à 90% de G_0 , on peut déduire un temps de l'ordre de 2.5 ps.

Pour terminer, signalons que nous avons ignoré dans le régime de commutation les effets capacitifs. En effet, la localisation temporaire de charges dans le stub devrait se traduire par une réaction de charge d'espace. Si en première approche on peut s'attendre à un lissage du transitoire de conductance, la prise en compte de ces phénomènes de réaction de charge d'espace ne devrait pas remettre en cause l'analyse spectrale proposée ci-dessus. En pratique, il apparaît que la mise en oeuvre d'un modèle prenant en compte ces réactions soulève un certain nombre de questions relatives par exemple au calcul des densités de charges libres. Une réflexion plus approfondie sur ce sujet est en cours au sein de l'équipe.

4.3 - CONCLUSION

Ce chapitre traite essentiellement du transport balistique dans les guides d'ondes électroniques incluant des discontinuités. Pour cette étude menée en régimes indépendant et dépendant du temps, plusieurs types de modèles numériques ont été développés. Ils sont basés d'une part sur la méthode du raccordement de modes pour les études statiques, et d'autre part sur le développement de Caley de l'opérateur d'évolution pour les analyses dynamiques. Dans ce dernier cas de figure, la propagation d'un paquet d'ondes gaussien et le régime d'injection continue ont été considérés.

Ces approches nous ont permis dans un premier temps d'étudier la constriction d'un canal 1D. Plus précisément nous avons étudié dans quelle mesure les zones de contact de dimensionnalité supérieure au guide d'ondes perturbent l'observation des plateaux de conductance en introduisant des résonances longitudinales. Sur ce même thème, nous avons analysé les effets relatifs à la présence de zones de transition ("taper") permettant une adaptation progressive entre les zones de dimensionnalité différente. Le cas général d'un élargissement local qui englobe l'ensemble des structures de type micro-cavité résonnante a été envisagé dans un second temps.

En se focalisant sur la structure de type stub, nous avons pu éclaircir un certain nombre de points visant à une meilleure compréhension, et à l'utilisation de ces structures. Ainsi pour le stub, une étude systématique a été entreprise dont les résultats sont en accord avec ceux publiés par l'équipe de K. Hess, pionnière dans ce domaine. Les modes de transmission ont été étudiés en détail en fonction des paramètres géométriques, largeur et longueur du stub notamment. Des structures plus complexes, incluant par exemple la mise en série de multiples résonateurs, ont été également présentés et nous avons mis en évidence un effet de résistance différentielle négative pour un fonctionnement hors-équilibre.

L'analyse du stub en régime transitoire constitue la partie la plus originale de ce travail. Outre la résolution de l'équation de Schrödinger dépendante du temps pour une structure bidimensionnelle, la difficulté vient également de la mise en oeuvre de conditions aux limites absorbantes capable de traiter le transport sous injection continue. Concernant ce volet, nous avons mis en évidence des effets décrits à notre connaissance pour la première fois dans la littérature. L'étude du régime de commutation montre en effet des phénomènes mettant en jeu la localisation momentanée de charges dans le stub, qui provoque un effet de dépassement de conductance par rapport au régime d'équilibre, ainsi que le mélange entre états quantiques initiaux et finaux mis en évidence par l'analyse spectrale du transitoire de conductance.



BIBLIOGRAPHIE CHAPITRE 4

- [1] C. C. EUGSTER, J. A. DEL ALAMO, and M. J. ROOKS
"Transport in novel gated quantum wires : the impact of wire length"
Jpn. J. Appl. Phys. 29(12), 1990, pp L2257-L2260.
- [2] G. L. SNIDER, M. S. MILLER, M. J. ROOKS, and E. L. HU
"Quantized conductance in ballistic constrictions at 30 K"
Appl. Phys. Lett. 59(21), 1991, pp 2727-2729.
- [3] J. C. WU, M. N. WYBOURNE, A. WEISSHAAR, and S. M. GOODNICK
"Waveguide effect in quantum wires with double-bend discontinuities"
J. Appl. Phys. 74(7), 1993, pp 4590-4597.
- [4] G. TIMP, A. M. CHANG, J. E. CUNNINGHAM, T. Y. CHANG. P. MANKIEWICH,
R. BEHRINGER, and R. E. HOWARD
"Observation of the Aharonov-Bohm effect for $\omega_c\tau > 1$ "
Phys. Rev. Lett. 58(26), 1987, pp 2814-2817.
- [5] F. SOLS, M. MARUCCI, U. RAVAIOLI, and K. HESS
"On the possibility of transistor action based on quantum interference phenomena"
Appl. Phys. Lett. 54(4), 1989, pp 350-352.
- [6] K. AIHARA, M. YAMAMOTO, and T. MIZUTANI
"Three-terminal conductance modulation of a quantum interference device using a
quantum wire with a stub structure"
Appl. Phys. Lett. 63(26), 1993, pp 3595-3597.
- [7] J. APPENZELLER, C. SCHROER, T. SCHÄPERS, A. V. D. HART, A. FÖRSTER,
B. LENGELER, and H. LÜTH
"Electron interference in a T-shaped quantum transistor based on Schottky-gate
technology"
Phys. Rev. B 53(15), 1996, pp 9959-9963.
- [8] A. WEISSHAAR, J. LARY, S. M. GOODNICK, and V. K. TRIPATHI
"Analysis and modeling of quantum waveguide structures and devices"
J. Appl. Phys. 70(1), 1991, pp 355-366.
- [9] H. TACHIBANA, and H. TOTSUJI
"Characteristics of a quantum waveguide : effects of finite confinement potential and
geometrical deformations and comparison with simple theoretical approach"
J. Appl. Phys. 79(9), 1996, pp 7021-7028.
- [10] G. KIRCZENOW
"Theory of the conductance of ballistic quantum channels"
Solid States Communications 68(8), 1988, pp 715-718.

- [11] L. ESCAPA, and N. GARCIA
"On the ballistic conductance of small contacts and its resonant structure : trumpet effect washes out resonant structure"
J. Phys. : Condens. Matter 1, 1989, pp 2125-2129.
- [12] L. I. GLAZMAN, G. B. LESOVIK, D. E. KHMEL'NITSKII, and R. I. SHEKHTER
"Reflectionless quantum transport and fundamental ballistic-resistance steps in microscopic constrictions"
JETP Lett. 48(4), 1988, pp 238-241.
- [13] R. I. HORNSEY
"Angular distributions of electrons transmitted ballistically through tapered constrictions"
J. Appl. Phys. 79(12), 1996, pp 9172-9180.
- [14] A. GOLDBERG, H. M. SCHEY, and J. L. SCHWARTZ
"Computer-generated motion pictures of one-dimensionnal quantum-mechanical transmission and reflection phenomena"
Am. J. Phys. 35(3), 1967, pp 177-186.
- [15] J. P. NOUGIER
"Méthodes de calcul numérique"
éd. Masson.
- [16] L. BURGNIES, O. VANBÉSIEN, and D. LIPPENS
"Evolution temporelle d'un paquet d'ondes dans les structures à base de guides d'ondes électroniques"
6^{èmes} J. N. M. O. III-V, Chantilly, 1997, pp 114-115.
- [17] A. ENDOH, S. SASA, H. ARIMOTO, and S. MUTO
"Dynamics of electron-wave packets in nanostructures"
Inst. Phys. Conf. Ser. n° 127 : chap 2, pp 33-36.
Int. Workshop on Quantum Effect Physics, Luxor, 1992.
- [18] L. BURGNIES, O. VANBÉSIEN, and D. LIPPENS
"Transport balistique dans les guides d'ondes électroniques"
Actes du workshop Transport Quantique
GDR SPARCH, Villeneuve d'Ascq, 1996, pp 55-77.
- [19] R. L. SCHULT, D. G. RAVENHALL, and H. W. WYLD
"Quantum bound states in a classically unbound system of crossed wires"
Phys. Rev. B 39(8), 1989, pp 5476-5479.
- [20] F. SOLS, M. MACUCCI, U. RAVAIOLI, and K. HESS
"Theory for a quantum modulated transistor"
J. Appl. Phys. 66(8), 1989, pp 3892-3906.
- [21] P. DEBRAY, R. AKIS, P. VASILOPOULOS, and J. BLANCHET
"Ballistic electronic stub tuner for potential use in analog-to-digital conversion"
Appl. Phys. Lett. 66(23), 1995, pp 3137-3139.

- [22] R. SORDAN, and K. NIKOLIC
"The nonlinear transport regime of a T-shaped quantum interference transistor"
Appl. Phys. Lett. 68(25), 1996, pp 3599-3601.
- [23] L. BURGNIES, O. VANBÉSIEN, and D. LIPPENS
"Transient analysis of ballistic transport in stub-like quantum waveguides"
Appl. Phys. Lett. 71(6), 1997, pp 803-805.
- [24] M. A. TALEBIAN, and W. PÖTZ
"Open boundary conditions for a time-dependent analysis of the resonant tunnelling structure"
Appl. Phys. Lett. 69(8), 1996, pp 1148-1150.
- [25] L. F. REGISTER, U. RAVAIOLI, and K. HESS
"Numerical simulation of mesoscopic systems with open boundaries using the multidimensional time-dependent Schrödinger equation"
J. Appl. Phys. 69(10), 1991, pp 7153-7158.
- [26] R. K. MAINS, and G. I. HADDAD
"Improved boundary conditions for the time-dependent Schrödinger equation"
J. Appl. Phys. 67(1), 1990, pp 591-593.
- [27] J. WANG, Y. WANG, and G. GUO
"Quasibound states in two-dimensional quantum wires"
Appl. Phys. Lett. 65(14), pp 1793-1795.

CHAPITRE 5

COUPLAGE ENTRE GUIDES D'ONDES ELECTRONIQUES

CHAPITRE 5 : COUPLAGE ENTRE GUIDES D'ONDES ELECTRONIQUES

Dans la littérature depuis quelques années, sont publiées des structures de basse dimensionnalité de plus en plus complexes. Pour les guides d'ondes électroniques, ces structures font notamment intervenir plusieurs guides parallèles, ou croisés, multipliant ainsi le nombre de ports d'entrée/sortie. Citons pour exemple, le réseau quantique proposé par Datta [1], ou le réseau de guides croisés [2]. En outre, la forte analogie de ces nouveaux composants avec les dispositifs micro-ondes et optiques a orienté un certain nombre des travaux vers la notion de couplage électronique [3][4][5]. Initialement, il s'agissait de coupler sur une longueur L deux fils quantiques par l'intermédiaire d'une barrière de potentiel, dont la hauteur pouvait être ajustée via une grille de commande déposée en surface. Suivant la hauteur de cette barrière, et suivant la longueur de couplage L , le transfert électronique d'un fil à l'autre peut alors être obtenu [6]. Depuis cette proposition, la fabrication d'une telle structure [7] a permis l'observation expérimentale d'un transfert électronique à basse température dans un coupleur électronique de ce type [8]. Pour notre part, nous avons orienté nos travaux vers des structures où le couplage entre les canaux est assuré par une ou plusieurs ouvertures au même potentiel que les guides parallèles. Dans le cas le plus simple, ce coupleur, appelé coupleur simple branche, présente alors une forte analogie avec le coupleur simple fente couramment rencontré en hyperfréquences. Par extension, et de manière comparable au coupleur de Bethe ou au coupleur en anneau 90° en technologie "microstrip", des premières études sur le coupleur double branche ont permis d'envisager l'optimisation des caractéristiques de couplage [9].

Dans ce chapitre nous nous proposons d'étudier en détail ces deux dernières structures. Tout d'abord, les caractéristiques du coupleur simple branche seront analysées en prêtant attention à l'aspect monomode ou multimode des phénomènes d'interférences. Différents modes de fonctionnement relatifs au transfert latéral, au couplage hybride, ou au non-linéarités de conduction seront présentés. Ces études ont nécessité le développement de traitements numériques spécifiques, sur la base des modèles présentés dans le chapitre précédent, que nous présenterons. Enfin, nous nous intéresserons aux améliorations potentielles que peuvent apporter les structures multibranches, en particulier le coupleur double branche.

5.1 - LE COUPLEUR SIMPLE BRANCHE : analyse paramétrique

5.1.1 - Généralités

Le coupleur simple branche est schématisé sur la figure 5.1 où nous avons spécifié les différentes notations utilisées par la suite. La structure est complètement définie par les trois

grandeurs géométriques suivantes :

- w , la dimension transverse des ports d'entrée/sortie (ici au nombre de quatre) que nous supposons identique dans chaque port.
- L_c et w_c qui caractérisent la branche de couplage, respectivement par sa longueur correspondant à la distance entre les deux guides principaux, et par sa largeur.

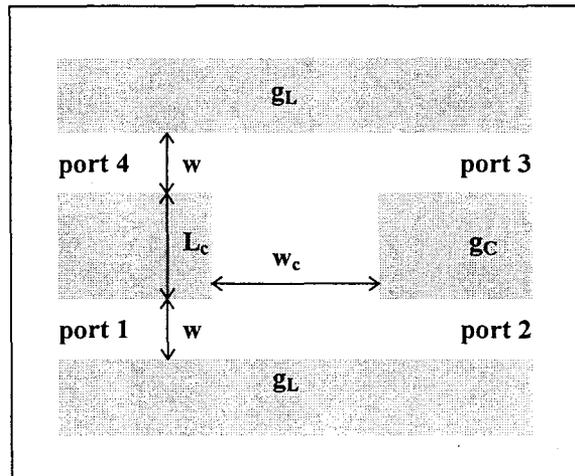


FIGURE 5.1 : Géométrie d'un couplage simple branche. Les ports d'entrée/sortie sont caractérisés par leur largeur (w), et la branche de couplage par sa largeur (w_c) et sa longueur (L_c).

Signalons que les hypothèses sur le potentiel de confinement, et jonctions entres guides, sont les mêmes qu'au chapitre précédent, à savoir : des murs infinis et coins carrés. Les porteurs sont injectés par le port 1(port d'entrée) qui est caractérisé par son coefficient de réflexion. Les ports 2 à 4 (ports de sortie) sont caractérisés par leur coefficient de transmission T_{1i}^n ($i=2$ à 4) qui traduit la probabilité qu'un électron incident sur le mode n du port 1 soit transmis sur un des modes du port i . Ces coefficients de transmissions sont définis par la relation :

$$T_{1i}^n(E) = \frac{\sum_{m=1}^N |S_{i1}^G(m,n)|^2 (k_i(m) + k_i^*(m))}{(k_1(n) + k_1^*(n))} \quad (5.1)$$

où N représente le nombre total de modes considéré dans le calcul, $k_i(j)$ le vecteur d'onde longitudinal du mode j du port i qui s'exprime par :

$$k_i(j) = \sqrt{\frac{2m_e^*}{\hbar^2} E - \left(\frac{j\pi}{w}\right)^2} \quad (5.2)$$

et où les paramètres $S_{ij}^G(m,n)$ sont extraits de la matrice de répartition globale $S^G = \left[S_{ij}^G \right]_{i,j=1 \text{ à } 4}$ de dimension $4N \times 4N$.

Comme pour les structures à un seul guide, la matrice de répartition globale S^G est obtenue par regroupement successif de matrices de répartition élémentaires correspondant soit à un guide d'onde uniforme, soit à une jonction. Dans ce dernier cas, les matrices sont calculées par la méthode du raccordement de modes, et ont une dimension $3N \times 3N$ pour tenir compte de la liaison de deux canaux à un canal plus large [10]. Les relations nécessaires à ces calculs matriciels sont données en annexe B. A partir de ces coefficients de transmission, on peut définir la conductance entre le port 1 et les autres ports par :

$$G_i = \frac{2q^2}{h} \sum_{n=1}^K T_{1i}^n(E_F) \quad (i = 2,3,4) \quad (5.3)$$

où la somme se fait sur les K modes propagatifs du port d'entrée dont les amplitudes sont normalisées à un.

Par analogie avec les systèmes micro-ondes nous définissons des coefficients de couplage (C) et de directivité (D) par :

$$C_{dB} = 10 \log_{10} \left(\frac{2q^2}{h} \frac{K}{G_3} \right) \quad (5.4)$$

$$D_{dB} = 10 \log_{10} \left(\frac{G_3}{G_4} \right)$$

L'ensemble des évolutions de conductance présentées ci-dessous ont été calculées en considérant les $N=30$ premiers modes transverses de chaque section, ce qui s'est avéré suffisant pour assurer un bon conditionnement des matrices.

5.1.2 - Paramètres géométriques

5.1.2.1 - Longueur de la branche de couplage

Pour étudier l'influence de la longueur L_c de la branche de couplage, nous avons considéré une structure dans laquelle les électrons sont injectés au port 1 à une énergie $E_F=30$ meV située entre les deux premiers modes transverses des quatre ports d'accès de largeur $w=20$ nm. Dans ce cas la propagation est monomode et les conductances ont une valeur maximale de $2q^2/h$. Suivant la largeur de la branche de couplage w_c , on peut discerner plusieurs types d'évolutions, chacune caractéristique du nombre de modes propagatifs dans la branche.

La figure 5.2 représente les évolutions des conductances G_i présentes entre le port 1 et les différents ports de sortie i ($i=2,3,4$), en fonction de la longueur L_c , pour (a) $w_c=15$ nm, (b) $w_c=20$ nm, (c) $w_c=30$ nm.

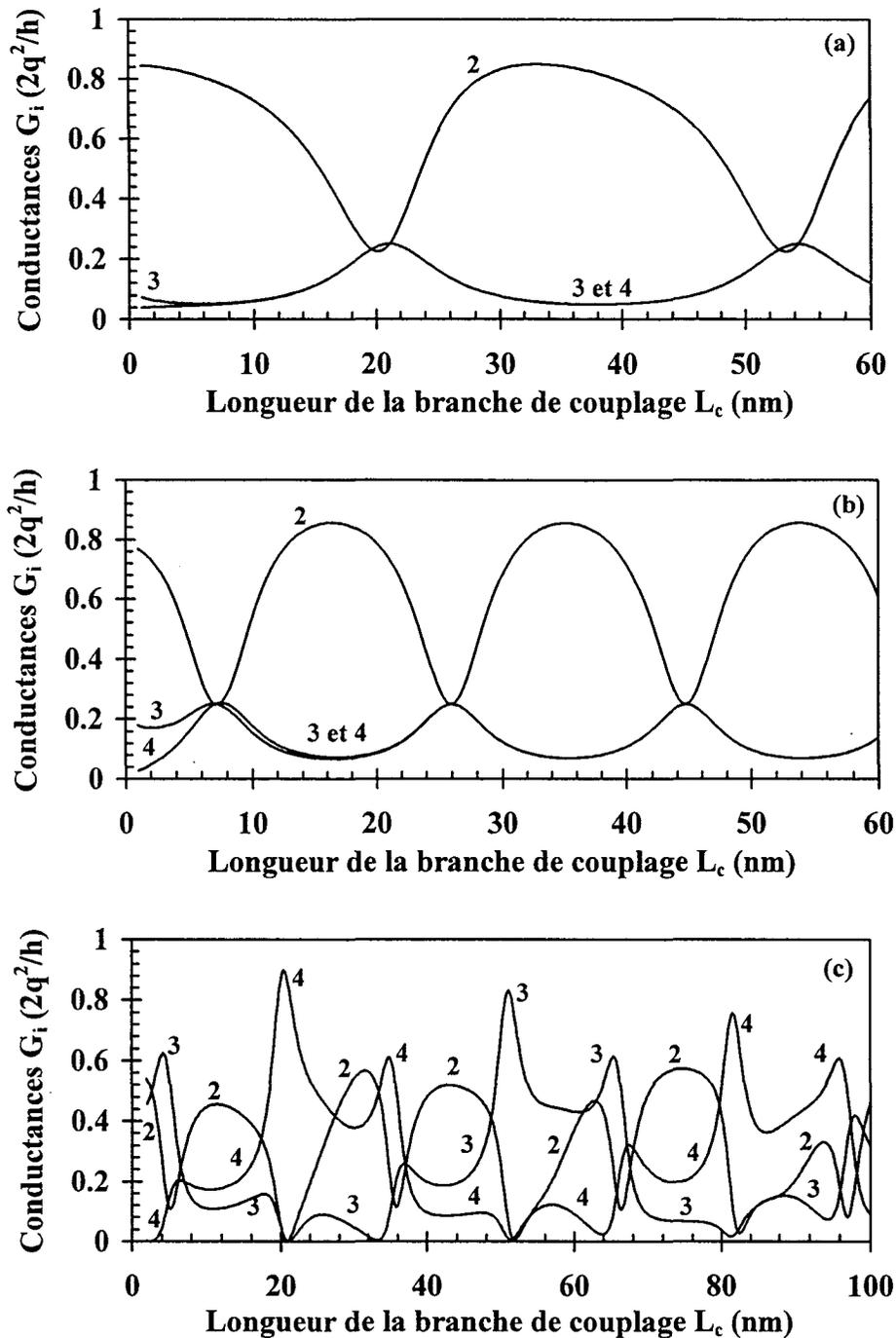


FIGURE 5.2 : Evolutions des conductances G_i ($i=2, 3, 4$) en fonction de la longueur de la branche (L_c) d'un coupleur simple branche, calculées pour $E_F=30$ meV et pour (a) $w_c=15$ nm, (b) $w_c=20$ nm, (c) $w_c=30$ nm. La largeur des ports d'accès est $w=20$ nm.

