

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE  
MINISTERE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA  
RECHERCHE SCIENTIFIQUE  
UNIVERSITE MENTOURI CONSTANTINE  
FACULTE DES SCIENCES DE L'INGEGNIEUR  
DEPARTEMENT D'ELECTRONIQUE

N°d'ordre :

Série :

# MEMOIRE

Présenté pour obtenir le Diplôme de Magister

En électronique

Option

Composants Et Microsystèmes

Par

M<sup>elle</sup> :BOUNEB Ilhem

Contribution à la modelisation  
d'une structure nanometrique:  
application aux transistors HEMTS et pseudomorphiques

Soutenu le : 27/06/2009 à 9<sup>h</sup>

Devant le jury :

Président :	M <sup>eme</sup> S.Lasoued	Prof	Univ.constantine
Rapporteur :	M <sup>eme</sup> M.Marir	Prof	Univ.constantine
Examineurs :	M <sup>er</sup> M.Bouchemat	Prof	Univ.constantine
	M <sup>eme</sup> S.Rebiai	MC	Univ.constantine

# Remerciements

Le travail présenté a été effectué au sein de l'équipe de recherche, d'étude des matériaux et composants électroniques du département d'électronique de l'UMC.

Mes plus sincères remerciements s'adressent à M<sup>me</sup> M.Marir –BENABBAS professeur à l'université Mentouri de Constantine, qui a dirigé ce travail, je lui exprime ma profonde gratitude pour l'honneur quelle me fait en acceptant d'être mon rapporteur, ainsi que pour les conseils avisés et précieux qu'elle a su me donner, et pour son aide efficace et constant tout au long de mes recherches.

Tous mes remerciements à M<sup>r</sup> B.E Marir professeur à l'université Mentouri de Constantine, pour tous les encouragements et son aide particulièrement en ce qui concerne l'élaboration numérique qui nous ont permis de mener notre étude dans les meilleures conditions.

Dans le cadre de la soutenance, je tiens à exprimer mes remerciements les plus sincères à M<sup>me</sup> S.Lasoued professeur à l'université de Constantine qui a bien voulu me faire l'honneur de présider le jury.

Je tiens vivement à remercier M<sup>r</sup> M.Bouchemat professeur à l'université de Constantine pour l'intérêt qu'il porte à notre travail et pour l'honneur qu'il me fait en acceptant d'être membre de jury.

Je remercie également M<sup>me</sup> S. Rebiai maître de conférence à l'université de Constantine, pour avoir accepté d'examiner ce travail et je tiens à lui exprimer mes respects les plus sincères.

Merci aussi à tous mes professeurs pour les connaissances qu'ils m'ont offert pendant l'année théorique de cette thèse.

Tous mes remerciements et mon estime à mes camarades chercheurs de l'UMC et à toute personne ayant contribué de près ou de loin au bon déroulement de ce travail.

# Dédicace

Je dédie ce modeste travail, avant tout à mes parents qui m'ont enseigné la persévérance dans mes études qui m'ont toujours été un grand secours par leur soutien et leurs encouragements pendant les moments difficiles.

A ma mère qui a partagé avec moi (et de manière synchrone) toutes les périodes de mon mémoire pendant lesquelles la morale oscille, et qui avec beaucoup d'amour et de tendresse, n'a jamais cessé de se sacrifier pour mon instruction, qu'elle trouve ici le témoignage de ma profonde gratitude

A mon père, avec tant  
d'affectation, s'est  
dépensé pour faire mes  
bonheurs et assurer mon  
avenir. pour ces conseils  
qu'il ne cesse de me  
prodiguer, qu'il trouve  
ici l'expression de ma  
profonde reconnaissance et  
de mon respect.

A mes frères : Zino ,  
Brahim ,Aido

A mes sœurs : Djess, Boudi  
, Mima

A tout mes amies du  
département  
d'électronique.

# Sommaire

Introduction générale.....	1
----------------------------	---

## Chapitre I : Généralité des hétérojonctions

Introduction.....	4
I. Propriétés du matériau utilisé .....	4
I.1 GaAs .....	4
I.2 Les alliages $Al_xGa_{1-x}As$ , InGaAs.....	7
II-Position des bandes d'énergie d'une hétérojonction- modèle d'ANDERSON .....	7
III- Les différents types d'hétérojonctions.....	10
IV-Les applications des hétérojonctions à puit quantique : le transistor HEMT .....	14
IV-1 Structure du HEMT.....	14
IV-2 Principe de fonctionnement d'un transistor HEMT.....	16
V-Les états électroniques liées à un puits de potentiel.....	20
V-1 Structure de sous bandes d'énergie .....	20
V-2 Occupation de sous bandes .....	21
VI- Calcul du puits quantique .....	22
VI-1 Approximation de la masse effective.....	23
VI-2 Approximation de Hartree.....	25
Conclusion .....	28

## Chapitre II : Différentes approches de résolution

Introduction .....	29
I- Méthodes approximatives –résolution analytique .....	29
I-1.Approximation du puits linéaire .....	29
I-2 Approximation d'un puits de potentiel parabolique .....	30
I-3 Approximation du puits triangulaire .....	31
I-4.Méthode variationnelle .....	33
II- Calcul self consistant .....	33
II-1 Modèle de F.Stern.....	34
II-2.Modele de A.Cappy.....	35
II-3.Modèle polynomiale d'ordre trois .....	36
II-4.Modele polynomiale d'ordre trois pour un transistor pseudomorphique (PHEMT) .....	37

II-5 Résolution par fonction d’Airy.....	38
II-6 Modèle polynomiale d’ordre deux .....	39
Conclusion .....	40

### **Chapitre III : Modélisation d’une structure HEMT par la méthode intégrale**

Introduction .....	41
I-Les fonctions de Green.....	41
II-Méthode des moments et méthode de Galerkin .....	42
III-Application de la méthode intégrale à une structure HEMT .....	44
IV- Méthodes de résolution .....	49
IV.1 Principe de la méthode de Newton.....	50
IV.2 Organigramme de la méthode.....	52
V- Résolution du système Schrödinger –poisson.....	53
Conclusion .....	54

### **Chapitre IV : Résultats et étude de convergence**

Introduction.....	55
I-Propriétés de la structure modélisée .....	55
II- Résultats et discussion .....	56
II- énergie potentielle- fonction d’onde –dispersion spatial des électrons.....	56
II-2 Influence du taux d’Aluminium.....	58
II-3 Influence du dopage .....	60
✓ Influence du dopage sur $N_s$ .....	60
✓ Influence du dopage sur l’offset $\Delta E_c$ .....	65
III- Largeur du puits .....	67
Conclusion .....	68
Conclusion générale	
Bibliographie	

# *Introduction générale*

# Introduction générale

Les systèmes quantiques de basse dimensionnalité font l'objet de nombreuses études depuis une vingtaine d'années. Cet intérêt est alimenté à la fois par des découvertes étonnantes du point de vue de la physique de la matière condensée mais aussi par le fort enjeu de fabrication de composants électroniques.

En effet, la réduction permanente de la taille des architectures en micro-électronique nécessite à terme de tenir compte des phénomènes quantiques qui modifient considérablement les propriétés physiques et conduisent à des phénomènes nouveaux.

Une grande majorité de composants électroniques est toujours réalisée à base de silicium. Or un nombre important d'utilisations des semi-conducteurs dans les domaines des télécommunications civiles et militaires conduit naturellement les différents acteurs à innover, car ces applications nécessitent l'utilisation de puissances toujours plus importantes à des fréquences élevées.

De ce fait, une solution alternative consiste à utiliser des matériaux semi-conducteurs aux propriétés physiques supérieures délivrant des puissances importantes et supportant de hautes températures de fonctionnement. Parmi ceux-ci, les semi-conducteurs III-V. Une des propriétés de la famille des composés semi-conducteurs III-V est en effet la probabilité de former des hétérostructures possédant une interface de bonne qualité cristallographique (par exemple GaAs/AlAsGa). Le gaz formé par les électrons accumulés à l'interface d'une telle hétérojonction possède deux propriétés physiques intéressantes : un caractère bidimensionnel et une mobilité très élevée en particulier à très basse température.

Les hétérostructures semi-conductrices sont donc de très bons candidats pour la réalisation de gaz d'électrons purement bidimensionnels. L'intérêt du gaz d'électrons 2D est qu'il se situe entre les systèmes électroniques à trois dimensions et ceux à une dimension. La réduction de la dimensionnalité altère fortement la densité électronique et les propriétés de ces systèmes.

En outre les structures quantiques à deux dimensions sont généralement, les systèmes les plus faciles à réaliser technologiquement. A l'heure actuelle, l'épitaxie par jets moléculaires permet de fabriquer des hétérostructures semi-conductrices de très bonne qualité.

Le développement des hétéro structures de matériaux semi-conducteurs a donné des illustrations claires de certains concepts de la mécanique quantique comme le confinement ou la quantification des niveaux d'énergie. Une nouvelle génération de dispositifs électroniques notamment le transistor HEMT a été développé mettant à profit ces effets quantiques.

Le transistor HEMT (High Electron Mobility Transistor) ou TEGFET (Two Dimensional Electron Gas FET) est constitué essentiellement d'une hétérojonction GaAsAl/GaAs, cette hétérojonction est considérée comme l'hétérojonction abrupte de référence grâce aux paramètres de mailles très proche de GaAsAl et du GaAs et aussi grâce aux techniques de croissance avec lesquelles elle est fabriquée.

L'étude de cette hétérojonction (abrupte) passe inévitablement par la résolution du système d'équations Schrödinger-Poisson à cause des effets quantiques qui se produisent au niveau de l'interface.

Ce travail est consacré à la modélisation physique numérique d'un puits quantique et à pour but de résoudre le système d'équations Schrödinger-Poisson sans aucune forme approximatif ni pour l'énergie potentielle ni pour la fonction d'onde qui sont les paramètres caractérisant un puits quantique. Notre méthode est dite intégrale basé sur les fonctions de Green et la méthode des moments.

Ce mémoire comporte quatre chapitres:

- Le premier chapitre introduit les bases théoriques, et les notions fondamentales indispensables pour la compréhension de l'ensemble de cette étude passant premièrement par les propriétés du matériau utilisé, les hétérojonctions et on termine par une des applications des hétérojonctions qui est le transistor HEMT.
- Le deuxième chapitre est consacré aux différentes approches qui déterminent le puits quantique précisant les hypothèses et les méthodes de calcul pour chaque modèle proposé
- Le troisième chapitre est consacré aux méthodes numériques et techniques de modélisations c'est-à-dire la méthodes des moments, méthode de Galerkin , fonction de Green et la méthode de newton qui représente les outils théoriques utilisés pour

nos travaux ainsi que l'application de cette modélisation physique numérique (dite intégrale) aux transistors HEMTS.

- Dans le quatrième chapitre, on fait d'abord une étude de convergence pour déterminer l'énergie potentielle, la fonction d'onde et la densité surfacique ainsi l'étude d'influence des paramètres technologiques sur les grandeurs caractéristiques du puits quantique tout en les commentant et en donnant les interprétations physiques nécessaires.

# Chapitre I

## *Generalités des heterojonctions*

## Introduction

Dans les structures à GaAs ou Arséniure de Gallium, qui sont les structures les plus utilisées, de par leurs caractéristiques physiques et électroniques ; apparaît cependant un compromis entre l'augmentation du dopage et la diminution de la mobilité. L'utilisation d'hétérostructures quantiques permet de lever cette limitation grâce à la création d'un gaz de porteur 2D.

Dans ce chapitre nous présenterons les principales caractéristiques d'hétérojonctions qui existent.

### I. Propriétés du matériau utilisé

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.

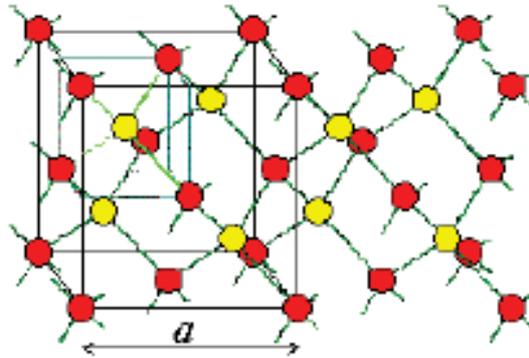
Les matériaux semi-conducteurs III-V sont des corps composés formés à partir d'un élément de la III<sup>ème</sup> colonne et d'un élément de la V<sup>ème</sup> colonne de la classification périodique de Mendeliev [1, 2, 3]. Une nouvelle classe de matériaux fait ainsi son apparition.

Nous nous sommes intéressés aux composés III-V GaAs et Les alliages  $Al_xGa_{1-x}As$ , InGaAs qui sont les matériaux utilisés pour notre structure.

#### I.1 GaAs

##### ▪ Structure cristalline

Les semi-conducteurs III-V tels que GaAs (arséniure de gallium) a une structure cristallographique de type blende de zinc. Cette structure, qui s'apparente à celle du diamant (Si, Ge, etc...), est constituée de deux sous réseaux cubique à faces centrées, l'un d'éléments III, l'autre d'éléments V, décalé l'un par rapport à l'autre du quart de la diagonale principale Figure (I.1), l'atome en rouge représente un élément III par exemple, l'atome en jaune représente un élément V. La maille élémentaire comporte deux atomes, le premier (Ga) à l'origine et l'autre (As) à  $(a/4, a/4, a/4)$ , où  $a$  représente le paramètre de maille du matériau [1,2].



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

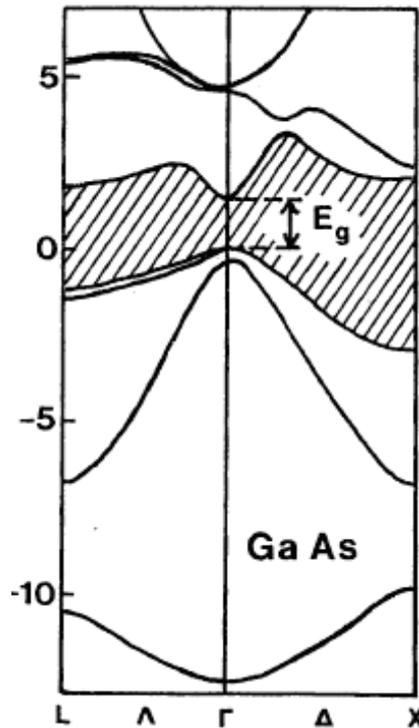
- **Caractéristique de la Structure de bande d'énergie**

- **Le semi-conducteur uni vallée GaAs [3]**

La structure de bandes du semi-conducteur GaAs est représentée sur la figure (I-2) suivant les directions de plus haute symétrie de l'espace réciproque. La bande interdite est hachurée, les bandes supérieures sont les bandes de conduction, les bandes inférieures sont les bandes de valence. Au zéro degré absolu la bande de valence est pleine d'électrons, la bande de conduction est vide. A la température ambiante à laquelle fonctionnent la plupart des composants électroniques, certains électrons sont thermiquement excités depuis la bande de valence et occupent la bande de conduction.

Il est évident que les électrons les plus susceptibles de passer de la bande de valence vers la bande de conduction sont les électrons de la bande de valence supérieure. En outre ces électrons occupent la bande de conduction inférieure.

De plus, parmi les états de ces bandes ceux qui jouent le rôle essentiel sont respectivement ceux du sommet de la bande de valence et du minimum de la bande de conduction.



**FigureI-2:** structure de bande du GaAs [3]

Pour le GaAs le minimum de la bande de conduction est situé au centre de la zone de Brillouin et puisque ce minimum est unique on dit que le GaAs est un semi-conducteur uni vallée contrairement au silicium qui est un semi-conducteur multi vallée.

➤ **La nature de la transition énergétique du GaAs [3]**

Le gap est par définition la largeur de la bande interdite c'est-à-dire la différence d'énergie entre le minimum absolu de la bande de conduction et le maximum absolu de la bande de valence.

A partir de la structure de bande on peut classer les semi-conducteurs en deux types [3] : les semi-conducteurs dans lesquels le minimum de la bande de conduction et le maximum de la bande de valence sont situés en des points différents dans l'espace réciproque et les semi-conducteurs pour lesquels ces extrema sont situés au même point. Les seconds sont dits à gap direct et les premiers sont dits à gap indirect.

Le GaAs est un composé III-V à transition direct. Cela signifie que l'énergie minimale de la bande de conduction et l'énergie maximale de la bande de valence sont localisées au centre

de la zone de Brillouin. Ceci a des conséquences importantes du point de vue des propriétés électroniques.

## I.2 Les alliages $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ , $\text{InGaAs}$

L'alliage  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  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 [3].

La nature de la transition énergétique de l'alliage  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  change selon le taux d'Aluminium  $x$ , avec  $1 < x < 0$ . 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 [3].

La constante de maille et les bandes d'énergies en fonction de la composition ( $x$ ) de Aluminium sont données par [1] :

$$\text{Constante de maille (en \AA)} : \quad a = 5.6533 + 0.0078x \quad (\text{I-1})$$

$$\text{Bande interdite (en eV)} : \quad E_g = 1.424 + 1.155x + 0.37x^2 \quad (\text{I-2})$$

La possibilité de choisir la largeur et la nature de la bande interdite se trouve encore plus étendue par l'utilisation de composé III-V ternaire  $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}$  pour lequel le paramètre de composition ( $x\%$ ) permet de modifier la largeur de la bande interdite.

## II-Position des bandes d'énergie d'une hétérojonction- modèle d'ANDERSON

Les hétérostructures sont des semi-conducteurs artificiels obtenus par la croissance alternée de fines couches de matériaux ayant une énergie de bande interdite différente mais présentent des paramètres de maille voisine [4].

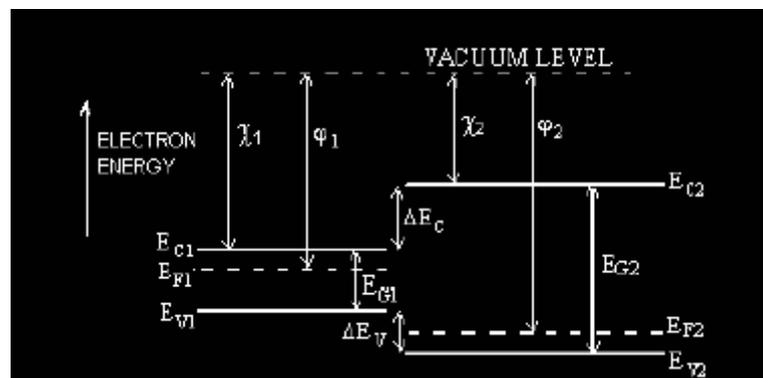
La plus simple des hétérostructures c'est hétérojonction qui est une jonction entre deux semi-conducteurs différents [4].

Le problème principale dans la théorie des hétérojonctions est de pouvoir prédire le positionnement relatif des bandes d'énergie des différents matériaux les uns par rapport aux autres. La plupart d'entre eux divisent le problème en deux parties [5] :

- Détermination des positions des bandes d'énergie par rapport à une certaine référence dans chacun des deux matériaux.
- La détermination de la différence d'énergie entre ces deux références après la formation de l'hétérojonction

Plusieurs études ont été accomplies à ce propos et plusieurs modèles ont été proposés. Parmi ces modèles le modèle d'ANDERSON .

Les règles de raccordements dites d'ANDERSON (1962) reposent sur la continuité du niveau de libération et celle du niveau de Fermi à la frontière qui sépare les deux matériaux. Le raisonnement est simple : lorsque les deux matériaux sont infiniment rapprochés (mais non en contact) et s'ils sont électriquement neutres, un électron en équilibre dans l'interstice qui les sépare occupe un niveau d'énergie qui peut être considéré indifféremment comme le niveau d'extraction du matériau 1 ou comme celui du matériau 2. Cela signifie que ces deux niveaux coïncident. Le diagramme d'énergie correspondant à cet état est représenté sur la figure (I-3).



**Figure I-3** : deux matériaux infiniment rapprochés électriquement neutres : leurs niveaux de libération coïncident [5]

Où :

$E_{G1}$  : largeur de la bande interdite du matériau 1.

$E_{G2}$  : largeur de la bande interdite du matériau 2.

$E_{C1}$  : bande de conduction du matériau 1.

$E_{C2}$  : bande de conduction du matériau 2.

$E_{V1}$  : bande de valence du matériau 1.

$E_{v2}$  : bande de valence du matériau 2.

$E_{F1}$  : niveau de Fermi du matériau 1.

$E_{F2}$  : niveau de Fermi du matériau 2.

$\Delta E_c$ : différence des bandes de conduction  $E_{c1}$  et  $E_{c2}$ .

$\Delta E_v$  : différence des bandes de valence  $E_{v1}$  et  $E_{v2}$ .

$\chi_1$  : affinité électronique du matériau 1.

$\chi_2$  : affinité électronique du matériau 2.

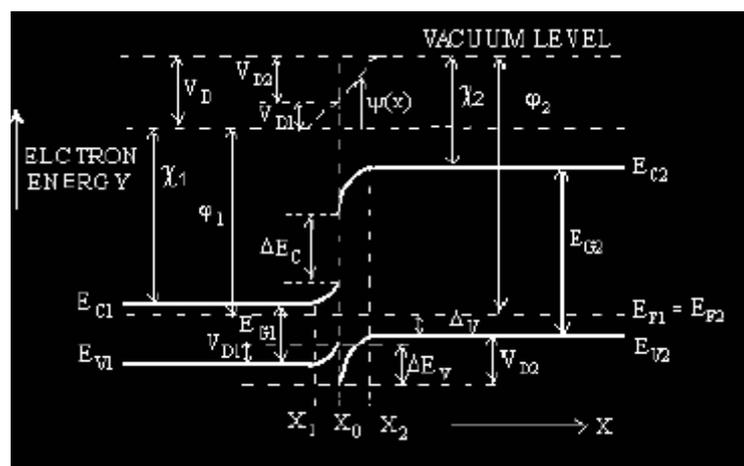
$\phi_1$  : travail de sortie du matériau 1.

$\phi_2$  : travail de sortie du matériau 2.

Si l'on rend maintenant les réseaux cristallin solidaires l'un de l'autre [5], ceci permettent aux électrons de passer d'un matériau dans l'autre, le système va tendre vers un nouvel état d'équilibre caractérisé par l'horizontalité du niveau de Fermi.

Naturellement, la règle de raccordement des niveaux d'énergies, et donc des bandes de conduction est conservée [5]. Le retour à un niveau de Fermi horizontal nécessite généralement l'apparition de zone de charge d'espace de part et d'autre part de la frontière.

Le diagramme des bandes pour les matériaux de la figure (I-3) est maintenant représenté sur la figure (I-4) qui montre qu'il y a une horizontalité du niveau de Fermi, des charges d'espaces doivent se constituer par le départ ou l'accumulation de porteurs. Les bandes de conduction et de valence présente une discontinuité à l'interface [5].



**Figure I-4** : Diagramme énergie- bande d'une hétérojonction à l'équilibre [5].

### III- Les différents types d'hétérojonctions

Selon différents critères, plusieurs types d'hétérojonction peuvent être définis. On peut citer les types suivants :

#### ✓ Hétérojonction isotype et anisotype

Lorsque ces deux semi-conducteurs sont de même type (N-NouP-P) on dit que l'hétérojonction est isotype et lorsqu'ils sont de type différents elle est appelée anisotype [3,4].

