

443039
AGASIN

50376

1998

451-2

BUSTL

x 50 376
1998
451-2
EXCLU
DU
PRÊT

THESE

Présentée à l'Université des Sciences et Technologies de Lille

pour obtenir le titre de

Docteur de l'Université
spécialité ELECTRONIQUE

Adel Mikhail



Résumé de la thèse

**Simulation des effets tunnel résonnant
dans les nanostructures de semi-conducteurs**

Soutenue le 19 Mai 1998 devant la commission d'examen

Membres du Jury:

R. Fauquemberg,
D. Lippens, Directeur de thèse
A. de Lustrac, rapporteur
J.C. Vaissière, rapporteur
J.C. De Jaeger
G. Beaudin

Résumé de la thèse d'Adel Mikhail intitulée :

Simulation des effets tunnel résonnant dans les nanostructures de semi-conducteurs

Le dénominateur commun des études effectuées dans le cadre de cette thèse est *l'effet tunnel résonnant*. Rappelons très brièvement que cet effet résulte d'un transfert d'électrons par effet tunnel mettant en jeu également un processus de localisation momentanée. Au niveau des propriétés de conduction il en résulte des comportements tout à fait intéressants en termes de non linéarité notamment avec la mise en évidence d'un effet de *conductance différentielle négative*.

Au niveau des *applications*, celles ci concernent les fonctions de l'électronique non linéaire et les circuits numériques à haute fonctionnalité. On peut montrer en effet qu'il est possible de tirer parti de ces effets de conductance ou de transconductance différentielle négative pour réaliser les briques de base des *circuits numériques* à l'aide de très peu de composants. Ceci procure un avantage indéniable dans l'optique de concevoir des circuits à très grande intégration. Par ailleurs, les temps de réponse des phénomènes physiques mis en jeu sont extrêmement courts prédisposant une utilisation de ces composants en *électronique analogique très hautes fréquences ou numérique ultra rapide*.

L'objectif de cette thèse est de mieux comprendre les *caractéristiques de conduction* dans des structures *dipôles et tripôles* qui mettent en jeu d'une part les processus d'effets tunnel permettant de traverser les barrières de potentiel et d'autre part de quantification de l'énergie par effet de localisation. Cette étude passe systématiquement par la résolution de l'équation de Schrödinger qui permet de déterminer les états propres du système et les probabilités de transmission quantique. A ce cadre très général viennent se greffer d'autres phénomènes qui interviennent dans les composants réels. Il s'agit principalement de la

réaction de charge d'espace qui vient courber les profils de bandes de potentiel et dont la prise en compte est impérative pour traduire les propriétés de conduction de façon réaliste.

Le *manuscrit est divisé en quatre chapitres* qui traitent respectivement du contexte général de l'étude, de l'effet d'injection bidimensionnelle, des perturbations dues aux phonons et aux rugosités d'interfaces et des effets tunnels dans des structures transistor dont les dimensions sont nanométriques.

L'effet tunnel résonnant a été observé depuis maintenant de très nombreuses années dans des hétérostructures de type double barrière en configuration dipôle. La mesure de la caractéristique courant-tension en polarisation continue, effectuée tout d'abord à très basses températures (77K) pour préserver la cohérence des ondes électroniques, fait apparaître un effet de résistance conductance différentielle négative (NDC). Au fil des ans, les caractéristiques se sont améliorées suite aux progrès constants effectués dans les technologies de croissance des semi-conducteurs aux très petites dimensions.

A présent on mesure directement, à température ambiante, des contrastes relativement importants entre les états de résonance et hors résonance. Cependant, par rapport à l'image simple d'un processus tunnel interrompu par le désalignement du niveau quantique du puits et des états occupés par les électrons dans la zone d'émetteur, un certain nombre d'observations montrent l'existence de processus physiques beaucoup plus complexes.

En premier lieu, il est possible de mettre en évidence des répliques dans la caractéristique. En second lieu, la coupure de la conduction se fait sur une plage de tension relativement étendue en désaccord avec les premières analyses. Une meilleure compréhension de ces divergences s'avère primordiale pour préparer les applications tirant parti de ces effets de conductance différentielle négative.