Dans les deux premiers cas, l'évolution de la conductance au port 2 présente une succession de niveaux hauts puis bas qui lui donne l'apparence de la conductance d'un stub en fonction de sa longueur. Dans chaque cas, on peut vérifier que la période de la conductance G_2 est proche d'une demi-longueur d'onde longitudinale dans la branche, et qu'elle diminue comme attendu lorsque la branche s'élargit. Aux ports 3 et 4, les conductances apparaissent elles aussi périodiques en phase avec le coefficient de réflexion au port 1, et quasiment en opposition de phase avec le port 2. Contrairement au stub simple, le minimum de conductance G_2 , qui nous le verrons plus tard correspond à peu près à l'existence d'un niveau quasi-lié de la

zone de couplage, n'implique pas ici un coefficient de réflexion unitaire mais induit presque une équirépartition de la probabilité de présence aux quatre ports d'entrée/sortie. Ceci résulte de la symétrie centrale de la structure et nécessite une propagation monomode dans la structure entière. Pour les faibles valeurs L_c , les conductances G_3 et G_4 se séparent. Cet écart reflète l'apparition d'un couplage croissant entre les deux guides principaux par modes évanescents - dans le cas présent, principalement via le premier mode excité de la zone centrale -.

Considérons maintenant une largeur $w_c=30$ nm pour laquelle le deuxième mode transverse de la branche située à 24.9 meV est propagatif. Les conductances aux ports 3 et 4 se dissocient nettement, et présentent alternativement une valeur maximale proche de $2q^2/h$ alors que la seconde devient quasiment nulle. On obtient ainsi deux situations de transfert latéral : le premier pour $L_c=51$ nm du port 1 vers le port 3 ($G_3=0.83 2q^2/h$), le second accompagné d'un changement de direction de propagation ("backward") pour $L_c=20.4$ nm du port 1 vers le port 4 ($G_4=0.9 2q^2/h$). De plus, comme le montre la figure 5.2c, on peut observer que la périodicité des conductances est modifiée par l'apparition du deuxième mode propagatif de la branche. La période de G_3 et G_4 est ici double de celle de G_2 , et quand G_2 tend à s'annuler les maxima sont présents alternativement sur G_3 et G_4 .

Dans l'analyse de ces deux types de fonctionnements détaillée ci-dessous, nous verrons que ce phénomène est la conséquence de l'adaptation de la fonction d'onde, et des parités associées, sur la zone de couplage dans les directions x et y . Pour les largeurs w_c supérieures, qui correspondent à l'existence d'un nombre de modes propagatifs dans la branche de couplage plus important, on perd comme pour le stub la périodicité des conductances. Les évolutions deviennent alors plus complexes suite à la multiplication du nombre d'adaptations possibles dans la zone centrale. A l'inverse pour des largeurs $w_c < 13.7$ nm pour lesquelles le premier mode transverse dans la branche est évanescent à l'énergie considérée, G_2 devient unitaire et les conductances aux ports 3 et 4 sont nulles tout comme pour un fil quantique isolé. Ainsi, cette largeur w_c joue un rôle fondamental dans les caractéristiques de fonctionnement du coupleur, et nous allons à présent nous situer dans les cas où nous interdisons le couplage par mode évanescent ($w_c > 15$ nm) pour étudier les spectres de conductance en fonction de la largeur des ports d'entrée/sortie.

5.1.2.2 - Largeur de la branche de couplage

Expérimentalement, les variations de conductance peuvent être observées par modification des tensions appliquées sur les grilles de commande définissant le motif. Ici, le confinement électronique est produit par des grilles centrales g_C et des grilles latérales g_L (figure 5.1). En fixant la tension V_{gC} appliquée sur les grilles g_C , on module la largeur des ports d'entrée/sortie en modifiant la tension V_{gL} appliquée sur les grilles latérales g_L : plus la tension V_{gL} sera négative, plus les ports d'accès seront étroits. On remarquera que ce type de commande provoque une modification de la zone de couplage, et en particulier de sa longueur totale (L_c+2w).

L'influence de la largeur w_c est donc ici déduite des évolutions des conductances G_i suivant la largeur w des ports d'entrée/sortie représentées figure 5.3 (a) pour $w_c=15$ nm.

(b) pour $w_c=20$ nm, (c) pour $w_c=30$ nm. Dans les trois cas, on a fixé $E_F=30$ meV et $L_c=20$ nm. Un certain nombre de points communs avec les évolutions précédentes peuvent être relevés.

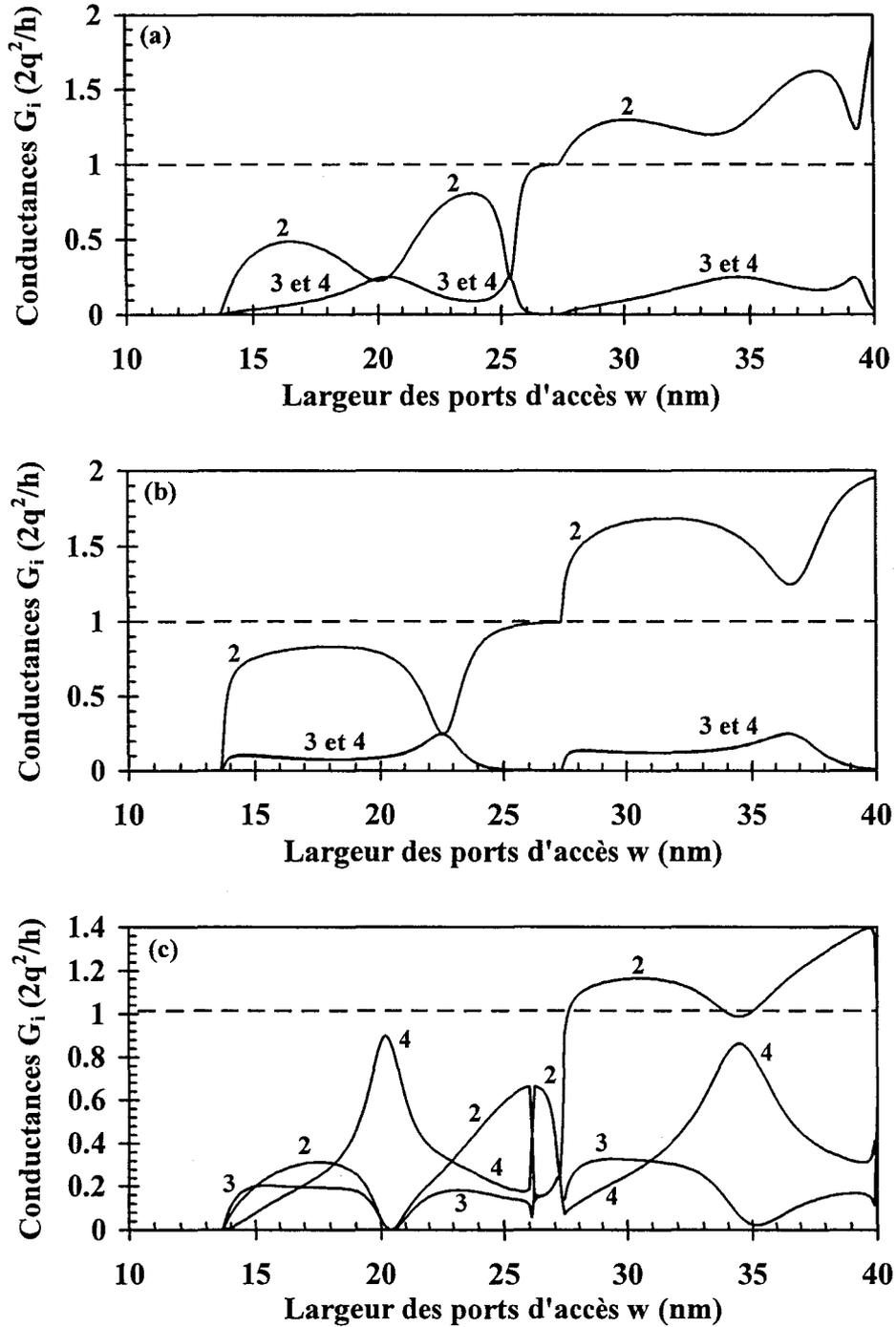


FIGURE 5.3 : Evolutions des conductances G_i ($i=2, 3, 4$) en fonction de la largeur w des ports d'accès d'un coupleur simple branche, calculées pour $E_F=30$ meV. La longueur de la branche et $L_c=20$ nm, et la largeur $w_c=15$ nm (a), 20 nm (b), 30 nm (c).

Tout d'abord, on ne discerne pas les conductances aux ports 3 et 4 lorsque la propagation est monomode dans la branche de couplage (figure 5.3a, et b). Ceci signifie que la capacité à propager plusieurs modes dans la zone de couplage est une condition nécessaire à l'obtention d'un couplage directif. Ainsi pour $w_c=30$ nm (figure 5.3c), on retrouve des évolutions aux ports 3 et 4 distinctes, et notamment le transfert électronique du port 1 vers le port 4 pour $w \approx 20$ nm correspondant à la situation de "backward" précitée. Ensuite, on n'observe plus dans le cas présent de transfert latéral vers le port 3 : ceci provient du choix de

la longueur de branche $L_c=20$ nm, en prenant $L_c \approx 51$ nm le maximum de G_4 disparaît au profit de G_3 .

De manière complémentaire, cette étude nous permet d'envisager les propriétés des mécanismes de couplage lorsque plusieurs modes deviennent propagatifs dans les ports d'entrée/ sortie. En effet pour les trois évolutions, on remarque une transmission totale des électrons du port 1 vers le port 2 pour une largeur $w=27.4$ nm correspondant à l'apparition du deuxième mode propagatif des ports d'accès à $E_F=30$ meV. De manière générale, on retrouve cette transmission totale ($G_2=2q^2/h, 4q^2/h, \dots, 2iq^2/h$) pour chaque largeur caractéristique de l'apparition d'un nouveau mode propagatif (i) [11].

Par ailleurs, on peut noter que les valeurs de G_3 et G_4 sont toujours inférieures à $2q^2/h$, même pour une propagation multimode. On voit ainsi que dans le cas d'une injection multimode, seul le mode propagatif d'ordre le plus élevé participe efficacement au couplage, les modes inférieurs se propageant majoritairement dans le canal incident. Ceci explique aussi la réplique des évolutions des conductances G_3 et G_4 , mais aussi G_2 (à $2iq^2/h$ près), après l'apparition d'un nouveau mode propagatif. Par exemple pour $w_c=30$ nm, on retrouve à nouveau un maximum de G_4 pour $w \approx 34.5$ nm.

On notera cependant qu'à mesure que le nombre de modes incidents augmente, les variations de conductance apparaissent moins marquées avec une dégradation de la directivité qui passe de -17.5 dB pour $w=20$ nm à -11.5 dB pour $w=34.5$ nm pour une branche de 30 nm de large. Enfin la diminution de la largeur de la branche entraîne d'une part l'étalement et l'élévation des minima de la conductance G_2 , et d'autre part leur décalage vers des largeurs w plus faibles. Ceci peut se vérifier aussi sur les évolutions calculées pour $w_c=20$ nm (b) et $w_c=15$ nm (a). La conductance G_2 tend alors vers une évolution en marche d'escalier, dans la limite d'une faible largeur w_c telle que le premier mode propagatif de la branche soit repoussé au delà de l'énergie d'injection.

En résumé, il apparaît possible par modification de la largeur des ports d'accès, et pour une structure (couple L_c, w_c) bien définie, de privilégier le transfert électronique du port d'injection vers tel ou tel port de sortie. Cependant, ceci nécessite une propagation multimode dans la branche de couplage. Nous allons à présent considérer l'influence d'un paramètre extérieur au couplage à savoir l'énergie d'injection des porteurs.

5.1.3 - Energie d'injection

Nous avons considéré ici une structure favorisant une situation de "backward". Elle est constituée de ports d'accès de largeur $w=20$ nm couplés par une branche de longueur $L_c=20$ nm. Dans la limite d'une propagation monomode dans les ports d'entrée/sortie, nous avons représenté figure 5.4 les évolutions des conductances G_j en fonction de l'énergie d'injection E_F pour (a) $w_c=30$ nm, (b) $w_c=44$ nm, et (c) $w_c=88$ nm. Soulignons que pour une largeur de branche inférieure, telle que la propagation y soit monomode, l'évolution de G_2 s'apparente à celle d'un stub alors que les conductances aux ports 3 et 4 restent faibles.

Sur la figure 5.4a, on retrouve bien la situation de "backward" avec un aspect résonnant de la conductance au port 4 autour de $E_F=30$ meV, et on peut encore reconnaître une ondulation de la conductance G_2 proche de celle d'un stub. Notons que dans cette configuration, le deuxième mode propagatif apparaît dans la branche à $E_F=24.9$ meV - les

conductances G_3 et G_4 sont alors discernables - alors que le troisième mode propagatif n'apparaît qu'à $E_F=56$ meV. Le transport est donc bimode sur quasiment toute la plage d'énergie représentée.

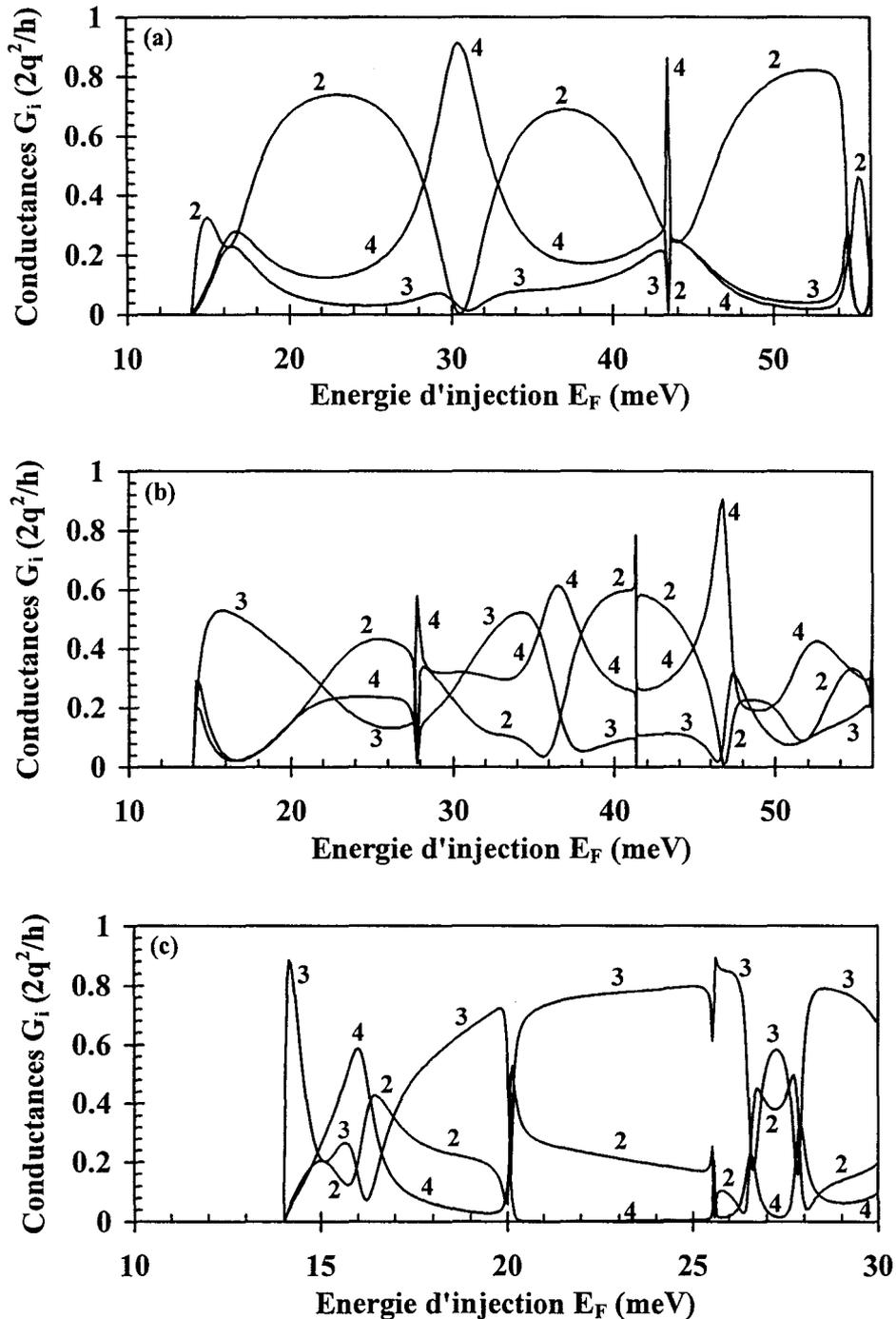


FIGURE 5.4 : Evolutions des conductances G_i ($i=2, 3, 4$) en fonction de l'énergie d'injection des porteurs d'un coupleur simple branche. Les dimensions de la structures sont $w=L_c=20$ nm, et la largeur de la branche vaut (a) $w_c=30$ nm, (b) $w_c=44$ nm, (c) $w_c=88$ nm.

Lorsque l'on élargit la branche à $w_c=44$ nm (figure 5.4b), jusqu'à quatre modes propagatifs peuvent exister dans la branche, respectivement pour les énergies 2.9 meV,

11.6 meV, 26 meV, et 46.3 meV : il en résulte des évolutions encore plus marquées des conductances dues à la multiplicité accrue des adaptations possibles de la probabilité de présence à mesure que la zone de couplage s'agrandit. Ceci apparaît encore plus clairement figure 5.4c où pour $w_c=88$ nm quatre à six modes assurent le couplage dans la gamme d'énergie 15-30 meV.

On peut aussi remarquer sur les figures 5.4b, et c, que l'on retrouve à la fois un transfert latéral privilégié vers le port 3 et vers le port 4 selon l'énergie d'injection, alors que pour $w_c=30$ nm et dans la limite d'un transport monomode dans les ports d'accès, la transition vers le port 3 n'apparaît pas car le transport dans la branche (ici trop courte pour la voir apparaître) est restreint à deux modes.

Enfin pour chaque largeur de branche, apparaissent dans les conductances des variations brutales autour de valeurs particulières de l'énergie. Par exemple pour $w_c=30$ nm, on observe ce phénomène pour une énergie $E_F \approx 43.4$ meV pour laquelle la conductance G_2 s'annule exactement.

Comme le montrent les évolutions de conductance de la figure 5.5 qui focalise les évolutions de la figure 5.4a autour de cette énergie, ces variations très localisées ne sont pas des artefacts de calcul : il est visible que les conductances évoluent bien continûment.

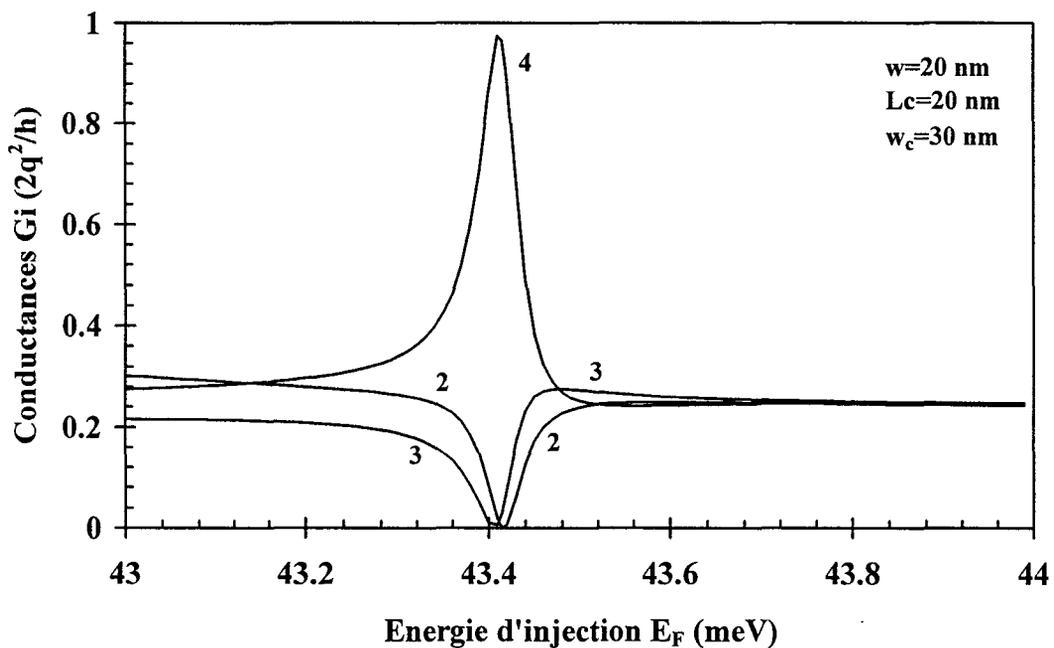


FIGURE 5.5 : Agrandissement des évolutions des conductances de la figure 5.4a autour de $E_F=43.4$ meV.

