

N° d'ordre : 2862

THESE

Présentée à

L'Université des Sciences et Technologies de Lille

pour obtenir le titre de

DOCTEUR DE L'UNIVERSITE

Spécialité : ELECTRONIQUE

par

Jean-David DELEMER

**Elaboration d'un nouveau modèle
hydrodynamique bidimensionnel
de transistor à effet de champ à hétérojonctions
pour l'amplification de puissance en millimétrique.**

Soutenue le 19 décembre 2000 devant la commission d'examen

Membres du jury : MM.	G. SALMER	Président
	J. C. DE JAEGER	Directeur de thèse
	M. ROUSSEAU	Co-directeur de thèse
	A. DE LUSTRAC	Rapporteur
	L. VARANI	Rapporteur
	R. FAUQUEMBERGUE	examineur

Résumé

Le développement ou l'amélioration des nouvelles filières de transistor à effet de champ hyperfréquence ne peut s'envisager sans l'appui de la modélisation physique qui permet la prédétermination des caractéristiques et l'optimisation des structures.

Le travail que nous présentons a pour objet l'élaboration d'un modèle physique bidimensionnel qui prend en compte les effets physiques spécifiques induits par une faible longueur de grille et la présence d'hétérojonctions.

Dans la première partie, un tour d'horizon des différents modèles susceptibles de prendre en compte les phénomènes physiques rencontrés dans les composants destinés à l'amplification de puissance en gamme millimétrique est effectué. Une attention particulière est portée aux modèles hydrodynamiques semi-classique ou à correction quantique qui font l'objet de ce travail.

Les méthodes numériques utilisées pour résoudre ce type de modèle sont alors décrites de manière approfondie.

Dans la partie suivante, les résultats de la simulation d'un MESFET GaAs à recess de grille sont présentés. Ils mettent en évidence l'influence d'une part des méthodes numériques utilisées et d'autre part des termes inertiels de l'équation du moment lorsque la longueur de grille diminue.

Enfin, la dernière partie de ce travail est consacrée à la simulation d'un transistor à effet de champ à hétérojonctions : le LM-HEMT sur InP. Plusieurs types de modèles d'hétérojonction sont comparés : le modèle de champ électrique équivalent et des modèles thermoïoniques. A cette occasion, leurs associations avec les modèles hydrodynamiques sont largement développées.

Mots clés :

Modélisation hydrodynamique bidimensionnelle

Equation du moment

Transistor à effet de champ

Recess de grille

Modélisation d'hétérojonction

Correction quantique

MESFET GaAs

LM-HEMT sur InP

TABLE DES MATIERES

<u>INTRODUCTION GENERALE</u>	1
<u>CHAPITRE 1 : ÉQUATIONS DE TRANSPORT ET MODÈLES</u>	5
1 INTRODUCTION	5
2 MODÈLES SEMI-CLASSIQUES	5
2.1 EQUATIONS FONDAMENTALES	5
2.1.1 <i>Equation de Poisson</i>	5
2.1.2 <i>Equation de transport de Boltzmann (ETB)</i>	6
2.2 DIFFÉRENTES RÉOLUTIONS DE L'ÉQUATION DE BOLTZMANN.....	9
2.2.1 <i>Résolutions directes</i>	9
2.2.1.1 Méthode variationnelle	9
2.2.1.2 Méthode de décomposition en série ou en harmonique sphérique.....	9
2.2.1.3 Méthode itérative	10
2.2.1.4 Méthode Monte Carlo.....	10
2.2.2 <i>Résolution par la méthode des moments</i>	11
2.3 MÉTHODE DES MOMENTS POUR LES SEMI-CONDUCTEURS III-V	13
2.3.1 <i>Modèle de vallée équivalente</i>	14
2.3.1.1 Système d'équations dans chaque vallée	14
2.3.1.2 Le modèle de vallée équivalente	18
2.3.1.2.1 Hypothèses et équations	19
2.3.1.2.2 Obtention des paramètres matériaux à l'aide de simulation Monte Carlo.....	20
2.3.1.3 Prise en compte d'autres phénomènes	22
2.3.1.3.1 Modélisation des hétérojonctions :	22
2.3.1.3.2 Dégénérescence	23
2.3.1.3.3 Echanges de porteurs interbande : ionisation par impact et recombinaison.	24
2.3.1.3.4 Effet d'écran.....	26
2.3.1.3.5 Potentiel de surface	27
2.3.1.3.6 Effet d'un champ magnétique extérieur	28
2.3.1.3.7 Echanges thermiques entre gaz de porteurs et réseau cristallin.	29