Si à présent on compare l'effet tunnel résonnant aux autres mécanismes physiques à l'origine d'un effet de NDC, on peut également situer un certain nombre d'avantages en termes de non linéarité, de temps de réponse et tout simplement de niveau d'impédance.

De façon schématique; deux phénomènes physiques sont actuellement exploités pour obtenir un effet de NDC. Le premier est *l'effet Gunn*, bien connu à présent, qui a donné lieu à un très grand nombre de réalisations. Brièvement, il s'agit d'un *transfert* électronique dans *l'espace réciproque*. Les électrons passent d'une vallée où leur masse effective est faible vers une vallée de masse effective élevée. Il s'agit donc d'un *effet en volume* intrinsèquement. La réalité est tout autre car on peut montrer que les composants réels fonctionnent suivant un *mode de transit* et sont donc limités fréquemment aux alentours de 100 GHz.

Le second effet est plus récent. Il concerne le *transfert* électronique dans *l'espace réel*. Des électrons, initialement dans un canal conducteur, vont transférer dans l'espace géométrique vers une zone de plus faible mobilité ou vont être extraits par une électrode. Ici encore on obtient un effet de NDC. Le mécanisme de transfert se fait par *injection thermoionique* en d'autres termes par saut au dessus de la barrière de potentiel qui canalise initialement les électrons. Ceci nécessite de "chauffer" très fortement les électrons dans un processus *activé thermiquement*.

Les structures à tunnel résonnant ne souffrent pas de telles limitations car les électrons traversent les barrières de potentiel. Les temps mis en jeu sont extrêmement courts. Il n'y a pas fondamentalement de temps de transit mais plus exactement un *temps de résidence* dans le puits. A titre d'exemple, les meilleures performances pour des composants utilisés en oscillateur sont actuellement des fréquences d'oscillation de plus de 700 GHz ce qui est très largement supérieur aux critères précités.

Par ailleurs on cherche à présent à utiliser ces structures en tripôle. L'objectif est, par l'ajout d'une troisième électrode, d'ouvrir la voie de l'intégration de ces composants dans des circuits numériques. Idéalement, on peut penser contacter directement le puits de potentiel. Nous avons pour notre part étudié cette solution en début de thèse. Malheureusement les difficultés technologiques sont très grandes tout du moins dans des structures unipolaires où on ne bénéficie pas d'une isolation par jonction p-n.

Enfin, un certain nombre de propositions ont été faites dans la littérature sur la base d'une co-intégration entre une structure transistor conventionnelle et l'hétérostructure double

barrière. Dans ce cas l'étude fondamentale concerne la structure quantique. Ce n'est pas le cas pour des structures pour lesquelles le potentiel de type puits barrière est non plus induit par des hétérostructures mais de façon électrostatique. Sous l'acronyme RTFET des composants ont été fabriqués notamment à IBM et nous avons cherché dans cette thèse à mieux comprendre les anomalies détectées pour ce type de composants.

En résumé si la physique des phénomènes est maintenant relativement comprise d'un point de vue qualitatif, au plan des applications il reste encore de très nombreuses interrogations. On peut citer pour exemple les pertes de cohérence lors du transport ceci étant d'autant plus vrai que l'on recherche un comportement à température ambiante. Par ailleurs, il peut être intéressant non seulement de s'intéresser aux structures dipôles qui sont à la base de la plupart des réalisations actuelles notamment avec la fabrication de *composants oscillateurs* aux fréquences submillimétriques mais aussi aux structures tripôles qui se révèlent absolument nécessaires dans la perspective d'applications numériques à *haute fonctionnalité*. Cette constatation est à l'origine des efforts effectués sur ces deux types de structure. En pratique, le travail s'est organisé comme suit avec tout d'abord la présentation de l'effet d'injection bidimensionnelle (*chapitre 2*) pour considérer ensuite les pertes de cohérence de phase (*chapitre 3*). Les effets dans les nanostructures de type transistors à effet de champ font l'objet du *chapitre 4*.