#### ✓ Hétérojonction graduelle et abrupte [1]

Si une hétérojonction est réalisée entre deux matériaux pour lesquels il existe un continuum de solution solide comme entre le GaAs/AlAs ( $\text{Al}_x \text{Ga}_{1-x}\text{As}$  existe pour tout  $0 < x < 1$ ) ou en faisant varier progressivement la composition de l'alliage ternaire et les dopages des deux semi-conducteurs, cette hétérojonction est dite graduelle (figure I-5).

La barrière de potentiel d'une hétérojonction graduelle est beaucoup plus difficile à décrire, la variation progressive du paramètre de composition  $x$  de l'alliage ternaire induit des modifications de la plupart des caractéristiques du matériau, contrairement à l'hétérojonction abrupte où à la fois la composition des matériaux et les dopages changent brusquement lors du passage du plan d'interface (figure I-6).

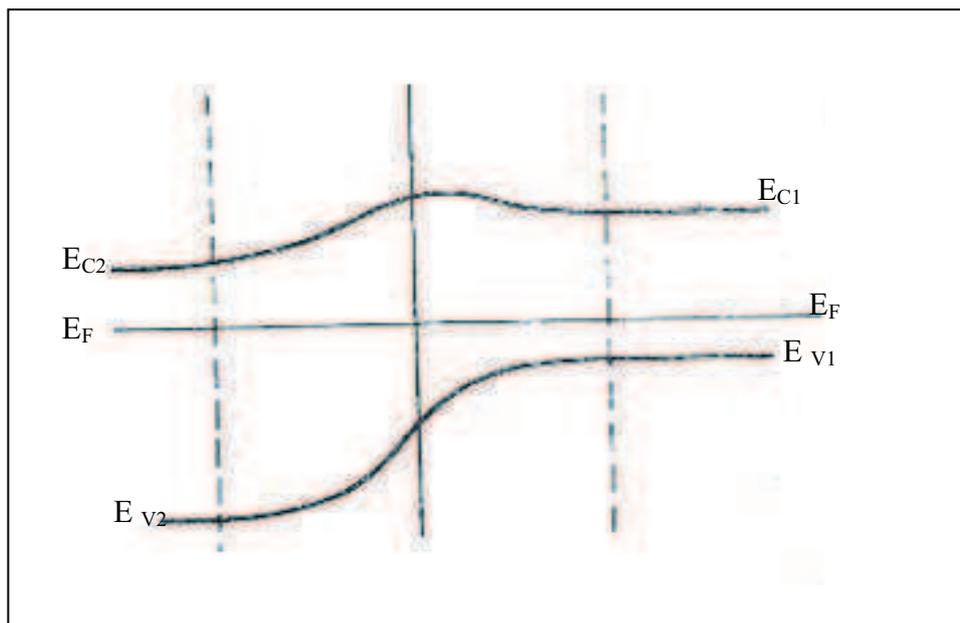
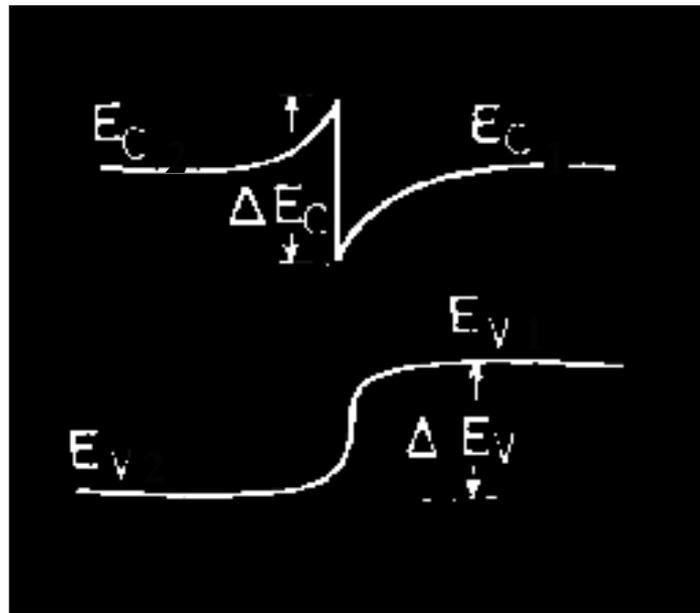


Figure I-5 : hétérojonction graduelle [1]



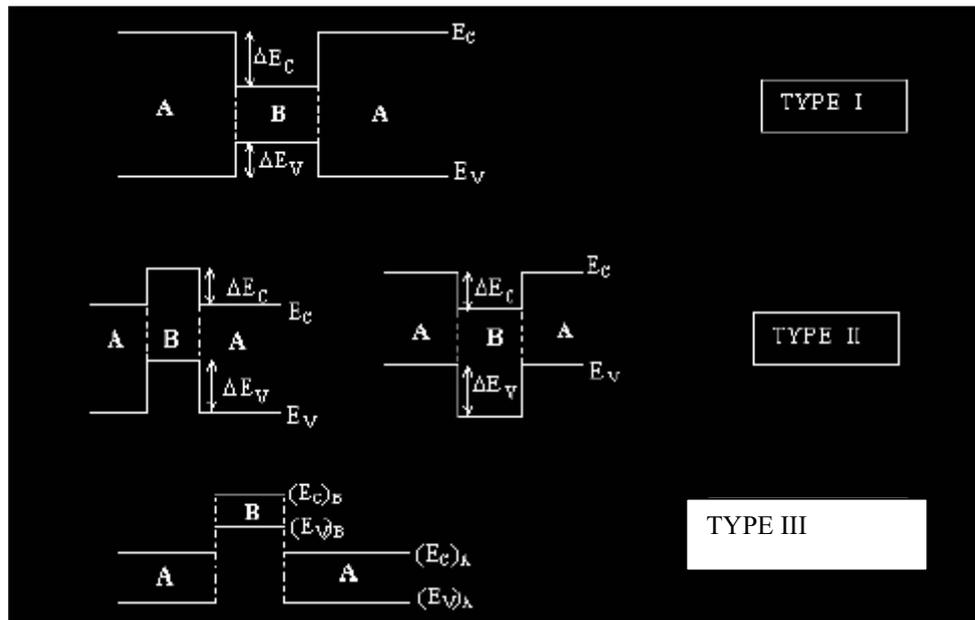
**Figure I-6** : hétérojonction abrupte [1]

### ✓ Les hétérojonctions de type I, II et III

Les hétérojonctions sont classées selon différents types suivant le signe des “offsets” de discontinuités de bande à l’hétérojonction abrupte mais le système le plus utilisé actuellement est de type I [6].

Le type I à chevauchement “starddling configuration” est illustré sur la figure ( I-7 ) c’est la configuration qui est considéré comme normale ou la discontinuité de bande de conduction  $\Delta E_C$  et de la bande de valence  $\Delta E_V$  ont des signe opposés c'est-à-dire la bande interdite du semi-conducteur à petit gap est englobé dans la bande interdite à grand gap ceci traduit le confinement des porteurs dans le matériau à petit gap [6].

Contrairement aux hétérojonctions de type I l’hétérojonction de type II (figure I-7) est de configuration décalée “straggered configuration” [6]. Dans ce type d’alignement le chevauchement n’est pas complet, le bas de la bande de conduction du semi-conducteur à gap étroit se positionne au dessus de celui du semi-conducteur à large gap ou bien son haut de la bande de valences positionne en dessous de celui à gap large, ce décalage peut atteindre le cas limite ou le chevauchement disparaît complètement, c’est à dire que les deux bandes interdites deviennent séparé, c’est le type III de configuration à gap rompu “broken gap” qui est représenté sur la figure ( I-7)[6].

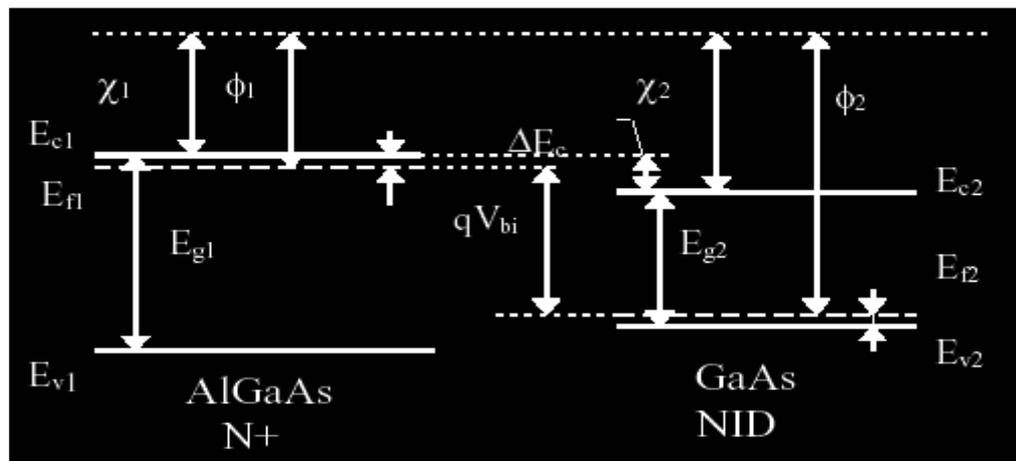


**Figure I-7 :** Divers types d'hétérojonctions définis par la position relative des bandes des semi-conducteurs A et B ; le type I est le plus utilisé

### ✓ L'hétérojonction de type GaAs/ GaAsAl

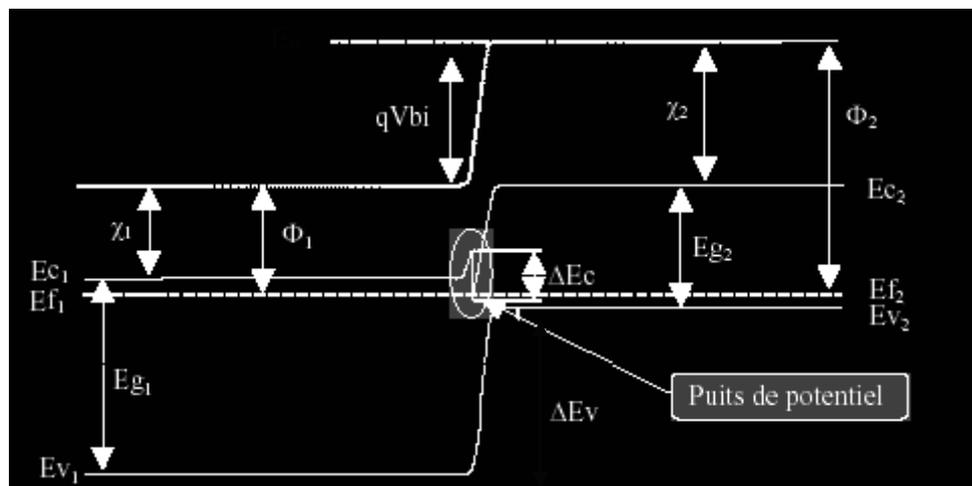
Pour que deux matériaux puissent former une bonne hétérojonction il est d'abord nécessaire que leurs paramètres de mailles soient aussi voisins que possible [4]. A cet effet l'intensification des recherches sur les matériaux semi-conducteurs III - V a permis de recenser des couples de matériau susceptible de constituer des hétérojonctions présentant des interfaces de qualité tout à fait acceptable. Parmi ceux-ci, l'hétérojonction AlGaAs/GaAs.

En faisant croître une couche non intentionnellement dopée (notée NID) de GaAs suivie d'une couche de AlGaAs fortement dopée  $N^+$ . La figure (I-8) représente le diagramme de bandes d'énergie de l'hétérostructure AlGaAs / GaAs avant contact.



**Figure I-8** : Diagramme de bandes d'énergie de deux matériaux de gap différents (AlGaAs et GaAs)

D'après les règles d'Anderson, lorsque les deux matériaux sont assemblés (Figure I-9) et à l'équilibre thermodynamique, les niveaux de Fermi doivent s'aligner et le niveau du vide ne peut subir de discontinuité. Il en résulte des discontinuités des bandes de conduction et de valence à l'interface [5]. Il se crée un puits de potentiel.



**Figure I-9** : Diagramme de bandes d'une hétérojonction

L'hétérojonction AlGaAs/GaAs accumule de nombreux avantages [4] : largeur de bande interdite relativement importante qui autorise un fonctionnement à haute température, mobilité électronique élevée qui permet d'atteindre de bonnes performances, mailles

crystallines assez proche qui minimisent les recombinaisons parasites. Beaucoup de composants ont bénéficié de ces performances notamment le transistor HEMT.

#### IV-Les applications des hétérojonctions à puit quantique : le transistor HEMT

Le développement de l'épitaxie par jets moléculaires a permis la réalisation des hétérojonctions déjà utilisées dans de nombreux dispositifs tels que les diodes laser et les transistors bipolaires. Plus précisément Dingle en 1978 [7], a montré que l'hétérojonction AlGaAs/GaAs est le siège d'une charge d'accumulation d'électrons extrêmement mobiles dans certaines conditions. En modulant cette charge par un contact Schottky déposé sur l'un des matériaux, on obtient un transistor à effet de champ dont les propriétés devraient être particulièrement intéressantes.

##### IV-1 Structure du HEMT

###### a) HEMT conventionnel

Le transistor HEMT est constitué essentiellement de trois matériaux différents : le substrat, un matériau à large bande interdite et un matériau à plus faible bande interdite, c'est la jonction de ces deux derniers matériaux qui conduit à la formation d'un gaz d'électrons à l'interface modulé par la tension appliquée au composant [8,9]. La figure (I-9) présente la structure de base d'un HEMT conventionnel

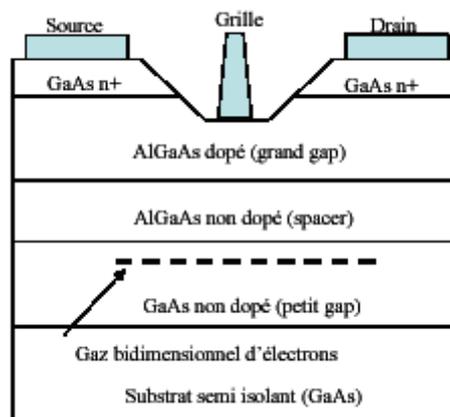


Figure I-10 : structure de base d'un HEMT

Le transistor HEMT est constitué de [9,10]:

- **Substrat GaAs**
- **Couche tampon GaAs non dopé** : elle est également appelée “buffer ”cette couche est constituée d’un matériau de plus faible largeur de bande interdite. C’est dans ce matériau et dans la partie supérieure de la couche que va se former le gaz bidimensionnel.
- **Le canal** : c’est la zone de confinement des électrons, il est formé à l’interface de la couche tampon GaAs et du spacer AlGaAs.
- **Le spacer AlGaAs non dopé**: cette couche représente le matériau de plus large gap, l’épaisseur de cette couche est de l’ordre de quelque nanomètres, elle permet de réduire les interaction électrons –donneurs entre le gaz d’électrons et la couche dopée.
- **Couche donneuse N-AlGaAs** : fournit des électrons de conduction au canal. Ces électrons libres occupent le plus bas d’énergie disponible du coté couche tampon GaAs non dopé.

### b) Le PHEMT

Les transistors PHEMT GaAs se différencient des transistors HEMT par l’ajout d’une couche d’InGaAs intercalée entre les couches AlGaAs et GaAs (FigureI-10) qui va former le canal du transistor .Les électrons bénéficient de très bonnes propriétés de transport de L’InGaAs [9].

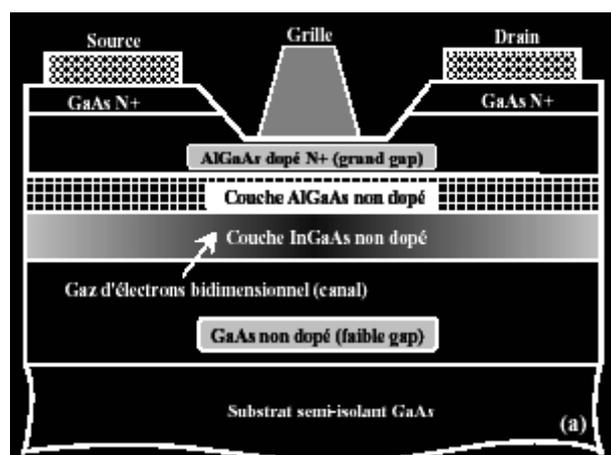


Figure I-11 : structure d’un transistor PHEMT

## IV-2 Principe de fonctionnement d'un transistor HEMT

Le principe de base consiste à mettre à profit les propriétés de haute mobilité d'un gaz bidimensionnel d'électron formé à l'interface d'une hétérojonction. L'idée de base est de séparer spatialement les électrons libres, des donneurs ionisés dont ils proviennent [8].

La couche donneuse N-AlGaAs fournit des électrons de conduction au canal. Ces électrons libres occupent le plus bas d'état d'énergie disponible du côté GaAs de l'hétérojonction. L'accumulation des électrons dans le canal GaAs et la présence des atomes donneurs ionisés dans la couche AlGaAs séparée du canal par le spacer créé un champ électrique transversal[8]. La dispersion des électrons dans la couche GaAs est empêchée par l'action du champ qui ramène les électrons vers l'interface. La bande de conduction se courbe et devient un puits de potentiel dans lequel les électrons sont confinés.

Les porteurs du gaz bidimensionnel d'électrons formés à l'interface d' $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  et GaAs sont confinés suivant la direction de croissance z et sont libres dans les deux autres directions x, y [8].

Lorsque la largeur du puits devient de l'ordre de la longueur de Louis de Broglie il y a apparition d'une quantification de l'énergie.

Les principales caractéristiques de la structure concernant donc celles du puits quantique :

- ◆ Paramètres géométriques et physique : largeur et profondeur (désignés par "offset" de la structure) qui correspond à la discontinuité de la bande de conduction.
- ◆ Fonctions d'ondes associées aux différentes énergies liées du puits.
- ◆ Densité du gaz bidimensionnel  $N_s$

### IV-2 -1 Discontinuité des bandes « offset $\Delta E_c$ , $\Delta E_v$ »

La différence de gap entre les deux semi-conducteurs est donnée par [11]:

$$\Delta E_g = E_{g1} - E_{g2} \quad (\text{I-3})$$

La différence d'énergie de bande interdite  $\Delta E_g$  des matériaux constituent l'hétérojonction se répartie entre bande de conduction et bande de valence. La manière dont se fait cette

répartition est d'une importance particulière car la discontinuité de bandes (ou offset de bande) ( $\Delta E_c$ ,  $\Delta E_v$ ) déterminent les barrières que doivent franchir les porteurs de charge [9,11].

Le but recherché est de connaître la contribution individuel exacte de  $\Delta E_c$ ,  $\Delta E_v$  dans  $\Delta E_g$ , pour ce faire plusieurs modèles de calcul ont été mise au point parmi ces modèle on a :

✓ **Règle d'affinité électronique :**

C'est une conséquence du modèle d'Anderson, le niveau du vide étant le même pour les deux matériaux, la différence entre leur affinité électronique est alors égale à la discontinuité de la bande de conduction [5] :

$$\Delta E_c = \chi_1 - \chi_2 \quad (\text{I-4})$$

La discontinuité de la bande de valence est déduite facilement à partir de l'équation suivante :

$$\Delta E_g = \Delta E_c + \Delta E_v \quad (\text{I-5})$$

✓ **La théorie linéaire des offset  $\Delta E_c$  :**

La théorie qui permet de prédire ces discontinuités de bande est dite « linéaire », elle suppose qu'il existe une énergie absolue spécifique associé à chaque bord de bande de tout semi-conducteur les, "offsets" sont alors simplement la différence entre les énergies absolus de chaque bande pour chacun des deux semi-conducteur. Par exemple pour la bande de conduction [3,11] :

$$\Delta E_c = E_{c1} - E_{c2} \quad (\text{I-6})$$

En fait cette hypothèse de linéarité est bien évidemment une approximation et on devait écrire [3,11] :

$$\Delta E_g = \Delta E_c + \Delta E_v + \delta(sc1/sc2) \quad (\text{I-7})$$

Où  $\delta(sc1/sc2)$  est une approximation ne pouvait être exprimé linéairement en fonction des propriétés individuelles des discontinuités du  $sc1$  et  $sc2$  mais est une caractéristique propre à la combinaisons ( $sc1/sc2$ ).

✓ **Mesure expérimentale :**

La valeur de la discontinuité  $\Delta E_c$  a été déterminée expérimentalement par H.KROEMER [12] et plus récemment par M.WATANABE [13] pour une concentration en Al inférieure à 0.35.

$$\Delta E_c = 0.62 \Delta E_g \quad (\text{I-8})$$

$$\Delta E_v = 0.38 \Delta E_g \quad (\text{I-9})$$

On suppose que l'expression (I-9) reste valable pour toutes les valeurs de  $x$ , cette hypothèse permet de calculer les discontinuités de bande à partir de l'expression de  $\Delta E_g$  (parabolique) donnée par P.ROBSON[11] :

$$\Delta E_g = 1.525x - 0.438x(1-x) \quad \text{pour } x < 0.44 \quad (\text{I-10})$$

$$\Delta E_g = 0.475 + 0.26x - 0.16x(1-x) \quad \text{pour } x > 0.44 \quad (\text{I-11})$$

Et par conséquent :

- pour  $x < 0.44$

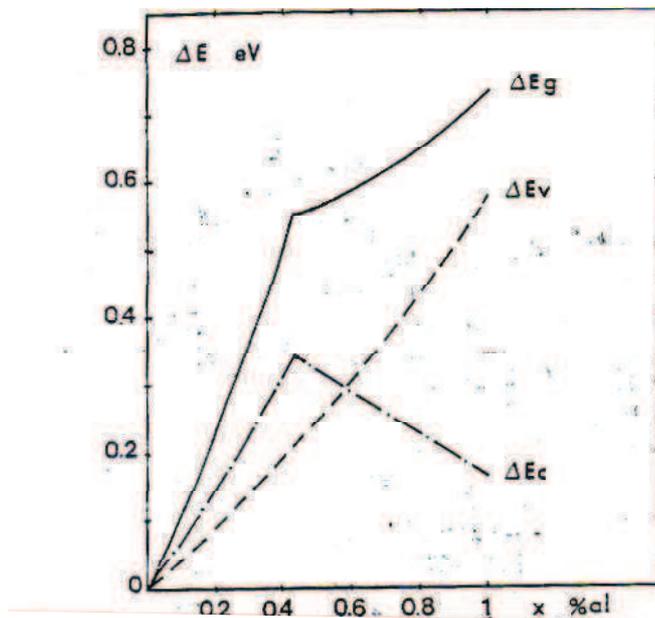
$$\Delta E_c = 0.62 \Delta E_g = 0.67x + 0.27x^2 \quad (\text{I-12})$$

$$\Delta E_v = 0.38 \Delta E_g = 0.413x + 0.166x^2 \quad (\text{I-13})$$

- pour  $x > 0.44$

$$\Delta E_c = \Delta E_g - \Delta E_v = 0.475 - 0.31x \quad (\text{I-14})$$

$$\Delta E_v = 0.38 \Delta E_g = 0.413x + 0.166x^2 \quad (\text{I-15})$$



**Figure I-12** : Evolution de la discontinuité énergétique de bande interdite, de bande de valence et de conduction avec le taux d'aluminium

La figure (I-12) montre que la discontinuité de bande de conduction  $\Delta E_c$  passe par un maximum pour une concentration en Al voisine de 0.44 concentration correspondante au passage gap direct -gap indirect.