2.3.2	<i>Modèle de vallée équivalente quasi 2D</i>	30
3	MODÈLE QUANTIQUE	32
3.1	MODÈLE SCHRÖDINGER-POISSON 2D.....	32
3.2	MODÈLES HYDRODYNAMIQUES QUANTIQUES	33
3.2.1	<i>Modèle de Schrödinger-Poisson 2D couplé à un modèle de dérive-diffusion</i>	33
3.2.2	<i>Modèle quasi 2D à commande de charges quantique</i>	34
3.2.3	<i>Modèle hydrodynamique à correction quantique</i>	35
3.2.3.1	Fonction de distribution de Wigner à correction quantique.....	35
3.2.3.2	Equations de transport hydrodynamiques à correction quantique.....	37
4	CONCLUSION	39
5	BIBLIOGRAPHIE	40
	<u>CHAPITRE 2 : MÉTHODES NUMÉRIQUES</u>	55
1	INTRODUCTION	55
2	EQUATIONS UTILISÉES :	55
3	CHOIX DE LA TECHNIQUE DE DISCRÉTISATION	57
3.1	MÉTHODE DES DIFFÉRENCES FINIES.....	57
3.2	MÉTHODE DES ÉLÉMENTS FINIS	58
3.3	MÉTHODE DES BOÎTES FINIES.....	59
4	DOMAINE SIMULÉ ET CONDITIONS AUX LIMITES	59
4.1	LIMITES PHYSIQUES DES SEMI-CONDUCTEURS	61
4.1.1	<i>Contact métallique</i>	61
4.1.1.1	Contacts ohmiques de source et drain.....	61
4.1.1.2	Contact Schottky.....	62
4.1.2	<i>Interfaces air/semi-conducteurs</i>	64
4.2	LIMITES ARTIFICIELLES.....	64
4.2.1	<i>Bord haut de la zone simulée</i>	64

4.2.1.1	Dans le recess.....	64
4.2.1.2	Interface air/semi-conducteur horizontale entre source et drain	64
4.2.2	<i>Bord bas, gauche et droit de la zone simulée.....</i>	65
5	DISCRÉTISATION SPATIALE.....	65
5.1	DISCRÉTISATION DE L'ÉQUATION DE POISSON.....	68
5.2	EQUATION DU MOMENT.....	70
5.2.1	<i>Remarques préliminaires 1D.....</i>	70
5.2.1.1	Méthode de Lax	71
5.2.1.2	Méthode "upwind" du 1 ^{er} ordre	71
5.2.2	<i>Discrétisation spatiale de l'équation du moment 2D.....</i>	72
5.3	EQUATION DE CONSERVATION DE LA CHARGE ET DE CONSERVATION DE L'ÉNERGIE	74
5.3.1	<i>Remarques préliminaires 1D.....</i>	74
5.3.2	<i>Discrétisation spatiale de l'équation de continuité 2D.....</i>	75
5.3.3	<i>Discrétisation spatiale de l'équation de conservation de l'énergie 2D.....</i>	76
5.3.4	<i>Système d'équations résultant.....</i>	78
6	DISCRÉTISATION TEMPORELLE.....	79
6.1	CHOIX DE DISCRÉTISATION TEMPORELLE.....	79
6.1.1	<i>Méthode explicite.....</i>	80
6.1.2	<i>Méthode implicite.....</i>	80
6.1.3	<i>Méthode du type Crank-Nicholson.....</i>	81
6.2	CHOIX DES CONDITIONS INITIALES	82
7	RÉSOLUTIONS DE SYSTÈMES NON LINÉAIRES.....	82
7.1	MÉTHODE ITÉRATIVE	84
7.2	MÉTHODE DE NEWTON-RAPHSON	84
7.2.1	<i>Méthode de Newton-Raphson classique.....</i>	84
7.2.2	<i>Approximation de la matrice Jacobienne.....</i>	85
8	MÉTHODES DE RÉOLUTION DE SYSTÈMES D'ÉQUATIONS LINÉAIRES.....	86
8.1	RÉSOLUTION DU SYSTÈME LINÉAIRE LIÉ À L'ÉQUATION DE POISSON : MÉTHODE MDS.....	87