De façon plus détaillée, le travail de thèse s'est articulé autour de *trois grands thèmes* qui se révèlent essentiels dans la compréhension des mécanismes de transport et qui sont respectivement les *effets tunnels assistés* en relation directe avec les effets de *pertes de cohérence*, les problèmes relatifs à la dérivation des *densités d'états dans les systèmes ouverts* et les perspectives de réaliser une *structure transistor à effet tunnel résonnant* dont les motivations ont été expliquées ci-dessus. Pour chacun de ces aspects, nous avons essayé de concilier les aspects non seulement *théoriques* avec notamment le calcul des propriétés de transport à partir de la résolution de l'équation de Schrödinger mais également *expérimentaux* avec notamment des mesures en fonction de la température qui constitue un des paramètres les plus importants en pratique.

Signature des niveaux quantiques

Cet aspect nouveau est à l'origine de la première série d'études qui a concerné plus particulièrement la description des *mécanismes d'injection et de fuite*. Dans ce but, il nous faut déterminer les densités d'états électroniques non pas dans un système fermé, comme cela se fait de façon conventionnelle, mais plutôt dans un système *capable d'échanger des charges* avec l'extérieur concrètement les zones réservoirs d'électrons.

L'essentiel du travail sur cette partie concerne d'une part la dérivation des *densités locales d'états* dans différentes conditions de polarisation et d'autre part de la fonction dite d'alimentation qui est fondamentalement différente de celle calculée pour des échanges de charge tri-dimensionnel/bi-dimensionnel. A l'aide de ces deux grandeurs et connaissant les probabilités de transmission quantique il est possible de calculer les densités de courant en tout point de polarisation.

A titre d'illustration nous avons modélisé une structure épitaxiée *au laboratoire NTT* par le groupe Composants Quantiques dirigé par M. Yamamoto. Cette structure se révèle très intéressante avec des perspectives d'application en logique multi-états car elle fonctionne à un seuil de tension relativement faible typiquement quelques centaines de millivolts. Or, la plage de tension sur laquelle on observe un effet de résistance différentielle négative est aussi de cet ordre de grandeur en contradiction avec les théories qui prédisent l'absence de conduction dès que le niveau quantique du puits passe en dessous de celui de la zone d'émetteur.

Nous avons pour expliquer ces mécanismes de conduction hors résonance mis en évidence un effet de *signature du puits quantique central* dans la zone d'injection. De façon schématique, pour des conditions de polarisation de mise hors résonance du système, l'évanescence de la densité de probabilité attachée au puits de potentiel central permet de préserver une densité d'état non nulle dans la zone d'injection. En d'autres termes, il y a un effet de trace ou de signature du puits central dans la zone d'injection. Ceci permet de maintenir dans des conditions de tension hors résonance une densité d'états dans l'émetteur et

donc une composante de courant importante avant que le niveau quantique ne passe sous la bas de bande de conduction.

Les résultats théoriques sont en bon accord avec les résultats expérimentaux et nous venons de trouver des résultats similaires pour une structure à très forte densité de courant épitaxiée au laboratoire récemment.

Perte de cohérence

Concernant le second thème de recherche à savoir l'importance des phénomènes tunnel assistés par défauts, nous avons focalisé notre attention sur les problèmes relatifs au transport *assisté par phonon*. Il s'agit donc d'une caractéristique intrinsèque du matériau qui peut être mise en évidence en privilégiant les interactions avec émission de phonons optiques.

Ces études ont démarré suite à la caractérisation d'une structure d'étude comportant une *zone d'injection peu dopée*. L'avantage lié à cette structure est la possibilité de contrôler très précisément la fenêtre des énergies d'injection qui présente en pratique une largeur inférieure à l'énergie d'un phonon optique.

Dans ces conditions, en réduisant l'agitation thermique par exemple par des mesures de caractéristiques $I(V)$ à la température de *l'azote liquide* il est possible de mettre en évidence un *pic satellite* qui a pour origine le tunnel des électrons avec émission d'un *phonon optique* à des tensions de polarisation telles qu'un transport purement cohérent est interdit. Concrètement, ces effets sont responsables d'un accroissement très important du courant dit de vallée et donc d'une *détérioration du rapport* entre les courants lorsque l'effet tunnel se fait en résonance et hors résonance.

