



**HAL**  
open science

# Injection électrique pour un laser en germanium contraint

Mathias Prost

► **To cite this version:**

Mathias Prost. Injection électrique pour un laser en germanium contraint. Science des matériaux [cond-mat.mtrl-sci]. Université Paris Sud - Paris XI, 2015. Français. NNT : 2015PA112027 . tel-01153881

**HAL Id: tel-01153881**

**<https://theses.hal.science/tel-01153881v1>**

Submitted on 20 May 2015

**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.

## UNIVERSITÉ PARIS-SUD

ÉCOLE DOCTORALE 422 : Sciences et Technologie de l'Information, des  
Télécommunications et des Systèmes

Institut d'Electronique Fondamentale

DISCIPLINE : PHYSIQUE

THÈSE DE DOCTORAT

soutenue le 06/03/2015

par

Mathias PROST

**Injection électrique pour un laser en germanium contraint**

<b>Directeur de thèse :</b>	Philippe BOUCAUD	Directeur de recherche (IEF-CNRS)
<b>Encadrant :</b>	Moustafa EL KURDI	Maître de conférences (IEF-CNRS Université Paris Sud 11)
<b>Composition du jury :</b>		
<i>Rapporteurs :</i>	Kader SOUIFI	Professeur des universités (INL-Lyon)
	Roland TESSIER	Directeur de recherche (IES-CNRS)
<i>Examineurs :</i>	Frédéric ANIEL	Professeur des universités (IEF- Université Paris-Sud 11)
	Frédéric BOEUF	Docteur-Ingénieur (STMicroelectronics)
	Jean-Marc FÉDÉLI	Ingénieur (CEA/LETI)



# Remerciements

J'ai eu le plaisir et la chance de pouvoir effectuer mes travaux dans un environnement dynamique et agréable, et cela grâce aux différentes personnes que j'ai pu côtoyer durant ces trois années.

Je souhaite tout d'abord remercier Philippe Boucaud, mon directeur de thèse. Il a toujours veillé à ce que la thèse se déroule dans de bonnes conditions, et son implication quotidienne y est pour beaucoup. J'ai beaucoup appris à ses côtés. Son expertise et son sens critique ont toujours permis de faire avancer et valoriser mes différents travaux. Je suis très fier de l'avoir eu comme directeur de thèse. Je tiens à remercier également Moustafa El Kurdi, qui a co-encadré ma thèse. J'ai été impressionné par sa force de travail, et il m'a toujours permis de progresser dans la bonne direction. Son soutien a été précieux durant ces trois années.

Je remercie Frédéric Bœuf, sans qui je n'aurais jamais eu l'opportunité de faire cette thèse. C'est toujours avec un grand plaisir que j'ai pu lui présenter l'avancement de mes travaux lors de mes visites à Grenoble, et je suis toujours reparti avec de nouvelles idées à explorer.

Je remercie Abdelkader Souifi, Roland Teissier, ainsi que Jean-Marc Fédéli, pour avoir accepté de faire partie de mon jury de thèse.

Frédéric Aniel a eu un rôle important durant cette thèse. En plus de m'avoir fait l'honneur de présider le jury de thèse, il m'a initié aux problématiques du transport électronique. Il a toujours su se montrer disponible lorsque j'ai rencontré des points bloquants, et pour cela je le remercie. Je remercie également Nicolas Zerounian pour sa participation aux différentes mesures, il a toujours été accessible et a pris le soin de me permettre d'utiliser ses équipements dans des conditions optimales.

Je tiens à remercier Isabelle Sagnes et Grégoire Beaudoin qui ont réalisé les différentes plaques de germanium, qui sont à la base de toutes mes réalisations expérimentales.

Je remercie le personnel de la CTU pour leur précieuse aide en salle blanche, merci à Jean-René Coudevylle, Delphine Néel, David Bouville, Nathalie Isac, Benoit Bélier, Aassime Abdelhanin, François Maillard et Fabien Bayle.

Je remercie les membres de mon équipe de recherche Sébastien Sauvage, Xavier Chécoury, ainsi que Eric Akmonsoy, Guy Fishman, Paul Crozat, Anne-Sophie Grimault, qui ont animé les discussions et imprégné le laboratoire d'une ambiance agréable. J'ai également une grande pensée pour mes prédécesseurs, Malo de Kersauson, Abdelhamid Ghrib et Eric Tea, qui m'ont beaucoup aidé et sans qui la thèse n'aurait pas eu le même déroulement au quotidien. Je remercie

---

également Candice Blin, Zheng Han, Yijia Zeng, Yiannis Rolan, Nicolas Cazier, Laurent-Daniel Haret, et Dac Trung Nguyen.

Enfin, je remercie mes parents, mon frère et mes amis pour leur soutien depuis toujours.

# Table des matières

<b>1</b>	<b>Introduction</b>	<b>5</b>
1.1	Contexte de l'étude . . . . .	5
1.1.1	Enjeux de la photonique sur silicium : . . . . .	5
1.1.2	Problématique de la source laser pour la photonique sur silicium . . . . .	6
1.1.3	Vers une source optique en germanium . . . . .	7
1.2	Principe de l'ingénierie des bandes sur le germanium pour un laser contraint . . . . .	8
1.2.1	Effet du dopage . . . . .	9
1.2.2	Effet de la contrainte . . . . .	10
1.3	État de l'art . . . . .	13
1.4	Problématique et plan de thèse . . . . .	14
<b>2</b>	<b>Dimensionnement du laser germanium sous injection électrique</b>	<b>17</b>
2.1	Modélisation du transport électronique dans des structures en germanium . . . . .	17
2.1.1	Modèle du transport électronique dans les semiconducteurs . . . . .	18
2.1.2	Mécanisme de génération et de recombinaison . . . . .	21
2.1.3	Mobilité des porteurs dans le germanium dopé . . . . .	24
2.1.4	Réduction de la bande interdite . . . . .	26
2.1.5	Modélisation d'une diode pn en germanium . . . . .	26
2.1.6	Choix de la structure à étudier . . . . .	29
2.1.7	Méthode de calcul pour la détermination du courant de seuil . . . . .	34
2.1.8	Détermination des courants de seuils . . . . .	44
2.1.9	Conclusion . . . . .	50
2.2	Modélisation du transfert de contrainte dans le germanium . . . . .	52
2.2.1	État de l'art des dispositifs contraints en germanium sous injection électrique	52
2.2.2	Choix de la structure - présentation des cavités optiques . . . . .	56

## Table des matières

---

2.2.3	Solutions proposées pour la réalisation de structures contraintes . . . . .	57
2.2.4	Modélisation du transfert de contrainte . . . . .	65
2.2.5	Modélisation du transfert de contrainte dans la structure à injection verticale	66
2.2.6	Modélisation du transfert de contrainte dans la structure à injection latérale	76
2.2.7	Modélisation du transfert de contrainte dans la structure à base d'hétéroépitaxie de SiGe . . . . .	77
2.2.8	Bilan du transfert de contrainte . . . . .	80
<b>3</b>	<b>Étude des propriétés de l'injection électrique dans des couches de germanium non contraint</b>	<b>83</b>
3.1	Réalisation des couches de germanium sur substrat GaAs . . . . .	83
3.1.1	Transport de courant attendu dans la double hétérostructure GaAs/Ge/-GaAs . . . . .	85
3.2	Méthodes de caractérisation électriques . . . . .	87
3.2.1	Résistivité d'une couche de semiconducteur . . . . .	87
3.2.2	Interface métal-semiconducteur . . . . .	88
3.2.3	Méthode de ligne de transmission . . . . .	93
3.2.4	Réalisation et caractérisation des contacts métalliques sur des couches de GaAs. . . . .	94
3.2.5	Mesures de capacité différentielle . . . . .	98
3.2.6	Choix de la méthode de mesure . . . . .	103
3.2.7	Dimensionnement des dispositifs coplanaires . . . . .	104
3.2.8	Processus de fabrication . . . . .	105
3.3	Caractérisation électrique la double hétérostructure GaAs/Ge/GaAs . . . . .	109
3.3.1	Mesures I-V préliminaires . . . . .	109
3.3.2	Mesures I-V en fonction de la température . . . . .	110
3.3.3	Mesures hyperfréquence . . . . .	112
3.3.4	Discussion des défauts d'interface . . . . .	114
3.4	Caractérisation électrique de l'empilement Métal/Ge/GaAs : diodes Schottky sur germanium . . . . .	115
3.4.1	Caractérisation des contacts métalliques . . . . .	117
3.4.2	Mesures I-V en température . . . . .	118
3.4.3	Extraction du courant de saturation . . . . .	118
3.4.4	Courant de fuites - influence des bords de la structure . . . . .	122

3.4.5	Mesures C-V . . . . .	123
3.4.6	Bilan . . . . .	125
3.5	Expériences d'électroluminescence . . . . .	126
3.5.1	Présentation du banc de caractérisation . . . . .	126
3.5.2	Photoluminescence des couches de germanium sur GaAs . . . . .	127
3.5.3	Expériences d'électroluminescence sur la double hétérostructure GaAs/- Ge/GaAs . . . . .	129
3.5.4	Mesures d'électroluminescence avec des diodes Schottky . . . . .	133
3.5.5	Comparaison des différentes structures . . . . .	139
3.6	Hétéroépitaxie de couche de SiGe assisté par recuit laser . . . . .	141
3.6.1	Mesures SIMS . . . . .	141
3.6.2	Mesures DRX . . . . .	142
3.6.3	Paramètres de couches visées . . . . .	144
3.6.4	Étude paramétrique des couches de SiGe par caractérisation électrique . .	144
3.6.5	Électroluminescence . . . . .	148
3.6.6	Bilan . . . . .	150
<b>4</b>	<b>Applications à des dispositifs en germanium contraint</b>	<b>151</b>
4.1	Procédé de fabrication de structures contraintes . . . . .	151
4.1.1	Description des étapes de fabrication . . . . .	151
4.1.2	Transfert de procédé pour du germanium sur silicium . . . . .	162
4.2	Mesures d'électroluminescence sur des cavités optiques contraintes en germanium	163
4.2.1	Principe de la caractérisation de contrainte par mesure de luminescence .	163
4.2.2	Structures étudiées . . . . .	164
4.2.3	Étude des propriétés d'émission radiative du germanium contraint avec injection utilisant des contacts Schottky . . . . .	165
4.2.4	Injection latérale des porteurs minoritaires dans les diodes Schottky . . .	179
4.2.5	Étude des propriétés d'émission radiatives de l'hétérostructure SiGe/Ge/- GaAs . . . . .	185
4.3	Conclusion . . . . .	189
<b>5</b>	<b>Liste des publications</b>	<b>191</b>
	<b>Bibliographie</b>	<b>193</b>



# Chapitre 1

## Introduction

### 1.1 Contexte de l'étude

La problématique des communications numériques est de pouvoir assurer la transmission de flux de données de plus en plus importants à des échelles de distance de plus en plus courtes. Les communications utilisant un média optique par rapport à des supports électriques permettent d'obtenir des débits beaucoup plus élevés. Les systèmes d'interconnexions optiques sont bien ancrés dans les infrastructures pour les télécommunications à longue distance. La technologie de transmission de données à courte portée ( $< 3\text{m}$ ) utilisant des câbles en cuivre commence à atteindre ses limites. Les entrées et sorties des flux de données représentent à l'heure actuelle près de 30% du coût énergétique sur le fonctionnement des serveurs de données. Le débit maximum dans une section de câble atteint une valeur seuil de 25 Gbit/s. Cette limitation peut être contournée en multipliant le nombre de sections, mais l'encombrement et le coût engendrés auraient un impact important sur les performances économiques de serveurs de données proportionnés à la demande actuelle et à venir.

L'intégration d'interconnexion optique devient nécessaire pour répondre à la demande croissante en lieu et en place des interconnexions en cuivre. Le passage à des interconnexions optiques offre de nombreuses opportunités :

- L'augmentation des performances
- La réduction des pertes d'énergie par les effets d'échauffement thermique
- L'amélioration de l'efficacité énergétique des infrastructures
- La réduction du coût des infrastructures
- De repenser l'organisation des infrastructures ( Calculateur en lien direct avec les serveurs de données ...)

#### 1.1.1 Enjeux de la photonique sur silicium :

La photonique sur silicium peut répondre à ces attentes. Depuis la proposition de l'optique guidée en utilisant le silicium dans le milieu des années 1980, ce domaine a connu une grande effervescence dans le monde académique et industriel. Ce fort intérêt a permis la mise au point

## Chapitre 1. Introduction

---

de toutes les briques de base pour la manipulation de la lumière au cours de ces dernières années. Il est alors possible d'envisager un système totalement intégré permettant de réaliser les opérations logiques avec des dispositifs électroniques, et une transmission d'informations avec des dispositifs optiques. Les briques de base nécessaires pour la réalisation d'un dispositif photonique sont les suivantes :

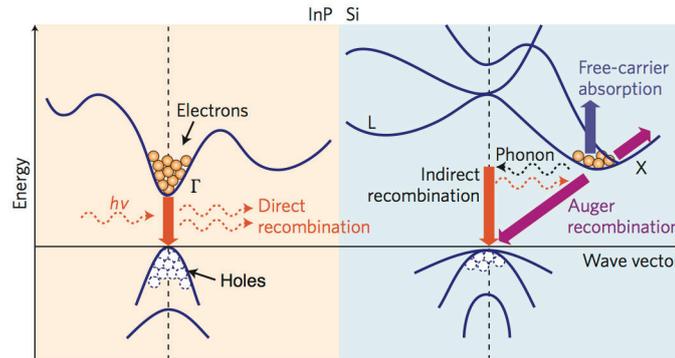
- Une source laser, pour permettre la génération de lumière comme médium au transport de l'information
- Un modulateur, pour convertir la lumière continue de la source laser en un signal optique modulé contenant l'information à transmettre à partir d'un signal électrique d'entrée.
- Un multiplexeur, pour permettre de combiner plusieurs signaux d'information sur une seule voie de transmission afin d'augmenter le débit dans un guide d'onde.
- Un guide d'onde, permettant le transport du signal optique.
- Un démultiplexeur, pour séparer les différents signaux optiques arrivant du guide d'onde.
- Un photodétecteur, pour transformer le signal optique reçu en signal électrique

Avec la photonique sur silicium, on dispose d'une technologie profitant de la grande maturité de la fabrication des composants électroniques sur silicium. Le développement de la photonique peut suivre la même trajectoire que la microélectronique en bénéficiant d'une réduction des coûts par la fabrication des composants à grande échelle, une forte densité d'intégration. Les principaux acteurs de la microélectronique commencent à commercialiser des dispositifs EPIC (electronic photonic integrated circuit), parmi lesquels on cite IBM, GlobalFoundries, Intel, STMicroelectronics ... Seulement un élément est manquant pour pouvoir réaliser un dispositif totalement monolithique : la source laser.

### 1.1.2 Problématique de la source laser pour la photonique sur silicium

Si les briques de base possédant des fonctions passives peuvent être réalisées par le silicium, et ses composés (SiO et SiN), les fonctions actives nécessitent le recours à d'autres types de matériaux. En effet, le silicium n'est pas adapté pour la réalisation d'une source optique, car ses propriétés d'émission de lumière sont très mauvaises. Il s'agit d'un semiconducteur à bande interdite indirecte. Pour obtenir l'émission d'un photon dans un semiconducteur, il faut qu'un électron excité de la bande de conduction se recombine radiativement avec un trou de la bande de valence. Le minimum d'énergie dans la bande de conduction est situé dans la vallée  $X$ . Les électrons vont être principalement localisés dans cette vallée, car elle est plus favorable en énergie. Or cette vallée n'est pas alignée dans l'espace réciproque avec le minimum en énergie de la bande de valence comme on peut le voir sur la figure 1.1. Selon le principe de conservation de l'énergie et du moment, une troisième particule doit intervenir. Par conséquent, la probabilité pour obtenir une recombinaison radiative est très fortement affaiblie.

Les semiconducteurs en matériaux III-V sont à bande interdite directe, le minimum de la bande de conduction est aligné dans l'espace réciproque avec la bande de valence. L'efficacité de recombinaison radiative est très forte dans cette configuration. C'est pourquoi les sources lasers sont fabriquées avec ces matériaux et leurs dérivés en fonction de la longueur d'onde d'émission recherchée (GaAs, InP, GaN).



**Fig. 1.1 :** Diagramme de bande d'un matériau à bande interdite directe (InP), comparé à celui d'un matériau à bande interdite indirecte (Si) pour des applications d'émission radiatives - Figure issue de (LIANG et al., 2010)

Une technologie non compatible avec les procédés de fabrication CMOS augmente très fortement les coûts de fabrication. Il est nécessaire d'ajouter des étapes supplémentaires d'intégration pour pouvoir adjoindre une source laser à un dispositif photonique sur silicium.

La première approche est de reporter directement la puce de la source laser sur silicium par hybridation avec des billes de contact entre les deux dispositifs. La lumière est ensuite couplée avec les éléments optiques du substrat en silicium. Cette technique est très dépendante de la qualité de l'alignement du dispositif. Elle ne permet pas une intégration à très large échelle, car le collage ne peut pas s'effectuer de manière parallèle avec une qualité d'alignement satisfaisante.

La croissance par hétéroépitaxie de matériaux III-V sur silicium n'est pas optimale à cause de la différence importante de paramètre de maille entre les deux matériaux. Cela génère de nombreux défauts qui peuvent se propager dans les couches actives. Ces défauts vont affaiblir l'efficacité des recombinaisons radiatives, par l'augmentation des recombinaisons non radiatives.

Le collage de couche III-V sur silicium, permet de réaliser les dispositifs laser avec des couches de bonne qualité. Le report peut s'effectuer avec différentes interfaces entre le matériau III-V et le silicium. Cette technique semble prometteuse. Elle offre une bonne capacité d'intégration, car la réalisation de la source et des éléments optiques sur silicium se font au même niveau. Le problème réside dans le fait que les chaînes de fabrication CMOS ne sont pas compatibles avec les procédés pour les matériaux III-V.

### 1.1.3 Vers une source optique en germanium

L'utilisation du germanium est déjà éprouvée dans les lignes de fabrication CMOS pour la fabrication de transistor à très haut niveau de concentration en germanium. Étant un élément de la colonne IV, il est compatible avec tous les procédés de fabrication utilisés pour les composants à base de silicium. Le germanium est maintenant utilisé pour la réalisation des fonctions actives de la photonique sur silicium. On le retrouve pour la fabrication des modulateurs et des photodétecteurs. Bien qu'il soit également un semiconducteur à bande d'énergie interdite indirecte, il est possible d'envisager le germanium comme source laser. En effet, la bande interdite directe est localisée à une énergie relativement réduite par rapport au silicium. Elle est située à 140

meV au-dessus de la bande d'énergie indirecte. Par ailleurs, l'énergie de bande interdite est 0.8 eV, ce qui correspond à une longueur d'onde d'émission de  $1.55 \mu\text{m}$ . Cette longueur d'onde est celle utilisée pour les transmissions d'un signal lumineux pour des applications télécoms.

Le germanium est un semiconducteur indirect, mais par ingénierie de bande, il est possible d'obtenir un semiconducteur à **pseudo bande d'énergie interdite directe**. En appliquant une contrainte en tension sur le germanium, la déformation de la maille cristalline va modifier la structure de bande du germanium et abaisser la position de la bande directe par rapport à la bande indirecte. En appliquant un dopage de type n au germanium, on va saturer en porteurs la vallée de la bande interdite indirecte. Les porteurs pourront être plus facilement injectés dans la vallée à bande interdite directe. En combinant ces deux effets, du gain optique dans le germanium a pu être mesuré, et une récente démonstration de l'effet laser dans le germanium a pu être obtenue. Pour faire un parallèle avec les lasers III-V, la première démonstration du laser en germanium souffre du besoin de fonctionner sous des régimes de très forte injection. Il est nécessaire de pouvoir continuer à optimiser les propriétés du matériau pour abaisser le point de fonctionnement, et obtenir un dispositif intégrable sur une puce CMOS.

### 1.2 Principe de l'ingénierie des bandes sur le germanium pour un laser contraint

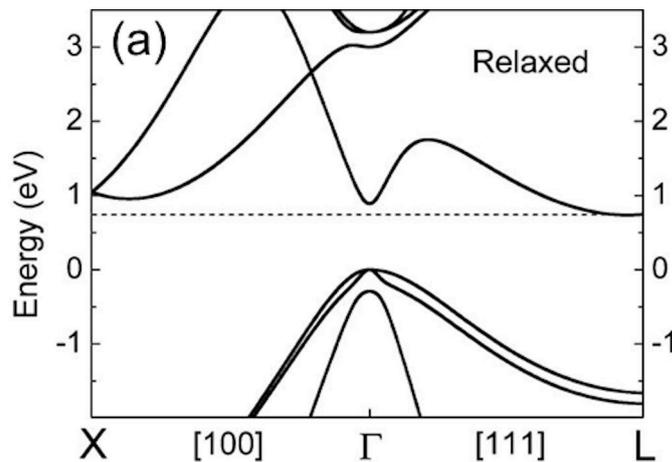


Fig. 1.2 : Diagramme de bande du germanium dans l'espace réciproque

La figure 1.2 présente le diagramme de bande du germanium dans l'espace réciproque. Son minimum d'énergie dans la bande de conduction se situe au point  $L$  de la zone de Brillouin. La valeur de la bande interdite indirecte en énergie est de 0.66 eV à température ambiante. De ce fait, le germanium est un mauvais émetteur de lumière. Une recombinaison radiative en centre de zone est beaucoup plus efficace, car le moment est directement conservé. La vallée en centre de zone  $\Gamma$  est située à 140 meV au-dessus de la vallée  $L$ , pour une énergie de bande interdite de 0.8 eV. Seulement la majeure partie des électrons sont situés dans la vallée  $L$ . Peu de porteurs sont localisés en centre de zone et la probabilité d'obtenir une recombinaison radiative est très faible. On considère que le potentiel chimique dans la bande de conduction est fixé par le remplissage des électrons dans la vallée  $L$ . Pour pouvoir dégénérer la vallée  $\Gamma$ , il faut

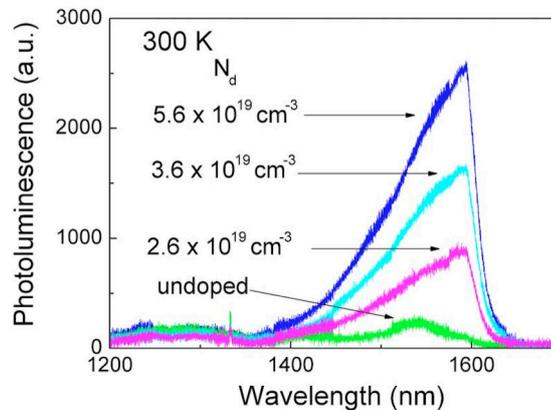
## 1.2. Principe de l'ingénierie des bandes sur le germanium pour un laser contraint

saturer la vallée  $L$  en porteurs. L'importante densité d'états de la vallée  $L$  impose une quantité de remplissage en porteur très élevée. Il faut introduire une densité de porteurs à un niveau de  $1 \times 10^{20} \text{cm}^{-3}$  pour pouvoir dégénérer la bande de la vallée  $\Gamma$ . Toutefois, cette quantité importante de porteurs s'accompagne de l'introduction d'une absorption par porteurs libres importante qui dégrade fortement les propriétés d'émission optique.

### 1.2.1 Effet du dopage

Pour compenser la forte densité d'électrons à injecter, on peut avoir au recours au dopage de type n dans la couche de germanium. Les impuretés dopantes introduites dans le germanium vont libérer des électrons qui vont venir peupler la vallée  $L$  du germanium. Ainsi la quantité de porteurs à injecter dans le germanium est réduite par la densité d'électrons introduite par le dopage. L'injection des porteurs est favorisée en centre de zone, les états accessibles pour les porteurs injectés sont réduits dans la vallée  $L$ , et la probabilité de remplissage de la vallée  $\Gamma$  augmente grâce à la diffusion intervallée.

La figure 1.3 permet de mettre en avant l'effet du dopage sur les propriétés d'émission de lumière du germanium. Plusieurs spectres sont effectués pour différents niveaux de dopage du germanium obtenus par un procédé de dopage sous gaz assisté par fusion laser (GILD). Les spectres sont dominés par les recombinaisons radiatives en bande directe, situées autour de 1560 nm. On note l'observation de l'augmentation du signal de la photoluminescence avec l'augmentation du dopage. Ces mesures permettent de mettre en avant l'effet bénéfique du dopage de type n sur l'émission spontanée.



**Fig. 1.3 :** Spectres de photoluminescence du germanium pour différents niveaux de dopage obtenus par méthode GILD

En principe un dopage important peut être obtenu dans le germanium, car la limite de solubilité des espèces dopantes de type n est suffisante pour dégénérer la bande de conduction  $\Gamma$  ( $2 \times 10^{20} \text{atm/cm}^3$  pour le phosphore, et  $8.1 \times 10^{19} \text{atm/cm}^3$  pour l'arsenic). En pratique, tous les dopants introduits ne seront pas actifs, car ils ne pourront pas se positionner en site substitutionnel à la place d'un atome de germanium dans la maille cristalline. L'activation et la diffusion des dopants sont une problématique importante pour obtenir une couche dopée de manière homogène. Le tableau ci-dessous résume quelques résultats rapportés dans la littérature

## Chapitre 1. Introduction

---

sur le dopage du germanium. Par ailleurs, le dopage par implantation n'est pas adapté, car cette technique génère trop de défauts dans la maille cristalline qui détériore les propriétés optiques de la couche.

**Tab. 1.1 :** Techniques et niveaux de dopage de type  $n$  atteint dans le germanium par différentes équipes de recherche.

Groupe	Espèce dopante	Technique	$N \sim \text{cm}^{-3}$
IEF	P	GILD	$1.0 \times 10^{20}$
LPN	As	MOCVD	$1.5 \times 10^{19}$
CINAM	P-Sb	MBE	$4.0 \times 10^{19}$
IHT stuttgart	Sb	MBE	$1.0 \times 10^{20}$
MIT	P	$\delta$ doping - CVD	$4.5 \times 10^{19}$

Un dopage important n'est pas une approche satisfaisante pour obtenir l'effet laser dans le germanium. On rencontre des difficultés suivantes :

- Difficulté d'obtenir un dopage supérieur à  $4 \times 10^{19} \text{cm}^{-3}$
- Problème d'activation des impuretés dopantes
- Les impuretés dopantes non actives jouent le rôle de centre de recombinaison non radiatif

Le dopage seul ne suffit pas pour obtenir l'effet laser dans le germanium. Il est nécessaire d'agir une propriété supplémentaire pour obtenir les conditions requises pour obtenir l'effet laser dans le germanium.

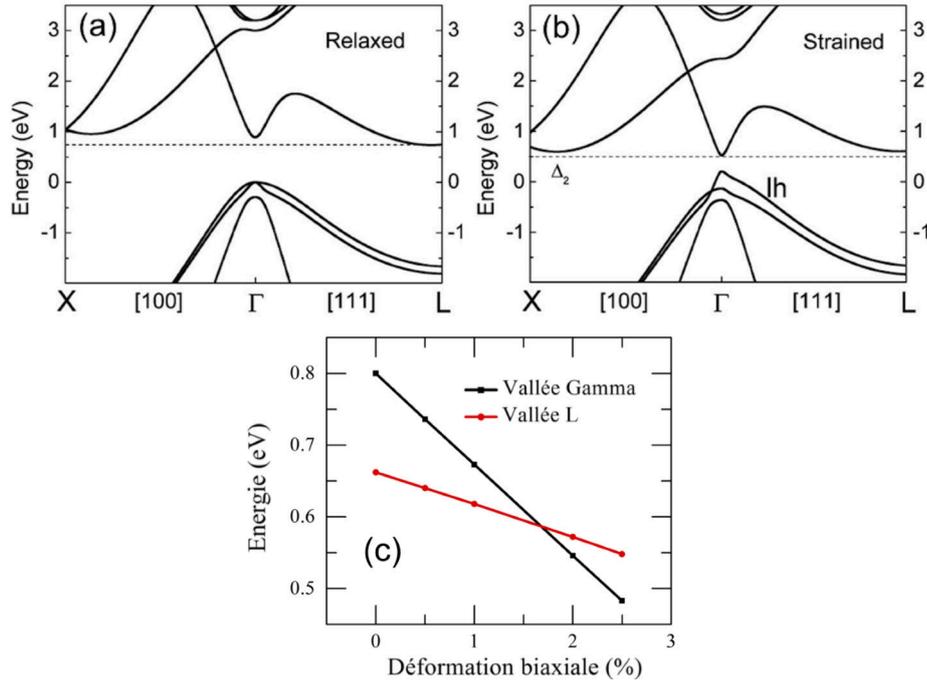
### 1.2.2 Effet de la contrainte

Il est possible de réduire la différence d'énergie entre la bande interdite directe et indirecte, en appliquant une contrainte en tension sur le germanium. Dans le cas d'un semiconducteur, la modification de la symétrie de la maille cristalline a une répercussion directe sur la structure de bande. La déformation a un effet distinct sur les différentes bandes.

Une déformation biaxiale en tension dans le plan sur une couche de germanium provoque les effets suivants sur les bandes d'énergie dans l'espace réciproque :

- Les bandes d'énergie directe et indirecte sont abaissées. Seulement la dynamique de la bande directe est plus importante. Le croisement en énergie s'effectue pour une valeur de 1.7% à température ambiante. Le germanium passe dans une configuration à bande interdite directe, comme on peut le voir sur la figure 1.4 (c).
- En centre de zone, il se produit une séparation en énergie pour les bandes de trous. La position de la bande des trous légers passe au-dessus des trous lourds
- La combinaison de ces deux effets fait que l'énergie interdite est réduite en fonction de la contrainte.

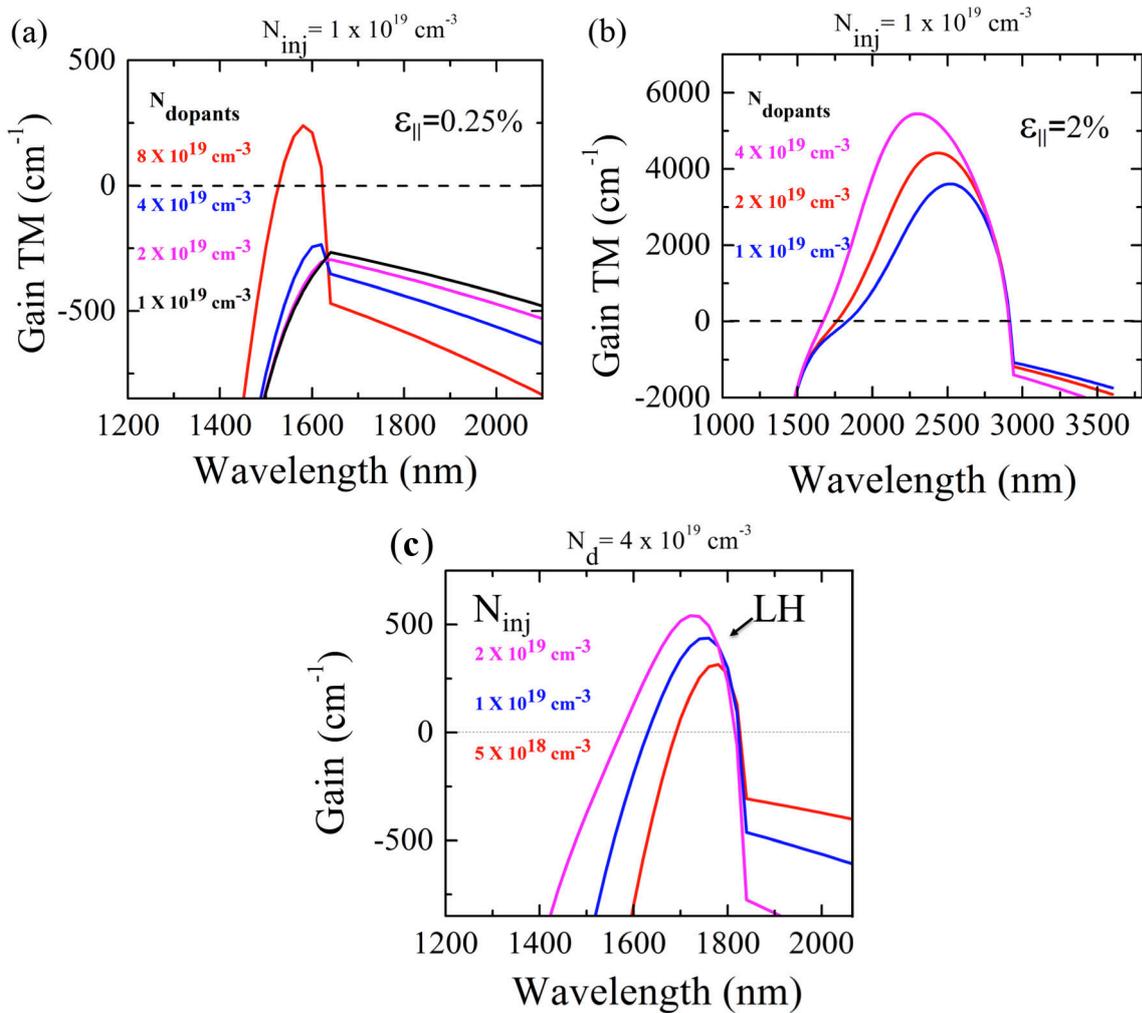
## 1.2. Principe de l'ingénierie des bandes sur le germanium pour un laser contraint



**Fig. 1.4 :** Diagramme de bande du germanium calculé par la méthode **k.p** 30 bandes à basse température (4 K) (a) dans une configuration relaxée (b) dans une configuration contrainte à 3%, (c) Évolution du minima des bandes de conduction en vallée *L* et en vallée  $\Gamma$  en fonction de la déformation biaxiale à 300 K calculée à partir du modèle **k.p** 30 bandes - Figure issue de (GHRIB, 2014)

La contrainte en tension est très bénéfique pour les applications optiques. En abaissant l'énergie de la vallée en centre de zone, on y favorise l'injection des porteurs par rapport à la vallée indirecte. La levée de dégénérescence sur les trous légers permet d'obtenir une inversion de population avec une quantité moins importante de trous, car la densité effective d'états sera plus petite. En contrepartie, à cause de la réduction en énergie de la bande interdite directe, la longueur d'onde d'émission sera décalée vers les plus grandes longueurs d'onde et s'éloignera de la longueur d'onde télécoms. La contrainte à atteindre pour obtenir une configuration où le germanium devient un matériau à bande d'énergie interdite directe est très élevée. Elle est difficile à atteindre expérimentalement sur des cavités optiques en germanium. Il faut pouvoir combiner une déformation raisonnable avec un dopage de type *n* pour obtenir des dispositifs réalisables

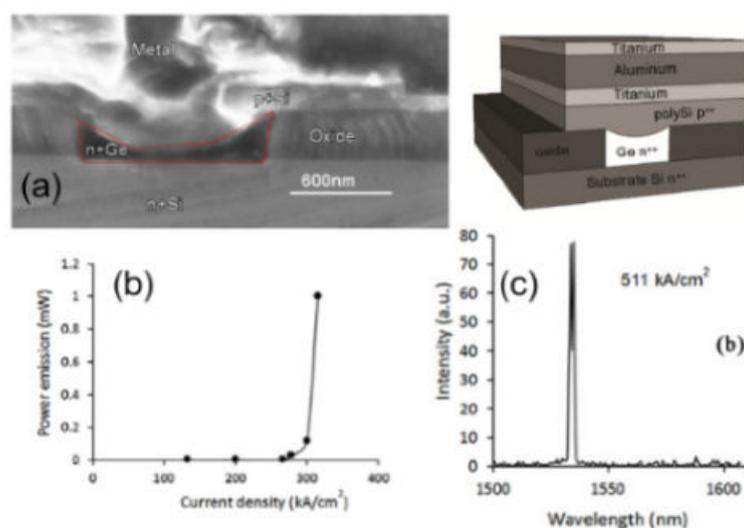
Pour illustrer l'effet du dopage de type *n* et de la contrainte en tension, on présente un calcul de gain optique pour le germanium sur la figure 1.5. Ils sont obtenus pour une injection de porteurs avec une densité de  $1 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ . On voit que pour une structure faiblement contrainte (a), il faut utiliser un dopage de  $8 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$  pour obtenir du gain. Pour une couche de germanium déformée à 2%, on obtient un gain supérieur à  $3000 \text{ cm}^{-1}$  avec un niveau de dopage réduit à  $1 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ , car la densité de porteurs injectés est très grande. On peut avoir du gain avec des niveaux d'injection plus faibles. On montre un cas intermédiaire (c) avec une déformation de 0.7% et un dopage de  $4 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$  qui montre l'évolution du gain en fonction de différents niveaux d'injection.



**Fig. 1.5 :** Spectres de gain TM en supposant une injection fixe à  $1 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$  pour plusieurs valeurs de densité de dopage. (a) La déformation biaxiale est fixée à 0.25 % (b) La déformation biaxiale est fixée à une valeur de 2%. La figure (c) présente le cas intermédiaire avec une contrainte de 0.7 % pour un niveau de dopage  $4 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$  à différents niveaux d'injection. Figures issues de (GHRIB, 2014)

## 1.3 État de l'art

L'effet laser dans le germanium a été observé sous pompage optique (LIU et al., 2010), et sous pompage électrique (CAMACHO-AGUILERA et al., 2012) par une équipe de recherche du MIT. La stratégie employée est d'utiliser une croissance du germanium sur silicium localisée dans des tranchées d'oxyde pour définir la cavité optique en guide d'onde. Les paramètres de la couche de germanium pour les structures sous injection électrique sont un dopage de type  $n$  avec une densité d'impureté de  $4.5 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ , et une déformation biaxiale résiduelle de 0.25% liée à la différence de coefficient de dilatation thermique entre le germanium et le silicium. Une image du dispositif obtenue par microscopie électronique à balayage, ainsi que les spectres d'émission du laser sont présentés sur la figure 1.6 (a) et (c). L'approche développée consiste à privilégier un dopage important avec un niveau de déformation relativement modérée. Dans cette structure, l'effet laser sous injection électrique est obtenu pour des densités de courant de seuil de  $300 \text{ kA/cm}^2$  en régime impulsif. La durée de vie des échantillons est limitée à seulement quelques dizaines de minutes. À titre de comparaison, les lasers hybrides III-V sur silicium actuels ont des points de fonctionnement autour de  $1 \text{ kA/cm}^2$  en régime continu (BAKIR et al., 2011 ; ZHANG et al., 2014). Des structures similaires en guide d'onde ont été réalisées par une équipe de recherche différente avec le même niveau de dopage et de déformation de la couche de germanium (SCHMID et al., 2014). Pour des conditions d'injection de courant identiques, il a été observé l'apparition de pics étroits sur le spectre d'émission, mais sans l'attribuer à l'effet laser. Ces conditions d'injection extrêmes ne sont pas optimales en terme d'efficacité et de reproductibilité pour cette configuration de dopage et de déformation, et nécessitent d'être améliorées. Le fonctionnement du laser germanium sous injection électrique est nécessaire pour son intégration dans de futurs dispositifs, mais avec des niveaux de courants réduits. Pour cela, le développement de structure avec des niveaux de déformations plus importants reste l'élément clé pour la diminution des courants d'injection.



**Fig. 1.6 :** (a) Image à microscopie électronique d'un laser en germanium en guide d'onde sur silicium, (b) dépendance de la puissance optique en fonction du courant d'injection, (c) spectre d'émission du laser - Figures issues de (CAMACHO-AGUILERA et al., 2012)

Si des records de déformation ont pu être obtenus sur des structures étudiées par photoluminescence (GHRIB et al., 2014; SUESS et al., 2013; SUKHDEO et al., 2014b), l'étude de l'électroluminescence sur des couches contraintes et dopées de type  $n$  en germanium nécessite d'être développée. La plupart des mesures expérimentales dans la littérature portent sur des approches ne permettant pas d'obtenir des niveaux déformations importants. En effet, les diodes fabriquées à partir des couches de germanium sur silicium possèdent des niveaux de déformation biaxiale autour de 0.25% (CHENG et al., 2009; KASCHEL et al., 2013; SCHMID et al., 2014; SUN et al., 2009). Un niveau de déformation de 0.76% a pu être obtenu sur des membranes de germanium sous injection électrique (NAM et al., 2011), mais cette méthode est difficile à intégrer et à appliquer pour la réalisation de cavités optiques. Effectivement, l'étude d'électroluminescence dans des cavités optiques en guide d'onde (CAMACHO-AGUILERA et al., 2012; SCHMID et al., 2014) ou en microdisque (CHENG et al., 2011) fonctionnant sous injection électrique, avec des niveaux de déformations supérieures à 0.25%, n'a jamais été effectuée. Il existe un défi technologique important pour la réalisation de cavité optique en germanium contraint sous injection électrique.

Pour réaliser l'injection électrique dans des couches de germanium de manière efficace, il faut considérer l'utilisation d'hétérostructure. Si les méthodes de calcul de gain optique dans le germanium ont pu être largement explorées en considérant des structures adaptées au pompage optique (ALDAGHRI et al., 2012; CARROLL et al., 2012; EL KURDI et al., 2010a; LIU et al., 2007) la problématique de l'injection électrique reste peu développée. Les modèles présents dans la littérature permettent de convertir les densités de porteurs à injecter pour obtenir du gain en courant (CAI et al., 2013; DUTT et al., 2012). Dans le germanium dopé de type  $n$ , l'injection peut être modifiée par le changement de comportement lié à la présence d'impuretés dopantes. Il est nécessaire d'approfondir la méthode de calcul d'inversion de population afin de prendre en considération le transport des porteurs dans des couches de germanium avec un dopage important. Il est également nécessaire d'étudier l'effet de la contrainte, afin de connaître l'impact sur la réduction du courant de seuil pour obtenir des conditions favorables à l'obtention de l'effet laser dans le germanium.

### 1.4 Problématique et plan de thèse

Cette thèse s'inscrit dans le cadre de l'étude de l'injection électrique dans des couches de germanium dopées de type  $n$ , et contrainte en tension pour la réalisation d'un laser.

Dans le premier chapitre, je m'intéresse au dimensionnement du laser germanium avec l'étude du transport électronique par des simulations numériques. Un calcul du courant de seuil d'inversion de population est proposé en fonction de la contrainte dans des doubles hétérostructures. Ensuite, je ferais la proposition de différents dispositifs qui permettent de combiner un transfert de contrainte dans une couche germanium avec une injection électrique des porteurs, afin d'évaluer les performances des dispositifs. La topologie des dispositifs a été optimisée avec une modélisation par la méthode des éléments finis du transfert mécanique de contrainte.

Dans le second chapitre, je présente les études expérimentales d'injection électrique dans le germanium par des techniques de caractérisations électriques, et d'électroluminescence dans différentes structures.

Dans le troisième chapitre, je montre l'électroluminescence des couches de germanium contraint,

#### **1.4. Problématique et plan de thèse**

---

grâce à la mise en oeuvre de procédés technologiques adaptés à l'application de la déformation.



## Chapitre 2

# Dimensionnement du laser germanium sous injection électrique

L'objectif de mes travaux de thèse est de pouvoir sonder la possibilité de réalisation d'un laser en germanium sous injection électrique. Afin de pouvoir dimensionner les futures structures, on passe par une étape de modélisation. Il faut pouvoir combiner l'injection électrique dans une couche de germanium dopée de type  $n$  et contrainte en tension. Cette partie se décompose en deux sections. La première traite de l'injection électrique dans le germanium. On s'appuie sur un outil de modélisation de transport électronique dit TCAD (Technology Computer Aided Design) qui permet de simuler des dispositifs complexes comme des hétérostructures. La seconde partie analyse le transfert de contrainte dans des structures permettant l'injection électrique dans le germanium, par une modélisation des déformations mécaniques.

### 2.1 Modélisation du transport électronique dans des structures en germanium

Dans cette partie, on va dimensionner le point de fonctionnement des futurs dispositifs sous injection électrique. On utilise le progiciel SILVACO avec le moteur physique ATLAS pour simuler le transport des porteurs dans du germanium. Les résultats de simulation permettront de visualiser la dynamique des porteurs injectés dans le germanium, afin de faire des propositions de dispositifs adaptés pour la réalisation du laser. L'utilisation du germanium massif n'étant pas très répandue pour la réalisation de dispositif, le logiciel ne propose pas une utilisation clé en main contrairement au cas du silicium qui a été très étudié. Les propriétés spécifiques du germanium dopé doivent être prises en compte, car cela va avoir un impact important sur les propriétés de transport. Il est nécessaire dans un premier temps d'adapter les paramètres physiques des différents modèles pour obtenir des résultats de simulations corrects.

Dans le cas du germanium, on souhaite connaître la répartition des porteurs dans l'espace réciproque, en considérant le remplissage des porteurs de la vallée  $\Gamma$  par rapport à la vallée  $L$  pour connaître l'efficacité des recombinaisons radiatives. Par ailleurs, la levée de dégénérescence de la bande de valence entre les trous lourds et les trous légers sous l'effet de la contrainte est aussi importante afin de connaître la réduction d'énergie de la bande interdite directe. Il faut

## Chapitre 2. Dimensionnement du laser germanium sous injection électrique

---

aussi considérer la modification des densités d'états du semiconducteur. Seulement, en traitant les équations de transport dans l'espace réel, on ne peut considérer qu'un seul type de bande. On a donc développé une stratégie qui permet de contourner cette limitation.

Dans un premier temps, on détaillera brièvement les équations simulées par le moteur ATLAS, ainsi que les différents paramètres d'entrées des modèles physiques utilisés. On comparera les résultats des simulations à des mesures expérimentales I-V de diodes en germanium dopé. Ensuite, on discutera de l'approche établie pour déterminer l'ordre de grandeur des courants d'injection permettant de créer l'inversion de population dans le germanium. On l'appliquera pour différents dispositifs, et on regardera les paramètres qui permettent d'obtenir une injection optimisée en fonction des paramètres des matériaux et du dopage, en considérant la contrainte dans la couche de germanium.

### 2.1.1 Modèle du transport électronique dans les semiconducteurs

On rappelle les différents éléments qui permettent d'établir le modèle de transport des porteurs dans un semiconducteur.

#### 2.1.1.1 État électrique d'un semiconducteur

L'état électrique d'un semiconducteur est défini par les relations qui unissent la densité de charges d'espace  $\rho$ , et potentiel  $\phi$ . Elles sont reliées par le théorème de Gauss, et l'équation de Poisson qui permettent de calculer la variation du potentiel électrostatique à une densité locale de charge.

Le théorème de Gauss s'écrit :

$$\operatorname{div} \vec{E} = \frac{\rho}{\varepsilon} \quad (2.1)$$

Où  $\varepsilon$  est la constante diélectrique du semiconducteur. Le champ électrique  $\vec{E}$  est obtenu par le gradient du potentiel  $\phi$  :

$$\vec{E} = -\vec{\nabla}\phi \quad (2.2)$$

Ce qui donne en développant l'équation 2.1 dans l'équation 2.2 :

$$\Delta\phi = -\frac{\rho}{\varepsilon} \quad (2.3)$$

Il s'agit de l'équation de Poisson. Son intégration permet de calculer la variation du potentiel dans un semiconducteur à partir de la charge d'espace. Elle est définie par la somme des contributions des charges mobiles, à savoir les électrons et les trous, et les charges fixes telles que les ions donneurs ou accepteurs.

$$\rho = q \left( p - N_A^+ - n + N_D^- \right) \quad (2.4)$$

## 2.1. Modélisation du transport électronique dans des structures en germanium

Où  $n$  est la densité d'électrons,  $p$  est la densité de trous,  $N_D^-$  la densité de donneurs ionisés, et  $N_A^+$  la densité d'accepteurs ionisés.

### 2.1.1.2 Équation de transport : Modèle de dérive-diffusion

Ce modèle décrit les densités de courant  $J_n$  et  $J_p$  en prenant en compte l'effet de la diffusion des porteurs sous l'effet d'un gradient de concentration, et de leur dérive sous l'effet d'un champ électrique :

$$\vec{J}_n = -q\mu_n \vec{\nabla} \phi_n \quad (2.5)$$

$$\vec{J}_p = -q\mu_p \vec{\nabla} \phi_p \quad (2.6)$$

Les expressions sont exprimées en terme de quasi-niveau de Fermi  $\phi_n$  et  $\phi_p$ . Ils caractérisent la densité et la distribution des électrons dans la bande de conduction, et des trous dans la bande de valence, quand le semiconducteur n'est pas à l'équilibre thermodynamique. Un courant ne va apparaître que sous l'effet de la variation du quasi-niveau de Fermi. La densité de courant est proportionnelle au gradient du quasi-niveau de Fermi. Cette description permet de continuer à appliquer le formalisme du niveau de Fermi, comme si tout se passait à un niveau différent pour les deux types de porteurs. Ils sont reliés à la densité de porteurs et au potentiel par les expressions suivantes en appliquant la statistique de Boltzmann :

$$n = n_{ie} \exp\left(\frac{q(\phi - \phi_n)}{kT_L}\right) \quad (2.7)$$

$$p = n_{ie} \exp\left(\frac{-q(\phi - \phi_p)}{kT_L}\right) \quad (2.8)$$

Où  $n_{ie}$  est la densité de porteurs intrinsèque du semiconducteur.

Ce qui permet de réécrire les équations pour exprimer les quasi-niveaux de Fermi :

$$\phi_n = \phi - \frac{kT_L}{q} \ln\left(\frac{n}{n_{ie}}\right) \quad (2.9)$$

$$\phi_p = \phi + \frac{kT_L}{q} \ln\left(\frac{p}{n_{ie}}\right) \quad (2.10)$$

En injectant les équations 2.6 dans l'expression des densités de courant des équations 2.10 on obtient les expressions :

$$\vec{J}_n = qn\mu_n \vec{E}_n + qD_n \vec{\nabla} n \quad (2.11)$$

$$\vec{J}_p = qp\mu_p \vec{E}_p - qD_p \vec{\nabla} p \quad (2.12)$$

## Chapitre 2. Dimensionnement du laser germanium sous injection électrique

Où l'on a exprimé le gradient du potentiel découlant du quasi-niveau de Fermi par un champ électrique effectif  $E_n$  et  $E_p$  pour les électrons et les trous respectivement. Les constantes  $D_n$  et  $D_p$  sont appelées constantes de diffusion pour les électrons et les trous respectivement. Ce modèle de transport est bien adapté pour des tailles de dispositif de taille de l'ordre de la centaine de nanomètres. L'approximation du modèle de dérive-diffusion devient moins rigoureuse quand la taille des dispositifs est très réduite.

Ces relations s'appliquent pour des semiconducteurs non dégénérés. Le semiconducteur est dégénéré si le niveau de Fermi est situé dans une bande permise. Pour prendre en compte la dégénérescence, il faut modifier les expressions 2.8 en utilisant le calcul exact de la densité de porteurs à partir de la densité d'états dans l'espace des énergies  $N_{c,v}(E)$  et de la statistique de Fermi-Dirac  $f_{p,n}$  pour les électrons et les trous respectivement. Les densités totales d'électrons dans la bande de conduction, et de trous dans la bande de valence sont données par :

$$n = \int_{-\infty}^{+\infty} f_n(E) N_c(E) dE \quad (2.13)$$

$$p = \int_{-\infty}^{+\infty} f_p(E) N_v(E) dE \quad (2.14)$$

avec les fonctions de Fermi-Dirac données par :

$$f_n(E) = \frac{1}{1 + e^{(E-E_{F,n})/kT}} \quad (2.15)$$

$$f_p(E) = \frac{1}{1 + e^{(E_{F,p}-E)/kT}} \quad (2.16)$$

En considérant des bandes de conduction et de valence paraboliques, on peut exprimer les densités d'états en fonction de l'énergie par des quantités de densités équivalentes d'états  $N_c$  et  $N_v$ , en réécrivant les intégrales des équations 2.14 sous les formes suivantes :

$$n = N_c F_{1/2} \left( \frac{E_{F,n} - E_c}{kT} \right) \quad (2.17)$$

$$p = N_v F_{1/2} \left( \frac{E_v - E_{F,p}}{kT} \right) \quad (2.18)$$

Où  $F_{1/2}$  est l'intégrale de Fermi-Dirac d'ordre 1/2. Les densités équivalentes d'états de bande de conduction  $N_c$ , et de bande valence  $N_v$ , sont exprimées en fonction des masses effectives de densité d'états  $m^*$  :

$$N_c = 2 \left( \frac{m_e^* kT}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} \quad (2.19)$$

$$N_v = 2 \left( \frac{m_h^* kT}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} \quad (2.20)$$

Cela permet de traiter les cas où les semiconducteurs ont un niveau de dopage important.

## 2.1. Modélisation du transport électronique dans des structures en germanium

### 2.1.1.3 Relation de continuité

Les équations de continuité régissent la condition d'équilibre dans le semiconducteur. La variation de porteurs par unité de temps dans un élément de volume infinitésimal est la somme algébrique de porteurs qui entrent, qui sortent, qui se créent, et qui se recombinent. L'expression de continuité pour les électrons et les trous s'écrivent :

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{1}{q} \operatorname{div} \vec{J}_n + G_n - R_n \quad (2.21)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = \frac{1}{q} \operatorname{div} \vec{J}_p + G_p - R_p \quad (2.22)$$

Où  $\vec{J}_n$  et  $\vec{J}_p$  sont les densités de courant d'électrons et de trous,  $G_n$  et  $G_p$  le taux de générations d'électrons et de trous, et  $R_n$  et  $R_p$  le taux de recombinaisons d'électrons et de trous. Le taux de génération résulte de deux contributions :

- les porteurs générés de manière spontanée due à l'agitation thermique
- les porteurs générés de manière induite par une excitation extérieure.

### 2.1.2 Mécanisme de génération et de recombinaison

Les taux de génération  $G_n$  et  $G_p$  permettent de mesurer le nombre d'électrons et de trous créés par unité de volume et de temps ( $cm^{-3}s^{-1}$ ). Les taux de recombinaisons  $R_n$  et  $R_p$  permettent de mesurer le nombre d'électrons et de trous qui se recombinent par unité de volume et de temps ( $cm^{-3}s^{-1}$ ).

Il y a trois types de phénomènes de recombinaisons fondamentales dans les semiconducteurs :

- Recombinaison Shockley-Read-Hall (SRH)
- Recombinaison radiative
- Recombinaison Auger

Ces trois mécanismes vont déterminer le temps de vie d'un porteur dans le semiconducteur avant qu'un porteur minoritaire ne se recombine. Le temps de vie moyen prenant en compte les trois phénomènes cités plus haut est décrit par la formule suivante :

$$\tau = \frac{1}{\tau_{SRH}^{-1} + \tau_{Aug}^{-1} + \tau_{Rad}^{-1}} \quad (2.23)$$

On va décrire l'origine de ces trois mécanismes de recombinaisons, et donner les valeurs des paramètres pour le germanium.

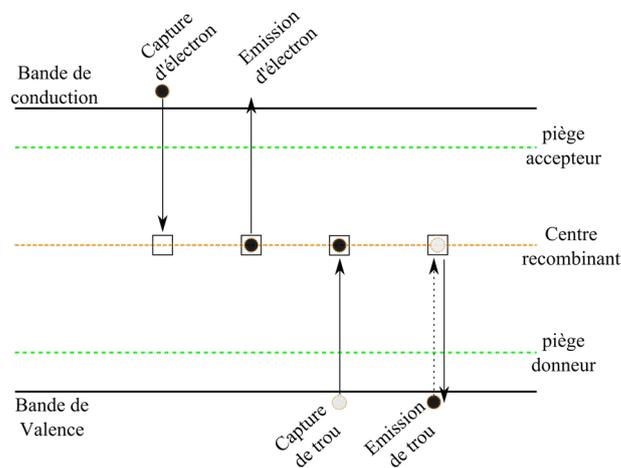
### 2.1.2.1 Recombinaison Shockley-Read-Hall

Les semiconducteurs contiennent des défauts de type :

- interstitiel
- substitutionnel
- lacune
- défaut d'empilement
- dislocation
- impuretés lors de la croissance

Toute rupture de périodicité provoquée par les défauts perturbe la structure de bande. Elle provoque l'apparition de niveaux d'énergie possibles à l'intérieur de la bande interdite. Les défauts peuvent assister les recombinaisons entre les porteurs. C'est un procédé à deux étapes. Par exemple, un défaut peut piéger un électron, qui par attraction Coulombienne peut attirer un trou et provoquer la recombinaison des deux particules, ou le réémettre dans la bande de conduction.

Un défaut agit comme des pièges ou des centres recombinants selon sa position en énergie, la position du niveau de Fermi du système, la température du réseau cristallin, et les taux de capture de porteurs. Généralement, les impuretés avec une énergie située en milieu de bande interdite sont des centres recombinants, tandis que les impuretés situées en bord de bande se comportent comme des pièges.



**Fig. 2.1 :** Différents mécanismes de recombinaisons assistés par les défauts

Les porteurs sont piégés un certain temps avant de se recombiner ou d'être réémis. Durant ce temps, ils ne sont plus actifs au transport électronique. Ce type de recombinaison peut avoir un impact important.

La théorie de ce mécanisme de recombinaison a été établie par Shockley, Read et Hall (SRH). Le taux de recombinaison  $R_{SRH}$  s'écrit :

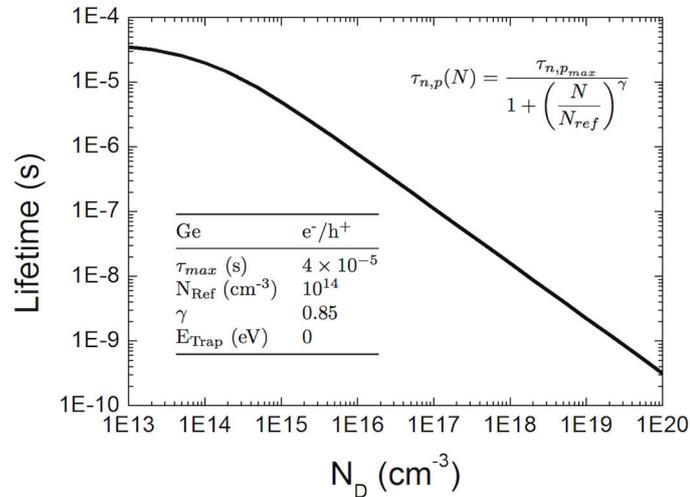
## 2.1. Modélisation du transport électronique dans des structures en germanium

$$R_{SRH} = \frac{pn - n_{ie}^2}{\tau_n \left[ n + n_{ie} \exp\left(\frac{E_{trap}}{kT_L}\right) \right] + \tau_p \left[ p + n_{ie} \exp\left(\frac{-E_{trap}}{kT_L}\right) \right]} \quad (2.24)$$

Où  $E_{trap}$  est la différence d'énergie entre la position du piège et du niveau de Fermi intrinsèque.  $\tau_n$  et  $\tau_p$  sont les temps de vie SRH pour les électrons et les trous. Ces temps de vie sont dépendants de la densité de défauts dans le semiconducteur. Un modèle empirique permettant de décrire l'évolution des temps de vie avec la densité d'impuretés dopantes a été adapté par (HELLINGS et al., 2010) dans le cas du germanium :

$$\tau_{n,p}(N) = \frac{\tau_{n,p,max}}{1 + \left(\frac{N}{N_{ref}}\right)^\gamma} \quad (2.25)$$

Où  $\tau_{n,p,max}$  est le temps de vie obtenu pour un semiconducteur intrinsèque,  $N$  est la densité d'impuretés dopantes et  $N_{ref}$  et  $\gamma$  les paramètres d'ajustement du modèle empirique. Les valeurs des paramètres sont en partie adaptées sur des mesures de temps par excitation optique et micro-onde en fonction du niveau de dopage du germanium effectué par (GAUBAS et al., 2006). Les paramètres du modèle sont donnés sur la figure 2.2. Lorsque le dopage atteint une valeur importante autour de  $N_D = 10^{19} \text{cm}^{-3}$ , le temps de vie des porteurs décroît à une valeur de l'ordre de la nanoseconde. Ce temps de vie est cohérent avec les mesures expérimentales de temps de vie sur des couches de germanium dopées effectuées par mesure de spectroscopie de transmission pompe sonde qui utilise une source synchrotron (GEIGER et al., 2014)



**Fig. 2.2 :** Temps de vie SRH pour le germanium en fonction de la densité d'impuretés dopantes en utilisant les paramètres définis par (HELLINGS et al., 2010)

### 2.1.2.2 Recombinaison Auger

La recombinaison Auger est un mécanisme à trois particules. Il existe plus d'une dizaine de combinaisons possibles entre les trois particules. Par exemple, un électron de la bande de conduction

## Chapitre 2. Dimensionnement du laser germanium sous injection électrique

---

va se recombiner avec un trou qui peut être localisé sur la bande de trous lourds, de trous légers ou sur la bande de spin-orbite. Pour compenser le déficit en énergie un électron va être émis de la bande de conduction à plus haute énergie pour que le bilan énergétique soit nul. Le porteur libre, un électron ou un trou, peut soit être émis ou capturé. Ce mécanisme étant complexe, on donne une description phénoménologique qui se traduit par des coefficients Auger  $C_n$  et  $C_p$  en  $\text{cm}^{-6}\text{s}^{-1}$ . Le taux de recombinaison Auger est donné par :

$$R_{Auger} = C_n (pn^2 - nn_{ie}) + C_p (np^2 - pn_{ie}^2) \quad (2.26)$$

La valeur de la constante pour le germanium est comprise entre  $10^{-30}$  et  $10^{-31} \text{ cm}^{-6}\text{s}^{-1}$ . Ce phénomène commence à devenir important pour des densités de porteurs libres élevées de l'ordre de  $10^{19} \text{ cm}^{-3}$ .

### 2.1.2.3 Recombinaison radiative

C'est un phénomène impliquant deux particules de bande à bande. Un électron de la bande de conduction va se recombiner avec un trou de la bande de valence. Il va céder son énergie sous forme de photon, pour que le bilan énergétique soit nul. Dans le cas d'un semiconducteur à bande interdite indirecte, ce phénomène doit inclure l'apport d'un phonon afin d'assurer la conservation des vecteurs d'onde. Le taux de recombinaison radiative peut s'exprimer par une loi phénoménologique :

$$R_{Opt} = B.np \quad (2.27)$$

Où  $B$  est le coefficient de recombinaison bimoléculaire. Sa valeur est de  $5 \times 10^{-14} \text{ cm}^{-3} \text{ s}^{-1}$  dans le cas du germanium à 300 K. Cette valeur est donnée pour du germanium intrinsèque, et ne prend en compte que les recombinaisons radiatives indirectes. À titre de comparaison, la valeur de ce coefficient est de  $7 \times 10^{-10} \text{ cm}^{-3} \text{ s}^{-1}$  pour le GaAs, car les recombinaisons radiatives s'effectuent directement en  $\Gamma$ .

### 2.1.3 Mobilité des porteurs dans le germanium dopé

Les trous et les électrons sont accélérés sous l'action d'un champ électrique, mais vont perdre leurs impulsions à cause des différents mécanismes d'interaction avec leurs environnements. La mobilité des porteurs permet de faire une description phénoménologique des différents mécanismes de diffusion qui se produisent à l'échelle microscopique, comme l'interaction des porteurs avec les phonons, les collisions avec les impuretés et avec les autres porteurs, ainsi que tout autre défaut du matériau. La mobilité des porteurs  $\mu$  définit l'aptitude de la distribution de porteurs à se mouvoir dans le réseau cristallin du semiconducteur, sous l'action d'un champ électrique modéré. Elle s'exprime en  $\text{cm}^2 \text{ V}^{-1} \text{ s}^{-1}$ . Elle est d'autant plus grande que le cristal est pur, et que la masse effective des porteurs est faible.

Sous un fort champ électrique, les porteurs acquièrent une grande énergie qui leur permet d'avoir accès à une gamme plus large d'interaction. On ne s'intéresse qu'à la mobilité dans le massif sous faible champ électrique. Cette hypothèse est valable pour des champs électriques allant, tout au

## 2.1. Modélisation du transport électronique dans des structures en germanium

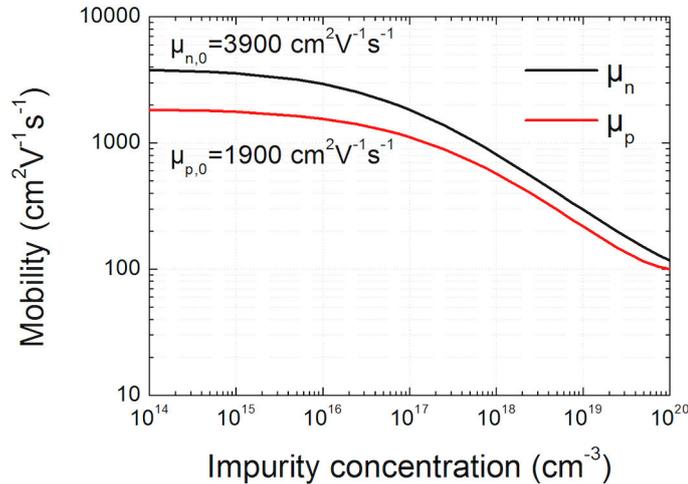
plus jusqu'à quelques kV/cm, au-delà l'effet de la saturation de la vitesse de déplacement des porteurs se fait ressentir.

Dans le massif, la valeur de la mobilité est contrôlée par beaucoup de mécanismes d'interaction, mais dans notre configuration on peut en dénombrer principalement trois :

- Les interactions avec les phonons acoustiques et optiques
- Les interactions avec les impuretés ionisées
- Les interactions Coulombienne entre les porteurs libres (électrons et/ou trous)

Les interactions entre porteurs et phonons dépendent de la structure électronique et des relations de dispersion des phonons. Les taux d'interactions d'absorption de phonons dépendent de la température, plus la température du réseau cristallin est basse, plus la section efficace de ces "collisions" est faible, donc la mobilité sera plus élevée, et inversement. En revanche, l'émission de phonons est relativement athermique ce qui explique la modeste évolution de la vitesse de saturation des porteurs à basse température comparativement à l'amélioration de la mobilité.

Il est connu que la mobilité se dégrade lorsque la concentration d'impuretés dopantes est augmentée. On utilise le modèle empirique de Masetti (MASETTI et al., 1983), qui est à la base décrit pour le silicium, mais qui a été adapté pour le germanium dans la littérature (HELLINGS et al., 2010). À 300 K, la mobilité des électrons dans le germanium est de  $3900 \text{ cm}^2.V^{-1}.s^{-1}$ , et la mobilité des trous est de  $1900 \text{ cm}^2.V^{-1}.s^{-1}$ . L'évolution de la mobilité en fonction du dopage est représentée sur la figure 2.3. Pour un dopage de  $10^{19} \text{ cm}^{-3}$ , la mobilité est réduite d'un ordre de grandeur à cause des interactions avec les impuretés dopantes. Dans le cas d'une couche de germanium dopée à une densité d'impuretés de  $4 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ , la valeur de mobilité devient de  $185 \text{ cm}^2.V^{-1}.s^{-1}$  pour les électrons, et  $150 \text{ cm}^2.V^{-1}.s^{-1}$  pour les trous.



**Fig. 2.3 :** Évolution de la mobilité en fonction de la densité de dopage en utilisant les paramètres définis par (HELLINGS et al., 2010)

Concernant l'interaction entre porteurs libres, il n'existe pas de données précises pour le germanium, mais la dégradation de la mobilité par les impuretés est très importante, et a été tabulée expérimentalement pour des concentrations supérieures à  $10^{19} \text{ cm}^{-3}$ , où le semiconducteur est

dégénéré et la densité de porteurs libres n'est plus négligeable. On a donc une idée globale de la mobilité avec des effets d'interaction porteur-porteur mais pas de manière dynamique avec le modèle implémenté.

### 2.1.4 Réduction de la bande interdite

La réduction de la bande interdite (ou BandGap Narrowing - BGN) se rencontre dans le cas des semiconducteurs très fortement dopés. Il est directement observable lors de la réalisation d'expérience de photoluminescence. La position du pic de résonance se décale vers les plus basses énergies au fur et à mesure que la densité d'impuretés augmente.

Les impuretés ionisées vont venir générer des états au voisinage des extremas des bandes de valence et de conduction dans la bande interdite. Si le nombre d'états devient important, il va alors se créer un couplage qui mène à la formation d'un quasi-continuum dans le prolongement des bandes. En plus d'avoir un effet sur la position effective des extremas des bandes de valence et de conduction, ils peuvent aussi jouer sur la courbure et donc modifier la description des bandes par le formalisme des masses effectives. Dans le cas du germanium avec un dopage de type  $n$ , on est en présence d'un semiconducteur multivallée. La problématique est de savoir si la réduction de la bande interdite s'effectue de la même quantité pour la vallée  $L$  et la vallée  $\Gamma$  de la bande de conduction. Bien que les porteurs aient accès à deux vallées différentes, les mesures expérimentales ont montré que la variation s'opère de façon équivalente sur les deux types de bandes dans le cas du germanium (CAMACHO-AGUILERA et al., 2013 ; HAAS, 1962 ; JAIN et al., 1991).

On peut décrire cet effet de manière phénoménologique de la réduction en énergie de la bande interdite entre le sommet de la bande de valence, et le minimum de la bande de conduction. En admettant que la réduction de la bande interdite  $\Delta E_G$ , soit d'une quantité identique sur la bande de valence et la bande de conduction, alors la variation intrinsèque de la concentration porteurs peut s'écrire comme suit :

$$n_{ie}^2 = n_i^2 \exp\left(\frac{\Delta E_G}{kT}\right) \quad (2.28)$$

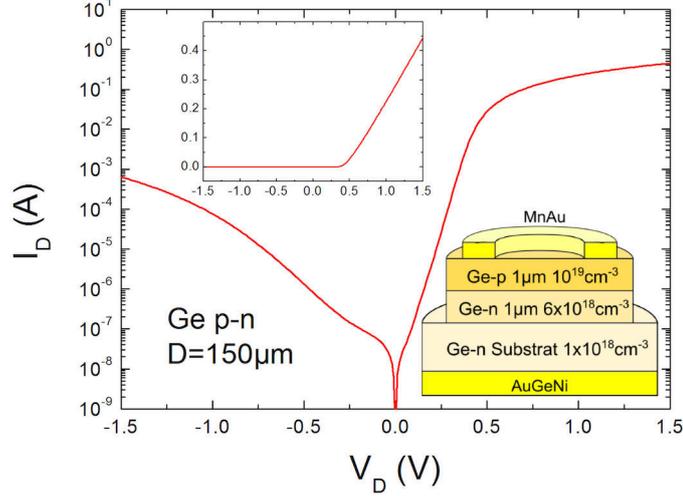
### 2.1.5 Modélisation d'une diode pn en germanium

Le transport des porteurs, et les différents modèles de recombinaison pour le germanium ont été introduits, on peut modéliser un dispositif réel pour étalonner l'outil de simulation. On va modéliser une diode  $pn$  en germanium, qui a permis l'observation des recombinaisons radiatives en bande interdite directe et indirecte (KERSAUSON et al., 2010).

Les diodes sont réalisées par épitaxie sur un substrat de germanium dopé de type  $n$  avec une densité  $N_D = 10^{18} \text{cm}^{-3}$ . Une reprise d'épitaxie d'une couche de germanium d'une épaisseur de 1  $\mu\text{m}$  et dopée de type  $n$  avec une densité de  $N_D = 6 \times 10^{18} \text{cm}^{-3}$  est effectuée. Afin de former une jonction  $pn$ , une couche d'une épaisseur de 1  $\mu\text{m}$  et dopée de type  $p$  avec une densité de  $N_A = 10^{19} \text{cm}^{-3}$  est épitaxiée successivement. La structure des diodes est ensuite formée par la gravure en mésas circulaires, avec des diamètres allant de 150 à 800  $\mu\text{m}$ . Le contact sur la couche de germanium dopé  $p$  est un anneau en MnAu formé sur le haut de la diode. Le contact

## 2.1. Modélisation du transport électronique dans des structures en germanium

sur la partie  $n$  de la diode est pris en face arrière du substrat avec une métallisation Au/Ge/Ni suivi d'un recuit pour obtenir un contact ohmique.



**Fig. 2.4** : Mesure I-V pour la diode pn en germanium de 150  $\mu\text{m}$  de diamètre

Des mesures de courant en fonction de la tension ont été réalisées. La mesure obtenue pour une diode de 150  $\mu\text{m}$  est présentée sur la figure 2.4. On peut extraire différentes informations à partir de la courbe I-V, en utilisant la relation reliant le courant à la tension appliquée pour une diode p-n :

$$I = I_S \exp\left(\frac{qV}{\eta k_b T_L} - 1\right) \quad (2.29)$$

Où  $I_S$  est le courant de saturation,  $\eta$  le coefficient d'idéalité de la diode,  $T_L$  la température du dispositif, et  $k_b$  la constante de Boltzmann.

Le seuil de la diode est obtenu autour de 0.4 V. En dessous de ce seuil, le facteur d'idéalité est de 1.16. Cela montre que le transport des porteurs est principalement diffusif dans la zone de charge d'espace. Le courant de saturation est égal à  $1 \times 10^{-8}$  A.

Au-delà du seuil, on extrait la résistance série dynamique du système lorsque celui-ci est en régime ohmique par la relation suivante :

$$R_S = \left(\frac{dI}{dV}\right)^{-1} \quad (2.30)$$

La résistance globale du dispositif est de 2.3  $\Omega$ .

On va simuler la diode  $pn$  en germanium, afin de vérifier le bon accord avec les paramètres utilisés des modèles physiques.

### 2.1.5.1 Hypothèses de simulation

On utilise les modèles de recombinaisons présentés dans la partie précédente, la mobilité des porteurs dépendant de la densité du dopage, et la réduction de la bande interdite liée au dopage. La structure circulaire de la diode est modélisée de manière axisymétrique, c'est à dire que le demi-plan suivant  $x$  et  $y$ , est étendu autour de l'axe de révolution  $y$ . On considère une jonction abrupte. Les dimensions de la diode sont très grandes par rapport aux dispositifs typiquement modélisés avec ce type de logiciel (10  $\mu\text{m}$ ). Le diamètre de la diode est de 150  $\mu\text{m}$ . Le contact étant pris en face arrière, il faut considérer l'épaisseur totale du substrat, qui est 450  $\mu\text{m}$ . Pour avoir une bonne précision, le maillage doit être de l'ordre de grandeur de la longueur de Debye à l'interface (ou Thomas-Fermi pour un semiconducteur dégénéré, environ 10 nm pour un dopage de  $10^{19} \text{ cm}^{-3}$ ).

On cherche à estimer la valeur de la résistance que l'on va introduire pour prendre en compte les résistances de contact la diode. Faute de dispositifs adaptés pour l'extraction des valeurs des résistances de contact, on va déduire leurs valeurs à partir de la résistance du dispositif. On considère que le dispositif est composé des résistances suivantes :

- Résistance de contact face avant
- Résistance de contact face arrière
- Résistance des couches dopées
- Résistance du substrat

Comme l'épaisseur du substrat est de deux ordres de grandeur supérieure à celle des couches, on peut négliger leurs résistances face à celle du substrat. En utilisant la résistivité d'une couche de germanium dopé  $n$ , on trouve pour une section de 150  $\mu\text{m}$  de diamètre et une épaisseur de 450  $\mu\text{m}$ , une résistance de 1.78  $\Omega$ . La résistance du substrat est la principale contribution à la résistance totale du dispositif qui est de 2.3  $\Omega$ . On fait l'hypothèse les résistances de contact seront englobées dans la résistance série que l'on applique avec une valeur égale à  $R_S - R_{substrat} = 0.52 \Omega$ .