Nous allons voir dans le paragraphe suivant que la nature des niveaux quasi-liés de la zone de couplage permet d'expliquer ces évolutions.

5.1.4 - Densité locale d'états et niveaux propres

Comme dans le chapitre précédent, l'ensemble des niveaux quantiques peuvent être déduits de la densité locale d'états calculée à chaque énergie par l'intégration de la probabilité de présence dans la zone de couplage. Nous avons calculé son évolution en fonction de l'énergie (figure 5.6) pour deux fils quantiques de largeurs 20 nm chacun, couplés entre eux par une branche de longueur $L_c=20$ nm et de largeur $w_c=30$ nm. Les spectres de conductance associés à cette structure ont été représentés précédemment figure 5.4a.

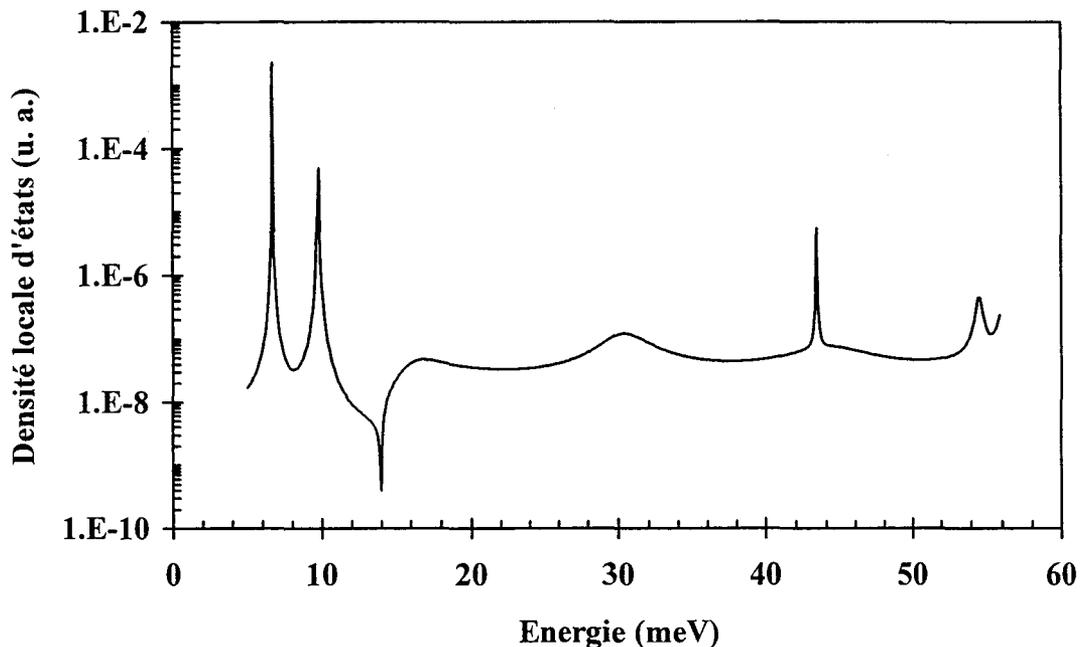


FIGURE 5.6 : Densité locale d'états en fonction de l'énergie calculée dans un coupleur simple branche de dimension $w=L_c=20$ nm et $w_c=30$ nm. Les évolutions des conductances correspondantes sont représentées sur la figure 5.4a.

La densité locale d'états présente six pics pour des énergies inférieures à l'apparition du deuxième mode propagatif (56 meV) des ports d'entrée/sortie. Deux d'entre eux, situés sous le seuil de propagation monomode des ports d'entrée/sortie, sont liés à 6.7 meV et 9.8 meV, les quatre suivants, constituant les niveaux quasi-liés, se situent à 16.9 meV, 30.4 meV, 43.4 meV, et 54.6 meV.

L'analyse des niveaux liés nous amène à faire une distinction concernant leur nature en fonction de la largeur de la branche de couplage et de leur position en énergie par rapport au premier mode transverse de celle-ci. A titre d'exemple pour $w_c=20$ nm, nous avons représenté figure 5.7 les modules des fonctions d'ondes des niveaux liés situés (a) à 10.8 meV, et (b) à 11.8 meV.

Dans ce premier cas où le premier mode transverse de la branche est situé à 14 meV, la probabilité de présence est maximale dans les zones de croisement entre la branche et les deux guides principaux. Il s'agit d'états liant et antiliant du système créés par le couplage des deux états quantiques appartenant à chaque intersection, qui s'effectue par mode évanescent à

travers la branche centrale. Celle-ci joue le rôle d'une barrière de potentiel dont la hauteur apparente est donnée par le seuil d'énergie du premier mode de la branche. L'état liant pour $E=10.8$ meV est caractérisé par une phase constante dans tous les canaux de la structure (toute propagation étant interdite pour les deux énergies concernées), alors que pour $E=11.8$ meV on observe un changement de phase de π , révélé ici par une probabilité de présence nulle au centre de la branche de couplage, qui est caractéristique d'un état antiliant. L'allongement de la branche a pour conséquence la diminution du couplage entre les deux états qui se traduit par le rapprochement des deux niveaux, et à la limite pour une longueur L_c très importante, par leur dégénérescence [12].

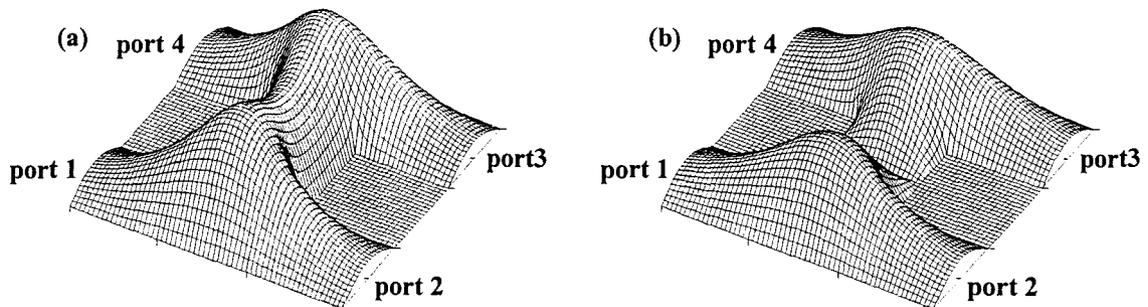


FIGURE 5.7 : Module des fonctions d'ondes calculées pour (a) $E=10.8$ meV, et (b) 11.8 meV. Ces énergies correspondent aux deux niveaux liés d'une structure simple branche de dimensions $w=w_c=L_c=20$ nm.

Si à présent on élargit la branche, les niveaux liés se placent au dessus du premier mode propagatif de la branche. Dans ce deuxième cas, la zone de couplage s'apparente à une cavité dans laquelle les états quantiques peuvent être approximativement déduits des confinements stricts dans les directions longitudinale et transversale, à l'ouverture du système par les ports d'entrée/sortie près.

C'est précisément le cas de la figure 5.6 où les niveaux liés à 6.7 meV et 9.8 meV se situent au dessus de 6.2 meV, premier mode transverse d'un canal de 30 nm de large. Ces deux états correspondent alors à une adaptation de type niveau fondamental dans la direction transverse de la branche et respectivement de type niveau fondamental et premier niveau excité dans l'autre direction. Plus on élargit la branche plus le nombre de niveaux liés augmente - par exemple pour $w_c=44$ nm, on en détecte quatre -.

Concernant les niveaux quasi-liés, on peut noter qu'à la présence d'un tel niveau correspond un minimum de la conductance au port 2 (figures 5.4a, et 5.6). Par ailleurs, on peut remarquer une grande différence entre les largeurs à mi-hauteur des pics de la densité locale d'états, et donc un temps de résidence des porteurs très différent selon les cas. Par rapport à l'approche classique qui prévoit une diminution des temps de vie (élargissement des pics) à mesure que l'énergie augmente, on observe ici un comportement fort différent avec une alternance de pics larges et étroits (figure 5.6). Cet effet est une conséquence de la géométrie du dispositif, et dépend de la forme de la fonction d'onde au voisinage des ports d'entrée/sortie.

Pour illustrer cela, la figure 5.8 représente les modules des fonctions d'ondes calculées (a) à 30.4 meV, et (b) à 43.4 meV pour $w_c=30$ nm. Pour la seconde énergie, on observe à chaque port d'entrée/sortie la présence d'un noeud au milieu du canal qui correspond pour les guides d'accès à l'excitation d'un deuxième mode transverse évanescents pour l'énergie considérée, et donc à une transmission minimale dans les ports 2 et 3 associée à un temps de vie important ($\tau \approx 10$ ps). En outre, dès qu'un noeud se déplace par modification de l'énergie d'injection, une part non négligeable de la probabilité de présence peut alors être transmise dans l'un ou l'autre des ports. Ceci explique donc les variations brutales des conductances observées précédemment. Dans l'autre cas à $E_F=30.4$ meV correspondant à une situation de "backward", la localisation moins forte bloque la transmission aux ports 2 et 3, mais autorise la propagation vers le port 4, ce qui donne un temps de résidence plus faible ($\tau \approx 0.1$ ps).

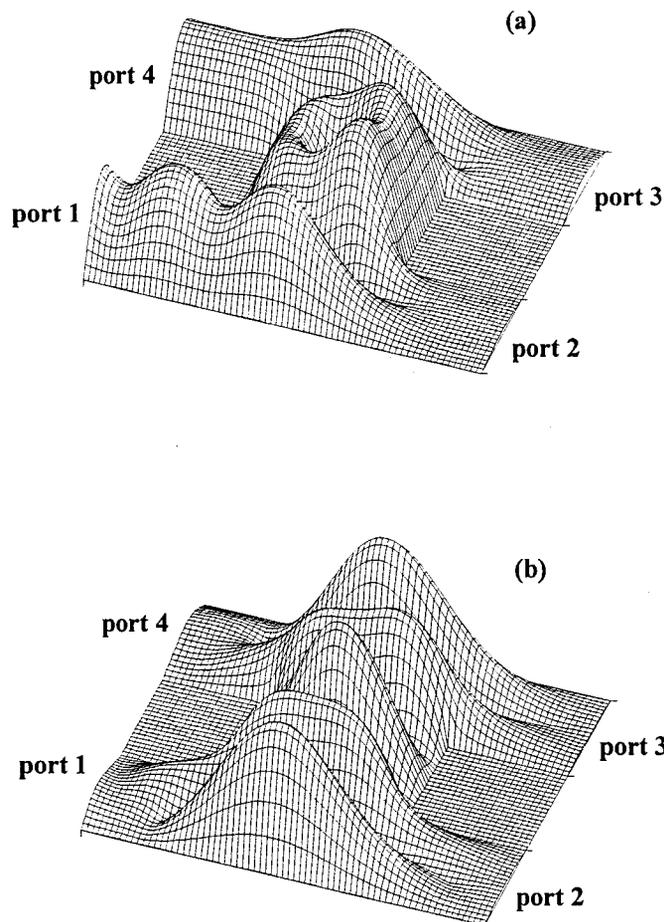


FIGURE 5.8 : Module des fonctions d'ondes dans un coupleur simple branche de dimensions $w=L_c=20$ nm et $w_c=30$ nm, calculées à des énergies $E=30.4$ meV, et 43.4 meV correspondant à deux niveaux quasi-liés de la structure.

Cette analyse en termes de niveaux quasi-liés et de leurs influences sur les conductances va nous permettre d'analyser en détail différents types de fonctionnement du coupleur simple branche en fonction des dimensions de la zone active.

5.2 - LE COUPLEUR SIMPLE BRANCHE : modes de fonctionnement

Nous avons choisi de focaliser notre attention sur quatre modes de fonctionnement du coupleur simple branche dont les études nous permettront de comprendre les mécanismes d'interférences intervenant dans la zone de couplage. Nous verrons successivement les situations de "backward" et de transfert latéral vers le port 3, puis nous étudierons conjointement les paramètres de couplage et de directivité en vue d'une application en coupleur hybride. Enfin, nous envisagerons l'obtention de non-linéarités dans les caractéristiques de conduction. Notons que pour l'ensemble des types de fonctionnement envisagés, les notions de port d'entrée et de port de sortie sont interchangeables au vu de la symétrie des dispositifs étudiés.

5.2.1 - Transfert latéral vers le port 4 : "backward"

Les caractéristiques du coupleur envisagé sont des largeurs de ports d'accès $w=20$ nm, une branche de couplage de 30 nm de large et 20 nm de long, et l'énergie d'injection est de 30.4 meV. Dans ces conditions, nous avons déjà représenté figure 5.8a le module de la fonction d'onde $|\varphi|$ dans la structure. En premier lieu, on peut noter que $|\varphi|$ présente à l'entrée des ports de sortie 2 et 3 un noeud situé en leur centre. De nouveau, une telle configuration est caractéristique d'un premier mode excité qui ne peut se propager car l'énergie d'injection considérée impose un transport monomode dans les ports de sortie. Ceci explique l'évanescence rapide de la fonction d'onde dans ces deux ports et les faibles valeurs des conductances G_3 et G_4 obtenues à cette énergie.

Par ailleurs, les légères ondulations de la fonction d'onde dans le port 1 reflètent un coefficient de réflexion de faible valeur, et on observe un cheminement préférentiel des électrons du port 1 vers le port 4 où la fonction d'onde est maximale. Enfin, il apparaît que la fonction d'onde est fortement asymétrique dans la branche de couplage avec une "accumulation" de probabilité de présence près du mur de confinement situé sur la droite de la branche [11]. Ce dernier joue le rôle d'un réflecteur qui permet une réorientation des électrons préférentiellement vers le port 4 avec changement du sens de propagation.

Ce phénomène peut aussi être analysé en termes d'orientation du front d'onde d'après les isophases de la fonction d'onde représentées figure 5.9. Rappelons que dans une telle représentation, la propagation libre d'une onde sur le premier mode est caractérisée par une évolution linéaire de la phase dans la direction de propagation, et par des sauts de 2π à 0 radians. Ainsi partant d'une évolution quasi-linéaire de la phase au port 1, confirmant le faible coefficient de réflexion, on note à l'entrée de la zone de couplage une courbure du front d'onde. L'onde entre dans la zone de couplage et "tourne" autour du noeud situé en son centre. L'onde est réfléchi sur le mur de confinement de droite, puis transmise majoritairement vers le port 4 avec un changement du sens de propagation visible ici par la modification des variations de phase comparativement au port 1. A l'entrée des ports de sortie 2 et 3, la phase

est presque constante sur une distance relativement grande. Ceci s'explique par la prédominance dans ces régions d'un mode évanescent. En s'éloignant de la zone de couplage, ce mode est fortement atténué et on retrouve, comme pour le port 4, une évolution linéaire de la phase caractéristique d'une propagation libre. Cependant, l'amplitude de la fonction d'onde étant faible dans ces deux ports de sortie, les conductances tendent vers 0.



FIGURE 5.9 : Courbe isophasse de la fonction d'onde d'une situation de "backward" dans un coupleur simple branche de dimensions $w=L_c=20$ nm, et $w_c=30$ nm. L'énergie d'injection est $E_F=30.4$ meV.

Cette description "classique" où l'on suit le trajet de l'électron lors de son transfert entre les ports 1 et 4, peut être complétée par une interprétation en termes de transfert d'amplitude entre modes propagatifs, suivant les zones de la structure. Pour cela, il faut d'abord remarquer sur les isophases que le saut de phase au centre de la branche est caractéristique de l'existence d'un mode d'ordre 2 propagatif. Sans l'existence de ce dernier, on retrouverait après la zone de courbure à l'intersection des guides un front de phase constant dans la direction transverse de la branche. Ceci expliquerait alors par symétrie dans le guide d'onde couplé, une équirépartition entre les ports 3 et 4, ainsi qu'une réflexion possible de l'onde à l'extrémité de la branche ; rien ne permettrait alors de différencier ces deux ports de sortie. Par contre, la redistribution des amplitudes de la fonction d'onde issue du port 1 sur les niveaux propres de la zone de couplage permet, par construction interférentielle (somme d'amplitudes complexes) de privilégier un transfert vers tel ou tel port de sortie, selon d'une part l'ordre des niveaux quasi-liés impliqués qui dépend lui-même des dimensions de la zone de couplage, et d'autre part de la longueur de la branche de couplage.

5.2.2 - Le transfert latéral vers le port 3

5.2.2.1 - Principe

Comme nous l'avons vu figure 5.2c, le transfert total des porteurs vers le port 3 peut être obtenu dans les mêmes configurations que précédemment à condition que la longueur de la branche de couplage soit amenée à $L_c=51$ nm. Par les mêmes approches que ci-dessus on peut expliquer ce transfert latéral quasi-total vers le port 3.

En effet, dans l'approche particulière de type "bille de billard", on observe figure 5.10 que l'onde provenant du port d'injection est réfléchiée par le mur de confinement droit, puis au lieu de rencontrer le port 4, grâce à l'allongement de la branche, elle est réfléchiée par le mur de gauche pour être enfin transmise vers le port 3.

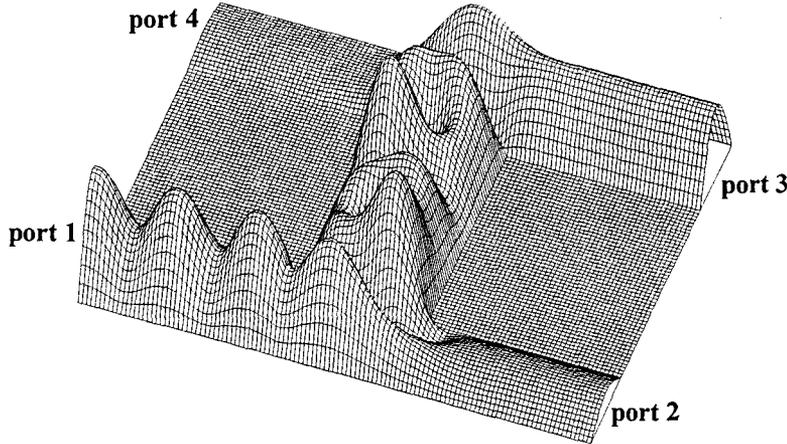


FIGURE 5.10 : Module de la fonction d'onde dans un coupleur simple branche de dimensions $w=20$ nm, $L_c=51$ nm, et $w_c=30$ nm, calculée à $E_F=30.4$ meV. Ici on observe un transfert latéral du port 1 vers le port 3.

D'un point de vue phase, la zone de couplage présente au milieu de sa largeur deux noeuds équirépartis sur la longueur totale (L_c+2w). L'onde arrivant du port 1 tourne autour du premier noeud dans un sens puis autour du second dans le sens inverse. Par ailleurs, on retrouve aussi une phase quasi-constante à l'entrée des ports de sortie 2 et 4, ainsi qu'une amplitude de la fonction d'onde très faible dans ces ports de sortie.

Un autre aspect de ces transferts électroniques consiste à déterminer l'ensemble des temps caractéristiques de ces processus d'interférences. Pour cela, nous analyserons le transfert d'un paquet d'ondes gaussien au sein de la structure, après avoir présenté les conditions aux limites absorbantes que nous avons développé.