### VI-2 -2 Densité surfacique

Lorsque l'équilibre est rompu ( $T \neq 0$ ), certains états d'énergie, vides à l'origine, se peuplent et la fonction de distribution de Fermi-Dirac, donnée par l'expression (I-16), renseigne sur la probabilité qu'un électron se trouve dans un état d'énergie  $E$  à une température  $T$ , avec  $E_F$  l'énergie de Fermi définie comme l'énergie du niveau rempli le plus élevé,  $T$  la température en Kelvin, et  $k_B$  la constante de Boltzmann égale en unité d'énergie à 0.086 meV/K [14].

$$f(E, T) = \frac{1}{\exp\left(\frac{E - E_F}{K_B T}\right) + 1} \quad (\text{I-16})$$

La densité surfacique des électrons par unité de surface  $N_s$  est donnée selon [14] par :

$$N_s = \int n(E).f(E, E_F).dE \quad (\text{I-17})$$

Où  $n(E)$  est la densité d'état

La densité superficielle peut être fractionner en sous bandes :

$$n_{2D} = \sum n_j \quad (\text{I-18})$$

Où  $n_j$  est la densité des électrons dans la sous bande  $j$  du niveau plus bas  $E_j$  et qui est donnée par l'équation suivante [14] :

$$n_j = \frac{mk_B T}{\pi \hbar^2} \ln \left[ 1 + \exp \left( \frac{E_F - E_j}{k_B T} \right) \right] \quad (\text{I-19})$$

## V-Les états électroniques liées à un puits de potentiel

### V-1 Structure de sous bandes d'énergie

Le confinement spatial entraîne l'apparition de sous bandes d'énergie, aussi bien dans la bande de conduction (BC) que dans la bande de valence (BV).

La densité d'états par unité d'aire et unité d'énergie est définie selon [15] par la relation (I-20) :

$$n(E) = \frac{g_v m_e}{\pi \hbar^2} \quad (\text{I-20})$$

Où  $g_v$  est le facteur de dégénérescence de vallée qui nous renseigne sur les bandes d'énergie équivalentes, avec un facteur 2 pour la dégénérescence de spin.

La structure choisie fait partie de la famille des semi-conducteurs III-V, qui ont pour particularité d'être uni vallées, ce qui donne  $g_v = 1$ , et une densité d'états électronique constante.

Puisque la largeur d'un puit de potentiel est de l'ordre de grandeur de la longueur d'onde de Broglie  $\lambda = h/p$  ( $\lambda = 250 \text{ \AA}$  dans le GaAs) et la densité d'état électronique est constante, les effets quantiques introduisent une suite de niveaux d'énergie discrets  $E^i$ .

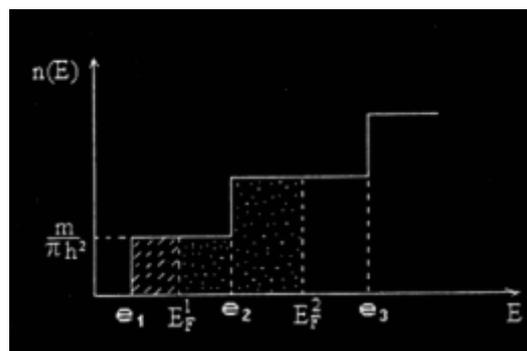
Ces niveaux  $E^i$  décrivent la quantification des états électronique dans la direction perpendiculaire à l'interface [14].

### V-2 Occupation de sous bandes

Le nombre de sous bandes occupé dépend de la densité d'électrons et de la température, lorsque un seul électrons se trouve dans le puits celui ci occupe le niveau de plus faible d'énergie, c'est-à-dire  $E_0$  et si on augmente le nombre des électrons, ces derniers vont occuper de manière successive les niveaux d'énergie supérieure [3, 11, 14].

La courbe de la densité d'état  $n_{2D}(E)$  à la limite de basse température est illustré par la figure (I-13) pour deux valeurs de  $E_F$  ( $E_{F1} < E_{F2}$ ,  $E_{F1} > E_{F2}$ ) [3, 11, 14].

Pour  $E_F = E_{F1}$  il y a occupation de la première sous bande, mais l'occupation de la seconde sous bande est négligeable à cause de la condition ( $e_2 \cdot E_{F1} \gg K_B T$ ). Pour une densité d'électrons plus importante l'énergie de Fermi entre dans la deuxième sous bandes comme le deuxième cas de la figure (I-14)  $E_F = E_{F2}$  la densité maximale d'électrons qui peut occuper le système avant d'entrer dans la deuxième sous bande est donné par  $(m/(3.14 \cdot h^2))(e_2 - e_1)$ . La séparation entre les niveaux d'énergie devrait être maximisé pour augmenter cette densité, l'augmentation de  $(e_2 - e_1)$  peut être réalisé par un puits étroit [3, 16].



**Figure I-13** : densité d'état d'un système quasi bidimensionnel

## VI- Calcul du puits quantique

En 1926 Schrödinger a montré que la fonction d'onde et l'énergie sont solution d'une équation au dérivé partielle du second ordre cette équation s'écrit [16] :

$$\frac{-\hbar^2}{2m_e} \Delta \Psi^i(z) + V(z) \Psi^i(z) = E^i \Psi^i(z) \quad (\text{I-21})$$

Où :

$\Delta$  : C'est le Laplatien

$m_e$  : la masse d'électron

$V$  : énergie potentielle

$E^i$  : énergie totale de l'électron

$\Psi^i$  : fonction d'onde

$\hbar = \frac{h}{2\pi}$ , où h est la Constante de Planck

On peut la mettre sous la forme :

$$\left[ -\left( \frac{\hbar^2}{8\pi^2 m_e} \right) \Delta + V \right] \Psi^i = E^i \Psi^i \quad (\text{I-22})$$

$$H^i \Psi^i = E^i \Psi^i \quad (\text{I-23})$$

Où :

$H^i$  C'est l'opérateur Hamiltonien

La résolution de l'équation de Schrödinger nécessite la connaissance de terme du potentiel ce qui veut dire que les équations de Schrödinger et de poisson sont couplées.

Le potentiel V varie suivant un axe perpendiculaire à la structure d'hétérojonction, ce potentiel égale à la somme de 4 types de potentiel [11]:

- Le potentiel image qui est du à la différence des constante diélectrique.
- Le potentiel périodique qui est du au interaction des ions.
- Le potentiel d'inversion qui est du à l'accumulation des électron à l'interface.
- Le potentiel de déplétion qui est du à l'ionisation des impurtées.

Il existe aussi le potentiel d'échange du au mélange des fonctions d'onde des électrons [2].

Pour trouver le potentiels d'ionisation et de déplétion on utilise l'équation de poisson où pour  $V_{\text{inversion}}$  on a [17] :

$$\frac{d^2 V_{inv}}{dz^2} = \frac{-\rho_{inv}}{\epsilon} \quad (\text{I-24})$$

Où  $\rho_{inv} = -q(N_A - N_D)$

Et pour  $V_{\text{déplétion}}$  on a :

$$\frac{d^2 V_{dep}}{dz^2} = \frac{-\rho_{dep}}{\epsilon} \quad (\text{I-25})$$

Où  $\rho_{dep} = -q\left(\sum n_i |\Psi(z)|^2\right)$

Le calcul exact d'un potentiel de charges fixes dépend de la précision de la connaissance de la densité de ces charges, mais le calcul d'un très grand nombre d'électrons considérés comme libres au voisinage de l'interface d'une hétérojonction est très difficile à déterminer.

Dans la littérature des approximations de simplification de calcul de ce potentiel sont données. Parmi ces approximations l'approximation de la masse effective et l'approximation de Hartree.

## VI-1 Approximation de la masse effective

### V-1.1 Description classique de l'approximation de la masse effective

L'approximation de masse effective dans les semi-conducteurs permet de tenir compte au premier ordre des interactions entre les différentes bandes d'énergies. Ce formalisme simple fournit essentiellement des informations qualitatives.

Dans la mécanique quantique, un électron est soumis à une force  $F$  qui égale à [11 ,14] :

- $F = m_0 \times \gamma$  si l'électron est libre
- $F = \left(m_0 + \frac{F_i}{\gamma}\right) \gamma$  si l'électron est dans le semi conducteur.

Le facteur  $(m_0 + f_i/\gamma)$  est appelé masse effective notée  $m_e$ , cette masse effective est constante si  $E(k)$  a une forme parabolique, (les bandes ne sont paraboliques qu'au voisinage du centre de zone.) donc  $m_e$  c'est un paramètre lié au type semi-conducteur et on le trouve dans les semi-conducteurs à gap direct (GaAs) inférieur à la masse d'électron  $m_0$  qui peut provoquer une amélioration de la mobilité d'électron [14].

Cette approximation influe sur le potentiel ou elle néglige le potentiel périodique. Dans le cas d'un semi-conducteur à gap direct (GaAs), la masse effective est isotrope par contre dans le cas d'un semi-conducteur à gap indirect (Si ou Ge), on peut définir des masses Longitudinales et transverses dans certaines directions de l'espace [3].

### VI-1.2 Fonction d'onde et validité de l'approximation de la masse effective

Le Hamiltonien décrivant l'interaction entre électrons ainsi qu'entre les électrons et les atomes du cristal est complexe, mais ces interactions peuvent souvent être ramenées à un potentiel effectif  $V(\mathbf{r})$  [2,18].

L'Hamiltonien décrivant un électron dans la structure périodique est:

$$H_{cristal} = \frac{p^2}{2m} + \sum V(r - r_i) \quad (\text{I-26})$$

Où  $p$  est la quantité de mouvement de l'électron et  $m$  sa masse. Les  $r_i$  sont les positions des nœuds du réseau. En tenant compte de la périodicité du cristal, on peut écrire [2,11,14,18]:

$$H_{cristal} = \frac{p^2}{2m} + U(r) \quad (\text{I-27})$$

Où  $U(\mathbf{r})$  est le nouveau potentiel vu par les électrons. Ce potentiel qui possède la périodicité du cristal nous permettons donc de restreindre la somme des interactions à traiter. Dans le vide, les solutions du Hamiltonien  $H = p^2/2m$ , sont des ondes planes  $e^{ikr}$ . Dans le cristal, les solutions de l'équation de Schrödinger sont les fonctions de Bloch, produit d'ondes planes par des fonctions périodiques  $U_{n,k}(\mathbf{r})$  [2,18] :

$$\Psi_{n,k}(r) = U_{n,k}(r).e^{ikr} \quad (\text{I-28})$$

Les fonctions d'ondes à un électron dans une hétéro structure se décrivent par le formalisme de la fonction enveloppe. Pour cela, nous supposons que le matériau A et le

matériau B qui constituent l'hétérojonction ont un paramètre de maille identique et qu'ils cristallisent dans la même structure [2,18].

A partir de ces deux hypothèses, on peut déduire un certain nombre de condition concernant les fonctions d'onde et la validité de la théorie de la masse effective [2,14]:

- la première condition pour que l'approximation de la masse effective soit valable est que les fonctions de Bloch dans les deux matériaux de l'hétérojonction doivent être semblable, une condition évidente est qu'elles doivent appartenir du même point dans la relation énergie vecteur d'onde  $E(k)$
- la discontinuité des bande de conduction impose un transfert des électrons du semi-conducteur à grand gap vers le semi-conducteur à petit gap la vitesse de ces électrons doit être la même sur les deux cotés et par conséquent la seconde condition concerne l'interface de l'hétérojonction et les égalités suivante doivent être vérifiées [2,18] :

$$\begin{aligned} \chi(0_A) &= \chi(0_B) \\ \left( \frac{1}{m_A} \right) \left[ \frac{d\chi(z)}{dz} \right]_{z=0_A} &= \left( \frac{1}{m_A} \right) \left[ \frac{d\chi(z)}{dz} \right]_{z=0_B} \end{aligned} \quad \text{(I-29)}$$

$m_A$  et  $m_B$  sont respectivement les masse effective du matériau A et B si on néglige la différence de la masse effective de l'électron dans les deux matériaux on peut écrire  $m_A = m_B$  et l'expression (I-29) se simplifier.

## VI-2 Approximation de Hartree

### V-2.1.Description classique de l'approximation de Hartree

Elle consiste à supposer que chaque électron se déplace indépendamment dans un champ noyau crée par les autres électrons et noyaux. Donc cette approximation ramène le problème de N corps au problème à un seul électron.

L'hamiltonien peut être écrit comme une somme des hamiltoniens décrivant un seul électron [3,14]:

$$H = \sum H^i \quad (\text{I-30})$$

Avec :

$$H_i = \frac{-\hbar^2}{2m} \Delta_i + V(r) \quad (\text{I-31})$$

$V(r)$  est le potentiel moyen du cristal possédant la périodicité du réseau, il contient le potentiel périodique

Donc l'approximation de Hartree consiste à traiter le problème à un électron c'est-à-dire à ramener les interactions électron-électron à un seul électron de potentiel moyen résultant de l'ensemble des autres électrons [3].

Cette approximation est applicable dans le cas où la masse effective d'électron est faible autrement dit est applicable dans la plupart des cas de semi-conducteur à gap direct.

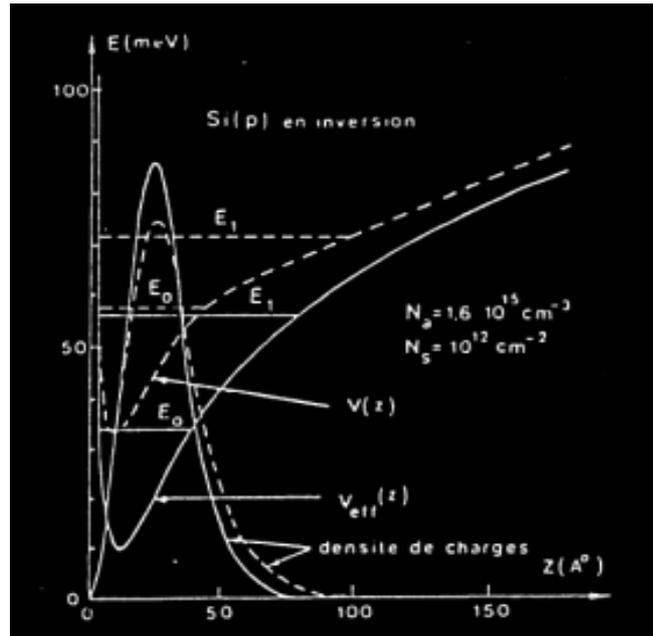
### VI-2.2. Les effets d'échange et de corrélation et l'approximation de Hartree

Dans le cas de semi-conducteur à gap indirect la masse effective de l'électron du semi-conducteur dans la direction perpendiculaire à la surface est de l'ordre de la masse  $m_0$  de l'électron libre, c'est pourquoi l'approximation de Hartree ne peut être pas globalisée et les effets d'échanges et de corrélation devient assez important [3].

Une façon de prendre ces effets en considération consiste à traiter le problème à un électron en ajoutant au potentiel de Hartree un potentiel additionnel représentant un effet équivalent, ce potentiel est fonction de la densité électronique mais de façon inconnue [3].

Les effets des échanges et de corrélation sont dû au couplage qui se produit entre les états énergétiques et les fonctions d'ondes des électrons ou ils sont mélangés partiellement, les électrons des niveaux les plus bas et qui sont les plus près de l'interface se déplacent vers l'intérieur du semi-conducteur car leurs fonctions d'ondes sont mélangées partiellement avec celle des électrons des niveaux supérieurs qui sont plus étalées loin de l'interface, l'effet inverse se produit pour ces derniers. Ils sont ramener vers l'interface donc on peut dire qu'il y a une contraction de distribution spatiale des électrons cet effet est montré sur la figure (I-14) où il est plus accentué dans le cas du Si que dans le cas du GaAs où il est quasiment négligeable en raison de faible valeur de sa masse effective [3, 11,14].

Mentionnant enfin, le fait que le potentiel image repousse les électrons et les éloigne de l'interface et compense les effets de contraction dus au potentiel d'échange et de corrélation, la majorité des auteurs ne le tiennent pas en compte dans leurs calculs du potentiel image et du potentiel d'échange [17].



**Figure I-14** : structure de sous bande d'énergie  $Si/SiO_2$  sans et avec effet d'échange et de corrélation

Le système d'équation non linéaire de Schrödinger- Poisson pour le niveau d'énergie  $E^i$  de la sous bande numéro  $i$  s'écrit donc [8,11,14,17] :

$$\begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{d^2\Psi^i}{dz^2} - qV(z)\Psi^i(z) = E^i\Psi^i(z) \\ \frac{d^2V(z)}{dz^2} = \frac{q[(N_A - N_D) + \sum n_i |\Psi|^2]}{\epsilon} \end{cases} \quad \text{(I-32)}$$

Où  $V(z) = V_{inversion} + V_{déplétion}$

## Conclusion

Dans ce chapitre nous avons mis en évidence d'existence d'un puits quantique d'une simple hétérojonction, qui en effet résulte de façon directe de la discontinuité de la bande de conduction au niveau de l'interface, et dont les caractéristiques en dépendent.

En outre, on a présenté certaines méthodes, les plus connues, permettant la détermination de la discontinuité aussi bien de la bande de conduction que de la bande de valence. Cependant toutes ces méthodes de détermination présentées restent empiriques ou semi empiriques.

La résolution du système d'équation Poisson – Schrödinger fondé sur l'approximation de la masse effective et l'approximation de Hartree pourrait calculer l'énergie potentielle à l'interface et par conséquent la discontinuité à l'interface.

# Chapitre II

## *Différentes approches de résolution*

## Introduction

Le système non linéaire Poisson Schrödinger n'a pas de solution analytique ce qui rend nécessaire une résolution numérique du système.

Cette résolution numérique peut être effectuée soit par un calcul self consistant soit par des méthodes simples qui donnent des résultats approximatifs satisfaisants.

Dans ce chapitre on va présenter les différentes approches de résolution de ce système.

### I- Méthodes approximatives –résolution analytique

Contenu de la difficulté de résoudre de façon rigoureuse les équations Poisson – Schrödinger couplées, des formes particulières du puits de potentiel et de la fonction d'onde ont été proposés.

#### I-1.Approximation du puits linéaire

Le modèle proposé par Delagebeaudeuf considère un puits de potentiel linéaire [19], le champ électrique étant de ce fait constant dans le puits.

Le calcul des niveaux  $E_n$  à partir de l'équation de Schrödinger en fonction du champ (le seul paramètre définissant le puits) est relativement simple et nous pouvons écrire [19] :

$$E_n = \left(\frac{\hbar^2}{2m_e}\right)^{1/3} \cdot \left(\frac{2}{3} \pi q E\right)^{2/3} \cdot \left(n + \frac{3}{4}\right)^{2/3} \quad \text{(II-1)}$$

En réalité l'hypothèse d'un puits de potentiel linéaire est très simple mais ne peut traduire avec suffisamment de rigueur le comportement de la couche d'accumulation à hétérojonction.

## I-2 Approximation d'un puits de potentiel parabolique

### I-2-1 Hypothèses de ce modèle

Dans ce modèle on considère le puits de potentiel de forme parabolique [20]. Ce choix à priori arbitraire est un état ultérieur vers le traitement rigoureux.

En effet, C.VERSNANYEN a pu considérer que ce choix traduit dans que certaine mesure la réaction de charges d'espace dans la zone d'accumulation, et si la densité de charges était uniforme cette hypothèse est proche de la réalité physique.

Au cours de ses calculs il a effectué les hypothèses suivantes [20]:

- ❖ Le puits étant parabolique, il est caractérisé par deux grandeurs : sa profondeur  $V$  et sa largeur  $Z$  qui déterminent le champ à l'interface.
- ❖ La position du niveau de Fermi loin de l'interface dans GaAs est déterminée par la condition d'équilibre thermodynamique en volume
- ❖ La limitation aux deux premiers niveaux d'énergie permis, les sous bandes définies par ceux-ci contenant la quasi-totalité de la charge.

### I-2-2 Méthode de résolution

Le calcul des niveaux d'énergies  $E_n$  s'effectue à partir de l'intégration de l'équation de Schrödinger conduit alors à la relation suivante :

$$\sqrt{2m_e} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{F_n - V(x)} \cdot dx = (n + \frac{1}{2}) \cdot \pi \hbar \quad (\text{II-2})$$

Cette équation (II-2) est couplée à celle de la densité de charge électronique interfaciale  $N_s$  dans l'AsGa

$$N_s = D \cdot \frac{kT}{q} \sum_{n=1}^2 \log(1 + \exp(\frac{E_F - E_n}{kT})) \quad (\text{II-3})$$

Le calcul se déroule de la façon suivante :

A partir d'une profondeur du puits donnée  $V$ , et par convergence numérique la largeur du puits est déterminée telle que la charge interfaciale calculée à partir des niveaux  $E_0$  et  $E_1$  soit compatible avec celle donné par l'équation de poisson.

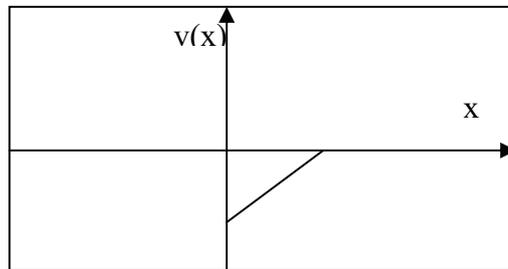
La charge interfaciale ainsi calculée satisfaisant l'équation de Poisson et la statistique particulière du gaz bidimensionnel sur l'ensemble du puits parabolique considéré.

**I-3 Approximation du puits triangulaire**

Dans cette approche approximative le puits de potentiel est considéré comme triangulaire infini (figure II-1) égale à [11] :

$$V(x) = \begin{cases} -F_s \cdot x & \dots\dots\dots \text{si } x > 0 \\ \infty & \dots\dots\dots \text{si } x < 0 \end{cases} \quad \text{(II-4)}$$

Où  $F_s$  est le champ électrique.



**Figure II-1** : puits de potentiel triangulaire

La résolution de l'équation de Schrödinger peut alors se mener analytiquement et donne :

$$E^i = \left( \frac{\hbar^2}{2m_e} \right)^{1/2} \left( \frac{2}{3} \cdot \pi \cdot q \cdot F_s \left( i + \frac{3}{4} \right) \right)^{3/2} \quad \text{(II-5)}$$

$$\psi^i(z) = A_i(z) \left[ \left( \frac{2 \cdot m_e \cdot q \cdot F_s}{\hbar^2} \right) \left( 3 - \frac{E^i}{q \cdot F_s} \right) \right] \quad \text{(II-6)}$$

Où  $A_i(z)$  est la fonction d'Airy.