### 2.1.5.2 Résultats de simulation

Une fois la géométrie du dispositif construite avec un maillage adapté on peut simuler le comportement du dispositif polarisé. La structure est polarisée en directe, c'est-à-dire que l'on applique une tension positive sur l'électrode de la couche du germanium dopé  $p$ , et l'électrode du substrat du germanium dopé  $n$  est maintenue à un potentiel nul. On obtient le courant dans la structure en fonction de la tension de polarisation. Le résultat de la simulation est superposé à la mesure expérimentale comme on peut le voir sur la figure 2.5. Le seuil est bien obtenu autour de 0.4 V pour la diode de 150  $\mu\text{m}$ . La tension qui abaisse la barrière de potentiel à l'interface pour permettre l'établissement d'un courant est bien en accord avec la mesure expérimentale. La pente des courbes dans le régime passant est équivalente entre la simulation et la mesure expérimentale, du fait de l'étalonnage de la résistance extraite par rapport à la diode réelle. Dans le régime bloquant de la diode, le courant de saturation mesuré est en très bon accord avec les résultats de la simulation. Dans ce régime, le courant est généré principalement par la recombinaison de porteurs dans la zone de charge d'espace. Dans ce régime, les recombinaisons

## 2.1. Modélisation du transport électronique dans des structures en germanium

SRH sont dominantes. Le choix des constantes de temps de vie est bien adapté au dopage des couches de germanium. On obtient des résultats similaires pour des diodes jusqu'à 200  $\mu\text{m}$  de diamètre. Pour des diamètres plus larges, la taille du dispositif à simuler est trop importante pour obtenir un maillage adapté de la structure. Les résultats s'en retrouvent dégradés.

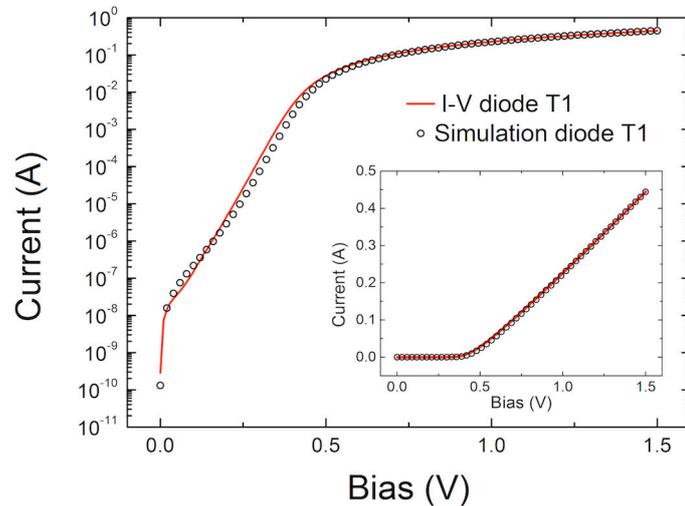


Fig. 2.5 : Mesure I-V pour la diode pn en germanium de 150  $\mu\text{m}$  de diamètre

Grâce à ces simulations, on a pu étalonner le fonctionnement de l'outil de modélisation pour le germanium dopé. Le choix des modèles de recombinaisons ainsi que leurs constantes associées permet d'obtenir un bon accord avec les mesures expérimentales sur des diodes *pn* en germanium. On va pouvoir modéliser différentes structures en germanium afin de dimensionner les futurs dispositifs.

### 2.1.6 Choix de la structure à étudier

Plusieurs conditions sont nécessaires pour pouvoir observer une émission stimulée de la lumière dans un semiconducteur :

- La population de trous et d'électrons injectée dans le matériau doit être suffisamment importante pour que la séparation en énergie des quasi-niveaux de Fermi soit supérieure à l'énergie des recombinaisons radiatives. Quand le semiconducteur est dans cette configuration, on parle d'inversion de population.
- Les pertes générées par absorption via des procédés non radiatifs doivent être faibles devant le gain optique obtenu dans le matériau.
- La région active doit être contenue dans une cavité optique résonnante en accord avec la longueur d'onde d'émission du matériau.

On s'intéresse à la première condition en étudiant l'injection électrique des porteurs pour obtenir le laser germanium.

### 2.1.6.1 Les lasers à semiconducteurs - historique

Les premiers lasers à semiconducteurs furent mis au point en 1962. Ils étaient basés sur des homojonctions p-n en GaAs et opéraient à température cryogénique sous courant à régime impulsif. Le courant de seuil nécessaire pour obtenir l'effet laser était d'environ 100 kA/cm<sup>2</sup>. La possibilité d'entrevoir des lasers sous courant à régime continu et à température ambiante émergea en même temps que les premières réalisations de diodes à double hétérostructure entre 1969 et 1970. Profitant du confinement des porteurs dans la zone active, l'efficacité de dispositif pour l'émission stimulée fut fortement augmentée, et a permis de réduire le seuil en courant à 2 kA/cm<sup>2</sup>.

Le concept de laser à puits quantique est ensuite apparu vers la fin des années 1970. En utilisant cette configuration, les seuils en courant furent réduits à 0.5 kA/cm<sup>2</sup>. L'utilisation d'une couche active très fine permet de réduire l'extension spatiale des électrons et des trous, mais aussi de confiner les distributions énergétiques par la quantification des états. Au début des années 1990, la contrainte fut employée sur les lasers à puits quantiques pour augmenter leurs performances. Cet historique permet d'avoir une idée de l'évolution des différentes structures pour obtenir des lasers à base de semiconducteurs.

### 2.1.6.2 Application au germanium

Pour obtenir l'effet laser dans le germanium, le point clé est de pouvoir injecter une densité suffisamment importante d'électrons. Ces électrons vont remplir la vallée  $L$ , qui vont entraîner une élévation du niveau de Fermi afin de pouvoir dégénérer la vallée  $\Gamma$  et d'obtenir l'inversion de population.

Pour répondre à des problématiques technologiques pour la réalisation des matériaux, on va dans un premier temps étudier les différentes structures à base de germanium massif accessibles expérimentalement. On élimine par conséquent tous les dispositifs à base de puits quantiques, bien que certains aient fait leurs preuves pour les lasers à matériau III-V. Dans cette partie, on survole les différentes structures afin de regarder quelles seraient les approches les plus intéressantes pour obtenir un démonstrateur du laser en germanium. Pour illustrer le point de fonctionnement de ces structures, on donnera la densité de courant de seuil pour obtenir l'inversion de population dans le germanium. La méthode de calcul du courant de seuil sera décrite en détail après la présentation des différentes structures dans la partie 2.1.7.

**2.1.6.2.1 Homojonction pn en Germanium** On étudie l'injection des porteurs dans une diode pn. On reprend les résultats précédents obtenus sur les diodes en germanium, permettant un bon accord des simulations avec les mesures expérimentales.

Le diagramme de bande de cette structure bande est reporté sur la figure 2.6. Le dopage des couches est de l'ordre de  $10^{19} \text{cm}^{-3}$ . On polarise la diode en direct, cela entraîne l'apparition d'un flux de porteurs. Les électrons vont diffuser vers le côté  $p$  et se recombiner avec les trous, et les trous vont diffuser vers le côté  $n$  et se recombiner avec les électrons. Le transport des porteurs dans cette structure n'est pas adapté à l'application que l'on souhaite obtenir. Les recombinaisons radiatives vont être générées spatialement dans la zone où la densité de paire électrons-trous est maximale, soit à l'interface de la jonction. La faible épaisseur de la zone

## 2.1. Modélisation du transport électronique dans des structures en germanium

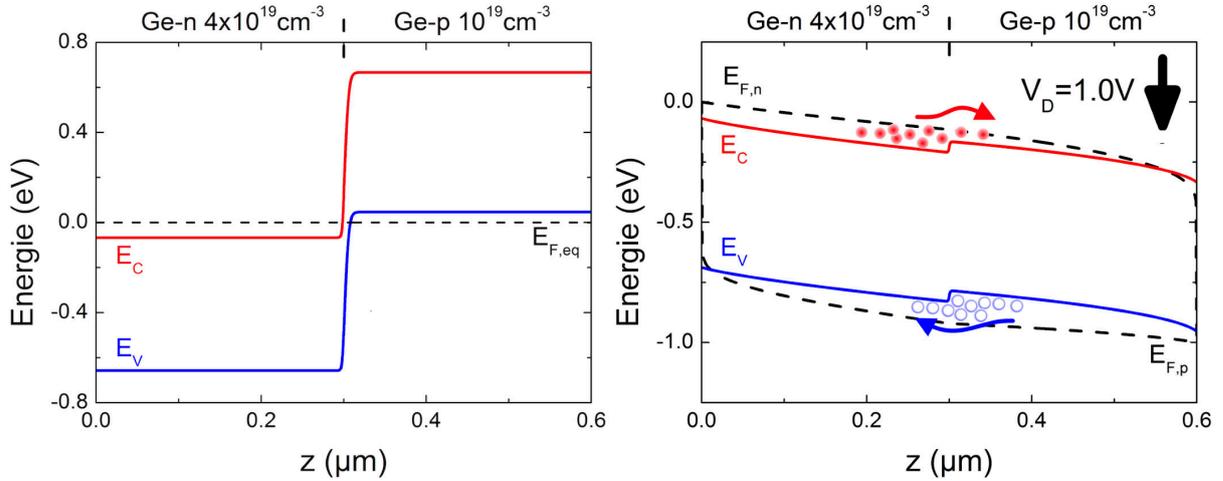


Fig. 2.6 : Diagramme de bande pour une jonction pn en germanium

mise en jeu, n'est pas adaptée dans le cas où la zone de gain est le germanium dopé de type n, et contraint en tension. Par ailleurs dans ce type de structure, il est très difficile d'injecter des densités de porteurs supérieures aux densités de dopage. Si on augmente la polarisation, le courant total augmente, car les porteurs peuvent s'écouler plus facilement vers les contacts sans pour autant que la densité totale de porteurs augmente significativement. À titre d'exemple, pour obtenir l'inversion de population dans du germanium relaxé et dopé à  $4 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ , il faudrait pouvoir appliquer un courant de l'ordre  $10^8 \text{ A/cm}^2$ . Cette valeur est beaucoup trop importante pour pouvoir réaliser un dispositif réel. Il faut donc étudier d'autres pistes pour réaliser l'injection électrique de porteurs dans le germanium.

**2.1.6.2.2 Hétérostructure pn Germanium/GaAs** La seconde approche réside dans l'utilisation d'une hétérostructure. On peut exploiter les propriétés de discontinuité de bande afin de confiner les porteurs dans le germanium. Comme on peut le voir sur la figure 2.7, la couche de germanium est en contact avec un matériau à plus grande bande interdite, comme dans cet exemple une couche de GaAs. La différence d'énergie de la bande d'énergie se répercute sur la discontinuité en énergie à l'interface des deux matériaux. Lors de l'application d'une polarisation positive sur la partie dopée p de la structure, l'énergie potentielle à l'interface va être abaissée. Mais il subsiste une barrière d'énergie qui est intrinsèque à la discontinuité de bande entre les deux matériaux. Dans ce cas, seuls les trous du GaAs-p vers le Ge-n peuvent être injectés de manière conséquente. Pour que les électrons puissent être injectés du germanium vers le GaAs, ils doivent franchir une importante barrière d'énergie. Cette configuration permet de confiner les électrons dans le germanium.

Le recouvrement des porteurs dans la zone active, le germanium dopé de type-n, est amélioré. La densité de courant nécessaire pour obtenir l'inversion pour le germanium relaxé est de l'ordre de  $10^7 \text{ A/cm}^2$ . L'injection des électrons dans le germanium dopé est dépendante de l'injection des trous. Or les trous injectés dans le germanium sont libres de diffuser dans la couche, et peuvent atteindre le contact métallique. Avec cette approche, on risque d'être confronté à la problématique du contact ohmique sur le germanium dopé de type n. Afin de ne pas dégrader les propriétés optiques du germanium par la diffusion d'impureté métallique, il est proscrit d'utiliser

## Chapitre 2. Dimensionnement du laser germanium sous injection électrique

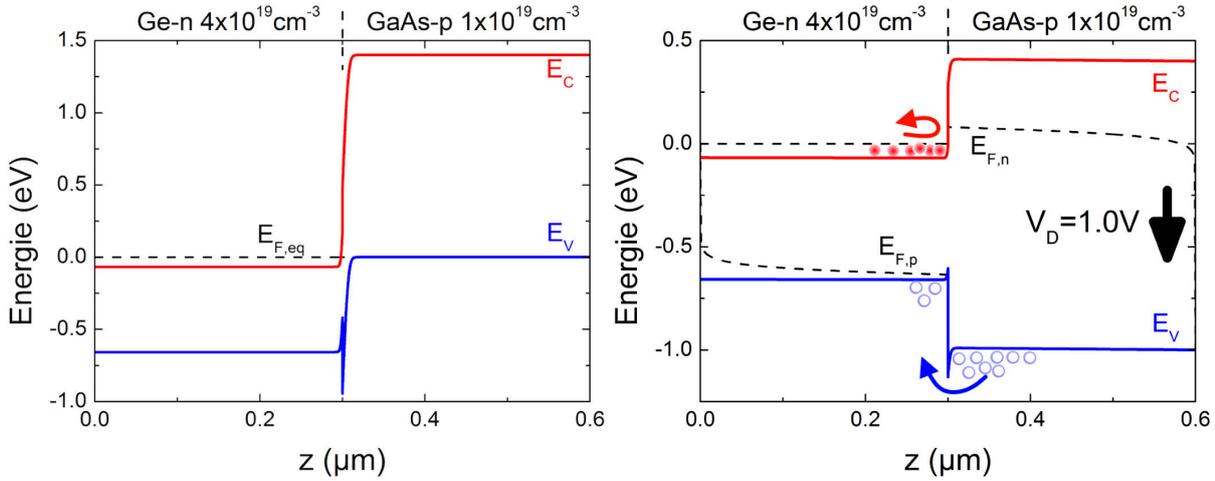


Fig. 2.7 : Diagramme de bande pour une hétérostructure pn en germanium/GaAs

un contact recuit. Il faut avoir recours à un contact non recuit qui génère dans la plupart des cas un contact redresseur (Schottky) pour le germanium de type n.

**2.1.6.2.3 Double hétérostructure pnn GaAs/Germanium/GaAs** La structure est représentée sur la figure 2.8, on note que la couche de germanium est encapsulée entre deux couches de GaAs. Dans cette configuration, on peut à la fois injecter et confiner les deux types de porteurs dans le germanium. Les porteurs sont injectés de manière homogène dans le germanium.

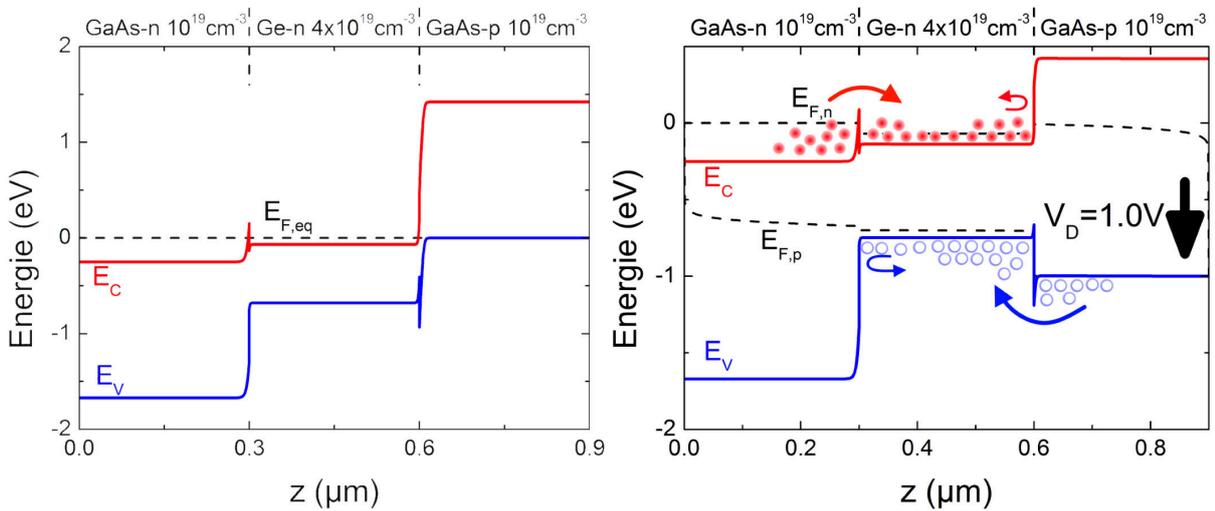


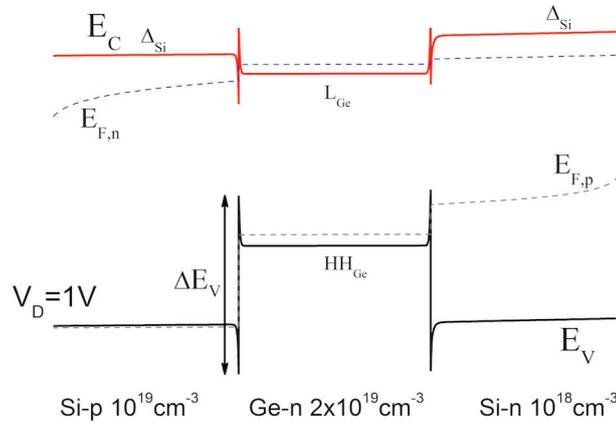
Fig. 2.8 : Diagramme de bande pour une double hétérostructure pnn en GaAs/germanium/GaAs

La densité de courant pour obtenir l'inversion de population est de  $8 \times 10^5 \text{ A/cm}^2$ . On réduit le courant de plusieurs ordres de grandeur par rapport à une homojonction *pn*. C'est d'ailleurs la double hétérostructure qui a permis l'avènement des lasers semi-conducteurs à température ambiante sous courant continu. La double hétérostructure est la configuration nécessaire pour

## 2.1. Modélisation du transport électronique dans des structures en germanium

pouvoir mener à bien l'injection des porteurs dans le germanium afin d'obtenir la condition d'inversion de population.

**2.1.6.2.4 Double hétérostructure pnn Silicium/Germanium/Silicium** De la même manière, on présente un diagramme de bande sous polarisation pour la double hétérostructure de germanium encapsulée dans des couches de silicium. Grâce aux dopages, on obtient une double pseudo-hétérostructure de type I, qui permet d'injecter efficacement les porteurs dans le germanium. La densité de courant de seuil est estimée à  $1 \times 10^6$  A/cm<sup>2</sup>, cette valeur est légèrement supérieure à la structure à base de GaAs, car les discontinuités de bande ne sont pas les mêmes. On fait l'hypothèse que la couche de germanium sur silicium est relaxée, sans défauts à l'interface. Cette étude sera approfondie dans la suite.



**Fig. 2.9 :** Diagramme de bande pour une double hétérostructure pnn en silicium/germanium/silicium sous injection électrique

### 2.1.6.3 Bilan

Par ces simulations, on peut se rendre compte du défi que représente l'injection électrique pour obtenir le laser germanium au vu des valeurs de courant calculées pour obtenir l'inversion de population dans le germanium.

L'approche technologique la plus simple à réaliser est la diode en germanium p-n, mais cette approche n'est pas satisfaisante, car elle ne permet pas d'obtenir l'inversion de population dans le germanium avec des conditions expérimentales réalistes. Il est donc obligatoire d'envisager l'utilisation d'une hétérostructure. En comparaison à des matériaux III-V, le germanium souffre du manque de liberté pour pouvoir former une double hétérostructure en accord de maille, avec des matériaux non polaires.

Le système Ge/GaAs permet d'obtenir une interface de très bonne qualité tout en proposant une hétérostructure de type I. Il se prête bien à la réalisation d'un démonstrateur. On peut bénéficier de ce type d'approche, car les échantillons étudiés seront principalement obtenus par une croissance du germanium sur un substrat de GaAs, par le biais d'une collaboration avec le Laboratoire de Photonique de Nanostructure (LPN).

À terme, la croissance du germanium devra s'effectuer sur silicium. La performance d'in-

jection électrique dans le germanium est similaire à la structure à base de GaAs. La croissance du germanium sur silicium permet d'envisager l'intégration du germanium dans des puces photoniques fabriquées dans la plateforme CMOS. Par ailleurs, les couches de germanium sur silicium peuvent être obtenues avec une contrainte résiduelle en tension liée à la différence de coefficient de dilatation thermique. Cet effet sera bénéfique pour le transfert de contrainte dans le germanium permettant la réduction des courants de seuil pour d'obtenir l'effet laser. Le défi est d'obtenir des couches de germanium sur silicium de bonne qualité avec des interfaces possédant des densités de défauts minimisées pour l'injection électrique. On peut envisager l'utilisation de l'alliage SiGe pour moduler les propriétés d'interface avec le germanium, et obtenir une interface avec une différence de paramètre de maille moins grande, et de meilleure qualité.

Pour faire l'analogie avec les lasers à matériaux III-V, l'étape suivante aurait été de considérer une structure à puits quantique. Seulement, la croissance des puits quantiques de germanium sur des substrats SiGe ne peut se faire que pour des couches en compression. La quantification des niveaux d'énergie dans le germanium génère une configuration qui n'est pas favorable pour les applications d'émission de lumière.

Pour conclure, les chiffres avancés ne tiennent pas compte de l'effet de la déformation dans la couche de germanium. On voit que l'application de la contrainte est un critère essentiel pour obtenir des points de fonctionnement viables pour le laser germanium par la réduction du courant de seuil. On développera l'effet de la contrainte dans la partie suivante.

### 2.1.7 Méthode de calcul pour la détermination du courant de seuil

On va maintenant présenter la méthode de calcul qui permet d'estimer le courant de seuil d'inversion de population dans le germanium.

#### 2.1.7.1 Inversion de population - Condition de Bernard-Durrafourg

Dans le cas d'un laser à semiconducteur classique (c.-à-d. à bande interdite directe), la condition pour obtenir l'effet laser est d'avoir une absorption du matériau qui devient négative. Elle peut être exprimée sous la simple forme :

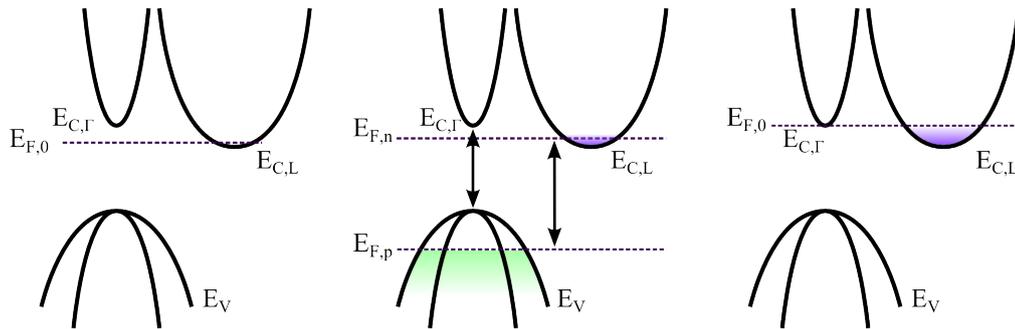
$$E_{F,n} - E_{F,p} \geq E_G \quad (2.31)$$

Avec  $E_{F,n}$  le quasi-niveau de Fermi associé à la bande de conduction,  $E_{F,p}$  le quasi-niveau de Fermi associé à la bande de valence, et  $E_G$  l'énergie de bande interdite du semiconducteur considéré. Cette condition d'inversion de population est aussi connue sous le nom du critère de Bernard-Duraffourg.

Dans le cas du germanium, on fait l'hypothèse que le niveau de Fermi pour la bande de conduction est fixé par la densité des porteurs en vallée  $L$ . Cette hypothèse peut se justifier par le fait que les temps de diffusion intervallée des porteurs sont de plusieurs ordres de grandeur plus faibles que les temps de recombinaisons des paires électrons-trous, sous condition que les

## 2.1. Modélisation du transport électronique dans des structures en germanium

températures électroniques des différentes vallées soient identiques. On peut alors appliquer la relation d'inversion de population dans le germanium en remplaçant l'énergie de la bande interdite directe dans la condition par rapport à la position du quasi-niveau de Fermi pour la bande de conduction indirecte. Seulement cette description simplifiée présente un inconvénient majeur. La condition d'inversion peut être satisfaite sans que la vallée  $\Gamma$  ne soit remplie par des électrons. On représente le diagramme de bande simplifié pour du germanium dopé de type  $n$  sur la figure 2.10 (a). Le niveau de Fermi à l'équilibre est défini par  $E_{F,0}$ . À cause du dopage, sa position est dégénérée avec le sommet de la bande de conduction dans la vallée  $E_{C,L}$ . Le bas de la bande de conduction pour les électrons en bande directe est défini par  $E_{C,\Gamma}$ . Sa position est située à 140 meV au-dessus de  $E_{C,L}$  dans le cas du germanium relaxé.



**Fig. 2.10 :** Diagramme de bande simplifié du germanium dans l'espace réciproque (a) modérément dopé à  $10^{19} \text{cm}^{-3}$ , (b) sous injection de porteurs (c) très dopé à  $10^{20} \text{cm}^{-3}$

Sous injection, le remplissage en trous se fait avec une dynamique plus importante que le remplissage de la bande de conduction qui est déjà occupée avec des densités très importantes d'électrons. Selon la configuration de la structure, on peut se retrouver dans un cas où le quasi-niveau de Fermi des trous  $E_{F,p}$  pénètre dans la bande de valence  $E_V$  sans que  $E_{F,n}$  atteigne  $E_{C,\Gamma}$ . Si on applique la condition d'inversion de population, le critère est vérifié, car  $E_{F,n} - E_{F,p} > E_{C,\Gamma} - E_V$ . Mais celle-ci est faussée, car la position du niveau de Fermi n'a pas atteint le bas de bande  $\Gamma$ . On illustre cette situation pour la figure 2.10 (b) où l'on peut observer que la séparation des niveaux de Fermi est supérieure à l'énergie de bande interdite directe sans pour autant que la bande associée soit dégénérée.

On propose donc une modification du critère de population d'inversion afin de la rendre correcte lors de son utilisation avec le germanium. Ainsi il est nécessaire de décomposer la condition d'inversion de population 2.31 en deux critères :

$$E_{F,n} > \Delta E_C^{\Gamma-L} \quad (2.32)$$

$$E_{F,p} > E_V \quad (2.33)$$

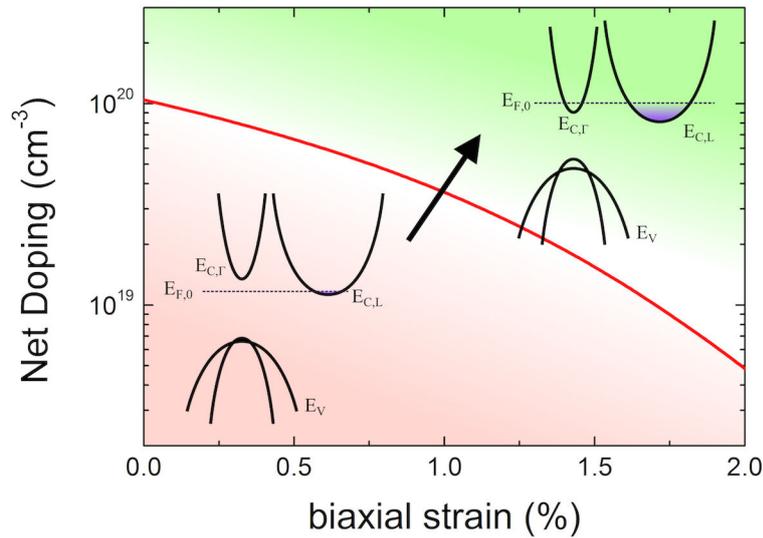
La séparation en énergie des minimas des différentes vallées en bande de conduction est annotée par  $\Delta E_C^{\Gamma/L}$ . Le premier critère stipule que la position du quasi-niveau de Fermi des électrons doit être au-dessus de la vallée de conduction  $L$  avec une valeur au moins supérieure à une énergie correspondante à la séparation entre la vallée  $L$  et la vallée  $\Gamma$ . Le second critère permet de vérifier que la bande de valence est bien dégénérée quand la position du quasi-niveau de

## Chapitre 2. Dimensionnement du laser germanium sous injection électrique

Fermi des trous est en dessous du maximum de la bande de valence. Si ces deux conditions sont respectées, on peut dire que le germanium est en régime de population d'inversion.

La valeur de  $\Delta E_C^{\Gamma/L}$  est dépendante de la contrainte. Elle diminue linéairement jusqu'à une valeur nulle quand la déformation biaxiale en tension est d'environ 1.7% à 2%. Ainsi, on peut faire intervenir l'effet de la contrainte pour obtenir l'inversion de population en faisant varier le premier critère en fonction de la contrainte.

Dans le cas d'une configuration particulière où le dopage et la contrainte sont importants, la bande de conduction en vallée  $\Gamma$  peut être déjà dégénérée à l'équilibre thermodynamique comme représenté sur la figure 2.10 (c). On obtient cette configuration en augmentant la pénétration du niveau de Fermi dans la bande de conduction par le dopage, et en réduisant la séparation d'énergie entre les deux vallées par la contrainte. Comme la première condition est vérifiée, on se retrouve à appliquer un critère d'inversion de population classique, car on n'a plus besoin de se préoccuper du remplissage en électrons de vallée  $L$ .



**Fig. 2.11 :** Diagramme de phase représentant le passage du germanium à une configuration dégénérée en bande  $\Gamma$  selon le dopage et la contrainte

La figure 2.11 représente un diagramme de phase pour lequel la combinaison du dopage et de la contrainte amène à cette situation. On voit que le germanium relaxé peut être dégénéré en  $\Gamma$  pour un dopage de l'ordre de  $10^{20}$   $\text{cm}^{-3}$ . Lorsque la valeur de la contrainte augmente, le dopage à appliquer est réduit. Ainsi pour un dopage raisonnable de  $10^{19}$   $\text{cm}^{-3}$ , il faudrait appliquer une déformation de 1.5%. Tandis qu'avec un dopage de  $5 \times 10^{19}$   $\text{cm}^{-3}$ , la déformation serait réduite à 0.75%.

### 2.1.7.2 Évaluation de courant de seuil à l'aide de la suite Silvaco

Le moteur ATLAS permet de traiter le transport électronique dans l'espace direct, ainsi on peut connaître la répartition 2D, voir 3D des porteurs dans une structure spécifique. En contrepartie, il est limité seulement à une bande de conduction et une bande de valence dans l'espace réciproque. Dans le cas du laser germanium, on a besoin de connaître la répartition des porteurs

## 2.1. Modélisation du transport électronique dans des structures en germanium

dans les différentes vallées. De plus lors de l'application d'une contrainte, il va se produire une séparation en bande de valence entre les trous lourds et les trous légers. À première vue, l'utilisation de cet outil ne semble pas être adaptée, mais il est possible de contourner cette limitation au prix d'hypothèses simplificatrices :

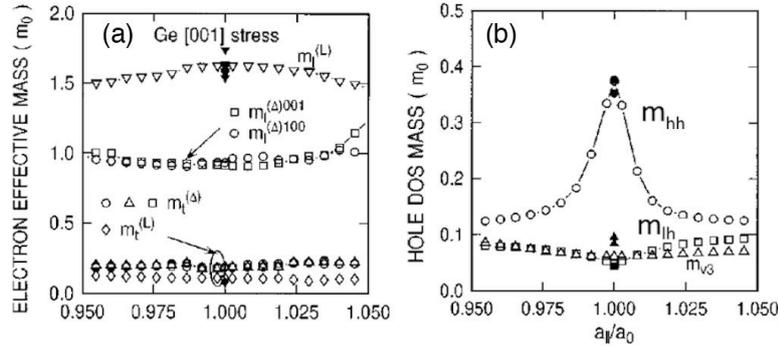
- Dans le cas des électrons, le transport électronique s'effectue majoritairement en vallée  $L$ , car elle est de plus basse énergie et la densité d'états est beaucoup plus importante. La fraction de remplissage de la vallée  $\Gamma$  par rapport à la vallée  $L$  est très inférieure au millièème dans le cas du germanium relaxé. Elle est d'environ 3 % quand la contrainte biaxiale applique une déformation en tension de 2 %. **La première hypothèse consiste à ne considérer que vallée  $L$  pour le transport des électrons.**
- Dans le cas des trous, lorsque le germanium est relaxé, le transport des porteurs en bande de valence peut être assimilé à celui pour les trous lourds. Lors de l'application d'une contrainte en tension, la séparation en énergie va permettre d'élever la position de la bande de trous légers par rapport à la bande des trous lourds. Ainsi la bande de trous légers se retrouve à être énergétiquement plus favorable pour le transport des porteurs. Bien que sa densité d'états soit beaucoup plus faible que la bande des trous lourds, son remplissage peut jouer sur la dynamique de transport.

**Tab. 2.1 :** Masse effective de densité d'états dans le germanium relaxé pour les différentes vallées, ainsi que les densités d'états calculées à température ambiante

Vallée	$m_{\text{DOS}}$	$N_C$ (cm <sup>-3</sup> )	$N_V$ (cm <sup>-3</sup> )
HH	0.34	-	$4.95 \times 10^{19}$
LH	0.05	-	$2.80 \times 10^{17}$
$\Gamma$	0.039	$2.0 \times 10^{17}$	-
L	0.58	$1.05 \times 10^{19}$	-

L'application d'une contrainte va également modifier les masses effectives des différentes vallées pour le germanium. En se basant sur les travaux de l'équipe (EL KURDI et al., 2010a), et ceux de (FISCHETTI et al., 1996), la variation de la masse de densité d'états reste limitée en bande de conduction pour la vallée  $L$ . Pour la vallée des trous légers, la variation est aussi négligeable. Seulement dans le cas des trous lourds, la masse de densité d'états est modifiée d'un facteur deux dans la plage de déformation pour laquelle on étudie le germanium, comme on peut le voir sur la figure 2.12. On a réalisé différents essais de simulation en modifiant la masse de densité d'états des trous lourds, mais les résultats obtenus étaient sensiblement équivalents, par le fait que la mobilité des porteurs est fixée par la densité d'impuretés dopantes. On a tenté de générer une bande effective de valence, avec une masse de densité d'états distribués entre les trous lourds et les trous légers, et avec une bande d'énergie interdite effective. Cette approche n'a pas été satisfaisante, car le couple de masse effective et de bande interdite effective peut prendre plusieurs valeurs amenant au même résultat.

L'abaissement en énergie pour la vallée  $L$  et la vallée des trous lourds s'effectue avec la même dynamique en fonction de la contrainte. Ainsi l'énergie de bande interdite  $E_G^{HH/L}$  reste constante. On choisit d'effectuer les simulations pour une couche de germanium en considérant la vallée  $L$ ,



**Fig. 2.12 :** (a) Masse effective des électrons en bande de conduction (b) Masse de densité d'états pour les différentes vallées en bande de valence - Figure issue de la référence (FISCHETTI et al., 1996)

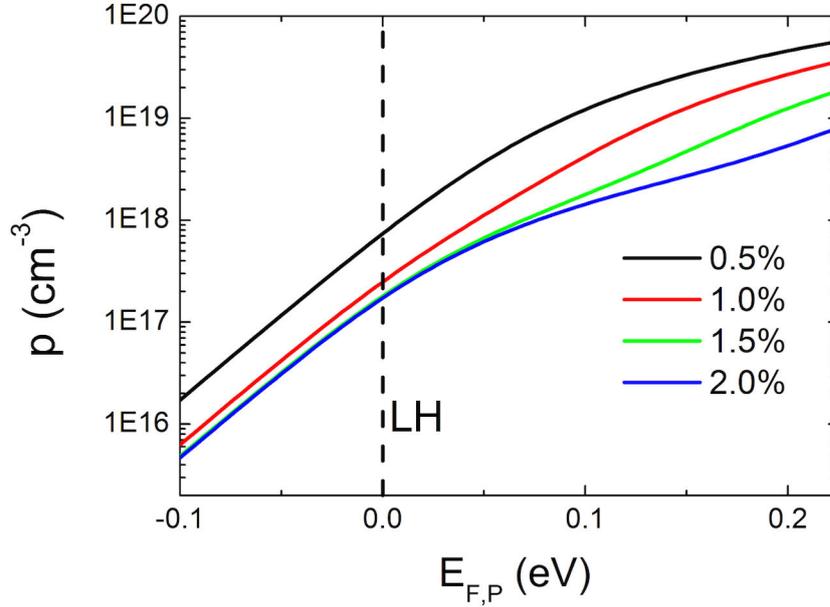
et la bande de trous lourds. L'effet de la contrainte ne sera pas répercuté sur les paramètres de simulations.

Comme on estime l'inversion de population par rapport à la position du quasi-niveau de Fermi fixé par la vallée  $L$ , l'effet de la contrainte sera injecté au travers du critère d'inversion de population qui dépend de la séparation en énergie  $\Delta E_C^{\Gamma-L}$ . On peut estimer l'inversion de population en considérant un niveau de contrainte homogène dans le germanium sous injection électrique. Cette démarche est appliquée quand la configuration du germanium n'est pas directement dégénérée en vallée  $\Gamma$  à l'équilibre thermodynamique comme représenté sur la figure 2.10 (c) de la page 35. Si c'est le cas, le critère d'inversion de population n'est dépendant que de l'injection des trous dans le germanium. Comme cette situation ne se produit qu'à des contraintes assez importantes, si la valeur du dopage est raisonnablement inférieure à  $5 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ , il faut considérer l'impact du remplissage de la bande de trous légers pour obtenir l'inversion de population. On a recours à un calcul externe en deux étapes utilisant la méthode **k.p**, et un calcul de la densité de porteurs pour un niveau de Fermi donné. La première étape du calcul, par la méthode **k.p**, permet de connaître la valeur de la séparation en énergie entre la bande de trous lourds et de trous légers  $\Delta E_{HH/LH}$  en fonction du niveau de déformation de la couche de germanium. La seconde étape consiste à calculer le remplissage en porteurs de la bande de valence, en connaissant l'énergie de séparation  $\Delta E_{HH/LH}$  entre la bande de trous lourds et de trous légers. On calcule la densité de trous  $p$  à partir de la densité équivalente d'états et de la fonction de Fermi. Cela permet de connaître la densité totale de trous à injecter pour que le niveau de Fermi vienne dégénérer la bande de trous légers. Enfin, on peut faire la correspondance entre cette densité de trous avec la densité de courant dans la structure à partir des simulations de transport. Cette méthode simplifiée permet de prendre en compte la fraction de trous légers pour obtenir l'inversion de population dans le germanium, en ne considérant qu'un transport sur la bande de trous lourds dans les simulations.

La figure 2.13 présente la densité totale de trous injectés dans le germanium en fonction de la position du quasi-niveau de Fermi de trous dans la bande de valence calculée à partir des densités d'états pour différents niveaux de la séparation d'énergie liés à la contrainte. Sa position est dégénérée avec le sommet de la bande de trous légers quand sa valeur est égale à 0 eV. On extrait la densité de trous à injecter dans le germanium pour dégénérer la bande de valence à cette valeur. En passant d'une contrainte en tension qui applique une déformation de 0.5 % à

## 2.1. Modélisation du transport électronique dans des structures en germanium

1 %, on réduit d'un facteur 3.5 la quantité totale de trous à injecter dans le germanium. Cette quantité commence à saturer à une valeur de  $2 \times 10^{17} \text{cm}^{-3}$  de trous injectés quand la valeur de la déformation dépasse 1.5 %.



**Fig. 2.13** : Densité de trous dans le germanium en fonction de la position du niveau de Fermi par rapport à la bande de valence pour les trous légers pour différentes valeurs de contrainte calculée par la méthode **k.p**

**2.1.7.2.1 Démarche appliquée** Dans un premier temps, on génère la structure que l'on souhaite étudier. Ensuite, l'outil ATLAS résout les équations de transport des porteurs pour différents points de polarisation. On obtient une courbe I-V, ainsi qu'un profil en deux dimensions de la répartition des porteurs en fonction du courant dans la structure. On applique le critère modifié de l'équation 2.33 pour déterminer le courant nécessaire dans la structure pour que l'élévation du quasi-niveau de Fermi corresponde à la séparation en énergie entre la bande de conduction en  $L$  et  $\Gamma$ .

L'approche complète pour la détermination de la densité de courant de seuil est récapitulée sur la figure 2.14. On effectue la simulation, on définit la contrainte que l'on veut appliquer. Si en fonction du dopage, le germanium n'est pas dégénéré en  $\Gamma$ , on applique le critère complet d'inversion de population. Si le germanium est déjà dégénéré, on fait correspondre la densité de trous injectés à celle obtenue par le calcul extérieur pour déterminer le courant de seuil dans le cas de l'inversion de population avec la bande de trous légers.

L'avantage de cette approche est de pouvoir étudier le transport dans une structure complète. Avec les hypothèses adaptées, il est possible de contourner la limitation induite par le fait de ne pouvoir considérer qu'un seul type de bande. Cela permet d'étudier l'effet de la topologie des différents éléments, comme la position des contacts, l'épaisseur des couches, le dopage de la zone active ou des couches de barrière.

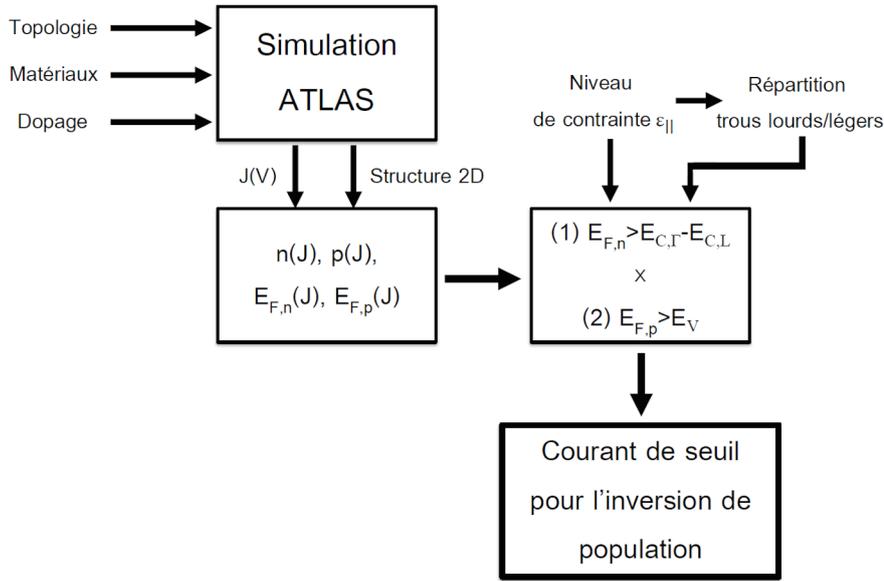


Fig. 2.14 : Déroulement de la démarche pour estimer le courant d'inversion de population dans le germanium

### 2.1.7.3 Application à une double hétérostructure

Comme on l'a présenté dans la partie du choix de la structure à étudier, la double hétérostructure offre la meilleure approche pour injecter efficacement les porteurs dans le germanium. On étudie une double hétérostructure de type SC1-p/Ge-n/SC2-n, où SC1 et SC2 correspondent aux matériaux choisis pour l'étude, à savoir le GaAs et le silicium.

Pour les simulations, on fait l'hypothèse que le transport électronique se fait dans les bandes de plus basse énergie. Le logiciel de simulation ne permet de gérer qu'un seul type de bande. Cette hypothèse implique que le transport à l'interface, par exemple entre le GaAs et le germanium, s'effectue par saut thermoélectronique aux discontinuités de bandes dans l'espace réel. Dans l'espace réciproque, l'origine et la destination des porteurs ne sont pas alignées sur les mêmes vallées ( $\Gamma$  pour le GaAs,  $L$  pour le Ge). Cela implique une sélection en vecteur d'onde de la population des porteurs pouvant passer l'interface, suivie d'une thermalisation des porteurs dans les vallées de plus basse énergie. Faute de connaissance dans la littérature de ce phénomène fin de transport, on fait l'hypothèse que le transport s'effectue de manière continue de  $\Gamma$  à  $L$  aux interfaces entre le germanium et le GaAs. On applique le même raisonnement pour une structure silicium/germanium. Par ailleurs, on ne prend pas en compte le passage des porteurs par effet tunnel à travers les discontinuités de bandes.

On décrit les alignements de bandes des systèmes Ge/GaAs, Ge/Si.

**2.1.7.3.1 Structure Ge/GaAs** Les principaux points à considérer pour cette structure sont :

- Interface de bonne qualité, car les paramètres de maille cristalline sont très proches

## 2.1. Modélisation du transport électronique dans des structures en germanium

- Hétérostructure de type I
- Substrat III-V, non compatible CMOS, adapté pour la réalisation d'un démonstrateur

**Discontinuité des bandes de l'interface Ge/GaAs** L'énergie de bande interdite du GaAs est égale à 1.42 eV. Dans le cas de la jonction hétérovalente Ge/GaAs (IV/III-V), la règle d'alignement des bandes par rapport à l'affinité électronique des deux semiconducteurs n'est pas adaptée. La discontinuité des bandes est induite par la présence d'états d'interface. Ces états créent des dipôles dont le potentiel réduit la discontinuité des bandes. Plusieurs méthodes théoriques ont été utilisées pour modéliser l'interface Ge/GaAs, en considérant une interface abrupte et sans défauts. Les valeurs théoriques sont répertoriées de 0.3 eV à 0.7 eV pour la discontinuité en bande de valence (CARDONA et al., 1987; FRANCIOSI et al., 1996; WALLE et al., 2003). Expérimentalement, il existe une grande dispersion des valeurs. En effet, la formation de cette hétérojonction est très dépendante des paramètres de dépôts qui vont influencer sur la qualité de l'interface, par exemple :

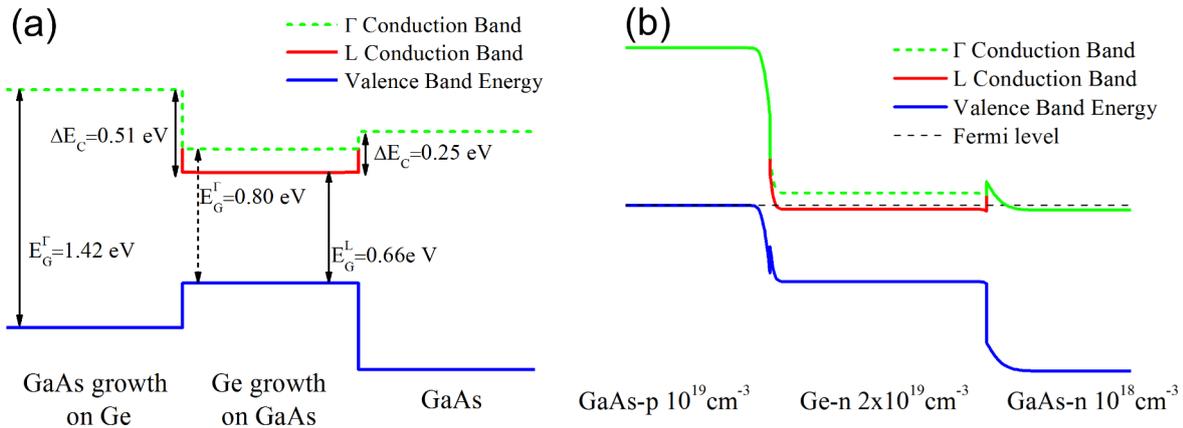
- Orientation cristalline du substrat
- Température de dépôt
- Reconstruction de surface
- Interdiffusion atomique à l'interface
- Présence de dipôles d'interface

La hauteur de barrière diffère pour une couche de germanium épitaxié sur GaAs, par rapport à une couche de GaAs épitaxié sur germanium. La croissance du Ge sur un substrat de GaAs (100) ou (111) est faite sur une alternance de plan atomique purement d'As ou de Ga, il n'y a pas de problème de polarité. Pour une couche de GaAs épitaxiée sur Ge, l'alternance de plan atomique formée de Ga ou d'As n'est pas forcément respectée. Ce phénomène provoque l'apparition de domaine d'antiphase. D'après (FRANCIOSI et al., 1996), et plus récemment (HUDAIT et al., 2012), les valeurs de discontinuité en bande de valence, selon l'ordre de croissance des couches et le type de substrat, sont :

- $\Delta E_V = 0.49 \pm 0.08$  eV pour Ge sur GaAs (110)
- $\Delta E_V = 0.54 \pm 0.14$  eV pour Ge sur GaAs (100)
- $\Delta E_V = 0.17 \pm 0.07$  eV pour GaAs sur Ge (100)

On présente sur la figure 2.15 (a) une double hétérostructure GaAs/Ge/GaAs avec les valeurs de discontinuités usuelles de la bibliographie. On a tracé le cas où la couche de Ge serait épitaxiée sur le GaAs, puis suivi de la couche de GaAs sur Ge. Les valeurs des discontinuités en bande de valence sont adaptées en fonction de l'ordre de l'épitaxie.

La double hétérostructure GaAs/Ge/GaAs est dite de type I. L'énergie de bande interdite du germanium est inférieure à celle du GaAs, et dans cette configuration la position en énergie de la bande de conduction du germanium est située en dessous de celle du GaAs. Cette structure est optimale pour l'injection électrique. La différence d'énergie potentielle à l'interface entre les deux matériaux permet de confiner les porteurs dans la couche de germanium. Par ailleurs, on note la possibilité d'exploiter la variation de la différence d'énergie selon l'ordre de l'épitaxie.



**Fig. 2.15 :** Diagramme de bande pour une double hétérojonction GaAs/Ge/GaAs (a) sans dopage (b) avec dopage *pnn*

Ainsi, en choisissant de faire croître la couche de type de *p* sur germanium, on obtient une discontinuité en bande de valence plus faible. On peut faciliter l'injection des trous dans le germanium, tout en augmentant le confinement des électrons.

Sur la figure 2.15 (b), est représenté la double hétérostructure GaAs-p/Ge-n/GaAs-n lorsqu'on applique le dopage pour chaque couche. La position du niveau de Fermi étant constante suivant l'épaisseur de la couche, il va se produire une redistribution de l'énergie de bande pour compenser l'introduction de charges dans le matériau. Le niveau de Fermi sera proche des bandes de conduction pour les couches dopées de type n. Pour la couche dopée de type p, la bande de valence se rapproche du niveau de Fermi. Le diagramme de bande est plus ramassé, il devient plus difficile d'apercevoir les discontinuités de bande.

On note que pour les niveaux de dopage utilisés, les semiconducteurs sont dégénérés. Il est donc nécessaire de faire appel à la résolution de l'équation de Fermi pour le calcul des équations de transport.

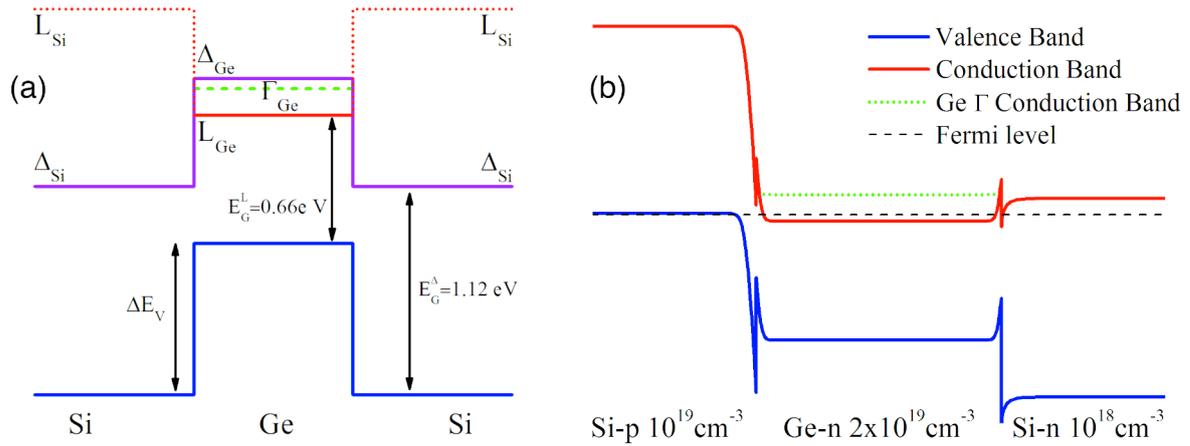
**2.1.7.3.2 Structure Ge/Si** On va étudier une double hétérostructure formée d'une couche de germanium encapsulée entre deux couches de silicium.

- Compatibilité CMOS
- Couche de germanium initialement déformée jusqu'à 0.25%, grâce à la différence de coefficient de dilatation thermique
- Difficulté d'épitaxie à cause de la différence importante du paramètre de maille
- Hétérostructure de type II

**Discontinuité des bandes de l'interface Ge/Si** Le paramètre de discontinuité de bande entre le germanium et le silicium est difficile à estimer. Pour avoir une interface non perturbée, il faut avoir recours à une croissance pseudomorphique. La différence de maille entre les deux matériaux étant très importante, elle ne peut se faire sans l'apparition d'une contrainte. L'épaisseur de la couche formée est d'ailleurs limitée à quelques nanomètres avant que la couche

## 2.1. Modélisation du transport électronique dans des structures en germanium

ne relaxe plastiquement. La contrainte va induire des effets de levée de dégénérescence, et modifier l'alignement relatif des différentes bandes. Il a été mesuré expérimentalement pour des couches pseudomorphiques de germanium sur silicium que la discontinuité en bande de valence est d'environ 0.8eV (COLOMBO et al., 1991 ; WALLE et al., 1986). Au contraire pour une couche pseudomorphique de silicium sur germanium, la hauteur de la discontinuité effective n'est plus que 0.3eV. Théoriquement, la valeur obtenue pour un système relaxé est située autour de 0.6eV (TEHERANI et al., 2012). On fixera pour la suite une hauteur de barrière de 0.55eV pour les simulations. On étudiera la variation du courant de seuil en fonction de la hauteur de barrière afin de quantifier son impact sur les propriétés de transport.



**Fig. 2.16** : Diagramme de bande pour une double hétérojonction Si/Ge/Si (a) non dopée (b) dopée de type *pnn*

La figure 2.16 (a) présente le diagramme de bande pour l'hétérostructure Si/Ge/Si. On fait apparaître les positions des bandes des différentes vallées, mais seules les bandes de plus basse énergie seront considérées pour les simulations du transport des porteurs. On note que la valeur importante de la discontinuité en bande de valence fait que la bande de conduction du germanium se retrouve à une position supérieure à celle du silicium. On est en présence d'une double hétérostructure de type II. Cette configuration n'est pas la plus adaptée à l'injection des porteurs dans le germanium. Les électrons doivent surmonter une énergie potentielle supplémentaire pour être injectés dans le germanium et d'autre part le confinement des électrons dans le germanium est nul.

L'application du dopage va permettre de résoudre ce point, comme on peut le voir sur la figure 2.16. La redistribution en énergie de la position des bandes relative au niveau de Fermi en fonction du dopage va permettre d'obtenir une pseudo-hétérostructure de type I. En effet, la bande de conduction du germanium et du silicium du côté *n* se retrouvent alignés, car le niveau de Fermi est séparé d'une valeur équivalente de la bande de conduction à cause du dopage très élevé. Du côté du silicium p, le niveau de Fermi est proche de la bande de valence. La remontée de la bande de conduction dans le silicium va pouvoir générer le confinement d'électrons dans le germanium. Dans le cas de double hétérostructure Si/Ge/Si, le dopage a un rôle très important pour obtenir une structure avec une injection efficace des porteurs dans le germanium.

### 2.1.8 Détermination des courants de seuils

On étudie le courant de seuil nécessaire pour obtenir l'inversion de population dans le germanium. Dans un premier temps, on étudie l'effet du dopage de la couche de germanium :

- Ge-n  $8 \times 10^{18} \text{cm}^{-3}$
- Ge-n  $2 \times 10^{19} \text{cm}^{-3}$
- Ge-n  $4 \times 10^{19} \text{cm}^{-3}$

Le germanium est dégénéré en bande de conduction dans la vallée  $L$  pour une valeur de dopage proche de la densité équivalente d'états en bande de conduction soit  $N_c = 1.05 \times 10^{19} \text{cm}^{-3}$  à température ambiante. Dans le cas de l'application à l'inversion de population, le dopage est bénéfique, car il augmente la position du niveau de Fermi dans la bande de conduction. Donc le nombre de porteurs nécessaire pour obtenir une élévation du niveau de Fermi jusqu'à la position de la bande de conduction en vallée  $\Gamma$  est réduit. Mais le dopage va influencer négativement sur les paramètres suivants :

- Dégradation de la mobilité des porteurs à cause de la diffusion par les impuretés dopantes
- Diminution du temps de vie des porteurs à cause de l'augmentation du taux de recombinaison SRH induit par les impuretés dopantes

Dans un premier temps, on ne prend pas en compte la topologie des contacts, ils seront distribués sur toute la structure. Cette simplification permet de ramener l'étude à une structure à une dimension suivant l'épaisseur de l'empilement des couches. Les contacts sont assumés ohmiques sans résistance de contact. Les épaisseurs des différentes couches sont fixées à 300 nm. Cette valeur est autour de l'épaisseur optimale pour confiner un mode optique dans le germanium.

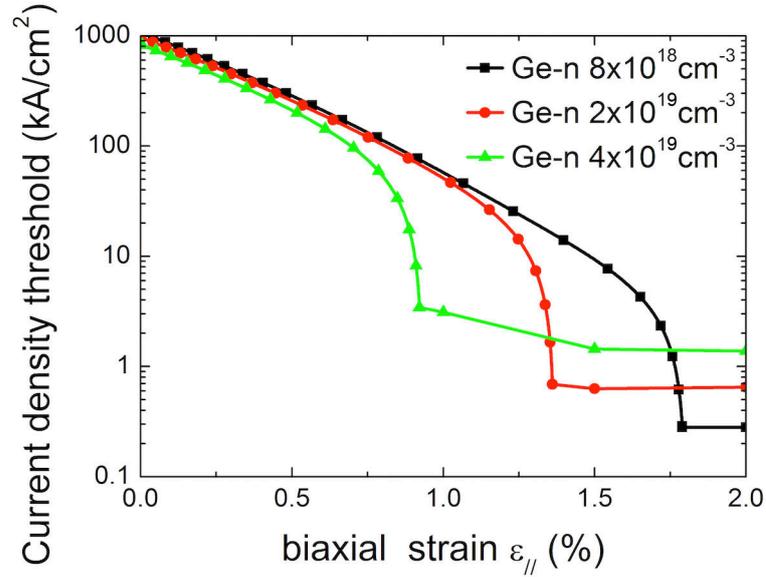
On applique la démarche pour le calcul du courant de seuil pour obtenir l'inversion de population décrite à la page 40. Le point de référence pour l'extraction du courant de seuil est choisi au centre de la couche de germanium d'une épaisseur de 300 nm. C'est un critère fort qui permet de vérifier que l'injection des porteurs est bien uniforme dans la couche. On présente les résultats pour un dopage optimal des couches de barrières.

Les résultats des simulations pour la double hétérostructure GaAs-p/Ge-n/GaAs-n sont présentés sur la figure 2.17. La densité de courant de seuil pour obtenir l'inversion de population est tracée en fonction de la déformation biaxiale appliquée.

Dans le cas où la contrainte est nulle, on voit qu'en fonction du dopage du germanium, le courant de seuil reste dans le même ordre de grandeur. Il est légèrement moins élevé quand le dopage augmente. À cause des fortes densités de porteurs à injecter pour saturer la vallée  $L$  obtenir l'inversion de population en  $\Gamma$ , les densités de courant de seuil restent de l'ordre de 1000  $\text{kA/cm}^2$ .

Au fur et à mesure que la contrainte augmente dans la couche de germanium, la valeur de la séparation en énergie entre la bande  $\Gamma$  et  $L$  est réduite. Par conséquent, le nombre de porteurs nécessaire à injecter est moins important, et donc le courant de seuil est réduit. On diminue d'un ordre de grandeur la densité de courant, en appliquant une contrainte de 0.5%.

## 2.1. Modélisation du transport électronique dans des structures en germanium

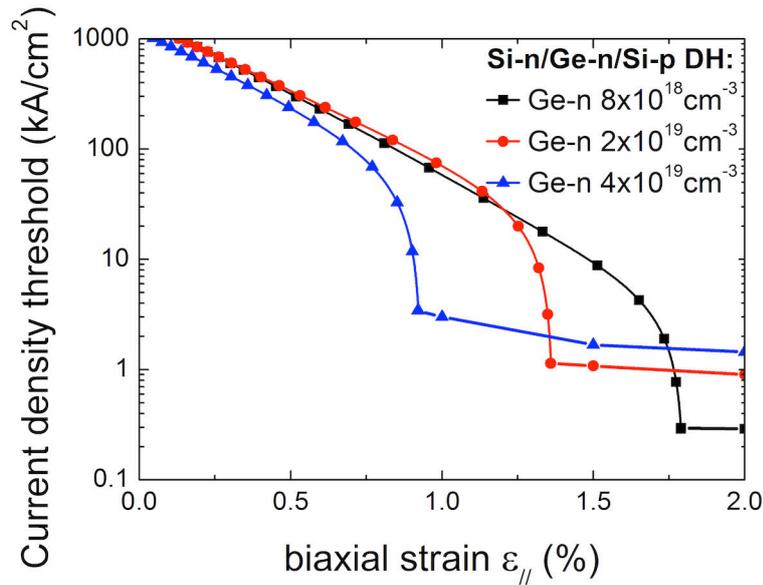


**Fig. 2.17 :** Densité de courant de seuil pour obtenir la population d'inversion en fonction de la contrainte pour la structure GaAs-p/Ge-n/GaAs-n

Le point important de cette figure est l'apparition d'une discontinuité en fonction de la valeur de la contrainte. Cette discontinuité traduit le changement de configuration lorsque le germanium devient dégénéré en bande interdite directe comme on a pu le voir sur la figure 2.11. Au-delà de ces valeurs de contrainte, la bande de conduction en  $\Gamma$  est déjà dégénérée. Il n'est plus nécessaire de se préoccuper de l'injection des électrons pour obtenir l'inversion de population, mais seulement des trous pour respecter la seconde partie du critère. Plus la couche de germanium est dopée, plus cette discontinuité se manifeste rapidement en fonction de la déformation. La réduction de courant est très importante au-delà de cette discontinuité. La quantité de trous à injecter pour que la bande de valence devienne dégénérée est d'environ deux ordres de grandeur inférieurs à celle pour remplir la bande de conduction en  $L$  jusqu'à la vallée  $\Gamma$ . Le courant est réduit de deux ordres de grandeur à comparer au cas où le germanium est relaxé. Ainsi dans cette zone de fonctionnement, l'inversion de population est obtenue pour des seuils en densité de courant inférieurs à 10 kA/cm<sup>2</sup>. Si la valeur du dopage de la couche de germanium est diminuée, la densité de courant nécessaire sera réduite. En effet, le dopage de type  $n$  n'est pas favorable au transport des trous dans le germanium. Ainsi, il est nécessaire d'injecter davantage de trous pour surmonter les effets de recombinaisons et de dégradation de mobilité lorsque le dopage augmente.

Sur la figure 2.18 sont représentés les résultats obtenus pour la structure Si-p/Ge-n/Si-n. On obtient sensiblement les mêmes résultats que pour le système à base de GaAs. En effet, l'apparition de la discontinuité est intrinsèque au germanium en fonction de la contrainte et du dopage. Les valeurs de courant sont légèrement plus élevées comparées à la double hétérostructure en GaAs, car la configuration du silicium est moins favorable pour injecter les porteurs.

Cette méthode n'est pas un calcul de gain modal, car on ne prend pas en compte les pertes optiques. Mais l'information obtenue est importante, car l'inversion de population est une condition à remplir pour obtenir du gain dans le germanium. Le critère donne la borne inférieure



**Fig. 2.18** : Densité de courant de seuil pour obtenir la population d'inversion en fonction de la contrainte pour la structure Si-p/Ge-n/Si-n

de la densité de courant nécessaire pour obtenir l'effet laser. On voit l'importance de combiner la contrainte au dopage. Il est plus difficile d'obtenir une structure fortement contrainte ou fortement dopée, alors qu'une combinaison des deux est plus facilement envisageable.

### 2.1.8.1 Effet du dopage des barrières

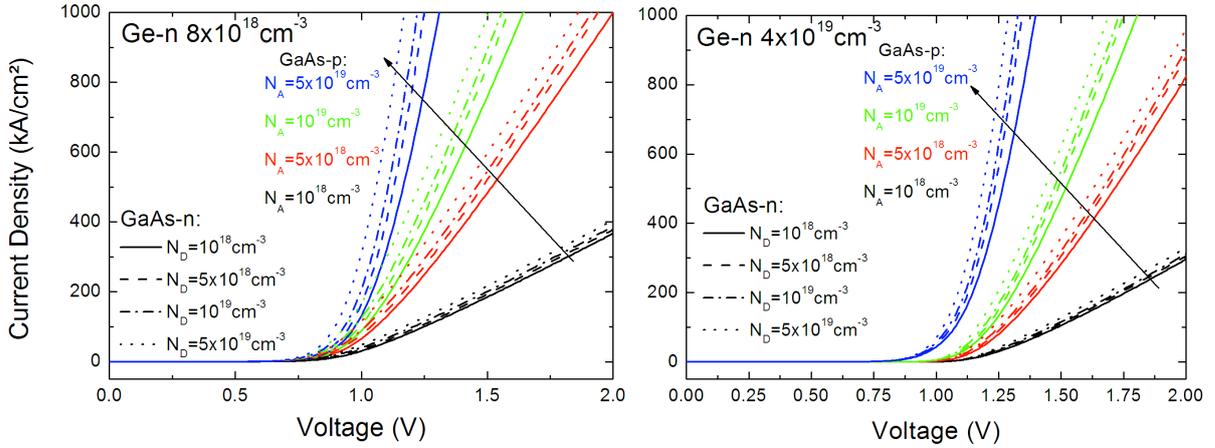
On étudie maintenant l'effet du dopage des couches de barrière sur l'injection des porteurs dans le germanium. On balaye les densités de dopage allant de  $10^{18}$  à  $10^{20} \text{ cm}^{-3}$  pour les couches  $n$  et les couches  $p$  respectivement, afin de déterminer la meilleure combinaison en fonction du niveau de dopage du germanium.

**2.1.8.1.1 Barrières GaAs** Les courbes J-V pour les différents jeux de valeurs de dopage pour la double hétérostructure GaAs-p/Ge-n/GaAs-n sont représentés sur la figure 2.19.

À partir d'un niveau de dopage de  $10^{18} \text{ cm}^{-3}$ , le GaAs de type  $n$  est dégénéré. Au-delà de ce niveau de dopage, l'augmentation de la densité d'impureté dopante du GaAs-n n'est pas significative sur les propriétés d'injection dans le germanium. Elle va seulement modifier la conductivité de la structure.

La jonction p-n pilote les caractéristiques électriques de la double hétérostructure. Le niveau de dopage de la couche de GaAs-p par rapport au dopage de la couche de germanium a une forte influence. La différence de dopage entre le germanium et la couche de GaAs-p va modifier la tension de diffusion pour l'alignement du niveau de Fermi à l'équilibre. Quand la dissymétrie de dopage est trop importante, la zone de déplétion va s'étendre dans le semiconducteur le moins dopé. Si la zone de déplétion se situe majoritairement dans la couche de GaAs-p, il est nécessaire d'appliquer une tension plus élevée pour repeupler cette zone en porteurs, et pouvoir injecter

## 2.1. Modélisation du transport électronique dans des structures en germanium



**Fig. 2.19 :** Courbe  $J(V)$  pour différents niveaux de dopage de la couche de germanium et des couches de barrières

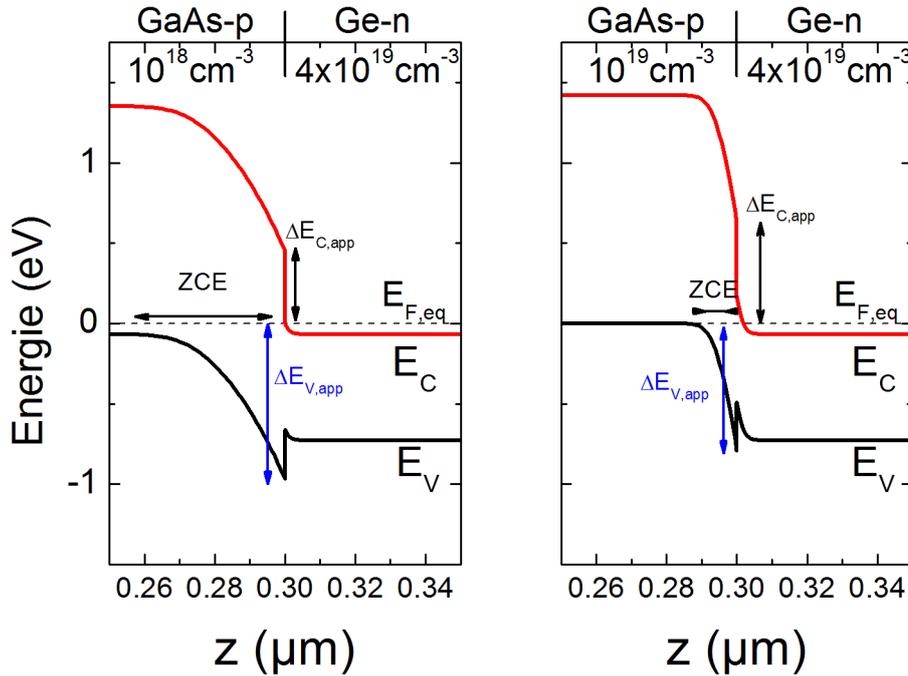
les trous vers le germanium. Cela va augmenter le seuil en tension de la diode. On peut le voir sur la figure 2.19 dans le cas du germanium dopé à  $4 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ . La position du seuil dépend du niveau de dopage du GaAs-p, alors que dans le cas d'une couche de germanium moins dopée on n'observe pas de variations du seuil.

Dans le cas de barrière en GaAs, le dopage n'influe pas sur les propriétés de confinement aux interfaces, il n'y a pas de pertes supplémentaires des porteurs lors de l'injection dans le germanium au travers de l'hétérostructure. Ainsi, les résultats sont identiques lorsqu'on compare les différentes structures à courant équivalent pour un même dopage de la couche de germanium. Le dopage des couches de barrière va influencer sur l'efficacité en tension pour obtenir l'inversion de population. Ainsi plus les couches sont dopées, plus la tension à appliquer sur la structure sera réduite. Cela permet de limiter les chutes de tension dans les résistances dans le cas d'un dispositif réel, et donc de limiter l'échauffement. Il faut aussi garder à l'esprit qu'un dopage trop élevé peut avoir un effet néfaste sur les propriétés optiques de la structure.

Dans le cas de double hétérostructure GaAs/Ge/GaAs, il faut considérer un dopage de  $10^{18} \text{ cm}^{-3}$  pour la couche n, et un dopage au moins équivalent à celui de la couche de germanium pour la couche de GaAs de type p.

**2.1.8.1.2 Barrières silicium** Comme expliqué dans la description du système de la structure Si/Ge, la double hétérostructure formée est de type II. Le dopage permet d'obtenir une pseudo-hétérostructure de type I. Selon les niveaux de dopage considérés, les propriétés d'injection vont être modifiées. La discontinuité de barrière apparente pour les porteurs va être modulée par le niveau de dopage appliqué dans les couches encapsulantes.

Comme pour la structure à base de GaAs, la couche de Si-n a un effet négligeable sur les performances lorsque le dopage est supérieur à  $10^{18} \text{ cm}^{-3}$ . Quand on compare à courant équivalent les différentes structures, le dopage de la couche p a un impact important sur les propriétés du dispositif. En effet, plus la couche p est dopée, plus l'injection des trous sera efficace, car la hauteur apparente de la discontinuité est réduite. Le confinement des électrons sera aussi amélioré, car la bande de conduction sera située plus haute en énergie. Il peut y avoir une réduction



**Fig. 2.20 :** Comparaison de la structure de bande pour l'interface GaAs-p/Ge-n avec différentes valeurs de dopage de la couche de GaAs-p

d'un ordre de grandeur sur le courant de seuil pour obtenir l'inversion de population en passant d'une couche dopée de  $10^{18}$  à  $5 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ .

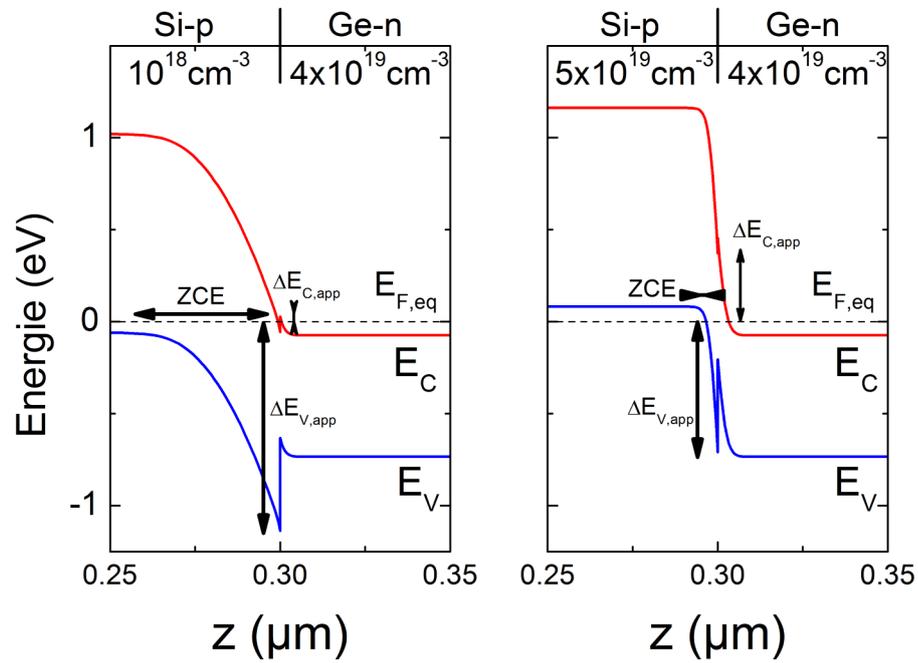
Pour le silicium, un dopage de la couche  $n$  entre  $10^{18} \text{ cm}^{-3}$  et  $10^{19} \text{ cm}^{-3}$  doit être envisagé. L'augmentation du dopage de la couche  $n$  peut être avantageuse pour permettre d'obtenir une meilleure efficacité à tension équivalente. Concernant le dopage de type  $p$ , il doit être au minimum de  $5 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ . Il n'est pas aberrant de considérer un dopage allant jusqu'à une valeur  $10^{20} \text{ cm}^{-3}$  pour améliorer les performances de la structure.

### 2.1.8.2 Effet de la hauteur de barrière

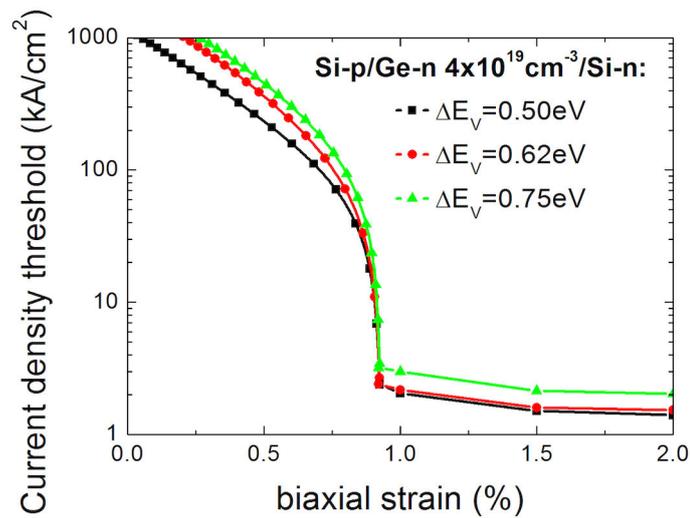
La variation de la hauteur de barrière peut provenir des propriétés de dépôt, mais aussi de l'effet de contrainte appliquée. On s'intéresse au cas de la structure de silicium/germanium. On fait varier la hauteur de barrière de la discontinuité de bande de valence de 0.5 à 0.75 eV, afin d'avoir une idée de son impact sur l'injection des porteurs. Dans le cas du silicium, l'augmentation de la barrière va avoir un double effet négatif, la structure va être moins efficace pour injecter les deux types de porteurs et pour confiner les électrons dans le germanium.

