



HAL
open science

Modélisation physique de la structure électronique, du transport et de l'ionisation par choc dans les matériaux IV-IV massifs, contraints et dans les puits quantiques

Soline Richard

► To cite this version:

Soline Richard. Modélisation physique de la structure électronique, du transport et de l'ionisation par choc dans les matériaux IV-IV massifs, contraints et dans les puits quantiques. Matière Condensée [cond-mat]. Université Paris Sud - Paris XI, 2004. Français. NNT : . tel-00008310

HAL Id: tel-00008310

<https://theses.hal.science/tel-00008310>

Submitted on 31 Jan 2005

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

N° D'ORDRE : 7757

UNIVERSITE PARIS XI
UFR SCIENTIFIQUE D'ORSAY

THESE

Présentée pour obtenir

Le GRADE de DOCTEUR en SCIENCES
de l'UNIVERSITE PARIS XI ORSAY

Discipline : Physique

Par

Soline RICHARD

Sujet :

MODELISATION PHYSIQUE DE LA STRUCTURE
ELECTRONIQUE, DU TRANSPORT ET DE L'IONISATION PAR
CHOC DANS LES MATERIAUX IV-IV MASSIFS, CONTRAINTS
ET DANS LES Puits QUANTIQUES

Soutenue le 14 décembre 2004 devant la commission d'examen :

M. Jean-François PALMIER	Président du jury
Mme Mireille MOUIS	Rapporteur
M. Luca VARANI	Rapporteur
Mme Anne-Sophie CORDAN	Examineur
M. Guy FISHMAN	Examineur
M. Frédéric ANIEL	Directeur de thèse

Thèse préparée au Dépt. NAEL (Nanophotonique et Electronique ultra-rapide)
Institut d'Electronique Fondamentale d'Orsay (IEF)-UMR 8622

Résumé :

Ce travail est consacré à l'étude des phénomènes physiques dans les composants à base d'alliage SiGe en présence de fort champ électrique donc mettant en jeu des porteurs très énergétiques susceptibles d'induire de l'ionisation par choc. A l'aide d'une méthode **k.p** à 30 bandes, nous avons modélisé les structures électroniques complètes du Si, du Ge et des alliages $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ massifs et contraints sur une large gamme d'énergie (11 eV autour de la bande interdite) avec une très grande précision sur les paramètres de Luttinger ou les masses effectives. Associée au formalisme de la fonction enveloppe, cette méthode nous a fourni les relations de dispersion des sous-bandes en bande de valence et de conduction de puits quantiques à base d'alliages SiGe. Pour intégrer les structures électroniques dans la simulation du transport, nous avons calculé les densités d'états pour des structures électroniques 3D et 2D. Nous avons aussi obtenu les masses de densité d'états en fonction de la température dans les alliages SiGe massifs et contraints sur Si. Le chapitre 4 est consacré à l'étude du transport dans les alliages SiGe à partir d'une résolution déterministe de l'équation de Boltzmann. A l'aide des masses de densité d'états, nous avons calculé les mobilités moyennes des trous dans le SiGe. A partir de la simulation du transport à fort champ électrique des électrons dans le Si contraint sur SiGe et des trous dans le Ge contraint sur SiGe, nous avons obtenu les coefficients d'ionisation par choc dans ces matériaux. Des mesures d'électroluminescence réalisées sur des HFET à base d'alliages SiGe ont permis de remonter à quelques propriétés de l'ionisation par choc dans ces composants.

Summary:

This PhD thesis is devoted to the study of physical phenomena in SiGe devices involving high energy carriers which can induce impact ionization. A thirty-band **k.p** method has been developed to model energy band diagrams of bulk and strained Si, Ge and SiGe alloys on the whole Brillouin zone in a large energy range (11 eV around the band gap). This method gives access to the Luttinger parameters and the conduction band effective masses with a very good accuracy. Associated with an envelop function algorithm, the band diagrams of SiGe quantum wells have been obtained in the valence and in the conduction band. From these band diagrams, carrier densities of states are obtained in bulk and strained semiconductors and in quantum wells. Hole density of state masses in bulk and strained SiGe alloys have been calculated as a function of crystal temperature. Chapter 4 is devoted to transport study in SiGe alloys with a matrix resolution of the Boltzmann transport equation. From the density of state masses, hole mean mobilities are calculated in SiGe alloys. From high electric field transport simulation, impact ionization coefficients have been evaluated for electrons in strained Si and for holes in strained Ge. Electroluminescence measurements have been performed on Si/SiGe and Ge/SiGe HFETs. These data give access to experimental study of impact ionization.

Mots-clefs : structure électronique, théorie **k.p**, densité d'états, puits quantiques, transport, ionisation par choc, HFET Si/SiGe/Ge, diode IMPATT, électroluminescence.

Ce travail de thèse a été réalisé à l'institut d'Electronique Fondamentale. Je remercie Monsieur Jean-Michel Lourtioz de m'avoir accueilli au sein de son laboratoire. Je remercie particulièrement Philippe Boucaud de m'avoir permis de travailler dans d'excellentes conditions au sein du département Nanophotonique et Electronique ultra-rapide.

J'adresse mes plus vifs remerciements à Madame Mireille Mouis et Monsieur Luca Varani d'avoir été rapporteurs de cette thèse.

Je remercie également Madame Anne-Sophie Cordan et Monsieur Jean-François Palmier de l'intérêt qu'ils portent à mon travail en participant au jury de cette thèse.

Je tiens à témoigner ma sincère reconnaissance à Monsieur Frédéric Aniel qui a encadré cette thèse avec compétence et disponibilité. Son imagination et sa curiosité, associées à une culture scientifique très large et pourtant pointue, m'ont permis de travailler sur des sujets innovants et passionnants.

Je remercie également très chaleureusement Monsieur Guy Fishman pour m'avoir donné l'occasion de travailler avec lui. Les nombreuses discussions que nous avons eues, en plus d'être des plus sympathiques, ont toujours apporté la réponse à une question que je me posais depuis longtemps.

Je tiens à exprimer ma reconnaissance à Monsieur Nicolas Cavassilas, qui a eu la gentillesse de me transmettre ses connaissances et son savoir-faire expérimental lors de mon stage de DEA. Sa disponibilité et son enthousiasme m'ont donné confiance pour persévérer dans cette voie.

J'exprime ma profonde gratitude à Monsieur Nicolas Zerounian qui a passé beaucoup de temps et d'énergie pour transmettre son savoir-faire pour tous les aspects expérimentaux ou informatiques.

Je tiens également à remercier tout particulièrement Monsieur Stéphane Cabaret pour sa constante disponibilité tant pour la réalisation que pour l'utilisation des moyens de mesure en particulier du nouveau cryostat.

Je remercie particulièrement Messieurs Mauro Enciso et Manuel Rodriguez pour m'avoir fait partager leurs connaissances dans le domaine de hyperfréquences et pour m'avoir fourni des données respectivement pour l'étude de HFET SiGe et des diodes IMPATT.

J'exprime ma gratitude à Monsieur Moustafa El Kurdi avec qui j'ai partagé de fructueuses discussions sur le confinement en k.p entre Bagneux et Bures.

Je tiens également à témoigner ma sympathie aux différents membres du département et du laboratoire que j'ai côtoyé pendant ces années, et en particulier à R. Adde, X. Checoury, P. Crozat, S. David, F. Delgehier, A. Dubois, F. Fossard, L. Giguere, L. Joulaud, C. Kammerer, S. Lepaul, S. Long, J. Mangeney, D. Mhalla, N. Chimot, C. Renaud, S. Sauvage, M. Sirbu et beaucoup d'autres.

Je dédie enfin cette thèse à ma famille et à mes amis qui m'ont tous encouragée durant ces trois années.

SOMMAIRE

Introduction générale	1
1) Intérêts de l'étude de la structure électronique des semi-conducteurs	3
2) Prise en compte de la structure électronique pour l'étude du transport	4
3) Objectifs de la simulation du transport	5
4) Electroluminescence	7
Bibliographie du chapitre 1	8
Diagrammes de bandes en k.p	9
I. Structure de bande d'un semi-conducteur	10
1) Cristal et zone de Brillouin	10
2) Diverses méthodes de résolution de l'équation de Schrödinger	12
3) Histoire de la théorie k.p	12
II. Principe de la théorie k.p	14
1) Construction de l'hamiltonien k.p en trois dimensions sans spin.	14
2) Du modèle de la masse effective à la théorie k.p à 8 bandes.	15
3) Interaction spin orbite	18
III. Matrice k.p à 20 bandes $sp^3s^*« d »$	21
1) Construction de la matrice	21
a) Le modèle sp^3	21
b) Prise en compte des bandes supérieures	23
2) Diagrammes de bandes du GaAs et du Si en k.p à 20 bandes	25
IV. Matrice k.p à 30 bandes (sp^3d^5)	29
1) Construction de l'hamiltonien à 30 bandes	29
a) Première étape : choix des bandes prises en compte	29
b) Deuxième étape : détermination des termes d'interaction non nuls	30
c) Troisième étape : ajustement des paramètres	33
2) Résultats : diagrammes de bandes de Si, Ge et GaAs	35
3) Comparaison des méthodes k.p à 20 et 30 bandes	39
V. Prise en compte de la contrainte dans les alliages SiGe	41
1) Diagramme de bande du SiGe massif	41
a) Paramètres choisis dans notre modèle	41
b) Résultats : relations de dispersion, bande interdite et masses effectives	43
2) Prise en compte de la contrainte en k.p	46
a) Origine de la contrainte	46
b) Hamiltonien de contrainte biaxiale	48

3) Diagramme de bande du $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ contraint sur du $\text{Si}_{1-y}\text{Ge}_y$	50
VI. Confinement	53
1) Modèle de la fonction enveloppe	53
a) <i>Position du problème</i>	53
b) <i>Méthode de calcul de la fonction enveloppe</i>	54
c) <i>Choix des fonctions tests</i>	55
2) Confinement en bande de valence	57
a) <i>Comparaison au k.p à 14 bandes</i>	57
b) <i>Modélisation d'un puits carré de Ge contraint sur $\text{Si}_{0.5}\text{Ge}_{0.5}$</i>	58
3) Confinement en bande de conduction	59
a) <i>Validation de la méthode grâce au modèle de la masse effective</i>	59
b) <i>Diagramme de bande et fonction enveloppe des niveaux confinés en bande de conduction</i>	61
Conclusion	62
Bibliographie du chapitre 2	63
Densité d'états	67
I. Densité d'états dans un semi-conducteur massif	69
1) Définition	69
a) <i>Densité d'états dans l'espace des vecteurs d'onde</i>	69
b) <i>Densité d'états en fonction de l'énergie</i>	70
2) Méthode de calcul	70
a) <i>Discretisation de l'espace des phases</i>	70
b) <i>Surfaces équi-énergie</i>	71
3) Quelques densités d'états	72
II. Densité d'états en deux dimensions	77
1) Définition	77
2) Méthode de calcul	78
3) Résultats	79
III. Masses de densité d'états	83
1) Surfaces équi-énergie en bande de valence	83
2) Définition de la masse de densité d'états	85
3) Masses de densité d'états dans les alliages IV-IV massifs et contraints	86
a) <i>Discretisation de l'espace des phases</i>	86
b) <i>Masses effectives à température ambiante</i>	86
c) <i>Masses effectives de densité d'états en fonction de la température</i>	87
Conclusion	92
Bibliographie du chapitre 3	93

Transport et ionisation par choc	95
I. Transport tridimensionnel	99
1) Présentation de l'équation de Boltzmann	99
a) Généralités sur l'équation de Boltzmann	99
b) Champ électrique	100
c) Interactions avec le réseau cristallin	100
d) Les différentes collisions	102
e) Equation finale	103
2) Résolution matricielle de l'équation de Boltzmann	104
a) Discrétisation des différents termes	105
b) Résolution	108
3) Mobilités des trous dans SiGe massif et contraint	109
a) Paramètres utilisés	109
b) Fréquences d'interaction	110
c) Mobilités	113
4) Transport électronique dans le silicium contraint	117
a) Présentation de la structure de bande utilisée	117
b) Fréquences d'interaction	119
c) Résultats de simulation du transport	120
5) Transport des trous dans le germanium contraint	125
a) Structure électronique	125
b) Fréquences d'interaction	126
c) Résultats de simulation du transport	127
II. Transport en gaz bidimensionnel	129
1) Présentation de l'équation de Boltzmann en gaz bidimensionnel	129
a) Expression des termes d'interactions	130
b) Résolution matricielle	132
2) Premiers résultats dans un puits de Ge contraint sur SiGe	133
a) Diagramme de bande	133
b) Fréquences d'interactions	135
c) Transport à faible champ	137
III. Ionisation par choc	140
1) Modèle physique de l'ionisation par choc	140
2) Coefficient d'ionisation par choc dans le Si contraint sur SiGe	143
a) Taux d'ionisation par choc	143
b) Coefficient d'ionisation par choc	144
3) Coefficient d'ionisation par choc dans le Ge contraint sur SiGe	145
a) Taux d'ionisation par choc	145
b) Coefficient d'ionisation par choc	146

Conclusion	147
Bibliographie du chapitre 4	149
Electroluminescence dans les HFET et les diodes IMPATT SiGe	153
I. Principe et dispositif expérimental	155
1) Objectif des mesures : caractériser l'ionisation par choc	155
2) Dispositif expérimental	156
II. Résultats expérimentaux sur les HFET Si/SiGe et Ge/SiGe	161
1) Les structures	161
2) Etat de l'art des HFET SiGe à la fin de SIGMUND	164
3) Résultats expérimentaux sur l'ionisation par choc dans les p-HFET Ge/SiGe	166
a) <i>Seuils d'électroluminescence</i>	166
b) <i>Interprétation des spectres</i>	167
4) Quelques résultats concernant l'ionisation dans le n-HFET	170
a) <i>Simulation hydrodynamique de n-HFET sous Silvaco</i>	171
b) <i>Luminescence des n-HFETs</i>	177
III. Ionisation par choc dans les diodes IMPATT	185
1) Introduction	185
2) Principe de fonctionnement de la diode IMPATT	185
a) <i>Rôle de la zone de transit</i>	185
b) <i>L'injection</i>	189
c) <i>Schéma équivalent des différentes zones</i>	192
3) Description des structures	192
4) Etat de l'art de la diode IMPATT	194
5) Résultats expérimentaux	195
a) <i>Electroluminescence des diodes IMPATT en direct</i>	195
b) <i>Diodes IMPATT 300 K en inverse</i>	201
c) <i>Résultats Hyperfréquences</i>	205
Bibliographie du chapitre 5	213
Conclusion générale	215
Annexe	219

CHAPITRE 1

Introduction générale

Les composants semi-conducteurs sont devenus le support privilégié de l'information et de la communication, en particulier grâce au développement d'Internet. Aujourd'hui, les transistors MOS sur silicium dominant très largement le marché des semi-conducteurs, mais la diminution de longueur de grille des transistors n'est plus suffisante pour améliorer leurs performances et respecter la loi de Moore. En particulier, pour les systèmes de télécommunications à haut débit, des composants plus rapides sont nécessaires. C'est pour cette raison qu'ont été proposées des structures alternatives : les hétérostructures IV-IV ou III-V. Ils utilisent des semi-conducteurs dans lesquels la masse effective des électrons est plus faible que dans le silicium massif, ce qui améliore leur mobilité. Les composants les plus performants dans ce domaine sont les transistors à effet de champ à hétérojonction (High Electron Mobility Transistor : HEMT) sur substrat III-V. Leurs inconvénients principaux sont leur coût de fabrication et leur faible tenue en tension. Réaliser des hétérostructures sur substrat silicium permet, dans une certaine mesure, de combiner les performances de ce type de composant avec l'appui des technologies silicium bien établies donc à faible coût.

Afin d'effectuer les meilleurs choix technologiques, il est nécessaire de modéliser le comportement de ces composants : il faut non seulement comprendre le transport dans la couche active, en prenant en compte la structure électronique des matériaux et les phénomènes de diffusion des porteurs, mais aussi s'intéresser aux processus susceptibles de se produire à fort champ électrique, tels l'ionisation par choc. Ce mécanisme consiste en la création d'une paire électron-trou par un porteur très énergétique et peut conduire à la destruction du composant par effet d'avalanche. Comme la tendance actuelle est de réduire les longueurs de grille, le champ électrique augmente localement dans les composants, ce qui les rend plus sensibles à l'ionisation par choc. Quantifier ce phénomène dans les composants à base d'alliage SiGe contribue donc à une meilleure compréhension des mécanismes susceptibles de conduire au claquage des transistors et permet d'améliorer leur fiabilité.

Ce travail de thèse a pour objectif d'étudier les phénomènes physiques dans les composants à base d'alliage SiGe en présence de fort champ électrique donc mettant en jeu des porteurs très énergétiques susceptibles d'induire de l'ionisation par choc.

La modélisation du transport à fort champ dans les composants à hétérostructures a déjà fait l'objet de nombreuses études, avec plus ou moins d'approximations sur la structure électronique. Les paramètres intervenant dans les calculs des taux d'interactions apparaissent souvent comme des données intrinsèques du matériau que l'on trouve dans la littérature. Dans les années 80, Shichijo et Hess, pour les électrons dans le GaAs, et Fischetti, pour les électrons dans le Si, ont montré la nécessité de prendre en compte la structure électronique réelle non seulement pour avoir accès à la « vraie » relation de dispersion des porteurs de charge, mais ils ont aussi montré l'étroite corrélation entre la structure électronique et les paramètres des interactions avec les phonons [Shichijo81], [Fischetti88].

Ce travail s'inscrit dans la même démarche pour simuler le transport dans les composants IV-IV. Nous avons développé une méthode de calcul de la structure électronique des semi-conducteurs IV-IV massifs, contraints et en prenant en compte le confinement quantique des porteurs, ce qui constitue la première étape de ce travail.

L'étude du transport consiste à prendre en compte l'effet des perturbations de ce potentiel cristallin dues au champ extérieur mais aussi aux vibrations du réseau, aux autres porteurs ou aux charges fixes. L'équation de Boltzmann permet de formaliser le transport de manière semi-classique. Dans la littérature, on rencontre de nombreux articles traitant de la résolution de l'équation de Boltzmann dans des matériaux divers. Certains s'appuient sur une description des bandes simplifiée (bandes isotropes paraboliques), d'autres moins simple (bandes paraboliques non isotropes...), d'autres enfin utilisent une structure réelle (« full band »). Il apparaît complexe, de nos jours, de choisir les paramètres pour les taux d'interactions dès lors qu'ils ne renvoient pas au même niveau de description de la structure électronique. Un des objectifs du présent manuscrit est de clarifier le choix des paramètres en fonction de la structure électronique en proposant une démarche cohérente et en discutant l'impact des hypothèses sur la structure de bande sur le choix des paramètres. Différents niveaux de modélisation de la structure électronique ont été utilisés pour résoudre l'équation de Boltzmann pour les trous dans les alliages SiGe, pour simplement obtenir les mobilités faible champ ou simuler le transport à fort champ.

A fort champ électrique, les perturbations du potentiel cristallin sont plus complexes puisqu'il y a création de porteurs par ionisation par choc. Dans les transistors, ce phénomène est nuisible car il accélère le vieillissement des transistors. Il peut cependant être mis à profit pour réaliser des capteurs ou des oscillateurs. Le calcul du coefficient d'ionisation par choc, qui permet d'évaluer le nombre de porteurs créés, nécessite de connaître la structure électronique et la fonction de

distribution des porteurs. La modélisation du transport menée durant ce travail donne accès à ce coefficient dans les semi-conducteurs IV-IV contraints.

Pour donner du sens à la simulation d'un phénomène physique, il est indispensable de s'appuyer sur des résultats expérimentaux. Des mesures du signal d'électroluminescence émis par des composants à base de SiGe ont été réalisées au cours de cette thèse. Associées à des mesures électriques, elles nous ont permis de mieux comprendre le transport en régime d'ionisation par choc.

1) Intérêts de l'étude de la structure électronique des semi-conducteurs

Développer une méthode de calcul de la structure électronique d'un semi-conducteur en 2004, alors que tous les semi-conducteurs usuels sont connus depuis plus de 25 ans, peut sembler étonnant. En effet, dès 1966, Cardona et Pollak avaient calculé la structure de bande du Si et du Ge à l'aide de la méthode **k.p** [Cardona66]. En 1976, Chelikowsky et Cohen ont fourni les diagrammes de bande de la plupart des semi-conducteurs usuels [Chelikowsky76]. Cependant, l'amélioration de la technologie de fabrication a permis, au cours des années 80, l'avènement des composants à hétérostructure, d'abord sur substrat III-V, tels les transistors bipolaires à hétérojonction (TBH) puis les HEMT. Le concept d'ingénierie des bandes est devenu incontournable. Pour les TBH, il s'agit, entre autres, d'utiliser les décalages de bande interdite pour favoriser l'injection des porteurs minoritaires dans la base du transistor en limitant la diffusion des minoritaires dans l'émetteur. Pour les transistors à effet de champ, l'objectif de l'ingénierie de bandes est de séparer le canal des zones dopées pour améliorer le transport en limitant la diffusion sur les impuretés ionisées. Tous ces concepts ont été transposés aux semi-conducteurs IV-IV pour bénéficier du savoir-faire de la technologie silicium bien établie. Pourtant, il ne suffit pas de connaître les hauteurs de barrière entre semi-conducteurs pour améliorer les composants.

D'une part, les semi-conducteurs sont des solides cristallins dont le paramètre de maille est fixe. Lorsqu'on fait croître un semi-conducteur sur un autre, s'il existe un désaccord de maille, des contraintes apparaissent dans la couche épitaxiée, ce qui provoque des dislocations pour une épaisseur supérieure à l'épaisseur critique. L'influence de la contrainte sur les structures électroniques des semi-conducteurs doit être prise en compte. Elle a été modélisée par Bir et Pikus [Bir74] et a été intégrée dans les méthodes existantes de calcul de structure de bande. Cependant, le plus souvent, la contrainte est considérée localement : les paramètres de Bir et Pikus sont utilisés pour quantifier son influence en centre de zone notamment pour la bande de valence. Dans les semi-conducteurs à bande interdite indirecte, des potentiels de déformation

locaux dans l'espace réciproque Γ_u et Γ_d quantifient l'influence de la contrainte pour la vallée Δ du silicium ou la vallée L du germanium par exemple.

D'autre part, l'épaisseur des couches utilisées pour la réalisation d'hétérostructures est souvent de l'ordre de quelques nanomètres. Les effets quantiques, souvent négligés lors de l'étude du transport dans les semi-conducteurs, deviennent incontournables. Non seulement ils modifient la relation de dispersion des semi-conducteurs, mais le modèle particulière de l'électron devient caduc au moins dans la direction de confinement. Un accès à la fonction d'onde de l'électron est nécessaire.

La structure électronique des puits quantiques est souvent calculée à partir de l'approximation de la masse effective, à l'aide du formalisme de la fonction enveloppe [BenDaniel66]. Ce formalisme associé à un modèle **k.p** à 6 bandes est aussi utilisé pour la bande de valence par Bastard [Bastard86]. Récemment, Moustafa El Kurdi a montré la nécessité de prendre en compte un modèle **k.p** à 14 bandes pour modéliser précisément les puits quantiques en bande de valence dans les semi-conducteurs à bande interdite indirecte [ElKurdi2003].

La méthode **k.p** à 30 bandes, développée au cours de cette thèse, a pour objectif d'unifier tous ces aspects. A partir des diagrammes de bande des semi-conducteurs massifs, l'influence de la contrainte biaxiale est modélisée par un Hamiltonien de contrainte qui généralise celui de Bir et Pikus. Cette méthode évite l'utilisation de potentiels de déformation locaux et permet de décrire l'effet de la contrainte sur toute la zone de Brillouin. Pour obtenir les niveaux confinés dans un puits quantique en bande de valence comme en bande de conduction, le formalisme de la fonction enveloppe a été associé à la méthode **k.p** à 30 bandes.

De plus, elle donne accès à la structure électronique des semi-conducteurs considérés sur une gamme d'énergie de l'ordre d'une douzaine d'eV aux alentours de la bande interdite. La modélisation du transport en tenant compte de la structure électronique réelle des semi-conducteurs massifs ou contraints est possible même pour des porteurs très énergétiques susceptibles d'induire de l'ionisation par choc.

2) Prise en compte de la structure électronique pour l'étude du transport

On peut tout connaître sur la structure de bande et ne pas pouvoir l'exploiter. Pour des simulations physiques du transport dans un semi-conducteur, la densité d'états disponibles pour un porteur de charge d'énergie donnée intervient fréquemment, notamment dans le calcul des fréquences d'interaction. Elle donne accès au taux d'ionisation par choc pour un modèle intermédiaire entre celui, rigoureux mais difficile à mettre en œuvre de Kane [Kane67] et celui de Keldysh, avec un seuil dépendant de la bande interdite [Keldysh65]. Cette densité ne dépend que

de la structure électronique du semi-conducteur considéré sur toute la zone de Brillouin. La calculer permet de valider les structures électroniques obtenues à l'aide de la méthode **k.p** à 30 bandes par comparaison avec des densités d'états issues d'autres techniques de calcul de bande (pseudopotentiel [Chelikowsky76], liaisons fortes [Jancu98]...).

Dans un puits quantique, la densité d'états est réputée être en « marches d'escalier ». C'est vrai dans le cadre de l'approximation parabolique mais prendre en compte la relation de dispersion réelle bidimensionnelle la modifie profondément. Les conséquences seront importantes sur le transport en gaz bidimensionnel.

La masse effective reste tout de même un outil simple pour une étude sommaire du transport. Mais le choix de cette masse en bande de valence n'est pas évident. Suivant le niveau de modélisation souhaité, une masse issue de la densité d'états permet de tenir compte, dans une certaine mesure, de la structure électronique réelle du semi-conducteur considéré.

Calculer la densité d'états est donc une étape clef pour prendre en compte la structure électronique dans une étude du transport.

3) Objectifs de la simulation du transport

Un des objectifs importants de l'électronique des composants est d'étudier et de fabriquer des dispositifs fonctionnant à vitesse élevée et pouvant donc être utilisés, soit en logique rapide, soit en hyperfréquence. Afin de réaliser les meilleurs choix technologiques il est indispensable d'effectuer des simulations de ces composants. Plusieurs niveaux de modélisation existent. Ils réalisent des approximations plus ou moins importantes, sont plus ou moins aisés à mettre en œuvre et requièrent des temps de calcul très différents. Les modèles les moins sophistiqués sont phénoménologiques. Il s'agit de modèles analytiques électriques (de type SPICE par exemple). L'objectif est de reproduire le comportement du dispositif le mieux possible pour simuler un circuit. Les temps de simulation sont courts mais on ne peut guère attendre d'explications ou de prédictions concernant la physique du fonctionnement des transistors à l'aide de tels modèles. Les modèles de type « Dérive Diffusion » ou « Hydrodynamique » permettent déjà d'obtenir un certain nombre d'informations sur la physique des dispositifs étudiés et sont des modèles plus performants. Des équations plus ou moins sophistiquées sont alors résolues. L'approche hydrodynamique est la plus pointue car elle est « non locale » et permet de traduire des effets de transport non stationnaire. Enfin, la seule approche qui garantisse des résultats fiables au niveau microscopique, consiste dans une résolution directe du transport électronique dans les matériaux constituant le composant, notamment les semi-conducteurs. Une telle approche donne accès aux grandeurs microscopiques qui caractérisent un matériau soumis à une force externe (un champ électrique, magnétique...), l'énergie des porteurs de charge, leur vitesse, leur fonction de

distribution. Cette résolution directe dans les matériaux ne permet pas de simuler un composant entier mais peut fournir des paramètres pour des modèles phénoménologiques de type « Derive Diffusion » ou « Hydrodynamique ».

La simulation du transport effectuée au cours de cette thèse est fondée sur l'approche microscopique semi-classique de l'équation de Boltzmann. Cette équation permet de connaître la distribution des porteurs dans l'espace des phases en fonction des forces extérieures appliquées au semi-conducteur (champ électrique dans notre cas) et des interactions qu'ils subissent. Elle est dite semi-classique car les interactions subies par les porteurs sont traitées des manière quantique, en termes de probabilité de passage d'un état à l'autre, mais l'influence du champ électrique ou d'autres forces extérieures sur la trajectoire des porteurs est supposée régie par la relation fondamentale de la dynamique utilisée en mécanique classique.

Il existe plusieurs méthodes de résolution de cette équation. La méthode la plus connue est la méthode Monte Carlo, qui traite l'évolution de la distribution de porteurs de manière stochastique. Cette méthode est assez simple à mettre en œuvre car elle ne nécessite que le calcul des termes de sortie. Cependant, elle ne permet pas de modéliser des processus dont les temps caractéristiques sont très différents.

Nous avons choisi une technique déterministe de résolution matricielle directe de l'équation de Boltzmann. Cette technique donne accès à un unique état stationnaire, indépendant des conditions initiales [Aubert84]. Par conséquent, elle permet la modélisation de processus lents, dont la constante de temps est très différente des autres processus pris en compte. Cependant, elle exige non seulement le calcul des termes de sortie ou temps de relaxation, mais aussi celui des termes d'entrée, c'est-à-dire la probabilité pour une particule d'entrer dans un état.

Dans les transistors à effet de champ à hétérostructure, le canal peut être considéré comme un puits quantique, dans lequel les mouvements des porteurs sont seulement libres dans le plan des couches, les niveaux d'énergie étant quantifiés dans l'axe de croissance. Comme nous avons accès aux relations de dispersion réelles dans les puits quantiques, une première simulation du transport « full band » en gaz bidimensionnel a été mise en œuvre en bande de valence.

La réduction de la taille des dispositifs, en conservant les mêmes tensions de polarisation, entraîne invariablement une augmentation des champs électriques régnant dans les composants. Les porteurs peuvent alors gagner suffisamment d'énergie pour induire de l'ionisation par choc. Pour modéliser ce processus, il est nécessaire d'avoir accès à la relation de dispersion des porteurs à très haute énergie, d'où l'intérêt de la méthode **k.p** à 30 bandes qui fournit la structure électronique des semi-conducteurs considérés jusqu'à 5 eV de chaque côté de la bande interdite. Néanmoins, cette relation de dispersion complète est difficile à intégrer dans une modélisation de

transport tridimensionnelle, c'est pourquoi des hypothèses plus ou moins fortes ont été utilisées pour résoudre l'équation de Boltzmann en considérant un diagramme de bande simplifié, tout en respectant les densités d'état réelles.

Il existe très peu de données sur les coefficients d'ionisation par choc dans les semi-conducteurs IV-IV contraints. La résolution de l'équation de Boltzmann à fort champ électrique mise en œuvre au cours de cette thèse donne accès aux fonctions de distribution qui permettent de calculer les coefficients d'ionisations par choc et d'interpréter quelques résultats de mesures d'électroluminescence réalisées au cours de cette thèse.

4) Electroluminescence

Pour la première fois des mesures d'électroluminescence ont été réalisées sur des HFET (Heterojunction Field Effect Transistor) à base d'alliages SiGe. Il s'agit d'analyser le rayonnement émis par les composants polarisés : le rayonnement qui nous intéresse est lié à la recombinaison radiative de porteurs créés par ionisation par choc. L'étude de ce rayonnement peut permettre une meilleure compréhension de l'ionisation par choc, en la localisant dans le composant, et en analysant la corrélation entre ce phénomène et les performances du transistor. En particulier, une étude spectrale de ce rayonnement peut permettre de remonter à l'énergie des porteurs impliqués dans ce processus. Comme ces matériaux sont à bande interdite indirecte, la recombinaison radiative nécessite l'intermédiaire d'un phonon et y est donc moins probable que dans les semi-conducteurs III-V.

Des mesures de spectres d'électroluminescence ont néanmoins été réalisées sur des HFET de type p à canal Ge contraint sur SiGe à température ambiante, et sur des n-HFET à canal Si sur SiGe à température cryogénique. L'analyse des seuils d'électroluminescence nous a montré que l'ionisation par choc se produisait dans des conditions de polarisation assez proches des conditions optimales hyperfréquences ou faible bruit. L'intérêt de l'étude de l'ionisation par choc est démontré.

Nous avons aussi réalisé des mesures d'électroluminescence sur des diodes IMPATT SiGe pour différents pourcentages de Ge. Associées à des mesures hyperfréquences réalisées par Manuel Rodriguez, les mesures d'électroluminescence nous ont permis de remonter au coefficient d'ionisation par choc et de comparer finalement expérience et résultats de modélisation.

BIBLIOGRAPHIE DU CHAPITRE 1

- [Aubert84] J. P. Aubert, J. C. Vaissiere, and J. P. Nougier, “Matrix determination of the stationary solution of the Boltzmann equation for hot carriers in semiconductors”, *J. Appl. Phys.* **56**, 4, 1128-32 (1984)
- [Bastard86] G. Bastard et J.A. Brum, “Electronic states in semiconductor heterostructures”, *IEEE J. Quantum Electronics.* **22**, 9, 1625-44 (1986)
- [BenDaniel66] D.J. BenDaniel et C.B. Duke, “Space-Charge Effects on Electron Tunneling”, *Phys. Rev.* **152**, 683-92 (1966).
- [Bir74] G. L. Bir et G. E. Pikus, *Symmetry and Strain-Induced Effects in Semiconductors*, John Wiley & Sons, New York/Toronto (1974)
- [Cardona66] M. Cardona et F.H. Pollak, “Energy-Band structure of Germanium and Silicon : the k.p Method”, *Phys. Rev.* **142**, 2, 530-43 (1966)
- [Chelikowsky76] J.R. Chelikowsky et M.L. Cohen, “Nonlocal pseudopotential calculations for the electronic structure of eleven diamond and zinc-blende semiconductors,” *Phys. Rev. B* **14**, 2, 556-82 (1976)
- [Elkurdi2003] M. Elkurdi, G. Fishman, S. Sauvage et P. Boucaud. “Comparison between 6-band and 14-band k.p formalisms in SiGe/Si heterostructures”, *Phys. Rev. B* **68**, 165333 (2003)
- [Fischetti88] M.V. Fischetti et S.E. Laux, “Monte Carlo analysis of electron transport in small semiconductor devices including band-structure and space-charge effects”, *Phys. Rev. B* **38**, 14, 9721-45 (1988)
- [Jancu98] J.M. Jancu, R. Scholz, F. Beltram et F. Bassani “Empirical spds* tight-binding calculation for cubic semiconductors: General method and material parameters”, *Phys. Rev. B* **57**, 11, 6493-6507 (1998)
- [Kane67] E. O. Kane, “Electron Scattering by Pair Production in Silicon”, *Phys. Rev.* **159**, 3, 624-31 (1967)
- [Keldysh65] L. V. Keldysh, *Sov. Phys. JETP* **21**, 1135 (1965)
- [Shichijo81] H. Shichijo et K. Hess, “Band structure dependant transport and Impact ionization in GaAs”, *Phys. Rev. B* **23**, 8, 4197-209 (1981)

CHAPITRE 2

Diagrammes de bandes en **k.p**

Afin d'étudier le transport des porteurs de charge dans un semi-conducteur, il est nécessaire de connaître la relation de dispersion, qui lie leur vecteur d'onde et leur énergie. Pour un électron

dans le vide, cette relation de dispersion s'écrit : $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}$

avec E l'énergie, m_0 la masse de l'électron libre, \vec{k} son vecteur d'onde et \hbar la constante de Planck divisée par 2π . Cette relation ne sera calculée que pour les électrons de valence : les électrons de cœur appartiennent à des orbitales complètement remplies et sont principalement localisés au voisinage du noyau auquel ils appartiennent. Cette relation de dispersion est obtenue en résolvant l'équation de Schrödinger dans un potentiel périodique formé par les ions supposés fixes. L'ensemble de ces fonctions de dispersion des électrons dans l'espace réciproque est appelé structure de bande ou structure électronique du semi-conducteur.

L'objectif de ce chapitre est de calculer cette structure de bande, d'abord pour un semi-conducteur massif, puis en prenant en compte la contrainte et le confinement des porteurs. Après quelques généralités sur les techniques de calcul de la structure électronique, nous étudierons le principe de la théorie **k.p** (§ II) puis les méthodes à 20 bandes (§ III) et 30 bandes (§ IV) seront détaillées. Nous verrons ensuite qu'une extension de ces méthodes donne aussi accès à la structure électronique des matériaux contraints (§ V). Enfin, comme l'objectif de cette thèse est de modéliser le transport dans des hétérostructures, nous verrons que le formalisme de la fonction enveloppe associé à la méthode **k.p** donne aussi accès aux sous-bandes confinées non seulement en centre de zone de Brillouin pour la bande de valence mais aussi en bande de conduction des semi-conducteurs à bande interdite indirecte (§ VI).

I. Structure de bande d'un semi-conducteur

1) Cristal et zone de Brillouin

Si on souhaite simuler un phénomène physique impliquant des particules évoluant dans un cristal, le premier élément à connaître est la fonction de dispersion de ces particules dans le milieu. La dérivée de la fonction de dispersion donne la vitesse de groupe et donc la vitesse d'une particule. Pour un semi-conducteur, l'ensemble de ces relations de dispersion des électrons constitue la structure de bande.

Les semi-conducteurs sont des solides cristallins. La plupart s'ordonne selon un réseau cubique à face centrée, avec occupation d'un site tétraédrique sur deux. Ils présentent une structure de type zinc-blende si les deux atomes sont différents. Dans ce cas, ces semi-conducteurs appartiennent au groupe T_d . C'est typiquement le cas des matériaux III-V tels GaAs, InP... où les atomes du groupe III -cations Ga ou In- et V -anions As ou P- sont situés aux nœuds de 2 réseaux cubiques à faces centrées, décalés l'un par rapport à l'autre du quart de la diagonale (fig. 1). C'est aussi le cas du $\text{Si}_{0,5}\text{Ge}_{0,5}$ dans la famille des matériaux IV-IV. Si les deux atomes sont identiques (Si, Ge, C), cette structure est celle du diamant. Les semi-conducteurs qui cristallisent dans ce système appartiennent au groupe O_h .

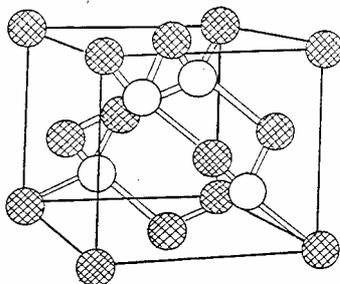


Figure 1 : Structure cristalline des composés III-V

La relation de dispersion $E(\vec{k})$ s'obtient en résolvant l'équation de Schrödinger en tenant compte des interactions avec les atomes du cristal (noyaux et électrons). Dans l'approximation de Bloch, où l'électron considéré est soumis à un potentiel moyen périodique dû aux autres électrons et au réseau cristallin, l'équation de Schrödinger s'écrit :

$$H\psi = \left[\frac{p^2}{2m_0} + V(\vec{r}) \right] \psi = E\psi$$

où \vec{p} est l'opérateur quantité de mouvement : $\vec{p} = -i\hbar\vec{\nabla}$, m_0 la masse de l'électron et $V(\vec{r})$ le potentiel périodique vu par l'électron dû aux atomes du réseau cristallin. Dans le vide, les solutions de l'hamiltonien $H = \frac{p^2}{2m_0}$ sont des ondes planes $e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$. Dans le cristal, les solutions de l'équation de Schrödinger sont les fonctions de Bloch, produits d'ondes planes par des fonctions périodiques $u_{n,k}(\vec{r})$:

$$\mathbf{y}_{n,k}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u_{n,k}(\vec{r})$$

La structure périodique du réseau réciproque permet de replier l'espace des \vec{k} et de restreindre le vecteur d'onde à une cellule primitive, la première zone de Brillouin (fig. 2).

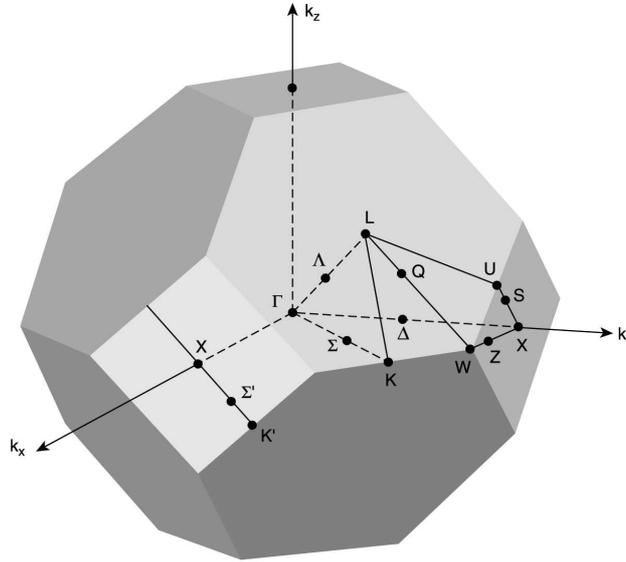


Figure 2 : Zone de Brillouin du diamant.

Dans cette zone de Brillouin, on distingue trois directions principales :

- la direction Δ reliant les points Γ (centre de la zone de Brillouin) et X $\left[\frac{2\mathbf{p}}{a}(1,0,0) \right]$
- la direction Λ reliant Γ et L $\left[\frac{2\mathbf{p}}{a}\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right) \right]$
- la direction Σ reliant Γ et K $\left[\frac{2\mathbf{p}}{a}\left(\frac{3}{4}, \frac{3}{4}, 0\right) \right]$.

Les points K et U $\left[\frac{2\mathbf{p}}{a}\left(1, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}\right) \right]$ sont équivalents du point de vue cristallographique. Nous verrons que respecter cette équivalence est un point clef pour obtenir une description correcte de

la structure de bande en théorie **k.p**. Les structures de bande existantes sont souvent présentées dans ces trois directions assez représentatives de la structure totale [Chelikowsky76], mais avoir seulement accès à $E(\vec{k})$ dans ces trois directions ne permet pas de décrire toute la zone de Brillouin.

2) Diverses méthodes de résolution de l'équation de Schrödinger

Les relations de dispersion des matériaux massifs ont été étudiées par deux types de théories. Le premier type contient les théories ayant peu de paramètres ajustables (un seul dans le cas minimum), telles par exemple la méthode du pseudo-potential [Wang96], ou la méthode de la « boîte de camembert » (traduction de *muffin-tin*) [Willatzen94]. Le deuxième type contient des théories avec une série de paramètres ajustables telle la méthode dite CLOA (Combinaison Linéaire d'Orbitales Atomiques), en anglais LCAO ou des liaisons fortes (en anglais *tight binding*) [Vogl83], [Jancu98], et bien sûr la méthode **k.p**. Le nombre de paramètres ajustables dépend du nombre de bandes que l'on veut décrire et de la précision recherchée. Typiquement, 5-6 paramètres sont nécessaires au voisinage de la bande interdite, une vingtaine si plusieurs bandes sont utiles.

3) Histoire de la théorie k.p

La théorie de la structure de bande basée sur la méthode **k.p** (ou, en abrégé, théorie **k.p**) est née dans les années cinquante. Elle utilise les propriétés qu'engendre la symétrie d'un certain nombre de points de la zone de Brillouin sur les énergies. Les premiers articles [Dresselhaus55], [Luttinger55] décrivent en détails le sommet de la bande de valence, via des perturbations du second ordre appliquées à un état dégénéré. Le couplage de la bande de valence et de la bande de conduction est pour la première fois décrit en détail par Kane [Kane57], qui relie la masse effective, la bande interdite et le couplage spin-orbite. Les deux théories de Luttinger-Kohn et de Kane seront combinées par Pidgeon et Brown [Pidgeon66], qui définiront les paramètres de type Luttinger et construiront un hamiltonien à 8 bandes. Dès lors, la théorie est bien comprise, et la méthode **k.p** permet de décrire la bande de valence et la première bande de conduction des semi-conducteurs à bande interdite directe au voisinage du centre de la zone de Brillouin. Les paramètres de type Luttinger simulent l'influence des bandes non prises en compte. Ajouter des bandes permet d'étendre de domaine de validité de la méthode ou offre une meilleure précision pour le calcul des fonctions d'onde. Ainsi, Pfeffer et Zawadski [Pfeffer90] passent à 14 bandes pour prendre en compte le « splitting » de spin de la bande de conduction.

Cardona et Pollak [Cardona66] ont un autre point de vue : ils utilisent une base de 15 fonctions (sans spin) pour décrire la structure de bande du silicium et du germanium sur toute la zone de Brillouin. Ils n'ont plus besoin de prendre en compte l'influence des autres bandes sur les 15 bandes du « voisinage » de la bande interdite, séparant la bande de conduction de la bande de valence de sorte que l'introduction des paramètres de Luttinger ou même de type Luttinger n'est plus nécessaire. Prendre en compte le spin oblige à passer à 30 bandes, ce qui paraissait délicat, c'est pourquoi Nicolas Cavassilas *et al.* ont développé un hamiltonien à 20 bandes [Cavassilas2001], en simulant l'influence des bandes d à l'aide de bandes fictives s^* et de paramètres de type Luttinger aussi en bande de conduction. Ils ont obtenu une description précise de la structure de bande de -1 eV à 3.5 eV, l'origine des bandes étant le sommet de la bande de valence. Mais finalement, nous verrons que passer à 30 bandes en introduisant l'interaction spin-orbite dans l'hamiltonien de Cardona et Pollak permet d'étendre le domaine de validité de cette méthode de -6 eV à +5 eV sur toute la zone de Brillouin sans multiplier le nombre de paramètres ajustables. Nous constaterons même que le nombre de paramètres ajustables diminue.

II. Principe de la théorie $\mathbf{k.p}$

1) Construction de l'hamiltonien $\mathbf{k.p}$ en trois dimensions sans spin.

La théorie $\mathbf{k.p}$ est une méthode de résolution de l'équation de Schrödinger qui s'apparente à un développement limité de la structure de bande à partir du centre de la zone de Brillouin. Plus on considère de bandes, c'est-à-dire plus l'ordre du développement limité est grand, plus le domaine de validité de la méthode s'accroît.

Le point de départ est l'équation de Schrödinger indépendante du temps :

$$H\psi = \left[\frac{p^2}{2m_0} + V(\vec{r}) \right] \psi = E\psi$$

dont les solutions sont des fonctions de Bloch, produits d'une partie périodique $u_{n,k}(\vec{r})$ et d'une onde plane $e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$.

L'équation vérifiée par les parties périodiques des fonctions de Bloch est la suivante :

$$H_{kp}u_{n,k}(\vec{r}) = \left[\frac{p^2}{2m_0} + V(\vec{r}) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{\hbar}{m_0} \vec{k} \cdot \vec{p} \right] u_{n,k}(\vec{r}) = E_{n,k} u_{n,k}(\vec{r})$$

Pour résoudre cet hamiltonien $\mathbf{k.p}$, on suppose que les fonctions $u_{n,0}(\vec{r}) = u_n(\vec{r})$ sont connues, ainsi que les énergies propres en $k = 0$: $\langle u_n | H_{kp} | u_n \rangle = E_n$ et les éléments de matrice $\langle u_n | \vec{p} | u_n \rangle$.

On projette alors l'hamiltonien $\mathbf{k.p}$ sur la base des $u_{n,0}(\vec{r})$. Les éléments de matrice de l'hamiltonien s'écrivent alors :

$$\langle u_n | H_{kp} | u_n \rangle = \left(E_n + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \right) \delta_{n,n'} + \langle u_n | \frac{\hbar}{m_0} \vec{k} \cdot \vec{p} | u_n \rangle$$

Comme la base des $u_n(\vec{r})$ est infinie, la résolution des états propres de cet hamiltonien ne peut être qu'approchée : on projette cet hamiltonien sur une base restreinte des $u_n(\vec{r})$. Les valeurs propres de cet hamiltonien fourniront les énergies propres $E_{n,\vec{k}}$ et les vecteurs propres fourniront les coefficients c_i tels que : $u_{n,k}(\vec{r}) = \sum_i c_i u_{i,0}(\vec{r})$.

En pratique, les éléments $\langle u_n | H_{kp} | u_n \rangle = E_n$ sont les énergies des bandes en $k = 0$, souvent connues expérimentalement. Par exemple, l'énergie de bande interdite fournit les positions relatives des bandes de conduction et de valence. D'autres différences d'énergie sont connues

parce qu'elles sont mesurables optiquement, comme par exemple le couplage spin-orbite de la bande de valence.

La dimension de la base, soit le nombre de bandes prises en compte, détermine le domaine de validité de la méthode.

2) Du modèle de la masse effective à la théorie $\mathbf{k.p}$ à 8 bandes.

Le modèle de la masse effective peut être considéré comme une théorie $\mathbf{k.p}$ à une bande, l'influence des autres bandes étant traitée comme perturbation.

Hamiltonien à une bande :

La matrice $\mathbf{k.p}$ se réduit à un seul élément : $\langle u_0 | H_{kp} | u_0 \rangle = E_0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}$

Si on ne prend pas en compte l'influence des autres bandes, on retrouve la relation de dispersion de l'électron libre. Au cas où le terme $\frac{\hbar}{m_0} \vec{k} \cdot \vec{p}$ est très faible devant les différences d'énergie entre bandes, on peut traiter l'influence des autres bandes par perturbation sur la bande i . On obtient alors :

$$E_i(k) = E_{i0} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \left(\frac{\hbar}{m_0} \right)^2 \sum_{u,v} \sum_{n \neq i} \frac{\langle u_i | p_u | u_n \rangle \langle u_n | p_v | u_i \rangle}{E_i - E_n} k_u k_v$$

où $u, v = x, y, z$. Cette méthode fait simplement varier la masse effective des bandes, qui restent paraboliques, comme le montre la figure 3.

Hamiltonien à deux bandes :

En considérant deux bandes u_c, u_v de symétrie s , d'énergies respectives E_c et E_v séparées en énergie par E_G , on obtient l'hamiltonien suivant, où l'on peut prendre P réel :

$$H_{kp} = \begin{bmatrix} E_G + \tilde{k}^2 & Pk \\ Pk & \tilde{k}^2 \end{bmatrix} \text{ avec } \tilde{k}^2 = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \text{ et } P = \frac{\hbar}{m_0} \langle u_v | p | u_c \rangle$$

Les énergies que l'on souhaite calculer sont les valeurs propres de cette matrice. Il suffit donc de la diagonaliser pour les valeurs de k qui nous intéressent.

On définit l'énergie E_p de la manière suivante :

$$E_p = \frac{2}{m_0} \left| \langle u_v | p | u_c \rangle \right|^2 \text{ de sorte que } P^2 k^2 = E_p \tilde{k}^2 = E_p \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}$$

Comparons les hamiltoniens à une bande (masse effective) et à deux bandes dans le cas du GaAs dont les paramètres sont définis dans le tableau I.

Bande interdite	$E_G = 1.519 \text{ eV}$
Masse effective de conduction	$m_c^* = 0.067 m_0$
Energie d'interaction	$E_p = 21 \text{ eV}$

Tableau I : Paramètres du GaAs en théorie k.p à deux bandes.

Si l'énergie d'interaction E_p est nulle, on retrouve la relation de dispersion de l'électron libre (\mathbf{k}, \mathbf{p} à une bande), comme le montre la figure 3.

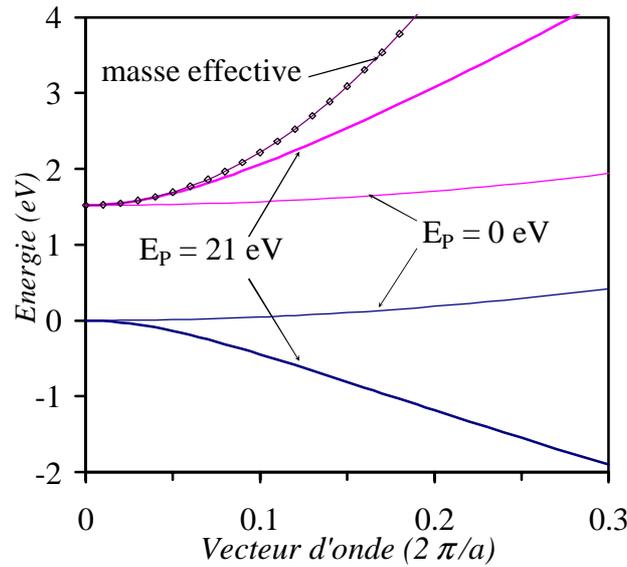


Figure 3 : Comparaison des relations de dispersion obtenues en masse effective et k.p deux bandes.

Si on considère l'influence de la bande de valence comme une perturbation sur la bande de conduction, on obtient l'expression suivante de E_c .

$$E_c(k) = E_G + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{P^2 k^2}{E_G} = E_G + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \left(1 + \frac{E_p}{E_G} \right) = E_G + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_c^*}$$

Avec les valeurs numériques considérées (tableau I), cette équation permet de retrouver la masse effective de la bande de conduction mais la non-parabolicité n'apparaît plus.

Hamiltonien à huit bandes :

La première bande de conduction du GaAs et de la plupart des semi-conducteurs est de symétrie « s ». Elle est notée Γ_1 dans le groupe simple et Γ_6 dans le groupe double T_d (avec les notations de Koster *et al.* que nous prendrons dans tout le manuscrit [Koster63]). L'effet du couplage spin-orbite sur cette bande est simplement de remplacer la bande de conduction par deux niveaux

dégénérés. En revanche, la bande de valence, notée Γ_5 , est de symétrie « p ». Sans le couplage spin-orbite, cette bande se divise en trois niveaux dégénérés en $k = 0$ notés $|X\rangle$, $|Y\rangle$, $|Z\rangle$. Ce couplage modifie les fonctions de base qui deviennent des mélanges des fonctions $|X\rangle$, $|Y\rangle$ et $|Z\rangle$, et lève en partie la dégénérescence en $k = 0$. L'expression de ces fonctions de base est rappelée en annexe. On obtient deux bandes Γ_8 et Γ_7 séparées par l'énergie Δ . La bande Γ_8 est dégénérée quatre fois (deux bandes de trous lourds, deux bandes de trous légers) Le couplage est décrit par les paramètres de Luttinger ($\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$). On peut seulement définir une masse effective dans une direction donnée.

Par exemple, la masse effective des trous lourds en unités atomiques est $\frac{1}{\gamma_1 - 2\gamma_2}$ dans la direction $[100]$ et $\frac{1}{\gamma_1 - 2\gamma_3}$ en direction $[111]$. La description la plus simple de ce couplage des trous lourds et trous légers est donnée par l'hamiltonien 4×4 de Luttinger et Kohn [Luttinger55]. La figure 4a montre les résultats obtenus avec cet hamiltonien, sans tenir compte du couplage de la bande Γ_8 avec les bandes de conduction Γ_6 et spin-orbite Γ_7 supposées paraboliques.

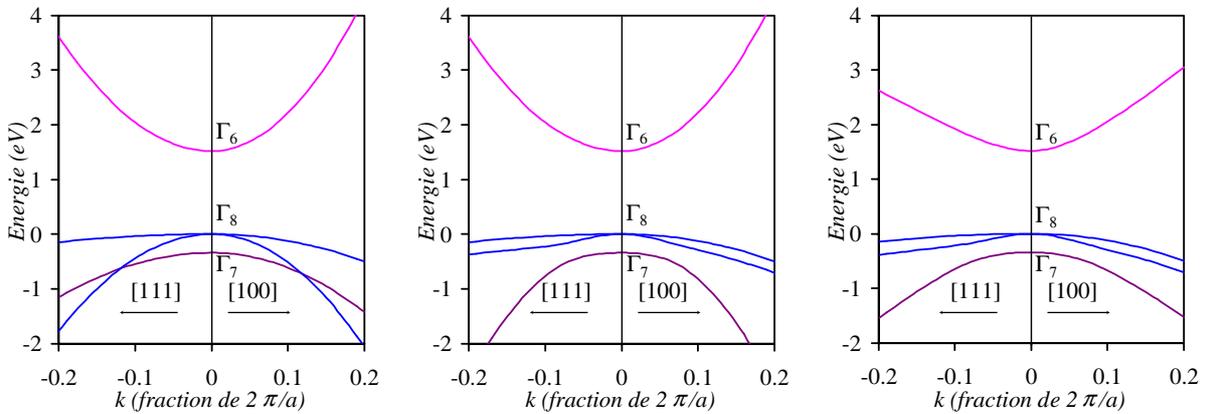


Figure 4 : De la masse effective au k.p 8 bandes.

Figure 4a : les bandes Γ_6 , Γ_7 et Γ_8 sont indépendantes et paraboliques.

La courbure des bandes Γ_6 et Γ_7 est l'inverse de leur masse effective et celle des bandes Γ_8 est liée aux paramètres de Luttinger.

Figure 4b : la bande Γ_6 de conduction, toujours parabolique, est indépendante de la bande de valence (Γ_8, Γ_7) mais le couplage spin-orbite est pris en compte.

Figure. 4c : les bandes Γ_6, Γ_7 et Γ_8 sont couplées. Aucune bande n'est parabolique.

Les paramètres de Luttinger ont le même rôle que la masse effective pour une bande non dégénérée : ils permettent de tenir compte de l'influence des bandes non prises en compte dans l'hamiltonien considéré. Dans le cas de l'hamiltonien de Luttinger-Kohn, ils modélisent

l'influence de toutes les autres bandes. Ce sont les « vrais » paramètres de Luttinger, mesurés expérimentalement [Pfeffer90].

La description des bandes obtenue figure 4a est valide sur une très faible proportion (environ 5 %) de la zone de Brillouin pour le GaAs : en effet, la bande des trous légers est couplée avec la bande Γ_7 donc elle ne la croise pas mais la repousse ; c'est un anticroisement. L'hamiltonien à six bandes [Luttinger56] permet de tenir compte de ce couplage : le croisement de la figure 4a devient un « anticroisement » sur la figure 4b. La bande de valence n'est plus parabolique.

Enfin, d'après la figure 4c, si la bande de conduction Γ_6 est couplée à la bande de valence par l'hamiltonien de Pidgeon et Brown [Pidgeon66], elle devient non parabolique. Les paramètres de Luttinger utilisés dans cet hamiltonien sont différents de ceux de l'hamiltonien 4x4 de Luttinger-Kohn : la bande Γ_6 n'est plus seulement considérée comme perturbation : on parle de pseudo-paramètres de Luttinger (« Luttinger-like parameters »).

Nous verrons que dans l'hamiltonien 30x30, il n'est plus nécessaire de considérer d'autres bandes en perturbation, les pseudo-paramètres de Luttinger considérés seront réduits à leur plus simple expression : $\gamma_1 = 1, \gamma_2 = \gamma_3 = 0$.

En résumé :

- La masse effective permet de tenir compte des autres bandes par perturbation. Pour obtenir une bande non parabolique, elle ne suffit pas. Il faut un terme de couplage de type Pk hors diagonale.
- Le sommet de la bande de valence est dégénéré : la masse effective est inutilisable même à k « petit », d'où l'intérêt des paramètres de Luttinger. Ces paramètres ont le même rôle que la masse effective : ils modélisent l'influence des bandes non prises en compte dans l'hamiltonien.
- Si deux bandes sont couplées, elles ne se croisent pas. Cette propriété, générale, est d'autant plus utilisée que le nombre de bandes couplées augmente.

3) Interaction spin orbite

L'interaction spin orbite ajoute un terme à l'équation de Schrödinger écrite au début de ce chapitre. Elle devient [Luttinger56] :

$$H_{so}\psi = \left[\frac{p^2}{2m_0} + V(\vec{r}) + \frac{\hbar}{4m_0^2c^2} (\vec{\nabla}V \times \vec{p}) \cdot \vec{\sigma} \right] \psi = E\psi$$

où σ est l'ensemble des trois matrices de Pauli [Cohen-Tannoudji98].

On projette cet hamiltonien sur la base des $u_{nk}(r)$:

$$(\vec{\nabla}V \times \vec{p}) \cdot \vec{\sigma} (e^{ikr} u_{nk}(r)) = e^{ikr} \left[(\vec{\nabla}V \times \vec{p}) \cdot \vec{\sigma} + \hbar (\vec{\nabla}V \times \vec{k}) \cdot \vec{\sigma} \right] u_{nk}(r)$$

Le second terme dépendant de k (linéaire en k) est d'habitude négligé et c'est le premier qui est pris en compte pour obtenir l'hamiltonien vérifié par les $u_{nk}(r)$ [Cardona88].

$$H_{kp}u_{n,k}(\vec{r}) = \left[\frac{p^2}{2m_0} + V(\vec{r}) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{\hbar}{m_0} \vec{k} \cdot \vec{p} + \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} (\vec{\nabla} V \times \vec{p}) \cdot \vec{\sigma} \right] u_{n,k}(\vec{r}) = E_{n,k} u_{n,k}(\vec{r})$$

Pour résoudre cette équation aux valeurs propres, on utilise la même méthode que sans les termes de spin. On projette l'hamiltonien sur la base complète des $u_{n,0}(\vec{r})$. Un terme supplémentaire apparaît dans les éléments de matrice qui s'écrivent :

$$\langle u_{n'} | H_{kp} | u_n \rangle = \left(E_n + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \right) \delta_{n,n'} + \langle u_{n'} | \frac{\hbar}{m_0} \vec{k} \cdot \vec{p} | u_n \rangle + \langle u_{n'} | \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} (\vec{\nabla} V \times \vec{p}) \cdot \vec{\sigma} | u_n \rangle$$

Théoriquement, la base de fonctions à considérer devient $|S \uparrow\rangle, |S \downarrow\rangle, |X \uparrow\rangle, |X \downarrow\rangle, |Y \uparrow\rangle, |Y \downarrow\rangle, |Z \uparrow\rangle, |Z \downarrow\rangle$. En pratique, « tous calculs faits », l'effet principal de l'interaction spin orbite est de lever la dégénérescence des bandes de symétrie p (Γ_5) en introduisant un décalage Δ entre les bandes des trous lourds et des trous légers (notées Γ_8) et la bande « spin orbite » (Γ_7). L'expression de ce décalage est la suivante :

$$\Delta = \frac{3\hbar}{4m_0 c^2} \left\langle X \left| \frac{\partial V}{\partial x} p_y - \frac{\partial V}{\partial y} p_x \right| iY \right\rangle$$

Pour la bande de conduction, chaque niveau est remplacé par deux niveaux dégénérés en $k = 0$ dits « spin up » symbolisé $|\uparrow\rangle$ ou $|+\rangle$ et « spin down » symbolisé $|\downarrow\rangle$ ou $|-\rangle$.

La figure 5 résume les effets de l'interaction spin orbite pour la bande de valence et la première bande de conduction d'un semi-conducteur à bande interdite directe. La base de fonctions à considérer pour la bande de valence en tenant compte du couplage spin-orbite s'écrit :

$$\left| \frac{3}{2} \right\rangle, \left| \frac{1}{2} \right\rangle, \left| \frac{-1}{2} \right\rangle, \left| \frac{-3}{2} \right\rangle \text{ pour le niveau } \Gamma_8 \text{ et } \left| \frac{7}{2} \right\rangle, \left| \frac{-7}{2} \right\rangle \text{ pour le niveau } \Gamma_7.$$

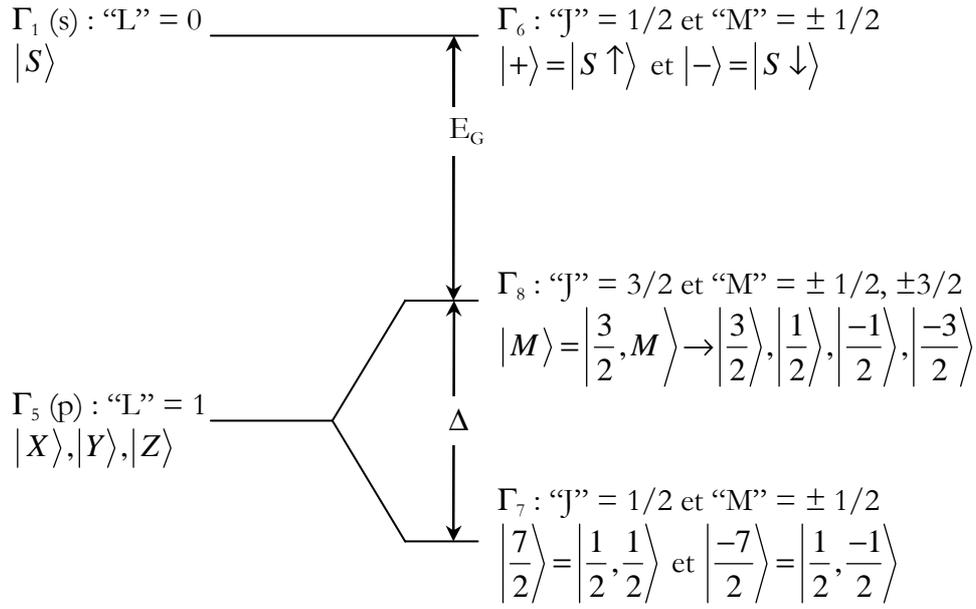


Figure 5 : Influence du couplage spin-orbite sur la bande de valence et la première bande de conduction d'un semi-conducteur à bande interdite directe [Kane57].

Sur la figure 5, L et J sont des moments orbitaux effectifs et M un moment magnétique effectif. Cette figure précise les notations utilisées dans ce manuscrit. Les relations entre les $|X\rangle, |Y\rangle, |Z\rangle$ et les $\left| \frac{\pm 1}{2} \right\rangle, \left| \frac{\pm 3}{2} \right\rangle, \left| \frac{\pm 7}{2} \right\rangle$ sont explicitées en annexe.

Les autres effets de l'interaction spin-orbite seront détaillés en § III pour la matrice 20×20 et § IV pour la matrice 30×30.

La méthode **k.p** est connue pour décrire le sommet de la bande de valence, sur 15 % de la zone de Brillouin, et le bas de la bande de conduction pour les semi-conducteurs à bande interdite directe, à l'aide d'un hamiltonien à 8 bandes. L'objectif des parties suivantes est de montrer que cette méthode peut être étendue sur toute la zone de Brillouin pour tous les semi-conducteurs en augmentant le nombre de bandes considérées.

III. Matrice k.p 20 bandes sp^3s^* « d »

Cette matrice a été mise au point par Nicolas Cavassilas dans le cadre de sa thèse sur les semi-conducteurs III-V [Cavassilas2000]. J'ai contribué à transposer cette méthode pour les IV-IV et à introduire la prise en compte de la contrainte. Je donne ici les grandes lignes de sa construction et quelques résultats.

1) Construction de la matrice

a) Le modèle sp^3

L'objectif est de calculer correctement les deux premières bandes de conduction et la bande de valence. Pour le remplir, nous prenons en compte les bandes de symétrie « s » et « p » en bande de valence comme en bande de conduction. La figure 6 schématise les bandes prises en compte dans ce modèle sp^3 et les termes d'interaction entre elles. Les bandes de symétrie « p » sont notées Γ_5 dans le groupe simple (sans prise en compte de l'interaction spin orbite). Elles se séparent en Γ_7 (dégénérées 2 fois) et Γ_8 (dégénérées 4 fois) dans le groupe double (cf. figure 5). Les bandes de symétrie « s » sont notées Γ_1 dans le groupe simple et deviennent Γ_6 (dégénérées 2 fois) dans le groupe double. Ces notations sont celles du groupe T_d (GaAs, sans centre d'inversion). Nous les utiliserons aussi pour le groupe O_h (Si, Ge, avec centre d'inversion).

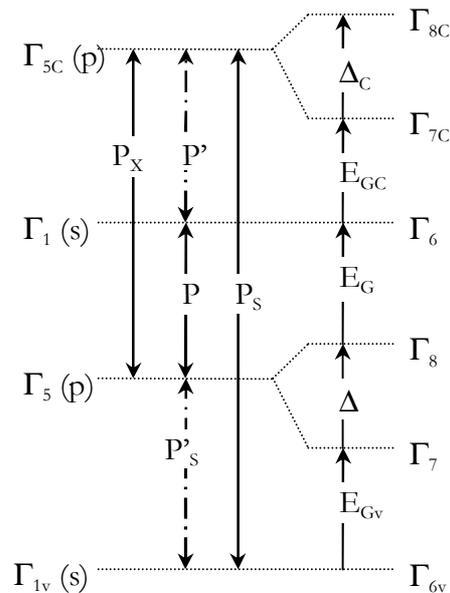
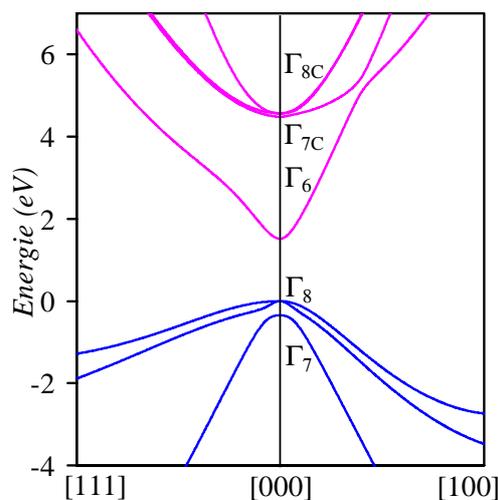


Figure 6 : Termes k.p et bandes pris en compte dans le modèle sp^3 . A gauche : notations sans l'interaction spin-orbite ; à droite : notations avec interaction spin-orbite.

Le modèle sp^3 prend en compte deux bandes de type « s » et deux bandes de type « p » soit 16 bandes en tout compte tenu des dégénérescences dues au spin. Dans le premier exemple de matrice $\mathbf{k.p}$ (2×2), nous avons noté P le terme d'interaction entre les deux bandes. Ici, il y a plusieurs termes d'interactions mais toutes les bandes n'interagissent pas entre elles. La prise en compte des règles de symétrie permet de conclure que certains termes d'interaction sont nuls. Seuls les termes d'interaction non nuls sont notés figure 6. Les termes avec un « prime » sont nuls dans O_h et non nuls dans T_d . L'ordre des bandes présenté figure 6 est vérifié pour la plupart des semi-conducteurs qui cristallisent dans le système diamant ou zinc-blende, sauf pour le plus commun, le silicium. En $k = 0$, le minimum de la bande de conduction du Si est constitué par la bande Γ_{5C} , de symétrie « p », la bande Γ_1 étant située à plus haute énergie ; avec les notations définies figure 6, on obtient E_{GC} négatif.

La structure de la matrice considérée est détaillée dans [Cavassilas2000]. Les valeurs des énergies E_G , Δ , Δ_C , E_{GC} , E_{Gv} sont connues dans la littérature. En revanche, les termes d'interaction sont des paramètres ajustés de façon à obtenir un diagramme de bande proche de celui donné par la méthode des pseudo-potentiels et qui vérifie les données connues de masses effectives et d'énergie de bord de zone de Brillouin, de pente moyenne nulle en bord de zone de Brillouin.

Ce modèle à 16 bandes ne permet pas d'obtenir une bande de conduction décroissante lorsqu'on s'éloigne de Γ , comme indiqué figure 7. En effet, pour qu'une bande ait une courbure négative, elle doit être couplée avec une bande située au dessus, avec un terme $\mathbf{k.p}$ suffisant. Ici, certes la première bande de conduction Γ_6 est couplée avec la seconde bande (Γ_{7C} , Γ_{8C}) mais le terme P' est faible : son seul effet est d'éviter que les bandes Γ_6 et Γ_{7C} se croisent en direction [100].



**Figure 7 : Diagramme de bande du GaAs obtenu avec le modèle sp^3 .
La bande de conduction reste croissante de [000] à [100].**

Il est donc nécessaire de prendre en compte d'autres bandes, au dessus des bandes considérées, d'où l'intérêt du modèle **k.p** à 20 bandes.

b) Prise en compte des bandes supérieures

Les bandes situées au dessus de celles considérées dans le modèle sp^3 sont de symétrie « *s* » et « *p* » mais aussi de symétrie « *d* », dont l'influence semble plus difficile à prendre en compte. C'est pourquoi Nicolas Cavassilas *et al.* ont introduit des bandes fictives dites s^* à l'instar de Vogl *et al.* [Vogl83] pour le modèle LCAO (Combinaison Linéaire d'Orbitales Atomiques) pour simuler l'influence des bandes supérieures sans les prendre en compte directement. 4 bandes de symétrie « *s* » ont ainsi été introduites (une bande liante, une bande antiliante, multiplié par 2 pour tenir compte du spin). Comme ces bandes sont fictives, non seulement le terme d'interaction **k.p** mais aussi leur énergie en $k = 0$ et leur non-parabolicité sont ajustables. Ainsi, le terme diagonal de la matrice 20 bandes H_{20} s'écrit pour une bande s^* :

$$E_U(\vec{k}) = E_U + \alpha_U \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + 27(\alpha'_U - \alpha_U) \beta_U \frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{k_x^2 k_y^2 k_z^2}{k^4} + 3(\alpha'_U - \alpha_U)(1 - \beta_U) \frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{k_x^2 k_y^2 + k_y^2 k_z^2 + k_z^2 k_x^2}{k^2} + \alpha''_U \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \right)^2 + 27(\alpha'''_U - \alpha''_U) \beta'_U \left(\frac{\hbar^2}{2m_0} \right)^2 \frac{k_x^2 k_y^2 k_z^2}{k^2} + 3(\alpha'''_U - \alpha''_U)(1 - \beta'_U) \left(\frac{\hbar^2}{2m_0} \right)^2 (k_x^2 k_y^2 + k_y^2 k_z^2 + k_z^2 k_x^2)$$

avec $U = A$ ou L pour la bande antiliante ou liante. Les α et β sont des paramètres ajustables qui modifient la forme de la bande qui n'est plus sphérique, tout en vérifiant les propriétés de symétrie en k_x, k_y, k_z . Comme ces bandes sont fictives, le terme diagonal peut être différent de la relation de type électron libre $\hbar^2 k^2 / 2m_0$ à condition de respecter la symétrie du cristal. La forme de chacune des bandes s^* est décrite par 6 paramètres ajustables, y compris l'énergie en $k = 0$. La figure 8 résume les bandes et les termes **k.p** pris en compte dans le modèle $sp^3 s^*$.

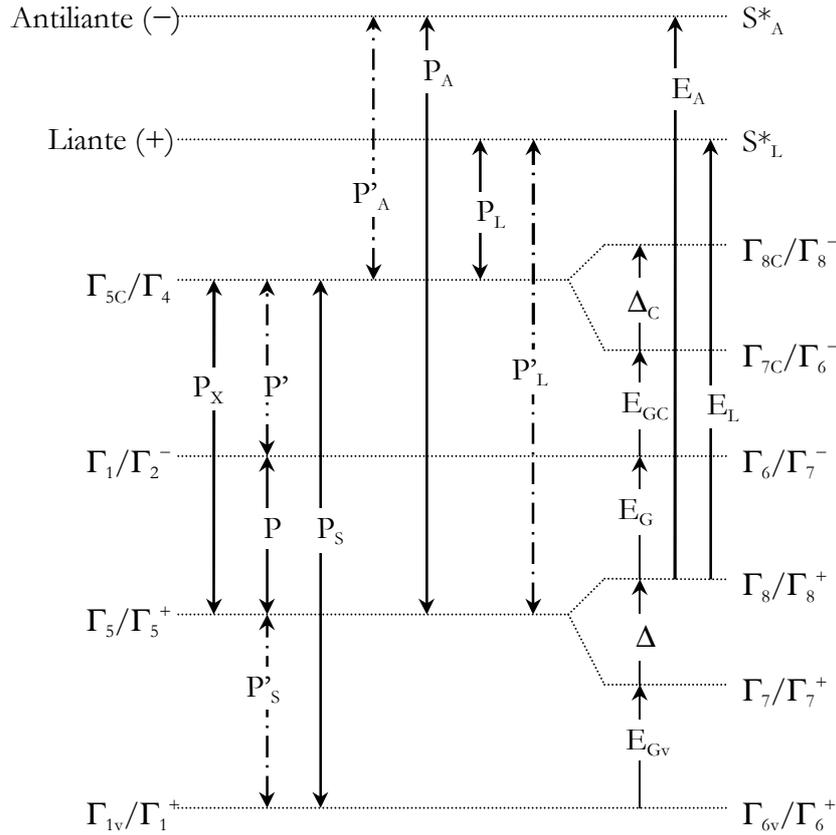


Figure 8 : Termes k.p et bandes prises en compte dans le modèle sp^3s^* . Nous utilisons les notations du groupe T_d (sans signe en exposant) mais rappelons celles du groupe O_h pour le groupe simple (sans couplage spin orbite) à gauche et pour le groupe double à droite.

Comme précédemment, les termes « en prime » sont nuls dans le groupe O_h (Si, Ge) pour des raisons de symétrie grâce à la présence du centre d'inversion et non nuls dans le groupe T_d (GaAs). L'introduction de ces bandes s^* a permis de faire redescendre la bande de conduction du GaAs mais des problèmes se posaient toujours en direction [111], c'est pourquoi l'influence des bandes « d » a aussi été modélisée à l'aide de pseudo paramètres de Luttinger.

En bande de valence, les paramètres de Luttinger permettent de décrire l'anisotropie des bandes. Comme la masse effective pour une bande de symétrie « s », ces paramètres modélisent l'influence des bandes non prises en compte pour une bande de symétrie « p ». Pourquoi ne pas en introduire aussi pour la bande de conduction de type « p » ? Les paramètres notés $(\gamma_{c1}^m, \gamma_{c2}^m, \gamma_{c3}^m)$ dans [Cavassilas2001] modélisent ainsi en centre de zone de Brillouin l'influence des bandes éloignées (d notamment) pour la bande de conduction de type « p ».

L'hamiltonien $sp^3s^*«d»$ est intégralement explicité dans la thèse de Nicolas Cavassilas [Cavassilas2000]. Voici maintenant quelques résultats obtenus avec cet hamiltonien.

2) Diagrammes de bandes du GaAs et du Si en k.p 20 bandes

Voici tout d'abord figure 9 le diagramme de bande du GaAs obtenu par Nicolas Cavassilas.

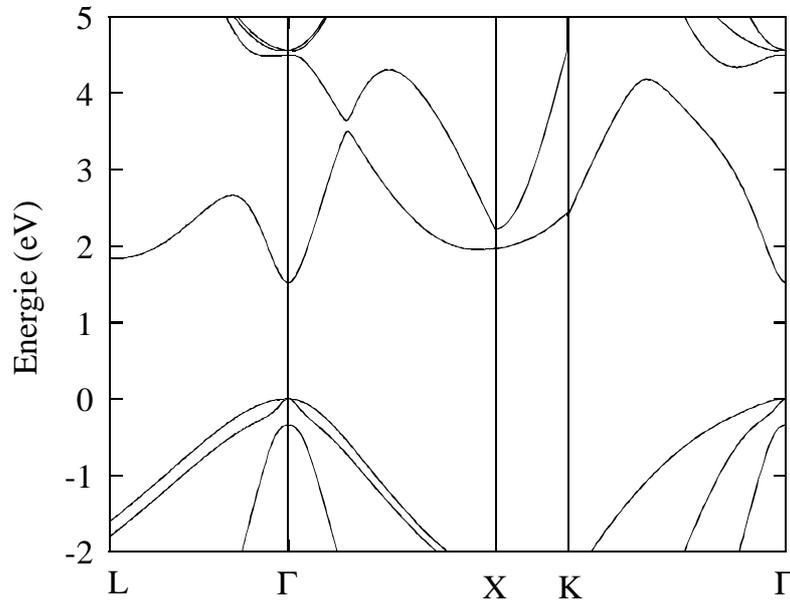


Figure 9 : Diagramme de bande du GaAs obtenu avec le modèle $sp^2s^*« d »$.

Pour le silicium, Nicolas Cavassilas en avait obtenu une première version que j'ai améliorée, notamment concernant les masses effectives en bande de conduction. Voici le diagramme que j'ai obtenu figure 10.

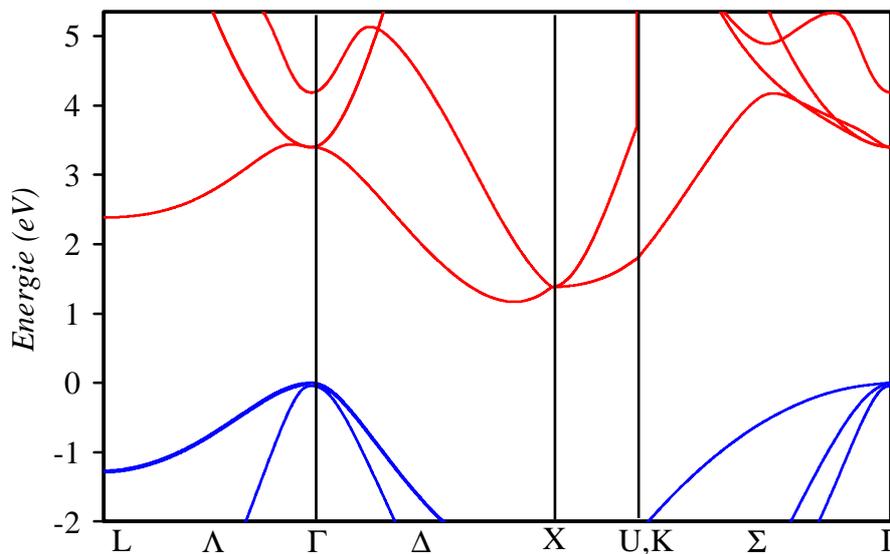


Figure 10 : Diagramme de bande du Si obtenu avec le modèle $sp^2s^*« d »$.