Pour déterminer le champ électrique, l'énergie potentielle doit être linéarisée [21] telle que:

- l'énergie potentielle due à la charge de déplétion varie linéairement avec  $z$  au voisinage de l'interface
- l'énergie potentielle d'inversion est négligée si la charge de déplétion est plus importante que la charge d'inversion et dans ce cas l'énergie potentielle des électrons s'écrit sous la forme :

$$V(z) = e.Ez \quad \text{(II-7)}$$

Où  $E = e \cdot \frac{N_{dep}}{\epsilon_2}$  représente le champ électrique dans le semi-conducteur 2. Ce champ est

constant aux voisinages de l'interface dans la mesure où le potentiel varie linéairement.

- Si la charge d'inversion n'est pas négligeable devant la charge de déplétion on écrit l'énergie potentielle sous la forme approchée [11] :

$$V(z) = e.E_{eff}.z \quad \text{(II-8)}$$

Avec :

$$E_{eff} = e \cdot \left( \frac{N_{dep} + f.n}{\epsilon_2} \right)$$

$E_{eff}$  représente le champ électrique effective,  $F$  est un coefficient numérique prépondérant la participation des charges d'inversion.

L'approximation du puits triangulaire est très utilisée pour sa simplicité, le principal avantage de cette formulation est la loi particulièrement simple liant les valeurs des niveaux d'énergie avec le champ électrique, ce qui permet l'introduction de ces expressions dans la modélisation du composant [21].

#### I-4.Méthode variationnelle

Pour une approche variationnelle, FRANG et HOWARD ont utilisé la fonction d'onde suivante [21]:

$$\Psi_0 = \left(\frac{b^3}{2}\right)^{1/2} \cdot \exp^{-b.x/2} \quad (\text{II-9})$$

Cette formule a un seul paramètre à déterminer : b, il existe d'autre forme de  $\Psi_0$  qui peuvent être écrites telle que [4] :

$$\Psi_0 = \left(3 \cdot \frac{b^3}{2}\right)^{1/2} \cdot \exp^{-[(b.x)^{3/2}/2]} \quad (\text{II-10})$$

Mais pour des raisons évidentes de simplicité la première fonction d'onde est celle qui est utilisée dans la littérature.

Le paramètre b sera déterminé en minimisant l'énergie totale du système pour des valeurs données des densités de charge de déplétion et de charge d'inversion.

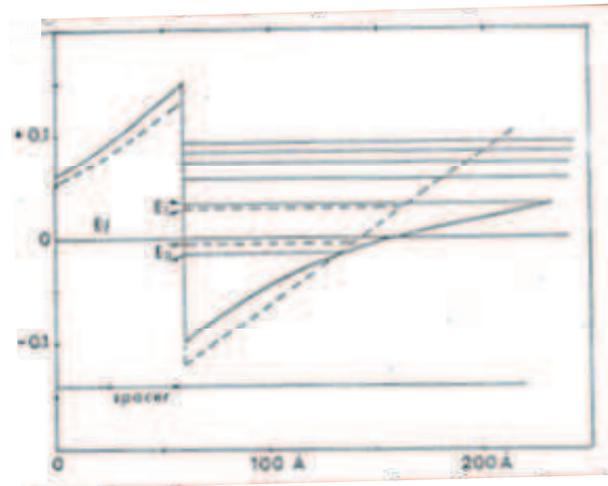
Si on néglige le potentiel image et on minimise l'énergie totale, b sera donc :

$$b = \left[ \frac{12 \cdot m_e \cdot e^2}{\hbar^2 \cdot \epsilon_2} \left( N_{dep} + \frac{1}{3} \cdot N_s \right) \right]^{1/3} \quad (\text{II-1})$$

Cette méthode donne de bons résultats à basse température lorsque le nombre des niveaux occupés est faible (1 ou 2).

## II- Calcul self consistant

Les méthodes précédentes, bien qu'elles soient simples d'utilisation, ont le défaut du manque de précision surtout lorsqu'on cherche à connaître l'allure exacte du potentiel ainsi que la densité du gaz ou même la différence d'énergie entre les différents niveaux. Pour cela il y a qu'une seule méthode celle qui consiste à résoudre le système des deux équations de Poisson -Schrödinger par un calcul self consistant [21].



**Figure II-1** : comparaison entre les résultats obtenus par la méthode du potentiel triangulaire (-----) et la méthode du calcul self consistant (——) [22]

La figure (II-1) illustre une comparaison entre les résultats obtenus par la méthode du potentiel triangulaire et une méthode du calcul self consistant pour une hétérojonction en GaAsAl/GaAs à 300k.

On remarque l'écart entre les valeurs de l'énergie des deux premiers sous bande ainsi que celle du fond du puits, on voit aussi l'important écart entre les deux potentiels pour les grandes valeurs de  $z$  [22].

Le principe de la méthode self consistant est basée sur un puits de potentiel initial le plus souvent triangulaire pour lequel on calcul les niveaux d'énergie et les fonctions d'onde on résolvant l'équation de Schrödinger, avec ces données on résout l'équation de Poisson pour obtenir un nouveau potentiel pour lequel on résout une nouvelle fois l'équation de Schrödinger et ainsi de suite. On mène ce processus itératif jusqu'à ce que la différence entre le potentiel issus de deux itérations successives soit inférieur à une certain valeur (1mev, 1 $\mu$ ev).

### II-1 Modèle de F.Stern

La résolution numérique self consistant de F. Stern du système formé par les équation de Schrödinger et Poisson pour une couche d'inversion de l'hétérojonction Si(p)/SiO<sub>2</sub> est basée sur trois approximation majeures [21] :

- ↪ la validité de l'approximation de la masse effective
- ↪ la fonction d'onde enveloppe s'annule à l'interface
- ↪ les états d'interface sont négligés et leurs effets et les effets d'autres charges pouvant se trouver dans SiO<sub>2</sub> près de l'interface sont remplacés par un champ électrique équivalent.

Le potentiel image étant fonction de la différence des constantes diélectriques des deux matériaux constituant l'hétérojonction, il sera donc négligé dans le cas de l'hétérojonction Si(p)/SiO<sub>2</sub>.

Le système à résoudre est représenté par [21] :

$$\begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2\Psi^i}{dz^2} - qV(z)\Psi^i(z) = E^i\Psi^i(z) \\ \frac{d^2V(z)}{dz^2} = -\frac{[\rho_{dep} - q\sum n_i|\Psi|^2]}{\epsilon} \end{cases} \quad (\text{II-12})$$

Les niveaux d'énergie des états excités sont obtenus soit à partir de la méthode variationnelle soit à partir de l'hypothèse du potentiel triangulaire.

## II-2. Modele de A.Cappy

Pour la résolution numérique self consistant du system formé par les équation de Schrödinger et Poisson pour une couche d'accumulation de l'hétérojonction GaAsAl/GaAs A.Cappy a repris la philosophie générale de F. Stern pour la modélisation des couche d'inversion dans le transistor MOS. Cette approche est basée sur les approximations suivantes [22] :

- ↪ la validité de l'approximation de la masse effective
- ↪ la différence des masses effectives dans les deux semi-conducteurs est négligée.
- ↪ Condition aux limite impose que  $\psi(-w) = \psi(+w) = 0$
- ↪ La fonction d'onde est définie comme un produit d'une fonction enveloppe et un terme oscillant :

$$\psi^i(x, y, z) = \psi^i(z) \cdot \exp(i.k_x \cdot x + i.k_y \cdot y)$$

Où  $k_x, k_y$  représentent les vecteurs d'onde dans la direction parallèle à l'hétérojonction

- ↳ L'énergie potentielle correspondant au bas de la bande de conduction s'écrit sous la forme  $V_0(z) = V(z) - \Delta E_c H(z - z_0)$  où H représente la fonction échelon.

Deux grandeurs sont imposées dans ce modèle self consistant de Cappy [22] :

- La densité superficielle d'électrons  $N_s$  dépend des caractéristiques technologiques et physiques de l'hétérojonction (température, dopage spacer...)
- La position du niveau de Fermi :  $E_F=0$

A partir d'une solution initial  $V_0(z)$  donnée, les niveaux d'énergie et les fonctions d'onde sont calculés ainsi que la valeur du niveau de fermi ; l'intégration de l'équation de Poisson fournit alors une nouvelle valeur du potentiel .Tant que la valeur du niveau de Fermi est différente de zéro une nouvelle itération est effectué en utilisant le nouveau potentiel comme solution initial.

### II-3.Modèle polynomiale d'ordre trois

#### II-3.1 Hypothèses de calculs

La résolution self consistant du système d'équation Schrödinger - Poisson [23] basée sur les approximations majeures suivantes [23] :

- ↳ la validité de l'approximation de la masse effective.
- ↳ la fonction d'onde s'annule à  $\infty$ .
- ↳ le niveau de Fermi est pris comme origine des énergies.
- ↳ Le potentiel à l'interface est approximé par une fonction polynomiale du 3<sup>eme</sup> degré

### II-3.2.Methode de calcul

Pour la résolution du système d'équation Schrödinger –Poisson, la méthode utilisée est self consistante avec un paramètre de relaxation pour assurer la convergence du processus itératif.

Cette résolution a été faite par la méthode de Galerkin ou le potentiel est approximé à l'aide de fonction de base ce qui réduit considérablement les calculs [23].

Pour l'équation de Schrödinger sa résolution est divisée en deux parties qui sont étroitement liées :

- la détermination de la fonction d'onde
- la détermination de l'énergie.

La fonction d'onde est exprimée à l'aide de fonction de base dont les coefficients sont déterminés par la méthode de Galerkin [23] alors que l'énergie est calculée à partir d'une équation qui exprime la condition que la fonction d'onde s'annule à la limite de l'hétérojonction.

### II-4.Modele polynomiale d'ordre trois pour un transistor pseudomorphique (PHEMT)

#### II-4.1 Hypothèse de calcul

La résolution self consistant du système d'équation Schrödinger - Poisson [24] est basée sur les approximations majeures suivantes [24] :

- ↳ la validité de l'approximation de la masse effective.
- ↳ la fonction d'onde s'annule à  $\infty$ .
- ↳ le niveau de Fermi est pris comme origine des énergies.
- ↳ Le potentiel à l'interface est approximé par une fonction polynomiale du 3<sup>eme</sup> degré

Pour ce modèle le domaine d'étude (hétérojonction quantique) est limité et pour cela il est partagé en plusieurs régions suivant la valeur de la densité de charge.

### II-4.2 Méthode de calcul

La résolution numérique self consistant du système formé par les équations de Schrödinger et Poisson pour un transistor pseudomorphique a été menée par une méthode self consistant basé sur la projection sur les bases de Galerkin des différents grandeurs inconnus ce qui a facilité la discrétisation et par conséquent la numérisation du modèle [24]

### II-5 Résolution par fonction d’Airy

La résolution du système formé par les équation de Schrödinger et Poisson basée sur les fonctions d’Airy est une méthode autocohérente de type analytique numérique où l’équation de Schrödinger est résolue analytiquement contrairement à l’équation de Poisson qui a été résolu par une méthode numérique dont les hypothèse de calcul sont les suivants [25] :

- ↪ la validité de l’approximation de la masse effective.
- ↪ la fonction d’onde s’annule à  $\infty$ .
- ↪ le niveau de Fermi est pris comme origine des énergies.
- ↪ La résolution de l’équation de Schrödinger se présente sous la forme d’une fonction d’Airy
- ↪ potentiel est supposé triangulaire

La résolution de l’équation de Schrödinger est faite par des fonctions d’Airy où le potentiel est supposé triangulaire ce qui permet une résolution analytique. On obtient la fonction d’onde associée et des états liés correspondant. Cette fonction obtenue est numérique et l’énergie potentielle est déterminée à partir des conditions aux limites sur la fonction d’onde qui doit s’annuler à l’infini ce qui correspondrait à l’existence des murs électrique [25].

Donc la résolution de l’équation de Schrödinger est faite par des fonctions d’Airy, où cette résolution est typiquement analytique contrairement à la résolution de l’équation de Poisson qui est une résolution numérique.

## II-6 Modèle polynomiale d'ordre deux [26]

### II-6-1 Hypothèse de calcul

La résolution du système non linéaire Poisson Schrödinger pour ce modèle est de type approximation dont les approximations majeures sont :

↪ la validité de l'approximation de la masse effective.

↪ la fonction d'onde s'annule à  $\infty$ .

↪ Le potentiel est approximé par un polynôme d'ordre deux

↪  $n_{2DEG}(z) = \alpha(z - z_0)$  où  $\alpha = \frac{\mu_e \cdot a}{qD_e} n_{2DEG}(0)$ ,  $z_0 = \frac{qD_e}{\mu_e a}$ ,  $a$  est une constante

### II-6-1 Méthode de calcul

Dans ce modèle le potentiel est approximé par un polynôme d'ordre deux de la forme :

$$V(z) = az + bz^2$$

Le terme linéaire est injecté dans l'équation de Schrödinger pour calculer la fonction d'onde et les énergies électroniques qui sont donnés par :

$$\psi(z) = \phi(z) \cdot e^{-iz} \quad (\text{II-13})$$

$$E^i = 0.997 \cdot 10^{-6} \cdot n_{2DEG}^{3/2} (i + 0.75)^{3/2} \quad (\text{II-14})$$

Le terme quadratique est traité comme une perturbation indépendante du temps qui nous permet de corriger l'énergie électronique.

Ce qui concerne notre travail nous avons choisie une résolution du système d'équation Schrödinger –Poisson où on n'utilise à priori aucune forme donnée au potentiel et/ou de fonction d'onde, cette méthode dite intégrale est basée sur l'utilisation de la fonction de Green et la méthode des moments.

**Conclusion**

La résolution du système d'équation Poisson - Schrödinger a été menée soit par des méthodes approximatives soit par des méthodes de type self consistant.

Les méthodes approximatives sont simples lorsque les utilise mais ont le défaut du manque de précision surtout lorsque on cherche à connaître l'allure exacte du potentiel ainsi que la densité du gaz ou même la différence d'énergie entre les différents niveaux.

Par contre le calcul self consistant est le plus précis et peut être appliqué dans toutes les circonstances, pour cela on a choisi le calcul self consistant pour notre étude.

# Chapitre III

## **Modélisation d'une structure HEMT par la méthode integrale**

## Introduction

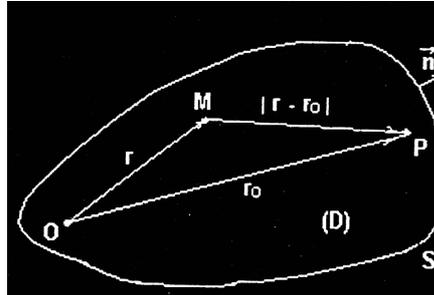
La résolution du système auto cohérent Schrödinger poisson, est réalisée sous forme intégrale à l'aide de fonctions spéciales : fonction de Green, dont les conditions aux limites correspondraient à celles du potentiel.

La numérisation du système sera faite à l'aide de méthodes projectives, méthode des moments utilisant les fonctions de base égales aux fonctions test soit la méthode de Galerkin.

Dans ce deuxième chapitre on va présenter premièrement les fonctions de Green et la méthode des moments (méthode intégrale) et comme un deuxième point : l'application de cette méthode intégrale à une structure HEMT ainsi que la méthode de résolution choisie.

### I. Les fonctions de Green

Soit  $V$  le volume d'un domaine  $(D)$ , borné et régulier de l'espace de trois (ou deux) dimensions,  $S$  sa surface continue et  $\vec{n}$  le vecteur normal extérieur unitaire à la surface  $S$  [27, 28,29]



**Figure III-1** : points : origine(o), observation(M), source(p). (S) surface du bord du domaine (D) et  $\vec{n}$  vecteur normal extérieur

Soit  $\varphi$  et  $\Psi$  deux fonctions définies continues ayant des dérivées continues jusqu'au second ordre dans  $(V \cup S)$ .

La fonction de Green  $G(M, P)$  est une fonction de deux points [27, 28,29] :

- point M : appelé point d'observation (ou point influencé)
- point P : appelé point source (ou point influençant).

Les fonctions de Green associées à une équation aux dérivées partielles peuvent être définies ou calculées, leurs formes dépendent de la fonction physique à étudier dans notre cas le potentiel, elles dépendent aussi du domaine de définition et des conditions aux limites.

L'interprétation mathématique au sens de distribution de ces conditions est [27, 28, 29] :

$$\Delta_M G(M, P) = \delta_p(r - r_0) \quad (\text{III-1})$$

## II. Méthode des moments et méthode de Galerkin [28,30]

La méthode des moments peut être définie comme une procédure générale à transformer une équation fonctionnelle en une équation matricielle.

Etant donné une équation inhomogène écrite sous la forme réduite suivante :

$$L(f) = g \quad (\text{III-2})$$

Où :

- L est un opérateur linéaire.
- f une fonction inconnue.
- g une fonction connue

Une équation fonctionnelle du type précédent peut être transformée par la méthode des moments en une équation matricielle.

La fonction inconnue f de l'équation (III-2) est supposée de la forme linéaire suivante :

$$f = \sum_{i=1}^n \alpha_i \cdot f_i \quad (\text{III-3})$$

Les  $\alpha_i$  et  $f_i$ ,  $i \in \mathbb{N}$ , sont respectivement des constantes réelles et des fonctions d'une base complète.

L'entier n du développement en série précédent de la fonction f de l'équation (III-3) est dicté par la précision et par conséquent par le coût du calcul numérique.

En tenant compte de l'égalité (III-3), l'équation (III-2) peut être écrite sous la forme suivante :

$$L\left(\sum_{i=1}^n \alpha_i \cdot f_i\right) = g \quad , \quad \Longrightarrow \quad \sum_{i=1}^n \alpha_i \cdot L(f_i) = g \quad (\text{III-4})$$

On choisit :

- Une base de fonctions test  $w_j$ ,  $j=1 \dots m$ .
- Un produit scalaire approprié au problème.



### III. Application de la méthode intégrale à une structure HEMT

#### III-1-problème à résoudre

Le potentiel à l'interface d'une heterostructure vérifie simultanément l'équation de Schrödinger et de Poisson auto cohérent. C'est pourquoi nous nous proposons de résoudre de façon rigoureuse le système d'équations Schrödinger - Poisson suivant :

$$\begin{cases} Es : \frac{-\hbar^2}{2m_e} \Delta \Psi^i(z) + V(z)\Psi^i(z) = E^i \Psi^i(z) \\ Ep : V(z) + \frac{\rho(z)}{\epsilon} = 0 \end{cases} \quad \text{(III-8)}$$

$\Delta$  : est l'opérateur le Laplacien

$m_e$  : masse effective d'électron

$\Psi^i(z)$  : Fonction d'onde associée au niveau d'énergie  $E^i$ .

$V(z)$  : le potentiel

$\hbar$  : Constante de Planck

$\rho(z)$  : Représente la densité des charges des électrons libres elle est donnée par [31]:

$$\rho(z) = \begin{cases} qN_D - q \sum n(E^i) |\Psi^i(z)|^2 \dots\dots\dots \text{dans GaAsAl} \\ -qN_A - q \sum n(E^i) |\Psi^i(z)|^2 \dots\dots\dots \text{dans GaAs} \end{cases}$$

$q$  : représente la charge d'électron.

$qN_D$  et  $-qN_A$  : représente les charges fixes (  $N_D$  : dopage en donneurs  $N_A$  :dopage en )  
accepteurs

$q \sum n(E^i) |\Psi^i(z)|^2$  : Représente les charges mobiles avec :

$$|\Psi^i(z)|^2 = \sum_{m,n} \alpha_m^i \alpha_n^i \left[ \frac{1}{2w} \left( \frac{\cos((m-n)\pi(x+w))}{2w} - \frac{\cos((m+n)\pi(x+w))}{2w} \right) \right]$$

$n(E^i)$  : représente la densité (au niveau de la sous bande  $i$ ) des électrons obtenue par la distribution de fermi Dirac elle est donnée par :

$$n(E^i) = \left( \frac{m_e k_B T}{\pi \hbar^2} \right) \log \left( 1 + \exp \frac{E_F - E^i}{k_B T} \right)$$

$E_F$ : énergie niveau de Fermi.

$K_B$ : constante de boltzman

$T$ : température absolue

$i$ : nombre d'état lié possible.

La fonction d'onde est décomposée en une série de fonction de base tel que [31] :

$$\Psi(z) = \sum_n \alpha_n \varphi_n(z) \quad \text{(III-9)}$$

$$\varphi_n(z) = \frac{1}{\sqrt{w}} \sin\left(\frac{n\pi}{2w}(x+w)\right) \quad \text{(III-10)}$$

Le potentiel et la fonction d'onde s'annulent aux mûrs électriques positionnés à  $\pm w$ .