8.2	MÉTHODES ITÉRATIVES UTILISÉES.....	89
8.2.1	Méthode SOR.....	90
8.2.2	Méthodes du bigradient conjugué stabilisé.....	91
8.2.2.1	Algorithme du BiCGSTAB.....	92
8.2.2.2	Algorithme du BiCGSTAB(2).....	93
9	CONCLUSION.....	96
10	BIBLIOGRAPHIE.....	98
 CHAPITRE 3 : TRAITEMENT DE L'ÉQUATION DU MOMENT ET APPLICATION AU MESFET		
GAAS.....105		
1	INTRODUCTION.....	105
2	PRÉSENTATION DES PROGRAMMES.....	105
2.1	PROG1 : MODÈLE HYDRODYNAMIQUE SIMPLIFIÉ.....	105
2.2	PROG2 ET PROG3 : MODÈLE HYDRODYNAMIQUE COMPLET.....	108
2.2.1	PROG2 : Résolution des équations de transport découplées.....	108
2.2.2	PROG3 : Résolution des équations de transport couplées.....	110
2.2.2.1	Description de PROG3, version pas temporel constant.....	110
2.2.2.2	Version à pas temporel variable.....	112
3	STRUCTURE ÉTUDIÉE.....	114
4	COMPARAISON DES SIMULATIONS DE STRUCTURES À L'AIDE DE "PSEUDO-RECESS" ET DE "RECESS RÉEL".....	115
5	INFLUENCE DE LA LONGUEUR DE SOURCE ET DE DRAIN.....	117
6	INFLUENCE DE L'ÉPAISSEUR DU SUBSTRAT.....	120
7	COMPARAISON DES RÉSULTATS ISSUS DE PROG2 ET PROG3.....	125
7.1	COMPARAISON DES ÉVOLUTIONS TEMPORELLES DES COURANTS.....	126
7.2	COMPARAISON DES RÉSEAUX I(V).....	127

7.3	COMPARAISON DES ERREURS RELATIVES SUR LES COURANTS FINAUX.....	129
7.4	COMPARAISON DES DISTRIBUTIONS MOYENNES DES PRINCIPALES GRANDEURS PHYSIQUES SUIVANT L'AXE LONGITUDINAL À LA STRUCTURE.....	131
7.4.1	<i>Comparaison des distributions longitudinales moyennes des composantes longitudinales et transversales du vecteur vitesse</i>	<i>131</i>
7.4.2	<i>Comparaison des distributions longitudinales moyennes de densité de porteurs.....</i>	<i>133</i>
7.4.3	<i>Comparaison des distributions longitudinales moyennes de l'énergie</i>	<i>134</i>
8	COMPARAISON DE PROG1 ET PROG3.....	135
8.1	COMPARAISON DES ÉVOLUTIONS TEMPORELLES DES COURANTS	135
8.2	COMPARAISON DES RÉSEAUX I(V).....	137
8.3	COMPARAISON DES ERREURS RELATIVES SUR LES COURANTS FINAUX.....	140
8.4	COMPARAISON DES DISTRIBUTIONS LONGITUDINALES MOYENNES DE QUELQUES GRANDEURS	144
8.4.1	<i>Comparaison des distributions longitudinales moyennes des composantes longitudinales V_x des vecteurs vitesses</i>	<i>144</i>
8.4.2	<i>Comparaison des distributions longitudinales moyennes des composantes transversales V_y des vecteurs vitesses</i>	<i>147</i>
8.4.3	<i>Comparaison des distributions longitudinales moyennes de densité de porteurs.....</i>	<i>149</i>
8.4.4	<i>Comparaison des distributions longitudinales moyennes de l'énergie</i>	<i>152</i>
8.5	COMPARAISON DE PARAMÈTRES PETITS SIGNAUX.....	154
8.5.1	<i>Comparaison des conductances de sortie.....</i>	<i>155</i>
8.5.2	<i>Comparaison des transconductances.....</i>	<i>156</i>
8.5.3	<i>Comparaison des capacités C_{gs}.....</i>	<i>158</i>
8.5.4	<i>Comparaison des fréquences de coupure du gain en courant f_{ci}.....</i>	<i>159</i>
9	CONCLUSION.....	160
10	BIBLIOGRAPHIE	161
 CHAPITRE 4 : TRAITEMENT DES HÉTÉROJONCTIONS DANS LES MODÈLES		
HYDRODYNAMIQUES.....		
1	INTRODUCTION.....	163