Pour les deux diagrammes, les énergies en $k = 0$ des bandes sp^3 sont celles de [Landolt-Börnstein87]. Les paramètres ajustables ont d'abord été estimés en centre de zone de Brillouin,

puis en X [100] et enfin en L [$\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}$]. L'allure de la bande de conduction est extrêmement dépendante des pseudo paramètres de Luttinger et des valeurs des α et β qui régissent la forme des bandes s^* . C'est pourquoi certaines valeurs sont données avec trois chiffres significatifs dans le tableau II.

eV	GaAs	Si	eV	GaAs	Si		GaAs	Si		GaAs	Si
Γ_{8C}	4.659	3.40	E_p	22.5	25.68	γ_{1v}^m	-0.65	-1.831	α_A	-2.35	-2.39
Γ_{7C}	4.448	3.40	E'_p	0.025	0	γ_{2v}^m	0.20	0.0108	α'_A	-1.00	0.33
Γ_6	1.519	4.185	E_{pX}	15	18.2	γ_{3v}^m	-0.26	-0.733	α''_A	0.18	-0.052
Γ_8	0	0	E_{pS}	2.3	1.025				α'''_A	0.18	0.01
Γ_7	-0.341	-0.044	E'_{pS}	0.2	0	γ_{1C}^m	-0.15	-0.78	β_A	0.78	0.5015
Γ_{6v}	-12.5	-12.5	E_{pA}	12	11.5	γ_{2C}^m	0.104	-0.271	β'_A	0	-0.90
E_A	7.2	6.24	E'_{pA}	0	0	γ_{3C}^m	-0.267	0.14	α_L	1.40	-0.277
E_L	7	6.7	E_{pL}	9.8	14.62				α'_L	1.40	0.75
			E'_{pL}	0	0				α''_L	0.35	0.0867
									α'''_L	0.35	-0.21
									β_L	0	1.54
									β'_L	0	1.22

**Tableau II : Paramètres utilisés pour le GaAs et le Si.
Les énergies en $k = 0$ des bandes sp^3 sont issues de [Landolt-Börnstein87].**

Les structures électroniques obtenues sont en bon accord avec les structures de référence en pseudo potentiel [Chelikowsky76] sur une gamme de 6 eV environ. Plus précisément, le haut de la bande de valence sur 1 eV, et les deux premières bandes de conduction dans les quatre directions ΓX , ΓL , ΓK et XU sur 3,5 eV. Les deux premières directions ΓX et ΓL sont plus faciles à obtenir que les directions ΓK et ΓU , en particulier la continuité entre les points K [$\frac{3}{4}, \frac{3}{4}, 0$] et U [$1, \frac{1}{4}, \frac{1}{4}$] équivalents du point de vue cristallographique mais pas par construction de notre matrice. La seconde bande de conduction est bien décrite sur la direction XU , mais pas entre Γ et K . Cette dernière bande provient de la bande d'électrons libres $(2\pi/a)$ [$2-x, 2-x, 0$] ($0 < x < \frac{3}{4}$) qui est issue du point Γ $(2\pi/a)$ [220] dont l'énergie est environ à 20 eV au dessus du minimum de la bande de conduction, soit en dehors des bandes considérées par notre modèle $k.p$ sp^3s^* « d ».

L'allure des diagrammes de bande ne constitue pas un critère pour évaluer la précision de ce modèle à 20 bandes. Les énergies en bord de zone de Brillouin (tableau III) et les masses effectives (tableau IV) sont des paramètres clés pour évaluer la fiabilité de la méthode.

	GaAs			Si		
	k.p	TB	exp	k.p	TB	exp
X _{7C}	2.210	2.328	2.35	X _{5C}	1.38	1.35
X _{6C}	1.945	1.989	1.98	Δ_{\min}	1.168	1.17
X _{7V}	-2.870	-2.929	-2.80	X _{5V}	-2.90	-3.15
X _{6V}	-2.968	-3.109	-2.88			
L _{8C}	5.625	5.047	5.7	L _{8C}	2.38	2.14
L _{6C}	1.841	1.837	1.85	L _{6C}	7.56	4.39
L _{8V}	-1.585	-1.084	-1.2	L _{8V}	-1.27	-1.08
L _{7V}	-1.780	-1.33	-1.42	L _{7V}	-1.29	-1.12

Tableau III : Energies en bord de zone de Brillouin comparées avec des valeurs expérimentales (exp) [Landolt-Börnstein87] et des valeurs obtenues en Tight Binding $sp^3d^5s^*$ (TB) [Jancu98].

Excepté le point L_{6C} pour le silicium, toutes les énergies obtenues sont proches des valeurs expérimentales, au moins autant que les valeurs obtenues en LCAO [Jancu98] avec un nombre de bandes prises en compte du même ordre. Le problème de la deuxième bande de conduction du silicium est une des raisons qui nous ont poussés à développer la méthode **k.p** 30 bandes.

Le tableau IV fournit les masses effectives des électrons en vallée Γ , L et X pour le GaAs, Δ et L pour le Si ainsi que les paramètres de Luttinger pour la bande de valence. Nos résultats sont aussi comparés avec les valeurs obtenues en LCAO [Jancu98] et les valeurs expérimentales [Landolt-Börnstein87] quand elles existent (les mesures par résonance cyclotron ne sont possibles que pour le sommet de la bande de valence ou le minimum de la bande de conduction).

	γ_1	γ_2	γ_3	$m(\Gamma)$	$m_1(X)$	$m_1(X)$	$m_1(L)$	$m_1(L)$
Si (k.p)	4.26	0.38	1.42		0.1906	0.9178	0.21	4.17
Si (exp)	4.26	0.38	1.56		0.1905	0.9163		
Si (TB)					0.22		0.16	
GaAs (k.p)	7.07	2.40	3.05	0.067	0.22	1.19	0.13	1.56
GaAs (exp)	6.85	2.1	2.9	0.067	0.23 ^(*)	1.3 ^(*)	0.075 ^(*)	1.9 ^(*)
GaAs (TB)				0.067	0.237		0.117	

Tableau IV : Masses effectives obtenues en k.p 20 bandes comparées avec des valeurs expérimentales de [Landolt-Börnstein87] ou (*) reportées par [Vurgaftman2001] et des valeurs obtenues en LCAO sp³d⁵s* [Jancu98].

Les valeurs des masses effectives obtenues montrent l'efficacité de la méthode sp³s*« d » surtout pour les minima de la bande de conduction en Γ pour le GaAs et en Δ pour le Si. Il faut noter que les valeurs calculées de γ_1 , γ_2 , γ_3 sont à l'intérieur de l'incertitude des paramètres expérimentaux [Pfeffer96].

L'inconvénient majeur de cette méthode est non seulement le nombre de paramètres à ajuster mais aussi la précision requise sur certains d'entre eux. Une infime variation sur les pseudo paramètres de Luttinger ou sur la description des bandes s* induit de grandes modifications du diagramme de bande. De plus, comme l'objectif de ma thèse est d'étudier l'ionisation par choc dans le Si et les alliages SiGe, il semble important d'avoir accès à la deuxième bande de conduction. C'est pourquoi, nous avons développé la méthode **k.p** à 30 bandes, finalement beaucoup plus simple que l'on pourrait croire. En effet, nous allons montrer que la méthode **k.p** 30 bandes exige moins de paramètres ajustables que la méthode **k.p** à 20 bandes.

IV. Matrice $\mathbf{k.p}$ 30 bandes (sp^3d^5)

1) Construction de l'hamiltonien à 30 bandes

a) Première étape : choix des bandes prises en compte

Le point de départ de construction de la matrice est l'hamiltonien $\mathbf{k.p}$ à 15 bandes de Cardona et Pollak [Cardona66]. Cet Hamiltonien ne prend pas en compte l'interaction spin orbite (ils introduisent un terme correctif après avoir construit la matrice). Les états de base pris en compte sont ceux des ondes planes qui proviennent des points [000], [111] et [200] de l'électron libre ; les autres états sont considérés comme trop haut en énergie. La figure 11 représente la relation de dispersion d'un cristal 3D.

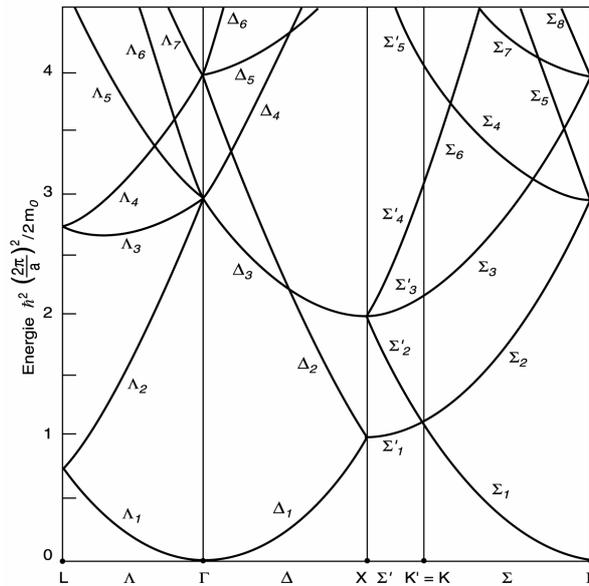


Figure 11 : Relation de dispersion d'un cristal zinc blende en première zone de Brillouin [Yu96]

Seules les bandes provenant des points Γ correspondant aux énergies 0, 3 et $4 \times \frac{\hbar^2}{2m_0} \left(\frac{2\pi}{a} \right)^2$ de la

figure 11 sont prises en compte dans l'hamiltonien $\mathbf{k.p}$ 15 bandes de Cardona et Pollak.

L'introduction du couplage spin orbite multiplie par deux le nombre d'états considérés, c'est pourquoi nous construisons une matrice 30×30 . Les 16 premières bandes sont celles du modèle sp^3 décrit pour la matrice 20 bandes. Cette fois, les bandes supérieures considérées sont des bandes réelles de symétrie « s », « p », ou « d ». Le tableau V présente les notations utilisées pour

les niveaux d'énergie considérés. Nous utilisons toujours les notations du groupe T_d , définies dans [Koster63] même pour le Si ou le Ge du groupe O_h .

Groupe simple			Groupe double	
[Cardona66]	O_h	T_d	O_h	T_d
$\Gamma_{2'}^u$	Γ_{2q}^-	Γ_{1q}	Γ_{7q}^-	Γ_{6q}
$\Gamma_{25'}^u$	Γ_{5d}^+	Γ_{5d}	$\Gamma_{8d}^+ / \Gamma_{7d}^+$	$\Gamma_{8d} / \Gamma_{7d}$
$\Gamma_{12'}$	Γ_3^-	Γ_3	Γ_{8D}^-	Γ_{8-3}
Γ_1^u	Γ_{1u}^+	Γ_{1u}	Γ_{6u}^+	Γ_{6u}
Γ_{15}	Γ_4^-	Γ_{5C}	Γ_8^- / Γ_6^-	$\Gamma_{8C} / \Gamma_{7C}$
$\Gamma_{2'}^l$	Γ_2^-	Γ_1	Γ_7^-	Γ_6
$\Gamma_{25'}^l$	Γ_5^+	Γ_5	Γ_8^+ / Γ_7^+	Γ_8 / Γ_7
Γ_1^l	Γ_1^+	Γ_{1V}	Γ_6^+	Γ_{6V}

Tableau V : Notations utilisées pour les niveaux considérés dans ce modèle 30 bandes

Par rapport au modèle 16 bandes, nous ajoutons deux niveaux de symétrie « s » (soit 4 niveaux en considérant l'interaction spin-orbite), un niveau de symétrie « p » (6 niveaux en fait), et un niveau d dont les fonctions d'onde ont la symétrie de $D_z = 3z^2 - r^2$ et $D_x = \sqrt{3}(x^2 - y^2)$ soit 4 niveaux $D_z\uparrow, D_z\downarrow, D_x\uparrow, D_x\downarrow$. Les 30 bandes sont définies. Voyons maintenant les termes d'interaction entre elles.

b) Deuxième étape : détermination des termes d'interaction non nuls [Koster63]

Termes $\mathbf{k.p}$:

L'opérateur p a la symétrie des bandes Γ_5 dans T_d et Γ_4^- dans O_h . Dans T_d , les seuls termes d'interaction $\mathbf{k.p}$ nuls sont du type $\langle \Gamma_1 | \Gamma_5 | \Gamma_1 \rangle$. Tous les autres peuvent exister. Dans O_h , si le produit des signes en exposant est négatif (intégrale de fonctions impaires), le terme $\mathbf{k.p}$ non nul dans T_d devient nul dans O_h .

Termes d'interaction spin orbite :

L'Hamiltonien représentant l'interaction spin orbite s'écrit $H_{so} = \frac{\hbar}{4m_0^2c^2} (\vec{\nabla}V \times \vec{p}) \cdot \vec{\sigma}$.

$(\vec{\nabla}V \times \vec{p}) \cdot \vec{\sigma}$ a la symétrie de Γ_4 dans T_d et de Γ_4^+ dans O_h . Dans O_h , les seuls termes non nuls sont $\langle \Gamma_5^+ | \Gamma_4^+ | \Gamma_5^+ \rangle$, $\langle \Gamma_4^- | \Gamma_4^+ | \Gamma_4^- \rangle$ et $\langle \Gamma_4^- | \Gamma_4^+ | \Gamma_3^- \rangle$. Dans T_d , les seuls termes non nuls sont du type $\langle \Gamma_5 | \Gamma_4 | \Gamma_5 \rangle$ et $\langle \Gamma_3 | \Gamma_4 | \Gamma_5 \rangle$.

Termes considérés dans la matrice 30x30 :

Dans le groupe O_h , il n'y a que 10 termes d'interaction $\mathbf{k.p}$ différents, comme le montre la figure 12.

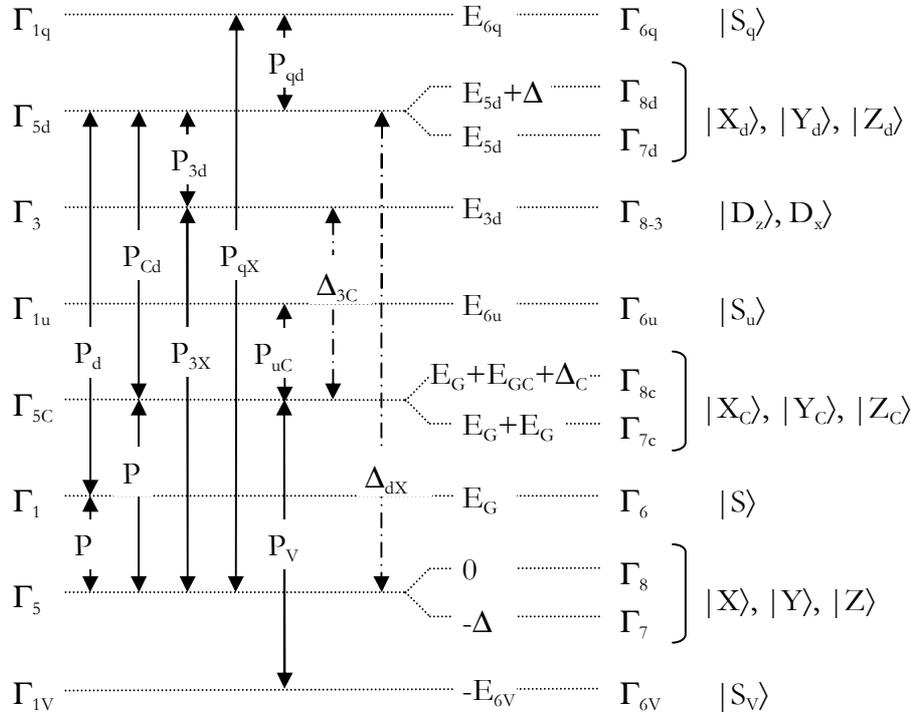


Figure 12 : Termes d'interaction $\mathbf{k.p}$ et spin orbite pour le groupe O_h . A gauche, les notations du groupe simple, à droite, celles du groupe double et les fonctions d'onde associées à chaque niveau d'énergie considéré dans le modèle $\mathbf{k.p}$ 30 bandes [Richard2004].

Tous les autres termes sont nuls pour des raisons de parité. En revanche, dans le groupe T_d , à cause de l'absence de centre d'inversion, 8 termes supplémentaires doivent être pris en compte comme indiqué figure 13.

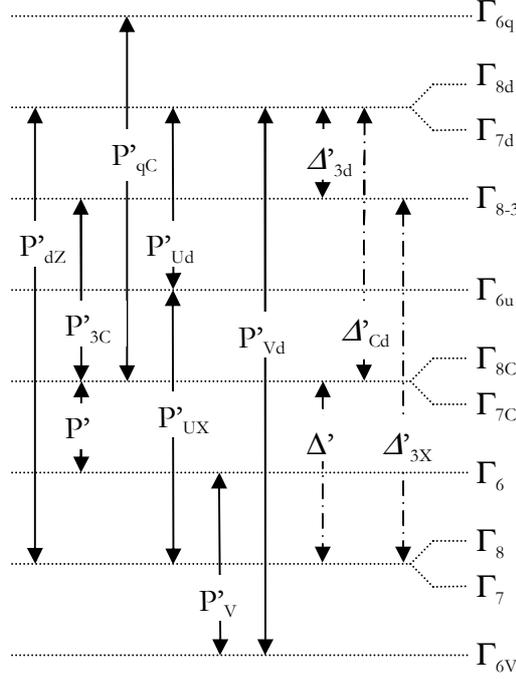


Figure 13 : Termes d'interaction k.p ou spin orbite supplémentaires dans le groupe T_d par rapport au groupe O_h .

L'interaction spin orbite introduit des termes supplémentaires. Les états de base considérés sont de trois sortes, correspondant à la symétrie de la fonction d'onde. Les niveaux Γ_1 sont de symétrie « s » ; l'interaction spin-orbite les transforme en deux états dégénérés $S\uparrow$ et $S\downarrow$ notés Γ_6 . Le niveau Γ_3 est associé à une fonction « d » ; l'interaction spin orbite n'introduit pas non plus de décalage entre les niveaux $D_z\uparrow, D_z\downarrow, D_x\uparrow, D_x\downarrow$, de symétrie Γ_8 et notés $\Gamma_{8,3}$. Enfin, nous avons vu l'effet de cette interaction sur le niveau « p » de la bande de valence (Γ_5) qui se sépare en deux (Γ_8, Γ_7). Tous les niveaux de type « p » subissent cette transformation. Les fonctions de Bloch qui diagonalisent l'interaction spin-orbite dans le multiplet (Γ_8, Γ_7) sont détaillées en annexe [Pfeffer90].

Dans le groupe O_h , les décalages introduits à l'intérieur des niveaux Γ_5 s'écrivent :

$$\Delta = 3 \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} \langle X | \frac{\partial V}{\partial x} p_y - \frac{\partial V}{\partial y} p_x | iY \rangle \text{ pour } \Gamma_5,$$

$$\Delta_c = 3 \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} \langle X_c | \frac{\partial V}{\partial x} p_y - \frac{\partial V}{\partial y} p_x | iY_c \rangle \text{ pour } \Gamma_{5c},$$

$$\Delta_d = 3 \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} \langle X_d | \frac{\partial V}{\partial x} p_y - \frac{\partial V}{\partial y} p_x | iY_d \rangle \text{ pour } \Gamma_{5d}.$$

Des couplages interbandes apparaissent aussi. Ils s'écrivent :

$$\Delta_{dz} = 3 \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} \langle X_d | \frac{\partial V}{\partial x} p_y - \frac{\partial V}{\partial y} p_x | iY \rangle \text{ entre les niveaux } \Gamma_5 \text{ et } \Gamma_{5d},$$

$$\Delta_{3c} = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} \langle D_z | \frac{\partial V}{\partial y} p_z - \frac{\partial V}{\partial z} p_y | iX_c \rangle \text{ entre les niveaux } \Gamma_3 \text{ et } \Gamma_{5c}.$$

Dans le groupe T_b , d'autres couplages interbandes apparaissent :

$$\Delta'_{cd} = 3 \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} \langle X_d | \frac{\partial V}{\partial x} p_y - \frac{\partial V}{\partial y} p_x | iY_c \rangle \text{ entre les niveaux } \Gamma_{5c} \text{ et } \Gamma_{5d},$$

$$\Delta' = 3 \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} \langle X_c | \frac{\partial V}{\partial x} p_y - \frac{\partial V}{\partial y} p_x | iY \rangle \text{ entre les niveaux } \Gamma_{5c} \text{ et } \Gamma_5,$$

$$\Delta'_{3d} = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} \langle D_z | \frac{\partial V}{\partial y} p_z - \frac{\partial V}{\partial z} p_y | iX_d \rangle \text{ entre les niveaux } \Gamma_3 \text{ et } \Gamma_{5d},$$

$$\Delta'_{3x} = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} \langle D_z | \frac{\partial V}{\partial y} p_z - \frac{\partial V}{\partial z} p_y | iX \rangle \text{ entre les niveaux } \Gamma_3 \text{ et } \Gamma_5.$$

Tous ces couplages sont aussi schématisés figures 12 et 13 dans lesquelles sont aussi détaillés tous les éléments de matrice $\mathbf{k.p}$ qui peuvent être non nuls.

En pratique, pour les semi-conducteurs du groupe O_b , il suffit d'ajuster les 10 termes d'interaction $\mathbf{k.p}$. Pour l'interaction spin-orbite, seules les valeurs connues de Δ et Δ_c ont été introduites, tous les autres couplages Δ étant nuls. Dans T_b , il a suffi d'ajuster un seul terme $\mathbf{k.p}$ supplémentaire (P') et de rajouter le couplage Δ' , entre les bandes Γ_5 et Γ_{5c} pour obtenir une structure électronique en bon accord avec les données existantes, à l'épaisseur du trait près. La valeur de ce couplage Δ' est connue [Pfeffer96].

c) Troisième étape : ajustement des paramètres

Après avoir construit le canevas de la matrice, il s'agit de déterminer les paramètres définis précédemment, soit à l'aide de valeurs connues dans la littérature, soit par ajustement sur des diagrammes en pseudo potentiel, sur des masses effectives connues ou des paramètres de Luttinger, connus eux aussi [Landolt-Börnstein87].

Les niveaux d'énergie en $k = 0$ sont connus pour les 16 premières bandes [Landolt-Börnstein87]. Pour les nouvelles bandes, les énergies proposées par Cardona et Pollak [Cardona66] pour Si et Ge ont été retenues. Les niveaux d'énergie du GaAs ont été calculés avec la même méthode que celle de [Cardona66], basée sur des raisonnements en pseudo potentiel. De toute façon, il n'est pas nécessaire de connaître très précisément les grandes énergies en $k = 0$: le terme d'interaction

$\mathbf{k.p}$ est ajusté en ayant fixé cette énergie. Si on modifie légèrement cette énergie et qu'on réajuste le terme $\mathbf{k.p}$, la partie utile du diagramme de bande ne sera pas altérée.

Les niveaux d'énergie en $k = 0$ étant fixés (ainsi que les couplages spin-orbite), la partie la plus difficile est l'ajustement des termes $\mathbf{k.p}$. Pour cela, un algorithme de minimisation de fonction (du logiciel MATLAB) permet par itérations successives de se rapprocher d'une fonction objectif. Le problème est de définir cette fonction afin d'obtenir un résultat suffisamment précis en faisant en sorte que l'algorithme converge.

1) D'abord, la fonction objectif est une série de points issus d'un diagramme en pseudo-potentiel [Chelikowsky76] ; environ 10 points par direction ΓX , ΓL , ΓK , XU et par bandes. Un ordre de grandeur des termes $\mathbf{k.p}$ est ainsi obtenu, mais les masses calculées sont loin d'être satisfaisantes. De plus, le diagramme est discontinu en K,U . Eviter cette discontinuité est une contrainte forte en $\mathbf{k.p}$. En effet, cette méthode peut être considérée comme un développement limité autour de $k=0$; comme le point K,U est le plus éloigné du centre de la zone de Brillouin, il est assez critique. Les méthodes pseudo potentiel ou liaisons fortes peuvent au contraire être assimilées à des développements en série de Fourier, où la périodicité du réseau (et l'équivalence des points K et U) sont obtenues par construction.

2) L'objectif suivant est encore une série de points, mais avec cette fois un grand nombre de points aux endroits où les masses sont connues et autour du point K,U pour assurer la continuité. Les intervalles de variation des termes $\mathbf{k.p}$ sont restreints aussi pour assurer la convergence de l'algorithme alors que la fonction objectif est plus précise. Les valeurs initiales des termes à ajuster sont les résultats de l'étape précédente.

3) La fonction objectif finale n'est plus seulement une série de points $E(\vec{k})$ mais contient aussi des valeurs des masses et des paramètres de Luttinger à obtenir, ainsi que des énergies en bord de zone de Brillouin. Cette fois, l'algorithme estime les masses effectives (en calculant la courbure obtenue sur le diagramme calculé) et minimise la différence entre les masses expérimentales et calculées.

L'estimation des paramètres de Luttinger est plus simple que celle des masses. En effet, un intérêt considérable de cette méthode à 30 bandes par rapport au $\mathbf{k.p}$ 20 bandes est l'absence de pseudo paramètres de Luttinger car il n'est plus nécessaire de prendre en compte l'influence des bandes extérieures au modèle pour obtenir les paramètres expérimentaux. Les paramètres obtenus par la méthode 30 bandes s'écrivent directement à partir des énergies d'interaction $\mathbf{k.p}$ et des énergies à l'origine :

$$\gamma_1 = -1 + \frac{E_P}{3E_G} + \frac{E_{PX}}{3} \left(\frac{1}{E_G + E_{GC}} + \frac{1}{E_G + E_{GC} + \Delta_C} \right) + \frac{2E'_{PdX}}{3E_{5d}} + \frac{4}{3} \frac{E_{P3X}}{E_3} + \frac{E_{PqX}}{3E_{6q}} - \frac{E'_{PVX}}{3E_{6V}} + \frac{E'_{PuX}}{3E_{6u}}$$

$$\gamma_2 = \frac{1}{6} \left(\frac{E_P}{E_G} + \frac{E_{PqX}}{E_{6q}} + \frac{E'_{PuX}}{E_{6u}} - \frac{E'_{PVX}}{3E_{6V}} \right) - \frac{E_{PX}}{6(E_G + E_{GC})} - \frac{E'_{PdX}}{6E_{5d}} + \frac{2}{3} \frac{E_{P3X}}{E_{3d}}$$

$$\gamma_3 = \frac{1}{6} \left(\frac{E_P}{E_G} + \frac{E_{PqX}}{E_{6q}} + \frac{E'_{PuX}}{E_{6u}} - \frac{E'_{PVX}}{3E_{6V}} \right) + \frac{E_{PX}}{6(E_G + E_{GC})} + \frac{E'_{PdX}}{6E_{5d}} - \frac{1}{3} \frac{E_{P3X}}{E_{3d}}$$

Les numérateurs de ces expressions sont les énergies d'interaction : elles sont reliées aux termes

$\mathbf{k.p}$ par la relation : $P_{\alpha\beta}^2 k^2 = E_{p\alpha\beta} \tilde{k}^2 = E_{p\alpha\beta} \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}$. Les dénominateurs sont les niveaux d'énergie en

$k = 0$. La masse effective m_C en Γ en bande de conduction peut aussi s'exprimer directement de

la même manière : $\gamma_C = \frac{1}{m_C} = 1 + \frac{E_P}{3} \left(\frac{1}{E_G + \Delta} + \frac{2}{E_G} \right) - \frac{E'_P}{3} \left(\frac{1}{E_{GC}} + \frac{2}{E_{GC} + \Delta_C} \right) - \frac{E_{Pd}}{E_{5d} - E_G}$

Le calcul d'une structure électronique satisfaisante est loin d'être aussi évident que cette description le laisse entendre. Les critères de construction de la fonction objectif sont ceux précités, mais l'importance relative à accorder à chacun dépend étroitement des caractéristiques de chaque semi-conducteur. Néanmoins, voici quelques structures électroniques obtenues à l'aide de cette méthode $\mathbf{k.p}$ à 30 bandes

2) Résultats : diagrammes de bandes de Si, Ge et GaAs

Cette méthode $\mathbf{k.p}$ à 30 bandes donne accès aux relations de dispersion de ces semi-conducteurs sur une gamme de $[-6 \text{ eV}, +5 \text{ eV}]$ autour du maximum de la bande de valence sur toute la zone de Brillouin, avec seulement 10 (Si, Ge) ou 11 paramètres à ajuster pour GaAs [Richard2004a].

Voilà tout d'abord dans le tableau VI les énergies en $k = 0$ utilisées.

eV	Ge	Si	GaAs	eV	Ge	Si	GaAs
Γ_{8C}	3.22	3.40	4.569	Γ_{6q}	18.36	13.46	13.64
Γ_{7C}	3.01	3.40	4.488	Γ_{8d}	17.0	12.78	11.89
Γ_6	0.90	4.185	1.519	Γ_{7d}	17.0	12.78	11.89
Γ_8	0	0	0	Γ_{8-3}	10.47	9.66	10.17
Γ_7	-0.290	-0.044	-0.341	Γ_{6u}	7.77	7.07	8.56
Γ_{6V}	-13.14	-12.92	-12.55				

Tableau VI : Energies en $k = 0$ pour Si, Ge et GaAs en $\mathbf{k.p}$ 30 bandes.

Pour Si et Ge, les valeurs sont celles de [Cardona66]. Pour GaAs, les énergies de la première colonne sont issues de [Landolt-Börnstein87], celles de la dernière colonne sont calculées selon la méthode exposée par Cardona et Pollak, en utilisant le pseudo-potentiel.

Le tableau VII donne les énergies d'interaction **k.p.**

eV	Ge	Si	GaAs	eV	Ge	Si	GaAs
E_P	24.60	19.96	22.37	E_{Pd}	0.0051	1.193	0.010
E_{PX}	17.65	14.81	16.79	E_{PXd}	12.23	7.491	4.344
E_{P3}	5.212	4.475	4.916	E_{P3d}	15.76	9.856	8.888
E_{P2}	2.510	3.993	6.280	E_{P2d}	27.59	20.76	23.15
E_{PS}	1.071	1.092	2.434	E_{PU}	17.84	16.36	19.63
E'_P	0	0	0,0656	$E'_{Pd}, E'_{P3}, E'_{P2}, E'_{PS}, E'_{PU}, E'_{PSd}, E'_{PUd}$			0

Tableau VII : Energies d'interaction k.p.

10 paramètres ont été ajustés pour le Si et le Ge. Le fait que seulement 11 paramètres (au lieu de 18) aient été ajustés pour le GaAs ne semble pas gênant compte tenu de la précision recherchée pour le diagramme de bande du GaAs (figure 14).

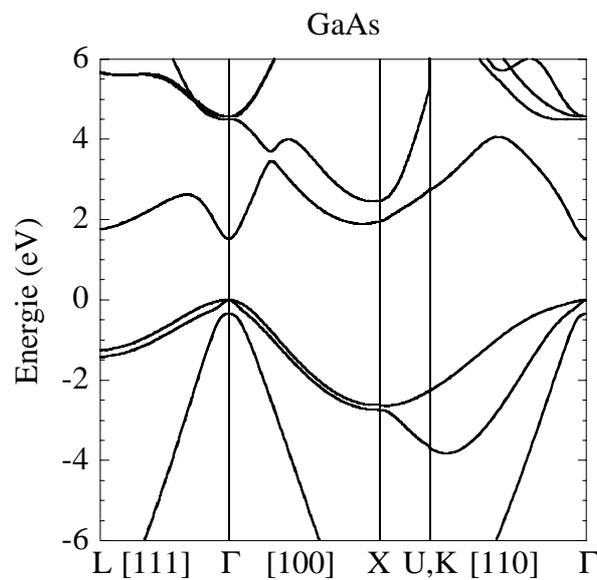


Figure 14 : Diagramme de bande du GaAs massif obtenu en k.p 30 bandes à T = 0 K.

Comme en **k.p** à 20 bandes, la seconde bande de conduction est bien décrite sur la direction XU, mais pas entre Γ et K. Cette dernière bande provient de la bande d'électrons libres $(2\pi/a) [2-x, 2-x, 0]$ ($0 < x < 3/4$) qui est issue du point $\Gamma (2\pi/a) [220]$ dont l'énergie est environ à 20 eV au dessus du minimum de la bande de conduction, soit en dehors des bandes considérées par notre modèle **k.p** sp^3d^f . C'est pourquoi la zone de validité de cette méthode s'arrête à 5 eV au dessus du maximum de la bande de valence.

Le seul terme « en prime » non nul pour ce diagramme, P , permet l'anticroisement de la première et de la seconde bande de conduction en direction [100]. Comme ce terme n'existe pas dans le groupe O_h , les deux premières bandes de conduction peuvent se croiser. C'est le cas dans le Si et le Ge, comme le montre la figure 15.

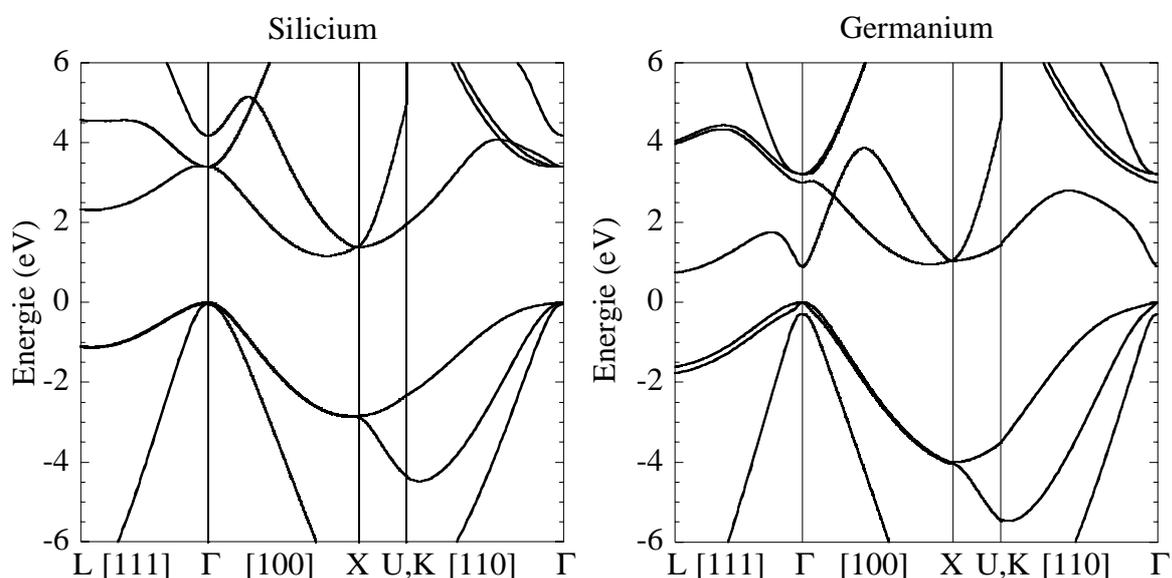


Figure 15 : Diagramme de bande du Si et du Ge obtenus en k.p 30 bandes à T = 0 K.

La seconde bande de conduction redescend en vallée L (point L_{8C} du tableau VII). L'un des objectifs du passage aux 30 bandes est atteint. Finalement, prendre en compte les niveaux d directement et non par l'intermédiaire de bandes s^* et de pseudo paramètres de Luttinger permet d'étendre leur influence à toute la zone de Brillouin et non seulement à son centre. On obtient ainsi la redescente de la seconde bande de conduction. De plus, même si on considère 10 bandes supplémentaires, la matrice obtenue est plus creuse, et il y a beaucoup moins de paramètres à ajuster. En effet, l'ajustement des pseudo-paramètres de Luttinger, ici absents, était de loin l'étape la plus difficile dans la méthode **k.p** à 20 bandes.

	Si			Ge			GaAs			
	k.p	TB	exp	k.p	TB	exp	k.p	TB	exp	
X _{5C}	1.36	1.35		1.04	1.12	1.30	X _{7C}	2.46	2.328	2.35
Δ_{\min}	1.17	1.17	1.17	0.95	1.00		X _{6C}	1.94	1.989	1.98
X _{5V}	-2.90	-3.15	-2.90	-3.99	-3.37	-3.15	X _{7V}	-2.62	-2.929	-2.80
							X _{6V}	-2.74	-3.109	-2.88
L _{8C}	4.50	4.39	4.15	4.01	3.99	4.30	L _{8C}	5.65	5.047	5.70
L _{6C}	2.35	2.14	2.40	0.74	0.74	0.74	L _{6C}	1.75	1.837	1.85
L _{8V}	-1.10	-1.08	-1.2	-1.62	-1.12	-1.40	L _{8V}	-1.25	-1.084	-1.20
L _{7V}	-1.12	-1.12	-1.2	-1.77	-1.37	-1.40	L _{7V}	-1.42	-1.330	-1.42

Tableau VIII : Energies en bord de zone de Brillouin comparées avec des valeurs expérimentales [Landolt-Börnstein87] et des valeurs obtenues en LCAO $sp^3d^5s^*$ [Jancu98].

Les résultats obtenus en matière d'énergie aux points de haute symétrie (tableau VIII) sont comparables au LCAO $sp^3d^5s^*$ de [Jancu98].

	$m(\Gamma)$	$m_c(X)$	$m_t(X)$	$m_t(L)$	$m_l(L)$
Si (k.p)	0.1759	0.1912	0.9167	1.65	0.128
Si (exp)		0.1905	0.9163		
Ge (k.p)	0.0380	0.195	0.93	0.0818	1.593
Ge (exp)	0.038			0.0815	1.59
GaAs (k.p)	0.0676	0.23	1.16	0.108	1.67
GaAs (exp)	0.067	0.23 ^(*)	1.3 ^(*)	0.075 ^(*)	1.9 ^(*)

Tableau IX : Masses effectives obtenues en k.p 30 bandes comparées avec des valeurs expérimentales de [Landolt-Börnstein87] ou (*) reportées par [Vurgaftman2001].

Les masses effectives des minima de bande de conduction (tableau IX) diffèrent de moins de 1% des valeurs expérimentales. Dans le pire cas, la masse transverse en vallée L du GaAs, notre résultat est plus proche de la valeur expérimentale que celui de [Jancu98] qui obtient $m_t(L, \text{GaAs}) = 0.117 m_0$; dans tous les autres cas, on obtient avec ce modèle une différence inférieure à 10 % entre les valeurs obtenues et les données expérimentales [Vurgaftman2001].

	Si (k.p)	Si (exp)	Ge (k.p)	Ge (exp)	GaAs (k.p)	GaAs (exp)
γ_1	4.21	4.26-4.28	12.60	13.35-13.25	7.18	6.85-6.98-6.79-7.20
γ_2	0.427	0.38-0.34	3.93	4.25-4.20	2.23	2.1-2.06-1.9-2.88
γ_3	1.42	1.45-1.56	5.39	5.69-5.56	2.99	2.9-2.93-2.681-3.05

Tableau X : Paramètres de Luttinger obtenus en k.p 30 bandes comparés avec des valeurs expérimentales ([Landolt-Börnstein87] pour Si et Ge et [Vurgaftman2001] pour GaAs).

Le tableau X montre que la différence entre les valeurs obtenues par notre modèle et les données expérimentales est en général inférieure à 5 % ; elle est de 10 % dans le pire cas (γ_2 du Si). Pour la bande de valence, la précision des paramètres de Luttinger semble moins bonne (tableau X) mais la dispersion des valeurs expérimentales existantes montre que les paramètres de Luttinger sont connus avec beaucoup moins de précision que les masses effectives [Pfeffer96].

3) Comparaison des méthodes k.p 20 et 30 bandes

Pour obtenir une description complète de toute la zone de Brillouin, introduire directement les niveaux de symétrie « d » semblait beaucoup plus compliqué que de les copier, par l'intermédiaire de bandes s^* et de pseudo-paramètres de Luttinger. C'est pourquoi la méthode sp^3s^* « d » avait été développée. L'hamiltonien correspondant est une matrice 20×20 , plus facile à manipuler qu'une matrice 30×30 . Les propriétés des bandes « s » et « p » sont bien connues donc la structure de la matrice est assez proche de celle de l'hamiltonien de Kane [Kane57] puisque les bandes considérées ont la même symétrie, y compris les bandes fictives s^* de symétrie « s ». Pour la première fois, une méthode **k.p** permet de décrire la bande de conduction d'un semi-conducteur à bande interdite indirecte, le silicium, avec des masses effectives très proches des valeurs expérimentales (tableau IV). Le problème le plus important est le nombre de paramètres à ajuster : 25 pour le silicium.

L'introduction des bandes « d » pour construire l'hamiltonien à 30 bandes a posé moins de problème que ce que nous craignons même si l'article de Cardona-Pollak [Cardona66] montrait déjà qu'il suffisait de 10 paramètres pour décrire les diagrammes du Si et du Ge sans couplage spin-orbite.

Le nombre de paramètres ajustables a considérablement diminué. Avec 10 ou 11 paramètres, nous avons décrit les diagrammes de bandes de Si, Ge et GaAs sur une gamme d'énergie beaucoup plus grande (11 eV au lieu de 5 eV) et avec une précision similaire pour les masses effectives et les énergies des points de haute symétrie.

L'absence de pseudo paramètres de Luttinger simplifie aussi la prise en compte du confinement, grâce à l'absence de termes quadratiques dépendant du matériau dans la matrice. La diagonale de la matrice contient simplement une relation de dispersion de type « électron libre » pour chaque niveau d'énergie :

$$E(k) = E(k=0) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}$$

Bref, la prise en compte de 10 bandes supplémentaires permet d'élargir considérablement le domaine de validité de la méthode **k.p** développée au cours de cette thèse, en diminuant le nombre de paramètres ajustables, ce qui constitue un progrès notoire. La prise en compte de la contrainte est effectuée de la même manière en 20 bandes qu'en 30 bandes puisque nous ne considérons son effet que sur les 14 bandes utiles : la bande *p* de valence et les bandes *s* et *p* de conduction. Une autre application de la méthode **k.p** à 30 bandes abordée au cours de ce travail est le calcul de la relation de dispersion des états évanescents dans la bande interdite [Drouhin2003], [Richard2004b].

V. Prise en compte de la contrainte dans les alliages SiGe

1) Diagramme de bande du SiGe massif

Pour construire le diagramme de bande du $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$, quelques données sont disponibles dans la littérature : le paramètre de maille, les constantes A, B, C, reliées aux paramètres de Luttinger, décrivant la bande de valence, l'énergie de bande interdite, quelques masses effectives en bande de conduction. Schmid, Christensen et Cardona [Schmid90] font aussi remarquer que le SiGe ne subit pas seulement une relation linéaire entre Si et Ge : en effet, l'alliage $\text{Si}_{0.5}\text{Ge}_{0.5}$ n'a plus de centre d'inversion, comme GaAs : ce semi-conducteur fait donc partie du groupe T_d et non plus O_h comme Si et Ge. Pour le décrire à l'aide de notre méthode **k.p** à 30 bandes, il y aura donc des paramètres « en prime ».

a) Paramètres choisis dans notre modèle

Paramètre de maille : $a_{\text{Si}} = 5.432 \text{ \AA}$; $a_{\text{Ge}} = 5.657 \text{ \AA}$ à 0 K

$$a_{\text{Si-Ge}_x} = a_{\text{Si}} + 0.200326x + 0.0247x^2 \text{ d'après [Dismukes64]}$$

Le décalage par rapport à la relation linéaire (bowing) maximal est de 0.44 % (Dans la littérature, il varie entre 0.19% [Theodorou94] et 0.58 % [Shen95]).

Niveaux d'énergie :

La dépendance du gap indirect en fonction de x est bien connue à 300 K [People85] et peut être ramenée à 0 K [Van de Walle86]. Le décalage dû à l'interaction spin-orbite en bande de valence Δ est linéaire en x [Schäffler97], [Braunstein63]. Braunstein prédit des relations linéaires en x pour tous les niveaux d'énergie en Γ et L, mais pas en X.

Voici tableau XI les énergies à l'origine considérées dans notre modèle (l'origine des énergies est prise au sommet de la bande de valence ; on utilise les notations du groupe T_d pour les niveaux) :

Niveaux Γ	Silicium Massif	Germanium massif	$\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$
Γ_{6q}	13.46 [CP]	18.36 [CP]	$13.46(1-x)+18.36x$
Γ_{8d}	12.78 [CP]	17.0 [CP]	$12.78(1-x)+17x$
Γ_{7d}	12.78 [CP]	17.0 [CP]	$12.78(1-x)+17x$
Γ_{8-3}	9.66 [CP]	10.47 [CP]	$9.66(1-x)+10.47x$
Γ_{6u}	7.07 [CP]	7.77 [CP]	$7.07(1-x)+7.77x$
Γ_{8c}	3.4 [LB]	3.21 [LB]	$3.4-0.59x+0.4x^2$ (*)
Γ_{7c}	3.4 [LB]	3.01 [LB]	$3.4-0.79x+0.4x^2$ (*)
Γ_6	4.185 [LB]	0.9 [LB]	$4.185(1-x)+0.9x$
Γ_8	0	0	0
Γ_7	-0.044	-0.29	$-0.044(1-x)-0.29x$
Γ_{6v}	-12.92 [CP]	-13.14 [CP]	$-12.92(1-x)-13.14x$

**Tableau XI : Energies en $k = 0$ du $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ en k.p 30 bandes.
[CP] = [Cardona66], [LB] = [Landolt-Börnstein87] ; (*) : Variation parabolique pour ajuster la bande interdite du SiGe aux valeurs expérimentales de [People85].**

Toutes ces énergies sont choisies linéaires en fonction de la proportion de Ge. Seule l'énergie correspondant à la bande interdite indirecte suit une relation parabolique pour obtenir la bande interdite indirecte de [People85].

Énergies d'interaction (eV):

Énergie	Silicium Massif	Germanium massif	$\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$
E_p	19.963	24.596	$19.963(1-x)+24.596 x$
E_{pX}	14.806	17.649	$14.806(1-x)+17.649 x$
E_{p3X}	4.475	5.212	$4.475(1-x)+5.212 x$
E_{pqX}	3.993	2.510	$3.993(1-x)+2.510 x$
E_{pd}	1.193	0.005122	$1.193(1-x)^{2.5}+0.005122x^{2.5}$
E_{pCd}	7.491	12.230	$7.491(1-x)+12.230 x$
E_{p3d}	9.856	15.757	$9.856(1-x)+15.757 x$
E_{pqd}	20.757	27.578	$20.757(1-x)+27.578 x$
E_{puC}	16.356	17.845	$16.356(1-x)+17.845 x$
E_{pVC}	1.092	1.071	$1.092(1-x)+1.071 x$

Tableau XII : Energies d'interaction k.p prises pour modéliser le $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ en k.p 30 bandes.

La valeur particulière de E_{pd} (tableau XII) permet d'assurer la continuité du diagramme en K,U : elle a été obtenue en minimisant la discontinuité en K,U.

Le SiGe n'est pas une combinaison linéaire de Si et de Ge : en perdant son centre d'inversion, il fait partie du groupe T_d . De nouveaux paramètres P' ou Δ' sont pris en compte.

Δ' est l'interaction spin orbite entre les bandes de type « p » de valence et de conduction. Ce terme est nul dans Si ou dans Ge et évalué à 0.13 eV dans $Si_{0.5}Ge_{0.5}$ [Schmid90]. Il ne modifie pas sensiblement les bandes. Voici l'expression de Δ' considérée dans notre modèle : $\Delta'=0.52 x(1-x)$

P' couple les bandes « s » et « p » de conduction : par conséquent, un splitting apparaît en X (0.4 eV sur le diagramme de [Schmid90]) entre ces bandes (dans Ge et Si, ce splitting est nul : les deux bandes se rejoignent avec des pentes opposées). L'existence de ce paramètre P' modifie la variation des masses de bande de conduction qui ne sont plus linéaires en fonction de x ... Ce terme P' est donc assez faible pour ne pas modifier visiblement les masses mais fait quand même apparaître un splitting en X : $E_p'=0.02 x(1-x)$ (eV)

En résumé, la structure électronique de $Si_{1-x}Ge_x$ est issue d'une relation linéaire entre Si et Ge pour tous les éléments de matrice $\mathbf{k.p}$ sauf E_{pb} et pour tous les niveaux d'énergie en Γ sauf celui de la bande « p » de conduction. Pour ce niveau, une relation parabolique permet d'ajuster la variation du gap indirect aux mesures [People85]. Les termes supplémentaires P' et Δ' permettent d'obtenir un splitting en X même si l'effet de Δ' n'est pas primordial.

Avec tous ces paramètres, voici les diagrammes de bande obtenus.

b) Résultats : relations de dispersion, bande interdite et masses effectives

Voici tout d'abord quelques diagrammes de bande obtenus avec notre modèle :

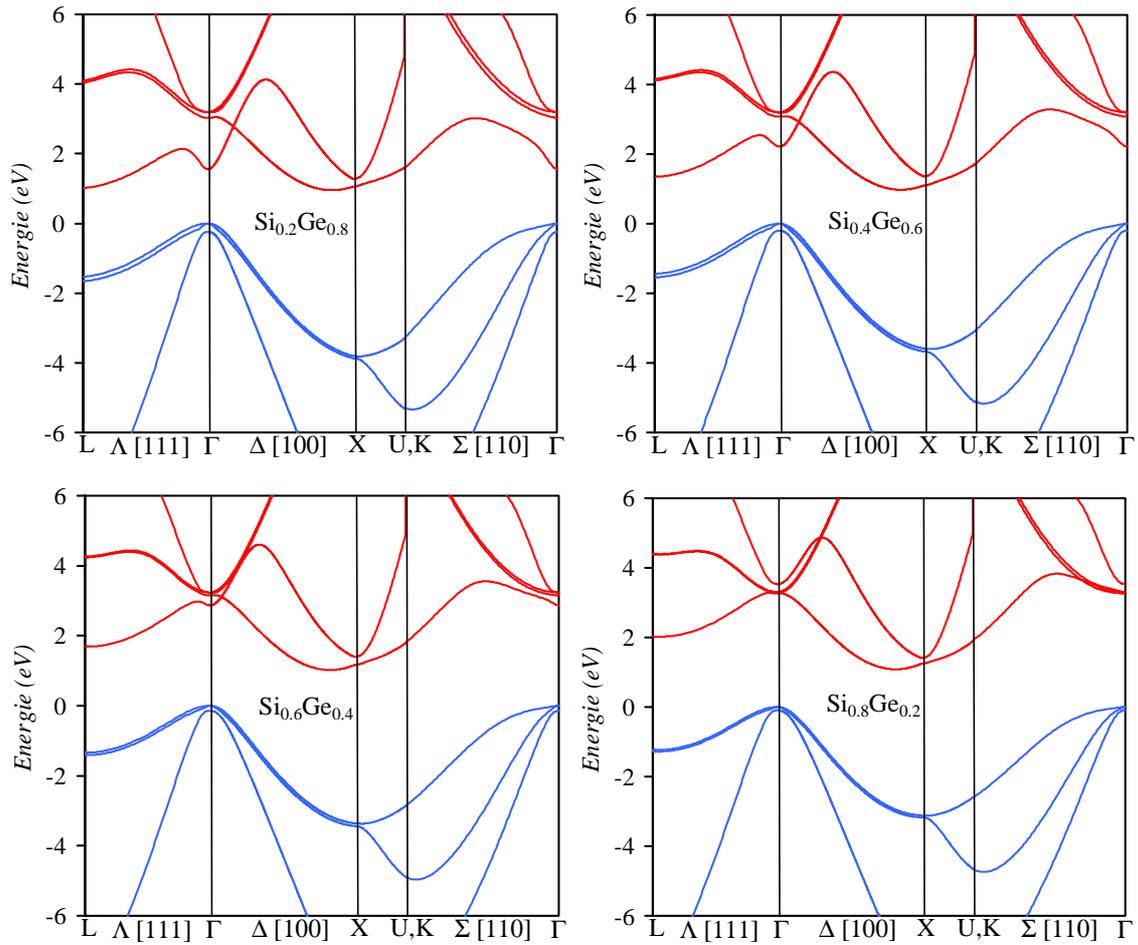


Figure 16 : Diagrammes de bande du $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ pour $x = 0.8, 0.6, 0.4, 0.2$ obtenus en k.p 30 bandes.

Pour valider notre modèle, comparons les résultats obtenus aux données expérimentales existantes, l'énergie de bande interdite, les masses effectives et les paramètres de bande de valence.

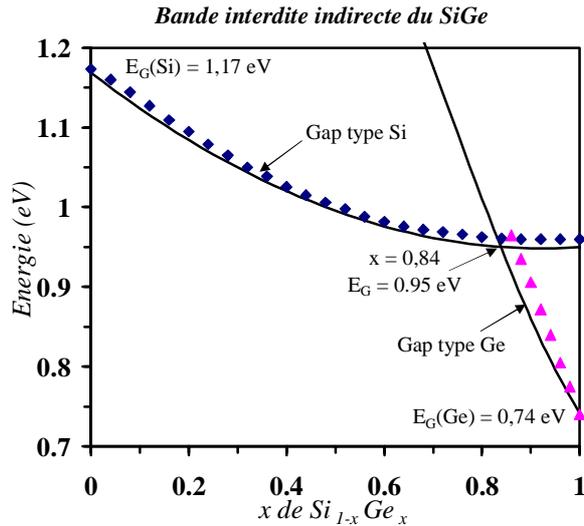


Figure 17 : Bande interdite indirecte du $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ (Les points sont extraits des données expérimentales à 300 K de [People85], transposées à 0 K par [Van de Walle86], et les traits continus sont les résultats obtenus en k.p à 30 bandes).

Pour $x < 0.84$, le minimum de la bande de conduction du $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ est en Δ comme celui du silicium ; pour $x > 0.84$, le minimum de la bande de conduction est en L, comme celui du germanium.

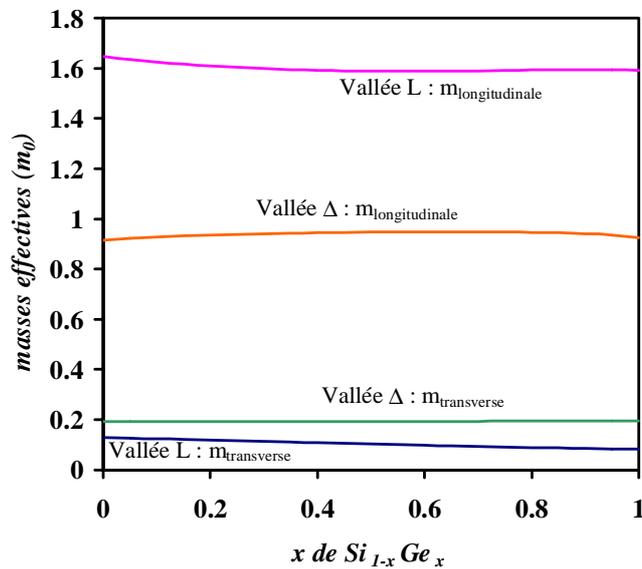


Figure 18 : Variation des masses effectives du $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ en fonction de x .

D'après Rieger et Vogl [Rieger93], ces masses de conduction varient, à peu près, linéairement en fonction de x , la linéarité est parfaite dans la simulation, sans introduire de paramètre P' , mais dans ce cas, le splitting n'existe plus en X. Le paramètre P' non nul est la cause des légères variations montrées figure 18.

Pour la bande de valence, les paramètres à considérer sont ceux de Luttinger ou les paramètres A, B, C, qui s'obtiennent à partir de ceux de Luttinger. Comme le montre la figure 19, nos résultats concernant les paramètres de la bande de valence correspondent aux données de [Schäffler97].

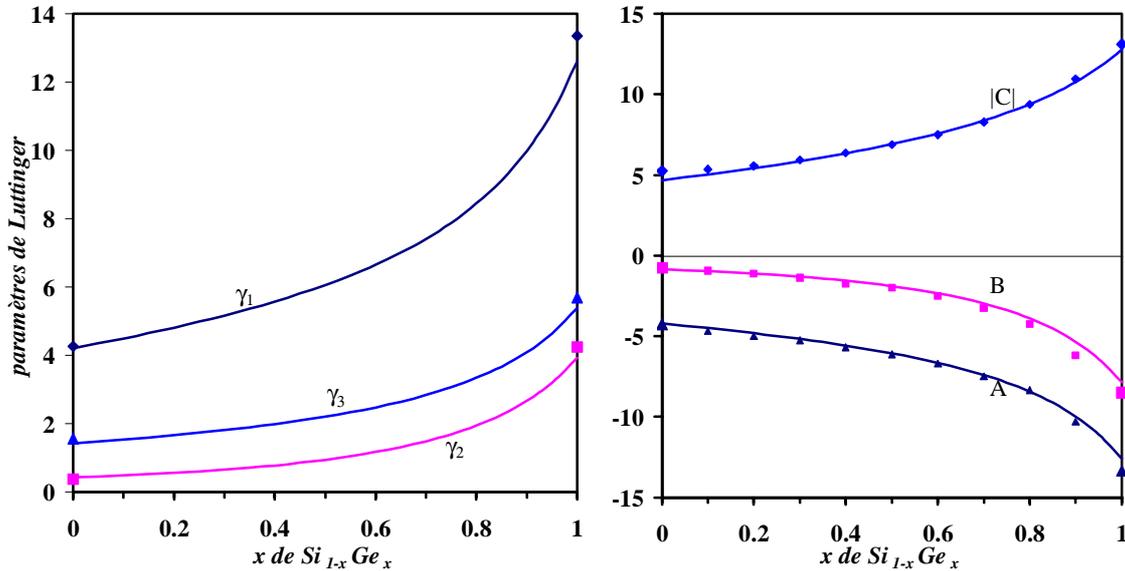


Figure 19 : Paramètres de la bande de valence du $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ obtenus en k.p à 30 bandes. Les points pour $x = 0$ ou 1 sont les données de [Landolt-Börnstein87] sur les 2 graphes. Pour les paramètres A, B, C, les points sont ceux de [Schäffler97]. Les lignes continues sont les résultats obtenus en k.p à 30 bandes.

Notre modèle **k.p** à 30 bandes permet d'obtenir tous les diagrammes de bande du $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ quel que soit x . Mais lorsqu'on fait croître du Ge sur du SiGe, le Ge est contraint à cause de la différence de paramètre de maille entre Si et Ge. Voyons les effets de la contrainte sur le diagramme de bande.

2) Prise en compte de la contrainte en k.p

a) Origine de la contrainte

Le désaccord de maille entre le silicium et le germanium est de 4.2 % : l'alliage $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ suit la loi suivante :

$$a_{\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x} = a_{\text{Si}} + 0.200326x + 0.0247x^2 \text{ d'après [Dismukes64]}$$

A cause de ce désaccord de maille, une couche de SiGe épitaxiée sur silicium, par exemple, subit une contrainte en compression biaxiale. Suivant les conditions de la croissance et la proportion de germanium, la couche de SiGe peut absorber élastiquement la contrainte, et croître avec le même paramètre de maille (dans les directions du plan de la couche) que son substrat (couche

pseudomorphique) jusqu'à une épaisseur critique (h_c) au-delà de laquelle le semi-conducteur se relaxe progressivement et apparaissent des dislocations (figure 20).

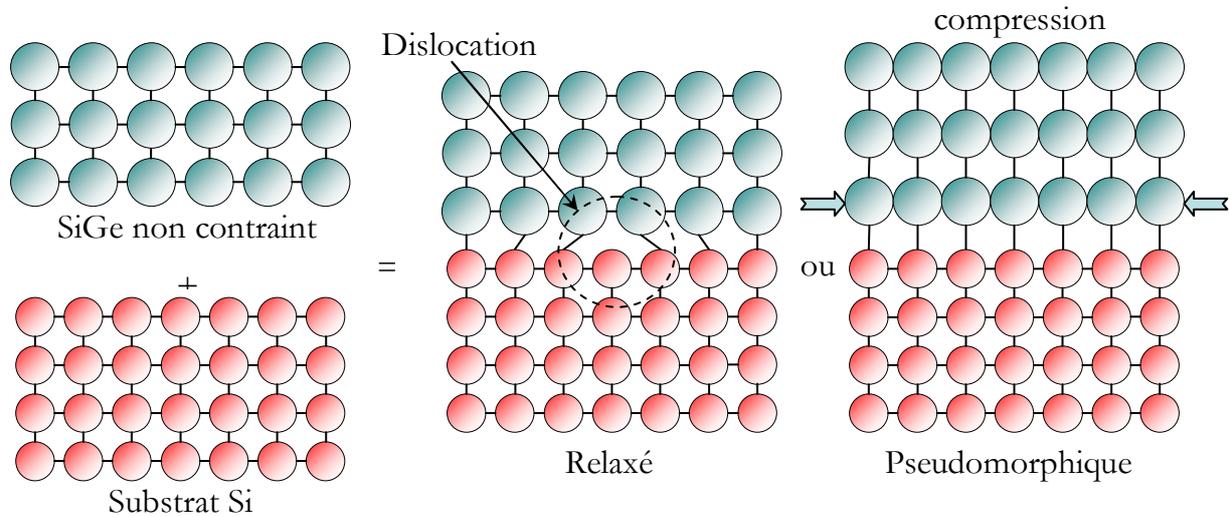


Fig. 20 : Représentation bidimensionnelle de l'accord de maille entre une couche SiGe crue sur substrat Si, avec relaxation de la croissance à l'hétérojonction, laissant apparaître des dislocations ou avec accord pseudomorphique contraignant en compression la couche SiGe.

Entre une faible épaisseur pour laquelle la contrainte ne peut pas se relâcher conduisant à une couche « stable », et une grande épaisseur où la couche est « relaxée », il existe une gamme d'épaisseur pour laquelle la couche est métastable (fig. 21), pour chaque fraction de germanium. Initialement, la couche peut être contrainte, mais tout apport d'énergie favorise la génération de dislocations, notamment lors de recuits ou d'implantations ultérieures. L'épaisseur critique est plus grande lorsque la couche contrainte épitaxiée est recouverte (« sandwich ») d'une couche de composition identique à celle du substrat ou de la couche tampon initiale.

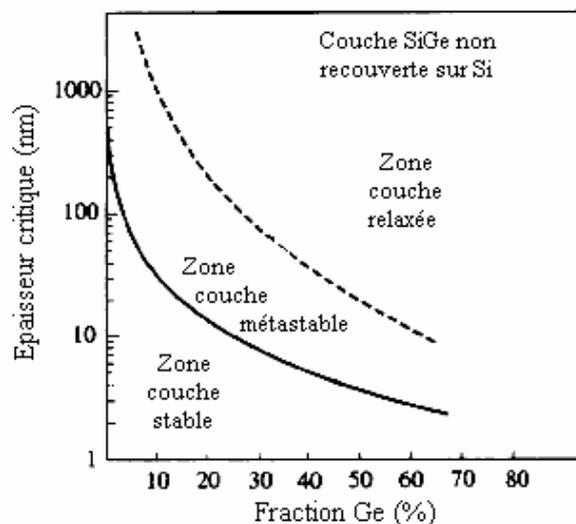


Fig. 21 : Variation de l'épaisseur critique (stabilité de l'accord pseudomorphique) d'une couche SiGe (non recouverte) sur substrat Si [Ismail93].

Sur une couche d'alliage relaxée, on peut de nouveau épitaxier du silicium et ainsi obtenir du silicium contraint sur SiGe. Le diagramme de bande d'un semi-conducteur contraint non relaxé est différent de celui du semi-conducteur massif car la contrainte abaisse la symétrie du cristal. L'énergie de bande interdite est modifiée, la dégénérescence est levée en bande de valence... L'hamiltonien de contrainte biaxiale présenté ci-après permet de prendre en compte ces modifications dans le calcul du diagramme de bande.

b) *Hamiltonien de contrainte biaxiale*

Lorsqu'on dépose une couche de $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ sur du $\text{Si}_{1-y}\text{Ge}_y$ relaxé, on induit une brisure de symétrie selon l'axe de croissance [001] parallèle à O_z . Le $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ adopte le paramètre de maille du $\text{Si}_{1-y}\text{Ge}_y$ dans le plan des couches. La différence de maille entre le $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ et le $\text{Si}_{1-y}\text{Ge}_y$ se traduit par l'établissement d'un champ de contrainte biaxiale à l'intérieur de la couche de $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$.

Pour une épaisseur inférieure à l'épaisseur critique, les composantes du tenseur de déformation subie par la couche de $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ sont les suivantes :

$$\begin{aligned}\varepsilon_{xy} = \varepsilon_{yz} = \varepsilon_{zx} &= 0 \\ \varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} = \varepsilon_{//} &= \frac{a_{\text{Si}_{1-y}\text{Ge}_y} - a_{\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x}}{a_{\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x}}\end{aligned}$$

où $a_{\text{Si}_{1-y}\text{Ge}_y}$ et $a_{\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x}$ sont respectivement les paramètres de maille du substrat et de la couche contrainte déposée.

$$\varepsilon_{\perp} = \varepsilon_{zz} = -2 \frac{C_{12}}{C_{11}} \varepsilon_{//}$$

où C_{11} et C_{12} sont les constantes d'élasticité [Landolt-Börnstein87].

La contrainte biaxiale subie par le $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ peut se décomposer en une contrainte hydrostatique, qui décale les niveaux d'énergie, et une contrainte uniaxiale qui lève les dégénérescences en Γ en bande de valence et en Δ en bande de conduction.

Les potentiels de déformation a_c , a_v et b_v définis en centre de zone par Bir et Pikus [Bir74] relient les déformations ε et les décalages des niveaux d'énergie de la couche contrainte. a_c est lié à la bande de conduction et (a_v, b_v) à la bande de valence. Pour un semi-conducteur à bande interdite directe tel GaAs, les bandes les plus utiles autour de la bande interdite sont Γ_{1C} et Γ_{5V} . Les paramètres a_c et a_v donnent accès au décalage en énergie de la bande interdite, et b_v fournit le « splitting » qui apparaît en bande de valence. Dans un semi-conducteur à bande interdite indirecte tel que le silicium, le minimum de la bande de conduction est en Δ ; la contrainte uniaxiale lève aussi la dégénérescence en bande de conduction en décalant les vallées Δ_2 dans l'axe

de croissance des couches par rapport à celles dans le plan des couches Δ_4 . Jusqu'à présent, pour calculer le diagramme de bande du Si contraint, seuls les potentiels locaux Ξ_d et Ξ_u permettaient de décrire la variation de la bande interdite et le « splitting » en bande de conduction. Mais ces deux paramètres ne peuvent être utilisés en \mathbf{k}, \mathbf{p} dont les fonctions de base sont les fonctions de Bloch en $k = 0$. C'est pourquoi nous avons introduit un paramètre b_c qui permet de décrire le « splitting » en bande de conduction comme b_v en bande de valence. Nous construisons ainsi un hamiltonien de contrainte de type Bir et Pikus, aussi valable pour les semi-conducteurs à bande interdite indirecte [Richard2003].

Pour les niveaux de type Γ_1 , typiquement la bande « s » de conduction, un seul paramètre a_{1c} suffit pour décrire le décalage de son énergie à l'origine. L'hamiltonien correspondant est diagonal et s'écrit : $H_{st}^{1c} = a_{1c} \boldsymbol{\varepsilon}$ où $\boldsymbol{\varepsilon} = 2\varepsilon_{//} + \varepsilon_{\perp}$.

Pour les niveaux de type Γ_5 , deux paramètres sont nécessaires, $a_{5(cv)}$ décrivant le décalage en énergie de la bande « p » de conduction (respectivement de valence), et $b_{(cv)}$ décrivant le splitting entre bandes. Les niveaux Γ_5 se séparent en Γ_8 et Γ_7 . Pour les fonctions d'ondes, les raccourcis suivants sont utilisés : pour $\Gamma_{8c,v}$ ($J=3/2$), $|\pm 3/2\rangle_{c,v}$, $|\pm 1/2\rangle_{c,v}$ à la place des notations usuelles de Luttinger et Kohn $|3/2, \pm 3/2\rangle_{c,v}$, $|3/2, \pm 1/2\rangle_{c,v}$ et pour $\Gamma_{7c,v}$ ($J=1/2$), $|\pm 7/2\rangle_{c,v}$ à la place de $|1/2, \pm 1/2\rangle_{c,v}$. L'Hamiltonien de Bir et Pikus correspondant s'écrit :

$$H_{st}^{5c,v} = \begin{bmatrix} |\frac{3}{2}\rangle_{c,v} & |1/2\rangle_{c,v} & |-1/2\rangle_{c,v} & |-3/2\rangle_{c,v} & |7/2\rangle_{c,v} & |-7/2\rangle_{c,v} \\ a_{5c,v} \boldsymbol{\varepsilon} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ +b_{5c,v} \boldsymbol{\varepsilon}_{\perp//} & & & & & \\ 0 & a_{5c,v} \boldsymbol{\varepsilon} & 0 & 0 & -\sqrt{2} b_{5c,v} \boldsymbol{\varepsilon}_{\perp//} & 0 \\ & -b_{5c,v} \boldsymbol{\varepsilon}_{\perp//} & & & & \\ 0 & 0 & a_{5c,v} \boldsymbol{\varepsilon} & 0 & 0 & \sqrt{2} b_{5c,v} \boldsymbol{\varepsilon}_{\perp//} \\ & & -b_{5c,v} \boldsymbol{\varepsilon}_{\perp//} & & & \\ 0 & 0 & 0 & a_{5c,v} \boldsymbol{\varepsilon} & 0 & 0 \\ & & & +b_{5c,v} \boldsymbol{\varepsilon}_{\perp//} & & \\ 0 & -\sqrt{2} b_{5c,v} \boldsymbol{\varepsilon}_{\perp//} & 0 & 0 & a_{5c,v} \boldsymbol{\varepsilon} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} b_{5c,v} \boldsymbol{\varepsilon}_{\perp//} & 0 & 0 & a_{5c,v} \boldsymbol{\varepsilon} \end{bmatrix}$$

avec $\boldsymbol{\varepsilon}_{\perp//} = \varepsilon_{\perp} - \varepsilon_{//}$.

Pour calculer le diagramme de bande du $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ contraint sur du $\text{Si}_{1-y}\text{Ge}_y$ relaxé, cet hamiltonien de contrainte est ajouté à l'hamiltonien à 20 bandes ou 30 bandes présentés précédemment. Nous n'avons pas considéré l'effet de la contrainte sur les autres bandes, d'une part parce qu'aucune

donnée n'est disponible dans la littérature, d'autre part parce que leur influence sur les bandes utiles Γ_1 , $\Gamma_{5c,v}$ est très faible. Cet hamiltonien de contrainte est aussi bien utilisable en 20 bandes qu'en 30 bandes. Les valeurs des paramètres a , b sont données pour le Si contraint sur SiGe en $\mathbf{k.p}$ à 20 bandes dans [Richard2003].

Le § 3 donne les valeurs utilisées en $\mathbf{k.p}$ à 30 bandes pour $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ sur du $\text{Si}_{1-y}\text{Ge}_y$.

3) Diagramme de bande du $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ contraint sur du $\text{Si}_{1-y}\text{Ge}_y$

Les constantes d'élasticité C_{11} et C_{12} du $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ varient linéairement avec x_{Ge} d'après Rieger et Vogl [Rieger93]. Nous avons donc adopté une variation linéaire entre les valeurs fournies par [Landölt-Bornstein87] :

$$C_{11} = 16,772 (1-x) + 13,112 x \text{ et } C_{12} = 6,498 (1-x) + 4,923 x$$

Les paramètres a_{1c} , a_{5c} , a_{5v} et le paramètre b_v de la bande de valence du Si et du Ge sont directement issus de la littérature. Pour le $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$, une variation linéaire des paramètres a été adoptée à l'instar de [Elkurdi2003]. Les décalages des niveaux d'énergie étant définis à une constante près, nous avons posé $a_{5v} = 0$. Les paramètres a_{1c} , a_{5c} fournis par [Blacha84] ont été utilisés ce qui donne pour le $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$:

$$a_{1c} = 5,1 (1-x) + 8,8 x ; a_{5c} = 0,2 (1-x) + 3,9 x$$

Pour la levée de dégénérescence en bande de valence, une variation linéaire entre les paramètres de [Van de Walle86] donne $b_v = -2,35 (1-x) - 2,55 x$.

Le décalage des vallées Δ_2 et Δ_4 en bande de conduction est donné dans la littérature par Ξ_u et $\Xi_d + \Xi_u/3 - a_{5c}$ [Richard2003]. Un consensus se dégage pour la valeur de Ξ_u , entre 9,16 [Van de Walle86] et 10,5 [Fischetti96] pour Si, et entre 9,42 [Van de Walle86] et 10,2 [Rieger93] pour Ge. La valeur de $\Xi_d + \Xi_u/3 - a_{5c}$ est beaucoup plus incertaine : entre 0,09 [Xu93] et 2,5 [Fischetti96] pour Si et entre -1,9 [Rieger93] et 5,75 [Fischetti96] pour Ge. En prenant $b_{5c} = 5,1$, nous obtenons $\Xi_u = 9,17$ pour Si et 9,43 pour Ge, ce qui est tout à fait comparable avec la littérature. Pour $\Xi_d + \Xi_u/3 - a_{5c}$, nous obtenons 0,11 pour Si et 2,41 pour Ge, ce qui est dans la fourchette des valeurs existantes. En bref :

$$a_{1c} = 5.1 (1-x) + 8.8 x$$

$$a_c = 0.2 (1-x) + 3.9 x$$

$$b_c = 5.1$$

$$b_v = -2.35 (1-x) - 2.55 x$$

Voici quelques diagrammes de bande du $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ contraint sur du $\text{Si}_{1-y}\text{Ge}_y$ relaxé :

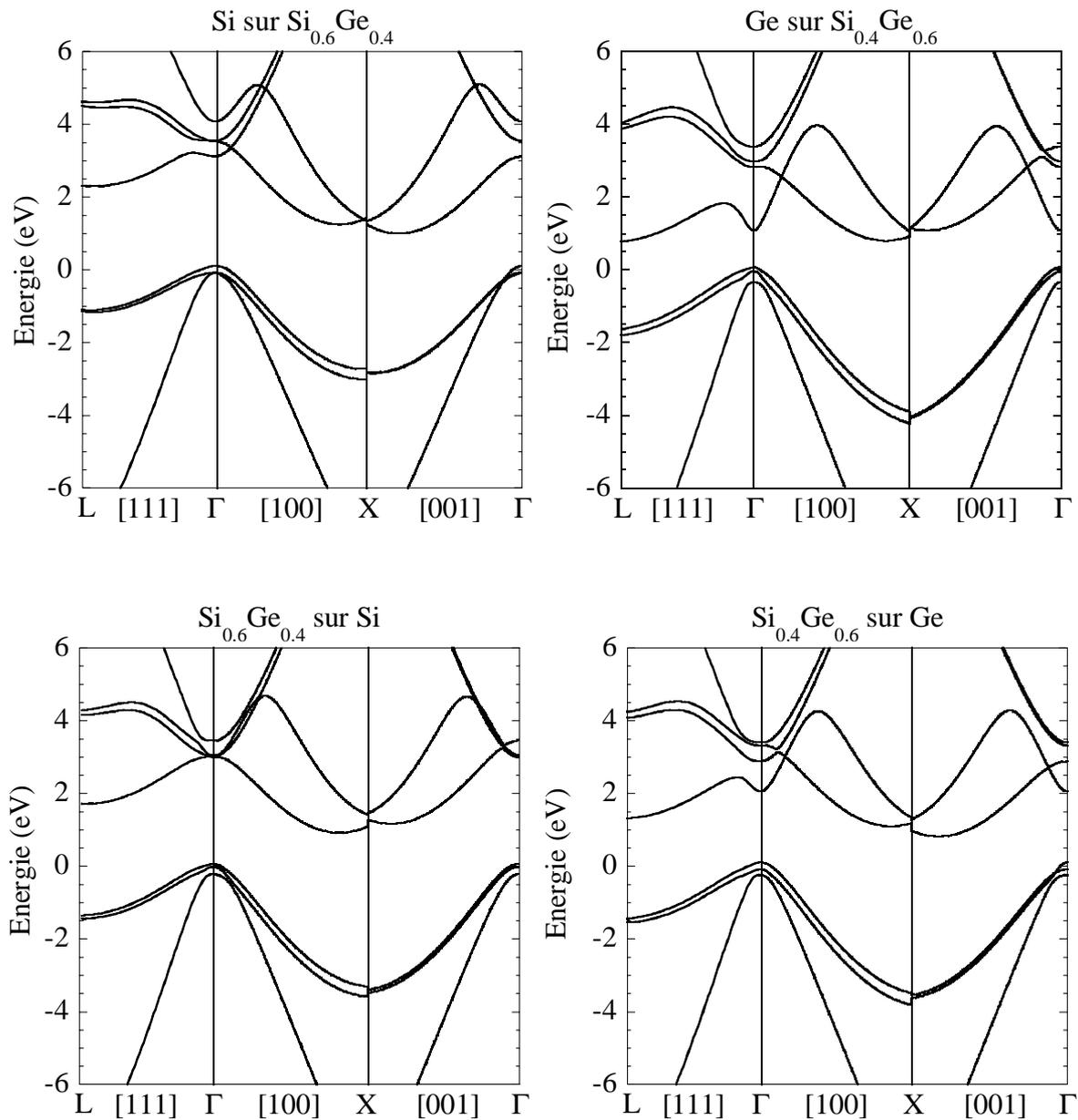


Figure 22 : Diagrammes de bande du Si contraint en tension sur $\text{Si}_{0.6}\text{Ge}_{0.4}$, du Ge contraint en compression sur $\text{Si}_{0.4}\text{Ge}_{0.6}$, du $\text{Si}_{0.6}\text{Ge}_{0.4}$ contraint en compression sur Si et du $\text{Si}_{0.4}\text{Ge}_{0.6}$ contraint en tension sur Ge.

D'après la figure 22, la contrainte en tension abaisse les vallées Δ_2 dans la direction de croissance des couches [001] par rapport aux vallées Δ_4 (directions [100] et [010]) en bande de conduction, alors que la contrainte en compression a l'effet inverse. Pour la bande de valence, très anisotrope, il est moins évident de distinguer les effets de la contrainte en tension par rapport à la contrainte en compression. Il est usuel de dire que lorsqu'un semi-conducteur est contraint en tension, la bande des trous légers passe au dessus de celle des trous lourds et inversement pour une contrainte en compression. Cependant, cette assertion n'est vérifiée que si l'on considère comme masse effective l'inverse de la courbure des bandes dans la direction de contrainte [001]. Pour un

semi-conducteur contraint, les appellations « trous lourds » ($\Gamma_8^{3/2}$) et « trous légers » ($\Gamma_8^{1/2}$) n'ont plus de sens : une des deux bandes peut avoir une courbure plus importante que l'autre dans une direction et moins importante dans une autre. Nous utiliserons donc d'autres notations : la bande élevée par la contrainte sera symbolisée Γ_8^u et la bande abaissée Γ_8^l , la bande découplée par spin-orbite étant notée Γ_7 .

Pour tracer le diagramme de bande d'une hétérostructure, il faut encore connaître la hauteur de barrière en bande de valence ΔE_v entre la couche contrainte et le substrat. Cette hauteur de barrière n'est pas directement introduite dans l'hamiltonien : en effet, il faut tenir compte du décalage en énergie introduit par la contrainte. D'après [Rieger93] repris par [Schäffler97], $\Delta E_v = (0,47-0,06y) (x - y)$ pour $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ contraint sur $\text{Si}_{1-y}\text{Ge}_y$. D'après [Van de Walle86], ΔE_v (Ge contraint sur Si) = 0,54 eV et ΔE_v (Si contraint sur Ge) = -0,51 eV. Un décalage moyen de 0,54 (x - y) eV fournit le diagramme suivant (figure 23) qui correspond à peu près aux données fournies par [Schäffler97].

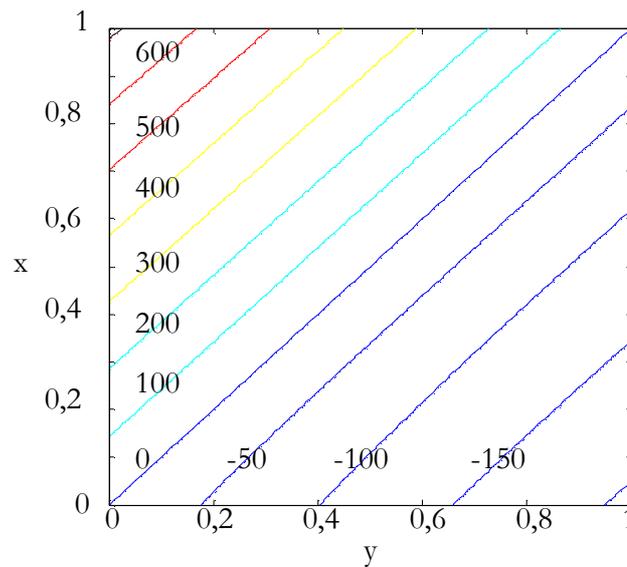


Figure 23 : Hauteurs de barrière (meV) en bande de valence entre la couche contrainte de $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ et le substrat $\text{Si}_{1-y}\text{Ge}_y$.

La méthode **k.p** à 30 bandes associée à un hamiltonien de contrainte permet donc d'obtenir toutes les données nécessaires pour tracer le diagramme de bande de n'importe quelle hétérostructure de $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ contraint sur $\text{Si}_{1-y}\text{Ge}_y$. Il reste à tenir compte du confinement induit dans la couche contrainte.

VI. Confinement

Si la couche contrainte a une épaisseur de l'ordre de la longueur d'onde de de Broglie associée aux porteurs, elle peut être considérée comme un puits quantique dans la direction de croissance des couches. Dans ces conditions, le diagramme des bandes n'est plus un continuum de niveaux d'énergie d'allure parabolique en bas des bandes mais les niveaux d'énergie accessibles aux électrons sont quantifiés pour la composante du vecteur d'onde suivant la direction de croissance des couches. L'objectif de cette partie est de calculer ces niveaux d'énergie quantifiés, les sous-bandes, à l'aide du formalisme de la fonction enveloppe. Le premier paragraphe présente le modèle de la fonction enveloppe et précise comment l'associer à la méthode **k.p** à 30 bandes. Au second paragraphe, cette méthode est mise en œuvre pour calculer des sous-bandes de trous dans un puits carré de Ge contraint sur SiGe. Enfin, le troisième paragraphe présente le calcul de sous-bandes d'électrons dans un puits carré de silicium contraint sur SiGe. Le minimum de la bande de conduction du silicium n'étant plus en Γ mais en Δ , les fonctions tests choisies sont modifiées pour obtenir les sous-niveaux.

1) Modèle de la fonction enveloppe [BenDaniel66]

a) Position du problème

Si on suppose que le mouvement des porteurs est libre suivant les directions du plan x-y et confiné suivant z (axe de croissance des couches), on peut obtenir les minima des sous-bandes en résolvant l'équation de Schrödinger dans l'approximation de la fonction enveloppe.