Pour traiter théoriquement ce problème, nous avons tout d'abord calculé les *fréquences caractéristiques d'interaction* afin de les comparer à l'inverse des *temps de durée de vie* des porteurs sur le ou les niveaux quasi-liés de la structure. Ceci étant, il est alors possible de

décrire les phénomènes de transport globaux par deux termes décrivant les contributions *cohérente et incohérente*.

Par ailleurs, les phénomènes d'injection ont été modélisés en rendant compte des effets bi-dimensionnels. A ce stade il est nécessaire d'ouvrir une parenthèse sur cet aspect qui est fondamental. En introduction, nous avons décrit le processus de transport comme résultant d'un mécanisme d'injection dans un puits quantique suivi d'un processus d'échappement et de collection électronique. Or, pour des structures réalisées en pratique on constate que le phénomène d'injection se fait en réalité entre deux systèmes de même dimensionnalité par conséquent entre deux niveaux quantiques. On parle dans ce cas *d'injection bi-dimensionnelle*.

Ce modèle théorique a été appliqué de façon systématique pour calculer d'une part les fonctions d'alimentation et d'autre part les probabilités de transmission quantique avec préservation ou perte de la cohérence. Les fonctions d'alimentation sont structurées par l'effet d'injection bidimensionnelle avec des effets de résonance résultant de la quasi localisation dans le puits. Les probabilités de transmission sont également fortement affectées par les interactions sur phonons. Au final en introduisant les interactions sur phonons on détériore très fortement le rapport entre le courant pic et le courant vallée.

Etude en température

Expérimentalement pour traiter le problème global du transport des électrons hors résonance et des phénomènes d'injection 2D, nous avons entrepris une mesure systématique des caractéristiques $I(V)$ en fonction de la température *depuis l'hélium liquide jusque la température ambiante*.

Dans cette très large gamme de températures il est possible de mesurer la caractéristique $I(V)$ dans la zone de résistance différentielle mais aussi au démarrage des phénomènes de conduction qui correspondent théoriquement au recouvrement de la probabilité de passage par effet tunnel et de la fonction d'alimentation.

Par ailleurs, il est possible de montrer que la mesure de la *dérivée seconde du courant* par rapport à la tension à très basses températures reflète la transmission par effet tunnel. Partant de cette idée, des études systématiques ont été effectuées dans ce sens sur différentes structures de type double barrière différant principalement par les densités de courant admissibles, paramètres extrêmement importants dans les applications.

Transistor quantique

Le dernier volet des études concerne les structures tripôles. A ce stade plusieurs possibilités s'ouvrent à nous. Tout d'abord la réalisation d'un *troisième contact* directement dans le puits, ce contact pouvant être *ohmique* ou de type redresseur c'est à dire *Schottky*. Dans le premier cas on se heurte à un très grand nombre de difficultés technologiques que nous avons essayé de résoudre en début de thèse par une optimisation des contacts ohmiques. Cependant cette étude s'est très vite heurtée au problème de concilier un contact ohmique très peu profond et de bonne qualité.

Une autre solution possible consiste à *dissocier* la structure tunnel résonnant de celle de commande soit en intégrant directement une hétérostructure double barrière dans l'émetteur d'un transistor bipolaire soit en associant des structures résonnantes avec des transistors conventionnels à effet de champ.

Nous avons théoriquement évalué les possibilités offertes par la première solution sur la base d'un travail expérimental publié par le laboratoire central de recherches de *Texas Instruments* (Equipe d' A. Seabaugh). Les composants étudiés intègrent une structure double barrière en amont d'une zone de contact de base créant un flux d'électrons résonnant commandé par la tension entre base et émetteur. En pratique cependant, ces structures ont présenté un courant d'émission important entre la base et le collecteur. C'est ce problème qui a été plus particulièrement étudié en calculant les composantes de courants parasites mettant en jeu les effets tunnel et leurs répercussions au niveau du réseau de caractéristiques courant tension paramétré en courant ou tension de base.

