#### Université Mohamed Khider de Biskra



Faculté des sciences exactes et des sciences de la nature et de la vie Département des sciences de la matière

#### MÉMOIRE DE MASTER

Domaine des sciences de la matière Filière de physique Spécialité Physique énergétiques et énergies renouvelables

> Présenté et soutenu par : Houili kamir , bourouis kamilia

> > Le : jeudi 27 juin 2019

#### Modélisation quantique d'un transistor HEMT

		Jury :	
Heddar Mebarak	M.A.« A »	Université Med Khider- Biskra	Président
Laznek Samira	M.C. « B »	Université Med Khider- Biskra	Rapporteur
Latreche Farid	M.C.« A »	Université Med Khider- Biskra	Examinateur

Année universitaire : 2018/2019

Dieu soit loué: premièrement, sans sa grâce, cette thèse ne sera pas achevée à temps.

Remerciement

Je voudrais exprimer ma sincère gratitude à l'honorable **Dr**. Laznak Samira pour son soutien, sa patience et ses conseils soutenus. Nous n'avons jamais imaginé un meilleur superviseur pour étudier la thèse.

Je voudrais remercier les autres membres du jury (Heddar Mebarak, Latreche Farid) our l'intérêt qu'ils portent à ce travail et pour l'honneur qu'ils nous ont témoigné et pour leur acceptation de la relecture de cette note, de leurs commentaires et de leurs questions.

Enfin, n'oubliez pas de remercier tous les professeurs, en particulier le département des sciences et tous ceux qui nous connaissent pendant nos études universitaires. Merci à tous pour l'amour et le respect

Nous voudrions également remercier tous les amis pour leur soutien et leurs encouragements et leur souhaiter plein succès dans la vie.

Et à chacun de notre famille d'être à nos côtés.

Kamilia et kamir 🕑

#### TABLE DES MATIERES

Remerciement	Ι
Table des matières	II
Introduction générale	1

#### CHAPITRE I: Théorie générale sur les hétéro-structures et le transistor

#### HEMT

I.1	Introduction	2
I.2	Propriétés du matériau étudié	2
I.2.1	Structure cristalline	2
I.2.2	Structure des bandes d'énergie	4
I.2.3	L'alliage AlGaAs	4
1.3	Les propriétés physiques et électroniques	5
1.3.1	Les propriétés physiques	5
1.3.2	Propriétés électroniques	6
I.4	L'hétérojonction AlGaAs/GaAs	6
I.5	Les transistors à effet de champ	8
I.5.1	Historique du transistor HEMT	8
I.5.2	Transistor HEMT	8
I.5.3	Structure d'un HEMT	9
I.6	Hétérojonction et gaz bidimensionnel d'électrons	11

#### **CHAPITRE II : MODELES MATHEMATIQUES**

II .1	Introduction	13
II .2	L'équation de Poisson	13
II .3	L'équation de Schrödinger	14
II .3.1	Approximation de la masse effective	15
II .3.2	Energie potentielle des électrons	16
II .4	Confinement d'électrons et densité d'états	16
II .4.1	Densité d'états 3D	16
II .4.2	Densité d'états 2D	17
II .4.3	Densité d'états 1D	20

#### CHAPITRE III : ETUDE DU TRANSISTOR HEMTAVEC COUCHES $$\Delta$$ DOPEE

III.1	Introduction	23
III.2	Description du HEMT	23
III.3	Energie potentielle et distributions des porteurs de charge	24
III.4	Effet de la concentration du couche $\delta$ -dopée sur le confinement des électrons	27
III.5	Effet du dopage de la couche $\delta$ -dopée sur la bande de conduction	28
III.6	Etude quantique	29
III.7	Effet des paramètres	37
III.7.1	Effet de l'épaisseur de la couche $\delta$ -dopée sur le confinement des porteurs dans le	
	puits quantique	38
III.7.2	Effet de la distance (d) sur le confinement des porteurs dans le puits quantique	40
III.7.3	Effet de la fraction molaire sur le confinent dans le puits quantique	43
III.8	Conclusion	44
	conclusion générale	45

ш

## htroduction Général

#### **INTRODUCTION GENERALE**

Au cours des vingt dernières années, les chercheurs ont appris à structurer la matière à l'échelle du nanomètre, en particulier pour les besoins de l'optoélectronique. Rappelons qu'un nanomètre, c'est un milliardième de mètre, c'est à dire cinquante mille fois plus petit que le diamètre d'un cheveu. On parle donc ici d'une échelle extrêmement petite, de l'ordre de quelques distances interatomiques au sein des molécules ou des corps solides. A l'échelle du nanomètre, les propriétés physiques sont très différentes de celles qui sont observables dans notre monde macroscopique et sont gouvernées pour l'essentiel par la mécanique quantique. Les matériaux semi conducteurs jouent aujourd'hui un grand rôle dans les dispositifs électroniques et optoélectroniques. Les semi-conducteurs employés dans notre travail sont le «GaAs» qui est un semi conducteur direct, et le «Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As», ici « x » représente le nombre relatif d'atomes, le «Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As» est un matériau à bande interdite directe. Par contre, lorsque la fraction molaire « x » est plus grande, le matériau devient indirect.Le développement des hétérojonctions des matériaux semi conducteurs a donné des illustrations claires de certains.

L'objet principal de ce travail est la simulation numérique des hétérojonctions simples AlGaAs/GaAs en utilisant le modèle de transport électrique dans cas des équations quantiques par le programme MATLAP.

Le mémoire est structuré comme suit :

Le premier chapitre, présente des généralités sur les hétérojonctions semi-conductrices et quelques notions de base sur les propriétés électronique et cristalline du composé AlGaAs et GaAs et transistor HEMT. Le deuxième chapitre est consacré à l'étude quantique des hétéro structures de type AlGaAs/GaAs à puits quantiques, les états électroniques dans un puits de potentiel, Dans le troisième chapitre, nous avons fait une étude de l'effet des paramètres technologiques d'un transistor AlGaAs avec la couche  $\delta$ -dopée type n. Les électrons confinés dans la région du canal de GaAs sont quantitativement analysés en fonction de la concentration des impuretés de la couche  $\delta$ -dopée type n la fraction molaire d'Al, l'épaisseur et la distance au canal. On a montré qu'il y a un optimum pour la concentration en impureté d'une couche de n-type pour divers x, t, et d. L'épaisseur de la couche de n-type et de sa distance au canal de silicium devrait être choisi aussi petite que possible pour augmenter l'efficacité puisque les électrons peuvent pénétrer dans le canal de GaAs.

Chapiter I: Chapiter I: Théorie générale sur les hétéro-structures et les transistor HEMT

#### I.1. Introduction :

Depuis les premiers travaux en 1970 de L. Esaki et R. Tsu sur les couches minces semiconductrices (GaAs,AlAs) et grâce à l'évolution de la nanotechnologie, la recherche fondamentale sur les propriétés de ces semi-conducteurs et leurs applications pour les hétéro structures semi-conductrices *III-V* a bien avancée [1].

Dans ce chapitre, nous définirons et exposerons quelques propriétés des semi conducteurs de III-V en particulier les composés *GaAs*, *AlGaAs*, afin d'arriver à la présentation des principales caractéristiques d'une hétéro structure. Puis nous présenterons les transistors HEMT à puits quantique.

#### I.2. Propriétés du matériau étudié :

La recherche des composants électroniques présentant des propriétés de transport supérieures à celles du Silicium, conduit la plupart des grands laboratoires de recherches à s'intéresser à des nouveaux matériaux en particulier les semi-conducteurs III-V.

Les matériaux semi-conducteurs III-V sont des corps composés formés à partir d'un élément de la III <sup>éme</sup> colonne et d'un élément de la V <sup>éme</sup> colonne de la classification périodique de Mendeleïev [2, 3, 4]. Une nouvelle classe de matériaux fait ainsi son apparition.

Nous nous sommes intéressés aux composés III-V GaAs et L'alliages AlGaAs, qui sont les matériaux utilisés dans notre structure.

#### ➤ GaAs:

#### I.2.1.Structure cristalline :

Comme les semi-conducteurs III-V, le GaAs cristallise dans une structure de type zincblende (cfc) (voir Figure I.1). Il est formé de deux réseaux cubiques à faces centrées identiques qui s'interpénètrent, l'un contenant les atomes de gallium 'Ga' l'autre les atomes de l'arsenic 'As'. Le décalage entre les deux réseaux est d'un quart de la diagonale principale du cube. On a donc quatre paires d'atomes par cellule conventionnelle. Les liaisons tétraédriques covalentes telles que le liaisons Si-Si par exemple ou partiellement ioniques et partiellement covalentes telles que les liaisons Ga-As dans le cas qui nous concerne sont la base de la structure zinc -blende. En effet chaque atome est l'origine de quatre liaisons orientées dans l'espace suivant les axes de symétrie d'un tétraèdre régulier, comme le montre (Figure I.1). [5] [2, 3]



Figure (1-1) : structure cristalline du GaAs (structure zinc blende)

Une autre propriété chimique importante du GaAs est que si l'on clive (coupe) le cristal selon la direction [001], on aura une succession de plans cristallins comportant des atomes de l'élément de type III, puis les atomes de l'élément de type V, et ainsi de suite. Cela permet une croissance couche à couche du semi-conducteur. D'un point de vue énergétique, la relation de dispersion E(k) présentant l'énergie en fonction du vecteur d'onde, montre que contrairement au silicium et au germanium où la transition est indirecte, le GaAs est un matériau à transition directe (Figure I.2)  $E_g = 1,424$  eV à 300 K [6] .Par comparaison, les valeurs des bandes interdites correspondant au Si et au Ge sont de 1,12 eV et 0,66 eV respectivement.