Pour une hétérostructure de type I, le puits de largeur $2a$ peut être schématisé ainsi :

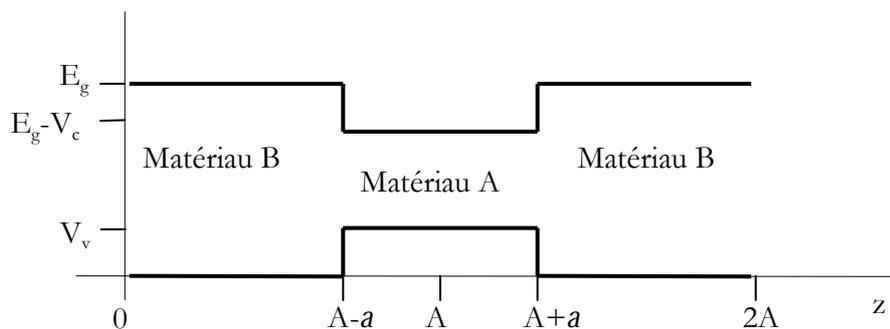


Figure 24 : Schéma d'une hétérostructure de type I, entre un matériau B de bande interdite E_g et un matériau A de bande interdite $E_g - V_v - V_c$, V_v (resp. V_c) étant la hauteur de barrière en bande de valence (resp. conduction).

Pour utiliser le formalisme de la fonction enveloppe, il faut supposer que les matériaux puits et barrière cristallisent avec le même paramètre de maille et dans la même structure dans le plan de jonction, et que la limite entre les deux matériaux est abrupte. Dans chaque couche, la fonction d'onde est développée sur la partie périodique des fonctions de Bloch. Les parties périodiques des fonctions de Bloch $u_{l,k_0}(\vec{r})$ sont supposées identiques dans le puits et la barrière [Bastard96]. Les fonctions d'onde s'écrivent de la façon suivante :

$$\psi_b(\vec{r}) = \sum_l f_l^{(b)}(\vec{r}) u_{l,k_0}(\vec{r}) \text{ dans la barrière}$$

$$\psi_a(\vec{r}) = \sum_l f_l^{(a)}(\vec{r}) u_{l,k_0}(\vec{r}) \text{ dans le puits}$$

Calculer les fonctions enveloppes revient à déterminer $f_l^{(a,b)}(\vec{r}) = f_l^{(a,b)}(\rho, z) = \exp(i\vec{k}_\rho \cdot \vec{\rho}) \chi_l^{(a,b)}(z)$ avec $\vec{k}_\rho \cdot \vec{\rho} = k_x x + k_y y$ et $\chi_l^{(a,b)}(z)$ appelée fonction enveloppe, continue en $A-a$ et $A+a$.

b) Méthode de calcul de la fonction enveloppe

La fonction d'onde recherchée vérifie toujours l'équation de Schrödinger mais elle ne peut plus être factorisée par $\exp(i\vec{k} \cdot \vec{r})$:

$$\psi_{n,k_\rho}(\vec{r}) = \exp(i\vec{k}_\rho \cdot \vec{\rho}) \chi_{n,k_\rho}(z) u_{n,k_\rho}(\vec{r})$$

Par conséquent, le vecteur d'onde k_z est remplacé par l'opérateur $-i \frac{\partial}{\partial z}$ dans l'hamiltonien $\mathbf{k.p}$.

Les solutions de l'équation à un vecteur d'onde k_ρ sont de la forme :

$$\psi_{k_\rho}(\vec{r}) = \sum_n^{30 \text{ bandes}} \chi_{n,k_\rho}(z) \exp(i\vec{k}_\rho \cdot \vec{\rho}) u_{n,k_\rho}(\vec{r})$$

où n indice les bandes prises en compte dans l'hamiltonien $\mathbf{k.p}$ à 30 bandes.

La méthode $\mathbf{k.p}$ revient toujours projeter l'équation de Schrödinger sur la base des $u_{n,0}$. L'équation aux valeurs propres vérifiée par la fonction enveloppe $\chi(z)$ est la suivante :

$$H_{l,m} \chi(z) = \left[\left[V(z) + \frac{\hbar^2}{2m_0} \left(k_\rho^2 - \frac{d^2}{dz^2} \right) \right] \langle u_l | u_m \rangle + \frac{\hbar k_\rho}{m_0} \langle u_l | p_\rho | u_m \rangle - \frac{i\hbar}{m_0} \langle u_l | p_z | u_m \rangle \frac{d}{dz} \right] \chi(z) = \mathcal{E} \chi(z)$$

où $H_{l,m}$ est l'élément de matrice de la l -ième ligne et m -ième colonne de l'hamiltonien à 30 bandes et p_ρ l'opérateur p dans le plan (k_x, k_y) .

La fonction enveloppe est calculée sur l'intervalle $[0, 2A]$, avec $A \gg a$ de sorte que $\chi(0) = \chi(2A) = 0$. Elle est développée sur une base de fonctions tests $\phi_i(z)$, qui s'annulent en $z = 0$ et $z = 2A$:

$$\chi(z) = \sum_j a_j \varphi_j(z) \text{ avec } \varphi_j(0) = \varphi_j(2A) = 0$$

On cherche à déterminer les coefficients a_j , composantes des vecteurs propres de l'Hamiltonien sur la base des fonctions tests $\varphi_j(z)$. Les valeurs propres correspondent aux niveaux d'énergie associés.

Chaque élément de matrice de l'hamiltonien à 30 bandes H_{lm} est développé en une sous matrice de dimension N, où N est le nombre de fonctions tests $\varphi_j(z)$ prises en compte. La recherche des solutions de cette équation se fait par diagonalisation de la matrice de taille 30N×30N. Un compromis entre précision et rapidité du calcul permet de déterminer la valeur de N, de toute façon inférieure à 80 à cause de limitations internes du logiciel utilisé.

c) Choix des fonctions tests

Le choix des fonctions tests dépend de l'endroit où l'on souhaite calculer les sous-bandes, forcément en vallée Γ pour les trous, mais les sous-bandes des électrons peuvent aussi être situées en vallée Δ ou L.

En trois dimensions, sans confinement, les fonctions d'onde des électrons s'écrivent :

$$\psi_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = u_{n,k}(\vec{r}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} = e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \sum_j c_j u_{j,0}(\vec{r})$$

Les c_j sont les composantes des vecteurs propres déterminés par la méthode **k.p** sur la base des parties périodiques des fonctions de Bloch en $k = 0$.

Soit \vec{k}_e le vecteur d'onde de l'extremum de la vallée où l'on souhaite calculer les sous-bandes. En bande de valence, $\vec{k}_e = \vec{0}$: le sommet de la bande de valence est Γ . En revanche, le minimum de la bande de conduction varie selon le semi-conducteur considéré : pour le silicium contraint en tension, il est en vallée Δ_2 dans l'axe z de croissance des couches (en direction [001]) donc

$$\vec{k}_e = \vec{k}_\Delta = \left(0; 0; 0,85 \frac{2\pi}{a_0} \right), \text{ } a_0 \text{ étant le paramètre de maille du cristal considéré. Pour le germanium}$$

contraint, il est en vallée L (les vallées L restent équivalentes dans le cas d'une contrainte biaxiale),

$$\vec{k}_e = \vec{k}_L = \left(\frac{\pi}{a_0}; \frac{\pi}{a_0}; \frac{\pi}{a_0} \right).$$

Les fonctions d'onde des électrons situés au voisinage de l'extremum considéré \vec{k}_e peuvent s'écrire, avec $\vec{k} = \vec{k}_e + \vec{k}_0$ et $k_0 \ll k_e$:

$$\psi_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}_e \cdot \vec{r}} \sum_j c_j(\vec{k}) \mathbf{u}_{j,0}(\vec{r}) e^{i\vec{k}_0 \cdot \vec{r}} = e^{i\vec{k}_e \cdot \vec{r}} \sum_j c_j(\vec{k}_e + \vec{k}_0) \mathbf{u}_{j,0}(\vec{r}) e^{i\vec{k}_0 \cdot \vec{r}}.$$

Pour un puits carré infini de largeur $2A$ dans l'approximation de la masse effective, les fonctions enveloppes sont des sinusoides :

$$\text{Energie de la sous bande } n : E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m^*} \frac{n^2}{4A^2}, \text{ Fonction enveloppe : } \varphi_n(z) = \frac{1}{\sqrt{A}} \sin\left(\frac{n\pi z}{2A}\right)$$

Ces fonctions, qui s'annulent en 0 et $2A$, constituent une base usuelle des fonctions tests pour développer la fonction enveloppe [Fossard2002] :

$$\chi(z) = \sum_j a_j \varphi_j(z) = \sum_j a_j \left(\frac{1}{\sqrt{A}} \sin\left(\frac{j\pi z}{2A}\right) \right)$$

Autour de Γ , cette base permet de fournir les sous-bandes de manière tout à fait satisfaisante [Elkurdi2003] avec un nombre N limité de fonctions tests comme le montre le paragraphe suivant (§ 2). En revanche, elle ne donne aucun niveau confiné en vallée Δ_2 dans le cas du silicium contraint. En effet, pour donner accès aux niveaux confinés en Δ , N doit vérifier :

$$\frac{N\pi}{2A} > k_{ez} = 0.85 \frac{2\pi}{a_0} \text{ soit } N > 0.85 \frac{4A}{a_0}$$

Si on considère un puits de largeur $2a = 5$ nm, on peut prendre par exemple $A = 30$ nm, ce qui donne $N > 180$ (avec $a_0(\text{Si}) = 5.43 \text{ \AA}$), impossible à simuler avec notre logiciel. Par conséquent, pour obtenir les niveaux confinés en un autre point $\vec{k}_e = (k_{ex}, k_{ey}, k_{ez})$ de la zone de Brillouin, nous avons introduit le facteur $e^{ik_{ez}z}$ dans les fonctions tests :

$$\varphi_n(z) = \frac{\exp(ik_{ez}z)}{\sqrt{A}} \sin\left(\frac{n\pi z}{2A}\right)$$

Les fonctions tests en Γ restent les fonctions sinus usuelles puisque $k_{ez} = 0$, et ce facteur permet d'obtenir les sous-bandes en Δ ou L comme le montre le paragraphe 3.

Après avoir choisi les fonctions tests, il reste à développer l'hamiltonien à 30 bandes sur cette base, c'est-à-dire à calculer tous les termes de l'hamiltonien 2D, de dimension $30N \times 30N$. Ses termes sont de la forme :

$$\langle \varphi_j | H_{l,m} | \varphi_g \rangle = \int_0^{2A} \frac{\exp(-ik_{ez}z)}{\sqrt{A}} \sin\left(\frac{j\pi z}{2A}\right) H_{l,m} \frac{1}{\sqrt{A}} \sin\left(\frac{g\pi z}{2A}\right) \exp(ik_{ez}z) dz$$

La résolution numérique de cette équation aux valeurs propres s'effectue par diagonalisation de l'hamiltonien 2D. Les paragraphes suivants décrivent cette résolution en bande de valence (§ 2) et de conduction (§ 3).

2) Confinement en bande de valence

Le sommet de la bande de valence des semi-conducteurs usuels est toujours situé au centre de la zone de Brillouin Γ . Pour obtenir les sous-bandes de trous, la base de fonctions tests est la base usuelle des fonctions propres du puits carré infini :

$$\varphi_n(z) = \frac{1}{\sqrt{A}} \sin\left(\frac{n\pi z}{2A}\right)$$

où $2A$ est le domaine sur lequel la fonction enveloppe s'étend, avec $2A > 5 \times 2a$, $2a$ étant la largeur du puits. La méthode du formalisme de la fonction enveloppe associée au **k.p** à 30 bandes ne peut pas être validée par comparaison avec la masse effective en bande de valence : le couplage des bandes élevées et abaissées de Γ_8 modifie considérablement l'allure des sous-bandes [Yu96]. C'est pourquoi cette méthode a d'abord été comparée au **k.p** à 14 bandes développé par Moustafa El Kurdi durant sa thèse [ElKurdi2003] (§ a), puis elle a été utilisée sur un puits de Ge contraint sur SiGe (§ b), dans lequel a été modélisé le transport en gaz bidimensionnel (Chap. 4, II).

a) Comparaison au k.p 14 bandes [Elkurdi2003]

Moustafa El Kurdi a calculé le diagramme de bande d'un puits quantique de 5 nm de large de $\text{Si}_{0.5}\text{Ge}_{0.5}$ contraint sur Si en utilisant un modèle à 6 bandes et à 14 bandes. Les niveaux d'énergie en $k = 0$ et les paramètres de Luttinger du $\text{Si}_{0.5}\text{Ge}_{0.5}$ sont un peu différents de ceux utilisés dans notre modèle **k.p** à 30 bandes comme le montre le tableau XIII.

	$\Gamma_6 - \Gamma_8$ (eV)	$\Gamma_{7c} - \Gamma_6$ (eV)	$\Gamma_8 - \Gamma_7$ (eV)	$\Gamma_{8c} - \Gamma_{7c}$ (eV)	γ_1	γ_2	γ_3
k.p 14 bandes	2.54	0.725	0.165	0.093	5.9	0.9	2.0
k.p 30 bandes	2.54	0.668	0.169	0.103	6.06	0.94	2.20

Tableau XIII : Comparaison des paramètres utilisés en k.p à 30 bandes et en k.p à 14 bandes pour obtenir la relation de dispersion du $\text{Si}_{0.5}\text{Ge}_{0.5}$ (en centre de zone pour le k.p à 14 bandes).

Les paramètres utilisés diffèrent de moins de 10 %, mais l'allure des diagrammes de bande en deux dimensions est très sensible aux variations des paramètres de Luttinger. La hauteur de barrière entre le Si et le $\text{Si}_{0.5}\text{Ge}_{0.5}$ est de 350 meV en bande de valence. La figure 25 présente à gauche les diagrammes obtenus par les méthodes **k.p** à 14 et 30 bandes et à droite une comparaison entre les méthodes **k.p** à 6 bandes et 14 bandes. Pour modéliser cette structure de bande, 40 fonctions tests ont été utilisées sur un espace de longueur 60 nm (12 fois la largeur du puits). Ces valeurs réalisent un bon compromis entre précision et temps de calcul.

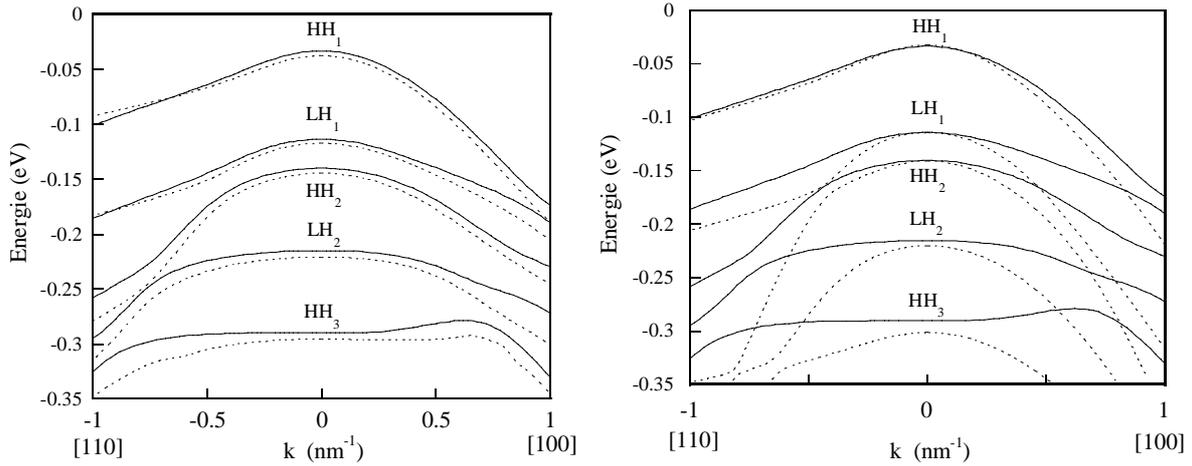


Figure 25 : Diagrammes de la bande de valence d'un puits quantique de 5 nm de large de $\text{Si}_{0.5}\text{Ge}_{0.5}$ contraint sur Si. Sur les deux figures, le diagramme en traits pleins est obtenu en $\mathbf{k.p}$ à 14 bandes [ElKurdi2003]. Sur celle de gauche, le diagramme en pointillés est calculé en $\mathbf{k.p}$ à 30 bandes et sur celle de droite, il est obtenu en $\mathbf{k.p}$ à 6 bandes.

Le diagramme obtenu à l'aide de la méthode $\mathbf{k.p}$ à 30 bandes est décalé vers le bas de 4 ou 5 meV par rapport au diagramme obtenu à l'aide de la méthode à 14 bandes (figure 25 gauche). Les différences de niveaux d'énergie en $k = 0$ sont principalement dues aux différences entre les paramètres de Luttinger, les deux courbes ayant été obtenues avec les mêmes potentiels de déformation et de confinement. Mais les courbes obtenues sont à peu près parallèles, en tout cas beaucoup plus que celles de la figure de droite. Pour la description des allures des sous-bandes, les modèles $\mathbf{k.p}$ à 14 et 30 bandes sont aussi efficaces en vallée Γ . Il est impossible de décrire les sous-bandes ailleurs qu'en vallée Γ à l'aide de la méthode $\mathbf{k.p}$ à 14 bandes. L'intérêt du passage à 30 bandes est donc évident en bande de conduction. Pour la bande de valence, l'intérêt de la matrice à 30 bandes réside dans l'absence de termes du second ordre en k^2 , plus difficiles à manipuler que les termes du premier ordre en $\mathbf{k.p}$. Ces termes du second ordre sont notamment dus aux pseudo paramètres de Luttinger en bande de valence (§ IV,3).

Cette méthode a été utilisée pour calculer la relation de dispersion des trous dans un puits carré de Ge sur SiGe qui constitue le canal d'un transistor à hétérojonction de type p. Cette relation de dispersion et les fonctions d'onde obtenues ont ensuite permis de modéliser le transport en gaz bidimensionnel dans ce canal (chap. 4, § II).

b) Modélisation d'un puits carré de Ge contraint sur $\text{Si}_{0.5}\text{Ge}_{0.5}$

Le puits quantique considéré est un puits carré de Ge de 5 nm de large, contraint en compression sur $\text{Si}_{0.5}\text{Ge}_{0.5}$. L'hétérojonction considérée est de type I mais les électrons en vallée L ne sont pratiquement pas confinés. La hauteur de barrière en bande de conduction est de 0.01 eV alors qu'elle est de 363 meV en bande de valence. La relation de dispersion dans le plan des couches

est présentée figure 26 gauche et les fonctions enveloppes correspondantes dans la direction z de croissance des couches figure 26 droite.

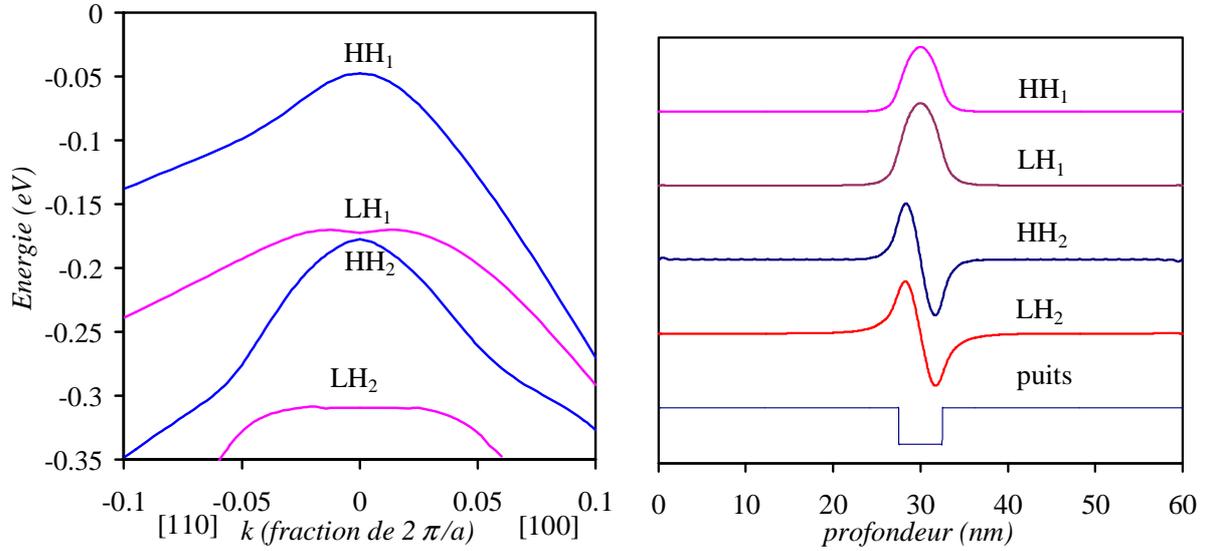


Figure 26 : Structure électronique et fonctions enveloppes des sous-bandes d'un puits de Ge contraint sur $\text{Si}_{0.5}\text{Ge}_{0.5}$ de 5 nm, calculées à l'aide du formalisme de la fonction enveloppe associé au $k.p$ à 30 bandes.

Les fonctions enveloppes obtenues ont la même allure que celles d'un puits fini dans l'approximation de la masse effective mais la structure électronique est profondément accidentée à cause du couplage fort entre les sous bandes des trous élevés (HH) et abaissées (LH). Les anticroisements entre les différentes sous-bandes rendent leur allure imprévisible. Pour étudier le transport d'un gaz bidimensionnel de trous, il est nécessaire d'avoir accès à la structure électronique réelle. La présence d'un champ électrique déforme le puits c'est pourquoi une perspective de ce travail pourrait être de développer un algorithme couplé Schrödinger-Poisson qui fournirait l'allure des sous-bandes en tenant compte de la déformation du puits due au champ électrique. Pour l'instant, les premières études du transport bidimensionnel présentées au chapitre 4 utilisent la structure de bande du puits carré.

3) Confinement en bande de conduction

a) Validation de la méthode grâce au modèle de la masse effective

On se place dans un puits carré fini en bande de conduction. Les matériaux barrière et puits ont tous deux une vallée en Δ , dont on connaît la masse effective.

L'équation test à résoudre est :
$$\left(p_z \frac{1}{2m(z)} p(z) + V(z) \right) \chi(z) = E \chi(z)$$
 pour chacune des

bandes. Soient V_p le potentiel de confinement, m_A et m_B les masses effectives respectivement

dans le puits et la barrière. La fonction enveloppe des niveaux confinés est sinusoidale de nombre d'onde k dans le puits et exponentielle décroissante de coefficient K dans la barrière.

L'énergie des niveaux confinés vérifie $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_A} = V_p - \frac{\hbar^2 K^2}{2m_B}$ et la pulsation k est solution des

équations :

$$ka \tan ka = \sqrt{\frac{m_A}{m_B}} \sqrt{\frac{V_p}{(\hbar^2/2m_A a^2)} - (ka)^2} \quad \text{ou} \quad -ka \cotan ka = \sqrt{\frac{m_A}{m_B}} \sqrt{\frac{V_p}{(\hbar^2/2m_A a^2)} - (ka)^2}$$

Le cas étudié est celui d'un puits de largeur $2a = 5$ nm de silicium contraint en tension sur $\text{Si}_{0.5}\text{Ge}_{0.5}$. La masse à considérer est la masse dans l'axe de croissance des couches, soit la masse longitudinale des vallées Δ_2 abaissées par rapport aux vallées dans le plan des couches Δ_4 . Les valeurs des masses présentées dans le tableau XII sont extraites des calculs de structures électroniques exposés § V,3.

	Vallée Δ_2
potentiel de confinement	308.3 meV
masse effective longitudinale dans la barrière m_B	0.947
masse effective longitudinale dans le puits m_A	0.925

Tableau XIV : Masses effectives et potentiel de confinement en bande de conduction pour un puits de Si contraint sur $\text{Si}_{0.5}\text{Ge}_{0.5}$.

Dans le tableau XIV, le potentiel de confinement est la hauteur de barrière entre les vallées Δ du SiGe et la vallée Δ_2 du silicium. Les vallées Δ_4 sont situées à 319.7 meV au dessus des vallées Δ_2 soit au dessus des vallées Δ du SiGe ; elles ne sont donc pas confinées (cf. figure 27).

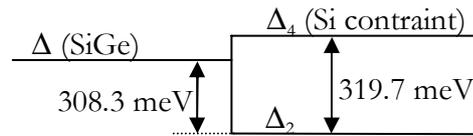


Figure 27 : Minima de la bande de conduction dans un puits de Si contraint sur $\text{Si}_{0.5}\text{Ge}_{0.5}$

Comparons les résultats obtenus analytiquement et numériquement avec $A = 12a$ et 80 fonctions tests.

Sous bande	Analytiquement	Numériquement
E1 (meV)	12.23	13.17
E2 (meV)	48.70	49.57
E3 (meV)	108.4	109.0
E4 (meV)	189.2	190.0

Tableau XV : Minima des sous bandes en vallée Δ_2 du silicium contraint sur $\text{Si}_{0.5}\text{Ge}_{0.5}$.

D'après le tableau XV, la différence entre les minima des sous-bandes obtenus à l'aide du formalisme de la fonction enveloppe en $\mathbf{k.p}$ à 30 bandes et l'approximation de la masse effective est inférieure à 1 meV. Cette méthode permet donc de calculer les niveaux confinés non seulement en Γ mais aussi en n'importe quel point de la zone de Brillouin.

b) Diagramme de bande et fonction enveloppe des niveaux confinés en bande de conduction.

Le formalisme de la fonction enveloppe associé à la méthode $\mathbf{k.p}$ à 30 bandes permet non seulement d'évaluer les minima des sous-bandes en bande de conduction mais aussi d'obtenir la relation de dispersion des électrons dans le plan (k_x, k_y) . La structure électronique du puits de Si de 5 nm contraint sur $\text{Si}_{0.5}\text{Ge}_{0.5}$ étudié § a est présentée figure 28 gauche. La partie droite montre les fonctions enveloppes associées à chaque sous-bande.

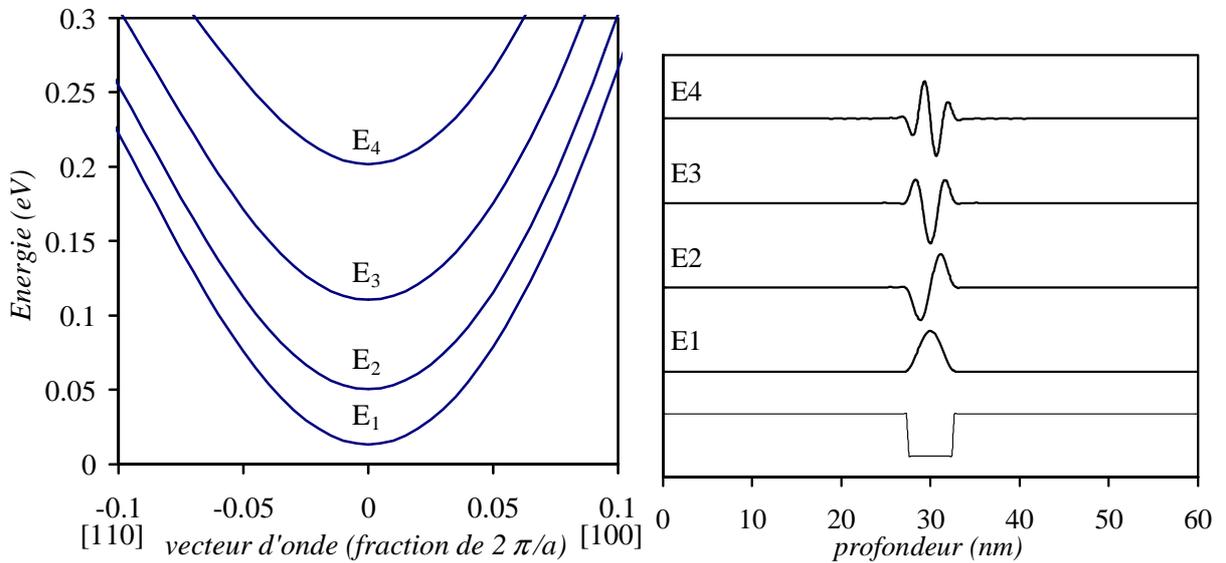


Figure 28 : Relation de dispersion et allure des fonctions enveloppes d'électrons confinés en vallée Δ_2 d'un puits quantique Si contraint sur $\text{Si}_{0.5}\text{Ge}_{0.5}$ de 5 nm, l'origine des énergies étant prise au minimum de la vallée Δ_2 .

Les sous-bandes obtenues sont parallèles les unes aux autres, et ont la même allure que la vallée Δ_2 du silicium contraint non confiné. En effet, contrairement à la bande de valence, les sous-bandes considérées sont issues d'une seule bande et non de deux bandes fortement couplées comme les trous lourds et légers en bande de valence. C'est néanmoins le premier algorithme qui fournit les relations de dispersion et les fonctions enveloppes des niveaux confinés en Γ en bande de valence et en Δ en bande de conduction.

Conclusion

Après avoir rappelé quelques généralités sur les technique de calcul des structures électroniques de semi-conducteurs, nous avons construit pas à pas des hamiltoniens **k.p** à 20 bandes et 30 bandes qui permettent d'obtenir avec une grande précision les structures électroniques de semi-conducteurs usuels, le Si, le Ge et le GaAs. La méthode **k.p** à 30 bandes permet d'obtenir les structures électroniques du Si, du Ge et du GaAs sur une large gamme d'énergie (11 eV autour de la bande interdite) avec une très grande précision sur les paramètres utiles pour l'étude du transport (chapitre 4), tels les paramètres de Luttinger ou les masses effectives en bande de conduction. Ces deux objectifs, large gamme de validité et précision locale aux extrema des bandes, habituellement difficiles à cumuler, sont ici atteints pour les semi-conducteurs usuels. Les structures électroniques des alliages SiGe massifs ont été calculées à partir de celles du Si et du Ge, en tenant compte des données expérimentales existantes (variation de la bande interdite en fonction du pourcentage de Ge...)

Nous avons aussi construit un hamiltonien de type Bir et Pikus, qui permet de décrire les effets de la contrainte biaxiale subie par un semi-conducteur dans le plan [001], non seulement en bande de valence mais aussi en vallée Δ de la bande de conduction, sans potentiel local de déformation. Associé à l'hamiltonien **k.p** à 30 bandes, il donne accès aux structures électroniques de tous les alliages $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ contraints. Nous avons ainsi construit une base de données exhaustive sur les structures électroniques des alliages SiGe massifs et contraints. L'étude du transport présentée au chapitre 4, § I peut donc s'appuyer sur les diagrammes de bande réels.

La dernière partie de ce chapitre a montré comment cette méthode **k.p** à 30 bandes pouvait être associée au formalisme de la fonction enveloppe pour obtenir les sous-bandes en bande de valence et de conduction du puits quantiques à base d'alliages SiGe. Non seulement les extrema des sous-bandes sont disponibles, mais aussi les structures électroniques et les fonctions enveloppes. Le transport bidimensionnel « full band » est ainsi à portée de main. Les premiers résultats obtenus lors de cette thèse sont d'ailleurs présentés au chapitre 4, § II.

Pour l'étude du transport comme pour le calcul des taux d'ionisation par choc, un paramètre important est la densité d'états disponibles dans la zone de Brillouin en fonction de l'énergie. C'est l'objectif du chapitre 3.

BIBLIOGRAPHIE DU CHAPITRE 2

- [Bastard96] G. Bastard, *Wave mechanics applied to semiconductor heterostructures*, Les éditions de physique, Paris (1996).
- [BenDaniel66] D.J. BenDaniel et C.B. Duke, "Space-Charge Effects on Electron Tunneling", *Phys. Rev.* **152**, 683-92 (1966).
- [Bir74] G. L. Bir et G. E. Pikus, *Symmetry and Strain-Induced Effects in Semiconductors*, John Wiley & Sons, New York/Toronto (1974)
- [Blacha84] A. Blacha, H. Presting et M. Cardona, "Deformation potentials of $k=0$ states of tetrahedral semiconductors." *Phys. Stat. Sol. (b)* **126**, 11-36 (1984).
- [Braunstein63] R. Braunstein, "Valence Band Structure of Germanium-Silicon Alloys", *Phys. Rev.* **130**, 3, 869-79 (1963).
- [Cardona66] M. Cardona et F.H. Pollak, "Energy-Band structure of Germanium and Silicon : the $k.p$ Method", *Phys. Rev.* **142**, 2, 530-43 (1966).
- [Cardona88] M. Cardona, N.E. Christensen et G. Fasol, "Relativistic band structure and spin-orbit splitting of zinc-blende-type semiconductors", *Phys. Rev. B* **38**, 3, 1806-27 (1988).
- [Cavassilas2000] Rapport de thèse de sciences par Nicolas Cavassilas présenté à l'université Paris XI Orsay en 2000, intitulé « Etude du phénomène d'ionisation par choc dans les semi-conducteurs III-V : application aux transistors à effet de champ. »
- [Cavassilas2001] N. Cavassilas, F. Aniel, K. Boujdaria et G. Fishman, "Energy-band structure of GaAs and Si: A sps^* $k.p$ method", *Phys. Rev. B* **64**, 115207(2001).
- [Chelikowsky76] J.R. Chelikowsky et M.L. Cohen, "Nonlocal pseudopotential calculations for the electronic structure of eleven diamond and zinc-blende semiconductors," *Phys. Rev. B* **14**, 2, 556-82 (1976).
- [Cohen-Tannoudji98] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, F. Laloë, *Mécanique Quantique*, Editions Hermann, Paris (1998).
- [Dismukes64] J. P. Dismukes, L. Ekstrom et L. J. Paff, "Lattice parameter and density in germanium-silicon alloys", *J. Phys. Chem.* **68**, 10, 3021-7 (1964)
- [Dresselhaus55] G. Dresselhaus, A.F. Kip et C. Kittel, "Cyclotron Resonance of Electrons and Holes in Silicon and Germanium Crystals", *Phys. Rev.* **98**, 2, 368-84 (1955).
- [Drouhin2003] H.-J. Drouhin, G. Fishman, N. Rougemaille, and S. Richard, "Extraordinary tunnel effect", Invited Paper at the SPIE Photonics West Conference, Quantum sensing and nanophotonic devices, edited by G. J. Brown and M. Razeghi, San Jose, Californie, USA Janvier 2004; to be published.
- [Elkurdi2003] M. Elkurdi, G. Fishman, S. Sauvage et P. Boucaud. "Comparison between 6-band and 14-band kp formalisms in SiGe/Si heterostructures", *Phys. Rev. B* **68**, 165333 (2003).
- [Fishman2004] G. Fishman, « Physique de base des semi-conducteurs en théorie $k.p$ », Cours d'intérêt général, IEF, Orsay, 2004.

- [Fossard2002] Rapport de thèse de sciences par Frédéric Fossard présenté à l'université Paris XI Orsay en 2002, intitulé « Spectroscopie infra-rouge des fils et boîtes quantiques d'InAs/InAlAs/InP (001) »
- [Ismail93] K. Ismail, S.F. Nelson, J.O. Chu et B.S. Meyerson, "Electron transport properties of Si/SiGe heterostructures : Measurements and device implications", *Appl. Phys. Lett.* **63**, 5, 660-2 (1993).
- [Jancu98] J.M. Jancu, R. Scholz, F. Beltram et F. Bassani "Empirical spds* tight-binding calculation for cubic semiconductors: General method and material parameters", *Phys. Rev. B* **57**, 11, 6493-6507 (1998).
- [Kane57] E.O. Kane, "Band structure of indium antimonide", *J. Phys. Chem. Solids* **1**, 4, 249-261 (1957).
- [Koster63] G. F. Koster, J. O. Dimmock, R. G. Wheeler et H. Statz, Properties of the Thirty-Two Point Groups, edited by the M.I.T. Press, Cambridge, Massachusetts (1963).
- [Landolt-Börnstein87] *Semiconductors : Intrinsic Properties of Group IV Elements and III-V, II-VI and I-VII Compounds*, édité par O. Madelung, Landolt-Börnstein, New Series, Group III, Vol. 22, Part a (Springer, Berlin, 1987)
- [Luttinger55] J. M. Luttinger et W. Kohn, "Motion of Electrons and Holes in Perturbed Periodic Fields", *Phys. Rev.* **97**, 4, 869-883 (1955).
- [Luttinger56] J. M. Luttinger, "Quantum Theory of Cyclotron Resonance in Semiconductors: General Theory", *Phys. Rev.* **102**, 4, 1030-41 (1956).
- [People85] R. People, "Indirect band gap of coherently strained $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$ bulk alloys on <001> silicon substrates", *Phys. Rev. B* **32**, 2, 1405-8 (1985).
- [Pfeffer90] P. Pfeffer et W. Zawadzki, "Conduction electrons in GaAs: Five-level **k.p** theory and polaron effects", *Phys. Rev. B* **41**, 3, 1561-76 (1990).
- [Pfeffer96] P. Pfeffer and W. Zawadzki, "Five-level **k.p** model for the conduction and valence bands of GaAs and InP", *Phys. Rev. B* **53**, 19, 12813-28 (1996).
- [Pidgeon66] C. R. Pidgeon et R. N. Brown, "Interband Magneto-Absorption and Faraday Rotation in InSb" *Phys. Rev.* **146**, 2, 575-83 (1966).
- [Richard2003] S. Richard, N. Cavassilas, F. Aniel et G. Fishman, "Energy-band structure in strained silicon: A 20-band k.p and Bir-Pikus Hamiltonian model", *J. Appl. Phys.* **94**, 3, 1795-99 (2003).
- [Richard2004] S. Richard, F. Aniel et G. Fishman, "Energy-band structure of Ge, Si and GaAs : a thirty-band k.p method", *Phys. Rev. B* **70**, 235204 (2004)
- [Richard2004a] S. Richard, F. Aniel et G. Fishman, "Energy-band structure of Si, Ge and GaAs over the whole Brillouin zone via the **k.p** method", 27th International Conference on Physics of Semiconductors, ICPS 27, Flagstaff, Arizona, Etats-Unis, 26-30 juillet 2004.
- [Richard2004b] S. Richard, H.-J. Drouhin, G. Fishman, N. Rougemaille "Spin-Dependent Tunneling In III-V Semiconductors", 27th International conference on Physics of Semiconductors, ICPS-27, Flagstaff, Arizona, USA, 26-30 juillet 2004
- [Rieger93] M. M. Rieger et P. Vogl, "Electronic-band parameters in strained $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ alloys on $\text{Si}_{1-y}\text{Ge}_y$ substrates", *Phys. Rev. B* **48**, 19, 14276-87 (1993).

- [Schäffler97] F. Schäffler, “High-mobility Si and Ge structures.” *Semicond. Sci. Technol.* **12**, 12, 1515-49 (1997).
- [Schmid90] U. Schmid, N. E. Christensen et M. Cardona, “Relativistic band structure of Si, Ge, and GeSi: Inversion-asymmetry effects”, *Phys. Rev B* **41**, 9, 5919-30 (1990).
- [Shen95] S. Shen, D. Zhang et X. Fan, “Tight-binding studies of crystalline $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ alloys”, *J. Phys. Condensed Matter* **7**, 3529-38 (1995).
- [Theodorou94] G. Theodorou, P. C. Kelires et C. Tserbak, “Structural, electronic, and optical properties of strained $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ alloys”, *Phys. Rev. B* **50**, 24, 18355-59 (1994).
- [Van de Walle86] C. G. Van de Walle et R. M. Martin, “Theoretical calculations of heterojunction discontinuities in the Si/Ge system”, *Phys. Rev. B* **34**, 8 5621-34 (1986).
- [Vogl83] P. Vogl, H.P. Hjalmarson et J.D. Dow, “A semi-empirical tight-binding theory of the electronic structure of semiconductors”, *J. Phys. Chem. Solids*, **44**, 5, 365-378 (1983).
- [Vurgaftman2001] I. Vurgaftman, J. R. Meyer et L. R. Ram-Mohan, “Band parameters for III–V compound semiconductors and their alloys”, *J. Appl. Phys.* **89**, 11, 5815-75 (2001).
- [Wang96] L.W. Wang et A. Zunger, “Pseudopotential-based multiband **k.p** method for ~250 000-atom nanostructure systems”, *Phys. Rev. B* **54**, 16, 11417-35 (1996).
- [Willatzen94] M. Willatzen, M. Cardona et N. E. Christensen, “Linear muffin-tin-orbital and **k.p** calculations of effective masses and band structure of semiconducting diamond” *Phys. Rev B* **50**, 24, 18054-59 (1994).
- [Xu93] Zhi–Zhong Xu, “Electronic band structure of coherently strained $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$ alloys on Si(001) substrates”, *Phys. Rev. B* **47**, 7, 3642-8(1993).
- [Yu96] P.Y. Yu, M. Cardona, *Fundamentals of semiconductors*, édité par Springer-Verlag, Berlin Heidelberg (1996)

CHAPITRE 3

Densité d'états

Même quand toutes les données sur la relation de dispersion des semi-conducteurs IV-IV sont disponibles, elles ne sont pas directement utilisables pour étudier le transport des porteurs de charge. La densité d'états est le nombre d'états disponibles à une énergie donnée pour un électron ou un trou. Elle traduit le principe d'exclusion de Pauli pour les porteurs de charge dans le réseau réciproque. Cette grandeur est un paramètre clef pour évaluer les fréquences d'interactions entre les porteurs et les phonons (vibrations du réseau cristallin) ou les taux d'interaction liés à l'ionisation par choc. En effet, dans l'approche de Kane [Kane67] rappelée dans la partie suivante, le taux d'ionisation par choc est directement lié au nombre d'états disponibles pour les particules créées. Dans notre étude, le calcul de la densité d'états apparaît aussi comme un moyen de vérifier la validité des diagrammes de bande sur toute la zone de Brillouin, et pas seulement sur des directions privilégiées.

Pour des simulations « Full Band » du transport, le diagramme de bande est pris en compte directement. Cependant, l'approximation de la masse effective est parfois utilisée pour des simulations particulières de dispositifs en Monte Carlo par exemple. La masse effective m^* permet de simplifier la relation $E(k)$ d'une bande isotrope pour des valeurs de k inférieurs à 2%

de $\frac{2\pi}{a}$, a étant le paramètre de maille. Cette relation s'écrit simplement : $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$.

Pour une bande isotrope parabolique, la masse effective est simplement l'inverse de la courbure de la bande considérée. Mais cette définition est inutilisable pour la bande de valence qui est très anisotrope : même à proximité du centre de la zone de Brillouin, les surfaces équi-énergie sont loin d'être des sphères : la courbure des bandes est différente selon les directions considérées. Les masses de densité d'états offrent une description simplifiée du diagramme de bande, valable seulement au sommet de la bande de valence. Les simulations de transport qui utilisent ces masses pour simplifier la relation $E(k)$ permettent par exemple d'évaluer les mobilités des trous à faible champ électrique.

La première partie de ce chapitre présente la méthode de calcul de la densité d'états en trois dimensions, puis les densités d'états du Si, du Ge et du GaAs massifs sont calculées et discutées. La partie II est consacrée au calcul de la densité d'états en deux dimensions en présence de confinement. La densité d'états calculée en \mathbf{k}, \mathbf{p} à 30 bandes est très différente de celle obtenue en

masse effective. Enfin, (§ III), une étude des masses de densité d'états des trous dans les alliages SiGe massifs et contraints est menée dans une large gamme de température (5 à 600 K).

I. Densité d'états dans un semi-conducteur massif

Après avoir rappelé la définition de la densité d'états en fonction de l'énergie, cette partie présente la méthode de calcul et les résultats obtenus pour Si, Ge et GaAs massifs.

1) Définition

a) Densité d'états dans l'espace des vecteurs d'onde [Lundstrom2000]

Les structures électroniques étudiées au chapitre II sont continues. Cependant, si le semi-conducteur étudié est de dimension finie, un nombre fini de vecteurs d'onde discrets est autorisé. En une dimension, si on considère une chaîne de N atomes de longueur L et de distance inter atomique a , en imposant des conditions aux limites périodiques, les valeurs de k autorisées s'écrivent :

$$k = \frac{2\pi l}{Na} \text{ avec } l = 1, \dots, N$$

Comme $L = Na$, chaque état occupe un espace $\frac{2\pi}{L}$ dans l'espace réciproque. Le nombre d'états compris entre k et $k + dk$ est $\frac{Ldk}{2\pi}$. La densité d'états correspondante est $\frac{L}{2\pi}$.

En trois dimensions, le nombre d'états disponible par unité de volume dans l'espace réciproque est $\frac{L^3}{8\pi^3}$. Comme il y a deux électrons par état si on tient compte du spin, le nombre d'états disponible dans un volume L^3 de l'espace réciproque s'écrit :

$$N_k = \frac{L^3}{4\pi^3}$$

Cette équation se généralise pour un semi-conducteur à une dimension (fil quantique) ou deux dimensions (puits quantique) :

$$N_k = 2 \frac{L^d}{(2\pi)^d}$$

où d est la dimensionnalité et L la longueur caractéristique de l'échantillon. Le facteur 2 introduit la dégénérescence de spin.

Entre les vecteurs d'onde \vec{k} et $\vec{k} + d\vec{k}$, le nombre d'états disponibles s'écrit :

$$dN = f(\vec{k}) d\vec{k}$$

où $f(\vec{k})$ est la densité d'états dans l'espace des vecteurs d'onde. Cependant, il est souvent plus utile de connaître la densité d'états en fonction de l'énergie que du vecteur d'onde.

b) Densité d'états en fonction de l'énergie

La densité d'états est le nombre d'états disponibles pour une énergie donnée dans l'espace réciproque. Elle vérifie :

$$dN = f(\vec{k})d\vec{k} = g(E)dE$$

Pour chaque bande n , elle est proportionnelle à la surface équi-énergie $S_n(E)$ d'énergie E dans la première zone de Brillouin et à l'inverse du gradient de l'énergie en fonction du vecteur d'onde. Dans un semi-conducteur massif, en trois dimensions, elle s'écrit [Ashcroft76] :

$$g_n(E) = \int \frac{d\vec{k}}{4\pi^3} \delta(E - E_n(\vec{k})) = \int_{S_n(E)} \frac{dS}{4\pi^3} \frac{1}{|\vec{\nabla}_k(E_n)|}$$

La densité d'états d'une bande parabolique, isotrope, de masse effective m^* est donnée par :

$$g_n(E) = \frac{m^* \sqrt{2m^* E}}{\pi^2 \hbar^3}$$

La densité d'états d'une bande réelle est très différente de celle obtenue dans l'approximation de la masse effective. Elle ne peut être calculée que numériquement. Pour ce faire, il faut tout d'abord évaluer l'énergie propre de chaque bande non seulement en certaines directions privilégiées, comme pour tracer un diagramme de bande, mais dans toute la zone de Brillouin. L'estimation de la densité d'états apparaît donc comme un moyen de valider notre méthode de calcul de structure électronique.

2) Méthode de calcul

a) Discrétisation de l'espace des phases

Pour calculer la densité d'états, il faut dénombrer les états disponibles entre les surfaces d'énergie E et $E+dE$, c'est pourquoi l'espace des phases est discrétisé pour obtenir les surfaces équi-énergie.

Dans l'espace réciproque d'un semi-conducteur en trois dimensions, les plans d'équation $k_x = 0$, $k_y = 0$ et $k_z = 0$ sont plans de symétrie. Il suffit alors d'évaluer la densité d'états sur 1/8^e de la zone de Brillouin. Cette partie correspond aux vecteurs d'onde $\vec{k}(k_x, k_y, k_z)$ qui vérifient :

$$0 \leq k_x \leq \frac{2\pi}{a}, \quad 0 \leq k_y \leq \frac{2\pi}{a}, \quad 0 \leq k_z \leq \frac{2\pi}{a}$$

$$k_x + k_y + k_z \leq \frac{3}{2} \frac{2\pi}{a}$$

La dernière relation signifie que le cube considéré est tronqué par le plan $k_x + k_y + k_z = \frac{3}{2} \frac{2\pi}{a}$, plan qui passe en L $\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right) \frac{2\pi}{a}$ (cf. chap. II, fig. 2).

Cet espace est discrétisé en cubes de côté $2b$, indicés par i,j,l . L'énergie du milieu de chaque cube, $E(\vec{k}_{i,j,l})$ est évaluée ainsi que le gradient de cette énergie au milieu de chaque cube, $[\vec{\nabla}_k(E)]_{i,j,l}$, vecteur à trois composantes selon les axes x, y, z . Pour tracer la densité d'états sur une large gamme d'énergie, toute la zone de Brillouin est découpée en cubes de côté $2b = 4 \times 10^8 \text{ m}^{-1}$, ce qui permet une précision de l'ordre de 50 meV. Une discrétisation beaucoup plus fine sur un espace restreint est utilisée pour calculer les masses de densité d'états.

Cette tabulation du diagramme de bande permet ensuite d'évaluer les surfaces équi-énergie à l'aide d'un algorithme développé par Gilat et Raubenheimer [Gilat66].

b) Surfaces équi-énergie

Dans chaque cube i,j,l , la surface équi-énergie d'énergie E est assimilée à un plan de normale \vec{n} parallèle au gradient de l'énergie $[\vec{\nabla}_k(E)]_{i,j,l}$, situé à la distance $\frac{|E - E(\vec{k}_{i,j,l})|}{|\vec{\nabla}_k(E)|_{i,j,l}} = w_b$ du centre du cube.

La forme de l'intersection entre le plan et le cube (i,j,l) est déterminée par cette distance w_b et les cosinus directeurs du gradient $[\vec{\nabla}_k(E)]_{i,j,l}$, notés (a_1, a_2, a_3) , tous positifs et numérotés dans l'ordre croissant.

On définit aussi les distances entre le plan de normale \vec{n} passant par le centre du cube et les sommets de ce cube qui s'écrivent :

$$w_1 = b|a_1 - a_2 - a_3|$$

$$w_2 = b(a_1 - a_2 + a_3)$$

$$w_3 = b(a_1 + a_2 - a_3)$$

$$w_4 = b(a_1 + a_2 + a_3)$$

Si $E(\vec{k}_{i,j,l}) - w_4 |\vec{\nabla}_k(E)|_{i,j,l} \leq E \leq E(\vec{k}_{i,j,l}) + w_4 |\vec{\nabla}_k(E)|_{i,j,l}$ soit $w_b \leq w_4$, on considère que la surface d'énergie E traverse le cube (i,j,l) .

Selon la valeur des cosinus directeurs et des distances, l'aire de l'intersection $A(w_b)$ entre la surface équi-énergie et le cube s'écrivent différemment :

$$\begin{aligned}
& 4b^2 \quad (a_2 = 0) \\
& 4b^2/a_1 \quad (a_3 = 0, w_b < w_1) \\
& 2b[b(a_1 + a_2) - w]/(a_1 a_2) \quad (a_3 = 0, w_b \geq w_1) \\
& [2b^2(a_1 a_2 + a_1 a_3 + a_2 a_3) - (w_b^2 + b^2)]/(a_1 a_2 a_3) \quad (a_1 < a_2 + a_3, w_b < w_1) \\
& 4b^2/a_1 \quad (a_1 \geq a_2 + a_3, w_b < w_1) \\
& [b^2(3a_2 a_3 + a_1 a_2 + a_1 a_3) - b w_b(a_2 + a_3 - a_1) - 1/2(w_b^2 + b^2)]/(a_1 a_2 a_3) \quad (w_1 \leq w_b < w_2) \\
& [2b^2(a_1 + a_2) - b w_b]/(a_1 a_2) \quad (w_2 \leq w_b < w_3) \\
& [b(a_1 + a_2 + a_3) - w_b]^2/(2a_1 a_2 a_3) \quad (w_3 \leq w_b < w_4)
\end{aligned}$$

Si E ne vérifie pas $E(\vec{k}_{i,j,l}) - w_4 |\vec{\nabla}_k(E)|_{i,j,l} \leq E \leq E(\vec{k}_{i,j,l}) + w_4 |\vec{\nabla}_k(E)|_{i,j,l}$, l'aire de l'intersection entre la surface équi-énergie et le cube est nulle.

La densité d'états en chaque cube est l'aire de l'intersection divisée par la norme du gradient : $A(w_b)/|\vec{\nabla}_k(E)|_{i,j,l}$. La densité d'états globale est la somme des densités d'états en chaque cube.

3) Quelques densités d'états

Voici figures 1, 2 et 3, les densités d'états obtenues pour le Si, le Ge et le GaAs. Un huitième de la première zone de Brillouin a été discrétisé en 13500 cubes pour les calculer. Ces densités d'états sont comparées avec celles obtenues en pseudopotentiel par Chelikowsky et Cohen [Chelikowsky76] et d'autres auteurs suivant le matériau. Sur ces figures, les pics de densité d'états correspondent aux extrema locaux du diagramme de bande (où le gradient $\vec{\nabla}_k(E)$ est faible). La densité d'état dans l'approximation de la masse effective est aussi représentée en bande de conduction.

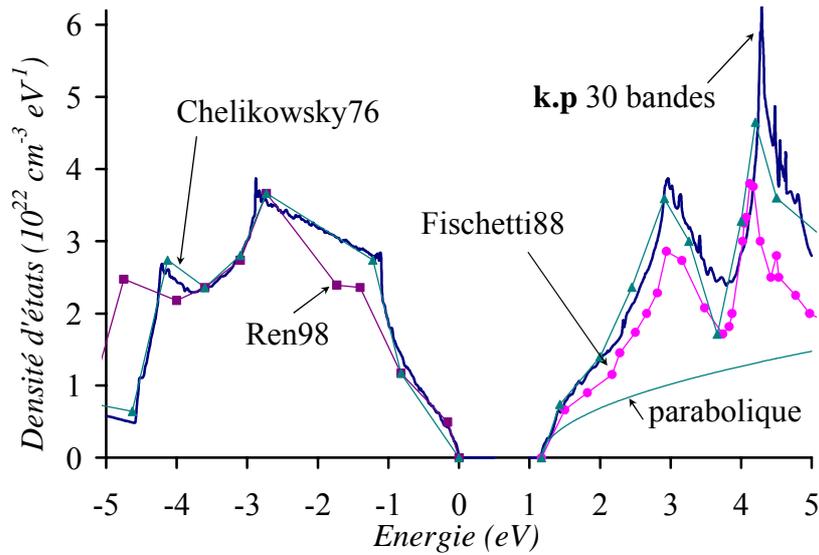


Figure 1 : Densité d'états du silicium calculée à l'aide de la méthode k.p à 30 bandes, comparée à celles obtenues en masse effective, en pseudopotentiel [Chelikowsky76], [Fischetti88] et en liaisons fortes sp^3d^5 [Ren98].

Les densités d'états obtenues pour le silicium par la méthode k.p 30 bandes sont en très bon accord avec les résultats existants, tant en pseudopotentiel qu'en liaisons fortes avec pour cette technique un nombre de bandes prises en compte comparable au nôtre. La densité d'états obtenue en masse effective (avec $m^* = (6m_l m_t^{1/2})^{2/3} = 1.06 m_0$, 6 étant le nombre de vallées Δ équivalentes, m_l et m_t les masses respectivement longitudinale et transverse d'une vallée Δ) est inférieure à la densité d'états réelle. L'approximation parabolique est seulement valide jusqu'à 100 meV au dessus de la bande interdite. Un coefficient de non-parabolicité élargirait le domaine de validité jusqu'à 1 eV environ [Kuyiniko94].

Les ruptures de pente de la densité d'états correspondent aux endroits où le gradient de l'énergie s'annule, ce qui est le cas dans une vallée mais aussi aux maxima locaux de la bande de conduction ou minima locaux de la bande de valence. Par exemple, la première rupture de pente en bande de valence correspond à l'endroit où la bande des trous lourds et trous légers parviennent en L, et le maximum est obtenu quand ces bandes atteignent le point X. Ces points ne sont pas des vallées : il n'y a pas d'accumulation de trous en cet endroit même si la densité d'états est grande. En bande de conduction, le premier maximum autour de 3 eV correspond à l'énergie à l'origine de la bande p de conduction et le deuxième maximum à la vallée Γ de la bande s et à la deuxième vallée L.

Pour le germanium (figure 2) et le GaAs (figure 3), un désaccord plus important existe entre les densités obtenues en **k.p** 30 bandes et par d'autres techniques mais il est du même ordre de grandeur que les désaccords des résultats des autres méthodes entre elles.

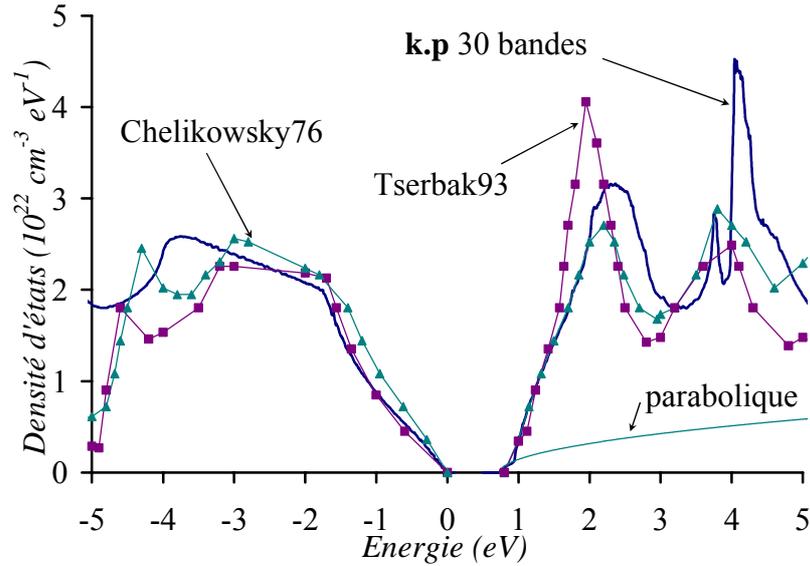


Figure 2 : Densité d'états du germanium calculée à l'aide de la méthode **k.p à 30 bandes, comparée à celles obtenues en masse effective, en pseudopotentiel [Chelikowsky76], et en liaisons fortes sp^3 [Tserbak93].**

Pour le germanium (figure 2), les densités d'états issues des différentes méthodes sont concordantes pour les énergies comprises entre -3 et $+3$ eV, c'est-à-dire pour les énergies auxquelles nous nous limitons pour simuler l'ionisation par choc. La principale différence entre les résultats obtenus en **k.p** à 30 bandes et les données existantes, autour de -3 eV en bande de valence, provient du fait que la bande de valence atteint le point X à -3.99 eV au lieu de -3.15 eV expérimentalement (tableau VII, chapitre 2). C'est pourquoi la densité d'états obtenue en pseudopotentiel décroît plus tôt que celle obtenue en **k.p**. Cette différence aura peu de conséquences dans la mesure où elle ne correspond pas à une vallée mais à un minimum en bande de valence.

La masse effective considérée pour l'approximation parabolique s'écrit : $m^* = (4m_t m_l^{1/2})^{2/3} = 0.553 m_0$, 4 étant le nombre de vallées L équivalentes (8 demi-vallées), et m_t et m_l les masses respectivement transverse et longitudinale d'une vallée L. Comme pour le silicium, cette approximation permet d'obtenir une densité d'états correcte sur seulement 100 meV au dessus de la bande interdite.

Le premier maximum en bande de conduction correspond au maximum entre les points Γ et L de la première bande de conduction s . La petite pointe suivante est la vallée Γ de la bande p de conduction et le maximum absolu correspond à la deuxième vallée L et au maximum de la bande s entre les points Γ et X. La différence entre les résultats obtenus en **k.p** et par d'autres méthodes s'explique par la méconnaissance de la courbure de la deuxième vallée L.

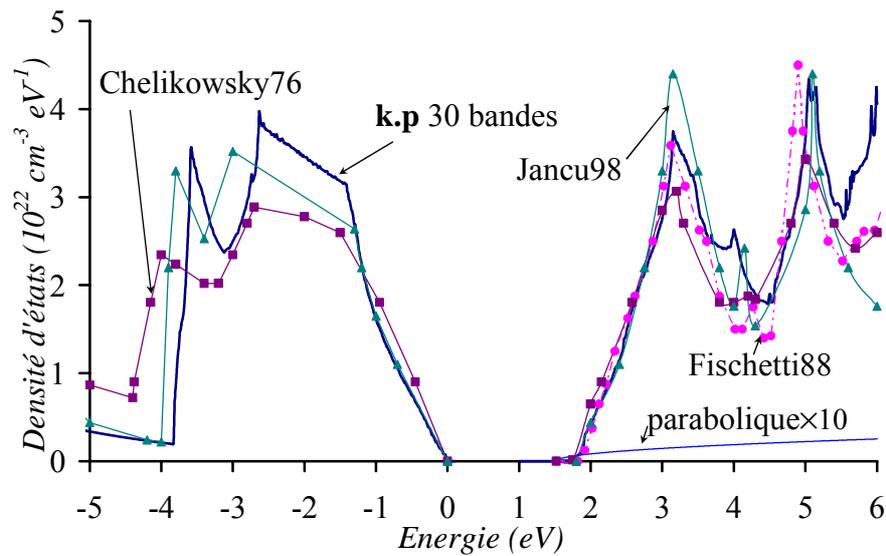


Figure 3 : Densité d'états de GaAs calculée à l'aide de la méthode **k.p à 30 bandes, comparée à celles obtenues en masse effective, en pseudopotential [Chelikowsky76], [Fischetti88] et en liaisons fortes $sp^3d^5s^*$ [Jancu98].**

Sans la multiplier par 10, la densité d'états de GaAs obtenue en masse effective était confondue avec l'axe des énergies (figure 3). La très faible valeur de la masse effective en Γ ($0.067 m_0$) explique ce phénomène. La première pointe en bande de conduction correspond au maximum de la bande s entre Γ et L. La deuxième petite pointe provient de l'anticroisement en direction [100] et le maximum autour de 5 eV à la vallée Γ de la bande p . En bande de valence, la première rupture de pente correspond au point L, et le maximum correspond au point X. La deuxième pointe, dont l'énergie est moins précise, correspond au minimum de la bande des trous légers en U,K.

Pour GaAs, la comparaison entre les densités d'états obtenues en **k.p** à 30 bandes et d'autres techniques telles le pseudopotential [Fischetti88], [Chelikowsky76] ou les liaisons fortes [Jancu98] montre la validité de la méthode **k.p** à 30 bandes sur une très grande gamme d'énergie, suffisante en tout cas pour modéliser l'ionisation par choc.

L'effet de la contrainte sur les densités d'états est assez peu visible sur la gamme d'énergies étudiée comme le montre la figure 4.

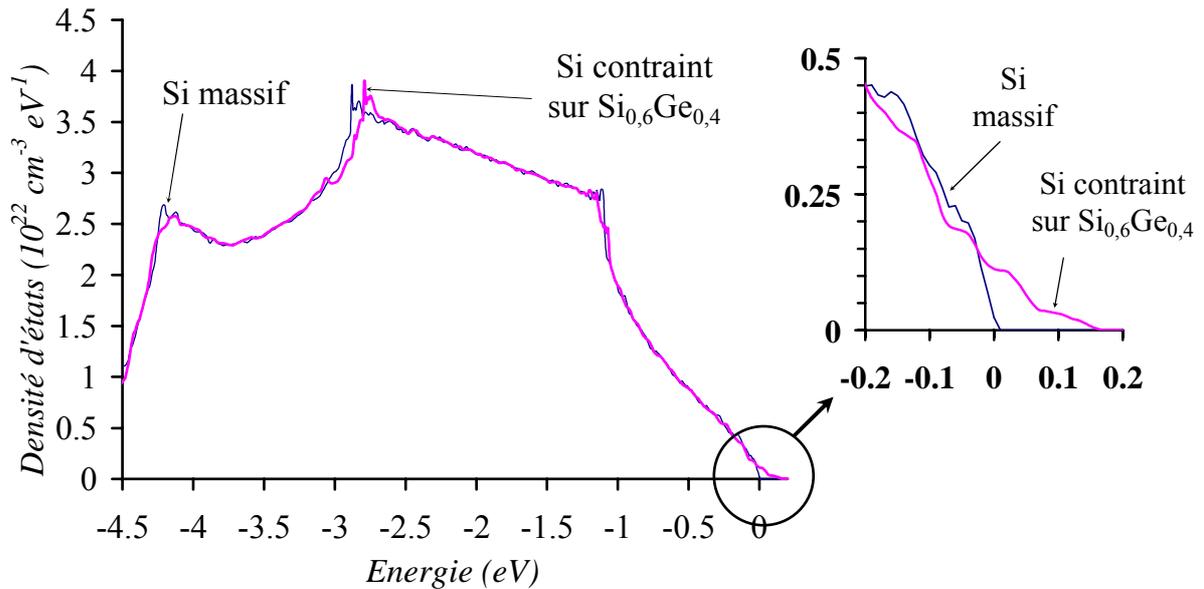


Figure 4 : Effet de la contrainte sur la densité d'états du Si en bande de valence

Dans le cas du Si contraint en tension sur SiGe, la bande dite des "trous légers" passe au dessus de celle des "trous lourds". Le diagramme de bande est modifié de manière conséquente alors que la densité d'états semble inchangée. Le principal effet de la contrainte sur la densité d'états est de décaler le sommet de la bande de valence. Sur le reste de la gamme d'énergie considérée, la contrainte a peu de conséquences. Ce phénomène a été observé aussi bien pour le Si que pour le Ge, autant en bande de valence qu'en bande de conduction.

Cependant, dans le calcul du diagramme de bande d'un semi-conducteur contraint, la déformation qu'il subit est supposée élastique. Son épaisseur est donc inférieure à l'épaisseur critique (de 10 à 50 nm suivant le désaccord de maille, cf. figure 21 du chapitre 2), au delà de laquelle des dislocations apparaissent. Si les discontinuités de bandes entre la couche contrainte et le substrat sont telles que les porteurs s'accumulent dans la couche contrainte, celle-ci peut alors être considérée comme un puits quantique. Les porteurs sont alors confinés dans la direction de croissance des couches et leur énergie est quantifiée dans cette direction. Leur relation de dispersion, décrite le chapitre 2, § VI, devient bidimensionnelle. La densité d'états du puits quantique est très différente de celle d'un semi-conducteur en trois dimensions, comme le montre le paragraphe suivant.

II. Densité d'états en deux dimensions

Cette partie présente la définition et la méthode de calcul de la densité d'états dans une couche confinée dans une direction. Cette méthode est ensuite appliquée à un puits quantique de Ge contraint sur $\text{Si}_{0.5}\text{Ge}_{0.5}$ dans lequel les trous sont confinés. Une comparaison est effectuée entre la densité d'états obtenue à l'aide de sous-bandes paraboliques, et celle calculée à l'aide de la théorie **k.p** à 30 bandes.

1) Définition

Si la couche contrainte a une épaisseur de l'ordre de quelques nm, et si elle forme un puits de potentiel pour les porteurs de charge, elle peut être considérée comme un puits quantique dans la direction de croissance des couches. Dans ces conditions, les niveaux d'énergie accessibles aux électrons sont quantifiés pour la composante du vecteur d'onde suivant la direction z de croissance des couches.

Dans le plan (k_x, k_y) , la relation de dispersion vérifiée par chacune des sous-bandes est continue. On peut donc définir une densité d'états $f(\vec{k}_\rho)$ pour chaque sous-bande, avec

$$\vec{k}_\rho = k_x \vec{e}_x + k_y \vec{e}_y.$$

Le nombre d'états disponibles sur une surface L^2 s'écrit : $N_{k_\rho} = 2 \frac{L^2}{4\pi^2}$ et peut être différencié :

$$dN_{k_\rho} = f(\vec{k}_\rho) d\vec{k}_\rho = g(E) dE$$

$g(E)$ est la densité d'états en énergie.

Pour chaque sous-bande n , elle est proportionnelle à la longueur de la ligne équi-énergie $L_n(E)$ d'énergie E dans la première zone de Brillouin et à l'inverse du gradient de l'énergie en fonction du vecteur d'onde réduit \vec{k}_ρ . Elle s'écrit en deux dimensions :

$$g_n(E) = \int \frac{d\vec{k}_\rho}{2\pi^2} \delta(E - E_n(\vec{k}_\rho)) = \int_{L_n(E)} \frac{dl}{2\pi^2} \frac{1}{|\vec{\nabla}_{k_\rho}(E_n)|}$$

La densité d'états d'une bande parabolique, isotrope, de masse effective m^* est une constante donnée par :

$$g_n(E) = \frac{m^*}{\pi \hbar^2}$$

2) Méthode de calcul

La méthode de calcul est identique à celle utilisée en trois dimensions : l'idée est cette fois de déterminer les lignes équi-énergie. $1/8^e$ de l'espace des phases qui est discrétisé en carrés de côté $2b$. On détermine l'énergie $E_{i,j}$ et le gradient $\left[\vec{\nabla}_{k_p} E \right]_{i,j}$ au centre de chaque carré ij (par la méthode des fonctions enveloppe).

Dans chaque carré, les morceaux de ligne équi-énergie d'énergie E sont assimilés à des droites orthogonales au gradient $\left[\vec{\nabla}_{k_p} E \right]_{i,j}$, passant à la distance $\frac{|E - E(\vec{k}_{i,j})|}{\left| \vec{\nabla}_{k_p} (E) \right|_{i,j}} = w_b$ du centre du carré.

La longueur de la droite équi-énergie coupant le carré ij est déterminée par w_b et l'angle α entre le gradient $\left[\vec{\nabla}_{k_p} E \right]_{i,j}$ et l'un des vecteurs \vec{e}_x ou \vec{e}_y (on le choisit pour avoir $\alpha < 45^\circ$)

On définit aussi les distances entre la droite orthogonale au gradient $\left[\vec{\nabla}_{k_p} E \right]_{i,j}$ passant par le centre du carré et ses sommets qui s'écrivent :

$$w_1 = b(\cos \alpha - \sin \alpha)$$

$$w_4 = b(\cos \alpha + \sin \alpha)$$

Si $E(\vec{k}_{i,j}) - w_4 \left| \vec{\nabla}_{k_p} (E) \right|_{i,j} \leq E \leq E(\vec{k}_{i,j}) + w_4 \left| \vec{\nabla}_{k_p} (E) \right|_{i,j}$ soit $w_b \leq w_4$, on considère que la ligne d'énergie E traverse le carré

La longueur du segment $l_{i,j}$ équi-énergie compris dans le carré (ij) s'écrit :

$$l_{i,j} = 2b \text{ si } \alpha = 0,$$

$$l_{i,j} = 2b/\cos \alpha \text{ si } \alpha \neq 0 \text{ et } w_b \leq w_1,$$

$$l_{i,j} = [b(\cos \alpha + \sin \alpha) - w_b] / (\cos \alpha \times \sin \alpha) \text{ si } \alpha \neq 0 \text{ et } w_b > w_1$$

Si E ne vérifie pas $E(\vec{k}_{i,j}) - w_4 \left| \vec{\nabla}_{k_p} (E) \right|_{i,j} \leq E \leq E(\vec{k}_{i,j}) + w_4 \left| \vec{\nabla}_{k_p} (E) \right|_{i,j}$, la longueur de l'intersection entre la ligne équi-énergie et le carré est nulle.

La densité d'états en chaque carré est la longueur de l'intersection divisée par la norme du gradient : $l_{i,j} / \left| \vec{\nabla}_{k_p} (E) \right|_{i,j}$. La densité d'états globale est la somme des densités d'états en chaque carré.

3) Résultats

La densité d'état des trous a été calculée pour un puits de Ge contraint sur $\text{Si}_{0.5}\text{Ge}_{0.5}$ de 5 nm d'épaisseur en considérant les trois premières sous-bandes. Le diagramme de bande de ce puits est présenté au chapitre 2, VI, 2. Le potentiel de confinement est supposé carré et vaut 363 meV. Le tableau suivant rappelle les niveaux des sous-bandes en $k = 0$.

HH ₁	47 meV
LH ₁	170 meV
HH ₂	177 meV

Tableau I : Niveaux des sous-bandes en $k = 0$, calculés à l'aide du formalisme de la fonction enveloppe associé à la théorie k.p à 30 bandes.

HH₁ et HH₂ sont les sous-bandes issues de Γ_8^u et LH₁ est issue de Γ_8^l .

Pour valider la méthode décrite précédemment, la densité d'états a d'abord été calculée en supposant des sous-bandes paraboliques de masse effective $m^* = 0.094 m_0$ pour la bande Γ_8^l et $m^* = 0.15 m_0$ pour la bande Γ_8^u (figure 5). Ces masses sont les masses effectives de densité d'état à 300 K présentées figure 12, § III, 3.

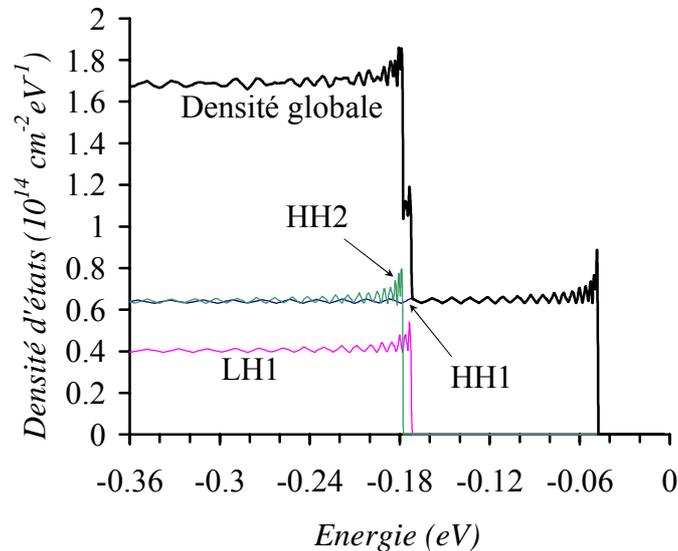


Figure 5 : Densité d'états obtenue dans un puits de Ge sur $\text{Si}_{0.5}\text{Ge}_{0.5}$ de 5 nm en supposant les sous-bandes paraboliques.

Théoriquement, en deux dimensions, pour chaque sous-bande n , la densité d'états est constante et vaut :

$$g_{LH}(E) = \frac{m^*}{\pi\hbar^2} = 0.396 \times 10^{14} \text{ eV}^{-1} \text{ cm}^{-2} \text{ pour } m^* = 0.094 m_0$$

$$g_{HH}(E) = \frac{m^*}{\pi\hbar^2} = 0.631 \times 10^{14} \text{ eV}^{-1} \text{ cm}^{-2} \text{ pour } m^* = 0.15 m_0$$

La densité d'états globale est donc composée de marches d'escalier d'amplitude $g_n(E)$. Pour obtenir la figure 5, l'espace des phases a été divisé en carrés de côté $2.8 \times 10^7 \text{ m}^{-1}$, la différence d'énergie entre deux carrés voisins étant au maximum de 10 meV. Le résultat obtenu ressemble fortement aux marches d'escalier prévues théoriquement : l'amplitude des marches est correcte et elles sont à peu près constantes. Les oscillations sont maximales autour du sommet de chaque sous-bande à cause de la division par le gradient proche de 0. Au-delà de ce point, elles atteignent une amplitude de 5% de la valeur moyenne pour la densité d'état globale ($0.019 \times 10^{14} \text{ eV}^{-1} \text{ cm}^{-2}$), ce qui est acceptable. Ces oscillations parasites se retrouvent dans tous les calculs numériques de densité d'états y compris en trois dimensions. Elles diminuent bien sûr pour un discrétisation plus fine mais un compromis est nécessaire entre temps de calcul et précision. Par exemple, si on divise l'espace à l'aide de carrés deux fois plus grands, on obtient la densité présentée figure 6.

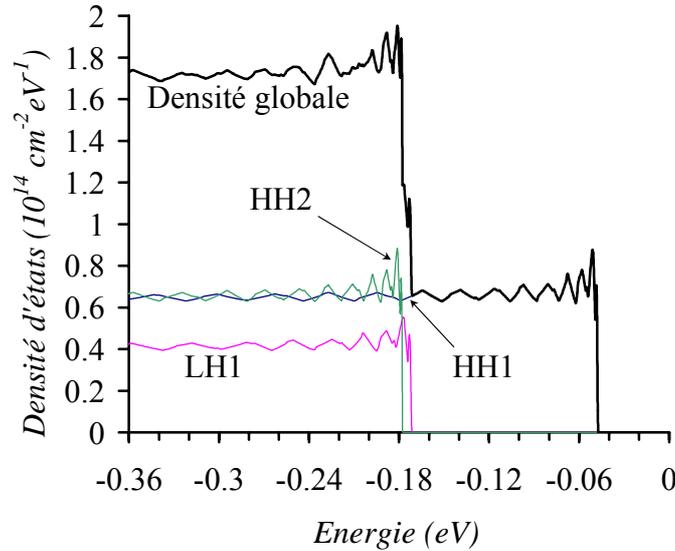


Figure 6 : Densité d'états obtenue dans un puits de Ge sur $\text{Si}_{0.5}\text{Ge}_{0.5}$ de 5 nm en supposant les sous-bandes paraboliques, avec une discrétisation deux fois plus grossière.

Lorsqu'on divise le côté du carré par 2, on divise par 4 le temps de calcul et l'amplitude des oscillations est multipliée par 2 : elles atteignent 10 % de la valeur moyenne pour la sous-bande LH_1 soit $0.034 \times 10^{14} \text{ eV}^{-1} \text{ cm}^{-2}$. Pour des sous-bandes paraboliques, le temps de calcul est négligeable (inférieur à 1 min) mais c'est loin d'être le cas pour un calcul « full band ».

Le calcul des sous-bandes en un point à l'aide du formalisme de la fonction enveloppe associé à la méthode **k.p** à 30 bandes avec 40 fonctions tests nécessite de diagonaliser une matrice carrée

1200×1200 : il dure environ 40 s. La densité d'états présentée figure 7 a nécessité plusieurs jours de simulation, en discrétisant l'espace à l'aide de carrés de $3.7 \times 10^7 \text{ m}^{-1}$, ce qui donne une amplitude d'oscillations d'environ $0.06 \times 10^{14} \text{ eV}^{-1} \text{ cm}^{-2}$.

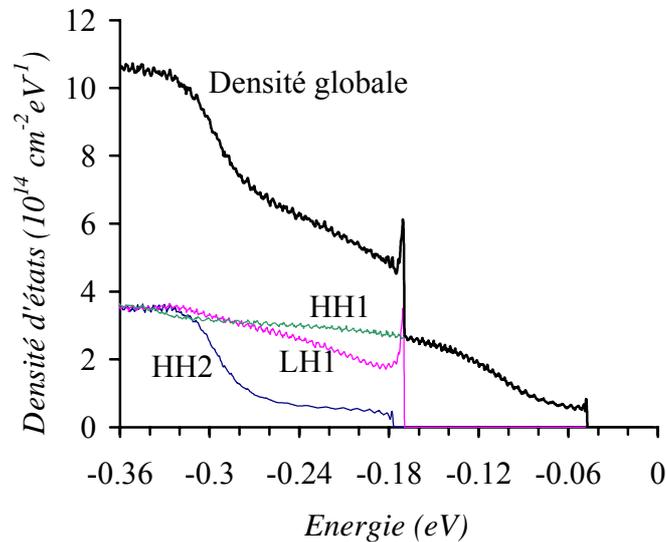


Figure 7 : Densité d'états obtenue dans un puits de Ge sur $\text{Si}_{0.5}\text{Ge}_{0.5}$ de 5 nm calculée à l'aide du formalisme de la fonction enveloppe (avec 40 fonctions tests) en $k.p$ à 30 bandes.

La densité d'états obtenue en "full band" est beaucoup plus grande que dans l'approximation de la masse effective. Pour chacune des sous-bandes, la densité d'états n'est plus constante. La zone où la relation de dispersion des sous-bandes peut être considérée comme parabolique est facile à distinguer : il s'agit de la zone où la densité d'états est constante, entre -0.047 et -0.1 eV pour la bande HH_1 et entre -0.177 et -0.27 eV pour la bande HH_2 . La bande LH_1 n'est jamais parabolique comme le montre le diagramme § 2, VI, 2 : le pic obtenu est dû à la zone où le gradient s'annule, non seulement au sommet de la sous-bande mais aussi légèrement au-delà de $k = 0$, puisque cette sous-bande n'est pas monotone. La figure 8 présente les courbes iso-énergie à -250 meV.

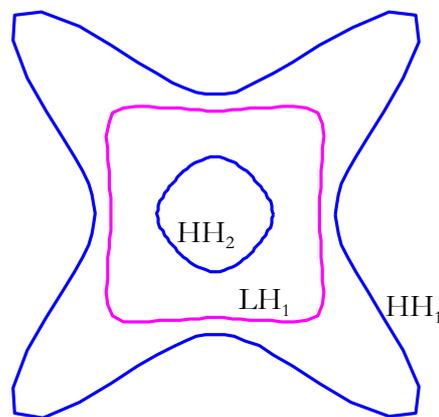


Figure 8 : Lignes iso-énergie à -250 meV pour un puits de Ge sur $\text{Si}_{0.5}\text{Ge}_{0.5}$ de 5 nm.

Dans l'approximation isotrope parabolique, les lignes équi-énergie sont des cercles. Figure 8, seule la ligne équi-énergie correspondant à la sous-bande HH_2 ressemble encore à un cercle à -250 meV, alors que les autres sous-bandes sont très anisotropes. L'allure des lignes iso-énergie montre bien que l'approximation isotrope parabolique n'est plus valide. Il est donc important de considérer la relation de dispersion réelle pour simuler du transport en gaz bidimensionnel.

III. Masses de densité d'états

Cette partie présente une étude des variations des masses de densité d'états dans les alliages SiGe en fonction de la température de 5 à 600 K.

Les masses de densité d'états offrent une description simplifiée du sommet de la bande de valence. Les simulations de transport qui utilisent ces masses pour simplifier la relation $E(k)$ permettent par exemple d'évaluer les mobilités des trous à faible champ électrique.

Deux raisons expliquent cette large gamme de températures. D'une part, les composants à base de SiGe ont une très mauvaise conductivité thermique, de l'ordre de $0.08 \text{ W.cm}^{-1}.\text{K}^{-1}$. Elle est divisée par 15 par rapport au Si et de l'ordre de celle de l'InGaAs. Tous les dispositifs à base de SiGe sont sujets à l'auto-échauffement. D'autre part, ces composants peuvent être utilisés ou étudiés à des températures cryogéniques.