Les résultats sont présentés sur la figure 2.22. L'augmentation de la hauteur de barrière de 0.5 à 0.75 eV, va multiplier la densité de courant de seuil d'un facteur 2.

## 2.1. Modélisation du transport électronique dans des structures en germanium



**Fig. 2.21 :** Comparaison de la structure de bande pour l'interface Si-p/Ge-n avec différentes valeurs de dopage de la couche de Si-p



**Fig. 2.22 :** Courant de seuil pour l'inversion de population en fonction de la contrainte pour différentes hauteurs de barrière

### 2.1.9 Conclusion

On a utilisé les outils de simulation de transport pour dimensionner le courant de seuil d'inversion de population dans des structures en germanium. On a pu développer une approche qui permet de s'affranchir de la limitation des simulations du transport dans l'espace réel pour pouvoir considérer l'effet de la contrainte sur le germanium. Les différentes hétérostructures ont pu être étudiées, pour optimiser les niveaux de dopage des dispositifs. Le courant d'inversion de population donne la borne inférieure pour obtenir l'effet laser dans le germanium, on peut mettre en avant l'importance de combiner le dopage et la contrainte pour obtenir une structure réaliste fonctionnant sous une densité de courant réduite de l'ordre de 10 kA/cm<sup>2</sup>. Le calcul est effectué pour une inversion totale de population dans le germanium. On n'a pas considéré l'extension des porteurs autour du niveau de Fermi à température ambiante. Les résultats pour les doubles hétérostructures à base de GaAs ou de silicium sont similaires. Ainsi les résultats obtenus par un démonstrateur à base de substrat III-V pourront être facilement transférés sur un système à base de silicium.

On référence deux approches qui permettent de calculer le courant de seuil pour obtenir le laser germanium dans la littérature. La première approche développée en collaboration entre l'équipe de recherche basée à l'université de Stanford et la société APIC (DUTT et al., 2012, 2013; SUKHDEO et al., 2014a), convertit la quantité de porteurs injectés pour obtenir du gain modal dans le germanium en densité de courant à partir de la formule suivante :

$$J_n = q (R_{SRH}(n) + R_{Rad}(n) + R_{Aug}(n)) \quad (2.34)$$

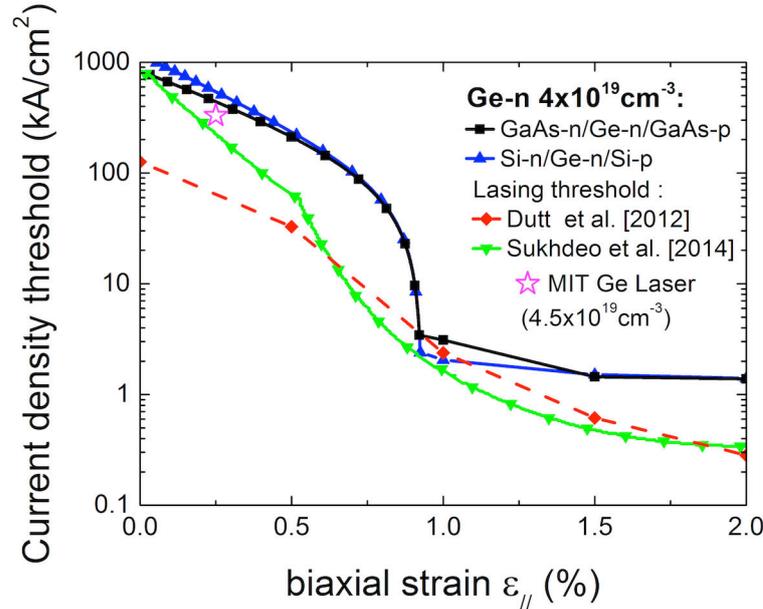
Les résultats sont comparés sur la figure 2.23 pour un dopage de la couche de germanium à  $4 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ . Une discontinuité qui prend en compte le passage recombinaisons en trous lourds à des recombinaisons en trous légers apparaît pour des niveaux de déformation de 0.5 %. Par rapport aux calculs que l'on a réalisés, le courant de seuil pour obtenir l'effet laser dans le germanium est beaucoup moins élevé. En effet, cette méthode ne prend pas en compte l'injection des porteurs au centre d'une couche de germanium au travers d'une double hétérostructure.

La seconde approche que l'on peut trouver dans la littérature se base sur la formule du courant de seuil dans le cas d'un laser simple, qui est utilisé par l'équipe de recherche du MIT (CAI et al., 2013) :

$$J_{th} = \frac{qn_0h}{\tau_r} + \frac{\alpha_i}{\Gamma A} + \frac{1}{2\Gamma L} \ln \left( \frac{1}{R_1 R_2} \right) \quad (2.35)$$

Où  $n_0$  est la quantité de porteurs injectés pour obtenir la transparence,  $\tau_r$  le temps de vie le plus court des porteurs minoritaires,  $\alpha_i$  les pertes optiques par porteurs,  $h$  l'épaisseur de la zone active, et  $A = a\tau_r/qt$ , et  $\Gamma$  le facteur de confinement optique. Par cette formule, un courant de seuil de 0.5 kA/cm<sup>2</sup> est annoncé grâce à des paramètres de design optimisés pour réduire les pertes optiques. Seulement le temps de vie  $\tau_r$  est choisi à 100 ns pour des couches dopées à  $4.5 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ . Sans même rediscuter des valeurs d'injection, et en effectuant le calcul avec un temps de vie plus raisonnable de 5 ns pour ces valeurs de dopage, le courant de seuil est obtenu à une valeur  $> 10 \text{ kA/cm}^2$ .

## 2.1. Modélisation du transport électronique dans des structures en germanium



**Fig. 2.23 :** Comparaison des calculs de densité de courant de seuil pour le laser germanium. La courbe verte est extraite de (SUKHDEO et al., 2014a), la courbe rouge est extraite de (DUTT et al., 2012), le point de fonctionnement du premier laser est extrait de (CAMACHO-AGUILERA et al., 2012)

La première démonstration du laser germanium a été réalisée sous une densité de courant d'injection de  $330 \text{ kA/cm}^2$  (CAMACHO-AGUILERA et al., 2012). Pour cette réalisation, la couche de germanium est d'une épaisseur de 100 nm avec un dopage de  $4.5 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ , et une contrainte résiduelle de 0.25%. Le modèle que l'on a développé, annonce une valeur d'inversion de population de  $500 \text{ kA/cm}^2$  dans le cas d'une couche de 300 nm de germanium pour une contrainte équivalente, et un dopage légèrement moins important. Cela montre que l'approche utilisée est bien en accord avec le résultat obtenu.

Pour obtenir un fonctionnement à bas niveau de courant, il faut combiner dopage et contrainte dans la couche de germanium. Un dopage élevé permet de limiter la déformation de la couche de germanium à appliquer. Si on veut réduire la valeur de dopage, il faut donc augmenter la contrainte. En contrepartie, la longueur d'émission du laser sera décalée vers les plus grandes longueurs d'onde. Il faut pouvoir appliquer une déformation de **0.9%** si le dopage de la couche de germanium est  $4 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ . Pour un dopage moins élevé de  $2 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ , la déformation de la couche de germanium doit être de **1.30%**.

Seulement un dopage élevé peut induire des effets nuisibles pour obtenir du gain dans le germanium. L'ajout supplémentaire de porteurs ne va pas participer à l'inversion de population, mais risque d'augmenter les taux des recombinaisons non radiatives (Auger, SRH) et de générer de l'absorption optique par des porteurs libres. Il faut privilégier la contrainte assez importante, en contrepartie de la modification des propriétés d'émission vers les plus grandes longueurs d'onde.

Dans la partie suivante, on s'intéressera aux différentes approches pour transférer une contrainte dans le germanium à travers une double hétérostructure fonctionnant sous injection électrique.

### 2.2 Modélisation du transfert de contrainte dans le germanium

On s'intéresse à l'application d'une contrainte en tension dans des dispositifs à base de germanium pour des applications en photonique. L'effet de la contrainte est essentiel pour réduire le courant de seuil de population d'inversion dans le germanium. Une déformation biaxiale d'une valeur autour de 2 % serait idéale pour faire passer le germanium en configuration de semiconducteur à bande interdite directe, mais dans la pratique ce niveau de déformation est difficilement atteignable. Dans un premier temps, on effectuera un état de l'art des méthodes permettant de transférer la contrainte dans le germanium. Puis, on décrira les différentes cavités optiques afin de visualiser le design des futurs dispositifs sur lequel on peut appliquer une ingénierie de contrainte. On proposera ensuite quatre solutions pour la réalisation du laser germanium, à partir des méthodes de transfert de contrainte et des cavités optiques sélectionnées, le tout fonctionnant sous injection électrique. Le transfert de contrainte sera dimensionné dans ces structures à l'aide d'outils de modélisation pour faire un lien avec les performances d'injection électrique.

#### 2.2.1 État de l'art des dispositifs contraints en germanium sous injection électrique

On peut différencier deux types d'approches. L'approche in situ consiste à adapter les paramètres de l'épitaxie du germanium pour obtenir une couche contrainte durant sa croissance. L'approche externe consiste à déformer la couche de germanium par une méthode de microfabrication ultérieure à sa croissance.

##### 2.2.1.1 Approche épitaxiale

###### Croissance pseudomorphique

Une croissance pseudomorphique a lieu quand la couche épitaxiée conserve le paramètre de maille cristalline du substrat. Cette croissance est maintenue jusqu'à ce que l'épaisseur de la couche devienne trop importante et que la couche relaxe. Il y a un compromis entre l'épaisseur de la couche et la contrainte transférée. Pour obtenir une couche avec une contrainte en tension, il faut que sa croissance s'effectue sur un substrat avec un paramètre de maille plus grand. Cette approche permet d'obtenir une contrainte biaxiale très importante, car la couche est étirée dans le plan de croissance. Ci-dessous sont rapportés deux résultats de la littérature :

- InGaAs : 0.75% pour une couche de 150 nm d'épaisseur sur un substrat avec 13% d'In (KERSAUSON et al., 2013)
- GeSn : 1.4% pour une couche de 70 nm d'épaisseur (WIRTHS et al., 2014)

Cette technique est intéressante pour obtenir des couches de germanium avec une contrainte biaxiale en tension importante. Mais elle est limitée par l'épaisseur critique de la couche de germanium avant relaxation, qui ne permet pas d'obtenir un confinement optique adéquat. Il faut aussi considérer la problématique de stabilité du système qui ne possède pas un budget thermique important, si les couches sont dans un état métastable.

### Effet bilame

Elle exploite la différence de coefficient de dilatation thermique entre deux matériaux. La croissance de la couche de germanium sur un substrat de silicium est effectuée à haute température (LUONG et al., 2013; SCHMID et al., 2014; SUN et al., 2009). Lors du refroidissement de l'échantillon à température ambiante, le germanium va vouloir se contracter davantage par rapport au silicium. Pour compenser la différence d'allongement par rapport au substrat en silicium, la couche de germanium va rester en tension. Grâce à cette technique, la valeur de la déformation biaxiale en tension dans le germanium peut atteindre 0.25 % pour des épaisseurs importantes ( $> 500$  nm).

Cette approche est utilisée pour la fabrication de diode électroluminescente à base de germanium sur silicium. C'est d'ailleurs cette stratégie qui a permis la démonstration du premier laser germanium sous pompage optique (LIU et al., 2010) et sous pompage électrique (CAMACHO-AGUILERA et al., 2012).

#### 2.2.1.2 Transfert de contrainte par techniques de microfabrication

##### Structuration de la couche de germanium en membrane

Cette approche consiste à libérer la couche de germanium du substrat et à venir contraindre la membrane formée. On peut référencer plusieurs approches :

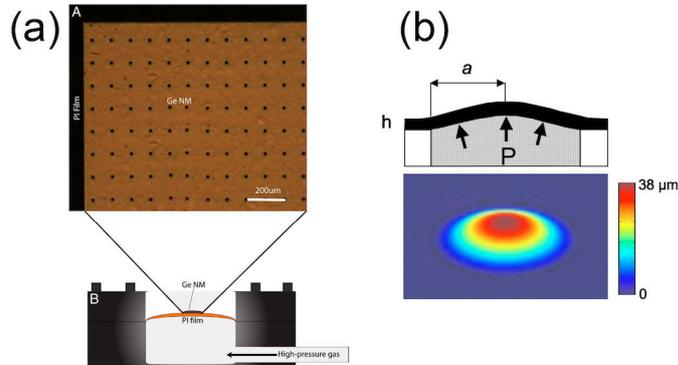
- Déplacement sous pointes
- Déplacement par pression gazeuse ou fluide
- Structuration en fil contraint

Les approches de déformation par déplacement mécanique de la membrane nécessitent une préparation lourde, car il est nécessaire d'effectuer une gravure à travers le substrat en face arrière. Deux exemples sont représentés sur la figure 2.24. Ces techniques ont permis d'étudier les propriétés de photoluminescence du germanium contraint, la plupart d'entre elles ne sont pas applicables pour obtenir une intégration de dispositif dans une puce photonique (EL KURDI et al., 2010b; SANCHEZ-PEREZ et al., 2011).

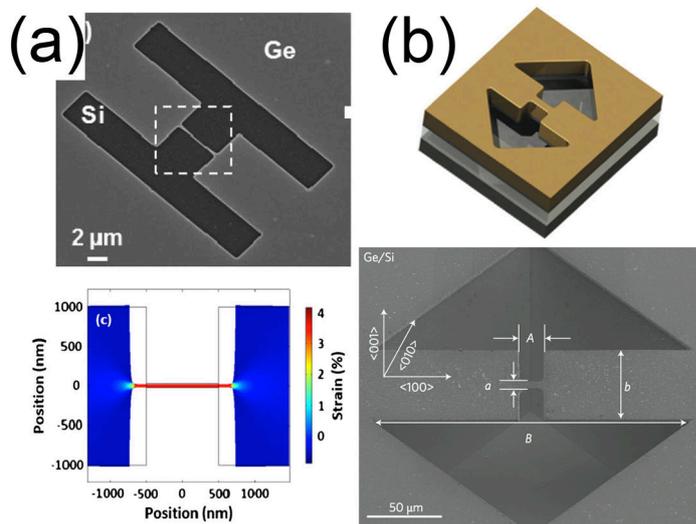
La structuration en fil suspendu d'une couche de germanium contrainte initialement par la différence de coefficient de dilatation thermique est illustrée sur la figure 2.25. Elle consiste à redistribuer la contrainte initiale du germanium, pour la concentrer dans la structure en fil suspendu. Cette technique permet d'atteindre des niveaux records de déformation uniaxiale dans le germanium (SUESS et al., 2013; SUKHDEO et al., 2014b). Mais les dimensions des dispositifs sont difficilement adaptables à des composants photoniques pour la réalisation de cavités optiques.

##### Transfert de contrainte par un film de nitrure de silicium (SiN)

Il est possible d'utiliser une couche de nitrure de silicium (SiN) déposée par la technique de dépôt chimique en phase vapeur assisté par plasma (PECVD) pour transférer une contrainte en tension dans le germanium (CAPELLINI et al., 2013; GHRIB et al., 2012). Cette méthode est un procédé classique de la microélectronique. Elle est par exemple utilisée pour contraindre



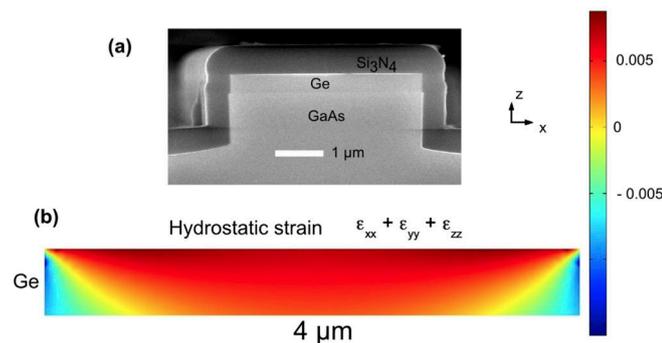
**Fig. 2.24 :** Schémas de dispositifs de déformation de membranes par l'application d'un fluide sous pression (a) par un gaz sur des nano-îlots de germanium (SANCHEZ-PEREZ et al., 2011) (b) par un flux d'eau sur une membrane épaisse de germanium (EL KURDI et al., 2010b)



**Fig. 2.25 :** Structure en fil suspendu permettant l'exaltation de la contrainte résiduelle du germanium (a) figure issue de (SUKHDEO et al., 2014b) (b) figure issue de (SUESS et al., 2013)

## 2.2. Modélisation du transfert de contrainte dans le germanium

les canaux des transistors CMOS dans le but d'augmenter la mobilité des porteurs. Selon les paramètres de dépôt, le SiN va emmagasiner une énergie mécanique qui va se relaxer. Lors de son retour à l'équilibre, la contrainte mécanique contenue dans la couche de SiN va se transférer. Si la couche de SiN est initialement en compression, alors elle va vouloir se dilater et va contraindre le support sur lequel elle est déposée en tension. Cette approche présente un fort intérêt, car elle est à la fois compatible avec les procédés de fabrication CMOS et peut s'appliquer facilement à une structure pour des applications optiques. Concernant les propriétés optiques du nitrure de silicium, celui-ci a l'avantage d'être transparent dans l'infrarouge. Il est donc compatible avec la longueur d'onde d'émission du germanium.



**Fig. 2.26** : Guide d'onde en germanium sur GaAs encapsulé par une couche de SiN contrainte, figure issue de (GHRIB et al., 2012)

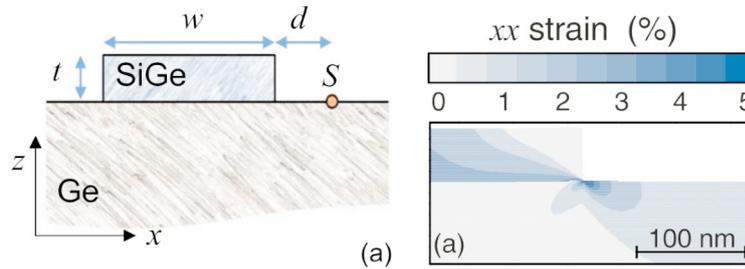
### Transfert de contrainte par hétéroépitaxie de SiGe sur germanium

On peut utiliser l'hétéroépitaxie d'une couche de SiGe sur germanium pour transférer une contrainte. La couche de SiGe sera contrainte en tension. Si l'on définit des îlots dans cette couche par une technique de microfabrication, ils seront libres de se relaxer élastiquement et pourront induire un transfert de contrainte dans les zones libres du germanium. Plus la concentration en silicium de l'alliage sera importante, plus la couche de SiGe aura une tension importante, au détriment de la réduction de l'épaisseur critique avant la relaxation par des effets plastiques. Cette technique permet de contraindre fortement le germanium, mais de manière très localisée. L'ordre de grandeur de l'extension de la contrainte est proche de l'épaisseur de la couche de SiGe épitaxiée. Un exemple du principe de cette technique est montré sur la figure 2.27, il n'existe pas à ce jour de réalisation expérimentale de cette technique dans la littérature.

#### 2.2.1.3 Bilan

Parmi les différentes approches pour obtenir une contrainte en tension dans le germanium, on va s'intéresser à trois approches qui sont compatibles avec les procédés de fabrication CMOS :

- La contrainte par dépôt d'un film de SiN initialement contraint en compression
- La contrainte par hétéroépitaxie et structuration d'une couche de SiGe
- La contrainte par différence de coefficient de dilatation thermique pour une croissance de germanium sur silicium



**Fig. 2.27** : Principe de la technique de transfert de contrainte par hétéroépitaxie et structuration de couche SiGe sur germanium, figures issues de (SCOPECE et al., 2014)

Ces trois méthodes sont complémentaires, et peuvent se combiner pour amplifier le transfert de contrainte dans le germanium. Ces techniques peuvent se mettre en oeuvre sans altérer le design de la structure sur laquelle elles sont appliquées. Dans le cas présent, on souhaite les employer pour des structures possédant des cavités optiques.

### 2.2.2 Choix de la structure - présentation des cavités optiques

Un laser à semiconducteur est composé d'une zone active qui est le milieu à gain et d'une cavité optique résonnante. La cavité optique joue le rôle de contre-réaction pour obtenir l'effet laser dans un milieu à gain. Elle doit être dimensionnée pour pouvoir confiner la lumière. Il est couramment utilisé quatre types de cavités optiques pour obtenir un laser à base de semiconducteur :

- **Fabry-Pérot** : guide d'onde planaire rectiligne composé de deux miroirs alignés aux extrémités. C'est la structure la plus simple à réaliser, car les facettes peuvent s'obtenir en clivant le semiconducteur.
- **Cavité en anneau** : guide d'onde rebouclant sur lui-même. La lumière circule comme si elle était dans un circuit. Cette configuration permet d'éliminer les facettes, mais elle nécessite le couplage optique avec un guide d'onde pour extraire la lumière émise.
- **Cavité en microdisque** : il s'agit d'un résonateur optique circulaire. La lumière se propage en suivant la périphérie du disque. Elle permet une intégration compacte, avec un seuil laser abaissé par rapport à un guide d'onde Fabry-Pérot, car elle possède moins de mode de résonance.
- **Cavité à miroir de Bragg** : Il s'agit d'une cavité en guide d'onde sur lequel est ajouté un miroir de Bragg à chaque facette. Ces cavités possèdent une meilleure efficacité, et un mode optique unique peut être obtenu. Elle nécessite le dimensionnement d'un réseau de diffraction, qui permet d'effectuer une contre-réaction sur la lumière émise en modulant l'indice complexe de diffraction optique du guide d'onde. Elles sont adaptées à des lasers où les propriétés d'émission sont très bien maîtrisées.

On sélectionne les cavités Fabry-Pérot en guide d'onde et microdisque pour la suite de l'étude. Elles offrent des propriétés complémentaires, notamment sur l'application de la contrainte.

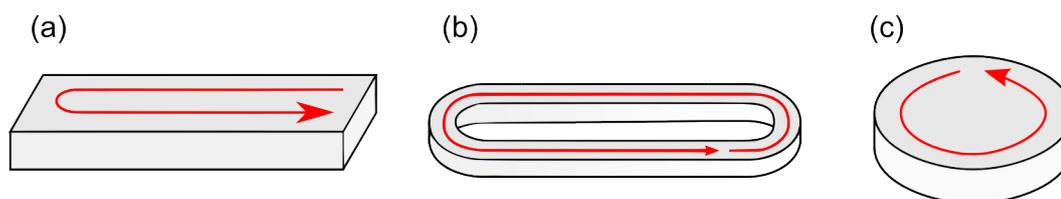


Fig. 2.28 : Schéma des différentes cavités laser (a) Fabry-Pérot (b) en anneau (c) en microdisque

### 2.2.3 Solutions proposées pour la réalisation de structures contraintes

L'objectif de cette partie est de démontrer la possibilité d'obtenir des structures contraintes opérant sous injection électrique. Les différents points que doit respecter le futur dispositif pour obtenir un laser en germanium sont :

- La couche de germanium, qui forme la zone active, doit être dopée de type  $n$  et contrainte en tension.
- La zone active doit être située dans une cavité optique pour obtenir l'amplification de la lumière
- Le dispositif doit pouvoir fonctionner sous injection électrique.
- L'injection électrique doit être compatible avec le transfert de contrainte.
- La réalisation du dispositif doit être compatible avec les procédés de fabrication de la plateforme CMOS pour envisager une intégration à grande échelle

En respectant les obligations pour obtenir un laser germanium, on réfléchit à différents concepts de structure permettant d'obtenir le transfert de contrainte sur une cavité optique compatible avec l'injection électrique. Après avoir présenté les différentes approches retenues, on va s'intéresser au procédé de fabrication pour la réalisation des structures. Puis on discutera de l'efficacité du transfert de contraintes dans cette structure à l'aide de modélisation de déformation mécanique.

On propose quatre approches d'intégration pour réaliser le laser germanium avec une cavité optique en guide d'onde :

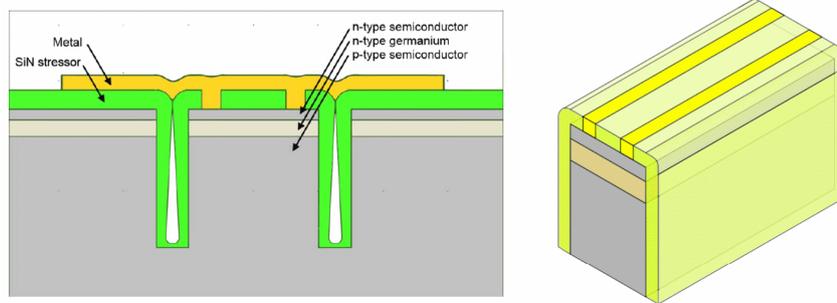
- Laser germanium à injection verticale à base de contrainte planaire via une couche de SiN
- Laser germanium à injection verticale sur pied, à base de contrainte planaire via une couche de SiN et de la libération partielle de la couche de germanium
- Laser germanium à injection latérale à base de contrainte planaire via une couche de SiN
- Laser germanium à injection latérale à base de contrainte utilisant des épitaxies latérales de SiGe contraint

Les cavités optiques à injection verticale, en guide d'onde et en microdisque utilisent une contrainte transférée par une couche de SiN. Le principe des procédés de fabrication est identique, seul le type de symétrie est différent pour ces structures. Le passage d'une symétrie plan à une symétrie de rotation impose un traitement différent pour la modélisation du transfert de contrainte.

Les structures à injection latérale seront ensuite traitées séparément.

### 2.2.3.1 Approche contrainte planaire par SiN et injection verticale

#### Laser germanium à injection verticale à base de contrainte planaire via une couche de SiN



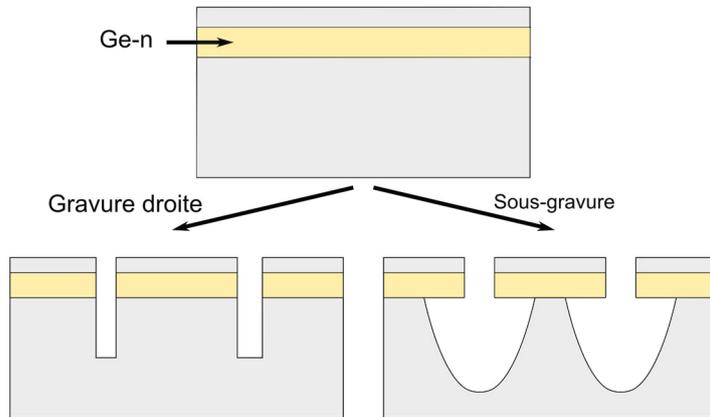
**Fig. 2.29 :** Vue en coupe et vue isométrique du dispositif à injection verticale à base de contrainte planaire via une couche de SiN

La première approche consiste à utiliser une cavité Fabry-Pérot sur un guide d'onde contraint en tension. La lumière est confinée grâce à l'interface air/SiN/germanium. La structure est formée à partir d'une couche contenant la zone active de germanium dopé de type  $n$ , encapsulé entre deux semiconducteurs de type  $n$  et  $p$  respectivement afin de former une double hétérostructure. À partir de cette couche, il est défini un ruban de matière qui permet de former le guide d'onde. Dans le cas d'une cavité en microdisque, il faut définir un disque de matière. Ce guide d'onde est mis sous contrainte par le dépôt d'une couche de SiN. La couche inférieure étant dopée, le contact métallique peut être reporté dans une zone proche du guide d'onde. On peut déposer un ruban de métal parallèle au guide dans une zone gravée proche d'une dizaine de microns pour réaliser le contact de la couche inférieure. L'injection électrique se fait via la formation de contacts linéiques sur les extrémités du guide. Au préalable, il est nécessaire d'ouvrir la couche de SiN afin de déposer le métal. La surface est quasi plane, car le dépôt du SiN est prévu pour obstruer les tranchées. Ainsi le métal peut être déposé sur une surface plus importante que le guide lui-même afin de faciliter le report de contact, tout en étant isolé optiquement de la zone active au centre par la couche de SiN. Une étape de polissage mécano-chimique peut permettre d'obtenir une surface plane au préalable.

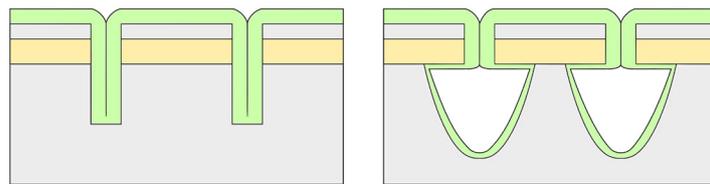
Dans le cas d'un microdisque, le contact peut soit être annulaire et reprendre le design du guide d'onde, ou en forme de disque concentrique avec le microdisque. Les propriétés optiques ne se trouvent pas au même point de symétrie pour les deux types de structure. Le mode optique du guide d'onde est localisé au centre de la structure, tandis que pour un microdisque le mode optique se propage à la périphérie du microdisque. Ainsi, les propriétés d'injection électriques vont différer entre les deux types de structures. Dans le cas d'un guide d'onde, il est nécessaire d'injecter les porteurs principalement dans le centre de la structure, tandis que pour un microdisque il faut adresser la périphérie de la structure.

L'enchaînement des étapes technologiques de fabrication est détaillé sur la figure 2.30 de la page 59. Le facteur de forme important de la structure, du fait de la gravure profonde des tranchées, impose d'obtenir une surface plane et continue grâce au dépôt du film de nitrure de silicium pour pouvoir enchaîner les étapes de fabrications subséquentes.

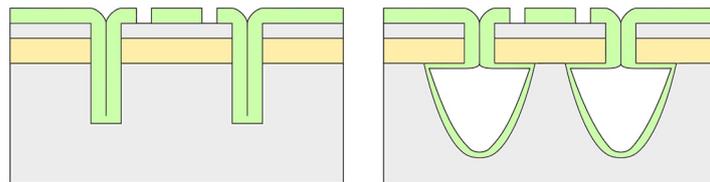
**Etape 1: Gravure des tranchées**



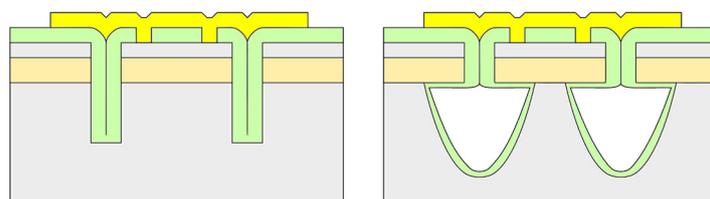
**Etape 2: Dépôt du film de nitrure de SiN contraint par PECVD**



**Etape 3: Réalisation des ouvertures à travers le film de SiN pour la prise des contacts métalliques**

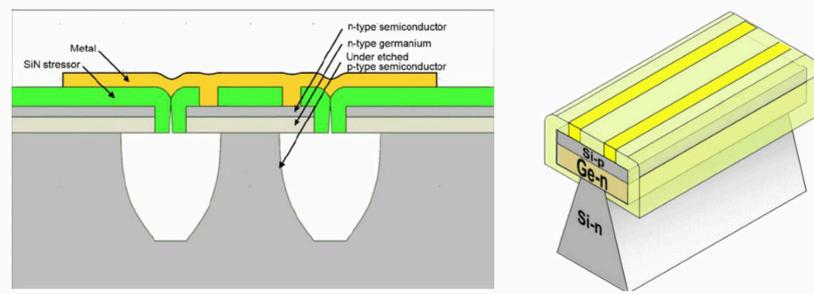


**Etape 4: Métallisation des électrodes de contact**



**Fig. 2.30 :** Description des étapes technologiques de fabrication pour un guide d'onde droit et sa variante avec une sous-gravure

### Laser germanium à injection verticale sur pied, à base de contrainte planaire via une couche de SiN et de la libération partielle de la couche de germanium



**Fig. 2.31** : Vue en coupe et vue isométrique du dispositif à injection verticale sur pied, à base de contrainte planaire via une couche de SiN et de la libération partielle de la couche de germanium

Dans le but d'exalter le transfert de contrainte, on propose une variation du dispositif précédent, en modifiant seulement une étape du procédé de fabrication. Elle consiste à sous-graver le semiconducteur sous le germanium. Le germanium n'est maintenu que par un pied, et est libéré partiellement du substrat. Ainsi, lors de la mise en tension de la structure, celle-ci peut se déformer avec une plus grande amplitude, afin de permettre le transfert d'une contrainte en tension dans le germanium plus forte.

Cette variation du procédé intervient après la gravure des tranchées. Il est nécessaire de réaliser une gravure chimique de la couche de semiconducteur inférieure. La solution chimique peut se propager sous la couche de germanium et venir graver le semiconducteur qui supporte la couche de germanium. La gravure chimique doit être sélective avec le germanium et la couche de semiconducteur supérieure. Si ce n'est pas le cas, il est nécessaire de réaliser une étape supplémentaire pour protéger ces deux couches lors du traitement chimique. La suite du procédé reste identique. Cette variation du procédé par rapport à une structure gravée droite permet d'avoir les avantages suivants :

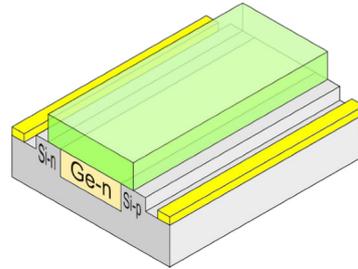
- Valeur maximale de contrainte plus importante dans la structure
- Confinement du mode optique plus important dans la couche de germanium par la suppression partielle du recouvrement avec le substrat
- Confinement des porteurs au centre de la structure lors de l'injection électrique

Les guides d'ondes doivent être orientés dans la direction cristallographique  $\langle 100 \rangle$  du germanium. L'application de la contrainte suivant cette direction permet une levée de dégénérescence des bandes d'énergies de la vallée en bande indirecte, qui amène une meilleure efficacité de remplissage en porteurs de la vallée en bande directe. Il est nécessaire de réaliser une ingénierie des facettes du guide d'onde pour avoir des coefficients de réflexion de bonne qualité. Un miroir réalisé avec une interface air/germanium possède un coefficient de réflexion  $R=34\%$ . Pour améliorer ce coefficient, on peut envisager un miroir avec une interface air/SiN/germanium ou un miroir de Bragg adapté à la longueur d'onde d'émission. En modulant l'épaisseur de nitrure de silicium déposée, on peut obtenir une couche réfléchissante ou anti-réfléchissante pour une longueur d'onde donnée. On peut aussi envisager une solution qui permet le couplage du guide

## 2.2. Modélisation du transfert de contrainte dans le germanium

d'onde à un miroir à cristal photonique. Ces différentes options permettront de coupler sur une puce photonique le laser germanium avec un guide d'onde passif en silicium ou en nitrure.

### 2.2.3.2 Approche à contrainte planaire par SiN et injection latérale



**Fig. 2.32** : Vue isométrique du dispositif à injection latérale contraint par SiN

Cette structure représentée sur le schéma de la figure 2.32 ressemble au dispositif précédent pour obtenir le transfert de contrainte, mais plutôt que d'obtenir une injection électrique verticale, on modifie la configuration de la structure pour que l'injection se fasse latéralement. Le guide d'onde est formé à partir d'une épitaxie localisée de germanium dans une tranchée de silicium. Cette structure forme une double hétérostructure pour réaliser de manière efficace l'injection électrique des porteurs dans le germanium. Le dopage des couches de silicium de type p et de type n peut être réalisé par implantation ionique.

La mise sous contrainte en tension du germanium est obtenue par le dépôt d'un film de nitrure de silicium sur le guide d'onde. Pour renforcer la déformation dans le guide, il peut être nécessaire de graver le silicium autour du guide, afin de permettre à la couche de germanium de se dilater plus facilement. Il n'est pas possible de graver profondément le guide d'onde à cause de la présence latérale des caissons d'injection obtenue par implantation. Pour isoler le guide de l'effet de compression du nitrure de silicium à sa base, il est nécessaire de retirer la couche de SiN présente hors du guide par une étape de gravure. L'enchaînement des étapes technologiques de fabrication est détaillé sur la figure 2.33 de la page 62.

La couche de germanium étant directement en contact avec la couche de nitrure, le transfert de contrainte se fait de manière directe pour atteindre un niveau plus important que dans le cas d'un guide à injection vertical. Les couches de silicium latérales dopées permettent de reporter la prise des contacts hors du guide d'onde. Les contacts métalliques n'influent pas sur le transfert de la contrainte dans le germanium. Cela permet aussi d'éviter la perturbation du mode optique par le métal, et de prévenir l'échauffement des parties métalliques loin de la zone active du guide d'onde. Cette solution semble prometteuse, mais il faut pouvoir gérer la difficulté d'obtenir une bonne qualité d'interface latérale lors de l'épitaxie localisée dans la tranchée de silicium. Comme l'injection des porteurs s'effectue latéralement, le rapport de forme entre la dimension du guide et de la zone active doit être choisi pour obtenir des conditions efficaces d'injection au centre du guide.

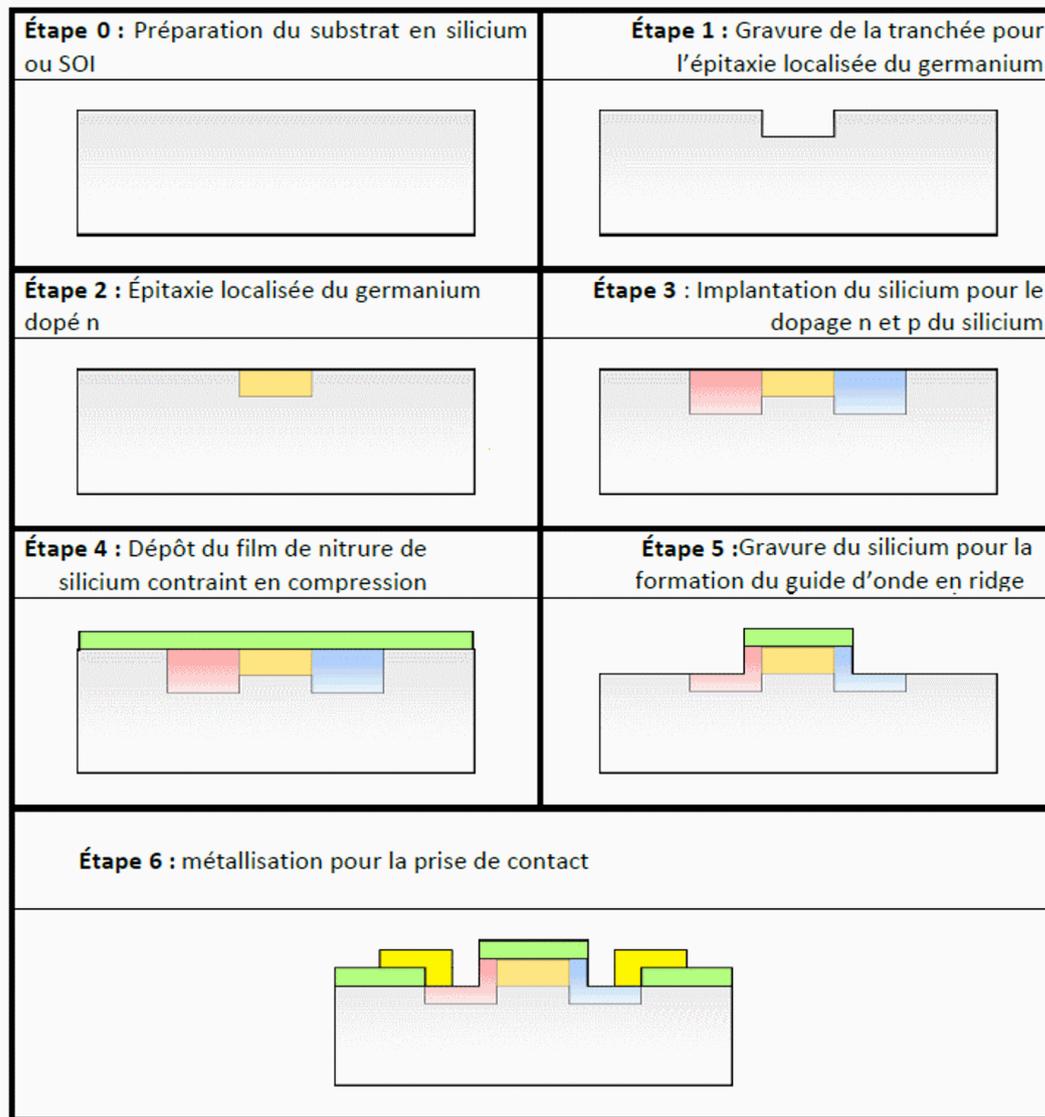


Fig. 2.33 : Description des étapes technologiques de fabrication pour un guide d'onde à injection latérale

## 2.2. Modélisation du transfert de contrainte dans le germanium

### 2.2.3.3 Approche à base de contrainte utilisant des épitaxies latérales de SiGe contraint

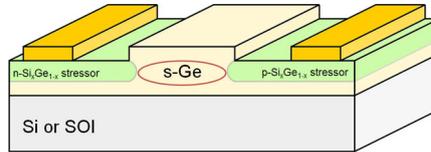


Fig. 2.34 : Vue isométrique du dispositif à base d'hétéroépitaxie en SiGe

Le dispositif proposé est formé d'un guide d'onde en germanium de type « ruban » ou « stripe ». Ce guide d'onde est formé d'une arête sur le dessus de la structure qui permet de guider la lumière au centre du dispositif, où se situe la zone active de germanium dopée de type  $n$ . Cette configuration permet d'éviter de graver complètement le guide pour l'isoler optiquement. Autour de la zone active sont épitaxiées des couches de SiGe qui permettent de réaliser l'injection électrique des porteurs de manière latérale dans le germanium dopé  $n$ . On profite des discontinuités des bandes d'énergie entre le Ge et le SiGe pour obtenir un confinement des porteurs. D'autre part comme les couches de SiGe sont épitaxiées sur du germanium, celles-ci seront contraintes en tension à cause de la différence de paramètre de maille. La contrainte en tension de la couche de SiGe va se transférer en tirant latéralement la couche de germanium. La contrainte est dépendante de la concentration de silicium dans la couche de SiGe formée. L'originalité de ce dispositif est l'utilisation d'épitaxies latérales de SiGe, qui permettent à la fois d'injecter des porteurs et de contraindre le germanium. L'effet de la contrainte en tension dans le germanium peut être amplifié en déposant un film de SiN contraint en tension de chaque côté du ruban de guide en germanium, ou en compression sur le ruban de guide en germanium.

Le recouvrement entre l'injection des porteurs et la zone contrainte du germanium dopé de type  $n$  est maximum dans la zone active. De cette manière, les zones non contraintes du germanium doivent être laissées non-dopées pour limiter les pertes optiques par absorption. La contrainte est appliquée sur toute la longueur, et permet d'avoir un milieu actif de plusieurs centaines de micromètres. Les couches de SiGe permettent de déporter les contacts métalliques loin de la zone active en germanium, ce qui permet de ne pas perturber le mode optique s'établissant dans le guide d'onde, et d'éviter les problèmes d'échauffement dans la zone active. La technique de fabrication est compatible avec les procédés CMOS. L'épitaxie localisée de SiGe sur silicium est l'une des briques de base pour contraindre les canaux des transistors en compression. La structure proposée ressemble à ces dispositifs de transistors contraints, comme on peut le voir sur la figure 2.35.

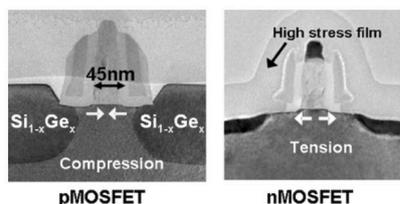
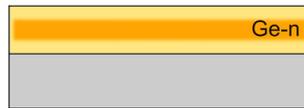


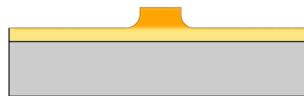
Fig. 2.35 : Images TEM de transistor CMOS contraint par hétéroépitaxie de SiGe sur silicium, figure issue de (THOMPSON et al., 2004)

## Chapitre 2. Dimensionnement du laser germanium sous injection électrique

**Etape 1 :** Epitaxie de la couche de germanium dopée de type n in-situ (zone orangée)



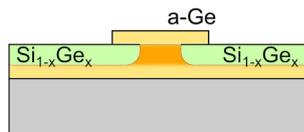
**Etape 2 :** Gravure du germanium pour la définition de la zone active



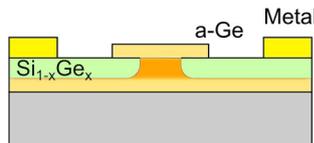
**Etape 3 :** Epitaxie localisée du  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$  contraint sur germanium, dopage par implantation des couches de SiGe



**Etape 4 :** Dépôt d'une couche amorphe de germanium (ou matériau avec  $n \approx n_{\text{Ge}}$ ) pour la formation du ruban du guide d'onde



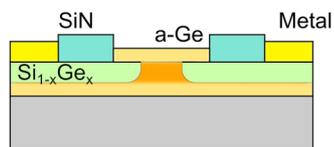
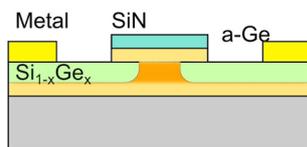
**Etape 5 :** Réalisation des contacts métalliques



**Variante de procédé:** Dépôt de SiN contraint pour l'exaltation des contraintes dans la zone active:

SiN contraint en **compression** sur le ruban du guide d'onde

SiN contraint en **tension** de chaque côté de la zone active



**Fig. 2.36 :** Description des étapes technologiques de fabrication pour un guide d'onde à injection latérale

### 2.2.4 Modélisation du transfert de contrainte

On rappelle le principe permettant de calculer les déformations dans un milieu élastique.

Dans le cas d'une déformation élastique d'un solide, la loi de Hooke relie la contrainte  $\sigma$  à l'allongement relatif  $\varepsilon$  par un coefficient de proportionnalité  $E$  appelé module de Young suivant la relation :

$$\sigma = E \cdot \varepsilon$$

Selon le type de structure que l'on étudie, on est amené à considérer deux types de sollicitations mécaniques que l'on applique à un solide donné.

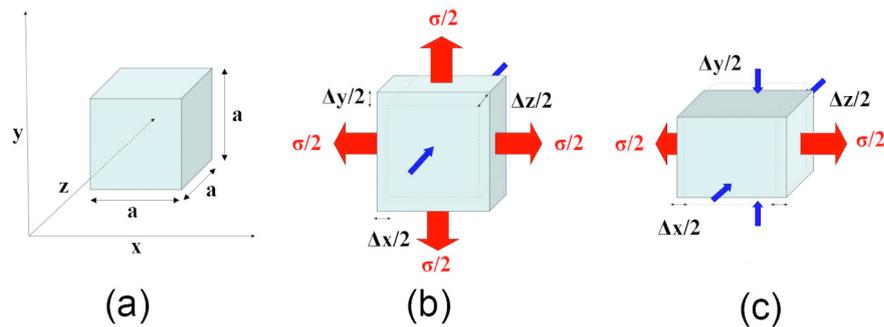
Traction biaxiale dans le plan  $x$  et  $y$  :

$$\varepsilon_{xx} = \frac{\sigma_{xx}}{E} - \nu \frac{\sigma_{yy}}{E} \quad (2.36)$$

$$\varepsilon_{yy} = \frac{\sigma_{yy}}{E} - \nu \frac{\sigma_{xx}}{E} \quad (2.37)$$

$$\varepsilon_{zz} = -\nu \frac{\sigma_{xx}}{E} - \nu \frac{\sigma_{yy}}{E} \quad (2.38)$$

Le coefficient de poisson  $\nu$  permet de caractériser la contraction de la matière perpendiculairement à la direction de la traction appliquée. Par conséquent, un solide qui subit une dilatation suite à une traction biaxiale dans le plan  $x$  et  $y$  va se contracter proportionnellement au coefficient de Poisson dans le plan  $z$  comme représenté sur la figure 2.37. L'approche biaxiale est utilisée lorsque l'on modélise le transfert de contrainte dans des structures à symétrie axiale comme dans les microdisques.



**Fig. 2.37 :** (a) cube de côté  $a$ . (b) effet d'une contrainte biaxiale en tension sur le cube. (c) effet d'une contrainte uniaxiale en tension sur le cube. Les flèches rouges suivent les axes des forces, les flèches bleues représentent les effets transverses. Figures issues de (KERSAUSON, 2013)

On peut considérer un second cas, lorsque la contrainte ne s'applique que dans une seule direction. On parle de traction uniaxiale dans le plan  $x$  :

$$\varepsilon_{xx} = \frac{\sigma_{xx}}{E} \quad (2.39)$$

$$\varepsilon_{yy} = -\nu \frac{\sigma_{xx}}{E} \quad (2.40)$$

$$\varepsilon_{zz} = -\nu \frac{\sigma_{xx}}{E} \quad (2.41)$$

L'approche uniaxiale s'emploie lorsque l'on modélise des guides d'ondes où le transfert de contrainte s'effectue que dans une direction unique. Pour le cas d'un guide d'onde semi-infini dans le plan  $y$ , la valeur de la déformation  $\varepsilon_{yy}$  est nulle.

### 2.2.4.1 Méthode de simulation du transfert de contrainte

Pour estimer la propagation des champs de contraintes dans une structure à base de germanium, on utilise le logiciel de modélisation COMSOL. Il permet de résoudre les équations de Hooke dans un système complexe en utilisant l'approche de calcul par éléments finis. On considère que la déformation des matériaux reste élastique. Pour estimer la déformation, il est nécessaire de connaître les paramètres mécaniques des différents matériaux utilisés durant l'étude, à savoir le module de Young  $E$ , et le coefficient de Poisson  $\nu$ . L'estimation de la contrainte transférable réside dans l'évaluation de la contrainte initiale de la couche de nitrure de silicium.

Un étalonnage de cette valeur a été effectué par A. Ghrib durant sa thèse, pour déterminer la valeur correspondante à une contrainte initiale hydrostatique par rapport à une mesure expérimentale du dépôt de nitrure sur des guides d'ondes. Un film de nitrure de silicium est déposé par PECVD sur un substrat de silicium. La contrainte du film de nitrure de silicium est déduite à partir de la courbure du substrat par une mesure utilisant un profilomètre optique. Par la loi de Stoney, on obtient la valeur de la contrainte dans le plan de la couche après relaxation, qui est de -1.8 GPa. Cette valeur correspond à une contrainte hydrostatique effective de -4.5 GPa à l'état initial dans les modélisations numériques, pour obtenir la relaxation du film de nitrure de silicium dans le plan en accord avec la valeur expérimentale mesurée. Le module de Young effectif de la couche de SiN est arbitrairement fixé à 100 GPa, et son coefficient de Poisson à 0.26.

	Germanium (100)	Silicium (100)	GaAs (100)
$E$ (GPa)	103	130	85.9
$\nu$	0.26	0.28	0.31

### 2.2.5 Modélisation du transfert de contrainte dans la structure à injection verticale

Les exigences de dimensionnement que doit respecter la structure sont :

- La largeur des guides d'ondes peut être définie de 2 à 6  $\mu\text{m}$ , selon les propriétés optiques souhaitées, tout en offrant un bon transfert de la contrainte avec la présence d'ouvertures

## 2.2. Modélisation du transfert de contrainte dans le germanium

---

pour la prise de contact électrique.

- L'épaisseur de la couche de germanium dopé n est d'environ 250-300 nm (proche de  $\lambda/2n$ , où  $\lambda$  est la longueur d'onde d'émission du laser, et  $n$  l'indice de réfraction du germanium). Cette épaisseur permet d'avoir un bon guidage de la lumière dans le domaine du proche infrarouge.
- La couche de barrière du semiconducteur supérieur doit être choisie avec une épaisseur suffisante pour obtenir la réalisation d'un contact électrique de bonne qualité, mais sans être trop épaisse pour éviter que cette couche absorbe la contrainte transférée par la couche de SiN.
- Le guide est isolé du reste du matériau par la formation de tranchées. Par conséquent, il faut dimensionner la largeur des tranchées en accord avec l'épaisseur de la couche de SiN déposée.

À partir des contraintes énoncées ci-dessus, des simulations numériques par éléments finis du comportement mécanique de la structure ont été menées afin d'optimiser les différents paramètres de la topologie du guide d'onde (profondeur des tranchées, largeur du guide, positionnement des ouvertures). On simule le transfert de la contrainte dans la structure à partir de la valeur de la contrainte initiale du film de nitrure déposé d'une épaisseur de 300 nm. On définit la direction  $x$  suivant la largeur du guide, la direction  $z$  suivant l'épaisseur des couches. On calcule ensuite le pourcentage de déformation uniaxiale suivant la direction latérale  $\varepsilon_{xx}$  du guide dans la couche de germanium. La contrainte dans le plan du guide suivant la direction  $y$  est nulle, car le guide est infini dans cette direction. La valeur de la contrainte uniaxiale  $\varepsilon_{xx}$  permet de remonter à partir du calcul de la structure de bande du germanium à l'abaissement en énergie de la bande interdite directe, duquel on pourra estimer la densité de courant nécessaire pour obtenir l'inversion de population dans le germanium.

On se retrouve à étudier un système à cinq degrés de liberté :

- Largeur de guide
- Profondeur de sous-gravure
- Taille du pied
- Position des ouvertures dans le nitrure de silicium
- Taille des ouvertures dans le nitrure de silicium

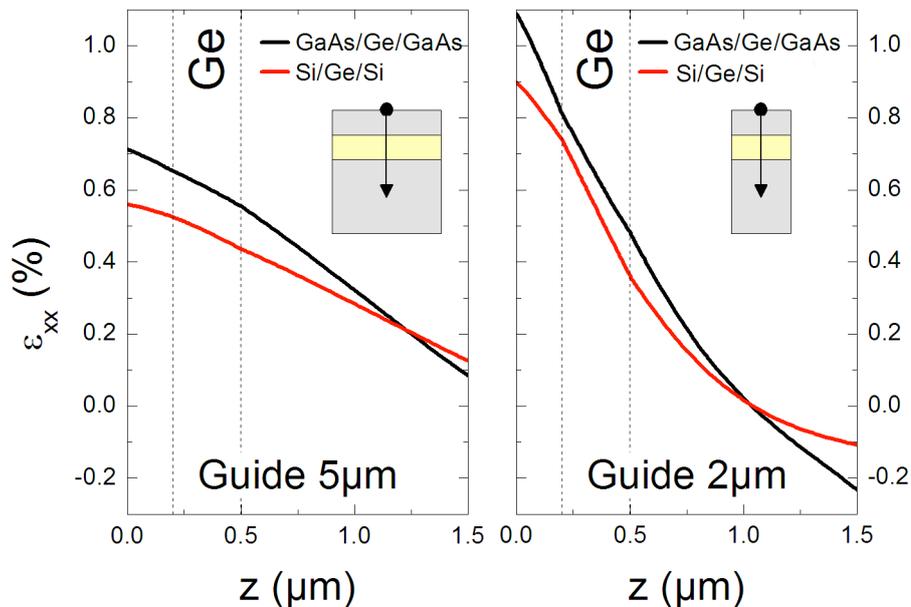
On va d'abord regarder le transfert de contrainte dans un guide simple sans ouvertures à travers la couche de nitrure de silicium. On va déterminer l'impact de la couche de semiconducteur supérieure de la structure sur le transfert de contrainte dans le germanium, et trouver le bon couple de paramètres pour les dimensions du guide. Ensuite, on étudie l'effet des ouvertures à travers la couche de silicium de nitrure pour la réalisation des contacts d'accès sur un guide optimisé. On réalise l'étude pour des guides de largeur de  $2\mu\text{m}$  et  $5\mu\text{m}$ .

### 2.2.5.1 Profil de contrainte dans un guide comportant une double hétérostructure à base de germanium

Afin de visualiser le transfert de la contrainte dans la structure, on présente un cas avec des paramètres déjà optimisés pour deux types d'empilement de matériaux (GaAs/Ge/GaAs et Si/-

## Chapitre 2. Dimensionnement du laser germanium sous injection électrique

Ge/Si). On s'intéresse au profil de la contrainte uniaxiale dans la structure suivant la profondeur de la structure au centre du guide, qui est présenté sur la figure 2.38. La valeur de la contrainte uniaxiale est maximale à l'interface avec le nitrure de silicium, et décroît quasi linéairement dans l'épaisseur de la couche vers le substrat. Le germanium n'étant pas directement en contact avec le nitrure de silicium. La déformation induite doit se propager à travers la couche supérieure vers le germanium. Dans le cas d'un guide  $2\ \mu\text{m}$ , il y a moins de matière à déformer, donc la contrainte se transfère plus efficacement (rapport épaisseur nitrure / matière), seulement la décroissance est plus importante par rapport à un guide plus large, car la structure est soumise à des effets de bords plus importants. La figure 2.39 permet de se rendre compte de cet effet. On choisit de ne représenter que les zones en tension, pour amplifier l'observation des effets de bord. Pour un guide de  $5\ \mu\text{m}$ , les effets de bords ont une extension latérale d'environ  $1\ \mu\text{m}$  et se répercutent sur une profondeur de  $200\ \text{nm}$  en dessous de l'interface avec le SiN. Ils ne perturbent pas l'homogénéité dans la couche de germanium au centre. Lorsque cet effet est appliqué à un guide de  $2\ \mu\text{m}$ , les effets de bords se recouvrent au centre du guide et ils permettent d'obtenir une contrainte très importante au centre du guide.

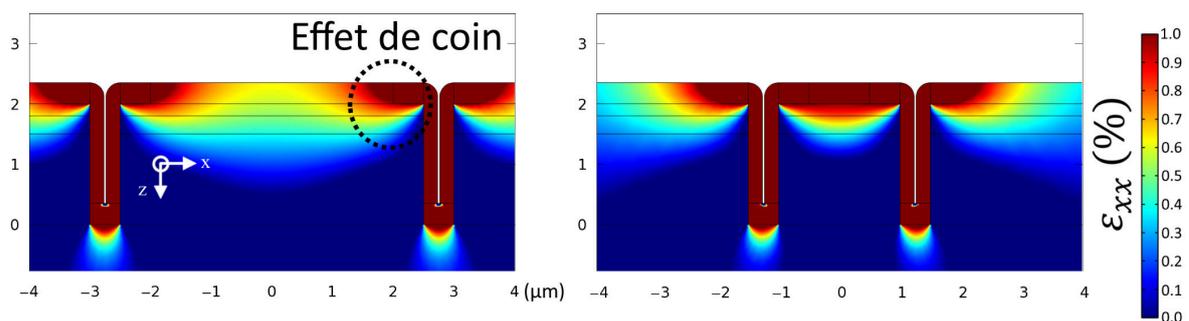


**Fig. 2.38 :** Profil de déformation uniaxiale suivant la profondeur au centre du guide pour (a) une largeur de  $5\ \mu\text{m}$  et (b)  $2\ \mu\text{m}$  pour des structures avec substrat GaAs et silicium

Une structure de taille réduite permet d'obtenir une valeur de contrainte maximale plus importante, mais au détriment de l'homogénéité suivant l'épaisseur de la couche de germanium.

Par ailleurs, on note l'importance de l'élasticité des matériaux utilisés. On compare un système en Si/Ge/Si à celui en GaAs/Ge/GaAs. Le GaAs a un module de Young d'une valeur de  $85.9\ \text{GPa}$  contre  $130\ \text{GPa}$  pour le silicium (100). Ainsi, il va se déformer plus facilement sous une contrainte équivalente, permettant de transférer une contrainte plus importante dans le germanium. Par la suite, on ne s'intéressera qu'à des guides de germanium sur silicium pour évaluer les performances d'une structure compatible avec les procédés de fabrication CMOS.

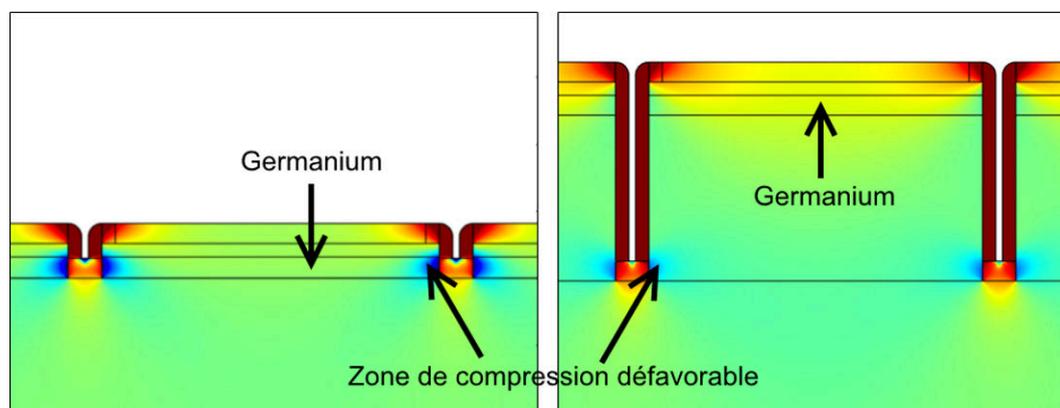
## 2.2. Modélisation du transfert de contrainte dans le germanium



**Fig. 2.39** : Représentation du champ de déformation uniaxiale  $\varepsilon_{xx}$  pour la structure Si/Ge/Si pour des guides (a) de 5  $\mu\text{m}$  et (b) 2  $\mu\text{m}$  de large

### 2.2.5.2 Optimisation de la structure

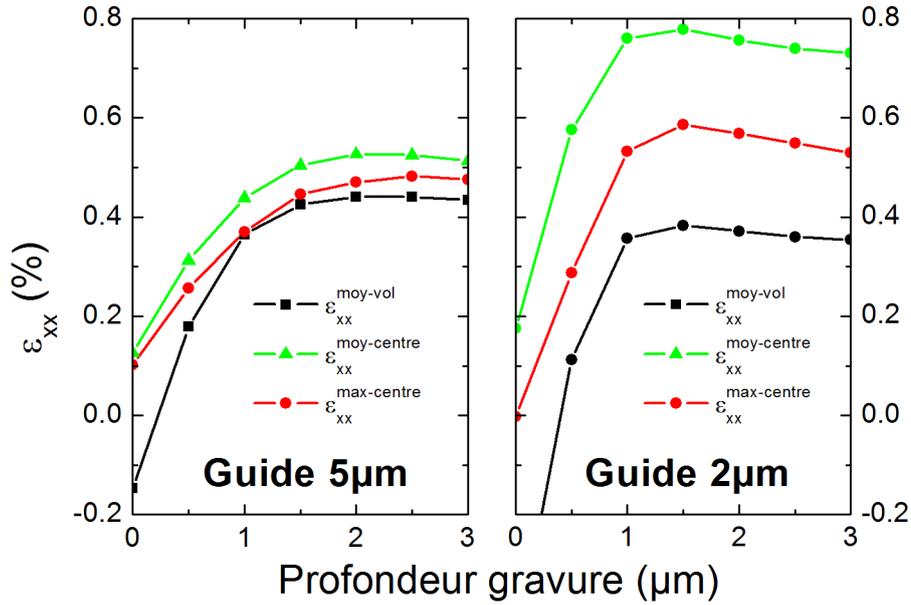
**2.2.5.2.1 Effet de la profondeur de gravure** Le film de nitrure de silicium déposé au pied de la structure va former une poche de contrainte en compression, car en se relaxant il va se dilater et comprimer latéralement le matériau avec lequel il est en contact. Cet effet de compression peut se retrouver dans la couche de germanium, et avoir un effet défavorable. On peut l'isoler la couche du germanium en gravant plus profondément le guide et repousser la zone de compression dans le substrat. Cet effet est représenté sur la figure 2.40. Il est important de pouvoir évaluer la profondeur de gravure optimale, car une gravure trop profonde peut rendre plus complexe le procédé de fabrication technologique (épaisseur du substrat, sélectivité de gravure, enchaînement des étapes technologique sur une structure avec un rapport de forme important...)



**Fig. 2.40** : Illustration de l'effet de gravure du pied sur la localisation de la poche de contrainte dans la structure

Pour pouvoir estimer l'impact de la profondeur de gravure, on calcule la valeur des trois composantes de la déformation uniaxiale à partir du résultat des modélisations :

- La valeur du maximum de la déformation uniaxiale  $\varepsilon_{xx}$  au centre du guide dans la couche de germanium, notée  $\varepsilon_{xx}^{max-centre}$



**Fig. 2.41** : Effet de la profondeur de gravure sur la déformation uniaxiale maximum et moyenne au centre de la couche, pour un guide de 2 et 5  $\mu m$

- La valeur moyennée de la déformation uniaxiale  $\varepsilon_{xx}$  suivant une coupe verticale au centre du guide dans la couche de germanium, notée  $\varepsilon_{xx}^{moy-centre}$
- La valeur moyennée de la déformation uniaxiale  $\varepsilon_{xx}$  dans tout le volume de la couche de germanium, notée  $\varepsilon_{xx}^{moy-vol}$

La figure 2.41 présente les résultats de simulation pour différentes profondeurs de tranchées. Lorsque la profondeur de gravure est nulle, le film de nitrure de silicium est en contact latéralement avec la couche de germanium, la valeur de la déformation est nulle, voire en compression dans la couche de germanium. Au fur et à mesure que la profondeur de gravure augmente, on commence à isoler l'effet de compression dans le substrat et le transfert de contrainte dans le germanium peut se faire plus efficacement. Puis la valeur de déformation rencontre un plateau, car la profondeur est suffisante pour isoler l'effet de compression au pied du guide, mais décroît légèrement à mesure que la surface de nitrure déposée sur les bords du guide augmente. La profondeur de gravure optimale est atteinte pour valeur entre 1.5 et 2.0  $\mu m$ . Dans le cas d'un guide de 5  $\mu m$ , la valeur maximale diffère très peu de la moyenne faite dans la couche. Tandis que pour un guide de 2  $\mu m$ , le gradient de déformation est très important lorsque l'on compare les valeurs maximales et moyennes à cause des effets de bord.

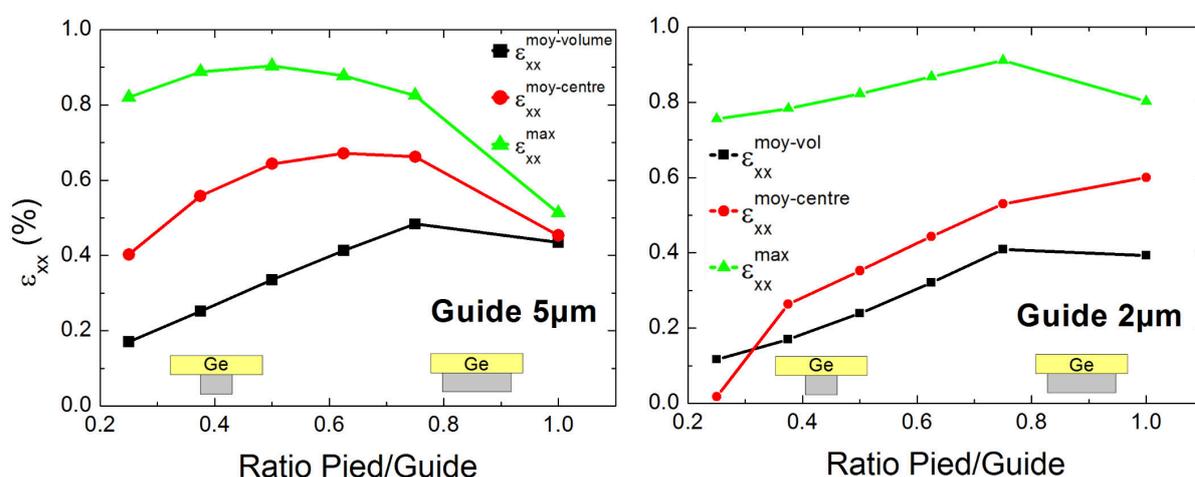
**2.2.5.2.2 Cas du guide sous-gravé - effet de la largeur du pied** Dans cette configuration, la couche de germanium ne repose plus que sur un pied. On définit le terme ailettes pour décrire les parties libres de la couche de germanium de part et d'autre du pied. Il faut identifier la largeur optimale de ce pied. En principe, le dépôt par PECVD est isotrope. Toute la structure se retrouve recouverte d'un film de nitrure de silicium lors du dépôt. Mais dans cette configuration, on est amené à modifier les conditions initiales de la simulation. On considère que le nitrure de silicium déposé indirectement sur la structure, c.-à-d. sous la couche de germanium,

## 2.2. Modélisation du transfert de contrainte dans le germanium

n'a pas les mêmes propriétés que le nitrure déposé de manière directe. Pour simplifier l'étude, ces parties du film de SiN ne sont pas contraintes initialement.

On compare l'effet de la taille du pied en utilisant des rapports de largeur de pied par rapport à la couche, allant de 1 pour un guide gravé droit à 0.25 pour un pied très fin. Les résultats de simulations sont présentés sur la figure 2.42. L'effet de la réduction de la taille du pied est bénéfique sur la valeur maximale de la déformation uniaxiale. On peut passer de 0.55 % à 0.90 % pour un guide de 5  $\mu\text{m}$ . Cette augmentation provient de deux effets :

- L'ajout d'un nouveau degré de liberté permettant une déformation plus aisée de la couche de germanium.
- La réduction des effets de compression au pied du guide et sur les bords, liés au changement de propriétés du nitrure de silicium déposé sous la couche de germanium.



**Fig. 2.42** : Évolution de la déformation uniaxiale en fonction du ratio de largeur entre le pied et la couche de germanium pour un guide de 5  $\mu\text{m}$  et 2  $\mu\text{m}$

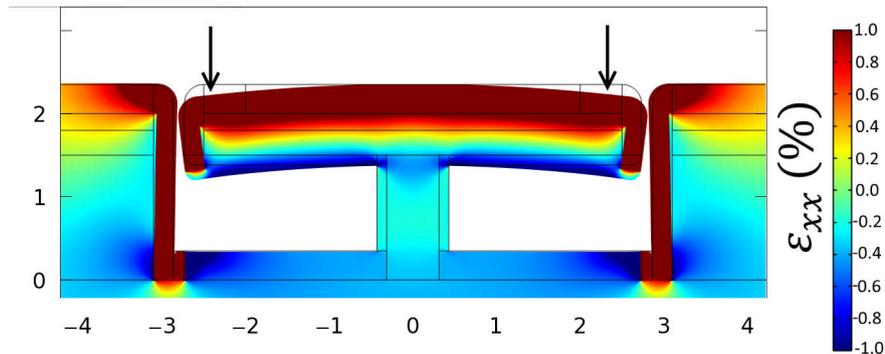
Seulement, la déformation sur les ailettes de la couche de germanium se fait aux dépens d'un phénomène de cintrage. La mise en tension de la partie supérieure s'accompagne d'une contre-réaction qui vient mettre en compression la partie inférieure à cause de la déformation verticale importante. Cet effet est principalement localisé sur les ailettes de la structure où la déformation est maximale, comme on peut le voir par exemple sur la représentation de la structure déformée de la figure 2.43. Pour la zone en contact avec le pied, la déformation reste homogène. Étant donné que la couche de germanium se trouve à 200 nm de l'interface avec le nitrure de silicium, l'effet de cintrage peut devenir important dans le germanium et dégrader la déformation moyenne. Par ailleurs, la structure devient indépendante de la profondeur de sous gravure, car on supprime l'effet de compression sur le pied du guide.

Un ratio de 0.6 entre la largeur du pied et du guide est un bon compromis pour un guide de 5  $\mu\text{m}$ . Il permet d'augmenter fortement la valeur maximale de la déformation, tout en gardant une homogénéité correcte au centre du guide. Pour un guide de 2  $\mu\text{m}$  de large, un ratio de 0.8 est à envisager. Le maximum de déformation est situé à l'interface avec le SiN, et la réduction

## Chapitre 2. Dimensionnement du laser germanium sous injection électrique

de la taille du pied ne permet pas d'être sensible à l'augmentation de cette valeur dans la couche de germanium.

On a maintenant identifié les dimensions pour une structure optimisée. On étudie des structures avec une profondeur de sous-gravure de  $1.5\ \mu\text{m}$ . On fixe le ratio de largeur de pied à  $0.6$  pour le guide de  $5\ \mu\text{m}$ , et à  $0.8$  pour le guide de  $2\ \mu\text{m}$  dans le cas des structures sous-gravées pour la suite de l'étude.



**Fig. 2.43** : Représentation de la structure déformée, et du champ de déformation  $\varepsilon_{xx}$  pour un guide de  $5\ \mu\text{m}$  avec un pied de  $1.25\ \mu\text{m}$

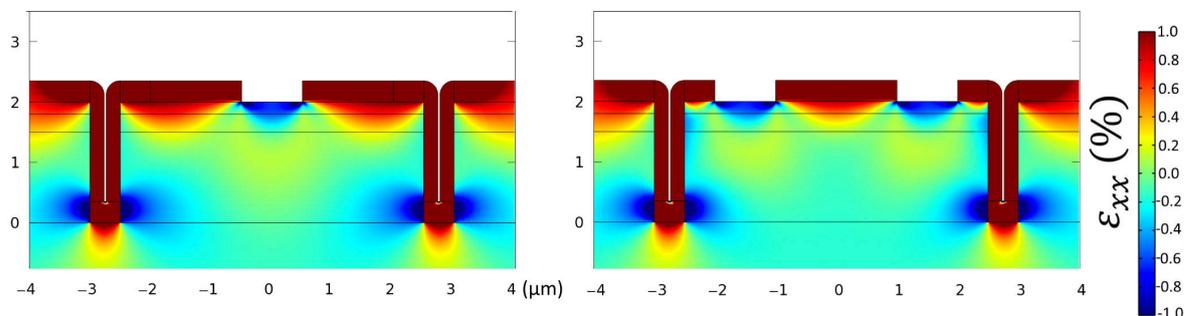
### 2.2.5.3 Effet des ouvertures dans la couche de SiN pour les contacts métalliques

Afin de réaliser la prise de contact électrique sur la couche de semiconducteur supérieure, il est nécessaire de faire une ouverture dans le film de nitrure de silicium. Un positionnement de l'ouverture au centre de la structure pour la métallisation n'est pas adapté pour le transfert de la contrainte, car il se crée une poche de compression sous cette ouverture qui se propage jusque dans le germanium à cause de la relaxation du film de nitrure de silicium, comme on peut l'observer sur la figure 2.44 pour des cas extrêmes. Un positionnement des ouvertures sur les bords permet de minimiser ce problème. Les ouvertures vont créer des poches de contrainte situées hors de la zone d'intérêt qui est le centre du guide. Cette solution a été retenue, car le transfert de contrainte est beaucoup moins perturbé. De plus, un contact métallique situé au centre viendrait parasiter le mode optique du germanium. Le rapport entre la taille des ouvertures et la taille du guide doit rester modéré afin de ne pas dégrader l'efficacité du transfert de contrainte, mais en contrepartie une ouverture trop fine pour les contacts ne serait pas adaptée pour l'injection électrique. On fixe la position des contacts à  $250\ \text{nm}$  ou  $500\ \text{nm}$  des bords du guide. On regarde différentes largeurs de taille de contact allant de  $250\ \text{nm}$ ,  $500\ \text{nm}$  et  $1\ \mu\text{m}$ , afin de déterminer la configuration optimale pour les dimensions des contacts.