**Figure I.2**: Bandes interdites à transition directe et indirecte dans les semi-conducteurs, a gauche transition directe (cas du GaAs), a droite transition indirecte (cas du Si)

#### Le AlGaAs:

L'alliage  $Al_x Ga_{1-x} As$  est une solution solide de GaAs et de AlAs. Tout paramètre physique relatif à cet alliage peut être obtenu par combinaison des paramètres correspondants au GaAs et à l'AlAs. Les deux matériaux ont la même structure cristalline. Les paramètres physiques de ces deux matériaux sont voisins pour une température de 900°C environ [7].

#### I.2.2. Structure des bandes d'énergie :

Le composé GaAs possède une bande interdite directe. La transition d'énergie minimale entre ses deux bandes peut avoir lieu sans changement de vecteur d'onde, ce qui permet l'absorption et l'émission de lumière de façon beaucoup plus dans les matériaux à gap indirect comme l'AIAs, figure (I.3) [8].



AlAs



Figure I.3: Structure de bande d'énergie du GaAs et d' AlAs [8].

#### I-2-3 L'alliage AlGaAs

L'alliage Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As est une solution solide de GaAs et de AlAs. Tout paramètre physique

relatif à cet alliage peut être obtenu par combinaison des paramètres correspondants au GaAs et à l'AlAs. Les deux matériaux ont la même structure cristalline. Les paramètres physiques de ces deux matériaux sont voisins [4].

La nature de la transition énergétique de l'alliage Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As change selon le taux

d'Aluminium x, avec  $1 \le x \le 0$ . Pour une fraction d'Aluminium inférieure à 0,45, la transition de l'alliage est identique à celle du GaAs caractérisée par une transition directe. Quand le taux d'Aluminium devient supérieur à 0,45 la transition devient indirecte comme celle de l'AlAs [4].

La constante de maille et les bandes d'énergies en fonction de la composition (x) de

l'Aluminium sont données par [2] :

Constante de maille (en A°) :	a = 5.6533 + 0.0078x	(I-1)
Bande interdite (en eV) :	$Eg = 1.424 + 1.155x + 0.37x^{2}$	(I-2)

#### I.3. Les propriétés physiques et électroniques :

#### I.3.1. Les propriétés physiques :

de l'alliage Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As sont obtenues par interpolation linéaire en utilisant celles de GaAs et

AlAs. Par exemple, le paramètre de maille (constante du réseau cristallin) de l'alliage  $Al_xGa_{1-x}As$  peut se déduire par interpolation linéaire en utilisant les paramètres de maille de GaAs et de AlAs. Il est donné par la loi de Végard [9].

a (Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As) =  $\mathbf{x} \times \mathbf{a}(AlAs) + (1 - \mathbf{x}) \times \mathbf{a}(GaAs)\mathbf{x}$ 



Figure I.4: Energie de bande interdite des principaux binaires et ternaires III-V en fonction de leur paramètre de maille [9].

#### I.3.2. Propriétés électroniques :

Dans le tableau (I.1), on peut résumer les paramètres cristallines et électriques des matériaux GaAs et AlGaAs ; celles de ce dernier sont donnés en fonction de la fraction molaire x [10].

Tableau I.1: Propriétés cristallines et électroniques des matériaux GaAs et AlGaAs.[10]

Paramètre	GaAs	AlGaAs	
Largeur de la bande interdite E <sub>g</sub> (eV)	1.424	1.424+1.247x 1.900+0.125x+0.143x <sup>2</sup>	0≤x≤0.45 0.45 <x≤1< th=""></x≤1<>
Constante de maille a (A°)	5.653	5.6533+0.0078x	
Coefficient de dilatation thermique β <sub>th</sub> (10-3°C)	6.4	6.4-1.2x	
L'affinité électronique χ(eV)	4.07	4.07-1.1x 3.64-0.14x	0≤x≤0.45 0.45 <x≤1< th=""></x≤1<>
Densité (g.cm <sup>-3</sup> )	5.360	5.36-1.6x	
Mobilité des électrons µ <sub>n</sub> (cm <sup>2</sup> /V.s)	8800	8.10 <sup>3</sup> -2.2.10 <sup>4</sup> x+10 <sup>4</sup> x <sup>2</sup> -255+1160x-720x <sup>2</sup>	0≤x≤0.45 0.45 <x≤1< th=""></x≤1<>
Mobilité des trous µ <sub>p</sub> (cm <sup>2</sup> /V.s)	400	370-970x+740x	
Masse effective des trous m <sub>p</sub> *(×m0)	0.62	0.62 0.62+0.14x	
Masse effective des électrons m <sub>n</sub> *(×m0)	0.067	0.067+0.083x 0.85-0.14x	0≤x≤0.45 0.45 <x≤1< th=""></x≤1<>
Coefficient de diffusion des électrons D <sub>n</sub> (cm <sup>2</sup> /s)	220	$200-550x+250x^{2} \\ -6.4+29x-18x^{2}$	0≤x≤0.45 0.45 <x≤1< th=""></x≤1<>
Coefficient de diffusion des trous $D_p(cm^2/s)$	10	$9.2-24x+18.5x^2$	
Vitesse thermique des électrons (cm/s)	107	$(4.4-2.1x) \times 10^7$ $2.3 \times 10^7$	0≤x≤0.45 0.45 <x≤1< th=""></x≤1<>
Vitesse thermique des trous (cm/s)	10	$(1.8-0.5x) \times 10^7$	

#### I.4. L'hétérojonction AlGaAs/GaAs :

L'hétérojonction issue de deux matériaux cité précédemment (GaAs et AlGaAs) dans le cas des HEMTs est formée par une couche donneuse AlGaAs dopée *n*, séparée d'une deuxième

couche intrinsèque de GaAs formant le canal par une couche AlGaAs non dopée (espacer). Les deux matériaux se différencient par leur largeur de bande interdite  $E_g$ , leur travail de sortie  $\varphi$  et leur affinité électronique  $\chi$ .

 $E_c$  et  $E_v$  représentent respectivement le niveau du vide, l'énergie de la bande de conduction et l'énergie de la bande de valence, Les différents paramètres relatifs au GaAs sont obtenus en donnant à *x* la valeur zéro.



Figure I.5: Diagramme énergétique de l'hétérojonction AlGaAs/GaAs . [11] [12] Anderson [13] a donné l'expression de la discontinuité des bandes de valence et de conduction.

$$\Delta E_c = \chi_1 - \chi_2 \tag{I.1}$$

$$\Delta E_{v} = (E_{g}^{2} - E_{g}^{1}) - \Delta E_{c}$$
(I.2)  
Avec  $E_{g}^{1}(E_{g}^{2})$  et  $\chi^{1}(\chi^{2})$  la largeur de la bande interdite et l'affinité électronique de AlGaAs  
(GaAs). Cependant, la détermination exacte des affinités électroniques est difficile. La

$$\Delta E_{c} = (0.85 \pm 0.03) \times (E_{g}^{2} - Eg^{1})$$
(I.3)

mécanique quantique permet d'écrire pour l'hétérojonction AlGaAs/GaAs:

$$\Delta E_{v} = (0.15 \pm 0.03) \times (E_{g}^{2} - Eg^{1})$$
(I.4)

Par exemple, pour un taux d'Aluminium x=0,25,  $\Delta E_c = 0,26$  eV et  $\Delta E_v = 0,045$  eV. À basse

température, il est recommandé d'utiliser  $E_g^2 = 1,42$  (eV) [14].

#### I.5. Les transistors à effet de champ

#### **I.5.1 Historique du transistor HEMT :**

La naissance du transistor HEMT (High Electron Mobility Transistor) date de peu après 1979 où Dingle et al. [15] [16] ont eu l'idée d'utiliser des hétérojonctions du type GaAs/AlxGa1-xAs, pour séparer spatialement les électrons libres des impuretés, ce qui la mobilité dans ces hétéro structures à gaz d'électrons. Une invention conjointe entre Thomson CSF (France) et Fujitsu (Japon) [17] permet, par la suite, la conception des premiers transistors HEMT en 1980.