### III-2-calcul du potentiel et de la fonction d'onde par la méthode intégrale

La résolution de l'équation de Schrödinger ne concerne que les états liés, pour simplifier on considérera un état lié unique, d'où :

$$\begin{cases} Es: \frac{-\hbar^2}{2m_e} \Delta \Psi(z) + V(z) \Psi(z) = E \Psi(z) \\ Ep: V(z) + \frac{\rho(z)}{\epsilon} = 0 \end{cases} \quad \text{(III-11)}$$

L'application de la fonction de Green donne à l'équation de Poisson la forme intégrale suivante [31]:

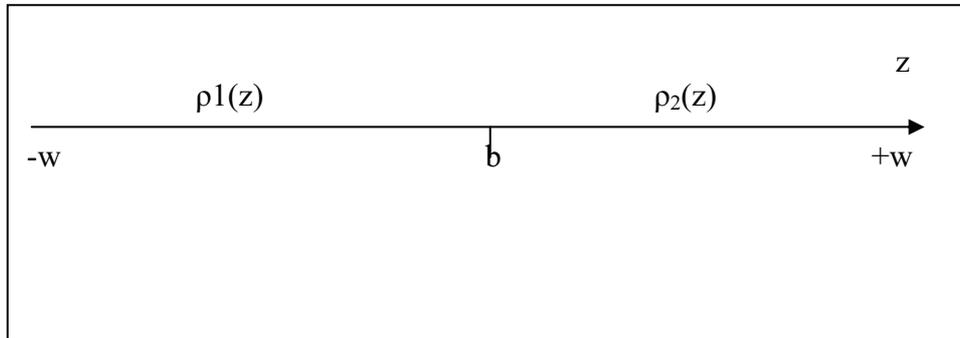
$$V(z) = \frac{1}{\epsilon} \int_{\Gamma} G(z/z_0) \rho(z_0) dz_0 \quad \text{(III-12)}$$

Et par conséquent l'équation de Schrödinger devient [31] :

$$\frac{-\hbar^2}{2m_e} \Delta \Psi(z) + \frac{1}{\epsilon} \int_{\Gamma} G(z/z_0) \rho(z_0) dz_0 \Psi(z) = E \Psi(z) \quad \text{(III-13)}$$

Pour une hétéro structure GaAsAl/GaAs l'équation de poisson s'écrit [31]:

$$V(z) = V_1(z) = \frac{1}{\epsilon} \int_{-w}^{+w} G(z/z_0) \rho(z_0) dz_0 \quad (\text{III-14})$$



**Figure II-2** : hétérojonction GaAsAl/GaAs : b est pris comme origine des z

Les murs électriques ( $\pm w$ )  $\rho_1$  et  $\rho_2$  différentes densités de charge

- Pour  $-w < z < b$  (figure II-) on a :

$$V(z) = V_1(z) = \frac{1}{\epsilon} \left[ \int_{-w}^z \rho_1(z) G^+(z/z_0) dz_0 + \int_z^b \rho_1(z_0) G^-(z/z_0) dz_0 + \int_b^{+w} \rho_2(z_0) G^-(z/z_0) dz_0 \right] \quad (\text{III-15})$$

$$V(z) = \frac{1}{\epsilon} \left\{ -qN_D \frac{z^2}{2} + C_1 z + C_2 - \frac{-qn(E)}{2w} \sum_{m,n} \alpha_m \alpha_n [F_{MN} \cdot Z + fx + G] \right\} \quad (\text{III-16})$$

- Pour  $b < z < w$  on a

$$V(z) = V_2(z) = \frac{1}{\epsilon} \int_{-w}^{+w} G(z/z_0) \rho(z_0) dz_0 \quad (\text{III-17})$$

$$V(z) = V_2(z) = \frac{1}{\epsilon} \left[ \int_{-w}^b \rho_1(z) G^+(z/z_0) dz_0 + \int_b^z \rho_1(z_0) G^+(z/z_0) dz_0 + \int_z^{+w} \rho_2(z_0) G^-(z/z_0) dz_0 \right] \quad (\text{III-18})$$

$$V(z) = \frac{1}{\epsilon} \left\{ qN_A \frac{z^2}{2} + C_3 z + C_4 - \frac{qn(E)}{2w} \sum_{m,n} \alpha_m \alpha_n [F_{MN} \cdot Z + fx + G] \right\} \quad (\text{III-19})$$

Les coefficients ( $C_1, C_2, C_3, C_4, FMN, fx, G$ ) sont donnés par :

$$C_1 = qN_D \left( \frac{-b^2}{4w} + \frac{b}{2} - \frac{w}{4} \right) - qN_A \left( \frac{b^2}{4w} - \frac{b}{2} + \frac{w}{4} \right)$$

$$C_2 = qN_D \left( \frac{-b^2}{4} + \frac{w^2}{4} + \frac{bw}{2} \right) - qN_A \left( \frac{b^2}{4} - \frac{w^2}{4} - \frac{bw}{2} \right)$$

$$C_3 = qN_D \left( \frac{-b^2}{4w} - \frac{w}{4} - \frac{b}{2} \right) - qN_A \left( \frac{b^2}{4w} + \frac{b}{2} + \frac{w}{4} \right)$$

$$C_4 = qN_D \left( \frac{b^2}{4} + \frac{bw}{2} + \frac{w^2}{4} \right) - qN_A \left( -\frac{b^2}{4} - \frac{bw}{2} + \frac{w^2}{4} \right)$$

$$FMN = (CX2J - CX1J) + C_5$$

$$fx = (w-1).(CX2J - CX1J) + CX4J - CX3J$$

$$G = 0.5.(CWM3J - CWM4J + CW3J - CW4J)$$

Avec :

$$CWM3J = \left( \frac{2w}{((n+m).\pi)} \right)^2$$

$$CWM4J = \left( \frac{2w}{((m-n).\pi)} \right)^2$$

$$CW3J = \left( \left( \frac{2w}{((m+n).\pi)} \right)^2 \right) \cdot \cos((m+n).\pi)$$

$$CW4J = \left( \left( \frac{2w}{((m-n).\pi)} \right)^2 \right) \cdot \cos((m-n).\pi)$$

$$CX1J = \left( \frac{2w}{((m+n).\pi)} \right) \sin((m+n).\pi.(z+w)/(2w))$$

$$CX2J = \left( \frac{2w}{((m-n).\pi)} \right) \sin((m-n).\pi.(z+w)/(2w))$$

$$CX3J = \left( \left( \frac{2w}{((m+n).\pi)} \right)^2 \right) \cos((m+n).\pi.(z+w)/(2w))$$

$$CX4J = \left( \left( \frac{2w}{((m-n).\pi)} \right)^2 \right) \cdot \cos((m-n).\pi.(z+w)/(2w))$$

$$C_5 = (0.5/w).(CWM4J - CWM3J + CW3J - CW4J)$$

n et m sont des nombre entiers  $\leq N$ , N représente le nombre des fonction de base choisie pour développer la fonction  $\Psi(z)$  dans notre cas on a  $n \neq m$ :

### III-3-détermination des alfa

En tenant compte des équations(III-13 ,16,15).et l'expression de  $v(z)$ nous aurons un système d'équation qui ne dépend que des coefficient  $\alpha_m$  ,l'énergie  $E$  et du nombre de fonction de base  $N$ (choisie)pour développer  $\Psi(z)$  .

$$\left\{ \begin{array}{l} Es : \frac{-\hbar^2}{2m_e} \Delta \Psi(z) + V(z) \Psi(z) = E \Psi(z) \\ v(x) = \begin{cases} v_1 \dots \dots \text{pour } -w < z < b \\ v_2 \dots \dots \dots \text{pour } b < z < +w \end{cases} \\ \Psi(z) = \sum_n^N \alpha_n \varphi_n(z) \\ \Delta \Psi(z) = -\left(\frac{n\pi}{2w}\right)^2 \Psi(z) \end{array} \right.$$

Ce qui implique que l'équation de Schrödinger devient :

$$\left(\frac{-\hbar^2}{2m_e}\right) \left(\frac{-n\pi}{2w}\right) \Psi(z) + V(z) \cdot \Psi(z) = E \Psi(z) \quad \text{(III-20)}$$

$$\sum_n \left[ \left(\frac{\hbar^2}{2m_e}\right) \left(\frac{n\pi}{2w}\right)^2 \alpha_n |\varphi_n\rangle + V(x) \cdot \alpha_n |\varphi_n\rangle \right] = \sum_n E \alpha_n |\varphi_n\rangle \quad \text{(III-21)}$$

On multiplie les deux membres par  $\langle \varphi_n |$  et après la simplification nous aurons :

$$\sum_{n,m}^N [H_{m,n}(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_N)] \alpha_n = E \sum_{m=n}^N \alpha_n \cdot \delta_{mn} \quad \text{(III-23)}$$

Où  $H$  représente la matrice Hamiltonienne dont les éléments sont donnés par :

$$H_{m,n} = V_{m,n} + \left(\frac{\hbar^2}{2m_e}\right) \cdot \left(\frac{n\pi}{2w}\right) \quad \text{(III-24)}$$

Avec :

$$V_{mm} = \int_{-w}^{+w} \varphi_n(z) \cdot \varphi_m(z) \cdot V(z) dz$$

La résolution d'un système non linéaire (III-19) peut être obtenue par un choix d'une méthode numérique convenable

### IV- Méthodes de résolution

la résolution autocohérente du système d'équations Schrödinger –poisson où en supposant l'existence d'un seul état lié dans le puit de potentiel est effectué par des méthodes numérique convenablement choisies qui ont le but de déterminer le profil de potentiel et la fonction d'onde associée à l'état lié .

On s'intéresse à la résolution numérique du système d'équation non linéaire suivant :

$$\begin{cases} f_1(\alpha_1 \dots \alpha_n) = 0 \\ f_2(\alpha_1 \dots \alpha_n) = 0 \\ \vdots \\ f_m(\alpha_1 \dots \alpha_n) = 0 \end{cases} \tag{III-25}$$

Où :  $n=m$

Avec :

$$\begin{cases} f_1(\alpha_1 \dots \alpha_n) = \sum_p^n H_{pq} \cdot \alpha_p - E \cdot \alpha_1 \\ f_2(\alpha_1 \dots \alpha_n) = \sum_p^n H_{pq} \cdot \alpha_p - E \cdot \alpha_2 \\ \vdots \\ f_q(\alpha_1 \dots \alpha_n) = \sum_p^n H_{pq} \cdot \alpha_p - E \cdot \alpha_q \\ \vdots \\ f_n(\alpha_1 \dots \alpha_n) = \sum_p^n H_{pq} \cdot \alpha_p - E \cdot \alpha_n \end{cases} \tag{III-26}$$

Les  $f_q$  sont les fonctions réelles non linéaire des variables réelle  $\alpha_1 \dots \alpha_n$ .

On peut noter le système sous forme matricielle de type :

$$f(\alpha) = 0 \tag{III-27}$$

Où :

$\alpha = (\alpha_1 \dots \alpha_n) \quad \alpha \in \mathbb{R}^n$

$0$  : c'est le vecteur nul de  $\mathbb{R}^n$

$f$  : l'opérateur non linéaire défini par l'ensemble  $(f_1 \dots f_n)$ .

Le problème est bien entendu de trouver un ensemble de  $n$  valeurs réelles

$\alpha = [\alpha_1^* \dots \alpha_n^*]$  Vérifiant simultanément les  $n$  équation.

Dans ce travail la résolution du système est effectuée par la méthode de Newton de type quasi par différence finie.

**VI.1 Principe de la méthode de Newton**

Notons  $\alpha^* = [\alpha_1^* \dots \alpha_n^*]$  est le vecteur solution du système non linéaire (III-26) et si chaque fonction  $f_q$  est continue et différentiable alors par le développement en série de Taylor dans le voisinage d'un estimé  $\alpha^{(k)}$  à la k<sup>ème</sup> itération on obtient [32, 33, 34] :

$$f_q^{(k)}(\alpha^*) = f_q^{(k)}(\alpha^{(k)}) + (\alpha^* - \alpha^{(k)}) \tag{III-28}$$

$$f_q^{(k)}(\alpha^*) = f_q^{(k)}(\alpha^{(k)}) + \sum_p^n \frac{\partial f_q^{(k)}(\alpha^{(k)})}{\partial \alpha_j^{(k)}} (\alpha^* - \alpha^{(k)}) \Big|_{\alpha=\alpha^{(k)}} + \frac{1}{2!} \dots \tag{III-29}$$

Avec :  $p=1 \dots n$

Si  $\alpha^{(k)}$  est un estimé proche de  $\alpha^*$  les termes puissance 2 sont négligeables ainsi que tous les termes de degré supérieurs, le système s'écrit donc :

$$\sum_p^n \frac{\partial f_q^{(k)}(\alpha^{(k)})}{\partial \alpha_j^{(k)}} (\alpha^* - \alpha^{(k)}) \Big|_{\alpha=\alpha^{(k)}} = -f_p^{(k)}(\alpha^{(k)}) \tag{III-30}$$

On définit :

- La matrice des dérivée première tel que :

$$d f_{pq}^{(k)} = \sum_p^n \frac{\partial f_q^{(k)}(\alpha^{(k)})}{\partial \alpha_j^{(k)}} (\alpha^* - \alpha^{(k)}) \Big|_{\alpha=\alpha^{(k)}} \tag{III-31}$$

Avec

$p=1 \dots n$

$q=1 \dots n$

- Le vecteur  $\Delta \alpha^{(k)}$  donné par :

$$\Delta \alpha^{(k)} = (\alpha_p^* - \alpha_p^{(k)}) \tag{III-32}$$

- Le vecteur  $F^{(k)}$  tel que :

$$F = -f_p^{(k)}(\alpha) \quad (\text{III-34})$$

Alors la résolution du (III-26) s'écrit :

$$df \cdot \Delta \alpha = F \quad (\text{III-35})$$

Si la matrice [df] et [F] sont connues le système et un système linéaire dont les inconnues sont les  $\Delta \alpha^{(k)}$ . Dans ce travail ce système est résolu par la méthode de Gauss .

La matrice des dérivées partielles peut être calculée numériquement par l'introduction d'une petite perturbation  $\delta$  choisie (doit être très petite). la dérivée partielle de la fonction  $f_q(\alpha)$  suivant la variable  $\alpha_p$  sera donc [32, 33, 34] :

$$\frac{\partial f_q(\alpha)}{\partial \alpha_p} = \frac{f_q(\alpha_1, \dots, \alpha_p + \delta, \dots, \alpha_n) - f_q(\alpha_1, \dots, \alpha_p, \dots, \alpha_n)}{\delta} \quad (\text{III-36})$$

On peut déterminer un meilleur estimé  $\alpha^{(k+1)}$  de  $\alpha^{(*)}$  par :

$$\alpha^{(k+1)} = \alpha^{(k)} + \Delta \alpha^{(k)} \quad (\text{III-37})$$

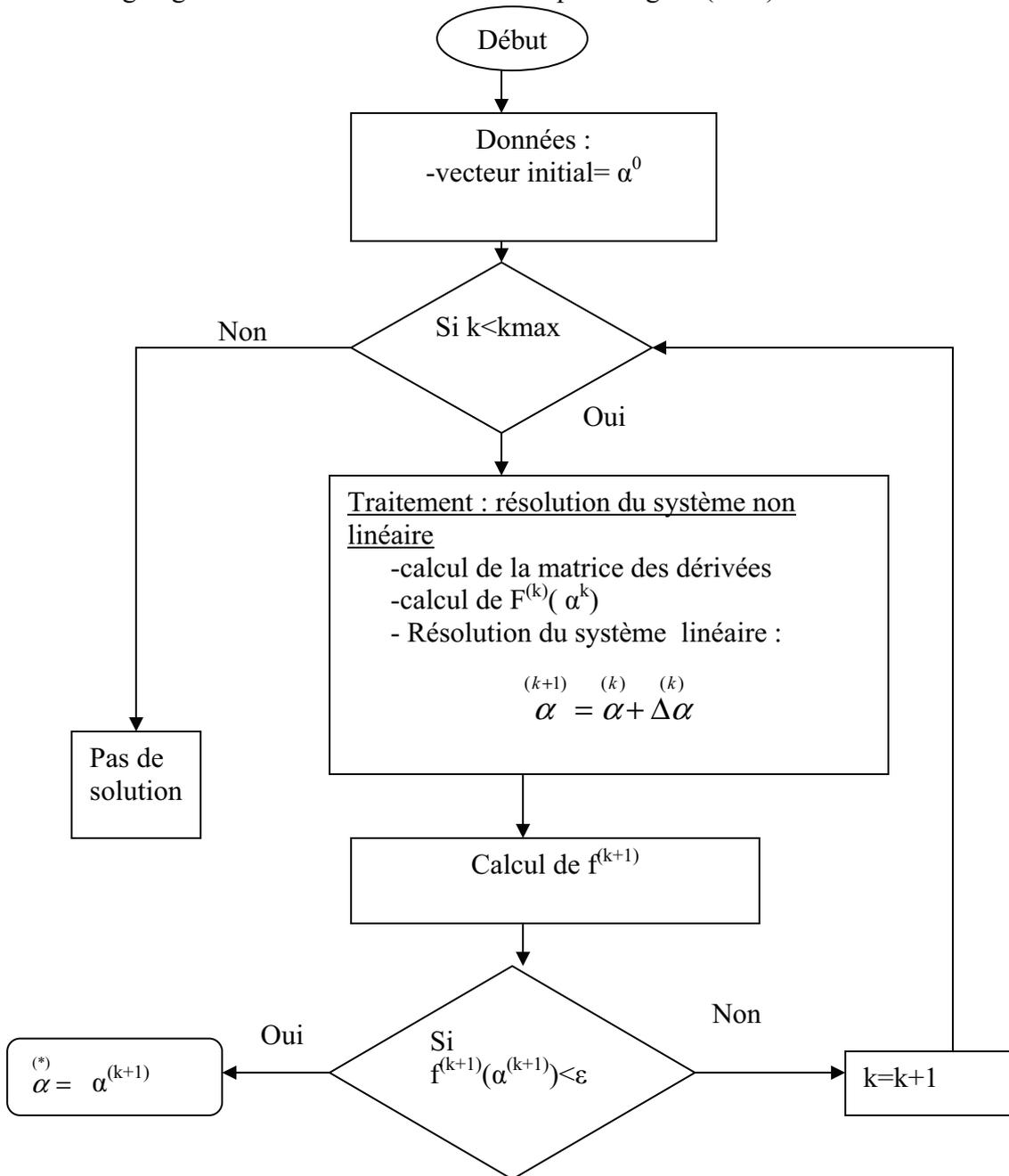
On arrête le processus itératif par le test :

$$\left| f_q(\alpha^{(k+1)}) \right| < \varepsilon \quad (\text{III-38})$$

Comme nous avons vu la méthode choisie utilise les idées de la méthode de Newton où elle exige le calcul de la dérivée et puisque il existe de nombreux cas où la fonction « f » n'est pas spécifiée par des formules mais par une expérience ou une exécution d'un logiciel [32], l'expression analytique de la dérivée est indisponible mais elle peut être calculée par la définition de la dérivée et dans ce cas là la méthode est dite méthode quasi Newton ou encore méthode de Newton de type quasi. Le calcul de la dérivée nécessite une valeur de perturbation «  $\delta$  » et si cette valeur est constante pour toute variable la méthode est dite : méthode de Newton de type quasi par différence finie [32].

### VI.1 Organigramme de la méthode

L'organigramme de la méthode est donné par la figure (III-2) :



**Figure III-2** : organigramme de la méthode de newton type quasi par différence finie (processus itératif)

## II- Résolution du système Schrödinger –poisson

Le calcul self consistant pour résoudre le système globalement non linéaire poisson – Schrödinger est représenté dans l'organigramme suivant :

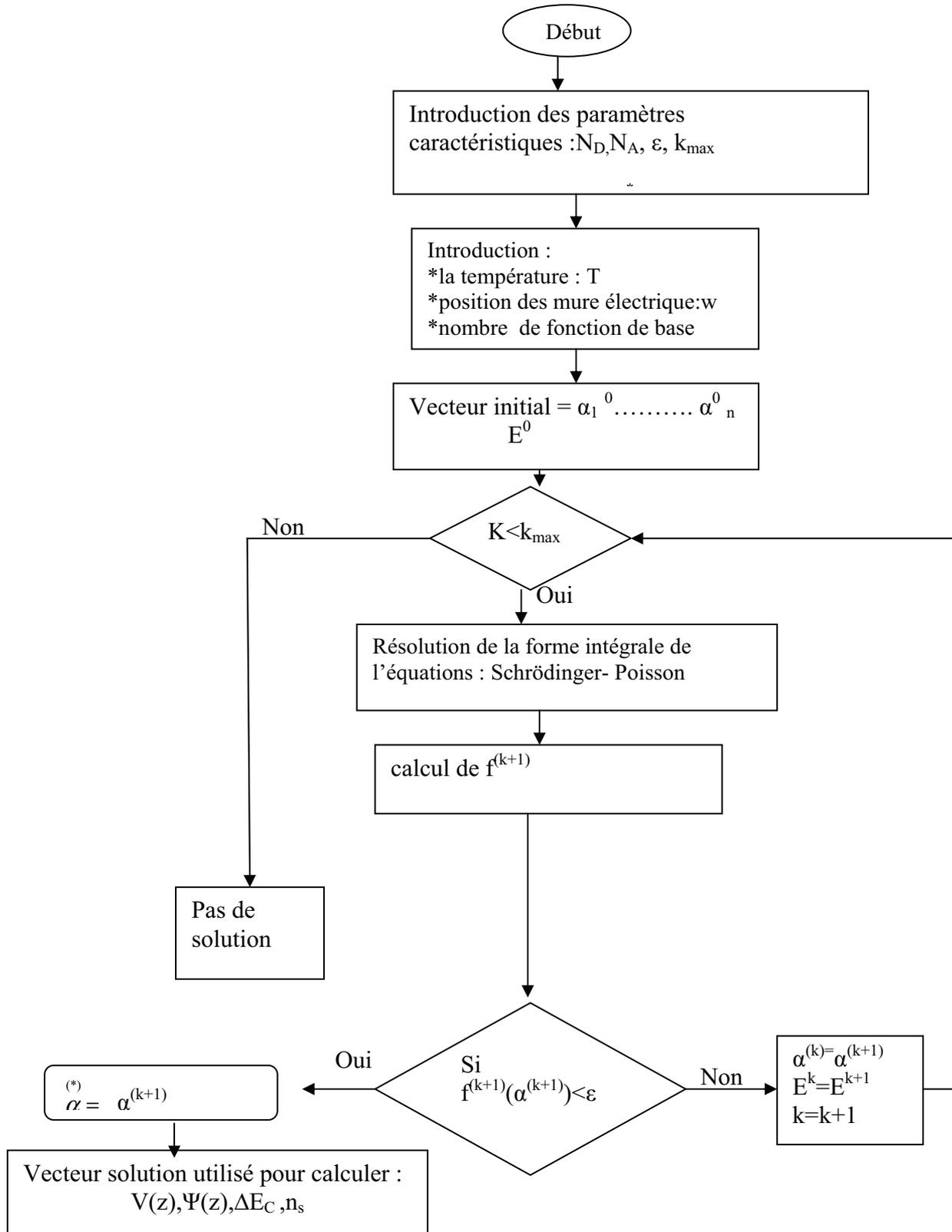


Figure III-3 : organigramme générale de la procédure numérique

**Conclusion**

La résolution des équations couplées Schrödinger –Poisson a été menée par une méthode self consistant dans un système globalement non linéaire.

Cette méthode utilisée pour la détermination de l'énergie potentielle des électrons confinés à l'interface nécessite l'utilisation de la fonction de Green bien choisie et la méthode des moments.

La projection sur des base de Galerkin des différentes grandeurs inconnues a facilité la discrétisation et par conséquent la numérisation de l'étude.

Le système étant globalement non linéaire sa résolution numérique était itérative où nous avons utilisé la méthode de newton de type quasi par différence finie pour le résoudre, une étude de convergence est donc nécessaire.

# Chapitre IV

## *Résultats et étude de convergence*

## Introduction

Dans ce chapitre on va présenter les résultats de notre modélisation concernant l'hétérojonction GaAsAl/GaAs.

Les résultats les plus importants étant l'énergie potentielle, la fonction d'onde et la densité surfacique. Puis enfin on va s'intéresser à l'influence de certains paramètres ( $N_{d,eff}, N_d, N_a, x$ ) sur la densité surfacique d'électrons et sur l'offset  $\Delta E_C$ . Ces deux grandeurs sont très importantes vu leur influence sur la mobilité des électrons du gaz bidimensionnel.