2	STRUCTURE D'ÉTUDE : HEMT ADAPTÉ EN MAILLE SUR INP.....	163
3	HÉTÉROJONCTION GRADUELLE.....	166
3.1	MODÈLE	166
3.2	MISE EN ŒUVRE POUR LES HÉTÉROJONCTIONS	168
3.3	MODÈLES ÉNERGÉTIQUES ET HÉTÉROJONCTIONS GRADUELLES	170
3.3.1	<i>Comparaison des réseaux $I(V)$ obtenus avec et sans flux de chaleur</i>	<i>170</i>
3.3.2	<i>Comparaison des distributions longitudinales moyennes dans le puits des principales grandeurs à faible V_{DS} ($V_{DS} = 0.25$ V, $V_{GS} = -0.6$ V) obtenues avec et sans flux de chaleur.....</i>	<i>172</i>
3.4	MODÈLE HYDRODYNAMIQUE COMPLET ET HÉTÉROJONCTIONS GRADUELLES	177
4	MODÈLE D'HÉTÉROJONCTION ABRUPTÉ	187
4.1	HISTORIQUE	188
4.2	MODÈLE DE SCHROEDER.....	189
4.3	MODÈLE UTILISÉ AU LABORATOIRE	193
4.3.1	<i>Modèle modifié.....</i>	<i>193</i>
4.3.2	<i>Modèles énergétiques.....</i>	<i>195</i>
4.3.2.1	<i>Comparaison des réseaux $I(V)$.....</i>	<i>195</i>
4.3.2.2	<i>Comparaison de quelques grandeurs moyennes dans le puits ($V_{DS} = 1$ V et $V_{GS} = -0.6$ V)</i>	<i>196</i>
4.3.3	<i>Modèle hydrodynamique complet.....</i>	<i>198</i>
4.3.3.1	<i>Problème d'utilisation avec le modèle hydrodynamique complet à $V_{DS} \geq 0.5$ V</i>	<i>198</i>
4.3.3.2	<i>Comparaison des réseaux $I(V)$ obtenus avec les modèles énergétique et hydrodynamique comprenant les termes inertiels.....</i>	<i>201</i>
4.3.4	<i>Problème de mise à l'équilibre de l'hétérojonction à l'équilibre thermodynamique.....</i>	<i>203</i>
4.4	MODÈLE ABRUPT AVEC CORRECTION QUANTIQUE.....	205
4.4.1	<i>Modèle de dérive-diffusion et thermoionique à correction quantique.....</i>	<i>205</i>
4.4.2	<i>Comparaison des densités de porteurs à l'aplomb du drain obtenus avec un modèle classique et le modèle comprenant une correction quantique.....</i>	<i>206</i>
5	CONCLUSION.....	208
6	BIBLIOGRAPHIE	209

<u>CONCLUSION GENERALE</u>	215
<u>ANNEXE 1 : CALCUL DES ELEMENTS PETIT SIGNAL DU SCHEMA EQUIVALENT...</u>	219
<u>ANNEXE 2 : DONNEES MONTE CARLO</u>	227
<u>PUBLICATIONS ET COMMUNICATIONS</u>	237

INTRODUCTION GENERALE

Durant cette dernière décennie, les filières de composants III-V ont vu leurs applications, auparavant essentiellement orientées vers le domaine militaire, prendre un formidable essor au niveau grand public. A l'heure actuelle, les industriels du secteur concentrent leurs efforts dans ce sens. Que ce soit pour les télécommunications (téléphonie mobile, faisceaux hertziens, satellites ...) ou pour le transport (radar anticollision, télépéage,...), la demande et la production de circuits intégrés micro-ondes sous forme hybride ou monolithique ne cessent d'augmenter. Par conséquent, les bandes de fréquence inférieures à 20 GHz se trouvent très largement occupées. Aussi cherche t-on à développer de plus en plus d'applications dans le domaine des ondes millimétriques.