Si la solution d'intégrer des composants conventionnels avec des structures quantiques se révèle satisfaisante pour un certain nombre d'applications on rencontre cependant des problèmes de compatibilité entre les composants ne serait ce que dans les densités de courant admissibles. Il est nécessaire en particulier que les composants soient de même force pour ne pas pénaliser la réponse globale.

Face à ces difficultés, on peut penser tirer parti d'un effet de résistance différentielle négative pour des structures combinant des processus de *transport parallèlement aux hétérostructures et perpendiculairement*. L'exemple peut être le plus représentatif démontré par le passé est le cas du transfert électronique dans l'espace réel mis en évidence dans des hétérostructures de type transistor à haute mobilité. Le passage des électrons initialement confinés dans une zone à haute mobilité vers des régions de faible mobilité donne effectivement lieu à des effets de conductance ou de transconductance négative. Par rapport à cette idée nous avons cherché à étudier dans quelle mesure les transferts pourraient s'effectuer par effet tunnel.

L'introduction des phénomènes quantiques dans la description des mécanismes de transport dans les transistors à haute mobilité est un *tâche particulièrement ardue*. En effet les dimensions mises en jeu dans le transport latéral sont telles qu'il est impératif de considérer un *transport diffusif* c'est à dire incluant les interactions sur phonons et sur impuretés pour ne citer que ces interactions dominantes. On décrit ces phénomènes par *l'équation de Boltzmann* qui dans ce cas précis doit tenir compte du *caractère bi-dimensionnel de la structure*. En revanche la description du transport quantique est basée sur *l'équation de Schrödinger* et il est relativement difficile d'avoir une approche globale dans l'état actuel de nos connaissances. Par ailleurs le fait de travailler avec des *gaz dégénérés d'électrons* complique notablement le problème avec la nécessité de rendre compte de gradients très importants de concentration par conséquent avec des statistiques très différentes (Boltzmann ou Fermi). Face à ces différents problèmes un certain nombre de solutions ont été jusqu'à présent apportées notamment dans des conditions de proche équilibre en introduisant la statistique de gaz dégénérés.

Par ailleurs, un premier calcul des probabilités de passage par effet tunnel à été effectué pour des variations de potentiel électrostatique de type "dos de chameau". En

pratique, ces effets vont intervenir lorsque la dimension des circuits notamment la longueur de grille devient nanométrique (Les meilleurs résultats du laboratoire font état de largeurs de grille de 50 nm).

Ces modélisations de la répartition bidimensionnelle des courbes d'iso-potentiels combinée au calcul des probabilités de transmission quantique au travers des barrières électrostatiques a permis d'évaluer les composantes de courants résonnantes. Trois pics ont été calculés en accord avec les expérimentations effectuées à IBM par K. Ismail. En outre nous avons ouvert le sujet en donnant les premiers éléments d'analyse d'un processus tunnel également de type bidimensionnel sur la base de différences importantes entre les vitesses électroniques suivant les directions transverse ou longitudinale.

En conclusion générale, un certain nombre de résultats originaux ont pu être mis en évidence au cours de ce travail de thèse sur la base d'un travail de fond sur la modélisation. Dans la mesure du possible nous avons comparé les résultats de calcul aux résultats de mesure soit effectuées au sein de l'équipe, c'est notamment le cas des études systématiques en température, soit pris dans la littérature. Certaines de ces comparaisons sont satisfaisantes quantitativement. Par contre il apparaît que des hypothèses sont encore trop simplifiées dans les cas de structures tunnel latéral où le caractère bidimensionnel n'affecte pas seulement la forme du potentiel mais également la façon dont les électrons vont appréhender ce potentiel.

Il reste une voie encore très peu explorée et pour lequel se travail peut constituer une première approche et qui concerne l'analyse globale des processus diffusifs et quantiques. Plusieurs approches sont d'ores et déjà possibles notamment les codes de simulation regroupés sous le terme générique de Monte Carlo quantique et les modèles hydrodynamiques associée à une description des effets quantiques. Nul doute que ces logiciels se révéleront d'un intérêt très important dans le futur ne serait que par la réduction toujours plus forte des dimensions des composants à l'avenir.