5.2.2.2 - Approche numérique : conditions aux limites absorbantes

Nous considérons ici l'injection dans la structure par le port 1 d'un paquet d'ondes gaussien dans la direction (x) de propagation. Dans l'hypothèse d'une injection monomode et pour tenir compte du confinement latéral, le paquet d'ondes est initialisé par :

$$\varphi(x, y, t = 0) = \frac{1}{(\pi\sigma)^{1/4}} e^{ik_{x0}x} e^{\left(-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2}\right)} \sqrt{\frac{2}{w}} \sin\left(\frac{\pi}{w}y\right) \quad (5.5)$$

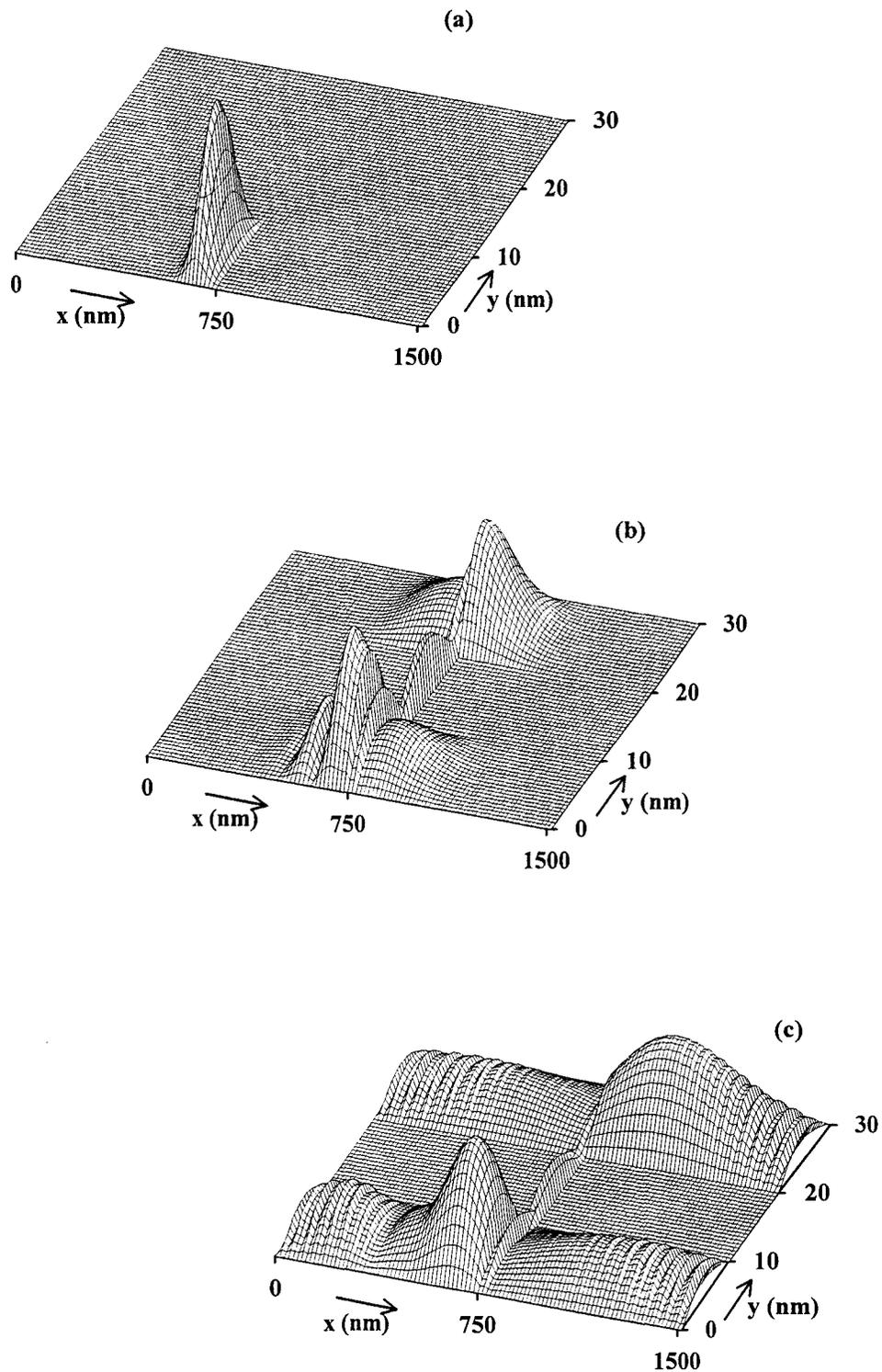


FIGURE 5.11 : Instantanés de l'évolution temporelle d'un paquet d'ondes injecté à $t=0$ ps (a) dans le port 1, (b) après 2 ps, et (c) après 6 ps. La structure est composée d'une branche centrale de largeur 44 nm, de longueur 10 nm, couplant deux guides de 10 nm de large.

où k_{x0} est le vecteur d'onde moyen du paquet d'ondes, σ son étalement spatial dans la direction de propagation, et w la largeur du port d'injection. Les coefficients précédant les termes exponentiels et le terme sinusoïdal assurent un paquet d'ondes unitaire.

L'évolution du paquet dans le temps est de nouveau déterminée par l'équation de Schrödinger à deux dimensions dépendante du temps conditionnée comme précédemment (équation 4.18). Pour la constriction, nous avons défini un domaine de simulation suffisamment étendu de manière à s'affranchir de la réflexion du paquet d'ondes sur les bords du domaine de simulation. Dans le cas présent, nous allons ignorer les réservoirs d'électrons injectant les porteurs et nous limiter aux ports d'accès. Ainsi le confinement latéral étant parfaitement connu aux limites, le paquet ne se déplace que dans la direction longitudinale, et l'écriture de conditions aux limites absorbantes en est nettement simplifiée.

La procédure adoptée, basée sur les travaux de Grün et al [13], consiste à introduire aux limites du domaine des zones tampons à potentiel complexe permettant de simuler des conditions d'accès adaptés, c'est à dire à coefficient de réflexion nul. L'avantage de la méthode comparativement à d'autres modèles mathématiques - de type mémoire par exemple où le stockage de tout le passé historique du paquet d'ondes aux limites est nécessaire [14] - provient de sa facilité de mise en oeuvre puisqu'elle se résume à résoudre numériquement deux équations couplées liant des fonctions du potentiel complexe (Annexe D). Cependant, on constate que la solution dépend du vecteur d'onde longitudinal, donc de l'énergie des porteurs incidents, ce qui peut poser un problème compte tenu de l'étalement énergétique du paquet d'ondes.

Bien qu'imparfaite, cette méthode permet néanmoins de réduire à seulement 10% la réflexion du paquet aux frontières du domaine lorsque l'on calcule le potentiel complexe en considérant le vecteur d'onde central k_{x0} du paquet d'ondes initial [13]. Ainsi, il est possible de réduire considérablement l'espace de simulation, et donc le temps de traitement numérique.

5.2.2.3 - Evolution temporelle

On considère le coupleur comprenant une branche de largeur $w_c=44$ nm, de longueur $L_c=10$ nm, couplant deux fils quantiques de largeur $w=10$ nm chacun. Cette structure est comparable, par réduction des dimensions dans un rapport 1/2, au coupleur pour lequel nous avons calculé les évolutions des conductances présentées sur la figure 5.4c. D'après la règle d'échelles ($\alpha=0.5$), on en déduit que les porteurs injectés au port 1 à une énergie $E_F=56.6$ meV ($4*14.15$ meV) transfèrent majoritairement vers le port 3.

Pour analyser ce transfert, nous initialisons un paquet d'ondes dans le port 1 (équation 5.5) à une distance de 80 nm de la zone de couplage. L'énergie centrale du paquet est prise à 56.7 meV ($k_{x0}=33.4 \cdot 10^6 \text{ m}^{-1}$), et l'étalement spatial longitudinal $\sigma=30$ nm ($\delta E=11.9$ meV). L'évolution temporelle du paquet est estimée toutes les $\Delta t=0.25$ fs et l'espace de simulation, discrétisé avec un pas $\Delta x=\Delta y=0.5$ nm, se réduit à $30*1500 \text{ nm}^2$. Cet espace réduit inclut à chaque extrémité des ports d'accès des zones tampons de 25 nm de long à potentiel complexe $V_T=W-iA$ avec $W=1.86$ meV, et $A=1.49$ meV.

Les figures 5.11a, b, et c représentent trois instantanés du module du paquet d'ondes : tout d'abord (a) le paquet à $t=0$ s situé dans le port 1, puis à $t=2$ ps (b) lorsque le paquet

interagit fortement avec la zone de couplage, et enfin (c) à $t=6$ ps lorsque les paquets quittent l'espace de simulation par les quatre ports d'accès.

On obtient bien le transfert majoritairement vers le port 3 ainsi que des amplitudes beaucoup plus faibles aux ports 2 et 4. Dans le canal incident, on observe le retour successif de paquets d'ondes d'amplitudes différentes qui reflètent l'existence de plusieurs phénomènes de réflexion successifs : la première réflexion (paquet à l'extrémité du port 1, figure 5.11c), provient de l'interaction initiale du paquet avec la zone de couplage, le second résulte des phénomènes d'interférences qui se développent lorsque s'opère le transfert entre les deux guides parallèles [15]. Notons que le paquet d'ondes initial est centré autour d'une énergie juste supérieure au premier mode propagatif. On s'attend donc à observer une réflexion assez importante (d'environ 50%) du paquet dans le port d'entrée.

Ceci est confirmé sur la figure 5.12 qui synthétise la répartition du paquet d'ondes en fonction du temps dans les trois ports de sortie, ainsi que dans la zone de couplage (ρ). Ces répartitions sont obtenues par intégration du paquet dans chaque zone distincte, et on peut en déduire par complémentarité un coefficient de réflexion de l'ordre de 35% dans la phase finale du transfert. Comme attendu, on obtient un maximum de transfert du paquet de 50% vers le port 3, alors que moins de 10% a été orienté vers chacun des deux autres ports de sortie.

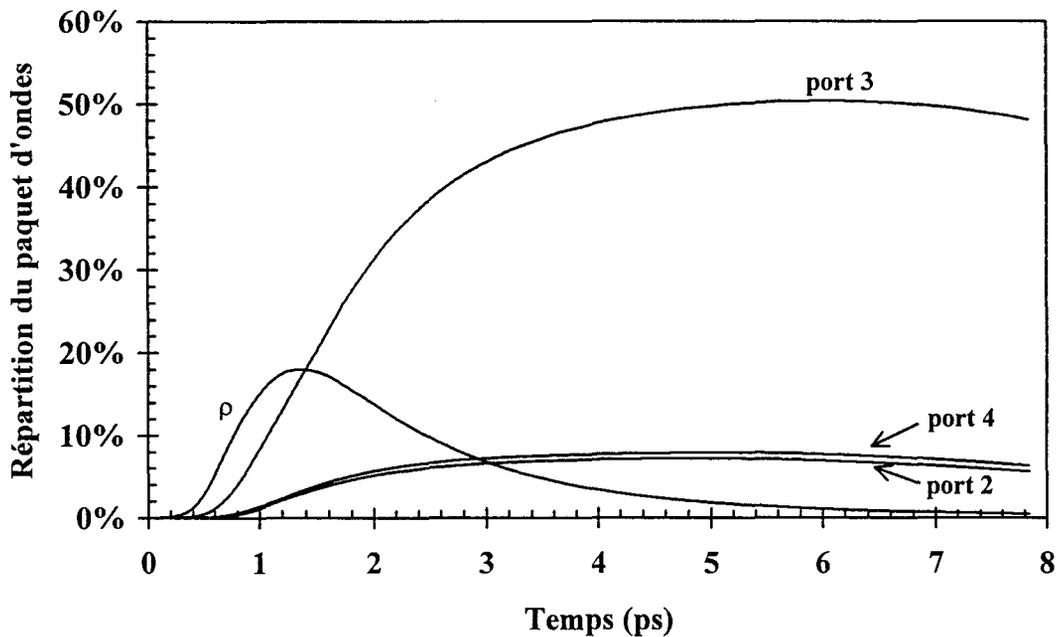


FIGURE 5.12 : Evolution temporelle de la répartition d'un paquet d'ondes dans les ports de sorties et dans la zone de couplage (ρ).

Comparativement au coefficient de transmission de 0.9 calculé pour le port 3 à l'énergie de résonance (figure 5.4c), le taux transféré dans le cas présent peut sembler faible. Néanmoins, ceci est une conséquence directe de la répartition énergétique du paquet d'ondes incident. En effet, les énergies situées dans les queues du paquet d'ondes provoquent soit une forte réflexion dans le port 1, pour les énergies inférieures à son énergie centrale, soit d'après

les spectres de conductance des transferts privilégiés vers le port 4 puis 2, pour les énergies supérieures.

Enfin, on constate la sortie des paquets du domaine de simulation par l'amorce d'une décroissance des répartitions en fin d'évolution temporelle, et par la disparition d'une probabilité de présence significative dans la zone de couplage. L'efficacité des zones tampons à potentiel complexe est ici vérifiée par l'absence d'ondes rétrodiffusées, et par l'évolution régulière des répartitions données figure 5.12. Elles ne sont révélées en fin de simulation que par les faibles sur-oscillations que l'on peut observer figure 5.11c sur les paquets à proximité des limites du domaine.

5.2.2.4 - Temps caractéristiques

Nous allons ici étendre au cas du transfert latéral les différents temps classiquement définis dans les études des diodes à effet tunnel résonnant [16]. Par analogie on peut définir les quatre temps suivants : le temps de construction dans la zone de couplage τ_B ("built up"), le temps de résidence τ_d ("dwell time"), le temps de transit τ_T , et le temps de transfert du port 1 vers le port 3 τ_{13} .

Les deux premiers temps peuvent être évalués d'après l'évolution temporelle de la répartition $\rho(t)$ dans la zone de couplage. Ainsi, le temps d'établissement de l'état quantique dans la zone de couplage correspond au temps de montée, soit $\tau_B=0.63$ ps, alors que le temps de résidence est calculé par une approximation exponentielle de la décroissance $\rho(t)=A\exp(-t/\tau_{d1})$ avec $\tau_{d1}=1.4$ ps.

Par une approche analogue aux diodes à effet tunnel résonnant, ce temps devrait être équivalent à celui déduit du pic de transmission correspondant par la relation $\tau_{d2}=\hbar/\Gamma$ (avec Γ la largeur à mi-hauteur). Cette deuxième détermination nous donne dans le cas présent $\tau_{d2}=0.3$ ps, laissant apparaître ici une différence importante entre les deux temps. Ceci signifie que le mécanisme de transfert ne peut pas être considéré aussi simplement qu'un processus résonnant à travers un niveau quasi-lié, comme traité dans le cas d'une diode double barrière.

Le temps de résidence (τ_{d1}) est en fait ici plus proche du temps de transit que l'on peut définir comme étant le temps nécessaire à l'électron pour qu'il effectue un aller et retour sur la largeur de la branche de couplage, soit $\tau_T=2w_c/v_{x0}$ avec v_{x0} la vitesse correspondant au vecteur d'onde central du paquet d'ondes : dans le cas présent on obtient $\tau_T=1.5$ ps. Ceci est caractéristique d'un système très transparent pour lequel il n'y a pas de région classiquement interdite à traverser par les électrons - en général ce type de région implique un temps de transit très petit devant le temps de résidence, traduisant les allers et retours de porteurs dans la zone de confinement [17] -.

En pratique, nous nous intéresserons plutôt au temps de transfert du port 1 vers le port 3, qui par analogie avec un temps de commutation en électronique peut être déduit de la croissance de la répartition du paquet d'ondes au port 3 (figure 5.12) entre 10 et 90% de sa valeur finale : on obtient ici $\tau_{13}=2.55$ ps. Bien que supérieur à l'ensemble des autres temps caractéristiques envisagés, celui-ci nous donne une bonne estimation du temps total nécessaire pour assurer la commutation et laisse envisager, comme attendu, la possibilité d'applications de ces structures à base de guides d'ondes électroniques à des fréquences de plusieurs centaines de GHz [15].

5.2.3 - Coupleur hybride

Par analogie avec les systèmes passifs micro-ondes, une autre application possible de notre dispositif est le coupleur 3 dB ou hybride. Ce fonctionnement est caractérisé par une équirépartition du flux électronique aux ports 2 et 3 (couplage 3dB), une transmission négligeable au port 4 (directivité élevée), et une réflexion en entrée la plus faible possible.

Comme vérifié précédemment, lorsque le transport est monomode dans la branche de couplage, des différences entre les conductances G_3 et G_4 sont indiscernables, et on ne peut pas observer de couplage directif. Ceci se retrouve en micro-ondes dans le cas d'un coupleur simple branche réalisé en lignes "microstrip". En effet en ne considérant que l'unique propagation du mode TEM dans les lignes, on peut vérifier en théorie l'égalité des coefficients de la matrice de répartition $S_{13}=S_{14}$ qui représentent l'analogie des coefficients de transmission T_{13} et T_{14} de notre dispositif.

La figure 5.13 donne les évolutions du coefficient de couplage (C) et de la directivité (D) en fonction de l'énergie d'injection E_F des porteurs dans une structure comprenant une branche centrale de largeur $w_c=44$ nm, de longueur $L_c=20$ nm, qui couple deux guides d'ondes électroniques de 20 nm de large. Pour quatre énergies E_F distinctes, on obtient un couplage de 3 dB, en particulier pour $E_F=17.2$ meV où la directivité est la plus importante ($D=12.4$ dB).

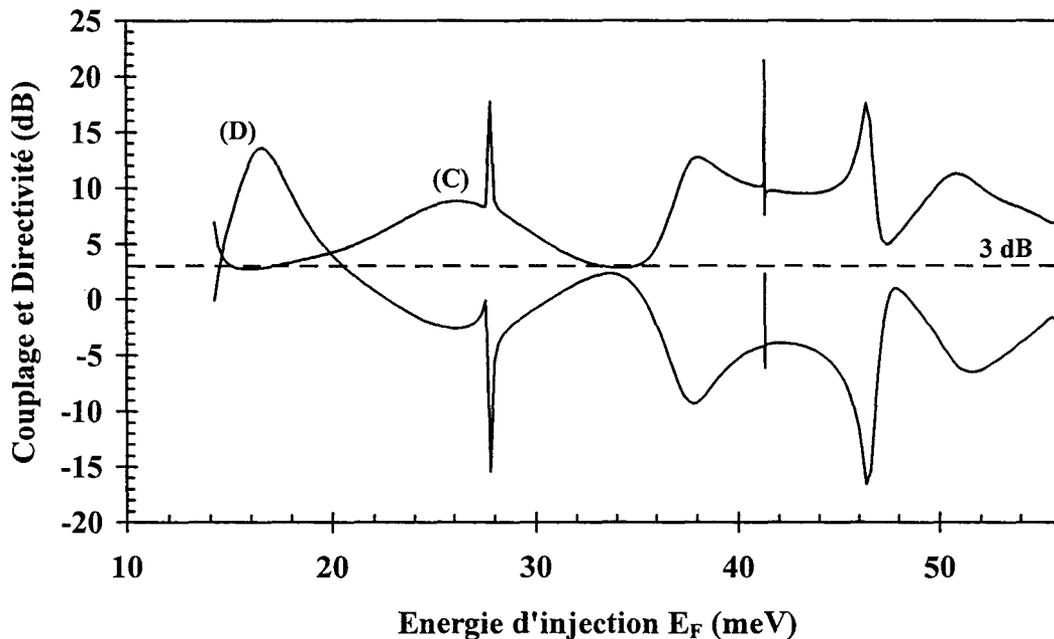


FIGURE 5.13 : Evolution du coefficient de couplage (C) et de la directivité (D) en fonction de l'énergie d'injection des porteurs dans un coupleur simple branche de largeur $w_c=44$ nm, de longueur $L_c=20$ nm, la largeur des ports d'accès est $w=20$ nm.

Bien que le couplage 3 dB soit envisageable, il faut cependant remarquer que la directivité reste médiocre. Nous verrons dans le paragraphe 5.3 comment l'utilisation de structures multibranches permet d'améliorer significativement ces propriétés.

5.2.4 - Système hors-équilibre

Comme dans le cas du stub, il est possible d'envisager les non-linéarités de conductions aux différents ports d'entrée/sortie. Par ailleurs, il convient de savoir si les propriétés de transport énoncées précédemment persistent ou non lorsque les différents ports d'accès sont polarisés.