Quelques allures de surfaces équi-énergie sont d'abord présentées, qui montrent la difficulté de modéliser simplement la bande de valence. Le paragraphe 2 rappelle la définition et expose la méthode de calcul des masses de densité d'états. Enfin, une étude exhaustive est menée sur les masses de densité d'états du Si contraint sur SiGe, du Ge contraint sur SiGe, et du SiGe massif et contraint sur Si en fonction de la température et de la contrainte.

1) Surfaces équi-énergie en bande de valence

Même en son sommet, la bande de valence est anisotrope. Les surfaces équi-énergie du silicium sont loin d'être des sphères même à basse énergie, comme le montre la figure 9.

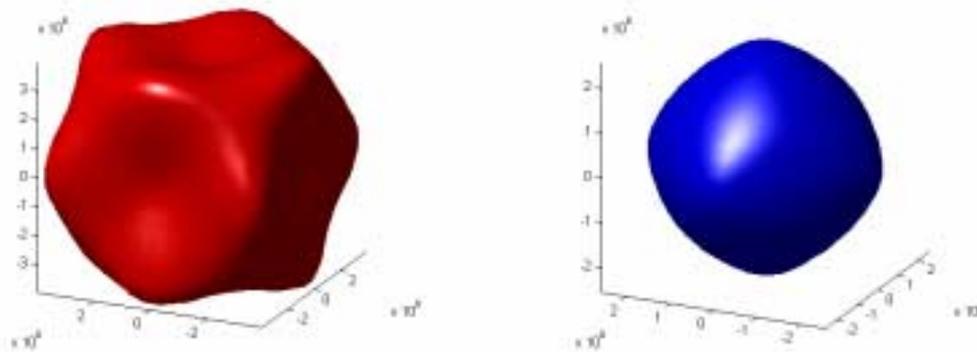


Figure 9 : Surfaces équi-énergie du Si massif pour les trous lourds à gauche et légers à droite. L'énergie considérée est $13 \text{ meV} = k_B T / 2$ avec $T = 300 \text{ K}$.

La figure 10 présente les mêmes surfaces mais dans le silicium contraint.

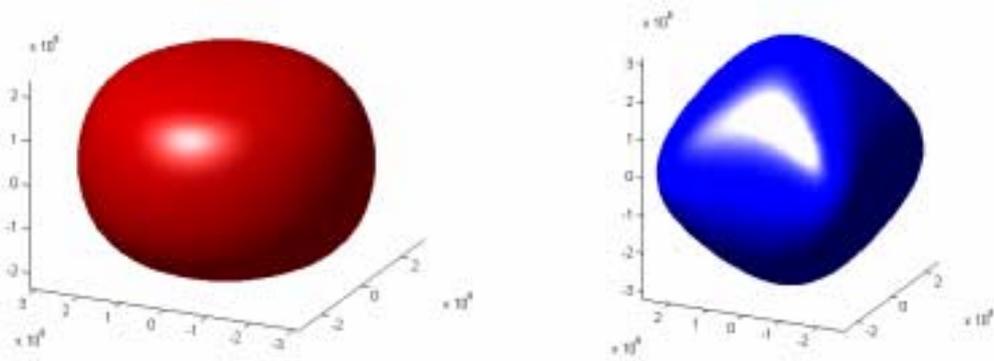


Figure 10 : Surfaces équi-énergie du Si contraint sur $\text{Si}_{0.6}\text{Ge}_{0.4}$ pour les trous de la bande élevée par la contrainte à gauche et abaissée à droite. L'énergie considérée est $13 \text{ meV} = k_B T/2$ avec $T=300\text{K}$ et k_B la constante de Boltzmann. La direction de croissance des couches est verticale.

La levée de dégénérescence en bande de valence due à la contrainte diminue l'anisotropie des bandes. Comme l'énergie considérée pour calculer les surfaces équi-énergie (13 meV) est inférieure au décalage entre les bandes dû à la contrainte (18 meV), la bande élevée subit beaucoup moins l'influence de la bande abaissée donc la surface équi-énergie de gauche est presque sphérique. Cet effet s'estompe naturellement lorsque l'énergie considérée augmente (figure 11).

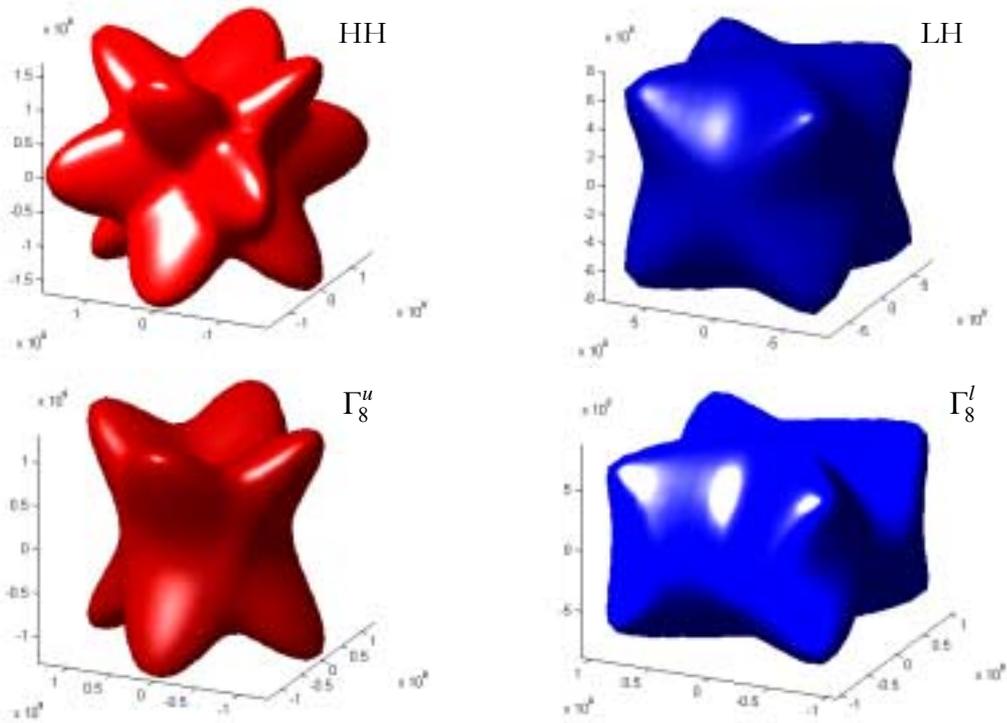


Figure 11 : Surfaces équi-énergie du Si massif (en haut à gauche : trous lourds, à droite : trous légers) et du Si contraint sur $\text{Si}_{0.6}\text{Ge}_{0.4}$ pour les trous de la bande élevée par la contrainte à gauche et abaissée à droite. L'énergie considérée est 100 meV .

A plus forte énergie, que le silicium soit massif ou contraint, l'anisotropie des bandes est très importante. La différence notable entre le silicium massif et contraint est la dissymétrie entre la direction k_z (verticale figure 11) et les autres. Cette direction est la perpendiculaire au plan des couches.

Pour le calcul des taux d'interaction en simulation Monte Carlo, le concept de masse effective de densité d'états introduit par Fischetti [Fischetti96] substitue aux bandes anisotropes une bande parabolique pour une énergie donnée, donc permet d'éviter une discrétisation totale sur l'espace des phases. Ce concept est utilisable à faible énergie pour des calculs de mobilité par exemple, mais devient tout à fait caduc pour une énergie de l'ordre de 100 meV : la figure 11 montre bien que les surfaces équi-énergie ne peuvent plus être assimilées à des sphères. C'est pourquoi les masses de densité d'états sont souvent calculées à l'énergie thermique $3/2 k_B T$. Les masses de densité d'états permettent seulement de calculer une mobilité moyenne sans distinguer de direction. Elles ne permettent pas de comparer par exemple les mobilités perpendiculaire et parallèle au plan des couches.

2) Définition de la masse de densité d'états

La masse de densité d'états est la masse effective d'une bande parabolique qui a la même densité d'états à l'énergie thermique $E_{th} = 3/2 k_B T$ que la bande réelle. Elle s'écrit [Fischetti96] :

$$\frac{m_{d,n}^{3/2} E_{th}^{1/2} 2^{1/2}}{\pi^2 \hbar^3} = g_n(E_{th})$$

où $m_{d,n}$ est la masse de densité d'états de la bande n , et $g_n(E_{th})$ la densité d'états à l'énergie E_{th} .

La masse de densité d'états utilise une approximation isotrope de la structure de bande : les surfaces équi-énergie sont assimilées à des sphères. Cette approximation n'est valide qu'à faible énergie comme illustré § 1. En bande de conduction, il est inutile de calculer des masses de densité d'états : soit les vallées sont déjà isotropes comme la vallée Γ du GaAs, soit les surfaces équi-énergie sont des ellipsoïdes de révolution définies par deux masses transverse et longitudinale, comme dans la vallée Δ du silicium.

Le concept de masse effective de densité d'états est donc utile pour calculer simplement un ordre de grandeur des mobilités en bande de valence, en résolvant l'équation de Boltzmann par une méthode Monte Carlo [Fischetti96] ou déterministe (chapitre 4, § I-3). Le paragraphe suivant fournit une base de données de masses de densités d'états en fonction de la température pour le Si, le Ge et les alliages SiGe massifs et contraints sur une large gamme de température : 10 à 600 K correspondant aux énergies thermiques ($3/2 k_B T$) de 1.29 meV à 77 meV.

3) Masses de densité d'états dans les alliages IV-IV massifs et contraints

a) Discrétisation de l'espace des phases

Pour calculer une masse de densité d'états, il faut connaître très précisément la densité d'états à l'énergie considérée, beaucoup plus que pour tracer les diagrammes présentés § I. C'est pourquoi le maillage utilisé est beaucoup plus fin. De plus, il est inutile de discrétiser toute la première zone de Brillouin : la région intéressante est celle où l'énergie vérifie $E \leq E_{th} + \delta E$ ou δE dépend de la discrétisation. Pour effectuer ces calculs, un huitième de cette zone est divisé en 62000 cellules cubiques [Richard2003].

Comme la gamme d'énergies étudiée est très grande, différents maillages ont été utilisés : en fait, il y a le même nombre de points dans un cube de côté $\frac{1}{3} \frac{2\pi}{a}$ pour les hautes températures ($T \geq 250$ K) et dans un cube de côté $\frac{1}{30} \frac{2\pi}{a}$ pour $T \leq 20$ K. Cinq maillages différents sont utilisés pour couvrir la gamme 10-600 K.

b) Masses effectives à température ambiante

Fischetti et Laux [Fischetti96] ont évalué l'effet de la contrainte sur les masses effectives de densité d'états m_{DOS} des semi-conducteurs IV-IV à température ambiante. Dans ce paragraphe, nos résultats sont comparés aux leurs avant une étude en température.

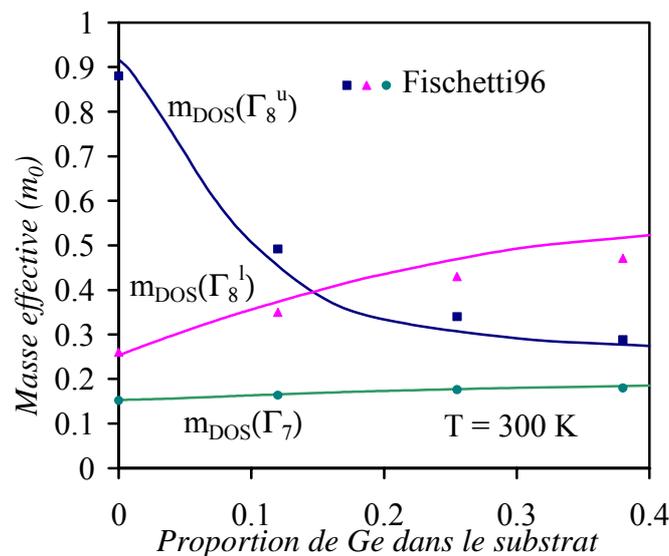


Figure 12 : Masses effectives de densité d'états dans le Si contraint sur $Si_{1-x}Ge_x$. Les traits pleins sont obtenus en k.p à 30 bandes et les points sont les données issues de [Fischetti96].

Figure 12, dans le silicium massif, la bande Γ_8^u est celle des « trous lourds » et la bande Γ_8^l celle des « trous légers ». Ces deux bandes semblent se repousser en Γ . Dès que la dégénérescence est levée, la masse effective des « trous lourds » diminue et celle des « trous légers » augmente... Comme nous l'avons mentionné au chapitre 2, § V, ces appellations sont caduques pour un semi-conducteur contraint. Nos résultats de simulation et ceux de [Fischetti96] sont en très bon accord.

Pour le germanium contraint en compression, les masses effectives ne se croisent pas. En effet, c'est la bande dite des « trous lourds » qui passe au dessus de celle des « trous légers » comme illustré figure 13.

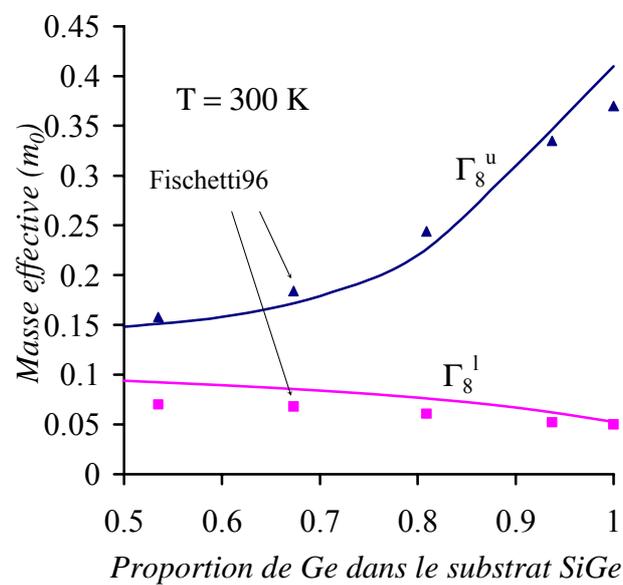


Figure 13 : Masses effectives de densité d'états dans le Ge contraint sur $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$. Les traits pleins sont obtenus en $\mathbf{k.p}$ à 30 bandes et les points sont les données issues de [Fischetti96].

La décroissance de la masse effective des « trous » lourds est très rapide dès la levée de dégénérescence. En effet, comme le couplage entre les deux bandes diminue, la bande supérieure Γ_8^u est de moins en moins repoussée par la bande inférieure Γ_8^l . La validité de la méthode $\mathbf{k.p}$ est montrée pour les masses effectives à température ambiante, donc l'étude en fonction de la température peut être menée.

c) Masses effectives de densité d'états en fonction de la température

Voici figure 14 les masses effectives de densité d'états du silicium contraint sur $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$.

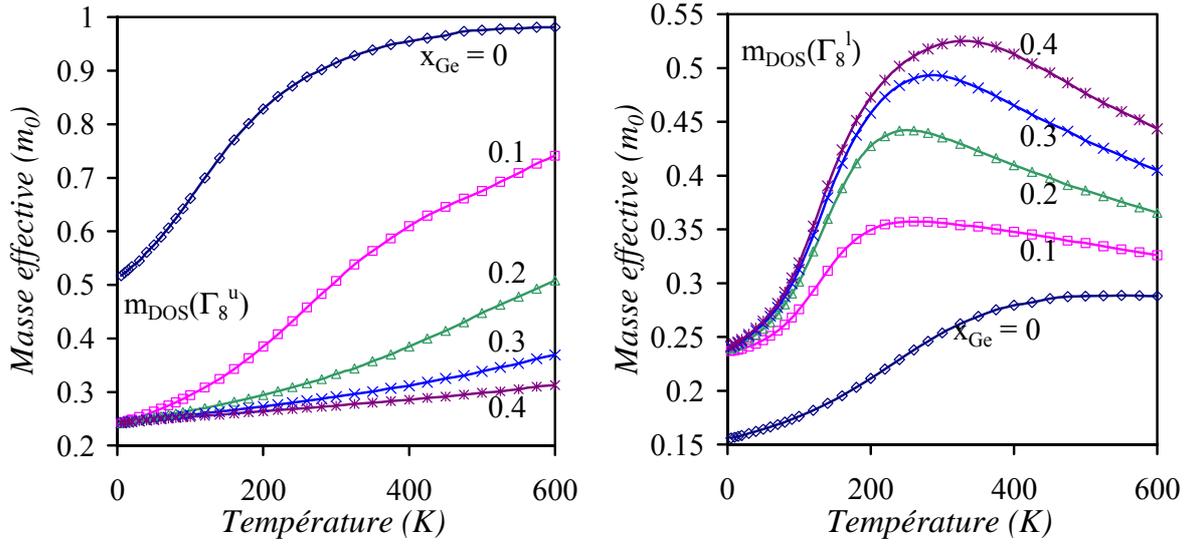


Figure 14 : Masses effectives de densité d'états dans le Si contraint sur $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ en fonction de la température calculées par la méthode $\mathbf{k.p}$ à 30 bandes.

La figure 14 montre que les masses de densité d'états dépendent beaucoup de la température pour deux raisons, la dépendance propre du diagramme de bande et la variation de l'énergie thermique considérée pour calculer la masse. Dans le silicium massif ($x_{\text{Ge}} = 0$), les masses effectives des trous lourds et des trous légers augmentent fortement avec la température : elles doublent presque entre 10 et 600 K.

Il y a une forte discontinuité entre les masses du Si massif et contraint, surtout à basse température. Autour de 5K, les masses calculées en $\mathbf{k.p}$ 30 bandes sont en bon accord avec les valeurs obtenues par résonance cyclotron [Landolt-Börnstein87], alors que dans le silicium contraint, toutes les masses tendent vers la valeur $m_{T=0\text{K}} = 0.24$. Seul le paramètre de Luttinger γ_1 ($\gamma_1 = 4.26 = 1/m_{T=0\text{K}}$) intervient sur la courbure des bandes à si faible énergie.

La masse effective de la bande Γ_8^u augmente avec la température, avec une pente plus importante pour un faible pourcentage de germanium dans le substrat. Entre 200 et 350 K, cette masse augmente avec une pente de $1.2 \cdot 10^{-3} m_0/\text{K}$ pour $x_{\text{Ge}} = 0.1$, alors que cette pente est divisée par 10 pour $x_{\text{Ge}} = 0.4$. Lorsque le silicium est fortement contraint, la bande Γ_8^u reste à peu près parabolique alors qu'elle est rapidement couplée avec la bande inférieure pour une contrainte plus faible.

La masse effective de la bande Γ_8^l augmente avec une pente raide à basse température (entre 100 et 160 K: $+1.75 \cdot 10^{-3} m_0/\text{K}$ pour $x = 0.4$ et $+8.8 \cdot 10^{-4} m_0/\text{K}$ pour $x = 0.1$) puis diminue avec une pente plus faible (entre 500 et 600 K: $-3.31 \cdot 10^{-4} m_0/\text{K}$ pour $x = 0.4$ et $-1.12 \cdot 10^{-4} m_0/\text{K}$ pour $x = 0.1$). La transition entre ces deux régions est autour de 250 K pour $x_{\text{Ge}} = 0.1$ et 320 K pour

$x_{\text{Ge}} = 0.4$. Cette température correspond à l'énergie de l'anticroisement des bandes Γ_8^u et Γ_8^l . En tout cas, cette bande Γ_8^l ne peut plus être appelée bande des « trous lourds », particulièrement pour une contrainte faible : sa masse est inférieure à $0.35 m_0$ dans la gamme de températures étudiée.

La figure 15 présente les masses effectives de densité d'états du germanium contraint sur $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$.

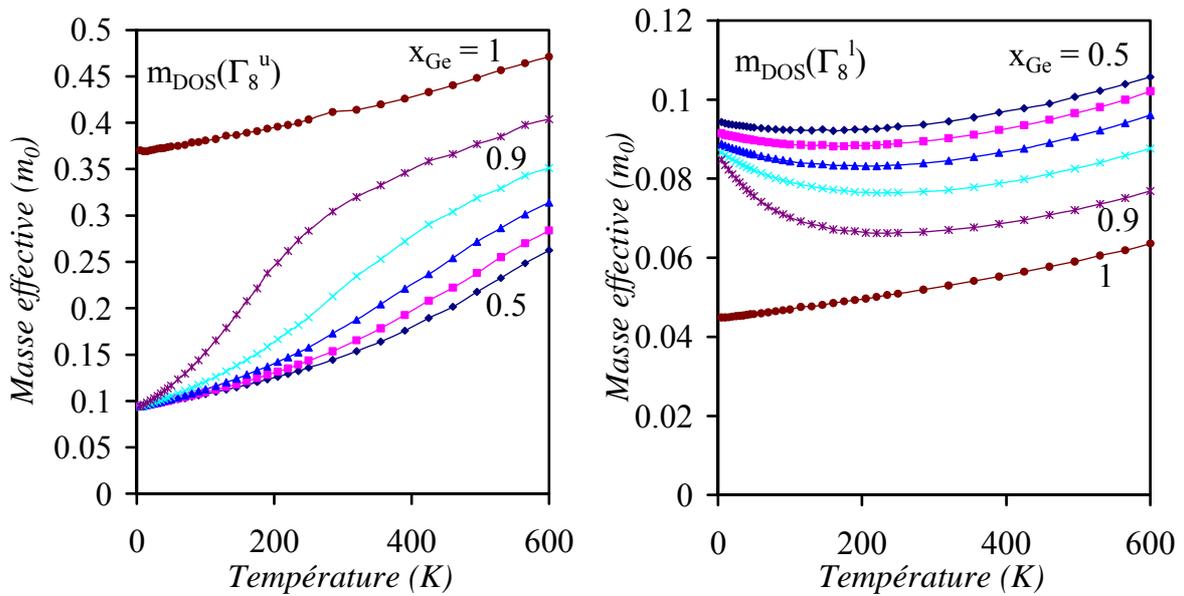


Figure 15 : Masses effectives de densité d'états dans le Ge contraint sur $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ en fonction de la température calculées par la méthode k.p à 30 bandes.

Le germanium est contraint en compression sur SiGe, donc c'est la bande dite des « trous lourds », Γ_8^u , qui passe au dessus de celle des « trous légers », Γ_8^l . Par conséquent, la masse effective de la bande Γ_8^u est toujours supérieure à celle de la bande Γ_8^l . Les masses effectives du germanium massif augmentent linéairement avec la température avec une pente de $2 \times 10^{-4} m_0/\text{K}$ pour les trous lourds (Γ_8^u) et de $3 \times 10^{-5} m_0/\text{K}$ pour les trous légers (Γ_8^l). Autour de 5 K, les masses effectives obtenues correspondent aux valeurs expérimentales de résonance cyclotron [Landolt-Börnstein87]. Dans le germanium contraint, toutes les masses tendent vers la valeur $m_{T=0\text{K}} = 0.09$. Seul le paramètre de Luttinger γ_1 ($\gamma_1 = 12.6 \approx 1/m_{T=0\text{K}}$) intervient sur la courbure des bandes à si faible énergie, comme pour le silicium.

A basse température ($T < 250 \text{ K}$), la masse effective de la bande Γ_8^u (figure 15 gauche) augmente avec une pente plus forte pour une faible contrainte que pour une forte contrainte : $+9 \times 10^{-4} m_0/\text{K}$ pour $x_{\text{Ge}} = 0.9$, et seulement $+2 \times 10^{-4} m_0/\text{K}$ pour $x_{\text{Ge}} = 0.5$. Au delà de cette température, le phénomène s'inverse : la masse effective croît plus rapidement pour une forte contrainte

($+2.5 \times 10^{-4} m_0/K$ pour $x_{Ge} = 0.9$ et $+4 \times 10^{-4} m_0/K$ pour $x_{Ge} = 0.5$). Comme pour le silicium, la transition entre ces deux régions correspond à la zone d'anticroisement entre les deux bandes Γ_8'' et Γ_8' .

La masse effective de la bande Γ_8' (figure 15 droite) décroît à basse température puis augmente à nouveau au delà de 160 K pour $x_{Ge} = 0.5$ ou 240 K pour $x_{Ge} = 0.9$. Pour une faible contrainte, la décroissance observée est plus rapide que pour une forte contrainte : les variations de la masse effective de la bande Γ_8' du Ge contraint sur $Si_{0.1}Ge_{0.9}$ se rapprochent de celles de la masse des « trous légers » du Ge massif dès que la température augmente. Au delà de 300 K, toutes les courbes sont parallèles, l'effet de la contrainte s'estompe.

Dans le $Si_{1-x}Ge_x$ massif ou contraint sur Si, l'effet de la température sur les masses effectives de densité d'états est aussi important (figure 16).

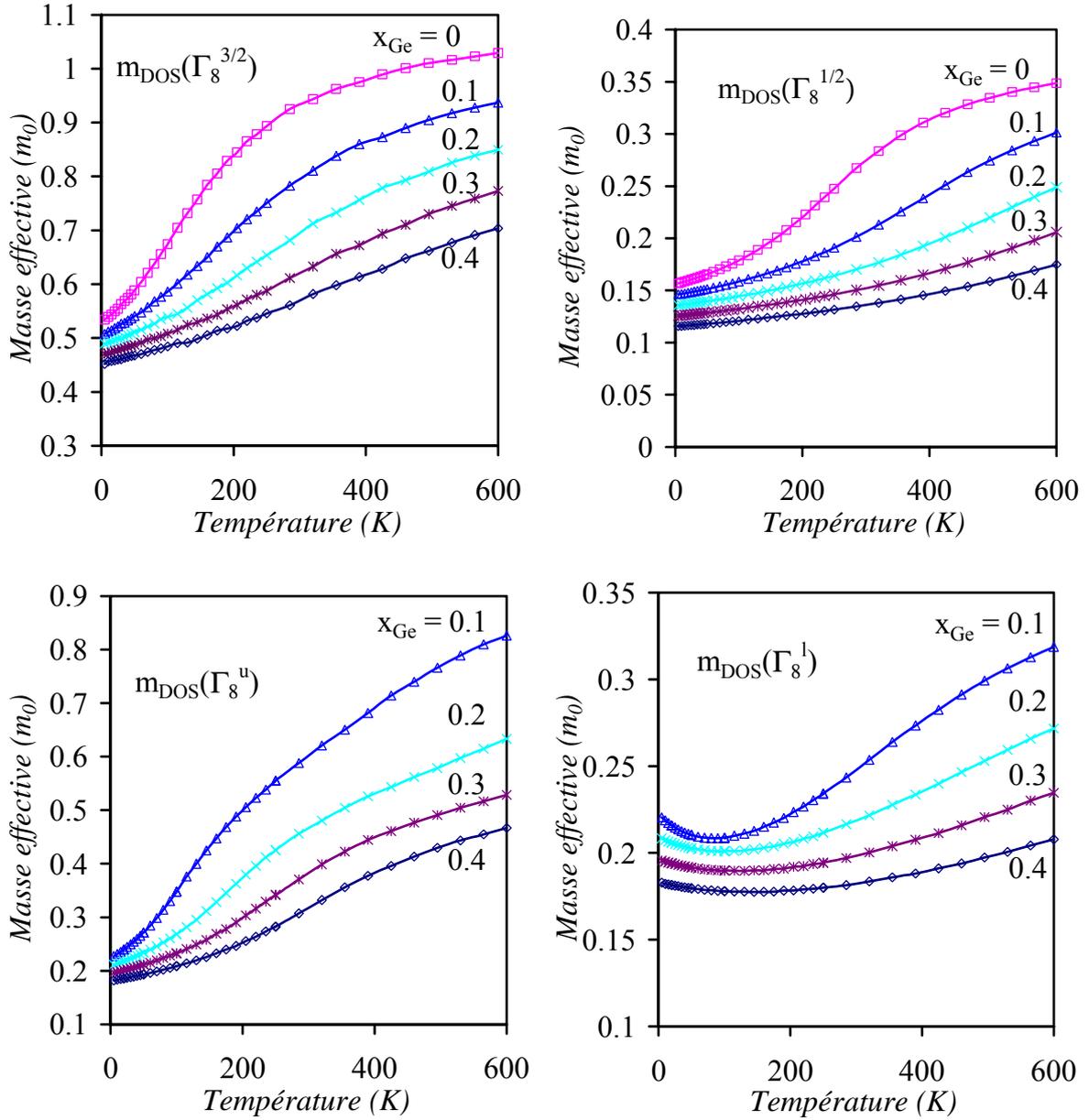


Figure 16 : Masses effectives de densité d'états dans le $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ massif en haut et contraint sur Si en bas en fonction de la température calculées par la méthode $k \cdot p$ à 30 bandes.

Tous les phénomènes observés précédemment se retrouvent : une croissance des masses effectives du $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ massif avec la température, croissance similaire à celle observée sur le Si pour le $\text{Si}_{0.9}\text{Ge}_{0.1}$ et plus linéaire (comme le Ge) pour une plus forte concentration de Ge. Pour le SiGe contraint sur Si, l'allure des variations des masses ressemble à celle du Ge contraint sur SiGe. La contrainte subie est aussi une contrainte en compression. A très basse température, autour de 5 K, les masses effectives observées pour les bandes Γ_8^u et Γ_8^l sont identiques pour chaque proportion de Ge. Le décalage des bandes dû à la contrainte les rend parallèles en $k = 0$.

Une base de données complète sur les masses effectives de densité d'états est ainsi disponible pour des simulations de transport faible champ dans les semi-conducteurs IV-IV. Mais les variations de la mobilité ne sont pas seulement liées à celles des masses effectives. Par exemple, même si les masses effectives du SiGe contraint sur Si diminuent lorsque la proportion de Ge augmente, les mobilités n'augmentent pas en particulier à cause du potentiel d'alliage [Richard2004]. C'est pourquoi une étude plus complète du transport s'impose.

Conclusion

Après avoir rappelé la définition de la densité d'états dans un semi-conducteur en trois dimensions, nous avons détaillé la méthode de calcul utilisée pour l'obtenir. Nous avons ensuite comparé les densités d'états issues des structures électroniques des semi-conducteurs massifs présentées au chapitre 2, à celles fournies par d'autres méthodes, ce qui nous a permis, si besoin en était, de valider la méthode **k.p** à 30 bandes développée dans le cadre de cette thèse.

Dans les hétérostructures, l'approximation de la masse effective est souvent utilisée pour calculer les relations de dispersion dans les puits quantiques. Pour un puits de Ge contraint sur $\text{Si}_{0.5}\text{Ge}_{0.5}$, nous avons comparé les densités d'états bidimensionnelles obtenues à partir de bandes paraboliques et de la structure électronique réelle obtenue au chapitre 2, § VI-2. La densité d'états usuelle en marches d'escalier n'est plus valide lorsqu'on considère la structure réelle des sous-bandes. Cette différence devra être prise en compte pour l'étude du transport bidimensionnel (chapitre 4, § II).

Enfin, nous avons calculé les masses de densité d'états des trous dans les alliages IV-IV, en fonction de la température et du pourcentage de Ge. Certes, l'allure des surfaces équi-énergie en bande de valence montre qu'un modèle de masse effective est une approximation forte. Cependant, ce modèle simplifié de la bande de valence permettra de dégager quelques idées sur l'influence de la contrainte sur la mobilité moyenne des trous dans les matériaux IV-IV (chapitre 4, § I-3).

La densité d'états, qui dépend seulement de la structure de bande du matériau, est un paramètre clef dans les modélisations physiques du transport : elle intervient pour le calcul des fréquences d'interaction, pour le taux d'ionisation par choc présentés chapitre 4. Elle permet aussi de modéliser simplement les relations de dispersion des matériaux, pour éviter de prendre en compte directement la structure électronique lorsqu'une simulation « full band » du transport n'est pas nécessaire.

BIBLIOGRAPHIE DU CHAPITRE 3

- [Ashcroft76] N.W. Ashcroft et N.D. Mermin, *Solid State Physics*, Saunders College Publishing (1976)
- [Chelikowsky76] J.R. Chelikowsky et M.L. Cohen, "Nonlocal pseudopotential calculations for the electronic structure of eleven diamond and zinc-blende semiconductors," *Phys. Rev. B* **14**, 2, 556-82 (1976)
- [Fischetti88] M.V. Fischetti et S.E. Laux, "Monte Carlo analysis of electron transport in small semiconductor devices including band-structure and space-charge effects", *Phys. Rev. B* **38**, 14, 9721-45 (1988)
- [Fischetti96] M. V. Fischetti et S. E. Laux, "Band structure, deformation potentials, and carrier mobility in strained Si, Ge, and SiGe alloys" *J. Appl. Phys.* **80**, 4 2234-52 (1996)
- [Gilat66] G. Gilat et L.J. Raubenheimer, "Accurate numerical method for calculating frequency-distribution function in solids", *Phys. Rev.* **144**, 2, 390-5 (1966)
- [Jancu98] J.M. Jancu, R. Scholz, F. Beltram, et F. Bassani, "Empirical sp³d⁵ tight-binding calculation for cubic semiconductors: General method and material parameters", *Phys. Rev. B* **57**, 11, 6493-507 (1998)
- [Kane67] E. O. Kane, "Electron Scattering by Pair Production in Silicon", *Phys. Rev.* **159**, 3, 624-31 (1967)
- [Kuyiniko94] T. Kuyiniko, M. Takenaka, Y. Yamakura, M. Yamaji, H. Mizuno, M. Morifuji, K. Taniguchi, "A Monte Carlo simulation of anisotropic electron transport in silicon including full band structure and anisotropic impact-ionization model", *J. Appl. Phys.* **75**, 1, 297-312 (1994).
- [Landolt-Börnstein87] *Semiconductors : Intrinsic Properties of Group IV Elements and III-V, II-VI and I-VII Compounds*, édité par O. Madelung, Landolt-Börnstein, New Series, Group III, Vol. 22, Part a (Springer, Berlin, 1987)
- [Lundstrom2000] M. Lundstrom, *Fundamentals of carrier transport*, édité par Cambridge University Press (2000)
- [Ren98] S.Y. Ren, J.D. Dow et X. Chen, "Tight-binding sp³d⁵ Hamiltonian for Si", *J. Phys. Chem. Solids* **59**, 3, 403-10 (1998)
- [Richard2003] S. Richard, N. Cavassilas, F. Aniel et G. Fishman, "Strained silicon on SiGe: Temperature dependence of carrier effective masses", *J. Appl. Phys.* **94**, 8, 5088-94 (2003).
- [Richard2004] S. Richard, F. Aniel et G. Fishman, "Strained Si_{1-x}Ge_x on [001] Si: Temperature dependence of hole mobility", 3rd International Conference on Computational Modeling and Simulation of Materials, CIMTEC 2004, Acireale (Sicile), Italie, 30 mai – 4 juin 2004.
- [Tserbak93] C. Tserbak, H. M. Polatoglou et G. Theodorou, "Unified approach to the electronic structure of strained Si/Ge superlattices", *Phys. Rev. B* **47**, 12, 7104-24 (1993)

CHAPITRE 4

Transport et ionisation par choc

Le diagramme de bande permet de décrire l'influence du potentiel cristallin à l'équilibre sur les porteurs de charge. L'étude du transport consiste à prendre en compte l'effet d'un champ électrique extérieur compte tenu des perturbations de ce potentiel cristallin dues aux vibrations du réseau, aux autres porteurs, aux charges fixes.

Le formalisme du transport électronique dans les semi-conducteurs est passé par plusieurs stades. La théorie classique du transport électronique dans les semi-conducteurs, considère le système des porteurs libres en équilibre avec le réseau cristallin comme formant un gaz parfait. Par la suite est venue se greffer la physique statistique avec le concept de fonction de distribution, et finalement la théorie quantique décrivant les interactions avec le réseau. Il en résulte finalement un formalisme semi-classique où trajectoires et champs sont traités classiquement et les interactions par la mécanique quantique. L'équation permettant de formaliser le transport est l'équation de Boltzmann.

L'équation de Boltzmann est utilisée dans divers domaines (thermodynamique, neutronique, électronique...) car elle permet de connaître la statistique dans l'espace des phases (\vec{k}, \vec{r}, t) (impulsion, position et temps) d'un ensemble de particules identiques (bosons ou fermions), c'est-à-dire la fonction de distribution des particules en fonction de forces extérieures en prenant en compte différentes interactions. La fonction de distribution d'un système de particules permet de calculer le nombre de particules en n'importe quel point de l'espace des phases. Pour les électrons dans un semi-conducteur on peut en déduire les paramètres de transport du matériau étudié tels que les taux de remplissage des différentes vallées des bandes de conduction ou de valence, les temps de relaxation du moment et de l'énergie, la vitesse moyenne, l'énergie moyenne en fonction du champ électrique...

Il existe plusieurs approches pour la résolution de l'équation de Boltzmann. Chacune a ses qualités et ses défauts et il faut la choisir en fonction du problème que l'on cherche à résoudre. Dans le cadre de cette thèse, nous avons développé un modèle résolvant l'équation de Boltzmann dans un semi-conducteur pour les électrons et les trous. Ce modèle se place du côté des simulateurs permettant l'accès aux phénomènes physiques fins liés aux porteurs chauds. Notre

modèle repose sur une technique déterministe de résolution de l'équation de Boltzmann. Notre technique utilise la résolution matricielle directe de l'équation de Boltzmann [Aubert84]. D'autres méthodes déterministes existent. On peut remarquer en particulier la technique dite « Spherical-Harmonics Expansion » (SHE) qui consiste à trouver une solution à l'équation sous la forme d'une série d'harmoniques sphériques [Vecchi98], [Reggiani98]. Une alternative plus couramment employée consiste dans une résolution Monte Carlo de l'équation de transport de Boltzmann qui, contrairement à notre approche et à la SHE, est une technique de résolution stochastique. La résolution Monte Carlo est une technique « mature » de simulation du transport dans les semi-conducteurs [Lugli90] mais, étant stochastique, l'incertitude sur la solution dépend du nombre de particules considérées. Les techniques dites déterministes donnent un unique état stationnaire qui dans notre cas ne dépend d'aucune condition initiale [Aubert 84].

La résolution matricielle directe de l'équation de Boltzmann a déjà fait l'objet de plusieurs publications [Vaissière92] [Aubert84] et de nombreuses thèses [Vaissière86] [Fadel88] [Hlou92], dans lesquelles les porteurs restaient à des énergies relativement faibles dans une structure de bande définie analytiquement. Durant sa thèse, Nicolas Cavassilas a étendu cette approche à l'étude du transport dans un semi-conducteur III-V dont la structure de bande est décrite jusqu'à des énergies importantes (4 eV) de façon non analytique [Cavassilas2000]. Une telle description est indispensable pour l'étude de phénomènes liés aux porteurs chauds à champ fort et nécessite une adaptation du calcul des termes d'interaction. En Effet, dans un modèle de résolution matricielle, les calculs des termes d'interaction sont plus complexes que dans une résolution Monte-Carlo où seules les probabilités de sortir d'un état donné sont calculées. Dans notre cas nous devons également calculer les probabilités offertes à tous les porteurs d'entrer sur un état donné. Ces calculs sont délicats mais ont l'avantage de n'être faits qu'une seule fois pour chaque semi-conducteur.

En revanche, un avantage important de cette technique déterministe, par rapport à la technique Monte-Carlo est qu'elle donne accès aux fonctions de distribution dans l'espace réciproque avec une grande finesse [Vaissière92]. Cela peut permettre de mieux comprendre certains phénomènes physiques fins tels que les transferts de vallée ou tous les phénomènes qui dépendent de l'orientation des vecteurs d'onde tel que le passage d'une barrière énergétique. Un autre avantage significatif de cette technique est qu'elle donne directement accès à la solution stationnaire et ce, avec le même temps de calcul quels que soient les temps de relaxation [Aubert84]. Cela donne accès à la prise en compte de processus difficilement accessibles aux simulateurs Monte-Carlo car ils mettent en jeu des temps caractéristiques importants, tels que la recombinaison radiative, la recombinaison Auger, les effets de piégeage /déliégeage...

En dehors du choix de la technique de résolution de l'équation de Boltzmann, les simulateurs du transport dans les semi-conducteurs sont classés en fonction d'hypothèses plus ou moins fortes faites sur la structure de bande considérée. Ils y a les modèles dits « bande complète » ou « full-band » [Shichijo81], [Brennan83], [Fischetti88], pour lesquels la structure de bande du semi-conducteur est considérée dans son ensemble sur toute la zone de Brillouin. Dans le cas où l'on souhaite étudier le transport sous champ électrique intense, les porteurs se dispersent sur toute la structure électronique et une description « full-band » est alors souhaitable. En pratique seules quelques équipes possèdent un modèle totalement « full-band » [Fischetti88], [Bude92]. En effet cela alourdit énormément la résolution de l'équation de Boltzmann car la structure de bande est définie sur beaucoup de points et aucune relation analytique ne permet de calculer les taux d'interaction simplement. Dans le but d'alléger les calculs numériques on peut utiliser des techniques alternatives où l'on ne considère qu'une approximation de la structure de bande. On peut considérer des bandes non paraboliques pour l'étude des porteurs froids [Littlejohn77]. Ce type d'approximation ne permet en aucun cas de faire l'étude de porteurs chauds. Pour cela des descriptions analytiques beaucoup plus complexes peuvent être utilisées. Une technique consiste par exemple à calculer une structure de bande analytique qui, une fois intégrée, donne une densité d'état proche de la densité réelle. Ce type de calcul est intéressant car il permet de simuler le transport des électrons chauds avec des résultats en bon accord avec ceux obtenus par un modèle « full-band » sans pour autant devoir calculer la vraie structure de bande [Mouton97]. Nous pouvons également remarquer que pour la SHE, Vecchi *et al.* n'utilisent pas la structure de bande mais uniquement la densité d'état (DOS) intégrée sur toutes les directions pour calculer les taux d'interactions avec les phonons [Vecchi98]. D'un point de vue dynamique (interactions des porteurs) leur modèle est « full-band » alors que d'un point de vue cinétique (relation de dispersion des électrons) il ne l'est pas. D'autres équipes ont à leur disposition les vraies structures de bandes mais les simplifient dans le but « d'alléger » les calculs de résolution de l'équation de Boltzmann [Ong2000]. L'avantage de cette approche est que seuls les états d'énergie « intéressants » sont pris en compte. Cela induit des temps de calcul beaucoup plus courts qu'un vrai modèle « full-band » tout en donnant des résultats très voisins même pour des champs électriques intenses [Ong2000], [Dunn97]. Dans ce type d'approche beaucoup d'hypothèses peuvent être faites. Le choix porte sur la prise en compte de la seconde bande de conduction [Fischetti91], sur la prise en compte de la non isotropie [Mouton97], sur le fait d'« approximer » ou non les bandes par une description analytique pour certaines parties de la zone de Brillouin [Fischetti88]... Notre modèle se place selon cette dernière approche c'est à dire que nous disposons des vraies structures de bandes des matériaux étudiés (décrites au chapitre 2) mais nous

les simplifications. Nous utilisons une description non analytique pour garder certaines subtilités telles que la décroissance de la vitesse de groupe avec l'augmentation de k , mais nous ne considérons que les vallées dans lesquelles se trouve la très grosse majorité des porteurs.

La première partie présente la résolution du transport en trois dimensions pour des semiconducteurs IV-IV massifs ou contraints mais où l'effet du confinement n'est pas pris en compte. Après une présentation du formalisme de l'équation de Boltzmann en trois dimensions, la méthode de résolution déterministe est détaillée. Ensuite, plusieurs types de simulations sont présentés, avec des hypothèses plus ou moins fortes pour simplifier le diagramme de bande. D'abord, les mobilités moyennes des trous dans le SiGe massif et contraint sur Si sont évaluées à partir des masses de densité d'états présentées au chapitre 3. Cette méthode, assez simple à mettre en œuvre, utilise des bandes paraboliques dont la masse varie en fonction de la température. En revanche, son domaine de validité est assez restreint à cause de l'approximation parabolique. Pour étudier le transport à fort champ électrique, les modèles de diagramme de bande sont plus évolués. Pour le transport des électrons dans le silicium contraint sur SiGe, la véritable relation de dispersion des vallées Δ est utilisée. Comme ces vallées sont des ellipsoïdes de révolution, la symétrie axiale permet de simplifier la simulation de transport en ne prenant en compte que deux dimensions. Enfin, pour le transport en fort champ électrique des trous dans le Ge contraint sur SiGe, une relation de dispersion sphérique qui possède la même densité d'états que la relation réelle est prise en compte ; pour les interactions isotropes avec les phonons, cette approximation est justifiée : les fréquences d'interaction dépendent seulement de la densité d'états d'arrivée. En revanche, pour l'effet du champ électrique, l'anisotropie n'étant pas prise en compte, il est impossible, avec ce modèle, de distinguer la direction normale de la direction parallèle au plan des couches.

La deuxième partie présente la résolution du transport en deux dimensions dans un puits de Ge contraint sur SiGe. Après une description du formalisme de l'équation de Boltzmann en gaz bidimensionnel, la méthode de résolution déterministe en deux dimensions est appliquée à un puits de Ge en utilisant des relations de dispersion dans le plan (k_x, k_y) paraboliques puis des relations réelles. La liaison avec le continuum tridimensionnel n'a pas encore été prise en compte c'est pourquoi cette partie présente simplement des mobilités en deux dimensions.

Enfin, le modèle physique de l'ionisation par choc est présenté, puis les coefficients d'ionisation par choc sont calculés pour les électrons dans le silicium et les trous dans le germanium afin d'interpréter les mesures d'électroluminescence présentées au chapitre 5.

I. Transport tridimensionnel

1) Présentation de l'équation de Boltzmann

A l'équilibre, les porteurs de charge peuplent les bandes d'énergie en suivant une statistique de Fermi-Dirac. En présence d'un champ électrique, cet équilibre est perturbé : les porteurs sont accélérés par le champ selon la relation fondamentale de la dynamique. Cependant, ils appartiennent à un réseau cristallin, et y subissent des interactions. Dans le réseau réciproque, ces phénomènes limitant le transport sont régis par l'équation de Boltzmann. Cette équation permet de connaître la distribution des porteurs dans l'espace des phases en fonction des forces extérieures appliquées au semi-conducteur (champ électrique dans notre cas) et des interactions qu'ils subissent.

a) Généralités sur l'équation de Boltzmann

Soit $f(\vec{k}, \vec{r}, t)$ la fonction de distribution des électrons dans le semi-conducteur. Cette fonction que l'on appelle également fonction de répartition, est définie comme étant le nombre de particules de vecteur d'onde \vec{k} à $d\vec{k}$ près, situées en \vec{r} à $d\vec{r}$ près au temps t . En d'autres termes, le nombre de particules situées dans le volume $(\vec{r}, d\vec{r})$ ayant le vecteur d'onde $(\vec{k}, d\vec{k})$ au temps t s'écrit :

$$dN(\vec{k}, \vec{r}, t) = f(\vec{k}, \vec{r}, t) \times d\vec{r} \times d\vec{k}$$

Dans un premier temps, notre étude sera faite indépendamment de l'espace réel, c'est-à-dire que f sera indépendante de \vec{r} .

Pour écrire l'équation de Boltzmann, nous allons raisonner sur un état \vec{k} à $d\vec{k}$ près. La différence de population dans cet état entre les temps t et $t + dt$, est :

$$f(\vec{k}, t + dt) d\vec{k} - f(\vec{k}, t) d\vec{k} = \frac{\partial f}{\partial t} dt \times d\vec{k}$$

On peut également voir cette différence comme étant égale au nombre de particules arrivées (Terme d'entrée) moins le nombre de particules parties (Terme de sortie) pendant l'intervalle de temps dt de la cellule $(\vec{k}, d\vec{k})$. Les phénomènes qui permettent aux particules de changer d'état, sont dans notre cas, une force extérieure due à un champ \vec{E} selon l'axe z , et différentes

interactions q avec le réseau dont les probabilités de transition de l'état \vec{k} à l'état \vec{k}' , $P_q(\vec{k}, \vec{k}')$ sont connues.

b) Champ électrique

Pour le champ électrique, on a $\vec{F} = q\vec{E} = m^* \cdot \vec{a}$ avec \vec{a} l'accélération. Or on sait que :

$$\vec{a} = \frac{1}{m^*} \frac{d\vec{p}}{dt} = \frac{\hbar}{m^*} \frac{d\vec{k}}{dt}$$

On en conclut que la différence de population qu'engendre le champ (terme d'entrée moins terme de sortie), est :

$$f\left(\vec{k} - \frac{q\vec{E}}{\hbar} dt, t\right) d\vec{k} - f(\vec{k}, t) d\vec{k} = \vec{\nabla}_{\vec{k}} f \cdot \frac{q\vec{E}}{\hbar} \times dt d\vec{k}$$

c) Interactions avec le réseau cristallin

Les interactions subies par un porteur sont considérées comme des perturbations qui le font passer instantanément de l'état \vec{k} à l'état \vec{k}' . Les probabilités de transition par unité de temps sont données par la règle d'or de Fermi, qui suppose que la durée des interactions est très inférieure au temps entre deux interactions.

La fonction d'onde du porteur considéré vérifie l'équation de Schrödinger dépendant du temps [Lundstrom2000] :

$$\left[H_0 + U_q(\vec{r}, t) \right] \psi(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t}$$

où H_0 est le potentiel cristallin à l'équilibre et $U_q(\vec{r}, t)$ est le potentiel perturbateur. Les solutions de l'équation de Schrödinger à l'équilibre $\psi_{\vec{k}}(\vec{r})$ sont connues (cf. chapitre 2). Pour obtenir la probabilité d'interaction, la première étape est le calcul de l'élément de matrice de transition qui s'écrit :

$$\left| M_q(\vec{k}, \vec{k}') \right|^2 = \left| \int \psi_{\vec{k}}^*(\vec{r}) U_q(\vec{r}) \psi_{\vec{k}'}(\vec{r}) d^3\vec{r} \right|^2 = \frac{1}{V_c^2} \left| \int e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} U_q(\vec{r}) e^{i\vec{k}'\cdot\vec{r}} \right|^2 \left| R(\vec{k}, \vec{k}') \right|^2$$

où V_c est le volume du cristal et $\left| R(\vec{k}, \vec{k}') \right|^2 = G(\vec{k}, \vec{k}')$ est le carré de l'intégrale de recouvrement des fonctions de Bloch. Ce facteur doit être évalué pour toutes les probabilités d'interaction.

Pour les électrons des matériaux IV-IV, les vallées considérées ne sont pas centrées en Γ donc $G(\vec{k}, \vec{k}')$ est pratiquement constante tant pour les interactions intravallées qu'intervallées

[Reggiani73]. La valeur de $G(\vec{k}, \vec{k}')$ est incluse dans la constante de couplage de l'interaction qui apparaît alors comme un paramètre ajustable [Dollfus99]. En revanche, pour les trous, le facteur de recouvrement est différent pour les interactions intrabandes et interbandes. Il a été évalué par Wiley pour les bandes de trous lourds et de trous légers dans les composés III-V [Wiley71] et est utilisé tel quel par Briggs *et al.* dans les alliages SiGe, y compris pour les transitions impliquant la bande découplée par interaction spin-orbite [Briggs98]. Il s'écrit :

$$G(\vec{k}, \vec{k}') = \frac{1}{4}(1 + 3 \cos^2 \theta) \text{ pour les transitions intrabandes et}$$

$$G(\vec{k}, \vec{k}') = \frac{3}{4} \sin^2 \theta \text{ pour les transitions interbandes}$$

où θ est l'angle entre \vec{k} et \vec{k}' .

La probabilité d'interaction par unité de temps pour qu'un porteur aille de l'état \vec{k} d'énergie ε à l'état \vec{k}' d'énergie ε' à l'aide de l'interaction q s'écrit :

$$P_q(\vec{k}, \vec{k}') = \frac{2\pi}{\hbar} |M_q(\vec{k}, \vec{k}')|^2 \delta(\varepsilon' - \varepsilon - \Delta\varepsilon)$$

où $\Delta\varepsilon$ est la différence d'énergie due à l'interaction. $\Delta\varepsilon = 0$ pour une interaction élastique.

Ecrivons le nombre de particules qui partent de \vec{k} pour \vec{k}' à l'aide des probabilités $P_q(\vec{k}, \vec{k}')$ pendant dt :

$$\sum_q P_q(\vec{k}, \vec{k}') \times f(\vec{k}) \times (1 - f(\vec{k}')) \times d\vec{k} d\vec{k}' dt = P(\vec{k}, \vec{k}') \times f(\vec{k}) \times (1 - f(\vec{k}')) \times d\vec{k} d\vec{k}' dt$$

avec $P(\vec{k}, \vec{k}')$ la somme de toutes les probabilités $P_q(\vec{k}, \vec{k}')$, $f(\vec{k}) d\vec{k}$ étant le nombre de porteurs dans l'état \vec{k} et $(1 - f(\vec{k}')) d\vec{k}'$ le nombre d'états disponibles dans l'état \vec{k}' . Ce nombre d'états disponibles est, en toute rigueur, fourni en appliquant le principe d'exclusion de Pauli. Néanmoins, dans le cadre de notre étude, la densité de porteurs est faible par rapport à la densité d'états disponibles ; le semi-conducteur est supposé non dégénéré donc $f(\vec{k}) \ll 1$ et $(1 - f(\vec{k}')) \approx 1$.

On en déduit la différence de population sur l'état \vec{k} engendrée par ces différentes interactions q (terme d'entrée de tous les autres états \vec{k}' , moins terme de sortie vers tous les autres états \vec{k}') :

$$\frac{1}{8\pi^3} \int_{\vec{k}'} P(\vec{k}', \vec{k}) \times f(\vec{k}') \times d\vec{k}' dt \times d\vec{k} - \frac{1}{8\pi^3} \int_{\vec{k}} P(\vec{k}, \vec{k}') \times f(\vec{k}) \times d\vec{k}' dt \times d\vec{k}$$

Le terme $\frac{1}{8\pi^3}$ est un terme de normalisation (volume élémentaire dans l'espace réciproque).

d) *Les différentes collisions*

Les principaux mécanismes d'interaction peuvent être classés en quatre catégories :

✖ avec le réseau cristallin

Les atomes d'un cristal oscillent autour de leur position d'équilibre. Ce phénomène engendre un certain nombre de modes vibratoires dans le cristal, caractérisés par leur pulsation ω . A ces modes vibratoires sont associées des pseudo-particules nommées phonons qui obéissent à la statistique de Bose Einstein. Ils ont des énergies quantifiées : $\hbar\omega$. Les phonons interagissent avec les porteurs de charge et obéissent aux principes de conservation de l'énergie et du moment. Dans la bande de valence du germanium, ces phonons peuvent induire des transitions intravallées et intervallées.

Dans l'approche simplifiée retenue pour la simulation du transport, on considère deux types de phonons, acoustiques et optiques, qui permettent tous deux des transitions intra et intervallées entre la bande des trous lourds et celle des trous légers, toutes deux centrées en Γ . Les phonons acoustiques sont associés aux modes de vibration correspondant à des atomes voisins vibrant en phase. Ceux-ci déforment le potentiel cristallin, ce qui engendre l'interaction acoustique de déformation. Cette interaction, à 300 K, se limite à modifier les directions des vecteurs d'onde \vec{k} des porteurs (collision élastique). A basse température ce n'est plus tout à fait le cas.

Les modes de vibration correspondant à des atomes vibrant en opposition de phase sont associés à des phonons optiques. La probabilité d'interaction d'un trou avec un phonon de ce type est différente de zéro pour deux états dont la différence des énergies est égale à $\hbar\omega_{op}$, énergie du phonon optique.

✖ avec les autres porteurs

Lorsque la densité de porteurs est élevée, leurs potentiels coulombiens sont sources d'interactions. Ce phénomène est complexe car il dépend de la fonction de distribution des porteurs. Nous n'avons pas pris en compte ce processus sauf si l'on considère que l'ionisation par choc relève de cette catégorie.

✖ avec les impuretés ionisées

Pour les matériaux dopés, les impuretés ionisées interagissent fortement avec les porteurs de charge par l'intermédiaire du potentiel coulombien. Cette interaction élastique est prédominante à basse température et est particulièrement efficace pour les porteurs de faible énergie.

✖ interaction d'alliage

Dans les matériaux ternaires (pour les II-VI ou III-V) ou binaires (IV-IV), à l'échelle microscopique, la stoechiométrie du réseau n'est pas respectée : le potentiel cristallin est perturbé, perturbation prise en compte par le potentiel d'alliage. Le modèle le plus utilisé est celui de [Harrison76] qui repose sur le raisonnement suivant : Un électron qui passe au voisinage d'un atome de type 2 sur un site normalement occupé par un atome de type 1 subit un potentiel E_{all} dont l'extension spatiale est r_0 telle que :

$$E_{all} = \begin{cases} qU_{all} & \text{si } r \leq r_0 \\ 0 & \text{si } r > r_0 \end{cases}$$

où U_{all} est le potentiel d'alliage et q la charge de l'électron. L'extension spatiale r_0 est définie comme la distance entre deux plus proches voisins : $r_0 = \frac{\sqrt{3}}{4}a$ où a est la maille du semi-conducteur [Bufler98].

e) Equation finale

L'équation de Boltzmann à champ constant et indépendamment de l'espace réel, s'écrit finalement :

$$\frac{\partial f(\vec{k}, t)}{\partial t} = \frac{q\vec{E}}{\hbar} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{k}} f + \frac{1}{8\pi^3} \int_{\vec{k}'} \left(P(\vec{k}', \vec{k}) f(\vec{k}', t) - P(\vec{k}, \vec{k}') f(\vec{k}, t) \right) d\vec{k}'$$

L'équation de Boltzmann n'est pas soluble analytiquement ; pour sa résolution, il existe deux approches usuelles :

- ✦ l'approche particulière Monte-Carlo.
- ✦ l'approche déterministe matricielle.

La première consiste à décrire le mouvement des porteurs comme une suite de vols libres, sous le seul effet du champ électrique, entrecoupés d'interactions. Si on suppose que les interactions sont des processus poissonniens, le temps de vol libre t_v est défini à partir d'un nombre aléatoire r compris entre 0 et 1 par :

$$r = \exp\left(-\int_0^{t_v} \lambda dt\right)$$

où λ est la probabilité d'interaction totale par unité de temps. Cette probabilité totale est la somme des probabilités relatives à chaque processus d'interaction. La probabilité de chaque processus s'obtient en intégrant la densité de probabilité sur tous les états possibles après interaction, c'est-à-dire en calculant le terme de sortie pour chaque interaction. On obtient le temps de vol libre, puis on détermine la nature de l'interaction suivante, les variations de l'énergie et du vecteur d'onde du porteur engendrées à l'aide d'autres nombres aléatoires et de la loi de

probabilité de l'interaction. A partir du nouvel état de sortie, on recommence : calcul du temps de vol libre...

Cette méthode est assez simple à mettre en œuvre car elle ne nécessite que les calculs des termes de sortie, mais les temps de simulation sont longs car il faut décrire le mouvement d'un grand nombre de porteurs pour obtenir des fonctions de distribution précises. D'autre part, si un terme de sortie n'est pas du même ordre de grandeur que les autres, comme c'est le cas pour la recombinaison radiative, la simulation est encore plus longue voire impossible.

L'approche matricielle est plus difficile à mettre en œuvre mais les temps de simulation sont plus réduits : on peut directement obtenir une solution stationnaire. C'est cette méthode que nous utilisons.

2) Résolution matricielle de l'équation de Boltzmann

L'équation de Boltzmann est un système d'équations différentielles. Les inconnues de ce système sont les fonctions de distribution pour chaque état (k, θ, φ) .

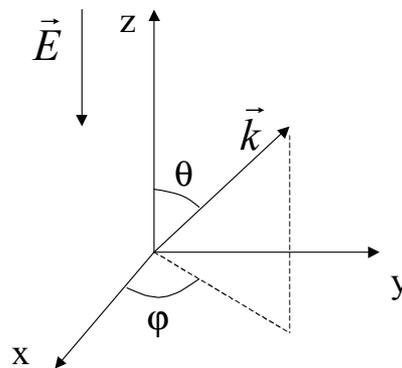


Figure 1 : Coordonnées sphériques utilisées dans l'espace réciproque. Le champ électrique est supposé parallèle à l'axe z.

Soit $[f]$ le vecteur base de l'espace des fonctions de distribution de tous les états électroniques (k, θ, φ) ($[f]_{i,j,l} = f(k_i, \theta_j, \varphi_l)$). Supposons $[A]$ une matrice carrée dans l'espace de ces fonctions de distribution. Montrons qu'il existe $[A]$ tel que :

$$\frac{\partial f(\vec{k}_i, t)}{\partial t} = ([A][f])_i$$

Le calcul de $[A]$ vérifiant la condition précédente suffira à en prouver l'existence.

a) Discrétisation des différents termes

Les termes de sortie et d'entrée, tout comme les probabilités des différentes interactions, ne montrent qu'une dépendance en k , en θ , en k' , en θ' et en d'autres paramètres liés au matériau étudié. La dépendance selon l'angle φ n'est pas prise en compte : les vallées sont supposées de symétrie sphérique ou ellipsoïdales. Pour la bande de conduction du silicium, les surfaces équi-énergie sont effectivement des ellipsoïdes de révolution au moins jusqu'à 1.5 eV au dessus de la bande interdite. Pour la bande de valence, cette approximation est grossière mais la discrétisation en trois dimensions est difficile à mettre en œuvre par une résolution matricielle. La taille de la matrice serait trop importante. En toute rigueur, l'espace de vecteurs d'onde devrait être discrétisé selon les trois dimensions k , θ , φ . Le problème est la taille de la matrice nécessaire pour résoudre l'équation de Boltzmann : 40 valeurs de k , 16 valeurs de θ (de 0 à π) et 5 valeurs de φ (de 0 à $\pi/4$ en tenant compte des symétries) sur trois bandes aboutissent à une matrice carrée de 9600×9600, au-delà des limites du logiciel utilisé.

Pour que $[A]$ puisse exister, il faut discrétiser l'espace (k, θ) (entre 0 et k_{\max} avec un pas Δk pour k , et entre 0 et π avec un pas $\Delta\theta$ pour θ).

L'espace des phases est discrétisé de la manière suivante :

$$k = (k_i)_{i=1..N} \quad \text{avec} \quad k_i = \frac{(i-1)}{(N-1)} k_{\max} + \frac{k_{\max}}{2(N-1)}$$

$$\theta = (\theta_j)_{j=1..L} \quad \text{avec} \quad \theta_j = \frac{(j-1)\pi}{(L-1)}$$

Le choix de L et N se fait empiriquement, en réalisant un bon compromis entre temps de calcul et précision du résultat. Il faut ensuite discrétiser les opérateurs « dérivée » et « intégrale ».

Champ électrique

Le terme de champ électrique s'écrit $\frac{q\vec{E}}{\hbar} \overrightarrow{\text{grad}} f$ avec $\vec{E} = E\vec{e}_z$ soit :

$$\frac{qE}{\hbar} \overrightarrow{\text{grad}} f \cdot \vec{e}_z = \frac{qE}{\hbar} \left(\frac{\partial f}{\partial k} \cos\theta - \frac{1}{k} \frac{\partial f}{\partial \theta} \sin\theta \right)$$

$\frac{\partial f}{\partial \theta}$ peut être exprimée à l'ordre 4 à l'aide des différences finies de la manière suivante

[Nougier83] :

$$\frac{\partial f}{\partial \theta}(k_i, \theta_j) = \frac{1}{\Delta \theta} \left[\frac{2}{3} (f(k_i, \theta_{j+1}) - f(k_i, \theta_{j-1})) - \frac{1}{12} (f(k_i, \theta_{j+2}) - f(k_i, \theta_{j-2})) \right]$$

Collisions

Pour chaque type de collision, dont on connaît la probabilité, il est nécessaire de calculer les termes d'entrée dans l'état (\vec{k}, ε) et de sortie de l'état (\vec{k}, ε) dont voici les formules générales :

Terme de sortie : $\frac{f(\vec{k})}{\tau(\vec{k})}$ avec $\frac{1}{\tau(\vec{k})} = \frac{1}{8\pi^3} \int_{\vec{k}'} P(\vec{k}, \vec{k}') d^3 \vec{k}'$ (intégration sur tous les états

\vec{k}' possibles)

Terme d'entrée : $C.f(\vec{k}) = \frac{1}{8\pi^3} \int_{\vec{k}'} f(\vec{k}') P(\vec{k}', \vec{k}) d^3 \vec{k}'$

Il est donc nécessaire de discrétiser ces opérateurs pour obtenir un système linéaire.

Phonons acoustiques

La probabilité qu'un porteur passe de l'état (\vec{k}', ε') à l'état (\vec{k}, ε) grâce à un phonon acoustique s'écrit par unité de temps [Jacoboni83] :

$$P_{ac}(k, k') = \frac{2\pi E_{ac}^2}{\rho s} |\vec{k} - \vec{k}'| N_{ac} \delta(\varepsilon' - \varepsilon)$$

$$N_{ac} = \frac{1}{\exp(\hbar s |\vec{k}' - \vec{k}| / k_B T)} \approx \frac{k_B T}{\hbar s |\vec{k}' - \vec{k}|}$$

s représente la vitesse du son dans le cristal, ρ la densité du cristal ; E_{ac} est le potentiel acoustique en eV/m. N_{ac} est la fonction de distribution des phonons acoustique à l'équilibre thermodynamique donnée par la statistique de Bose-Einstein, approchée par une statistique de Boltzmann.

Le terme d'entrée s'obtient par intégration sur tous les états \vec{k}' d'énergie ε' . En tenant compte de l'absorption et de l'émission, il s'écrit :

$$C.f(\vec{k}) = \frac{1}{8\pi^3} \int_{\vec{k}'} f(\vec{k}') P(\vec{k}', \vec{k}) d^3 \vec{k}' = A_{ac} \int_{S(\varepsilon')} f(\vec{k}') \frac{dS}{|\vec{\nabla}_{\vec{k}'}(\varepsilon')|}$$

avec $A_{ac} = \frac{k_B T E_{ac}^2}{4\pi^2 \hbar \rho s^2}$ et $\varepsilon' = \varepsilon$.

Terme de sortie : τ_{ac} est le temps de relaxation acoustique : $\lambda_{ac} = \frac{1}{\tau_{ac}} = A_{ac} \int_{S(\varepsilon')} \frac{dS}{|\vec{\nabla}_{\vec{k}'}(\varepsilon')|}$.

$S(\epsilon')$ désigne la surface équi-énergie d'énergie ϵ' dans la vallée d'arrivée. Le terme de sortie est proportionnel à la densité d'états dans l'état d'arrivée.

Dans le cas où les vallées sont supposées isotropes, les surfaces équi-énergie sont des sphères.

Les expressions des termes d'entrée et de sortie se simplifient et deviennent :

$$C.f(\vec{k}) = \frac{1}{8\pi^3} \int_{\vec{k}'} f(\vec{k}') P(\vec{k}', \vec{k}) d^3\vec{k}' = 2\pi A_{ac} \int_0^\pi f(k', \theta') \left| \frac{d\epsilon'}{dk'} \right| \sin \theta' d\theta'$$

$$\lambda_{ac} = \frac{1}{\tau_{ac}} = 4\pi A_{ac} \left| \frac{d\epsilon'}{dk'} \right|$$

Pour les interactions intervallées ou intravallées si l'espace est anisotrope, k tel que $\epsilon(k) = \epsilon(k')$ ne tombe pas forcément sur k_j précisément ; si $k \in [k_j, k_{j+1}]$, le terme d'entrée est réparti sur k_j et k_{j+1} proportionnellement à la distance en énergie.

Phonons optiques

La probabilité qu'un porteur passe de l'état (\vec{k}, ϵ) à l'état (\vec{k}', ϵ') grâce à un phonon optique s'écrit [Jacoboni83] :

$$P_{op}(\vec{k}, \vec{k}') = \frac{\pi \hbar E_{op}^2}{\rho \hbar \omega_{op}} \left(N_{op} + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \right) \delta(\epsilon' - \epsilon \pm \hbar \omega_{op})$$

$\hbar \omega_{op}$ est l'énergie du phonon optique polaire, E_{op} est le potentiel de déformation pour ce type de

collision et $N_{op} = \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar \omega_{op}}{k_B T}\right) - 1}$ est la fonction de répartition des phonons optiques. Les

termes d'entrée et de sortie sont calculés de manière similaire aux phonons acoustiques [Vaissière86]. Ils s'écrivent :

Terme d'entrée :

$$C.f(\vec{k}) = \frac{1}{8\pi^3} \int_{\vec{k}'} f(\vec{k}') P(\vec{k}', \vec{k}) d^3\vec{k}' = A_{op} \int_{S(\epsilon')} f(\vec{k}') \frac{dS}{|\vec{\nabla}_{\vec{k}'}(\epsilon')|}$$

avec $A_{op} = \frac{\hbar E_{op}^2}{8\pi^2 \rho \hbar \omega_{op}} \left(N_{op} + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \right)$ et $\epsilon' = \epsilon \pm \hbar \omega_{op}$

Terme de sortie : τ_{op} est le temps de relaxation optique : $\lambda_{op} = \frac{1}{\tau_{op}} = A_{op} \int_{S(\varepsilon')} \frac{dS}{|\bar{\nabla}_{\vec{k}'}(\varepsilon')|}$

Que l'interaction soit intravallée ou intervallée, si k tel que $\varepsilon(\vec{k}) = \varepsilon(\vec{k}') \pm \hbar\omega_{op}$ ne tombe pas forcément sur k_j précisément, si $k \in]k_j, k_{j+1}[$, le terme d'entrée est réparti sur k_j et k_{j+1} proportionnellement à la distance en énergie.

Potentiel d'alliage

L'interaction avec le potentiel d'alliage est isotrope et élastique. La probabilité est donnée par l'expression suivante [Bufler98] :

$$P_{all}(\vec{k}, \vec{k}') = \frac{\pi}{\hbar} x(1-x) U_{all}^2 \Omega_{cell} \delta(\varepsilon' - \varepsilon)$$

où x est la proportion de Ge dans l'alliage considéré, U_{all} le potentiel d'alliage et Ω_{cell} le volume d'une cellule élémentaire du réseau cristallin : $\Omega_{cell} = a_{\perp} a_{\parallel}^2 / 4$.

Les termes d'entrée et de sortie sont calculés de manière similaire aux phonons acoustiques. Ils s'écrivent :

Terme d'entrée :

$$C.f(\vec{k}) = \frac{1}{8\pi^3} \int_{\vec{k}'} f(\vec{k}') P(\vec{k}', \vec{k}) d^3\vec{k}' = A_{all} \int_{S(\varepsilon')} f(\vec{k}') \frac{dS}{|\bar{\nabla}_{\vec{k}'}(\varepsilon')|}$$

avec $A_{all} = \frac{U_{all}^2}{8\pi^2\hbar} x(1-x)$ et $\varepsilon' = \varepsilon$

Terme de sortie : τ_{all} est le temps de relaxation optique : $\lambda_{all} = \frac{1}{\tau_{all}} = A_{all} \int_{S(\varepsilon')} \frac{dS}{|\bar{\nabla}_{\vec{k}'}(\varepsilon')|}$

b) Résolution

Finalement, une fois l'espace (k, θ) discrétisé et les opérateurs discrétisés, on obtient $\frac{\partial f(\vec{k}_i, t)}{\partial t}$

égale à une combinaison linéaire des fonctions de distribution des différents états où les termes de multiplication dépendent de la vallée, de k et de θ . Il ne reste plus qu'à calculer $[A]$ tel que :

$$\frac{\partial f(\vec{k}_i, t)}{\partial t} = ([A][f])_i.$$

La matrice $[A]$, calculée précédemment, est indépendante du temps. Cette remarque permet d'écrire :

$$\frac{\partial^n f(\vec{k}_i, t)}{\partial t^n} = ([A]^n [f])_i$$

Il en découle le développement de Taylor de f par rapport au temps :

$$f(\vec{k}_i, t + \Delta t) = f(\vec{k}_i, t) + \frac{\Delta t}{1!} ([A][f])_i + \dots + \frac{\Delta t^n}{n!} ([A]^n [f])_i = ([B][f])_i$$

$$\text{où } [B] = [I] + \frac{\Delta t}{1!} [A] + \dots + \frac{\Delta t^n}{n!} [A]^n$$

La méthode de résolution qui découle de ce développement est présentée dans [Vaissière86] : On calcule la matrice $[A]$ et on en déduit $[B]$, par exemple pour $n = 6$. Le calcul de $[f(t + \delta t)]$ est alors facile si l'on a $[f(t)]$, et donc celui de $[f(t + 2\delta t)]$ ne l'est pas moins, et ainsi de suite. Il faut pour commencer ce calcul, donner des conditions initiales pour $f(t = 0)$. On peut prendre par exemple une fonction de Maxwell Boltzmann. Le problème de cette méthode est que pour avoir une solution stationnaire correcte de l'équation, il faut prendre un δt très petit (par rapport à l'inverse de la probabilité d'interaction par unité de temps qu'est le terme de sortie). Ceci entraîne des grands temps de calcul (quelques heures) et demande une grande mémoire mais donne tout de même des résultats satisfaisants.

3) Mobilités des trous dans SiGe massif et contraint : utilisation des masses de densité d'états

La masse de densité d'états fournit à une énergie donnée (l'énergie thermique $3/2 k_B T$) une relation parabolique isotrope comme modèle du diagramme de bande. La mobilité des trous est le rapport entre la vitesse moyenne des trous et le champ électrique lorsque leur énergie moyenne est voisine de l'énergie thermique. Pour chaque température, la relation $E(k)$ est modélisée à l'aide de la masse de densité d'états correspondante pour obtenir une mobilité moyenne isotrope. Ce paragraphe présente une étude de la mobilité en fonction de la température et du pourcentage de Ge dans le SiGe massif et contraint en compression sur silicium.

a) Paramètres utilisés

Pour étudier la mobilité dans le SiGe massif et contraint, pour chaque température, la bande de valence est modélisée par trois bandes isotropes (deux bandes issues de Γ_8 et une issue de Γ_7) dont la masse effective est la masse de densité d'états à la température considérée. Les trous subissent des interactions avec les phonons acoustiques, optiques non polaires, et avec le potentiel d'alliage. L'interaction avec les impuretés ionisées n'est pas prise en compte pour deux raisons. D'une part, les trous se déplacent dans une couche contrainte constituant le canal non

dopé d'un transistor. D'autre part, la modélisation de la diffusion à distance par les impuretés ionisées est difficile à mettre en œuvre dans le cadre d'une résolution déterministe de l'équation de Boltzmann puisqu'elle nécessite une discrétisation très fine de l'espace réciproque.

A l'instar de [Hinckley90] et [Bufler98], les probabilités d'interaction par les phonons dans le SiGe s'expriment comme la somme pondérée par la proportion de Si et de Ge des probabilités d'interaction dans chacun de ces matériaux. Les paramètres des interactions avec les phonons considérés pour les trous dans Si et Ge sont détaillés dans le tableau I.

	Germanium	Silicium
Phonons acoustiques	$E_{ac} = 6,5 \text{ eV}$	$E_{ac} = 5,5 \text{ eV}$
Phonons optiques	$\hbar\omega_{op} = 37 \text{ meV}$ $E_{op} = 9 \times 10^8 \text{ eV/cm}$	$\hbar\omega_{op} = 63 \text{ meV}$ $E_{op} = 8 \times 10^8 \text{ eV/cm}$

Tableau I : Paramètres des interactions des trous avec les phonons du Si et du Ge. Les énergies des phonons optiques sont issues de [Sze81] et les potentiels de déformation sont issus de [Dollfus99].

Le potentiel d'alliage considéré est de $U_{all} = 0.6 \text{ eV}$ [Venkataraman93]. La valeur de ce potentiel varie beaucoup suivant les publications, depuis 0.27 eV [Manku93], jusqu'à 1.4 eV [Briggs98]. Elle est donc sujette à caution, suivant le facteur considéré entre les mobilités calculées par simulation et les mobilités expérimentales de Hall comme l'exposent Fischetti et Laux [Fischetti96]. Toutes ces interactions sont supposées intra et interbandes. L'espace réciproque est discrétisé en 30 valeurs de k entre 0 et k_{max} , correspondant à une énergie de 400 meV (environ dix fois l'énergie thermique à 300 K) et 20 valeurs de θ entre 0 et π .

b) Fréquences d'interaction

Ce paragraphe présente les fréquences d'interaction qui correspondent aux termes de sortie utilisés dans la résolution déterministe de l'équation de Boltzmann. 3 vallées sont prises en compte pour cette résolution. Chacune des interactions considérées est intrabande et interbande donc 24 fréquences d'interaction (3 pour les phonons acoustiques, 3 pour le potentiel d'alliage, 9 pour l'absorption et 9 pour l'émission de phonons optiques) sont évaluées pour le calcul de la mobilité. Seules les fréquences d'interaction intrabandes de la première vallées sont représentées figure 2 et 3. Les valeurs relatives des fréquences d'interactions dépendent de la température, de la composition de Ge dans le SiGe et de la contrainte subie par la couche de SiGe. La figure 2 montre l'influence de la température sur les fréquences d'interaction subies par les trous dans le $\text{Si}_{0,6}\text{Ge}_{0,4}$ contraint sur Si.

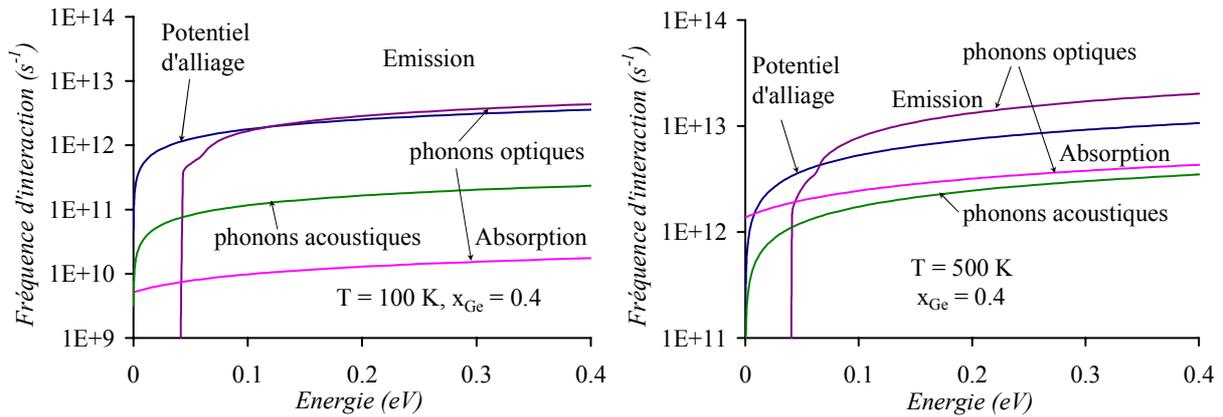


Figure 2 : Fréquences d'interaction subies par les trous dues aux phonons et au potentiel d'alliage dans le $\text{Si}_{0.6}\text{Ge}_{0.4}$ contraint sur Si à $T = 100 \text{ K}$ et $T = 500 \text{ K}$.

La probabilité d'interaction avec les phonons acoustiques dépend linéairement de la température. La fréquence d'interaction correspondante est donc plus importante à 500 K (figure 2 droite) qu'à 100 K (figure 2 gauche). La dépendance en température de la probabilité d'interaction avec les phonons optiques est plus compliquée : l'absorption augmente de plus de deux décades alors que l'émission augmente à peine d'une décade. En effet, l'absorption de phonons dépend de la densité de phonons "fournis" par le réseau cristallin donc varie beaucoup avec la température. L'émission de phonons dépend plutôt de l'énergie de la distribution de porteurs, donc existe aussi à basse température si les porteurs sont énergétiques. Le décrochement observé sur l'émission correspond aux deux types de phonons pris en compte : celui du Si à 63 meV et celui du Ge à 37 meV. Seules les fréquences d'interaction sont combinaisons linéaires des fréquences d'interaction du Si et du Ge : les énergies des deux phonons apparaissent donc.

La probabilité d'interaction avec le potentiel d'alliage ne dépend pas de la température mais la fréquence d'interaction varie : ce phénomène est dû aux variations des masses effectives de densité d'état qui passent de $0.21 m_0$ à 100 K à $0.43 m_0$ à 500K. Dans l'approximation parabolique, la masse effective intervient à la puissance 3/2 dans les fréquences d'interaction qui sont proportionnelles à la densité d'états.

A 100 K, l'énergie thermique est de 12.9 meV : c'est donc l'interaction avec le potentiel d'alliage qui domine à cette température alors qu'à 500 K, l'énergie thermique est de 64.7 meV, énergie correspondant à l'intersection entre les fréquences d'interaction avec le potentiel d'alliage et l'émission de phonons optiques. Même à 500 K, le potentiel d'alliage est le phénomène limitant la mobilité dans le $\text{Si}_{0.6}\text{Ge}_{0.4}$ contraint sur Si.

La figure 3 présente les mêmes fréquences d'interaction que la figure 2 dans le $\text{Si}_{0.9}\text{Ge}_{0.1}$ contraint sur Si.

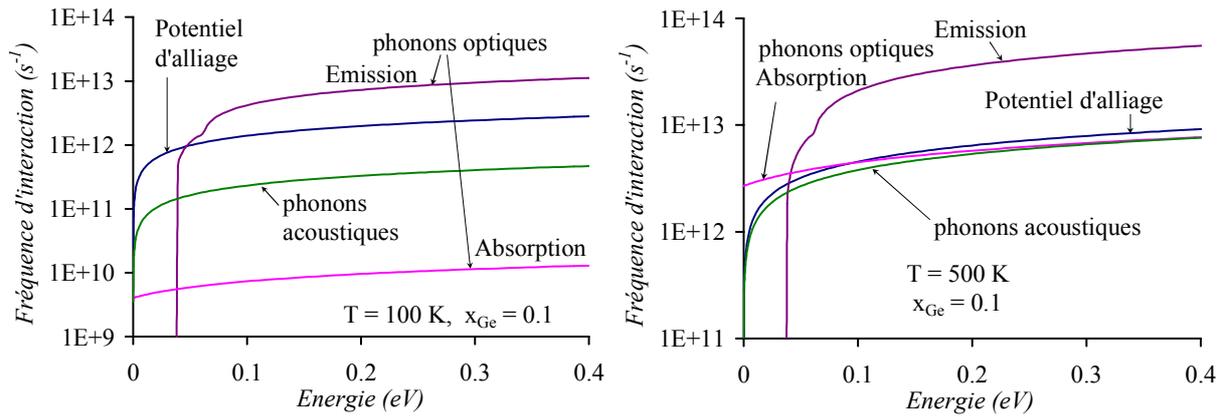


Figure 3 : Fréquences d'interaction subies par les trous dues aux phonons et au potentiel d'alliage dans le $\text{Si}_{0.9}\text{Ge}_{0.1}$ contraint sur Si à $T = 100 \text{ K}$ et $T = 500 \text{ K}$.