En 1985, le HEMT est présenté comme un composant micro-onde unique ayant les plus faibles caractéristiques en bruit. Initialement, ce transistor était utilisé dans un radiotélescope à Nobeyama (Japon) qui présente un diamètre de 45 mètres. En refroidissant le composant à la température de l'hélium liquide, il est possible de capter un signal provenant d'une molécule interstellaire située à mille années lumières de la Terre. Plus tard, HEMT est implanté dans des récepteurs de télévision pour capter les signaux des satellites géostationnaires (36000km d'altitude). Puis petit à petit, ce composant se fera une place dans notre quotidien.

Le HEMT constitue une évolution majeure du MESFET (FET à jonction métal/semiconducteur) et a pris le pas sur ce dernier depuis le début des années 1990 **[18] [19]** Ce composant est désormais largement utilisé en tant que composant faible bruit dans les systèmes de télécommunications terrestres et spatiales, dans les radiotélescopes, dans les récepteurs de télévision par satellite, dans bon nombre de systèmes électroniques, des téléphones portables aux véhicules automobiles

#### **I.5.2.Transistor HEMT :**

Le principe de fonctionnement du HEMT est identique à celui d'un transistor à effet de champ à grille Schottky de type MESFET figure (1-6). Il est basé sur la modulation de la conductance entre deux contacts ohmiques appelés "Source" et "Drain", par l'action électrostatique d'une électrode de commande dénommée "Grille".

La variation de cette conductance est proportionnelle au nombre de porteurs libres dans le canal, et donc au courant entre source et drain. C'est l'effet d'amplification transistor qui permet de transformer un faible signal appliqué sur la grille en un signal plus fort récupéré sur le drain.



Figure (1-6). Transistor à effet de champ à grille Schottky, le MESFET.

Ce type de transistor, illustré par la <u>figure (1-5)</u>, tire sa particularité de son contact métal/semi-conducteur de grille, que l'on nomme Schottky en référence au modèle qui régit son fonctionnement : à l'hétéro-interface métal/semi-conducteur apparaît une barrière de potentiel pour les électrons (tension de built-in  $V_b$ ), qui correspond à la différence de travail de sortie entre le métal et le semi-conducteur. Le comportement électrique de ce contact est celui d'une diode. En polarisation inverse, cette jonction se comporte comme un condensateur.

#### I.5.3.Structure d'un HEMT :

La structure d'un HEMT est présentée sur la <u>figure (1-7)</u>. Elle est constituée essentiellement de trois matériaux différents : le substrat, un matériau à grand gap et un matériau à petit gap. On retrouve les électrodes de source, grille et drain, communes au MESFET



Figure (1-7). Structure d'un transistor HEMT.

- La couche superficielle (appelée Cap Layer) est formée par un matériau de faible bande interdite, pour permettre la réalisation des contacts ohmiques de source et de drain. Cette couche est généralement fortement dopée afin de diminuer la valeur des résistances de contact et donc celle des résistances d'accès.
- La couche à grand gap non dopée est destinée à la réalisation du contact Schottky de grille, qui est déposé après gravure du Cap Layer (fossé de grille ou recès).
- La couche de matériau à grand gap dopé a pour rôle de fournir les électrons libres à la structure ; c'est la couche donneuse. Ce dopage, pouvant être volumique, est généralement réalisé par un plan de dopage silicium.
- Vient ensuite l'espacer (spacer), une couche de matériau à grand gap non intentionnellement dopé (nid), permettant de séparer les atomes donneurs d'électrons de la couche donneuse, des électrons du canal. Les interactions à distance électronsimpuretés sont ainsi réduites. Plus cette couche sera épaisse, meilleure sera la mobilité des électrons dans le canal. A l'inverse, le transfert des électrons de la couche donneuse dans le canal est favorisé par un espacer fin.
- Le canal est constitué d'un matériau à petit gap non intentionnellement dopé. Cette couche, importante dans la mesure où elle reçoit le gaz bidimensionnel d'électrons,

déterminera les performances du composant à travers les propriétés de transport des électrons dans le matériau.

- Une couche tampon, communément appelée buffer, permet d'améliorer le confinement des électrons dans le canal en réduisant l'injection des porteurs vers le substrat. Cette couche permet également d'avoir un matériau de base de bonne qualité cristallographique nécessaire à la croissance des autres couches.
- Enfin, le substrat semi-isolant (SI) est un matériau binaire qui identifie la filière (GaAs, InP).

#### I.6. Hétérojonction et gaz bidimensionnel d'électrons :

Dans le cas du HEMT, la juxtaposition d'un matériau à grand gap et d'un matériau à petit gap implique la création d'une discontinuité de bande de conduction à l'interface entre les deux matériaux (Modèle d'Anderson : c'est en 1962 que R. L. Anderson a proposé le modèle de l'hétérojonction qui sera le plus utilisé et deviendra une référence dans son domaine. Dans ce modèle, lors de la jonction de deux semi-conducteurs à bandes interdites différentes, les niveaux de Fermi s'alignent. La conservation des paramètres physiques de part et d'autre de l'interface entraîne des courbures des bandes de conduction et de valence, ainsi que des discontinuités à l'interface pour ces deux bandes.). Cette "hétérojonction", illustrée par la figure (1-8), entraîne la formation d'un puits de potentiel dans le matériau à petit gap où transfèrent et s'accumulent les électrons provenant de la couche donneuse. L'hétérojonction est caractérisée par la discontinuité de bande de conduction  $\Delta E_c$  entre les deux matériaux.



Figure (1-8). Structure de bande d'une hétérojonction en présence d'un potentiel de grille

Le transfert de charges génère dans la couche donneuse une zone désertée. Le profil électrique des charges détermine la courbure de bande de part et d'autre de l'hétérojonction, ce qui se traduit par la formation d'un puits de potentiel de forme triangulaire dans le canal. Pour une largeur de puits inférieure à la longueur d'onde de De Broglie, apparaissent les effets quantiques. Ces effets se traduisent par la quantification des niveaux d'énergie des électrons et par la restriction du mouvement des porteurs dans un plan parallèle à l'hétérojonction. On appelle gaz d'électrons bidimensionnel (2DEG : two Dimension al Electron Gas), l'accumulation des électrons dans ce puits. L'hétérojonction permet la séparation spatiale des atomes donneurs ionisés et des électrons libres. Ces électrons ne sont donc plus soumis aux interactions sur impuretés ionisées, et peuvent alors atteindre des mobilités importantes. Le HEMT bénéficie donc d'un transport électronique dans un gaz (quasi-bidimensionnel) bien supérieur à celui d'un matériau dopé. Notons que dans le cas de la <u>figure (1-</u>7), le canal du HEMT est situé entre deux matériaux de grand gap. La structure de bande n'est plus alors constituée d'une seule hétérojonction, comme sur la <u>figure (1-8)</u>, mais d'un double hétérojonction, améliorant encore ainsi le confinement des électrons dans le canal.

Les performances fréquentielles des HEMT sont liées au temps de transit entre la source et le drain. Monter en fréquence revient donc à réduire les dimensions du composant, mais également à utiliser des matériaux présentant des mobilités électroniques élevées.

## Chapiter II: Chapiter II: Od Modèles Mathématiques

#### **II** .1. Introduction :

Lorsque les dimensions ou la région active d'un composant atteignent l'échelle nanométrique, la représentation corpusculaire de porteurs de charge doit céder le pas à la représentation ondulatoire. Le confinement quantique résultant de la réduction de dimensionnalité du mouvement de porteurs redistribue la structure de bandes et les densités d'états. Ce sont alors les effets quantiques spécifiques de ces nouvelles dimensionnalités.

Dans ce chapitre, on va présenter les modèles mathématiques qui régissent les phénomènes physiques dans de telles structures. Dans ce cas deux phénomènes interviennent dans l'étude de ces structures ; Le phénomène électrique et le phénomène quantique.

Ces phénomènes sont décrits tout simplement pour notre cas d'étude, par l'équation de Poisson et l'équation de Schrödinger en tenant compte de quelques hypothèses approximatives.

#### II .2. L'équation de Poisson :

L'équation de Poisson tenant compte de la variation de permittivité dans le cas général s'écrie [20]:

$$div(\varepsilon.\overline{grad}\phi) = -\rho \tag{2-1}$$

où :

ε : Permittivité électrique.

φ: Potentiel électrique.

ρ : Densité de charge total développé dans le semi-conducteur.

Cette équation exprime la variation du potentiel électrique dans le domaine d'étude.

Au potentiel électrique  $\varphi$  est associé d'habitude un champ électrique donné par :

$$\vec{E} = - \vec{\text{grad}} \phi$$
 (2-2)

L'équation de Poisson dans le cas monodimensionnelle en explicitant le terme  $\rho$  de la charge d'espace se simplifie en :

$$\frac{\partial}{\partial z} \left( \varepsilon(z) \frac{\partial \varphi(z)}{\partial z} \right) = -\rho = -e \left( N_d^+(z) - N_A^-(z) + P(z) - n(z) \right)$$
(2-3)

tel que :

*e* : La charge d'un électron en valeur absolu.