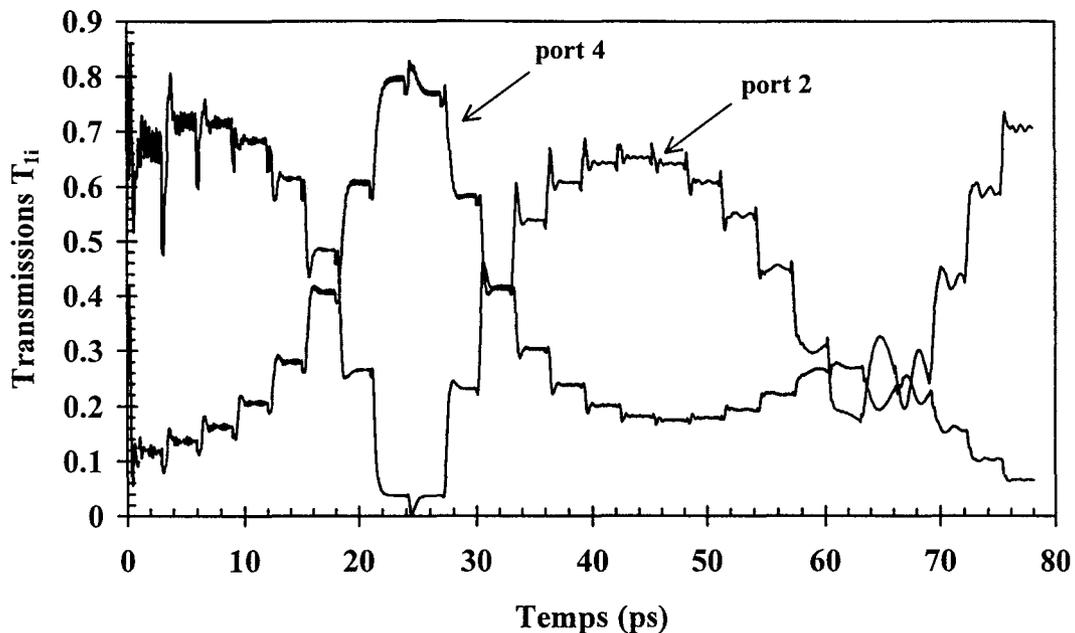


FIGURE 5.14 : Transitoires des transmissions aux port 2 et 4 calculés dans l'hypothèse d'une injection continue de porteurs dans un coupleur simple branche polarisé. Chaque saut de transmission est consécutive à la modification de l'énergie d'injection.

5.2.4.1 - Approche numérique

Pour obtenir les spectres de transmissions d'une structure simple branche hors-équilibre, nous avons développé une méthode qui se base sur un modèle d'injection continue de porteurs identique à celui utilisé au chapitre 4. La procédure se divise en deux étapes :

- nous nous définissons tout d'abord dans la zone de couplage un profil de potentiel. En supposant l'absence de réaction de charge d'espace, ce profil est obtenu en résolvant l'équation de Poisson à deux dimensions : $\Delta V_{\Phi}=0$. Les conditions aux limites sont de type Dirichlet aux quatre ports d'entrée/sortie, soit $V_{\Phi}=0$ dans le port 1 et $V_{\Phi}=V_p$ dans les trois autres ports, et des conditions de Neumann sont imposées aux autres limites de la zone de couplage.

- l'équation de Schrödinger à deux dimensions dépendante du temps en injection continue est initialisée à une énergie juste au dessus du premier mode propagatif à polarisation nulle des ports d'accès, et la variation de potentiel calculée ci-dessus est appliquée à l'instant $t=0$. Les conditions aux limites sont équivalentes à celles développées dans l'annexe C. Les transmissions vers les différents ports présentent un régime transitoire, puis se stabilisent autour d'une valeur moyenne donnant la valeur des transmissions sous polarisation à l'énergie considérée. Ensuite en augmentant l'énergie d'injection de ΔE périodiquement, on retrouve des évolutions de transmission similaires, et on obtient ainsi les spectres des transmissions hors équilibre. La figure 5.14 montre un exemple de ce type de calcul avec la succession des transitoires qui se répètent toutes les trois picosecondes.

5.2.4.2 - Coefficient de transmission

On a considéré une structure comportant une simple branche de largeur $w_c=30$ nm, de longueur $L_c=20$ nm, couplant deux guides d'ondes électroniques de 20 nm de large. Le domaine de simulation de dimension $70*60$ nm² est discrétisé par $\Delta x=\Delta y=1$ nm, et la zone de couplage est située en son centre. La fonction d'onde est calculée à $E_F=15$ meV par la méthode du raccordement de modes, puis après polarisation est évaluée toutes les $\Delta t=2.5$ fs. Après 1.5 ps, le régime permanent est supposé établi, et on calcule les valeurs moyennes des transmissions sur les 1.5 ps suivantes. Ensuite, l'énergie d'injection est augmentée de $\Delta E=0.25$ meV, les conditions aux limites sont réévaluées, et on réitère le calcul des valeurs moyennes des transmissions après chaque régime transitoire.

La figure 5.15 donne les spectres des transmissions et du coefficient de réflexion calculés (a) à l'équilibre, (b) pour $V_p=10$ mV, et (c) pour $V_p=20$ mV. On observe globalement un décalage et un élargissement des pics de transmission vers les énergies inférieures à polarisation croissante. Ce décalage s'accompagne d'un affaiblissement notable des taux transférés aux ports de sortie au profit du coefficient de réflexion qui augmente avec V_p . La situation de "backward" est conservée sous polarisation jusqu'à environ $V_p=20$ mV avec cependant une diminution de presque 50% de la transmission maximale vers le port 4.

Comme l'indique la pureté des spectres obtenus, on notera l'efficacité de la méthode utilisée pour traiter les problèmes à variations de potentiel dans les canaux. Cette efficacité est vérifiée aussi par un calcul d'écart type en chaque point des spectres qui donne au maximum des fluctuations de 4% autour de la valeur moyenne. Notons que l'amplitude de ces fluctuations, provenant de la modification de l'injection, est fortement dépendante du pas en énergie utilisé (ici 0.25 meV), ainsi que des durées du régime transitoire et du régime permanent considérées.

A partir de ces résultats, l'analyse des non-linéarités de conduction présentes aux différents ports d'entrée/sortie est possible. Néanmoins comme dans le cas du stub électronique, il apparaît que les contrastes de transmission, principalement vers le guide couplé, soient insuffisants pour obtenir des effets de conductance différentielle négative suffisamment prononcés pour en envisager une application. Il apparaît donc qu'un effort d'optimisation des structures en terme de directivité, que nous allons explorer dans la dernière partie de ce chapitre, est nécessaire. En revanche malgré les temps de traitement numérique

importants, la méthode développée ici semble tout à fait adaptée pour l'utilisation d'un profil de potentiel plus réaliste pour analyser les phénomènes d'interférences.

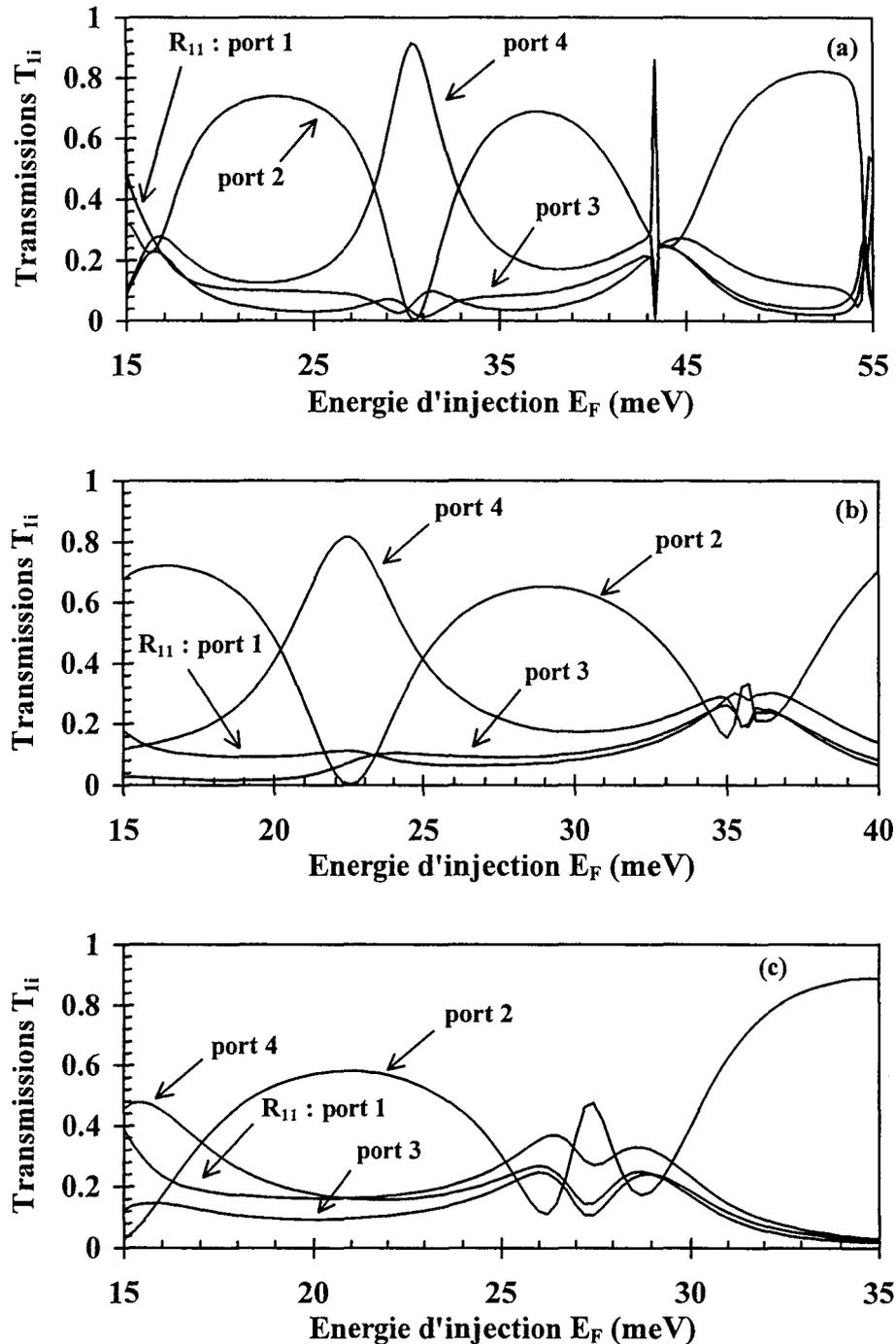


FIGURE 5.15 : Influence de la polarisation d'un coupleur simple branche, sur les spectres de transmission calculés (a) à l'équilibre, (b) pour $V_p=10$ meV, (c) $V_p=20$ mV. Le coupleur est composé d'une branche de largeur 30 nm et de longueur 20 nm, les guides principaux ont une largeur $w=20$ nm.

5.3 - STRUCTURES MULTIBRANCHES

5.3.1 - Généralités

Nous avons vu dans les paragraphes précédents que l'obtention d'un couplage directif dans une structure simple branche nécessitait un transport multimode dans la cavité. Par analogie avec les systèmes micro-ondes, et en considérant une décomposition de la fonction d'onde sur les différents modes propres de la cavité, ceci induit des phénomènes de dispersion consécutifs à des ondes évoluant avec des vitesses (vecteurs d'ondes) caractéristiques différentes. De manière générale, ces effets provoquent une dégradation des propriétés intrinsèques des structures envisagées.

Le concept qui sous-tend l'utilisation de structures multibranches repose sur la multiplication des zones d'interférences, dans lesquelles le transport est monomode, pour améliorer les caractéristiques de couplage et de directivité, au lieu d'utiliser une zone d'interférences unique où le transport est multimode.

5.3.2 - Coupleur double branche

La structure schématisée figure 5.16 comporte deux branches de couplage, de longueur L_c et de largeur w_c , séparée l'une de l'autre d'une longueur L_T , qui couplent deux guides d'ondes électroniques de largeur w . Nous considérerons des structures symétriques et des dimensions de branches égales. D'un point de vue numérique, la complication de la géométrie implique un nombre croissant d'opérations matricielles, mais ne modifie en rien la technique de raccordement de modes utilisée.

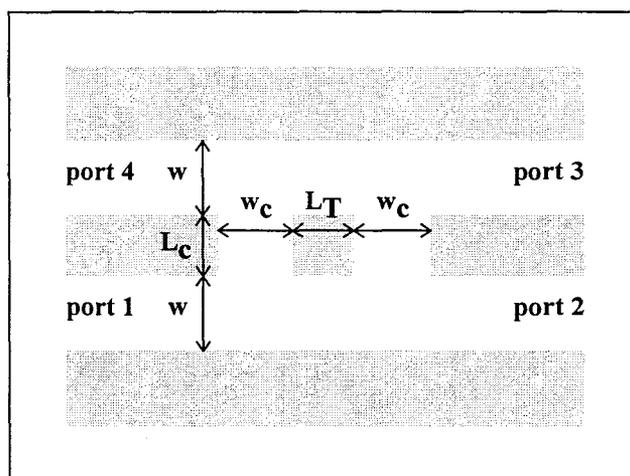


FIGURE 5.16 : Géométrie du coupleur double branche. La largeur des guides d'accès est w , les branches sont caractérisées par leur largeur w_c et leur longueur L_c . Elles sont séparées l'une de l'autre d'une distance L_T .

Comme dans le cas du coupleur simple branche, nous allons maintenant nous intéresser aux spectres de transmission et de conductance en fonction d'une part de l'énergie d'injection des porteurs pour une géométrie donnée, et d'autre part en fonction de la largeur des guides couplés à énergie fixée.

5.3.2.1 - Energie d'injection

Considérons un coupleur double branche dont toutes les dimensions caractéristiques sont fixées à $L_c=w_c=L_T=w=20$ nm. La figure 5.17 représente les spectres de conductance de la structure en fonction de l'énergie d'injection E_F (a) du port 2, et (b) des ports 3 et 4. Dans les ports d'accès de 20 nm de large, on voit apparaître le premier mode propagatif à 14 meV, et le deuxième mode à 56 meV.

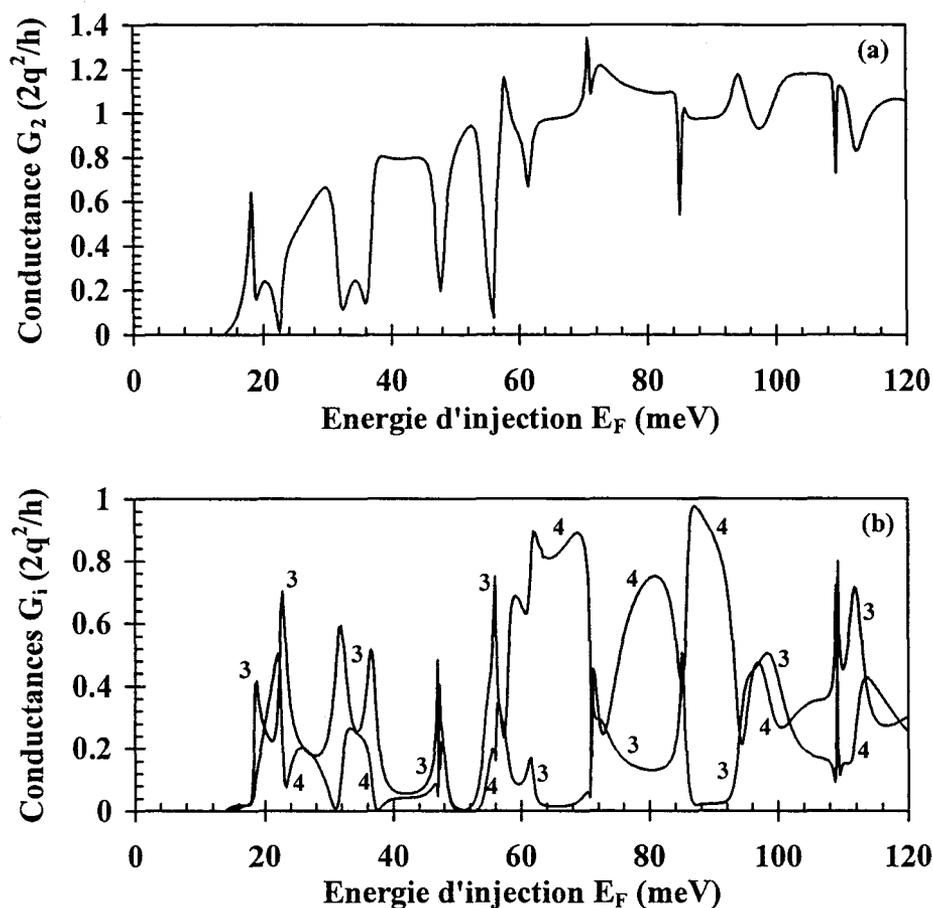


FIGURE 5.17 : Spectres de conductance en fonction de l'énergie d'injection E_F , (a) du port 2, et (b) des ports 3 et 4 d'un coupleur double branche. Les dimensions de la structure sont $L_c=w_c=L_T=w=20$ nm.

On retrouve des évolutions de conductance fortement marquées par la condition d'injection, ainsi que des transferts de porteurs privilégiés vers les différents ports de sortie. Il est visible que la configuration envisagée ici favorise le transfert latéral du port 1 vers le port 3 au détriment du port 4. Cependant comme pour le coupleur simple branche, l'allongement des branches de couplage (L_c) permet de renverser la situation à l'avantage du fonctionnement en "backward".

Un fait marquant est l'apparition d'un dédoublement des pics de conductance au port 3 qui est, comme l'indique les positions des minima de la conductance G_2 , caractéristique du couplage des états quantiques quasi-liés de chacune des branches qui se comportent alors

comme deux cavités résonantes. Dans une telle configuration, on peut aussi détecter quatre états liés situés sous l'énergie du premier mode propagatif des canaux d'accès, chacun d'entre eux pouvant être attaché par une vue de l'esprit à chacune des intersections des branches avec les ports d'accès.

En première approche, on peut obtenir un aperçu des caractéristiques de couplage et de directivité du coupleur, en notant que dans la limite d'un régime monomode on obtient pour plusieurs énergies d'injection un transfert latéral vers le port 3 de plus de 50% alors que la conductance au port 4 est en moyenne inférieure à G_3 . Ceci indique l'amélioration possible de la directivité des coupleurs électroniques dans une configuration double branche. Lorsque deux modes sont injectés, la situation s'inverse et on observe un transfert privilégié vers le port 4 au détriment du port 3. En effet, à plusieurs reprises la conductance G_4 tend vers $2q^2/h$ alors que G_3 tend vers 0. Conjointement G_2 est alors proche de $2q^2/h$, montrant la possibilité d'obtenir une directivité significative même lorsque plusieurs modes sont injectés dans le port d'entrée.

En résumé, il apparaît que l'ajout d'une branche de couplage tend à dissocier fortement, même en régime monomode, les évolutions des conductances aux différents ports, avec le bénéfice d'une augmentation de la directivité des phénomènes d'interférences.

5.3.2.2 - Largeur des ports d'accès

Nous avons déjà montré à maintes reprises que la modification de polarisation des grilles déposées en surface du composant permet de moduler la largeur des guides principaux. Nous envisageons à nouveau un tel cas en fixant l'énergie d'injection $E_F=40$ meV dans une structure double branche où $L_c=w_c=L_T=20$ nm, et pour laquelle nous faisons varier la largeur des ports d'accès (w) ainsi que la longueur totale des deux zones de couplage (L_c+2w).

La figure 5.18 représente les évolutions des conductances (a) au port 2, et (b) aux ports 3 et 4, en fonction de la largeur des ports d'accès. Afin de rendre visible l'apparition des modes dans le port d'entrée, nous donnons aussi sur la figure 5.18a l'évolution de la conductance dans un guide d'ondes uniforme de largeur w .

Ici encore pour le coupleur, la quantification de conductance au port 2 est globalement conservée avec cependant des valeurs moyennes de chacun des plateaux inférieures au cas du guide uniforme. Comme pour le coupleur simple branche, on retrouve aussi une transmission totale du port 1 vers le port 2 pour chaque largeur des ports d'accès laissant apparaître un mode de propagation supplémentaire. Par ailleurs quelque soit le nombre de modes propagatifs, les conductances aux ports 3 et 4 présentent des valeurs moyennes comparables et chacune inférieure à $2q^2/h$, montrant une fois de plus que seul le mode propagatif d'ordre le plus élevé participe au couplage, les modes d'ordres inférieurs étant directement transmis vers le port 2.

On notera aussi que si des différences notables existent entre G_3 et G_4 pour une propagation monomode, avec l'augmentation du nombre de modes propagatifs, il devient de plus en plus difficile de maintenir ces différences. En particulier, les coïncidences entre des valeurs de conductance élevées au port 3 et de valeurs faibles au port 4 - situation favorable pour un coupleur directif - tendent à disparaître dans un régime multimode.