### I- Propriétés de la structure modélisée

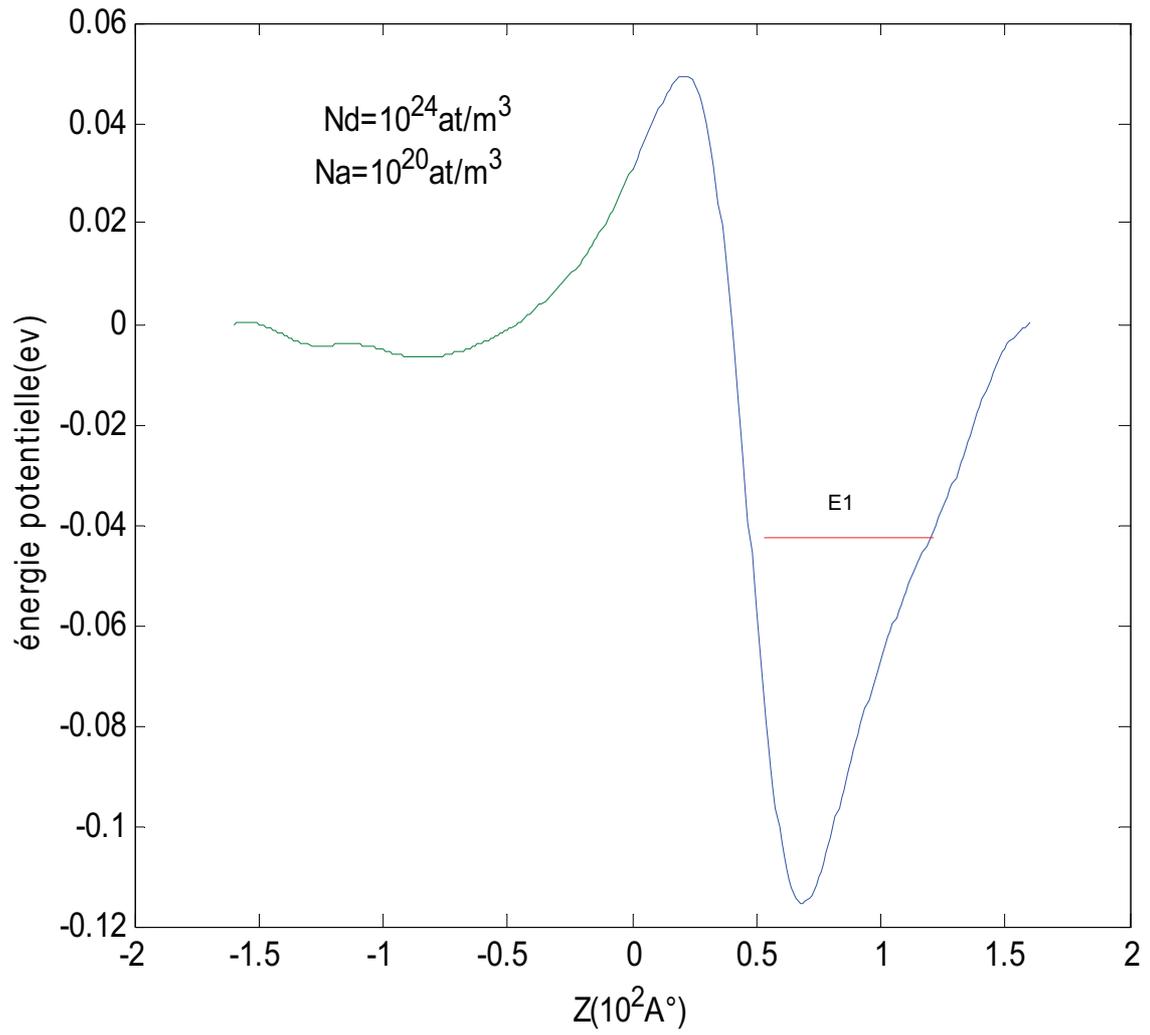
La structure HEMT GaAsAl/GaAs est modélisée à l'équilibre thermodynamique, de plus cette structure nanométrique est de type :

- puits quantique d'un état lié et sans espaceur.
- Anisotype ou les deux matériaux GaAs et AlAsGa sont dopé de type différent (GaAs dopé P, AlGaAs dopé type N)
- Abrupte : la composition des matériaux et les dopages changent brusquement lors du passage du plan d'interface
- D'alignement de bande de type I

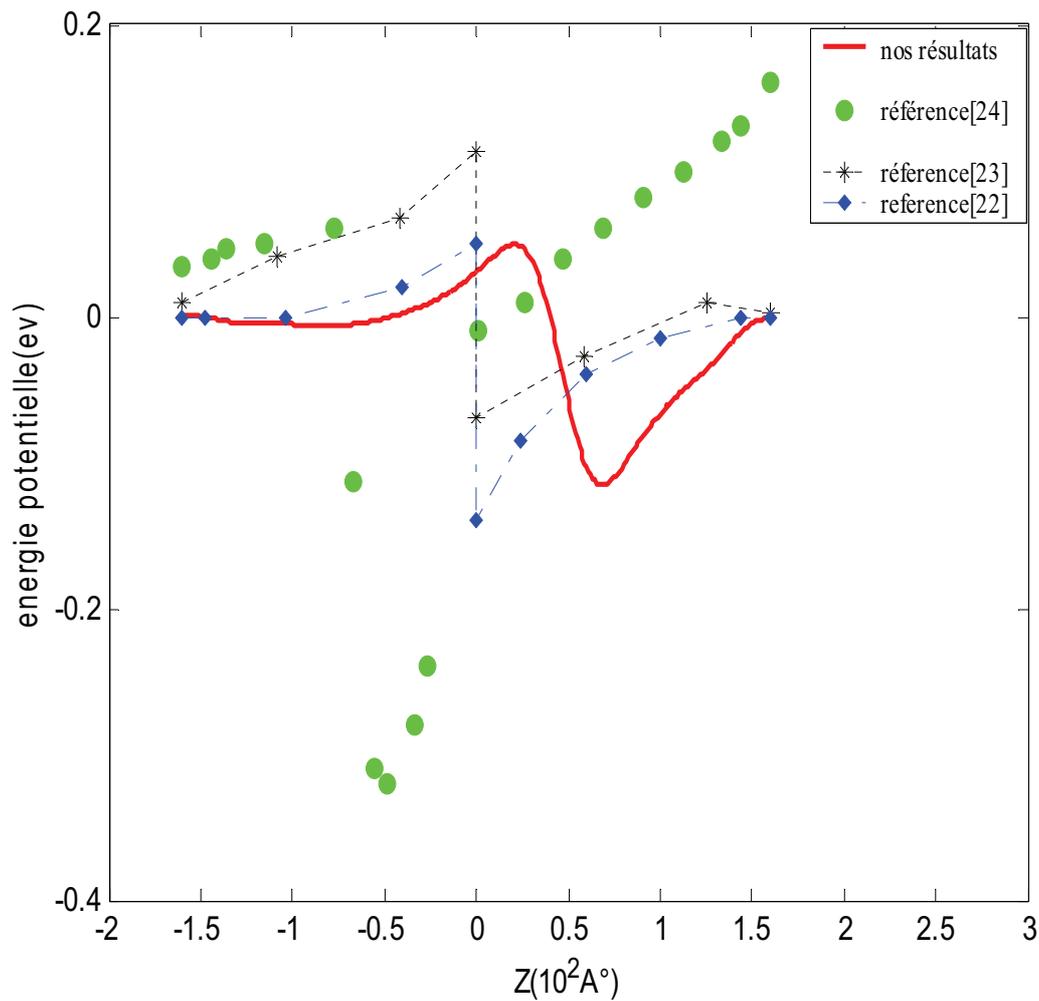
## II- Résultats et discussion

### II-1 Energie potentielle –dispersion spatiale et la fonction d'onde associée à un état lié

La figure (IV-1) représente l'allure du puits de potentiel au niveau de l'interface pour un état lié unique.



**Figure IV -1 : L'énergie potentielle**

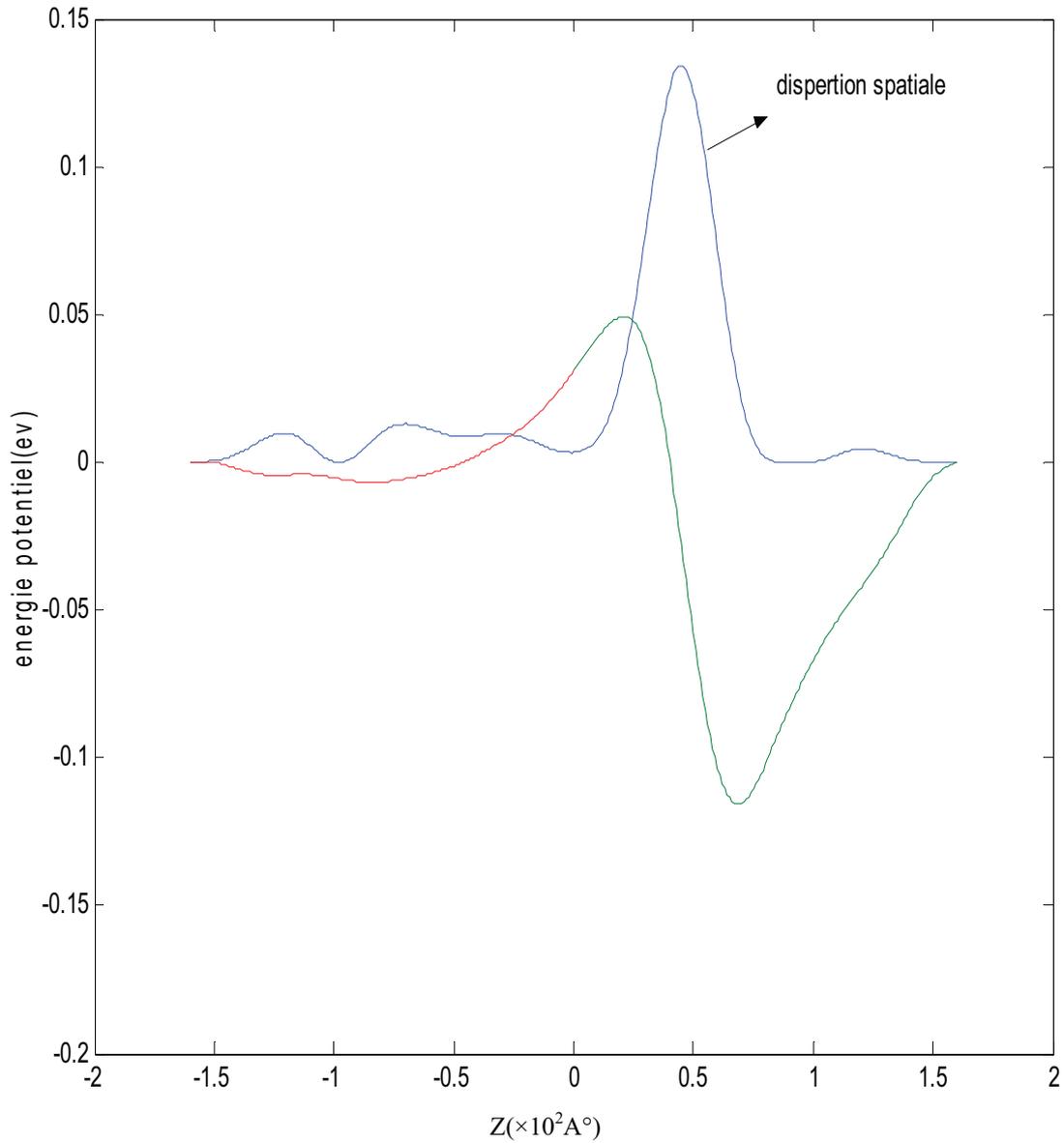


**Figure IV-2** : comparaison du résultat obtenu par la méthode intégrale ( — ) par rapport aux résultats reportés par les auteurs [22, 23, 24,25]

La figure (IV-2) montre la différence et l'influence des différents modèles physiques numériques sur l'allure du puit du potentiel. Ces différents modèles proposés par les auteurs [22, 23, 24,25] sont basé sur le calcul self consistant qui est basée sur un puits de potentiel initial le plus souvent triangulaire ce qui a donné au puit de potentiel l'allure d'un Pic .

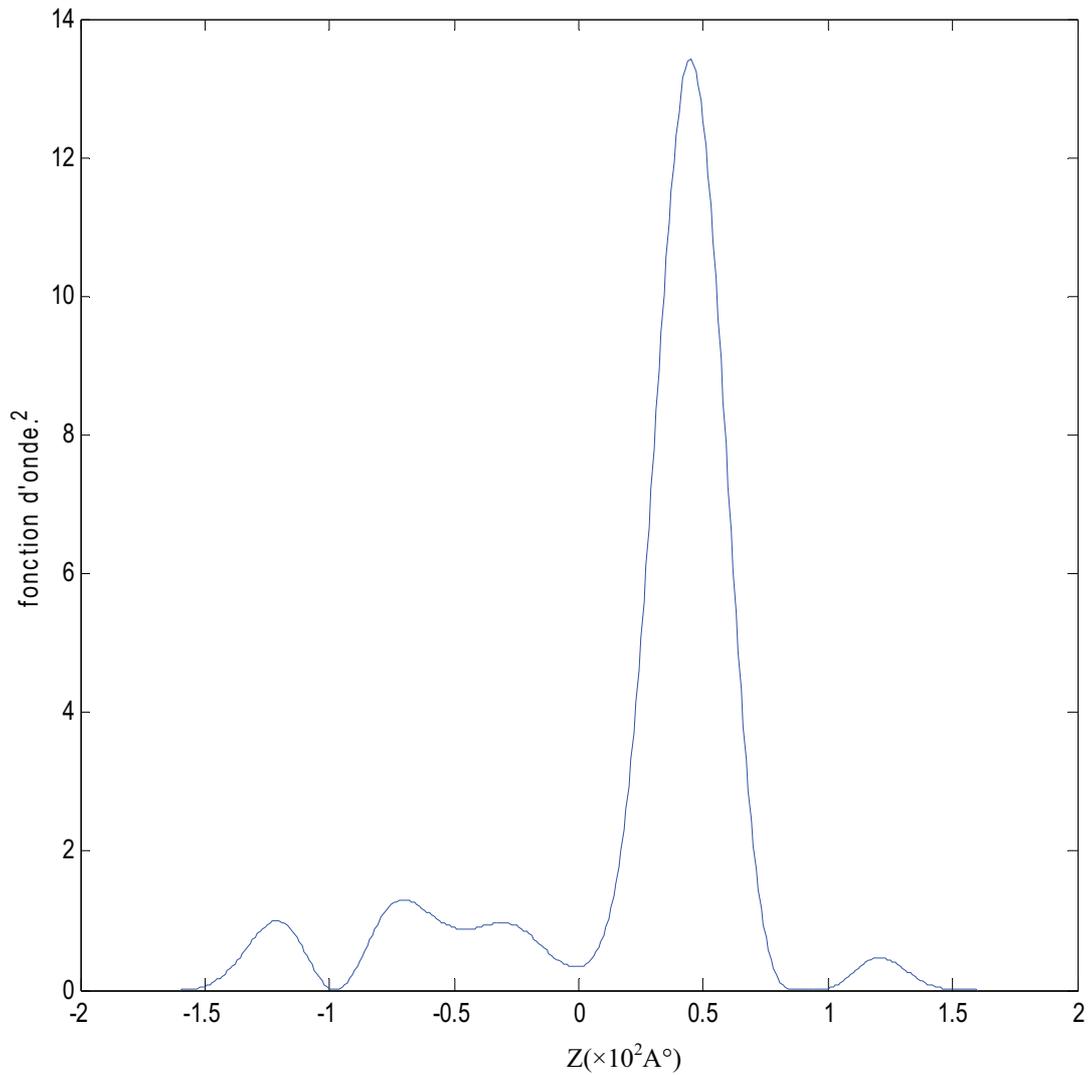
Par contre notre méthode n'utilise aucune forme donnée au potentiel et/ou de fonction d'onde, elle utilise la résolution de la forme intégrale de l'Hamiltonien par les méthodes projectives ce qui a montré la courbure des bandes de conduction.

Sur la figure (IV-3) on peut remarquer la forte concentration des électrons à quelques dizaines d'Angstrom de l'interface (figure IV-3). Ce qui confirme la théorie générale des puits quantiques, pour un état lié unique.



**Figure IV – 3 :** dispersion spatiale des électrons

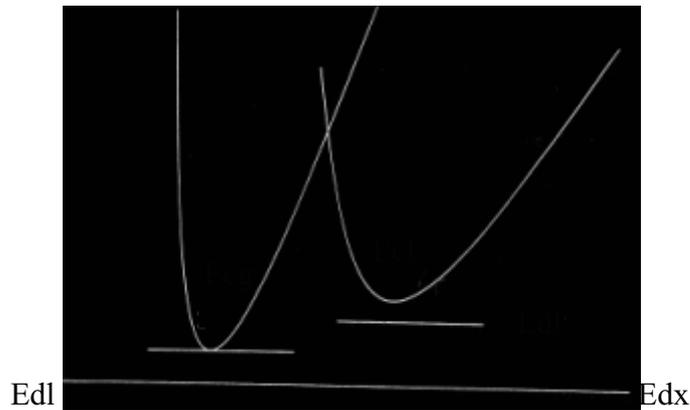
La fonction d'onde associée est illustrée sur la figure (IV-4) où on voit que la grande probabilité de trouver les électrons se situe aussi à quelque dizaine d'Å ce qui implique qu'il y a une pénétration de la fonction d'onde dans la barrière du potentielle.



**Figure IV -4 : fonction d'onde**

## II-2 Dopage effectif

Le composé ternaire GaAsAl présente différentes particularités qui nécessitent une étude plus approfondie, pour ce faire on va étudier son diagramme d'énergie (figure IV-5).



**Figure IV-5** : diagramme énergétique du matériau GaAsAl

Les valeurs des bas de la bande de conduction des  $\Gamma$  et L, notées respectivement  $E_{cg}$  et  $E_{cl}$ , peuvent être approximées de la façon suivante (les énergies sont mesurées en électronvolts et repérées par rapport au bas de la bande de conduction de la vallée  $\Gamma$ ) [35, 36]:

$$\begin{cases} E_{cg} = 0 & (\text{Énergie de référence}) \\ E_{cl} = 0.31 - 0.58x - 0.31x^2 \end{cases}$$

Où  $x$  représente le taux d'Aluminium de GaAsAl.

Au vu de ces résultats, il apparaît de manière évidente que le composé ternaire GaAsAl est indirect lorsque  $x$  est supérieur à 0.44. Ainsi, il conviendra de choisir un taux d'Aluminium compris entre 0 et 0.44.

De plus, l'expérience montre que lorsque  $x$  augmente, il apparaît une diminution sensible de la concentration d'atomes donneurs incorporés dans le matériau maintenue constante.

Il a en effet été montré dans la littérature que le Silicium utilisé comme dopant de type N crée deux niveaux donneurs lorsque celui-ci est incorporé dans le matériau GaAsAl [35,36] :

- Un niveau peu profond ou légers situé à 6mev au dessus de bas de bande de conduction de vallée L, noté  $E_{dl}$ .
- Un niveau donneur profond lié à la présence des centres DX est situé à 140mev en dessous du bas de bande de conduction de la vallée L, noté  $E_{dx}$ .

En se rapportant au diagramme des énergies (figureIV-5) il est possible de résumer les résultats suivant (les énergies sont toujours mesurées en électronvolts et repérées par rapport au bas de bande de conduction de la vallée L)[35,36] :

$$\begin{cases} E_{cg} = 0 & (\text{Énergie de référence}) \\ E_{dl} = 0.006 \\ E_{dx} = 0.17 - 0.58x - 0.31x^2 \\ E_{cl} = 0.31 - 0.58x - 0.31x^2 \end{cases}$$

Le niveau donneur léger  $E_{dl}$  est lié au bas de la bande de conduction, il est donc judicieux de supposer que tous les électrons appartenant à ce niveau participent à la conduction (il y a ionisation totale des atomes donneurs).

A l'inverse, le niveau profond  $E_{dx}$  est lié au bas de la vallée L. Ainsi, un électron piégé sur ce niveau devra franchir une barrière de potentiel de l'ordre de 140 mev pour atteindre la vallée L et ensuite peut être la vallée  $\Gamma$ .

Nous pourrions donc supposer que les électrons du niveau profond  $E_{dx}$  sont piégés à vie et ne pourront donc jamais participer à la conduction.

Ces hypothèses vont nous permettre de calculer la concentration effective totale  $N_{eff}$  dans le GaAsAl en fonction de la concentration de dopant Silicium  $N_d$  et du taux d'Aluminium.

Soit  $N_d$  le dopage en atomes donneurs Silicium, appelons  $N_{dl}$  et  $N_{dx}$  les concentrations respectives en atomes donneurs légers et profond, de manière évidente, nous pouvons dire :

$$N_d = N_{dl} + N_{dx}$$

Selon la statistique de Fermi-Dirac,  $N_{dl}$ ,  $N_{dx}$  sont donnés par les formules suivantes [35]:

$$N_{dl} = \frac{N}{1 + \frac{1}{2} e^{\frac{E_{dl} - E_F}{KT}}}$$

$$N_{dx} = \frac{N}{1 + \frac{1}{2} e^{\frac{E_{Dx} - E_F}{KT}}}$$

Où  $E_F$  est le niveau de Fermi et  $N$  est une constante du problème.

Un calcul simple nous permet d'accéder à la valeur de  $N_{dl}$  qui, nos hypothèses n'est autre que le dopage effectif  $N_{eff}$  :

$$N_{eff} = \frac{N_d}{1 + \frac{1}{2} \exp\left(\frac{E_{dl} - E_F}{kT}\right)} \cdot \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E_{dx} - E_F}{kT}\right)}$$

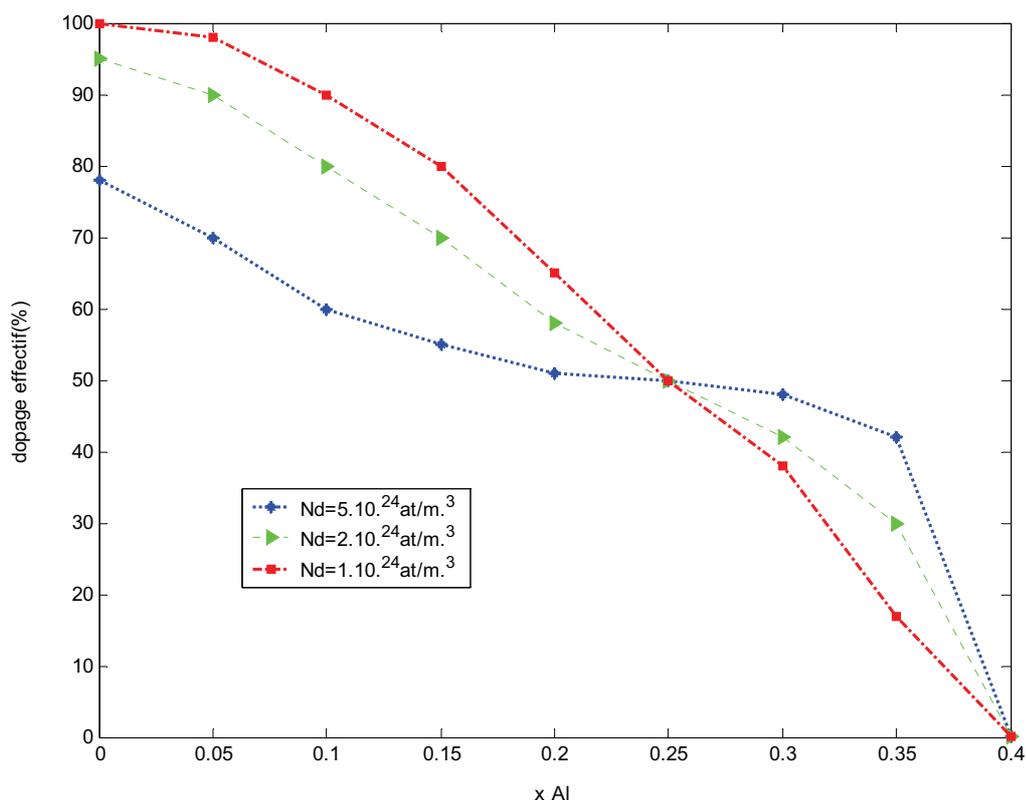
D'après la théorie de Fermi-Dirac,  $N_{eff}$  étant aussi la concentration de porteurs du GaAsAl, nous avons :

$$N_{eff} = N_{cg} \cdot F_{1/2}\left(\frac{E_F - E_{cg}}{kT}\right) + N_{cl} \cdot F_{1/2}\left(\frac{E_F - E_{cl}}{kT}\right)$$

Dans cette expression,  $N_{cg}$  et  $N_{cl}$  son respectivement les densités d'états disponibles des vallées  $\Gamma$  et L, et  $F_{1/2}$  représente la fonction de Fermi-Dirac.