*n* : Densité des électrons libres.

p : Densité des trous libres.

 $N_{\rm D}^+$ : Densité de donneurs ionisés exprimée par [21]:

$$N^{+}_{D} = \frac{N_{D}(z)}{1 + 2\exp(-\frac{E_{F} - [U(z) - E_{D}]}{k_{B}T})}$$
(2-4)

 $N_A$ : Densité d'accepteurs ionisés exprimée par [21]:

$$N_{A}^{-} = \frac{N_{A}(z)}{1 + 2\exp(\frac{(U(z) - E_{g}(z) + E_{A}) - E_{F}}{k_{B}T})}$$
(2-5)

Dans les deux équations précédentes  $N_D$  et  $N_A$  présentent la densité de dopage en atomes donneurs et accepteurs respectivement.  $E_D$  et  $E_A$  sont les énergies d'ionisation des atomes donneurs et accepteurs mesuré par apport au bat de la bande de conduction U et au sommet de la bande de valence  $U_v=U-E_g$  respectivement. Ici  $E_g(z)$  présente le gap à travers l'hétéro structures et  $E_F$  le niveau de Fermi.  $K_B$  et T dénote la constante de Boltzmann et la température en Kelvin respectivement.

La résolution de l'équation de Poisson passe par la connaissance des conditions aux limites. Il existe deux types de conditions :

#### Les conditions de type Dirichlet

Les conditions de Dirichlet non homogène sont imposées aux contacts tel que la fonction potentielle doit être spécifiée sur les contactes :  $\emptyset = \emptyset_1$ 

#### Les conditions de type Newman

Les conditions de type Newman sont imposées aux autres limites de la structure,

c'est-à-dire la dérivée normale sur ces limites est nulle :  $\frac{\partial \phi}{\partial n} = 0$ 

 $\rightarrow$ : Vecteur normal.

#### II .3. L'équation de Schrödinger :

Dans le cadre de simulation des phénomènes quantiques dans des dispositifs semi-conducteurs, Nous sommes amenés à étudier la structure énergétique d'un gaz d'électrons ou de trous confinés dans ces structures. Nous devons donc intégrer l'équation de Schrödinger. Cette équation dans le cas stationnaire s'écrit [22]:  $[T+U(r)] \psi^{\alpha}(r) = E_{\alpha} \psi^{\alpha}(r)$ 

tels que :

*T* : Opérateur énergie cinétique U(r) : Opérateur énergie potentielle  $\psi^{\alpha}(r)$  : Fonction d'onde à l'état propre α E<sub>a</sub> : Énergie associée à l'état propre α.

Puisque seulement des états liés sont considérés, des conditions au limites de type Neumann Ont été assumés pour l'équation de Schrödinger, c.-à-d., la fonction d'onde et sa dérivée doivent être zéro aux extrémités du système.

Pour résoudre l'équation de poisson et l'équation de Schrödinger, on doit passer par des Approximations simplificatrices :

#### II .3.1. Approximation de la masse effective :

Parmi les différences contributions au potentiel que voient les électrons, le potentiel périodique associé aux ions du cristal, c'est-à-dire le potentiel cristallin, joue évidemment un rôle important. Les états propres et les fonctions propres correspondants sont évidemment connus, il s'agit pour les premiers de la bande de conduction et pour les secondes des fonctions de Bloch. On peut alors s'affranchir aisément de ce terme en utilisant l'approximation de la masse effective. L'électron de masse m<sub>0</sub> dans le potentiel cristallin, se comporte comme un électron de masse effective m\* et dont la fonction d'onde de Bloch, cet électron se déplace dans un réseau périodique supposé vide d'ions. En d'autres termes, le potentiel cristallin est représenté par le fait que l'électron a une masse effective m\* différente de la masse m0 de l'électron libre. La périodicité de structure cristalline entraîne une périodicité de la fonction d'onde associée à l'électron qui doit satisfaire au théorème de Bloch. L'approximation de la masse effective est utilisée avec succès dans l'étude de tous les composants, cependant elle atteint ici une limite de validité dans la mesure où les électrons sont confinés dans une épaisseur de l'ordre de quelques couches atomiques [21].

La version la plus simple de l'approximation de la masse effective consiste à affecter à l'électron la masse effective de la bande de conduction correspondante, supposée isotrope et parabolique. L'opérateur énergie cinétique s'écrit alors :

(2-6)

$$T(r) = -\frac{\hbar^2}{2} div \left(\frac{1}{m^*} \ \overrightarrow{grad}\right)$$
(2-7)

#### II .3.2. Energie potentielle des électrons :

Dans l'approximation de la masse effective, les fonctions de base étant les fonctions de Bloch, le potentiel cristallin disparaît. Néanmoins la résolution de l'équation de Schrödinger nécessite la connaissance du terme d'énergie potentielle U(r).

L'énergie potentielle U(r) résulte de la contribution de quelque terme et peut s'écrire sous la forme [28] :

$$U(r) = -e\phi(r) - eV_{im} - eV_{Xc} + \Delta E_c$$
(2-8)

 $\emptyset$  (*r*): Potentiel électrostatique dû aux atomes de dopage.

V<sub>im</sub>: Potentiel image.

V<sub>xc</sub> : Potentiel d'échange et de corrélation.

 $\Delta Ec$ : Discontinuité de la bande de conduction à l'hétérojonction

Le potentielle image résulte de la discontinuité de la structure du constante diélectrique à l'interface entre deux matériaux. Le potentiel d'échange corrélation décrit les interactions entre les électrons et leurs charges images. La contribution de ces deux termes à l'énergie potentielle U(r) est faible, pour cela, nous avons négligé leurs effets afin de simplifier l'étude, alors :  $U(r) = -e \phi (r) + \Delta E c$  (2-9)

#### II .4.Confinement d'électrons et densité d'états :

En l'absence de confinement c.-à-d. le mouvement des électrons est libre dans les trois directions de l'espace, c'est le cas d'un composant massif- la fonction d'onde des électrons est une fonction propre du potentiel cristallin, c'est-à-dire une fonction de Bloch. Les états propres des électrons sont des états de la bonde de conduction d'énergie :

$$E(k) = Ec + \frac{\hbar^2 (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)}{2m^*}$$
(2-10)

C'est la relation de dispersion 3D donné simplement par une forme parabolique que l'on trace. Les états d'énergies sont remplis jusqu'au niveau de Fermi E<sub>F</sub> (zone grisée). A partir de relation précédente en tenant en compte des conditions de bord périodique sur une onde plane, on peut facilement calculer la densité d'états pour plusieurs dimensions 3D, 2D, et 1D.

#### II .4.1. Densité d'états 3D :

En 3D on peut montrer que la densité d'états par unité de volume s'exprime

$$g(E) = \frac{1}{2\pi^2} \left(\frac{2m^*}{\hbar^2}\right)^{3/2} \sqrt{E - Ec}$$
(2-11)

La concentration électronique s'obtient en intégrant cette quantité multipliée par la probabilité d'occupation du niveau d'énergie *E*, sur l'ensemble des énergies de  $E_c a +\infty$ :

$$\mathbf{n}_{3\mathrm{D}} = \int_{E_{C}}^{+\infty} g(E) f(E) dE \tag{2-12}$$

Où f(E) est la fonction de distribution de Fermi-Dirac donnée par :

$$f(E) = \frac{1}{1 + exp\left(\frac{E - E_F}{K_B T}\right)}$$
(2-13)

Avec un petit développement mathématique, l'équation (2-12) devient

$$n_{3D}(z) = 2\left(\frac{2\pi m_c^* K_B T}{h^2}\right)^{3/2} F_{1/2}\left(\frac{E_f - E_c}{K_B T}\right)$$
(2-14)

Tel que :  $F_{1/2}$  présente l'intégrale de Fermi d'ordre  $\frac{1}{2}$  et *h* la constante de Planck.

#### II .4.2. Densité d'états 2D :

Si maintenant on réduit une dimension, à une valeur proche de la longueur d'onde de De Broglie de l'électron, il faut ajouter un potentiel de confinement dans l'équation de Schrödinger. L'énergie dans la direction de confinement (z) est alors quantifié, et le mouvement se fait librement dans le plans (x,y) orthogonal à cette direction (z). Un tel confinement peut être obtenue dans une hétérojonction par exemple, dans la direction de croissance. L'énergie des électrons est la somme de leurs énergies dans la bonde de conduction et de l'énergie de leur mouvement associé à la présence de confinement. Dans ce cas la fonction d'onde d'électrons s'écrit sous la forme du produit d'une onde de Bloch par une fonction enveloppe. La fonction enveloppe et l'énergie additionnelle est respectivement fonctions propres et valeurs propres de l'équation de Schrödinger dans l'approximation de la masse effective. L'énergie potentielle des électrons n'étant fonction que de la variable z, le mouvement des électrons n'est perturbé que dans la direction z. Il reste libre dans le plan xy. Il en résulte que la fonction enveloppe peut s'écrire sous la forme d'un produit d'une fonction de z par une onde plane dans le plan xy. La fonction d'onde des électrons s'écrit alors :

$$\psi^{a}(\mathbf{r}) = \chi^{a}(\mathbf{z}) e^{ik_{\chi} + ik_{y}} \varphi(\mathbf{r})$$
(2-15)

Où  $\varphi(r)$  est la fonction de Bloch et  $\chi^a(z)$  est une solution de l'équation de Schrödinger dans l'approximation de la masse effective :

$$\frac{-\hbar^2}{2}\frac{\partial}{\partial z}\left(\frac{1}{m^*}\left(\frac{\partial\chi^{\alpha}(z)}{\partial z}\right)\right) + (E_{\alpha} - U(z))\chi^{\alpha}(z) = 0$$
(2-16)

Les énergies  $E_{\alpha}$  sont les énergies des électrons dans son mouvement dans la direction z. Elles décrivent la quantification des états électroniques dans la direction perpendiculaire du puits quantique. Dans le plan (x,y), le mouvement de l'électron est libre. Le spectre d'énergie total a donc une composante discrète décrivant la quantification de mouvement dans la direction de confinement et une composante continue liée au mouvement libre dans le plan.