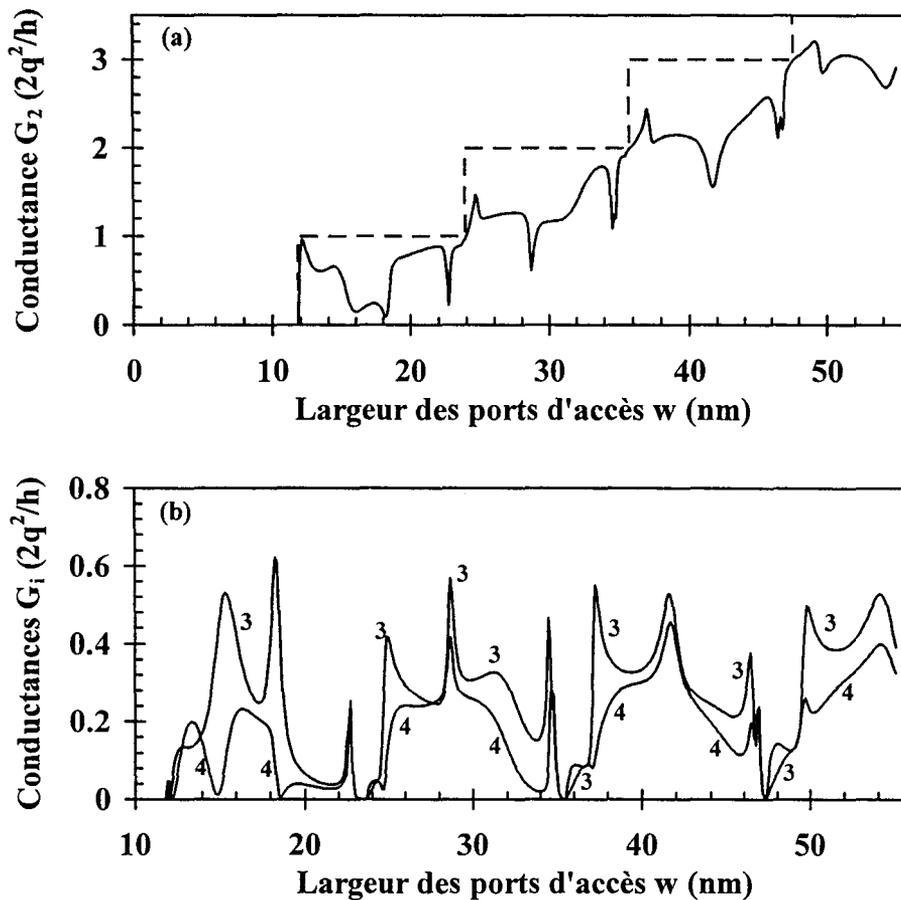


FIGURE 5.18 : Evolutions des conductances en fonction de la largeur w , (a) au port 2, (b) aux ports 3 et 4, d'un coupleur double branche. Les autres dimensions sont identiques ($L_c=w_c=L_T=20$ nm), et l'énergie d'injection vaut 40 meV.

5.3.3 - Modes de fonctionnement du coupleur double branche

A partir de ces évolutions de conductance, nous avons sélectionné trois types de fonctionnements particuliers : le couplage par mode évanescent, puis en régime monomode le coupleur hybride, et enfin les transferts latéraux provoqués par modification de la largeur des canaux d'accès. Ces différents modes opératoires vont nous permettre de mettre en évidence certains aspects des processus d'interférences.

5.3.3.1 - Couplage par mode évanescent

Le couplage par mode évanescent peut être obtenu pour des branches de couplage plus étroites que les ports d'accès, et lorsque l'énergie d'injection se situe entre le premier mode propagatif des ports d'accès et le premier mode transverse des branches ; le couplage entre guides principaux se fait alors par ondes évanescentes à travers les deux branches.

La figure 5.19 donne les spectres de conductance, (a) au port 2, et (b) aux ports 3 et 4, en fonction de l'énergie d'injection d'une structure couplant deux guides d'ondes électroniques

de largeur 40 nm à travers deux branches de largeur et de longueur 20 nm séparée l'une de l'autre de 20 nm.

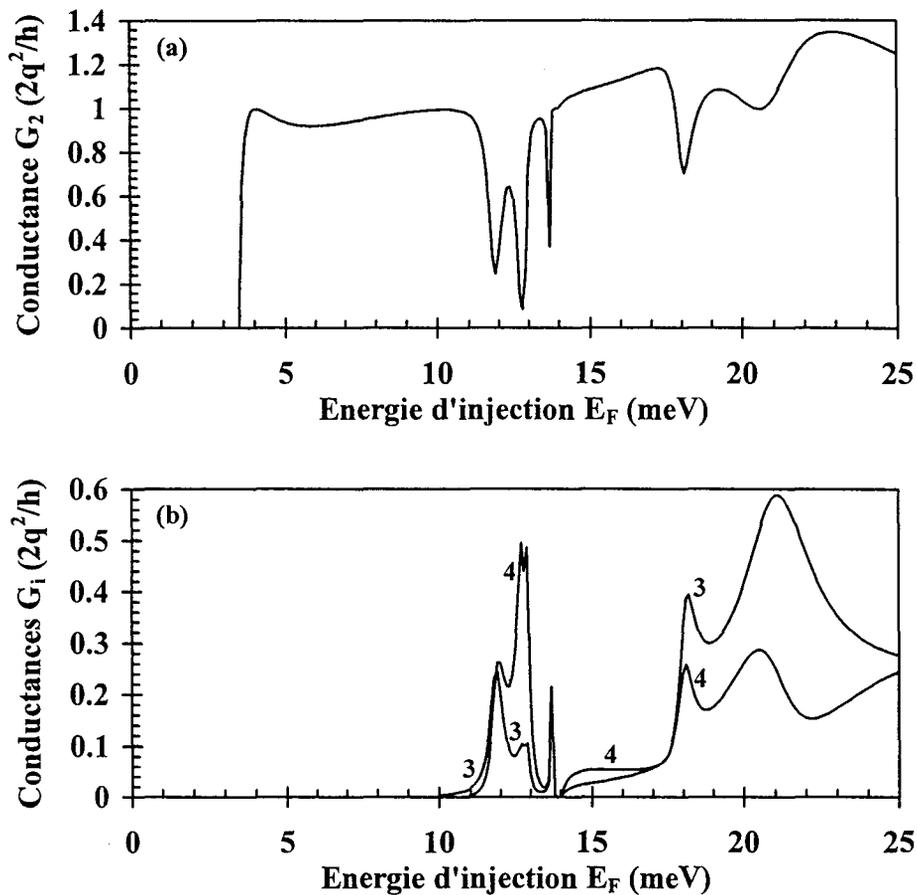


FIGURE 5.19 : Spectres de conductance (a) au port 2, et (b) aux ports 3 et 4, en fonction de l'énergie d'injection. Les deux guides d'accès de 40 nm de large, sont couplés par deux branches de largeur et de longueur 20 nm séparée l'une de l'autre par $L_T=20$ nm.

A basse énergie, le flux de porteurs est presque totalement transmis vers le port 2 car la longueur d'évanescence aux intersections avec les branches est trop petite devant la longueur de ces dernières pour qu'il y ait couplage aux ports 3 et 4. Au delà de 10 meV, on voit clairement apparaître le transfert de porteurs d'un guide principal à l'autre pour une énergie qui se situe sous le premier mode transverse des branches de couplage (14 meV).

A titre d'illustration pour une énergie de 11.9 meV, on obtient une équirépartition des conductances sur les trois ports de sortie avec $G_2=G_3=G_4=0.25 2q^2/h$ comme le montre la figure 5.20a qui donne la répartition de la fonction d'onde dans la structure calculée à cette énergie. Ici, la décroissance exponentielle observée dans chacune des branches traduit l'évanescence des ondes qui par la suite reconstruisent une fonction d'onde de type propagative dans les ports 3 et 4. En outre dans cette configuration, on observe sur la figure 5.20b des plateaux de phase constante dans chacune des branches, caractéristiques de l'évanescence.

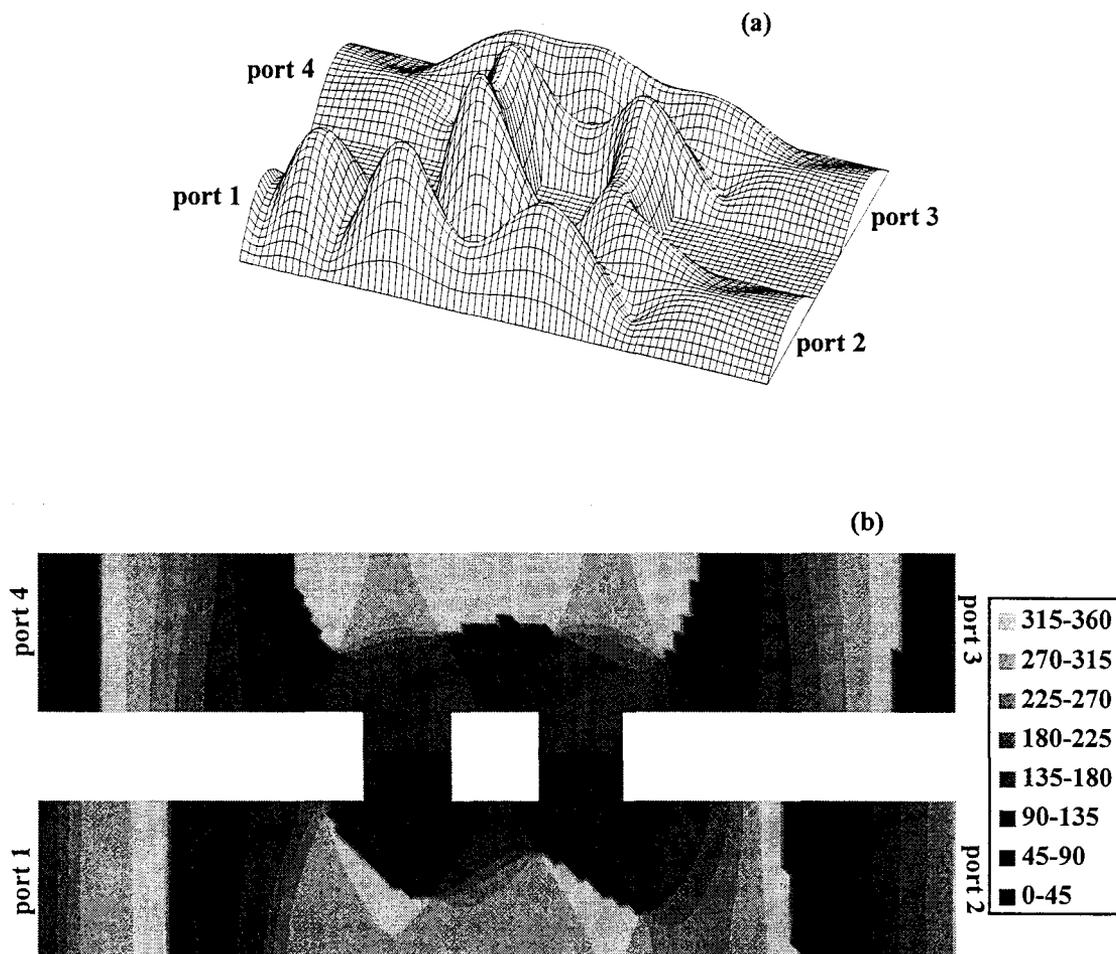


FIGURE 5.20 : Module de la fonction d'onde (a) et isophase (b) d'un coupleur double branche dans une situation de couplage par mode évanescent obtenue dans les structures de la figure 5.19 pour une énergie d'injection $E_F=11.9$ meV.

5.3.3.2 - Coupleur 3 dB

La figure 5.21 montre les évolutions du coefficient de couplage et de la directivité correspondant aux variations de conductance de la figure 5.18. Ainsi dans le régime bimode, la directivité reste inférieure à 10 dB alors qu'elle atteint plus de 30 dB au début du régime monomode. Cependant, cette forte directivité n'est pas exploitable au vu du faible couplage ($C=13$ dB) qui traduit la transmission quasi-unitaire des porteurs vers le port 2 apparaissant clairement à $w=12.2$ nm sur la figure 5.18a. Par contre pour $w=18.5$ nm, on retrouve une situation de coupleur 3 dB avec une directivité proche de 20 dB bien supérieure à celle obtenue par le coupleur simple branche.

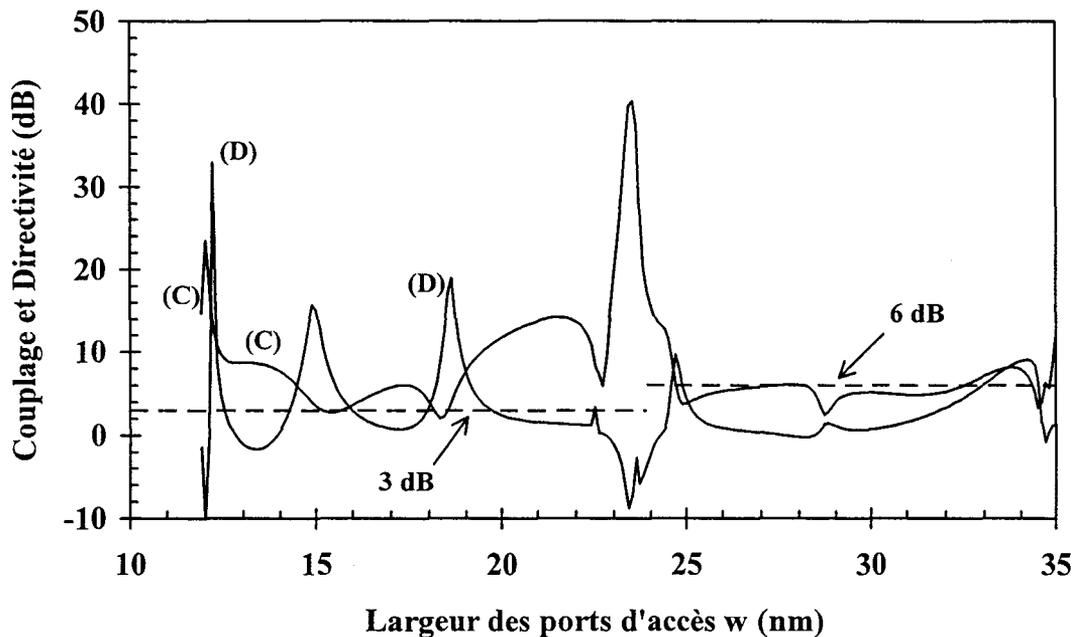


FIGURE 5.21 : Evolution du coefficient de couplage (C) et de la directivité (D) en fonction de la largeur des ports d'accès d'un coupleur double branche ($w_c=L_c=L_T=20$ nm) pour une injection des porteurs à une énergie $E_F=40$ meV.

Nous pouvons analyser plus en détail cette configuration à l'aide de la figure 5.22 qui donne des vues bidimensionnelles de (a) la probabilité de présence et (b) la phase de la fonction d'onde. A partir de la figure 5.22a, on observe le partage égal du flux incident entre les ports 2 et 3 (coupleur 3 dB) avec un coefficient de réflexion au port 1 inférieur à 0.01, ainsi qu'une transmission vers le port 4 très faible. La présence d'un noeud au milieu du port 4 à proximité de la première branche est le reflet de l'excitation d'un mode supérieur évanescant. Par contre, les phénomènes interférentiels qui se développent dans la zone de couplage construisent la fonction d'onde aux ports 2 et 3. On peut interpréter l'ensemble de ces phénomènes en distinguant les deux chemins qui assurent le couplage : les différents flux se trouvent en phase au port 3, et en opposition de phase au port 4 [18].

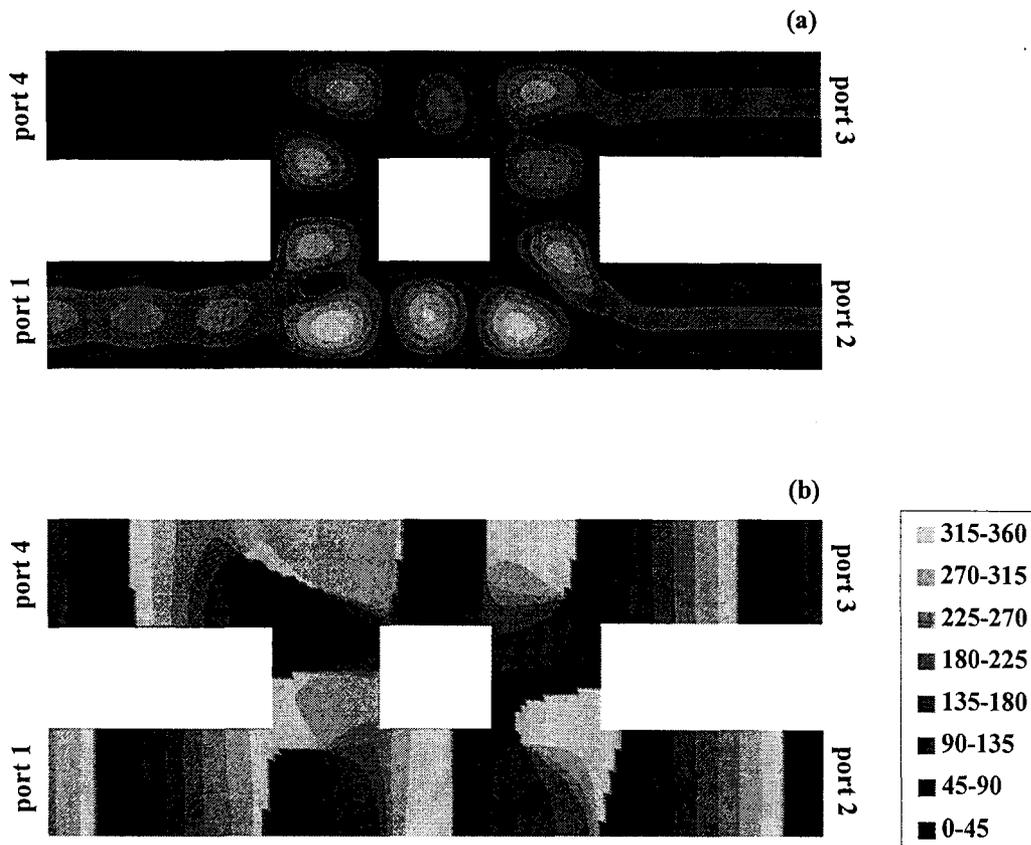


FIGURE 5.22 : Vues bidimensionnelles (a) de la probabilité de présence et (b) de la phase de la fonction d'onde dans une configuration de couplage 3dB. La structure comporte deux branches identiques ($w_c=L_c=20$ nm), séparées l'une de l'autre de $L_T=20$ nm, couplant deux guides d'ondes électroniques de largeur $w=18.5$ nm. L'énergie d'injection est $E_F=40$ meV.

Une telle interprétation, basée sur les interférences constructives et destructives, est confirmée par l'évolution de la phase représentée figure 5.22b. Dans chaque port d'accès, on observe une évolution linéaire de la phase de 0 à 2π caractéristique d'une propagation monomode. Si cette évolution est encore observée dans la seconde branche, en revanche la phase est quasiment constante dans la première branche et à proximité du port 4. Cela traduit l'existence dans cette zone de deux flux de vecteurs d'ondes opposés qui se superposent : l'un transmis par la première branche et l'autre provenant de la réflexion de l'onde issue de la seconde branche à l'entrée du port 3.

5.3.3.3 - Les transferts latéraux

Les situations privilégiant le transfert des porteurs vers un port unique de sortie peuvent être encore rencontrées dans les structures double branche. En prenant toujours la largeur des ports d'entrée/sortie comme paramètre, il est possible d'obtenir deux régimes de transfert total vers un des ports de sortie tout en conservant un régime de transport monomode. Cette interrupteur interférentiel, dont le fonctionnement peut être assimilé à celui d'un multiplexeur, permet par simple changement de polarisation de grilles en surface du composant, de privilégier le transfert de porteurs d'un port à l'autre [19].

Pour illustrer ce processus, nous avons utilisé des branches de couplage de largeur 20 nm et de longueur 15 nm séparée l'une de l'autre de $L_T=20$ nm. Comme le montre la figure 5.23 pour une énergie de 25 meV, nous obtenons soit (a) un transfert latéral vers le port 3 pour $w=27.4$ nm ($G_3=0.95 2q^2/h$), soit (b) une transmission directe pour $w=29$ nm ($G_2=0.99 2q^2/h$).