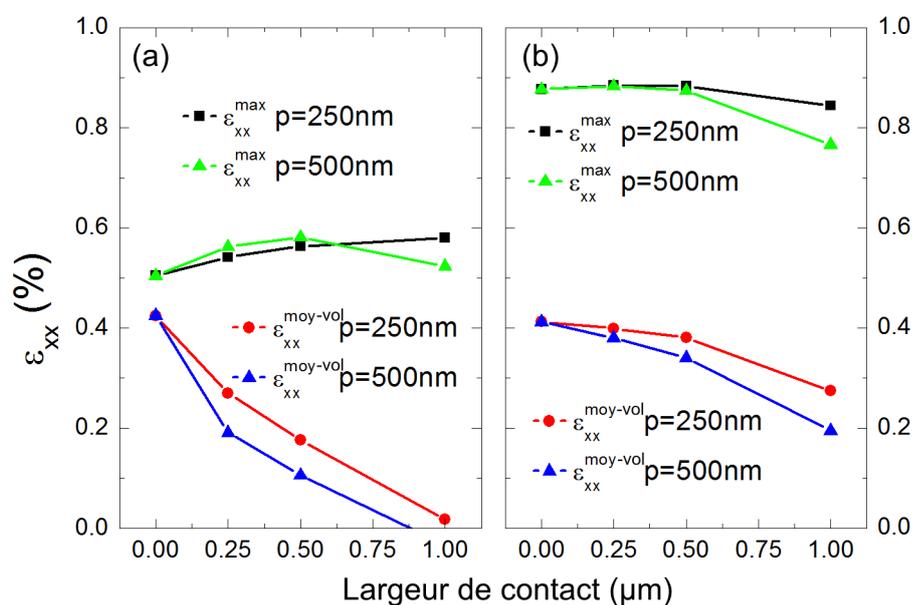
**2.2.5.3.1 Guide de  $5\ \mu\text{m}$**  Les résultats des simulations sont présentés sur la figure 2.45. On va regarder le maximum de la déformation uniaxiale au centre du guide, et sa valeur moyennée dans le volume de la couche de germanium.

**Cas du guide gravé droit :**

## 2.2. Modélisation du transfert de contrainte dans le germanium



**Fig. 2.44** : Champ de déformation pour une structure avec un contact central, et pour une structure avec des contacts latéraux



**Fig. 2.45** : Effet des ouvertures dans le nitrure de silicium pour un guide de 5  $\mu\text{m}$  (a) en gravure droite (b) à sous-gravure

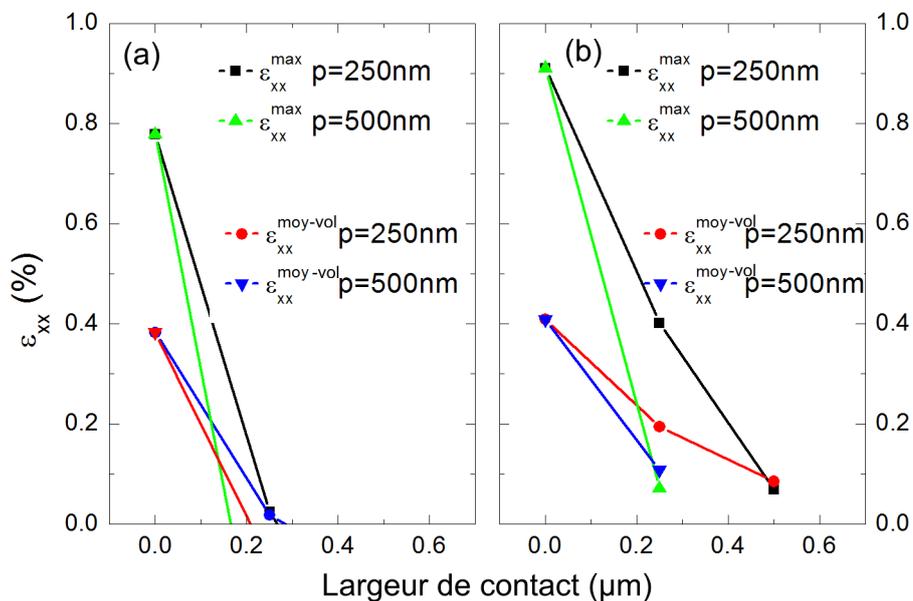
## Chapitre 2. Dimensionnement du laser germanium sous injection électrique

La présence des ouvertures vient dégrader très fortement l'homogénéité au sein de la couche, ce qui est attendu, car on crée deux poches de compression dans le germanium. Par contre, un contact avec des dimensions bien choisies permet d'obtenir un transfert de contrainte légèrement amélioré au centre du guide. En effet, on se retrouve avec un ruban de nitrure de silicium au centre de la structure. La zone contrainte en compression va être compensée par une mise en tension du germanium au centre de la structure.

### Cas du guide sous-gravé :

L'homogénéité de la déformation dans la structure n'est pas dégradée. La structure est libre de se relaxer sur les ailettes, l'effet des ouvertures est complètement absorbé. On a donc plus de liberté pour fixer les dimensions des ouvertures sans perturber le transfert de la contrainte dans le germanium, car on obtient un résultat assez similaire pour un guide avec ou sans ouverture.

**2.2.5.3.2 Guide de 2  $\mu\text{m}$**  Pour un guide de 2  $\mu\text{m}$ , on est limité à trois configurations de contact. Les résultats des simulations sont présentés sur la figure 2.46. On ne peut pas dépasser des contacts d'une largeur de 250 nm situés à 500 nm du bord. La moindre configuration d'ouverture dégrade la déformation en tension, à la fois pour la structure gravée droite et la structure sous-gravée. Le rapport de forme entre la taille du contact et la largeur du guide est trop important. La surface disponible pour le nitrure de silicium est trop réduite. La diminution de la taille du contact deviendrait problématique pour obtenir une injection efficace. Cette largeur de guide n'est pas adaptée pour l'injection électrique.



**Fig. 2.46 :** Évolution de la déformation uniaxiale en fonction du ratio de largeur entre le pied et la couche de germanium pour un guide de 2  $\mu\text{m}$  (a) en gravure droite (b) à sous-gravure

### 2.2.5.4 Bilan - Dimensionnement des dispositifs à injection verticale

Grâce à cette étude qui s'appuie sur l'analyse de la déformation de la structure par une couche de silicium de nitrure contraint, on a pu estimer les dimensions idéales pour un dispositif en guide d'onde à injection verticale. Le tableau suivant énumère les dimensions que doit respecter le dispositif pour obtenir un bon transfert de la contrainte.

Guide à gravure droite	Dimension
Épaisseur de la couche de Ge	300 nm
Épaisseur de la couche de l'injecteur	200 nm
Épaisseur du film de nitrure de silicium	300-500 nm
Largeur du guide	4 à 6 $\mu\text{m}$
Profondeur des tranchés	1.5 $\mu\text{m}$
Largeur des ouvertures	500nm
Position des ouvertures par rapport aux bords	500nm

On a pu établir les dimensions optimisées pour ce type de structure pour obtenir le laser germanium sous injection électrique.

Guide à sous-gravure	Dimension
Largeur du guide	4 à 6 $\mu\text{m}$
Ratio largeur du pied	0.5 à 0.6
Largeur des ouvertures	500nm
Position des ouvertures par rapport aux bords	250-500nm

Le niveau de déformation uniaxiale attendu pour un guide 5  $\mu\text{m}$ , est de **0.55%** au maximum pour un guide avec une gravure droite. Un guide avec une sous-gravure permet d'atteindre une valeur maximale de **0.87%**. L'utilisation de la sous-gravure est bénéfique pour augmenter le niveau de déformation dans la couche de germanium. Il faut choisir une largeur de pied optimisée, afin de ne pas dégrader l'homogénéité du transfert de contrainte. Le guide de 2  $\mu\text{m}$  n'est pas assez large pour être compatible avec l'injection électrique.

Cette étude est basée sur des paramètres en accord avec ce qu'il est possible d'obtenir dans la salle blanche universitaire de l'IEF pour le dépôt PECVD. Il est envisageable d'augmenter l'efficacité du transfert de contrainte, en modifiant les points suivants :

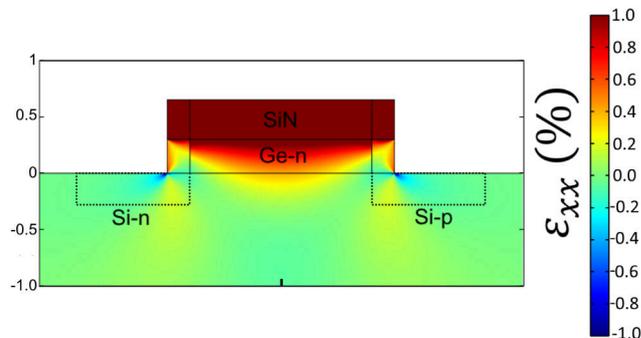
- Contrainte initiale du film de nitrure de silicium
- Augmentation de l'épaisseur du film de nitrure de silicium
- Réduction de l'épaisseur de la couche d'injection supérieure
- Le germanium peut être épitaxié sur silicium, et offrir une contrainte biaxiale en tension résiduelle de 0.25 % lié à la différence de coefficient de dilatation thermique

### 2.2.6 Modélisation du transfert de contrainte dans la structure à injection latérale

Dans le cas d'une injection latérale, la couche de germanium est en contact avec la couche de nitrure de silicium. Les exigences de dimensionnement que doit respecter la structure sont :

- La largeur des couches latérales pour l'injection électrique doit être suffisamment importante pour obtenir une injection homogène suivant l'épaisseur de la couche de germanium
- La largeur de guide doit suffisamment important pour confiner la lumière, mais sans être trop grande pour pouvoir injecter efficacement les porteurs au centre du guide dans la couche de germanium.

#### 2.2.6.1 Dimensionnement de la structure à injection latérale

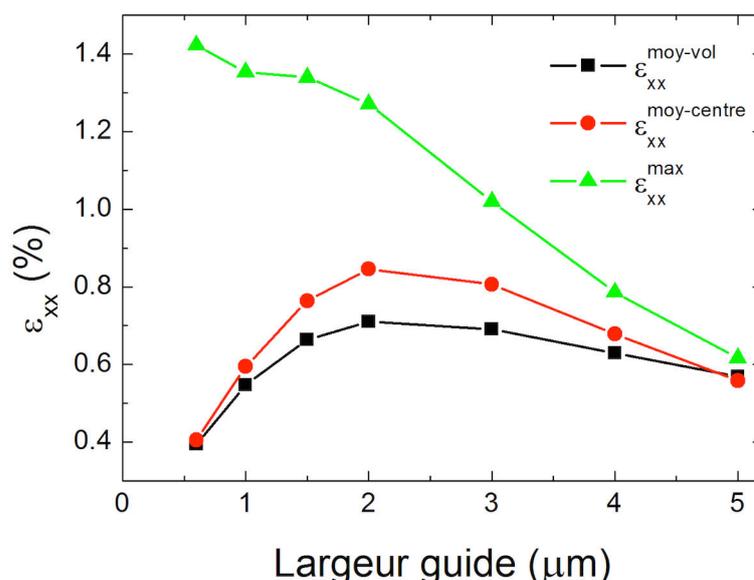


**Fig. 2.47 :** Représentation du champ de déformation uniaxiale dans une structure à injection verticale d'une largeur de 2 µm

On va étudier le transfert de contrainte pour différentes largeurs de guide. La largeur des couches latérales de barrière est fixée à 200 nm. On regarde la valeur de la contrainte pour des guides d'une largeur totale de 0.6 à 5 µm, soit une active de germanium de 200 nm à 4.6 µm.

On a vu dans la partie précédente que plus la largeur du guide est réduite, plus la contrainte maximale est importante au détriment de l'homogénéité suivant la profondeur de la couche.

Les résultats obtenus sont présentés sur la figure 2.48. Tout d'abord, on note que plus la largeur du guide est fine, plus la déformation maximale est importante. La déformation maximale est localisée à l'interface entre le germanium et la couche de SiN. Seulement l'homogénéité de la contrainte est très fortement dégradée. On peut obtenir une déformation maximale de 1.4 % contre 0.4 % dans le volume de la couche de germanium pour un guide de 0.6 µm de large. Lorsque le guide est très large, par exemple pour 5 µm, la déformation maximale et moyennée dans le volume sont très proches pour une valeur autour de 0.55 %. La contrainte est assez homogène. Pour un guide de 2 µm, on se retrouve dans une situation où un compromis peut être obtenu. La déformation maximale est **1.3 %**, et sa valeur moyenne est de 0.8 %. Ces deux valeurs sont assez importantes, et l'homogénéité dans la couche est correcte. Cela est dû aux effets de bords qui se recouvrent et qui se propagent dans une profondeur proche de l'épaisseur de la couche de germanium.



**Fig. 2.48** : Effet de la largeur du guide sur la déformation uniaxiale maximum et moyenne

On peut fixer la largeur maximale de la zone active du guide autour de 1.5  $\mu\text{m}$  pour obtenir un guide de 2  $\mu\text{m}$  de large.

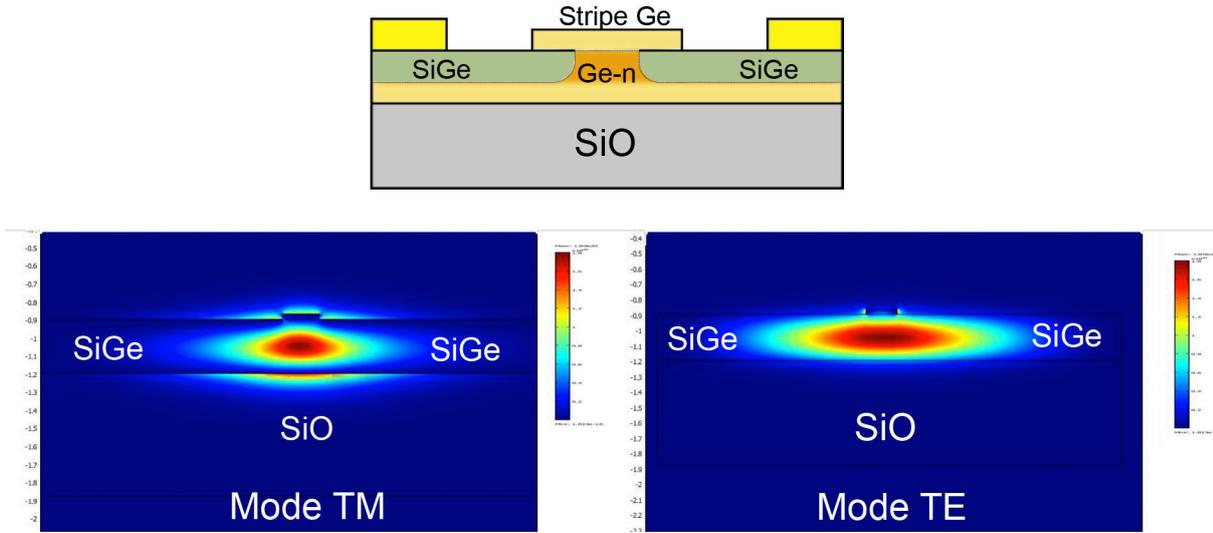
Guide à injection latérale	Dimension
Largeur de la zone active	1.6 $\mu\text{m}$
Largeur des couches latérale d'injection	200 nm
Épaisseur de la couche de germanium	300 nm
Épaisseur de la couche de SiN	300-350nm

Par rapport à une structure à injection verticale, la valeur de déformation de la couche de germanium est beaucoup plus importante, car la couche de SiN est directement en contact avec la couche de germanium. La taille des guides est réduite, et l'homogénéité est meilleure, car il n'est pas nécessaire de réaliser des ouvertures dans le SiN pour la prise de contact.

### 2.2.7 Modélisation du transfert de contrainte dans la structure à base d'hétéroépitaxie de SiGe

#### 2.2.7.1 Confinement optique

Avant de réaliser l'étude du transfert de contrainte, on étudie le dimensionnement du guide d'onde pour obtenir les bonnes propriétés optiques. Un "stripe" d'une épaisseur de 30 nm et d'une largeur de 300 nm permet de confiner les modes optiques TE et TM au centre de la couche de germanium d'une épaisseur de 300 nm pour une longueur d'onde d'émission de 1.7  $\mu\text{m}$ , comme il est montré sur les figures 2.49. En augmentant l'épaisseur du « stripe » à 50 nm, on fait glisser la position du maxima des modes vers le haut de la structure de manière à les rapprocher de la zone active du germanium, et obtenir un meilleur recouvrement.



**Fig. 2.49** : Mode TM et mode TE ( $\lambda = 1.7 \mu\text{m}$ ) dans un guide d'onde de type "stripe". L'arête supérieure permet de confiner la lumière au centre de la structure où se trouve la zone active de germanium contraint par les hétéroépitaxie de SiGe

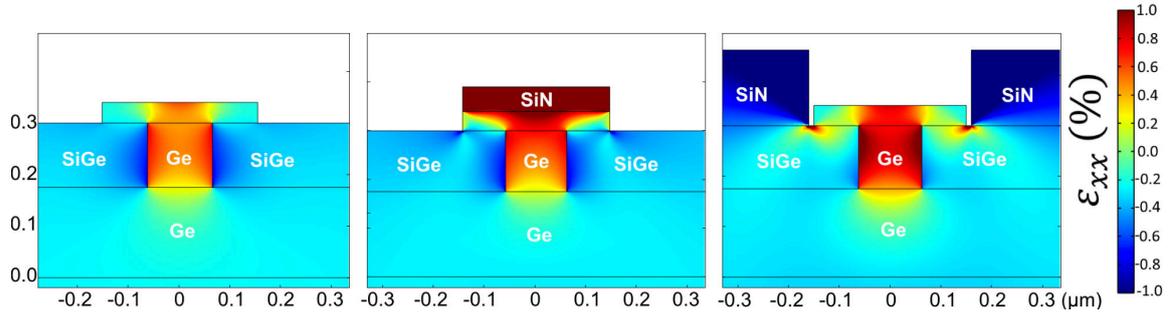
### 2.2.7.2 Dimensionnement de la structure

Pour fixer les dimensions du dispositif, il est primordial de connaître l'épaisseur de la couche de  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$  qu'il est possible d'épitaxier en fonction de sa composition. La contrainte obtenue dans la couche de  $\text{Si}_x\text{Ge}_{1-x}$  est proportionnelle au produit de la composition avec la différence relative du paramètre de maille entre le silicium et le germanium. Plus la concentration en silicium est importante, plus la couche de SiGe sera contrainte. Mais en contrepartie, l'épaisseur maximale qu'il est possible d'obtenir diminue. Comme la croissance est pseudomorphique, la contrainte biaxiale dans la couche de SiGe est égale à la différence de paramètre de maille de la couche par rapport à celui du substrat. Typiquement, les épaisseurs critiques de la croissance d'une couche de SiGe sur substrat silicium sont données dans le tableau suivant (HARTMANN et al., 2011 ; PEOPLE et al., 1985), on fait l'hypothèse que les couches de SiGe sur substrat germanium ont les mêmes épaisseurs critiques.

Alliage	Épaisseur critique	Déformation initiale
$\text{Si}_{0.4}\text{Ge}_{0.6}$	50 nm	$\varepsilon=1.6\%$
$\text{Si}_{0.3}\text{Ge}_{0.7}$	125 nm	$\varepsilon=1.2\%$
$\text{Si}_{0.2}\text{Ge}_{0.8}$	250 nm	$\varepsilon=0.8\%$

On étudie le transfert de contrainte pour les trois compositions des alliages de SiGe données dans le tableau. On appelle zone active, la surface de germanium en contact avec les couches de SiGe. L'épaisseur de la zone active de germanium doit être identique à celle de la couche de SiGe pour un transfert de contrainte optimal. On fixe l'épaisseur totale du film de germanium à 300 nm. Le film de germanium repose sur un substrat en oxyde de silicium, similaire à une structure GoI obtenue par report de couche. Pour l'amplification de la contrainte transférée, on regarde aussi l'effet de l'ajout d'une couche de SiN contraint, soit au centre du guide en compression, soit sur les bords du guide en tension.

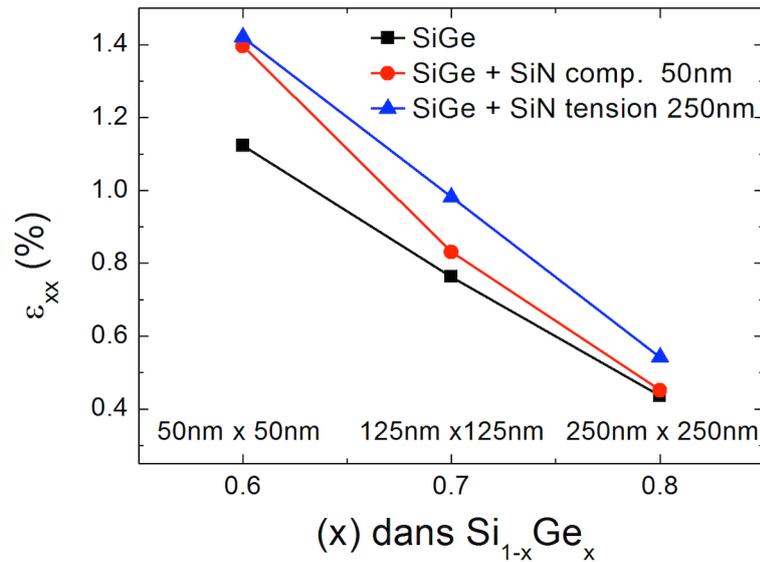
## 2.2. Modélisation du transfert de contrainte dans le germanium



**Fig. 2.50** : Représentation du champ de contrainte uniaxiale pour les 3 types de structures pour des couches de SiGe d'une épaisseur de 125 nm

La figure 2.50 présente les résultats pour une couche de  $Si_{0.3}Ge_{0.7}$  pour les différentes variations de la structure. La surface de la zone active de germanium est de 125 par 125 nm. Dans la configuration simple, on voit que les couches de SiGe viennent tirer latéralement la zone active de germanium. La contrainte est très localisée, mais elle est homogène dans la zone où elle s'applique. En rajoutant une couche de SiN contrainte en compression sur le ruban de matière qui permet de guider la lumière, on peut homogénéiser la contrainte dans la partie supérieure de la zone active du germanium. En rajoutant des couches de SiN latérales en tension, sur les couches de SiGe permet de renforcer la contrainte dans la zone active en germanium. On s'intéresse maintenant à la variation de la contrainte en fonction de la composition de la couche de SiGe. La figure 2.51 présente le résultat de la déformation uniaxiale moyenne dans le volume de la zone active en fonction de la composition de l'alliage. À chaque composition d'alliage, l'épaisseur de la couche de SiGe est adaptée jusqu'à l'épaisseur critique, par conséquent la zone active de germanium également. On choisit un ratio 1 : 1 entre la largeur de la zone active et son épaisseur. En effet, pour une largeur plus importante la contrainte transférée n'est plus homogène au centre de la zone active. On voit que plus la couche de SiGe est riche en silicium, plus la déformation uniaxiale dans la zone active de germanium augmente. L'évolution est linéaire avec la composition de l'alliage, car la contrainte initiale évolue linéairement avec la composition et le rapport entre l'épaisseur de la couche et le volume de zone active est gardé constant pour les trois configurations.

Pour résumer, une couche de  $Si_{0.4}Ge_{0.6}$  permet de déformer le germanium de la zone active avec des valeurs de 1.10 % à 1.40 %, si on utilise des couches de SiN pour amplifier cet effet. En contrepartie, le volume de la zone active est réduit par rapport à une configuration où l'on peut transférer moins de contrainte. Une couche de  $Si_{0.2}Ge_{0.8}$ , permet d'atteindre une déformation uniaxiale d'environ 0.5 % pour une zone active de 250 nm par 250 nm. L'utilisation de couche de SiGe avec une composition riche en silicium est intéressante, car elle permet de combiner les propriétés d'injection électrique et de transfert efficace, mais il faut pouvoir vérifier le bon recouvrement entre le mode optique de la structure avec la zone active en germanium, si son épaisseur devient trop fine.



**Fig. 2.51** : Valeur de la déformation uniaxiale moyenne dans le volume de la zone active en germanium en fonction de la composition de la couche de SiGe

### 2.2.8 Bilan du transfert de contrainte

On a présenté différentes approches pour obtenir des guides contraints en germanium fonctionnant sous injection électrique. Elles sont compatibles avec les procédés de fabrication CMOS. Pour récapituler, on rappelle les valeurs de déformations uniaxiales maximums que l'on peut obtenir pour les différentes structures étudiées.

- Guide d'onde à injection verticale contraint par SiN, et à gravure droite : 0.55 %
- Guide d'onde à injection verticale, et à sous-gravure : 0.87 %
- Guide d'onde à injection latérale contraint par SiN : 1.3 %
- Guide d'onde à injection latérale à base d'hétéroépitaxie SiGe : 1.4 %

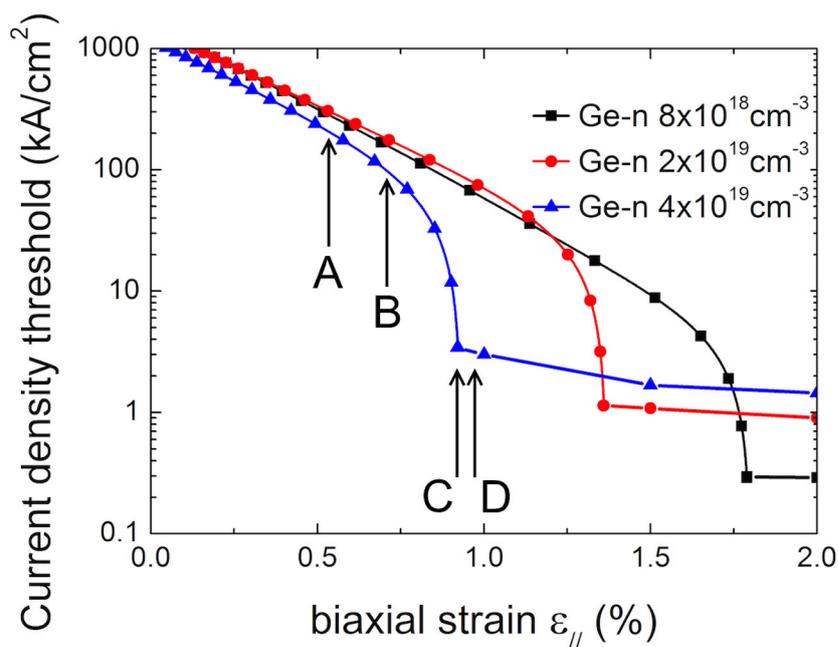
L'abaissement de la vallée  $\Gamma$  par rapport à  $L$  est deux fois moins importante pour une contrainte uniaxiale appliquée par rapport à une contrainte biaxiale, dans le cas particulier des guides très longs, car la contrainte se relaxe suivant la longueur. On peut diviser par deux les valeurs des contraintes uniaxiales pour les convertir en contraintes biaxiales équivalentes. Par ailleurs, si l'on suppose que l'épitaxie du germanium sur silicium est adaptée pour obtenir une déformation initiale de 0.25 %, on obtient les contraintes biaxiales équivalentes pour les différents dispositifs :

- **A** Guide d'onde à injection verticale contraint par SiN, et à gravure droite : 0.53 %
- **B** Guide d'onde à injection verticale, et à sous-gravure : 0.69 %
- **C** Guide d'onde à injection latérale contraint par SiN : 0.9 %
- **D** Guide d'onde à injection latérale à base d'hétéroépitaxie SiGe : 0.95 %

On repositionne les valeurs des contraintes obtenues sur la courbe calculée de la densité de courant de seuil pour obtenir l'inversion de population dans le germanium en fonction

## 2.2. Modélisation du transfert de contrainte dans le germanium

de la déformation en tension. Le résultat est présenté sur la figure 2.52. Les structures à injection verticale permettent de réduire la densité de courant de seuil autour d'une valeur de  $100 \text{ kA.cm}^{-2}$ , mais le niveau de déformation n'est pas assez suffisant pour obtenir un seuil en dessous de la dizaine de  $\text{kA.cm}^{-2}$ . Dans le cas des structures à injection verticale, la déformation atteinte de 0.9% permet d'obtenir un seuil à faible densité de courant autour de  $5 \text{ kA.cm}^{-2}$  pour un dopage de  $N_D = 4 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ .



**Fig. 2.52** : Positionnement des performances du transfert de déformation des différentes structures par rapport à la densité de courant de seuil pour obtenir l'inversion de population dans le germanium



## Chapitre 3

# Étude des propriétés de l'injection électrique dans des couches de germanium non contraint

Dans la partie précédente, on a simulé le comportement électrique au travers d'un système idéal pour obtenir les conditions optimales d'injection de porteurs dans le germanium. On va maintenant s'intéresser à des dispositifs réels dans le but de réaliser un démonstrateur du laser germanium. Les propriétés des couches utilisées pour la réalisation des échantillons (dopage, alignement des bandes, défauts ...) ne sont pas parfaitement connues. Pour cela, on va caractériser les dispositifs électriquement, puis dans un second temps on s'intéressera aux propriétés d'émission de lumière de germanium sous injection électrique. Dans cette partie, on ne s'intéresse qu'à des dispositifs non contraints. La topologie des structures, qui permettent d'étudier les propriétés électriques, n'est pas adaptée à un transfert de contrainte dans le germanium.

Dans un premier temps, on va décrire les couches utilisées pour la réalisation des échantillons de caractérisation électrique. On présentera les différentes techniques de caractérisation électrique des couches réalisées. Le choix de la méthode de caractérisation amène à dimensionner les dispositifs avec une topologie précise. On a mis au point un procédé de fabrication, permettant de mesurer des dispositifs avec des accès coplanaires par la méthode hyperfréquence. Les structures réalisées sont ensuite caractérisées. On s'intéresse à des doubles hétérostructures GaAs-p/Ge-n/GaAs-n, puis à des diodes Schottky en germanium. On introduira la méthode de réalisation de couches SiGe par recuit laser, qui permet d'obtenir une alternative pour la formation d'une double hétérostructure sur germanium. On présentera les résultats d'électroluminescence associés aux différentes structures.

### 3.1 Réalisation des couches de germanium sur substrat GaAs

Dans la suite des travaux, on se concentre sur des couches de germanium épitaxiées sur GaAs. Bien que le substrat soit en III-V, matériau employé pour la conception des lasers à semi-conducteurs, l'intérêt de pouvoir utiliser ce matériau comme support pour la réalisation d'un démonstrateur est multiple. On rappelle les avantages que ce type de substrat offre :

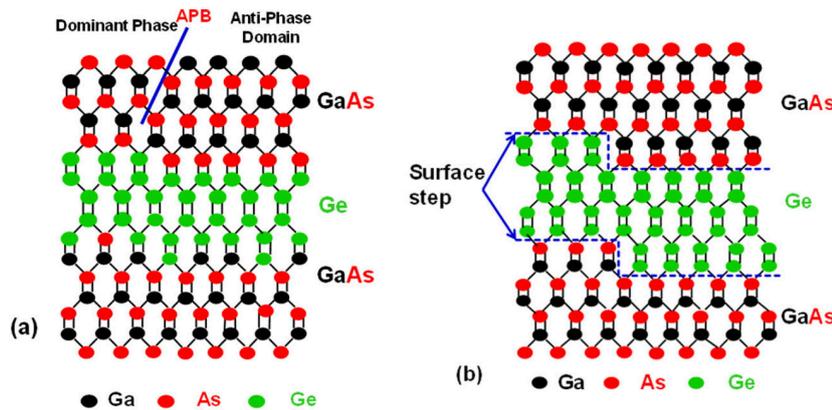
### Chapitre 3. Étude des propriétés de l'injection électrique dans des couches de germanium non contraint

- Accord de paramètre de maille entre le GaAs et le germanium
- Alignement des bandes de type I
- Sélectivité des procédés de gravure avec le germanium pour la réalisation de dispositifs complexes

L'excellente qualité cristalline des couches à l'interface, du fait de l'accord de maille entre les deux matériaux, reste l'avantage majeur.

Les couches sont épitaxiées au Laboratoire de Photonique et de Nanostructures (LPN) par Isabelle Sagnes et Grégoire Beaudoin. L'épitaxie des couches de germanium sur des substrats III-V se fait dans un réacteur de croissance par la méthode MOCVD (Metal Organic Chemical Vapor Deposition) (JAKOMIN et al., 2011 ; KERSAUSON et al., 2011, 2013). La croissance du germanium s'effectue à l'aide d'une source d'isobutyl-germane (IBGe) à une température de 650°C. Durant la croissance du germanium, un flux d'arsine ( $\text{AsH}_3$ ) est maintenu dans la chambre pour éviter la désorption de l'arsenic du substrat lors du début de la croissance de la couche de germanium, mais aussi pour permettre un dopage in situ de type  $n$ .

Dans le cas de la formation d'une double hétérostructure, une reprise d'épitaxie du GaAs sur la couche de germanium est effectuée. La formation d'une couche de GaAs sur un substrat non polaire peut amener à la formation de domaine d'anti-phase. (FRANCIOSI et al., 1996) Ces domaines se forment quand il y a une erreur d'alternance des plans atomique de Ga ou d'As lors de la croissance des premières couches. La phase de la couche de GaAs n'est plus neutre dans certains domaines. Cet effet est représenté sur la figure 3.1 (a). Pour limiter ce problème, les substrats de GaAs utilisés sont de type "6° off", c.-à-d. que la découpe du lingot de GaAs (100) est effectuée avec angle de 6° par rapport à la direction [110]. La surface du plan (100) du cristal se reconstruit avec une double marche atomique pour compenser cet angle. Grâce à cette double marche atomique, la reprise d'épitaxie de la couche de GaAs sur germanium peut s'effectuer en limitant l'apparition de domaine d'anti-phase, en saturant la surface par des atomes d'arsenic lors de la reprise de croissance et obtenir un empilement correct. Cet effet est représenté sur la figure 3.1 (b).



**Fig. 3.1 :** Figure extraite de la référence (HUDAIT et al., 2012), permettant d'illustrer la formation de domaine d'anti phase pour la structure (a) GaAs/Ge/(001)GaAs et (b) GaAs/Ge/(001)GaAs 6°-off suivant [100], la double marche atomique permet d'éliminer les domaines d'anti-phase en repartant d'un plan atomique d'As

### 3.1. Réalisation des couches de germanium sur substrat GaAs

Le dopage des couches est réalisé in situ durant la croissance. Pour la couche de GaAs-p, on incorpore une densité d'impuretés dopantes Zn à une valeur maximum de  $1 \times 10^{19} \text{cm}^{-3}$ . Le dopage de la couche de GaAs-n est limité à une valeur de  $1 \times 10^{18} \text{cm}^{-3}$ . Ces valeurs de dopage sont en accord avec le dimensionnement effectué dans la partie modélisation électrique pour obtenir une injection optimale des porteurs dans le germanium au travers d'une double hétérostructure.

On rappelle les valeurs de la discontinuité attendue en bande de valence entre le germanium et le GaAs. Elles sont de  $\Delta E_V = 0.50 \text{ eV}$  pour l'empilement Ge sur GaAs, et  $\Delta E_V = 0.25 \text{ eV}$  pour GaAs sur germanium sur un substrat "6°-Off". (FRANCIOSI et al., 1996; HUDAIT et al., 2012, 2013)

Pour les doubles hétérostructures, on choisit de réaliser l'empilement GaAs-p sur Ge-n/GaAs-n avec un substrat 6°-off. L'épaisseur de la couche est choisie à 200 nm afin de pouvoir réaliser des contacts et une injection de bonne qualité. On choisit de placer la couche de GaAs-p en reprise d'épitaxie sur germanium, car la hauteur de discontinuité attendue permet une injection plus efficace des trous dans le germanium, du fait que la discontinuité en bande de valence est réduite. Par ailleurs, en limitant l'épaisseur de la couche de GaAs dopé de type *p* à 200 nm, cela permet de limiter les pertes optiques par absorption par porteurs libres, qui est plus importante dans le cas des trous par rapport aux électrons dans le cas des applications photoniques des dispositifs. Des couches de germanium seul, épitaxiées sur GaAs-n et GaAs-p, ont également été réalisées afin de pouvoir effectuer des mesures complémentaires.

#### 3.1.1 Transport de courant attendu dans la double hétérostructure GaAs/-Ge/GaAs

Il n'existe pas de formalisme particulier pour décrire le courant à travers une double hétérostructure, c'est pourquoi on a eu recours à un logiciel de simulation afin d'aider à la compréhension du transport des porteurs. On va donner quelques ordres de grandeur afin d'identifier les caractéristiques attendues de la double hétérostructure GaAs/Ge/GaAs. Pour faciliter la compréhension, on décompose la structure en deux parties.

Pour l'hétérojonction GaAs-p/Ge-n, le courant dans la structure est dominé par un courant de trous, car l'énergie de bande interdite du GaAs est plus élevée que celle du germanium. En polarisation directe, on va injecter des trous du GaAs-p vers le Ge-n. Le courant d'électrons du germanium vers le GaAs-p reste minoritaire. On s'attend à être dans un régime ohmique et à avoir un niveau de courant important à partir d'une tension de polarisation proche de la tension de diffusion. Le potentiel qui découle de la tension de diffusion peut s'exprimer par la différence d'énergie de Fermi entre les deux semiconducteurs avant leurs mises en contact :

$$\phi_i = E_F^n - E_F^p \quad (3.1)$$

En réexprimant la position des niveaux de Fermi par rapport à l'alignement des niveaux de vide, on peut réécrire cette expression par rapport à l'énergie de bande interdite du semiconducteur le plus étroit, la discontinuité de la bande de conduction et la position relative des bandes de conduction par rapport au niveau de Fermi (CHUANG, 1995) :

$$\phi_i = E_G + \Delta E_C - \phi_p - \phi_n \quad (3.2)$$

### Chapitre 3. Étude des propriétés de l'injection électrique dans des couches de germanium non contraint

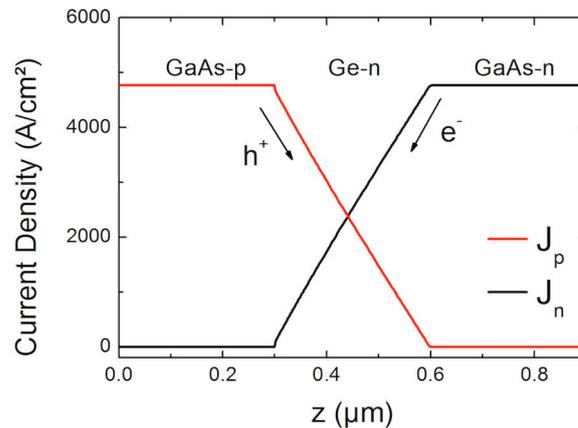
Pour les niveaux de dopage sur lequel on travaille, les semiconducteurs sont quasi dégénérés, l'approximation de Boltzmann ne s'applique plus, mais on peut considérer que  $\phi_p - \phi_n \sim 0$ . On estime la tension de diffusion entre 0.9 et 1.15 eV, selon l'alignement des bandes de conduction qui est compris 0.25 et 0.50 eV.

Dans le cas de l'hétérojonction isotype Ge-n/GaAs-n, on n'a qu'un seul type de porteur qui participe à l'établissement du courant dans la structure. Comme dans le cas précédent, on s'attend à ce que la structure soit dans un régime ohmique quand la tension appliquée est proche de la tension de diffusion. Dans ce cas, la tension de diffusion s'exprime de la manière suivante :

$$\phi_i = E_F^n - E_F^p = \Delta E_C + \phi_n - \phi_N \quad (3.3)$$

Sachant que pour les niveaux de dopage sur lequel on travaille, les semiconducteurs sont quasi dégénérés  $\phi_p - \phi_N \sim 0$ . On estime la tension de diffusion à 0.25 eV, selon l'alignement des bandes de conduction.

Si on considère maintenant la structure complète, pour avoir l'établissement d'un courant, les porteurs doivent être injectés du GaAs-n(p) vers le Ge-n, et passer ensuite dans le GaAs-p(n) afin de pouvoir se recombinaer sur les contacts métalliques. On le voit sur la figure 3.2 où le courant injecté dans le germanium décroît au fur et à mesure que les porteurs libres se recombinaent entre eux jusqu'à l'interface. À cet endroit, les porteurs doivent franchir de nouveau une barrière qui n'est pas favorable à l'injection, le courant est donc limité par le courant de saturation.



**Fig. 3.2 :** Densité de courant  $J_p$  et  $J_n$  dans la double hétérostructure en polarisation directe en fonction de l'épaisseur des couches

Les propriétés d'injection seront principalement pilotées par l'hétérojonction du côté GaAs-p/Ge-n qui possède la tension de diffusion la plus élevée. Une fois que cette tension de diffusion est surmontée, les porteurs seront injectés de manière importante dans le germanium.

## 3.2 Méthodes de caractérisation électriques

On connaît le comportement attendu sous injection électrique de la structure idéale que l'on va étudier. On va maintenant s'intéresser aux méthodes que l'on peut employer pour remonter à ses propriétés, comme le dopage des couches, l'alignement des bandes entre les deux semiconducteurs, ou encore la qualité des contacts métalliques.

### 3.2.1 Résistivité d'une couche de semiconducteur

Afin d'introduire la méthode de caractérisation des contacts, on va présenter le principe de résistivité de couche d'un semiconducteur, et définir la notion de résistance de contact. La densité de courant de conduction  $\vec{J}_c$  dans un barreau semiconducteur homogène découle du flux de déplacement des électrons et des trous sous l'action d'un champ électrique  $\vec{E}$  :

$$\vec{J}_c = \sigma \vec{E} \quad (3.4)$$

On définit la conductivité  $\sigma$  par :

$$\sigma = q(n\mu_n + p\mu_p) (\Omega.cm)^{-1} \quad (3.5)$$

Où  $q$  représente la charge élémentaire,  $n$  la densité d'électrons,  $p$  la densité de trous,  $\mu_n$  et  $\mu_p$  la mobilité des électrons et des trous dans le semiconducteur. Il s'agit de l'écriture microscopique de la loi d'Ohm. En intégrant l'expression 3.4 pour un barreau semiconducteur de longueur  $L$ , d'épaisseur  $h$ , et de largeur  $W$ , on obtient la formule suivante :

$$V = R.I \quad (3.6)$$

Où  $V = E \times L$  la différence de potentiel aux bornes du barreau,  $I = J_c(h \times W)$  le courant total circulant dans la section de surface  $(h \times W)$ , et  $R$  la résistance électrique du barreau qui est défini par :

$$R = \rho \frac{L}{h \times W} \quad (3.7)$$

Avec  $\rho$  ( $\Omega.cm$ ) est la résistivité du semiconducteur, qui est l'inverse de la conductivité  $\sigma$ . Pour une couche mince d'épaisseur  $h$ , et pour un dopage homogène, il est possible de réécrire l'expression ci-dessus afin de ne la faire dépendre que de la résistivité et de l'épaisseur. On parle alors de résistance de couche  $R_{Sh}$

$$R = \frac{\rho}{h} \frac{L}{W} = R_{Sh} \frac{L}{W} (\Omega) \quad (3.8)$$

La résistance de couche  $R_{Sh} = \rho/h$  a une unité exprimée en Ohm, car le rapport  $L/W$  est adimensionné, mais il ne s'agit pas d'une résistance à proprement parler.  $R_{Sh}$  représente une valeur moyenne de la résistance du semiconducteur en fonction de son épaisseur de couche.

### Chapitre 3. Étude des propriétés de l'injection électrique dans des couches de germanium non contraint

---

On retrouve parfois le terme de résistance carré de la couche  $R_{\square}$  ( $\Omega/\square$ ), qui correspond à une résistance découpée en surface élémentaire (rapport  $L/W = 1$ ). Le changement explicite d'unité permet d'éviter de confondre la résistance de couche avec la résistance totale du semiconducteur.

#### 3.2.2 Interface métal-semiconducteur

Quand un métal et un semiconducteur sont mis en contact, un dipôle se forme à l'interface, étant donné la différence de travaux de sortie. Il est constitué d'une zone de charge d'espace s'étendant dans le semiconducteur, et d'une charge surfacique sur le métal, car on peut considérer qu'elle est écrantée très fortement. Pour compenser la formation de cette charge d'espace dans le semiconducteur, qui entraîne une augmentation du potentiel électrostatique, les bandes d'énergie vont se courber. Il se forme une barrière de potentiel à l'interface entre le semiconducteur et le métal. L'équilibre thermodynamique est atteint lorsque le flux d'électrons à l'interface est nul lorsque les niveaux de Fermi sont alignés en énergie. La courbure des bandes  $\Phi_0$  dépend des niveaux de Fermi du métal  $E_{F,M}$  et du semiconducteur  $E_{F,S}$  :

$$\Phi_0 = E_{F,S} - E_{F,M} \quad (3.9)$$

Lorsque le métal, et le semiconducteur sont en contact, la hauteur de la barrière de potentiel  $\phi_B$  est donnée par l'expression :

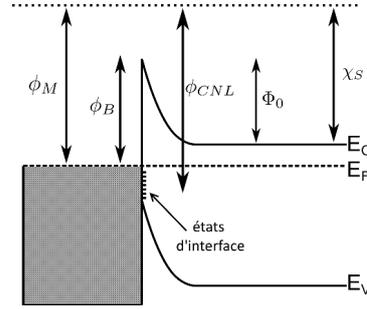
$$\phi_B = \phi_M - \chi_S \quad (3.10)$$

Où  $\phi_M$  représente le travail de sortie du métal,  $\chi_S$  l'affinité électronique du semiconducteur, comme illustré sur la figure 3.3. L'expression de la hauteur de barrière est donnée pour le cas idéal de Schottky-Mott. Seulement, les états de surface du semiconducteur ne sont pas pris en considération. La rupture de symétrie à l'interface du semiconducteur peut générer des états de surface. Des charges de surfaces provenant de liaisons vacantes, une contamination de la surface, la présence d'un oxyde, ou encore la pénétration des fonctions d'onde du métal dans le semiconducteur (MIGS - Metal induced gap states) peuvent également influencer. Lorsque la densité d'états surfaciques est suffisamment importante, ils peuvent jouer un rôle prépondérant si leurs niveaux d'énergie sont situés dans la bande interdite du semiconducteur. Ces états vont participer à l'alignement des bandes avec le niveau de Fermi du métal, ce qui fixe une barrière d'énergie complètement indépendante du travail de sortie du métal (HEINE, 1965; TERSOFF, 1984). Ce phénomène s'appelle le blocage du niveau de Fermi. La hauteur de barrière pour une interface métal/semiconducteur peut être décrite par la formule générale suivante (ROBERTSON, 2000) :

$$\phi_B = S(\phi_m - \phi_{CNL}) + (\phi_{CNL} - \chi_S) \quad (3.11)$$

Où  $\phi_{CNL}$  est le niveau de neutralité de charge (charge neutrality level - CNL) mesuré à partir du niveau de vide. Il traduit la population initiale des états d'interface. Le niveau de neutralité de charge peut alors être vu pour la surface d'un semiconducteur comme l'équivalent du niveau de Fermi d'un métal. Il est défini de sorte que la densité surfacique de charge soit nulle exactement quand les états d'interface sont remplis jusqu'à ce niveau d'énergie.

## 3.2. Méthodes de caractérisation électriques



**Fig. 3.3 :** Diagramme de bande à l'interface entre un métal et un semiconducteur dopé de type  $n$

La constante  $S$  permet de pondérer la hauteur de barrière entre les effets intrinsèques du semiconducteur et du métal avec les états d'interface. Cette constante peut s'obtenir expérimentalement en mesurant la variation de la barrière de potentiel en fonction du travail de sortie du métal  $S \equiv \partial\phi_B/\partial\phi_M$ . Si  $S$  tend vers 0, dans le cas de la limite de Bardeen, le rôle des états de surface est prépondérant, et le niveau de Fermi est aligné par rapport au niveau d'énergie de neutralité de charge. Quand  $S$  tend vers 1, le formalisme classique du contact Schottky-Mott peut s'appliquer, et la hauteur de barrière est dépendante du travail de sortie du métal.

Une loi empirique permet d'évaluer le paramètre  $S$ , qui possède une dépendance avec la constante diélectrique optique  $\varepsilon_\infty$  du semiconducteur (MONCH, 2012 ; TERSOFF, 1984) :

$$S = \frac{1}{1 + 0.1(\varepsilon_\infty - 1)^2} \quad (3.12)$$

Que ce soit dans le modèle de Bardeen (état de surface du semiconducteur) ou dans le modèle de Heine (perturbation par les fonctions d'onde du métal - MIGS), le mécanisme d'alignement revient au même. C'est pour cela que l'on fait rarement la distinction entre les deux.

### 3.2.2.1 Cas du contact métallique sur germanium

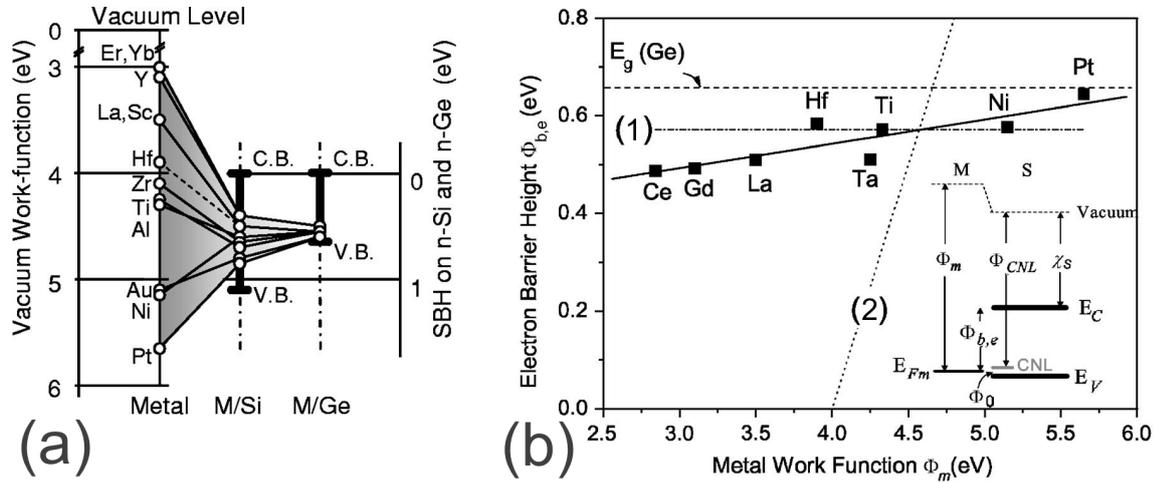
**3.2.2.1.1 Effet du blocage du niveau de Fermi** Dans le cas du germanium, le phénomène du blocage de niveau de Fermi est très important. Il possède une constante diélectrique de  $\varepsilon_\infty = 16.9$ . Le coefficient  $S$  est estimé à 0.038. Il est mesuré expérimentalement entre 0.02 et 0.05 d'après des travaux récents. (DIMOULAS et al., 2006 ; NISHIMURA et al., 2007). La figure 3.4 présente le résultat de ces mesures. On note que pour différents métaux, la hauteur de barrière reste quasi constante. On peut déduire que le niveau de neutralité de charge des états de surface se situe proche de la bande de valence. En comparaison pour le silicium, le coefficient  $S$  est estimé à 0.20. Dans le cas du germanium, on peut réécrire l'expression de la hauteur de barrière  $\phi_b$  sous la forme :

$$q\phi_B = E_G - E_{CNL} \quad (3.13)$$

Où  $E_{CNL}$  est la position du niveau d'énergie de neutralité de charge par rapport à la bande de valence. Il est estimé entre 30meV et 120 meV pour le germanium. À l'interface entre le métal et le germanium, le niveau de Fermi du métal sera toujours proche de la bande de valence, car la

### Chapitre 3. Étude des propriétés de l'injection électrique dans des couches de germanium non contraint

valeur de  $q\phi_B$  est proche de la valeur de la bande interdite. Ce phénomène implique la formation d'un contact redresseur (Schottky) sur du germanium dopé  $n$  et un contact ohmique avec du germanium dopé  $p$  quelque soit le métal utilisé.



**Fig. 3.4 :** À l'interface métal/semiconducteur, la valeur de la hauteur de barrière reste dans une fourchette étroite, quel que soit le métal utilisé en raison du blocage du niveau de Fermi. Figure (a) issue de (NISHIMURA et al., 2007) et (b) de (DIMOULAS et al., 2006)

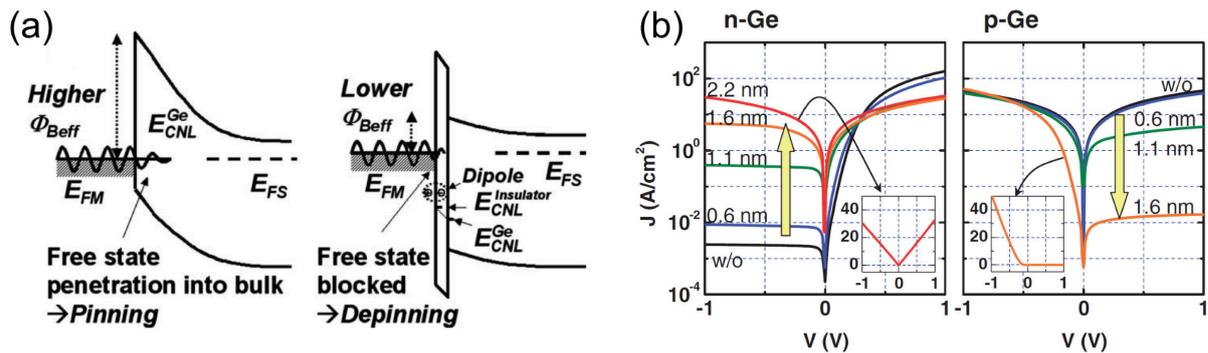
L'origine du blocage du niveau de Fermi pour le germanium est encore discutée. Si les états d'interface sont attribués à des liaisons vides, ou à des défauts de couche, la préparation de la surface de l'échantillon peut moduler la force du blocage, et la hauteur de la barrière. (NISHIMURA et al., 2007) a observé que les traitements appliqués à l'interface du germanium avant ou après le dépôt ne modifiaient pas la hauteur de barrière. Il a attribué le blocage du niveau de Fermi à la pénétration des états métalliques dans la bande interdite du germanium (théorie MIGS). Mais le métal peut réagir chimiquement avec la surface du semiconducteur et venir créer des liaisons vacantes. (KASAHARA et al., 2011) a montré que le comportement ohmique sur du germanium dopé de type  $p$  en utilisant de l'aluminium est lié à la présence de défauts. Il a comparé un contact métallique en  $\text{Fe}_3\text{Si}$  épitaxié en accord de maille avec le germanium. Il a mesuré que ce contact est redresseur, et il est donc indépendant du blocage du niveau de Fermi. En modulant la densité de défauts à l'interface, il peut retrouver un comportement ohmique.

**3.2.2.1.2 Contact ohmique sur germanium** Pour obtenir un contact ohmique sur germanium dopé de type  $n$ , il faut pouvoir diminuer la hauteur de barrière  $\phi_b$ . Dans le cas du germanium, la hauteur de barrière est fixée par la position du niveau de neutralité de charge. L'insertion d'une fine couche d'isolant entre le métal et le germanium peut bloquer la pénétration des fonctions d'ondes du métal dans le semiconducteur si l'on considère que cet effet est à l'origine du blocage du niveau de Fermi. D'après le modèle MIGS, tout isolant avec une énergie de bande interdite plus grande et une constante diélectrique plus faible que le germanium peut débloquent plus efficacement le niveau de Fermi. Le principe de cet effet est illustré sur la figure 3.5 (a). De manière plus générale, le rôle de la couche isolante sur le déblocage du niveau de Fermi peut être attribué à la présence d'un dipôle d'interface supplémentaire, ou à des charges fixes. Elles peuvent moduler la position du niveau de neutralité de charge à l'interface

### 3.2. Méthodes de caractérisation électriques

du semiconducteur (HU et al., 2011).

Différents matériaux ont été étudiés pour débloquent le niveau de Fermi :  $\text{GeO}_x$  (NISHIMURA et al., 2008),  $\text{Al}_2\text{O}_3$  (GAJULA et al., 2014; ZHOU et al., 2008),  $\text{Ge}_3\text{N}_4$  (LIETEN et al., 2008),  $\text{Si}_3\text{N}_4$  (KOBAYASHI et al., 2009),  $\text{TiO}_2$  (LIN et al., 2011). Un exemple de modulation de la hauteur de barrière est présenté sur la figure 3.5 (b). Dans le cas d'une couche de germanium dopé de type  $n$ , le contact passe progressivement d'un état redresseur à un contact ohmique en augmentant l'épaisseur de la couche d'interface. Inversement pour une couche dopée de type  $p$ , le contact passe d'un comportement ohmique à redresseur. Cette expérience montre que la modulation de la hauteur de barrière est effective par l'introduction d'une barrière isolante. Il y a un compromis à trouver pour l'épaisseur de la couche isolante. Une couche trop fine ne débloquent que partiellement le niveau de Fermi. Une couche trop épaisse rend le contact très résistif du fait que les électrons doivent franchir une barrière importante par effet tunnel. Avec cette technique, la résistance spécifique de contact reste assez élevée pour des applications dans le cas de transistor. L'utilisation du  $\text{TiO}_2$  semble être une approche prometteuse, car l'alignement de la position de la bande de conduction coïncide avec celle du germanium. De ce fait, les électrons injectés ne voient pas de barrière tunnel supplémentaire.



**Fig. 3.5 :** Effet du déblocage de niveau de Fermi grâce à l'ajout d'une couche isolante (a) Schéma de principe issue de (KOBAYASHI et al., 2009) (b) Mesures expérimentales issues de (NISHIMURA et al., 2008) montrant l'évolution du courant grâce au déblocage du niveau de Fermi par la couche de  $\text{GeO}_x$ .

Cette technique n'est pas la seule pour obtenir un contact ohmique sur germanium. Un effet du déblocage du niveau de Fermi peut être obtenu en passivant la surface par une solution sulfure avant le dépôt métallique et permet d'éliminer les liaisons vacantes lors de la formation du contact (FRANK et al., 2006; KASAHARA et al., 2014; THATHACHARY et al., 2010).

On peut aussi citer l'utilisation de nickel pour la réalisation de contact ohmique sur germanium. Le nickel réagit très fortement avec le germanium même à basse température ( $250^\circ\text{C}$ ). Il se forme un composé  $\text{NiGe}$  à l'interface (GALLACHER et al., 2012) avec une très faible résistivité, et une caractéristique ohmique. Cette technique permet une déposition directe du métal, mais consomme une épaisseur non négligeable de germanium pour la formation de la couche de  $\text{NiGe}$ , et limite le budget thermique de l'échantillon.

Dans la suite des travaux, on a réalisé des essais de déblocage du niveau de Fermi, en utilisant une couche d' $\text{Al}_2\text{O}_3$ , afin d'étudier les propriétés du germanium. Les résultats seront présentés dans la suite.

### Chapitre 3. Étude des propriétés de l'injection électrique dans des couches de germanium non contraint

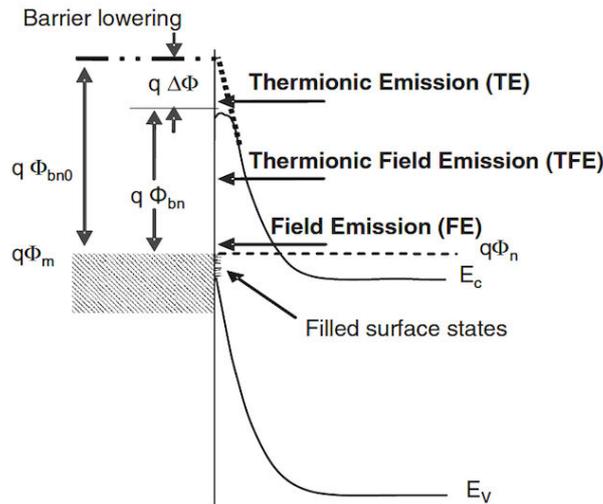
#### 3.2.2.2 Définition des résistances de contact

L'injection des porteurs à l'interface entre un semiconducteur et un métal peut faire intervenir différents modes de transport électronique

- Émission thermoélectronique, par saut de barrière des porteurs à l'interface activé thermiquement
- Effet tunnel, passage des porteurs à travers la barrière à l'interface.
- Effet tunnel assisté thermiquement

Le courant circulant à l'interface entre un métal et un semiconducteur peut être quantifié en faisant intervenir le potentiel appliqué, la hauteur de barrière entre les deux matériaux, et le niveau de dopant du semiconducteur :

$$J = f(V, \Phi_B, n) \quad (3.14)$$



**Fig. 3.6 :** Schéma de l'interface métal/semiconducteur de type  $n$  représentant les différents modes de transport, extrait de la publication (HUTIN et al., 2009)

Les propriétés de transport peuvent être modifiées par la présence d'états d'interface. Tous ces éléments rendent complexe le problème du transport à l'interface, et il est difficile de prédire une valeur de résistance théorique de contact.

On peut mesurer la qualité d'un contact par une approche expérimentale. On définit la résistance spécifique de contact (SZE, 1981) :

$$\rho_c = \left( \frac{\partial J}{\partial V} \right)_{V=0}^{-1} \Omega.cm^2 \quad (3.15)$$

Cette grandeur permet de quantifier l'écoulement des porteurs entre le métal et le semiconducteur. Elle permet dans sa description d'englober ce qui se produit autour de l'interface, et non à

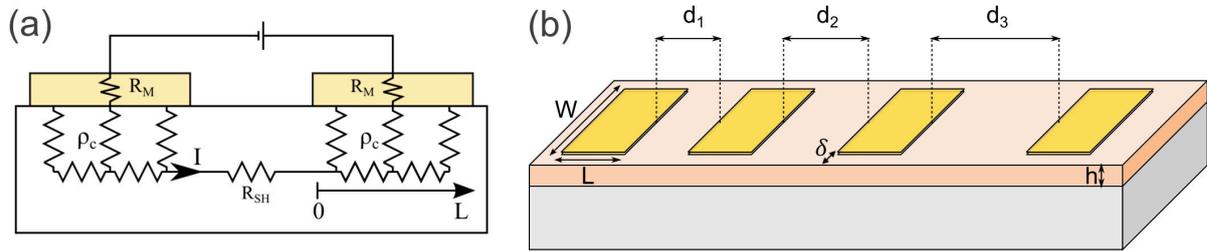
l'interface uniquement. En admettant que la distribution de courant sous le contact de surface  $S$  soit uniforme et homogène, cette grandeur est reliée à la résistance de contact  $R_C = \rho_c/S$  ( $\Omega$ )

#### 3.2.3 Méthode de ligne de transmission

Il existe plusieurs méthodes pour extraire la résistance de contact. La méthode de ligne de transmission (transmission line method - TLM) est couramment utilisée pour mesurer la qualité d'un contact métallique. (SCHRODER, 2006) Cette méthode consiste à injecter du courant entre deux plots de métallisation au travers d'une couche de semiconducteur dopé et d'épaisseur finie, pour permettre l'extraction de la résistance spécifique de contact. Lors du passage à travers les différents éléments du dispositif, le courant va rencontrer trois types de résistance :

- La résistance du métal, en entrée et en sortie du semiconducteur  $R_M$ , que l'on peut négliger dans la plupart des cas
- La résistance spécifique de contact  $\rho_c$ , qui correspond à la résistance équivalente distribuée sous le contact
- La résistance de couche du semiconducteur  $R_{SH}$ , entre deux plots de métallisation.

Le schéma équivalent de la structure est représenté sur le schéma (a) de la figure 3.7.



**Fig. 3.7 :** (a) Schéma du circuit équivalent lors du passage du courant entre deux plots métalliques au travers d'une couche de semiconducteur (b) Schéma du dispositif TLM

La méthode d'extraction consiste à mesurer la résistance totale du système entre deux plots séparés à une distance variable  $d_i$ . Un exemple de dispositif est représenté sur le schéma (b) de la figure 3.7. En faisant varier la distance des plots de métallisation, on isole la contribution de la résistance de couche à la résistance mesurée. Une régression linéaire en fonction de la distance séparant deux plots de métallisation permet d'extraire la résistance de contact, la longueur de transfert et la résistance de couche, grâce à la formule suivante :

$$R(d) = 2R_c + R_{Sh} \frac{d_i}{W} \quad (3.16)$$

En pratique, le courant n'est pas distribué de manière homogène sous le contact. D'après la méthode de résolution des équations des télégraphes du circuit équivalent de la structure (SCHRODER, 2006), la distribution du potentiel sous le contact subit une chute exponentielle en fonction de l'extension latérale. En réécrivant le potentiel électrique, en considérant la propagation dans les différents éléments de la structure, on obtient :

### Chapitre 3. Étude des propriétés de l'injection électrique dans des couches de germanium non contraint

---

$$V(x) = \frac{I\sqrt{R_{Sh}\rho_c}}{W} \frac{\cosh((L-x)/L_T)}{\sinh(L/L_T)} \quad (3.17)$$

Où  $L$  est la longueur du plot métallique,  $W$  sa largeur, et  $I$  le courant traversant le contact.  $L_T$  désigne la distance de transfert du courant du semiconducteur vers le métal. Elle est définie par :

$$L_T = \sqrt{\frac{\rho_c}{R_{Sh} + R_M}} \quad (3.18)$$

Pour une résistance de couche donnée, plus la résistance spécifique de contact augmente, plus la longueur pour transférer le courant du semiconducteur vers le métal sera importante. Le passage de courant va se faire en cherchant à minimiser le chemin qui permet d'obtenir la résistance globale du système le plus faible, et va donc vouloir limiter son extension dans le semiconducteur. C'est pourquoi le flux de courant est principalement concentré sur le bord du plot métallique. Il faut donc prévoir des plots de métallisation assez longs devant les caractéristiques de la couche afin de pouvoir faire une mesure pertinente du système. Il est nécessaire d'effectuer une gravure autour de l'échelle TLM pour isoler la structure des fuites latérales de courant. L'augmentation de l'écart entre le bord de la couche et la position du métal engendre une augmentation de l'erreur d'estimation.

On peut citer des variantes de mesure de la résistivité de contact, comme la technique TLM circulaire, qui consiste à remplacer les plots métalliques rectangulaires par des plots circulaires concentriques. Cette technique permet d'éliminer le problème des fuites latérales, mais elle présente une empreinte trop importante par rapport à la taille typique des échantillons réalisés. Il existe une variante qui utilise des contacts flottants entre les plots de métallisation qui permet d'inclure la contribution de la résistance du métal, mais la technique de réalisation nécessite de pouvoir fabriquer des lignes de contacts de largeur très fines (500 nm) (LIJADI et al., 2005).

#### 3.2.4 Réalisation et caractérisation des contacts métalliques sur des couches de GaAs.

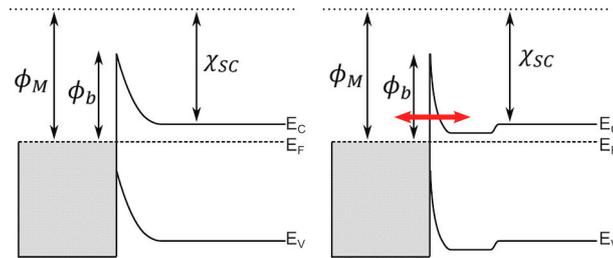
Pour avoir une bonne qualité d'injection des porteurs dans la double hétérostructure, il est nécessaire d'avoir un contact ohmique de bonne qualité avec des résistances d'accès minimisées. Dans le cas de l'empilement GaAs-p/Ge-n/GaAs-n, le contact s'effectue sur les couches de GaAs.

##### 3.2.4.1 Contact GaAs $n$

Le contact sur la couche de GaAs dopée de type  $n$  est un standard de la fabrication de dispositif à base de GaAs. Il est réalisé à l'aide de l'empilement de métallisation Ni/AuGe/Ni/Au, suivi d'un recuit rapide à 400°C pendant 1 minute. Le nickel vient réagir avec l'oxyde natif du GaAs et promouvoir l'adhésion de l'empilement métallique sur l'échantillon. Lors du recuit, il va se former un eutectique AuGe, qui va permettre la diffusion du Ge dans le GaAs grâce à la perturbation du réseau cristallin par le Ni. Les atomes de Ge vont diffuser localement sous le contact et augmenter très fortement le dopage de la couche de GaAs de type  $n$ . L'extension de

### 3.2. Méthodes de caractérisation électriques

la barrière de potentiel est réduite et les électrons sont alors libres d'être injectés dans le GaAs par effet tunnel. Comme il s'agit d'un contact diffusif, les propriétés de la couche de GaAs sous le métal sont modifiées. L'extension de la diffusion peut s'étendre sur quelques centaines de nanomètres. La seconde couche de nickel joue le rôle de barrière anti diffusion de la couche d'or supérieure qui permet d'épaissir le contact. Une fois déposés, ces contacts limitent le budget thermique de l'échantillon, et ne peuvent plus subir de recuit au-delà de 400°C sous peine de dégrader la métallisation.



**Fig. 3.8 :** Principe du contact ohmique sur GaAs-n. Les électrons peuvent passer par effet tunnel à l'interface grâce au dopage local sous le contact

La réalisation de ces contacts est effectuée au LPN, qui dispose d'un bâti de métallisation avec cette recette en standard. On caractérise ensuite la qualité du contact grâce à l'échelle TLM. On dispose d'un montage à deux points pour polariser les différents plots de métallisation. On ne dispose pas d'un montage à 4 points qui permet d'éliminer l'influence du système de mesure. Dans un premier temps, on mesure la résistance d'accès du dispositif de mesures, en contactant les points entre elles. Elle est estimée à 7.9  $\Omega$ . La tension appliquée est corrigée de cette valeur de résistance pour le traitement de mesure. On mesure ensuite les résistances entre les différents plots de métallisation. Le bon alignement des points permet d'extraire la résistance de couche, et la résistance de contact. On trouve pour le GaAs *n* une résistance de contact de 5.5  $\Omega$ , et une résistance de couche de 97.2  $\Omega/\square$ . On peut remonter à une estimation du dopage de la couche pour le GaAs d'une épaisseur de 500nm en utilisant un abaque de la résistivité en fonction du dopage. (SZE, 1981) On trouve une valeur de dopage actif estimée à  $7 \times 10^{17} cm^{-3}$ , ce qui est proche de la valeur visée lors de l'épitaxie de  $1 \times 10^{18} cm^{-3}$ .

En normalisant la résistance de contact par rapport à la taille du plot de la métallisation ( $40 \times 120 \mu m$ ), on trouve une résistance équivalente de contact de  $\rho_C = 2.6 \times 10^{-4} \Omega.cm^2$ . Cette valeur reste très grande devant les standards obtenus pour cette métallisation. La surface active du métal permettant l'injection du courant est en réalité réduite, seuls les coins du plot sont mis à contribution. En utilisant la grandeur de ligne de transmission, qui est estimée à 6.43  $\mu m$  en négligeant la résistance du métal, on trouve une résistance spécifique de contact de  $\rho_C = 2.2 \times 10^{-6} \Omega.cm^2$ . En réalité, la valeur de cette résistance doit être légèrement supérieure, à cause des différentes hypothèses pour établir l'extraction de la résistance, mais on a une métallisation de bonne qualité, car sa valeur est de l'ordre de  $10^{-6} \Omega.cm^2$ .

#### 3.2.4.2 Contact GaAs *p*

Le contact ohmique sur GaAs *p* est plus difficile à obtenir. Il n'existe pas de recettes bien définies comme pour les échantillons de type *n*. Par exemple, les contacts diffusifs font intervenir des

### Chapitre 3. Étude des propriétés de l'injection électrique dans des couches de germanium non contraint

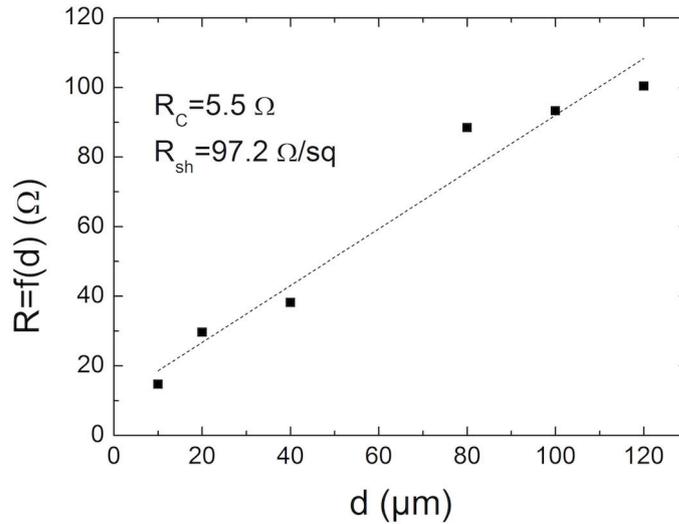


Fig. 3.9 : Mesures TLM du contact ohmique sur GaAs-n

alliages à base d'or et de zinc ou de béryllium. Il s'agit de technique non standard difficile à mettre en oeuvre. On ne souhaite pas les utiliser, car l'alliage pourrait diffuser dans toute la couche de GaAs qui très fine (200 nm) dans le cas des doubles hétérostructures réalisées et venir dégrader l'interface avec le germanium. On s'oriente sur l'utilisation de contact non diffusif. Dans ce cas, l'approche consiste à utiliser un métal avec un travail de sortie plus grand que l'affinité électronique du semiconducteur additionnée à l'énergie de bande interdite du semiconducteur. Cette configuration permet un alignement du niveau de Fermi du métal avec la bande de valence. Le GaAs a une affinité électronique de 4.07 eV et son énergie de bande interdite est de 1.42 eV. Le platine, ou le vanadium sont des candidats pour obtenir un contact ohmique sur le GaAs *p*. Mais il est nécessaire d'utiliser une couche d'accroche en titane d'une dizaine de nanomètres pour obtenir une bonne adhérence du métal sur le semiconducteur. L'approximation de l'alignement du niveau de Fermi par rapport au travail de sortie du métal n'est plus forcément pertinente. On s'est concentré sur un contact Ti/Au qui selon les différents retours de personnes ayant travaillé sur des dispositifs à base de GaAs permet d'obtenir un contact ohmique.

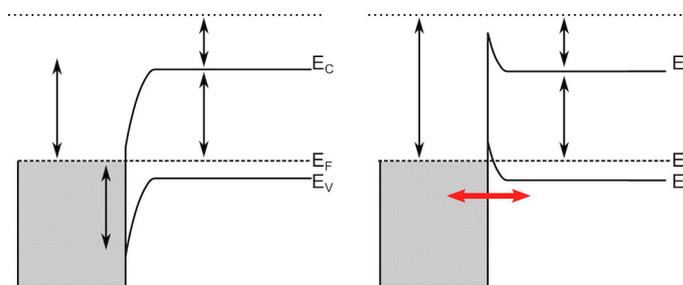


Fig. 3.10 : Contact métallique sur GaAs-p, configuration dans le cas où  $\Phi_M < \Phi_{SC}$  et  $\Phi_M > \Phi_{SC}$

Métal	Travail de sortie (SZE, 1981)
Au	4.8-5.1 eV
Ti	4.33 eV

### 3.2. Méthodes de caractérisation électriques

Métal	Travail de sortie (SZE, 1981)
Pd	5.22-5.6 eV
Pt	5.12-5.93 eV

On a déposé un empilement Ti/Au (10/200 nm) par la méthode d'évaporation électronique sous ultravide sur une couche de GaAs *p* dopé à  $1 \times 10^{19} \text{cm}^{-3}$  d'une épaisseur de 200 nm sur un substrat semi-isolant. Les premiers essais n'ont pas permis d'obtenir un contact ohmique. Lors de la mesure TLM, les caractéristiques de courant n'étaient pas linéaires et présentaient un effet redresseur. On a suivi plusieurs pistes pour éliminer les effets redresseurs et obtenir un contact ohmique de bonne qualité.