On parle alors de sous-bande ,En prenant l'origine des énergies au bas de la bande de conduction, le spectre d'énergie de l'électron s'écrit :

$$E(k) = E_a + \frac{\hbar^2 (k_x^2 + k_y^2)}{2m^*}$$
(2-17)

Où  $\alpha$  indexe la sous-bonde bidimensionnelle.

Le mouvement de l'électron est donc limité à deux dimension, la densité d'états dans l'espace réciproque par unité de surface est par conséquent donnée, compte tenu de la dégénérescence de spin par :

$$g(k) = \frac{2}{(2\pi)^2}$$
(2-18)

Ainsi sur le disque de rayon k<sub>//</sub> =  $\sqrt{k_x^2 + k_y^2}$ , le nombre d'états est donné par :

$$N(\mathbf{k}_{//}) = \frac{2}{(2\pi)^2} \pi |\mathbf{k}_{//}|^2$$
(2-19)

Soit en explicitant  $k_{ll}$  en fonction de l'énergie en prenant comme origine des énergies dans chacune des sous-bondes, le bas de sous-bande :

$$N(E) = \frac{2}{(2\pi)^2} \pi \frac{2m^*}{\hbar^2} E$$
(2-20)

Ainsi la densité d'états dans l'espace des énergies s'écrie pour une sous-bonde :

$$g_{\alpha}(E) = \frac{dN(E)}{dE} = \frac{m^*}{\pi\hbar^2} = g_0$$
(2-21)

C'est une caractéristique essentielle d'un système à deux dimensions, la densité d'états est constante en fonction de l'énergie. En tenant compte de toutes les sous bandes la densité d'états s'écrit :

$$g(E) = g_0 \sum_{\alpha} H(E - E_a)$$
(2-22)

Où H(x) est la fonction de Heaviside, H(x) = 0 pour x < 0, H(x) = 1 pour x > 0, une marche étant franchie à chaque fois que  $E > E_{\alpha}$ .

De la même manière que précédemment la population électronique de chaque sous bande d'énergie à une température *T* est donnée par :

$$n_a = \int_{E_a}^{\infty} g_a(E) f(E) dE$$
(2-23)

Où f(E) encore est la fonction de Fermi-Dirac :

$$f(E) = \frac{1}{\left(1 + exp\left(\frac{E - E_F}{K_B T}\right)\right)}$$
(2-24)

Après intégration, on obtient :

$$n_{\alpha} = \frac{m^*}{\pi\hbar^2} k_B T ln \left( 1 + exp\left(\frac{E_f - E_{\alpha}}{k_B T}\right) \right)$$
(2-25)

la densité total d'électrons est donnée par :

$$n = \sum_{\alpha} n_{\alpha} \tag{2-26}$$

Soit

$$n_{\alpha} = \frac{m^*}{\pi \hbar^2} k_B T \sum_{\alpha} ln \left( 1 + exp\left(\frac{E_f - E_{\alpha}}{k_B T}\right) \right)$$
(2-27)

En outre, le carré du module de la fonction enveloppe,  $|\chi_{\alpha}(z)|^2$  représente la probabilité de

présence, au point d'abscisses z, d'un électron de la sous bande  $\alpha$ . il en résulte que dans la mesure où le nombre d'électrons de la sous bande  $\alpha$  est  $n_{\alpha}$ , la distribution spatiale de ces électrons s'écrit :

$$n(z) = \sum_{\alpha} n_{\alpha} |\chi^{\alpha}(z)|^2$$
(2.28)

Il en résulte que la charge d'électrons libre associée au confinement est donnée par :

$$\rho_n(z) = -e \sum_{\alpha} n_{\alpha} |\chi^{\alpha}(z)|^2$$
(2-29)

où en explicitant  $n_{\alpha}$ :

$$\rho_n(z) = -\frac{m^*}{\pi\hbar^2} k_B T \sum_{\alpha} ln \left( 1 + exp\left(\frac{E_f - E_\alpha}{k_B T}\right) \right) |\chi^\alpha(z)|^2$$
(2-30)

On constate que la charge d'espace résultante du confinement est reliée à la fonction d'onde électronique. Mais  $\chi^{\alpha}(z)$  est une solution de l'équation de Schrödinger, donc fonction de U(z) qui est lui même fonction de la densité de charge.

#### **Remarque :**

Pour que les effets dû aux quantifications des niveaux  $E_{\alpha}$  soient observables, il faut que l'espacement entre les niveaux d'énergies soit suffisamment grand, devant l'énergie thermique  $E_{\alpha+1}$ - $E_{\alpha} > k_{BT}$ .

Lorsqu'une seule sous-bande est occupée ( $\alpha$ =0), on dit que le système est purement bidimensionnel ; dans le cas contraire on dit qu'il est quasi-bidimensionnel.

Si la structure admet des confinements des trous, une formule similaire est obtenue pour la distribution spatiale de celle-ci. Sinon la densité reste de type tridimensionnel est calculé par l'intégrale de Fermi d'ordre ½ via la densité d'états 3D dans la bande de valence.

#### II .4.3.Densité d'états 1D :

Si on réduit encore une dimension, par un potentiel de confinement latéral, la propagation des porteurs ne peut se faire que dans une seule direction, le long d'un canal étroit, et le system devient fil quantique à cause de la réduction de degré de liberté des électrons à une dimension. Par rapport au cas bidimensionnel, les sous-bandes se divisent en séries de sous-bandes unidimensionnelles, avec des énergies de bas de bandes  $E_{\alpha,m}$ , où le deuxième nombre quantique *m* réfère à la quantification selon la deuxième direction, selon y par exemple. L'énergie total d'un électron est alors donné par:

$$E(k) = E_{\alpha,m} + \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m^*}$$
(3-31)

Les sous-bandes unidimensionnelles sont souvent appelées modes transverses par analogies aux modes des ondes électromagnétiques. Les quantités calculées précédemment doivent être passe maintenant par la résolution de l'équation Schrödinger à deux dimensions :

$$-\frac{\hbar^2}{2} \left[ \frac{\partial}{\partial z} \left( \frac{1}{m^*} \frac{\partial \chi^{\alpha,m}(z,y)}{\partial z} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \frac{1}{m^*} \frac{\partial \chi^{\alpha,m}(z,y)}{\partial y} \right) \right] + \left( E_{a,m} - U(z,y) \right) \chi^{\alpha,m}(z,y) = 0$$
(2-32)

Où encore  $\chi^{\alpha,m}$  et la fonction enveloppe mais cette fois-ci à deux dimension de tel manière que la fonction d'onde d'électron s'écrit :

$$\psi(\mathbf{r}) = \chi^{\alpha,m}(\mathbf{z},\mathbf{y}).e^{-ik_x^2} \,\phi(\mathbf{r}) \tag{2-33}$$

La densité d'états dans l'espace des k par unité de longueur du fil est par conséquent donnée, compte tenu de la dégénérescence de spin par :

$$g(k) = \frac{2}{2\pi}$$
 (2-34)

Soit en explicitant k en fonction de l'énergie :

$$N = \frac{2}{\pi\hbar} \sqrt{2m^* (E - E_{a,m})}$$
(2-35)

En suivant les mêmes étapes du cas précédent la densité d'états dans ce cas devient :

$$g_{\alpha,m}(E) = \frac{1}{\pi\hbar} \sqrt{\frac{2m^*}{E - E_{a,m}}}$$
 (2-36)

C'est une spécifié d'un système à une dimension, la densité d'états présente un maximum et même une singularité, au bas de chaque sous-bande.