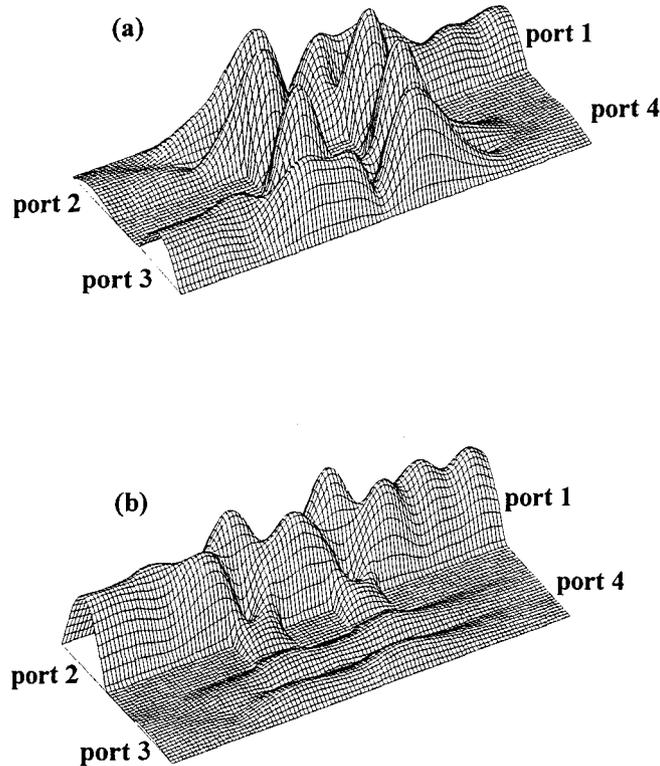


FIGURE 5.23 : Illustration du fonctionnement du coupleur double branche en interrupteur interférentiel. Les branches de couplages sont de dimensions $L_c=15$ nm et $w_c=L_T=20$ nm, et $E_F=25$ meV. Les modules des fonctions d'ondes sont donnés pour (a) $w=27.4$ nm, et pour (b) $w=29$ nm.

Dans le premier cas, la directivité importante obtenue provient, comme dans le cas du coupleur 3 dB, des interférences constructives et destructives qui se développent dans les zones de couplages, avec des ondes qui se retrouvent en opposition de phase aux ports 2 et 4, et qui construisent la fonction d'onde au port 3. Dans le second cas, la pénétration de l'onde dans les branches résulte en l'excitation d'un mode d'ordre 2 évanescents dans le guide couplé pour l'énergie considérée.

5.3.4 - Couplage multibranche

Au vu des résultats précédents et dans le but d'améliorer la directivité du coupleur, augmenter le nombre de branches de couplage est tentant. Prenons par exemple un coupleur quatre branches dont toutes les dimensions caractéristiques sont de 20 nm, et dont on fait varier la largeur des ports d'accès pour une énergie d'injection de 40 meV.

Nous avons représenté sur la figure 5.24 les évolutions du coefficient de couplage et de la directivité pour une largeur des ports d'entrée/sortie variant entre 12 et 35 nm : on observe bien en règle générale une augmentation de la directivité avec plusieurs pics proches de 30 dB, pour $w \approx 14.8$ nm, et 18.6 nm par exemple. Pour ces configurations, le coefficient de couplage étant de l'ordre de 0 dB, nous sommes encore en présence d'un transfert latéral vers le port 3. Par contre, il n'est pas possible de trouver un couple ($C=3$ dB, $D>20$ dB) correspondant au coupleur hybride obtenu avec deux branches de couplage.

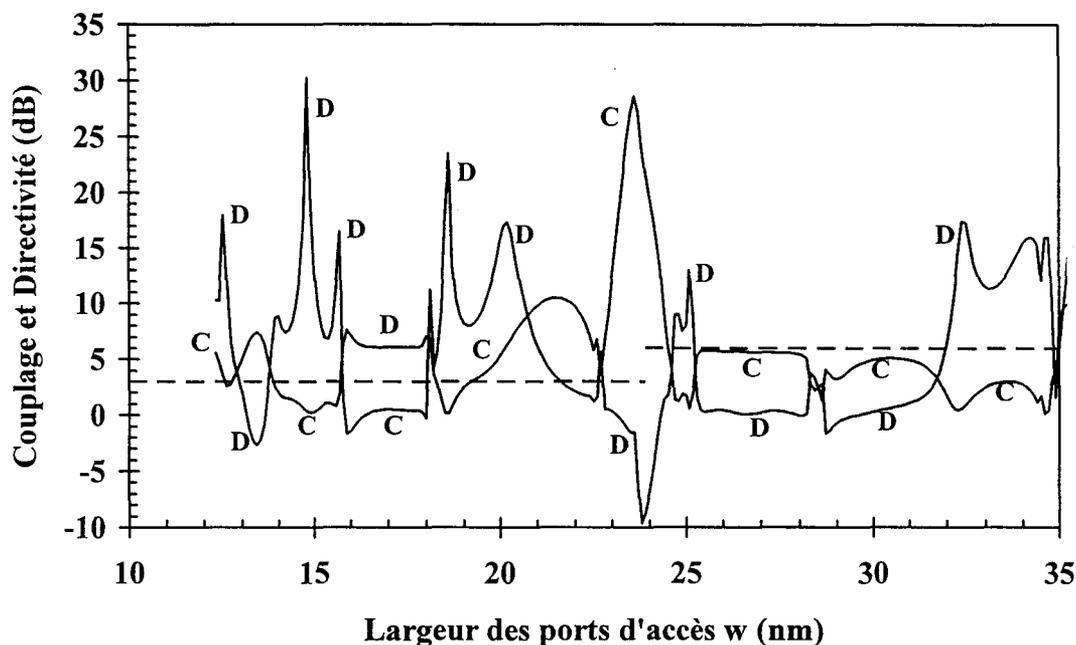


FIGURE 5.24 : Evolutions du coefficient de couplage et de la directivité en fonction de largeur des ports d'accès d'un coupleur quatre branche ($L_c=w_c=L_T=20$ nm) calculées pour une énergie d'injection $E_F=40$ meV.

Cette étude rapide montre que la complexité n'est pas forcément synonyme d'amélioration des caractéristiques du coupleur. De plus, les courbes montrent des variations très brutales, et très localisées, rendant parfois difficile de discerner tel ou tel type de fonctionnement. Signalons enfin qu'à la multiplication des zones de couplage correspond un augmentation de la taille du dispositif, et un risque croissant de présence d'inhomogénéités dans la structure (défauts d'interface, impuretés...) détruisant l'aspect balistique du transport. Un compromis entre complexité et efficacité, rendant d'autant plus difficile l'optimisation des structures à base de guides d'ondes électroniques, semble donc nécessaire. A ce titre, les coupleurs simple et double branche apparaissent les plus attractifs.

5.4 - CONCLUSION

Dans ce chapitre nous avons étudié des structures de couplage entre guides d'ondes électroniques via une ou plusieurs branches. L'analyse des spectres de conductance aux

différents ports d'entrée/sortie des structures a permis de mettre en évidence un certain nombre de modes de fonctionnement tels que le couplage par mode évanescent, les transferts latéraux (avec ou sans changement du sens de propagation), ou le couplage 3 dB.

Dans le cas du coupleur simple branche, l'existence de ces fonctionnements est conditionné par une propagation multimode dans la zone de couplage, de manière a obtenir des processus de transmission directifs. Dans le coupleur double branche, une nette amélioration de la directivité a été démontrée dans le cas d'une propagation monomode dans l'ensemble de la structure. Dans ce cas, ce sont les déphasages des ondes, consécutifs à l'existence de plusieurs chemins, qui permettent localement par addition de flux de provoquer des interférences constructives ou destructives, et donc les modulations de conductance dans les ports d'entrée/sortie.

Enfin dans un but plus prospectif, nous avons posé les bases d'une simulation permettant de calculer les spectres de transmission sous polarisation, et de manière générale permettant la prise en compte de variations quelconques du profil de potentiel. Cette méthode est basée sur l'exploitation des régimes transitoires consécutifs à une modification soit de l'énergie d'injection, soit d'une dimension, qui sont issus de la résolution de l'équation de Schrödinger à deux dimensions dépendante du temps en régime d'injection continue. Ce type d'approche couplée à l'équation de Poisson devrait à moyen terme nous permettre d'appréhender les phénomènes de réaction de charge d'espace, et d'étudier l'influence de perturbations locales de potentiel traduisant la présence de défauts dans la structure.

BIBLIOGRAPHIE CHAPITRE 5

- [1] S. DATTA
"Quantum devices"
Superlattices and Microstructures 6(1), 1989, pp 83-93.
- [2] W. D. SHENG
"Quantum coherent networks : a theoretical study"
J. Appl. Phys. 81(9), 1997, pp 6210-6213.
- [3] J. A. DEL ALAMO, and C. EUGSTER
"Quantum field-effect directional coupler"
Appl. Phys. Lett. 56(1), 1990, pp 78-80.
- [4] N. TSUKADA, A. D. WIECK, and K. PLOOG
"Proposal of novel electron wave coupled devices"
Appl. Phys. Lett. 56(25), 1990, pp 2527-2529.
- [5] J. WANG, H. GUO, and R. HARRIS
"Electron waveguide coupler : a four terminal device"
Appl. Phys. Lett. 59(24), 1991, pp 3075-3077.
- [6] G. XU, M. YANG, and P. JIANG
"A theoretical investigation on the quantum field effect directional coupler"
J. Appl. Phys. 74(11), 1993, pp 6747-6753.
- [7] M. J. ROOKS, C.C. EUGSTER, J. A. DEL ALAMO, G. L. SNIDER, and E. L. HU
"Split-gate electron waveguide fabrication using multilayer poly(methylmethacrylate)"
J. Vac. Sci. Technol. B 9(6), 1991, pp 2856-2860.
- [8] C. C. EUGSTER, J. A. DEL ALAMO, M. J. ROOKS, and M. R. MELLOCH
"Split-gate dual-electron waveguide device"
Appl. Phys. Lett. 60(5), 1992, pp 642-644.
- [9] O. VANBÉSIEN, and D. LIPPENS
"Theoretical analysis of branch line quantum directional coupler"
Appl. Phys. Lett. 65(19), 1994, pp 2439-2441.
- [10] L. BURGNIES, O. VANBÉSIEN, and D. LIPPENS
"Transport balistique dans les guides d'ondes électroniques"
Actes du workshop Transport Quantique
GDR SPARCH, Villeneuve d'Ascq, 1996, pp 55-77.
- [11] O. VANBÉSIEN, L. BURGNIES, and D. LIPPENS
"Operating modes of coupled quantum wires"
Proc. 3rd International Symposium on quantum confinement : quantum wires and dots,
Chicago, 1995.

- [12] J. WANG, Y. J. WANG, and H. GUO
"Ballistic-electron transport through a coupled-quantum-wire system"
Phys. Rev. B 46(4), 1992, pp 2420-2427.
- [13] N. GRÜN, and W. SCHEID
"Absorption of waves by complex surface layers in the solution of the Schrödinger equation by finite difference methods"
Computer Physics Communications 30, 1983, pp 243-247.
- [14] A. ARNOLD
"Numerically Absorbing Boundary Conditions for quantum evolution equations"
Proc. of the International Workshop on Computational Electronics
Tempe, Arizona, USA, 1995.
- [15] L. BURGNIES, O. VANBÉSIEN, and D. LIPPENS
"Evolution temporelle d'un paquet d'ondes dans les structures à base de guides d'ondes électroniques"
6^{èmes} J. N. M. O. III-V, Chantilly, 1997, pp 114-115.
- [16] H. GUO, K. DIFF, G. NEOFOTISTOS, and D. GUNTON
"Time-dependent investigation of the resonant tunneling in a double-barrier quantum well"
Appl. Phys. Lett. 53(2), 1988, pp 131-133.
- [17] J. WANG, and H. GUO
"Time-dependent transport in two-dimensional quantum-wire structures"
Phys. Rev. B 48(16), 1993, pp 12072-12075.
- [18] O. VANBÉSIEN, and D. LIPPENS
"Directional coupling in dual-branch electron-waveguide junctions"
Phys. Rev. B 52(7), 1995, pp 5144-5153.
- [19] O. VANBÉSIEN, and D. LIPPENS
"Quantum interference electronic switch"
Superlattices and Microstructures 17(2), 1995, pp 197-200.

CONCLUSION GENERALE

CONCLUSION GENERALE

L'objectif essentiel de ce travail de thèse a été de développer un certain nombre d'outils numériques capable d'analyser en statique ou en dynamique le transport balistique des électrons dans des structures semiconductrices de faible dimensionnalité. S'il est difficile d'affirmer dans chacun des cas étudiés le caractère prédictif des modèles présentés, compte tenu des divers degrés d'approximation utilisés notamment en supposant un transport cohérent, il n'en reste pas moins que ces diverses approches se révèlent des outils d'analyse très performants pour appréhender les phénomènes physiques à l'origine des grandeurs électriques mesurées. Dans ce contexte, le recours à "l'expérimentation numérique" devient de plus en plus nécessaire, dans la mesure où les approches empiriques faillent à décrire des processus de transport qui se complexifient lorsque des zones de dimensionnalités différentes se superposent au sein d'un même composant.

Au terme de cette étude, avant d'envisager la poursuite de ces travaux, il nous semble important de préciser les principaux résultats obtenus :

- Concernant les composants à effet tunnel résonnant intra-bande, nous avons développé, sur la base d'une résolution autocohérente des équations de Schrödinger et de Poisson, un modèle permettant la prise en compte des effets d'injection bidimensionnelle. Cette approche combine des phases de transport de charges à partir de zones soit volumique soit bidimensionnelle. Ce modèle décrit avec une relative précision les différents chemins caractéristiques de passage par effet tunnel, avec une bonne estimation des tensions caractéristiques et des densités de courant maximales que l'on observe expérimentalement. Par contre, il apparaît que l'hypothèse d'un transport purement cohérent soit trop restrictive pour décrire les contrastes en courant.

- Pour les structures à base de guides d'ondes électroniques, les modèles développés nous ont permis de comprendre comment interfèrent les ondes électroniques toujours en cohérence de phase soit par réflexion, soit par dérivation. Basé en générale sur la constriction latérale d'un gaz d'électrons bidimensionnel, ce thème de recherche est relativement exploratoire à l'heure actuelle. Les structures à base de guides d'ondes électroniques sont fondées en effet sur la réalisation de ces dispositifs à l'échelle nanométrique, et représentent un véritable enjeu dans l'état actuel des technologies car les effets ne sont observables qu'à très basses températures. Sur ce thème, les modèles statiques, basés sur la notion de raccordement de modes, et dynamiques (propagation d'un paquet d'ondes gaussien ou régime d'injection continue) nous ont permis de mettre en évidence les mécanismes suivants :

- Tout d'abord, concernant les propriétés de commutation d'un stub électronique, l'évolution temporelle de la conductance montre un retour à l'équilibre avec de multiples dépassements des valeurs de conductance stationnaire, et une oscillation auto-entretenu aux temps longs. L'analyse spectrale du signal révèle de multiples contributions dans une gamme de fréquence de l'ordre du Terahertz, et il a été montré dans ce travail que le système quantique conserve la "mémoire" de son état initial aux temps courts, avec des effets de

mélange, et avec une fonction d'onde partagée entre les états liés, et quasi-liés, de l'état initial et de l'état final.

- Ensuite, les jonctions entre guides d'ondes électroniques ont été étudiées en détail en considérant des coupleurs simple et double branche. Plusieurs modes opératoires, tels que le couplage par mode évanescent, le transfert latéral avec ou sans changement de direction de propagation, ou le coupleur hybride à forte directivité, ont été illustrés et analysés. Il ressort de ces études deux types de fonctionnement distincts suivant le nombre de branches de couplage, et le régime de propagation mono- ou multi-mode. En particulier, nous avons montré que le couplage directif n'est possible dans le coupleur simple branche qu'à la condition que des modes d'ordre supérieur soient excités. A l'inverse pour le coupleur double branche, une directivité très importante peut être obtenue en régime monomode grâce aux interférences constructives ou destructives aux intersections des guides avec les branches

Pour dépasser le stade actuel des simulations, plusieurs voies peuvent être explorées :

- Dans le domaine des diodes à effet tunnel résonnant, la généralisation des modèles existants aux structures multibandes permettrait d'élargir les domaines d'application, notamment aux composants de la filière Antimoine avec l'effet tunnel inter-bande dans les hétérostructures à gap brisé. De plus, une approche intégrant à la fois les bandes de valence et de conduction constitue un premier pas vers des simulations plus générales incluant des processus de pompage ou d'émission optique.

- Pour les structures à basse dimensionnalité, il apparaît important de prendre en compte les effets de réaction de charge d'espace. L'hypothèse de profils de potentiel plats ou linéairement variables dans le contexte d'une accumulation de charges importante est sans aucun doute problématique. De plus, il semble qu'il sera nécessaire à l'avenir de dépasser le cadre strict d'un régime purement balistique. Ceci demande dans nos calculs un traitement de type perturbation suite à la présence d'inhomogénéités dans les potentiels de confinement ou d'impuretés dans les canaux.

De manière plus générale, bien que la technologie de réalisation de guides d'ondes par confinement électrostatique ne soit pas encore ni tout à fait mature, ni complètement reproductible, les résultats expérimentaux et théoriques tendent à montrer intrinsèquement une faible robustesse des propriétés en température. En effet, les confinements latéraux envisagés dans ce travail sont électrostatiques. Dans ces conditions, il apparaît difficile d'obtenir des longueurs d'écrantage permettant l'obtention de dimensions des zones actives de l'ordre de quelques nanomètres. Les écarts en énergie entre les modes de propagation sont alors insuffisants pour observer expérimentalement des phénomènes d'interférences quantiques pour des températures supérieures à l'hélium liquide.

Pour que ces microstructures puissent à l'avenir passer au stade des applications, il semble nécessaire d'explorer d'autres voies de recherche que celle envisagée dans ce travail, en particulier la voie de la reprise d'épitaxie ou de la croissance sur marche. Néanmoins, gageons que la tendance actuelle à l'intégration et à la miniaturisation des circuits électroniques rendra incontournable à plus ou moins long terme l'utilisation de ces nouveaux composants quantiques dans bon nombre de dispositifs analogiques ou digitaux.

ANNEXES

ANNEXE A : FONCTION D'ONDE DANS LES SYSTEMES SEMI-OUVERTS.

Nous désirons résoudre l'équation de Schrödinger à une dimension dans les systèmes semi-ouverts, avec pour but d'y introduire les réactions de charge d'espace. Le profil de potentiel, calculé via l'équation de Poisson, est alors discrétisé dans la direction z de croissance des couches, en N intervalles à potentiel constant s'étendant sur un pas Δz .

Dans le cas général, dans l'intervalle Δz la fonction d'onde peut s'écrire :

$$\varphi_n(z) = A_n \exp(a_n(z - n\Delta z)) + B_n \exp(-a_n(z - n\Delta z)) \quad (\text{A.1})$$

avec

$$a_n = \sqrt{\frac{2m_{en}^*(E_c(n\Delta z) - E)}{\hbar^2}} \quad (\text{A.2})$$

on obtient alors

$$\begin{aligned} a_n &= ik_n \quad \text{pour } E > E_c(z) \\ a_n &= \alpha_n \quad \text{pour } E < E_c(z) \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

En chaque interface n , les conditions de continuités de la fonction d'onde et de sa dérivée première dans la direction z , pondérée par les masses effectives respectives des matériaux à droite et à gauche de l'interface, mènent à la relation matricielle suivante :

$$X_{n+1} = N_{n+1}^{-1} M_n X_n \quad (\text{A.4})$$

avec

$$X_n = \begin{pmatrix} A_n \\ B_n \end{pmatrix}$$

$$M_n = \begin{pmatrix} \exp(a_n \Delta z) & \exp(-a_n \Delta z) \\ \frac{a_n}{m_{en}^*} \exp(a_n \Delta z) & -\frac{a_n}{m_{en}^*} \exp(-a_n \Delta z) \end{pmatrix} \quad (\text{A.5})$$

$$N_{n+1} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ \frac{a_{n+1}}{m_{en+1}^*} & -\frac{a_{n+1}}{m_{en+1}^*} \end{pmatrix}$$

Aux limites du système, on impose une fonction d'onde évanescente à gauche de la zone quantique, et une onde propagative d'amplitude unitaire incluant un déphasage δ sur la droite, soit :

$$\begin{aligned} \varphi_0(z) &= A_0 \exp(\alpha_0 z) \\ \text{et } \varphi_N(z) &= \sin(k_N z + \delta) \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

Les conditions aux limites sont alors données par :

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{a_0}{m_{e0}^*} \end{pmatrix} A_0 \exp(a_0 \Delta z) &= N_1 X_1 \\ \text{et } M_N X_N &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -\frac{ia_{N+1}}{m_{eN+1}^*} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sin \delta \\ \cos \delta \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

et le système est résolu par les relations :

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} \sin \delta \\ \cos \delta \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -\frac{ia_{N+1}}{m_{eN+1}^*} \end{pmatrix}^{-1} \left(\prod_{n=N}^1 M_n N_n^{-1} \right) \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{a_0}{m_{e0}^*} \end{pmatrix} A_0 \\ \text{et } \sin^2 \delta + \cos^2 \delta &= 1 \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

Nous déterminons ainsi A_0 puis successivement par la relation A.5 les constantes A_n et B_n . Nous connaissons donc la fonction d'onde en tout point de la structure discrétisée, et pouvons déterminer la quantification en énergie de la structure par un calcul de densité locale d'états.