La première piste explorée a été de s'intéresser à la pollution de la surface de semiconducteur avant la formation de la métallisation. On utilise un procédé de définition de contact par la technique de lift off, qui consiste à déposer le métal dans des ouvertures de résines. La surface de l'échantillon est en contact avec une matière organique qui peut venir polluer la surface de l'échantillon, et laisse des terminaisons carbonées qu'il est difficile de retirer. On réalise un nettoyage par plasma  $\text{O}_2$  pendant une dizaine de secondes afin de retirer les derniers résidus organiques de la résine. Après cette étape, la couche de GaAs a été oxydée par le bombardement des ions oxygène, et il est nécessaire de retirer cette couche d'oxyde avant le dépôt des contacts. Une attaque acide  $\text{HCl}:\text{H}_2\text{O}$  (1 :4) permet de dissoudre l'oxyde formé sans attaquer la couche de GaAs. Seulement le transfert de l'échantillon dans la chambre de dépôt à ultra vide nécessite de manipuler l'échantillon à l'air ambiant de la salle blanche pendant quelques minutes. Durant ce temps, une couche d'oxyde natif a largement eu le temps de se reformer à la surface du semiconducteur. On a donc utilisé un bombardement à argon in situ pour retirer cette couche d'oxyde. Seulement aucun effet bénéfique n'a pu être observé sur la caractéristique du contact. On a utilisé différentes résines pour mesurer l'impact de la contamination de la surface, mais également sans grande différence sur les propriétés du contact.

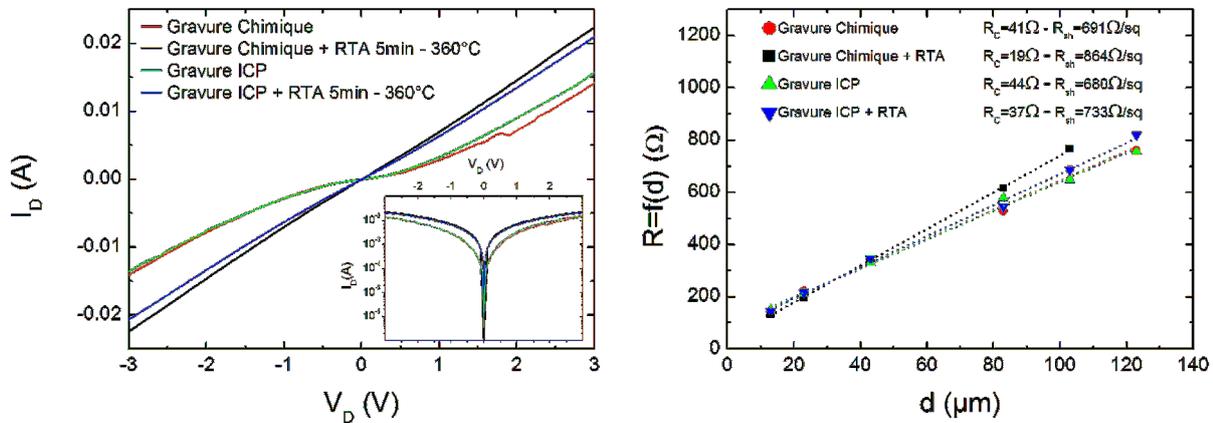
Dans un second temps, on a suspecté l'effet de la gravure. Lors de la formation des dispositifs, il faut pouvoir graver les couches de GaAs pour pouvoir isoler électriquement les dispositifs. On utilise une gravure sèche ICP-RIE à base du mélange de gaz réactif  $\text{BCl}_3/\text{Cl}_2$ . La gravure peut être contraignante à cause d'un échauffement local qui viendrait modifier les propriétés de l'échantillon proche des contacts. Cependant, en mesurant des échantillons avec des contacts déposés avant ou après la gravure, on obtient exactement le même comportement. On a essayé de graver chimiquement les couches de GaAs pour vérifier l'impact de la gravure ICP Chlorée. On retrouve le même comportement pour les caractéristiques des contacts.

Finalement, la solution pour obtenir un contact ohmique sur une couche de GaAs dopé de type *p* est venue de l'utilisation d'un recuit rapide à faible température (5 min - 360 °C). Le four de recuit rapide étant en maintenance durant une longue période, cette solution n'a pu être explorée qu'en dernier. Le recuit permet une légère interdiffusion du titane avec l'arsenic pour obtenir une surface moins accidentée. Cette interdiffusion ne modifie que très peu les propriétés d'interface de la couche, car il a été montré dans la littérature qu'un contact redresseur en titane sur une couche de GaAs dopé de type *n* reste stable pour des recuits jusqu'à 400°C. (KIM et al., 1988)

On a donc caractérisé un échantillon avant et après recuit comme on peut le voir sur la figure 3.11

### Chapitre 3. Étude des propriétés de l'injection électrique dans des couches de germanium non contraint

qui montre la caractéristique du courant en fonction de la tension entre deux plots TLM pour différentes méthodes de gravure. On note le passage d'une configuration de contact redresseur à un contact ohmique grâce au recuit rapide. On effectue les mesures de résistivité pour les différents plots contact. Les résultats obtenus pour deux méthodes de gravure suivies de recuit rapide montrent que les résistances mesurées restent dans la même gamme de valeur si l'on considère les effets des dispersions liées aux mesures et à la répétabilité du procédé. On obtient une résistance spécifique de contact à partir de la longueur de transfert d'une valeur de  $1.61 \times 10^{-5} \pm 0.5 \Omega.cm^2$ . La qualité du contact ohmique n'est pas optimale, car supérieure à la valeur standard de  $10^{-6} \Omega.cm^2$ . Elle est moins bonne que par rapport à un contact à interdiffusion, mais reste correcte pour la suite des mesures. Par ailleurs, les mesures de résistivité de la couche de GaAs dopée de type  $p$  permettent d'estimer la densité de dopants actifs autour d'une valeur de  $N_A = 6 \times 10^{18} cm^{-3}$ .



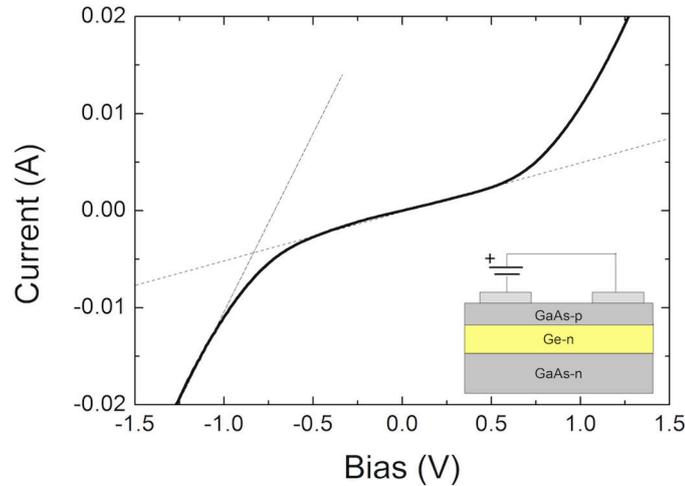
**Fig. 3.11 :** Courbes I-V au travers de deux plots de métallisation sur une couche de GaAs-p+ de 200nm d'épaisseur, et mesures TLM associés aux différentes configurations de gravure et de recuit du GaAs-p+

Ces différents essais ont permis de mettre au point l'utilisation d'un contact ohmique sur une couche de GaAs de type  $p$  qui est indispensable pour la caractérisation électrique des doubles hétérostructures. La figure 3.12 présente le résultat final d'une échelle TLM sur la couche de GaAs dopé de type  $p$  épitaxié sur un empilement de germanium sur GaAs. On peut observer deux pentes lorsqu'on applique une tension entre deux plots de métallisation. En réalisant l'extraction de la valeur de la résistance de couche dans la partie à basse tension, on retombe sur une valeur similaire à celle obtenue pour une couche de GaAs  $p$  sur un substrat semi-isolant.

Maintenant que l'on a caractérisé la qualité des contacts des échantillons, on peut s'intéresser à l'étude du dipôle électrique formé par la double hétérostructure.

#### 3.2.5 Mesures de capacité différentielle

Plusieurs méthodes permettent d'obtenir les propriétés de dopage d'un semiconducteur. On cite les techniques de caractérisation électrique par effet Hall, les mesures de résistivité de la couche, ou par capacité différentielle qui permettent d'obtenir les densités de porteurs dans un semiconducteur. Les mesures physiques comme la spectroscopie de masse d'ions secondaires



**Fig. 3.12 :** Courbe I-V au travers de deux plots de métallisation sur une couche de GaAs-p+ de 200nm d'épaisseur, et mesures TLM associés aux différentes configurations de gravure et de recuit du GaAs-p+

(SIMS) permettent de remonter à la densité de dopants en pulvérisant la couche étudiée par une source d'ions, et analysant la composition des ions récupérés par spectrométrie de masse. On cite les approches optiques par absorption, ou par photoluminescence qui permettent d'obtenir des informations sur les propriétés de dopage des couches.

Dans cette partie, on s'intéresse à la technique de l'extraction de la densité de porteurs par la mesure de la capacité différentielle. La capacité permet de remonter à la densité de charge présente dans le semiconducteur qui découle du niveau de dopage. Une mesure de capacité est définie comme la variation de la densité de charge en fonction de la variation du potentiel de polarisation :

$$C(V) = \frac{dQ}{dV} \quad (3.19)$$

Dans le cas d'un semiconducteur, une capacité de transition peut se former dans les zones de déplétion de porteurs. Cette zone de déplétion s'obtient à l'interface avec un métal, ou dans le cas d'une jonction *pn*. La capacité de transition peut prendre plusieurs formes selon le régime de polarisation de la structure :

- Capacité de déplétion  $C_D$  issue de l'hypothèse de la formation d'une zone de charge d'espace, elle est applicable à faible tension de polarisation directe, ou à polarisation inverse.
- Capacité de diffusion  $C_M$ , qui s'obtient à forte densité de courant ou à polarisation directe élevée, qui tient compte de la concentration des porteurs libres en mouvement qui ne sont plus négligeable dans la ZCE

On s'intéresse à la capacité de déplétion. Considérons un contact redresseur sur un semiconducteur de type n. Dans l'hypothèse de complète désertion, les zones de charges d'espace ne

### Chapitre 3. Étude des propriétés de l'injection électrique dans des couches de germanium non contraint

---

contiennent pas de porteurs libres, et s'étendent sur une distance  $W$ . La charge développée dans le semiconducteur est donnée par :

$$dQ_{SC} = \int_0^W q [p(x) - n(x) + N_D^+(x) - N_A^-(x)] dx \quad (3.20)$$

Si l'on considère que toutes les impuretés dopantes sont ionisées ( $N_D^+ = N_D$ ,  $N_A^- = 0$ ) et que la ZCE ne contient pas de porteurs libres ( $n, p = 0$ ), on peut écrire :

$$dQ_{SC} = \int_0^W q [N_D(x)] dx \quad (3.21)$$

Dans ce cas, la capacité de transition est donnée par :

$$C_D = \frac{dQ_{SC}}{dV} = qS \frac{d}{dV} \int_0^W N_D(x) dx \quad (3.22)$$

$$C_D = qSN_D(W) \frac{dW}{dV} \quad (3.23)$$

Pour une tension donnée  $V$ , l'extension de la zone de charge d'espace est fixée à  $W(V)$ . Une variation  $dV$  de la tension de polarisation entraîne une variation  $dW$  de la zone de charge d'espace. La capacité différentielle permet de sonder la densité de porteurs apparente située au bord de la zone de charge d'espace pour une tension donnée.

Par ailleurs, la capacité de la zone de charge d'espace peut s'exprimer sous une autre forme par la formule du condensateur plan :

$$C_D(V) = \frac{\varepsilon_R \varepsilon_0 S}{W(V)} \quad (3.24)$$

Lorsque le dopage n'est pas constant, il convient de réécrire la densité de porteur apparent sous la forme  $n(W)$ , pour une extension  $W$  de la zone de charge d'espace. Ainsi pour sonder la densité de profil apparent à une autre profondeur, on fait varier la tension  $V$ . En utilisant l'hypothèse du condensateur plan, on peut alors remonter au profil des charges dans la structure :

$$\begin{cases} n_{\text{app}}(V) = \frac{C(V)^3}{qS^2 \varepsilon_R \varepsilon_0 \frac{dC(V)}{dV}} \\ W(V) = \frac{S \varepsilon_R \varepsilon_0}{C(V)} \end{cases} \quad (3.25)$$

La densité du profil de dopage peut être obtenue par la pente de la courbe  $dC/dV$  ou de la pente de la courbe  $1/C(V)^2$ . Une connaissance de la surface mise en jeu est nécessaire, car sa dépendance est quadratique, et l'erreur peut devenir importante.

On retrouve le même formalisme pour une jonction  $pn$  si l'on considère que la ZCE se développe majoritairement du côté du semiconducteur le moins dopé.

#### Cas d'une Hétérojonction

Dans ce cas, l'expression de la capacité de transition reste similaire à l'expression dans une homojonction. La capacité de déplétion peut s'exprimer comme deux capacités en série liées à l'extension de la zone de charge d'espace dans les deux semiconducteurs :

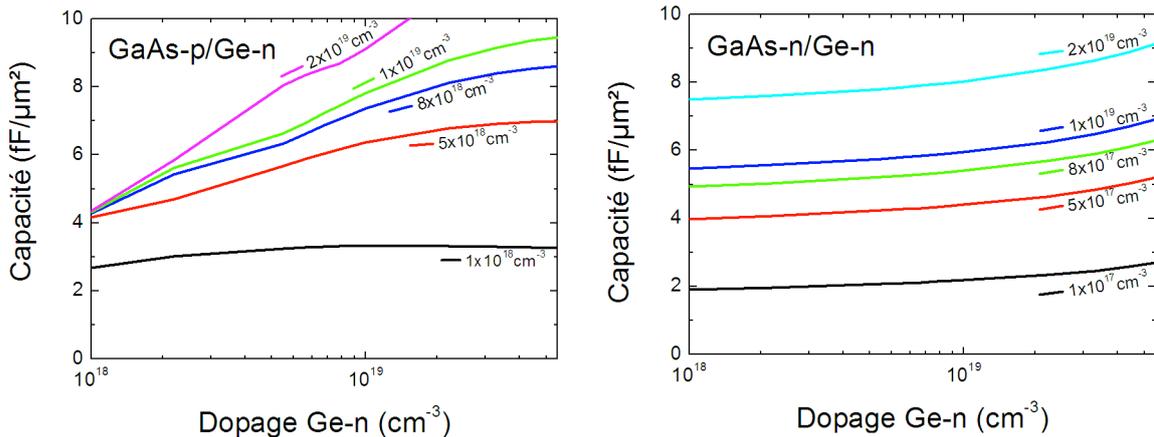
$$C_D = \frac{\varepsilon_1 \varepsilon_2}{\varepsilon_1 x_2 + \varepsilon_2 x_1} \quad (3.26)$$

L'expression de la capacité de diffusion reste inchangée, car elle dépend seulement des porteurs en mouvement dans la zone de charge d'espace :

$$C_M = \frac{d}{dV} \int_{x_1}^{x_2} qp(x) (\text{ou } n(x)) dx \quad (3.27)$$

#### 3.2.5.1 Ordre de grandeur des capacités attendues pour la double hétérostructure

La capacité quasi statique à l'interface Ge/GaAs est dépendante des niveaux de dopage, et de l'alignement des bandes. La résolution de l'équation de Poisson à l'interface entre les deux semiconducteurs pour calculer le profil de charge nécessite le recours à un calcul numérique à cause de la discontinuité de bande entre les deux semiconducteurs. À l'aide de la suite logicielle SILVACO, on peut estimer la longueur de déplétion pour la structure Ge/GaAs. Par ailleurs, il est également implémenté une méthode de résolution dynamique utilisant un traitement numérique à petits signaux perturbatifs pour calculer la capacité autour de point de polarisation (LAUX, 1985). On trouve une valeur de capacité de  $7.82 \text{ fF}/\mu\text{m}^2$  calculé par la méthode de perturbation, contre  $5.90 \text{ fF}/\mu\text{m}^2$  pour une capacité estimée avec la formule du condensateur plan pour une jonction  $pn$  GaAs/Ge dopé à  $10^{19} \text{ cm}^{-3}$ .



**Fig. 3.13 :** Valeurs de capacité à l'équilibre thermique pour la jonction  $pn$  GaAs/Ge, et la jonction  $n-n$  Ge/GaAs, en fonction du dopage de la couche de germanium. Les différentes courbes sont obtenues avec des dopages variables de la couche de GaAs

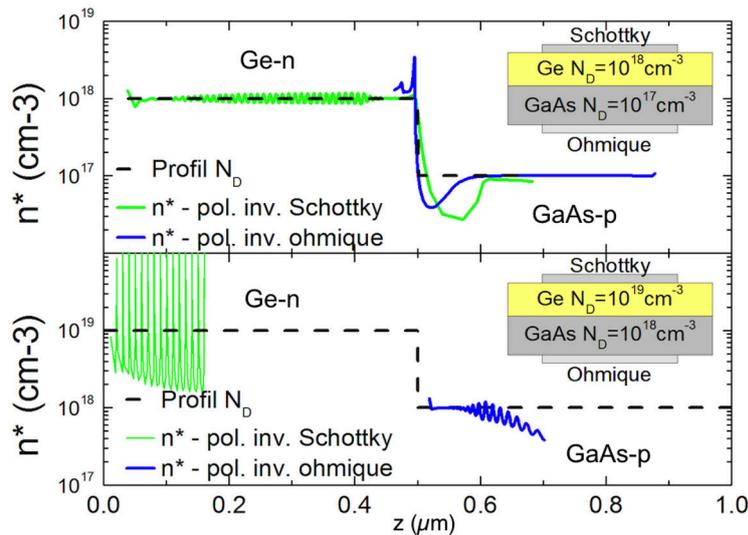
En utilisant la méthode perturbative, on génère un abaque qui permet de connaître un ordre de grandeur de la capacité de déplétion à l'équilibre thermodynamique avec un couple de dopage

### Chapitre 3. Étude des propriétés de l'injection électrique dans des couches de germanium non contraint

pour les différentes couches. On voit que la variation de la capacité dépend plus fortement de la dissymétrie du dopage. Les capacités pour la jonction  $pn$  et  $nn$  sont du même ordre de grandeur, il faudra passer par un épiluchage étape par étape afin de remonter aux propriétés des différentes interfaces.

#### 3.2.5.2 Essai de mesure de profil apparent par simulations numériques

Afin de prendre en main le principe de cette méthode, on réalise divers essais en simulation avec une jonction n-n germanium/GaAs d'une épaisseur de 300 nm chacune en modifiant les niveaux des dopants et le type de contact aux interfaces avec les électrodes métalliques. On réalise différents essais de simulations  $C(V)$  en modifiant les propriétés de contact. Les résultats des différents essais sont présentés sur la figure 3.14. Les courbes vertes correspondent à la densité de porteurs apparents extraite à partir d'un contact Schottky sur germanium. Les courbes bleues correspondent à la densité de porteurs apparents extraite à partir de la déplétion à l'interface entre le germanium et le GaAs en utilisant des contacts ohmiques.



**Fig. 3.14 :** Profils apparents de la densité d'électrons  $n^*$  obtenus par simulation pour la jonction n-n Ge/GaAs pour différents niveaux de dopage  $N_D$

Dans le cas où la jonction est modérément dopée, la déplétion arrive à se propager jusqu'à l'interface entre les deux semiconducteurs. En revanche quand le dopage devient trop important, il devient difficile de dépléter intégralement la couche. D'autre part, le profil apparent de porteur commence à osciller autour de la solution attendue, car le pas de la tension de polarisation est pris trop grand pour pouvoir finement moduler l'extension de la zone de charge d'espace par la méthode des perturbations.

Les différentes simulations montrent que l'on peut obtenir un profil de dopage, en utilisant des mesures  $C(V)$ . Seulement, la limitation provient du fait que la zone sondée ne s'effectue que dans la zone la moins dopée. Par ailleurs, le fort niveau de dopage des couches ne permet pas de dépléter intégralement les couches pour des tensions de polarisation raisonnables. Pour les applications que l'on vise de cette mesure, il faudra essayer de regarder le comportement dyna-

mique du système en polarisation inverse et directe pour les comparer aux ordres de grandeur obtenus par simulations, car il risque d'être difficile d'obtenir des profils complets des couches sondées par ces méthodes de modulation de la zone déplétée dans le cas de couches très dopées.

### 3.2.6 Choix de la méthode de mesure

On a vu que pour extraire la capacité d'un dispositif, il faut pouvoir travailler en régime dynamique, afin de moduler l'extension de la zone de charge d'espace. On choisit d'utiliser une méthode utilisant des mesures hyperfréquences. L'avantage avec ce type de mesure est que le dispositif sous test est sondé sur une plage de fréquence élevée de l'ordre du GHz. Cette technique permet de rendre les pièges électroniques liés aux défauts du semiconducteur transparents à la mesure. En effet, les défauts qui vont piéger des porteurs ont des temps de réponse très longs devant la fréquence d'excitation. Ils ne peuvent pas libérer et piéger à nouveau des porteurs durant la modulation du champ électrique, et ainsi leurs contributions sont éliminées lors de la mesure. Cette méthode s'applique sur des dispositifs de taille réduite de l'ordre du micromètre. Contrairement à une méthode utilisant un capacimètre, on n'a pas un accès direct à une mesure de la valeur de la capacité. Il est nécessaire de passer par une phase d'extraction à partir d'un schéma d'un circuit équivalent. Cela permet de remonter à des valeurs de capacités dans des circuits complexes.

#### 3.2.6.1 Principe de la méthode hyperfréquence

Lorsque les dimensions du circuit ne sont plus très grandes devant la longueur d'onde d'excitation, un phénomène de propagation du signal électrique apparaît, ce qui introduit la notion de signaux incidents et réfléchis. L'analyseur de réseaux vectoriels permet de mesurer les ondes transmises et réfléchies sur un dispositif sous test. On peut évaluer les paramètres S en module et en phase du dispositif. Le paramètre S permet de décrire un dispositif hyperfréquence sous forme d'un quadripôle en connaissant les caractéristiques de ses ports d'entrées et de sorties. Dans la suite des travaux, la mesure du dipôle s'effectue en réflexion. Elle consiste à mesurer le paramètre  $S_{11}$  qui est le rapport entre le signal incident et le signal réfléchi par le dipôle mesuré.

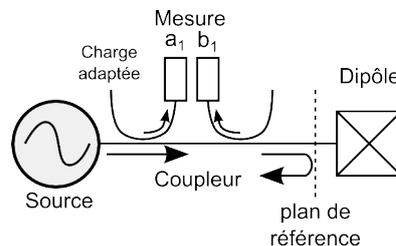


Fig. 3.15 : Principe de la mesure hyperfréquence en réflexion

Les mesures sont effectuées sur un banc comportant un cryostat qui permet d'étudier le comportement de l'échantillon à basse température. Le banc est également équipé d'un multimètre qui permet de mesurer les propriétés statiques de l'échantillon en réalisant des réseaux I-V.

Les mesures expérimentales ont été réalisées avec le soutien de N. Zerounian. On utilise un analyseur de réseau vectoriel Agilent E5071C. Avant de démarrer les mesures, une phase de

### Chapitre 3. Étude des propriétés de l'injection électrique dans des couches de germanium non contraint

---

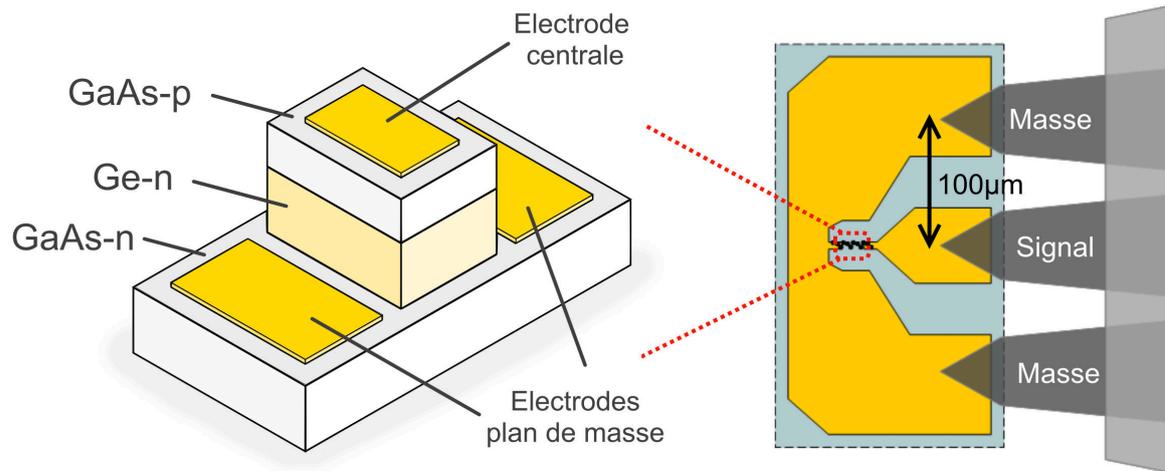
calibrage de l'analyseur de réseaux vectoriel est nécessaire. Elle permet de retrancher la contribution de l'environnement de mesures de la pointe jusqu'au système de mesure. Pour cela, on utilise un substrat de calibration possédant des dispositifs de référence. Les pointes sont posées sur une impédance adaptée à  $50 \Omega$ , puis sur un court-circuit et un circuit ouvert. Ces mesures permettent de calculer les vecteurs d'erreur et d'appliquer la correction nécessaire sur les différentes mesures. Dans un second temps, la contribution des plots d'accès jusqu'au dipôle sous test est retranchée grâce à une phase d'épluchage afin de pouvoir mesurer seulement le comportement du dipôle sous test. Des motifs spécifiques reprenant la topologie des lignes d'accès avec des caractéristiques en court-circuit et circuit ouverts (sans dispositif) sont mesurés. On retranche ensuite l'admittance de ces dispositifs de test à l'admittance de la mesure du dispositif mesurée pour obtenir la contribution du dipôle seul.

Après la phase de mesures, on peut extraire les paramètres du dipôle en proposant un modèle de circuit équivalent. Une fois le modèle équivalent établi, on utilise logiciel Advance Design System 2012, qui permet de simuler le circuit équivalent et de faire un ajustement numérique des paramètres du modèle avec les mesures de paramètre  $S_{11}$  du dipôle. Il faut donc judicieusement définir le modèle pour permettre une extraction réaliste des différents éléments du circuit équivalent.

#### 3.2.7 Dimensionnement des dispositifs coplanaires

Lors des mesures d'hyperfréquence, il faut pouvoir propager le signal dans le dispositif que l'on souhaite étudier. Dans cette gamme de fréquences, il faut utiliser des accès coplanaires. Il est nécessaire d'isoler électriquement le dispositif mesuré, car tout élément parasite peut venir se coupler à l'excitation fréquentielle et venir perturber le résultat des mesures. Une conception des diodes avec des motifs d'accès coplanaires permet de guider l'onde incidente dans le dispositif. La figure 3.16 représente un dispositif en géométrie de type méssa qui est contacté à des accès coplanaires. La structure est composée de deux méssas de taille différente formant un empilement de couches GaAs-p/Ge-n/GaAs-n sur un substrat semi-isolant en GaAs. La taille du plot centrale est de l'ordre de la dizaine de  $\mu m^2$ . Le plot le plus large permet d'obtenir un plan de masse pour la structure centrale. Toutes les couches conductrices autour de cette structure sont éliminées afin de réduire les effets parasites. Le dispositif est contacté aux pistes d'accès qui permettent de propager le signal hyperfréquence dans la structure. Les mesures sur le dispositif sont faites à l'aide d'une pointe hyperfréquence qui repose sur des lignes d'accès coplanaires.

Une pointe hyperfréquence est composé d'une partie centrale qui vient se contacter sur la partie supérieure du dispositif, et deux ailettes sur lesquelles viennent se poser les plans de masse. La distance entre la pointe de signal et l'une des pointes de masse est de  $100 \mu m$ . Les lignes de propagation sont dimensionnées pour être adaptées à  $50 \Omega$ . La taille des lignes d'accès est très grande devant la taille des dispositifs. Il est possible de déposer une couche de SiN pour éviter l'écrantage des charges dans le semiconducteur du substrat lors du dépôt des lignes d'accès. Afin de connaître l'influence des lignes d'accès sur les mesures, il est nécessaire de réaliser des motifs de test, de type circuit ouvert et court-circuit. Les informations recueillies par ces motifs permettent de retrancher les contributions des lignes d'accès et d'isoler au mieux les effets mesurés sur la diode.



**Fig. 3.16** : Schéma de la structure sous test de type méso et du système de mesure par pointes hyperfréquence avec les lignes d'accès coplanaires

Il faut minimiser la taille des motifs, afin de réduire la grandeur des capacités mesurées et qui viendraient couper très fortement le signal à haute fréquence. La limitation de réalisation technologique des dispositifs impose de travailler avec des tailles de l'ordre de la dizaine de micromètres. Une géométrie de forme carrée est critique pour l'exploitation des mesures, la largeur du motif central ne doit pas dépasser sa longueur. Afin de pouvoir discriminer les effets de périmètre des effets de surface, on propose plusieurs variations de la taille des motifs allant d'une longueur de 4 à 20 μm pour des largeurs de 2 à 16 μm. Il y a un total de 28 combinaisons sur les dimensions du méso supérieur.

#### 3.2.8 Processus de fabrication

On souhaite utiliser des méthodes de gravures sèches utilisant des procédés de gravure ICP-RIE pour avoir des flancs de gravure droits. La difficulté de réalisation technologique est d'obtenir un plot central d'un empilement GaAs/Ge reposant sur un méso plus large de GaAs, et cela sans l'utilisation de couche d'arrêt pour réaliser les différentes gravures. La gravure ICP-RIE à base du mélange de gaz réactif SF<sub>6</sub>/C<sub>4</sub>F<sub>8</sub> qui permet de graver le germanium ne réagit pas chimiquement avec le GaAs. Ce paramètre permet de proposer la mise au point d'un procédé de fabrication autoaligné.

On commence par délimiter le plan de masse par une gravure de la couche du GaAs supérieure et du germanium. Dans ce méso, on va ensuite définir le plot central contenant les couches de GaAs-p/Ge-n. Pour cela, on grave la couche de GaAs supérieure et inférieure de manière simultanée, jusqu'à atteindre le substrat semi-isolant. La couche de germanium sert de masque de gravure pour la gravure du plan de masse en GaAs. La couche de germanium exposé pendant la gravure est dégradée, mais elle est ensuite retirée pour dégager la surface du GaAs servant au plan de masse. Ce procédé a été mis au point avec l'aide de Jean-René Coudeville, ingénieur de recherche à la centrale technologique universitaire de l'IEF. Ce procédé de fabrication fait intervenir six

### Chapitre 3. Étude des propriétés de l'injection électrique dans des couches de germanium non contraint

étapes d'alignement lithographique, et nécessite une bonne maîtrise du procédé de fabrication pour mener au bout la réalisation complète des dispositifs. Un masque comportant les différents motifs de caractérisation électrique a été dessiné à l'aide du logiciel L-EDIT. Le masque a ensuite été réalisé pour permettre la fabrication des échantillons par photolithographie. En plus des dispositifs pour les mesures hyperfréquence, le masque contient d'autres motifs de caractérisation électrique pour la mesurer la qualité des contacts (échelle TLM) et des dispositifs pour étudier l'électroluminescence. Les contacts doivent être épais afin de diminuer la résistance de contact qui pourrait perturber l'exploitation des mesures, il faut donc pouvoir travailler avec des résines épaisses pour permettre la bonne réalisation du dispositif. On présente l'enchaînement des étapes de fabrication en détail pour la réalisation du dispositif :

#### Étape 1 : Premier niveau de gravure

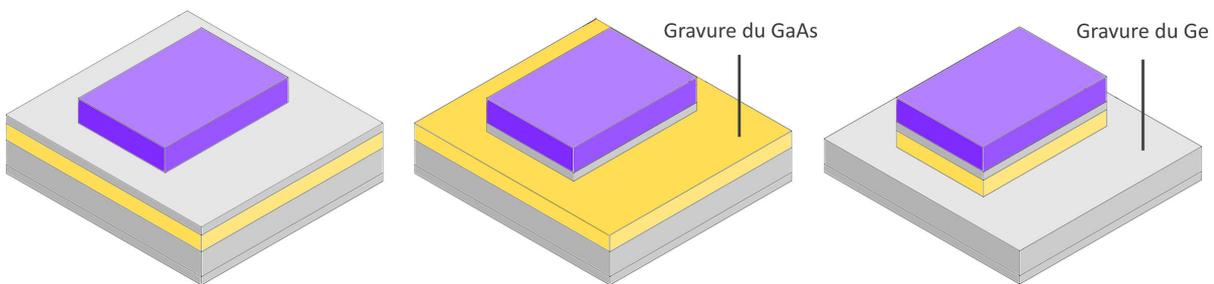


Fig. 3.17 : Étape 1 du procédé de fabrication

- Dépôt d'un film de SiN (40 nm) afin de protéger la surface de la résine
- Enrésinement (S1813) pour la définition de la partie large du méso
- Photolithographie, exposition 12s
- Développement pour la révélation des motifs (MF319 - 25s)
- Gravure du film de SiN par ICP avec le mélange de gaz réactif  $SF_6/C_4F_8$
- Gravure de la couche supérieure de GaAs par ICP avec le mélange de gaz réactif  $BCl_3/Cl_2$
- Gravure de couche de germanium par ICP avec le mélange de gaz réactif  $SF_6/C_4F_8$
- Retrait de la résine par bain d'acétone suivi d'un plasma  $O_2$

#### Étape 2 : Second niveau de gravure

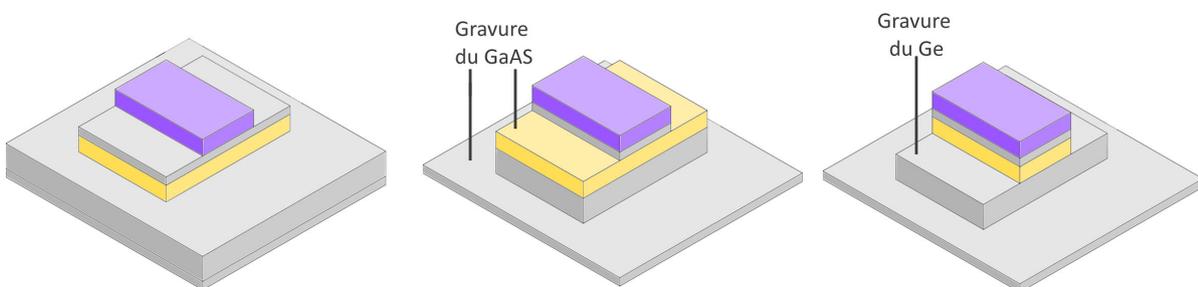


Fig. 3.18 : Étape 2 du procédé de fabrication

- Enrésinement (S1813) pour la définition de la centrale du méso

### 3.2. Méthodes de caractérisation électriques

- Photolithographie du second niveau aligné, exposition 12s
- Développement pour la révélation des motifs (MF319 - 25s)
- Désoxydation des couches de GaAs par solution HCl :H<sub>2</sub>O (1 : 2) 1min pour éviter les effets de masquage
- Gravure simultanée de la couche supérieure et inférieure de GaAs par ICP avec le mélange de gaz réactif BCl<sub>3</sub>/Cl<sub>2</sub>
- Gravure de la couche de germanium par ICP avec le mélange de gaz réactif SF<sub>6</sub>/C<sub>4</sub>F<sub>8</sub>
- Gravure H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> :H<sub>2</sub>O (1 : 1) pour retirer les résidus de germanium restant
- Nettoyage de la résine
- Retrait de la couche de SiN de protection par attaque acide HF

#### Étape 3 : Encapsulation par une couche d'isolant

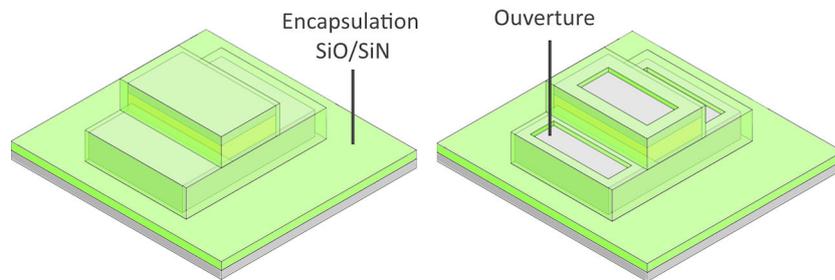


Fig. 3.19 : Étape 3 du procédé de fabrication

- Dépôt PECVD SiO<sub>2</sub> (20 nm) + SiN (350 nm) pour l'isolation électrique des dispositifs
- Enrésinement (S1813) pour la définition des ouvertures dans l'isolant
- Photolithographie de second niveau alignée, exposition 12s
- Développement pour la révélation des motifs (MF319 - 25s)
- Gravure ICP du SiN avec le mélange de gaz réactif SF<sub>6</sub>/C<sub>4</sub>F<sub>8</sub> jusqu'à la couche de SiO<sub>2</sub>
- Ouverture du SiO<sub>2</sub> par attaque acide BHF (Solution HF tamponnée)

#### Étape 4 : Métallisation du contact inférieur

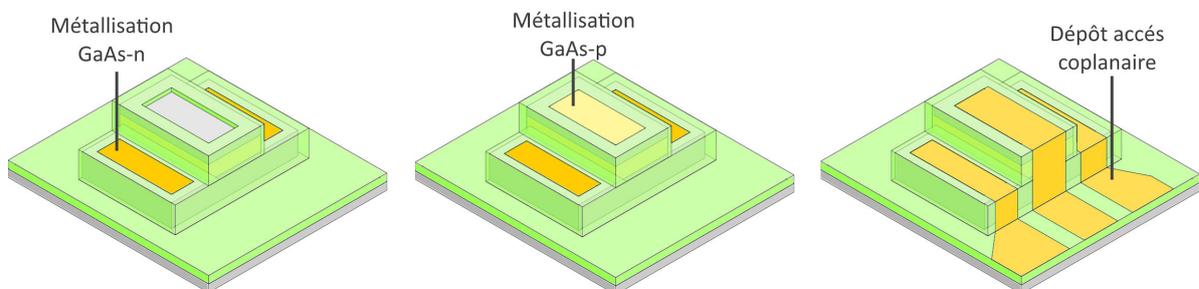


Fig. 3.20 : Étape 4, 5 et 6 du procédé de fabrication

### Chapitre 3. Étude des propriétés de l'injection électrique dans des couches de germanium non contraint

---

- Enrésinement pour la définition des contacts de la couche inférieure avec une résine réversible (AZ5214)
- Photolithographie - exposition 6s
- Recuit d'inversion 120°C 2min + exposition UV 40s
- Développement pour la révélation des motifs (AZ400K 1 :4 - 25s)
- Dépôt métallique Au/Ge/Ni/Ge (étape effectuée au LPN)
- Lift off - Dissolution de la résine dans un bain d'acétone
- Recuit rapide 400°C - 1min (étape effectuée au LPN)

#### Étape 5 : Métallisation du contact supérieur

- Enrésinement pour la définition des contacts de la couche inférieure avec une résine réversible (AZ5214)
- Photolithographie - exposition 6s
- Recuit d'inversion 120°C 2min + exposition UV 40s
- Développement pour la révélation des motifs (AZ400K 1 :4 - 25s)
- Déoxydation HCl :H<sub>2</sub>O (1 :2) - 1 min
- Dépôt métallique par évaporation électronique Ti/Au 10/200 nm
- Lift off - Dissolution de la résine dans un bain d'acétone
- Recuit rapide 360°C - 5 min

#### Étape 6 : Métallisation des accès coplanaires

- Enrésinement pour la définition des contacts de la couche inférieure avec une résine réversible (AZ5214)
- Photolithographie - exposition 6s
- Recuit d'inversion 120°C 2min + exposition UV 40s
- Développement pour la révélation des motifs (AZ400K 1 :4 - 25s)
- Dépôt métallique par évaporation électronique Ti/Au 10/200nm
- Dépôt métallique par évaporation électronique avec un angle de 35° Ti/Au 10/300nm pour assurer la continuité des contacts sur les parties verticales du dispositif
- Lift off - Dissolution de la résine dans un bain d'acétone

### 3.3. Caractérisation électrique la double hétérostructure GaAs/Ge/GaAs

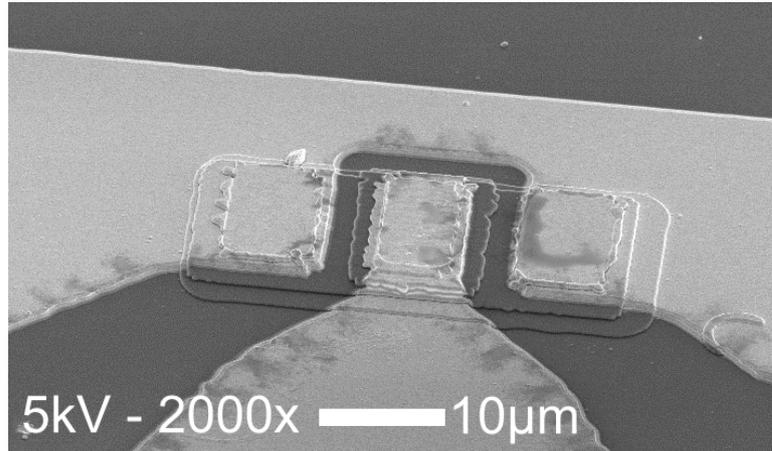


Fig. 3.21 : Image obtenue par microscopie électronique à balayage d'un dispositif réalisé

## 3.3 Caractérisation électrique la double hétérostructure GaAs/-Ge/GaAs

### 3.3.1 Mesures I-V préliminaires

On commence par regarder le comportement en courant-tension de la double hétérostructure. Les épitaxies ont été réalisées pour obtenir deux plaques différentes de 2 pouces avec deux variations de l'empilement étudié. Le premier possède une épaisseur de couche de germanium de 300 nm, le second une épaisseur visée de 500 nm. L'épaisseur de la couche de GaAs-n est de 500 nm, et 200 nm pour le GaAs-p, et cela pour les deux échantillons

Dans un premier temps, les mesures sont effectuées à température ambiante, pour vérifier le bon fonctionnement des dispositifs. On polarise en direct la diode en appliquant une tension positive sur la partie supérieure du méso (couche GaAs-p), et en gardant le plan de masse à un potentiel nul. La courbe I-V obtenue est tracée sur la figure 3.22. La réponse que l'on observe ne donne pas un comportement standard d'une diode. La caractéristique du courant présente un saut d'environ un ordre de grandeur à partir d'un seuil en tension autour de 0.8 V. Cet effet s'accompagne d'une hystérésis et le retour à niveau de courant plus faible s'effectue pour une tension de 0.7V. Cet effet est reproductible après plusieurs balayages en tension. En polarisant le dispositif en inverse, on retrouve un comportement similaire avec un saut en courant autour de 0.25 V et un comportement d'hystérésis. En revanche, si l'on polarise trop fortement le dispositif, par une tension de polarisation trop importante ( $> 2$  V), le dispositif change de comportement. La position du saut en courant est décalée à 1.5 V de manière irréversible, et la hauteur du saut est moins importante. Selon sa position sur l'échantillon, il se peut que le dispositif soit directement dans cet état sans avoir été stressé électriquement. On rencontre un gros problème d'inhomogénéité de l'échantillon.

Le second échantillon ne présente pas non plus des caractéristiques attendues, il y a un effet redresseur qui est surmonté pour de faibles tensions de polarisation autour de 0.2-0.3 V.

Ce comportement anormal modifie les attentes portées sur les résultats de caractérisation électriques. On se doute que l'interface entre le GaAs et le germanium est défectueuse. On va tenter

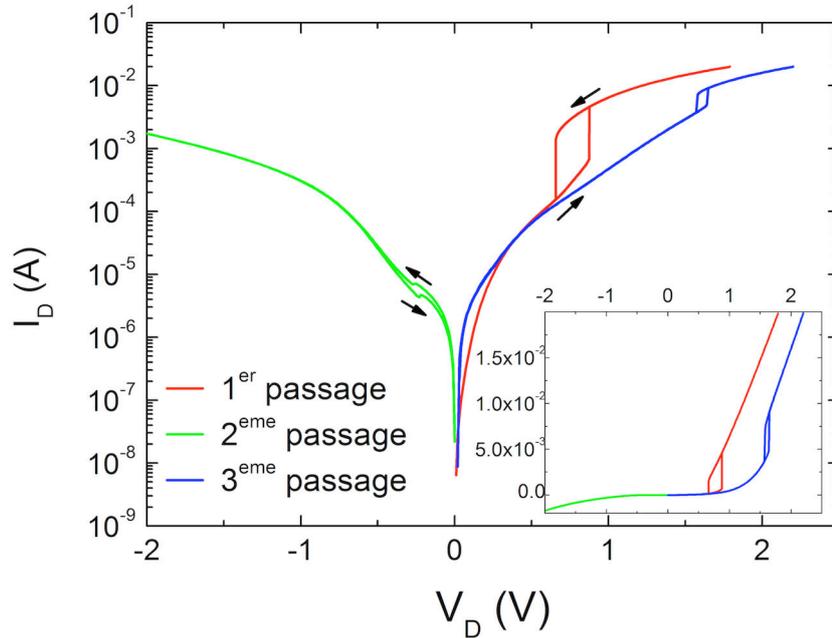


Fig. 3.22 : Balayage en courant tension de la double hétérostructure GaAs/Ge/GaAs

d'expliquer l'origine du phénomène qui modifie les propriétés de la diode. On a donc poursuivi la campagne de caractérisation électrique, et étudié l'échantillon à l'aide du banc hyperfréquence qui permet d'effectuer des mesures statiques et dynamiques à température variable.

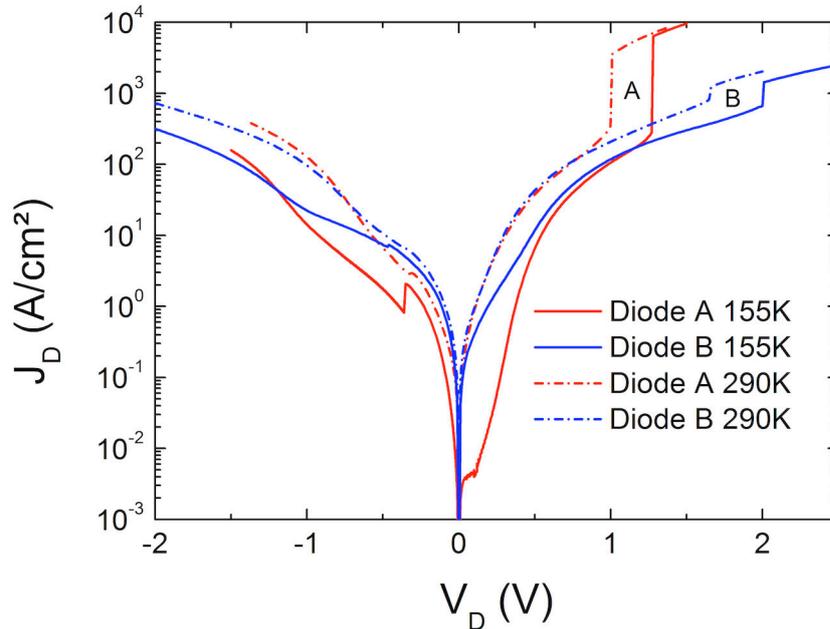
### 3.3.2 Mesures I-V en fonction de la température

Sur l'échantillon, on repère deux dispositifs avec des comportements différents, mais avec des dimensions similaires. Le premier avec un seuil autour de 0.9 V et un méso avec une surface active de 20 x 9  $\mu\text{m}$ , que l'on nomme dispositif (A). Le second dispositif avec un seuil autour de 1.5 V, à une surface active de 20 x 11  $\mu\text{m}$ , que l'on nomme dispositif (B). On effectue des mesures de réseaux I-V à différents points de température pour chaque dispositif. On normalise le courant par la surface active pour pouvoir comparer les mesures des deux dispositifs. La figure 3.23 présente les résultats à température ambiante, et à une température intermédiaire de 150 K.

Lors du refroidissement de l'environnement de mesure par azote liquide, on observe que la position de la discontinuité se décale vers des tensions plus hautes au fur et à mesure que la température est réduite pour le dispositif (A). La position du saut évolue linéairement avec la température. D'autre part, la hauteur du saut en courant est d'autant plus importante que la température est réduite. Tout se passe comme si un mécanisme venait bloquer l'injection des porteurs à travers l'interface jusqu'à ce qu'une tension critique débloque le passage des porteurs. On observe le même comportement sur le dispositif B avec des caractéristiques dégradées.

On va analyser de manière détaillée le comportement du courant, selon les différents régimes d'injection.

### 3.3. Caractérisation électrique la double hétérostructure GaAs/Ge/GaAs



**Fig. 3.23 :** Courbes I-V en fonction de la température, pour les diodes (A) et (B) à 290 K (tracé en pointillé) et 150 K (tracé plein)

#### À polarisation directe

- **À température ambiante :** On note que les courants de saturation à basse tension de polarisation sont identiques jusqu'à l'apparition du saut en courant. Au-delà du saut en courant, la conductivité entre les deux dispositifs n'est pas la même. L'échantillon B est beaucoup plus résistif. Cette première observation laisse à penser qu'un élément supplémentaire gêne le passage du courant pour un type de porteur.
- **À basse température :** Le courant de saturation est très dépendant de la température pour la diode A. Cette dépendance est caractéristique d'un processus assisté thermiquement pour passer une barrière de potentiel. Alors que pour la diode B cet effet est beaucoup moins prononcé. Une faible dépendance en température indique que le transport électronique à l'interface est régi principalement par le courant tunnel.

#### À polarisation inverse

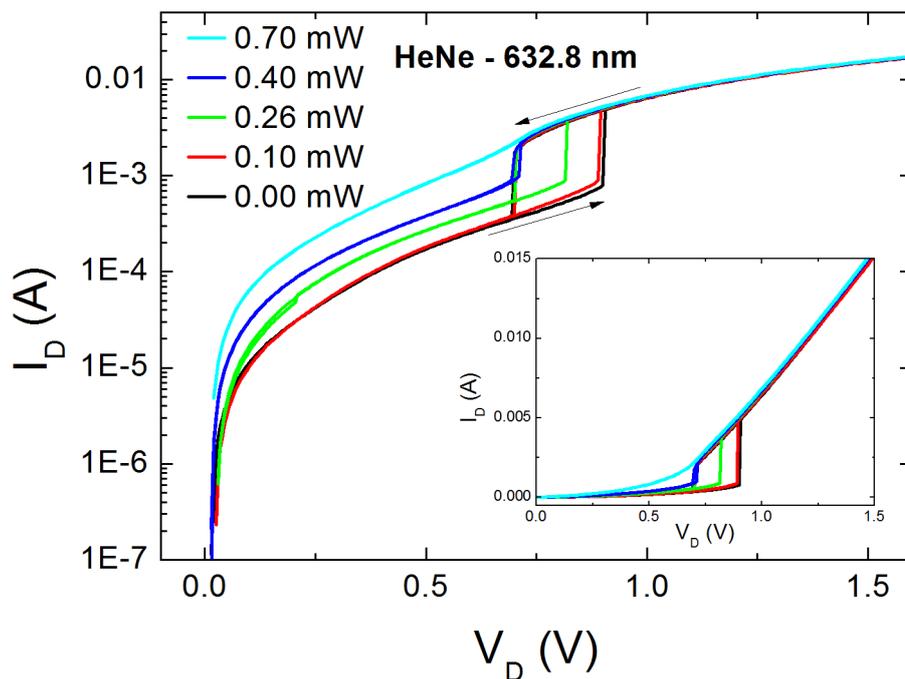
L'alignement des bandes force les porteurs à passer au travers des interfaces par effet tunnel. Le courant inverse est rapidement très élevé, car le niveau de dopage des couches est important. Le courant inverse est plus important pour la diode B que pour la diode A. Pour l'échantillon (A), on note l'apparition d'un saut en courant lors de la polarisation en inverse, qui s'accompagne par une réduction de sa valeur. Il y a un phénomène qui limite le passage des porteurs par effet tunnel.

On observe un courant tunnel plus important et une résistance plus élevée lorsque le dispositif fonctionne dans un comportement dégradé. Ces observations semblent indiquer la présence d'une couche d'interface qui produit ce phénomène de blocage. Cette différence peut provenir de deux

### Chapitre 3. Étude des propriétés de l'injection électrique dans des couches de germanium non contraint

effets. Soit l'extension de la zone de déplétion est plus courte, soit l'effet tunnel peut être assisté par des défauts présents à l'interface. Il est possible de moduler l'extension de cette couche en stressant électriquement le dispositif, ce qui montre que la qualité de l'interface n'est pas stable.

Des mesures I-V complémentaires sous pompage optique, et à température ambiante ont montré l'atténuation complète du saut en courant pour une densité de puissance de  $3 \text{ kW/cm}^2$  comme on peut le voir sur la figure 3.24. L'atténuation du saut de courant peut provenir de la saturation des défauts par des porteurs photo-induits, qui permet l'établissement du courant dans la structure sans phénomène d'hystérésis.



**Fig. 3.24 :** Balayage en courant tension de la double hétérostructure GaAs/Ge/GaAs sous pompage optique d'un laser HeNe à différentes puissances

#### 3.3.3 Mesures hyperfréquence

On est en présence de deux interfaces dans la structure, dans laquelle il se forme une zone de charge d'espace à cause de la déplétion en porteurs :

- interface GaAs-p/Ge-n
- interface Ge-n/GaAs-p

Pour ces deux interfaces, on utilise un modèle basique permettant de décrire la zone de déplétion. Il s'agit d'une capacité en parallèle avec une conductance, comme représenté sur la figure 3.25. La capacité traduit l'extension de la zone de charge d'espace, tandis que la conductance traduit l'injection du courant dans la structure. On répète ce motif en série pour chaque interface. Pour prendre en compte les effets des résistances d'accès des contacts métalliques et des résistances

### 3.3. Caractérisation électrique la double hétérostructure GaAs/Ge/GaAs

des couches, on rajoute une conductance série. Une inductance est également ajoutée pour prendre en compte les effets de couplage avec le substrat. On n'essaye pas de faire intervenir les effets parasites en rajoutant des éléments supplémentaires. On considère qu'ils seront englobés dans les éléments présents. On a mesuré que les contacts étaient ohmiques, il n'y a pas de zone déplétion supplémentaire à ce niveau.

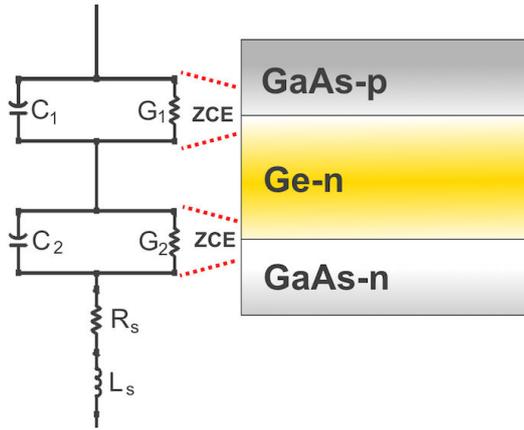


Fig. 3.25 : Représentation du circuit équivalent pour l'extraction des capacités du dipôle

À partir de ce modèle, on effectue le traitement des mesures pour extraire les différentes valeurs des composants. Les capacités extraites restent en bon accord avec l'ordre de grandeur des capacités théoriques de déplétion que l'on a calculées numériquement. À polarisation nulle, on trouve un couple de capacité à  $C_1=2.80 \text{ fF}/\mu\text{m}^2$  et  $C_2=0.98 \text{ fF}/\mu\text{m}^2$  à température ambiante pour le dispositif A, et  $C_1=3.49 \text{ fF}/\mu\text{m}^2$   $C_2=0.983 \text{ fF}/\mu\text{m}^2$  pour le dispositif B. Si l'on considère les niveaux de dopage attendus pour les couches réalisées, on obtient une erreur d'un facteur 2-3 par rapport aux valeurs que l'on a calculées sur la figure 3.13 de la page 101. Une source d'erreur peut provenir de la surface effective sondée par la mesure hyperfréquence aux interfaces entre les différents semiconducteurs.

Quand, on compare les dispositifs A et B, le comportement des capacités extraites en fonction de la tension de polarisation est similaire. Il est difficile de trancher sur la présence de l'effet qui modifie le comportement électrique de la jonction. S'il s'agit de défauts de type piège, les mesures hyperfréquences les rendent transparents. Par ailleurs, avant ou après le saut en courant dans le dispositif, on ne peut pas conclure sur le phénomène qui se produit. Le niveau de courant est trop élevé, et il perturbe de manière très significative les mesures en modifiant la conductance du dispositif. L'extraction des capacités devient incertaine. Il n'est pas possible de tirer un profil de porteurs à partir de l'extraction des différentes capacités, car la modulation de l'extension des zones de déplétion pour ces niveaux de dopage doit s'obtenir pour des valeurs de tensions de polarisation très élevées afin de sonder l'épaisseur de la couche. Or en polarisation inverse, le passage de courant est possible à des tensions de polarisation assez faibles par effet tunnel.

On appliquera les mesures C-V dans la suite, pour des structures Schottky sur germanium, afin d'extraire les densités de dopage.

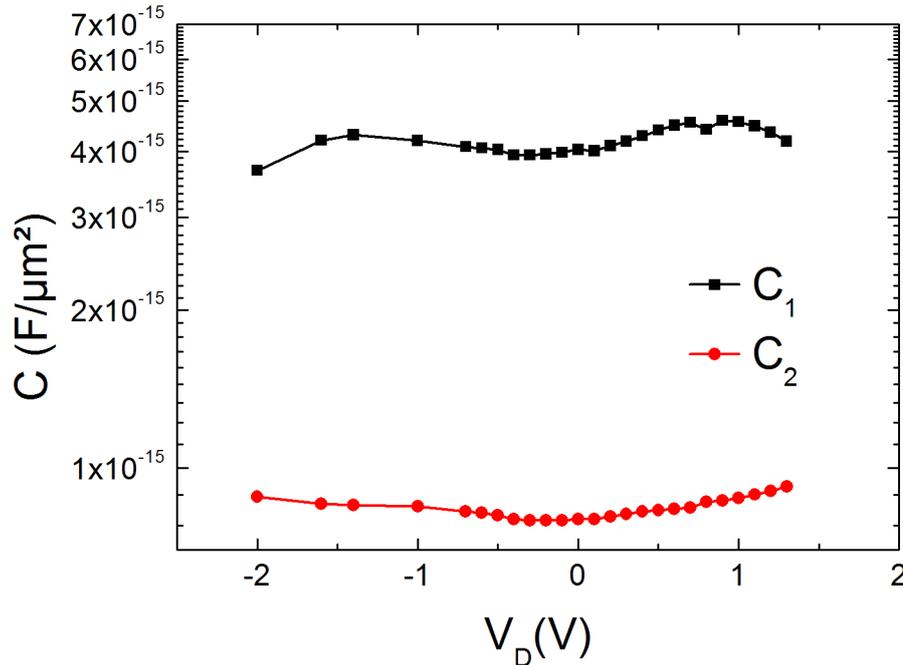


Fig. 3.26 : Exemple de l'extraction de la capacité équivalente surfacique (en échelle log) en fonction de la tension de polarisation pour le dispositif B qui possède un saut en courant à 1.1V à une température de 210 K

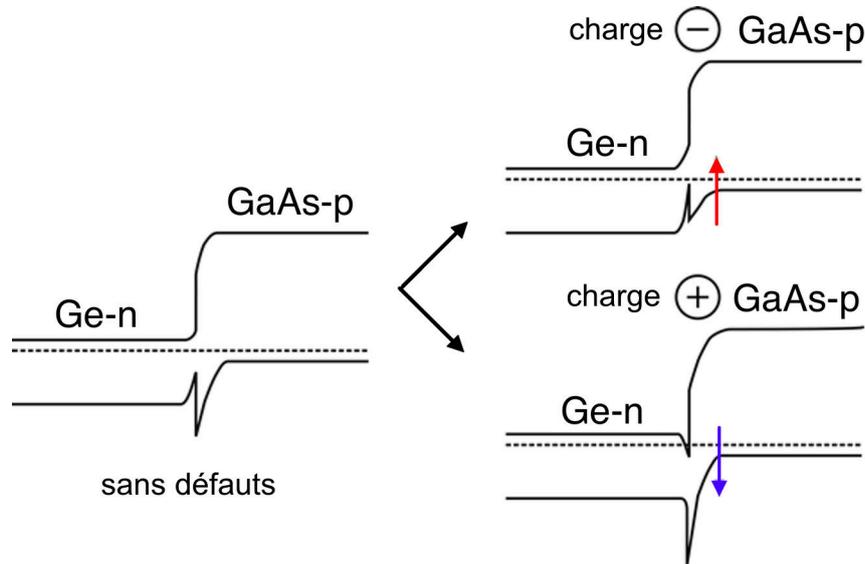
### 3.3.4 Discussion des défauts d'interface

Ces mesures montrent la difficulté d'obtenir une double hétérostructure à base de germanium avec des propriétés d'interface de bonne qualité. La qualité de l'interface est conditionnée par la reprise de l'épitaxie de GaAs sur germanium. Malgré l'utilisation de substrat de type 6°-off, si la polarité n'est pas respectée sur la formation des premiers plans atomiques, on peut se retrouver avec des domaines de phase.

On a vu que les propriétés électriques de l'échantillon peuvent être modifiées, lorsqu'on applique un courant trop important. Une explication peut provenir du fait que les porteurs très énergétiques peuvent venir briser certaines liaisons à l'interface et créer des liaisons vacantes. Ainsi la densité de défauts à l'interface est modifiée. La figure 3.27 présente l'effet de la présence de charge fixe à l'interface de l'hétérostructure sur l'alignement des bandes. L'application de charges négatives fait remonter la position du pic de la discontinuité de bandes. Les trous peuvent être injectés plus facilement, mais restent bloqués dans le germanium par la formation d'un puits de potentiel. Dans le cas où des charges positives sont présentes à l'interface, la position du pic de la discontinuité de bandes est descendue. Ainsi, il est plus difficile de pouvoir injecter des trous du GaAs vers le germanium, car la barrière de potentiel est augmentée. Une configuration extrême pourrait favoriser le passage des électrons vers le GaAs par effet tunnel.

On ne peut pas statuer sur le type de transport mis en jeu à l'interface, car on ne peut pas discriminer le courant de trous d'un courant d'électrons dans le cas des mesures électriques.

### 3.4. Caractérisation électrique de l'empilement Métal/Ge/GaAs : diodes Schottky sur germanium



**Fig. 3.27** : Effets de défauts chargés à l'interface (positif ou négatif) sur l'alignement des bandes de l'hétérostructure Ge-n/GaAs-p

### 3.4 Caractérisation électrique de l'empilement Métal/Ge-/GaAs : diodes Schottky sur germanium

On s'intéresse maintenant à l'étude d'une hétérostructure avec un empilement comportant une couche de germanium sur une couche de GaAs toutes les deux dopées de type  $n$ . Dans la partie 3.2.2.1.2, on a montré la difficulté d'obtenir un contact ohmique sur le germanium dopé de type  $n$  à cause du blocage du niveau de Fermi. Il sera difficile de réaliser un échantillon qui permet d'adresser seulement les propriétés de transport de courant à l'interface entre le germanium et le GaAs, car elles risquent d'être masquées par l'effet de l'interface entre le germanium et le métal.

Les couches de germanium sont réalisées sur des couches de GaAs dopées de type  $n$ . On a donc un confinement des porteurs dans la couche de germanium, car le GaAs a une énergie de bande interdite plus grande. La couche de GaAs joue le rôle d'injecteur de porteurs dans le germanium. Le contact est pris ohmique sur cette couche. Si l'on réalise un contact Schottky sur germanium, le dispositif formé fait intervenir principalement un courant de porteurs majoritaires, donc d'électrons. Ils pourront être injectés du GaAs- $n$  vers le Ge- $n$ , qui pourront se recombinaison sur le contact métallique. La discontinuité de bande d'énergie à l'interface Ge/GaAs peut modifier les propriétés de transport par rapport à une diode Schottky simple. Mais avec la hauteur de barrière attendue en bande de conduction ( $\Delta E_C = 0.25$  eV), et les niveaux de dopage appliqués, la contribution de la discontinuité sur le courant en polarisation directe peut avoir une influence minimisée. En revanche, en polarisation inverse l'impact de la discontinuité devrait être plus important, car elle n'est pas orientée de manière favorable pour le passage des électrons allant du germanium vers le GaAs.

Les dispositifs sont réalisés avec des accès coplanaires, et ils pourront être étudiés par la méthode hyperfréquence. Le procédé de fabrication de ces échantillons est le même que pour la réalisation

### Chapitre 3. Étude des propriétés de l'injection électrique dans des couches de germanium non contraint

---

des doubles hétérostructures à la différence qu'il n'y a pas de couches de GaAs supérieures, ce qui permet de se soustraire à deux étapes de gravure. On réalise deux échantillons possédant un contact métallique différent sur la couche de germanium. Le premier utilise une métallisation standard à base d'un empilement titane/or (5 nm / 200 nm). À cause du blocage du niveau de Fermi, on s'attend à avoir une hauteur de barrière  $\phi_b$  entre 0.5 et 0.6 eV indépendamment du métal utilisé. Le second échantillon a été réalisé dans l'optique d'étudier l'effet du déblocage du niveau de Fermi pour moduler la hauteur de la barrière de potentiel à l'interface avec le métal. En insérant une fine couche d'oxyde avant la déposition du contact métallique, on peut obtenir cet effet. On a retenu le couple  $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{Aluminium}$ , qui peut être déposé à l'aide de l'évaporateur métallique à canon d'électron. Après le pompage sous ultra vide de l'enceinte, les grains d'alumine contenus dans le creuset de dépôt sont fondus durant un temps assez important par le faisceau d'électrons pour homogénéiser le matériau. Ensuite, la vitesse d'évaporation est réduite à une valeur très basse pour obtenir un dépôt de bonne qualité. On vise une épaisseur moyenne de dépôt d'environ 1.5 nm. Cette épaisseur a été choisie, car pour des couches trop épaisses la résistance de l'interface augmente à cause de l'apparition de la barrière tunnel. La couche d'aluminium d'une épaisseur de 200 nm est ensuite déposée par la même technique. La barrière d'oxyde  $\text{Al}_2\text{O}_3$  obtenue par cette méthode est poreuse (polycristalline), car elle est sensible à une gravure chimique utilisant de l'acide fluorhydrique contrairement à une couche déposée par ALD (Atomic Layer Deposition) utilisée entre autres pour la réalisation d'oxydes de grille des transistors.

On dispose de deux échantillons permettant d'étudier l'effet du contact sur le germanium, et de sonder les propriétés électriques de l'hétérostructure Ge/GaAs. Il aurait été intéressant de pouvoir réaliser un échantillon avec métallisation de type aluminium sans la couche d'alumine, mais la complexité du procédé de fabrication n'a pas permis de fabriquer une quantité importante d'échantillons. Les échantillons réalisés sont issus du substrat possédant le numéro de nomenclature Ger302. Il s'agit d'une couche de germanium dopée de type  $n$  d'une épaisseur de 300 nm, sur une couche de GaAs dopée de type  $n$  d'une épaisseur de 500 nm sur un substrat en GaAs semi-isolant. Pour des raisons pratiques, on appellera l'échantillon avec un contact Ti/Au **Ger302A**, et l'échantillon avec un contact  $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{Al}$  **Ger302B** dans la suite.

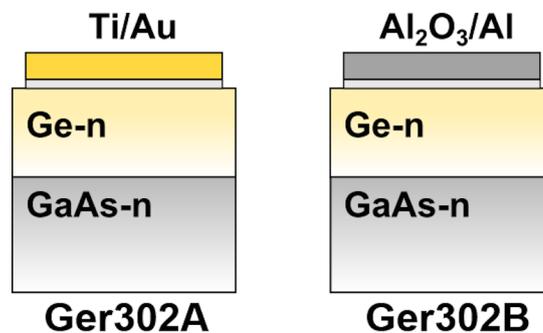
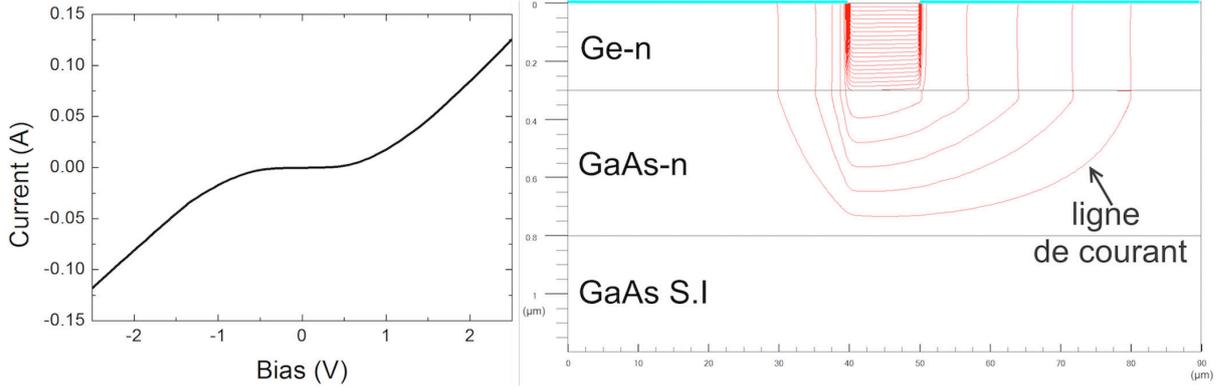


Fig. 3.28 : Schéma des deux échantillons possédant des contacts Schottky sur germanium

### 3.4. Caractérisation électrique de l'empilement Métal/Ge/GaAs : diodes Schottky sur germanium

#### 3.4.1 Caractérisation des contacts métalliques

Comme attendu, les contacts déposés sur le germanium dopé de type  $n$  sont redresseurs. La figure 3.29 (a) montre la mesure du passage de courant à travers deux plots de métallisation en fonction de la tension dans le cas d'un contact à base de Ti/Au. La caractéristique de courant correspond à la configuration de deux diodes Schottky tête-bêche.



**Fig. 3.29 :** (a) Caractéristique du courant en fonction de la tension au travers deux plots de métallisation Ti/Au sur germanium dopé de type  $n$  (b) Simulation du profil du courant de conduction entre deux contacts ohmiques parfaits pour l'empilement Ge-n/GaAs-n/GaAs semi-isolant

Afin d'estimer le dopage de la couche de germanium, on peut essayer de calculer la résistivité de la couche à partir des échelles TLM dans la portion ohmique de la courbe. On trouve une résistance de couche  $R_{Sh} = 32.2\Omega/\square$ . L'estimation de la résistivité pour une épaisseur de 300 nm donne  $\rho = 9 \times 10^{-4}\Omega.cm$ . Cette résistivité correspond à une densité de dopage actif de  $2 \times 10^{19} cm^{-3}$ . Mais on considère que seule la couche de germanium est adressée. Or la couche de GaAs-n peut aussi avoir une contribution à la résistivité mesurée.

Pour estimer l'impact de la contribution de la couche de GaAs, on peut écrire que la résistance de couche mesurée est équivalente à la résistance des deux couches en parallèle. On rajoute un facteur  $\alpha$  compris entre 0 et 1 sur la résistance de couche du GaAs-n, pour moduler sa contribution.

$$\frac{1}{R_{SH,Ge}} = \frac{1}{R_{SH,Mes}} - \frac{\alpha}{R_{SH,GaAs}} \quad (3.28)$$

La résistance de couche du GaAs-n d'une épaisseur de 500 nm est mesurée, on obtient une valeur de  $R_{SH,GaAs} = 49\Omega/\square$ . Ainsi on trouve une fourchette de résistance de couche entre 32.1 et 94.1  $\Omega/\square$  pour la couche de germanium. Ce qui correspond à un dopage actif compris entre  $5 \times 10^{18}$  et  $2 \times 10^{19} cm^{-3}$ . Afin d'estimer la contribution de la couche de GaAs, on peut simuler le comportement du dispositif et regarder la répartition des porteurs participant au courant de conduction dans la structure avec des contacts ohmiques, comme on peut le voir sur la figure 3.29 (b). En simulant différentes configurations d'empilement pour extraire la résistivité, on peut calculer le facteur  $\alpha$  à une valeur de 0.25. On estime la résistance de couche de germanium autour de 38.5 $\Omega/\square$ , ce qui correspond à une densité de dopants autour de  $1 - 1.3 \times 10^{19} cm^{-3}$ . Cette valeur correspond à celles obtenues par la technique de mesures 4 pointes pour des couches sur substrat semi-isolant en GaAs.

## Chapitre 3. Étude des propriétés de l'injection électrique dans des couches de germanium non contraint

---

### 3.4.2 Mesures I-V en température

La diode est polarisée de manière directe lorsqu'on applique une tension positive sur le contact Schottky. On abaisse la position du niveau de Fermi du métal par rapport à la position des bandes du semiconducteur à l'interface. Cela permet l'établissement d'un courant du semiconducteur vers le métal grâce à la réduction de la tension de diffusion.

#### Mesures sur l'échantillon Ger302A :

Les mesures réalisées sont présentées sur la figure 3.30 (a). Pour l'échantillon avec le contact Ti/Au, on observe un saut en courant pour une tension de 0.8 V, accompagné d'un effet d'hystérésis avec un retour à 0.75 V lors des mesures à température ambiante. Le saut en courant est obtenu pour des valeurs de l'ordre du mA, qui correspond à des densités de courant de l'ordre du kA/cm<sup>2</sup>. Le tout premier balayage donne une position du saut en courant autour de 1.5 V. Ensuite le système se stabilise, le saut en courant se situe autour de 0.8 V et sa position reste reproductible. Lorsqu'on réalise des mesures en fonction de la température, sa position est décalée vers des tensions de polarisation plus élevées au fur et à mesure que la température décroît. On retrouve le comportement similaire à la double hétérostructure étudiée dans la partie précédente. Cela montre la sensibilité de la surface de la couche de germanium. On note qu'en polarisation inverse, il n'y a plus la présence de saut contrairement à la double hétérostructure. La diode ne présente pas deux types de comportements. Si l'on stresse trop fortement la diode, celle-ci subit un claquage avant que l'on puisse observer une modification de sa caractéristique en courant-tension. Les dispositifs sont plus robustes par rapport aux doubles hétérostructures et peuvent tenir des niveaux de courant de l'ordre de la centaine de mA.

#### Mesures sur l'échantillon Ger302B :

Les courbes obtenues pour l'échantillon avec un contact Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/Al sont très différentes par rapport à la diode précédente, comme on peut le voir sur la figure 3.30 (b). La discontinuité en courant n'est plus présente à température ambiante. Elle ne commence qu'à apparaître pour des températures autour de 210 K. Elle se manifeste sous forme de sauts multiples à des températures  $\leq 150$  K.