Nous avons donc deux équations à deux inconnues qui permettent le calcul du dopage effectif et l'écart énergétique entre le bas de bande de conduction de la vallée  $\Gamma$  est le niveau de Fermi ( $E_{cg} - E_F$ ) dans la couche de GaAsAl.

On a représenté les caractéristiques de dopage effectif (tracées en pourcentage du dopage initial  $N_d$ ) en fonction du taux d'Aluminium, ceci pour différentes valeurs du dopage (figure IV -6) [35,36].



**Figure IV- 6:** évolution du dopage effectif en fonction du taux d'Aluminium

En accord avec les études expérimentales, nous pouvons tirer quelques conclusions de ces résultats [35] :

- Les valeurs des niveaux donneurs  $E_{dl}$  et  $E_{dx}$  sont égales pour une valeur du taux d'Aluminium de l'ordre de 0.25, ceci indépendamment du dopage, il est donc normal que toutes les courbes se croisent au point  $(x=0.25, N_{\text{eff}}=N_d/2)$ .
- Pour des valeurs du taux d'Aluminium proche de 0.44, le dopage effectif tend vers zéro : en effet, la vallée L devient la vallée de conduction prépondérante et la probabilité d'occupation de niveau profond est maximale. Il est noté que pour des forts dopages ( $N_d=10^{25} \text{ at/m}^3$ ), ce résultat n'est plus tout à fait vrai, le pourcentage de dopage effectif pouvant atteindre des valeurs de l'ordre de 20 à 30%.
- Pour des valeurs du taux d'Aluminium proche de zéro (cas de GaAs), le dopage est de l'ordre du dopage initial introduit dans la structure, ceci d'autant plus que le dopage décroît ( $N_d=10^{24} \text{ at/m}^3$ )

- Pour des dopages inférieure à  $10^{24}$  at/m<sup>3</sup>, les courbes ne varient quasiment plus avec celui-ci. Au dessus de  $10^{24}$  at/m<sup>3</sup>, plus le dopage augmente et plus les courbes tendent vers une courbe limite définie par :

$$N_{\text{eff}}=N_d \quad \text{pour } x < 0.44$$

$$N_{\text{eff}}=0 \quad \text{pour } x = 0.44$$

### II-3 Influence du taux d'Aluminium

Le taux d'Aluminium intervient de manière complexe sur la valeur finale de Ns. Il sera donc nécessaire de parvenir à un compromis dans le choix de ce paramètre.

Comme le montre la figure (IV-7), on a trouvé que pour un dopage donné ( $N_d=10^{24}$ at/m<sup>3</sup>) il existe une valeur du taux d'Aluminium optimisant Ns, cette valeur vaut 0.25.

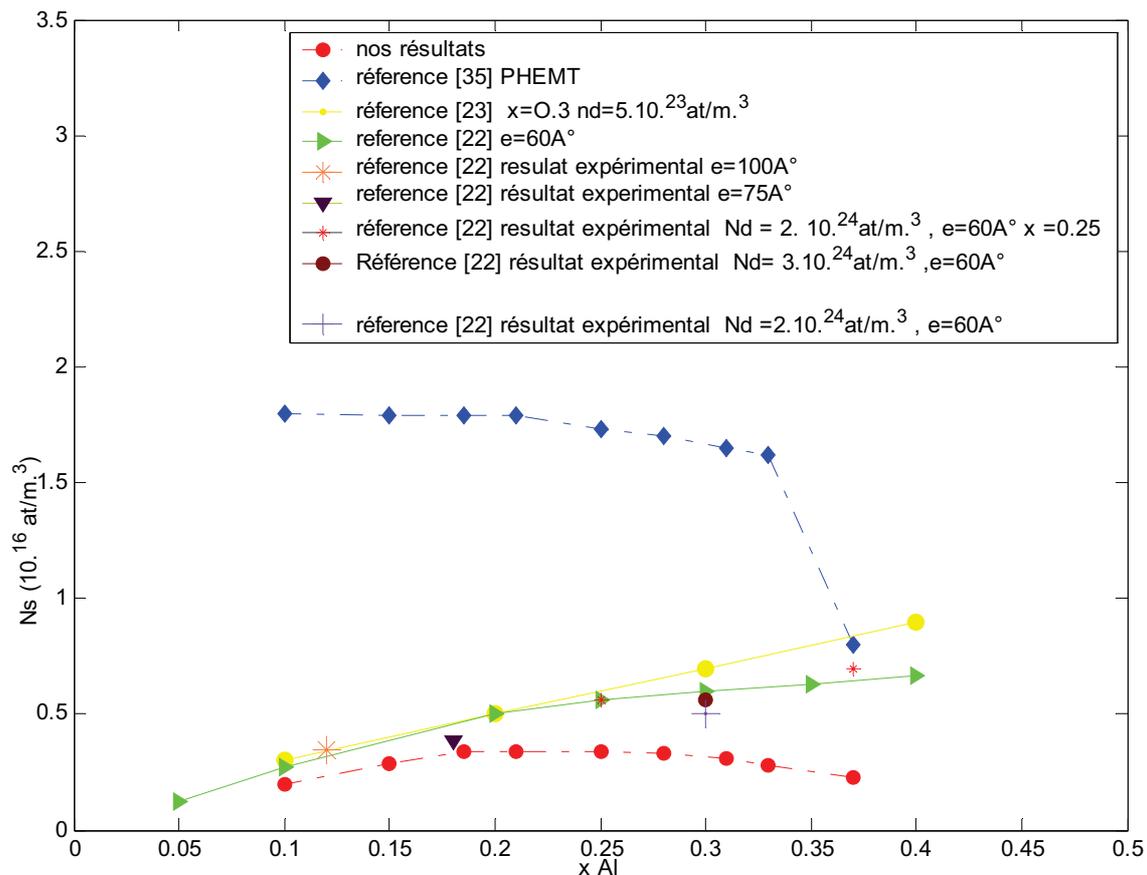
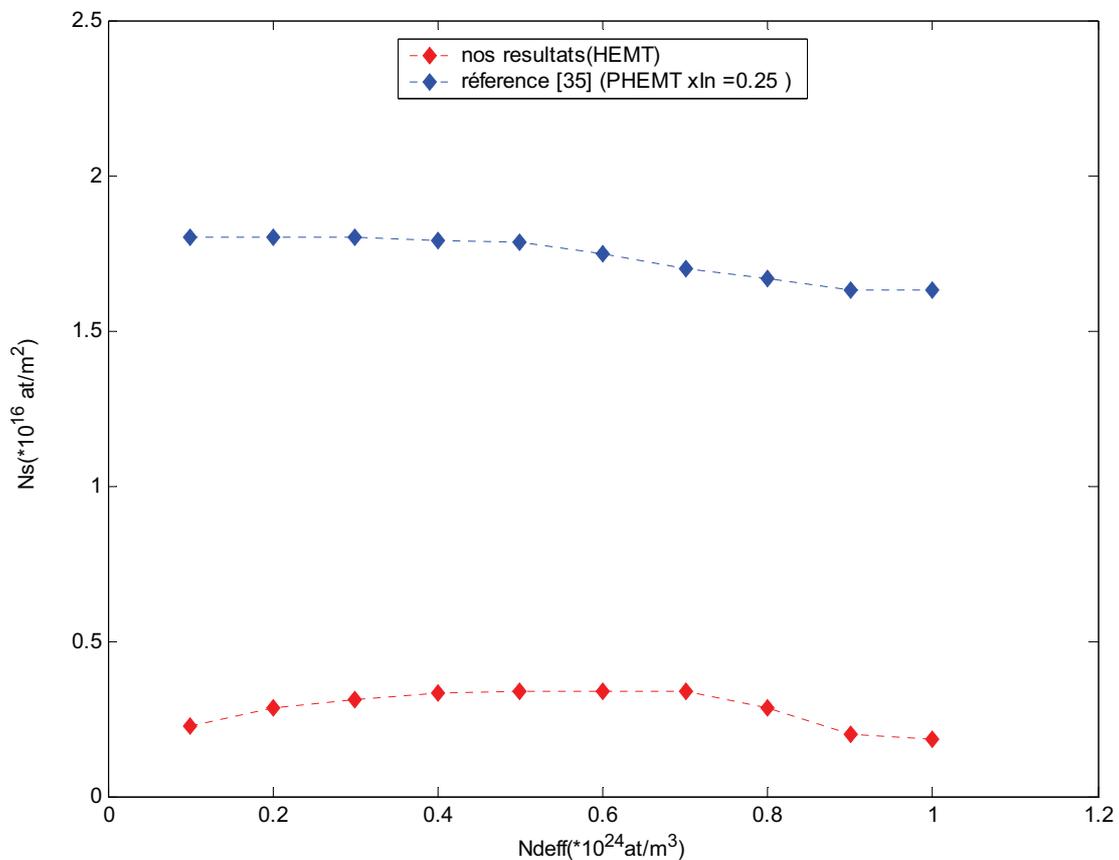


Figure IV-7 : variation du Ns en fonction du taux d'Al

Pour des valeurs du taux d'Aluminium compris entre 0 et 0.25,  $N_s$  augmente lentement avec celui-ci, et lorsque le taux d'Aluminium est compris entre 0.25 et 0.37  $N_s$  va décroître.

Par contre pour des valeurs du dopage effectif compris entre  $5.10^{23}$  at/m<sup>3</sup> et  $1.10^{24}$  at/m<sup>3</sup> (augmentation du dopage effectif),  $N_s$  diminue lentement avec celui-ci, de même  $N_s$  va décroître lorsque le dopage effectif est compris entre  $5.10^{23}$  at/m<sup>3</sup> et  $1.10^{23}$  at/m<sup>3</sup> (diminution du dopage effectif) ce qui prouve que la valeur du dopage effectif optimisant  $N_s$  vaut  $5.10^{23}$  at/m<sup>3</sup> pour un dopage donné ( $N_d=10^{24}$  at/m<sup>3</sup>) ce qui correspond à un taux d'Aluminium de 0.25 (figure (IV-8)).

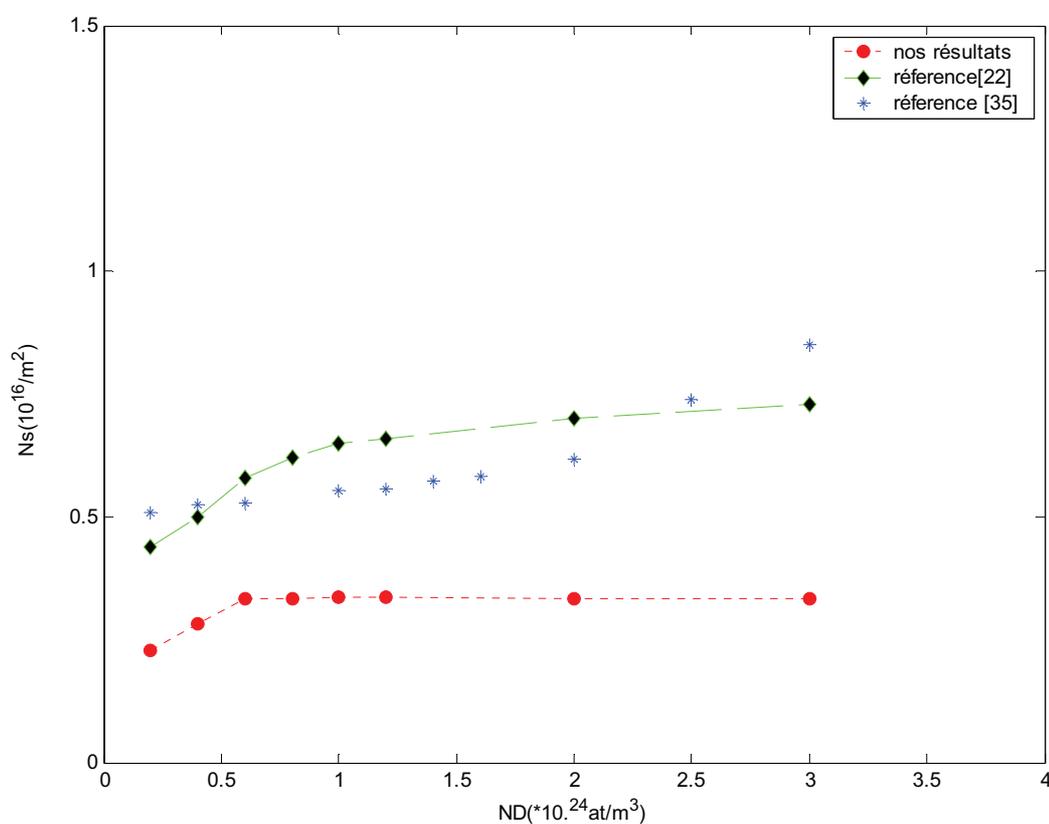


**Figure IV-8:** comparaison de  $N_s = f(N_{eff})$  entre HEMT et PHEMT

## II-4 Influence du dopage

### ✓ Influence du dopage sur $N_s$

La figure (IV-9) montre que  $N_s$  augmente lentement avec le dopage ( $N_d$ ). Plus le dopage augmente plus le transfert d'électrons de la couche GaAsAl(couche donneuse) vers la couche GaAs (couche tampon ) augmentera. Ainsi, plus le dopage du GaAsAl augmente, plus la densité surfacique augmente et plus le confinement des électrons dans la couche tampon sera efficace mais elle va tendre vers une valeur limite lorsque le dopage continue à augmenter.



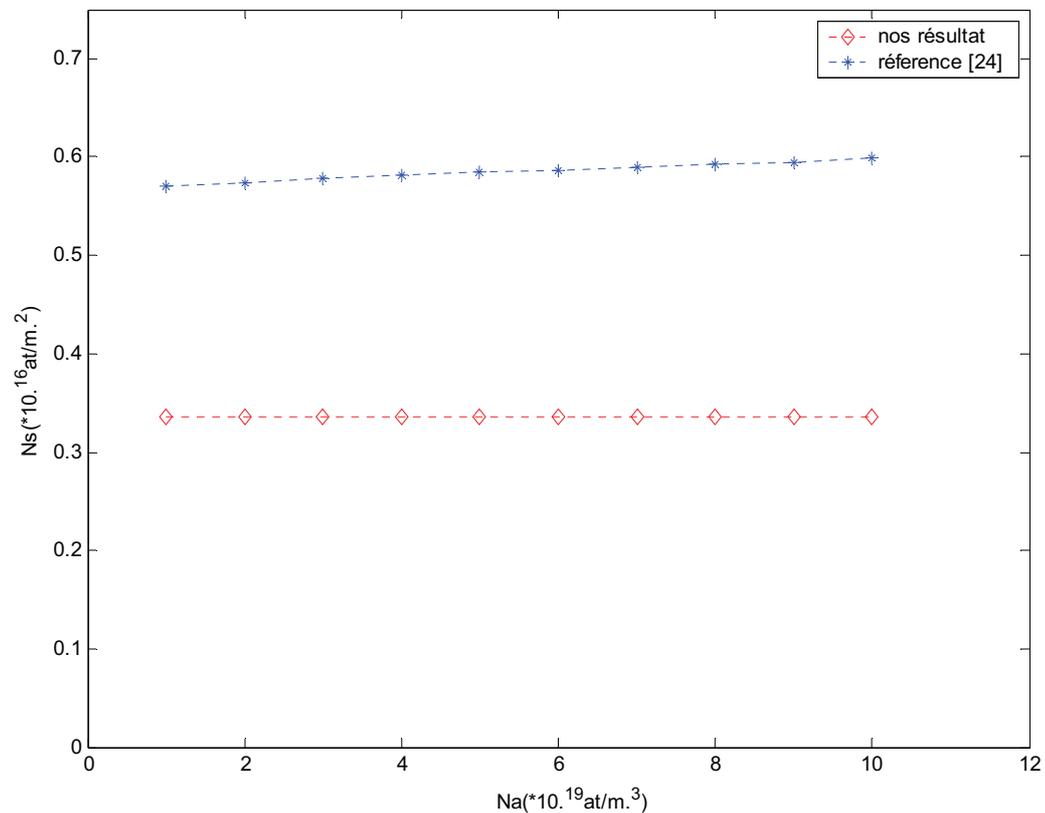
**Figure IV –9 :** influence du dopage  $N_d$  sur  $N_s$  (structure HEMT et PHEMT avec et sans espaceur)

Donc à taux d'Aluminium fixe, plus le dopage augmente plus le dopage effectif va augmenter ainsi le transfert des électrons de la couche GaAsAl (couche donneuse) vers la

couche GaAs (couche tampon) augmentera ce qui implique une augmentation de  $N_s$ . Cette augmentation va tendre vers une valeur limite lorsque le dopage continue à augmenter.

Ce résultat est en désaccord avec les travaux de A.P.Temple-Boyer comme il est montré sur la figure (IV-9) mais il est en accord avec les travaux de A.Cappy qui montre que la densité surfacique électronique  $N_s$  augmente bien sur avec le dopage de la couche donneuse mais tend vers une valeur limite lorsque le dopage continue à augmenter.

Par contre la densité surfacique est presque constante lorsque en faisant varier le dopage en atome accepteur (Na) ce qui est donnée par la figure (IV-10), comparé aux résultats de la référence [24].