ANNEXE B : METHODE DU RACCORDEMENT DE MODES

La figure B.1 montre une jonction type de connexion de M canaux à un canal plus large.

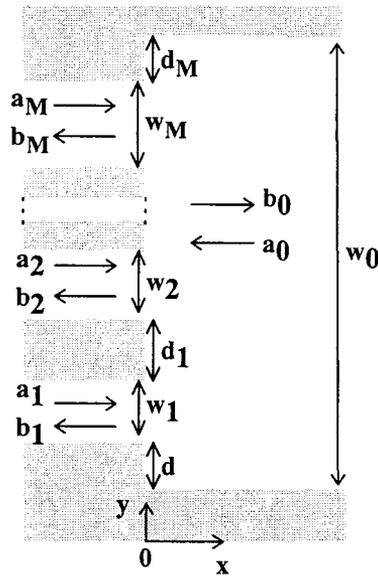


FIGURE B.1 : Description d'une jonction multicanaux.

Dans chaque canal k ($=0$ à M) de part et d'autre de la jonction située en $x=0$, la fonction d'onde est exprimée par :

$$\begin{aligned} \varphi_0(x,y) &= \Phi_0^T \left(P_0^{-1} a_0 + P_0 b_0 \right) \quad \text{pour } k = 0 \\ \varphi_k(x,y) &= \Phi_k^T \left(P_k a_k + P_k^{-1} b_k \right) \quad \text{pour } k = 1 \text{ à } M \end{aligned} \tag{B.1}$$

où a_k et b_k sont des vecteurs à N dimensions dont les éléments expriment les coefficients des ondes respectivement incidente et réfléchie dans le canal k des N modes considérés. Les fonctions Φ_k sont des vecteurs introduisant la quantification transverse dans chaque canal.

Dans l'hypothèse des murs de confinement à potentiel infini, elles sont exprimées pour le mode n par :

$$\begin{aligned}\Phi_0(n) &= \sqrt{\frac{2}{w_0}} \sin\left(\frac{n\pi}{w_0} y\right) && \text{pour } k = 0 \\ \Phi_k(n) &= \sqrt{\frac{2}{w_k}} \sin\left(\frac{n\pi}{w_k} (y - d - S_k)\right) && \text{pour } k \neq 0 \\ \text{avec } S_k &= \sum_{j=1}^{k-1} (d_j + w_j)\end{aligned}\tag{B.2}$$

Les quantités P_k , traduisant la propagation ou l'évanescence des ondes modales, sont des matrices diagonales dont les éléments diagonaux sont donnés par :

$$P_k(n, n) = \exp(ik_x^k(n)x)\tag{B.3}$$

avec

$$k_x^k(n) = \sqrt{\frac{2m_e^*}{\hbar^2} (E - V_k) - \left(\frac{n\pi}{w_k}\right)^2}\tag{B.4}$$

Les conditions de continuité de la fonction d'onde et de sa dérivée première par rapport à x dans le plan de la jonction s'expriment par :

$$\Phi_0^T(a_0 + b_0) = \begin{cases} \Phi_k^T(a_k + b_k) & \text{pour } d + S_k \leq y \leq d + S_k + w_k \\ 0 & \text{pour } d + S_k + w_k \leq y \leq d + S_{k+1} \end{cases}\tag{B.5}$$

$$-\Phi_0^T K_0(a_0 - b_0) = \Phi_k^T K_k(a_k - b_k) \text{ pour } d + S_k \leq y \leq d + S_k + w_k\tag{B.6}$$

pour $k=1$ à M , et où les éléments des matrices diagonales K_k sont données par la relation B.4.

On obtient des relations liant les coefficients a_k et b_k des différents canaux en utilisant les propriétés orthonormales des fonction $\Phi_k(n)$:

$$\int_0^{w_0} \Phi_0(m) \cdot (B.5) \cdot dy \rightarrow (a_0 + b_0) = \sum_{k=1}^M G_k(a_k + b_k)\tag{B.7}$$

et pour $k=1$ à M :

$$\int_0^{w_0} \Phi_k(m) \cdot (B.6) \cdot dy \rightarrow (a_k - b_k) = H_k(a_0 - b_0)\tag{B.8}$$

avec

$$G_k(m,n) = \int_{d+S_k}^{d+S_k+w_k} \Phi_0(m)\Phi_k(n)dy \quad (B.9)$$

$$H_k = -K_k^{-1}G_k^T K_0$$

En utilisant les relations B.2, un calcul analytique de l'intégrale dans $G_k(m,n)$ nous donne:

pour $nw_0 \neq mw_k$:

$$G_k(m,n) = \frac{\sqrt{w_0 w_k}}{\pi} \frac{2nw_0}{(nw_0)^2 - (mw_k)^2} \left\{ \sin\left(\frac{m\pi}{w_0}(d+S_k)\right) + (-1)^{n+1} \sin\left(\frac{m\pi}{w_0}(d+S_k+w_k)\right) \right\} \quad (B.10)$$

sinon :

$$G_k(m,n) = \sqrt{\frac{w_k}{w_0}} \cos\left\{\frac{n\pi}{w_k}(d+S_k)\right\} \quad (B.11)$$

Il s'agit ensuite de conditionner le système à $M+1$ équations (B.7 et B.8) en une matrice de répartition de la forme :

$$\begin{bmatrix} b_0 \\ b_1 \\ \cdot \\ b_M \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} S_{00} & S_{01} & \cdot & S_{0M} \\ S_{10} & S_{11} & \cdot & S_{1M} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ S_{M0} & \cdot & \cdot & S_{MM} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \cdot \\ a_M \end{bmatrix} \quad (B.12)$$

où chaque sous matrice S_{ij} , de dimension $N \times N$, sont exprimée par :

$$S_{00} = -D^{-1} \left\{ I + \sum_{k=1}^M G_k H_k \right\} \quad (B.13)$$

$$\text{et } S_{0k} = 2D^{-1}G_k \quad \text{pour } k = 1 \text{ à } M$$

et pour $j \neq 0$ et $k \neq 0$ par :

$$S_{j0} = -H_j \left[I + D^{-1} \left[I + \sum_{k=1}^M G_k H_k \right] \right]$$

$$S_{jj} = \left[I + 2H_j D^{-1} G_j \right] \quad (B.14)$$

$$S_{jk} = 2H_j D^{-1} G_k$$

avec I la matrice identité, et D donné par :

$$D = \left[I - \sum_{k=1}^M G_k H_k \right] \quad (\text{B.15})$$

Regroupements des matrices de répartition

Structures deux ports entrée/sortie

Le regroupement s'effectue comme indiqué sur la figure B.2 :

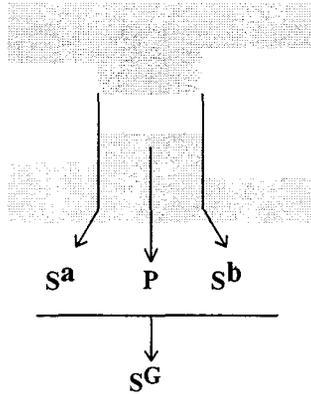


FIGURE B.2 : Description du regroupement des matrices de répartition de deux discontinuités de guide.

On détermine les matrices de répartition S^a et S^b des jonctions, et la matrice P qui traduit la propagation ou l'évanescence des modes dans la section de guide uniforme. La matrice de répartition globale est alors obtenue par :

$$\begin{aligned} S_{11}^G &= S_{11}^a + S_{12}^a P S_{11}^b D_1^{-1} P S_{21}^a \\ S_{12}^G &= S_{12}^a P S_{12}^b + S_{12}^a P S_{11}^b D_1^{-1} P S_{22}^a P S_{12}^b \\ S_{21}^G &= S_{21}^b D_1^{-1} P S_{21}^a \\ S_{22}^G &= S_{22}^b + S_{21}^b D_1^{-1} P S_{22}^a P S_{12}^b \\ \text{avec } D_1 &= I - P S_{22}^a P S_{11}^b \end{aligned} \quad (\text{B.16})$$

Structures quatre ports entrée/sortie

Le regroupement s'effectue comme indiqué sur la figure B.3.

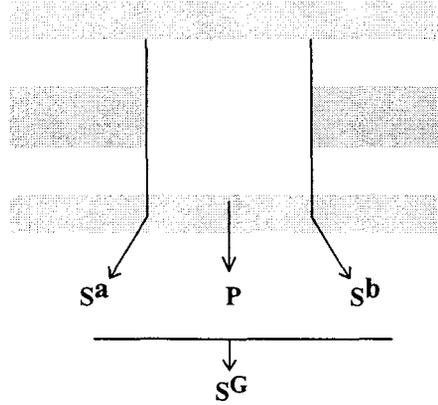


FIGURE B.3 : Description du regroupement de matrices de répartition des structures à quatre ports d'accès.

Comme précédemment, on détermine S^a, S^b, P , et la matrice de répartition globale est déterminée par :

$$\begin{aligned}
 S_{11}^G &= S_{11}^a + S_{13}^a P D_2^{-1} S_{33}^b P S_{31}^a & S_{22}^G &= S_{22}^a + S_{23}^a P D_2^{-1} S_{33}^b P S_{32}^a \\
 S_{12}^G &= S_{12}^a + S_{13}^a P D_2^{-1} S_{33}^b P S_{32}^a & S_{21}^G &= S_{21}^a + S_{23}^a P D_2^{-1} S_{33}^b P S_{31}^a \\
 S_{13}^G &= S_{13}^a P D_2^{-1} S_{31}^b & S_{23}^G &= S_{23}^a P D_2^{-1} S_{31}^b \\
 S_{14}^G &= S_{13}^a P D_2^{-1} S_{32}^b & S_{24}^G &= S_{23}^a P D_2^{-1} S_{32}^b \\
 \\
 S_{31}^G &= S_{13}^b P D_3^{-1} S_{31}^a & S_{41}^G &= S_{23}^b P D_3^{-1} S_{31}^a \\
 S_{32}^G &= S_{13}^b P D_3^{-1} S_{32}^a & S_{42}^G &= S_{23}^b P D_3^{-1} S_{32}^a \\
 S_{33}^G &= S_{11}^b + S_{13}^b P D_3^{-1} S_{33}^a P S_{31}^b & S_{43}^G &= S_{21}^b + S_{23}^b P D_3^{-1} S_{33}^a P S_{31}^b \\
 S_{34}^G &= S_{12}^b + S_{13}^b P D_3^{-1} S_{33}^a P S_{32}^b & S_{44}^G &= S_{22}^b + S_{23}^b P D_3^{-1} S_{33}^a P S_{32}^b
 \end{aligned}$$

(B.17)

$$\text{avec } D_2 = I - S_{33}^b P S_{33}^a P \text{ et } D_3 = I - S_{33}^a P S_{33}^b P$$

ANNEXE C : INJECTION CONTINUE

La fonction d'onde à l'extrémité du canal d'injection unidimensionnel peut s'écrire :

$$\varphi(x, y, t) = A(y) \exp(ik_x x) + B(x, y) \exp(-ik_x x) \quad (C.1)$$

où les fonctions $A(y)$ et $B(y)$ dans l'hypothèse d'un régime monomode sont proportionnelles à $\sin(k_y y)$, avec $k_y = \pi/w$ pour tenir compte du confinement latéral de type puits triangulaire infini. La fonction A traduit l'amplitude de l'onde incidente, et B prend en compte la variation spatial (et par voie de conséquence, la variation temporelle) de l'onde réfléchie à l'entrée.

Dans ce cas nous pouvons déterminer :

$$\left\{ \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} \right\} = -k^2 \varphi(x, y) - 2ik_x \frac{\partial B(x, y)}{\partial x} \exp(-ik_x x) \quad (C.2)$$

avec $k^2 = k_x^2 + k_y^2 = 2m_e^* E / \hbar^2$.

En introduisant cette expression dans l'équation de Schrödinger à deux dimensions dépendante du temps, on peut écrire :

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} = -\frac{i\hbar k^2}{2m_e^*} \varphi(x, y, t) + \frac{\hbar k_x}{m_e^*} \frac{\partial B(x, y)}{\partial x} \exp(-ik_x x) \quad (C.3)$$

Alors la fonction d'onde à l'instant $t + \Delta t$ est donnée par :

$$\varphi(x, y, t + \Delta t) = \varphi(x, y, t) \exp\left(-\frac{iE}{\hbar} \Delta t\right) + \frac{\hbar k_x}{m_e^*} \frac{\partial B(x, y)}{\partial x} \Delta t \exp(-ik_x x) \quad (C.4)$$

En $x = x_0$, on exprime numériquement la dérivée de B par rapport à la direction x de manière semi-implicite soit :

$$\frac{\partial B^n(x_0, y)}{\partial x} \approx \frac{1}{2} \left\{ \frac{B^n(x_0 + \Delta x, y) - B^n(x_0, y)}{\Delta x} + \frac{B^{n+1}(x_0 + \Delta x, y) - B^{n+1}(x_0, y)}{\Delta x} \right\} \quad (C.5)$$

où l'exposant n indique l'instant t , et $n+1$ l'instant $t + \Delta t$.

La fonction B aux abscisses considérées peut être exprimée en fonction de la fonction d'onde et de la fonction A. En discrétisant le système, on obtient :

$$B^n(x_0, y = j\Delta y) = \left(\varphi_{1j}^n - A_j^n \exp(ik_x \Delta x) \right) \exp(ik_x \Delta x) \quad (C.6)$$

$$B^n(x_0 + \Delta x, y = j\Delta y) = \left(\varphi_{2j}^n - A_j^n \exp(2ik_x \Delta x) \right) \exp(2ik_x \Delta x)$$

et de manière identique la fonction B en x_0 et $x_0 + \Delta x$ à l'instant $t + \Delta t$ est obtenue en exposant les fonctions d'ondes φ_{1j} , φ_{2j} , et la fonction A_j , par $n+1$.

On obtient finalement, d'après les relations C.4, C.5, et C.6, la condition d'injection à l'entrée :

$$(1 + A_x) \varphi_{1k}^{n+1} - B_x \varphi_{2k}^{n+1} = (C - A_x) \varphi_{1k}^n + B_x \varphi_{2k}^n + A(1 + C) D_x \quad (C.7)$$

$$\text{avec } A_x = \frac{\hbar k_x \Delta t}{2m_e \Delta x} \quad B_x = A_x \exp(ik_x \Delta x)$$

$$C = \exp(-iE\Delta t / \hbar) \quad D_x = (1 - \exp(2ik_x \Delta x)) \exp(ik_x \Delta x)$$

De manière semblable, pour traduire la propagation d'une unique onde sortante à l'extrémité du canal de sortie, la fonction d'onde est exprimée par :

$$\varphi(x, y, t) = C(x, y) \exp(ik_x x) \quad (C.8)$$

Par la même approche que ci-dessus on obtient alors la condition à la limite du canal de sortie en $x = N\Delta x$:

$$(1 + A_x) \varphi_{Nk}^{n+1} - B_x \varphi_{N-1k}^{n+1} = (C - A_x) \varphi_{Nk}^n + B_x \varphi_{N-1k}^n \quad (C.9)$$

avec les coefficients A_x , B_x , et C , donnés ci-dessus, et où la polarisation éventuelle du canal de sortie par rapport à l'entrée peut être prise en compte dans le vecteur d'onde longitudinal k_x .

ANNEXE D : CONDITIONS AUX LIMITES ABSORBANTES

Dans les ports d'accès des structures unidimensionnelles, seul le mouvement longitudinal des électrons est libre. Dans ce cas on ramène le problème des conditions aux limites à un problème à une dimension (x). Le but est d'insérer une zone tampon de largeur (d) à potentiel complexe ($V=W-iA$) entre la structure et le bord des canaux d'accès (figure D.1). Le domaine non simulé est considéré comme interdit en prenant un potentiel infini.

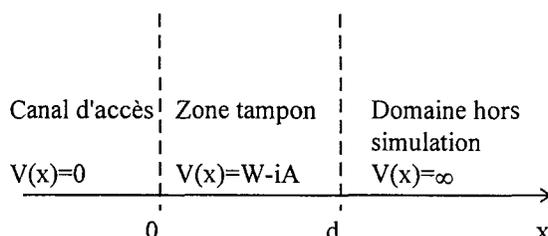


FIGURE D.1 : Potentiels considérés pour la détermination de conditions aux limites absorbantes.

Dans chaque zone on écrit la fonction d'onde par :

$$\begin{aligned} \varphi(x) &= B \exp(ikx) + C \exp(-ikx) && \text{pour } x \leq 0 \\ \varphi(x) &= b \exp(ik_1x) + c \exp(-ik_1x) && \text{pour } 0 \leq x \leq d \\ \varphi(x) &= 0 && \text{pour } x \geq d \end{aligned} \tag{D.1}$$

avec

$$\begin{aligned} k^2 &= \frac{2m_e^* E}{\hbar^2} \\ \text{et } k_1^2 &= k^2 + \frac{2m_e^*}{\hbar^2} (-W + iA) \end{aligned} \tag{D.2}$$

Les conditions de continuités de φ et de sa dérivée première par rapport à x (en $x=0$) et la condition à la limite (en $x=d$), nous permettent de déterminer B et C en fonction de b (ou c), k , k_1 , et d . Le coefficient de réflexion dû au passage d'un potentiel nul au potentiel complexe est alors exprimé par :

$$C = \frac{b}{2} \left[\left(1 - \frac{k_1}{k} \right) - \left(1 + \frac{k_1}{k} \right) \exp(2ik_1d) \right] \tag{D.3}$$

En imposant la condition d'une réflexion nulle ($C=0$), nous obtenons en exprimant $k_1=\alpha+i\beta$:

$$\begin{aligned}\alpha &= k \frac{\text{sh}(\beta d)\text{ch}(\beta d)}{\cos^2(\alpha d)\text{ch}^2(\beta d) + \sin^2(\alpha d)\text{sh}^2(\beta d)} \\ \beta &= -k \frac{\sin(\alpha d)\cos(\alpha d)}{\cos^2(\alpha d)\text{ch}^2(\beta d) + \sin^2(\alpha d)\text{sh}^2(\beta d)}\end{aligned}\tag{D.4}$$

Ces deux équations non linéaires sont résolues par la méthode itérative de Newton-Raphson, et on en déduit les valeurs de α et β . Le potentiel complexe est alors déduit en calculant les parties réelle (W) et imaginaire ($-A$) en fonction de α et β .

On notera que les valeurs du potentiel complexe dépendent du vecteur d'onde k . Dans le cas d'un paquet d'ondes gaussien on utilisera la valeur centrale de la répartition énergétique du paquet.

Résumé

Ce travail est consacré à la simulation des mécanismes de conduction en régime balistique dans les dispositifs électroniques quantiques. Ces composants tirent parti des effets d'interférence des ondes associés aux électrons suite à la restriction à une ou deux dimensions de l'espace du transport électronique. Dans ce but, nous avons développé un ensemble de logiciels basés sur la résolution de l'équation de Schrödinger à une ou deux dimensions, indépendante ou dépendante du temps, couplée ou non à la résolution de l'équation de Poisson. Dans chacun des cas, une attention toute particulière a été apportée à la modélisation de conditions aux limites absorbantes aux frontières du domaine de simulation.

Dans un premier temps, ces modèles ont été appliqués à l'étude des effets d'injection bidimensionnelle dans les diodes à effet tunnel résonnant intrabande. La description quantique des processus d'injection et de fuite à travers la structure double barrière a permis d'obtenir une comparaison théorie-expérience satisfaisante en termes de densité de courant maximale et tension caractéristique sur des structures fabriquées dans les filières GaAs et InP.

Dans un second temps, nous nous sommes intéressés au transport balistique dans des structures à base de guides d'ondes électroniques obtenues par la constriction latérale d'un gaz bidimensionnel d'électrons d'une hétérostructure à haute mobilité. Par analogie avec les structures micro-ondes, nous avons envisagé successivement le stub électronique puis le couplage entre guides d'ondes.

Pour le stub électronique, le résultat saillant concerne la mise en évidence, lors du régime de commutation, d'effets de mélange entre états quantiques initiale et finale au sein de la zone active révélés par l'analyse spectrale du transitoire de conductance.

Pour les coupleurs, différents modes de fonctionnement ont été analysés tels que le couplage par mode évanescent, les transferts latéraux avec ou sans changement de direction de propagation, ou le couplage hybride. Leur origine a pu être clairement établie en fonction de la géométrie du dispositif et de l'énergie d'injection des porteurs, en termes de propagation multimode dans les structures simple branche, ou d'interférences constructives et destructives en régime monomode dans les structures multibranches.

Mots clés

Transport balistique
Système Schrödinger-Poisson
Effet tunnel résonnant

Guide d'ondes électroniques
Stub électronique
Coupleur quantique