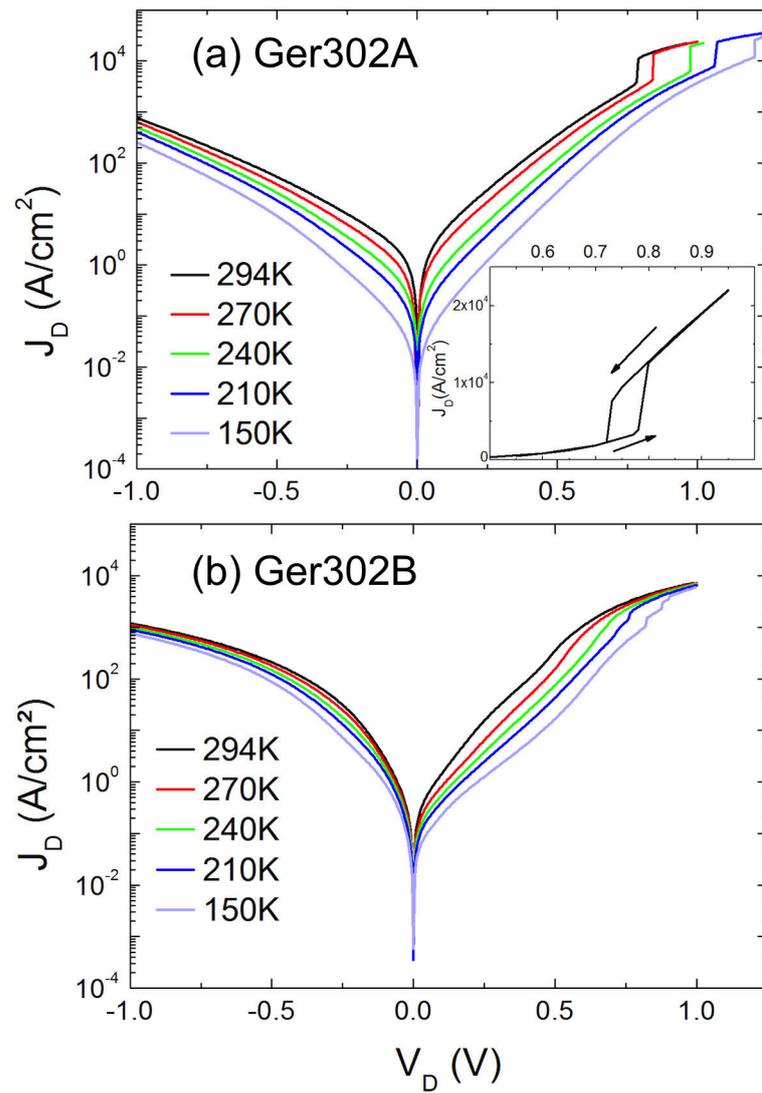
En inverse, un courant tunnel s'établit du métal vers le semiconducteur. Les porteurs passent directement à travers la barrière d'oxyde et trouvent des états inoccupés dans le semiconducteur. On note que le contact reste redresseur, mais le courant en inverse est plus important, car la hauteur de barrière est réduite grâce au déblocage du niveau de Fermi. Le déblocage n'est pas complet, cela peut s'expliquer par l'épaisseur de la couche d'oxyde qui n'est peut-être pas assez importante.

La résistance série du dispositif est plus grande d'un facteur 2 par rapport à l'échantillon avec un contact redresseur standard. La barrière d'oxyde a une influence sur les propriétés de conduction de la diode.

### 3.4.3 Extraction du courant de saturation

Dans le cas d'une diode Schottky, où le transport est assuré par le saut des porteurs de la barrière activé thermiquement, le courant en fonction de la tension dans la diode peut s'écrire :

### 3.4. Caractérisation électrique de l'empilement Métal/Ge/GaAs : diodes Schottky sur germanium



**Fig. 3.30 :** Courbes J-V en fonction de la température ambiante. (a) pour l'échantillon Ger302A. L'encart montre l'effet de l'hystérésis à température ambiante pour un balayage en tension par pas de 20 mV (b) pour l'échantillon Ger302b

### Chapitre 3. Étude des propriétés de l'injection électrique dans des couches de germanium non contraint

---

$$I_D = I_S \left( e^{(qV/\eta kT)} - 1 \right) \quad (3.29)$$

Le coefficient d'idéalité  $\eta$  traduit l'écart entre le modèle du transport courant thermoélectronique et les différents autres types de contribution (Émission tunnel, émission tunnel assistée en température).  $I_S$  est le courant de saturation. Il dépend de la hauteur de barrière  $\phi_b$ , de la température  $T$ , et de  $A^*$  la constante de Richardson.  $A$  est l'aire de la surface active de l'échantillon :

$$I_S = AA^*T^2 e^{-q\phi_b/kT} \quad (3.30)$$

À partir des mesures I-V, on peut extraire la valeur du courant de saturation, et le coefficient d'idéalité. On ajuste linéairement la courbe  $\ln(I_D)$  dans une plage de tension comprise entre 0.1 V et 0.3 V. On peut en déduire le courant de saturation à l'origine, ainsi que le coefficient d'idéalité  $\eta$  à partir de la pente de la courbe.

$$\eta = \frac{dV}{d(\ln(I_D))} \frac{q}{kT} \quad (3.31)$$

Pour extraire la hauteur de barrière à partir du courant de saturation, il est nécessaire de connaître la surface active, et la constante de Richardson. Cette méthode peut souffrir d'un manque de précision s'il existe une incertitude sur ces deux paramètres. On peut remonter à l'énergie d'activation du transport grâce aux mesures en fonction de la température. Une réécriture du courant de saturation permet d'obtenir en fonction de l'inverse de la température, la hauteur de la barrière  $\phi_b$ . Il s'agit du tracé de Richardson (ou d'Arrhenius), qui est un dérivé du tracé d'Arrhenius :

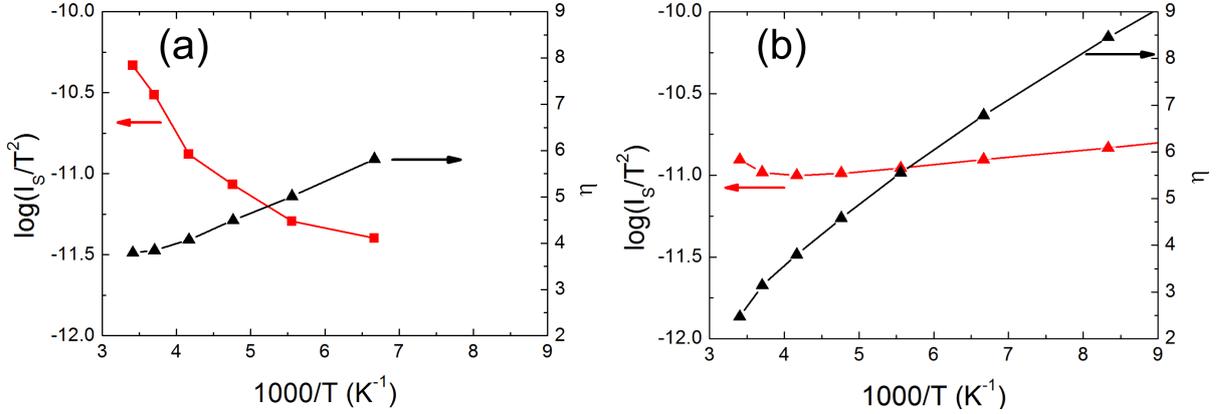
$$\ln \left( \frac{I_S}{T^2} \right) = \ln(AA^*) - \frac{q\phi_b}{kT} \quad (3.32)$$

Grâce à la variation en température, cette méthode permet de s'affranchir de la connaissance de la constante de Richardson  $A^*$  et de la surface effective du dispositif, car la hauteur de barrière est liée à la pente de ce tracé.

Comme on peut le voir sur la figure 3.31, le tracé de Richardson pour l'échantillon Ger302A n'est pas linéaire. En effet, le coefficient d'idéalité est trop important pour pouvoir considérer la seule contribution du courant thermoélectronique du transport à l'interface. Pour l'échantillon Ger302B, la variation du courant n'est pas sensible à la température du fait que le transport par effet tunnel est dominant. Les porteurs sont forcés à passer à travers la barrière d'oxyde par effet tunnel. L'évolution du facteur d'idéalité traduit l'écart important avec un modèle de type purement thermoélectronique.

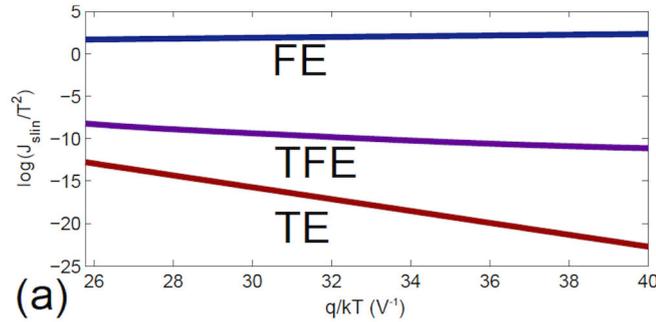
Des méthodes permettent d'extraire à partir du tracé de Richardson non linéaire la hauteur de barrière, en prenant en compte les différentes contributions de transport à l'interface. Elles n'ont pas été appliquées, car trop lourdes à mettre en place. D'autre part, l'influence de l'interface Ge/GaAs sur le courant de saturation est aussi à prendre en compte. Le système à étudier devient complexe. La figure 3.32 est issue des travaux de (KENNEY, 2010) montre l'effet des différentes

### 3.4. Caractérisation électrique de l'empilement Métal/Ge/GaAs : diodes Schottky sur germanium



**Fig. 3.31 :** Tracé de Richardson (courbe rouge) et variation du coefficient d'idéalité  $\eta$  (courbe noire) en fonction de l'inverse de la température pour l'échantillon (a) Ger302A et (b) Ger302B

contributions de transport sur le tracé de Richardson. On voit que lorsque le transport de courant est purement tunnel, le tracé d'Arrhenius, reste constant en fonction de la température, comme on peut l'observer pour le cas de l'échantillon Ger302B.



**Fig. 3.32 :** Exemple d'une simulation d'un tracé de Richardson pour différentes composantes de transport (Field Emission, Thermoionic-Field Emission, Thermoionic Emission) figure issue de (KENNEY, 2010)

#### Inhomogénéité de la hauteur de barrière :

Dans le cas d'une barrière inhomogène, qui peut provenir par exemple des défauts de surface, du dopage, ou des réactions chimiques à l'interface, la hauteur de barrière peut dépendre de la température (WERNER et al., 1988). Dans le cadre du transport thermoélectronique, un formalisme décrit que la hauteur de barrière effective peut être modélisée par rapport à un terme d'erreur qui prend en compte les fluctuations de la barrière liées aux différentes inhomogénéités.

$$\phi_{b,eff} = \phi_{b_0,m}(T) - \frac{q\sigma^2}{2kT} \quad (3.33)$$

Où  $\phi_{b,eff}$  est la hauteur de barrière mesurée à partir du courant de saturation, et  $\sigma$  un terme d'écart type obtenu à partir d'une distribution gaussienne autour de la valeur de barrière  $\phi_{b_0,m}$ . Si l'écart type  $\sigma$  ne dépend pas de la température, on peut remonter à la hauteur de barrière à partir d'un tracé en fonction l'inverse de la température. Pour cela, il faut connaître la surface de

### Chapitre 3. Étude des propriétés de l'injection électrique dans des couches de germanium non contraint

l'échantillon, et la constante de Richardson qui est estimée à  $140 \text{ A.cm}^{-2}\text{K}^{-2}$  dans la littérature pour le germanium (SZE, 1981), afin d'estimer  $\phi_{b,eff}$ .

On applique cette méthode pour l'échantillon Ger302A. À partir d'une régression linéaire, on trouve  $\phi_{b_0,m}(0K)=0.52 \text{ eV}$ , et  $\sigma=24 \text{ meV}$ . On trouve une valeur attendue de hauteur de barrière pour un contact redresseur (Schottky) avec un blocage du niveau de Fermi, en éliminant les effets d'inhomogénéité de l'interface.

Cette technique ne s'applique pas pour l'échantillon Ger302B, car le transport par effet tunnel est prédominant.

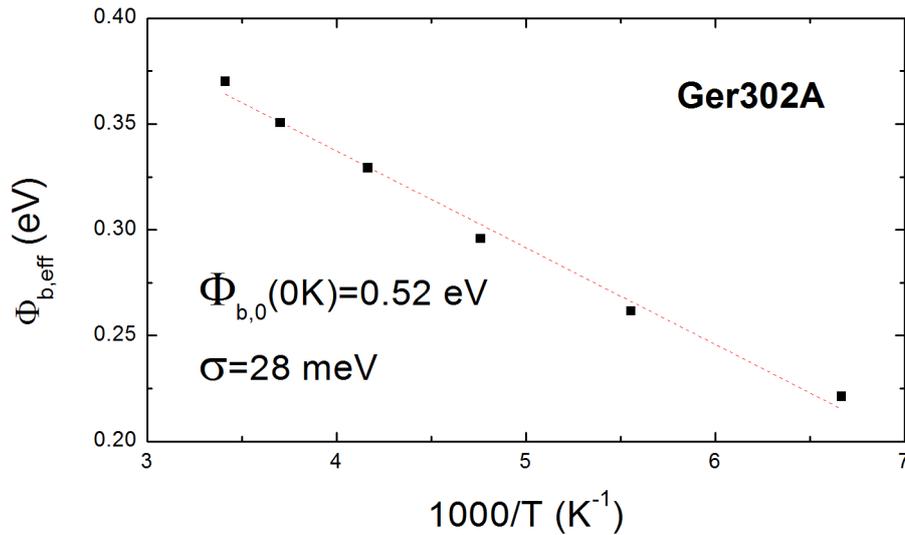


Fig. 3.33 : Tracé de  $\phi_{b,eff}$  en fonction de l'inverse de la température pour l'échantillon Ger302A

#### 3.4.4 Courant de fuites - influence des bords de la structure

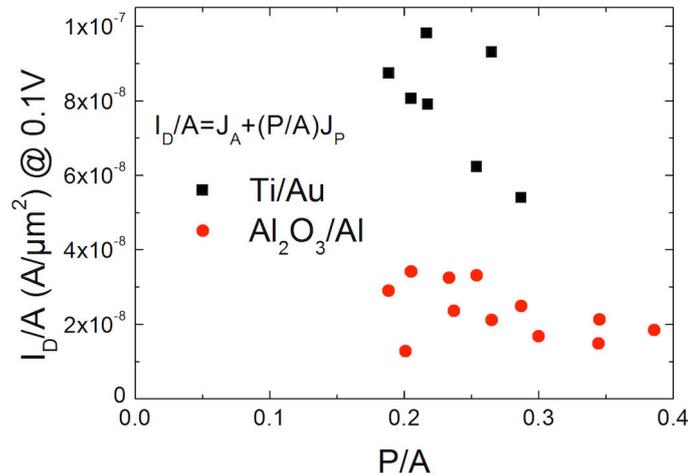
Comme la reproductibilité entre les différents dispositifs est assez bonne, on peut estimer les contributions au courant de fuite dans une diode à injection verticale. Dans certains dispositifs, le courant de fuite important sur les bords peut court-circuiter le courant de la zone active en surface. On va vérifier que la surface des dispositifs est correctement passivée. On peut exprimer le courant de fuite comme une combinaison d'un courant de surface, et un courant proportionnel au périmètre du dispositif (CZERWINSKI et al., 1998) :

$$I_S = A \times J_A + P \times J_P \quad (3.34)$$

Avec  $A$  l'aire de la surface active du dispositif,  $P$  le périmètre du dispositif,  $J_A$  le courant de fuite associé à la surface et  $J_P$  le courant de fuite du périmètre (en  $\Omega/m$ ). On relève le courant à une tension de polarisation faible (0.1V). On trace le courant normalisé par la surface du dispositif en fonction du ratio périmètre sur surface. On doit pouvoir faire apparaître la dépendance en fonction du périmètre du dispositif. Comme on peut le voir sur la figure 3.34. On note que le courant n'est pas corrélé par rapport au périmètre pour les diodes de l'échantillon **Ger302B**, car  $I_D/A$  reste constant avec l'évolution de  $P/A$ . Le courant de fuite par les bords du dispositif

### 3.4. Caractérisation électrique de l'empilement Métal/Ge/GaAs : diodes Schottky sur germanium

est négligeable, donc la passivation des dispositifs par la couche de *SiO* déposé par PECVD est convenable. Pour le second échantillon **Ger302A**, le comportement est similaire, même si la dispersion est peu plus importante sur certains points.



**Fig. 3.34** : Courant de saturation à  $V_D = 0.1\text{V}$  tracé en fonction du rapport périmètre/surface du dispositif

#### 3.4.5 Mesures C-V

Le modèle pour l'extraction hyperfréquence est identique à celui pris pour la double hétérostructure, présenté à la page 113. On a fait l'hypothèse que l'on a la formation de deux zones de charges d'espace. La première est obtenue entre le contact métallique et le germanium. La seconde est prise à l'interface entre le germanium et le GaAs.

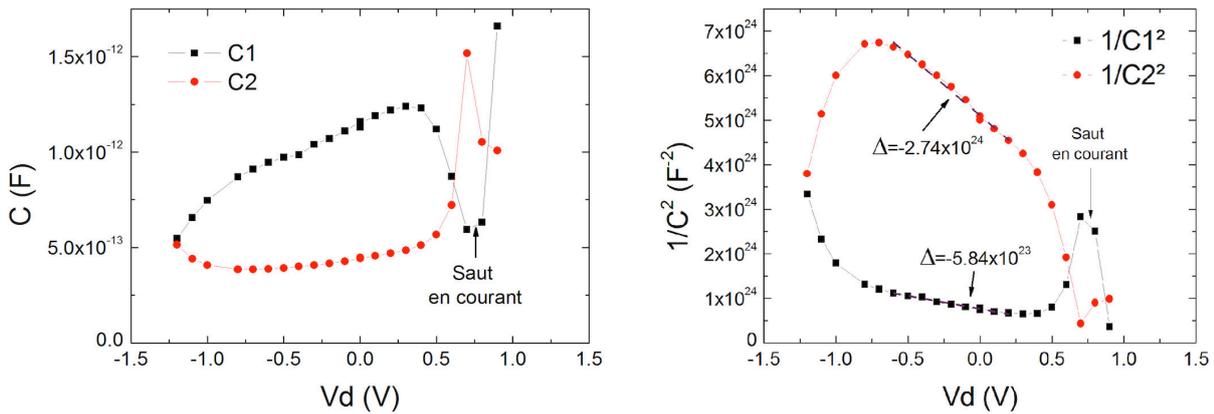
##### Échantillon Ger302A

La figure 3.35 (a) présente les capacités extraites en fonction de la tension de polarisation. Lorsque la tension de polarisation inverse augmente, la valeur de la capacité  $C_1$  associée au contact Schottky diminue, à cause de l'augmentation de l'extension de la zone de charge d'espace. Et ce jusqu'à ce que le courant inverse devienne trop important et perturbe l'effet de la capacité de déplétion par l'apparition de la capacité de diffusion. En polarisation directe, la valeur de la capacité augmente du fait de la réduction de la zone de charge d'espace, puis commence à décroître quand celle-ci disparaît. On voit que le saut en courant provoque une modification de la capacité. Pour la capacité  $C_2$  associée à l'interface Ge/GaAs, l'effet est similaire. Le comportement obtenu de la C-V est en accord avec ce qui est attendu.

On peut tenter d'extraire le niveau de dopage sondé par la modulation de la zone de charge d'espace. On trace les courbes  $1/C^2$  en fonction de la tension de polarisation, comme on peut le voir sur la figure (b). On extrait la pente de cette courbe dans la zone linéaire, où seul l'effet de la capacité de déplétion est adressé. On trouve des pentes de  $\Delta_1 = -5.84 \times 10^{23}$  et  $\Delta_2 = -2.74 \times 10^{24}$  pour les capacités  $C_1$  et  $C_2$ . En utilisant la formule 3.25 de la page 100, qui permet de relier la valeur de la capacité à la densité apparente de porteurs, on trouve un dopage de  $1.3 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$  si l'on associe la capacité  $C_1$  à la zone de déplétion dans le germanium par

### Chapitre 3. Étude des propriétés de l'injection électrique dans des couches de germanium non contraint

le contact Schottky. Pour la seconde capacité, on trouve un dopage de  $5.89 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ , si l'on considère que la surface adressée est liée à l'interface Ge/GaAs. Les valeurs déduites par cette méthode correspondent aux ordres de grandeur des dopages attendus, et mesurés par la méthode de résistivité de couche. La difficulté est de connaître précisément la surface active qui participe à la réponse de la capacité. Autant pour l'interface avec le métal, la surface de métal déposé doit être équivalente à la surface active de la capacité. Mais pour la jonction Ge/GaAs, il est plus difficile de statuer sur la surface mise en jeu, car on ne connaît pas l'extension latérale du champ électrique qui vient adresser l'interface par rapport au contact du dispositif. Par ailleurs, on a vu que la propriété de la jonction en courant est anormale, il se peut que la présence de charge supplémentaire puisse influencer sur la réponse du système. Il faut aussi considérer que l'extraction de la valeur des deux capacités nécessite de pouvoir découpler leurs variations en considérant un modèle comportant deux capacités en série, d'autant plus que les valeurs attendues sont dans le même ordre de grandeur. L'ajustement de ce modèle sur le coefficient de réflexion  $S_{11}$  mesuré est très sensible à la valeur des paramètres initiaux associés aux différentes conductances en parallèle avec les capacités. On arrive tout de même à extraire des valeurs de capacités avec les niveaux de dopage attendus.



**Fig. 3.35 :** Mesures C-V des capacités extraites de l'échantillon Ger302A

Il n'est pas possible d'extraire la hauteur de barrière  $\phi_b$ , à partir de la variation de la capacité en fonction de la tension de polarisation. Typiquement, la démarche pour extraire la hauteur de barrière consiste à extrapoler la partie linéaire de la courbe et d'en déduire la tension de polarisation lorsque  $1/C^2$  est nulle. Ce qui correspond à une extension de la zone de charge d'espace nulle ( $C = \infty$ ). Les valeurs obtenues par cette méthode sont autour de 1.5 V. Il n'est pas possible d'obtenir directement le régime de bande plate pour la Schottky seule, car pour cette structure il faut à la fois pouvoir contrebalancer la zone de charge d'espace de la Schottky et celle de l'interface Ge/GaAs.

#### Échantillon Ger302B

Pour l'échantillon Ger302B, le courant de fuite est trop important, et ne permet pas de sonder proprement les caractéristiques des capacités du modèle équivalent. On note que la réponse des dispositifs fait apparaître un effet inductif sur le coefficient de réflexion  $S_{11}$  mesurée pour des tensions de polarisation directe supérieure à 0.7 V. Cet effet peut être associé à la modulation de la conductivité de la structure qui change de régime. Celle-ci augmente fortement, court-circuite les capacités et adresse les inductances de la structure. Cet effet peut être associé à l'injection

### 3.4. Caractérisation électrique de l'empilement Métal/Ge/GaAs : diodes Schottky sur germanium

---

de porteurs minoritaires dans la structure (GREEN et al., 1973; WERNER et al., 1988). Ce point sera discuté dans la suite.

#### 3.4.6 Bilan

La complexité de la structure, associée au niveau de dopage important, ne permet pas d'extraire les caractéristiques sur les hauteurs de barrière de manière formées à l'interface entre le germanium et le métal, par des méthodes de caractérisation standards.

Les propriétés d'interface du germanium sont très sensibles aux états de surface. La réalisation d'un contact simple laisse apparaître un phénomène de saut en courant. La passivation de la surface joue un rôle important. L'ajout d'une barrière d'oxyde d' $\text{Al}_2\text{O}_3$  change drastiquement les propriétés de transport à l'interface avec le métal. Il permet de supprimer l'instabilité en courant par rapport à un contact classique. Les états d'interface sont en partie supprimés. Le déblocage du niveau de Fermi a pu être observé, car on mesure un courant de saturation plus important à température ambiante, lié à la modification de hauteur de barrière. Mais le déblocage du niveau de Fermi n'est pas totalement effectif, car on n'est pas en présence d'un contact ohmique. Mais l'effet de passivation par cette couche d'oxyde est effectif, et améliore grandement les propriétés de transport à l'interface.

### 3.5 Expériences d'électroluminescence

On s'intéresse maintenant aux propriétés d'émission radiative des échantillons. On va pouvoir étudier l'injection des porteurs dans le germanium pour différentes configurations d'empilement. Dans un premier temps, on s'intéresse aux propriétés des couches sous pompage optique pour obtenir des spectres de photoluminescence. Ensuite, on effectuera des expériences d'électroluminescence pour étudier la réponse des dispositifs sous injection électrique.

#### 3.5.1 Présentation du banc de caractérisation

Les mesures d'électroluminescence ont été réalisées sur le banc de caractérisation électro-optique. Le porte-échantillon comporte un montage qui permet de contacter les dispositifs par deux pointes métalliques. Ces deux pointes sont reliées à une source continue tension/courant (CW) Keithley 2400A. Le générateur courant/tension est utilisé pour tracer les courbes I-V des échantillons étudiés. Le montage peut être relié à une source de tension impulsionnelle Agilent 8114A Pulse Generator, qui permet de générer des impulsions d'une largeur temporelle jusqu'à 50 ns avec un courant de 1 A. Le courant du générateur de tension impulsionnelle est mesuré par une sonde de courant par effet Hall, qui est reliée à un oscilloscope. Cela permet d'évaluer la valeur du courant injecté dans le dispositif, et de contrôler le profil des impulsions.

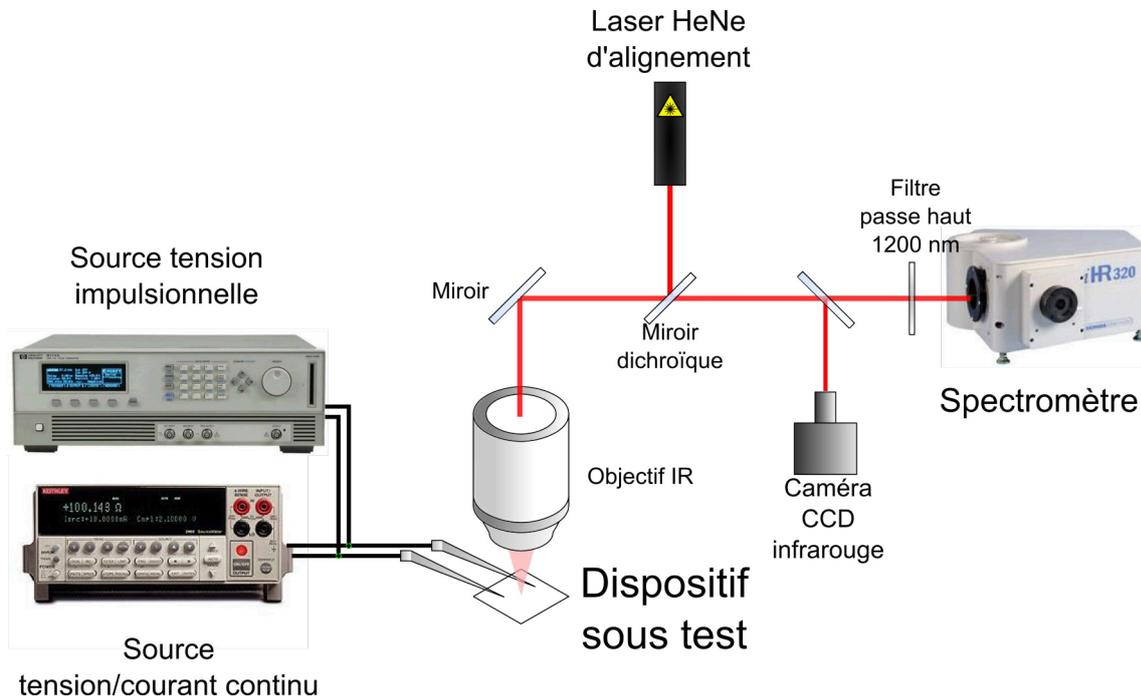


Fig. 3.36 : Schéma du banc de caractérisation électro-optique

La collection de la lumière s'effectue à l'aide d'un objectif adapté à une plage de longueur d'onde dans le proche l'infrarouge. Sa distance focale est de 1 cm afin de pouvoir passer les pointes entre la tête de l'objectif et le dispositif. La lumière émise est récupérée par rapport à la normale de l'échantillon. Elle est guidée jusqu'à l'entrée du spectromètre IHR 320. Un

### 3.5. Expériences d'électroluminescence

faisceau laser est injecté dans le chemin optique afin de pouvoir aligner la lumière collectée avec l'entrée du spectromètre. La lumière est dispersée par le réseau du spectromètre, et un détecteur en InGaAs étendu multicanal refroidi à l'azote liquide permet de mesurer l'intensité du signal injecté. La longueur d'onde de coupure du détecteur est de 2100 nm. Une caméra CCD infrarouge permet de visionner l'émission du dispositif et de contrôler l'alignement du montage.

Grâce à un jeu de miroir repositionnable, le banc peut être utilisé en configuration pour réaliser des mesures de micro-photoluminescence. L'échantillon est installé sur un porte-échantillon différent qui permet d'utiliser des objectifs plus performants, grâce à la réduction de la distance focale entre l'objectif et l'échantillon.

#### 3.5.2 Photoluminescence des couches de germanium sur GaAs

Avant d'entreprendre les expériences d'électroluminescence, on peut dans un premier temps regarder les propriétés d'émission radiative des échantillons par des mesures de photoluminescence. L'échantillon est excité optiquement par une source laser HeNe ( $\lambda = 632.8$  nm) d'une puissance de 5 mW. Le pompage par la source laser à plus haute énergie que les énergies de bande interdite des différentes couches va créer des porteurs libres qui vont pouvoir se recombiner radiativement.

On étudie la réponse de l'échantillon comportant une couche de germanium d'une épaisseur de 300 nm et dopée de type  $n$  sur une couche de GaAs dopée de type  $n$  et d'une épaisseur de 500 nm sur un substrat semi-isolant de GaAs. Le second échantillon étudié correspond à la double hétérostructure qui comporte une couche de GaAs dopée de type  $p$  sur une couche de germanium de 500 nm.

L'excitation et la collection de lumière se font perpendiculairement aux plans des couches. Dans le cas de la double hétérostructure, l'excitation de la couche de germanium se fait à travers la couche supérieure de GaAs dopée de type  $p$  d'une épaisseur 200 nm.

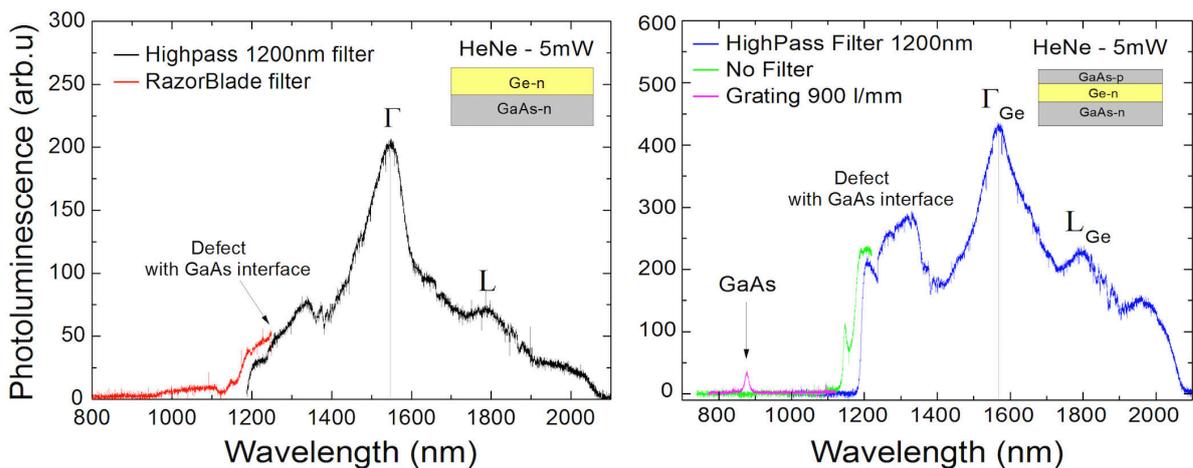


Fig. 3.37 : Spectre de photoluminescence l'échantillon Ge-n/GaAs et GaAs-p/Ge-n/GaAs

La figure 3.37 présente le spectre de photoluminescence obtenu pour une couche de germanium sur GaAs. On trouve un pic important qui correspond aux recombinaisons radiatives en vallée

### Chapitre 3. Étude des propriétés de l'injection électrique dans des couches de germanium non contraint

---

directe  $\Gamma$  dans le germanium. Son maximum est localisé à 1543 nm. On peut estimer l'énergie de la bande interdite directe de la couche de germanium par la formule suivante :

$$E_{PL} = E_G + \frac{k_b T}{2} \quad (3.35)$$

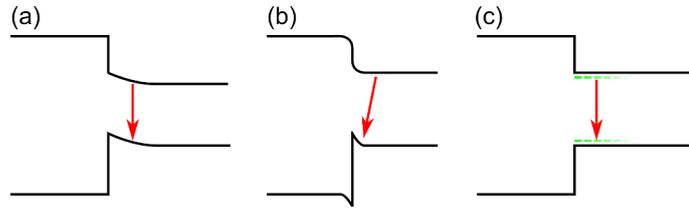
Les mesures sont réalisées à température ambiante. Cette transition radiative correspond à une énergie de bande interdite directe égale à 0.78 eV. L'écart de valeur par rapport à la bande interdite du germanium légèrement contraint en compression sur GaAs (0.794 eV), du fait de la différence de paramètre de maille de 0.078%, est lié à la renormalisation de la bande interdite par rapport au dopage. Elle réduit la valeur initiale de la bande interdite en créant une bande de défauts sous le minimum de la bande de conduction. L'épaule à 1800 nm correspond aux recombinaisons en vallée indirecte du germanium. On trouve une résonance sur le signal située entre 1200 et 1400 nm. Il s'agit de la contribution liée à la bande de défauts à l'interface entre le germanium et le GaAs.

On regarde maintenant le spectre de la double hétérostructure. Comme l'émission du germanium est transparente à travers le GaAs, on obtient un comportement identique à la différence que le fond continu est beaucoup plus important. La position du pic associé aux recombinaisons radiatives en vallée directe du germanium est légèrement décalée dans le rouge, il est situé à 1570 nm. Ce décalage spectral correspond à une différence d'énergie de 13 meV. L'élargissement du pic est plus important, ce qui montre que l'origine de cet effet n'est pas homogène dans la couche de germanium. On peut identifier trois causes à ce phénomène :

- Une contrainte mécanique en tension à l'interface causée par la croissance de la couche de GaAs sur germanium qui peut réduire l'énergie de bande interdite du germanium. Il existe une légère différence de paramètre de maille entre le GaAs et le germanium (0.078 %). Mais la couche de GaAs est en accord de maille sur la couche de germanium, car le paramètre de maille du germanium est accordé sur celui du substrat en GaAs. La déformation en tension à l'interface peut tirer son origine des défauts d'interface qui peuvent créer une contrainte locale importante par des reconstructions liées aux liaisons vacantes ou à d'autres défauts d'empilement
- La courbure des bandes à l'interface, qui provient du dopage des deux matériaux dopés ou de la présence de charges résiduelles, peut provoquer des recombinaisons non localisées spatialement avec une énergie légèrement inférieure à celle de l'énergie de la bande interdite.
- La diffusion à l'interface d'atome d'As ou de Ga dans le germanium qui pourraient créer une bande d'énergie de défauts proche du sommet des vallées, et réduire l'énergie de la transition radiative par renormalisation de la bande d'énergie interdite.

Le schéma de la figure 3.38 illustre ces différents scénarios. La discussion reste encore ouverte sur l'origine de ce décalage du maximum d'électroluminescence. Des mesures SIMS permettraient de vérifier l'interdiffusion des espèces à l'interface. Mais l'effet de la courbure des bandes reste le plus probable à la vue du comportement des mesures électriques effectuées sur cet échantillon.

Pour en revenir au spectre de photoluminescence de la double hétérostructure, la courbe tracée en bleu correspond à une configuration où un filtre passe-haut à 1200nm est installé pour couper

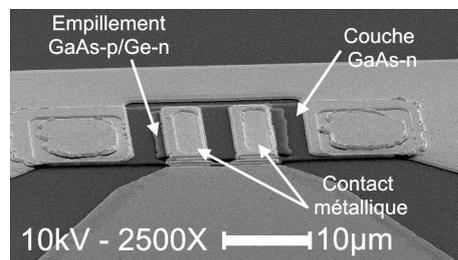


**Fig. 3.38** : Schéma associé aux différents scénarios pouvant provoquer une réduction de l'énergie de la transition radiative proche de l'interface (a) par l'effet d'une contrainte (b) par un effet de courbure de bande (c) par la diffusion d'impuretés

la lumière parasite extérieure. Le faisceau lumineux passe également par le miroir dichroïque avec une transmission faible pour des longueurs d'onde inférieures à 1200 nm. Lorsqu'on retire le filtre, on observe l'apparition de résonances pour des longueurs d'onde inférieures à 1200 nm. Ces résonances peuvent être associées à des défauts d'interface avec le GaAs. Par ailleurs, on observe l'émission associée à la transition radiative directe du GaAs située à une position de 878 nm. Mais pour cela, il faut sélectionner un réseau de diffraction du spectromètre différent, qui permet de travailler dans une plage de longueur d'onde centrée à 900 nm contre 1500 nm dans le cas précédent. La réponse du détecteur dans cette longueur d'onde n'est pas adaptée, le signal mesuré du GaAs n'est pas très intense à cause du miroir dichroïque. On retrouve la signature du GaAs sur les spectres de photoluminescence par l'émission radiative des défauts d'interface entre 1100 et 1400 nm ou par la présence d'un fond continu important sur le spectre du germanium.

#### 3.5.3 Expériences d'électroluminescence sur la double hétérostructure GaAs/Ge/GaAs

Les échantillons réalisés avec des accès coplanaires comportent des dispositifs qui permettent d'étudier l'électroluminescence. Les dispositifs sont réalisés avec une ouverture centrale dans le contact supérieur qui permet de laisser passer la lumière émise par l'échantillon. La surface de la couche de germanium est de  $20 \times 17 \mu m^2$ , l'ouverture centrale est de  $20 \times 4 \mu m^2$ , comme on peut le voir sur l'image MEB de la figure 3.39.

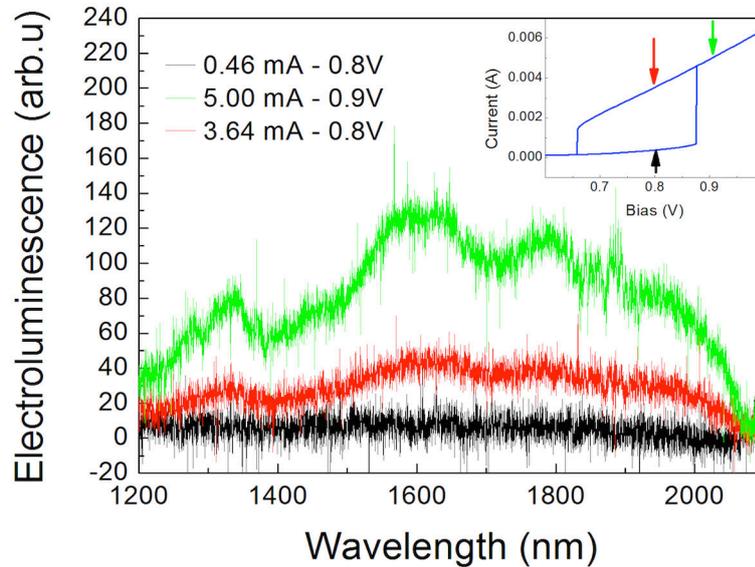


**Fig. 3.39** : Image MEB des diodes adaptées pour les mesures d'électroluminescence

Dans le cas de la double hétérostructure, on rappelle que la caractéristique courant-tension en polarisation directe des dispositifs mesurés présente un saut en courant pour une tension de 0.8V. Cette caractéristique particulière influence également sur les propriétés d'électroluminescence. En effet, si l'on se place dans un point de fonctionnement avant le saut en courant on n'observe

### Chapitre 3. Étude des propriétés de l'injection électrique dans des couches de germanium non contraint

pas de signal d'électroluminescence. Pour une tension de polarisation légèrement supérieure à la valeur du saut, on peut observer un signal d'électroluminescence. Ces résultats sont présentés sur la figure 3.40.

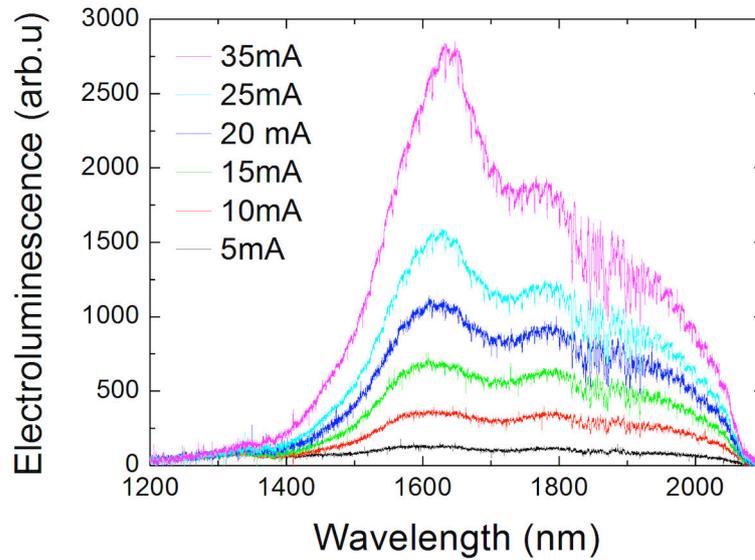


**Fig. 3.40 :** Spectre d'électroluminescence de la double hétérostructure GaAs-p/Ge-n/GaAs-n à différentes tensions de polarisation, l'encart montre le point de fonctionnement du dispositif par rapport à la caractéristique courant-tension durant l'acquisition du spectre

Le saut en courant correspond à une augmentation de sa valeur d'un facteur 10. Le spectre obtenu juste après le saut atteint un maximum d'intensité de 140 coups. Si l'on fait l'hypothèse que la dépendance de l'électroluminescence est linéaire avec le courant, alors la valeur du signal avant le saut en courant devrait être de 14 coups. On se trouve dans la limite de détection du capteur. Malgré le nombre très important d'accumulations de mesures, on ne peut pas statuer s'il y a une absence d'émission ou si le signal est trop faible pour être mesuré.

Lorsque l'on observe les propriétés du spectre après le saut en courant, on retrouve l'épaule à 1800 nm associée aux recombinaisons indirectes du germanium, et la queue de défauts entre 1200 et 1400 nm. Il n'y a pas de fond continu important qui vient se superposer au spectre du germanium comparé à la photoluminescence. Le maximum du pic de recombinaison directe du germanium est localisé à 1620 nm. Ce point sera discuté dans la suite du texte.

On peut étudier la réponse de l'électroluminescence en fonction du courant d'injection. La figure 3.41 présente des spectres obtenus pour des courants allant de 5 à 35mA, ce qui correspond à des densités de courant de 1 à 10 kA/cm<sup>2</sup>. On note que le spectre est distordu entre chaque pas de capture du spectromètre. Cet effet est lié à la difficulté d'obtenir un réglage d'injection homogène de la lumière dans le spectromètre à cause du caractère non ponctuel de l'émission radiative du dispositif, c.-à-d. la surface d'émission autour des deux contacts est très importante, et rayonne dans plusieurs directions. Pour des valeurs importantes de courant, le dispositif commence à s'échauffer. Au bout d'une dizaine de minutes à un courant de 35 mA, l'intensité du spectre d'électroluminescence commence à décroître légèrement. On atteint les limites en courant continu que peut supporter le dispositif. L'échauffement du dispositif se traduit par un



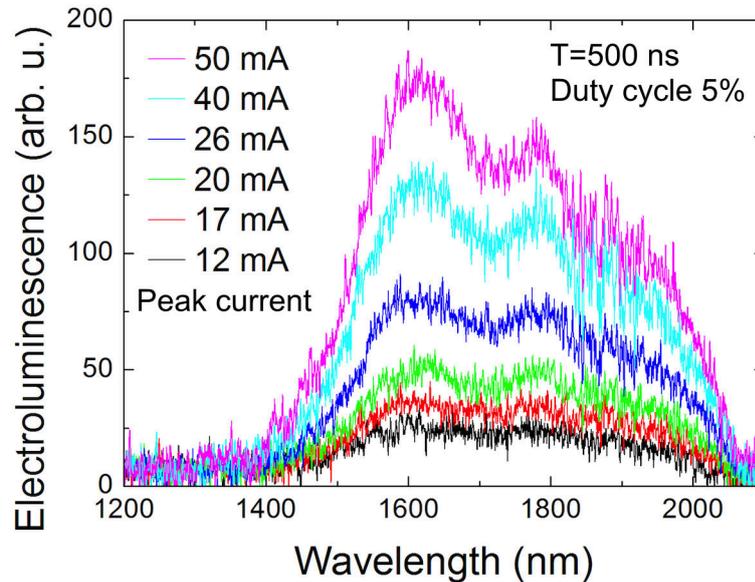
**Fig. 3.41** : Spectre d'électroluminescence pour différents courants d'injection pour la double hétérostructure GaAs-p/Ge-n/GaAs-n

décalage en longueur d'onde dans le rouge du maximum d'électroluminescence à cause de la dilatation du réseau cristallin.

Pour éliminer ce problème d'échauffement, on utilise la source en tension impulsionnelle pour injecter les porteurs dans le germanium. Le rapport cyclique est configuré pour obtenir des impulsions de tension d'une durée de 500 ns avec un taux de répétition de 5 %, afin de prévenir l'échauffement du dispositif. La figure 3.42 présente les mesures obtenues sous régime d'injection impulsionnel. Comme le rapport signal sur bruit est réduit d'un facteur 20, les spectres ont été lissés pour faciliter leurs lectures. On note que la position du maximum de recombinaisons en bande directe est située autour de 1620 nm et reste à cette position même pour des courants importants. Contrairement aux spectres de photoluminescence, la résonance située entre 1200 et 1400 nm n'évolue pas avec le courant d'injection, et le fond continu est absent. Il n'y a pas de contribution du GaAs sur les spectres d'électroluminescence. Les porteurs sont injectés seulement dans le germanium.

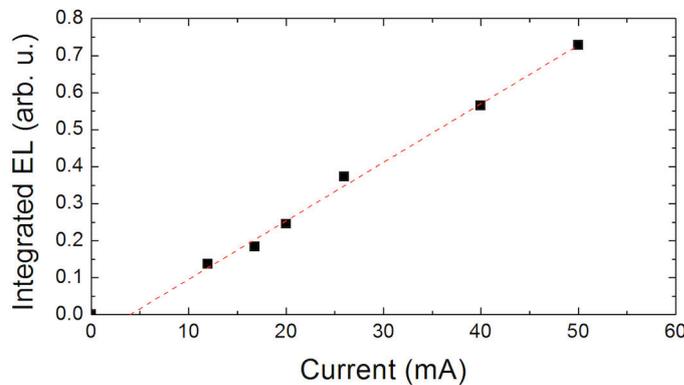
On a montré que la position du maximum des recombinaisons radiatives directes en photoluminescence du germanium est située à 1568 nm. En électroluminescence, il est localisé à 1620 nm. Cette différence correspond à un décalage supplémentaire en énergie de 25 meV. On a éliminé l'échauffement par une injection impulsionnelle. Ce décalage provient de la courbure de bande à l'interface entre le germanium et le GaAs, comme on l'a illustré sur la figure 3.38 (b) de la page 129. Le champ électrique ne permet de surmonter les zones de charges d'espace, qui provoque les courbures de bandes, de manière aussi homogène qu'avec un pompage laser.

La valeur de la densité intégrée de chaque spectre en fonction du courant d'injection est présentée sur la figure 3.43. On note que sa réponse est linéaire, car l'échauffement est éliminé. Si l'on effectue un ajustement linéaire sur les points mesurés, la courbe ne passe pas par l'origine. On trouve un seuil en courant à 4 mA. Cette valeur correspond au niveau de courant juste après le saut au-delà de la tension de seuil de 0.8 V que l'on observe sur les courbes I-V. Pour générer des



**Fig. 3.42 :** Spectre d'électroluminescence pour différents courants d'injection pour la double hétérostructure GaAs/Ge /GaAs en régime impulsif

recombinaisons radiatives, il faut pouvoir injecter des trous dans le germanium. L'observation d'électroluminescence n'intervient qu'après le saut en courant. On peut donc considérer que le saut en courant est relié au passage des trous du GaAs dopé de type  $p$  vers le germanium.



**Fig. 3.43 :** Signal intégré en fonction de courant d'injection en régime impulsif pour la double hétérostructure GaAs-p/Ge-n/GaAs-n

On a vu dans la partie des caractérisations électriques que les dispositifs de cet échantillon pouvaient avoir deux types de comportements. On a pu observer de l'électroluminescence quand le dispositif présente un saut de courant à tension de 0.8 V. Pour le second type de comportement, qui possède un saut en courant autour d'une tension de 1.1 V, il n'est pas possible d'observer un signal d'électroluminescence. Le dispositif perd la capacité de pouvoir injecter des trous dans le germanium.

On a démontré l'injection de porteur à travers la double hétérostructure GaAs-p/Ge-n/GaAs-n, et cela avec une couche de germanium possédant un dopage important. Le signal collecté est

très intense. Il est du niveau de la photoluminescence, même si les conditions de collection sont légèrement différentes. Ce qui montre que l'injection de porteurs dans le germanium est très efficace. On n'observe pas une signature de la réponse de GaAs sur les spectres d'électroluminescence, ce qui montre que les porteurs sont bien injectés et confinés dans le germanium. Malheureusement, l'instabilité du comportement de la structure n'a pas permis d'approfondir l'étude des propriétés d'électroluminescence à forte densité d'injection. La densité de courant maximale a seulement pu atteindre une valeur maximale de 15 kA/cm<sup>2</sup>.

On cherche à développer une alternative par rapport à la double hétérostructure, qui permet d'étudier les propriétés d'électroluminescence du germanium. On va s'intéresser aux dispositifs avec un contact Schottky sur germanium, et caractériser leurs propriétés d'électroluminescence afin de pouvoir connaître leurs applications pour des dispositifs d'émission radiative.

#### 3.5.4 Mesures d'électroluminescence avec des diodes Schottky

La diode Schottky est un dispositif à porteurs majoritaires. Dans certaines conditions d'injection, il est possible d'observer de l'électroluminescence. Cette configuration est à l'origine de la première observation du phénomène d'électroluminescence dans un semiconducteur en SiC au cours de l'année 1907 (SCHUBERT, 2006), bien avant l'avènement de jonctions pn.

La contribution des porteurs minoritaires aux propriétés de transport dans les dispositifs Schottky est omise dans la plupart des cas. Ce problème a été traité dans la littérature principalement dans les années 70 (CARD et al., 1973; GREEN et al., 1973; NG et al., 1990; RIEDER et al., 1980; SCHARFETTER, 1965). Les approches développées permettent de calculer le paramètre d'injection  $\gamma$  qui exprime le rapport entre le courant de porteurs minoritaires et majoritaires en utilisant la théorie de la diffusion. Un rapport d'injection limite, dans le cas d'un semiconducteur dopé de type  $n$ , peut être calculée par la relation suivante (GREEN et al., 1973) :

$$\gamma_0 = \frac{\mu_p p_0}{\mu_n N_D + \mu_p p_0} \quad (3.36)$$

Où  $p_0$  est la densité de trous à l'interface, qui découle d'une couche d'inversion dans la zone de charge d'espace. Cette quantité est donc dépendante de la hauteur de barrière et des propriétés intrinsèques du semiconducteur. Cette quantité peut se calculer par résolution numérique. En connaissant les mobilités et le dopage du matériau, on peut en déduire le rapport d'injection des porteurs minoritaires. Ce facteur est estimé à 1% pour du germanium dopé à environ  $1 \times 10^{19}$  cm<sup>-3</sup>. Seulement cette approche ne traite pas strictement le passage des porteurs du métal vers le germanium, car elle néglige le passage des porteurs par effet tunnel. L'interface avec le métal est gérée par une condition limite pour calculer un courant à travers l'interface (CROWELL et al., 1966) :

$$J_n = q(n - n_{eq})v_{R,n} \quad (3.37)$$

$$J_p = q(p - p_{eq})v_{R,p} \quad (3.38)$$

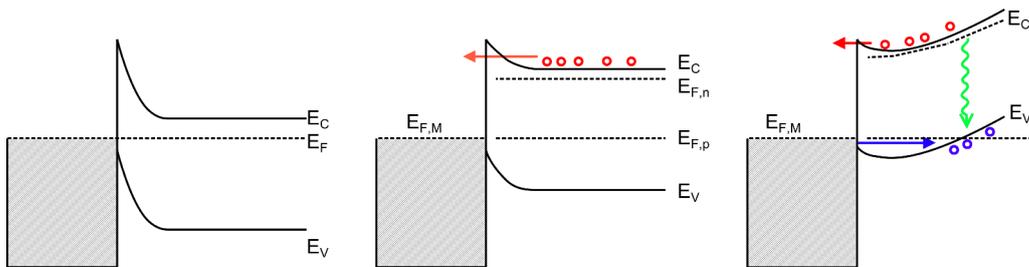
Où  $v_{R,n}$  et  $v_{R,p}$  sont les vitesses de recombinaison à l'interface pour les électrons et les trous respectivement, et  $n_{eq}$  et  $p_{eq}$  sont les densités de porteurs équivalentes si la vitesse de recombinaison

### Chapitre 3. Étude des propriétés de l'injection électrique dans des couches de germanium non contraint

son état infini. La vitesse de recombinaison est calculée à partir de la constante de Richardson, et de la densité d'état effective du semiconducteur  $v_{R,n,p} = A_{n,p}^* T^2 / q N_{c,v}$  (cm/s).

Cette relation est souvent utilisée pour traiter le contact Schottky, notamment dans le logiciel de simulation ATLAS Silvaco. Mais on n'a pas réussi à obtenir une compréhension claire du cadre théorique qui permet d'établir cette condition d'interface, car on ne connaît pas l'origine du transport des porteurs minoritaires injectés dans le semiconducteur (CROWELL et al., 1966).

On envisage un scénario différent pour expliquer l'injection des porteurs minoritaires dans le semiconducteur. Dans le cas où le niveau de Fermi du métal est aligné proche de la bande de valence du semiconducteur, les électrons de la bande de valence ont la possibilité de passer dans le métal par effet tunnel. Réciproquement, cela revient à injecter des trous depuis le métal vers le semiconducteur. Si le champ électrique est suffisamment intense pour s'appliquer dans la zone quasi neutre, la courbure des bandes va provoquer une dérive favorable des trous dans le volume, et ils pourront se recombiner radiativement avec les électrons. Le principe de l'observation de l'électroluminescence dans des diodes Schottky par injection de porteurs minoritaires est représenté sur le schéma de la figure 3.44.



**Fig. 3.44 :** Principe de l'injection de porteurs pour la génération de recombinaisons radiatives dans une diode Schottky (a) à l'équilibre thermique (b) à polarisation directe (c) à forte polarisation directe

Ces considérations ont amené à étudier les échantillons avec des contacts Schottky sur germanium dopé de type  $n$  par des mesures d'électroluminescence. On va pouvoir mesurer l'injection de porteurs minoritaires, et voir si elle est effective par cette approche.

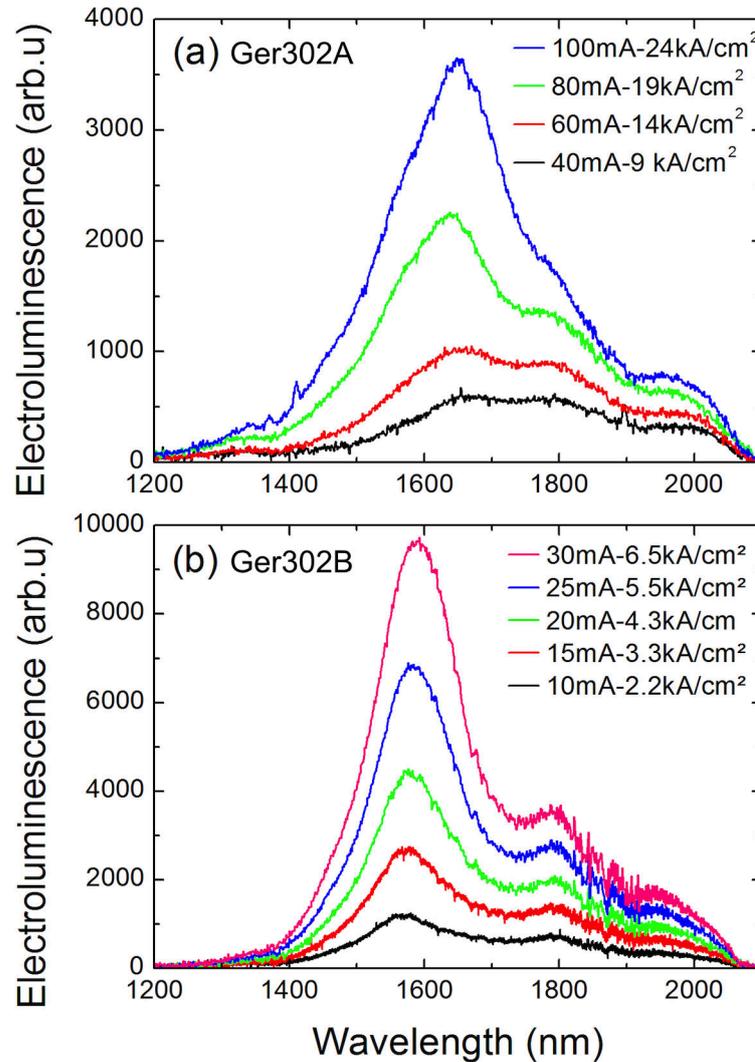
#### 3.5.4.1 Électroluminescence des échantillons Schottky

On rappelle que l'on dispose de deux échantillons. Le premier avec un contact Ti/Au (Ger302A), le second avec un contact  $\text{Al}_2\text{O}_3$  (Ger302B), ils ont été caractérisés électriquement dans la partie précédente. Les diodes pour mesurer l'électroluminescence disposent d'une ouverture centrale sur le contact supérieur de  $24 \times 4 \mu\text{m}^2$ , la surface des contacts est de  $20 \times 4 \mu\text{m}^2$ , et la surface germanium est de  $24 \times 17 \mu\text{m}^2$ .

Les résultats des spectres d'électroluminescence sont présentés sur les figures 3.45 (a) et (b) pour l'échantillon Ger302A et 302B respectivement. Ils sont obtenus en polarisation directe, c.-à-d. en appliquant une tension positive sur le contact Schottky, et à température ambiante. En polarisation inverse, on n'observe pas de signal électroluminescence jusqu'à une tension de -2 V sans dégrader la diode. On peut donc considérer que le phénomène d'ionisation par chocs n'est pas à l'origine de la création de paires électrons-trous dans le germanium. Comme pour la double hétérostructure, on retrouve un comportement de saut en courant qui modifie les propriétés

### 3.5. Expériences d'électroluminescence

d'électroluminescence sur l'échantillon Ger302A. On n'observe pas de signal d'électroluminescence, tant que la tension de polarisation n'est pas supérieure à l'apparition du saut en courant. Au contraire, pour l'échantillon Ger302B le signal d'électroluminescence peut s'observer pour des niveaux de courant assez faibles.



**Fig. 3.45 :** Spectres d'électroluminescence obtenus en polarisation directe pour l'échantillon (a) Ger302A et (b) Ger302B pour différents courants d'injection

Les spectres d'électroluminescences sont dominés par la recombinaison radiative en vallée  $\Gamma$ . Le maximum du pic de résonance d'électroluminescence est situé à 1650 nm pour l'échantillon Ger302A, contre 1570 nm pour l'échantillon Ger302B. Les recombinaisons radiatives en vallée indirecte  $L$  sont observables par l'épaule située entre 1800 nm et 2000 nm. Le décalage en longueur d'onde, par rapport à une mesure obtenue par photoluminescence, est associé à la courbure de bande à l'interface entre le semiconducteur et le métal, provoquant des recombinaisons radiatives non localisées spatialement (ou de type II).

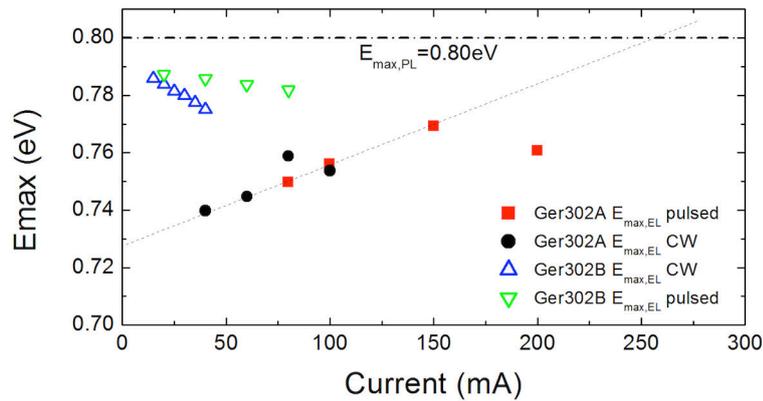
Pour l'échantillon Ger302A, le maximum du pic de résonance associé à la vallée  $\Gamma$ , se décale

### Chapitre 3. Étude des propriétés de l'injection électrique dans des couches de germanium non contraint

dans des longueurs d'onde plus courte quand la tension de polarisation augmente. Si la densité de courant devient trop importante, la position du maximum se déplace vers les plus grandes longueurs d'onde à cause de l'échauffement du dispositif. On obtient également le même comportement sous régime d'injection impulsionnel. Lorsque la tension de polarisation augmente la courbure des bandes est diminuée, ainsi le maximum des recombinaisons radiatives augmente en énergie. L'élargissement de la résonance est très important. L'émission radiative en vallée indirecte  $L$  ne semble pas être affectée par ce phénomène. L'émission radiative observée en vallée directe est plus intense pour une zone proche de l'interface avec le métal, car les photons émis en vallée  $\Gamma$  peuvent être réabsorbés du fait que leurs énergies sont plus grandes que la bande énergie interdite indirecte de la vallée  $L$ . Cela montre que le phénomène de courbure de bande est très important à l'interface proche du métal.

Pour l'échantillon Ger302B, avec une couche d'oxyde d' $\text{Al}_2\text{O}_3$ , le maximum ne se décale que vers les plus grandes longueurs d'onde à cause de l'échauffement du dispositif. Le passage à une injection impulsionnelle permet d'atténuer cet effet.

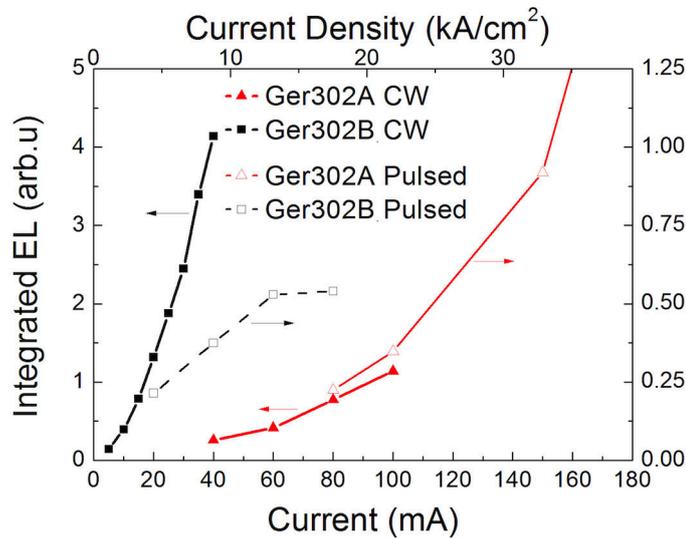
La figure 3.46 représente la position du maximum d'électroluminescence en énergie associée aux recombinaisons en vallée  $\Gamma$ , en fonction du courant d'injection. Cette figure permet de bien illustrer la différence de fonctionnement entre les deux échantillons, l'évolution des maximums ont des tendances opposées.



**Fig. 3.46 :** Évolution de la position du maximum des recombinaisons radiatives directes en fonction du courant, sous injection continue et impulsionnelle pour l'échantillon Ger302A et Ger302B

On peut mesurer l'efficacité d'injection des porteurs minoritaires dans le germanium en comparant la densité intégrée du signal d'électroluminescence en fonction du courant d'injection. Le comportement des deux échantillons est représenté sur la figure 3.47. L'échantillon Ger302B avec la couche d'interface  $\text{Al}_2\text{O}_3$ , possède une intensité d'émission plus importante que l'échantillon Ger302A avec un contact Ti/Au. Ce qui montre que l'injection des porteurs minoritaires se fait beaucoup plus efficacement. En étudiant les échantillons sous injection impulsionnelle, on obtient le même comportement. Dans le cas de l'échantillon Ger302B, on élimine l'effet d'autoéchauffement qui est responsable du comportement légèrement surlinéaire de l'émission avec l'augmentation du courant. Cette observation est cohérente avec l'absence de décalage important de la longueur d'onde du maximum de recombinaisons. Cet effet est dû à une modification du remplissage des états autour du niveau de Fermi en bande de conduction (CHENG et al., 2009). Pour l'échantillon Ger302A, l'effet légèrement surlinéaire est aussi présent à injection im-

pulsionnelle. On attribue cet effet de l'augmentation du niveau de signal à l'efficacité d'injection qui évolue de manière favorable avec le niveau du courant d'injection.



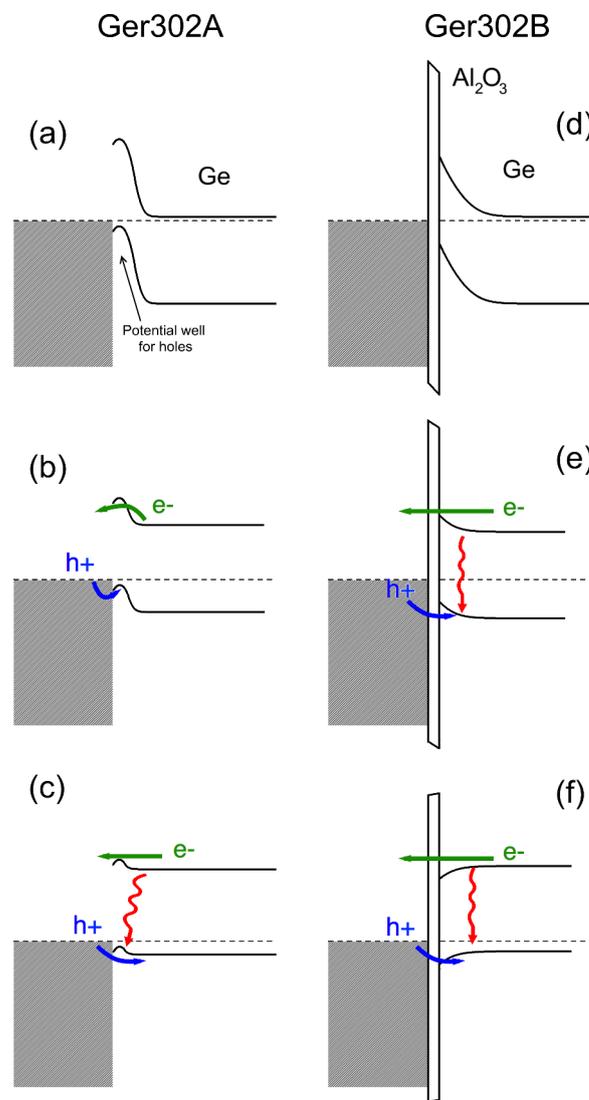
**Fig. 3.47 :** Évolution du signal intégré en fonction du courant d'injection pour l'échantillon Ger302A (courbes rouges) à courant continu (symbole triangulaire plein) et sous injection impulsionnelle (symbole triangulaire vide) et pour l'échantillon Ger302B (courbes noires) à courant continu (symbole carré plein) et sous injection impulsionnelle (symbole carré vide)

Les observations obtenues par électroluminescence sont très complémentaires avec les mesures électriques. L'observation d'électroluminescence permet de discriminer la présence des porteurs minoritaires sur la modification des propriétés de transport. Dans le cas de l'échantillon Ger302A, la présence du saut en courant est corrélée avec l'observation de l'électroluminescence. Des mesures I-V sous pompage optique ont montré l'atténuation complète du saut en courant similaire à celles obtenues sur la double hétérostructure (cf. figure 3.24 p. 112). Les états d'interface qui bloquent le courant sont saturés, de la même manière que l'on peut l'obtenir avec la passivation par une couche d'interface d' $\text{Al}_2\text{O}_3$ .

On a vu dans la partie 3.2.2.1 que les états d'interface sont prépondérants dans le cas du germanium. Les états donneurs et accepteurs dans la bande interdite du germanium sont localisés à une énergie proche de la bande de valence (CHRONEOS et al., 2012). Une importante densité de charge négative peut être capturée à l'interface dans le cas du germanium dopé de type  $n$ . Cette modification de la zone proche de l'interface dans le semiconducteur peut amener à la formation d'une barrière de potentiel supplémentaire pour les porteurs majoritaires, et un puits de potentiel pour les porteurs minoritaires. En s'appuyant sur les résultats expérimentaux, on propose un diagramme de bande pour l'interface qui permet de décrire ses effets. Il est présenté sur la figure 3.48 (a) pour la structure à l'équilibre thermodynamique. Lors de la polarisation du dispositif, les porteurs minoritaires injectés sont préférentiellement capturés dans le puits de potentiel comme représenté sur la figure 3.48 (b). En augmentant la densité d'injection des porteurs, le puits de potentiel commence à se remplir, jusqu'à une valeur critique où le passage des porteurs devient effectif par la réduction de la hauteur de barrière aux travers le puits de potentiel, comme on peut le voir sur figure 3.48 (c). Les porteurs majoritaires et minoritaires sont alors libres d'être injectés à l'interface, provoquant une hausse importante de la valeur de

### Chapitre 3. Étude des propriétés de l'injection électrique dans des couches de germanium non contraint

courant dans la structure. Cet effet peut expliquer l'absence d'observation d'électroluminescence avant le courant, du fait que les porteurs minoritaires sont confinés dans le puits de potentiel. Il permet de justifier aussi l'observation du décalage de longueur d'onde par rapport aux expériences de photoluminescence, par le fait que les trous piégés dans le puits de potentiel et les électrons ne sont pas localisés spatialement. L'effet du pompage optique est similaire à une injection électrique à fort niveau de courant. Les porteurs photo-induits peuvent venir saturer le puits de potentiel, et réduire la barrière de potentiel s'opposant aux passages des porteurs. Le diagramme de bande proposé permet de trouver une explication sur l'effet d'hystérésis. Une fois que le puits de potentiel est rempli, le niveau de courant peut rester plus important pour des tensions moins importantes, jusqu'à ce que le puits de potentiel soit de nouveau dépeuplé.



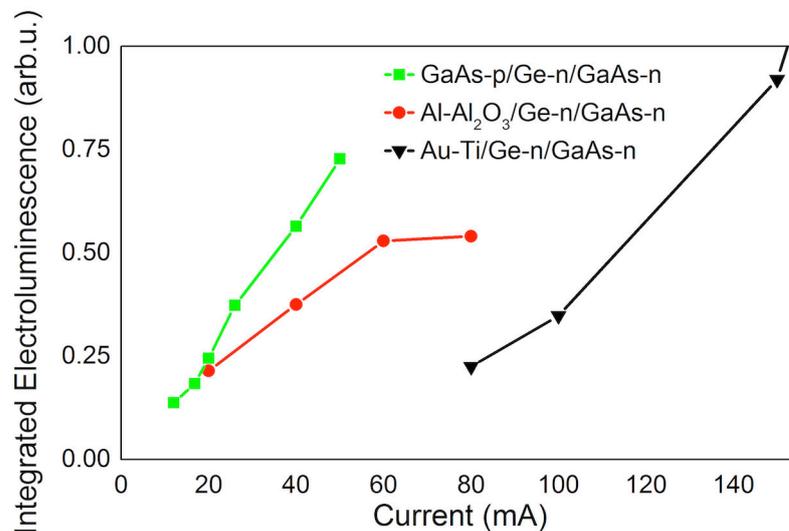
**Fig. 3.48** : Schéma du diagramme de bande pour l'échantillon Ger302A (a) et (b) l'échantillon avec une barrière d'interface Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (Ger302B)

L'insertion d'une fine barrière d'oxyde d'Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> permet de diminuer très fortement les états

d'interface. Ainsi la formation du puits de potentiel n'est plus possible. Le diagramme de bande de cette structure est représenté sur la figure 3.48 (d). Cet effet est associé à un léger déblocage du niveau de Fermi, l'injection de porteurs peut se faire de manière directe (e), sans caractéristique abrupte sur le courant dans la structure en fonction de la tension de polarisation. L'injection des porteurs minoritaires se fait de manière plus efficace, ce qui explique l'augmentation importante de l'intensité du signal d'électroluminescence à un niveau similaire de courant d'injection.

On a démontré l'observation de l'électroluminescence à température ambiante, en utilisant des diodes Schottky sur germanium dopé de type *n* en polarisation directe. L'ajout d'une couche d'interface pour passiver les états d'interface est bénéfique à la fois pour le transport des porteurs minoritaires et majoritaires. Elle permet de supprimer les modifications de changement de régime d'injection en fonction de la tension de polarisation. Elle a un apport très bénéfique pour l'étude des propriétés d'électroluminescence. Elle peut être observée à faible niveau de courant avec une intensité plus importante par l'augmentation de l'efficacité d'injection des porteurs minoritaires dans le germanium. L'observation de l'électroluminescence grâce à cette structure permet de simplifier grandement les dispositifs réalisés. Ces résultats sont importants, car ils permettent d'offrir une alternative simple pour l'étude des propriétés d'électroluminescence dans le germanium (PROST et al., 2014).

#### 3.5.5 Comparaison des différentes structures



**Fig. 3.49** : Comparaison des performances d'injection dans le germanium en fonction du courant pour les différentes structures réalisées sous régime d'injection impulsionnelle

La figure 3.49 permet de synthétiser les résultats d'électroluminescence pour les différentes structures étudiées, à savoir la double hétérostructure GaAs-p/Ge-n/GaAs-n et les diodes Schottky sur germanium, en comparant la densité intégrée d'électroluminescence en fonction du courant d'injection. On compare le signal intégré des différentes structures sous injection impulsionnelle. La bonne qualité des couches de germanium sur substrat GaAs, permet d'observer les recombinaisons radiatives en bande interdite directe  $\Gamma$  avec une forte intensité.

### Chapitre 3. Étude des propriétés de l'injection électrique dans des couches de germanium non contraint

---

Comme attendu, la structure la plus efficace est la double hétérostructure. Malheureusement, l'empilement de la double hétérostructure souffre de problème de reproductibilité et d'homogénéité qui ne permet pas d'obtenir un nombre important d'échantillon à étudier. L'uniformité des échantillons peut devenir problématique dans le cas où l'on souhaite réaliser une injection sur plusieurs centaines de micromètres comme dans le cas d'un guide d'onde. On a développé une alternative utilisant des dispositifs Schottky. L'échantillon Ger302A, qui utilise un contact Ti/Au, a une meilleure tenue en courant. Seulement l'efficacité de recombinaison radiative à courant équivalent est plus faible par rapport à l'échantillon Ger302B avec une barrière  $\text{Al}_2\text{O}_3$ . Dans ce cas, l'efficacité d'injection d'un échantillon avec une barrière  $\text{Al}_2\text{O}_3$  se rapproche d'une double hétérostructure. Ce qui permet de considérer cette structure comme une alternative viable pour l'étude des propriétés d'électroluminescence du germanium contraint.

## 3.6 Hétéroépitaxie de couche de SiGe assisté par recuit laser

L'injection des trous dans le germanium est primordiale pour obtenir la génération de recombinaisons radiatives. Le choix de privilégier la croissance d'une couche de GaAs dopée de type  $p$  sur germanium ne s'est pas avéré idéal du fait des propriétés d'interface qui pouvaient en être altérées comme l'ont montré les résultats des caractérisations électriques. On a vu les difficultés pour obtenir une double hétérostructure de bonne qualité. On a donc considéré la réalisation de couche de germanium dopée de type  $n$ , sur un substrat de GaAs dopé de type  $p$ , afin d'obtenir une hétérostructure  $pn$  simple. L'élaboration de cet échantillon se fait au détriment du confinement des trous de l'injection des électrons dans le germanium, par l'absence d'un semi-conducteur à plus grande énergie de bande interdite dopé de type  $n$ . Seulement, on a vu que la formation d'un contact ohmique sur germanium est difficilement réalisable malgré les essais de déblocage de niveau de Fermi. On a donc commencé à développer une alternative permettant de surmonter la problématique d'injection et de confinement des porteurs dans le germanium par la formation d'une couche SiGe sur germanium, qui permet d'obtenir une double hétérostructure. Grâce à une collaboration avec D. Debarre au sein de l'IEF, on a pu avoir accès à une technique d'épitaxie induite par effet laser impulsif (PLIE - Pulsed Laser Induced Epitaxy) (KOCINIEWSKI et al., 2011).