**Figure IV –10** : influence du dopage Na sur  $N_s$

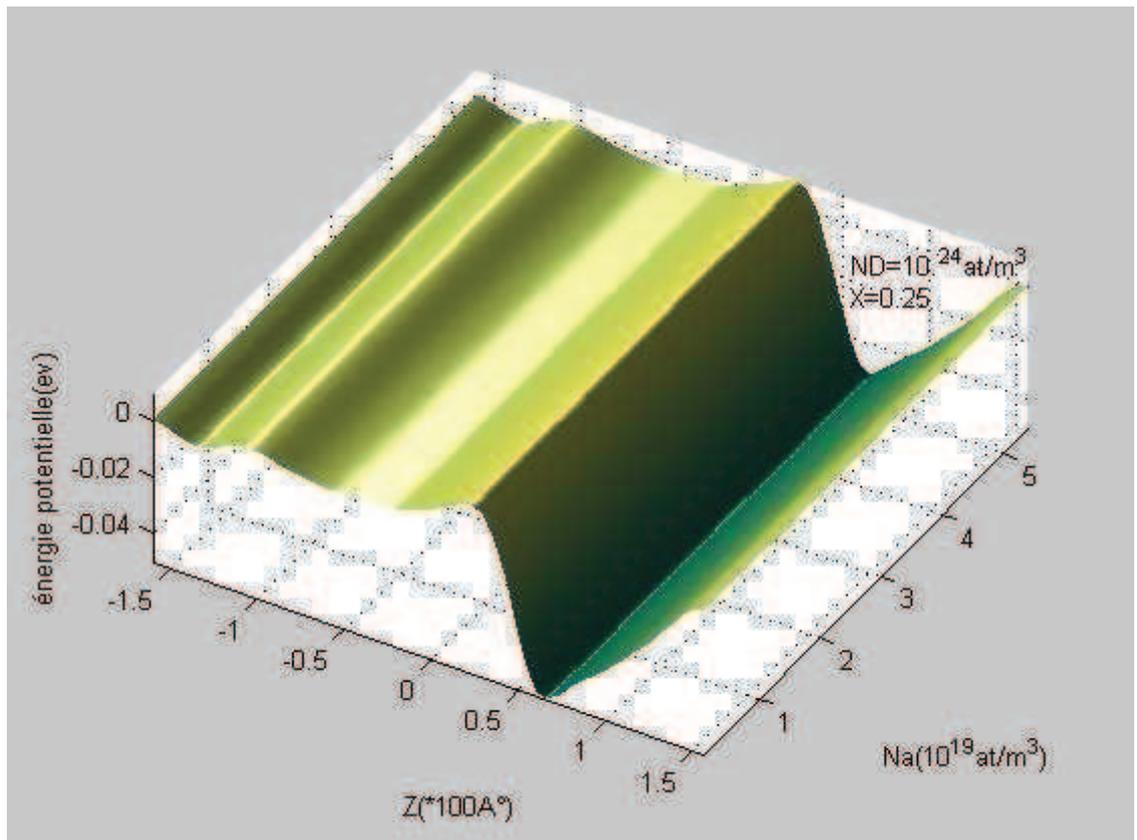


Figure IV-11 : visualisation de l'énergie potentielle en fonction de Na

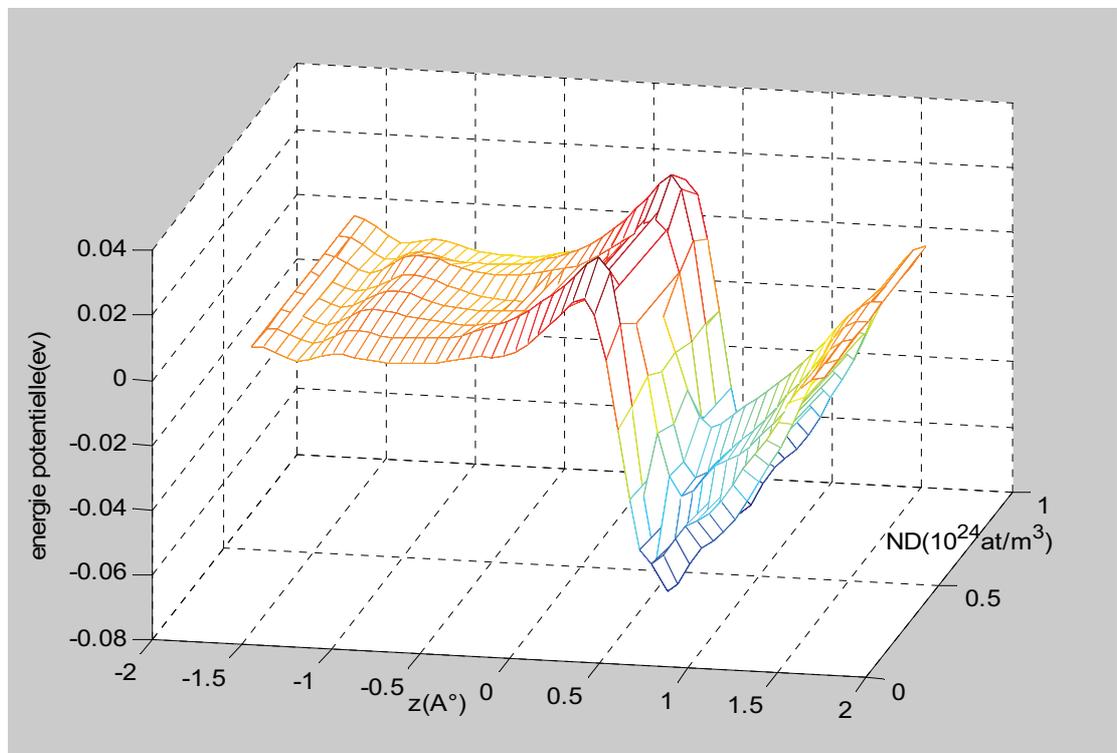
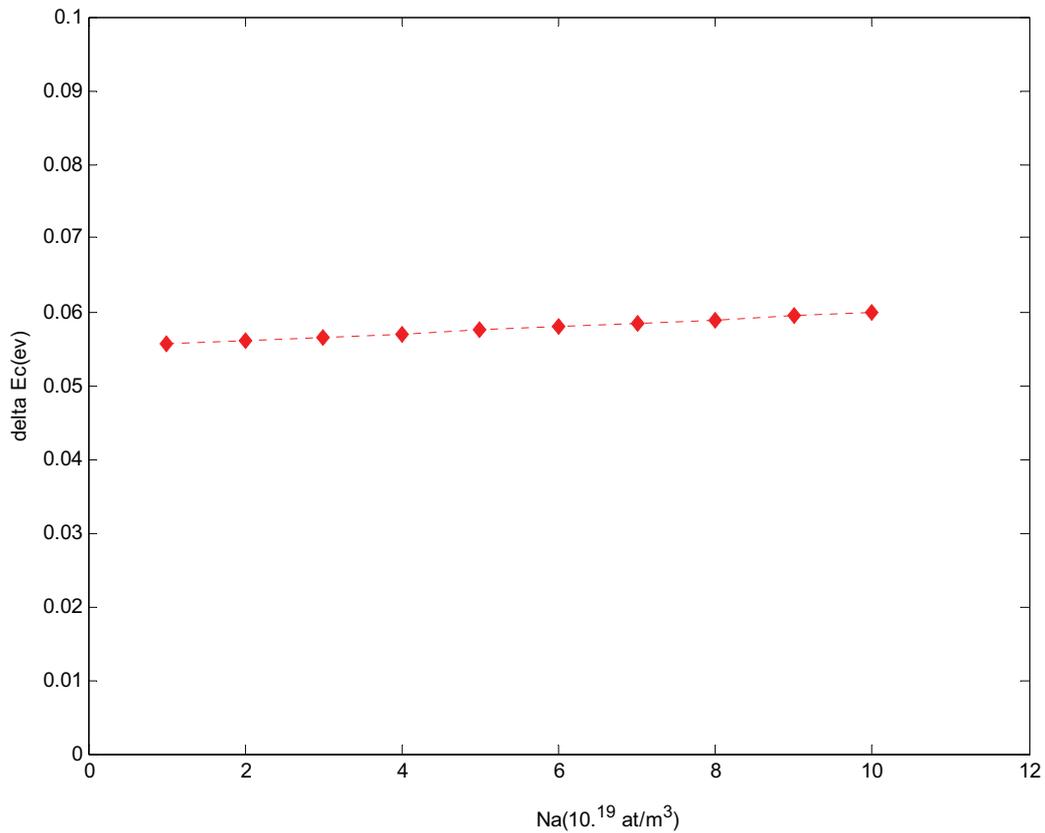


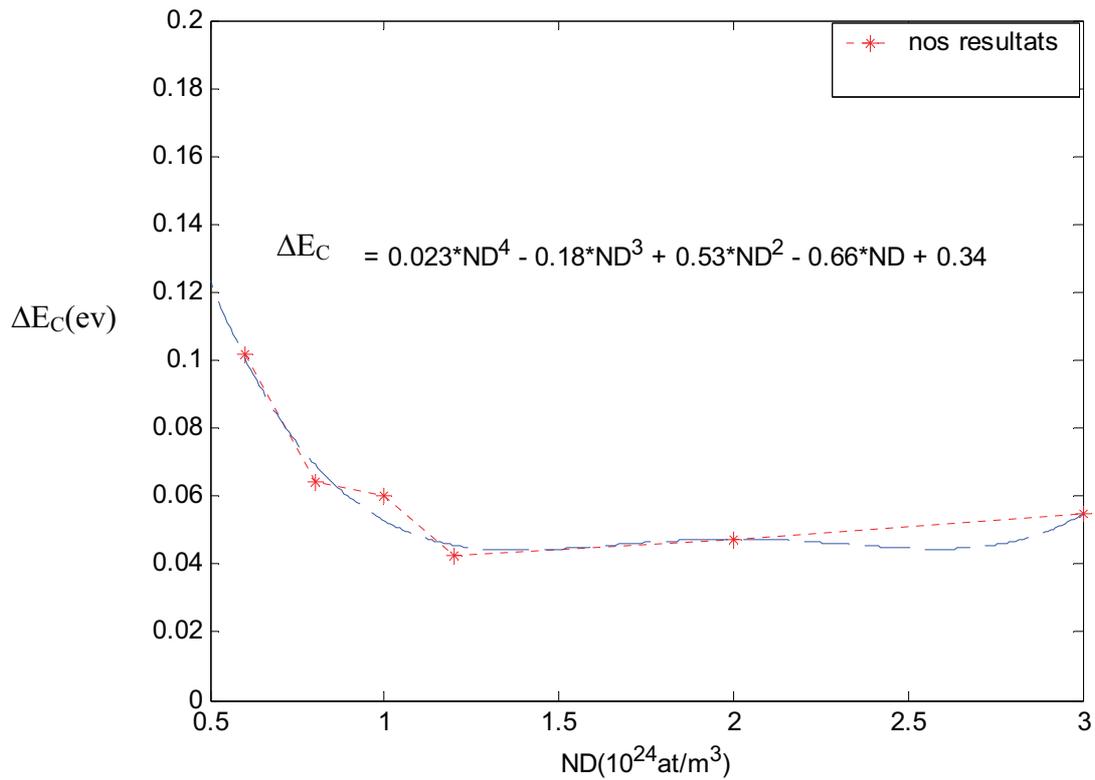
Figure IV-12 : visualisation de l'énergie potentielle en fonction de  $N_D$

**✓ Influence du dopage sur l'offset  $\Delta E_c$** 

Comme il est illustré sur la figure (IV-13), l'augmentation du dopage Na ne provoque pas une variation remarquable de l'offset  $\Delta E_c$ , par contre l'influence du dopage  $N_d$  est remarquable (figureIV-14).



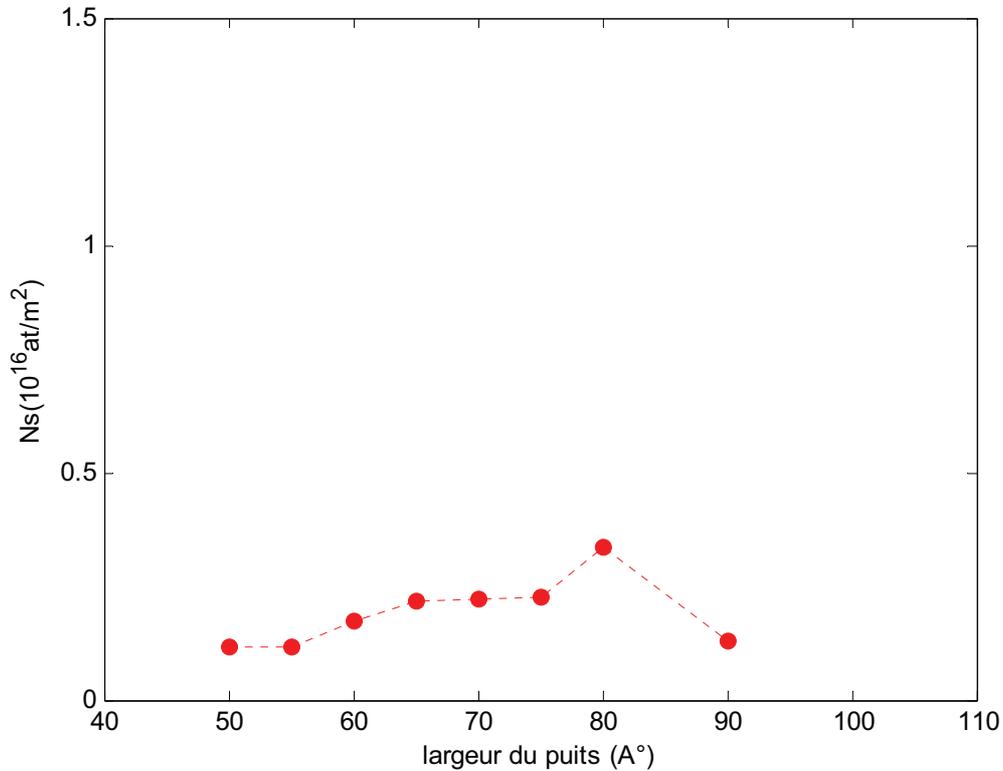
**Figure IV –13 : influence du dopage Na sur  $\Delta E_C$**



**Figure IV –14 :** influence du dopage Nd sur  $\Delta E_C$

Sur la figure (IV-14) on voit que pour un taux d'Aluminium de l'ordre de 0.25  $\Delta E_C$  diminue lorsque  $N_D$  augmente et si  $N_D$  continue à augmenter elle va tendre vers une valeur limite contrairement à  $N_s$  qui augmente lorsque  $N_D$  augmente et elle va tendre vers une valeur limite si  $N_D$  continue à augmenter.

### III- Largeur du puits



**Figure IV-15 :** variation de  $N_s$  en fonction de la largeur du puits

La figure (IV-15) montre que pour un dopage donné et pour un taux d'Aluminium fixe égale à 0.25 la densité surfacique augmente lorsque la largeur du puits augmente mais elle va diminuer lorsque on dépasse une valeur critique ( $80A^\circ$ ) qui correspondant à une valeur max de  $N_s$  ( $0.3361 \cdot 10^{16} \text{ at/m}^2$ ). Au-delà de cette valeur le nombre d'états liés n'est plus unique ce qui explique la diminution de  $N_s$  qui en fait correspond alors à  $N_{s1}$  [37].

**Conclusion**

Dans ce chapitre l'objectif que nous nous avons fixé à été atteint c'est-à-dire l'élaboration d'un modèle permettant l'obtention de l'allure du puits de potentiel à l'interface et la fonction d'onde associée à un état lié unique, la population de cette état liée en fonction des paramètres géométriques ( $\Delta E_c$ ,  $d$ ) et physique (dopage). L'influence des différents paramètres sur les performances de l'heterostructure GaAsAl/GaAs est mis en évidence ; ce qui nous permettra ultérieurement d'envisager l'étude dynamique de transistor HEMT de manière rigoureuse et complète.

# *Conclusion générale*



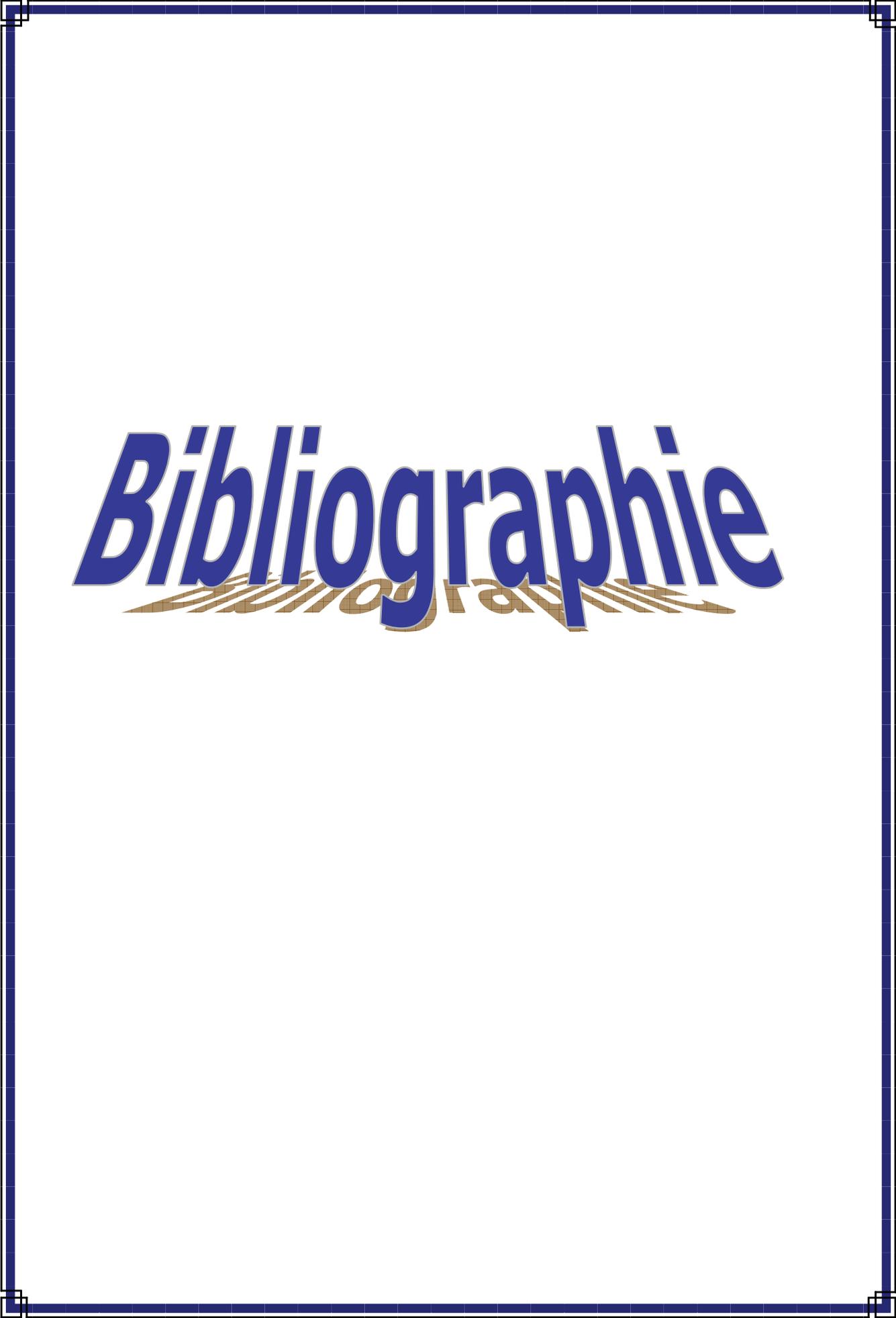
# Conclusion générale

Notre travail a eu comme objectif principal la résolution numérique exact du système globalement non linéaire Schrödinger -Poisson en vu de modéliser le potentiel à l'interface d'une hétérojonction GaAsAl/GaAs. Le système été résolu de façon autocohérente, Les calculs, utilisant des méthodes projectives, permettant l'intégration de Hamiltonien à l'aide des fonctions de Green dans l'équation de Schrödinger, pour une résolution rigoureuse autocohérente avec l'équation de Poisson sont élaborés.

Cependant, la résolution de ce système est faite par la méthode de newton de type quasi par différence finie où le vecteur initial est très proche de la solution (vecteur initial approximé d'un puits carré) ce qui permet la convergence du système globalement non linéaire confirmé pour dix fonctions de bases et une position bien déterminée des murs électriques. Ceci nous a permis de déduire les performances les plus influentes dans le fonctionnement du HEMT tel que la densité de charge et l'influence des paramètres physiques tel que le dopage et le taux d'Aluminium.

Cette modélisation physique numérique, que nous avons effectuée peut être appliquée à toutes les autres hétérojonctions quantiques à couche d'inversion ou d'accumulation.

# *Bibliographie*



# Bibliographie

- [1] :R.Castagné, J.P.Duchemin, M.Gloanecet Ch.Rumelhard, « circuits intégrés en Arséniure de galilum », physique, et regles de conception, Masson, **1989**
- [2] : G.Bastart, « Wave Mechanics applied to semiconductors heterostructures », les éditions de physiques, **1988**.
- [3] : Henry Mathieu, « physiques des semi-conducteurs et des composants électroniques », Quatrième édition, Masson, **2001**
- [4] :D.Bimberg, M.G.Rundmann, N.N.Ledentsov, « Quantum Dots Heterostructures », Wiley, **2001**.
- [5]:R.L.Anderson, «Experiments on GaAs Heterojunctions », Solid-STATE Electron, vol 5, 341-351, **1962**.
- [6]:NG. Kwokk, «Complete guide to semiconductors Devices », seconde edition , IEEE press, **2002**
- [7]: R.Dingle, H.Stromer, A.Gossard, apply phys, **1978**
- [8]: J.N.Patillon, J.P.André, « Propriétés de transport dans les heterostructures à base de composés III-V », vol 28, pp.1-72, Acta electronica, **1988**
- [9] :T.Schwiersj,«Moderne Microwave Transistors », wiley, **2003**.
- [10]: M.Wolny, P.Chambry, A.Brirés, J.P.André, «transistors à haute mobilité electronique obtenus par épitaxie en phase vapeur aux organométalliques», acta electronica ,vol 28,**1988**.
- [11]: B.R. Nag L. R. Carley, G. Declerck, F. M. Klaassen, «Physics of Quantum Well Devices», Kluwer Academic Publishers,**2002**
- [12]: H.Kromer, appli.phys, lett46, 504, **1985**
- [13]:J.Tersoff,in «heterojunction Band Discontinuities, physics and Device applications », (F.Capasso and G.Margaritondo,eds.), p3, North Holland,,Amsterdam, **1987**
- [14]: « Quantum Well,Wires and Dots», Paul Harrison , **2002**
- [15]: T.Ando, A.B.Fowler,F.Stern mod phys45,437, **1982**.
- [16] Broge Vinter, «Optoelectronique», Emannul Rosencher, Masson , **1998**
- [17] :P.Godts, D.Depreeuw, E.Constant et J.Zmmermann, «Methodes generales de modélisation du transistor à effet de champ à heterojonction », Revue Phys.Appl.24 , 151-170, **1989**

- [18] : W.Grener , «mécanique quantique une introduction » , springer , **1999**.
- [19] :D.delagebeaudeuf and N.T.Lini, « metal-(n)AlGaAs-GaAs tow dentional electron gas FET », IEEE transaction on electron de vice, volDE-29, n°6, **1982**.
- [20] :C .Versnaeyen, « propriétés physiques et expérimentale du transistors à effet de champ à heterojonction AlGaAs /GaAs », these de doctorat , université de LILLEI,**1985**
- [21] :F.Stern, « self-consistent results for n-type Si inversion layer », physical rview B, volume 5, Number 12, june **1972**
- [22]: A.Cappy, « propriétés physiques et performances potentielles des composants submicroniques à effet de champ .structure conventionnel à gaz bidimensionnel », thèse de doctorat en science physique, université des sciences et techniques de LILLE Flandres-Artrois , **1986**
- [23] :S.E.Benchaiba , «modélisation d'une hétérojonction en  $Al_xGa_{1-x}As/GaAs$ , cas du HEMT », thèse de Magister, université de Batna ,**2000**.
- [24] :M.Baazouzi, « Etude du matériau semi-conducteur pour la modélisation d'une structure pseudomorphique (GaAlAs/GiNaS/GaAs », these de Magister, université de Batna, **2000**
- [25] : S.Toubal, « introduction à la modélisation physique numérique de la dynamique des porteurs dans les heterostructures à Gaz 2D», université de Constantine ,**2002**
- [26]: A.Meftah , H.Ajlani, A.Marzouki, R.Chtourou and M.Oueslati, « Electronic Energies in Delta Doped AlGaAs-GaAs Heterostructures », American journal of applied science 5(4):425-439,**2008**
- [27]: Paul du Chateau,David W.Zachaman they and problem of partial differential equations Schaum's outline series **1986**
- [28] : D. Euvrad, résolution numérique des équation au dérivées partielles 3<sup>ème</sup> édition, **1994**.
- [29]: ROACH. g. f. Green function introductory theorie whith applications, VNR compagy London **1960**
- [30]: HARRINGTON .R.F.Feild computation by moments methods Mac Milan , **1968**.
- [31]: M .Benabbas, B.Marir , D.Bajon ,H.Baudrand, « exact resolution of coupled Schrodinger-Poisson equation : application to accurate determination of potential profile in HEMTS » electronic letter ,vol 27 , 1848 -1850, **1991**
- [32]: Michel Bierlaire , « Introduction à l'optimisation différentiable » , press polytechnique et universitaire romandes, première édition , **2006**
- [33] : A.Gourdin, M.Boumahrat, «méthodes numériques appliquées », OPU, **1991**
- [34] : A.Fortin, « Analyse numérique pour l'ingénieur », Edition de l'école polytechnique de Montréal, **1995**

[35] : P TEMPLE-Boyer «Elaboration d'un modèle Pseudo - Bidimensionnel d'un transistor pseudomorphique GaAlAs/GaInAs/GaAs » laboratoire d'électronique Philips, Juin **1990**

[36]: F.N .TROFIMENKOFF«field dependent mobility analysis for the field effect transistor, proc.IEEE 53, 1765 -1766, **1965**

[37]: O.Vanbesieu , «composants à heterostructures, applications en nanoélectronique et nanophotonique » , n°4, pp 25-33, **2007**

## Résumé

Le présent travail est consacré à la contribution à l'élaboration d'un modèle numérique basé sur la modélisation physique numérique du potentiel à l'interface d'une hétérostructure en GaAsAl/GaAs.

Les calculs, utilisant des méthodes projectives, permettant l'intégration de Hamiltonien, à l'aide des fonctions de Green dans l'équation de Schrödinger, pour une résolution rigoureuse auto-cohérente avec l'équation de Poisson sont élaborés.

Une étude de convergence du système globalement non linéaire est alors effectuée et confirmée pour dix fonctions de bases et une position bien déterminée des murs électriques.

La validité de ce modèle physique numérique rigoureux pour des hétérojonctions, que nous avons présenté peut être faite par une comparaison de nos résultats aux résultats des autres modèles de la littérature, de ce point de vue la validité de notre modèle est confirmée.

## Abstract

This work investigates an approach for contributing to the development of a numerical model based on physical and numerical modelling potential at the interface of a hetero structure in GaAsAl / GaAs .

We elaborate a calculus, using projective methods permit the Hamiltonian integration using Green functions in the equation of Schrödinger, for a rigorous resolution auto coherent with the equations of Poisson.

A study of the convergence of globally non linear system so is effectuated and confirmed for ten essential workbench functions and for a position well established of electrical wall.

The validity of this rigorous physical and numerical model for hetero junction, which we have presented, can be effectuated with a comparison of our result with the result of different models developed in the literature of related work; with this point of view the validity of our model is confirmed.