Avec les progrès technologiques réalisés, les composants actifs sont sans cesse plus performants, mais la complexité de leur fonctionnement s'accroît à mesure que leurs dimensions sont réduites. Dans le domaine des hyperfréquences, parmi les différents types de composants, les transistors à effet de champ constituent l'un des éléments de choix pour la réalisation des fonctions de base telles que la génération de puissance, la conversion de fréquence ou l'amplification faible bruit.

Tout système d'émission requiert un étage amplificateur de puissance. Jadis assurée par les tubes à onde progressive, cette fonction est désormais de plus en plus réalisée par des dispositifs à l'état solide qui permettent une meilleure fiabilité, une miniaturisation et une baisse des coûts de production. Dans ce domaine, la technologie basée sur les circuits intégrés monolithiques micro-ondes (MMIC) constitue une solution intéressante pour les applications

à très haute fréquence. En contre partie, une fois le dispositif réalisé, il est impossible de le modifier si les objectifs du cahier des charges ne sont pas atteints. Il est donc très important de prédéterminer les caractéristiques des éléments actifs : la modélisation physique trouve ici l'une de ses principales applications. Notre travail a pour but l'amélioration d'outils de simulation de type hydrodynamique bidimensionnel de composants micro-ondes pour des applications de puissances au-delà de 60 GHz.

Le développement ou l'amélioration de nouvelles filières de composants requiert des moyens importants tant au point de vue de la conception, de la réalisation que de la caractérisation. Dans cette optique, l'association du savoir-faire de plusieurs pôles de recherche et de grandes industries permet de mener à bien de tels projets. Les études auxquelles nous avons apporté notre contribution se sont déroulées dans ce cadre.

Celles-ci se sont inscrites, en effet, dans un projet plus global à l'étude des limitations des nouvelles filières de composants micro-ondes dans le cadre du contrat DRET n°94.160 " potentialités des transistors de la filière GaInAs pour applications à l'amplification micro-onde faible bruit, de puissance et à la conversion optoélectronique ".

Ces filières, dont les composants ont des topologies complexes, ont en commun les caractéristiques suivantes :

- la présence d'une couche de matériau de forte affinité électronique en comparaison aux matériaux qui la côtoient. Cette association de matériaux constitue un puits où sont recueillis les électrons fournis par un ou deux plans de dopage. Le matériau de plus forte affinité électronique présente, de plus, d'excellentes propriétés de transport ceci dans le but d'obtenir des courants élevés ;
 - les longueurs de grille sont faibles de l'ordre du dixième de micromètre afin d'obtenir des fréquences de travail fixées par le cahier des charges.
-

La modélisation de ce type de composants est analysée dans ce manuscrit qui comporte quatre chapitres.

Dans le premier chapitre nous passons en revue les principaux modèles rencontrés dans le cadre de la simulation de dispositifs semi-conducteurs. Une attention particulière est portée aux modèles hydrodynamiques qui constituent la base de notre travail.

Dans le second chapitre, les différentes méthodes de résolution numérique des équations des modèles hydrodynamiques retenus sont présentées.

Dans le troisième chapitre, des résultats de simulation d'un composant simple, le Mesfet GaAs, obtenus à l'aide de deux modèles hydrodynamiques comprenant ou non les termes inertiels dans l'équation du moment sont comparés. Ceci dans le but de mettre en évidence l'influence de ces termes pour des longueurs de grille courtes. En outre, une attention particulière est portée aux incidences du choix des méthodes de résolution utilisées.

Enfin dans le dernier chapitre, la modélisation du Hemt est étudiée. Deux approches de modélisation des hétérojonctions sont abordées et leur introduction dans les différents modèles hydrodynamiques est développée.

CONCLUSION GENERALE

L'objectif de ce travail était la modélisation de transistors à effet de champ de type HEMT pour l'amplification de puissance au-delà de 60 GHz. Nous avons pour cela amélioré un modèle de simulation de type hydrodynamique bidimensionnel existant au laboratoire. Ces améliorations portent sur deux domaines différents qui sont d'une part la physique régissant le transport dans les composants et d'autre part les méthodes de résolution numériques utilisées. Celles-ci ont été effectuées en prenant en compte la topologie spécifique des transistors à effet de champ de puissance qu'est le recess de grille.