Une impulsion (20 ns) d'un laser excimer (308 nm) induit un processus de fusion suivie d'une solidification ultrarapide de la couche de germanium. La profondeur de fusion est contrôlée par la densité d'énergie laser. Durant le processus de solidification, la phase liquide se recristallise en une couche monocristalline de germanium. Si on dépose à la surface de la couche de germanium une couche de silicium amorphe, alors la matière fondue va se recristalliser en un alliage SiGe. Le principe de l'expérience est décrit sur la figure 3.50. La même méthode est d'ailleurs employée pour le dopage post-croissance des couches avec la chimisorption d'un gaz de  $\text{PCl}_3$  à la surface du germanium avant sa fusion (Gaz Immersion Laser Doping - GILD) (EL KURDI et al., 2009). Les propriétés du recuit laser sont caractérisées par deux paramètres :

- La fluence du tir laser, exprimée en mJ dans cette étude
- Le nombre de répétitions du tir laser

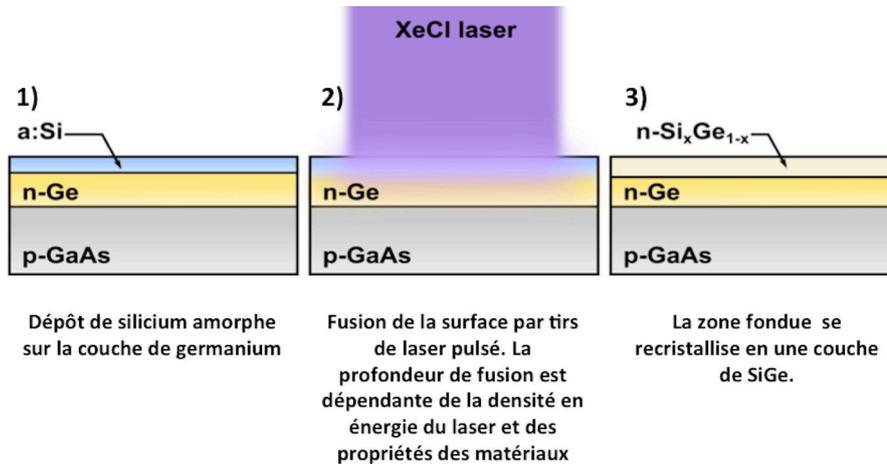
On va donc étudier leurs effets sur la formation de couches de SiGe.

### 3.6.1 Mesures SIMS

Dans le cadre du dopage par effet laser post-croissance par la méthode GILD, des mesures SIMS ont été réalisées à STMicroelectronics par M. Juhel. Elle commence avec la chimisorption d'un précurseur de  $\text{PCl}_3$  à la surface du germanium. Lors de la recristallisation du germanium après les tirs laser, la plupart des atomes de dopant de phosphore vont occuper un site substitutionnel. La position des atomes de phosphore dans la couche permet d'avoir un marqueur sur la profondeur du tir laser, car l'épaisseur de la zone dopée est liée à l'épaisseur de la couche fondue. Les mesures SIMS, présentées sur la figure 3.51 ont permis de caractériser la profondeur d'inclusion des atomes de phosphore, en fonction des paramètres de recuit du laser :

- 450mJ/5 Tirs : 40nm

### Chapitre 3. Étude des propriétés de l'injection électrique dans des couches de germanium non contraint



**Fig. 3.50** : Schéma de principe de la formation d'une couche de SiGe sur germanium par la méthode PLIE

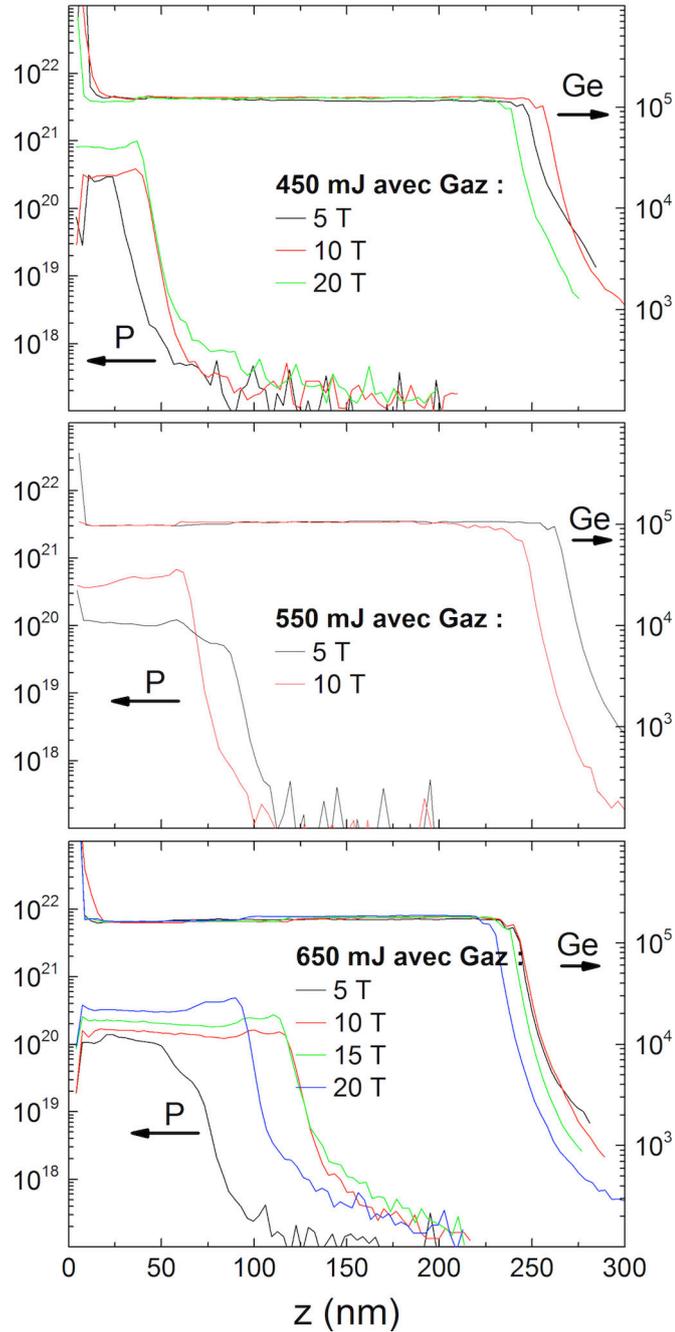
- 450mJ/10 Tirs : 60nm
- 550mJ/5 Tirs : 80nm
- 650mJ/10 Tirs : 145nm
- 750mJ/10 Tirs : 155nm

On voit que l'on peut inclure une densité d'atome supérieure à  $10^{20}\text{cm}^{-3}$  par cette méthode. Étant donné que la couche de SiGe est formée à partir d'une couche de germanium dopé de type  $n$ , celle-ci sera également dopée puisque les impuretés dopantes incluses dans la couche de germanium seront présentes dans la couche de SiGe recristallisée. On choisit de ne pas réaliser un dopage supplémentaire par un gaz de  $\text{PCl}_3$  des couches de SiGe. Le dopage dans la couche de SiGe sera assez important pour obtenir un bon contact et une injection des porteurs dans le germanium. Un dopage trop important pourrait favoriser le passage des porteurs par effet tunnel à l'interface avec le germanium. On risque de perdre les propriétés de confinement des porteurs. Par ailleurs cette technique de dopage ne peut pas être appliquée pour la couche de germanium sur GaAs, car on va dégrader les propriétés d'interface à cause du recuit laser.

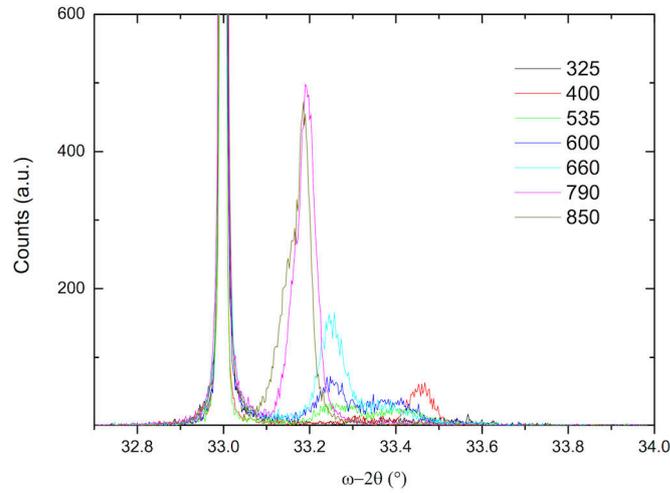
#### 3.6.2 Mesures DRX

Les études réalisées en 2009 au sein de l'équipe de recherche ont permis d'identifier les paramètres des tirs lasers permettant d'obtenir une recristallisation de la couche de SiGe formée. Une mesure par diffraction de rayon X résolu en angle permet de remonter aux paramètres de maille des matériaux. Comme on peut le voir sur la figure 3.52, la position angulaire du pic de résonance à  $33^\circ$  correspond au germanium. La diffraction des rayons X montre que les couches formées sont cristallines. Plus l'énergie est importante, plus le pic de la couche supérieure se rapproche de celui du germanium, donc la proportion de silicium dans l'alliage est faible. Une énergie comprise entre 400 et 550mJ pour 10 tirs permet d'obtenir un pic de diffraction rayon X résolu montrant le caractère cristallin de la couche formée.

### 3.6. Hétéroépitaxie de couche de SiGe assisté par recuit laser



**Fig. 3.51** : Mesures SIMS sur des échantillons de germanium sur GaAs, pour différentes valeurs d'énergie et du nombre de tirs laser. L'épaisseur de la couche de germanium est de 250 nm



**Fig. 3.52** : Spectre de diffraction rayon X résolu en angle pour des couches de SiGe formée par recuit laser

#### 3.6.3 Paramètres de couches visées

Maintenant que l'on connaît la profondeur de fusion, et la densité d'énergie permettant d'obtenir une recristallisation du silicium amorphe, on peut définir les paramètres visés de l'alliage SiGe que l'on veut former. L'intérêt de cette couche est double. On veut à la fois confiner les trous dans le germanium, mais aussi pouvoir injecter efficacement les électrons. Le confinement des trous entre le germanium et le SiGe commence à devenir effectif pour une valeur de discontinuité en bande de valence de  $\Delta E_V > 50$  meV. Cette discontinuité est obtenue pour une composition en silicium de supérieure à 30% dans l'alliage SiGe. On est limité par le volume de silicium que l'on peut inclure dans la couche de germanium, mais on peut jouer sur la profondeur de fusion. Une couche avec une épaisseur importante ne sera pas très concentrée en silicium. Inversement, une couche avec une concentration plus importante en silicium aura une épaisseur réduite.

On choisit une épaisseur initiale de silicium amorphe de 15nm, en connaissant la profondeur de fusion, on peut remonter à la composition de l'alliage SiGe

- 450mJ-10T : épaisseur fondue 40nm : SiGe : 25-30% de Silicium
- 550mJ-10T : épaisseur fondue 80nm : SiGe : 15-20% de Silicium
- 650mJ-10T : épaisseur fondue 140nm : SiGe : 10% de Silicium

#### 3.6.4 Étude paramétrique des couches de SiGe par caractérisation électrique

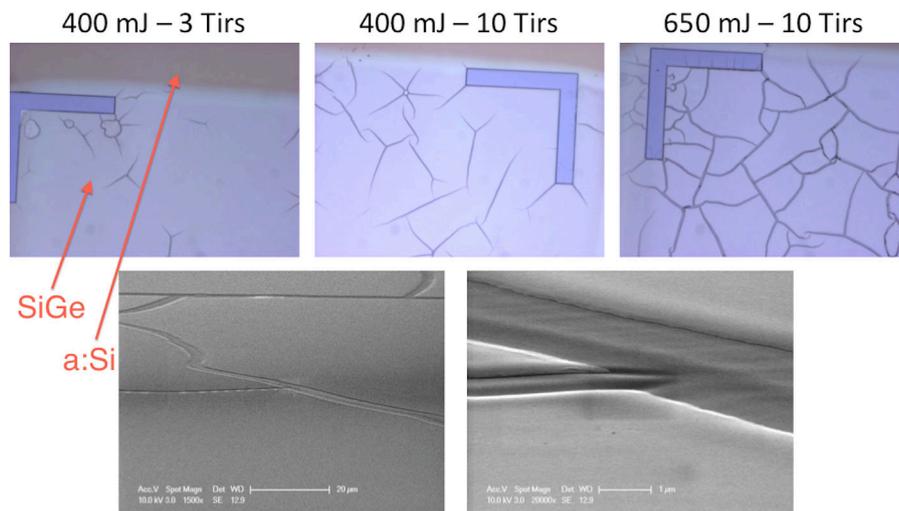
On va étudier les paramètres de recuit laser des couches de SiGe. On va regarder l'effet de l'énergie pour des valeurs entre 400 et 600 mJ avec un nombre de tirs compris entre 3 et 10.

On dépose une couche de silicium amorphe de **15 nm** sur l'échantillon constitué d'une couche de germanium dopé de type *n*, épitaxiée sur un substrat de GaAs dopé de type *p*. Le dépôt de la couche de silicium est obtenu par l'évaporateur à canon à électrons sous ultravide. Avant le

### 3.6. Hétéroépitaxie de couche de SiGe assisté par recuit laser

chargement de l'échantillon dans la chambre de dépôt, l'échantillon est soumis à un nettoyage acide HCl :H<sub>2</sub>O 1 :4 pendant 1min30 afin de dissoudre la couche d'oxyde natif, et de passiver chimiquement la surface du germanium.

Une fois le dépôt effectué, l'échantillon est prêt à être utilisé pour former les couches de SiGe. Il est chargé dans la chambre à ultravide du montage PLIE. Les premiers essais n'ont pas été concluants. Les couches formées présentent des craquelures importantes à la surface comme on peut le voir sur les images obtenues par microscope optique et électronique de la figure 3.53. Le nombre de craquelures est d'autant plus important que la densité d'énergie du tir laser est forte.



**Fig. 3.53** : Images des couches de SiGe obtenues pour différents paramètres de recuit laser sans déoxydation préalable

Une vérification par analyse dispersive en énergie (EDX) à l'aide du microscope électronique à balayage a permis de vérifier que la couche après recuit laser comportait bien du silicium, afin de confirmer que le dépôt de silicium amorphe n'a pas été retiré par une ablation laser. Après un échange avec D. Debarre, il s'est avéré qu'une attaque chimique à base d'acide fluorhydrique permet d'éliminer l'oxyde de silicium formé dans le volume de la couche de silicium amorphe, et éliminer le problème des craquelures. On a d'ailleurs pu observer la présence de l'oxyde de silicium en essayant de graver les couches de SiGe par ICP-RIE qui n'ont pas donné de bons résultats à cause d'un effet de micromasquage. En s'assurant au préalable de la tenue de la couche de silicium amorphe, on a pu réaliser un second échantillon en le désoxydant par une attaque chimique au BHF pendant 1 min 30 avant le chargement dans le bâti de la chambre à ultravide. Grâce à cette étape, les couches de SiGe ont été formées sans craquelures, indifféremment des paramètres de tirs laser. On a ensuite réalisé des dispositifs permettant de caractériser électriquement les couches formées. Les dispositifs ont été conçus afin de pouvoir étudier les propriétés d'électroluminescence. Il s'agit de diode circulaire simple avec un contact en anneau afin de laisser passer la lumière. Le diamètre des diodes est important (60 µm) afin de pouvoir contacter les dispositifs avec des pointes d'essais. Cette approche permet de simplifier le procédé de fabrication pour cette étude préliminaire.

### Chapitre 3. Étude des propriétés de l'injection électrique dans des couches de germanium non contraint

La métallisation de la couche de GaAs dopé de type  $p$  est réalisée en face arrière de l'échantillon. La recette utilisée est celle développée dans la partie précédente, utilisant un empilement Ti 5 nm / Au 500 nm, suivi d'un recuit rapide à 360°C pendant 3 min 30 afin d'obtenir un contact ohmique.

Pour la métallisation de la couche de SiGe, on utilise une recette standard à base de l'empilement Ti 5 nm / Au 100 nm qui est communément utilisée pour la formation de contact ohmique dans les dispositifs à base de SiGe.

#### 3.6.4.1 Mesures TLM

La qualité du contact a pu être mesurée par la méthode TLM. Le contact obtenu possède une caractéristique ohmique, quelles que soient les conditions de recuit pour la formation des couches laser. La figure présente le résultat obtenu pour 3 tirs laser à une énergie de 400 et 550 mJ sur une couche de germanium d'une épaisseur initiale de 275 nm.

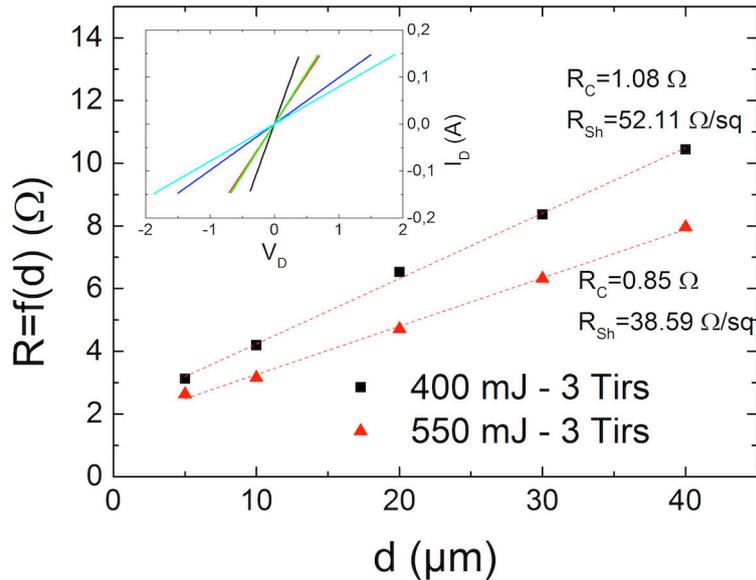


Fig. 3.54 : Mesures TLM des contacts formés sur une couche de SiGe

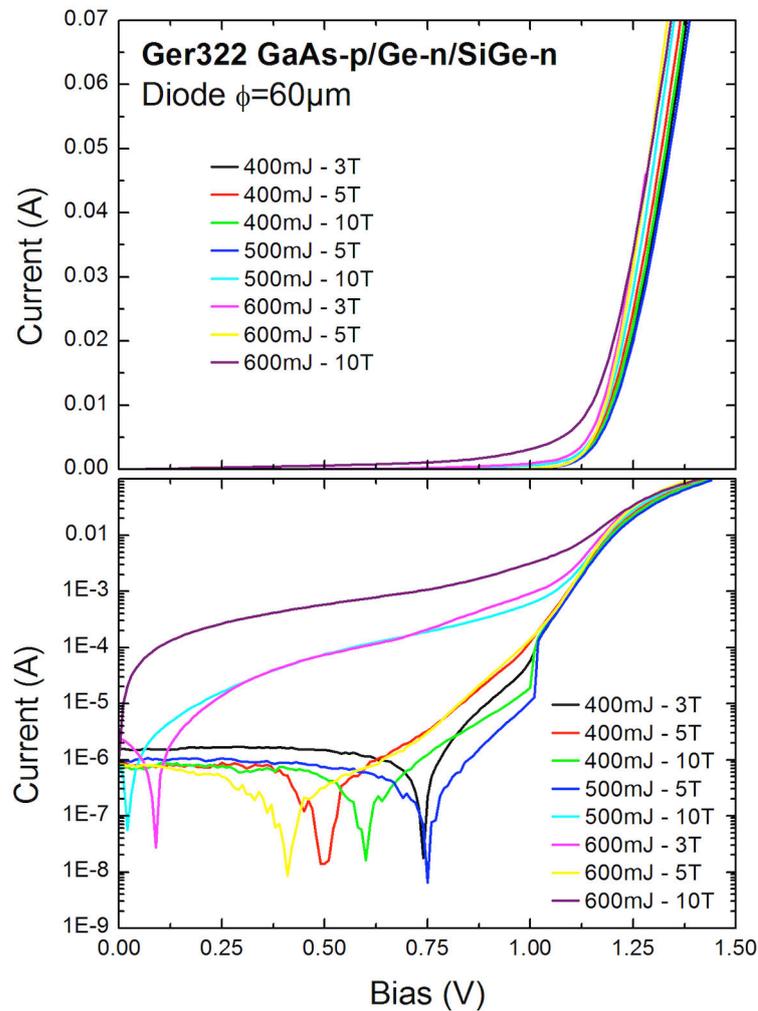
Les résistances de contact mesurées sont de 1.08 et 0.85  $\Omega$ , ce qui correspond à des résistances spécifiques de contact  $\rho_c$  de  $2.9 \times 10^{-7}$  et  $2.7 \times 10^{-7} \Omega.cm^2$ . Les contacts obtenus sont de très bonne qualité. Le changement drastique de comportement du contact par rapport à une couche de germanium peut provenir du fait que le niveau de Fermi n'est pas bloqué dans le cas de la couche de SiGe. La hauteur de barrière est réduite à l'interface avec le métal, et ainsi les porteurs sont libres d'être injectés par effet tunnel à cause du dopage important de la couche. On note que la résistivité de couche est modifiée entre les conditions de recuit laser. Elle est de 52  $\Omega/\square$  pour une couche formée avec une énergie de 400 mJ contre 39  $\Omega/\square$  pour une couche réalisée avec une énergie de 550 mJ. Comme l'épaisseur de la couche formée est plus importante pour une énergie de 550 mJ, la résistance est diminuée. Malheureusement, on ne possède pas une gamme plus importante de mesures sur différents paramètres de laser, car les mesures ont été effectuées sur les deux zones où les dispositifs étaient exploitables. Il serait intéressant d'étudier cette

### 3.6. Hétéroépitaxie de couche de SiGe assisté par recuit laser

méthode en détail pour obtenir un contact ohmique sur germanium, en réduisant l'épaisseur de la couche formée afin de pouvoir intégrer cette méthode dans des dispositifs de type transistor.

#### 3.6.4.2 Mesures I-V

On s'intéresse maintenant aux caractéristiques courant-tension des diodes SiGe-n/Ge-n/GaAs-p. Pour cette étude, l'épaisseur de la couche initiale de germanium n'est que de 150 nm. Les mesures présentées sur la figure 3.55, ont été réalisées sous éclairage. Les courbes tracées en échelle logarithmique présentent une discontinuité qui correspond au passage d'une valeur négative à une valeur positive du courant mesuré.



**Fig. 3.55** : Courbes I-V pour l'échantillon SiGe/Ge-n/GaAs-p obtenues pour différents paramètres de recuit laser. L'épaisseur initiale de la couche de germanium est de 150 nm

Comme discuté dans la partie caractérisation électrique de la double hétérostructure GaAs/Ge, on s'attend à ce que le dispositif soit dans un régime ohmique quand la tension de polarisation appliquée est proche de la tension de diffusion pour l'interface entre le germanium et le GaAs

## Chapitre 3. Étude des propriétés de l'injection électrique dans des couches de germanium non contraint

---

dopé de type  $p$ . La tension de seuil est obtenue pour une valeur d'environ 1.10 V. Cette valeur est en bonne cohérence avec la valeur attendue qui est comprise entre 0.9 et 1.15 V. Le second point est que le courant de saturation reste faible pour des tensions de polarisation jusqu'à 0.75 V. Les courants de fuites sont limités, cela montre la bonne qualité de l'interface Ge/GaAs. Certaines diodes présentent des caractéristiques de saut de courant. Ils interviennent pour des niveaux de courant relativement faibles, comparés aux dispositifs étudiés précédemment. Le saut en courant n'est pas systématique sur toutes les diodes, ce qui montre l'interface SiGe/Ge est de bonne qualité. La recristallisation permet d'aider à la formation d'une interface qui peut éliminer en partie les états d'interface. Lorsque la densité d'énergie du recuit devient trop importante, on commence à dégrader les propriétés d'interface entre le germanium et le GaAs (600mJ et 500 mJ - 10 T), car le courant de fuite est plus important. Pour les autres configurations de couche, la différence de l'effet des paramètres laser est moins perceptible, car les propriétés de courant-tension sont similaires.

### 3.6.5 Électroluminescence

On s'intéresse aux propriétés d'électroluminescence qui permettent d'étudier l'injection des porteurs dans le germanium. Les spectres obtenus correspondent aux diodes étudiées dans la partie précédente. On va décrire les résultats obtenus pour chaque énergie de recuit. On montre les spectres réalisés à un courant d'injection de 100 mA, ce qui correspond à une densité de courant de 0.8 kA/cm<sup>2</sup>.

#### 600 mJ

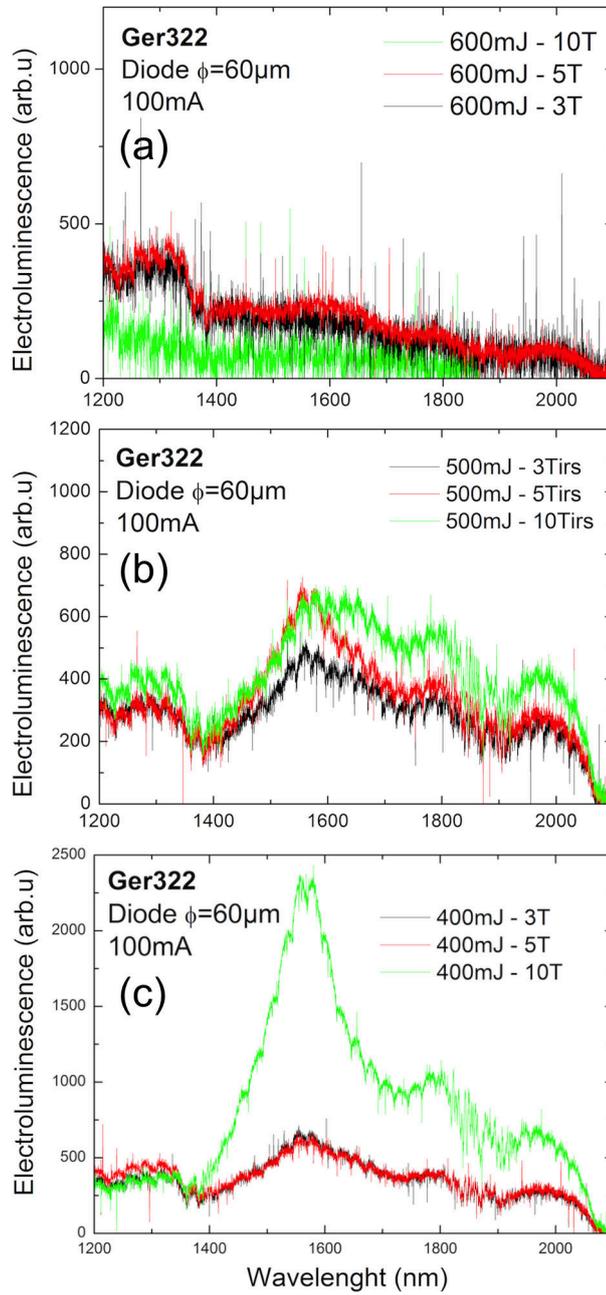
Les couches de SiGe formées avec une énergie de 600 mJ ne donnent pas de résultat d'électroluminescence satisfaisant. Sous un courant d'injection de 100 mA, on observe une résonance associée à des défauts de couches entre 1200 et 1400 nm. Comme on peut le voir sur le spectre de la figure 3.56 (a), on distingue difficilement la signature des recombinaisons directes ou indirectes du germanium, même à plus haut niveau de courant. On voit que si le nombre de tirs est trop important, il n'y a plus de signal électroluminescence. On a dégradé la couche de germanium. Si toute la couche de germanium est fondue, on a mélangé complètement la couche de silicium amorphe avec le germanium. D'autre part, on a commencé à adresser également l'interface avec le GaAs, provoquant une interdiffusion. Ainsi les propriétés d'injection sont modifiées.

#### 500 mJ

Dans cette configuration, on commence à observer un signal plus important de la réponse du germanium sur les spectres de la figure 3.56 (b). On retrouve la résonance associée aux recombinaisons radiatives directes en vallée  $\Gamma$ , localisés à 1568 nm. L'épaule localisée à 1800 nm correspond aux recombinaisons radiatives en vallée indirecte  $L$ . On retrouve la bande de défauts entre 1200 et 1400 nm. Celle-ci ne semble pas évoluer, quel que soit le nombre de tirs laser. Le nombre de tirs idéal est autour de 5. Au-delà, on obtient un élargissement du pic de résonance des recombinaisons radiatives en vallée directe du spectre d'électroluminescence. Cette configuration correspond au cas où le courant de saturation commence à devenir important. On retrouve un problème d'interface qui commence à être dégradé par l'échauffement thermique des tirs laser qui peuvent amener à une interdiffusion avec le substrat de GaAs.

#### 400 mJ

### 3.6. Hétéroépitaxie de couche de SiGe assisté par recuit laser



**Fig. 3.56 :** Spectres d'électroluminescence pour des couches de SiGe formées avec une énergie de (a) 600 mJ, (b) 500 mJ, (c) 400 mJ pour différents nombres de tirs

### Chapitre 3. Étude des propriétés de l'injection électrique dans des couches de germanium non contraint

---

Dans le cas de 400 mJ, on retrouve la résonance associée aux recombinaisons radiatives directes en vallée  $\Gamma$ , localisés à 1568 nm, comme on peut le voir sur la figure 3.56 (c). On obtient un résultat similaire pour un nombre de 3 et 5 tirs. Dans le cas de 10 tirs, il y a une augmentation spectaculaire du niveau de signal d'électroluminescence. La position des maximums reste localisée à la même position. Malgré l'augmentation du niveau d'électroluminescence, l'intensité de la résonance associée aux défauts entre 1200 et 1400 nm est stable entre les trois conditions de recuit. Ce qui montre que l'injection devient effective quand le nombre de tirs est égal à 10.

#### 3.6.6 Bilan

Les mesures d'électroluminescence ont été réalisées sur une couche de 150 nm de germanium. Pour une énergie trop importante, on dégrade complètement la couche de germanium. On voit que l'influence du nombre de tirs provoque une évolution de l'intensité du spectre d'électroluminescence. On peut donc conclure qu'un nombre de 10 tirs est minimum pour obtenir une bonne recristallisation de la couche de SiGe, afin d'avoir des conditions optimales d'injection dans le germanium. Du fait que la couche de germanium était trop fine pour les tests préliminaires, on n'a pas pu obtenir des résultats intéressants pour des énergies supérieures à 400 mJ sans dégrader l'interface.

On a donc accès à une alternative supplémentaire pour étudier l'électroluminescence du germanium. On n'a pas accès aux propriétés de la couche SiGe par des mesures électriques, car elles sont masquées par les propriétés électriques de la jonction Ge/GaAs.

## Chapitre 4

# Applications à des dispositifs en germanium contraint

Nous allons étudier l'injection des porteurs dans le germanium avec des structures contraintes en tension. Nous avons obtenu des résultats d'électroluminescence sur des couches de germanium dopées de type  $n$  par différentes approches. En combinant ces résultats avec ceux obtenus pour le dimensionnement de structures contraintes possédant une cavité optique pour établir le procédé de fabrication, on peut sonder les propriétés d'électroluminescence pour obtenir un laser germanium contraint. Dans un premier temps, on va s'intéresser à l'élaboration du procédé de fabrication mis au point pour réaliser ces structures contraintes. Ensuite, on étudiera les propriétés d'électroluminescences de ces dispositifs.

### 4.1 Procédé de fabrication de structures contraintes

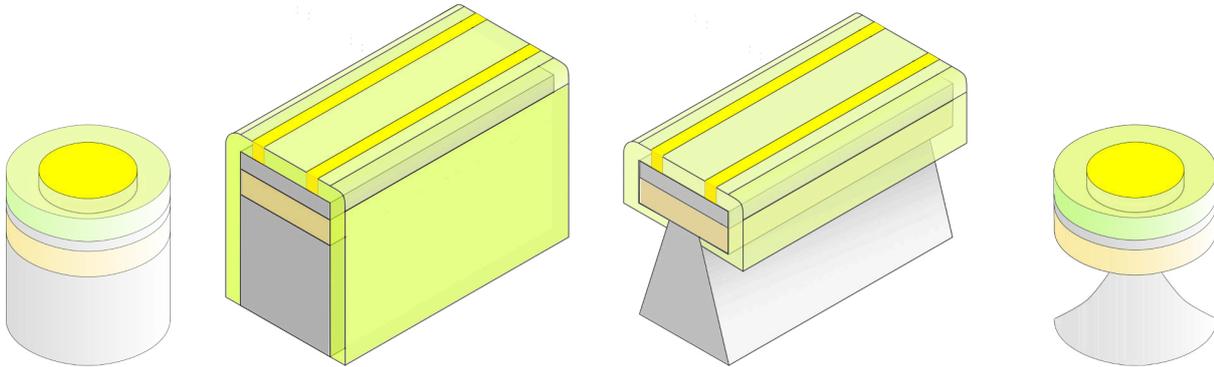
Les structures réalisées qui permettant l'étude des propriétés d'électroluminescence dans des couches de germanium contraintes et dopées de type  $n$  sont les suivantes :

- Guides contraints à injection verticale
- Microdisques contraints à injection verticale

Les deux types de structures seront réalisés avec et sans sous-gravure du substrat de GaAs qui permet une libération partielle de la couche de germanium. Les structures des différents dispositifs sont rappelées sur les schémas de la figure 4.1.

#### 4.1.1 Description des étapes de fabrication

Le procédé de fabrication est basé sur la définition des structures par lithographie électronique. Cette technique permet de définir des motifs de taille nanométrique avec une très grande précision. Elle est plus difficile à mettre en oeuvre par rapport à une technique de photolithographie, notamment sur des dispositifs à grand facteur de forme, et les temps d'écriture sont plus longs.



**Fig. 4.1** : Schémas représentant les différents dispositifs réalisés (a) micropilier (b) guide d'onde à gravure droite (c) guide d'onde à sous-gravure (d) microdisque

On dispose d'un accès à un équipement de lithographie électronique très performant à la salle blanche de l'IEF. Le masqueur électronique possède un faisceau d'électrons accéléré à une tension de 80 kV. Grâce à l'énergie importante du faisceau d'électrons, la poire d'interaction électronique sera localisée dans la profondeur du substrat. La dispersion des électrons dans la résine est limitée. Cela permet d'avoir des profils de résine droite, pour obtenir une gravure sèche de bonne qualité.

On peut résumer la fabrication des dispositifs en trois points cruciaux :

- Définition des cavités optiques
- Encapsulation par une couche de SiN contrainte
- Réalisation des accès métalliques

En pratique, pour arriver au résultat final il faut enchaîner une multitude d'étapes avec plusieurs niveaux d'alignement. Dans la suite, on va décrire le procédé complet pour la réalisation des dispositifs. On rappelle les dimensions et les spécificités liées au procédé de fabrication des structures réalisées. Un extrait du masque comportant les différents éléments pour former des guides d'ondes et des microdisques est représenté sur la figure 4.2.

### Microdisque/Micropilier :

Les disques sont réalisés avec différents diamètres de 3 à 12  $\mu\text{m}$ . On dispose de deux variations sur la prise de contact de la couche de germanium :

- Un contact plein en disque occupant 2/3 de la surface du disque
- Un contact en anneau d'une largeur de 500 nm

On garde les mêmes proportions de tailles de contact pour chaque variation de diamètres de disques.

### Guides d'ondes

Les dimensions des guides d'ondes ont été définies par rapport aux paramètres optimisés de la partie modélisation.

#### 4.1. Procédé de fabrication de structures contraintes

- Largeur : 6,5,4,3  $\mu\text{m}$
- Tranchée de gravure de 500 nm de large
- Contact métallique de 400 nm situé à 500 nm du bord

Pour chaque largeur de guide, on réalise 4 longueurs différentes (470,300,150,60  $\mu\text{m}$ ) afin de pouvoir mesurer la variation de l'intensité lumineuse émise en fonction de la longueur d'injection dans les guides. L'électrode centrale de report de contact occupe une surface importante sur le guide, afin d'assurer une bonne continuité électrique. Celle-ci sera isolée optiquement et électriquement de la couche de germanium grâce à la couche de nitrure de silicium.

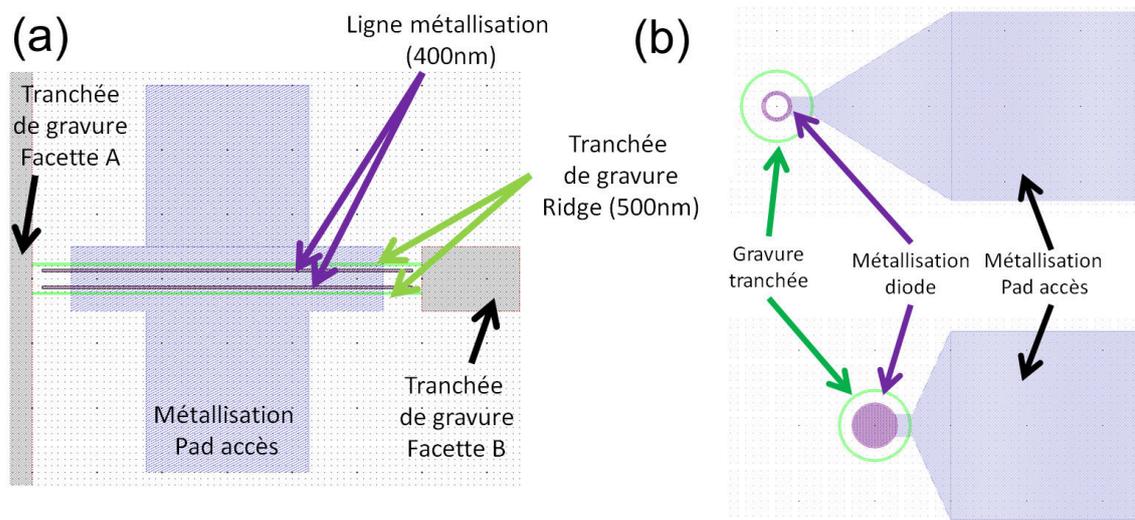


Fig. 4.2 : Masque des dispositifs réalisés (a) pour des guides d'ondes (b) et des microdisques

##### 4.1.1.1 Étape préliminaire

La surface de travail des échantillons réalisés est typiquement de 1  $\text{cm}^2$ . Ils sont découpés à partir d'un substrat de 2 pouces à la scie diamantée de façon à pouvoir définir les bords de l'échantillon suivant la direction  $\langle 100 \rangle$ , car la direction de clivage du substrat s'effectue suivant  $\langle 110 \rangle$ . Cela permet un alignement des guides d'ondes suivant  $\langle 100 \rangle$ , qui lors de l'application de la contrainte permet une levée de dégénérescence de la vallée  $L$ , et augmente l'efficacité d'injection des porteurs en vallée  $\Gamma$  (GHRIB et al., 2012).

Par ailleurs, avant de commencer les différentes étapes de fabrication, on réalise la métallisation du substrat dopé en face arrière.

La première étape consiste à former des marques à la surface de l'échantillon afin de pouvoir construire un repère d'alignement pour l'enchaînement des différents niveaux de lithographie électronique. La dérive de positionnement des platines de déplacement de la machine de lithographie est environ de 50-100 nm par heure d'écriture. Les dimensions critiques d'alignement pour la réalisation des dispositifs sont de cet ordre de grandeur. Pour obtenir une bonne précision d'alignement ( $< 50$  nm), l'échantillon est divisé en sous-domaines d'écriture de 2  $\text{mm}^2$ . La

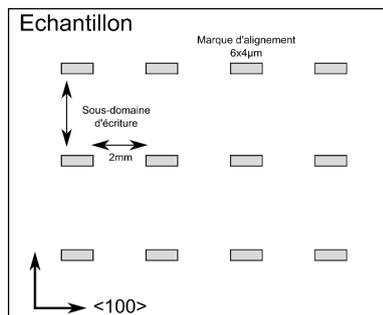


Fig. 4.3 : Principe d’alignement par écriture en sous-domaine pour la lithographie électronique

durée d’écriture est réduite à une quinzaine de minutes, et l’alignement est effectué à chaque sous-domaine afin de limiter la dérive de la platine.

Pour que l’instrument d’écriture puisse repérer automatiquement la position du repère, il faut obtenir un bon contraste entre la marque ( motif rectangulaire  $6 \times 4 \mu\text{m}^2$  à  $2 \times 1.5 \mu\text{m}^2$ ) et le substrat. On peut utiliser deux approches. Soit en utilisant des marques gravées dans la couche ( avec une profondeur supérieure à 200 nm), soit en utilisant des marques métallisées par lift off (avec une épaisseur supérieure à 100 nm). On peut combiner cette étape préliminaire avec le premier niveau de lithographie, si le procédé de fabrication coïncide avec la réalisation des marques.

#### 4.1.1.2 Premier niveau : Métallisation des accès

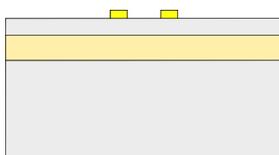


Fig. 4.4 : Premier niveau de lithographie : Dépôt des lignes de contact métallique

On choisit d’effectuer en première étape la métallisation des lignes d’accès des dispositifs pour deux raisons principales. Les dimensions des lignes d’accès sont critiques (500 nm) et nécessitent d’avoir une bonne précision. Le lift off sera difficile à réaliser si le facteur de forme des structures de l’échantillon est important. D’autre part, la réalisation des métallisations en première étape permet de limiter la contamination de la surface de l’échantillon durant les autres étapes. De cette façon, on obtiendra des contacts de bonne qualité sur les structures réalisés.

La métallisation est effectuée grâce à la résine positive PMMA A6. La zone insolée par le faisceau d’électrons rend soluble la résine lors du développement. On effectue un prérecuit à une température de  $180^\circ\text{C}$  pendant 5 min pour désorber l’échantillon. L’enrésinement s’effectue à une rotation de 4000 tr/min pendant 60s, pour obtenir une épaisseur de résine de 300 nm. On effectue ensuite un recuit pendant 2 min 30 à  $180^\circ\text{C}$  pour évaporer les solvants.

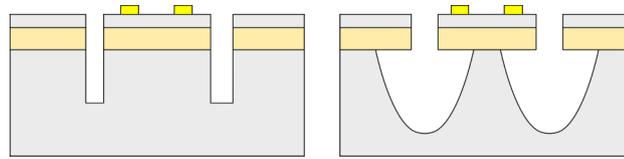
La dose pour obtenir la révélation de la résine est de  $9.5 \text{ C}/\text{m}^2$  pour des motifs de 500 nm de large, et  $6.5 \text{ C}/\text{m}^2$  pour tailles  $>10\mu\text{m}$  sur substrat GaAs. Le développement de la résine se réalise dans le mélange MIBK :IPA (1 : 3) pendant 1min30, suivi d’un rinçage à l’IPA.

## 4.1. Procédé de fabrication de structures contraintes

Avant de réaliser la métallisation, on applique la procédure de nettoyage par un plasma  $O_2$  pendant 10s pour enlever les résidus de résines dans les motifs suivie d'une désoxydation (BHF ou HCl dilué). L'échantillon est ensuite chargé dans l'évaporateur à canon à électrons. Une couche d'une épaisseur maximum de 110 nm est déposée. Le choix de l'empilement métallique dépend de l'échantillon réalisé.

L'échantillon est placé dans un bain d'acétone pour dissoudre la résine et libérer les motifs métalliques déposés dans les ouvertures de résine du reste du métal déposé sur la résine.

### 4.1.1.3 Second niveau : Gravure pour la définition des dispositifs



**Fig. 4.5** : Second niveau de lithographie : définition des cavités optiques par gravure en tranchées des différentes couches

Une fois la métallisation achevée, la seconde étape consiste à définir les structures des cavités optiques alignées autour des contacts par une gravure. On forme deux tranchées autour du guide. Perpendiculairement, une tranchée d'une dimension plus importante est formée pour la formation des facettes, et permet de dégager l'accès au guide pour les caractérisations optiques. Dans le cas des microdisques, on définit une tranchée circulaire de 500 nm. Autour de ce motif, on réalise une ouverture circulaire d'un diamètre extérieur plus important sur les trois quarts de la périphérie du disque. Cela permet de dégager la structure pour les caractérisations optiques, tout en laissant un accès pour l'électrode de contact.

La lithographie est réalisée en utilisant la résine positive ZEP-520A, qui possède une bonne résistance à la gravure et une bonne sensibilité électronique pour obtenir des motifs avec une très bonne résolution. L'enrésinement s'effectue à vitesse de rotation de 2000 tr/min pour obtenir une épaisseur de 500 nm. Le recuit est effectué à  $180^{\circ}C$  pendant de 2 min 30. Pour obtenir un enrésinement conforme de la résine avec des motifs préexistants, il est nécessaire d'oxyder pendant un temps très court la surface de l'échantillon à l'aide d'un plasma  $O_2$  ( $<10$  s) à faible puissance afin d'avoir une meilleure affinité chimique avec la résine, et donc une meilleure adhésion.

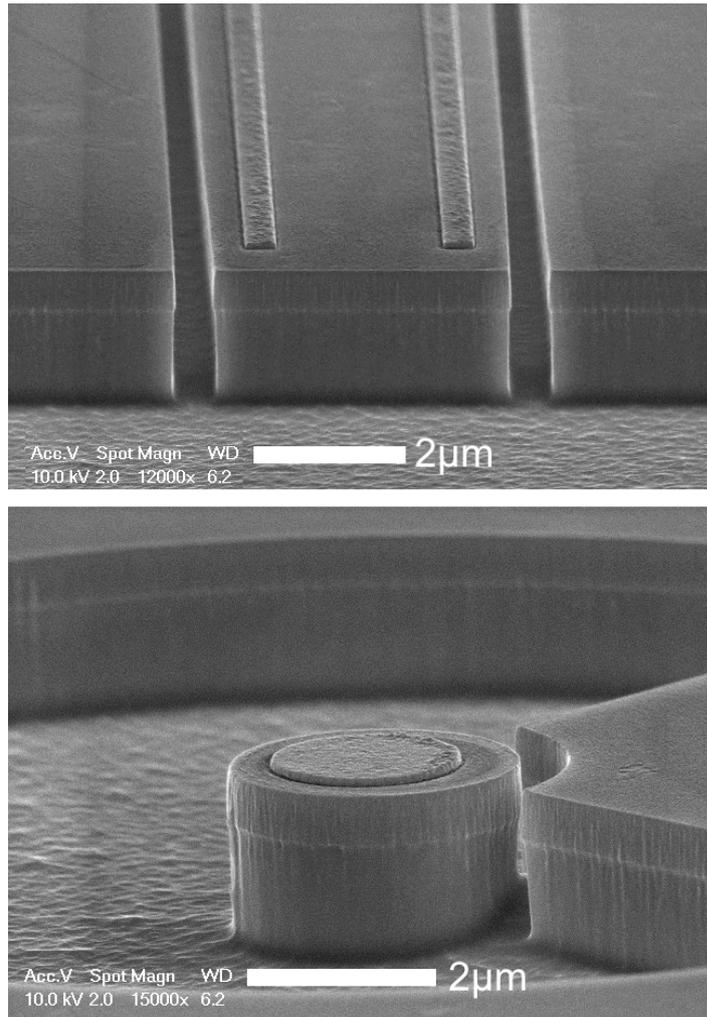
Pour des motifs de 500 nm de large, la valeur de la dose a été calibrée à  $2 C/m^2$  pour la réalisation des tranchées de 500 nm de large, et  $1.6 C/m^2$  pour des motifs micrométriques. La résine exposée est développée dans la solution ZD-50N pendant 1min30, suivi d'un rinçage IPA.

La gravure s'effectue en deux temps. La première consiste à graver la couche supérieure de germanium par ICP-RIE par le mélange de gaz  $SF_6/C_4F_8$ . La vitesse de gravure du germanium est mesurée à 10 nm/sec. La sélectivité avec la résine est environ 1 : 5.

La seconde étape consiste à graver le substrat de GaAs. Selon le type de dispositif visé, on a le choix entre une gravure ICP-RIE pour obtenir des flancs droits, ou une gravure chimique sélective avec le germanium permettant d'obtenir une libération partielle de la couche de germanium par une sous-gravure.

## Chapitre 4. Applications à des dispositifs en germanium contraint

- La gravure ICP-RIE du GaAs s'effectue à l'aide du mélange réactif de gaz  $\text{Cl}_2/\text{BCl}_3$ . La vitesse de gravure du GaAs est de 25 nm/s. La sélectivité de la résine est d'environ 1 : 4. On peut donc graver la couche de GaAs pendant 1min30, en gardant une marge de sécurité sur l'épaisseur de la résine restante. Cela permet d'obtenir une profondeur de gravure entre 1.5 et 2  $\mu\text{m}$  selon la largeur de la tranchée gravée. Les structures réalisées peuvent être visualisées sur la figure 4.6.

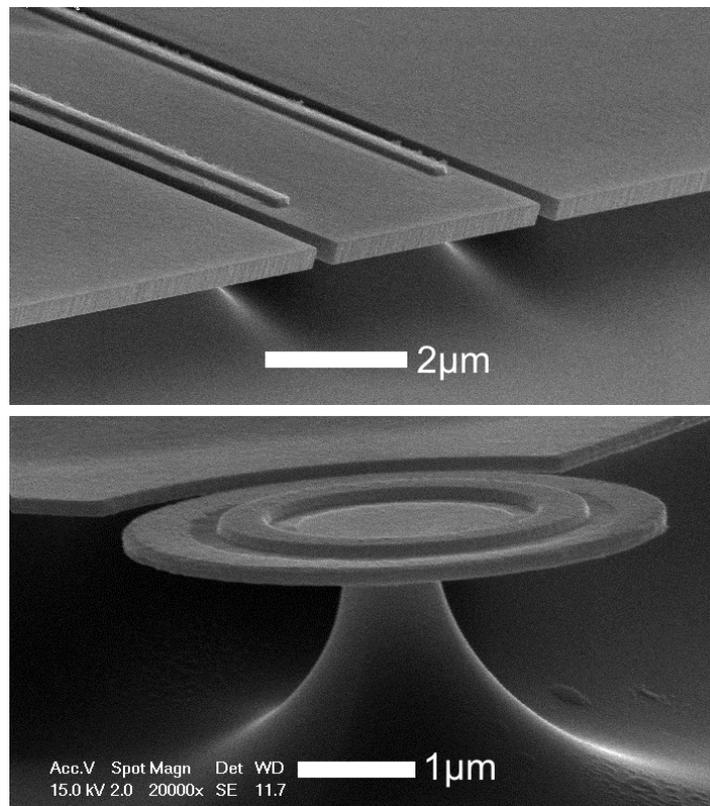


**Fig. 4.6 :** Images MEB des cavités optiques en guide d'onde et en micropilier avec contact électrique obtenues après l'étape de gravure ICP-RIE du GaAs

- La gravure chimique du GaAs est obtenue par la solution  $\text{H}_3\text{PO}_4 : \text{HNO}_3$  (50 :1) à une température de 40°C. Cette solution permet d'obtenir une gravure isotrope avec une bonne sélectivité par rapport à la couche de germanium. La solution est mélangée par un agitateur magnétique. L'échantillon est positionné dans la solution de telle manière à ce que le flux de la solution soit tangent à l'orientation des guides dans la longueur. On a constaté que le flux de la solution ne pénétrait pas de manière homogène dans les tranchées de

#### 4.1. Procédé de fabrication de structures contraintes

500 nm de large, car la gravure n'était pas uniforme suivant la longueur du guide. La réalisation d'une prégravure dans le GaAs, utilisant l'ICP-RIE pendant 20s, permet de faciliter l'accès à la solution chimique dans les tranchées et d'obtenir une gravure uniforme le long des guides. La sous-gravure a été améliorée en dégagant également les facettes des guides ou des microdisques sur une surface plus importante. Cela permet au flux de la solution de gravure de s'écouler plus facilement dans les tranchées. Les structures réalisées peuvent être visualisées sur la figure 4.7. La vitesse de gravure de la solution permet de graver latéralement la couche de GaAs entre 2 et 3  $\mu\text{m}$ , durant 30 secondes. La vitesse de gravure est contrôlée par l'ajout de motif de repère avec des tailles différentes. Une observation au microscope optique permet de connaître la taille des motifs gravés.



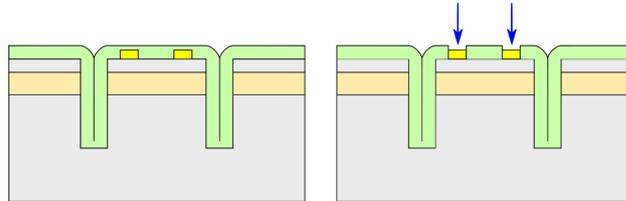
**Fig. 4.7** : Images MEB des cavités optiques en guide d'onde et en microdisque avec contact électrique obtenues après l'étape de sous-gravure par voie chimique

Pour certains échantillons, on a été confronté à un problème supplémentaire. La solution acide peut rentrer en contact avec le métal déposé sur les structures si l'épaisseur de la résine devient trop fine après la gravure ICP-RIE. Cela provoque une réaction chimique qui peut modifier les propriétés de gravure et venir attaquer la couche de germanium. Le procédé de gravure peut être amélioré en déposant une fine couche de  $\text{SiO}_2$  ou de  $\text{SiN}$  (20 nm) avant l'enrésinement. La couche déposée permet de protéger la surface du germanium, et agir comme une barrière chimique dans le cas d'une gravure en solution acide.

L'échantillon est ensuite nettoyé à l'aide d'un solvant spécifique ZDMAC, qui permet de dissoudre la résine ZEP. Les résidus de résine sont ensuite éliminés par un plasma  $\text{O}_2$  à une énergie

de 80 W pendant un temps de 2 min 30 à 5 min.

### 4.1.1.4 Troisième niveau : Encapsulation par une couche de SiN contrainte et gravure pour les accès métalliques



**Fig. 4.8 :** Troisième niveau de lithographie : Encapsulation par une couche de SiN et ouverture pour la reprise de contact

L'étape suivante consiste à encapsuler les cavités optiques dans une couche de SiN afin de pouvoir appliquer la contrainte en tension dans le germanium. Le film de nitrure est déposé par PECVD en utilisant une recette basse pression, afin d'obtenir un film de nitrure de silicium contraint initialement en compression.

Dans le cadre de la réalisation des échantillons à partir des doubles hétérostructures, les couches de SiN contraintes déposées sur GaAs n'ont pas une affinité chimique qui permet d'obtenir une accroche de bonne qualité. Les couches se délaminent systématiquement si l'épaisseur devient trop importante. Pour assurer un bon transfert de contrainte dans la couche de germanium, on souhaite déposer une épaisseur de 350 nm, qui est bien au-dessus de l'épaisseur critique sur GaAs. Malgré une préparation de la couche de GaAs par voie chimique, on n'a pas réussi à résoudre ce problème. La solution est venue de l'ajout d'une couche de SiN déposée à haute fréquence avant le dépôt de la couche contrainte. Le dépôt à haute fréquence se fait par chimisorption plutôt que par bombardement dans le cas du dépôt à basse fréquence. Le bombardement est d'autant plus important que le dépôt contraint se fait à basse pression, augmentant le libre parcours moyen des molécules et donc leurs énergies d'impact à la surface de l'échantillon.

Le dépôt à haute fréquence permet d'avoir une couche de SiN conforme avec une bonne accroche. De manière générale, la durabilité de l'accroche des échantillons est plus importante. Seulement, elle possède un effet antagoniste à celui recherché, car elle est initialement contrainte en tension. Des simulations numériques ont montré que si l'épaisseur de la couche reste assez faible devant la couche contrainte en compression, le transfert de contrainte n'est pas perturbé. Une couche d'une épaisseur minimum de 20 nm est nécessaire pour obtenir une bonne accroche. Les essais avec des épaisseurs 10 nm n'ont pas été concluants.

Des études de passivation du germanium sont en cours de réalisation dans l'équipe au moment de la rédaction du manuscrit, pour savoir si le dépôt de cette couche permet d'améliorer la qualité de l'interface avec le germanium, par rapport à une couche de SiN contrainte.

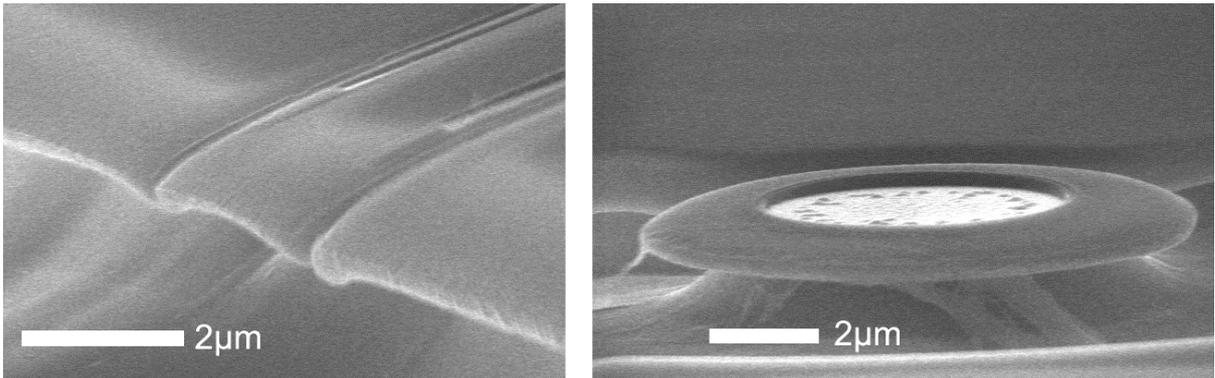
La démarche pour déposer le nitrure de silicium est la suivante :

- Chargement de l'échantillon dans la chambre de dépôt PECVD après désoxydation au HCl :H<sub>2</sub>O (1 : 2) si la compatibilité avec le métal le permet

#### 4.1. Procédé de fabrication de structures contraintes

- Attente de 10 min dans la chambre à une température de 300°C pour permettre la désorption de l'échantillon
- Dépot d'une couche HF-SiN d'une épaisseur 20 nm (2min)
- Dépot d'une couche LF-SiN à basse pression entre 350nm et 450 nm (15-20 min), l'épaisseur est à adapter selon la largeur des tranchées de la structure.

Une fois la couche contrainte de nitrure de silicium déposée, il faut maintenant pouvoir réaliser des ouvertures afin de contacter les différents dispositifs.

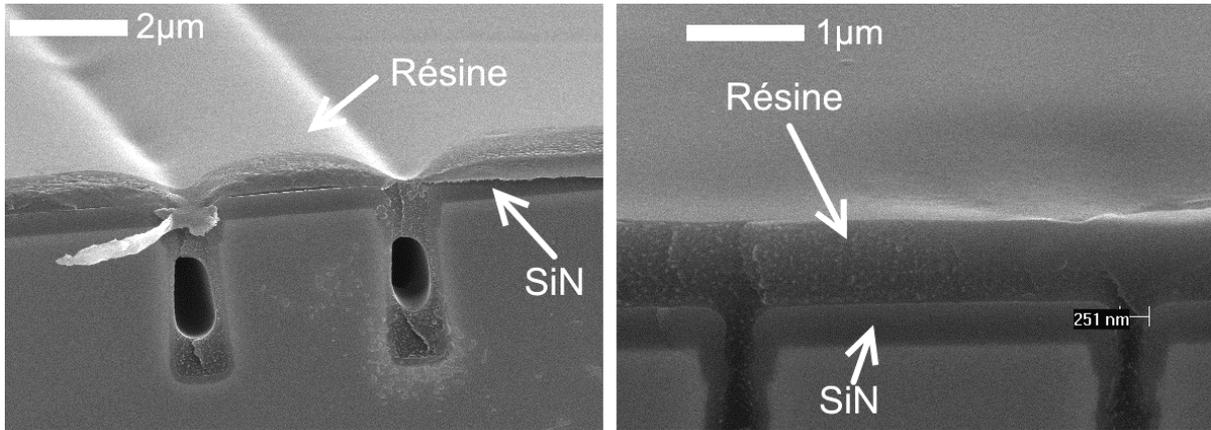


**Fig. 4.9 :** Images des cavités sous-gravées encapsulées par une couche contrainte de SiN après la réalisation d'une ouverture pour la prise de contact. La courbure des structures montre que le transfert de contrainte est concret

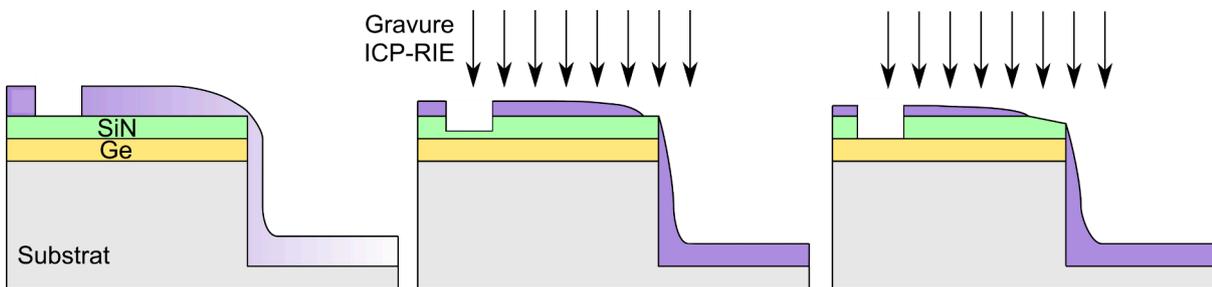
On a défini les cavités optiques par une gravure profonde de la couche de GaAs. Le facteur de forme des structures est très important. Grâce à la technique de planarisation développée, on peut surmonter cette difficulté. La largeur des tranchées est fixée de manière à ce que la couche de nitrure de silicium déposée vienne quasiment obstruer le gap. Des essais d'enrésinement montrent que l'on peut avoir une épaisseur de résine homogène, si le couple entre la largeur de tranchée et l'épaisseur du film de nitrure de silicium est bien choisi. Pour obtenir la continuité de la couche de résine, il faut que l'écart entre deux bords de la tranchée soit inférieur à 150 nm, comme on peut le voir sur la figure 4.10. Dans la longueur des guides, cela permet de réaliser une étape de lithographie de manière standard.

On peut réaliser des ouvertures dans la couche de SiN de la taille des accès métalliques. La gravure du nitrure de silicium est réalisée par ICP-RIE. Le choix de cette méthode plutôt que l'utilisation d'une gravure RIE, se justifie par le fait que l'échauffement local est moins important durant la gravure et permet d'éviter la modification des propriétés du film de nitrure de silicium. La recette utilisée est la même que pour graver le germanium. La vitesse de gravure est de 5 nm/s. Un problème peut émerger sur les bords des structures proches des facettes. Le profil de la résine s'affine près des bords. Lors de la gravure physique par ICP-RIE, la faible épaisseur de résine va être consommée et la gravure va commencer à attaquer la couche de SiN. Cet effet est représenté sur le schéma de la figure 4.11. Ce point est problématique pour la réalisation de microdisque de faible dimension ( $< 5 \mu\text{m}$ ).

La figure 4.9 présente un exemple de dispositifs réalisés après la gravure de la couche de SiN. L'étape de lithographie peut se dérouler sans difficulté, même sur des échantillons possédant une sous-gravure, grâce à la technique de planarisation développée.



**Fig. 4.10 :** Essai d'entrésinement en fonction de la largeur des tranchées. L'image (a) montre le profil de résine dans le cas de tranchées trop larges, l'image montre que le profil de résine est uniforme si la largeur des tranchées est bien adaptée



**Fig. 4.11 :** Effet de la gravure sur les bords de la structure. Au bout d'un temps trop important de gravure, les bords commencent à être gravés à cause de l'affinement de la résine

4.1.1.5 Quatrième niveau : Réalisation des accès métalliques

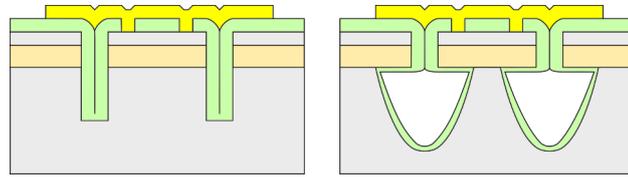


Fig. 4.12 : Quatrième niveau de lithographie : Métallisation des électrodes de contacts

La dernière étape consiste à déposer les électrodes d'accès pour venir contacter les dispositifs réalisés. Il faut venir déposer du métal dans les ouvertures réalisées dans la couche de SiN. La taille des électrodes doit être assez large pour déposer une pointe de contact ( $30 \times 30 \mu\text{m}^2$ ). L'électrode est déportée sur la surface de l'échantillon hors de la cavité optique, grâce à l'isolation électrique du film de SiN.

On effectue un lift off en utilisant la résine PMMA A-6. On utilise la même procédure que pour la première étape à l'exception que l'enrésinement s'effectue à une rotation de 2000 tr/min pendant 60 s, pour obtenir une épaisseur de résine de 500 nm. La dose reste inchangée.

Le dépôt est réalisé à l'aide de l'évaporateur à canon à électrons. Ce type de dépôt est directif. L'épaisseur de la couche déposée dépend de l'angle d'incidence ( $\propto \cos(\theta)$ ). Il n'y aura pas de dépôt sur les flancs des structures verticales de la structure. Il y a un faible gap (50-150 nm) entre le guide et le reste de l'échantillon. Pour remédier au problème de continuité, une première couche est déposée à incidence normale pour commencer à remplir les ouvertures dans la couche de SiN, puis la position de la platine de dépôt est modifiée avec un angle de  $-35^\circ$ , afin de pouvoir déposer le métal entre les tranchées, comme représenté sur la figure 4.13. De cette manière, on assure la continuité du dépôt métallique de l'électrode vers la structure. On dépose une couche de titane de 5 nm à incidence normale puis 10 nm avec un angle de  $-35^\circ$ , pour définir la couche d'accroche. Ensuite, on vient déposer une couche d'or de 100 nm à incidence normale, et de 250 nm avec un angle de  $-35^\circ$ .

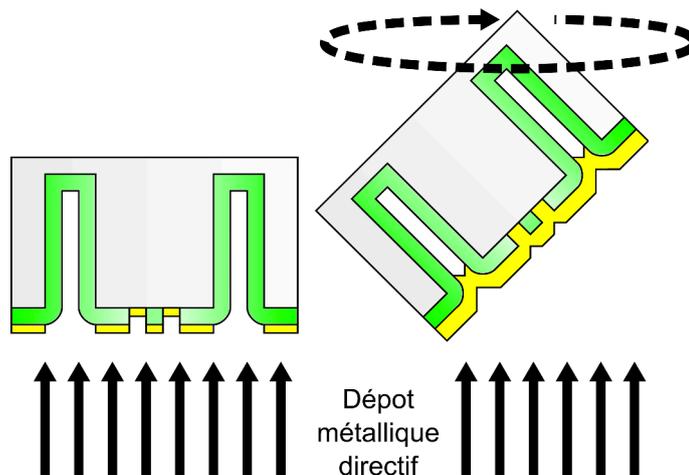


Fig. 4.13 : Principe du dépôt métallique pour la réalisation des électrodes d'accès. L'angle de la platine permet d'assurer la continuité sur les bords de la structure pour un dépôt directif

### 4.1.2 Transfert de procédé pour du germanium sur silicium

Le procédé est défini pour du germanium épitaxié sur GaAs. Il peut être transposé pour des couches de germanium réalisées sur des substrats en silicium. En effet, le seul paramètre à modifier est la gravure du substrat. Le silicium peut se graver de la même manière que le germanium à l'ICP-RIE. Dans le cas d'une sous gravure chimique, l'utilisation d'une solution à base KOH permet d'obtenir le même résultat. Elle permet une gravure du silicium tout en étant sélective avec le germanium. La problématique de l'intégration des dispositifs sort du cadre de ces travaux.

## 4.2 Mesures d'électroluminescence sur des cavités optiques contraintes en germanium

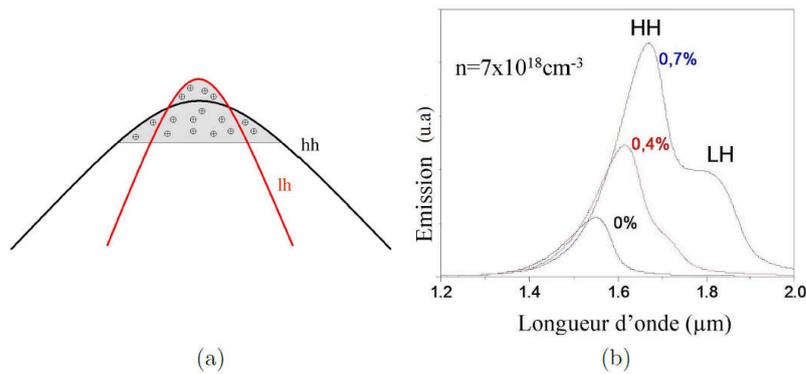
### 4.2.1 Principe de la caractérisation de contrainte par mesure de luminescence

La position en énergie de la résonance en vallée directe  $\Gamma$  des spectres de luminescence est la signature du transfert de contrainte. La réduction de l'énergie de bande interdite directe est proportionnelle à la déformation en tension appliquée par une contrainte biaxiale dans la couche de germanium. Elle peut se mesurer par le décalage de la position du maximum d'intensité associée à la résonance des recombinaisons radiatives entre la vallée  $\Gamma$  et celle des trous lourds (Heavy Hole - HH) ou des trous légers respectivement (Light Hole - LH) :

$$\Delta E_{PL}^{\Gamma/HH} = -7.8\varepsilon_{\parallel} \quad (4.1)$$

$$\Delta E_{PL}^{\Gamma/LH} = -15.7\varepsilon_{\parallel} \quad (4.2)$$

Lorsque la déformation devient importante, il faut prendre en compte la séparation en énergie entre les bandes des trous lourds et des trous légers. Pour une contrainte donnée, l'extremum en énergie de la bande des trous légers sera localisé plus haut que celle des trous lourds. L'énergie de la transition radiative sera réduite. L'effet des trous légers sur la répartition du spectre de luminescence est représenté sur la figure 4.14. Le spectre de la luminescence est calculé pour les recombinaisons radiatives directes du germanium. La séparation en énergie en bande de valence commence à avoir un impact important à partir d'une valeur de 1 % de déformation sur la répartition du signal du spectre de luminescence.



**Fig. 4.14 :** (a) Schéma de la répartition des trous en bande de valence pour une couche de germanium contrainte en tension (b) Évaluation de la luminescence du germanium pour différents niveaux de contraintes pour des recombinaisons radiatives directes, figure issue de (KERSAUSON, 2013)

Dans le cas d'un guide d'onde, la contrainte transférée par un film de SiN s'applique seulement suivant sa largeur. Dans sa longueur, la très grande dimension du guide permet une relaxation complète du film de nitrure de silicium. On est dans une configuration uniaxiale. L'effet de la déformation sur la modification des bandes d'énergie du germanium est deux fois inférieur au cas d'une configuration biaxiale dans ce cas particulier :

$$\Delta E_{PL}^{\Gamma/HH} = -3.9\varepsilon_{xx} \quad (4.3)$$

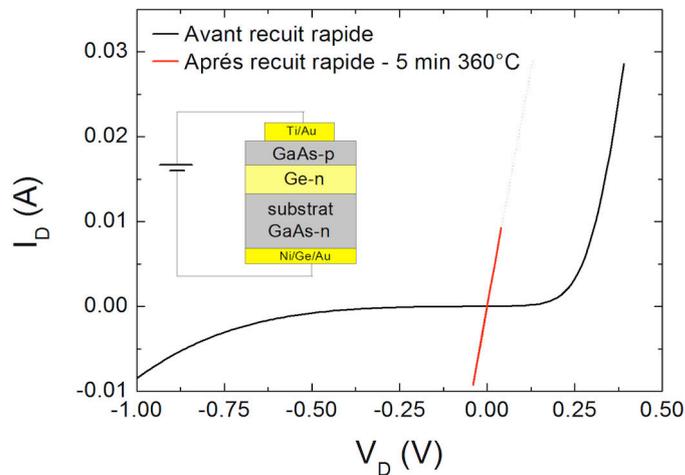
$$\Delta E_{PL}^{\Gamma/LH} = -7.8\varepsilon_{xx} \quad (4.4)$$

### 4.2.2 Structures étudiées

Dans cette partie, on présente les résultats obtenus sur les dispositifs contraints à injection verticale. On dispose de trois approches pour générer l'électroluminescence dans le germanium :

- Double hétérostructure GaAs-p/Ge-n sur substrat GaAs-n
- Contact Schottky optimisé sur Ge-n sur substrat GaAs-n
- Hétéroépitaxie SiGe sur Ge-n sur substrat GaAs-p

La première approche ne s'est pas révélée exploitable. Les couches épitaxiées sur des substrats dopés de GaAs de type *n* ne présentaient pas de caractéristique de diode. Dans ce cas, la jonction GaAs-p/Ge-n est complètement court-circuitée, comme on peut le voir sur la caractéristique courant tension de la figure 4.15. Pour ce lot d'échantillon, il se peut que la densité de défauts à l'interface entre le GaAs-p et le Ge-n est plus importante, et permet le passage des porteurs direct à l'interface. Mais grâce à l'alternative développée pour générer de l'électroluminescence sur des dispositifs non contraints en germanium, on a pu contourner ce problème.



**Fig. 4.15** : Mesure de courant d'une diode à base d'hétérojonction GaAs-p sur Ge-n sur substrat dopé GaAs-n avant et après recuit du contact supérieur

On s'est donc focalisé sur la réalisation d'échantillons avec des contacts Schottky pour venir étudier les propriétés de l'électroluminescence du germanium contraint. Cette approche possède un avantage majeur, car la couche de nitrure de silicium sera directement en contact avec le germanium. Ainsi la contrainte transférée pourra être plus importante. La seconde alternative utilisant une hétéroépitaxie SiGe sur germanium a été réalisée durant la fin des travaux de thèse. On a pu obtenir les premiers résultats sur des échantillons d'essais. Des structures avec des échantillons plus aboutis sont en cours de réalisation.

### 4.2.3 Étude des propriétés d'émission radiative du germanium contraint avec injection utilisant des contacts Schottky

Les contacts Schottky sont réalisés avec l'empilement métallique  $\text{Al}_2\text{O}_3$  1.5nm / Al 100nm. L'épaisseur de la couche de germanium dopée de type  $n$  est de 250 nm avec un dopage  $10^{19} \text{ cm}^{-3}$ . L'épaisseur de la couche de germanium permet d'assurer un guidage en mode TM et TE de la lumière. Le substrat de GaAs est dopé de type  $n$  avec une valeur de  $10^{18} \text{ cm}^{-3}$ .

On dispose de deux échantillons, le premier est réalisé avec une gravure droite. Le second avec une sous-gravure. Cet échantillon a été réalisé avec un procédé de sous-gravure chimique non optimisé. Le substrat n'a pas pu subir de sous-gravure au niveau des micropiliers, et donc de former des microdisques sur pied. La contrainte transférée sera moins importante. Mais la configuration en pilier permet une injection électrique homogène à l'interface Ge/GaAs, plutôt que de limiter le passage des porteurs par un pied au centre de la structure. Les micropiliers formés sont enterrés sous la couche de nitrure de silicium contrainte d'une épaisseur de 350 nm. Cette configuration a permis un report du contact électrique, mais elle supprime la possibilité d'observer les modes de galerie circulant à la périphérie du micropilier.