Les mêmes dépendances en température des interactions avec les phonons sont observées sur la figure 3 par rapport à la figure 2 : l'absorption de phonons optiques augmente pratiquement de 3 décades lorsque la température passe de 100 à 500 K pour les mêmes raisons que celles énoncées précédemment. La fréquence d'interaction avec le potentiel d'alliage n'a pas diminué, contrairement à ce qu'on pourrait attendre à cause de la diminution de la proportion de Ge : la probabilité d'interaction contient un facteur $x_{\text{Ge}}(1-x_{\text{Ge}})$ qui vaut 0.09 pour le $\text{Si}_{0.9}\text{Ge}_{0.1}$ et 0.24 pour le $\text{Si}_{0.6}\text{Ge}_{0.4}$. Cette diminution attendue est contrariée par une forte augmentation de la masse effective considérée qui passe de $0.21 m_0$ pour le $\text{Si}_{0.6}\text{Ge}_{0.4}$ à $0.34 m_0$ pour le $\text{Si}_{0.9}\text{Ge}_{0.1}$ à 100K et de $0.43 m_0$ pour le $\text{Si}_{0.6}\text{Ge}_{0.4}$ à $0.77 m_0$ pour le $\text{Si}_{0.9}\text{Ge}_{0.1}$ à 500 K. Cependant, comme la densité d'état intervient pour toutes les fréquences d'interaction, ce n'est plus l'effet du potentiel d'alliage qui domine à haute température mais l'émission et l'absorption de phonons optiques. A 100K, c'est toujours le potentiel d'alliage qui domine à l'énergie thermique 12.9 meV.

Toute cette étude des fréquences d'interaction a été faite pour le SiGe contraint. Elle serait similaire pour le SiGe massif pour les interactions intrabandes, excepté la différence des masses de densité d'état. Le principal effet de la contrainte est en effet de limiter les interactions interbandes à faible énergie à cause du décalage des bandes qu'elle induit, outre une profonde modification des masses déjà discutée au chapitre 3, § III. La figure 4 montre une comparaison entre les fréquences d'interaction intrabandes et interbandes dans le $\text{Si}_{0.8}\text{Ge}_{0.2}$ massif et contraint sur Si.

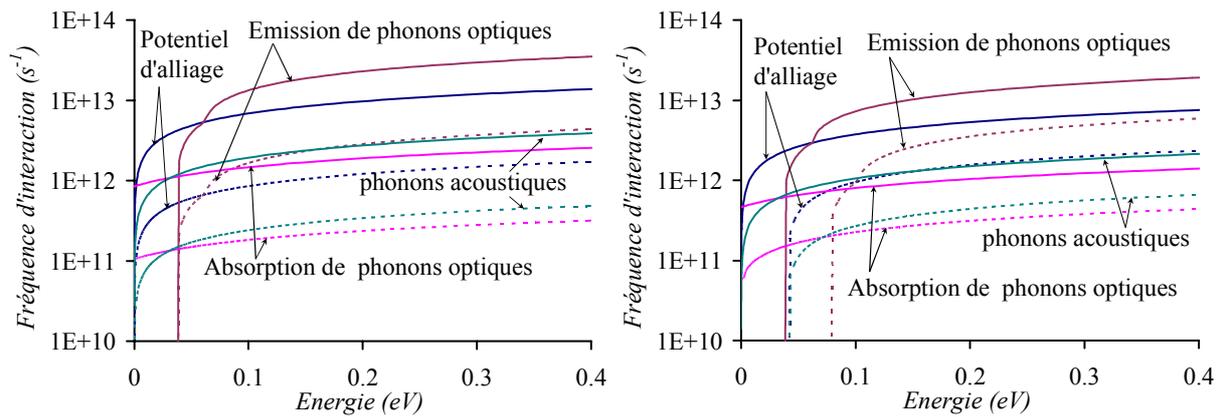


Figure 4 : Fréquences d'interaction subies par les trous dues aux phonons et au potentiel d'alliage à $T = 300$ K dans le $\text{Si}_{0.8}\text{Ge}_{0.2}$ massif (à gauche) et contraint sur Si (à droite). En traits pleins sont représentées les fréquences d'interaction intrabandes pour la bande supérieure et en pointillés les fréquences d'interaction interbandes de la première vers la deuxième bande.

Dans le SiGe massif, les deux premières bandes de valence sont dégénérées en Γ : les interactions interbandes existent même à très faible énergie. Elles font intervenir la masse de densité d'état de l'état d'arrivée, qui correspond ici à la bande des trous légers (LH). Les fréquences d'interaction interbandes de HH vers LH (en pointillés sur la figure 4 gauche) sont plus faibles que les intrabandes de HH vers HH (en traits pleins) à cause de la différence des masses effectives des états d'arrivée ($m_{\text{HH}} = 0.69 m_0$ et $m_{\text{LH}} = 0.17 m_0$ à 300 K).

La contrainte lève la dégénérescence en bande de valence : le décalage entre les deux premières bandes de valence est de 39.8 meV en Γ . Ce décalage est directement visible sur les fréquences d'interactions élastiques (potentiel d'alliage, phonons acoustiques) interbandes qui apparaissent à cette énergie, mais correspond aussi au décalage du terme d'émission de phonons optiques. Dans le SiGe contraint sur Si, la masse effective de densité d'états de la bande élevée ($0.46 m_0$ à 300 K) est supérieure à celle de la bande abaissée ($0.22 m_0$ à 300K), d'où la diminution des fréquences d'interactions interbandes par rapport aux intrabandes.

En tout cas, la contrainte diminue fortement les fréquences d'interactions interbandes à l'énergie thermique 38.8 meV à 300K : seule l'absorption interbande existe pour cette énergie dans le $\text{Si}_{0.8}\text{Ge}_{0.2}$.

Cette étude des taux d'interaction montre donc l'influence cruciale du potentiel d'alliage et les effets bénéfiques, sur la mobilité, de la contrainte qui diminue les interactions interbandes.

c) Mobilités

Ce paragraphe présente une étude de la mobilité moyenne dans le SiGe massif ou contraint sur Si pour des températures de 80 à 500 K. Toutes les mobilités présentées ici ont été calculées par une résolution déterministe de l'équation de Boltzmann prenant en compte les trois premières bandes

de valence supposées isotropes et paraboliques. Les masses effectives, différentes pour chaque température, sont les masses de densité d'états présentées au chapitre 3. La mobilité des trous dans le Si massif a été calculée par cette même méthode et varie de la même manière que [Bufler98], atteignant $380 \text{ cm}^2/\text{V}/\text{s}$ à 300K .

Il n'existe, à notre connaissance, aucune étude de la mobilité des trous en fonction de la température dans le SiGe, mais des données existent à température ambiante. Les mobilités expérimentales des trous dans le SiGe de Busch et Vogt diminuent lorsque le pourcentage de Ge augmente [Busch60]. Le problème est de déterminer le lien entre les mobilités mesurées par effet Hall et les mobilités de dérive pour un matériau non dopé. De plus, la fiabilité de ces mesures est controversée et l'incertitude de mesure est importante [Manku93]. En tout cas, elles montrent l'importance du potentiel d'alliage puisque sans cette interaction, la mobilité des trous atteindrait $950 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ dans le $\text{Si}_{0,8}\text{Ge}_{0,2}$ et $1300 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ dans le $\text{Si}_{0,6}\text{Ge}_{0,4}$ [Fischetti96]. Les résultats de modélisation varient beaucoup selon la valeur du potentiel d'alliage. Un potentiel de 0.7 eV fournit une mobilité à peu près constante de $500 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ à 300 K pour le $\text{Si}_{0,8}\text{Ge}_{0,2}$ et le $\text{Si}_{0,6}\text{Ge}_{0,4}$ [Briggs98], alors que la mobilité diminue avec la concentration de Ge pour un potentiel de 0.9 eV [Fischetti96]. Pour un potentiel d'alliage de 0.6 eV , elle augmente légèrement, comme le montre la figure 5, passant de $380 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ (Si) à $500 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ pour le $\text{Si}_{0,8}\text{Ge}_{0,2}$ et à $650 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ pour le $\text{Si}_{0,6}\text{Ge}_{0,4}$, ce qui est en accord avec l'augmentation obtenue par [Manku93].

Voici figure 5 la mobilité dans le SiGe massif.

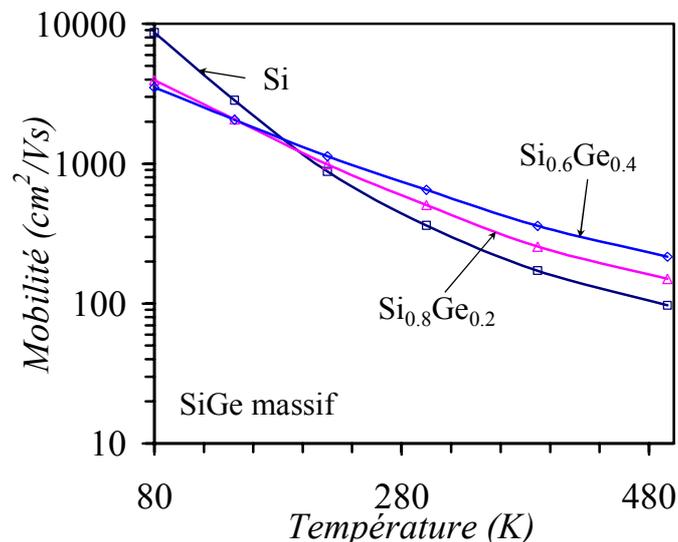


Figure 5 : Mobilité dans le SiGe massif en fonction de la température.

Comme les masses effectives de densité d'état du SiGe diminuent lorsque la proportion de Ge augmente, les mobilités devraient augmenter par rapport au silicium quelle que soit la température. La figure 5 montre que ce n'est pas le cas à basse température : pour $T < 220\text{K}$, la

mobilité du Si est meilleure que celle du SiGe. Le potentiel d'alliage est la cause de cette dégradation de la mobilité. Sa probabilité d'interaction ne décroît pas à basse température contrairement à l'absorption de phonons : la répartition irrégulière des atomes de Ge dans le réseau de SiGe existe et perturbe le transport des trous même à basse température alors que les vibrations du réseau cristallin, qui correspondent à l'absorption de phonons, diminuent comme l'agitation thermique. L'émission de phonons dépend, quant à elle, de la température de la distribution de porteurs ; elle existe toujours à basse température.

En revanche, la mobilité du SiGe contraint sur Si est toujours meilleure que celle du Si sur la gamme de température étudiée comme le montre la figure 6.

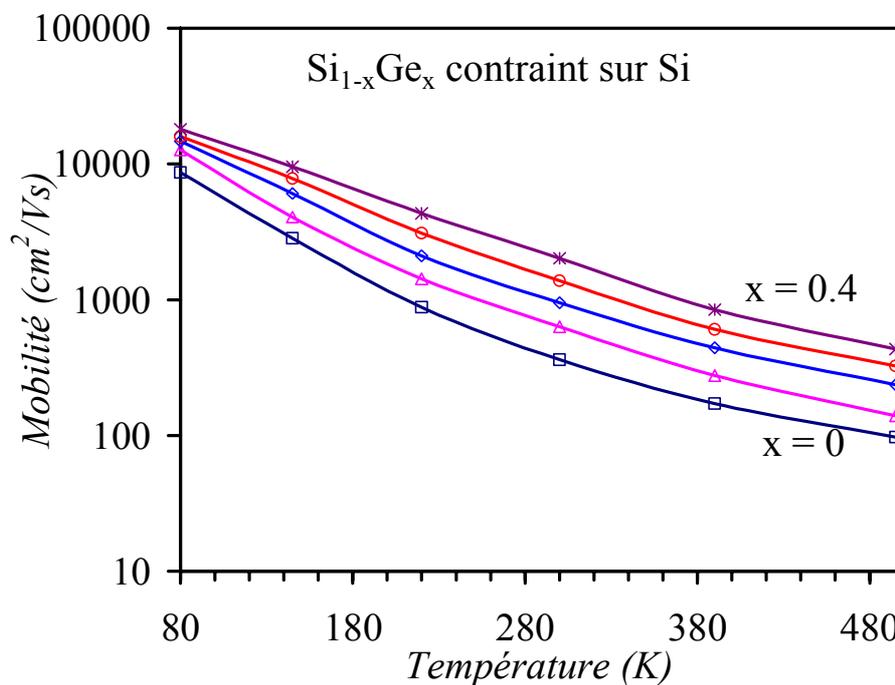


Figure 6 : Mobilité dans le SiGe contraint sur Si en fonction de la température.

La contrainte a plusieurs effets bénéfiques sur la mobilité. Elle lève la dégénérescence en Γ donc la diffusion interbande est réduite grâce au décalage des bandes. Elle diminue la masse effective de densité d'états de la bande supérieure Γ_8'' ce qui diminue les fréquences d'interaction intrabandes proportionnelles à la densité d'états d'arrivée. A basse température, les porteurs peuplent surtout la bande supérieure même pour une faible contrainte, l'énergie moyenne de la distribution étant très inférieure au décalage des bandes. C'est pourquoi la différence entre les mobilités du Si_{0,9}Ge_{0,1} et du Si_{0,6}Ge_{0,4} est plus faible à 80 K qu'à 300 K. Une faible contrainte suffit pour améliorer la mobilité à basse température. Bien sûr, le potentiel d'alliage a toujours tendance

à diminuer la mobilité ce qui contribue aussi à limiter l'écart entre les différentes courbes de la figure 6 à basse température.

A température ambiante, l'augmentation de la mobilité avec la contrainte est cohérente avec d'autres simulations issues de la littérature. Par exemple, pour le $\text{Si}_{0.6}\text{Ge}_{0.4}$ la résolution déterministe mise en oeuvre donne $\mu=2020 \text{ cm}^2/\text{Vs}$, en bon accord avec [Hinckley90] qui obtient la mobilité du Ge pour cet alliage contraint sur Si. Hormis à température ambiante, très peu de données sont disponibles dans la littérature.

La figure 7 présente une comparaison entre les mobilités du SiGe massif et contraint pour deux concentrations différentes de Ge.

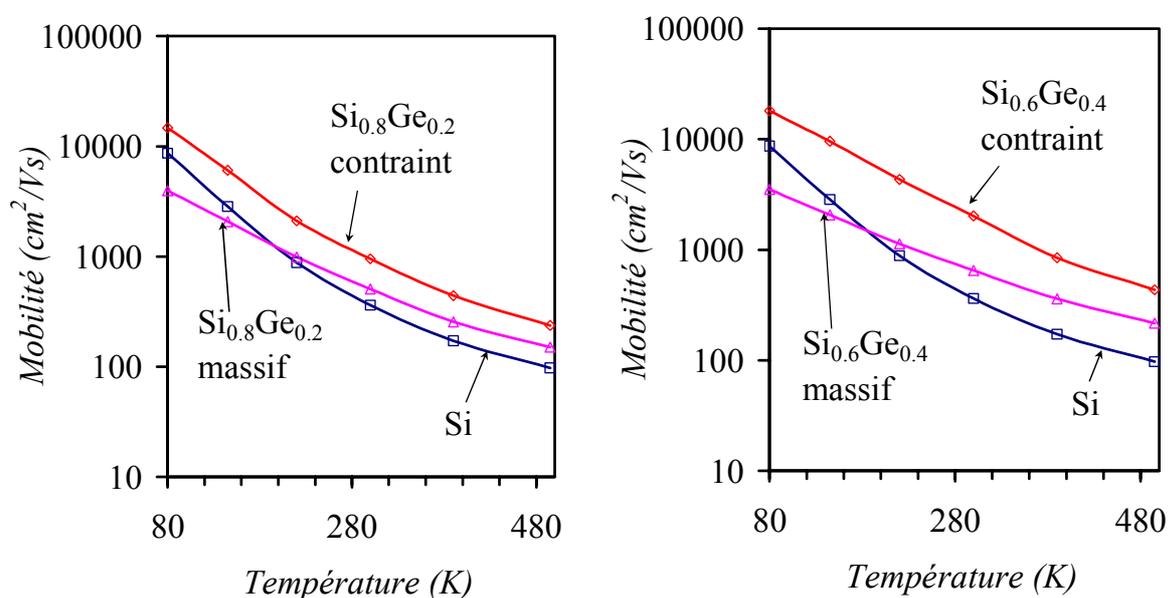


Figure 7 : Mobilité dans le $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ massif et contraint en compression sur Si en fonction de la température. A gauche, $x_{\text{Ge}} = 0.2$. A droite, $x_{\text{Ge}} = 0.4$.

La figure 7 montre les effets bénéfiques de la contrainte en compression sur Si : l'augmentation de la mobilité dans le $\text{Si}_{0.6}\text{Ge}_{0.4}$ contraint par rapport au $\text{Si}_{0.6}\text{Ge}_{0.4}$ massif est plus importante que pour le $\text{Si}_{0.8}\text{Ge}_{0.2}$.

La mobilité du Si massif augmente avec une plus forte pente lorsque la température diminue que celle du $\text{Si}_{0.8}\text{Ge}_{0.2}$, qui a une plus forte pente que la mobilité du $\text{Si}_{0.6}\text{Ge}_{0.4}$: c'est l'effet du potentiel d'alliage, prépondérant à basse température sur la mobilité.

Le calcul des masses de densité d'états présenté au chapitre 3, § III a permis une étude de la mobilité moyenne en fonction de la température. Cette mobilité est dite moyenne car elle ne distingue pas de direction privilégiée, comme la direction de croissance des couches ou le plan des couches. Cette étude nous a permis de détailler les effets de la contrainte sur la mobilité qui ne sont pas seulement liés aux variations de la masse effective. Comme au § b, le décalage des

bandes améliore la mobilité en limitant les interactions interbandes particulièrement à basse température. Cependant, l'introduction des atomes de Ge crée des irrégularités dans le réseau cristallin qui diminuent la mobilité. Ces irrégularités sont modélisées par le potentiel d'alliage. Dans les transistors à effet de champ à hétérostructure, si le matériau utilisé pour le canal est un alliage, l'amélioration de la mobilité grâce à la contrainte sera limitée par le potentiel d'alliage. De ce fait, sans prendre en compte les contraintes technologiques, il peut être judicieux d'utiliser plutôt des matériaux purs comme canaux de transistors. Les paragraphes suivants présentent une étude du transport fort champ électrique des électrons dans le Si contraint sur SiGe et des trous dans le Ge contraint sur SiGe.

4) Transport électronique dans le silicium contraint

Ce paragraphe présente une étude du transport des électrons à fort champ électrique dans le silicium contraint en tension sur SiGe. La relation de dispersion réelle des électrons, présentée § a, est prise en compte pour cette simulation. La couche contrainte de silicium constitue le canal d'un transistor à effet de champ à hétérostructure. Elle n'est donc pas dopée. Nous rappelons d'ailleurs au chapitre 5 quelques uns des très bons résultats obtenus pour ces structures par Mauro Enciso durant sa thèse [Enciso2003]. Seules les interactions avec les phonons sont considérées, détaillées § b. Enfin, le paragraphe c présente quelques résultats de simulation : le peuplement des différentes vallées en fonction du champ électrique, les vitesses et énergies moyennes... Les coefficients d'ionisation par choc seront détaillés § III.

a) Présentation de la structure de bande utilisée

Dans le silicium massif, le minimum d'énergie de la bande de conduction se trouve sur l'axe [100] en k_Δ à 0.85 fois la distance du centre Γ au point X de la première zone de Brillouin. Il existe six vallées équivalentes dans les 6 directions [100]. Dans ces vallées, les surfaces iso-énergie sont des ellipsoïdes de révolution autour des axes [100] centrés en k_Δ . Au voisinage de ce point k_Δ , l'énergie est donnée en première approximation par la relation suivante :

$$E(\vec{k}) = E_{c0} + \frac{\hbar^2}{2m_l} (k_x - k_\Delta)^2 + \frac{\hbar^2}{2m_t} (k_y^2 + k_z^2) \text{ avec } m_l = 0,91m_0 \text{ et } m_t = 0,19m_0$$

L'approximation de la masse effective est valable environ sur 5% de la zone de Brillouin. En revanche, les vallées Δ restent des ellipsoïdes de révolution jusqu'à environ 1.5 eV au dessus du minimum de la bande de conduction comme le montre la figure 8. La symétrie de révolution étant maintenue, l'espace des phases n'est discrétisé que selon θ et k . L'énergie s'écrit alors :

$$E(\vec{k}) = E(k, \theta) = E(k) \left(\sin^2 \theta + \frac{m_t}{m_l} \cos^2 \theta \right)$$

où $E(k)$ est la relation obtenue en \mathbf{k}, \mathbf{p} 30 bandes dans la direction transverse de la vallée Δ .

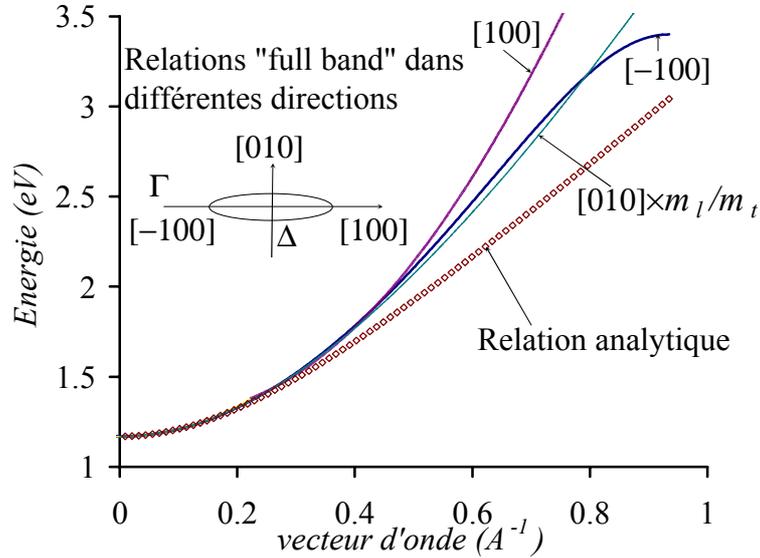


Figure 8 : Relations de dispersion réelles pour les vallées Δ du silicium pour $\theta = 0$ (direction [100]), $\theta = \pi$ (direction [-100]) et $\theta = \pi/2$ (direction [010]), comparées à la relation analytique

habituellement prise en compte $E(1 + \alpha E) = \frac{\hbar^2}{2m_l} (k_x - k_\Delta)^2 + \frac{\hbar^2}{2m_t} (k_y^2 + k_z^2)$ avec $\alpha = 0.5$.

Les autres vallées prises en compte pour la simulation du transport sont récapitulées dans le tableau II. Elles sont supposées soit de symétrie sphérique (vallée Γ) soit ellipsoïdales (vallées L).

Vallée L_1	$m_l = 1.65 m_0$ et $m_t = 0.128 m_0$	$\Delta - L_1 = 1.25$ eV
Vallée Γ	$m = 0.18 m_0$	$\Delta - \Gamma = 3.01$ eV
Vallée L_2	$m_l = 1.18 m_0$ et $m_t = 0.28 m_0$	$\Delta - L_2 = 3.36$ eV

Tableau II : Vallées prises en compte pour la simulation du transport fort champ dans le Si.

La contrainte en tension du silicium abaisse les vallées Δ_2 dans l'axe de croissance des couches, par rapport aux vallées Δ_4 dans le plan des couches mais ne modifie pratiquement pas les masses effectives [Richard2003]. Les quatre vallées L_1 restent équivalentes, de masse effective inchangée par la contrainte. L'effet de la contrainte est négligé pour les vallées supérieures.

Après avoir décrit la structure de bande considérée pour le transport des électrons dans le silicium massif et contraint, le paragraphe suivant présente les fréquences d'interaction prises en compte pour les interactions avec les phonons.

b) Fréquences d'interaction

Les phonons, qu'ils soient acoustiques ou optiques, interagissent avec les porteurs de charge et obéissent aux principes de conservation de l'énergie et du moment. Dans le silicium, ces phonons peuvent induire des transitions intravallées et intervallées. Les mêmes probabilités d'interaction sont prises en compte dans le silicium massif et dans le silicium contraint sur SiGe.

Dans les vallées Δ , les transitions intravallées sont permises par des interactions électron-phonon acoustique de faible vecteur d'onde. Les transitions intervallées peuvent être induites aussi bien par des phonons acoustiques qu'optiques. Le phonon mis en jeu est toujours un phonon de grand vecteur d'onde dont le module, pratiquement constant, est égal à la distance entre les minima des vallées initiale et finale. Deux types de processus permettent le transfert d'un électron entre deux vallées Δ ; en assimilant la direction d'une vallée à celle de son axe longitudinal, on appelle respectivement processus f et g les transferts entre vallées perpendiculaires et parallèles. Dans ces deux cas, le transfert se fait par des phonons conduisant à l'extérieur de la zone de Brillouin dans laquelle l'électron revient par addition d'un vecteur du réseau réciproque.

Selon [Dollfus99], les phonons d'ordre 0 ont une énergie minimale trop élevée (46.3 meV) pour obtenir un bon accord entre les mobilités théoriques et expérimentales en fonction de la température c'est pourquoi il introduit des phonons d'ordre 1, dont l'élément de matrice de transition dépend de la différence des vecteurs d'onde $\vec{k} - \vec{k}'$, à l'instar de [Ferry76]. Le tableau III récapitule les paramètres de ces interactions avec les phonons.

phonons	Energie (eV)	Potentiel de déformation
acoustique		9.0 eV
intervallée f d'ordre 0	46.3 ; 59.1	3.4×10^8 eV/cm ; 3.4×10^8 eV/cm
intervallée f d'ordre 1	21.9	3.0 eV
intervallée g d'ordre 0	63.2	3.4×10^8 eV/cm
intervallée g d'ordre 1	11.4 ; 18.8	3.0 eV ; 3.0 eV

Tableau III : Paramètres des interactions avec les phonons à faible champ [Dollfus99]

Cependant, Hess propose d'autres énergies de phonons tous d'ordre 0, ce qui simplifie la modélisation du transport. En effet, les collisions d'ordre 1 sont anisotropes donc les fréquences d'interactions associées ne dépendent pas seulement de la densité d'états d'arrivée. Le tableau IV récapitule ces autres paramètres [Hess2000].

phonons	Energie (eV)	Potentiel de déformation (eV/cm)
acoustique		9.5 eV
intervallée f	19.0 ; 47.4 ; 59.1	3×10^7 ; 2×10^8 ; 2×10^8
intervallée g	12.1 ; 18.6 ; 62.1	5×10^7 ; 8×10^7 ; 1.1×10^9

Tableau IV : Paramètres des interactions avec les phonons en vallée Δ [Hess2000].

La figure 9 montre les fréquences d'interactions intravallées subies par les électrons d'une vallée Δ dans le silicium massif, en prenant en compte les phonons de [Dollfus99] pour la figure de gauche et ceux de [Hess2000] pour la figure de droite.

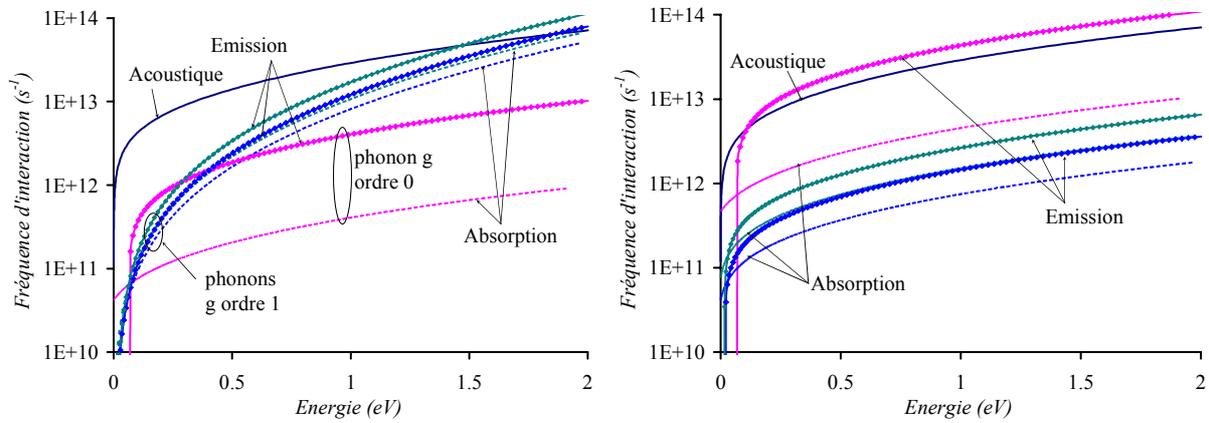


Figure 9 : Fréquences d'interactions intravallées subies par les électrons d'une vallée Δ du silicium massif, avec les paramètres de [Dollfus99] à gauche et de [Hess2000] à droite.

La modélisation du transport électronique du silicium présentée ici prend en compte les phonons de [Hess2000] pour des raisons de simplicité. A faible champ électrique, les deux modèles donnent des résultats en bon accord avec ceux de la littérature, mais à fort champ électrique, le modèle de [Dollfus99] donne une vitesse de saturation trop faible.

c) Résultats de simulation du transport

Pour valider notre méthode de simulation du transport, voici figure 10 une comparaison des vitesses et énergies moyennes des électrons dans le silicium massif obtenue par notre méthode, expérimentalement [Canali75], et par simulation Monte Carlo [Fischetti88].

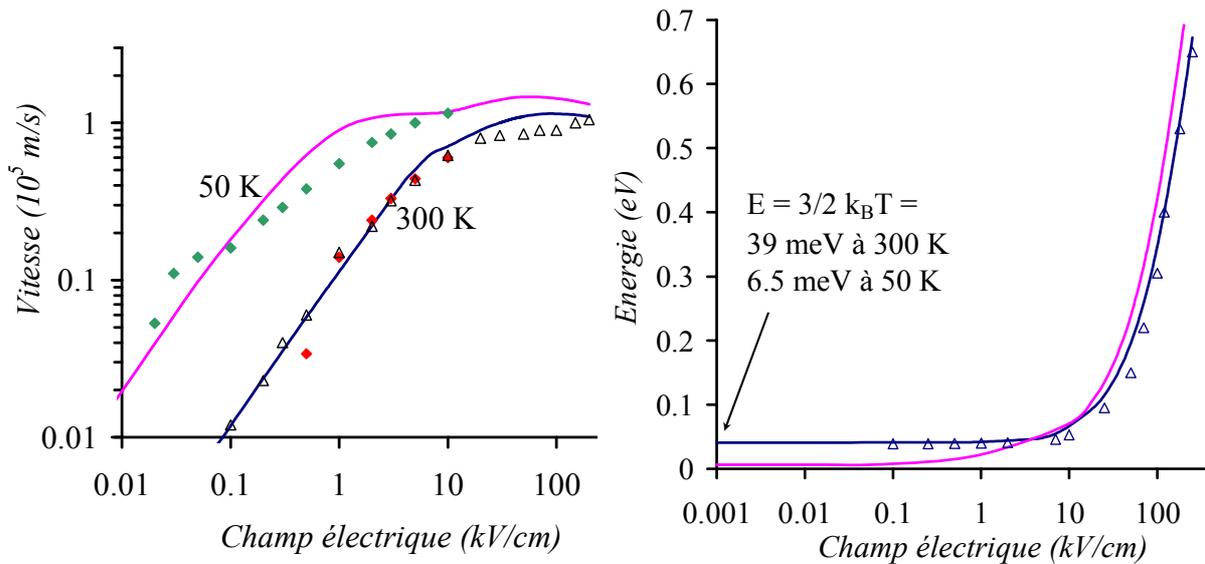


Figure 10 : Vitesses et énergies des électrons dans le silicium massif, obtenues expérimentalement (losanges) [Canali75], par simulation Monte Carlo à 300 K (triangles) [Fischetti88] et par ce travail (traits pleins) à $T = 50\text{ K}$ et $T = 300\text{ K}$.

En régime de mobilité, l'énergie des porteurs est une constante $E_{th} = \frac{3}{2}k_B T$ où k_B est la constante de Boltzmann, et la vitesse des porteurs croît linéairement avec le champ électrique : $\vec{v} = \mu \vec{E}$. Ce régime est celui des électrons dans le silicium jusqu'à environ 2 kV/cm à 300 K avec une mobilité $\mu = 1400\text{ cm}^2/\text{Vs}$ et seulement jusqu'à 0.01 kV/cm à 50 K avec $\mu = 20000\text{ cm}^2/\text{Vs}$. Au delà de cette zone, la vitesse décroît et sature autour de 10^7 cm/s à 300 K et $1.15 \times 10^7\text{ cm/s}$ à 50 K. Les résultats obtenus par simulation déterministe de l'équation de Boltzmann sont en bon accord avec les résultats expérimentaux existants [Canali75].

Le principal effet de la contrainte pour la bande de conduction du silicium est de diminuer l'énergie des vallées Δ_2 dans l'axe de croissance des couches par rapport aux vallées Δ_4 , sans modifier leur courbure. A faible champ électrique, les électrons peuplent donc massivement ces vallées Δ_2 comme le montre schématiquement la figure 11.

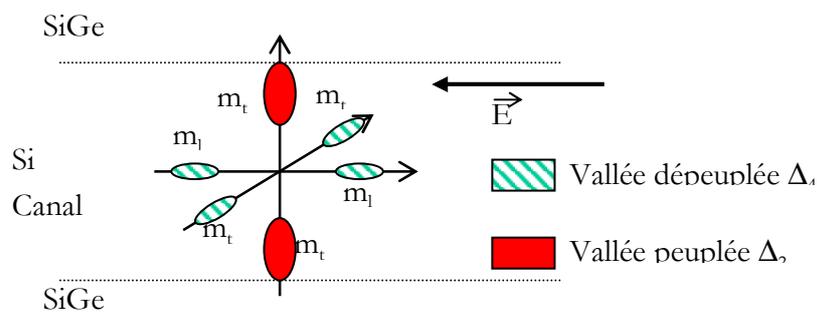


Figure 11 : Effet de la contrainte sur les vallées Δ du silicium contraint à faible champ électrique.

Si la couche contrainte constitue le canal d'un transistor, dans la direction du champ électrique, les électrons présenteront une masse transverse plus faible que la masse moyenne limitant la mobilité dans le silicium massif. De plus, à cause du décalage en énergie des vallées Δ_2 et Δ_4 , les interactions intervalle mettant en jeu des phonons f seront réduites. Enfin, avant même l'application d'un champ, le peuplement des vallées dépend de la température : à basse température, les électrons peuplent presque exclusivement les vallées Δ_2 alors que lorsque la température augmente, l'énergie moyenne de la distribution à l'équilibre augmente donc les électrons commencent à peupler aussi les vallées Δ_4 . Cette étude sommaire laisse prévoir une amélioration de la mobilité grâce à la contrainte. L'objectif de ce paragraphe est de quantifier cette amélioration à basse et haute température. La figure 12 présente la vitesse électronique dans le silicium massif et contraint en tension sur $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ à 300 K.

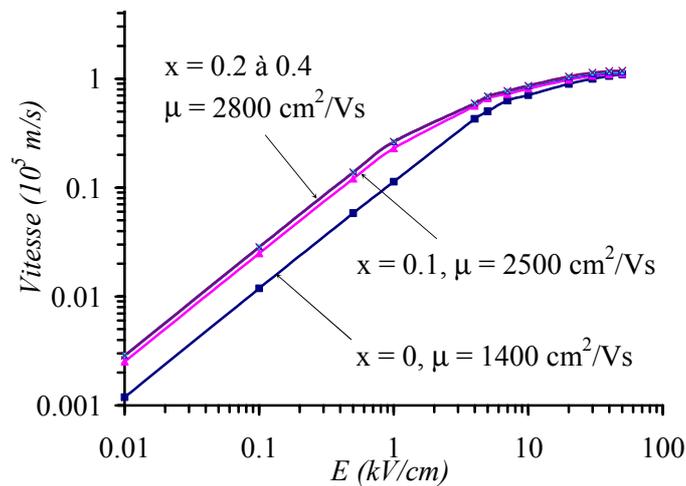


Figure 12 : Vitesse des électrons dans Si massif ou contraint sur $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ pour $x < 0.4$ à $T = 300$ K, pour un champ électrique dans le plan des couches.

D'après la figure 12, la contrainte améliore la mobilité, qui double lorsque le silicium est contraint sur $\text{Si}_{0.8}\text{Ge}_{0.2}$ par rapport au silicium massif. Les valeurs de mobilité concordent avec les valeurs obtenues expérimentalement par [Ismail93] qui obtient $2830 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ à 300K pour du Si contraint sur $\text{Si}_{0.7}\text{Ge}_{0.3}$. Au-delà de 20 % de Ge dans le substrat, augmenter la contrainte ne permet plus d'améliorer la mobilité. Pour cette concentration de Ge, le décalage des vallées Δ_4 et Δ_2 est de l'ordre de 130 meV, supérieure à 3 fois l'énergie moyenne de la distribution d'électrons en régime de mobilité. A température ambiante, les vallées Δ_4 sont entièrement dépeuplées au profit des vallées Δ_2 donc la mobilité obtenue correspond aux vallées Δ_2 seules et ne peut plus être améliorée par la contrainte [Rashed95]. L'intérêt d'augmenter encore la proportion de Ge dans le

substrat n'est plus l'amélioration de la mobilité mais seulement l'augmentation de la hauteur de barrière entre zone dopée et canal pour améliorer le confinement des porteurs en particulier à plus forte énergie.

A basse température, l'amélioration de la mobilité sature pour un très faible pourcentage de Ge : à 77 K, l'énergie moyenne de la distribution en régime de mobilité est de 10 meV et le décalage des vallées Δ_2 et Δ_4 est déjà de 65 meV pour du Si contraint sur $\text{Si}_{0,9}\text{Ge}_{0,1}$ soit 6 fois l'énergie thermique [Miyata93]. La figure 13 montre une comparaison des vitesses dans le Si massif et contraint sur $\text{Si}_{0,6}\text{Ge}_{0,4}$ à $T = 50$ K.

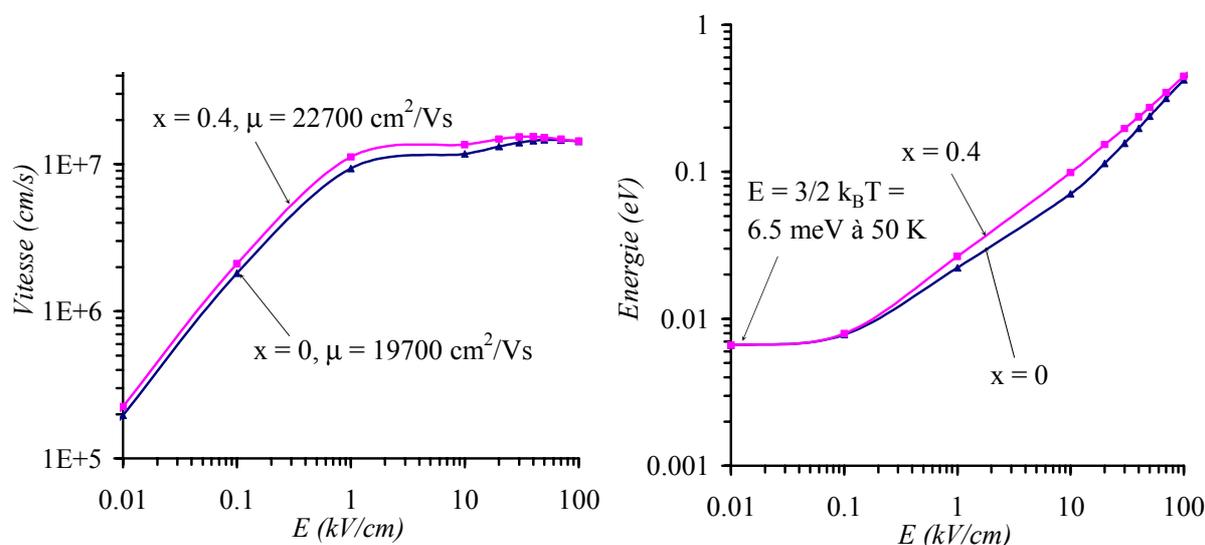


Figure 13 : Evolution de la vitesse électronique et de l'énergie moyenne des électrons en fonction du champ électrique à $T = 50$ K pour du Si massif et contraint sur $\text{Si}_{0,6}\text{Ge}_{0,4}$.

La contrainte améliore un peu la mobilité à basse température mais beaucoup moins qu'à 300 K. En effet, les interactions avec les phonons sont déjà faibles à cette température. Le décalage des bandes les atténue mais ce phénomène a moins de conséquences sur la mobilité. L'énergie moyenne des électrons augmente plus rapidement dans le silicium contraint à cause de l'amélioration de la mobilité.

A fort champ électrique, quelle que soit la température, la vitesse des électrons dans le Si contraint sature au même niveau que celle du silicium massif. L'effet du décalage des bandes ne se voit plus sur le peuplement des vallées. La figure 14 présente les fonctions de distribution dans les vallées Δ_4 et Δ_2 du silicium massif et contraint pour un champ de 20 et 100 kV/cm.

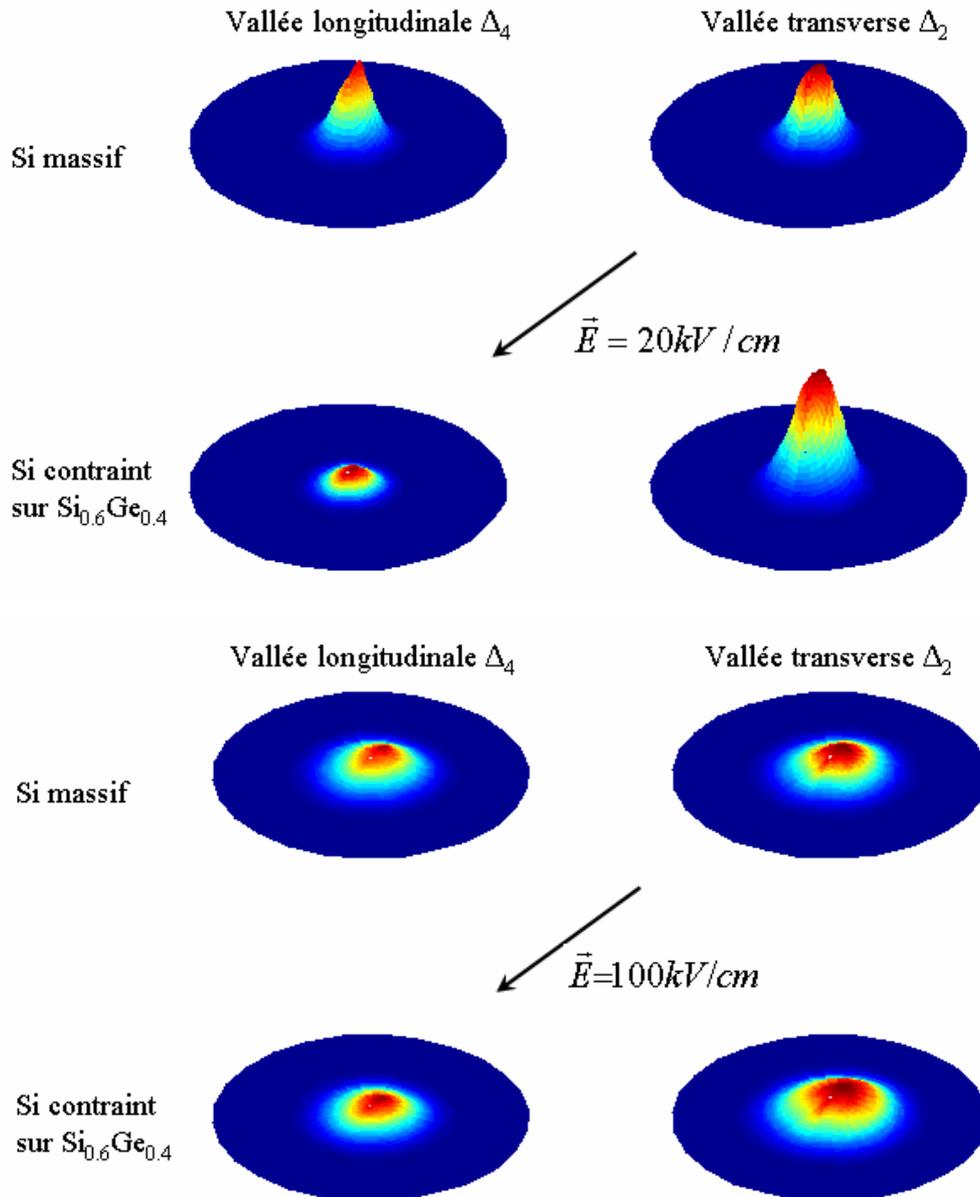


Figure 14 : Fonctions de distribution dans les vallées longitudinale Δ_4 et transverse Δ_2 du silicium massif et contraint sur $\text{Si}_{0.6}\text{Ge}_{0.4}$ pour des champs électriques de 20 et 100 kV/cm à $T = 300 \text{ K}$.

A 20 kV/cm, dans le Si contraint, les porteurs peuplent encore essentiellement la vallée Δ_2 de mobilité plus importante que la vallée Δ_4 , l'influence de la contrainte est encore visible sur la vitesse moyenne des porteurs plus grande dans le Si contraint ($1.05 \times 10^7 \text{ cm/s}$ vs. $9 \times 10^6 \text{ cm/s}$). En revanche, à 100 kV/cm, la répartition des porteurs entre les vallées Δ dans le silicium contraint est pratiquement identique à celle du Si massif. La contrainte n'a plus d'effet sur la vitesse à fort champ électrique. La figure 15 représente le peuplement relatif des bandes en fonction du champ électrique.

5) Transport des trous dans le germanium contraint

Ce paragraphe présente une étude du transport des trous à fort champ électrique dans le germanium contraint en compression sur SiGe. La relation de dispersion réelle des trous est très anisotrope. Les surfaces équi-énergie du germanium sont aussi accidentées que celles du silicium présentées au chapitre 3, § III. Une simulation tridimensionnelle réelle serait nécessaire mais très gourmande en taille de matrice pour une résolution déterministe. C'est pourquoi une relation $E(k)$ moyenne pour chacune des bandes est prise en compte pour cette simulation. Le calcul de cette relation est présenté § a. Comme pour le Si (§ 4), la couche contrainte de germanium constitue le canal non dopé d'un transistor à effet de champ à hétérostructure. Seules sont considérées les interactions avec les phonons, détaillées § b. Enfin, le paragraphe c présente quelques résultats de simulation : le peuplement des différentes vallées en fonction du champ électrique, les vitesses et énergies moyennes... Enfin, les coefficients d'ionisation par choc seront détaillés § III.

a) Structure électronique

La bande de valence du germanium massif est constituée de 3 vallées centrées en Γ , celle des trous lourds, des trous légers et celle découplée par interaction spin-orbite. La vallée découplée par spin-orbite est réellement de symétrie sphérique sur une large gamme d'énergie. En revanche, les deux autres vallées sont très anisotropes, surtout la bande des trous lourds dans le Ge massif, ou élevée dans le Ge contraint. La véritable structure de bande est délicate à prendre en compte dans le cadre d'une résolution déterministe de l'équation de Boltzmann parce qu'une discrétisation selon les trois dimensions (k, θ, φ) imposerait une matrice de trop grande taille.

En Monte Carlo, le calcul des termes d'entrée est inutile et le calcul des termes de sortie (fréquences d'interaction) fait seulement intervenir la densité d'états. C'est pourquoi la mise en œuvre d'un véritable calcul « Full Band » en bande de valence semble plus abordable en Monte Carlo. Julien Vigroux, stagiaire DEA encadré par Philippe Dollfus, a d'ailleurs commencé à introduire la description complète de la structure de la bande de valence du silicium massif calculée en $\mathbf{k.p}$ 30 bandes (chapitre 2, § IV) dans un algorithme Monte Carlo développé au sein du laboratoire.

Néanmoins, la simulation matricielle du transport des trous dans le germanium prend en compte une structure de bande de symétrie sphérique, qui a la même densité d'états que la structure réelle à chaque énergie. Autrement dit la relation $\epsilon_n(k)$ est calculée de façon à vérifier pour chaque bande n d'énergie réelle $E_n(\vec{k})$ et de densité $g_n(E)$:

$$g_n(E) = \int \frac{d\vec{k}}{4\pi^3} \delta(E - E_n(\vec{k})) = \int_{S_n(E)} \frac{dS}{4\pi^3} \frac{1}{|\vec{\nabla}_k(E_n)|} = \int_{\theta=0}^{\pi} \int_{\phi=0}^{2\pi} \frac{1}{4\pi^3} \frac{k^2 \sin\theta d\theta d\phi}{\frac{dE_n}{dk}} = g_n(\varepsilon)$$

Pour la mobilité des trous dans les alliages SiGe à une température donnée T (§ 3), la relation de dispersion utilisée était parabolique de masse effective la masse de densité d'états à cette température T . Seule la densité d'états à l'énergie thermique $E=3/2k_B T$ est nécessaire pour obtenir toute la relation de dispersion utilisée pour le calcul de la mobilité à T .

L'approche présentée ici pour le Ge est différente : le calcul de la relation de dispersion à une température donnée $T = 300$ K fait intervenir la densité d'états $g_n(E)$ sur toute la gamme d'énergie discrétisée et pas seulement à $E=3/2k_B T$. La relation ainsi obtenue est, certes, isotrope mais n'est plus du tout parabolique. La figure 15 présente l'allure de la structure de bande ainsi calculée dans le Ge massif et contraint sur $\text{Si}_{0.4}\text{Ge}_{0.6}$.

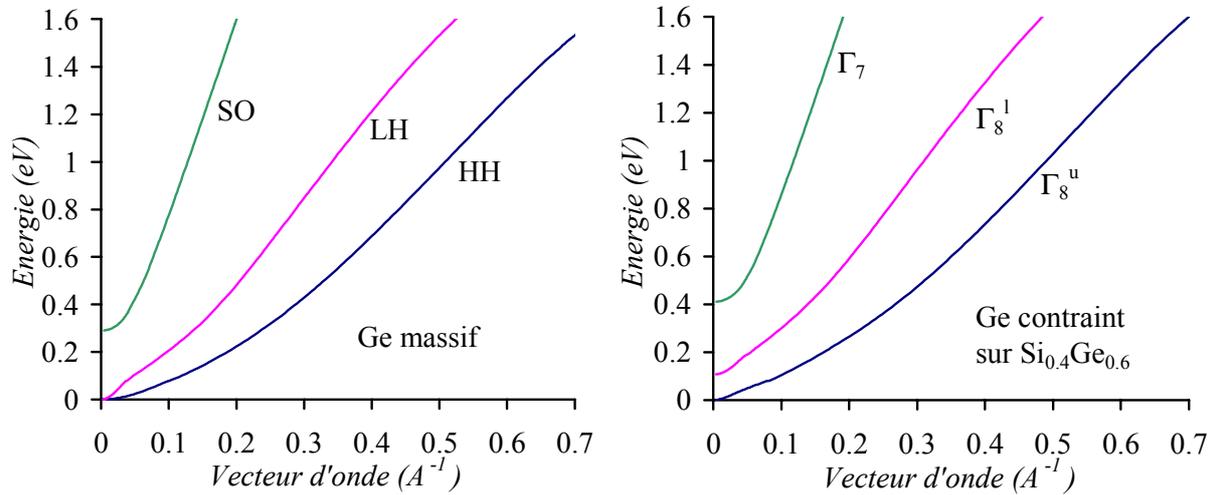


Figure 15 : Relations de dispersion prises en compte pour le transport des trous dans le Ge massif (à gauche) et contraint sur $\text{Si}_{0.4}\text{Ge}_{0.6}$ (à droite).

Cette structure de bande fournit les mêmes fréquences d'interaction qu'un véritable modèle « full band ». En revanche, l'interaction avec le champ électrique, anisotrope par définition, est moins bien prise en compte. En particulier dans le Ge contraint, les directions perpendiculaire et parallèle au plan des couches ne pourront pas être distinguées. Pour l'étude des propriétés de transport à fort champ dans le Ge, ce défaut n'est pas rédhibitoire : la différence entre ces modes de transport est surtout visible en régime de mobilité. Le paragraphe suivant présente les taux d'interaction pris en compte dans la résolution du transport.

b) Fréquences d'interaction

Comme dans le silicium, les seules interactions considérées sont les interactions avec les phonons acoustiques et optiques qui provoquent chacun des collisions intra et inter bandes. Les

paramètres de ces interactions sont rappelés tableau I (§ 3, page 110). L'allure des fréquences d'interaction est présentée figure 16.

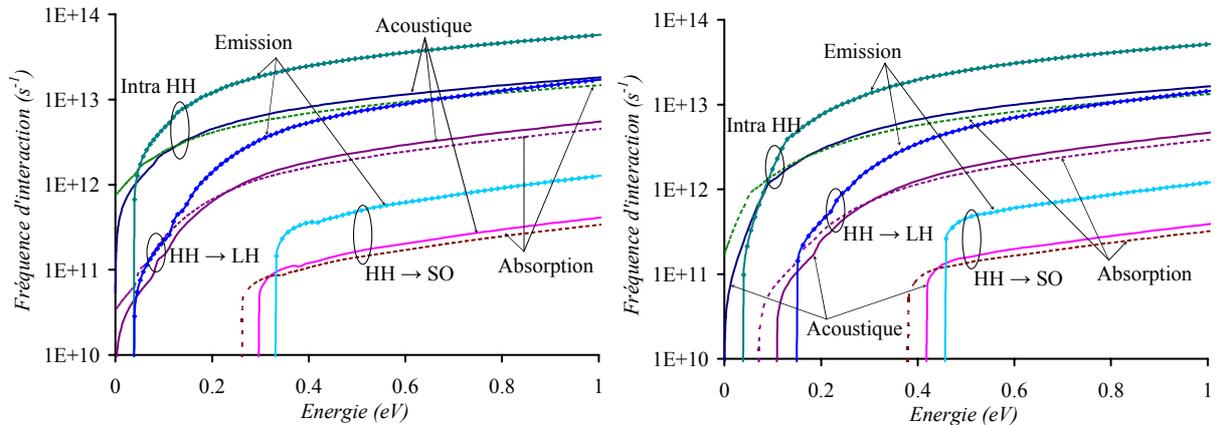


Figure 16 : Fréquences d'interaction subies par les trous de la vallée supérieure (HH) dans le germanium massif (à gauche) et contraint (à droite).

Comme dans le SiGe, la contrainte diminue les fréquences d'interaction à faible énergie, à cause du décalage qu'elle provoque. L'allure des fréquences d'interaction est plus accidentée que pour le SiGe. Même si la relation de dispersion prise en compte ne traduit pas l'anisotropie de la bande de valence, elle n'est pas analytique ce qui se traduit sur les fréquences d'interaction.

c) Résultats de simulation du transport

La contrainte modifie fortement la mobilité des trous dans le Ge. Dans le Ge massif, la mobilité des trous atteint $1950 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ alors qu'elle atteint $4860 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ dans le Ge contraint sur $\text{Si}_{0.4}\text{Ge}_{0.6}$. La figure 17 montre une comparaison entre les vitesses et énergies moyennes dans le Ge massif et contraint en fonction du champ électrique.

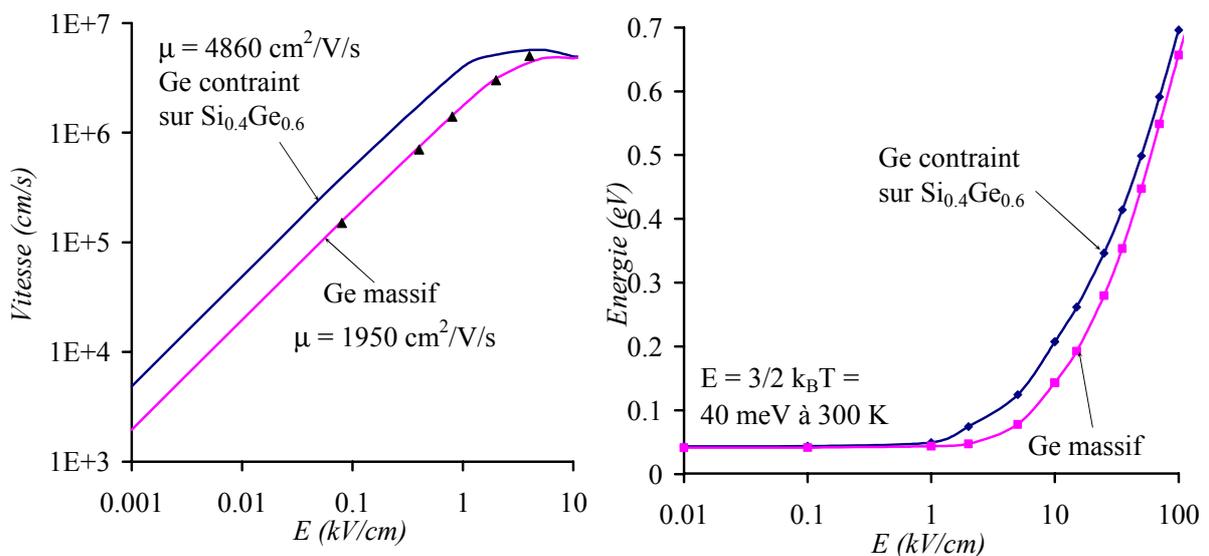


Figure 17 : Vitesse et énergie moyenne des trous dans le Ge massif et contraint sur $\text{Si}_{0.4}\text{Ge}_{0.6}$ en fonction du champ électrique à $T = 300\text{K}$. Les triangles représentent les résultats de [Yamada94].

La mobilité obtenue dans le Ge contraint en compression sur $\text{Si}_{0.4}\text{Ge}_{0.6}$ est comprise entre les valeurs de mobilité dans le plan des couches ($10000 \text{ cm}^2/\text{Vs}$) et dans l'axe de croissance des couches ($4000 \text{ cm}^2/\text{Vs}$) issues de [Fischetti96].

Les trous restent en régime de mobilité jusqu'à environ 2 kV/cm dans le Ge massif, mais seulement jusqu'à 1 kV/cm dans le Ge contraint. En effet, comme nous l'avons vu pour le SiGe (§ 3), la contrainte limite les interactions ce qui favorise le gain d'énergie des porteurs. L'absence de potentiel d'alliage permet d'atteindre des mobilités dans le Ge contraint beaucoup plus importantes que dans le SiGe contraint. Les transistors à effet de champ à hétérojonction à canal Ge contraint sur SiGe par rapport au SiGe contraint sur Si atteignent ainsi des performances hyperfréquences et en bruit records [Enciso2003].

La modélisation le transport dans le canal d'un transistor de quelques nm nécessite de prendre en compte le confinement des porteurs. C'est l'objectif de la partie suivante.

II. Transport en gaz bidimensionnel

Dans un transistor à effet de champ à hétérostructure, le canal forme un puits quantique dans lequel les porteurs sont confinés suivant la direction perpendiculaire aux couches. Le mouvement des trous est libre dans le plan des couches, il est donc limité à deux dimensions. De plus ce puits de potentiel entraîne une quantification des états dans la direction z . Il en résulte une structure de sous-bandes avec une quantification discrète suivant k_z qui est prise en compte par le formalisme de la fonction enveloppe.

Pour simuler le transport des porteurs de charge dans ce canal, l'équation de transport de Boltzmann est modifiée pour prendre en compte cette quantification suivant l'axe z (§ 1). La résolution déterministe « full band » de cette équation a été mise en œuvre dans le cadre du stage DEA de Cédric Renaud pour un puits de Ge contraint sur SiGe. Les premiers résultats sur le transport en gaz bidimensionnel sont présentés § 2. Une telle modélisation n'a, à notre connaissance, jamais été entreprise.

1) Présentation de l'équation de Boltzmann en gaz bidimensionnel

L'équation de Boltzmann en gaz bidimensionnel donne accès à la fonction de distribution $f(\vec{k}_\rho, \vec{r}, t)$ avec $\vec{k}_\rho = k_x \vec{e}_x + k_y \vec{e}_y$. k_z est fixé pour chacune des sous-bandes. Cette équation s'écrit toujours comme un bilan entrée-sortie de porteurs mais l'expression des probabilités d'interaction est modifiée pour prendre en compte la quantification suivant k_z . Un terme de recouvrement des fonctions enveloppes apparaît. L'expression de l'interaction avec le champ électrique, supposé parallèle au plan des couches est inchangée. L'équation de transport de Boltzmann s'écrit donc en deux dimensions :

$$\frac{\partial f(\vec{k}_\rho, t)}{\partial t} = -\frac{q\vec{E}}{\hbar} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{k}_\rho} f + \frac{1}{4\pi^2} \int_{\vec{k}'_\rho} P(\vec{k}'_\rho, \vec{k}_\rho) f(\vec{k}'_\rho) - P(\vec{k}_\rho, \vec{k}'_\rho) f(\vec{k}_\rho) d\vec{k}'_\rho$$

où $\frac{1}{4\pi^2}$ est un terme de normalisation et $P(\vec{k}_\rho, \vec{k}'_\rho)$ la probabilité par unité de temps qu'une particule passe de l'état \vec{k}_ρ à l'état \vec{k}'_ρ . Les interactions envisagées sont les mêmes qu'en trois dimensions : collisions avec les phonons et potentiel d'alliage. Les termes d'entrée et de sortie dus aux interactions sont détaillés § a.

a) Expression des termes d'interactions

On considère un gaz 2D de porteurs confinés dans un puits quantique carré de longueur $2a$. La fonction d'onde des porteurs de la sous bande n , développée sur les parties périodiques des fonctions de Bloch $u_{l,k_0}(\vec{r})$, peut s'écrire sous la forme d'un produit d'une fonction de z (fonction enveloppe) par une onde plane dans le plan xy , comme présenté au chapitre 2, § VI :

$$\psi_{k_0}(\vec{r}) = \sum_l \exp(i\vec{k}_\rho \cdot \vec{\rho}) \chi_l(z) u_{l,k_0}(\vec{r})$$

On pose : $\rho = (x, y)$, $\vec{r} = (\rho, z)$

La probabilité d'interaction par unité de temps pour qu'un porteur aille de l'état \vec{k}_ρ d'énergie ε à l'état \vec{k}'_ρ d'énergie ε' à l'aide de l'interaction q s'écrit de la même manière qu'en trois dimensions :

$$P_q(\vec{k}_\rho, \vec{k}'_\rho) = \frac{2\pi}{\hbar} \left| M_q(\vec{k}_\rho, \vec{k}'_\rho) \right|^2 \delta(\varepsilon' - \varepsilon - \Delta\varepsilon)$$

où $\Delta\varepsilon$ est la différence d'énergie due à l'interaction. $\Delta\varepsilon = 0$ pour une interaction élastique et $M_q(\vec{k}_\rho, \vec{k}'_\rho)$ est l'élément de matrice de transition qui vérifie :

$$\left| M_q(\vec{k}, \vec{k}') \right|^2 = \left| \int \psi_{\vec{k}'}^*(\vec{r}) U_q(\vec{r}) \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) d^3\vec{r} \right|^2 = \left| \int e^{-i\vec{k}' \cdot \vec{\rho}} \chi_m^*(z) U_q(\vec{r}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{\rho}} \chi_n(z) dz d\vec{\rho} \right|^2 \left| R(\vec{k}, \vec{k}') \right|^2$$

où $\{\chi_m, \chi_n\}$ sont les fonctions enveloppes respectives des sous-bandes m de départ et n d'arrivée

et $\left| R(\vec{k}, \vec{k}') \right|^2 = G(\vec{k}, \vec{k}')$ est toujours le carré de l'intégrale de recouvrement des fonctions de Bloch. La valeur de $G(\vec{k}, \vec{k}')$ est identique à celle considérée en trois dimensions. En revanche, l'intégrale de recouvrement des fonctions enveloppes doit être évaluée pour chaque type d'interaction.

Pour les phonons acoustiques ou les phonons optiques d'ordre 0 (les seuls considérés dans le cadre de ce travail), le terme de recouvrement des fonctions enveloppes se réduit à l'intégrale du produit de leurs carrés [Ando82] :

$$\left| M_q(\vec{k}, \vec{k}') \right|^2 = K_0 \int \chi_m^2(z) \chi_n^2(z) dz$$

où K_0 est une constante dépendant de l'interaction considérée.

Phonons acoustiques

La probabilité d'interaction avec les phonons acoustiques s'écrit :

$$P_{ac}(\vec{k}_\rho, \vec{k}'_\rho) = \frac{2\pi E_{ac}^2 k_B T}{\hbar \rho S^2} \delta(\varepsilon' - \varepsilon) \int \chi_m^2(z) \chi_n^2(z) dz$$

où s représente la vitesse du son dans le cristal, ρ la densité du cristal ; E_{ac} est le potentiel acoustique en eV/m.

Le terme d'entrée s'obtient par intégration sur tous les états \vec{k}' d'énergie ε' . En tenant compte de l'absorption et de l'émission, il s'écrit :

$$C.f(\vec{k}) = \frac{1}{4\pi^2} \int_{\vec{k}'} f(\vec{k}'_\rho) P(\vec{k}'_\rho, \vec{k}_\rho) d^2\vec{k}'_\rho = A \int_{L(\varepsilon')} f(\vec{k}'_\rho) \frac{dl}{|\vec{\nabla}_{\vec{k}'_\rho}(\varepsilon')|} \times \int \chi_m^2(z) \chi_n^2(z) dz$$

avec $A = \frac{k_B T E_{ac}^2}{2\pi\hbar\rho s^2}$ et $\varepsilon' = \varepsilon$. $L(\varepsilon')$ est la longueur de la ligne équi-énergie d'énergie ε' dans la sous-bande d'arrivée.

Terme de sortie : τ_{ac} est le temps de relaxation acoustique :

$$\lambda_{ac} = \frac{1}{\tau_{ac}} = A \int_{L(\varepsilon')} \frac{dl}{|\vec{\nabla}_{\vec{k}'_\rho}(\varepsilon')|} \times \int \chi_m^2(z) \chi_n^2(z) dz.$$

Le terme de sortie est proportionnel à la densité d'états d'arrivée.

Phonons optiques

La probabilité d'interaction avec les phonons optiques s'écrit :

$$P_{op}(\vec{k}_\rho, \vec{k}'_\rho) = \frac{\pi\hbar E_{op}^2}{\rho\hbar\omega_{op}} \left(N_{op} + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \right) \delta(\varepsilon' - \varepsilon) \int \chi_m^2(z) \chi_n^2(z) dz$$

$\hbar\omega_{op}$ est l'énergie du phonon optique polaire, E_{op} est le potentiel de déformation pour ce type de

collision et $N_{op} = \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar\omega_{op}}{k_B T}\right) - 1}$ est la densité de phonons optiques. Les termes d'entrée et de

sortie sont calculés de manière similaire aux phonons acoustiques.

Terme d'entrée :

$$C.f(\vec{k}) = \frac{1}{4\pi^2} \int_{\vec{k}'} f(\vec{k}'_\rho) P(\vec{k}'_\rho, \vec{k}_\rho) d^2\vec{k}'_\rho = A \int_{L(\varepsilon')} f(\vec{k}'_\rho) \frac{dl}{|\vec{\nabla}_{\vec{k}'_\rho}(\varepsilon')|} \times \int \chi_m^2(z) \chi_n^2(z) dz$$

avec $A = \frac{\hbar E_{op}^2}{4\pi\rho\hbar\omega_{op}} \left(N_{op} + \frac{1}{2} \mp \frac{1}{2} \right)$ et $\varepsilon' = \varepsilon \pm \hbar\omega_{op}$.

Terme de sortie : τ_{op} est le temps de relaxation optique :

$$\lambda_{op} = \frac{1}{\tau_{op}} = A \int_{L(\varepsilon')} \frac{dl}{|\vec{\nabla}_{\vec{k}'_\rho}(\varepsilon')|} \times \int \chi_m^2(z) \chi_n^2(z) dz$$

b) Résolution matricielle

Pour une résolution déterministe, l'équation de Boltzmann est écrite sur un espace discret. Nous utilisons les coordonnées polaires (k_ρ, θ) avec θ l'angle entre \vec{k}_ρ et le champ \vec{E} . Le champ est dirigé perpendiculairement à la direction z. La figure 18 résume les conventions utilisées dans le cas d'un puits de Ge contraint sur SiGe.

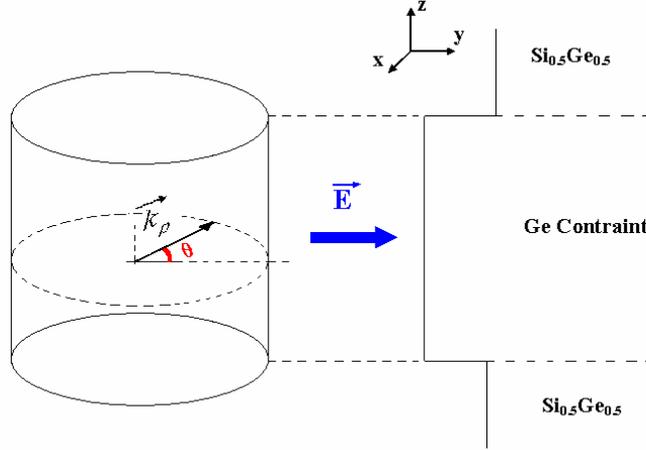


Figure 18 : Coordonnées utilisées pour la modélisation du transport en gaz bidimensionnel.

Les états étant quantifiés dans le puits suivant la direction k_z , ils ne sont définis que par $(k_{\rho i}, \theta_j)$ avec :

$$k = (k_{\rho i})_{i=1..N} \quad \text{avec} \quad k_{\rho i} = \frac{(i-1)}{(N-1)} k_{\rho \max} + \frac{k_{\rho \max}}{2(N-1)}$$

$$\theta = (\theta_j)_{j=1..L} \quad \text{avec} \quad \theta_j = \frac{(j-1)\pi}{(L-1)}$$

Pour chaque sous-bande, $k_{\rho \max}$ est le module du plus grand vecteur d'onde correspondant à une énergie confinée dans le puits (énergie inférieure à l'énergie de la barrière). θ prend des valeurs comprises entre 0 et π : la direction du champ est axe de symétrie du système. Les valeurs de N et L sont choisies pour obtenir un bon compromis entre le temps de simulation et la précision du résultat. Typiquement, $N = 40$ et $L = 20$.

On calcule donc les fonctions de distribution $f_{ij} = f(k_{\rho i}, \theta_j)$ à l'aide d'une résolution matricielle de l'équation de Boltzmann qui s'écrit :

$$\frac{\partial f(k_{\rho i}, \theta_j, t)}{\partial t} = ([A][f])_{i,j}$$

Contrairement à la discrétisation en trois dimensions réduite artificiellement à deux, la résolution matricielle utilisée ici est véritablement « full band » : le vrai diagramme de bande est pris en compte dans toute les directions de l'espace.

Le calcul de la matrice $[A]$ par discrétisation des opérateurs dérivée et intégrale s'effectue de la même manière qu'en trois dimensions, notamment pour le choix de l'état d'arrivée. Comme en tridimensionnel, que l'interaction soit intravallée ou intervallée, k tel que $\varepsilon(\vec{k}) = \varepsilon(\vec{k}') \pm \Delta\varepsilon$ ne tombe pas forcément sur k_{ρ_i} précisément. Si $k \in]k_{\rho_i}, k_{\rho_{i+1}}[$, le terme d'entrée est réparti sur k_{ρ_i} et $k_{\rho_{i+1}}$ proportionnellement à la distance en énergie.

2) Premiers résultats dans un puits de Ge contraint sur SiGe

Ce paragraphe présente une simulation du transport de trous en gaz bidimensionnel effectuée pour la première fois par résolution déterministe "full band" de l'équation de Boltzmann. Le passage du gaz bidimensionnel au continuum d'énergie en trois dimensions n'est pas, pour l'instant, pris en compte c'est pourquoi seul le transport à faible champ est étudié, pour lequel tous les porteurs sont supposés confinés. La structure électronique considérée est présentée § a. Elle a été calculée à l'aide du formalisme de la fonction enveloppe associé au $\mathbf{k.p}$ 30 bandes (Chap. 2, § VI, 2) puis tabulée en fonction de k et θ .

Pour développer une résolution « full band » du transport en gaz bidimensionnel, Cédric Renaud, dans le cadre de son stage de DEA, a d'abord effectué une simulation de transport en utilisant une structure électronique isotrope parabolique dans l'approximation de la masse effective. Il a en fait mené deux simulations en considérant la structure isotrope parabolique : pour la première, il a utilisé les relations analytiques fournissant les fréquences d'interaction et les termes d'entrée dans l'approximation de la masse effective [Ridley82]. Pour la seconde, il a tabulé cette relation de dispersion parabolique de la même manière que la structure "full band" et évalué les termes d'entrée et de sortie à partir de cette tabulation. Comme ces deux simulations fournissaient les mêmes résultats, il a ainsi validé la méthode de calcul qu'il a ensuite utilisée en « full band ». Une comparaison des fréquences d'interactions obtenues pour ces deux modèles est donc menée § b. Enfin, les premiers résultats de l'étude des mobilités en fonction de la température sont présentés § c.

a) Diagramme de bande

La structure électronique utilisée pour simuler le transport en gaz bidimensionnel est présentée figure 9. L'énergie des trois premières sous-bandes a été calculée dans 11 directions $[\cos\theta, \sin\theta, 0]$ avec θ compris entre 0 et $\pi/4$.

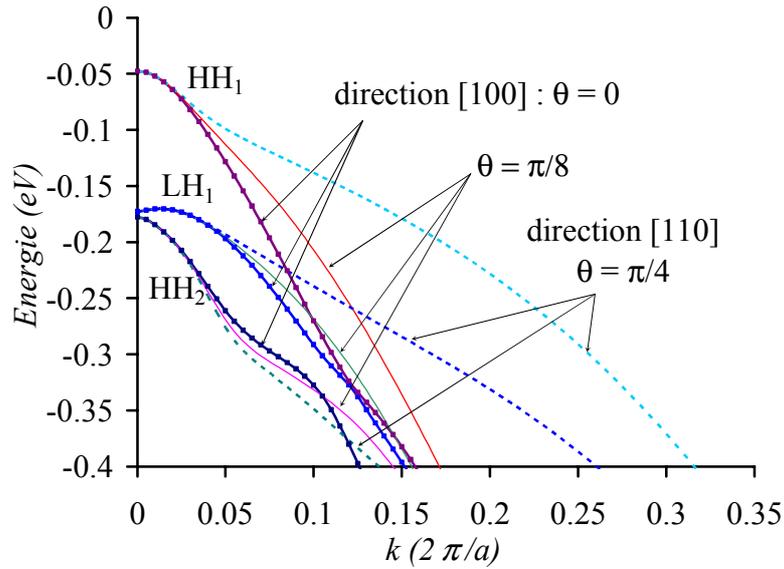


Figure 19 : Relation de dispersion des sous-bandes utilisées pour la simulation du transport des trous en gaz bidimensionnel dans un puits de Ge sur SiGe. La hauteur de barrière entre Ge et SiGe est de 0.3637 eV.

L'énergie en chaque point (k_{ρ_i}, θ_j) est obtenue par interpolation à partir de la structure de bande présentée figure 19. Pour chaque sous-bande, le pas Δk_{ρ} est différent mais constant quelle que soit la direction. Certains points du réseau (k_{ρ_i}, θ_j) choisis ont donc une énergie supérieure à l'énergie de confinement. Pour l'instant, comme la simulation du transport ne prend pas en compte le passage au continuum tridimensionnel, ces points sont supposés vides de porteurs. Les fonctions enveloppes de chaque sous-bande ont été calculées à l'aide du formalisme de la fonction enveloppe associé au \mathbf{k}, \mathbf{p} à 30 bandes. Elles sont présentées figure 20.

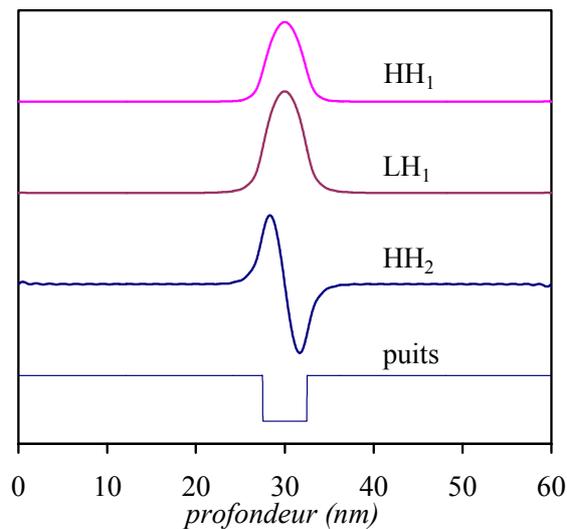


Figure 20 : Fonctions d'ondes des trous dans un puits de Ge de 5 nm contraint sur $\text{Si}_{0.5}\text{Ge}_{0.5}$.

Pour l'approximation parabolique (figure 21), les masses considérées sont les masses de densité d'état à 300 K soit $0.15 m_0$ pour les trous élevés correspondant aux sous-bandes HH_1 et HH_2 et $0.09 m_0$ pour les trous abaissés correspondant à la sous-bande LH_1 .

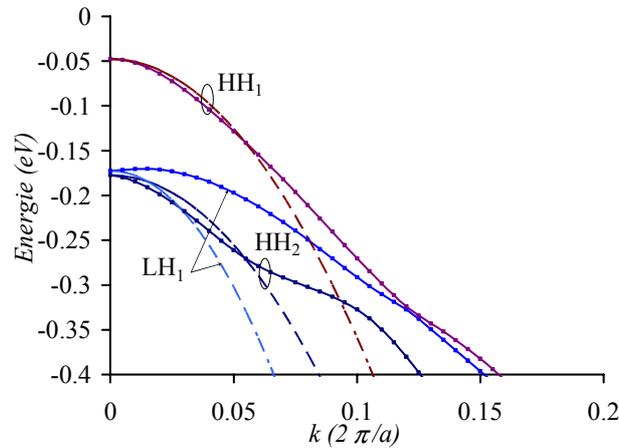


Figure 21 : Comparaison des diagrammes de bande utilisés dans l'approximation parabolique et calculés en k.p 30 bandes pour $\theta=0$.

L'origine des énergies est identique pour les sous-bandes paraboliques et réelles, ainsi que les fonctions enveloppes.

Après avoir présenté la structure de bande utilisée, voici une comparaison entre les fréquences d'interaction obtenues dans l'approximation parabolique et en considérant la structure électronique réelle.

b) Fréquences d'interactions

Seules les interactions avec les phonons acoustiques et optiques sont prises en compte pour cette simulation du transport en gaz bidimensionnel. Comme le puits est constitué de Ge, il n'y a pas de potentiel d'alliage. L'interaction avec les impuretés ionisées est négligée pour les mêmes raisons qu'en trois dimensions : le canal est supposé non dopé, et la diffusion par des impuretés distantes est difficile à prendre en compte.

Les paramètres des collisions avec les phonons sont les mêmes qu'en trois dimensions (tableau I page 110). Toutes ces interactions mènent à des transitions intra- et inter-sous-bandes. La figure 22 représente les fréquences d'interaction subies par les trous de la première sous bande dans le cas parabolique et « full band ».

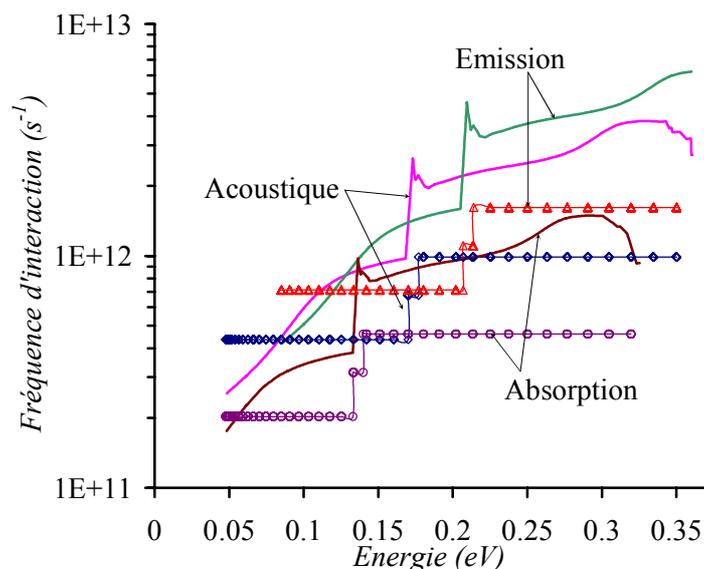


Figure 22 : Fréquences d'interaction subies par les trous de la première sous bande du puits considéré dans le cadre de l'approximation parabolique (traits fin et symboles creux) et du modèle « full band » (traits épais).

Les fréquences d'interaction sont proportionnelles à la densité d'état dans l'état d'arrivée. Dans l'approximation parabolique, les densités d'état sont en « marches d'escalier », c'est pourquoi on retrouve cette allure pour les fréquences d'interaction. Les sauts correspondent à l'énergie des sous-bandes pour les collisions avec les phonons acoustiques et à l'énergie des sous-bandes plus ou moins celle du phonon pour les collisions avec les phonons optiques. Les fréquences d'interaction ont été calculées à partir d'une tabulation de la structure électronique pour l'approximation parabolique et pour le modèle « full band ». Dans l'approximation de la masse effective, on retrouve bien les fréquences d'interaction en marches d'escalier attendues théoriquement.