Un travail de fond a été entrepris du point de vue numérique portant sur :

- la mise au point d'une discrétisation originale des termes convectifs croisés de l'équation du moment. Cette discrétisation allie précision et stabilité numérique ;
 - l'utilisation de méthodes itératives plus rapides et plus facilement vectorisables que sont les méthodes de la famille BiCGSTAB par rapport à la méthode SOR précédemment utilisée ;
 - un algorithme de variation de pas temporel a été mis au point pour éviter les valeurs négatives d'énergie et de densité de porteurs. Un effort supplémentaire doit être encore consenti pour supprimer les deux paramètres empiriques que sont ITMAX le nombre maximum d'itérations autorisé lors de l'inversion de matrice du système linéarisé et Δt_{\max} , le pas sur le temps maximum autorisé ;
 - il a été montré qu'il est préférable, pour une meilleure conservation du courant, de résoudre les équations hydrodynamiques couplées.
-

Le volet se rapportant à la physique des semi-conducteurs de ce travail comprend les aspects suivants :

- la comparaison de résultats de simulation de MESFET GaAs qui a permis de mettre en évidence la nécessité de prendre en compte les termes inertiels de l'équation du moment lorsque les longueurs de grille deviennent faibles ($< 0.5\mu\text{m}$). Pour ces faibles longueurs de grille, leur introduction produit une diminution des composantes du vecteur vitesse et par la même des courants, de la transconductance et de la fréquence de coupure intrinsèque ;

- les résultats de simulation du LM-HEMT de la filière InP ont montré que la modélisation thermoïonique des hétérojonctions présente de nets avantages par rapport à la modélisation par champ électrique équivalent tant sur le plan physique que numérique. En outre, la modélisation thermoïonique permet une généralisation simple aux hétérojonctions de semi-conducteurs multivallées^[1]. Le modèle thermoïonique proposé par M. Rousseau au sein de notre équipe, prenant en compte le premier niveau de sous-bande de quantification dans le puits et le passage par effet tunnel, associé au modèle hydrodynamique comprenant l'équation du moment complète, donne des résultats relativement proches des résultats expérimentaux. Cependant, un certain nombre de phénomènes physiques doit être encore introduit pour améliorer la précision des prédictions de notre modèle. Par ailleurs, il est nécessaire, pour obtenir des densités de courant nulles au niveau de l'hétérojonction proche du plan de dopage, de prendre en compte les effets quantiques d'une manière différente. Les courants tunnels doivent être mieux modélisés. Quant au premier niveau d'énergie de sous-bande, il peut être pris en compte à l'aide d'un modèle hydrodynamique à correction quantique en volume accompagné de relations thermoïoniques à correction quantique à l'interface. Seule l'expression de la densité de courant de ce type a été établie dans le présent travail mais son utilisation présente d'ores et déjà un réel intérêt.

Pour finir, il est nécessaire de prendre en compte la contribution des trous dans les composants à effet de champ de puissance. En effet, ceux-ci contribuent à des phénomènes limitatifs importants notamment le claquage par avalanche. Il n'a pas été étudié ici, mais son introduction dans un modèle énergétique a débuté au sein de l'équipe avec l'étude d'une structure de type MESFET GaAs par M. Fall^[i] et poursuivi par l'étude de HEMT pseudomorphique sur substrat GaAs par M. Elkhoul^[iii].

Bibliographie de la conclusion générale

[ⁱ] **S.S. Lu et al.**, "Theoretical and experimental study of the longitudinal uniaxial stress dependence of I-V characteristics in GaAs-Al_xGa_{1-x}As-GaAs heterojunction barriers", Journal of Applied physics, Vol. 67, n°10, pp. 6360-6360, May 1990.

[ⁱⁱ] **M. Fall**, "Etude des phénomènes de claquage dans les transistors à effet de champ fonctionnant en ondes millimétriques", D.E.A. d'électronique, U.S.T.L., Septembre 1997.

[ⁱⁱⁱ] **M. Elkhoul**, "Simulation hydrodynamique bidimensionnelle d'un HEMT pseudomorphique GaAlAs/GaInAs/GaAs à double recess. Etude physique et analyse des phénomènes de claquage par avalanche", D.E.A. d'électronique, U.S.T.L., Juillet 2000.