La population électronique de chaque sous-bande d'énergie est alors donné par :

$$n_{\alpha,m} = \int_{\alpha,m}^{\infty} \frac{1}{\pi\hbar} \sqrt{\frac{2m^*}{E - E_{\alpha,m}}} \frac{dE}{\left[1 + exp\left(\frac{E - E_f}{k_B T}\right)\right]}$$
(2-37)



Où

$$n_{\alpha,m} = \frac{1}{\pi} \left(\frac{2m^* k_B T}{\hbar^2}\right)^{1/2} F_{-1/2} \left(\frac{E_F - E_{\alpha,m}}{k_B T}\right)$$
(2-38)

Avec F-1/2 représente l'intégral de Fermi d'ordre -1/2 Ainsi la distribution spatiale d'électron devient :

$$\mathbf{n}(\mathbf{x},\mathbf{y}) = \sum_{(\alpha,m)=1}^{(\alpha,m)} |\chi^{\alpha,m}|^2 \times \int_{E_k}^{\infty} \frac{\sqrt{2m^*}}{\pi \hbar \sqrt{E - E_{\alpha,m}} \left[1 + exp\left(\frac{E - E_f}{k_B T}\right)\right]} dE$$
(2-39)

Finalement, il en résulte que le calcul des états électroniques doit se faire de manière auto- cohérente, qui sera discuté au chapitre suivant.

### **Chapiter III: Etude du transistor HEMT** avec couches &-dopée avec couches &-dopée

#### Etude du transistor HEMT avec couches δ-dopée

#### **III.1 Introduction**

Dans ce travail, nous allons évaluer les performances des structures du transistor HEMT à base de GaAs/AlxGa1-xAs avec des couches  $\delta$ -dopées. La couche  $\delta$ -dopée de type n distante du canal est désignée comme source des porteurs. Nous allons étudier l'effet des différentes concentrations de la couche  $\delta$ -dopée, de son épaisseur et de sa position sur les performances du transistor HEMT. Les propriétés physiques des matériaux (les densités des états, les masses effectives, les paramètres des bandes, les bandes interdites et les affinités électroniques) sont évaluées en fonction des fractions molaires x de l'Al dans les systèmes GaAs/AlxGa1-xAs. Nous allons faire plusieurs développements qui vont permettre d'évaluer l'énergie potentielle et la densité des porteurs libres.

#### **III.2 Description du HEMT**

La structure du transistor étudié est montrée sur la figure (III-1). Le transistor analysé est construit d'une couche de AlxGa1-xAs non dopée d'épaisseur 0.1  $\mu$ m sur un substrat de GaAs de type p. Le drain et la source de type n<sup>+</sup> ont une forme Gaussienne avec une concentration de  $1.10^{20}$  cm<sup>-3</sup> et d'une déviation standard de 18 nm. L'épaisseur « t » de la couche  $\delta$ -dopée (t=1, 5 ou 10 nm) est distante d'une couche « d » au-dessus du canal (d=1, 5 ou 10 nm). La figure (III-1) montre un canal non dopé en GaAs d'épaisseur 20 nm. L'espace entre le canal de conduction et la grille est fixé par 30 nm où t et d sont variables. Une couche isolante de SiO<sub>2</sub> de 10 nm est interposée entre la grille et la couche Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As.

Le dopage de la couche non dopée  $Al_xGa_{1-x}As$  est assumé d'être  $1.10^{16}$  cm<sup>-3</sup> et le dopage de la couche  $\delta$ -dopée type n varie entre  $1.10^{17}$  cm<sup>-3</sup> et  $5.10^{18}$  cm<sup>-3</sup>. Le dopage minimum contrôlable du GaAs à température ambiante est de  $1.10^{15}$  cm<sup>-3</sup>.



Figure III-1 : Structure d'un transistor HEMT

#### **III.3** Energie potentielle et distributions des porteurs de charge

Le déplacement des électrons libérés des donneurs de la couche  $\delta$ -dopée vers la couche de GaAs entraîne des modifications énergétiques dans la structure. Les figures (III-2) et (III-3) représentent les diagrammes des énergies calculées et les densités des porteurs de charge à l'échelle logarithmique (Figure III-4 et III-5 échelle normale) calculées à la polarisation de grille égale 0 V. La fraction molaire d'Al est de 0.35 dans la couche Al<sub>1-x</sub>Ga<sub>x</sub>As et le dopage de la couche  $\delta$ -dopée est de 1.10<sup>17</sup> dopants/cm<sup>3</sup> (le nombre de dopants par unité de surface est de N=5.10<sup>10</sup> dopants/cm<sup>2</sup>) montré dans la figure (III-2), et 5.10<sup>18</sup> dopants/cm<sup>3</sup> (le nombre de dopants par unité de surface de N=2.5.10<sup>12</sup> dopants/cm<sup>2</sup>) montré dans la figure (III-3). La distance (d) entre la couche donneuse et le canal est 10 nm et l'épaisseur de la couche  $\delta$ -dopée (t) est égale 10 nm.



**Figure III-2 :** a) Energie de la bande de conduction et de la bande de valence.

b) Densité des électrons et des trous pour  $N=1.10^{17}$ dopants/cm<sup>3</sup>

(À l'échelle logarithmique).



Figure III-3 : d) Energie de la bande de conduction et de la bande de valence.

c) Densité des électrons et des trous pour N= $5.10^{18}$ dopants/cm<sup>3</sup>

(À l'échelle logarithmique).



**Figure III-4 :** Densités des électrons et des trous pour N=1.10<sup>17</sup>dopants/cm<sup>3</sup> (à l'échelle normale).



**Figure III-5:** Densité des électrons et des trous pour N=5.10<sup>18</sup> dopants/cm<sup>3</sup> (à l'échelle normale).

#### III.4 Effet de la concentration du couche δ-dopée sur le confinement des électrons :

Quand le niveau du dopage de Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As de la couche  $\delta$  -dopée est inférieur à 10<sup>12</sup> cm<sup>-2</sup>, le courant du drain (aussi bien que la densité des électrons dans le canal de GaAs et la couche  $\delta$  - dopée) est diminué avec la diminution du dopage de la couche  $\delta$ -dopée (figure III-6). Le potentiel dans la couche d'Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As est plat comme représenté sur la figure (III-2-a). Le niveau de Fermi dans cette couche d'AlxGa1-xAs est plus près de la bande de conduction qu'au fond de la bande de valence. De plus, la bande de valence dans cette couche d'Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As est plus haute que celle dans le canal de GaAs.Comme représenté sur la figure (III-2-b), la couche d'Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As m'agit pas comme une couche donneuse des électrons ; plutôt la couche d'Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As comprenant la couche de  $\delta$ -dopée type n se comporte comme une couche type p.

Quand le niveau du dopage d'Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As est de l'ordre de  $10^{12}$  cm<sup>-2</sup>, les électrons additionnels dans le canal de GaAs sont fournis par le couche  $\delta$  -dopée type n comme représenté sur la figure (III.3-d). Pour une concentration surfacique au-dessus de 2,5.10<sup>12</sup> cm<sup>-2</sup>. La figure (III.6) montre une augmentation dans la densité des électrons dans le canal et la couche donneuse avec l'augmentation du dopage de la couche  $\delta$ -dopée.



Figure III-6 : Densité des électrons dans le canal et la couche donneuse

#### III.5. Effet du dopage de la couche δ-dopée sur la bande de conduction

Le grand dopage de la couche  $\delta$ -dopée produit de profond puits de potentielle ; par exemple, à une concentration approximativement de N=1.10<sup>18</sup> cm<sup>-3</sup>, la bande de conduction dans le canal est courbée jusqu'à ce qu'elle touche le niveau de Fermi comme il est montré dans la figure (III-7). Les électrons dans le canal de GaAs se comportent, donc, comme un gaz d'électron dans un métal et la modulation du bande de conduction se fait par le potentiel de la grille ou par le dopage du couche donneuse. La figure (III.8) montre que le confinement des électrons augmente quand le potentiel du puits est plus profond.



Figure III-7 : Bande de conduction en fonction du dopage de la couche δ-dopée



Figure III.8 : Densité des électrons en fonction du dopage de la couche  $\delta$ -dopée

#### **III.6 Etude quantique :**

• Fonctions d'ondes et densité des électrons pour N=1.10<sup>17</sup>dopants/cm<sup>3</sup>.

La figure (III-9) montre les fonctions d'onde correspondantes aux quatre premières sous bandes des électrons. Les fonctions d'onde sont localisées dans le puits à double hétérojonction  $Al_xGa_{1-x}As$  /GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As de forme rectangulaire dans la couche GaAs impliquant une densité des électrons dans le canal (figure (III-10)) :



Figure III-9 : Les quatre premières fonctions d'onde des électrons à dopage du couche  $\delta$ -dopée est $1.10^{17}$ dopants/cm<sup>3</sup>.



Figure III-10 : Energie potentielle et densité des électrons à dopage du couche  $\delta$ -dopée de  $1.10^{17}$ dopants/cm<sup>3</sup>.

• Fonctions d'ondes et densité des trous pour N=1.10<sup>17</sup> dopants/cm<sup>3</sup>.

La figure (III-11) montre les fonctions d'onde correspondantes aux quatre premières sous bandes des trous. Les fonctions d'onde sont localisées dans le substrat GaAs impliquant une densité des trous dans le substrat (figure (III-12)).