Les fréquences d'interaction « full band » montrent aussi des sauts à chaque énergie de sous-bande mais ne sont pas constantes entre les sauts. Leur allure ressemble à celle de la densité d'état bidimensionnelle calculée chapitre 3, § 2. Les pics observés à chaque saut correspondent à des artefacts de calcul numérique de dérivée pour une fonction discontinue ; ce phénomène a déjà été mentionné pour le calcul de la densité d'états.

Pour l'instant, seuls les fréquences d'interaction bidimensionnelles ont été calculées. C'est pourquoi le paragraphe suivant se limite à une étude des mobilités en gaz bidimensionnel, c'est-à-dire une étude du transport à énergie suffisamment faible pour que les porteurs restent confinés dans le puits quantique.

c) Transport à faible champ

Seules des données expérimentales existent pour le transport bidimensionnel dans un puits de Ge [Irisawa2003]. Elles mentionnent une mobilité de Hall de $2100 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ pour un puits de Ge de 20 nm sur $\text{Si}_{0.3}\text{Ge}_{0.7}$ à température ambiante. A notre connaissance, aucune simulation « full band » de transport bidimensionnel n'a été mise en œuvre pour la bande de valence. La simulation effectuée au cours de ce travail fournit une mobilité de $2580 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ à 300 K , légèrement supérieure aux données expérimentales.

Voici figure 23 les énergies et vitesses moyennes obtenues à $T = 70 \text{ K}$ et $T = 300 \text{ K}$ pour les trous de ce puits de Ge contraint sur SiGe.

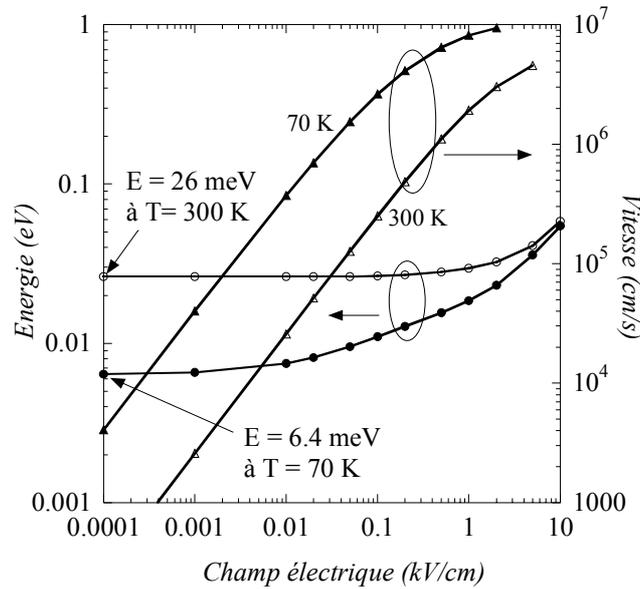


Figure 23 : Energies et vitesses moyennes des trous dans un puits de Ge contraint sur $\text{Si}_{0.5}\text{Ge}_{0.5}$ à $T = 300 \text{ K}$ (symboles creux) et $T = 70 \text{ K}$ (symboles pleins).

En transport bidimensionnel, l'énergie moyenne en régime de mobilité est $E = k_B T$, k_B étant la constante de Boltzmann. A 300 K , cette énergie est de 25.9 meV et à 70 K , elle est de 6.04 meV . Les trous sont donc en régime de mobilité jusqu'à 0.1 kV/cm environ à 300 K , alors qu'à 70 K , les trous ne sont déjà plus en régime de mobilité avant 0.1 V/cm . La simulation du transport effectuée s'arrête à 2 kV/cm à 70 K et 10 kV/cm à 300 K parce que la distribution de trous commence à sortir du puits de Ge pour ces champs électriques. Voici figure 24 les mobilités obtenues en fonction de la température.

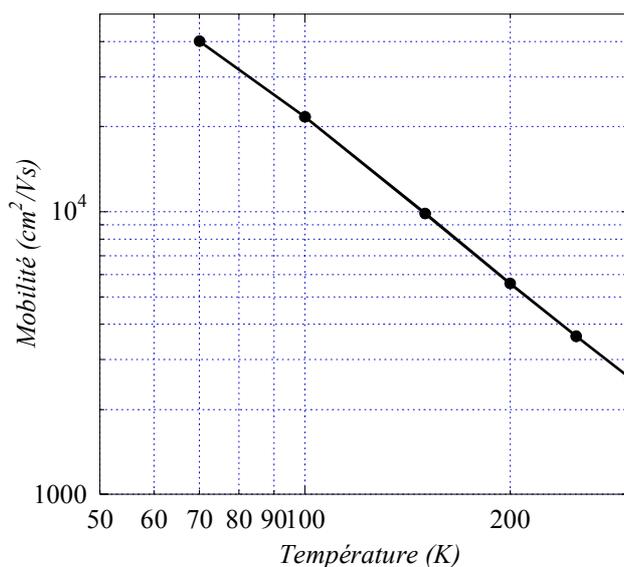


Figure 25 : Mobilités des trous confinés dans un puits de Ge contraint sur SiGe en fonction de la température.

La mobilité des trous dans le puits considéré est de $2580 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ à 300 K et de $40000 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ à 70 K. A 300 K, cette mobilité est supérieure à celle du Ge massif ($2000 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ à 300 K [Yamada94]) mais inférieure à celle du Ge contraint en transport tridimensionnel ($4400 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ d'après les résultats présentés en § I-5). La répartition des porteurs dans les sous-bandes est très inégale : dans la gamme d'énergie considérée (jusqu'à 60 meV), les porteurs peuplent principalement la première sous-bande HH_1 , la première transition $\text{HH}_1\text{-LH}_1$ étant de 120 meV. La figure 26 montre l'évolution de cette répartition de porteurs en fonction du champ électrique à 300 K.

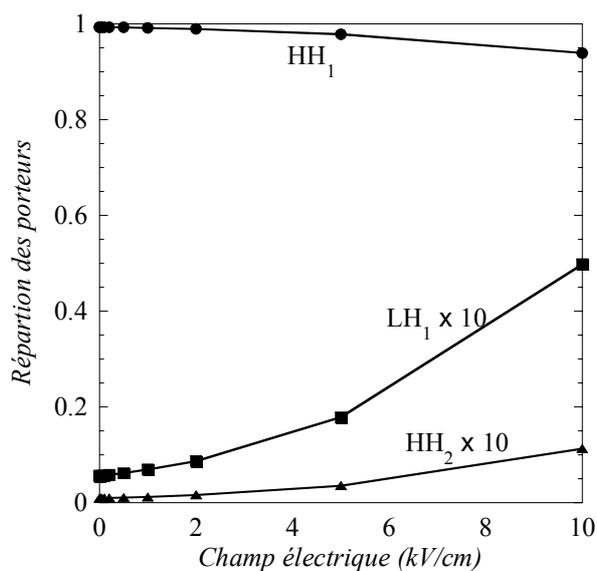


Figure 26 : Répartition des porteurs dans les sous-bandes en fonction du champ électrique.

L'allure des fonctions de distribution fait apparaître la topologie des bandes comme le montre la figure 26. La base des fonctions de distribution correspond en effet à l'allure des lignes iso-énergie présentées figure 8 du chapitre 3, page 81.

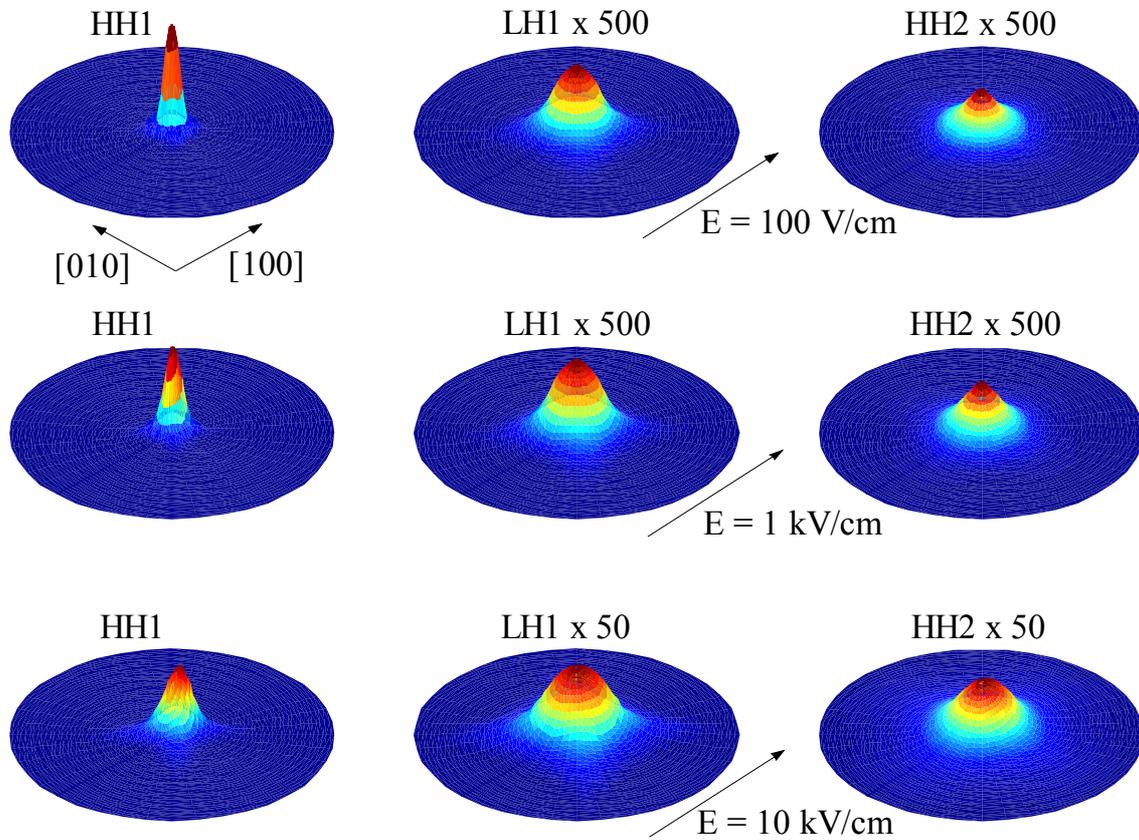


Figure 26 : Fonctions de distribution des trous dans les sous-bandes d'un puits de Ge contraint sur $\text{Si}_{0.5}\text{Ge}_{0.5}$ pour différents champs électriques en direction $[100]$ à $T = 300$ K.

Les trous sont principalement situés dans la première sous-bande, d'où l'utilisation de facteurs multiplicatifs figures 25 et 26. La courbure de la première sous-bande HH_1 est beaucoup plus importante que celle de la seconde LH_1 malgré leurs appellations. Les trous sont donc beaucoup plus confinés en centre de zone de Brillouin dans la sous-bande HH_1 . L'anisotropie des sous-bandes se lit sur la forme des fonctions de distribution : la sous-bande HH_2 est beaucoup moins accidentée que les deux autres, comme le montre la figure 19.

Pour explorer une gamme d'énergie et de champ électrique plus grande, pour notamment modéliser l'ionisation par choc, il est nécessaire de prendre en compte les transitions entre le gaz bidimensionnel de trous et le continuum tridimensionnel ce qui n'a pas encore été mené. C'est pourquoi l'étude de l'ionisation par choc présentée § III est menée à partir des simulations tridimensionnelles du transport présentées § I-4 pour les électrons dans le silicium contraint et § I-5 pour les trous dans le germanium contraint.

III. Ionisation par choc

1) Modèle physique de l'ionisation par choc

Le taux d'ionisation est l'inverse du temps moyen entre deux chocs ionisants pour un porteur incident dont on connaît l'énergie. C'est donc la probabilité par unité de temps pour qu'un porteur, à une énergie donnée, crée une paire électron trou à l'aide du processus d'ionisation par choc. Il existe deux approches bien distinctes pour le calcul du taux d'ionisation.

La première approche est le calcul dit « ab-initio ». Cette approche consiste à calculer les taux d'interaction $Rate(E)$, E étant l'énergie de l'électron incident. Pour ce calcul il faut utiliser la théorie des perturbations dépendant du temps. Il faut pour cela connaître la structure de bande et les fonctions d'onde. L'interaction prise en compte est l'interaction coulombienne avec écran diélectrique [Kane67]. Dans ce contexte pour un électron ionisant, l'expression de $Rate(E)$ est la suivante [Kane67] :

$$Rate(E) = \frac{2\pi}{\hbar} \left(\frac{V}{(2\pi)^3} \right) \sum_{n_1, n_2, n_3, n_4} \frac{\int d\vec{k}_1 d\vec{k}_2 d\vec{k}_3 d\vec{k}_4 \delta(E_1(\vec{k}_1) - E)}{\sum_{n_1} \int d\vec{k}_1 \delta(E_1(\vec{k}_1) - E)} \delta(E_1(\vec{k}_1) - E_2(\vec{k}_2) - E_3(\vec{k}_3) + E_4(\vec{k}_4))$$

$$\times \left\{ |M_a|^2 + |M_b|^2 - (M_a^* M_b + M_a M_b^*) / 2 \right\}$$

avec

$$M_a \equiv M(1, 4; 2, 3) \quad M_b \equiv M(1, 4; 3, 2)$$

$$M(1, 4; 2, 3) \equiv \left\langle \psi_1(r_1) \quad \psi_4(r_2) \left| \frac{e^2}{\varepsilon |r_1 - r_2|} \right| \psi_2(r_1) \quad \psi_3(r_2) \right\rangle$$

$$\text{et } \vec{k}_1 + \vec{k}_4 = \vec{k}_2 + \vec{k}_3 + \vec{K}_0$$

où V est le volume, n l'indice de bande, r les vecteurs dans l'espace réel, ε la constante diélectrique, k_1 le vecteur d'onde de l'état 1, $E_1(k_1)$ son énergie et ψ_1 sa fonction d'onde. L'état 4 est l'état du trou et l'état 1 celui de l'électron initial. \vec{K}_0 est un vecteur du réseau réciproque (différent de 0 pour un processus Umklapp) qui assure que les différents états 1, 2, 3 et 4 sont dans la première zone de Brillouin. Les états 2 et 3 sont les états finaux des électrons. Ce calcul non trivial ne prend en compte aucune hypothèse simplificatrice. De plus il demande de connaître les fonctions d'onde. C'est pour ces deux raisons que très peu d'auteurs font ce calcul.

Le moyen le plus simple d'obtenir une estimation du taux d'ionisation est la formule empirique de Keldish [Keldish65]. Cette dernière donne la probabilité en fonction de l'énergie et est tirée d'un modèle à bande interdite directe et à vallées paraboliques. Cette formule s'écrit de la façon suivante :

$$\begin{cases} R_{Kel}(E) = P \left(\frac{E - E_{th}}{E_{th}} \right)^2, E \geq E_{th} \\ R_{Kel}(E) = 0, E < E_{th} \end{cases}$$

où E_{th} est le seuil d'ionisation et P est un paramètre d'ajustement. En pratique ces deux termes sont des paramètres d'ajustement qu'il convient de choisir afin de coller au mieux avec le calcul « ab-initio ».

En théorie cette formule n'est applicable que si l'on considère deux bandes purement paraboliques centrées en $k = 0$ (bande de valence et de conduction). En pratique un grand nombre d'auteurs utilisent cette approche avec certaines variantes. En effet on peut considérer plusieurs seuils [Cartier93], ou bien considérer par exemple qu'au-dessus d'une certaine énergie la probabilité d'ionisation est infinie [Ong2000]. Le fait d'utiliser la formule de Keldish a comme avantage de ne demander aucun calcul. En revanche cette approche ne permet en aucun cas d'avoir accès à certaines subtilités liées à la structure de bande des semi-conducteurs. En effet seul le seuil d'ionisation différencie ces derniers. Pourtant des considérations reposant sur la structure de bande peuvent avoir une grande importance comme par exemple la prise en compte des vallées L et X [Bude92]. Ce type de considération est complètement ignoré par la formule de Keldish. Il reste toutefois raisonnable de l'appliquer si l'on ne considère que la vallée Γ qui n'est pas trop éloignée d'une parabole.

Entre le calcul « ab-initio » et la formule de Keldish, il existe des approches intermédiaires où l'on fait des hypothèses qui permettent de calculer les probabilités plus facilement qu'avec le calcul « ab-initio ». La première hypothèse est celle où l'on considère l'élément de matrice M (voir le calcul « ab-initio ») comme étant indépendant de l'énergie (approximation CME Constant Matrix Element). Cette hypothèse se justifie car l'élément de matrice ne varie en effet que très peu avec l'énergie de l'électron initial [Harrison99], [Fischetti97]. Une seconde hypothèse simplificatrice peut être faite. Elle consiste à considérer que le processus d'ionisation n'est que très peu contrôlé par la conservation des « moments » mais qu'il est en grande partie contrôlé par la densité d'état des états finaux. Cela revient à dire que par exemple, le vecteur d'onde k_4 du trou est une variable aléatoire dont la probabilité $p(k_4)$ de tomber sur l'intervalle d'énergie dE_4 est proportionnelle à la densité d'états $D(E_4)$. Cela permet d'écrire $Rate(E)$ sous la forme suivante [Kane67] :

$$\begin{cases} Rate(E) = Q \int D(E_2)D(E_3)D(E_4)dE_2dE_3 \\ E_1 = E_2 + E_3 - E_4 \end{cases}$$

où l'origine des énergies est prise en haut de la bande de valence, c'est à dire que E_4 est négative et où Q est tiré de la moyenne de l'élément de matrice. En pratique Q est un paramètre d'ajustement. Cette approximation est appelée « random-k » et permet de calculer le taux d'ionisation sans connaître les fonctions d'onde. Seules les densités d'états sont indispensables et pour cela nous avons les bandes calculées par la théorie **k.p**. Nous allons à présent discuter de la validité de cette approximation.

Cette approximation est particulièrement bien vérifiée quand un processus Umklapp, qui rend le vecteur d'onde aléatoire, est le processus le plus probable de production de paires électron trou. Dans le cas des semi-conducteurs à gap indirect, le calcul « ab-initio » et le calcul « random-k » donnent des résultats en très bon accord [Fischetti97]. En effet, dans ce cas, un processus sans l'apport d'un grand vecteur d'onde K_0 est quasiment inexistant. Dans les matériaux à gap direct cette approximation n'est pas forcément justifiée. Dans ce cas, le phénomène d'ionisation ne passe pas forcément par l'intermédiaire d'un processus Umklapp puisque la conservation des moments, si la particule initiale est en vallée Γ , peut facilement être respectée sans l'apport d'un vecteur K_0 .

Dans ce qui suit, la méthode « random-k » a été utilisée pour évaluer les taux d'ionisation par choc à partir des densités d'état d'arrivée calculées au chapitre 3. En résumé, nous allons considérer le modèle suivant.

La fréquence d'ionisation par choc est proportionnelle aux densités d'états disponibles pour les particules créées. Si c'est un électron qui ionise un atome du réseau cristallin, il crée une paire électron trou et modifie son énergie. On peut donc considérer que trois particules sont créées, deux électrons et un trou. La fréquence d'ionisation par choc (inverse du temps moyen entre deux chocs ionisants $1/\tau_{II}$) s'écrit alors :

$$1/\tau_{II}(\vec{k}) = \langle M^2 \rangle \int dE_c dE_v g_c(E_c) g_v(E_v) g_c(E - E_{gap} - E_c - E_v)$$

où E_c , E_v et $E - E_{gap} - E_c - E_v$ sont les énergies des particules créées, $g_{c(v)}(E)$ est la densité d'états en bande de conduction (valence) et $\langle M^2 \rangle$ l'élément de matrice d'interaction coulombienne.

Dans le cas où la particule ionisante est un trou (qui crée alors deux trous et un électron), la fréquence d'ionisation par choc s'écrit :

$$1/\tau_{II}(\vec{k}) = \langle M^2 \rangle \int dE_c dE_v g_c(E_c) g_v(E_v) g_v(E - E_{gap} - E_c - E_v)$$

Le coefficient d'ionisation par choc α (cm^{-1}) est l'inverse du libre parcours moyen entre deux chocs ionisants. Il s'écrit :

$$\alpha(\text{cm}^{-1}) = \frac{\int f(\vec{k}) 1/\tau_H(\vec{k}) d^3\vec{k}}{\int f(\vec{k}) v(\vec{k}) d^3\vec{k}}$$

où $f(\vec{k})$ est la fonction de distribution de la particule ionisante, et $v(\vec{k})$ sa vitesse.

Le paragraphe suivant présente les fréquences et coefficients d'ionisation par choc des électrons dans le Si contraint sur SiGe et des trous dans le Ge contraint sur SiGe. Les fréquences d'ionisation par choc sont calculées à l'aide des densités d'états présentées au chapitre 3 et les coefficients d'ionisation par choc sont évalués à l'aide des fonctions de distribution calculées § I-4 et § I-5 dans ce chapitre.

2) Coefficient d'ionisation par choc dans le Si contraint sur SiGe

a) Taux d'ionisation par choc

Le taux d'ionisation par choc est proportionnel au produit des densités d'état d'arrivée. Le coefficient de proportionnalité est le carré de l'élément de matrice coulombienne, supposé constant sur toute la zone de Brillouin et identique pour toutes les bandes. Pour ce travail, nous avons évalué l'élément de matrice du silicium massif en l'ajustant sur des valeurs issues de la littérature [Fischetti97] et nous l'avons supposé identique dans le silicium contraint.

La figure 23 présente les taux d'ionisation par choc dans le silicium massif et contraint à 300 K, calculés par la méthode « random-k » à l'aide des densités d'états présentées au chapitre 3, et les taux d'ionisation issus de [Fischetti97], calculés par les méthodes « random-k » ou « constant matrix element » qui concordent bien.

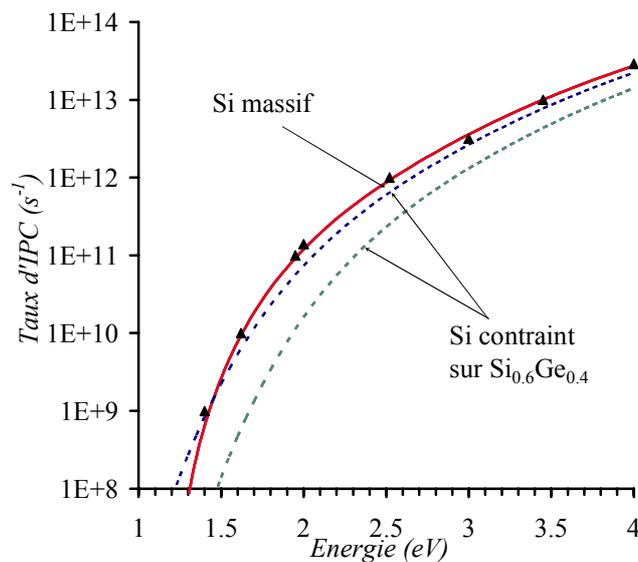


Figure 23 : Taux d'ionisation par choc dans le Si massif (trait continu : ce travail, triangles : [Fischetti97]) et contraint sur Si_{0.6}Ge_{0.4} (pointillés). Le taux d'ionisation par choc le plus grand

correspond aux électrons issus des vallées Δ_2 abaissées par la contrainte, et l'autre correspond aux vallées Δ_4 .

La concordance entre nos résultats et ceux issus de [Fischetti97] permet de valider la méthode utilisée. Le seuil d'ionisation par choc est plus faible dans le Si contraint que dans le Si massif à cause de la diminution de la bande interdite. Cependant, dès 1.5 eV, le taux d'ionisation par choc du Si massif devient supérieur à celui du Si contraint. Le décalage des vallées Δ diminue la densité d'états d'arrivée disponibles à une énergie donnée, ce qui diminue le taux d'ionisation par choc. Les effets sur le coefficient d'ionisation par choc sont présentés § b.

b) Coefficient d'ionisation par choc

La figure 24 présente les coefficients d'ionisation par choc dans le Si massif et contraint sur $\text{Si}_{0.6}\text{Ge}_{0.4}$.

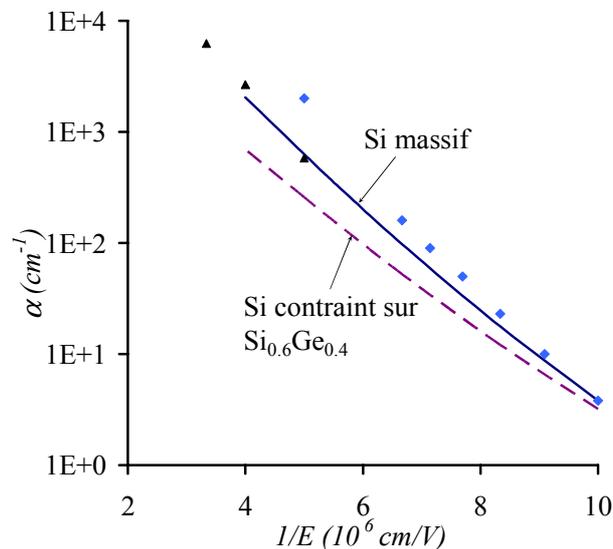


Figure 24 : Coefficients d'ionisation par choc en fonction de l'inverse du champ électrique dans le silicium massif (traits pleins) et contraint sur $\text{Si}_{0.6}\text{Ge}_{0.4}$ (pointillés). Les symboles représentent des coefficients d'ionisation par choc dans le Si massif issus de [Fischetti97] pour les triangles, et [Overstraeten70] pour les losanges.

Pour le silicium massif, les données issues de la littérature et nos résultats sont en bon accord.

A priori, le coefficient d'ionisation par choc dans le silicium contraint devrait être supérieur à celui du Si massif : le transport est amélioré donc l'énergie des porteurs est plus importante à champ constant dans le Si contraint que dans le Si massif. Un calcul du coefficient d'ionisation par choc à l'aide du modèle de Keldysh montre d'ailleurs que le coefficient d'ionisation par choc augmente avec la contrainte [Rashed95]. Effectivement, la bande interdite diminue donc le seuil d'ionisation aussi.

Or, le coefficient d'ionisation par choc décroît avec la contrainte d'après cette simulation. En effet, au champ électrique où a lieu l'ionisation par choc, les propriétés du transport électronique dans le Si contraint et massif sont équivalentes : l'effet de la contrainte sur le transport est seulement visible à faible champ électrique. La seule différence est donc due aux taux d'ionisation par choc qui diminuent avec la contrainte. Cette diminution du taux d'ionisation par choc entraîne donc une diminution du coefficient d'ionisation par choc, ce que le modèle de Keldysh prenant seulement en compte un seuil d'ionisation par choc ne peut prévoir.

3) Coefficient d'ionisation par choc dans le Ge contraint sur SiGe

a) Taux d'ionisation par choc

Comme pour le silicium, nous avons supposé le carré de l'élément de matrice coulombienne du germanium massif constant sur toute la zone de Brillouin et nous l'avons évalué en l'ajustant sur des valeurs issues de la littérature [Fischetti97]. Cet élément est aussi supposé identique dans le germanium contraint.

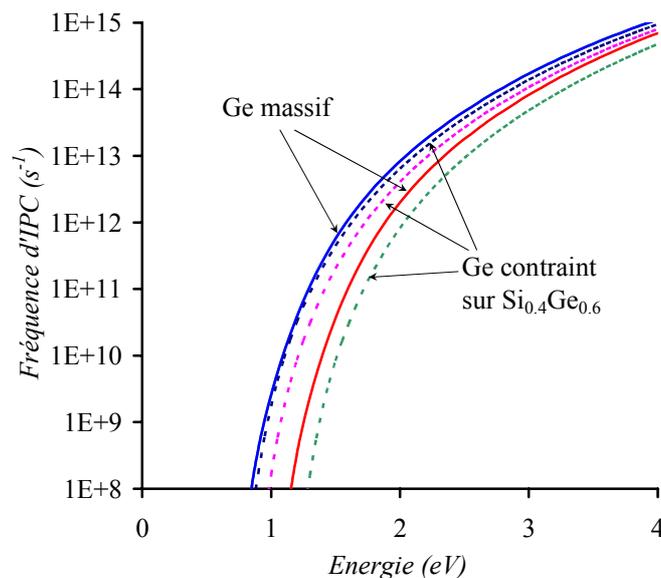


Figure 25 : Taux d'ionisation par choc dans le Ge massif (trait continu) et contraint sur $\text{Si}_{0.4}\text{Ge}_{0.6}$ (pointillés). Dans le Ge massif, les bandes des trous lourds et trous légers sont dégénérées en $k = 0$, le plus grand taux correspond aux trous issus de ces bandes et le plus faible à la bande découplée par interaction spin-orbite. Trois taux sont représentés pour le Ge contraint à cause de la levée de dégénérescence en bande de valence.

La figure 25 présente les taux d'ionisation des trous dans le Ge massif et contraint. Le seuil d'ionisation dans le Ge contraint est supérieur à celui du Ge massif alors que la bande interdite diminue (elle passe de 0.66 eV à 0.62 eV dans le Ge contraint sur $\text{Si}_{0.4}\text{Ge}_{0.6}$). Cet effet est dû à la faible densité d'états au sommet de la bande de valence lié à la diminution de la masse effective.

Le sens de variation de la bande interdite ne permet pas de déduire celui du seuil d'ionisation par choc. Cet effet de la contrainte sur le taux d'ionisation par choc a de fortes conséquences sur le coefficient d'ionisation par choc comme le montre le paragraphe suivant.

b) Coefficient d'ionisation par choc

La figure 26 présente les coefficients d'ionisation par choc des trous dans le Ge massif et contraint en compression sur $\text{Si}_{0.4}\text{Ge}_{0.6}$.

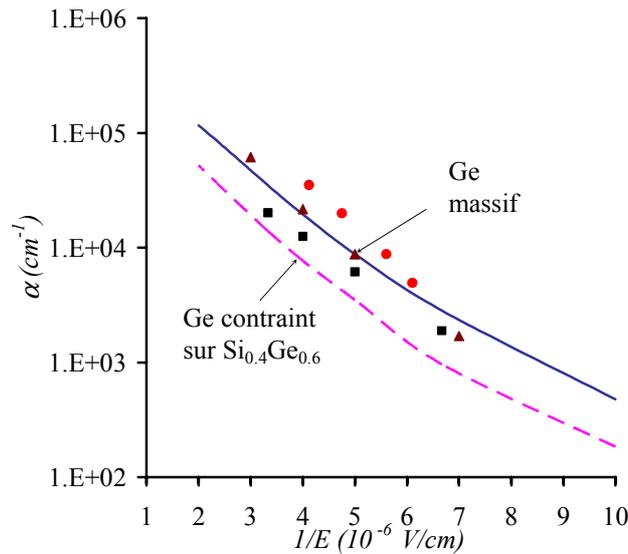


Figure 26 : Coefficients d'ionisation par choc en fonction de l'inverse du champ électrique dans le germanium massif (traits pleins) et contraint sur $\text{Si}_{0.4}\text{Ge}_{0.6}$ (pointillés). Les triangles correspondent aux données de simulation issues de [Fischetti97], les carrés aux mesures de [Decker70], et les cercles aux mesures de [Miller55] pour le Ge massif.

Le coefficient d'ionisation par choc du Ge massif est en bon accord avec les données existantes. Nous observons la même tendance que pour le silicium, à savoir que le coefficient d'ionisation par choc diminue avec la contrainte. Aux champs électriques où se produit l'ionisation par choc, les trous ont atteint leur vitesse de saturation donc l'effet de la contrainte n'est plus visible. Comme pour le silicium, la seule différence est donc due au taux d'ionisation par choc qui diminue avec la contrainte, ce que le modèle de Keldysh prenant seulement en compte un seuil d'ionisation par choc ne peut prévoir.

Tant pour le Ge que pour le Si, la diminution des coefficients d'ionisation par choc en fonction de la contrainte est assez inattendue. Elle semble corrélée à la diminution des taux d'ionisation par choc mais une étude plus approfondie des éléments de matrice coulombienne en fonction de la contrainte est nécessaire pour confirmer ou infirmer cette tendance.

Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons étudié le transport dans les alliages SiGe à partir d'une résolution déterministe de l'équation de Boltzmann. Nous avons d'abord mené cette résolution pour le transport tridimensionnel, en utilisant plusieurs niveaux d'approximations du diagramme de bande.

Pour le calcul de la mobilité dans les alliages SiGe massifs, ou contraints sur Si, nous avons considéré les bandes paraboliques et exploité la variation des masses de densité d'états en fonction de la température présentée au chapitre 3, § III. Il n'est en effet pas nécessaire de prendre en compte toute la structure électronique pour évaluer une mobilité. Néanmoins, le fait de considérer des bandes isotropes ne permet pas de distinguer la direction de croissance des couches du plan des couches dans le cas d'un semi-conducteur contraint. L'influence considérable du potentiel d'alliage a été démontrée, et nous avons pu détailler l'effet de chaque type d'interaction en fonction de la température et de la contrainte.

Pour simuler le transport à fort champ électrique, les hypothèses sur la structure électronique sont différentes selon le type de porteurs considérés : pour les électrons dans le silicium, nous avons considéré les vallées Δ comme des ellipsoïdes de révolution, en vérifiant que cette approximation est valable jusqu'à 1.5 eV au dessus de la bande interdite, grâce à la méthode $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ à 30 bandes présentée au chapitre 2. La symétrie de révolution des vallées Δ nous a permis d'effectuer une résolution seulement bidimensionnelle en conservant l'anisotropie de la structure électronique. Les propriétés de transport des électrons se déplaçant dans le plan des couches d'un transistor à effet de champ à hétérojonction à canal Si contraint en tension sur SiGe ont été dégagées. En particulier, à basse température, nous avons pu comprendre pourquoi il suffit d'une très faible contrainte pour améliorer considérablement la mobilité des porteurs, alors que cet effet est plus progressif à température ambiante.

Pour les trous dans le Ge, la méthode de résolution utilisée ne permettait pas de conserver l'anisotropie de la structure électronique, c'est pourquoi nous avons utilisé une relation de dispersion isotrope, de même densité d'états que la structure électronique réelle. Nous avons néanmoins pu dégager l'effet de la contrainte sur la vitesse et l'énergie moyenne de la distribution de porteurs.

Le transport dans un transistor à effet de champ à hétérojonction est essentiellement bidimensionnel c'est pourquoi nous avons développé une résolution déterministe de l'équation de Boltzmann bidimensionnelle, en prenant en compte la relation de dispersion réelle des porteurs calculée au chapitre 2, § 6. Cette résolution a été appliquée à un puits de Ge, pour l'instant supposé carré en compression sur $\text{Si}_{0.5}\text{Ge}_{0.5}$. La comparaison des fréquences d'interaction dans

L'approximation des vallées paraboliques et calculées à partir de la relation de dispersion réelle nous a montré la nécessité de connaître cette relation de dispersion pour l'étude du transport en gaz bidimensionnel, particulièrement pour les trous dont la structure électronique est très éloignée d'une parabole à cause du fort couplage entre les deux bandes supérieures de la bande de valence. Pour l'instant, cette étude nous a seulement fourni des mobilités car la prise en compte du passage du gaz bidimensionnel au continuum tridimensionnel n'est pas encore effectuée.

En associant ces études du transport et les densités d'états calculées au chapitre 3, nous avons extrait des valeurs de coefficients d'ionisation par choc qui sont utilisés pour l'interprétation des mesures d'électroluminescence présentées au chapitre 5. La diminution de ces coefficients due à la contrainte est assez inattendue et montre la nécessité d'avoir accès à la structure électronique pour modéliser l'ionisation par choc. Une étude plus fine de ce processus semble nécessaire pour valider l'approximation de Kane utilisée ici.

BIBLIOGRAPHIE DU CHAPITRE 4

- [Ando82] T. Ando, A.B. Fowler, F. Stern "Electronic properties of two-dimensional systems", *Rev. Mod. Phys.* **54**, 2, 437-672 (1982)
- [Aubert84] J. P. Aubert, J. C. Vaissiere, and J. P. Nougier, "Matrix determination of the stationary solution of the Boltzmann equation for hot carriers in semiconductors", *J. Appl. Phys.* **56**, 4, 1128-32 (1984)
- [Brennan83] K. Brennan, "Theory of the steady-state hole drift velocity in InGaAs", *Appl. Phys. Lett.* **51**, 13, 995-7 (1987)
- [Briggs98] P.J Briggs, A.B. Walker, D.C. Herbert, "Calculation of hole mobilities in relaxed and strained SiGe by Monte Carlo simulation", *Semicond. Sci. Technol.* **13**, 680-91 (1998)
- [Bude92] J. Bude, and K. Hess, "Threshold of impact ionization in semiconductors", *J. Appl. Phys.* **72**, 8, 3554-61 (1992)
- [Bufler98] F. M. Bufler et B. Meinerzhagen, "Hole transport in strained $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ alloys on $\text{Si}_{1-y}\text{Ge}_y$ substrates", *J. Appl. Phys.* **84**, 10, 5597-602 (1998)
- [Busch60] G. Busch et O. Vogt, "Elektrische Leitfähigkeit und Halleffekt von GeSi-Legierungen", *Helv. Phys. Acta.* **33**, 437-58 (1960)
- [Canali75] C. Canali, C. Jacoboni, F. Nava, G. Ottaviani et A. Alberigi-Quaranta, "Electron drift velocity in silicon" *Phys. Rev. B* **12**, 6, 2265-84 (1975)
- [Cartier93] E. Cartier, M.V. Fischetti, E.A. Eklund, F.R. McFeely, "Impact ionization in Silicon", *Appl. Phys. Lett.* **62**, 25, 3339-41 (1993)
- [Cavassilas2000] Rapport de thèse de sciences par Nicolas Cavassilas présenté à l'université Paris XI Orsay en 2000, intitulé « Etude du phénomène d'ionisation par choc dans les semi-conducteurs III-V : application aux transistors à effet de champ. »
- [Decker70] D.R. Decker, C.N. Dunn, "Determination of germanium ionization coefficients from small-signal IMPATT diode characteristics", *IEEE Trans. Electron Dev.* **17**, 4, 290-9 (1970)
- [Dollfus99] Dossier présenté à l'université Paris XI Orsay par Philippe Dollfus pour obtenir l'habilitation à diriger les recherches, en 1999, intitulé : « Etudes théoriques de structures pour l'électronique rapide et contribution au développement d'un simulateur particulière Monte Carlo ».
- [Dunn97] G.M. Dunn, G.J. Rees, J.P.R. David, S.A. Plimmer, D.C. Herbert, "Monte Carlo simulation of impact ionization and current multiplication in short GaAs $p^+ n^+$ diodes", *Semicond. Sci. Technol.* **12**, 1, 111-20 (1997)
- [Enciso2003] Rapport de thèse de sciences par Mauro Enciso présenté à l'université Paris XI Orsay en 2000, intitulé « Analyse expérimentale et modélisation électrique de n-HFET et p-HFET sur SiGe »
- [Fadel88] Rapport de thèse de sciences par Mohamed Fadel présenté à l'université des Sciences et Technique du Languedoc en 1988, intitulé « Méthodes de Résolution de l'Equation de Boltzmann en Régime de Porteurs chauds dans les semi-conducteurs composés III-V »

- [Ferry76] D.K. Ferry. "First-order optical and intervalley scattering in semiconductors" *Phys. Rev. B* **14**, 4, 1605-9 (1976)
- [Fischetti88] M.V. Fischetti, and S.E. Laux, "Monte Carlo analysis of electron transport in small semiconductor devices including band-structure and space-charge effects", *Phys. Rev. B* **38**, 14, 9721-45 (1988)
- [Fischetti91] MV Fischetti, "Monte carlo simulation of transport technologically significant semiconductors of the diamond and zinc-blend structure, part I: Homogeneous transport", *IEEE. Trans. Electron. Dev.* **38**, 3, 634-49 (1991).
- [Fischetti97] M.V. Fischetti, N. Sano, S.E. Laux, and K. Natori, "Full-band-structure theory of high-field transport and impact ionization of electrons and holes in Ge, Si, and GaAs," *IEEE Trans. Semicond. Techn. Modeling. and Simulation.*, URL :<http://www.ieee.org/journal/tcad/accepted/fischetti-feb97/>
- [Harrison76] J.W. Harrison et J.R. Hauser, "Alloy scattering in ternary III-V compounds", *Phys. Rev. B* **13**, 5347-50 (1976)
- [Harrison99] D. Harrison, R.A. Abram, and S. Brand, "Characteristics of impact ionization rates in direct and indirect gap semiconductors", *J. Appl. Phys.* **85**, 12, 8186-92 (1999)
- [Hess2000] K. Hess, *Advanced theory of semiconductor devices*, IEEE Press, 2000.
- [Hlou92] Rapport de thèse de sciences par Laamari Hlou présenté à l'université des Sciences et Technique du Languedoc en 1992, intitulé « Nouvelles techniques de Résolution de l'Equation de Boltzmann pour la Détermination du Bruit dans les Semiconducteurs »
- [Hinckley90] J. M. Hinckley et J. Singh, "Hole transport theory in pseudomorphic Si_{1-x}Ge_x alloys grown on Si(001) substrates", *Phys. Rev. B* **41**, 5, 2912-26, (1990)
- [Irisawa2003] T. Irisawa, S. Koh, K. Nakagawa and Y. Shiraki. "Growth of SiGe/Ge/SiGe heterostructures with ultrahigh hole mobility and their device application" *J. Crystal Growth* **251**, 1-4, 670-5 (2003)
- [Ismail93] K. Ismail, S.F. Nelson, J.O. Chu et B.S. Meyerson, "Electron transport properties of Si/SiGe heterostructures : Measurements and device implications", *Appl. Phys. Lett.* **63**, 5, 660-2 (1993)
- [Jacoboni83] C. Jacoboni et L. Reggiani, "The Monte Carlo method for the solution of charge transport in semiconductors with applications to covalent materials", *Rev. Mod. Phys.* **55**, 3 645-705 (1983)
- [Kane67] E. O. Kane, "Electron Scattering by Pair Production in Silicon", *Phys. Rev.* **159**, 3, 624-31 (1967)
- [Keldysh65] L. V. Keldysh, *Sov. Phys. JETP* **21**, 1135 (1965)
- [Littlejohn77] M.A. Littlejohn, J.R. Hauser, T.H. Glisson, "Velocity-field characteristics of GaAs with $\Gamma_6^c L_6^c X_6^c$ conduction band ordering", *J. Appl. Phys.* **48**, 11, 4587-90 (1977)
- [Lugli90] P. Lugli, "The Monte Carlo method for semiconductor device and process modelling", *IEEE Trans. Computer Aided Design of Integrated Circuits and Systems*, **9**, 11, 1164-76 (1990)

- [Lundstrom2000] M. Lundstrom, *Fundamentals of carrier transport*, édité par Cambridge University Press (2000)
- [Manku91] T. Manku et A. Nathan, "Lattice mobility of holes in strained and unstrained $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ alloys", *Electron Dev. Lett.* **12**, 12, 704-6 (1991)
- [Manku93] T. Manku, J.M. McGregor, A. Nathan, D.J. Roulston, J.P. Noel, et D.C. Houghton, "Drift hole mobility in strained and unstrained doped $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ alloys", *IEEE Trans. Electron Dev.* **40**, 11, 1990-96 (1993)
- [Miller55] S. L. Miller, "Avalanche Breakdown in Germanium", *Phys. Rev.* **99**, 4, 1234-41 (1955).
- [Miyata93] H. Miyata, T. Yamada et D. K. Ferry, "Electron transport properties of a strained Si layer on a relaxed $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ substrate by Monte Carlo simulation" *Appl. Phys. Lett.* **62**, 21, 2661-63 (1993)
- [Mouton97] O. Mouton, J.L. Thobel, R. Fauquembergue, "Monte Carlo simulation of high field electron transport in GaAs using an analytical band-structure model", *J. Appl. Phys.* **81**, 7, 3160-9 (1997).
- [Nougier83] J.P. Nougier, *Méthodes de calcul numérique*, Ed. Masson, 1983.
- [Ong2000] D.S. Ong, K.F. Li, S.A. Plimmer, G.J. Rees, J.P.R. David, P.N. Robson, "Full band Monte Carlo modeling of impact ionization, avalanche multiplication, and noise in submicron GaAs p(+)-i-n(+) diodes", *J. Appl. Phys.*, **87**, 11, 7885-91 (2000)
- [Rashed95] M. Rashed, S. Jallepalli, R. Zaman, W. Shih, T.J.T. Kwan, et C.M. Maziar, "Simulation of electron transport in strained silicon on relaxed $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ substrates", Proceedings of the Eleventh Biennial University / Government / Industry Microelectronics Symposium pp. 168-171, Microelectron. Res. Center, Texas Univ., Austin, Texas, Etats-Unis, 16-17 mai 1995.
- [Reggiani73] L. Reggiani, C. Calandra, "Bloch states mixing in Si conduction band" *Phys. Lett. A* **43**, 4, 339-40 (1973)
- [Reggiani98] S. Reggiani, M.C. Vecchi, M. Rudan, "Investigation on electron and hole transport properties using the full-band spherical-harmonics expansion method", *IEEE. Trans Electron. Dev.*, **45**, 9, 2010-17 (1998)
- [Richard2003] S. Richard, N. Cavassilas, F. Aniel et G. Fishman, "Strained silicon on SiGe: Temperature dependence of carrier effective masses", *J. Appl. Phys.* **94**, 8, 5088-94 (2003).
- [Ridley82] B.K. Ridley, "The electron-phonon interaction in quasi-two-dimensional semiconductor quantum-well structures", *J. Phys. C : Solid State Phys.* **15** 5899-5917 (1982)
- [Schäffler97] F. Schäffler, "High-mobility Si and Ge structures." *Semicond. Sci. Technol.* **12**, 12, 1515-49 (1997)
- [Shichijo81] H. Shichijo et K. Hess, "Band structure dependant transport and Impact ionization in GaAs", *Phys. Rev. B* **23**, 8, 4197-209 (1981)
- [Sze81] S.M. Sze, *Physics of semiconductor devices*, New-York : Wiley, 1981.

- [Vaissière86] Rapport de thèse de sciences par Jean-Claude Vaissière présenté à l'université Paris XI Orsay, en 1986, intitulé « Etude du régime de porteurs chauds dans le silicium de type p.»
- [Vaissière92] J.C. Vaissière, M. Elkssimi, J.P. Nougier, "Transient regime of hot carriers in InP", *Semicond. Sci. Technol.* **7**, 3B, B308-11, (1992)
- [Van Overstraten70] R. Van Overstraeten et H. De Man, "Measurement of the ionization rates in diffused silicon p-n junctions", *Solid State Elec.* **13**, 583-608 (1970)
- [Vecchi98] M.C. Vecchi, M. Rudan, "Modeling electron and hole transport with full-band effects by means of the spherical-harmonics expansion of the BTE", *IEEE. Trans. Electron. Dev.* **45**, 1, 230-8 (1998)
- [Venkataraman93] V. Venkataraman, C. W. Liu et J. C. Sturm, "Alloy scattering limited transport of two-dimensional carriers in strained Si_{1-x}Ge_x quantum wells", *Appl. Phys. Lett.* **63**, 20, 2795-2797 (1993)
- [Wiley71] J.D. Wiley, "Polar mobility of holes in III-V compounds", *Phys. Rev. B* **4**, 8, 2485-93 (1971)
- [Yamada94] T. Yamada, Jing-Rong-Zhou, H. Miyata, et D.K. Ferry, "Velocity overshoot in a modulation-doped Si/Si_{1-x}Ge_x structure", *Semicond. Sci. Technol.* **9**, 775-7 (1994)

CHAPITRE 5

Electroluminescence dans les HFET et les diodes

IMPATT SiGe

Dans un semi-conducteur l'ionisation par choc est le mécanisme de création d'une paire électron trou par un porteur très énergétique. Ce porteur peut être un électron ou bien un trou. L'ionisation par des électrons apparaît dans les régions des composants semi-conducteurs où des électrons atteignent sous l'effet du champ électrique des énergies supérieures à un certain seuil d'énergie qui dépend du matériau. L'ionisation par choc est observée aussi bien dans les transistors à effet de champ que dans les transistors bipolaires ou dans les diodes. Ce phénomène peut conduire à la destruction des composants par effet d'avalanche. Pour les transistors à effet de champ (FET), la tendance actuelle est de réduire les longueurs de grille et d'utiliser des semi-conducteurs de bande interdite de plus en plus petite comme couche active. Cette réduction entraîne une augmentation locale des champs électriques. Ceci a comme conséquence de rendre les composants plus sensibles à l'ionisation par choc, c'est à dire que les tensions maximales de fonctionnement sont plus faibles. L'étude de l'ionisation par choc dans les transistors est donc de première importance car elle permet d'approfondir notre compréhension du fonctionnement global de ces structures en régime de fort champ électrique. Cela permet de mieux comprendre les mécanismes qui conduisent au claquage. L'objectif final que nous poursuivons, en général, pour une technologie donnée est d'améliorer la rapidité du transistor et sa tenue en tension.

Le moyen expérimental le plus communément utilisé pour l'étude de l'ionisation par choc dans les transistors à effet de champ de type N, est la mesure de l'excès de courant grille associé aux trous créés par ce phénomène susceptibles de remonter vers la grille. Ce courant donne une image de la quantité de trous créés. Or le nombre de trous collectés à la grille ne dépend pas uniquement du nombre de trous créés par ionisation par choc. La polarisation du dispositif, l'auto-échauffement dont il est le siège, mais également des paramètres physiques (discontinuité en bande de valence dans le canal) ou technologiques (longueurs des accès ou niveau de dopage des accès) contrôlent la qualité de la mesure. Un moyen alternatif et riche pour l'étude de l'ionisation par choc consiste dans l'analyse du rayonnement émis par les composants polarisés. Cette technique qui est appelée électroluminescence est notre principal moyen d'étude de

l'ionisation par choc. Les premiers travaux d'électroluminescence dans les transistors III-V ont été menés sur des MESFETs GaAs [Zappe90], des HEMTs conventionnels AlGaAs/GaAs [Zappe90], des TBH sur AsGa [Zanoni93] et des HEMTs pseudomorphiques AlGaAs/InGaAs/GaAs [Tedesco93]. Dans le cas de l'étude de l'ionisation par choc le rayonnement qui nous intéresse est lié à la recombinaison radiative interbande d'électrons avec des trous créés par ionisation par choc. L'étude de ce rayonnement apporte de nombreuses informations permettant de mieux comprendre ce mécanisme, de localiser la zone du composant où apparaît le phénomène et d'analyser la corrélation entre l'ionisation par choc et la diminution des performances des composants ou leur amélioration [Tedesco93]. De façon générale, l'électroluminescence est non seulement un outil d'étude de la physique des composants (énergie de recombinaison, température électronique, qualité des interfaces [Cavassilas2000]...), mais également un outil de caractérisation des conditions de fonctionnement (évolution des spectres en fonction de la polarisation, auto-échauffement [Aniel95], délocalisation des porteurs [Cavassilas2000]...). L'étude du signal lumineux peut être de nature spatiale [Gaddi99], de nature temporelle ou spectrale. Ces différentes études peuvent être couplées. L'étude la plus courante est de nature spectrale. Notre dispositif expérimental n'autorise que cette dernière. La lumière émise est dispersée par un monochromateur et l'intensité lumineuse mesurée par un détecteur (infrarouge, visible).

Le chapitre 5 comprend trois parties d'inégales longueurs. Après une présentation du processus d'ionisation par choc dans les composants, nous consacrons quelques pages à l'approche expérimentale mise en œuvre à l'Institut d'Electronique Fondamentale pour étudier ce phénomène ; ensuite, nous abordons les résultats expérimentaux obtenus avec différents types de composants : les p-HFET Ge/SiGe, le n-HFET Si/SiGe en partie II puis la diode IMPATT SiGe en partie III. Pour chaque famille de composants nous décrivons la structure, rappelons l'état de l'art des performances micro-ondes puis nous discutons des résultats de mesures. Pour cela nous nous appuyons sur d'autres types de mesures (statiques, paramètres S) ou sur des modélisations numériques.

I. Principe et dispositif expérimental

1) Objectif des mesures : caractériser l'ionisation par choc

Le phénomène physique d'ionisation par choc est la création d'une paire électron trou par un porteur chaud qui peut être un électron ou un trou. Si nous prenons l'exemple d'un électron, ce dernier doit avoir une énergie suffisamment importante pour que par interaction coulombienne, il puisse faire passer un électron de valence en bande de conduction. L'énergie de l'électron initial doit donc être au moins supérieure à l'énergie de bande interdite. Pour qu'un électron puisse atteindre une telle énergie, il doit être soumis à un fort champ. En pratique, les champs sont suffisamment élevés en sortie de grille des HEMT pour que le processus d'ionisation ait lieu.

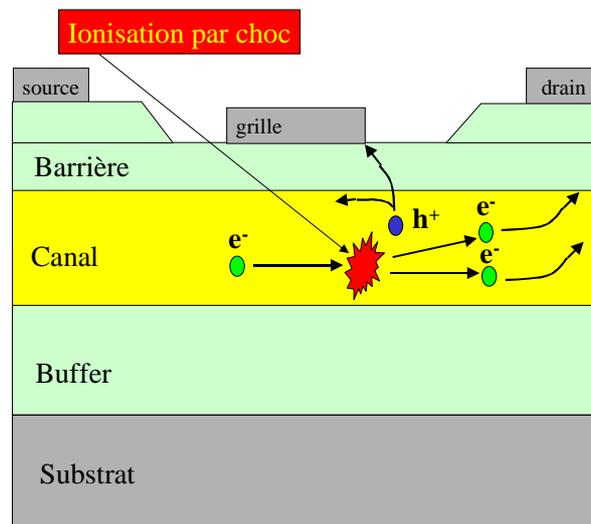


Figure 1 : Schéma de l'ionisation par choc dans un n-HFET [Cavassilas2000b]

Comme présenté figure 1, l'ionisation par choc dans un FET entraîne une augmentation du courant par la création d'un électron et d'un trou. L'électron se dirige vers le drain, alors que le trou peut remonter le long du canal vers la source ou se diriger vers les couches de SiGe (il n'y a pas de barrière de potentiel pour les trous) et rejoindre la grille. Cet excès de courant de trous est mesurable et permet en partie de caractériser l'ionisation par choc dans les transistors à effet de champ. Les trous qui ne rejoignent pas la grille se déplacent vers la source dans le canal. Ils sont alors en présence d'électrons qui font le chemin en sens inverse. Or les électrons et les trous, lorsqu'ils sont en présence, ont une forte tendance à se recombiner, radiativement ou par effet Auger. La recombinaison radiative implique une émission de photon qui est appelée dans ce cas électroluminescence. Le processus ionisation-électroluminescence est représenté figure 2. Dans

un pHFET, ce sont les trous qui peuvent créer l'ionisation par choc ; sinon, le processus est identique : un trou énergétique fait passer un électron de la bande de valence en bande de conduction, le trou créé se dirige vers le drain et l'électron peut soit rejoindre la grille, soit remonter vers le source et se recombiner, radiativement ou non. L'analyse du courant grille (excès d'électrons) et l'étude spectrale de l'électroluminescence sont nos deux moyens expérimentaux d'étude de l'ionisation par choc dans les transistors.

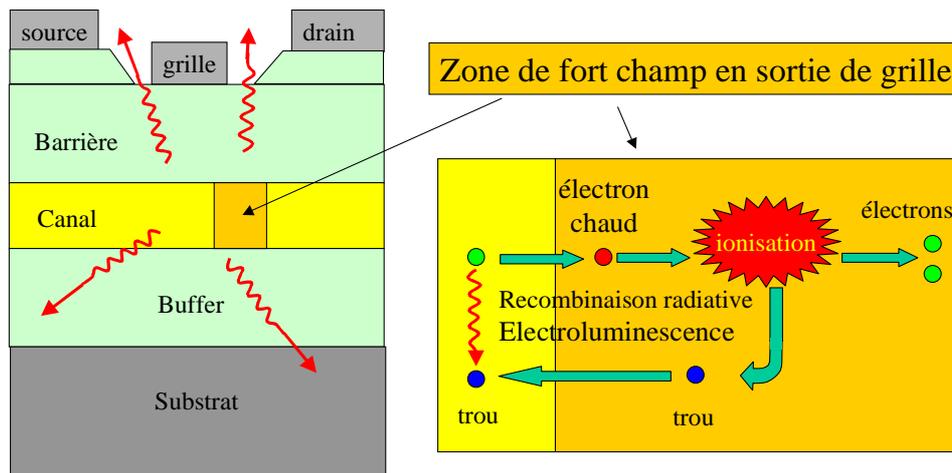


Figure 2 : Schéma de l'ionisation et de l'électroluminescence dans un HFET de type n [Cavassilas2000b]

Ces mesures d'électroluminescence donnent accès à des informations non seulement sur l'ionisation par choc, mais aussi sur le spectre énergétique des porteurs (thermalisés ou balistiques), sur leur confinement dans les structures de basse dimension, sur la présence éventuelle d'états localisés et l'auto-échauffement des structures.

2) Dispositif expérimental

Le dispositif est constitué de deux modules distincts : le support qui permet de polariser ou même de refroidir les composants et le système de collection et de mesure du signal d'électroluminescence. Le système de collection et de mesure d'électroluminescence comprend :

- 1/ une table optique (marbre) ;
- 2/ différents accessoires : lentille convergente, miroir, binoculaire ;
- 3/ un spectromètre ;
- 4/ un détecteur germanium ;
- 5/ une détection synchrone ;
- 6/ un ordinateur

Quelle que soit la station de mesure, les composants sont polarisés par des pointes hyperfréquences reliées à des câbles 50 Ω . Cela permet de faire fonctionner les composants dans les meilleures conditions de stabilité. Ils sont alimentés par un signal carré. Dans notre dispositif,

la détection sera donc synchronisée sur le générateur. Le générateur d'impulsion utilisé est un HP 8110A.

Une fois polarisé, le composant peut émettre de la lumière. Afin de récupérer ce signal lumineux, on utilise un montage optique constitué d'un objectif et de miroirs. Les miroirs sont orientés de façon à ce que le signal aille vers le système de mesure décrit ci-après.

Le marbre et les accessoires : Une table optique (anti-vibration) supporte le système de guidage du signal lumineux, ainsi que le spectromètre et le détecteur germanium. Le signal réfléchi par le montage miroirs/objectif est réfléchi par un autre miroir puis est focalisé sur l'entrée du spectromètre par une lentille convergente.

Le spectromètre : L'appareil utilisé est un ISA Jobin Yvon HR 460. Le spectromètre est piloté exclusivement par ordinateur. Le filtrage en longueur d'onde du signal lumineux est effectué par un réseau de diffraction. La résolution du réseau est de 600 traits/mm. Le spectromètre peut aller jusqu'à 0,7 eV au minimum (soit environ 1800 nm au maximum). Les fentes peuvent s'ouvrir à 2 mm maximum.

Le détecteur : Le détecteur placé en sortie du spectromètre est constitué d'un cristal de Germanium. Les porteurs créés par photogénération sont accélérés grâce à une tension de 250 V. Ils peuvent créer d'autres porteurs par l'ionisation par choc. Le courant est donc amplifié par un phénomène d'avalanche. Le détecteur est refroidi à basse température (77 K) ce qui réduit le bruit d'une façon considérable et augmente la sensibilité.

La détection synchrone : nous utilisons une détection synchrone numérique EG&G 5209. Cette dernière est synchronisée sur le générateur d'impulsions.

L'ordinateur : un PC Pentium équipé d'une carte GPIB 32 bits National Instruments contrôle le spectromètre et l'appareil de détection synchrone. Le programme utilisé a été développé sous le logiciel LABVIEW.

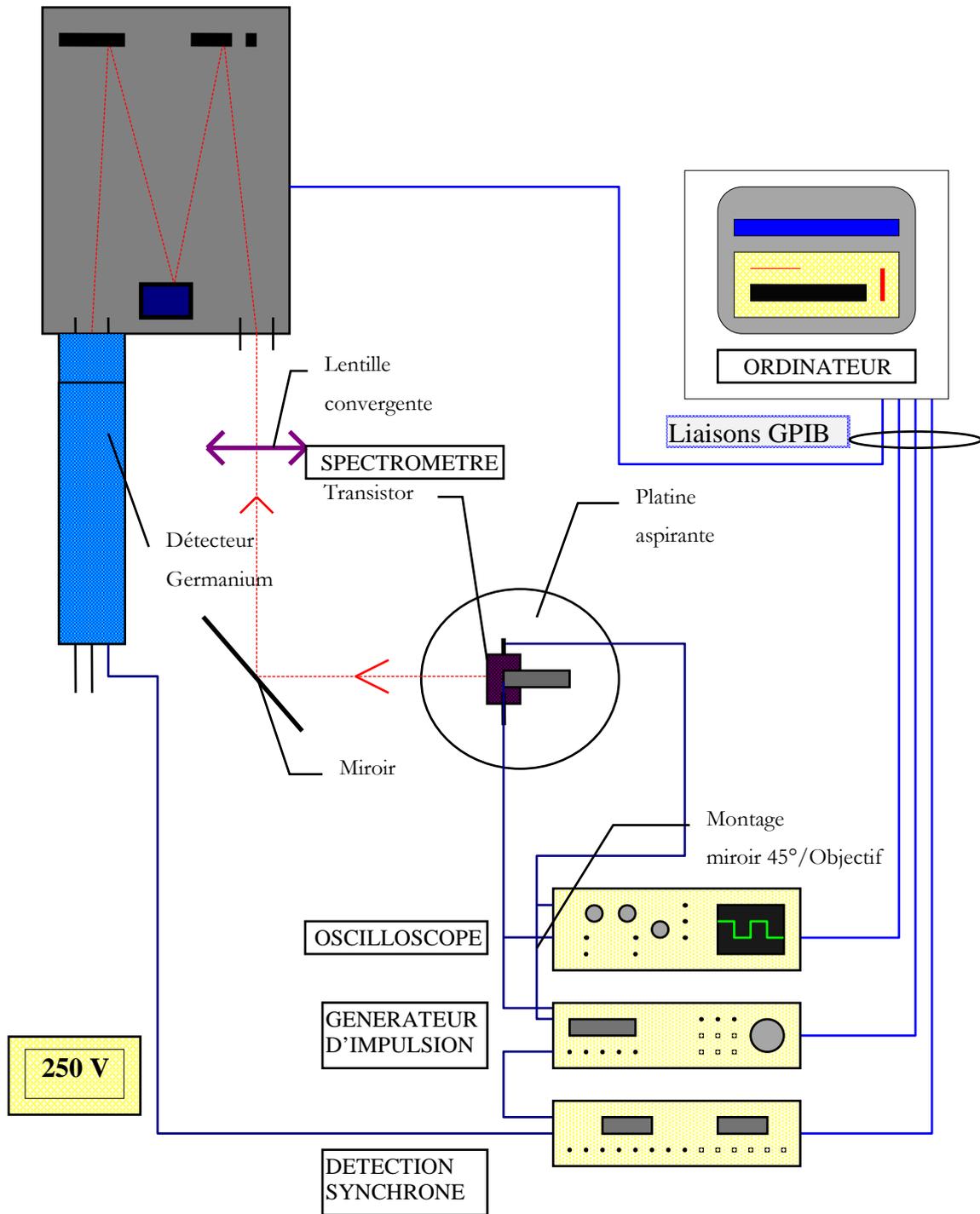


Figure 3 : Dispositif expérimental dans son ensemble pour les mesures à température ambiante.

Pour les mesures à température ambiante, le composant est placé sur une platine aspirante horizontale comme le montre la figure 3. Pour les mesures à basse température, un cryostat à circulation d'He qui permet de descendre à 1.5 K est utilisé. Il a été mis au point par Stéphane Cabaret et Robert Adde. Dans ce cryostat, le composant est fixé sur un support circulaire creux

(figure 4) placé verticalement. Comme à température ambiante, il est polarisé à l'aide de pointes hyperfréquences 50 Ω .

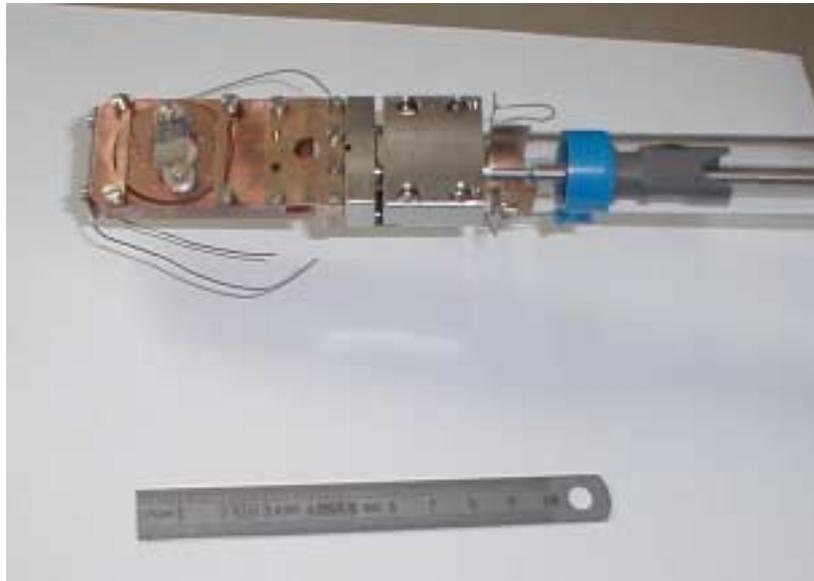


Figure 4 : Porte échantillon creux utilisé dans le cryostat.

A la hauteur du composant, le cryostat possède deux fenêtres si bien que la collection du signal lumineux peut aussi bien être effectuée en face avant, côté pointes qu'en face arrière si le substrat est transparent aux longueurs d'onde observées. La figure 5 montre le système optique en sortie du cryostat. Il est ici composé d'une optique d'appareil photo, d'une lentille et d'un miroir.



Figure 5 : Système optique en sortie du cryostat.

Le même système est ensuite utilisé pour collecter le signal lumineux à travers le spectromètre vers le détecteur germanium.

Après cette description du dispositif expérimental de mesure d'électroluminescence, les paragraphes suivants présentent les résultats obtenus dans des pHFET à canal Ge contraint sur SiGe, dans des nHFET à canal Si contraint sur SiGe et dans des diodes IMPATT à base de Si et SiGe.

II. Résultats expérimentaux sur les HFET Si/SiGe et Ge/SiGe

Nous décrivons les structures, puis nous faisons un rapide survol des performances hyperfréquences et du comportement en bruit de ces composants avant de livrer les résultats obtenus grâce aux mesures d'électroluminescence. Il faut rappeler que lorsque cette étude a été entreprise, les publications concernant l'ionisation par choc dans le Ge et Si contraint étaient rares, seuls quelques articles sur ce phénomène dans l'alliage SiGe existent dans la littérature [Czajkowski92], [Williams96], [Ridley93].

1) Les structures

Rappelons que depuis 30 ans la micro électronique silicium suit la loi de Moore ce qui signifie que tous les 18 mois la capacité d'intégration est multipliée par un facteur 2. La feuille de route qui structure les avancées technologiques nécessaires afin d'assurer une croissance régulière au marché des semi-conducteurs montre qu'un certain nombre de difficultés doivent être dépassées pour que l'amélioration de l'intégration et des performances de ces composants se poursuive à un rythme important (mais vraisemblablement inférieur à celui de la loi de Moore) [Paul99]. Ces difficultés sont nombreuses, citons par exemple : les diélectriques à forte permittivité qui ont vocation à réduire le courant de fuite par effet tunnel, ou l'épaisseur des zones actives. Afin d'améliorer les performances des MOSFET, une démarche intéressante consiste à utiliser des alliages SiGe soit pour générer des discontinuités de bandes (comme dans les TBH SiGe à base abrupte), soit pour améliorer le transport grâce à une gradualité de germanium qui induit un pseudo champ interne (à l'instar des effets obtenus dans les TBH SiGe à base graduelle) ou bien grâce à la contrainte et au confinement. Il est en effet possible de générer de la contrainte et du confinement dans le silicium lui-même pour des transistors de type n (n-HFET Si/SiGe) ou dans le SiGe ou le Ge pour des transistors de type p (p-HFET $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}/\text{Si}_y\text{Ge}_{1-y}$ ou Ge/SiGe). C'est dans cette démarche prospective que s'inscrivait le contrat IST SIGMUND dans lequel l'équipe « phénomènes physiques dans les composants pour les hautes fréquences » où j'ai fait ma thèse était partenaire de janvier 2000 à avril 2003.

Deux types de structures ont été mesurés en électroluminescence au cours de ce travail, le n-HFET à canal Si contraint en tension sur SiGe et le p-HFET à canal Ge contraint en compression sur SiGe.

Dans les HFET étudiés, on fait croître un substrat virtuel de SiGe sur le silicium. L'épaisseur de ce substrat est telle que le SiGe est totalement relaxé en surface ou très fortement relaxé quand il

s'agit de substrat virtuel ultra fin. Sur cette surface on fait croître une couche tampon de SiGe puis les couches actives du transistor dont le cœur pour les composants de type n, est un puits quantique de silicium contraint en tension (figure 6). En bande de conduction la contrainte biaxiale se traduit par un abaissement de l'énergie de deux des six vallées Δ . Ces deux vallées Δ (Δ_2) sont placées dans la direction de croissance des couches de telle sorte que les porteurs voient une masse transverse pour un champ appliqué dans le plan des couches comme nous l'avons discuté au chapitre 4, § IV. La différence d'énergie $\Delta_{2,4}$ est typiquement de 7 meV par pourcent de germanium dans le substrat virtuel relaxé. En régime de mobilité, le transport des électrons est bien supérieur à celui du silicium massif. Aussi longtemps que les porteurs restent confinés dans les vallées Δ_2 , le transport est meilleur que dans le silicium massif. Tant que l'énergie d'un électron n'est pas de l'ordre de grandeur de la discontinuité $\Delta_{2,4}$ alors les interactions avec les phonons optiques non polaires de type f sont inopérantes. Par ailleurs la présence d'un confinement de potentiel en bande de conduction dans le système SiGe/Si/SiGe permet d'éloigner les porteurs des impuretés ionisées et de l'oxyde si on choisit de faire un canal enterré avec un oxyde. Bref, ce système présente bien des qualités. La figure 6 fournit la structure « épitaxiale » typique d'un n-HFET.

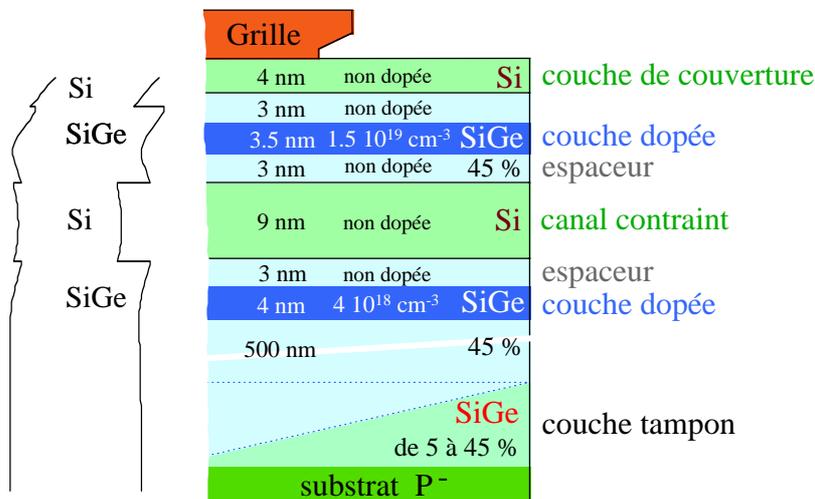


Figure 6 : Constitution et diagramme de bande d'un n-HFET

Nous avons proposé à DaimlerChrysler AG, notre partenaire dans SIGMUND, de réaliser un masque spécifique contenant un grand nombre de transistors unitaires présentant des longueurs et des largeurs de grilles variables et une position de la grille dans l'espace « source-drain »

également variable, ainsi que de nombreux motifs d'épluchages. DCAG a fait réaliser ce masque et l'a utilisé pour la plupart des familles des composants dont nous présentons l'étude ici.

La figure 7 présente la constitution typique d'un p-HFET étudié au cours de ce travail.

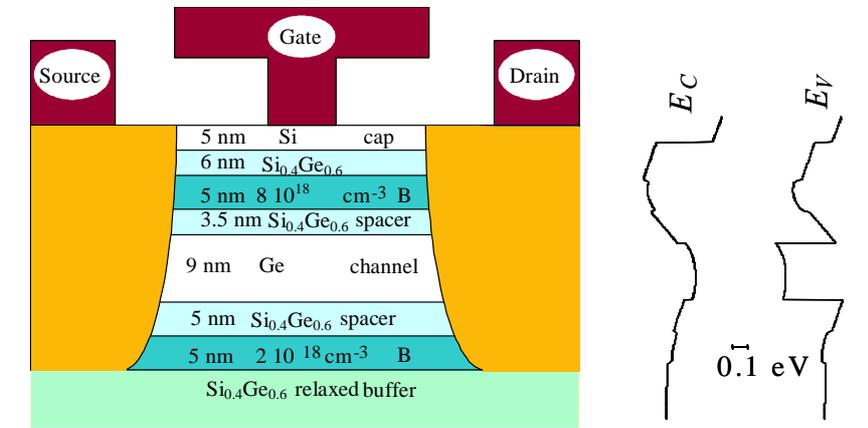


Figure 7 : Constitution et diagramme de bande du p-HFET Ge/SiGe.

La mobilité des trous dans le Ge contraint en compression peut être supérieure à celle des électrons dans le silicium contraint en tension. Aussi est-il apparu intéressant à DCAG de réaliser des p-HFET dont la structure « épitaxiale » est voisine de celle des composants de type n si ce n'est que la composition en germanium du substrat virtuel atteint 60% (figure 7). Une technologie quasi auto-alignée a également été retenue pour la grille. Il n'y a pas eu de substrat fin pour des pourcentages de germanium supérieurs à 50 %. Avec leur substrat épais ces composants souffrent des mêmes problèmes thermiques que les composants n sur substrat virtuel épais. Ils ouvrent la porte à de futurs composants de type p qui ont vocation à remplacer les p-MOSFET standards qui présentent de très faibles mobilités et même les p-MOSFET SiGe qui ne donnent pas des résultats aussi élevés que ceux espérés ils y a quelques années. Il est tout à fait remarquable de souligner que ces composants ont présenté des caractéristiques excellentes à basse température ne révélant aucun effet parasites comme le « collapse » ou l'effet « Kink ». Le seul problème qui a été observé sur un nombre limité de dispositifs, est que la valeur de la résistance de grille augmente à température cryogénique. L'application d'une polarisation élevée sur la grille mettait fin à ce comportement. Ce dernier a été associé à l'absence d'une étape de nettoyage de l'oxyde avant le dépôt de grille. Nous n'avons pas étudié les seuils d'ionisation par choc dans ces dispositifs.

2) Etat de l'art des HFET SiGe à la fin de SIGMUND

Préambule :

L'ensemble des résultats expérimentaux (réseaux courant-tension et performances hyperfréquences) rappelés dans cette section, ont été obtenus par Mauro Enciso dans le cadre de sa thèse soutenue en septembre 2003 [Enciso2003] ; quant aux résultats de modélisation numérique sur Silvaco, ils ont été obtenus par Laurent Giguere qui a travaillé dans l'équipe de septembre 1999 à septembre 2002. Il a notamment réalisé des modélisations numériques de HFET dans les environnements commerciaux de *Silvaco* et *ISE*.

Dans ce paragraphe, nous présentons les performances DC, hyperfréquences et en bruit haute fréquence de n-HFET et de p-HFET. Les composants ont atteint des fréquences maximales d'oscillation et de facteur de bruit minimum à l'état de l'art des composants sur silicium : pour les n-HFETs les meilleures performances ont été : $f_T = 74$ GHz (105 GHz), $f_{MAX} = 188$ GHz (225 GHz) à 300 K (50K) $NF_{min} = 0.3$ dB et $R_n = 41 \Omega @ 2.5$ GHz. Tandis que pour les p-HFET, les meilleures performances obtenues dans le cadre de la thèse de Mauro Enciso ont été : $f_{MAX} = 135$ GHz (180 GHz), $f_T = 55$ GHz (90 GHz) à 300 K (35 K) et $NF_{min} = 0.5$ dB et $R_n = 90 \Omega @ 2.5$ GHz.

Ces performances (cf. figures 8a-8d) restent modestes en comparaison de ce qui est obtenu avec les filières III-V mais si les étapes technologiques deviennent compatibles avec la filière CMOS, les HFET sur SiGe sont susceptibles de devenir des structures alternatives intéressantes pour des applications jusqu'à une vingtaine de GHz. Les figures 8a et 8b représentent f_T et f_{MAX} en fonction de V_{GS} à 300 et à 50 K pour les n- et les p-HFET.

Il est intéressant de souligner les performances en bruit de ces transistors. La figure 8c présente le facteur de bruit minimum (NF_{min}) et le gain associé (G_{ass}) en fonction de la fréquence pour un n-HFET de $L_G = 130$ nm et pour un p-HFET de $L_G = 100$ nm. On peut observer que NF_{min} augmente avec la fréquence, proportionnellement à f / f_{Ti} où f est la fréquence de mesure, et f_{Ti} est la fréquence de transition intrinsèque du gain en courant. Le p-HFET présente une pente de NF_{min} vis-à-vis de la fréquence, plus élevée que celle du composant de type n, car la fréquence de transition du gain en courant est plus élevée dans ces dispositifs.

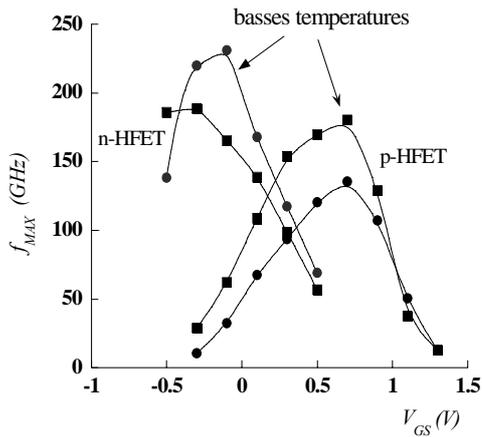


Figure 8a : f_{MAX} pour les n- et les p-HFET à 300 K et à basses températures (50 K)

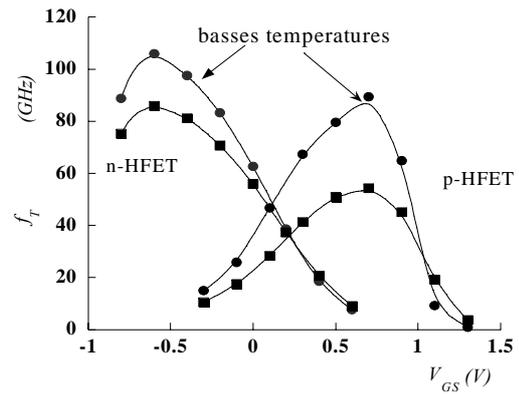


Figure 8b : f_T pour les n- et les p-HFET à 300 K et à basses températures

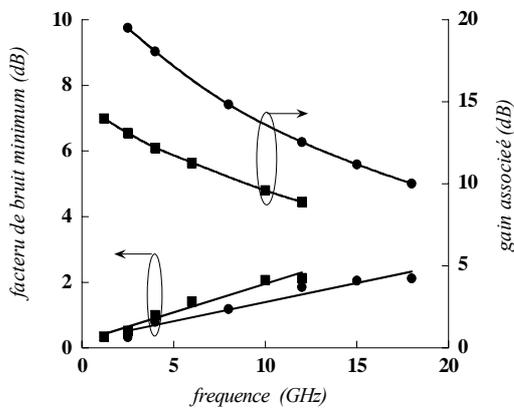


Figure 8c : Evolution fréquentielle de NF_{min} et G_{ass} pour les n-HFET ($V_{DS} = 1.25$ V, $I_{DS} = 70.7$ mA/mm, cercles), pour les p-HFETs ($V_{DS} = 0.75$ V, $I_{DS} = 40$ mA/mm, carrés).

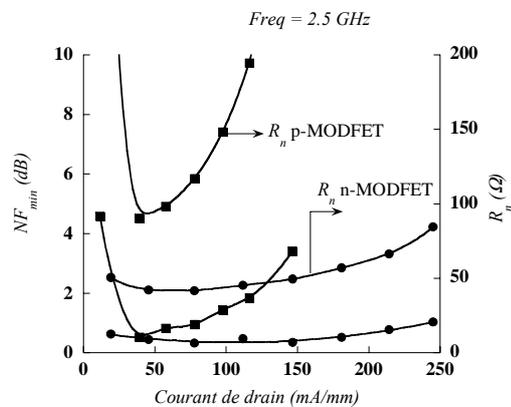


Figure 8d : NF_{min} et R_n vs IDS à 2.5 GHz pour un n-HFET 130 nm ($V_{DS} = 1.25$ V) et pour un p-HFET 100 nm ($V_{DS} = 0.75$ V).

La figure 8d présente le facteur de bruit minimum (NF_{min}) et la résistance équivalente de bruit (R_n) en fonction du courant de drain pour les deux dispositifs de la figure 8c. Le comportement plus linéaire du composant de type n est imputable au fort niveau de dopage tant au dessus qu'au dessous du canal. La transconductance dont le maximum est largement plus élevé dans ce dernier dispositif (715 mS/mm contre 225 mS/mm dans le p-HFET) explique également les meilleures résistances équivalentes de bruit relevées pour le n-HFET. Un NF_{min} de 0.5 dB ($G_{ass} = 14$ dB) à $I_{DS} = -4$ mA et $V_{DS} = -1.25$ V pour le p-HFET, constitue la plus faible valeur jamais rapportée pour un transistor FET SiGe. De même, le n-HFET présente un NF_{min} de 0.3 dB ($G_{ass} = 19$ dB) à $I_{DS} = 7.7$ mA et $V_{DS} = 1.25$ V, comme le montre la figure 8d.

3) Résultats expérimentaux relatifs à l'ionisation par choc dans les p-HFET Ge/SiGe

Etudier l'ionisation par choc dans ces structures HFET est une absolue nécessité car 1/ l'énergie de bande interdite du canal de Germanium est assez faible, l'ionisation par choc peut se produire pour une polarisation assez proche des conditions optimales hyperfréquences ou faible bruit et 2/ l'ionisation par choc accélère le vieillissement des transistors, c'est pourquoi nous avons effectué des mesures d'électroluminescence sur ces composants.

Les porteurs minoritaires créés par ionisation par choc peuvent soit remonter vers la source et se recombiner, soit remonter vers la grille et donner au courant de grille une forme typique en cloche un courant parasite de grille. L'électroluminescence donne des informations sur la localisation des porteurs (dans le canal Ge ou dans le SiGe) et sur leur énergie.

Pour ces pHFET, nous n'avons observé aucune augmentation du courant de grille, une des signature de l'ionisation par choc, pour des tensions de drain jusqu'à 2 V. Ce comportement peut s'expliquer de deux manières : soit cet excès de courant a été écranté par le courant tunnel inverse de la jonction Schottky de grille, soit les électrons n'ont pas pu atteindre la grille à cause de la barrière de potentiel entre le Ge contraint et le SiGe. Une fois hors du puits, les électrons devaient traverser la barrière de potentiel SiGe juste sous la grille si le courant tunnel était plus important, ou bien ils devaient passer la barrière Schottky si le courant était plutôt d'origine thermoionique.

Nous avons en revanche mesuré un signal d'électroluminescence pour une polarisation correspondant au transistor passant (canal ouvert). Ce signal apparaît pour une tension de drain assez faible. Pour ces transistors, l'électroluminescence apparaît donc, dans le cas précis des p-HFET Ge/SiGe, le meilleur moyen pour détecter l'ionisation par choc.

a) Seuils d'électroluminescence

La figure 9 montre les variations de l'intensité d'électroluminescence en fonction de la tension drain-source intrinsèque pour deux tensions de grille. La chute de tension dans les résistances d'accès source et drain a été soustraite. L'électroluminescence est plus importante à fort V_{GS} près de la tension de seuil (1,0 V), lorsque le canal est partiellement déplété et pour un champ électrique tangentiel intense. Le signal d'électroluminescence augmente exponentiellement avec V_{DS} comme le coefficient d'ionisation par choc en fonction du champ électrique. La tension V_{DS} de seuil d'ionisation par choc (0.85 V) autoriserait un porteur balistique à atteindre l'énergie L-

HH1 du tableau I page suivante. L'ionisation par choc suggère donc la présence de porteurs balistiques ou quasi-balistiques dans ces p-HFET Ge/SiGe de longueur de grille de 100 nm.

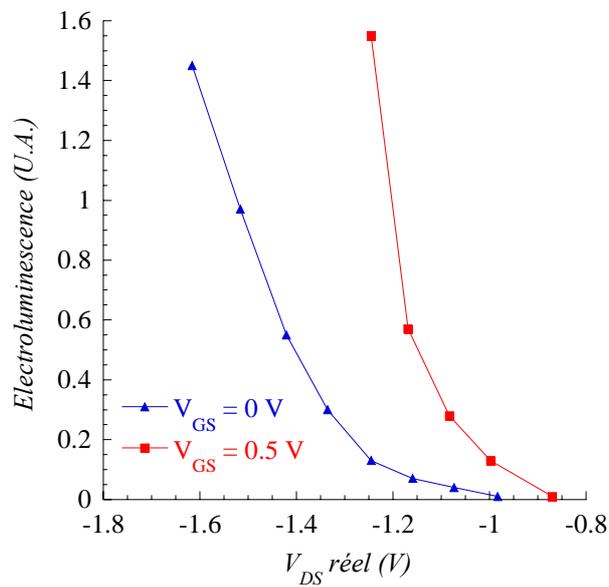


Figure 9 : Intensité du signal d'électroluminescence en fonction de la tension réelle appliquée entre les extrémités de la grille (en ayant soustrait la chute de tension due aux résistances d'accès grille-source et grille-drain) [Richard2004].

b) Interprétation des spectres

Nous avons mesuré les pHFET à température ambiante. La figure 10 représente un spectre d'électroluminescence obtenu pour $V_{GS} = 0.5 \text{ V}$ et $V_{DS} = 1.7 \text{ V}$.

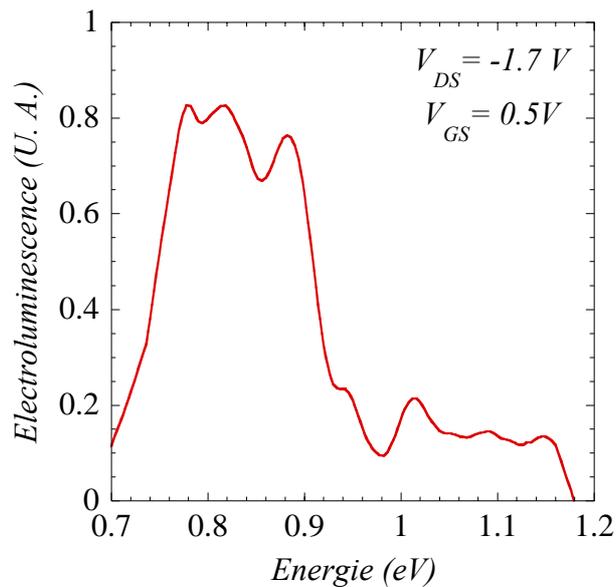


Figure 10 : Spectre d'électroluminescence obtenu à 300 K pour $V_{DS} = 1.7 \text{ V}$ et $V_{GS} = 0.5 \text{ V}$.

La tension de seuil est $V_{TH} = 1,0$ V. Ce spectre se divise en deux zones : deux bosses centrées autour de 0,85 et 1,06 eV. L'ionisation par choc a certainement lieu dans le canal pour trois raisons : 1/ le seuil d'ionisation est plus faible dans le Ge par rapport au SiGe ; 2/ le transport des trous est meilleur dans la couche contrainte de Ge que dans le substrat SiGe très dopé ; enfin, 3/ les trous sont confinés dans le puits quantique : lorsqu'ils en sortent, leur énergie cinétique est diminuée de la discontinuité de bande de valence. La tension de polarisation nécessaire pour obtenir de l'ionisation par choc dans les couches de SiGe est plus élevée que pour déclencher ce phénomène dans le canal de Ge contraint.

Pour toutes ces raisons, l'ionisation par choc a certainement lieu dans le canal, plus précisément dans la zone d'accès grille-drain, là où sont les porteurs très énergétiques (communément dénommés porteurs chauds) : l'énergie du pic de recombinaison radiative est élevée par rapport à l'énergie de bande interdite donc l'ionisation par choc est due à des porteurs chauds.

L'hétérojonction entre le Ge contraint en compression et le $\text{Si}_{0,4}\text{Ge}_{0,6}$ est de type I. Mais la discontinuité en bande de conduction est très faible et sera négligée. Les électrons sont en vallée L et l'énergie de bande interdite E_G est 627 meV à température ambiante. Cette énergie est un peu plus faible que celle du germanium massif (662 meV). A 300 K, la bande interdite directe du Ge massif est de 812 meV alors qu'elle est de 923 meV dans le Ge contraint. A $k = 0$, non seulement les trous mais aussi les électrons sont fortement confinés.

Un algorithme de la fonction enveloppe associé à l'hamiltonien $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ à 30 bandes présenté chapitre 2, § VI fournit les niveaux d'énergie confinés dans le bande de valence pour un puits carré de 9 nm. Le tableau I présente les différences d'énergie entre les premières sous-bandes de trous (Heavy Hole HH et Light Hole LH), la vallée L et la première sous-bande d'électrons en vallée Γ (E1). La gamme d'énergie étudiée est limitée à 1.2 eV, correspondant à l'énergie maximale où la recombinaison radiative a été détectée.

Transition	Energie (meV)	Transition	Energie (meV)
L-HH1	646.7	E1-HH1	1005.2
L-HH2	701.4	E1-HH2	1059.9
L-LH1	758.1	E1-LH1	1116.6
L-HH3	785	E1-HH3	1143.5
L-LH2	822.3	E1-LH2	1172.2
L-LH3	905.2	E1-LH3	1180.8

Tableau I : Différences d'énergie entre les premières sous-bandes de trous et le minimum de la bande de conduction (vallée L) ou la première sous-bande d'électrons en Γ (E1).

L'analyse du spectre est complexe parce que plusieurs phénomènes antagonistes entrent en jeu :

1/ la recombinaison radiative qui implique des électrons de la vallée L nécessite un phonon pour satisfaire la conservation du vecteur d'onde. L'énergie du phonon optique est de 37 meV. Donc le pic de luminescence devrait correspondre à l'absorption ou à l'émission de phonon (à $T = 300$ K).

2/ L'auto échauffement du composant à cause de la mauvaise conductivité thermique de l'alliage SiGe décale les énergies vers le bas de quelques dizaines de meV. L'auto échauffement est difficile à quantifier mais il a lieu à cause de la très forte densité de puissance échangée entre les trous et le réseau cristallin en régime d'ionisation par choc.

3/ le champ électrique local augmente la courbure des bandes dans le puits quantique. Si les électrons et les trous qui se recombinent appartiennent à des états localisés de la bande interdite, la présence de ce champ réduit l'énergie de recombinaison radiative. Pour l'heure, le modèle $\mathbf{k.p}$ utilisé n'est pas associé à la résolution de l'équation de Poisson. Un algorithme Schrödinger Poisson unidimensionnel a été utilisé dans l'approximation de la masse effective mais il n'est pas assez précis à cause de l'anisotropie de la bande de valence.

4/ Les porteurs sont très énergétiques : ils ne restent pas au sommet de la sous-bande donc la gamme d'énergie où se produit la recombinaison radiative est très large.

De plus, la bande interdite indirecte Γ - Δ de la couche relaxée de SiGe est réduite à cause du fort dopage Bore ($8 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$). Elle passe de 0.89 eV à 0.82 eV [Shi2003]. Cette réduction de la bande interdite due au dopage ("band gap narrowing") augmente le confinement des porteurs ce qui

peut favoriser la recombinaison radiative. Là encore, l'auto échauffement décale la bande interdite vers des énergies plus basses. La recombinaison indirecte de porteurs situés dans la couche supérieure de SiGe contribue certainement au large pic de recombinaison centré à 0.85 eV. Pour une polarisation positive de la grille, les électrons peuvent traverser facilement la barrière en bande de conduction entre le puits quantique et la couche de SiGe. Mais la bande interdite est indirecte et l'intensité de cette recombinaison radiative n'est pas comparable à la recombinaison directe dans le puits. La bande interdite directe du $\text{Si}_{0.4}\text{Ge}_{0.6}$ est 2 eV donc il ne peut pas y avoir de recombinaison directe dans le substrat.

En conclusion, l'électroluminescence observée sur plusieurs composants et pour plusieurs conditions de polarisation est attribuée à la recombinaison indirecte entre la vallée L de la bande de conduction et les sous-bandes de trous et à la recombinaison directe au centre de la zone de Brillouin entre la sous-bande E1 d'électrons et les sous-bandes de trous. L'énergie du pic d'électroluminescence est à plus basse énergie que celle attendue pour plusieurs raisons : l'auto échauffement, le fort champ électrique, la présence de phonons pour la recombinaison indirecte et l'énergie élevée des trous.

Il aurait été extrêmement intéressant de réaliser des mesures sur les p-HFET à température cryogénique. Malheureusement au cours de manipulations la totalité des dispositifs dont nous disposions ont été endommagés. Le nombre de transistor était très limité.

4) Quelques résultats concernant l'ionisation dans le n-HFET

Le courant de grille a été systématiquement mesuré dans les transistors et nous n'avons pas observé d'ionisation par choc « canal ouvert ». Cela constitue une surprise car notre expérience des HEMTs III-V nous invitait à penser que nous en mesurerions et d'autre part des modélisations numériques utilisant le logiciel commercial « Atlas » de Silvaco nous laissaient penser que devait se produire de l'ionisation par choc canal ouvert dans les n-HFET Si/SiGe. Nous reviendrons sur ces simulations numériques un peu plus loin.

En revanche, quand le canal des n-HFET est fermé il nous est arrivé de noter la présence d'ionisation par choc à travers la caractéristique $I_G(V_G)$. La figure 11 présente l'évolution typique de I_G avec V_{GS} pour un HFET Si/SiGe de $L_G = 0.13 \mu\text{m}$ canal fermé.

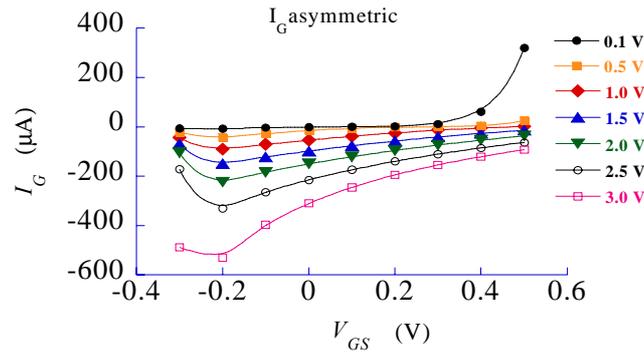


Figure 11 : Caractéristiques $I_G (V_G)$ pour un pour un HFET Si/SiGe de $L_G = 0.13 \mu\text{m}$ canal fermé [Enciso2003].

Il est intéressant de constater que le pic de courant de trous (créés en régime d'ionisation) apparaît pour des polarisations de drain très faibles 0.5 – 1V (parfois voisines de 0 V !). Cela laisse à penser que le processus est largement contrôlé par la grille. Les porteurs sont injectés par effet tunnel à partir de la grille vers le « cap layer », la zone dopée et vers le canal. Là, ils sont accélérés par le champ électrique entre le bord de la grille et la zone implantée du drain et peuvent exciter par choc un électron de la bande de valence en raison de la faible largeur de bande interdite du silicium contraint. Ils génèrent ainsi une paire électron trou. Une nouvelle fois, nos résultats expérimentaux nous font penser que la qualité de la surface du « cap layer » et notamment la nature des états de surface qui assurent le blocage du niveau de Fermi sont des éléments clés de ce processus complexe car suivant la nature de leur substrat virtuel certains composants présentent ou non des signes d'ionisation par choc « canal fermé ». D'autre part, l'ionisation canal fermé n'est apparente sur les caractéristiques $I_G - V_G$ que si la distance grille-drain est petite (inférieure à 1 μm).

a) Simulation hydrodynamique de n-HFET sous Silvaco

Arrêtons nous un peu sur les résultats de modélisation numérique obtenus par Laurent Giguierre dans le cadre de sa thèse. Pour des longueurs de grille inférieures à 300 nm, il est nécessaire de résoudre le système d'équations hydrodynamiques en régime permanent. Il s'agit d'un jeu d'équations dans l'espace réel satisfaisant aux équilibres du nombre de porteurs et des échanges d'énergies entre le milieu et les porteurs qui s'appuient sur des hypothèses lourdes concernant la forme de la fonction de distribution dans l'espace réciproque. Cette approche non locale permet de prendre en considération le transport non stationnaire. Il s'agit d'une approche simplifiée de résolution de l'équation de Boltzmann. Elle fournit des résultats pertinents pour des configurations où la distribution de porteurs même très excités est représentée de manière satisfaisante par une fonction de Maxwell Boltzmann pourvue d'une température locale T_c . Dans

les autres cas, elle atteint vite ses limites. Une forte densité d'état constitue un critère d'efficacité dans bien des cas. Il est indubitable que s'agissant d'un processus marginal comme l'ionisation par choc (pour les gammes de polarisation où nous l'analysons), cette approche est discutable. Cependant à titre d'information nous livrons ici quelques résultats.

Afin de modéliser l'ionisation par choc dans les n-HFET SiGe nous avons choisi le modèle de Toyabe qui dérive le modèle stationnaire de Selberherr [Selberherr84]. La différence majeure réside dans le fait que le modèle de Toyabe calcule le coefficient d'ionisation à partir de la température électronique des électrons [Toyabe96]. Lorsque l'étude a été menée en 2001 les coefficients d'ionisation dans le silicium contraint en tension sur SiGe n'étaient pas disponibles dans la littérature. Les résultats du chapitre 4 n'avaient pas encore été obtenus. C'est donc avec les coefficients d'ionisation du silicium massif que Laurent Giguère a réalisé ses simulations. Cela constitue certes une nouvelle approximation importante mais nous allons principalement discuter l'existence de l'ionisation canal ouvert et surtout nous allons évaluer des différences entre diverses modélisations réalisées sur des structures variées.

Le taux de génération de paires électron-trou est donné par : $G = \alpha_n \frac{J_n}{q} + \alpha_p \frac{J_p}{q}$

où α_n et α_p sont les coefficients d'ionisation des électrons et des trous. Les paramètres du modèle de Toyabe ont été obtenus par simulation particulières Monte-Carlo de l'équation de Boltzmann

par Fischetti [Fischetti97] (Figure 12). Le coefficient d'ionisation est : $\alpha_n = A_n \exp\left(\frac{-B_n}{E_{eff}}\right)$

où le champ effectif est donné par : $E_{eff} = \frac{3}{2} \frac{kT_n}{q \cdot L_{REL}}$

et la longueur de relaxation est $L_{REL} = v_{sat} \cdot \tau_i$

Les paramètres ajustables A_n , B_n et τ_i sont indépendants du temps de relaxation de l'énergie.

Les paramètres retenus sont : $\begin{cases} A_n = 7.86 \times 10^5 \text{ cm}^{-1} \\ B_n = 6.35 \text{ V/cm} \\ \tau_i = 0.613 \text{ ps} \end{cases}$

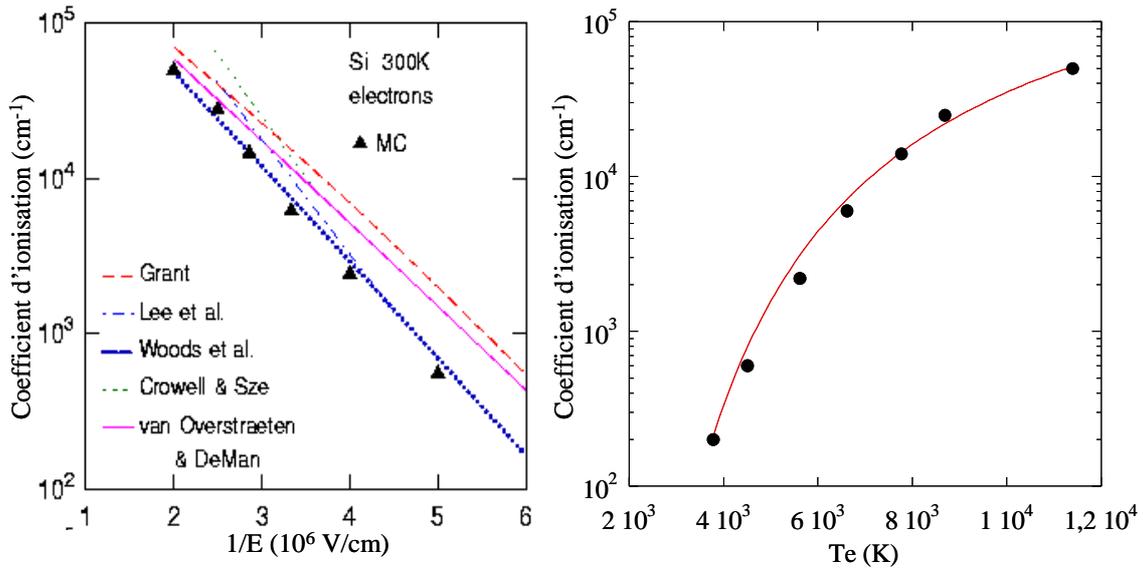


Figure 12 : Coefficients d'ionisation dans du Si massif [Fischetti97] en fonction de $1/E$ et ajustement de ce paramètres avec le modèle de Toyabe en fonction de T_e

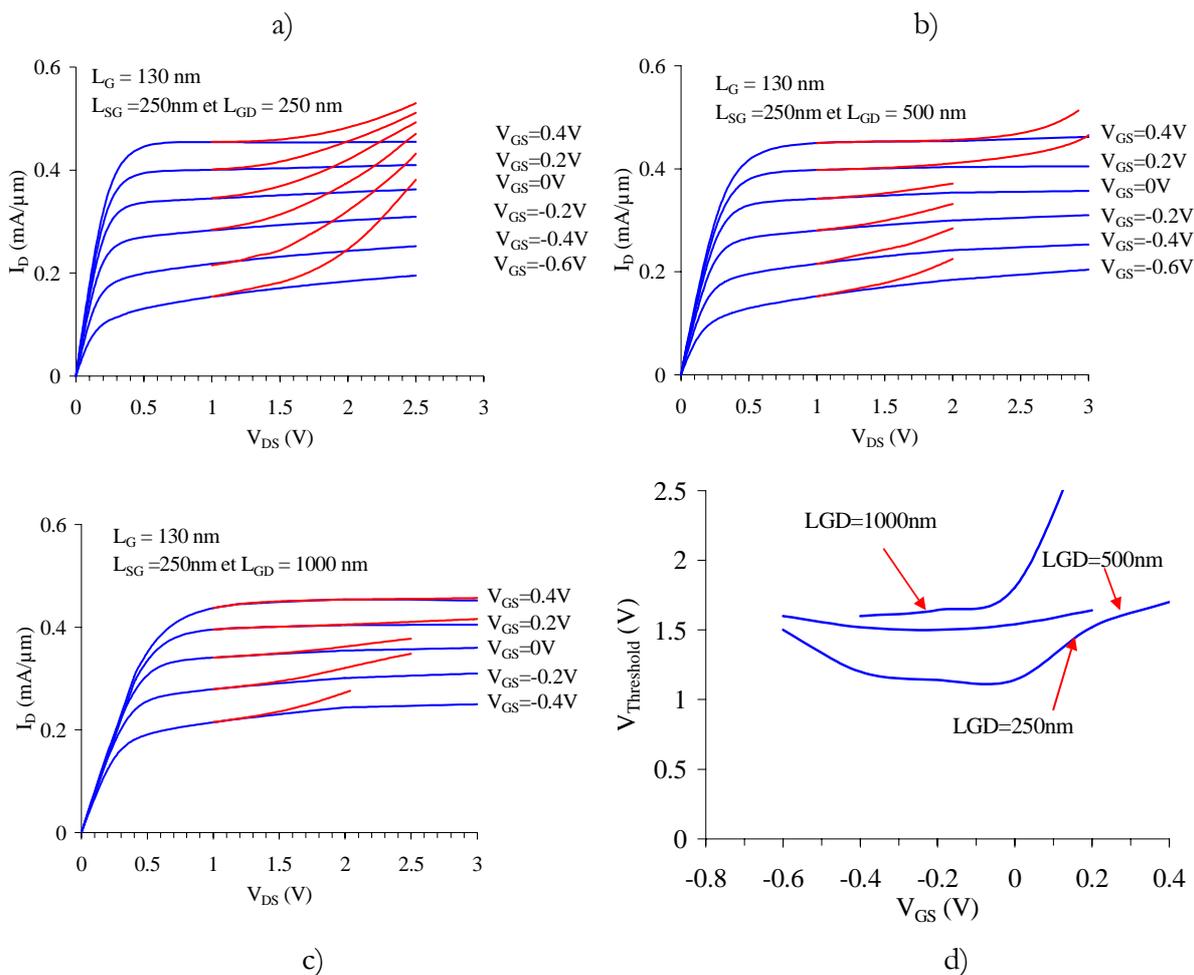
L. Giguere a simulé des n-HFET de $0.13 \mu\text{m}$ à 300K dans Blaze (Silvaco) afin de préciser la dépendance du seuil d'ionisation par choc en fonction de la distance grille-drain : L_{GD} , de L_G et de la polarisation tout en estimant concomitamment les performances micro-ondes. Afin d'obtenir le seuil d'ionisation par choc sur les caractéristiques courant tension, il a systématiquement calculé la différence entre la conductance de sortie extrinsèque g_d sur les réseaux pour lesquels l'ionisation par choc a été prise en compte et le g_d sur les réseaux renvoyant à des simulations n'incluant pas ce processus physique. La différence que nous avons retenue pour fixer le seuil est de 2%. La précision sur le seuil d'ionisation est estimée à $\pm 20 \text{ mV}$.

Les figures 13 représentent les réseaux courant tension simulés de n-HFET de $L_G = 130 \text{ nm}$ présentant une longueur d'accès grille source de 250 nm alors que la distance grille-drain varie de 250 nm à $1 \mu\text{m}$ avec l'ionisation par choc (courbes croissantes à grand V_{DS}) et sans (courbes constantes à grand V_{DS}). On constate que le seuil d'ionisation se produit pour une polarisation d'autant plus faible que L_{GD} est petit. La gamme d'utilisation pour le composant de $L_{GD} = 250 \text{ nm}$ est très limitée. Pour ce composant la plus petite valeur de V_{DS} relevée pour laquelle se produit de l'ionisation est 1.14 V .

V_{GS}	0.4 V	0.2 V	0 V	-0.2 V	-0.4 V	-0.6 V
V_{Th-II}	1.7 V	1.52 V	1.14 V	1.14 V	1.2 V	1.5 V

Tableau II : Variation du seuil d'ionisation par choc de V_{DS} noté V_{TH} en fonction de V_{GS} .

Le tableau II fournit la dépendance de la tension de seuil d'ionisation (en V_{DS}) pour différents V_{GS} . Le seuil de l'ionisation par choc diminue quand V_{GS} augmente de (de $-0,6$ à 0 V) car l'énergie gagnée par les électrons du canal augmente. Mais quand $V_{GS} > 0$ V, la concentration de porteurs devient très élevée et la probabilité d'ioniser diminue car le champ électrique (maximum) local diminue. Il apparaît que le minimum du seuil d'ionisation survient alors que la transconductance est maximum (i.e. quand le produit de la concentration de porteurs et de leur énergie devient maximum). Une recette simple pour augmenter la tenue en tension du transistor est d'augmenter la longueur de l'accès grille-drain.



Figures 13 : Réseaux courant tension simulés d'un HFET de $L_G = 130$ nm pour $L_{GD} = 250$ nm (a), $L_{GD} = 500$ nm (b), $L_{GD} = 1 \mu$ m (c). La figure 13d représente la tension de drain seuil en fonction V_{GS} pour plusieurs L_{GD} .

Toutefois les variations de V_{TH-II} avec V_{GS} sont petites (250 mV) sur la gamme de tension de contrôle de la grille. Nous soulignons que V_{TH-II} ne suit pas la tension V_{GD} . Cela est cohérent avec les résultats de mesures de transistors de longueur de grille ultra courte dans lesquels le transport est hautement non stationnaire.

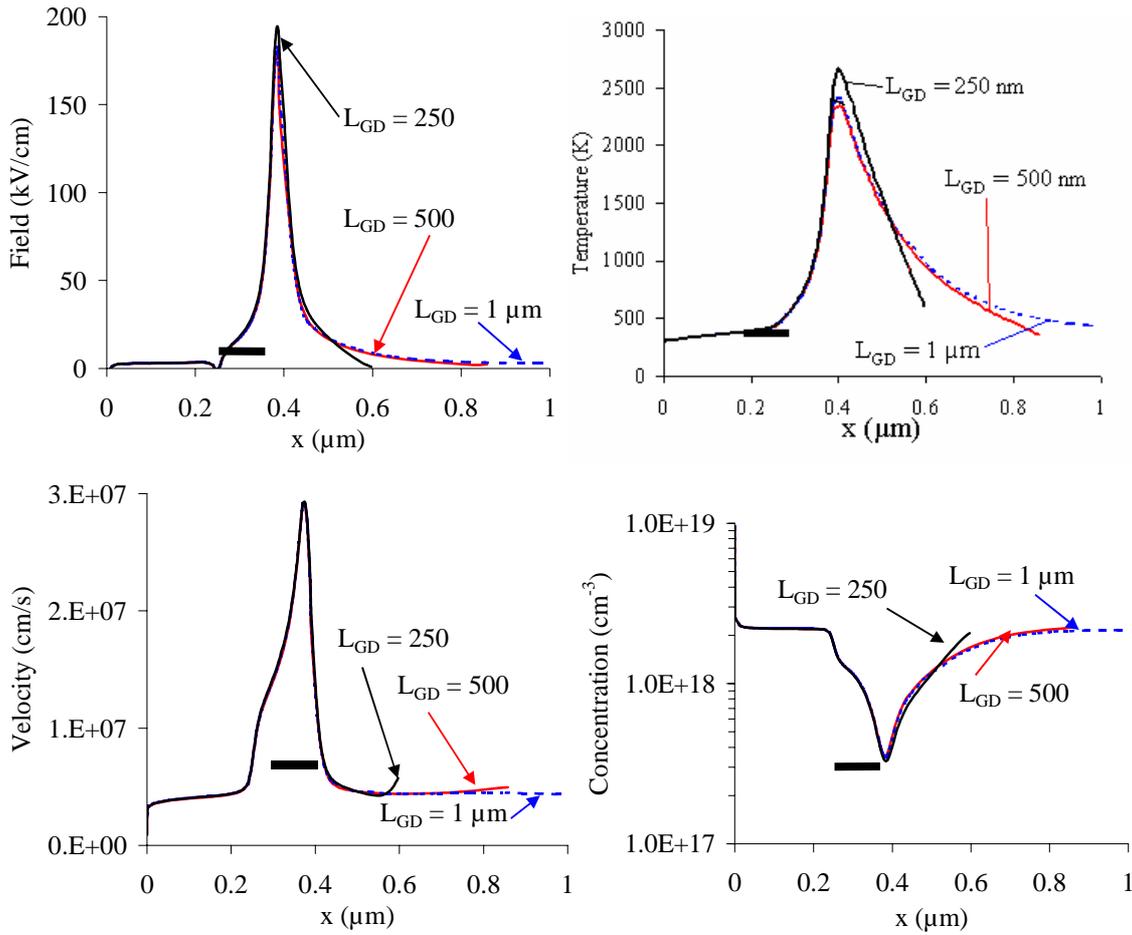
La tension de seuil d'ionisation par choc $V_{\text{TH-II}}$ et présentant trois distances grille-drain 250, 500 nm et 1 μm est représentée figure 13d. On observe que $V_{\text{TH-II}}$ vaut respectivement 1.14 V, 1.5V et 1.6 V à $V_{\text{GS}} = -0.2\text{V}$ correspondant à $g_{\text{m Max}}$ pour un n-HFET de 130 nm. Dans le même temps R_{D} vaut 0.17, 0.39 et 0.81 $\Omega\cdot\text{mm}$ respectivement pour des densités de courants de 0.286, 0.291 et 0.233 A/mm.

La différence de $V_{\text{TH-II}}$ entre deux longueurs $L_{\text{GD}} = 500$ et 1000 nm est seulement de 100mV. Une fraction est due à la différence de chute de potentiel ΔV_a dans l'accès drain et vaut $\Delta V_a = 65$ mV. Toutefois la différence de $V_{\text{TH-II}}$ pour les composants de $L_{\text{GD}} = 500$ et 1000 nm due à la zone active est 35 mV ce qui est presque équivalent à l'incertitude de la tension de seuil de l'ionisation (± 20 mV). On en conclut qu'au delà de 500 nm, toute augmentation de L_{GD} n'entraîne pas d'augmentation supplémentaire du seuil d'ionisation.

En revanche, il y a une variation significative de $V_{\text{TH-II}}$ lorsque L_{GD} varie de 250 à 500 nm. La différence de seuil d'ionisation est alors de 295 mV ce qui est cette fois très grand devant l'incertitude. Les figures 14 montrent les principaux paramètres moyens locaux des électrons dans un n-HFET de $L_{\text{G}} = 130$ nm suivant l'axe source-drain au milieu du canal pour trois distances grille-drain, respectivement $L_{\text{GD}} = 250, 500$ et 1 μm . La tension de grille est $V_{\text{GS}} = -0.2$ V et celle de drain est choisie de telle sorte que $V_{\text{DS}} - (R_{\text{S}} + R_{\text{D}})I_{\text{DS}}$ soit 1.5 V.

La concentration électronique et la vitesse moyenne des porteurs sont voisines dans les trois structures ce qui laisse à penser que les performances dynamiques seront voisines. En revanche, on peut noter que pour le dispositif de $L_{\text{GD}} = 250$ nm, le champ électrique longitudinal doit devenir nul sur le bord de la zone de drain fortement dopé ce qui se traduit par une valeur maximale plus élevée (pour un potentiel fixé) que dans les autres configurations. La température électronique atteint, elle aussi, des valeurs plus élevées dans cette configuration, cela à cause du profil de champ électrique. Ces éléments nous montrent clairement qu'un accès grille-drain de 250 nm est trop petit. Cela éclaire la discussion sur les seuils d'ionisation en fonction de L_{GD} .

D'autre part, une longueur d'accès L_{GD} de 500 nm permet au champ électrique de redescendre de manière moins brutale ce qui est profitable à la fiabilité du dispositif puisque cela repousse le seuil d'ionisation. Les courbes de champs électriques pour $L_{\text{GD}} = 500$ et 1000 nm se superposent totalement ce qui indique qu'il n'y a aucun intérêt à prendre un accès plus grand que 500nm.



Figures 14 : Champ électrique, température électronique, vitesse moyenne et concentration des électrons dans l'axe source-drain au milieu du canal d'un n-HFET de $L_G = 130$ nm, $L_{SG} = 250$ nm et $L_{GD} = 250, 500$ et 1000 nm pour $V_{GS} = -0.2$ V et $[V_{DS} - (R_S + R_D)I_{DS}] = 0.5$ V.

Intéressons nous maintenant aux performances micro-ondes en fonction de L_{GD} . Les paramètres S sont calculés sous Silvaco. Les paramètres sont extraits par des techniques mises en place pour les mesures. Une distance grille – drain importante se traduit par une augmentation de R_D . Lorsque L_{GD} passe de 250 à 500 puis à 1000 nm R_D augmente d'un facteur voisin du rapport des longueurs L_{GD} comme le montre le tableau III. Cela montre la fiabilité des méthodes d'extraction et révèle également que les contributions dues à la métallisation et à la résistance de contact sont négligées. La transconductance est maximale pour $V_{GS} = -0.2$ V.

L_{GD} (nm)	250	500	1000
R_S (Ω .mm)	0.17	0.17	0.16
R_D (Ω .mm)	0.17	0.39	0.81

Tableau III : Dépendance de R_S et R_D avec L_{GD} pour $L_{SG} = 250$ nm.

La figure 15 illustre la dégradation des performances micro-ondes en fonction de L_{GD} , toujours pour le n-HFET de 130 nm. La dépendance de la fréquence de transition du gain en courant f_T

en fonction de L_{GD} est modeste. Il diminue de 60 à 56 GHz lorsque L_{GD} passe de 250 nm à 1 μm pour $V_{DS} = 1\text{V}$. L'influence de R_D sur f_T est faible car la fréquence de transition intrinsèque vaut la même valeur dans les deux cas : 63 GHz. Le résultat serait tout autre si nous discutons l'influence de R_S . La fréquence maximale d'oscillation f_{MAX} dépend, quant à elle, bien davantage de R_D . C'est ainsi que f_{MAX} passe de 160 GHz à 139.4 GHz lorsque L_{GD} augmente de 0.25 à 1 μm (pour $V_{DS} = 1\text{V}$). En conclusion, un compromis entre un faible seuil d'ionisation par choc et une fréquence maximale d'oscillation pas trop dégradée serait $L_{GD} = 400\text{ nm}$.

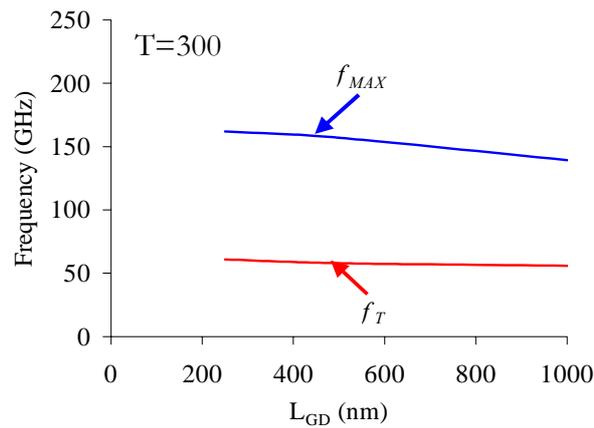


Figure 15 : f_T et f_{MAX} en fonction de L_{GD} (R_D) ($V_{GS} = -0.4\text{V}$) pour un n-HFET de $L_G = 130\text{ nm}$.

Discutons maintenant la dépendance du seuil d'ionisation par choc en fonction de la longueur de grille. Plus la grille est courte plus l'énergie moyenne de électrons augmentent en sortie de grille, pour une chute de potentiel identique dans la zone active réduisant concomitamment la tension V_{DS} qui constitue le seuil de l'ionisation par choc (notée V_{TH-II}). Le tableau IV montre la dépendance de V_{TH-II} avec L_G .

L_G (nm)	250	130	100	70
V_{TH} (V)	1.45	1.14	1.08	1.0

Tableau IV : Dépendance de la tension de seuil de l'ionisation par choc V_{TH} avec L_G pour $L_{SG} = L_{GD} = 250\text{ nm}$.

Quand L_G passe de 250 à 70 nm, V_{TH-II} diminue de 1.45 à 1.0 V. La gamme de polarisation du dispositif se trouve très réduite.

b) Luminescence des n-HFETs

Différentes technologies de n-HFET ont été mesurées par électroluminescence à 300K et à température cryogénique. Les mesures effectuées à température ambiante n'ont donné que très

peu de résultats significatifs. Cela signifie qu'il a parfois été possible d'obtenir un signal de très faible intensité mais qu'aucun spectre n'a été obtenu et que la reproductibilité des mesures était, en générale, assez médiocre. A température cryogénique les résultats ont été plus intéressants, reproductibles et exploitables. Tous les dispositifs analysés n'ont pas luminescé mais cela n'est guère surprenant car les caractéristiques électriques ne révélaient aucune trace d'ionisation par choc (on sait depuis l'analyse des p-HFET que ce n'est pas un critère tangible). A température cryogénique, certains composants ont fourni des signaux de luminescence « canal ouvert » et « canal fermé » alors que d'autres technologies n'ont fourni de signaux de luminescence qu'en condition « canal fermé ». Nous détaillons ces résultats dans ce paragraphe.

A température cryogénique, trois technologies ont été analysées. Il s'agit des technologies 2802, 2798 et 2816. Les empilements de couches des zones actives varient légèrement entre ces trois technologies. Fondamentalement elles se distinguent entre elles par des substrats virtuels assez différents réalisés grâce à des techniques de croissances diverses.

Les coupes schématiques des empilements de couches constituant les trois technologies sont représentées en figure 16. On constate que le substrat virtuel de la famille 2802 a été obtenu en LEPECVD (Low energy plasma enhance Chemical Vapor Deposition), celui de la plaque 2816 a été réalisé à Stuttgart en MBE (épitaxie par jet moléculaire) à très basse température en utilisant de l'antimoine comme surfactant et enfin celui de la plaque 2798 à été réalisé à Jülich par implantation d'He. Une description fine et une analyse détaillée de l'influence des substrats a été faite dans la référence [Enciso2003].

wafer	C2816	C2798	C2802
Cap layer	3.5 nm Si	4 nm Si	4 nm Si
Cap spacer	4 nm SiGe 40%	8 nm SiGe 30%	8 nm SiGe
Supply layer	5 nm SiGe 45 %, 2E19 Sb	5 nm SiGe 45 %, 1 to 2xE19 Sb	5 nm SiGe 40 %, 1xE19 Sb
Spacer	3 nm SiGe 40%	4.5 nm SiGe 30%	4.5 nm SiGe 40%
Channel	9 nm Si	12 nm Si	9 nm Si
Spacer	4 nm SiGe 40 %	3 nm SiGe 30 %	3 nm SiGe 40 %
Supply layer	5 nm SiGe 30%, 2 to 3xE18 Sb	5 nm SiGe 30%, 2 to 3xE18 Sb	5 nm SiGe 40%, 2.4xE18 Sb
Constant graded buffer	133nm SiGe 40 % 240 nm SiGe 40% UST	100 nm SiGe 30 % He implantation Anneal 850 °C	130 nm SiGe 45%
Linear graded buffer		100 nm SiGe 2744	5000 nm 5-45% LEPECVD

Figure 16 : Empilement des couches des n-HFET mesurés en électroluminescence.

Pour les composants 2816, aucun signal n'a été détecté, que ce soit "canal ouvert" ou "canal fermé". La figure 17 représente les courants de grille et de drain ainsi que la tension V_{DS} en fonction de V_{GS} pour une intensité de luminescence constante à 20 K pour un transistor 2798.

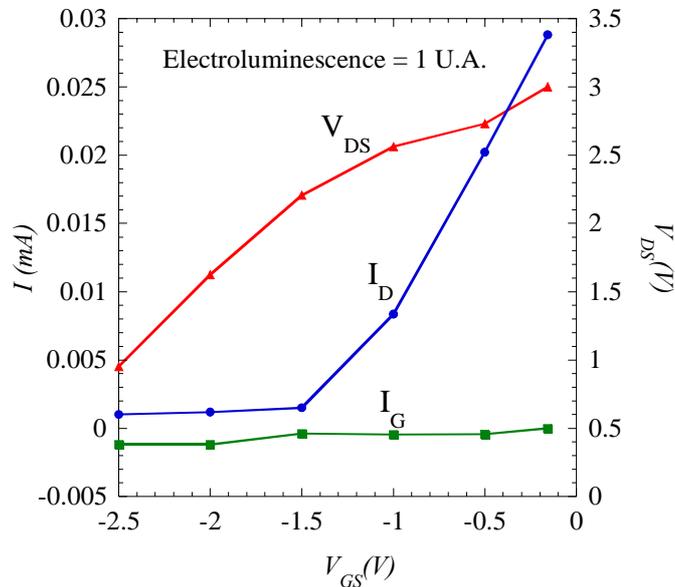


Figure 17 : I_G , I_D et V_{DS} en fonction de V_{GS} à signal d'électroluminescence constant pour un transistor 2798 de $L_G \times W_G = 100 \text{ nm} \times 100 \text{ }\mu\text{m}$ à $T = 20 \text{ K}$.

On constate que la polarisation requise pour obtenir un signal en dessous de la tension de seuil ($V_{TH} = -1.5 \text{ V}$) augmente régulièrement à mesure que le canal se peuple et que l'intensité de courant augmente. Le courant de grille est exactement égal en intensité au courant de drain tant que $V_{GS} < V_{TH}$. Cela montre que les porteurs qui ionisent sont directement injectés par la diode Schottky grille-drain en inverse. Au-delà de V_{TH} , la tension drain autorise une ionisation « canal ouvert » et le courant de drain comprend une faible composante lié au courant d'électrons et de trous créés par l'ionisation par choc. Quant au courant de grille, le fait qu'il reste négatif montre que le courant présente une composante due au courant de trous.

La figure 18 présente l'intensité du signal d'électroluminescence en fonction de V_{DS} à $V_{GS} = -2.5 \text{ V}$, soit lorsque le canal est fermé. Les courants de grille et de drain, aussi représentés figure 18, sont égaux et opposés et l'intensité du signal d'électroluminescence est proportionnelle à ces courants. L'électroluminescence observée est donc due à l'injection de porteurs chauds par la jonction Schottky de grille en inverse vers le drain.

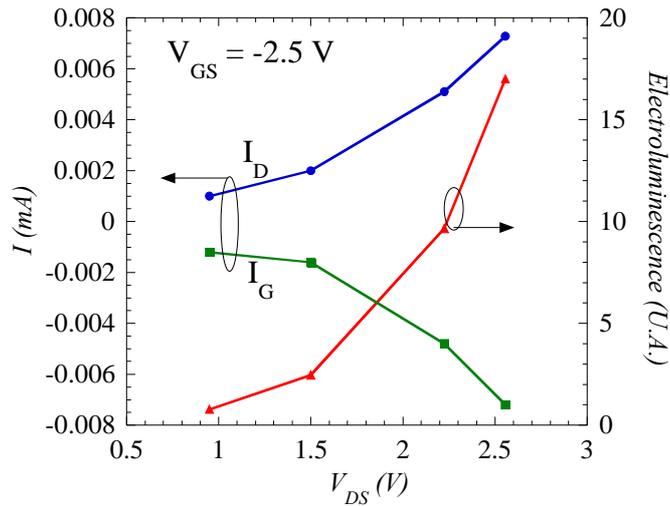


Figure 18 : Intensité du signal d'électroluminescence et courants de grille et de drain pour le n-HFET 2798 à $T = 20$ K, à $V_{GS} = -2.5$ V. $L_G = 0.1$ μm .

Pour pouvoir tracer un spectre, l'intensité du signal d'électroluminescence doit être supérieure à 5 U.A, ce qui est le cas pour le transistor 2798 pour une tension V_{GS} inférieure à la tension de seuil. Nous avons donc pu obtenir des spectres d'électroluminescence pour ces transistors, présentés figure 19.

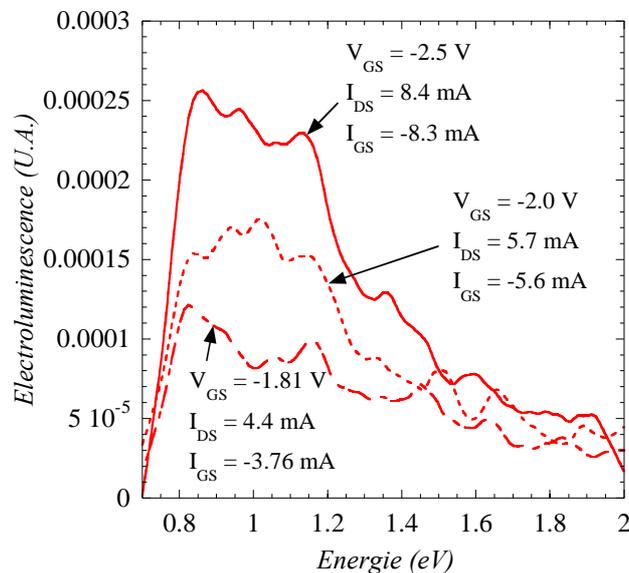


Figure 19 : Spectres d'électroluminescence obtenus à $T = 20$ K pour les n-HFET 2798. $V_{GS} = -2,5\text{V}, -2\text{V}$ et $-1,8$ V, $L_G = 0.1$ μm .

La figure 19 représente trois spectres d'électroluminescence à 20 K d'un n-HFET de type 2798 et de longueur de grille $L_G = 0.1$ μm . On constate que les spectres sont constitués d'un très large pic. Qui s'étant de 0.7 à 2 eV. Bien que les spectres ne soient pas corrigés de la réponse du détecteur, on constate que le maximum de luminescence est obtenu entre 0.8 et 1.2 eV.

L'hétérojonction Si/SiGe est ici de type II. Compte tenu du champ électrique transverse localement présent, il nous semble peu probable que nous puissions observer une recombinaison entre des électrons localisés dans les sous bandes des vallées Δ_2 du canal en silicium et des trous situés dans la bande « des trous légers ». En revanche et bien que cette recombinaison soit à la fois indirecte dans l'espace réciproque et dans l'espace réel, il nous semble plus probable que la luminescence soit imputable à des électrons situés dans les sous-bandes de Si et à des trous lourds du SiGe. Pour un puits carré de 12 nm de Si entre deux couches de $\text{Si}_{0.7}\text{Ge}_{0.3}$, on peut quantifier les énergies correspondant aux transitions évoquées ci-dessus. Des électrons localisés aux bas des trois premières sous bandes et des électrons situés au sommet de la bande LH donneraient :

$$E1-LH = 0.886 \text{ eV}$$

$$E2-LH = 0.894 \text{ eV}$$

$$E3-LH = 0.924 \text{ eV}$$

Ces énergies ne prennent pas en compte la courbure des bandes dues au champ, l'auto-échauffement et l'effet Franz-Keldysh, qui correspond à une extension des fonctions d'ondes des électrons dans la bande interdite à cause de la forte courbure des bandes due au champ électrique intense. On peut penser que le pic correspond à ces recombinaisons. Si le minimum du pic commence avant ces énergies c'est à cause de l'effet Franz-Keldysh. Si le maximum du pic est plutôt vers 800 meV, c'est dû à l'auto-échauffement. Enfin s'il s'étend jusqu'à 2 eV, c'est que les recombinaisons impliquent des porteurs chauds. Des électrons mais également des trous très énergétiques sont impliqués. Ces porteurs peuvent de surcroît aisément transférer dans les couches adjacentes. L'ionisation peut certainement également survenir dans le SiGe même si la concentration en électrons y est nettement plus faible que dans le Si.

L'intensité du signal de luminescence obtenu pour les transistors de la technologie 2802 est nettement plus faible que celle des composants 2798. A tel point que nous n'avons pu obtenir un spectre correct. C'est pourquoi nous nous contentons pour cette technologie de discuter les valeurs des seuils d'ionisation et des intensités en fonction des conditions de polarisation.

On constate sur la figure 20 que l'ionisation par choc se produit dans les conditions de canal bloqué mais également de canal ouvert. Il se trouve que cette technologie est celle qui a fourni les performances HF record ainsi que d'excellentes performances en bruit HF et en bruit BF. Elle a donc été beaucoup étudiée à température ambiante mais également à température cryogénique.

Or il n'a jamais été détecté de manière électrique un signal prouvant la présence d'ionisation par choc. Des composants ont été mesurés jusqu'à une tension V_{DS} de 3V et nous n'avons jamais détecté le moindre pic de courant de trous sur les caractéristiques I_G - V_G . C'est pourquoi la figure 20 présente un résultat très original.

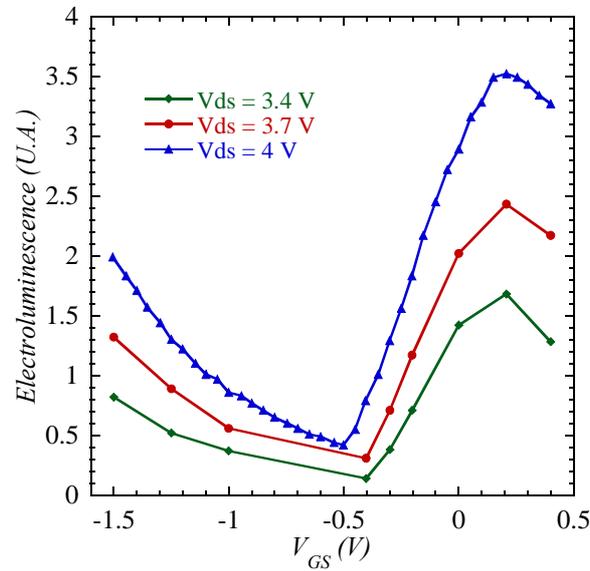


Figure 20 : Intensité d'électroluminescence en fonction de V_{GS} pour les nHFET 2802 à $T = 20$ K.

On constate, toujours sur la figure 20 que l'intensité de luminescence augmente avec la polarisation V_{DS} , aussi bien canal ouvert que canal fermé. Pour les polarisations de grille positives, on constate que l'intensité de luminescence passe par un maximum puis redescend, lorsque la densité de porteurs dans le canal devient très élevée ce qui contribue à réduire le champ électrique qui engendre le processus. En revanche, pour des polarisations de grille négatives, on voit bien que l'intensité ne demande qu'à croître à mesure que V_{GD} augmente. La limite de cette augmentation réside dans le claquage du transistor.

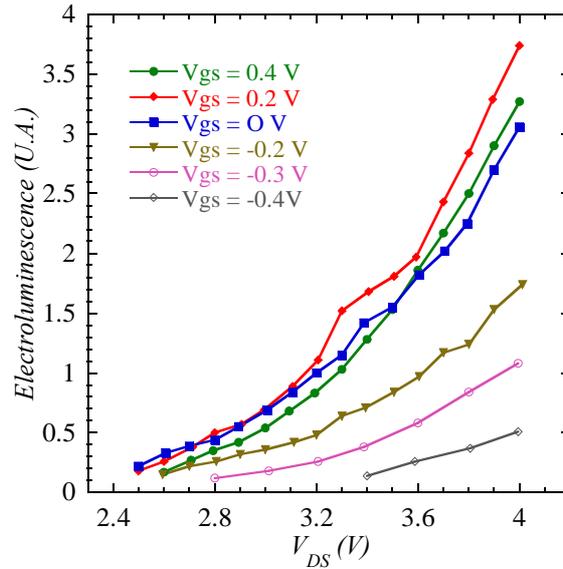


Figure 21 : Intensité d'électroluminescence pour le transistor 2802 à l'état passant à $T = 20$ K.

La figure 21 représente l'intensité de luminescence « canal ouvert ». On peut y lire que le seuil de la polarisation V_{DS} qui donne lieu à un signal se décale vers des valeurs de plus en plus faible à mesure que le canal se peuple. Pour $V_{GS} = 0$ V le seuil en V_{DS} est voisin de 2.4 V. Ce seuil est très supérieur à ce qui a été obtenu par simulation numérique sur *Silvaco* par Laurent Giguere. Cependant, pour les couches dont le substrat virtuel a été réalisé en LEPECVD nous suspectons que le blocage du niveau de Fermi en surface joue un rôle complexe et notamment que s'opère une modification sensible du potentiel de surface qui induit un étalement plus important de la composante latérale du champ ce qui augmente la tenue en tension du dispositif. Cela n'a pas été modélisé sur *Silvaco*. On peut s'interroger sur le lien entre les états de surface qui assurent le blocage du niveau de Fermi et la nature du substrat virtuel. Cela est lié au fait que les couches actives étaient toutes « épitaxiées » à Ulm au centre de DCAG quelle que soit la nature du substrat virtuel. Les couches actives réalisées en MBE étaient réalisées dans la foulée du substrat virtuel. L'échantillon demeurait longtemps dans le bâti d'épitaxie ce qui augmentait les risques de pollution. Alors que pour les substrats réalisés en externe (LEPECVB, He implantation,...) après un nettoyage de la surface du « buffer », on opérait une reprise d'épitaxie. Le temps passé dans le bâti était beaucoup plus court. La densité de polluants présents lors de la réalisation de la surface du dessus avant passivation était nettement plus faible.

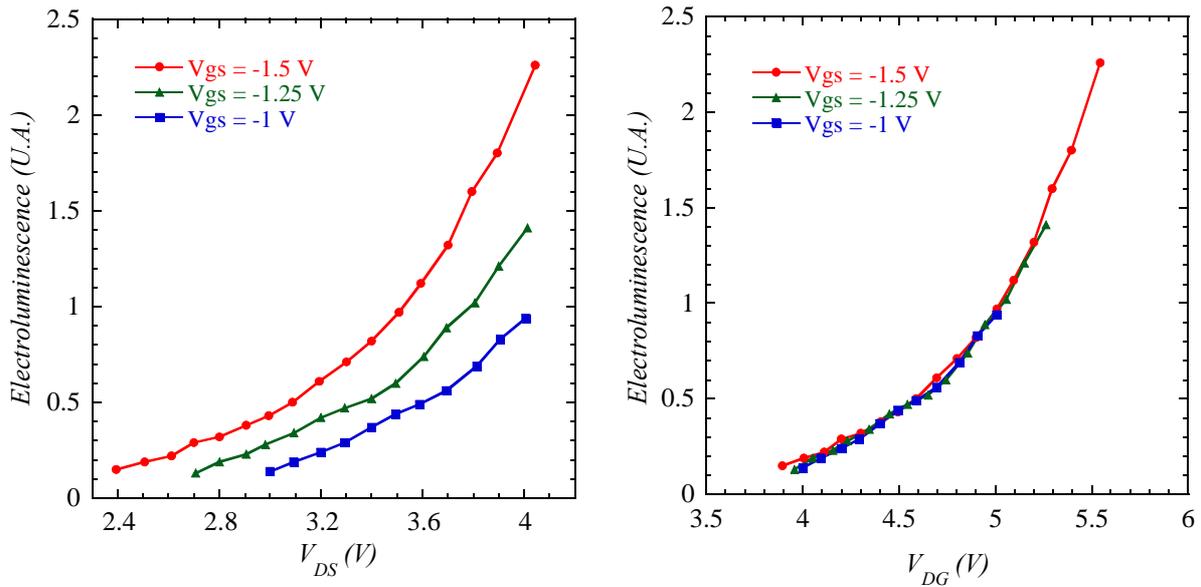


Figure 22 : Intensité d'électroluminescence pour le transistor 2802 canal pincé à $T = 20$ K en fonction de V_{DS} et de V_{DG} .

La figure 22 représente l'intensité de luminescence « canal fermé ». Sur la courbe de droite, on constate que l'intensité de luminescence est contrôlée par V_{GD} . Ce qui montre que ce sont des porteurs injectés depuis la grille dans le canal qui génèrent l'ionisation par choc.

Les mesures d'électroluminescence réalisées sur les HFET de type n ou p sur substrat SiGe nous ont apporté bon nombre de réponses car les mesures électriques ne fournissaient, dans bien des cas, aucune indication sur le processus d'ionisation par choc. Quand elles fonctionnaient, l'approche expérimentale mise en œuvre à l'IEF autour d'un très récent cryostat en gaz d'échange a permis d'obtenir des résultats avec une sensibilité que des mesures électriques ne permettent pas. On peut citer : 1/ la mise en évidence de processus d'ionisation par choc canal ouvert dans les n-HFET Si/SiGe et dans les p-HFET Ge/SiGe, 2/ l'analyse de l'ionisation par choc canal fermé dans les n-HFET, 3/ l'importance de la nature du substrat virtuel de SiGe dans les n HFET. L'analyse des résultats a été grandement facilitée par les calculs des sous-bandes en $\mathbf{k,p}$ mais nous avons également pu mesurer l'urgence qu'il y avait à chercher à coupler ce $\mathbf{k,p}$ à 30 bandes avec l'équation de Poisson afin d'intégrer les champs électriques internes présents dans le puits quantique. La comparaison des simulations hydrodynamiques avec les mesures a également révélé la complexité de la modélisation d'un processus tel que l'ionisation par choc (mais il en va de même avec l'effet Auger) au niveau hydrodynamique.

III. Ionisation par choc dans les diodes IMPATT

1) Introduction

Nous allons consacrer quelques pages au rappel du fonctionnement d'une diode IMPATT car c'est un dispositif qui est beaucoup moins utilisé aujourd'hui qu'il ne l'était dans les années 80. Cela n'en fait pas un composant obsolète même s'il est confiné à des applications spécifiques. En effet la diode IMPATT permet de générer des signaux à très hautes fréquences (300 GHz) mais ce signal est généralement assez bruité. L'autre oscillateur utilisé pour les très hautes fréquences est la diode Gunn qui fonctionne sur un principe totalement différent. La diode Gunn permet de générer des signaux moins bruités mais la puissance est, en générale, très faible. L'intérêt pour les très hautes fréquences (THz) va sans doute donner un nouvel élan à ces dispositifs. Le paragraphe III est assez long. Après avoir rappelé le fonctionnement des diodes IMPATT, nous décrivons les quatre diodes qui ont été étudiées. Puis nous passons aux résultats de luminescence en nous appuyant sur les résultats des chapitres 2 à 4 de ce manuscrit. Nous distinguons les spectres de luminescence obtenus en polarisation directe et en polarisation inverse. Puis nous comparons des résultats expérimentaux obtenus à l'aide de mesures hyperfréquences avec des résultats de calculs numériques.

2) Principe de fonctionnement de la diode IMPATT

Depuis 1934 (J. Müller), on sait qu'un temps de transit peut donner naissance à une impédance complexe à partie réelle négative nécessaire à la génération d'oscillations. Plus tard, ce concept de base a été utilisé pour la réalisation de diodes IMPATT (IMPact Avalanche Transit-Time), BARITT (BARier Injection Transit Time) ou TUNNETT (TUNNEL injection Transit Time). Dans les diodes IMPATT, la génération de porteurs est obtenue par multiplication en régime d'avalanche, dans les diodes BARITT, les porteurs minoritaires sont injectés via une barrière de potentiel et dans les diodes TUNNETT, un effet tunnel permet de fournir les porteurs pour la zone de dérive.

Nous allons tout d'abord discuter du processus de dérive qui est commun aux différentes structures puis nous nous focalisons sur la zone d'avalanche de la diode IMPATT.

a) Rôle de la zone de transit

Nous nous référons au schéma 23 dans lequel les porteurs minoritaires (les trous) vont circuler en régime de dérive entre les deux abscisses $x = 0$ et $x = d$. L'émetteur est polarisé positivement et le collecteur négativement.

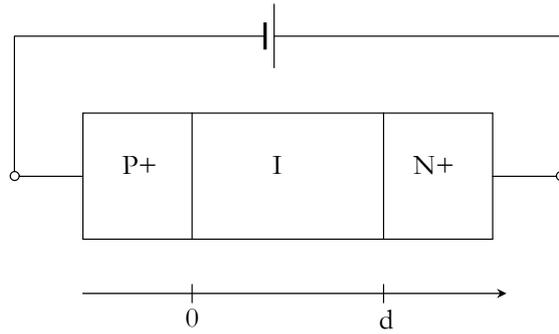


Figure 23 : Structure générale d'une diode à retard en régime d'oscillation.

Hypothèses (très simplificatrices) du calcul :

- Seul un type de porteurs est décrit (les électrons dans ce cas)
- La structure est supposée 1D
- La diffusion est négligeable par rapport à la dérive.
- Le temps de transit est petit par rapport au temps de vie
- Il n'y a pas de génération-recombinaison dans la zone de dérive

En régime statique, les équations du transport sont :

$$\frac{\partial E}{\partial x} = -\frac{e}{\epsilon} (N_A^- + n) \quad \text{équation de Poisson}$$

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{1}{e} \frac{\partial J}{\partial x} \quad \text{équation de conservation}$$

$$J = -evn \quad \text{densité de courant}$$

Si on s'intéresse au régime harmonique (ce qui est le cas puisqu'on recherche un régime d'oscillation hyperfréquence) les grandeurs J , n , v et E dépendant du temps sont supposées suivre :

$$E = \Re\{E_0 + E_1 e^{j\omega t}\}; \quad J = \Re\{J_0 + J_1 e^{j\omega t}\}; \quad n = \Re\{n_0 + n_1 e^{j\omega t}\}; \quad v = \Re\{v_0 + v_1 e^{j\omega t}\}$$

Si on ne considère que les contributions harmoniques et que l'on néglige les contributions d'ordre supérieur, on obtient le jeu d'équations :

$$\frac{\partial E_1}{\partial x} = -\frac{e}{\epsilon} n_1; \quad j\omega n_1 = \frac{1}{e} \frac{\partial J_1}{\partial x} \quad \text{et} \quad J_1 = -e(v_0 n_1 + v_1 n_0)$$

Si on considère que la mobilité est constante : $v_1 = \mu E_1$

On aboutit à l'équation du second degré : $\frac{\partial^2 E_1}{\partial x^2} = -\left(\frac{n_0 \mu \epsilon}{v_0 \epsilon} + \frac{j\omega}{v_0}\right) \frac{\partial E_1}{\partial x}$

Dont la solution générale est : $E_1(x) = ae^{kx} + b$ avec $k = -\left(\frac{n_0 \mu \epsilon}{v_0 \epsilon} + \frac{j\omega}{v_0}\right)$

où k est le nombre d'onde qui est complexe dans le cas présent.

Le courant total est la somme du courant de conduction et du courant de déplacement :

$$J_T = J_1 + j\omega \epsilon E_1(x)$$

Par comparaison avec la solution générale de l'équation donnée ci-dessus on déduit :

$$b = \frac{J_T}{j\omega \epsilon} \quad \text{et} \quad a = -\frac{J_1(0)}{j\omega \epsilon}$$

La solution pour le champ harmonique est donc : $E_1(x) = \frac{J_T}{j\omega \epsilon} \left(-\frac{J_1(0)}{J_T} e^{kx} + 1 \right)$

On peut, dès lors calculer l'impédance de la zone de dérive en intégrant le champ :

$$Z_D = \frac{\int_0^d E_1(x) dx}{J_T S} = \frac{1}{jC\omega} \left(\frac{J_1(0)}{J_T} \frac{1}{kd} (1 - e^{kd}) + 1 \right) \quad \text{avec} \quad C = \frac{S\epsilon}{d}$$

S étant la section du composant.

A partir de cette expression, on peut discuter certaines propriétés des composants à retard.

1/ L'impédance est inversement proportionnelle à la capacité de la diode.

2/ On distingue l'importance du nombre complexe traduisant le rapport d'injection qui a la forme générale :

$$\frac{J_1(0)}{J_T} = A(\omega) e^{-j\Phi(\omega)}$$

qui présente une amplitude A et un angle Φ représentant le déphasage entre la densité de courant injectée $J_1(0)$ et la densité de courant totale J_T . Cette expression traduit la nature de l'injection et est cause des différences entre les diodes.

Pour souligner l'importance du terme d'injection, discutons la partie imaginaire et réelle de l'impédance de la zone de dérive :

A très haute fréquence $k = -\left(\frac{n_0 \mu \epsilon}{v_0 \epsilon} + \frac{j\omega}{v_0}\right) \approx -\frac{j\omega}{v_0}$ et donc $kd \approx -\frac{j\omega d}{v_0} = -j\theta$

$$Z_D \approx \frac{1}{jC\omega} \left(A e^{-j\theta} \frac{j}{\theta} (1 - e^{-j\theta}) + 1 \right) = \frac{A}{\theta C \omega} (e^{-j\theta} - e^{-j(\theta+\theta)}) - \frac{j\theta}{\theta \omega C}$$

Comme $\Re\{e^{-j\mathbf{f}} - e^{-j(\mathbf{f}+\mathbf{q})}\} = \cos(\mathbf{f}) - \cos(\mathbf{f} + \mathbf{q})$ et $\text{Im}\{e^{-j\mathbf{f}} - e^{-j(\mathbf{f}+\mathbf{q})}\} = -\sin(\mathbf{f}) + \sin(\mathbf{f} + \mathbf{q})$

$$\Re\{Z_D\} = \frac{A}{q\omega C} [\cos(\mathbf{f}) - \cos(\mathbf{f} + \mathbf{q})] \quad \text{et} \quad \text{Im}\{Z_D\} = \frac{-1}{q\omega C} \{q + A[\sin(\mathbf{f}) - \sin(\mathbf{f} + \mathbf{q})]\}$$

$q = \frac{\omega d}{v_s}$ est l'angle de retard, et la propagation a été considérée dans un cas qui correspond à une déplétion totale de la zone n, i.e ; à un très fort champ pour lequel les porteurs dérivent à la vitesse de saturation v_s .

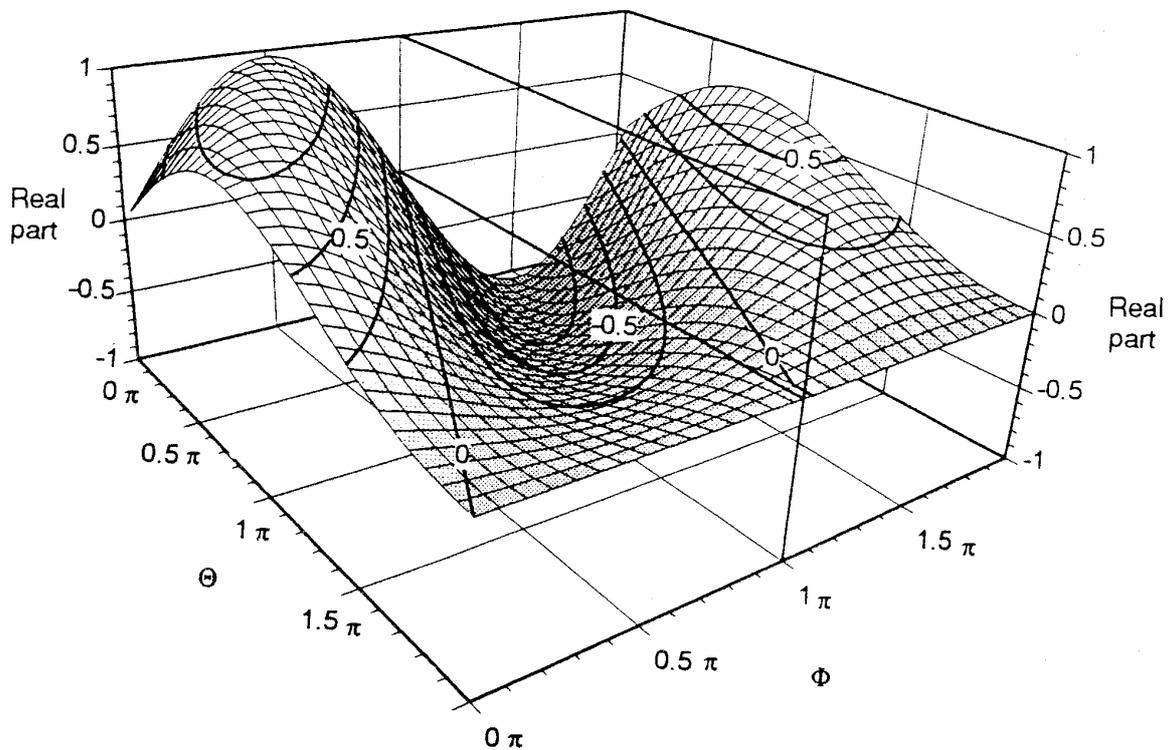


Figure 24 : Représentation 3D de la partie réelle l'impédance de la région de dérive en fonction de l'angle de retard q de l'angle d'injection F [Luy94].

Les figures 24 et 25 représentent respectivement la partie réelle et la partie imaginaire de Z_D avec la simplification : $\frac{A}{\omega C} = 1$. On constate que la partie réelle devient négative pour un angle d'injection F supérieur à zéro.

L'angle de retard optimum pour une partie réelle maximum dépend de la phase du rapport d'injection et diminue quand on augmente l'angle de phase, parallèlement la quantité de résistance négative augmente.

Par exemple, une phase d'injection $F = \pi/2$ dans une diode BARITT impose un angle de retard $\theta = 3\pi/2$ pour obtenir la partie réelle négative de l'impédance la plus élevée. Avec $F = \pi$ dans une diode IMPATT un angle de retard $\theta = 3\pi/4$ permet d'avoir la partie réelle de la résistance la plus élevée.

En outre il ressort qu'un mécanisme d'injection qui présente un angle de phase grand et dont l'amplitude ne décroît pas en fonction de l'espace est très favorable. De plus, le mécanisme d'injection doit assurer que les porteurs sont injectés avec la vitesse de saturation. Une autre approche consisterait à laisser $F = 0$ ou π mais d'assurer $A(w) \leq 0$ (ce qui se produit d'ailleurs dans les diodes IMPATT).

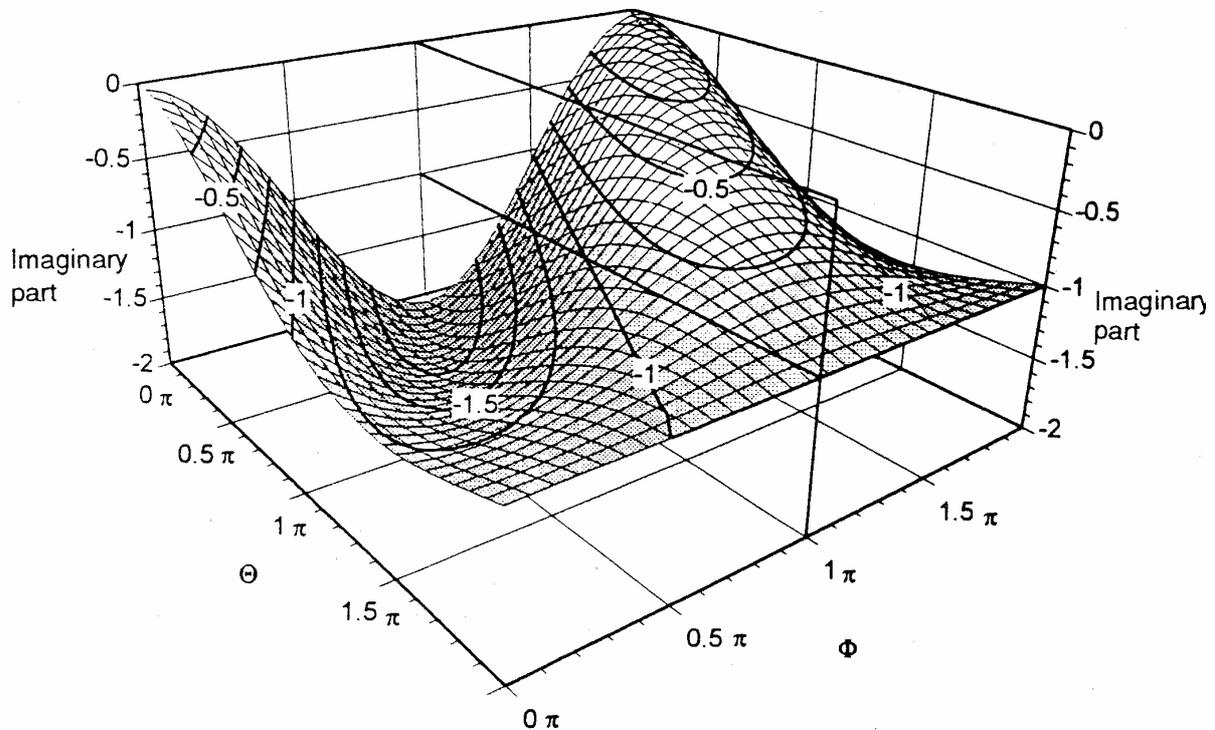


Figure 25 : Représentation 3D de la partie imaginaire l'impédance de la région de dérive en fonction de l'angle de retard et de l'angle d'injection [Luy94].

b) L'injection

Read avait déjà perçu qu'on pouvait utiliser l'ionisation par choc et le mécanisme de multiplication de porteurs chauds pour réaliser une structure qui oscillait. Les paramètres clés de ce composant sont les coefficients d'ionisation qui correspondent aux nombres de paires électron-trou créés par des électrons ou des trous par unité de distance.

L'injection de courant dans une diode IMPATT est contrôlée par l'équation de Read [Read58] :

$$\tau_a \frac{\partial J}{\partial t} = 2(\bar{\alpha} l_a - 1)J \quad \text{avec} \quad \tau_a = \frac{l_a}{v_s} \quad \text{et} \quad \bar{\alpha} = \frac{1}{l_a} \int \alpha(x) dx$$

l_a : longueur de la zone d'avalanche

Notons α' la grandeur différentielle associée au processus d'ionisation: $\bar{\alpha} = \bar{\alpha}_c + \alpha' E_1 e^{j\omega t}$

On a $\bar{\alpha}_c \approx \frac{1}{l_a}$ et donc en régime harmonique l'équation de Read devient : $j\omega J_1 = \frac{2J_c \alpha' l_a E_1}{\tau_a}$

$$\text{D'où } J_1 = \frac{2J_c \alpha' v_s}{j\omega} E_1$$

Pour avoir le courant total, il faut ajouter le courant de déplacement : $J_d = \frac{\partial D}{\partial t} = j\omega \epsilon E_1 e^{j\omega t}$

$$\text{La densité de courant totale est donc : } J_T = j \left[-\frac{2J_c \alpha' v_s}{\omega} + \omega \epsilon \right] E_1$$

Une version simplifiée de la réalité est de percevoir le courant dans la zone d'avalanche comme la somme de deux composantes en opposition de phase. Il en résulte qu'il est possible d'obtenir un champ E_1 et par voie de conséquence une différence de potentiel V_1 aux bornes de la zone dans laquelle se produit l'ionisation par choc, tous les deux différents de zéro alors que le courant alternatif total est nul. De plus une contribution varie en $1/\omega$ et l'autre en ω de sorte que cette zone de la diode est équivalente à un circuit bouchon constitué d'une inductance L_a en parallèle avec une capacité C_a , avec :

$$L_a = \frac{\tau_a}{2\alpha' J_c} \quad \text{et} \quad C_a = \frac{\epsilon}{l_a}$$

La fréquence de résonance du circuit équivalent est donnée par :

$$\omega_a = \frac{1}{\sqrt{L_a C_a}} = \sqrt{\frac{2\alpha' l_a J_c}{\epsilon \tau_a}} = \sqrt{\frac{2\alpha' v_s J_c}{\epsilon}}$$

$$\text{On peut donc écrire } j_T : J_T = j \left[-\frac{\epsilon \omega_a^2}{\omega} + \omega \epsilon \right] E_1$$

$$\text{et donc le rapport d'injection : } \frac{J_1(0)}{J_T} = \frac{j \frac{\epsilon \omega_a^2}{\omega} E_1}{j \left[\frac{\epsilon \omega_a^2}{\omega} - \omega \epsilon \right] E_1} = \frac{1}{1 - \frac{\omega^2}{\omega_a^2}}$$

On en déduit en se référant aux notations du paragraphe précédent que : $A(\omega) = \frac{1}{1 - \frac{\omega^2}{\omega_a^2}}$ et que

$$\theta = \pi$$

$$\text{Donc : } \Re\{Z_D\} = \frac{A(\omega)}{\theta \omega C} [1 - \cos(\theta)] = \frac{1}{1 - \frac{\omega^2}{\omega_a^2}} \cdot \frac{1}{\omega C} \cdot \frac{1 - \cos(\theta)}{\theta}$$

Des calculs beaucoup plus complexes, mènent à une relation un peu différente :

$$\Re\{Z_D\} = \frac{1}{1 - \xi(z) \cdot \frac{\omega_a^2}{\omega^2}} \cdot \frac{1}{\omega C} \cdot \frac{1 - \cos(\theta)}{\theta} \text{ dans laquelle } \xi(z) \text{ est une fonction (réelle) de } z = \frac{\alpha' l_a}{\omega \tau_a}$$

La figure 26 fournit la partie réelle de Z_D dans un cas particulier et la figure 27 la partie imaginaire.

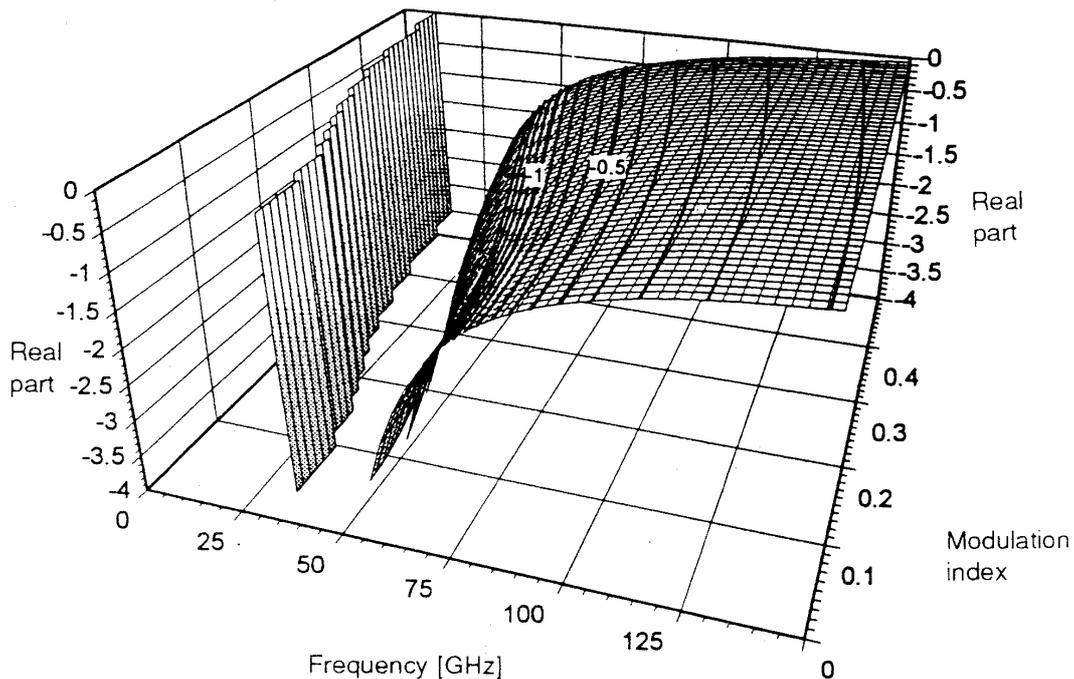


Figure 26 : Partie réelle de l'impédance d'une diode IMPATT en fonction de la fréquence et α'
 $v_s = 0.65 \times 10^7$ cm/s, $d = 250$ nm, $E = 500$ kV/cm, densité de courant : 10 kA/cm²,
 surface de la diode : 7×10^{-6} cm² [Luy94].

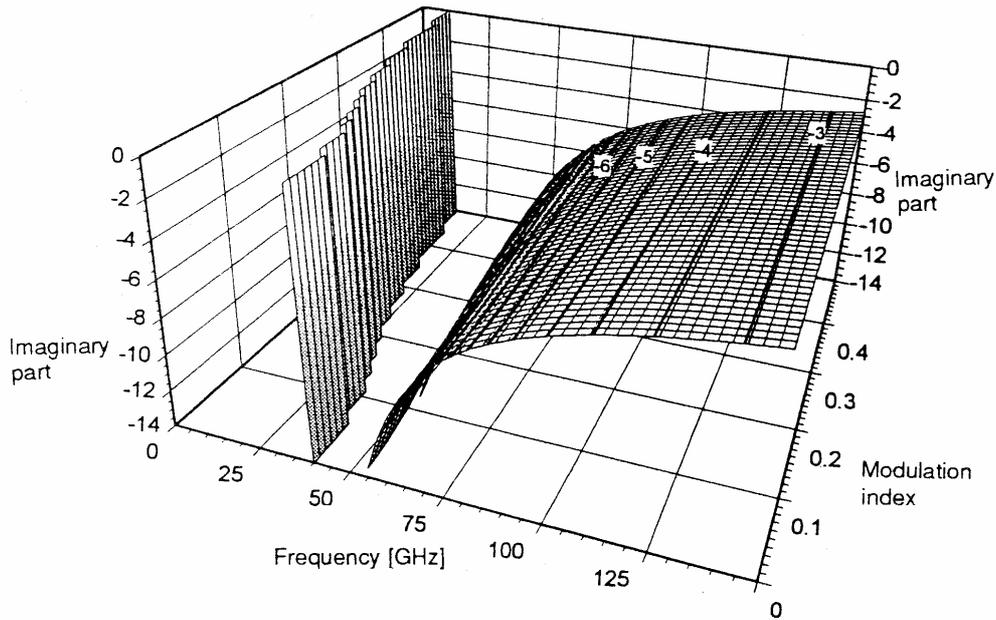


Figure 27 : Partie imaginaire de l'impédance d'une diode IMPATT en fonction de la fréquence et a' [Luy94].

c) Schéma équivalent des différentes zones

Lorsque la diode IMPATT n'est pas montée dans un boîtier, son impédance équivalente s'exprime sous la forme de la somme des impédances des zones d'avalanche et de transit, auxquelles il convient d'ajouter la résistance équivalente liée aux pertes ohmiques dans les différentes régions du composant et des contacts :

$$Z = Z_A + Z_T + R_S$$

R_S : est la résistance série liée aux contacts et aux pertes ohmiques.