Figure III-11 : Les quatre premières fonctions d'onde des trous à dopage du couche  $\delta$ -dopée de  $1.10^{17}$ dopants/cm<sup>3</sup>.



Figure III-12 : Energie potentielle et densité des trous à dopage de la couche  $\delta$ -dopée de  $1.10^{17}$ dopants/cm<sup>3</sup>

• Fonctions d'ondes et densité des électrons pour N=5.10<sup>18</sup>dopants/cm<sup>3</sup>

La figure (III.13) montre les fonctions d'onde correspondant aux six premières sous bande des électrons. Les fonctions d'onde sont localisées à l'interface de l'hétérojonction AlGaAs/GaAs de la couche AlGaAs et le canal GaAs. La figure montre aussi que la sixième fonction d'onde est localisée dans la couche donneuse impliquant une densité des électrons dans les deux canaux AlGaAs et GaAs (figure (III-14)).



Figure III-13 : Les six premières fonctions d'onde des électrons N=5.10<sup>18</sup>dopants/cm<sup>3</sup>



Figure III-14 : Energie potentiel et densité des électrons à dopage du couche  $\delta$ -dopée de 5.10<sup>18</sup> dopants /cm<sup>3</sup>

• Fonctions d'ondes et densité des trous pour N=5.10<sup>18</sup> dopants/cm<sup>3</sup>.

La figure (III-15) montre les fonctions d'onde correspondant aux quatre premières sous bande des trous. Les fonctions d'onde sont localisées dans le substrat GaAs impliquant une densité des trous dans le substrat (figure (III-16)).



Figure III-15 : Les quatre premières fonctions d'onde des trous à dopage du couche  $\delta$ -dopée 5.10<sup>18</sup> dopants/cm<sup>3</sup>.



Figure III-16 : Energie potentielle et densité des trous à dopage du couche  $\delta$ -dopée  $5.10^{18}$ dopants/cm<sup>3</sup>

#### III.7 Effet des paramètres technologiques sur le confinement des porteurs :

Dans le transistor HEMT à base d'Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As plusieurs couches de GaAs et Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As sont déposés alternativement sur un substrat pour former le canal. Le canal est une couche non dopée pour réduire les collisions avec les atomes dopants et donc augmenter la mobilité. La source des porteurs de charge est une autre couche fortement dopée d'épaisseur (t). Une troisième couche sépare les porteurs et leurs atomes parents pour réduire l'interaction colombienne d'épaisseur (d), cette couche appelée (spacer) figure (III-1). Afin de réduire les états d'interface et l'immigration des dopants, une couche appelée (cap layer) sépare la couche dopée et l'oxyde du silicium (SiO<sub>2</sub>). Le canal au GaAs est créé principalement par deux mécanisme, le premier est la diffusion des porteurs de charge de la région fortement dopée vers la région non dopée ; le deuxième est le confinement dans un puits de potentiel crée par la

discontinuité des bandes d'énergie à l'hétérojonction entre le  $Al_xGa_{1-x}As$  et le GaAs. Nous allons faire une étude de l'effet de ces paramètres technologiques sur la création du canal.

#### III.7.1 Effet de l'épaisseur de la couche $\delta$ -dopée sur le confinement des porteurs dans le puits quantique

La densité des électrons est représentée sur la figure (III-17) pour différentes épaisseurs de la couche donneuse (t=1, 5, 10 nm). La diminution de l'épaisseur permet de diminuer l'énergie potentielle qui donne un bon confinement des électrons dans le canal.

La figure (III-18) montre que pour une petite épaisseur de la couche donneuse la densité des électrons est plus grand dans le canal et la couche  $\delta$ -dopée.



Figure III-17 : Densité des électrons en fonction de l'épaisseur de la couche  $\delta$ -dopée.

La figure (III-18) présente la densité des électrons à l'échelle logarithmique pour différente valeur de (t) (t=1, 5,10nm) où d=10 nm. La figure montre pour une petite épaisseur de (t), la majorité des électrons est dans le canal GaAs, et pour une épaisseur plus grand, les électrons sont confinés dans les deux canaux AlGaAs et GaAs. Aussi bien que la densité des électrons dans la couche  $\delta$ -dopée est diminuée avec l'augmentation de (t).



Figure III.18 : Densité des électrons à l'échelle logarithmique en fonction de l'épaisseur de la couche  $\delta$ -dopée.

La densité des électrons en fonction de l'épaisseur de la couche  $\delta$ -dopée est représenté sur la figure (III-19) pour différentes valeurs de l'épaisseur de la couche donneuse (t=1,5, 10 nm). La figure (III-19) montre que les électrons sont bien confinés si l'épaisseur est à égale 1nm.



Figure III-19 : Densité des électrons en fonction de l'épaisseur du couche δ-dopée

#### III.7.2 Effet de la distance (d) sur le confinement des porteurs dans le puits quantique :

La densité des électrons est représentée sur la figure (III-20) pour différentes valeurs de la distance entre la couche donneuse et le puits de potentiel (d=1, 5 et10 nm) où t=10 nm. La distance (d) forme une barrière de potentiel entre les atomes donneurs dans le couche  $\delta$  - dopée et le puits de potentiel, une petite distance (d) entre la couche  $\delta$  - dopée et le canal GaAs donne une grande densité des électrons dans le canal.



Figure III-20 : Densité des électrons en fonction de la distance (d)

La densité des électrons à l'échelle logarithmique est représentée sur la figure (III-21) pour différentes valeurs de barrière de potentiel (d) (d=1, 5 et 10 nm). La figure (III-21) montre que la densité des électrons dans la couche  $\delta$ -dopée est presque la même pour différentes valeurs de (d), mais elle augmente dans le canal avec la diminution de la distance (d).



Figure III-21 : Densité des électrons à l'échelle logarithmique en fonction de la distance (d).

La figure (III-22) représente la densité des électrons en fonction de concentration de la couche  $\delta$ -dopée pour différente valeur de la distance entre la couche donneuse et le puits de potentiel (d= 1, 5 et10nm). Quand la distance est 1 nm le confinement est plus grand que les autres distances 5, 10 nm.



Figure III-22 : Densité des électrons à l'échelle logarithmique en fonction de la distance (d).

#### **III.7.3** Effet de la fraction molaire sur le confinent dans le puits quantique :

Pour améliorer le confinement des électrons dans le canal, on augmente de la discontinuité de la bande de conduction  $\Delta E_c$ , c'est-à-dire on augmente la concentration d'Al qui est donnée par la relation :

 $\Delta E_{\rm C} = 0.1 \text{ x eV}.$ 

La figure (III-23) montre effet de la fraction molaire d'Al sur la concentration des électrons dans le puits et le canal.



Figure III-23 : Densité des électrons en fonction de la concentration des différentes fractions molaires (x) (calcul quantique).

• L'augmentation du dopage provoque une augmentation de la densité des électrons dans le canal et la couche donneuse.

#### 8. Conclusion

Nous avons fait une étude de l'effet des paramètres technologiques d'un transistor  $Al_xGa_{1-x}$  As avec la couche  $\delta$ -dopée type n. Les électrons confinés dans la région du canal de GaAs sont quantitativement analysés en fonction de la concentration des impuretés de la couche  $\delta$ -dopée type n, la fraction molaire d'Al, l'épaisseur et la distance au canal. On a montré qu'il y a un optimum pour la concentration en impureté d'une couche de n-type pour divers x, t, et d. L'épaisseur de la couche de n-type et de sa distance au canal de GaAs devrait être choisi aussi petite que possible pour augmenter l'efficacité puisque les électrons peuvent pénétrer dans le canal de GaAs.

# conclusion génerale

#### **CONCLUSION GENERALE**

Les techniques modernes de croissance de cristaux semi-conducteurs, permettent de réaliser des couches atomiques et des composants à l'échelle nanométrique. Généralement les porteurs de charge dans ces structures sont confinés soit dans une direction 2DEG, soit dans deux directions 1DEG où soit dans trois directions 0DEG. Pour la conception et l'optimisation de ces composants on est obligé d'étudier le phénomène quantique.

Nous avons étudié une structure bidimensionnelle 2DEG. Les effets quantiques sont traduits par les niveaux d'énergie et par la restriction du mouvement des porteurs dans un plan parallèle à l'hétérojonction.

Des notions de base sur les hétérojonctions et sur les transistors à grande mobilité électronique ont été présentées. Puisque ces transistors présentent plusieurs phénomènes physiques, on a décrit les modèles mathématiques qui sont l'équation de Poisson et l'équation de Schrödinger.

On a présenté une application du puits quantique. Cette application est un transistor HEMT à base d' $Al_xGa_{1-x}$  As. En tenant compte des conditions aux limites et des hypothèses énoncées, nous avons fait plusieurs développements qui ont permis d'évaluer la densité des porteurs libres, l'énergie potentielle et les fonctions d'onde.