La partie réelle de l'impédance équivalente peut s'écrire sous la forme :

$$R = R_S + R_T$$

R_T : est la partie réelle de Z_T déduite de la relation : $R_T = \frac{1}{C_T w} \frac{1}{1 - \left(\frac{w}{w_A}\right)^2} \frac{(1 - \cos q)}{q}$

3) Description des structures

Quatre familles de diodes IMPATT réalisées à l'Université de Stuttgart par M. Schöllhorn dans l'équipe du professeur Kasper ont été étudiées. Les figures 28 montrent les coupes schématiques de ces quatre dispositifs. Sur un substrat P+ de faible résistivité (10 – 20 mΩ.cm), on a fait croître un buffer en silicium dopé Bore à $5 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ d'épaisseur variable suivant les échantillons. Puis on

trouve une couche au niveau de dopage identique mais en $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$, x vaut 0, 0.1, 0.2 et 0.46 respectivement pour les échantillons 738, 740, 768 et 820.

Si, 90 nm, dopage n, 10^{20} cm^{-3} (Sb)	$\text{Si}_{0.9}\text{Ge}_{0.1}$, 85 nm, dopage n, 10^{20} cm^{-3} (Sb)	$\text{Si}_{0.8}\text{Ge}_{0.2}$, 140 nm, dopage n, 10^{20} cm^{-3} (Sb)	$\text{Si}_{0.54}\text{Ge}_{0.46}$, 80 nm, dopage n, 10^{20} cm^{-3} (Sb)
Si, 330 nm Zone intrinsèque	$\text{Si}_{0.9}\text{Ge}_{0.1}$, 315 nm, Zone intrinsèque	$\text{Si}_{0.8}\text{Ge}_{0.2}$, 520 nm, Zone intrinsèque	$\text{Si}_{0.54}\text{Ge}_{0.46}$, 290 nm, Zone intrinsèque
Si, 165 nm, dopage p, $5 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ (B)	Buffer Si, 158 nm, $5 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ (B)	$\text{Si}_{0.8}\text{Ge}_{0.2}$, 710 nm, dopée p, $5 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ (B)	$\text{Si}_{0.54}\text{Ge}_{0.46}$, 440 nm, dopée p, $5 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ (B)
Substrat Si p+ 10-20 mO.cm	Substrat Si p+ 10-20 mO.cm	Buffer Si, 260 nm, 5×10^{18} cm^{-3} (B)	Buffer Si, 145 nm, 5×10^{18} cm^{-3} (B)
		Substrat Si p+ 10-20 mO.cm	Substrat Si p+ 10-20 mO.cm
Diode 738	Diode 740	Diode 768	Diode 820

Figure 28 : Coupes schématiques des diodes IMPATT.

On trouve ensuite une zone intrinsèque en silicium ou en SiGe et enfin une couche dopée N+ à 10^{20} cm^{-3} . Les épaisseurs des zones p, i et n ne sont pas identiques, ce qui ne contribue pas à faciliter l'analyse. Le plus ennuyeux est bien entendu l'épaisseur de la zone intrinsèque. Sa longueur est respectivement 330, 315, 520 et 290 nm pour les échantillons 738, 740, 768 et 820.

Pour des raisons technologiques, les zones supposées intrinsèques ne le sont pas du tout (!). Pour la diode Si la zone « intrinsèque » est en réalité légèrement de type N à 10^{15} cm^{-3} . Pour les autres diodes (SiGe) la zone « intrinsèque » est en réalité de type P à 10^{16} cm^{-3} .

Les diodes présentées ici constituent les premières (et uniques) tentatives de diodes SiGe réalisées dans l'équipe de Stuttgart. Les grandes épaisseurs intrinsèques choisies permettaient de réaliser des mesures dans des gammes de fréquences assez basses accessibles par bon nombre d'équipes. Une diode dont la fréquence d'oscillation est élevée est par définition une diode où la zone de dérive est courte.

Les épaisseurs critiques des différents alliages SiGe constituant les zones actives des diodes sont : 1/ $\text{Si}_{0.9}\text{Ge}_{0.1}$: 32 nm ; 2/ $\text{Si}_{0.8}\text{Ge}_{0.2}$: 13 nm et 3/ $\text{Si}_{0.54}\text{Ge}_{0.46}$: 4.4 nm. On constate que ces épaisseurs sont très faibles au regard de l'épaisseur de la zone active (figure 28). Les diodes présentent donc des clivages ainsi que d'autres défauts structuraux de nature à dégrader le

transport des porteurs et à induire la présence de « raies » parasites dans les spectres de luminescence.

4) Etat de l'art de la diode IMPATT

On trouvera dans la référence [Eisele98] un état de l'art très complet de plusieurs technologies de diodes susceptibles de permettre la réalisation d'oscillateurs dans la gamme 30-400 GHz. Les deux technologies principales sont les diodes Gunn et des diodes IMPATT. Concernant ces dernières Eisele *et al* rapportent une puissance de 50 mW à 210 GHz pour une diode en Si, et une puissance de 20 mW à 160 GHz pour une diode GaAs. Le niveau de bruit à 136 GHz pour la diode Si est de 36 dB et de 26 dB pour la diode GaAs. Plus récemment Luschas et collaborateurs ont obtenu une puissance de 100 mW à 135 GHz et 45 mW à 150 GHz pour une diode IMPATT Si de 23 μm de diamètre et une courant de 250 mA [Luschas2002]. La résistance série (voisine de 1Ω) empêche d'atteindre une puissance de sortie plus élevée pour une technologie standard. En revanche ils proposent une structure alternative nommée par les auteurs : « hermétique » qui devrait permettre d'augmenter la densité de courant et ainsi que de générer une puissance de sortie RF plus élevée grâce à une garde dans laquelle les effets thermiques et les contraintes mécaniques sont mieux contrôlés et pour laquelle les « bondings » seraient améliorés. Söllhorn et ses collègues qui a réalisé les diodes présentées ici, ont proposé dans [Söllhorn2003] une diode Si de $8 \times 8 \mu\text{m}^2$ qui est quasiment compatible avec les technologies CMOS et dont l'originalité est de présenter une impédance négative très élevée ce qui autorise la conception d'un circuit résonateur simple pour des tests préliminaires. Dans cet article l'équipe de Stuttgart rapporte une puissance de sortie de -10 dBm à 93 GHz sous 30 mA et -12.9 V. Si on améliore la dissipation thermique dans la diode et le facteur de qualité du résonateur on peut aisément obtenir une puissance de sortie beaucoup plus élevée.

Dans une publication encore plus récente, Mishra *et al.* présente une étude volumineuse de diodes IMPATT à double région d'avalanche (DAR), de type $n^+ pnp^+$ comprenant une hétérojonction $\text{InP}/\text{Ga}_{47}\text{In}_{53}\text{As}$ par la modélisation numérique [Mishra2004]. Sept structures différentes ont été simulées pour couvrir la gamme de fréquence de 30 à 300 GHz. L'objectif principal des auteurs est de réduire le bruit en choisissant une épaisseur adéquate de la couche d'InGaAs. In fine, ils aboutissent à un facteur de bruit de 15.7 dB à 40 GHz et de 8.7 dB à 84 GHz pour une épaisseur totale de la région active de 1600 nm, une surface de $100 \mu\text{m}^2$ et une densité de courant de 10 kA/cm^2 .

Une alternative à la montée en fréquence et au faible bruit est une quête d'une forte puissance pour des fréquences intermédiaires. Comme on a déjà pu le constater, divers matériaux sont expérimentés afin d'améliorer les caractéristiques des diodes IMPATT. Parmi ceux-ci, on trouve les matériaux à large bande interdite. Ainsi Arai et collaborateurs obtiennent une puissance de sortie de 1.8 W at 11.93 GHz, avec une diode de type p+ n- n+ SiC [Arai2004]. Cela constitue la plus forte puissance jamais rapportée pour des diodes de cette technologie. Une bague en vanadium (entourant la diode) et présentant un grande résistivité permet de réduire le champ électrique dans la jonction p-n. Malgré cela, la puissance annoncée ci dessus est encore en retrait en comparaison de ce qui est obtenu avec des technologies Si et GaAs plus éprouvées.

Dans ce contexte on perçoit l'intérêt d'étudier la possibilité d'utiliser le SiGe pour les couches actives des diodes IMPATT.

5) Résultats expérimentaux

Nous avons réalisé des mesures HF et des mesures d'électroluminescence sur ces échantillons. On peut s'interroger sur la pertinence de mesures de paramètres S sur un oscillateur. Cependant, dans la mesure où la puissance du signal émis reste très modeste on peut considérer les résultats obtenus comme significatifs. Les mesures de luminescence ont été réalisées en inverse et en direct. En direct la diode p-i-n est le siège de courant de diffusion de minoritaires ce qui se traduit par des signaux d'électroluminescence intense. En inverse la recombinaison n'existe qu'en présence d'ionisation par choc.

a) *Electroluminescence des diodes IMPATT en direct*

L'oscillation dans les diodes IMPATT survient lorsqu'elles sont polarisées en inverse. Il nous est cependant apparu intéressant de les faire fonctionner en direct afin d'observer un spectre de luminescence n'impliquant pas l'ionisation par choc et correspondant à la diffusion de porteurs minoritaires. La figure 29 représente l'allure des spectres obtenus pour les quatre familles de diodes IMPATT.

Le pic associé à la diode silicium est correctement résolu quoique très large. Il n'est pas de même des pics associés aux diodes SiGe. Le signal de luminescence est très large. Les spectres révèlent l'existence de pics « centrés » sur 1.075, 0.98, 0.86 et 0.8 eV. Ces données sont bien supérieures aux énergies $\Gamma-\Delta$ à 4K données du tableau V.

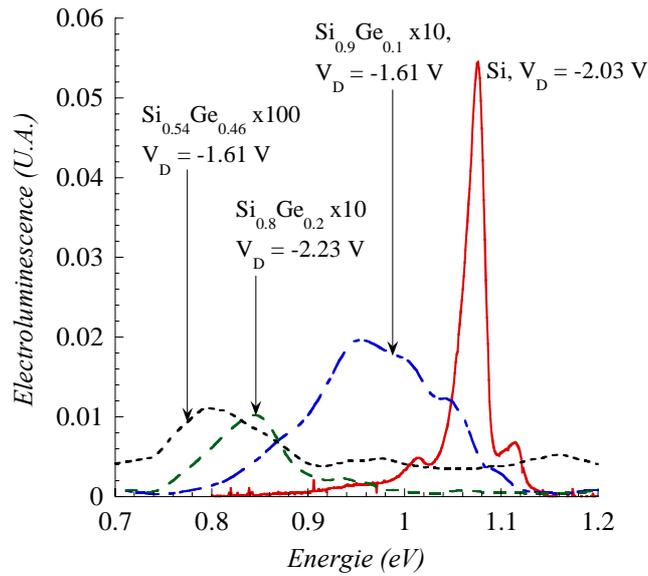
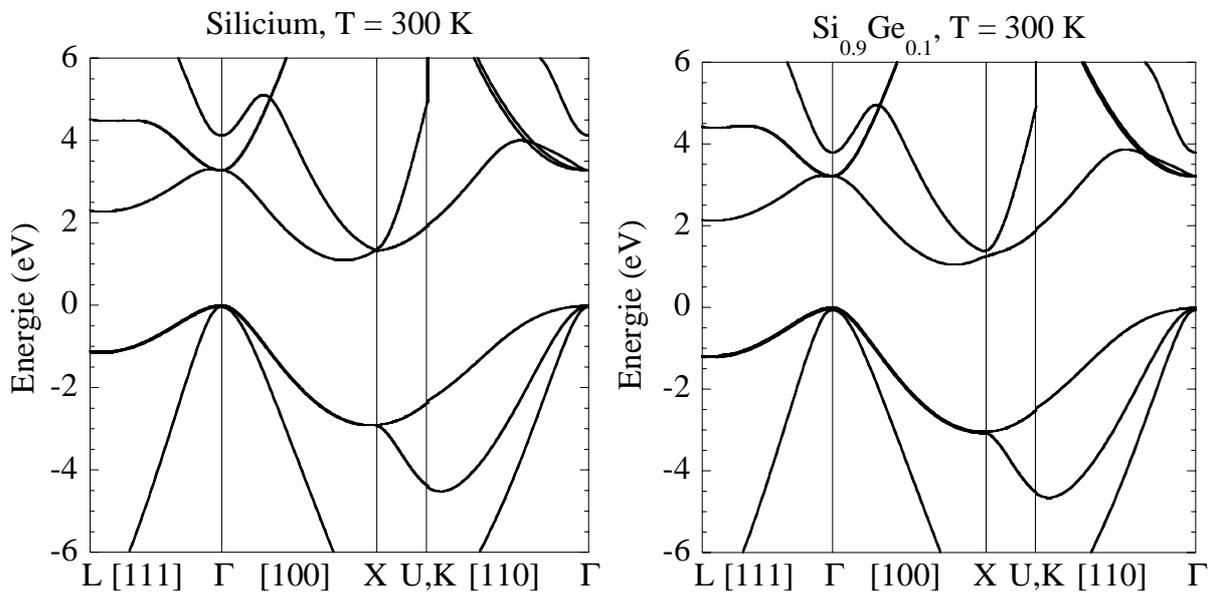


Figure 29 : Spectres d'électroluminescence des diodes 738, 740, 768 et 820 en régime direct pour un courant de 40 mA à 4K.

Les structures électroniques des matériaux constituant les zones « intrinsèques » des diodes ont été calculées afin d'estimer les énergies de recombinaison radiative et sont reportées en figure 30.



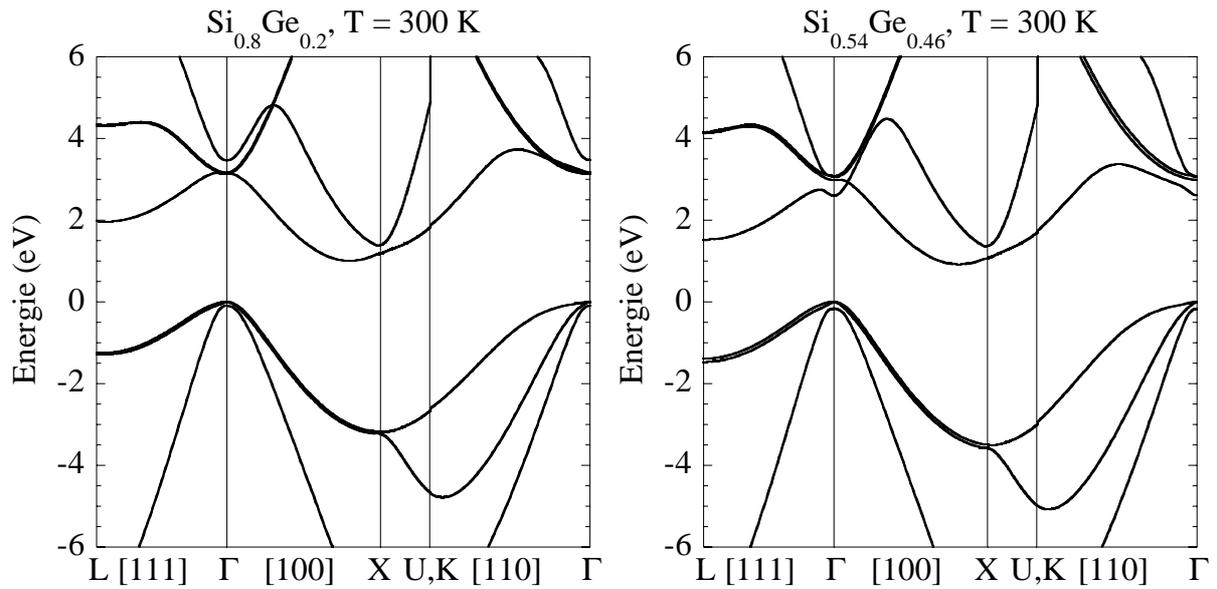


Figure 30 : Structures électroniques de Si, $\text{Si}_{0.9}\text{Ge}_{0.1}$, $\text{Si}_{0.8}\text{Ge}_{0.2}$ et $\text{Si}_{0.54}\text{Ge}_{0.46}$ calculées en k.p à 30 bandes.

Transition	$\Gamma - L$		$\Gamma - \Gamma$		$\Gamma - \Delta$	
	T = 4 K	T = 300 K	T = 4 K	T = 300 K	T = 4 K	T = 300 K
0	2.32	2.28	3.4	3.28	1.17	1.10
0.1	2.17	2.12	3.32	3.2	1.12	1.05
0.2	2.02	1.97	3.26	3.13	1.08	1.01
0.46	1.59	1.53	2.67	2.60	1.01	0.92

Tableau V : Valeurs des énergies correspondant aux transitions potentiellement impliquées dans les spectres de recombinaisons radiatives observées après les mesures d'électroluminescence des quatre diodes.

Les contraintes biaxiales dues à l'hétéro-croissance des alliages SiGe sont encaissées dans la couche tampon située au dessus du substrat. Il est probable que des défauts se soient propagés jusqu'au cœur de la diode. Des mesures spectroscopiques de bruit basse fréquence vont être entreprises par Manuel Rodriguez dans un très proche avenir, afin de trouver les signatures d'éventuels défauts. Même pour un pourcentage de 46 % l'alliage SiGe présente une structure de bandes voisine de celle du silicium : le minimum de la bande de conduction est en Δ , comme cela a été évoqué au chapitre 2.

Le tableau V fournit les différences d'énergies pouvant correspondre à des recombinaisons de bord de bande. Ces énergies ne prennent pas en compte l'énergie des phonons. A température

ambiante, la recombinaison radiative est accompagnée de l'émission ou de l'absorption de phonon. Si l'énergie des phonons impliqués est de 63 meV on observe un signal de luminescence à partir d'énergie inférieures de 63 meV par rapport aux données du tableau. A température cryogénique, on peut négliger l'absorption des phonons, en revanche l'émission reste comparable à ce qui se produit à l'ambiante.

Pour interpréter les résultats expérimentaux, il faut encore prendre en considération deux points. Le SiGe est un piètre conducteur thermique : pour un taux de germanium de 46% il est presque aussi mauvais que $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$ (7.4 W/Km). Les valeurs de la conductivité thermique relevées dans la littérature sont 150 W/Km pour le Si mais seulement de 8 W/Km pour le $\text{Si}_{0.9}\text{Ge}_{0.1}$ et diminuent encore lorsque la composition de Ge augmente [Yamashita2000]. Aussi les échantillons mesurés sont le siège d'auto-échauffement. On sait que lorsque la température du réseau cristallin augmente dans un morceau de semi-conducteur, la bande interdite diminue. Enfin, si la recombinaison se produit partiellement dans les zones fortement dopées, les énergies de recombinaison seront encore différentes de celles du tableau car il faudra prendre en considération la percolation des niveaux donneur et accepteurs menant à ce qui est communément nommé « Band Gap Narrowing ». Les décalages de bandes interdites auxquels il faut s'attendre peuvent être estimés :

« Band Gap Narrowing » :

$$N_A = 5 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3} \quad \Delta E_G = 51 \text{ meV [Shi2003]}$$

$$N_A = 10^{20} \text{ cm}^{-3} \quad \Delta E_G = 92 \text{ meV}$$

Si on prend en compte l'énergie du phonon intervallée en bande de valence et en supposant que la recombinaison a lieu à l'interface P+-N il faut retrancher 115 meV. Les énergies de recombinaison seraient : 1.06, 1.01, 0.97 et 0.90 eV. L'accord est obtenu pour la diode silicium mais le désaccord est grand pour les diodes SiGe. Notamment pour les taux de germanium de 20 et 46 %. On peut bien entendu songer à l'auto-échauffement pour justifier la différence importante. Et il apparaît naturel que l'effet soit d'autant plus sensible que le pourcentage de germanium augmente. Cependant il faut prendre les données du tableau V à 300K pour trouver des énergies comparables à celle des pics des spectres ce qui ne semble pas raisonnable. Nous pouvons donc considérer que les couches actives des diodes SiGe comprennent une concentration importante de défauts. Les figures 31 à 34 présentent les spectres obtenus pour une polarisation en direct des diodes pour différents courants.

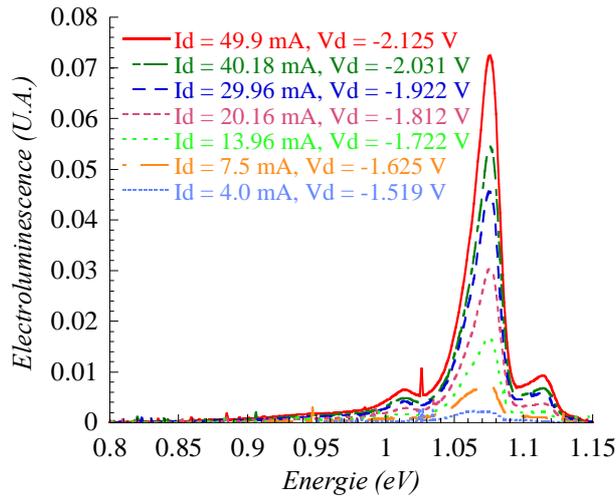


Figure 31: Spectres d'électroluminescence de la diode Si en régime direct à 4 K.

On constate que l'intensité de luminescence augmente avec l'intensité du courant. Le spectre est composé de trois pics d'inégales importances. Un pic large et de forte intensité centré sur 1.08 eV, correspondant à une recombinaison de bord de zone. On observe également deux pics de part et d'autre de ce pic principal ; respectivement centrés sur 1.02 et 1.12 eV.

On n'observe aucun décalage important du pic principal en fonction de la puissance. Cela signifie que l'auto-échauffement n'est pas très important en polarisation directe dans cette diode. Comme nous le verrons, la puissance dissipée en polarisation directe est très inférieure à ce qu'elle est en polarisation inverse.

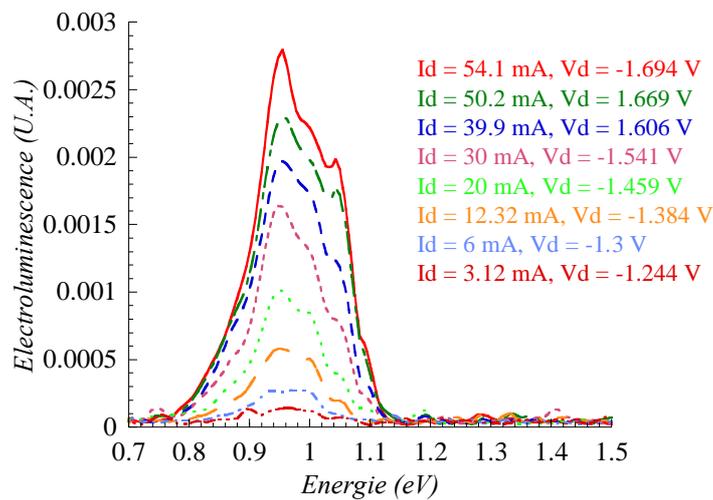


Figure 32 : Spectres d'électroluminescence de la diode $Si_{0.9}Ge_{0.1}$ en régime direct à 4 K.

Sur la figure 32 on distingue un pic principal à 0.96 eV et un fort épaulement à 1,04 eV. Ici encore, l'intensité de luminescence croît avec l'intensité du courant. A faible courant seul un bosse assez large et centrée sur 0.98 eV existe puis l'épaulement apparaît alors que le courant

augmente. On n'observe pas de décalage de l'énergie du pic principal vers les basses énergies qui pourrait être interprété comme la signature d'un échauffement.

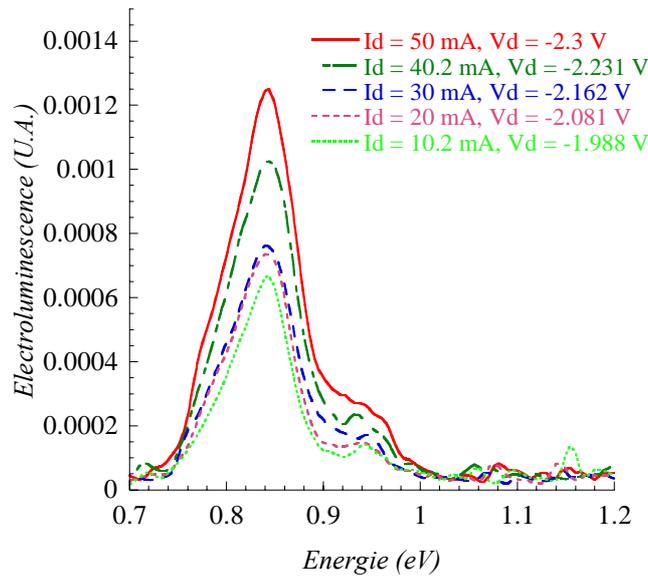


Figure 33 : Spectres d'électroluminescence de la diode $\text{Si}_{0.8}\text{Ge}_{0.2}$ en régime direct à 4 K.

Sur la figure 33 on distingue un pic principal à 0.84 eV et un épaulement à 0.95 eV. Ici encore, l'intensité de luminescence croît avec l'intensité du courant et aucun décalage du pic principal n'est repéré ce qui est très surprenant car la conductivité de $\text{Si}_{0.8}\text{Ge}_{0.2}$ est mauvaise et la couche est épaisse.

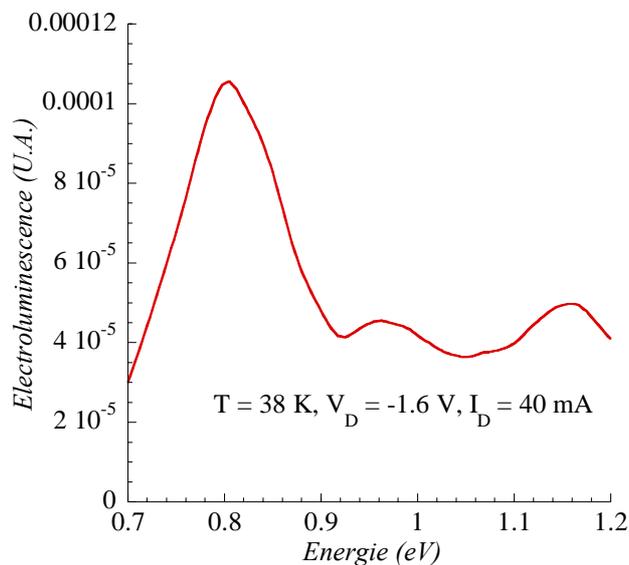


Figure 34 : Spectre d'électroluminescence de la diode $\text{Si}_{0.54}\text{Ge}_{0.46}$ en régime direct à 4 K

Sur la figure 34 on distingue un pic principal à 0.8 eV. Cependant, l'intensité du signal d'électroluminescence étant très faible, il est délicat de discuter de son allure.

b) *Diodes IMPATT 300 K en inverse*

En polarisation inverse, les tensions de coude des diodes sont d'autant plus élevées que les zones intrinsèques sont épaisses. On constate que l'allure des courbes de luminescence est voisine de celle des courbes de courant.

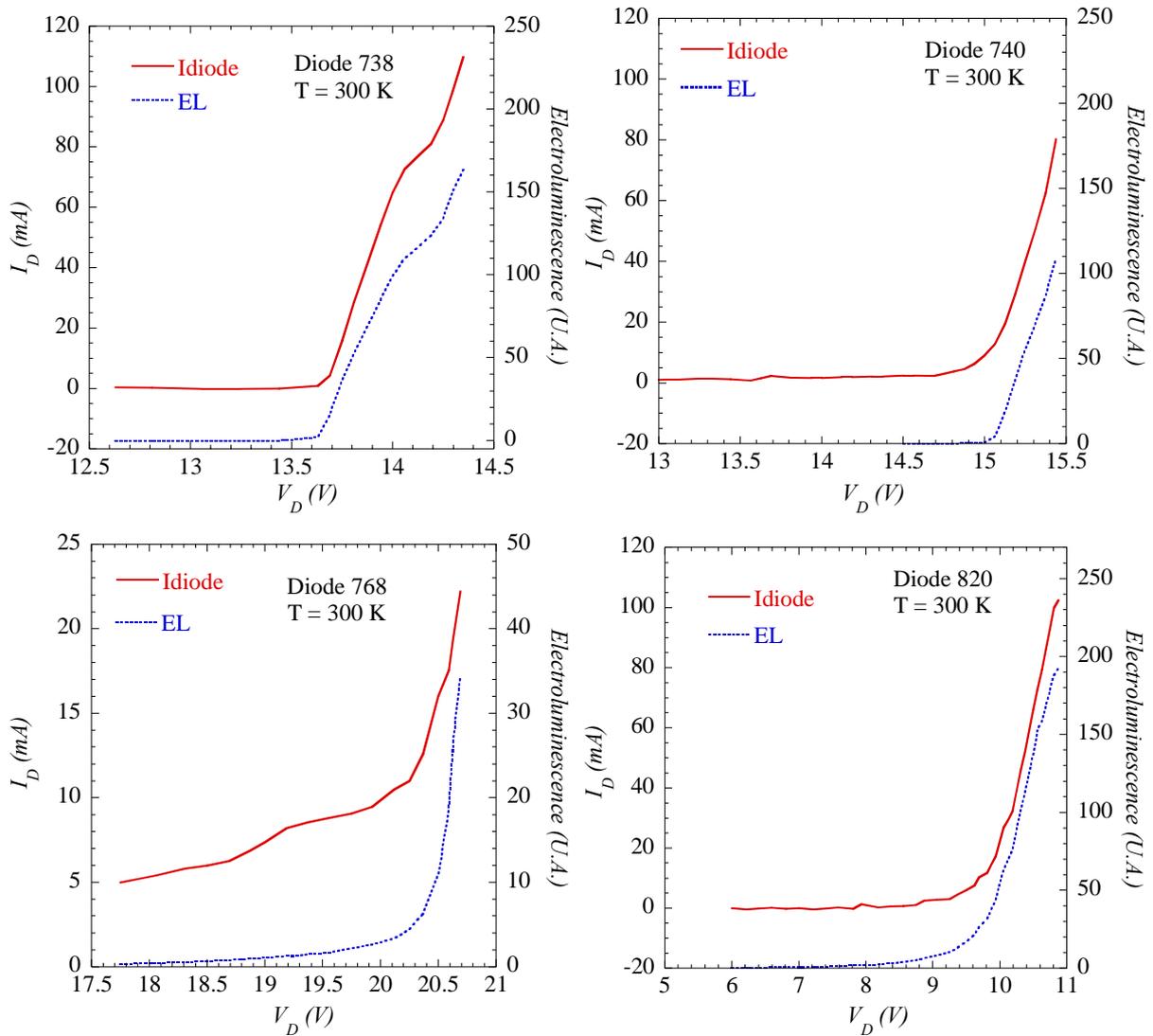


Figure 35: Caractéristiques I-V (en inverse) et intensité de luminescence des diodes 738, 740, 768 et 820 à 300 K.

Cependant, la courbe de luminescence « décolle » toujours légèrement avant celle du courant ; montrant qu'il ne s'agit pas d'un courant tunnel direct à travers la bande interdite (effet Zener) mais d'un processus initié par les porteurs présents dans la zone d'avalanche coté P-i. On peut apprécier, au passage, la sensibilité de la mesure de luminescence en comparaison de celle des caractéristiques électriques statiques. Au delà du coude, l'intensité du signal de luminescence augmente, traduisant une forte concentration de porteurs minoritaires créés par l'ionisation par choc.

Même si il est difficile de comparer l'intensité de luminescence d'une courbe à l'autre car les réglages optique sont différents, on peut affirmer que les diodes Si et $\text{Si}_{0.54}\text{Ge}_{0.46}$ ont davantage luminescé que les deux autres.

Discutons les spectres de luminescences relevés en polarisation inverse afin d'identifier le lieux de la recombinaison radiative, l'énergie des porteurs impliqués.

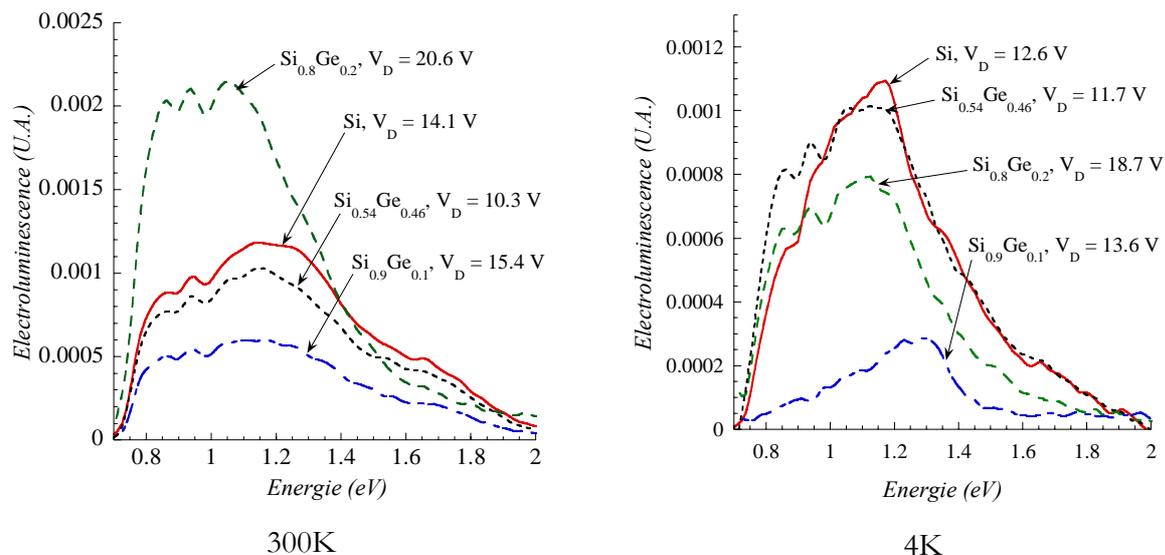


Figure 36: Diodes 738, 740, 768 et 820 en régime inverse pour un courant de 20 mA à 300 K et à 4K

On constate que :

- 1/ Les spectres s'étendent depuis la coupure du détecteur jusqu'à 2 eV.
- 2/ Les spectres ont à peu près la même allure quelle que soit la diode.
- 3/ Les spectres n'évoluent guère en température. Si ce n'est un léger décalage du pic maximum de luminescence.
- 4/ La diode Si présente un maximum d'intensité à plus haute énergie.
- 5/ A 300K c'est la diode $\text{Si}_{0.8}\text{Ge}_{0.2}$ qui luminesce le plus juste devant la diode Si, à 4K c'est la diode Si qui luminesce le plus devant la diode $\text{Si}_{0.54}\text{Ge}_{0.46}$. Cela illustre le rôle important joué par les processus non radiatifs dans les diodes SiGe notamment à cause de défauts.
- 6/ Les tensions de seuil se décalent de -1,5, -1,8, -1,9 et +1,5 V entre 300K et 4K respectivement pour les diodes Si, $\text{Si}_{0.1}\text{Ge}_{0.9}$, $\text{Si}_{0.2}\text{Ge}_{0.8}$ et $\text{Si}_{0.54}\text{Ge}_{0.46}$.

Remarque : Les réponses observées ne sont pas décorréliées des réponses de la diode Ge (détecteur) et du spectromètre.

Où la recombinaison radiative se produit-elle ?

Parmi les observations des figures 36, explicitées ci-dessus les deux plus remarquables sont les commentaires 1/ et 2/ Il est en effet très surprenant d'observer des spectres de luminescence aussi voisins alors que les zones intrinsèques des diodes sont très différentes. Dans un premier mouvement, nous avons imaginé que les recombinaisons radiatives pourraient avoir lieu dans le même matériau : le silicium de la zone P+ ou bien des pièges en périphérie de la structures par exemple. Mais une analyse fine du fonctionnement interne de la diode et l'observation visuelle de signaux lumineux dans le visible sortant du volume de la diode nous ont convaincus que les recombinaisons radiatives se produisent localement dans la zone d'avalanche.

Nous consacrons quelques lignes à l'établissement de cette conviction.

Comme tous les spectres se ressemblent, on peut penser que les recombinaisons impliquent des porteurs (électrons et trous) très énergétiques. Ces recombinaisons sont, de surcroît, indirectes ce qui ne contribue pas à augmenter la résolution des spectres.

Où la recombinaison pourrait elle avoir lieu ? Les porteurs électrons ou trous sont séparés par un champ électrique intense. L'oscillation existe car les électrons dérivent jusqu'à la zone N+. Nous avons vu que les zones intrinsèques sont soit légèrement N (diode Si) soit légèrement P (diode SiGe). Dans ce dernier cas on peut imaginer des recombinaisons électron/trou dans la zone de transit. Mais le champ intense balaie les porteurs... Dans le cas de la diode Si ce type de contribution ne peut exister. Or les spectres se ressemblent beaucoup...

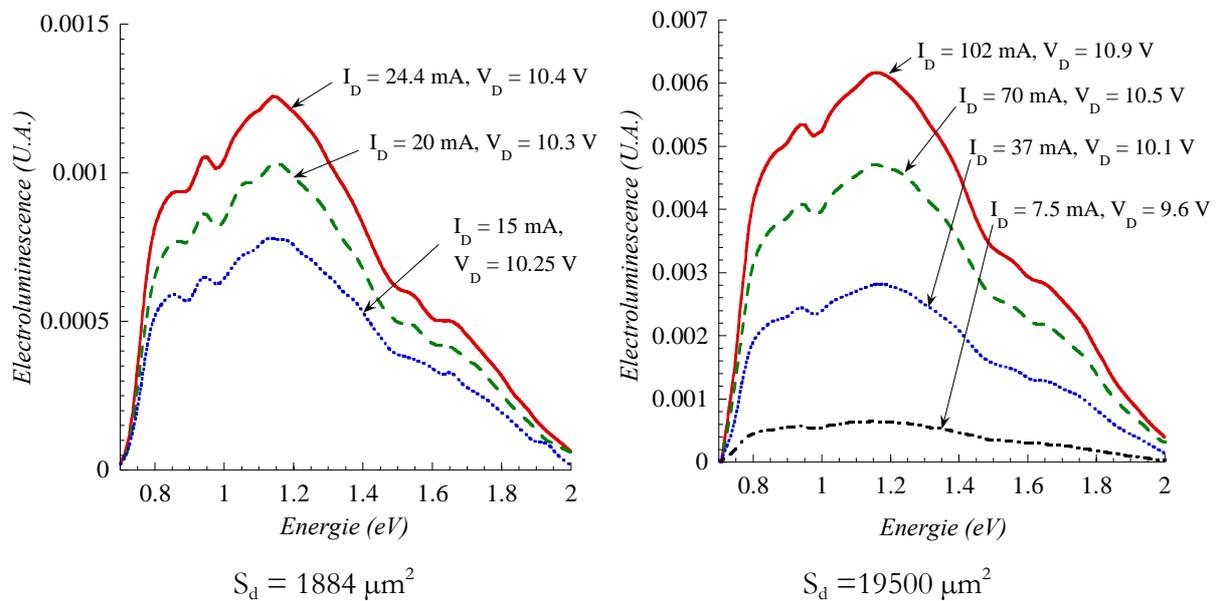
Pourrait il s'agir de recombinaisons sur des défauts en volume ou en périphérie dus au clivage? Certes mais le comportement thermique serait tout autre. Des diodes présentant des surfaces et des rapports périphérie sur surface très différents ont été mesurées sans que cela ne révèle des spectres très différents.

Les recombinaisons pourraient elles avoir lieu dans les zones P+ ou N+ suite à la diffusion de minoritaires ? Cela est peu probable en polarisation inverse.

Le fait que les spectres de luminescence commencent à 800 meV est imputable à l'effet Franz-Keldysh le champ extrêmement intense (voir tableau VI) induit un abaissement de l'énergie de recombinaison en dessous de celle de la bande interdite, car les fonctions d'ondes des porteurs s'étendent dans le « gap ».

La remarque 6/ est également intéressante car elle montre bien que la dépendance du seuil de l'ionisation par choc dans un dispositif est complexe. En effet, non seulement les propriétés physiques du matériau dans lequel se produit l'ionisation par choc interviennent, mais aussi le fonctionnement de l'ensemble du dispositif. Au chapitre 4, § III nous avons fourni les

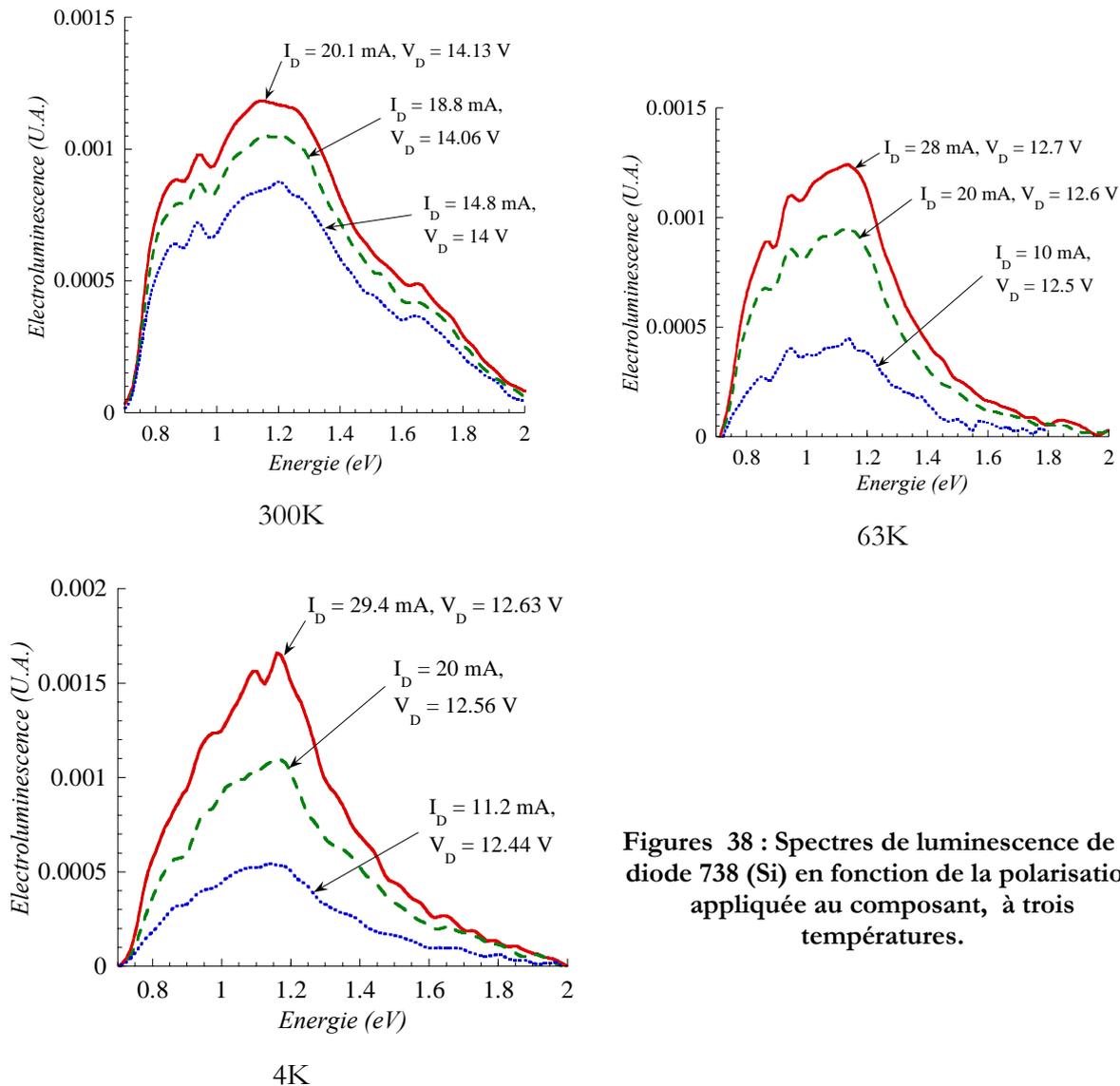
coefficients d'ionisation par choc de Si et de Ge massifs et contraints, et nous avons vu que l'évolution de la largeur de bande interdite ne contrôlait pas, à elle seule, la valeur du coefficient d'ionisation. Des études antérieures menées dans l'opération [Cavassilas2000] ont également montré que le coefficient d'ionisation pouvait augmenter mais aussi diminuer lorsqu'on refroidissait un matériau. Ce qu'indique l'augmentation de la tension de polarisation en inverse de la diode $\text{Si}_{0.54}\text{Ge}_{0.46}$ c'est que le coefficient d'ionisation semble diminuer aux températures cryogéniques (nous disposons de plusieurs analyses de spectres à diverses température entre 300K et 4K). Le rôle du taux d'interaction d'alliage dans ce matériau exige des travaux complémentaires. En revanche dans les diodes Si, $\text{Si}_{0.1}\text{Ge}_{0.9}$, $\text{Si}_{0.2}\text{Ge}_{0.8}$ les seuils d'ionisation en tension diminuent avec la température semblant indiquer que le coefficient d'ionisation diminue à basse température dans ces matériaux.



Figures 37 : Spectres d'électroluminescence de la diode 820 ($\text{Si}_{0.54}\text{Ge}_{0.46}$) à 300K pour deux surfaces de diodes : $S_d = 1884 \mu\text{m}^2$ et $S_d = 19500 \mu\text{m}^2$.

Les figures 37 montrent que les spectres de luminescence ne dépendent quasiment pas de la surface de la diode. Pour des densités de courant comparables, l'échauffement est plus élevé dans la diode la plus grande mais comme il est impossible d'identifier un pic de luminescence, nous ne pouvons nous en rendre compte visuellement. On observe par ailleurs que si l'intensité de luminescence varie avec la puissance électrique imposée aux bornes de la diode, l'allure du spectre lui n'évolue guère. Le renforcement de l'intensité de luminescence vers 1 eV au détriment de

l'intensité à haute énergie est, en fait, discutable car il s'agit de données brutes n'intégrant pas la réponse du spectromètre et celle de la diode Ge refroidie.



Figures 38 : Spectres de luminescence de la diode 738 (Si) en fonction de la polarisation appliquée au composant, à trois températures.

Les figures 38 montrent les spectres d'électroluminescence de la diode Si à trois températures et pour divers points de polarisation. On constate que l'allure des spectres évolue peu. Il apparaît toutefois que l'intensité de luminescence à faible énergie (0.8-1 eV) diminue à cause de l'augmentation de la largeur de bande interdite et à cause de l'accroissement de la capacité des porteurs à gagner de l'énergie.

c) Résultats Hyperfréquences

Monsieur Manuel Rodriguez a réalisé des mesures des diodes IMPATT en inverse. Dans une première analyse, seules les diodes Si et $\text{Si}_{0.8}\text{Ge}_{0.2}$ ont été étudiées. Avant d'accéder aux paramètres

S des diodes, il faut réaliser un épluchage des plots et des lignes d'accès aux dispositifs. Dans la mesure où le substrat est P+, ce travail est très ardu. Le schéma équivalent que nous avons retenu pour réaliser cet « épluchage » est donnée en figure 39.

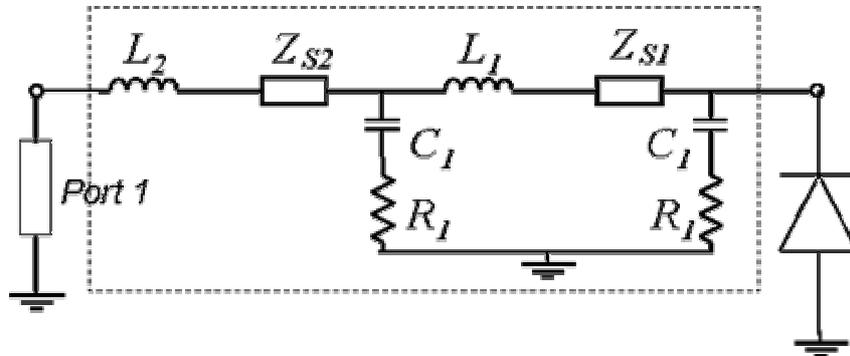
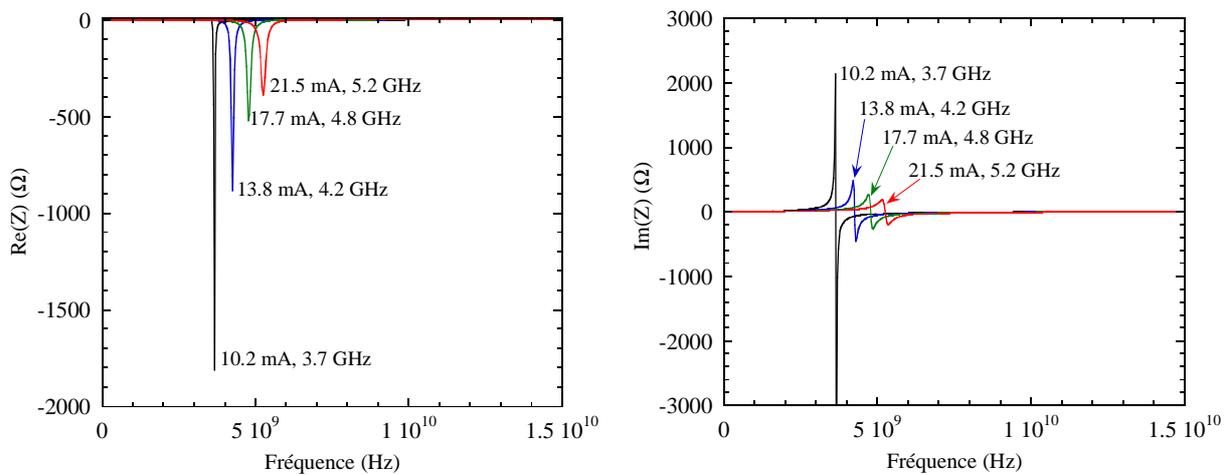


Figure 39 : Schéma équivalent petit signal des plots et des lignes d'accès à la diode IMPATT.

Nous avons ensuite cherché les valeurs des paramètres intervenant dans l'impédance complexe de la diode IMPATT établie au § III-2 grâce à des méthodes de minimisation de fonction. Toutefois, avant d'utiliser ces algorithmes nous avons cherché à fixer analytiquement le plus grand nombre de paramètres. Pour cela nous avons utilisé la partie imaginaire et la partie réelle de cette impédance Z . La figure 40 montre la variation des parties réelle et imaginaire de cette impédance en fonction de la pulsation pour une diode SiGe à différents courants. Le pic étroit observé va nous permettre de trouver la valeur de f_a qui est la fréquence de résonance de la cellule

$$L_a C_a \text{ correspondant à la zone d'avalanche : } \omega_a = \frac{1}{\sqrt{L_a C_a}} = \sqrt{\frac{2\alpha' v_s J_c}{\epsilon}}$$



Figures 40 : Parties réelle et imaginaire des paramètres Z pour 6, 10, 13, 17 et 21 mA pour la diode $\text{Si}_{0.8}\text{Ge}_{0.2}$ en fonction de la fréquence.

Nous avons établi que :

$$\text{Re}(Z) = \frac{1}{\omega C_d} \frac{(1 - \cos \theta) / \theta}{1 - \left(\frac{\omega}{\omega_a}\right)^2} \text{ et } \text{Im}(Z) = \frac{\sin \theta / \theta}{\omega C_d} - \frac{1}{\omega C_d} - \frac{1}{\omega C_d} \frac{\sin \theta / \theta}{1 - \left(\frac{\omega_a}{\omega}\right)^2} - \frac{1}{\omega C_a} \frac{1}{1 - \left(\frac{\omega_a}{\omega}\right)^2}$$

où $C_d = \frac{\epsilon S}{(d - l_a)}$, $C_a = \frac{\epsilon S}{l_a}$ et $\theta = \frac{\omega(d - l_a)}{v_m}$ où l_a est la longueur de la zone d'avalanche et v_m la vitesse moyenne des porteurs dans la zone intrinsèque (qui s'est avérée être supérieure à la vitesse de saturation des électrons dans la zone de transit).

On peut tirer analytiquement la valeur de f_a à partir de la relation suivante :

$$2\pi f_a = \frac{\omega^2 (\text{Re}(Z) \text{Im}(Z) \omega)^{1/2}}{\text{const} + (\text{Re}(Z) \text{Im}(Z) \omega)^{1/2}}$$

Puis nous avons extrait de manière numérique la longueur de la zone d'avalanche noté l_a en

utilisant la relation : $l_a = d \left[\frac{\theta_a \omega_a \text{Im}(Z)}{2\omega \text{Re}(Z)} - 1 + \frac{\theta_a}{6} \right]$ où $\theta_a = \frac{\omega l_a}{v_m}$

Nous avons ensuite utilisé les algorithmes de minimisation de fonction du logiciel *ADS* pour extraire les valeurs de la vitesse moyenne des porteurs dans la zone intrinsèque ainsi que la résistance série de la diode qui est une fraction d'Ohm, comme cela est illustré sur la figure 41, où l'on peut voir le coefficient de réflexion de la diode IMPATT (« épluché ») pour un courant de 10,2 mA.

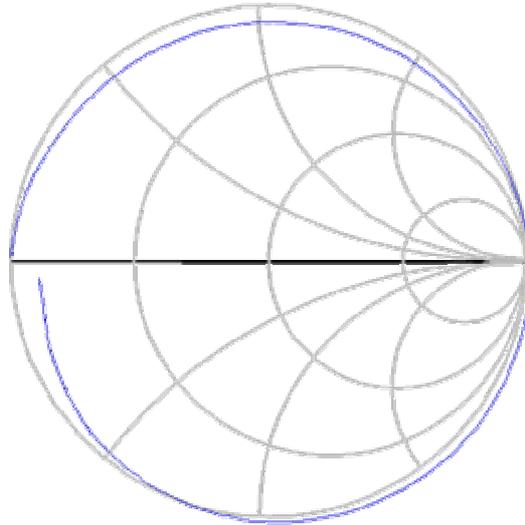


Figure 41: Paramètres S pour 10,2 mA pour la diode $\text{Si}_{0.8}\text{Ge}_{0.2}$ (après « épluchage »).

Ces données permettent de calculer la valeur de α' et le champ électrique appliqué à la diode dans la zone d'avalanche E_a . Pour des raisons de simplification E_a est supposé constant entre le début de la zone intrinsèque et l_a puis nous supposons qu'il diminue linéairement jusqu'à atteindre zéro au début de la zone N^+ .

Ainsi le champ E_a et le potentiel appliqué à la diode V_d sont liés par la relation : $V_d = \frac{E_a(L+l_a)}{2}$

(si on néglige la chute de potentiel dans la résistance série).

Quant au paramètre α' il vaut : $\alpha' = \frac{2\varepsilon\pi^2 f_a^2}{v_m J_{c0}}$

Où J_{c0} est la densité de courant de conduction continue traversant la diode.

Les résultats obtenus sont reportés dans le tableau VI. Il apparaît que le coefficient α' est plus faible dans le $Si_{0.8}Ge_{0.2}$ que dans Si ce qui n'est guère favorable pour obtenir des fréquences d'oscillation très élevées.

Diode	E_a (V/m)	α' (m ² /V)
IMPATT 738 (Si)	1.0356e+07	0.30844
	1.0546e+07	0.31586
	1.0622e+07	0.31360
	9.7724e+06	0.31827
IMPATT 768 (Si _{0.8} Ge _{0.2})	1.9725e+07	0.24160
	1.7312e+07	0.23067
	1.7115e+07	0.23600
	1.6672e+07	0.23290
	1.6311e+07	0.22901

Tableau VI : E_a et α' obtenus à partir des mesures HF pour les échantillons 738 et 768 de surface $S_d = 1884 \mu m^2$.

Une hypothèse lourde des calculs du § III.1 est que le coefficient d'ionisation est le même pour les électrons et pour les trous. Dans la réalité, le coefficient qui est estimé dans le tableau VI est une moyenne. En fait, il constitue même une moyenne de valeurs moyennes. En effet en chaque point de la zone d'avalanche, le coefficient d'ionisation différentiel apparent est la moyenne des coefficients d'ionisation différentiels des électrons et des trous pondérés des populations. Comme les populations d'électrons et de trous se modifient le long de la zone d'avalanche nous estimons

donc par notre approche expérimentale une moyenne spatiale des coefficients d'ionisation différentiels apparents.

Les coefficients α' ont également été calculés pour les électrons et les trous dans Si et dans $\text{Si}_{0.8}\text{Ge}_{0.2}$ à l'aide des outils de modélisation numérique décrits aux chapitres 2, 3 et 4. Comme cela a été discuté au chapitre 4, § III, il faut ajuster le terme constant de la matrice pour une valeur du champ électrique (sur une donnée expérimentale) afin d'obtenir des résultats pour toutes les autres valeurs du champ électrique.

La difficulté réside dans le fait que pour le silicium il existe des données expérimentales très différentes pour la valeur du α'_n à 100 kV/cm. On trouve dans la littérature des valeurs qui sont comprises entre $0.147 \text{ m}^{-2}\text{V}^{-1}$ [Lee64] et 25 [Grant73]. J'ai choisi d'ajuster les α_n sur la valeur de Van Overstraeten et al. [VanOverstraeten70] qui obtient $\alpha'_n = 3.9 \text{ m}^{-2}\text{V}^{-1}$ à 100 kV/cm. Pour les électrons dans SiGe, un article de simulation Monte Carlo [Ershov94] prévoit $\alpha(\text{Si}_{0.8}\text{Ge}_{0.2}) = 0.41\alpha_n(\text{Si})$ à 250 kV/cm, j'ai donc utilisé ce facteur (faute de mieux !). Pour les trous dans Si, j'ai réalisé un ajustement de α_p sur ceux de Fischetti et al. [Fischetti97] à 200 kV/cm. Pour les trous dans SiGe j'ai utilisé les données de la référence [Lee95].

La figure 42 fournit la variation des coefficients d'ionisation différentiels pour les électrons et les trous dans Si et dans $\text{Si}_{0.8}\text{Ge}_{0.2}$. Ces coefficients sont des résultats de modélisation du même type que ceux présentés au chapitre 4.

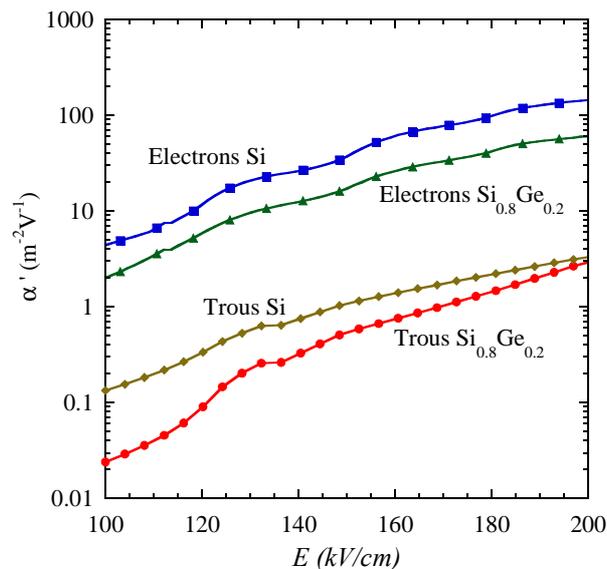


Figure 42 : α'_n et α'_p dans Si et dans $\text{Si}_{0.8}\text{Ge}_{0.2}$ à 300 K.

Le tableau VII comprend les valeurs de α'_n et α'_p dans Si et dans $\text{Si}_{0.8}\text{Ge}_{0.2}$ à 100 et à 200 kV/cm, toujours issus de la modélisation. On constate que dans le silicium les données expérimentales (tableau VI) sont obtenues pour des champs électriques voisins de 100 KV/cm. Les valeurs de α' mesurées apparaissent donc plus proches du coefficient d'ionisation différentiel des trous que de celui des électrons. Dans la diode $\text{Si}_{0.8}\text{Ge}_{0.2}$, il en est de même car les champs électriques sont beaucoup plus élevés que dans la diode Si.

α' ($\text{m}^{-2}\text{V}^{-1}$)	Electrons Si	Trous Si	Electrons $\text{Si}_{0.8}\text{Ge}_{0.2}$	Trous $\text{Si}_{0.8}\text{Ge}_{0.2}$
E = 100kV/cm	4.4	0.13	2.0	0.024
E = 200 kV/cm	145	3.4	60	2.9

Tableau VII : α'_n et α'_p dans Si et dans $\text{Si}_{0.8}\text{Ge}_{0.2}$ à 300 K pour 100 et 200 kV/cm.

Il convient de rester mesuré au moment de tirer des conclusions de la comparaison des coefficients d'ionisation différentiels issus des mesures et de ceux tirés de la modélisation numérique. On peut retenir que l'ordre de grandeur de ces coefficients pour les trous dans les deux matériaux est le même que celui des coefficients issus de la mesure. Les mesures et les traitements expérimentaux sont entachés d'erreurs ; quant à la modélisation de l'ionisation par choc avec la méthode de Kane, elle requiert un paramètre d'ajustement et constitue une simplification de la réalité. Des approches alternatives sont à appréhender afin d'approfondir la connaissance du coefficient d'ionisation différentiel qui est un paramètre clef pour l'optimisation des diodes IMPATT.

En conclusion du § III, nous pouvons rappeler que les travaux présentés ici constituent les premières études de luminescence de diodes IMPATT. Les composants étudiés intègrent des couches actives SiGe ce qui n'avait jamais été entrepris. Ces réalisations préliminaires ne visent pas des records de performances mais visent une intégration, in fine, dans une filière CMOS avec laquelle elle a vocation à être compatible.

La question posée par l'université de Stuttgart est : l'incorporation de SiGe dans des diodes IMPATT est il de nature à améliorer leurs performances ?

Il faut savoir que les diodes Silicium tiennent le haut du pavé car le silicium présente une bien meilleure conductivité thermique que ses concurrents (GaAs, InGaAs et InP). Sur ce volet il est

douteux que les composants SiGe puissent le concurrencer car la conductivité thermique de SiGe peut être 20 fois plus mauvaise que celle de Si. Et comme la zone intrinsèque est épaisse de quelques centaines de nanomètres cela constitue un handicap. Le volet sur lequel le SiGe est potentiellement plus intéressant que le silicium est ce qui relève de l'ionisation par choc : la tension de seuil –plus elle est faible pour une épaisseur intrinsèque donnée moins la puissance dissipée est élevée– et sur le paramètre α' qui joue au premier ordre –tout comme la densité de courant– sur la fréquence d'oscillation de la diode.

La diode IMPATT est en outre pour notre équipe un dispositif particulièrement intéressant car l'ionisation par choc est au cœur de son fonctionnement et n'est pas perçue, pour une fois, comme un effet négatif mais comme un processus à favoriser et à optimiser.

Après avoir rappelé le principe de fonctionnement de la diode IMPATT, l'état de l'art des diodes IMPATT et après avoir décrit les quatre diodes étudiées, nous avons discuté de l'allure des spectres d'électroluminescence en polarisation directe et en polarisation inverse, en fonction de la température, de la polarisation et de la taille des dispositifs afin d'établir les caractéristiques du processus d'ionisation par choc dans chacun des composants.

Nous avons obtenu des spectres d'électroluminescence en polarisation directe conformes à nos attentes à l'exception de la localisation du pic principal de recombinaison dans les diodes $\text{Si}_{0,8}\text{Ge}_{0,2}$ et $\text{Si}_{0,54}\text{Ge}_{0,46}$. En effet, ces pics sont localisés à des énergies plus basses que l'énergie de bande interdite des alliages considérés. Aucune trace d'auto-échauffement n'a été relevée en polarisation directe. L'ensemble de ces points semble indiquer que des niveaux accepteurs et/ou des centres profonds dus à des défauts structurels sont impliqués dans les mécanismes de recombinaisons radiatives dans ces composants SiGe.

Les spectres d'électroluminescence relevés en polarisation inverse sont beaucoup plus surprenants. Ils s'étendent depuis la coupure du détecteur jusqu'à 2 eV et présentent à peu près la même allure quelle que soit la diode et la température. Pour les diodes Si, $\text{Si}_{0,1}\text{Ge}_{0,9}$ et $\text{Si}_{0,2}\text{Ge}_{0,8}$ on relève un décalage de la tension de seuil d'ionisation qui se décale vers de plus faibles valeurs alors qu'il augmente à basse température pour les diodes polarisations $\text{Si}_{0,54}\text{Ge}_{0,46}$. Ces résultats indiquent la dépendance du coefficient d'ionisation avec la température. Ce qui présente un intérêt fort pour le fonctionnement des diodes IMPATT qui ont une propension à chauffer.

La dernière partie de ce § III a également fourni des résultats intéressants. Nous avons comparé le coefficient d'ionisation par choc différentiel obtenu grâce aux traitements de données expérimentales (mesures de paramètres S) et des calculs de ce coefficients tirés de ce qui est présenté au chapitre 4.

BIBLIOGRAPHIE DU CHAPITRE 5

- [Aniel95] F. Aniel, P. Boucaud, A. Sylvestre, P. Crozat, F.H. Julien, R. Adde, and Y. Jin, "Electroluminescence spectroscopy of AlGaAs/InGaAs and AlGaAs/GaAs high-electron-mobility transistors", *J. Appl. Phys.* **77**, 5, 2184-9 (1995).
- [Arai 2004] M. Arai, S. Ono et C. Kimura, "Impatt oscillation in SiC $p^+n^-n^+$ diodes with a guard ring formed by vanadium ion implantation", *Electronics Lett.* **40**, 16, 1026-7 (2004)
- [Cavassilas2000] N. Cavassilas, F. Aniel, P. Boucaud, R. Adde, H. Maher, J. Décobert and A. Scavenec, "Electroluminescence of Composite Channel InAlAs/InGaAs/InP/InAlAs High Electron Mobility Transistor," *J. Appl. Phys.* **87**, 5, 2548-52 (2000)
- [Cavassilas2000b] Rapport de thèse de sciences par Nicolas Cavassilas présenté à l'université Paris XI Orsay en 2000, intitulé « Etude du phénomène d'ionisation par choc dans les semi-conducteurs III-V : application aux transistors à effet de champ. »
- [Czajkowski92] I. K Czajkowski, J. Allam, A. R. Adams et M. A. Gell "Impact ionization thresholds in Ge_xSi_{1-x} alloys and strained layers", *J. Appl. Phys.* **71**, 8 3821-6(1992)
- [Eisele98] H. Eisele, G.I. Haddad, "Two-terminal millimeter-wave sources", *IEEE Trans. Microwave theory tech.* **46**, 6, 739-46 (1998)
- [Enciso2003] Rapport de thèse de sciences par Mauro Enciso présenté à l'université Paris XI Orsay en 2000, intitulé « Analyse expérimentale et modélisation électrique de n-HFET et p-HFET sur SiGe »
- [Ershov94] M. Ershov, V. Ryzhii, "High-field electron transport in SiGe Alloys", *Jpn. J. Appl. Phys.* **33**, 1, 3A, 1365-71 (1994)
- [Fischetti97] M.V. Fischetti, N. Sano, S.E. Laux, and K. Natori, "Full-band-structure theory of high-field transport and impact ionization of electrons and holes in Ge, Si, and GaAs," *IEEE Trans. Semicond. Techn. Modeling. and Simulation.*, URL :<http://www.ieee.org/journal/tcad/accepted/fischetti-feb97/>
- [Gaddi99] R. Gaddi, G. Meneghesso, M. Pavesi, M. Peroni, C. Canali and E. Zanoni, "Electroluminescence analysis of HFET's Breakdown," *IEEE Electron Device Lett.* **20**, 7, 372-74 (1999)
- [Grant73] W.N. Grant, "Electron and hole ionization rates in epitaxial silicon at high electric fields", *Solid State elec.* **16**, 1189-203 (1973)
- [Lee64] C.A. Lee, R.A. Logan , R.L. Batdorf, J.J. Kleimack et W. Wiegmann, "Ionization rates of holes and electrons in silicon", *Phys. Rev.* **134**, 3A, A761-73 (1964)
- [Lee95] J. Lee, A.L. Gutierrez-Aitken, S.H. Li et P.K. Bhattacharya, "Impact ionization coefficients in $Si_{1-x}Ge_x$ ", *Appl. Phys. Lett.* **66**, 2, 204-5 (1995)
- [Luschas2002] M. Luschas, R. Judaschke, J.F. Luy, "Simulation and measurements results of 150 GHz integrated silicon Impatt diodes", *IEEE MTT-S International Microwave Symposium Digest* **2**, 1269-1272 (2002)

- [Luy94] J.F. Luy, P. Russer, *Silicon based millimeter waves devices*, Ed. Springer Verlag, 1994
- [Mishra2004] J. K. Mishra, G. N. Dash, S. R. Pattanaik et I. P. Mishra, "Computer simulation study on the noise and millimeter wave properties of InP/GaInAs heterojunction double avalanche region Impatt diode", *Solid State Electronics* **48**, 401-408 (2004)
- [Paul99] D.J. Paul, "Silicon-Germanium Strained Layers Materials in Microelectronics", *Advanced Materials* **11**, 3, 191-204 (1999)
- [Read58] W.T. Read, "A proposed high frequency negative resistance diode", *Bell Syst. Tech. J.* **37**, 401-46 (1958)
- [Richard2004] S. Richard, N. Zerounian, G. Höck, T. Hackbarth, H.-J. Herzog et F. Aniel, "Electroluminescence of Ge/SiGe pMODFETs", International silicon technology and device meeting, ISTDM 2004, Frankfurt (Oder), Allemagne, 16-19 mai 2004.
- [Ridley93] B.K Ridley, "Electron-hybridon interaction in a quantum well", *Phys.Rev. B* **47**, 8, 4592-602 (1993)
- [Selberherr84] S. Selberherr, *Analysis and simulation of semiconductor devices*, Springer-Verlag, Wien-New York, 1984.
- [Shi2003] Y. Shi, G. Niu, J.D. Cressler, D.L. Harnage, "On the Consistent Modeling of Band-Gap Narrowing for Accurate Device-Level Simulation of Scaled SiGe HBTs", *IEEE Trans. Electron Dev.* **50**, 5, 1370-7 (2003).
- [Söllhorn2003] Söllhorn et al., "Monolithically integrated silicon-Impatt oscillator at 93 GHz", 33rd E. M. C Munich pp. 1291-1294, 2003
- [Tedesco93] C. Tedesco, E. Zanoni, C. Canali, S. Bigliardi, M. Manfredi, D.C. Streit, W.T. Anderson, "Impact ionization and light emission in high-power pseudomorphic AlGaAs/InGaAs HEMTs", *IEEE Trans. Electron Dev.* **40**, 7, 1211-14 (1993)
- [Toyabe96] T. Toyabe, "Semiconductor Device Modeling," *Encyclopedia of Applied Physics*, VCH Publishers, Inc, 17, 1996
- [VanOverstraeten70] R. Van Overstraeten et H. De Man, "Measurement of the ionization rate in diffused silicon p-n junctions", *Solid. State Elec.* **13**, 583-608 (1970)
- [Williams96] C.J. Williams, "Impact Ionisation and Auger Recombination in SiGe Heterostructures", PhD thesis, University of Newcastle-upon-Tyne, 1996.
- [Yamashita2000] O. Yamashita, N. Sadatomi, "Thermoelectric properties of Si_{1-x}Ge_x (x=0.10) with alloy and dopant segregations", *J. Appl. Phys.* **88**, 1, 245-51 (2000)
- [Zanoni93] E. Zanoni, L. Vendrame, P. Pavan, M. Manfredi, S. Bigliardi, R. Malik, "Hot-electron electroluminescence in AlGaAs/GaAs heterojunction bipolar transistors", *Appl. Phys. Lett.* **62**, 4, 402-4 (1993)
- [Zappe90] H. P. Zappe, C. Moglgestue, "Electroluminescence from Gunn domains in GaAs/AlGaAs heterostructure field-effect transistors", *J. Appl. Phys.* **68**, 5, 2501-3 (1990).

Conclusion générale

L'objectif de cette thèse était l'étude du transport à fort champ dans les alliages SiGe et plus particulièrement du processus d'ionisation par choc.

Pour simuler le transport à fort champ électrique, il est nécessaire d'avoir accès à la structure électronique complète des semi-conducteurs considérés c'est pourquoi nous avons développé la méthode **k.p** à 30 bandes. Nous avons ainsi modélisé les structures électroniques du Si, du Ge, des alliages SiGe et du GaAs sur une large gamme d'énergie (11 eV autour de la bande interdite) avec une très grande précision sur les paramètres utiles pour l'étude du transport (chapitre 4), tels les paramètres de Luttinger ou les masses effectives en bande de conduction.

Nous avons aussi construit un hamiltonien de type Bir et Pikus, qui permet de décrire les effets de la contrainte biaxiale subie par un semi-conducteur dans le plan [001], non seulement en bande de valence mais aussi en vallée Δ de la bande de conduction, sans potentiel local de déformation. Associé à l'hamiltonien **k.p** à 30 bandes, il donne accès aux structures électroniques de tous les alliages $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$ contraints. Une base de données exhaustive sur les structures électroniques des alliages SiGe massifs et contraints est ainsi disponible.

Cette méthode **k.p** à 30 bandes a été associée au formalisme de la fonction enveloppe pour obtenir les sous-bandes en bande de valence et de conduction de puits quantiques à base d'alliages SiGe. Elle nous a fourni non seulement les extrema des sous-bandes, mais aussi les structures électroniques bidimensionnelles associées et les fonctions enveloppes.

Pour intégrer les structures électroniques dans la simulation du transport, nous avons développé un algorithme qui donne accès aux densités d'états pour des structures électroniques tridimensionnelles mais aussi bidimensionnelles. Nous avons comparé les densités d'états obtenues à partir des diagrammes de bandes calculés au chapitre 2 avec des densités d'états issues d'autres techniques de calcul de bande ce qui nous a permis de vérifier l'efficacité de la méthode **k.p** à 30 bandes pour calculer les structures électroniques sur toute la zone de Brillouin. Nous avons aussi obtenu les masses de densité d'états en fonction de la température dans les alliages SiGe massifs et contraints en compression sur Si. Ces masses ont fourni un modèle simplifié de la bande de valence qui a permis de quantifier l'influence de la contrainte sur la mobilité moyenne des trous dans les matériaux IV-IV.

Le chapitre 4 était consacré à l'étude du transport dans les alliages SiGe à partir d'une résolution déterministe de l'équation de Boltzmann. Nous avons d'abord mené cette résolution pour le transport tridimensionnel, en utilisant plusieurs niveaux d'approximation du diagramme de bande. Le calcul de la mobilité moyenne des trous dans les alliages SiGe à partir des masses de densité d'états nous a montré l'importance considérable du potentiel d'alliage.

Pour simuler le transport des électrons dans le Si à fort champ électrique, nous avons pu conserver l'anisotropie de la structure électronique, grâce à la symétrie de révolution des vallées Δ de la bande de conduction. Les propriétés de transport des électrons se déplaçant dans le plan des couches d'un transistor à effet de champ à hétérojonction à canal Si contraint en tension sur SiGe ont été dégagées. En particulier, à basse température, nous avons pu comprendre pourquoi il suffit d'une très faible contrainte pour améliorer considérablement la mobilité des porteurs, alors que cet effet est plus progressif à température ambiante.

Pour les trous dans le Ge, la méthode de résolution utilisée ne permettait pas de conserver l'anisotropie de la structure électronique, c'est pourquoi nous avons utilisé une relation de dispersion isotrope, de même densité d'états que la structure électronique réelle. Nous avons néanmoins pu dégager l'effet de la contrainte sur la vitesse et l'énergie moyenne de la distribution de porteurs.

Nous avons enfin développé une résolution déterministe de l'équation de Boltzmann bidimensionnelle, en prenant en compte la relation de dispersion réelle des porteurs calculée au chapitre 2, § VI. Cette résolution a été appliquée à un puits de Ge, pour l'instant supposé carré, en compression sur $\text{Si}_{0.5}\text{Ge}_{0.5}$. La comparaison des fréquences d'interaction dans l'approximation des vallées paraboliques et calculées à partir de la relation de dispersion réelle nous a montré la nécessité de connaître cette relation de dispersion pour l'étude du transport en gaz bidimensionnel, particulièrement pour les trous dont la structure électronique est très éloignée d'une parabole à cause du fort couplage entre les deux niveaux supérieurs de la bande de valence. Pour l'instant, cette étude nous a seulement fourni des mobilités car la prise en compte du passage du gaz bidimensionnel au continuum tridimensionnel n'est pas encore effectuée.

En associant ces études du transport et les densités d'états calculées au chapitre 3, nous avons extrait des valeurs de coefficients d'ionisation par choc utilisés pour l'interprétation des mesures d'électroluminescence présentées au chapitre 5.

Pour la première fois, des mesures d'électroluminescence réalisées sur les HFET de type n ou p sur substrat SiGe ont été réalisées. Elles nous ont apporté bon nombre de réponses car les mesures électriques ne fournissaient, dans bien des cas, aucune indication sur le processus

d'ionisation par choc. Elles nous ont permis de mettre en évidence le processus d'ionisation par choc canal ouvert dans les n-HFET Si/SiGe et dans les p-HFET Ge/SiGe et d'analyser ce phénomène canal fermé dans les n-HFET. L'analyse des résultats a été grandement facilitée par le calculs des sous bandes en **k.p** mais nous avons également pu mesurer l'urgence qu'il y avait à chercher à coupler ce **k.p** à 30 bandes avec l'équation de Poisson afin d'intégrer les champs électriques internes présents dans le puits quantique.

Nous avons aussi réalisé les premières études d'électroluminescence de diodes IMPATT. Les composants étudiés intègrent des couches actives SiGe ce qui n'avait jamais été entrepris. Ces réalisations préliminaires ne visent pas des records de performances mais visent une intégration, in fine, dans une filière CMOS avec laquelle elle ont vocation à être compatibles.

L'étude présentée dans ce manuscrit vise à montrer que l'incorporation de SiGe dans des diodes IMPATT ne mène pas nécessairement à une amélioration des performances, d'une part à cause de la mauvaise conductivité thermique du SiGe (qui peut être 20 fois plus mauvaise que celle de Si) d'autre part car son paramètre α' (coefficient d'ionisation différentiel) qui joue au premier ordre –tout comme la densité de courant– sur la fréquence d'oscillation de la diode n'est pas aussi élevé que celui du silicium.

Des travaux complémentaires s'appuyant à la fois sur des modélisations numériques plus abouties (en ce qui concerne le processus d'ionisation par choc et le transport en gaz bidimensionnel) et sur des analyses expérimentales doivent être menées pour confirmer (ou infirmer) les conclusions de ce travail préliminaire.

ANNEXE

Fonctions propres de l'hamiltonien à l'intérieur de (Γ_8, Γ_7)

Sans couplage spin-orbite, les fonctions propres de l'hamiltonien décrivant la bande de valence s'écrivent $|X\rangle, |Y\rangle, |Z\rangle$. Avec couplage spin-orbite, la nouvelle base de fonctions à considérer s'écrit $|X \uparrow\rangle, |X \downarrow\rangle, |Y \uparrow\rangle, |Y \downarrow\rangle, |Z \uparrow\rangle, |Z \downarrow\rangle$. Les nouvelles fonctions propres de l'hamiltonien sont combinaison linéaires de ces fonctions. Elles s'écrivent [Pfeffer90] :

$$\begin{aligned} \left| \frac{3}{2}, \frac{3}{2} \right\rangle &= \left| \frac{3}{2} \right\rangle = \left| i \left[\frac{-1}{\sqrt{2}} (X + iY) \uparrow \right] \right\rangle \\ \left| \frac{3}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle &= \left| \frac{1}{2} \right\rangle = \left| i \left[\sqrt{\frac{2}{3}} Z \uparrow - \frac{1}{\sqrt{6}} (X + iY) \downarrow \right] \right\rangle \\ \left| \frac{3}{2}, \frac{-1}{2} \right\rangle &= \left| \frac{-1}{2} \right\rangle = \left| i \left[\frac{1}{\sqrt{6}} (X - iY) \uparrow + \sqrt{\frac{2}{3}} Z \downarrow \right] \right\rangle \\ \left| \frac{3}{2}, \frac{-3}{2} \right\rangle &= \left| \frac{-3}{2} \right\rangle = \left| i \left[\frac{1}{\sqrt{2}} (X - iY) \downarrow \right] \right\rangle \\ \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle &= \left| \frac{7}{2} \right\rangle = \left| i \left[\frac{1}{\sqrt{3}} Z \uparrow + \frac{1}{\sqrt{3}} (X + iY) \downarrow \right] \right\rangle \\ \left| \frac{1}{2}, \frac{-1}{2} \right\rangle &= \left| \frac{-7}{2} \right\rangle = \left| i \left[\frac{1}{\sqrt{3}} (X - iY) \uparrow - \frac{1}{\sqrt{3}} Z \downarrow \right] \right\rangle \end{aligned}$$

Pour les multiplets $(\Gamma_{8c}, \Gamma_{7c})$ (respectivement $(\Gamma_{8d}, \Gamma_{7d})$), les relations entre les fonctions propres sans couplage spin-orbite $|X_c\rangle, |Y_c\rangle, |Z_c\rangle$ (resp. $|X_d\rangle, |Y_d\rangle, |Z_d\rangle$) et les fonctions propres avec

couplage spin-orbite $\left| c \frac{3}{2} \right\rangle, \left| c \frac{1}{2} \right\rangle, \left| c \frac{-1}{2} \right\rangle, \left| c \frac{-3}{2} \right\rangle, \left| c \frac{7}{2} \right\rangle, \left| c \frac{-7}{2} \right\rangle$ (resp. $\left| d \frac{3}{2} \right\rangle, \left| d \frac{1}{2} \right\rangle, \left| d \frac{-1}{2} \right\rangle, \left| d \frac{-3}{2} \right\rangle, \left| d \frac{7}{2} \right\rangle, \left| d \frac{-7}{2} \right\rangle$) s'écrivent de la même manière.