Nous avons fait une étude de l'effet des paramètres technologiques d'un transistor HEMT avec la couche  $\delta$ -dopée type n. Les électrons confines dans la région du canal de GaAs sont quantitativement analysés en fonction de la concentration des impuretés de la couche  $\delta$ -dopée type n la fraction molaire d'Al, l'épaisseur et la distance au canal. On a montré qu'il y a un optimum pour la concentration en impureté d'une couche de n-type pour divers x, t, et d. L'épaisseur de la couche de n-type et de sa distance au canal de GaAs devrait être choisi aussi petite que possible pour augmenter l'efficacité puisque les électrons peuvent pénétrer dans le canal de GaAs.

# Bibliographie

#### 1. Bibliographie

[1] L. Esaki et R. Tsu, IBM J. Res. Dev. 14, 61, 1970.

[2] R.Castagné, J.P.Duchemin, M.Gloanecet Ch.Rumelhard, «circuits intégrés en Arséniure de galilum ». Physique, et règles de conception, Masson, 1989.Pour Le Suivit In-Situ Des Contaminants", Revue F.S.B 2, 2003, 92-98.

[3] G.Bastart, « Wave Mechanics applied to semiconductors heterostructures ». Les éditions de physiques, 1988.

[4] Henry Mathieu, « Physiques des semi-conducteurs et des composants électroniques ».Quatrième édition, Masson, 2001..

[5] D.Bimberg, M.G.Rundmann, N.N.Ledentsov, «Quantums Dots Heterostructures ». Wiley, 2001.

[6] R.L.Anderson, «Experiments on GaAs Heterojunctions », Solid-State Electron 5, pp. 341-351, 1962.

[7] B.R. Nag L. R. Carley, G. Declerck, F. M. Klaassen, «Physics of Quantum Well Devices», Kluwer Academic Publishers, 2002..

[8] [Adachi; 1985] Adachi S, "GaAs, AlAs, and AlxGa1–xAs@B: Material parameters for use in research and device applications", J Appl Phys.58:1-29, 1985.

[9] Experiments on Ge-GaAs heterojunctions. R. L. Anderson. Solid-State Electronics. 5 (5), pp. 341-344, septembre–octobre 1962.

[10] Khelifi Samira, « Modélisation d'une cellule solaire Ga1-xAlxAs(n)-GaAs(i)- GaAs(p) » mémoire de magister, 2011, université Béchar.

[11] Rachid Khlil, «Étude d'un gaz bidimensionnel d'électrons dans des hétérostructures

AlGaAs/GaAs par des mesures courant-tension et bruit basses fréquences en température»,

thèse de doctorat, 2005, université Reims Champagne-Ardenne.

[12] R.L.Anderson, «Experiments on GaAs Heterojunctions », Solid-State Electron 5, pp. 341-351, 1962.

[13] Experiments on Ge-GaAs heterojunctions. R. L. Anderson. Solid-State Electronics. 5 (5), pp. 341-344, septembre–octobre 1962.

[14] Low temperature electronics–Physics, Devices, Circuits, and applications. E. A. Gutierrez-D, M. J. Deen, C. L. Claeys. Édit. Academic Press. 2001

[15] Yazid BEDDIAFI Modélisation d'un transistor MESFET en GaAs en utilisant le simulateur

atlas-silvaco Soutenu publiquement le 03 juillet 2013.

[16] R. Dingle ; H.L. Stormer ; A.C. Gossard ; and W. Wiegmann « Electron mobilities in modulation-doped semiconductor heterojunction superlattices» Applied Physics Letters, vol. 33, no. 7, pp. 665–667, 1978.

[17] T. Mimura, S. Hiyamizu, T. Fujii, and K. Nanbu « A new field-effect transistor with selectively doped GaAs/n-AlxGa1-xAs heterojunctions » Japaneese Journal of Applied Physics, vol. 19, pp. L225–227, May 1980.

[18] Y.F. Wu, B.P. Keller, S. Keller, D. Kapolnek, S.P. Denbaars, U.K. Mishra « Measured microwave power performance of AlGaN/GaN MODFET » IEEE Electron Device Lett., vol. 17, pp. 455-457, 1996.

[19] S.T. Sheppard, K. Doverspike, W.L. Pribble et al. «High power microwave AlGaN/GaN HEMTs on semi-insulating silicon carbide substrates» IEEE Electron Device Lett., vol. 20, pp. 161-163, April 1999.

[20] K. Libarir, S. M. Mimoune, K. Srairi, N. Sengouga, J. Fouladgar et M. Feliachi "Modélisation Bidimensionnelle de l'Equation de Poisson par la Méthode des Volumes Finis "ICEL'Proceeding of the second international Conference on Electrothecnics ICEL'2000, pp. 601-603, Oran 2000

[21] S. E. Laux, F. Stern, "Electron States in Narrow Gate Induced Channels in Si ", Appl.Phys. Lett. 49(2), 14 July 1986

[22] T. Kerkhoven, A. Galick, U. Ravaioli, J.H. Arends et Y. Saad "Efficient Numerical Simulation of Electron States in Quantum Wires. Appl. Phys. 68(7), 1 Octobre 1990

[23] H. Mathieu " Physique des Semi-conducteurs et des Composants Electroniques" Masson, Paris. 1998

#### Résumé

Le modèle du transistor GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As avec des couches  $\delta$ -dopée d'être développé. Quand les dimensions de ces composants deviennent de plus en plus très petite, Cela nous emmène à prendre en considération les effets quantiques.

On utilise le modèle quantique pour étudier les effets des différentes transitions de la bande de conduction et la variation entre le canal GaAs et la couche  $\delta$ -dopée type n et l'épaisseur de cette couche  $\delta$ -dopée à la température ambiante.

Nous avons trouvé qu'une grande variation de bande conduction ou de la fraction molaire d'Al, les électrons sont confinés plus grand dans le canal GaAs. La surface entre le GaAs canal et la couche  $\delta$ -dopée forme une barrière de potentiel, quand la barrière est petite la majorité des électrons se trouve dans le canal.

Mots clés : transistor HEMT, puits quantique, hétérojonctions

#### ملخص

يتم تطوير نموذج ترانزستور GaAs / Al<sub>x</sub>Ga<sub>l-x</sub>As بطبقات مطعمة بشدة عندما تصبح أبعاد هذه المكونات صغيرة أكثر فأكثر ، فإنه يأخذنا في الاعتبار التأثيرات الكمومية.

يتم استخدام نموذج الكم لدراسة آثار التحولات المختلفة لشبكة التوصيل والاختلاف بين قناة GaAs وطبقة النوع n وسمك هذه الطبقة في درجة حرارة الغرفة.

لقد وجدنا أن هناك تباينا كبيرا في توصيل النطاق أو الكسر المولي لـ Al ، وتقتصر الإلكترونات بشكل أكبر في قناة GaAs. يشكل السطح الفاصل بين القناة GaAs ومخدر الطبقة حاجزا محتملا ، عندما يكون الحاجز صغيرا ، توجد غالبية الإلكترونات في القناة.

الكلمات المفتاحية : ترانزستور HEMT ، البئر الكمومية ، التغاير

#### Résumé

Le modèle du transistor GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As avec des couches  $\delta$ -dopée d'être développé. Quand les dimensions de ces composants deviennent de plus en plus très petite, Cela nous emmène à prendre en considération les effets quantiques.

On utilise le modèle quantique pour étudier les effets des différentes transitions de la bande de conduction et la variation entre le canal GaAs et la couche  $\delta$ -dopée type n et l'épaisseur de cette couche  $\delta$ -dopée à la température ambiante.

Nous avons trouvé qu'une grande variation de bande conduction ou de la fraction molaire d'Al, les électrons sont confinés plus grand dans le canal GaAs. La surface entre le GaAs canal et la couche  $\delta$ -dopée forme une barrière de potentiel, quand la barrière est petite la majorité des électrons se trouve dans le canal.

Mots clés : transistor HEMT, puits quantique, hétérojonctions

#### ملخص

يتم تطوير نموذج ترانزستور GaAs / Al<sub>x</sub>Ga<sub>l-x</sub>As بطبقات مطعمة بشدة عندما تصبح أبعاد هذه المكونات صغيرة أكثر فأكثر ، فإنه يأخذنا في الاعتبار التأثيرات الكمومية.

يتم استخدام نموذج الكم لدراسة آثار التحولات المختلفة لشبكة التوصيل والاختلاف بين قناة GaAs وطبقة النوع n وسمك هذه الطبقة في درجة حرارة الغرفة.

لقد وجدنا أن هناك تباينا كبيرا في توصيل النطاق أو الكسر المولي لـ Al ، وتقتصر الإلكترونات بشكل أكبر في قناة GaAs. يشكل السطح الفاصل بين القناة GaAs ومخدر الطبقة حاجزا محتملا ، عندما يكون الحاجز صغيرا ، توجد غالبية الإلكترونات في القناة.

الكلمات المفتاحية : ترانزستور HEMT ، البئر الكمومية ، التغاير