Dans le cas de l'échantillon sous-gravé, la plus petite taille de guide disponible est d'une largeur de 4  $\mu\text{m}$ . La sous-gravure provoque une attaque chimique qui grave latéralement le GaAs sur un peu plus de 3  $\mu\text{m}$ . On estime donc la largeur du pied de 1,2, et 3  $\mu\text{m}$  pour les guides de 4,5, et 6  $\mu\text{m}$  de large. On rappelle aussi que la profondeur de la sous-gravure n'est pas uniforme suivant la longueur du guide.

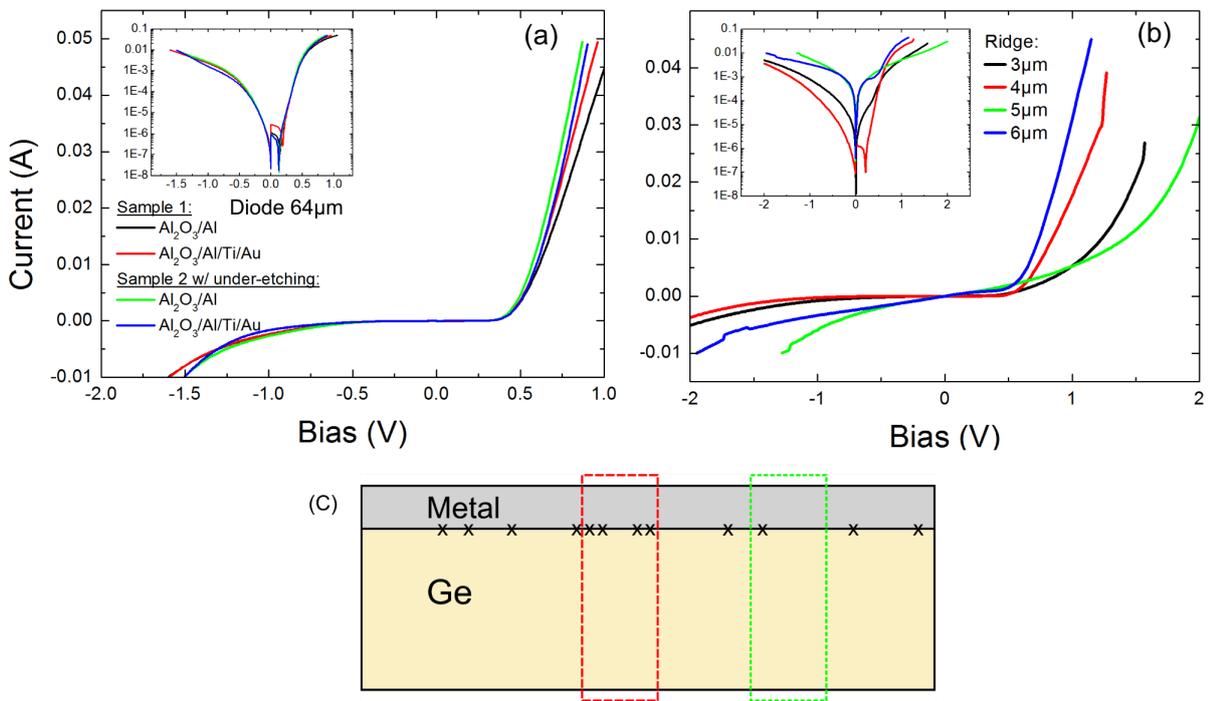
#### 4.2.3.1 Propriétés électriques

On retrouve le comportement d'une diode Schottky pour des dispositifs de grande taille, qui ne sont pas contraints. La reproductibilité entre les deux échantillons est bonne. Lorsque la taille des métallisations est réduite, le comportement en courant est moins stable et moins reproductible d'une structure à l'autre, comme on peut le voir sur les figures 4.16 (a) et (b). On compare les caractéristiques I-V des diodes avec des diamètres importants, à des structures de types guides où la surface de contact est très réduite. On propose une explication de cet effet sur la figure (c). Avec la réduction de la largeur du contact, on a une probabilité d'adresser une zone avec une densité de défauts importante ou une zone libre de défauts. Ainsi sur des dispositifs de petite taille, les caractéristiques électriques peuvent différer. Les couches de germanium ont été amincies chimiquement pour passer d'une épaisseur de 880 nm à 250 nm. On ne garantit pas une surface d'une qualité optimale comparée à une couche d'origine.

Il est donc difficile de statuer de l'effet de la contrainte sur les propriétés électriques. Les dispositifs réalisés ne sont pas adaptés pour ce type d'étude. Il aurait fallu avoir un échantillon de référence sans contrainte avec la même topologie de diodes. L'objectif principal reste l'étude des propriétés d'électroluminescence des couches contraintes.

#### 4.2.3.2 Mesures de photoluminescence sur des cavités contraintes

Afin de connaître le niveau de déformation dans les cavités optiques en germanium, on peut mesurer les propriétés des échantillons par photoluminescence.



**Fig. 4.16 :** Courbes I-V (a) pour des diodes circulaires larges ( $D=64\mu\text{m}$ ) pour les deux échantillons réalisés avec différents empilements métalliques de contact (b) pour des mesures effectuées sur des structures de guide d'onde à gravure droite pour différentes largeurs. (c) schéma de principe pour l'explication de la non-homogénéité des mesures sur des dispositifs de taille réduite

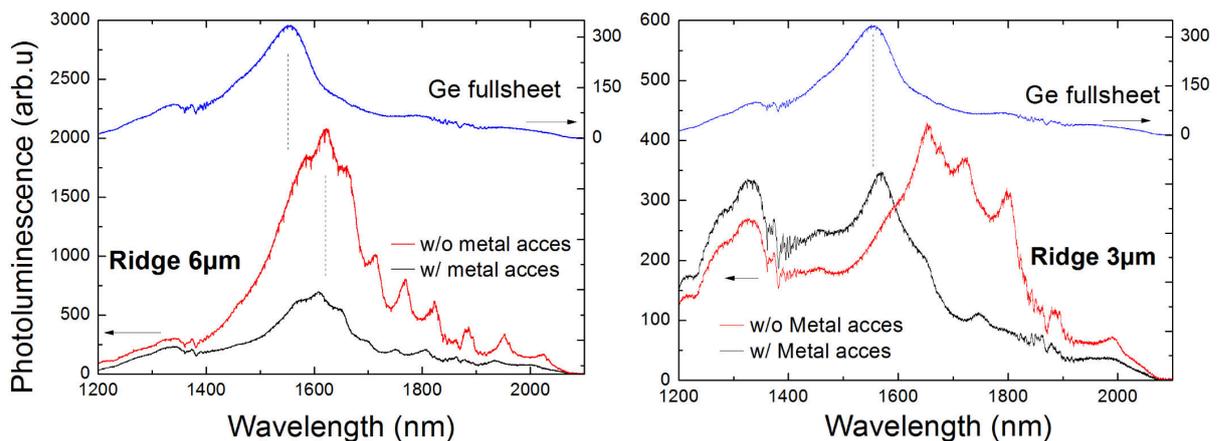
## 4.2. Mesures d'électroluminescence sur des cavités optiques contraintes en germanium

**4.2.3.2.1 Cas des micropiliers** Comme la majeure partie de la surface est occupée par le contact métallique, on n'a pu effectuer des mesures de photoluminescence, car le pompage optique par le faisceau laser est masqué ou vient adresser les zones de germanium hors de la structure à cause de la disposition en tranchée.

**4.2.3.2.2 Cas des guides d'ondes** La collection se fait à la normale du guide. Une collection dans le plan de la facette serait plus adaptée. Mais la diffraction de la lumière émise par les facettes des guides permet de récupérer une portion de signal assez importante par une collection à la normale, pour l'étude des propriétés de luminescence des dispositifs. On dispose de guides d'ondes avec des ouvertures dans la couche de SiN pour les contacts, et des guides d'ondes sans ouvertures qui serviront de référence.

**Guide à gravure droite** On va comparer le transfert de contrainte dans des guides gravés droit d'une largeur de 3 et 6  $\mu\text{m}$ . La figure 4.17 présente les résultats obtenus. La courbe tracée en couleur bleue représente l'émission du germanium dans une zone hors structure. La courbe rouge correspond à un guide sans ouverture dans le nitrure, et la courbe noire est obtenue pour un guide avec des contacts métalliques.

Par rapport à la référence du spectre de germanium obtenu dans une zone non structurée, il apparaît des pics de résonances. L'intensité des spectres est modulée par les résonances Fabry-Pérot suivant la largeur du guide. Le transfert de contrainte est effectif dans les guides réalisés, car on observe un décalage du maximum de recombinaisons radiatives en vallée directe  $\Gamma$ . Par ailleurs, le spectre subit un élargissement à cause de la contrainte qui n'est pas homogène dans la couche de germanium, et de la séparation en énergie entre les bandes de trous lourds et de trous légers.



**Fig. 4.17 :** Spectres de photoluminescence obtenus pour des guides d'onde avec ouvertures (en noir) et sans ouvertures (en rouge) pour une largeur de guide (a) 6  $\mu\text{m}$  et (b) 2  $\mu\text{m}$ . La courbe en bleu représente le spectre de référence obtenu sur du germanium hors guide.

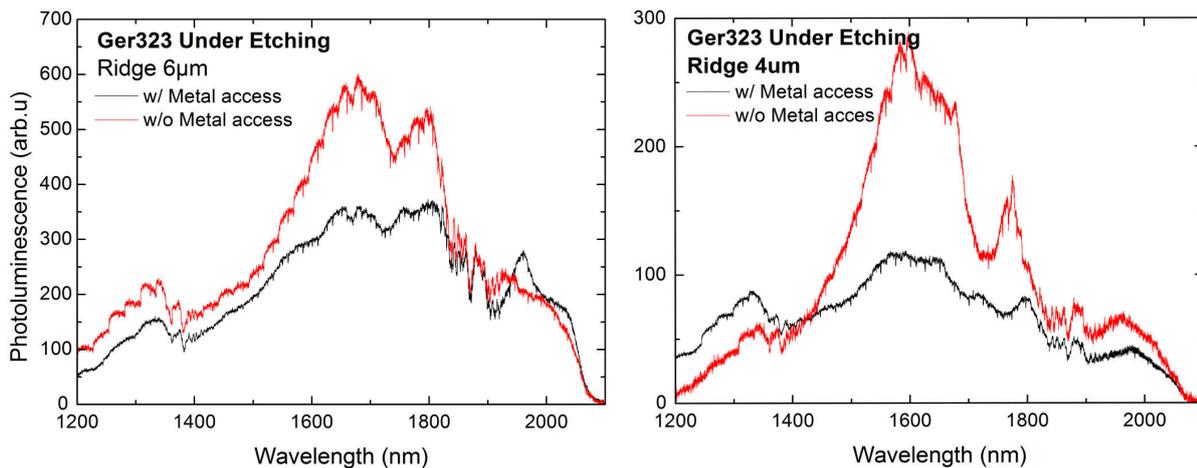
Dans le cas d'un guide de 6  $\mu\text{m}$  sans ouvertures, la position du maximum est située à 1610 nm, contre 1550 nm pour une mesure de photoluminescence hors structure. Pour un guide de 3  $\mu\text{m}$  de large, il est situé à 1650 nm en considérant la recombinaison avec les trous lourds. Ces

## Chapitre 4. Applications à des dispositifs en germanium contraint

décalages correspondent à des valeurs de déformation uniaxiale équivalente de 0.57% et 1.2% respectivement.

Lorsque l'on compare ces spectres avec ceux des guides possédant des ouvertures pour les contacts, le comportement de la luminescence est modifié. Comme attendu le transfert de contrainte est totalement dégradé dans le cas d'un guide de 3  $\mu\text{m}$ . Le retrait de la couche de nitrure de silicium entraîne une relaxation dans le guide. La déformation n'est plus que de 0.15%. Dans les guides de 6  $\mu\text{m}$ , la déformation uniaxiale ne varie que très peu, elle est estimée à une valeur de 0.53%. La contrainte transférée est moins importante pour un guide large, mais n'est pas sensible à la réalisation des contacts. On retrouve bien les résultats attendus pour les modélisations que l'on a effectuées dans le premier chapitre.

**Guide à sous-gravure** On a étudié également le cas où les guides d'onde sont sous-gravés. On s'intéresse aux tailles de 4 et 6  $\mu\text{m}$  de large. La figure 4.18 montre les spectres obtenus pour ces deux structures sur la facette la plus sous-gravée.



**Fig. 4.18** : Spectres de photoluminescence obtenus pour des guides d'onde sous-gravés avec ouvertures (en noir) et sans ouvertures (en rouge) pour un guide (a) de 6  $\mu\text{m}$  de large avec un pied de 3  $\mu\text{m}$  et (b) un guide de 4  $\mu\text{m}$  de large avec un pied de 1  $\mu\text{m}$

Sur le spectre du guide de 6  $\mu\text{m}$  sans ouvertures, on trouve deux résonances principales. Le maximum de la première résonance est localisé à 1670 nm, et à 1780 nm pour la seconde. La première est associée à la recombinaison HH- $\Gamma$ . La seconde se recouvre avec la transition entre LH- $\Gamma$  et les recombinaisons indirectes. La séparation en énergie entre l'émission des trous lourds et des trous légers rend difficile la détermination exacte de la position des maximums. On peut avancer une valeur de déformation uniaxiale comprise entre 1.30 et 1.40% à partir de la localisation de ces deux résonances. Lorsque l'on réalise l'ouverture pour les métallisations, la position des spectres ne varie pas, donc le transfert de contrainte au centre du dispositif n'est pas dégradé. En effet la position des métallisations est située sur des zones de germanium libérées du substrat de GaAs. La couche est libre de se relaxer, et la contrainte au centre du guide n'est pas modifiée. On retrouve bien l'effet attendu que l'on a mis en avant dans la partie modélisation.

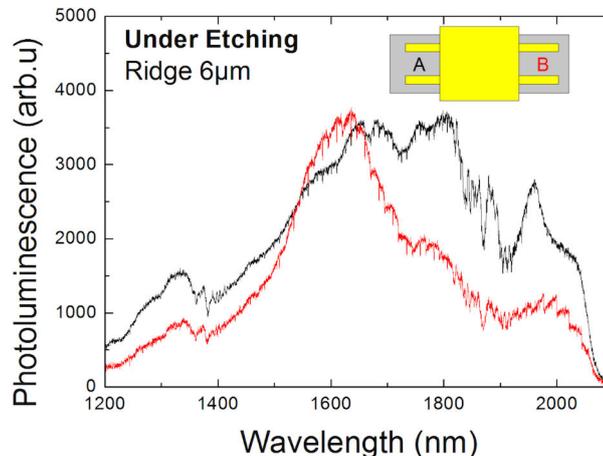
On obtient le même résultat pour un guide de 4  $\mu\text{m}$ . Le transfert de contrainte est légèrement

## 4.2. Mesures d'électroluminescence sur des cavités optiques contraintes en germanium

perturbé, car on note une faible différence sur la position des résonances avec un guide possédant des contacts. La valeur de la déformation uniaxiale obtenue est estimée à 0.7% dans le germanium pour ce guide.

Quand on compare les résultats entre un guide de 4 et 6  $\mu\text{m}$  de large, on note que le transfert de contrainte est moins important. En effet, le ratio entre la taille du pied et la largeur des guides est différent. Comme on l'a vu dans la partie modélisation, le guide de 6  $\mu\text{m}$  possède un ratio pied/guide de 0.5 qui est proche de la valeur idéale de 0.6. La contrainte transférée reste homogène dans la couche de germanium. Au contraire, le guide de 4  $\mu\text{m}$  possède une homogénéité moins bonne de la déformation moyenne dans le guide, car le pied est beaucoup trop fin (ratio inférieur à 0.25).

On met aussi en exergue le problème de gravure chimique qui n'est pas uniforme suivant la longueur du guide. La figure 4.19 montre les spectres obtenus sur les deux extrémités d'un même guide. La première extrémité (facette A) correspond à une zone où le substrat de GaAs est très sous-gravé. Tandis que sur l'autre extrémité (facette B), seule la couche de germanium est gravée. On voit que la zone du germanium sondée sur la facette B est moins déformée, car le décalage de la photoluminescence est plus faible, et la densité d'émission est moins importante. Cette mesure permet de mettre en évidence l'effet de la sous gravure sur les propriétés de transfert de contrainte.



**Fig. 4.19 :** Effet du problème d'uniformité de la sous-gravure du guide pour l'homogénéité du transfert de contrainte suivant la longueur du guide. Les mesures sont réalisées aux extrémités de chaque facette. La facette A (courbe rouge) correspond à une zone très sous-gravée

Par ces mesures, on montre que le transfert de contrainte sur des guides d'ondes possédant des contacts métalliques a pu être réalisé en conservant des niveaux de déformation similaires à des guides sans ouvertures. On retrouve bien les propriétés annoncées dans la partie modélisation. On doit travailler avec des guides d'onde assez large, et avec des métallisations assez fines pour ne pas perturber le transfert de contrainte au centre du guide. On a aussi démontré l'effet bénéfique de la sous-gravure sur les propriétés de transfert de contrainte.

### 4.2.3.3 Mesures d'électroluminescence

On connaît les propriétés de transfert de contrainte dans les guides d'ondes réalisés. On va maintenant s'intéresser aux propriétés d'électroluminescence. Sous injection électrique, les porteurs vont sonder des zones différentes de celles sondées par un pompage optique. Dans le cas d'un pompage optique, on adresse principalement une zone proche de l'interface entre le germanium et le nitrure de silicium au centre du guide. Dans le cas d'une injection électrique, on va adresser des zones contraintes qui vont dépendre des propriétés de transport électronique. On peut s'attendre à ce que l'électroluminescence soit principalement localisée proche des contacts métalliques.

Dans un premier temps, on réalise des mesures d'électroluminescence sur un dispositif non contraint. Il s'agit d'une diode circulaire de très grand diamètre, qui permet la relaxation de la couche de SiN sans déformer celle de germanium. La diode est polarisée en direct par l'application d'une tension positive sur le contact Schottky. La position de la référence d'électroluminescence est mesurée à 1560 nm, afin de prendre en compte l'effet de la courbure des bandes à l'interface avec le métal.

On va présenter les résultats d'électroluminescence obtenus pour des cavités optiques en guides d'ondes, puis pour les cavités en micropilier.

### 4.2.3.4 Cavité optique en guide d'onde

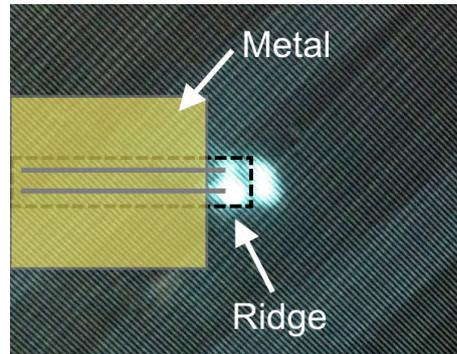
**4.2.3.4.1 Guide d'onde à gravure droite** Lors de ces mesures, la difficulté est de pouvoir atteindre un fort niveau d'injection électrique sans dégrader le dispositif. On attribue cet effet à la finesse de l'épaisseur des contacts au niveau des reports avec l'électrode. L'étude en fonction du courant d'injection s'est relevée compliquée pour ces dispositifs.

On a pu réaliser des mesures d'injection électrique sur des guides de différentes tailles. On présente le résultat obtenu pour un guide de 6  $\mu\text{m}$ , car on dispose d'un point de comparaison avec les expériences de photoluminescence.

Grâce à la caméra infrarouge CCD, on peut observer la position de la luminescence sous injection électrique. Une capture de l'image obtenue est présentée sur la figure 4.20. On a redessiné la position du guide et de l'électrode de contact centrale. Proche de l'électrode centrale, on voit que l'on a principalement deux zones d'émission. Elles sont localisées dans le prolongement des lignes de contact. À l'extrémité du guide, on retrouve également deux zones d'émission. Il s'agit de la lumière guidée diffractée par les facettes.

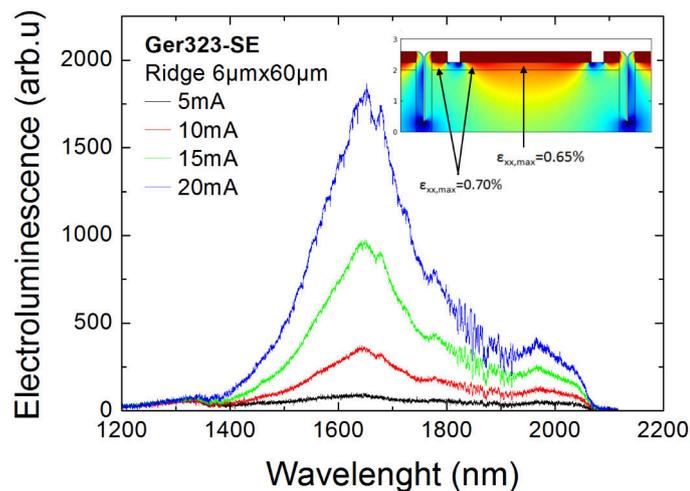
La figure 4.21 présente le résultat des spectres d'électroluminescence en fonction du courant pour un guide de 6  $\mu\text{m}$  de large. La position du maximum est localisée à 1620 nm à bas niveau de courant (5 mA). Ce décalage correspond à une valeur de déformation uniaxiale de 0.75 %, si on le compare à la position du maximum d'électroluminescence obtenue pour un dispositif non contraint. On retrouve un résultat supérieur par rapport à celui de la photoluminescence qui est de 0.57%. L'injection électrique adresse une zone légèrement plus contrainte. Pour vérifier ce comportement, on utilise une modélisation du transfert de contrainte par la couche de SiN dans cette structure. La déformation maximale au centre est de 0.65%, tandis qu'aux abords des contacts la zone de germanium en déformation peut atteindre un niveau de déformation

## 4.2. Mesures d'électroluminescence sur des cavités optiques contraintes en germanium



**Fig. 4.20** : Capture d'image de l'émission du germanium dans un guide d'onde obtenue par la caméra infrarouge CCD. La position du guide est redessinée pour faciliter la lecture

de 0.75%. Dans le cas des guides larges, l'effet de bords au niveau de la couche de SiN est important, et la contrainte peut être plus élevée qu'au centre de la structure. Cette valeur est en cohérence avec la visualisation des zones principales d'émission par la caméra infrarouge et le décalage en longueur d'onde des spectres mesurés.



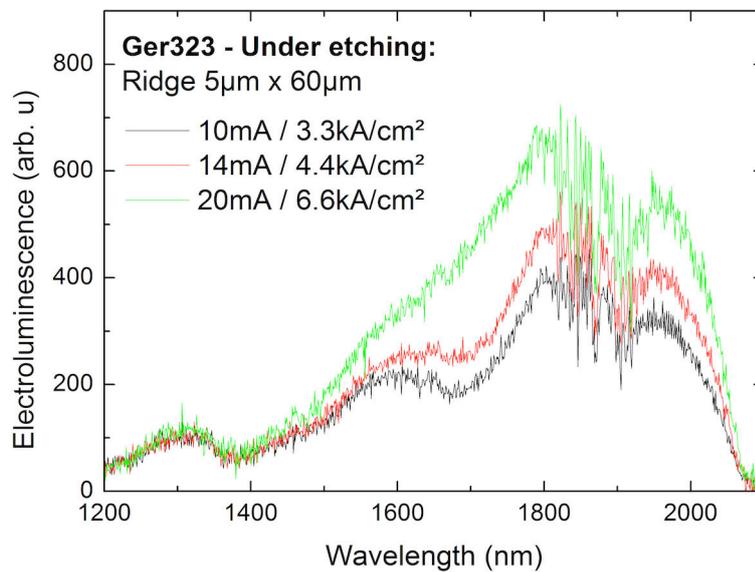
**Fig. 4.21** : Spectres d'électroluminescence d'un guide à gravure droite de 6  $\mu\text{m}$  sous différents courants d'injection. L'encart montre le profil de déformation simulé pour ce type de structure

Cette observation implique que l'injection des porteurs minoritaires depuis les contacts est faite de manière latérale vers des zones plus favorables en énergie dans le germanium, c.-à-d. dans les zones contraintes. Cet aspect de l'injection sera discuté dans la suite de l'étude.

On a pu atteindre un niveau de courant d'injection de 20 mA dans la structure, soit une densité de courant de  $5 \text{ kA/cm}^2$  ramenée à la surface totale du guide. Pour des courants supérieurs (25 mA), on dégrade la qualité de l'injection et l'intensité du signal est diminuée de manière irréversible.

**4.2.3.4.2 Guide d'onde sous-gravé** Le niveau de déformation est plus important dans ces structures, et de la séparation en énergie entre les bandes des trous lourds et les trous

légers devient plus marquée. Cette modification de la bande d'énergie peut avoir un effet sur les propriétés d'injection des porteurs dans le germanium. À faible niveau d'injection, les trous vont remplir la bande de trous légers. Si on peut appliquer une injection plus importante, et venir saturer cette bande, les porteurs vont commencer à peupler la bande de trous lourds. On a pu observer cet effet dans certains des guides sous injection électrique. Avec l'augmentation du courant, on commence à voir émerger une résonance sur le spectre associée aux recombinaisons associées entre la vallée  $\Gamma$  et la bande de trous lourds, comme on peut le voir sur la figure 4.22. En augmentant l'intensité du courant d'injection dans la structure, on aurait pu retrouver un spectre avec un comportement similaire à celui obtenu par photoluminescence.



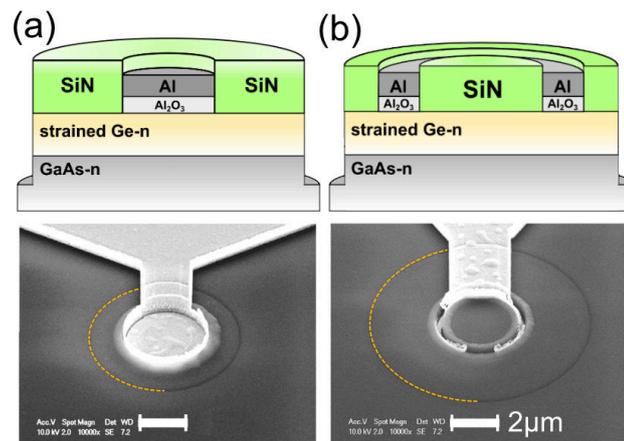
**Fig. 4.22 :** Spectres d'électroluminescence pour un guide d'onde sous-gravé de 5  $\mu\text{m}$  de large, en fonction du courant d'injection

**4.2.3.4.3 Bilan des mesures sur les guides** Ces mesures permettent de valider le procédé de fabrication pour des structures combinant injection électrique et transfert de contrainte. Les difficultés identifiées du procédé, comme l'uniformité de la sous-gravure, ont pu être débloquées et améliorées par la suite. Le design des dispositifs établis dans le premier chapitre a permis de fabriquer des structures où la contrainte n'est pas dégradée pour obtenir l'injection des porteurs dans le germanium. L'injection par des contacts Schottky a permis d'étudier les propriétés d'électroluminescence pour des couches de germanium contraint. La complexité est d'obtenir une injection homogène dans ces structures. Ce point n'a pas permis une étude en fonction de la longueur de guide, car les caractéristiques d'émission peuvent évoluer d'une structure à l'autre. Les contacts permettent à la fois l'écoulement des porteurs majoritaires, et l'injection des porteurs minoritaires. L'homogénéité d'injection sera favorisée par l'utilisation d'une double hétérostructure.

## 4.2. Mesures d'électroluminescence sur des cavités optiques contraintes en germanium

### 4.2.3.5 Cavité optique en micropilier

Les microdisques présentent deux intérêts par rapport aux guides étudiés précédemment. La contrainte appliquée par le film de SiN est de type biaxial, ce qui permet une réduction de la séparation en énergie entre la vallée  $\Gamma$  et la vallée  $L$ . Par ailleurs la diminution de la surface de la couche de germanium permet d'appliquer des densités de courant plus importantes. On dispose de deux configurations d'injection, elles sont représentées sur le schéma de la figure 4.23, ainsi que les images MEB obtenues pour ces configurations.

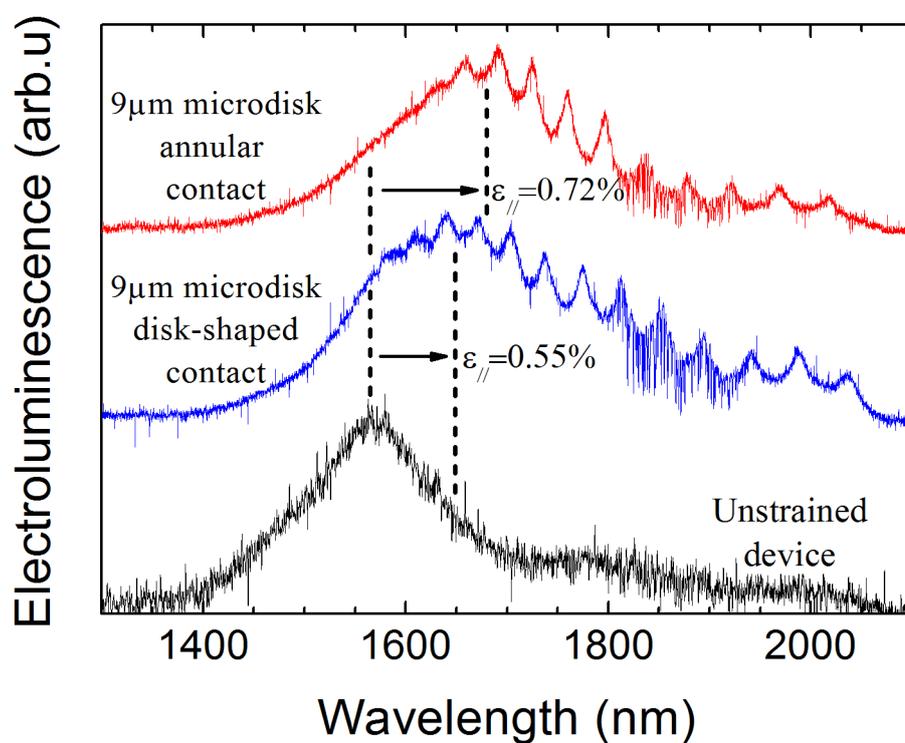


**Fig. 4.23** : Schéma de la coupe transversale de la diode de germanium en micropilier avec un contact (a) en disque plein et (b) un contact annulaire, ainsi que les images MEB des dispositifs fabriqués. Les micropiliers sont enterrés sous la couche de SiN, une ligne est tracée pour indiquer la position du bord de micropilier

La figure 4.24 présente les spectres d'électroluminescence obtenus pour un disque de rayon de 9  $\mu\text{m}$ . On compare les résultats obtenus au dispositif non contraint. Comme la surface d'émission est différente pour les trois dispositifs, on normalise l'intensité des spectres pour confronter la position des résonances. Les intensités ne peuvent pas être comparées, car l'émission ne provient pas des mêmes zones. Les mesures sont obtenues pour le courant le plus faible permettant d'observer de l'électroluminescence ( $\sim 1 \text{ mA}$ ) afin d'éviter l'échauffement des dispositifs.

Dans le cas des spectres des micropiliers, les recombinaisons radiatives directes et indirectes sont modulées par une série de pics de résonances. Deux types de modes optiques peuvent s'établir dans les cavités circulaires. Les modes de galerie, qui correspondent à des réflexions internes totales sur la paroi de la périphérie du microdisque, et des modes Fabry-Pérot suivant le diamètre du disque (XIA et al., 2007, Ghrib2013). La disposition du micropilier enterré sous une couche de nitrure ne permet pas l'extraction de la lumière diffusée suivant la périphérie du disque. On ne peut pas observer les modes de galerie.

Sur les spectres présentés, les pics de résonance observés sont associés à des modes Fabry-Pérot. Si on compare les positions des pics de résonance obtenues pour les deux dispositifs, on observe un décalage d'une demi-période. Cela est lié à une légère modification de l'indice optique effectif par le contact métallique. Le facteur de qualité associé à ces pics atteint une valeur de 100. Elle est mesurée par la largeur spectrale du pic par la relation :



**Fig. 4.24** : Spectres d'électroluminescence d'un dispositif non contraint en germanium (courbe noire), d'un micropilier de 9 μm de diamètre avec un contact en disque plein (courbe bleue) et avec un contact annulaire (courbe rouge). Les spectres sont normalisés et décalés en ordonnées pour plus de clarté

## 4.2. Mesures d'électroluminescence sur des cavités optiques contraintes en germanium

---

$$Q = \frac{\lambda_0}{\delta\lambda} \quad (4.5)$$

Où  $\lambda_0$  est la longueur d'onde de la résonance, et  $\delta\lambda$  l'élargissement à mi-hauteur. Cette valeur est comparable à celle obtenue sur des structures similaires sous pompage optique. Les pertes optiques générées par le contact métallique restent faibles devant celle de l'interface Ge/SiN/air.

Dans le cas du micropilier avec un contact en disque plein, la partie centrale est masquée par le contact métallique, la lumière collectée est émise des bords des micropiliers, qui correspond à une zone où le film de SiN applique une contrainte sur la couche de germanium. Cet effet est observé par le décalage vers les plus grandes longueurs du maximum des recombinaisons directes du spectre d'électroluminescence à une valeur de 1650 nm. On obtient un décalage de 90 nm, ce qui correspond à une réduction en énergie de 43 meV de la séparation entre la vallée  $L$  et la vallée  $\Gamma$ . Cette valeur correspond à une déformation biaxiale  $\varepsilon_{\parallel} = 0.55\%$  si on considère les recombinaisons en centre de zone  $\Gamma$  avec la bande de trous lourds. Par ailleurs, la résonance du spectre est élargie à cause du gradient de contrainte dans la couche de germanium, et de la séparation en énergie entre les bandes de trous lourds et de trous légers.

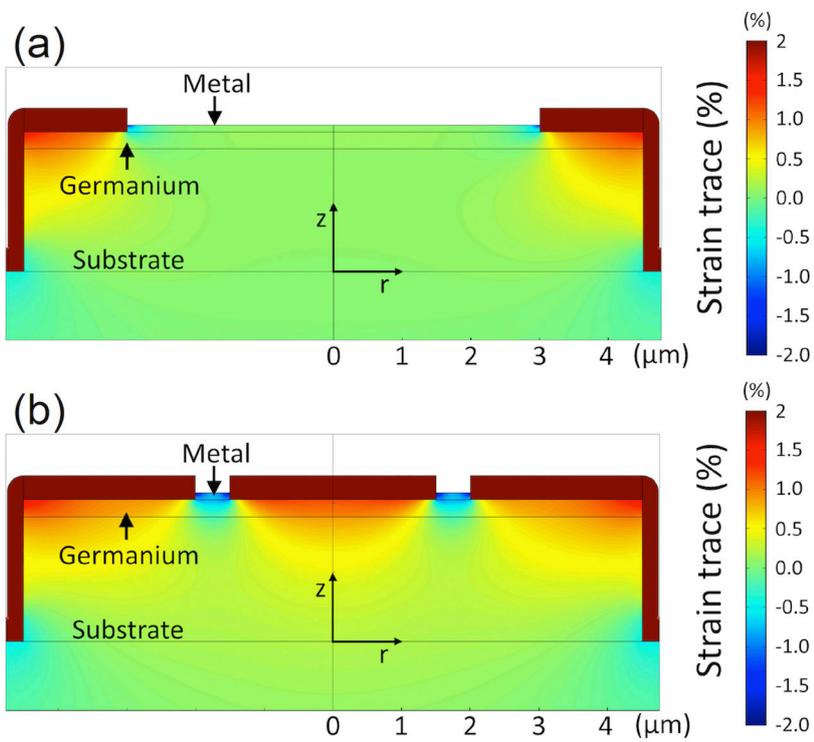
La seconde configuration étudiée comporte un contact annulaire. Cette fois la lumière émise peut provenir du centre de la structure ou des bords du micropilier. La position du maximum est localisée à 1680 nm. Comparé au dispositif précédent, on obtient un décalage de 30 nm supplémentaire. La réduction en énergie est de 56 meV, et la contrainte biaxiale estimée est de 0.72%. Le transfert de contrainte est optimisé grâce à la réduction de la taille du contact. La couche de SiN peut couvrir une surface plus importante.

On a effectué la modélisation par éléments finis des deux micropiliers de diamètre de 9  $\mu\text{m}$  étudiés précédemment, pour simuler le transfert de contrainte. Les résultats obtenus sont présentés sur la figure 4.25, qui représente la somme des déformations ( $\varepsilon_{tot} = \varepsilon_r + \varepsilon_{phi} + \varepsilon_z$ ) dans le cadre d'un domaine de simulation axisymétrique (déformation hydrostatique). La différence d'énergie entre la vallée  $\Gamma$  et la vallée  $L$  dépend directement de ce paramètre.

La déformation est maximum à l'interface entre la couche de SiN et la couche de germanium, puis décroît progressivement dans la profondeur. La valeur de la déformation hydrostatique augmente sur les bords de la structure à cause de la présence de la couche de SiN sur les parois.

On estime la valeur de déformation biaxiale  $\varepsilon_{\parallel}$  à partir des simulations pour lesquelles on a calculé la déformation totale pour permettre la comparaison avec les mesures expérimentales. Pour cela, il faut retrancher la contribution de  $\varepsilon_z$  à la déformation totale  $\varepsilon_{tot}$  pour obtenir la déformation biaxiale. On a d'abord appliqué cette hypothèse sur une structure sans discontinuité sur la couche de SiN afin de vérifier si l'on retombe sur bien l'approximation de déformation biaxiale pure. Une fois cette hypothèse vérifiée, on a estimé la déformation biaxiale pour des zones hors des contacts des structures.

Dans le cas d'un contact en disque plein, la déformation est nulle sous le métal. En dehors du contact métallique, la valeur moyenne de la déformation dans le volume de la couche est de 0.53% dans le cadre de l'approximation biaxiale. Cette valeur est en bon accord avec la valeur expérimentale mesurée par le décalage en longueur d'onde du maximum des recombinaisons radiatives.

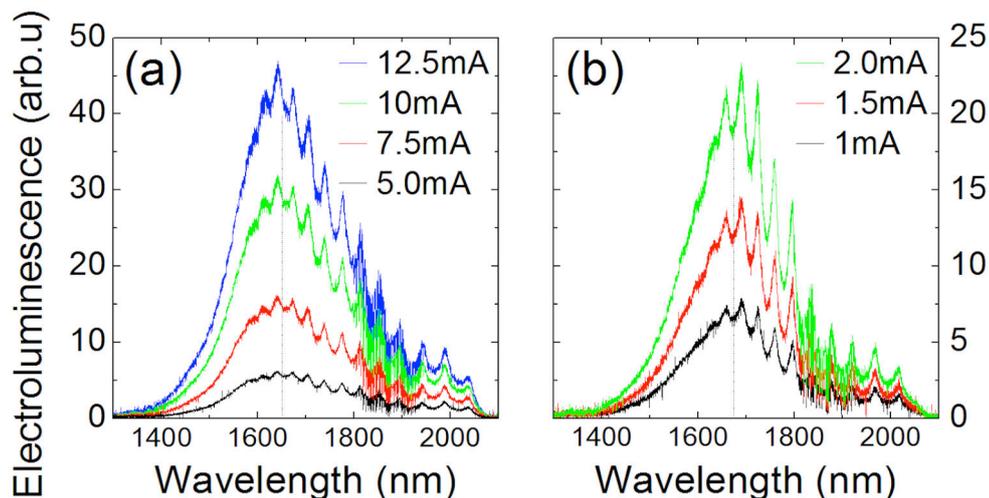


**Fig. 4.25** : Profils de déformation obtenus par modélisation par éléments finis pour des micropiliers de  $9\ \mu\text{m}$  de diamètre avec la configuration (a) de contact en disque plein (b) de contact annulaire . La composante hydrostatique du champ de déformation ( $\varepsilon_r + \varepsilon_{phi} + \varepsilon_z$ ) est représentée

## 4.2. Mesures d'électroluminescence sur des cavités optiques contraintes en germanium

Dans le cas de la configuration avec un contact annulaire, la zone sous le métal est légèrement en compression. On considère seulement la zone de  $2\ \mu\text{m}$  au centre du dispositif pour calculer la valeur de la déformation moyennée dans le volume de la couche, car on a observé expérimentalement que l'émission provenait essentiellement du centre de la structure. On trouve une valeur de  $0.63\%$  dans le cadre de l'approximation biaxiale. Comparée à la valeur de  $0.72\%$  obtenue expérimentalement, la légère différence peut venir de la difficulté d'estimer avec exactitude les zones concernées pour l'émission de recombinaisons radiatives. Ces zones sont dépendantes de l'injection de porteurs minoritaires dans le germanium.

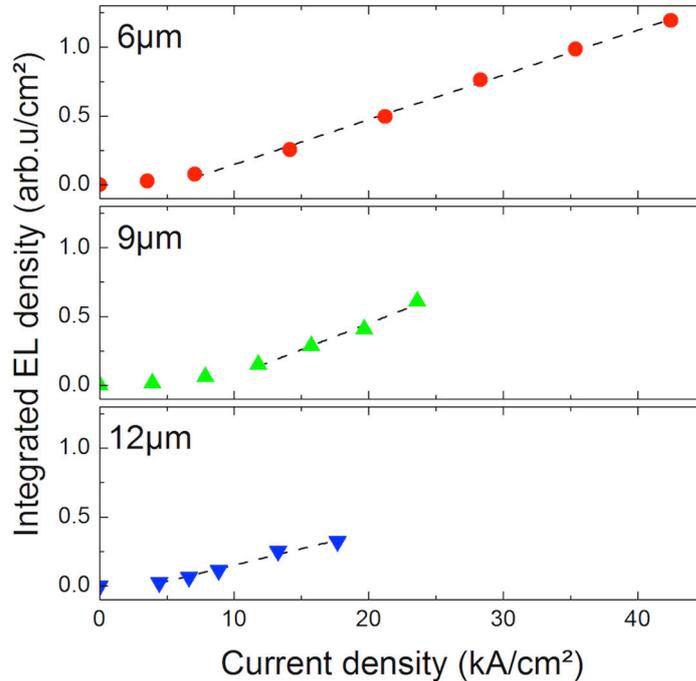
**4.2.3.5.1 Effet du régime d'injection** La figure 4.26 présente les spectres obtenus pour différents courants sous injection continue, pour les micropiliers de  $9\ \mu\text{m}$  de diamètre, avec un contact en disque plein (a) et un contact annulaire (b). Une valeur de courant de  $1\ \text{mA}$  correspond à une densité de courant de  $1.5 \times 10^3\ \text{A}/\text{cm}^2$ . Dans la gamme de courant appliqué jusqu'à  $20\ \text{mA}$ , le facteur de qualité ne varie pas.



**Fig. 4.26** : Spectres d'électroluminescence en fonction du courant à injection continue pour la configuration (a) à contact en disque plein (b) à contact annulaire

On a réalisé une étude en fonction du diamètre du micropilier pour la configuration avec les contacts en disque plein. On dispose de diodes avec des diamètres allant de  $6$  à  $12\ \mu\text{m}$ . La densité de signal intégré est linéaire après le dépassement d'un seuil en courant comme on peut le voir pour la figure 4.27. Le seuil est localisé pour une valeur autour de  $5\ \text{kA}/\text{cm}^2$ . Ce comportement peut être associé à un changement du régime d'injection des porteurs minoritaires, par la modification de la courbure des bandes d'énergie dans le germanium en fonction du potentiel appliqué sur le contact Schottky. On peut affirmer que les trous sont injectés de manière latérale, car les spectres d'électroluminescence mesurés montrent que les recombinaisons radiatives ont lieu dans des zones contraintes de la structure. Si l'injection latérale devient efficace, le signal d'électroluminescence devient important.

On étudie une diode de  $12\ \mu\text{m}$  de diamètre sous injection impulsionnelle. Cette taille de diode permet l'injection à fort niveau de courant. En utilisant des impulsions très courtes de  $10\ \text{ns}$ , on a pu appliquer un courant de  $400\ \text{mA}$ , ce qui correspond à une densité de courant de  $350$

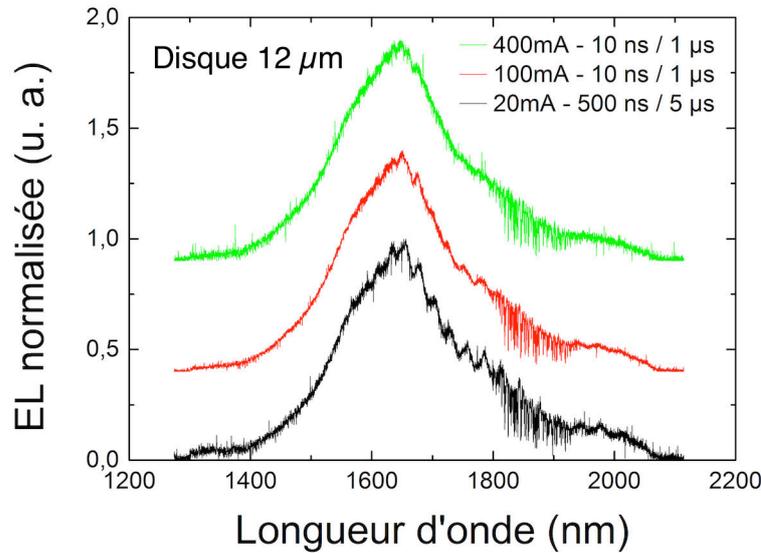


**Fig. 4.27** : Densité intégrée d'électroluminescence normalisée par la surface d'émission en fonction de la densité de courant pour les diodes de 6,9, et 12  $\mu\text{m}$  de diamètre avec des contacts en disque plein. Les lignes discontinues sont tracées en tant que repère

$\text{kA}/\text{cm}^2$ . Sur la figure 4.28 sont présentés les spectres normalisés sous injection impulsionnelle. On observe que l'augmentation du courant provoque un élargissement des pics de résonance associés aux modes Fabry-Pérot, jusqu'à leur disparition totale. Cet effet est lié à la génération de perte optique par l'absorption des porteurs libres dans la couche de germanium (SHAMBAT et al., 2010), car le courant d'électrons devient très important.

#### 4.2.3.6 Bilan

Les dispositifs réalisés ont atteint un niveau de déformation que l'on peut trouver dans la littérature sous injection électrique (NAM et al., 2012). Mais la majeure différence provient du fait que la structure des dispositifs réalisés inclue une cavité optique. Cette réalisation est d'autant plus importante que le procédé de transfert de contrainte est compatible avec l'environnement CMOS. La déformation obtenue est plus large d'un facteur trois que les diodes de germanium sur silicium possédant une déformation résiduelle par différence de coefficient de dilatation thermique. En partant d'une couche de germanium sur silicium, on pourra renforcer la déformation en tension dans la cavité optique à un niveau permettant la zone de fonctionnement à bas courant d'injection que l'on a présenté dans la partie de modélisation électrique.



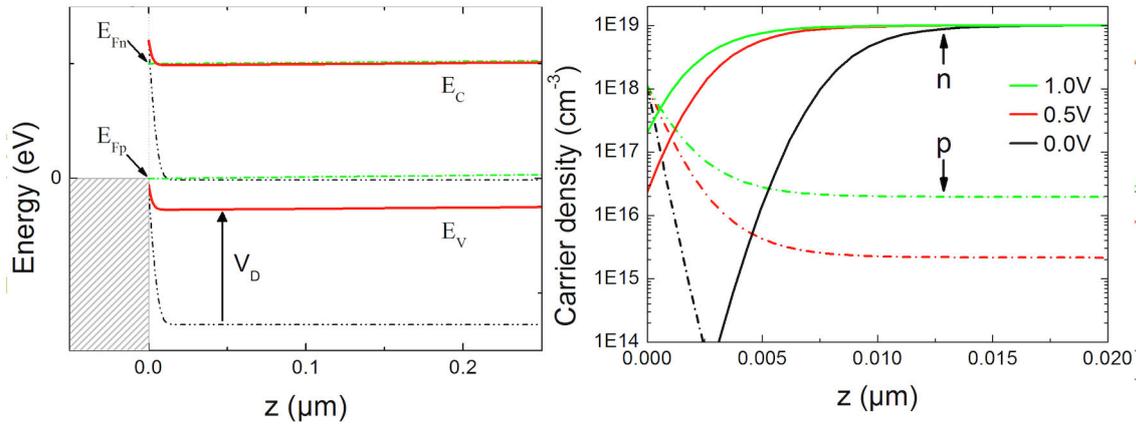
**Fig. 4.28** : Spectres d'électroluminescence mesurés sous régime d'injection impulsif pour différents niveaux de courant sur une diode de 12  $\mu\text{m}$  de diamètre. Les spectres sont normalisés et décalés en ordonnée pour faciliter la lecture

#### 4.2.4 Injection latérale des porteurs minoritaires dans les diodes Schottky

On a mentionné à plusieurs reprises que pour obtenir la génération de recombinaisons radiatives dans des zones contraintes, l'injection des porteurs minoritaires dans le germanium doit s'effectuer de manière latérale dans la couche de germanium. On peut envisager différents scénarios pour la génération de recombinaisons radiatives à l'aide d'un contact Schottky :

- Les trous sont bloqués à l'interface germanium/métal. Le flux d'électrons vers le métal va permettre de repeupler en porteurs la zone de charge d'espace où sont localisés les trous. Les électrons peuvent se recombiner de manière radiative avec les trous. L'électroluminescence est localisée sous le contact métallique.
- Les trous sont bloqués à l'interface germanium/SiN. Le courant d'électrons va favoriser le transport de porteurs dans la zone proche de l'interface. Les recombinaisons radiatives prennent place à la surface.
- Les trous sont injectés dans la couche de germanium par le contact métallique. Les recombinaisons radiatives sont localisées suivant le chemin d'injection des trous.

On note que l'électroluminescence commence à devenir importante à partir d'une certaine densité de courant, comme on a pu le voir sur la figure 4.27. Cette densité de courant est obtenue pour une tension entre 0.7 et 0.8 V. Le seuil en tension de la diode Schottky est mesuré à une valeur d'environ 0.6 V. Il se produit un phénomène qui permet d'obtenir une injection plus efficace dans le dispositif pour l'électroluminescence **observable**, même si le niveau de courant commence à être conséquent dans la structure. L'électroluminescence n'est pas immédiate par rapport au courant total. Le scénario pour lequel le courant d'électrons viendrait se recombiner avec les trous localisés aux interfaces est moins probable. **Il faut plutôt considérer l'injection des trous dans la couche de germanium par le contact Schottky.**



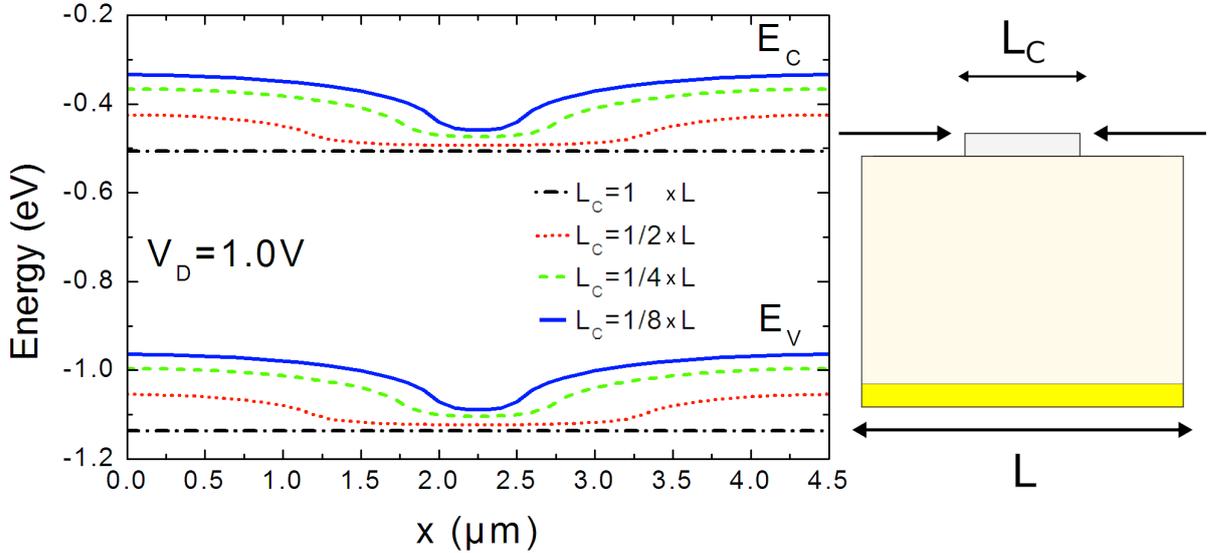
**Fig. 4.29 :** (a) Diagramme de bande simulé pour un contact Schottky sur germanium dopé de type  $n$  à l'équilibre thermodynamique (courbes en pointillé) et sous polarisation directe (courbes pleines) (b) Répartition des porteurs à l'interface pour différentes tensions de polarisation

On a simulé le comportement d'une diode Schottky à l'interface, en utilisant la suite logicielle Silvaco. Comme on l'a vu dans le chapitre précédent, le courant passant à l'interface entre le métal et le semiconducteur est géré par une condition limite. On émet quelques réserves sur la manière dont est contrôlé le courant pour des diodes Schottky avec une hauteur de barrière qui s'approche de l'énergie de la bande interdite du semiconducteur. On se sert de l'outil de simulation pour visualiser le comportement des charges lors de l'application d'une tension de polarisation raisonnable.

On polarise la structure en appliquant une tension positive sur le métal. La barrière dans le sens semiconducteur métal est réduite comme on peut le voir sur la figure 4.29 (a), et un courant d'électrons s'établit. Le quasi-niveau de Fermi des trous reste aligné avec celui du métal. Il n'y a pas une injection supplémentaire de trous à l'interface. Sur la figure 4.29 (b), on peut constater que la densité de trous à l'interface ne varie pas avec la tension de polarisation, alors que la densité d'électrons augmente progressivement pour repeupler la zone de déplétion à l'interface. Les trous sont créés dans le volume par agitation thermique au fur et à mesure que la bande de Valence se rapproche du quasi-niveau de Fermi des trous. Dans cette configuration, il n'y a aucune raison à ce que les trous injectés viennent diffuser dans l'épaisseur de la couche de germanium. Par ailleurs, on a réalisé des essais de blocage de niveau de Fermi à l'interface entre le germanium et la couche de SiN. Avec différentes positions du niveau de Fermi, pour rendre l'interface comme une zone d'accumulation ou de déplétion pour les électrons, il n'y a pas de modification du comportement observé sur la diffusion des porteurs minoritaires.

Cela confirme que les trous sont injectés de manière latérale dans la structure. Il faut donc considérer la topologie du contact métallique afin de comprendre l'injection des porteurs minoritaires dans le germanium. Dans le cas où la taille du contact serait réduite, le champ électrique va s'appliquer principalement sous le contact. Hors du contact, le potentiel appliqué est moins important. Les bandes d'énergie vont commencer à se courber, et il va se créer un gradient du niveau de Fermi de manière latérale, traduisant l'apparition d'un courant. Les porteurs minoritaires vont subir une diffusion latérale, car les zones hors du contact sont plus favorables en terme d'énergie pour les trous. Cet effet est illustré sur la figure 4.30.

## 4.2. Mesures d'électroluminescence sur des cavités optiques contraintes en germanium



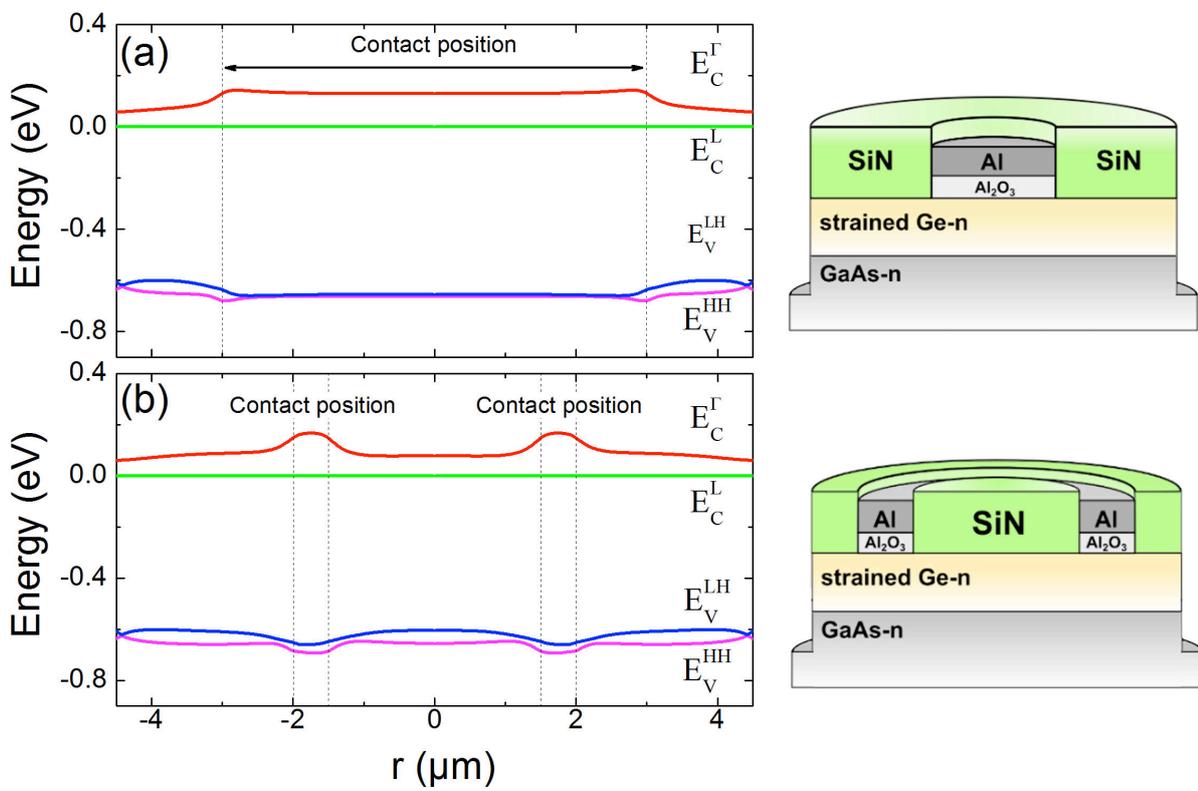
**Fig. 4.30** : Profil de bandes de conduction et de valence extraite pour un dispositif Schottky en fonction de la réduction de la largeur du contact  $L_c$  à différentes tensions de polarisation

### 4.2.4.1 Application à une structure contrainte

On s'intéresse au cas particulier du transfert de contrainte dans les micropiliers pour essayer de remonter aux profils d'injection des porteurs dans le germanium. Comme on peut observer l'électroluminescence depuis des zones contraintes du germanium, l'injection latérale du courant est primordiale. À partir des modélisations par éléments finis du transfert de contrainte présentés sur la figure 4.25, on peut calculer la structure de bande du germanium par la méthode **k.p** 30 bandes, en utilisant le code de calcul développé dans l'équipe de recherche. La figure 4.31 présente le diagramme d'énergie extraite du profil de déformation suivant une coupe latérale à mi-hauteur de la couche de germanium, pour la configuration avec un contact en disque plein, et un contact annulaire respectivement. On visualise l'impact de la position du contact sur la modification de l'énergie de bande interdite dans la structure. L'interface entre le germanium et le métal concerne des zones peu contraintes en tension, ou légèrement en tension. Cette configuration peut amener à une légère modification de la hauteur de la barrière à l'interface à cause de la modification de l'énergie de bande interdite (LIAO et al., 2006). L'apparition d'un gradient d'énergie amène à la formation d'un comportement similaire à une pseudo-hétérostructure dans les zones les plus contraintes. Cet effet a pu être observé expérimentalement dans les structures en micropont de germanium très contraint sous pompage optique (NAM et al., 2013).

Le diagramme de bande est ensuite injecté dans le logiciel de modélisation SILVACO, pour tenir compte des effets de la contrainte sur les propriétés de bande d'énergie du germanium.

Sous l'application du champ électrique, il se crée une zone énergétiquement favorable pour les trous hors des contacts. Cet effet est renforcé par la réduction de l'énergie due à la contrainte de tension de bande interdite, comme on peut le voir sur la figure 4.32. Ceci induit une diffusion latérale des trous de la zone de contact vers les zones contraintes du germanium. L'injection de trou latéral peut donc être optimisée par la réduction de la taille de métal et en augmentant la contrainte en tension qui modifie le gradient de bande d'énergie. En l'état, on ne peut pas estimer



**Fig. 4.31** : Diagramme de bande calculé à partir du profil de déformation par la méthode **k.p** dans le germanium à mi-hauteur de la couche pour la configuration (a) avec un contact en disque plein (b) avec un contact annulaire

## 4.2. Mesures d'électroluminescence sur des cavités optiques contraintes en germanium

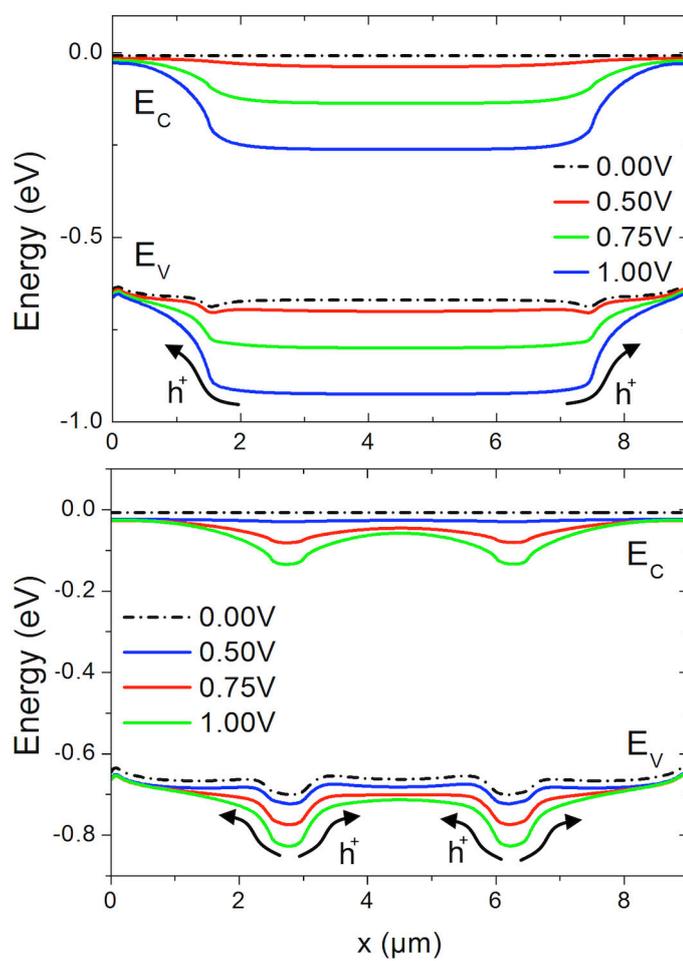


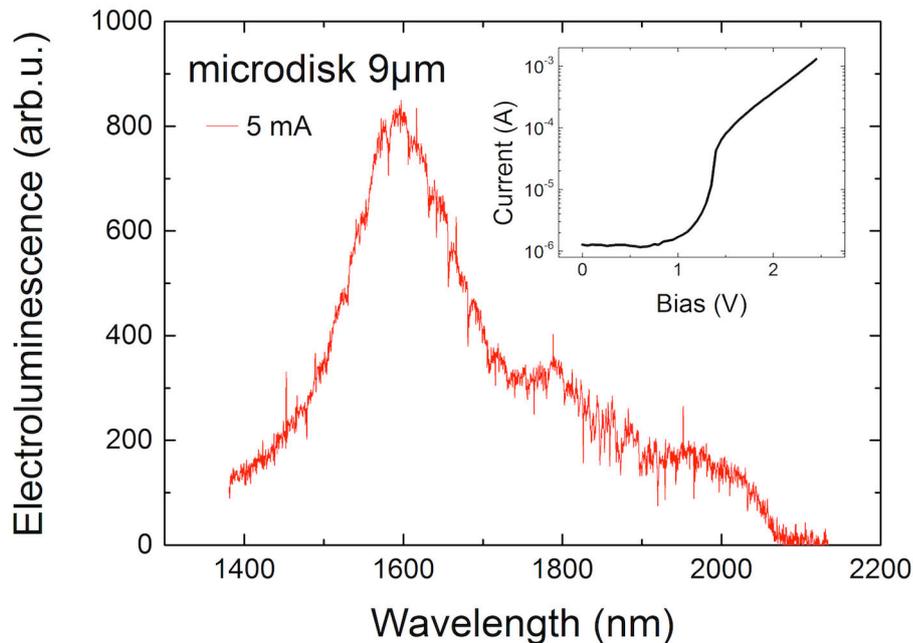
Fig. 4.32 : Diagramme de bande du germanium contraint sous polarisation électrique

la densité de porteurs minoritaires injectés. Les niveaux du signal des spectres d'électroluminescence laissent penser que les densités de trous sont supérieures à  $10^{18} \text{ cm}^{-3}$ . Ce qui représente un niveau d'injection de l'ordre  $\sim 10\%$  par rapport au courant de porteurs majoritaires d'électrons.

### 4.2.4.2 Conclusion

On a montré le bon déroulement du procédé de fabrication qui permet d'obtenir des structures contraintes. On a vérifié expérimentalement que les structures réalisées étaient contraintes grâce à l'observation du décalage de l'électroluminescence. La contrainte transférée par un film de SiN permet d'atteindre un niveau de déformation record dans une cavité optique sous injection électrique (**Prost2014a**). On a expliqué le phénomène d'injection de porteurs minoritaires avec un contact Schottky de manière latérale grâce à la signature de l'émission des porteurs dans des zones contraintes. Pour obtenir le profil des porteurs, il faudrait avoir recours à une modélisation plus fine du transport à l'interface entre le métal et le semiconducteur. L'injection par contact Schottky souffre du problème d'homogénéité qui ne permet pas d'avoir une reproductibilité importante notamment dans le cas des guides d'ondes.

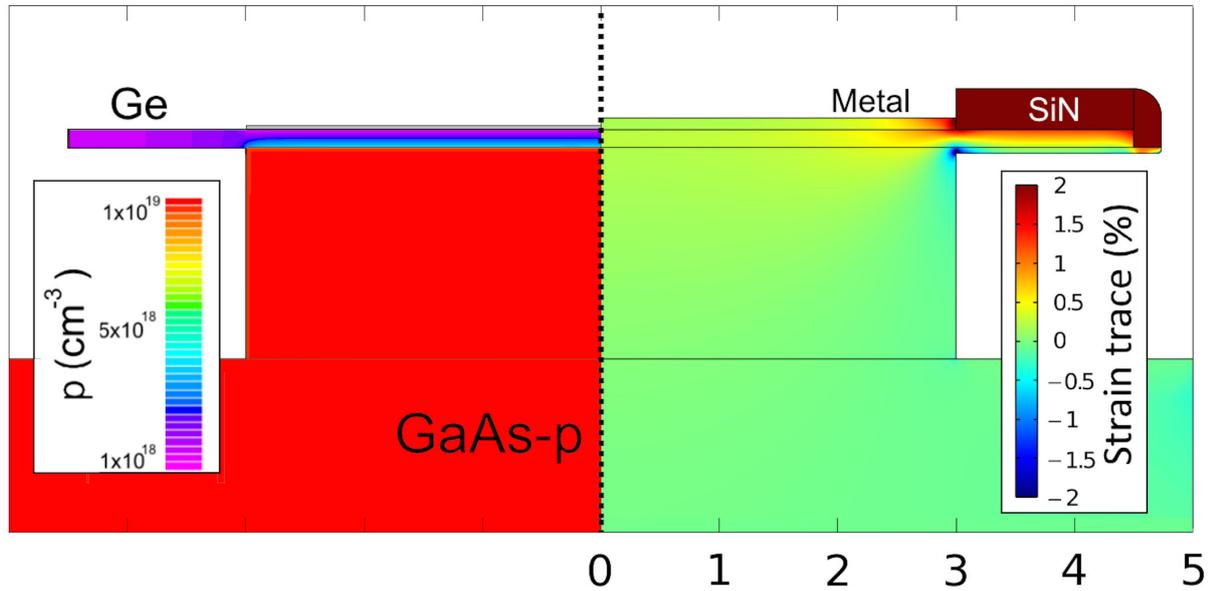
4.2.5 Étude des propriétés d'émission radiatives de l'hétérostructure SiGe/-Ge/GaAs



**Fig. 4.33** : Spectre d'électroluminescence sur un microdisque de diamètre de 9 µm avec un contact en disque plein. L'encart montre la caractéristique I-V associée à cette structure

Dans cette partie, on montre les premiers résultats obtenus sur des échantillons d'essais en utilisant une hétéroépitaxie de SiGe sur germanium. L'épaisseur initiale de la couche de germanium est de 150 nm avant la formation de la couche de SiGe. Les structures de ces échantillons possèdent une sous-gravure. On présente sur la figure 4.33, le spectre d'un microdisque de 9 µm de diamètre possédant un contact en disque plein de 6 µm de diamètre. La position en longueurs d'onde du maximum des recombinaisons radiatives est localisée à 1595 nm. Par rapport à un dispositif non contraint localisé à 1555 nm, ce décalage correspond à une réduction en énergie de 20 meV, soit une déformation biaxiale de 0.25 %. Comparé aux structures précédentes avec des contacts Schottky, le décalage est beaucoup moins important. Cette différence peut s'expliquer par le changement de mode d'injection des porteurs minoritaires. Pour illustrer cet effet, on a simulé le transfert de contrainte et l'injection électrique dans cette structure. On choisit de ne pas inclure la couche de SiGe pour ces simulations. Comme on peut le voir sur la partie gauche de la figure 4.34 qui représente la densité de trous, les porteurs minoritaires sont injectés à l'interface entre le GaAs-p et le Ge-n principalement sous le contact. Cette partie du dispositif correspond à une zone très peu contrainte comme on peut le voir sur le champ de déformation représenté sur la partie de droite de la figure 4.34. Cette structure n'est pas adaptée pour l'injection électrique. En effet les porteurs ne sont pas injectés dans la zone favorable pour obtenir des modes de galerie qui est la périphérie du disque. Dans le cas des microdisque sous injection électrique, il faut plutôt considérer des structure à gravure droite. Cette configuration est plus adaptée à la réalisation de guide d'onde contraint.

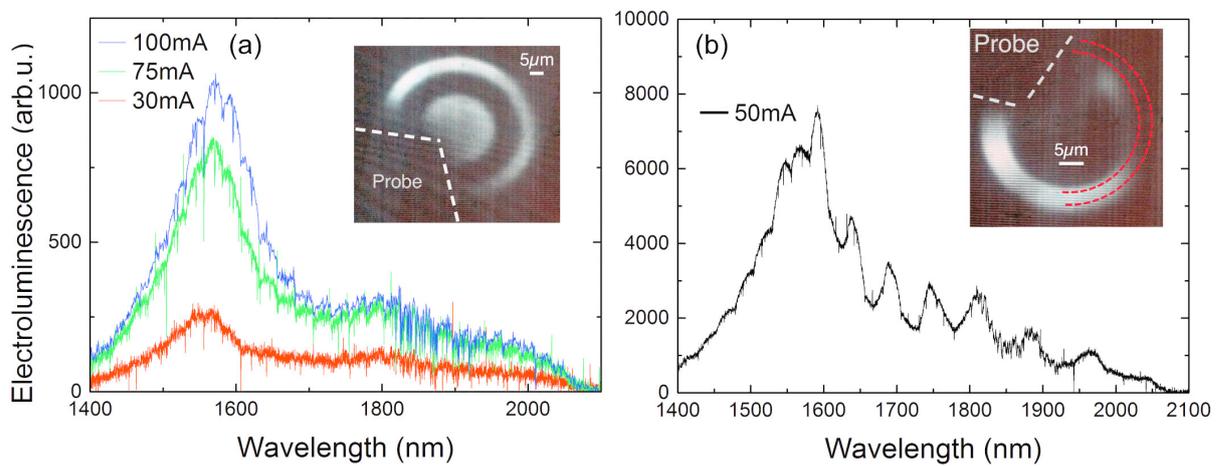
En guise de perspective, on montre les spectres et les images d'émission observés à la caméra



**Fig. 4.34** : Simulations du transport électronique et du transfert de contrainte dans une structure en microdisque, la partie gauche représente la densité de trous injectés pour un courant de 10 mA, la partie de droite représente le champ de contrainte hydrostatique  $\varepsilon_{tot}$

CCD à une étape intermédiaire du procédé de fabrication avant le dépôt de SiN contraint, sur la dernière série d'échantillons en cours de réalisation possédant des gravures droites. L'épaisseur de la couche de germanium est de 500 nm. On montre le spectre obtenu sur une diode circulaire de diamètre important sur la figure 4.35 (a). La zone d'émission observée est parfaitement homogène sur plusieurs dizaines de micromètres autour du contact et au centre de la diode. Le résultat est encore plus remarquable sur un circulateur en anneau rebouclant sur lui-même de 5  $\mu\text{m}$  de large et un diamètre intérieur de 40  $\mu\text{m}$ . Comme on peut le voir sur la figure 4.35 (b), la zone d'émission est uniforme dans toute la structure du circulateur. Un contact par une pointe à un point du circulateur permet d'observer de l'électroluminescence dans toute la structure. Ce qui montre que l'injection électrique est beaucoup plus uniforme avec ce type de structure. Cette structure est prometteuse, car on va pouvoir résoudre les difficultés rencontrées avec les structures possédant des contacts Schottky. Cet échantillon est en cours de finalisation. Il permettra l'étude de l'électroluminescence sous des régimes de très forte injection avec une homogénéité respectée dans les différentes cavités optiques.

## 4.2. Mesures d'électroluminescence sur des cavités optiques contraintes en germanium



**Fig. 4.35 :** (a) Spectre d'électroluminescence d'une diode circulaire de 60 μm de diamètre avec un contact annulaire de 10 μm de large qui correspond à la zone sombre de l'image obtenue par la caméra CCD (b) Spectre pour un circulateur en anneau de 5 μm de large. Le contact est fait en posant la pointe sur le guide qui possède des lignes de contact métallique retracées en rouge sur l'image obtenue par la caméra CCD. La zone centrale ne contient pas de germanium.



### 4.3 Conclusion

Mes travaux ont permis d'étudier l'injection électrique dans le germanium dopé de type n et contraint dans le but de réaliser un laser. J'ai tout d'abord étudié les propriétés d'injection électronique dans le germanium. J'ai pu établir une méthode qui permet de calculer le courant de seuil pour obtenir l'inversion de population dans le germanium. J'ai dû adapter l'outil de simulation pour cette application, afin de pouvoir prendre en compte l'impact du transport des porteurs sur les performances d'injection dans le germanium par des doubles hétérostructures. La stratégie d'inversion de population se base sur le fait qu'il faut venir saturer la vallée L en électrons du germanium pour que le niveau de Fermi commence à adresser le bas de la bande de la vallée  $\Gamma$ . Il faut assurer un remplissage assez important de porteur dans le cas d'une structure non contrainte, et les courants de seuil d'inversion de population sont de l'ordre du MA/cm<sup>2</sup>. Par la réduction de la séparation en énergie des deux vallées avec l'application d'une contrainte, et du remplissage de la vallée L avec le dopage, on a montré l'évolution du courant de seuil en fonction de ces deux paramètres. Il est possible d'atteindre un régime de fonctionnement avec des densités de courant inférieures à 10 kA/cm<sup>2</sup>, si le couple entre la valeur de la déformation et le niveau de dopage est bien choisi, par exemple en combinant un dopage de  $4 \times 10^{19}$  cm<sup>-3</sup> avec une déformation biaxiale de 0.9%.

La méthode développée ne traite que le transport des porteurs dans l'espace direct. Une description plus fine nécessiterait de développer et d'approfondir l'injection des porteurs dans l'espace réciproque. De cette manière, on aura accès à une description plus fine du comportement des porteurs avec leurs répartitions dans les différentes vallées, en prenant en compte la dépendance de la contrainte sur les propriétés de transport. Dans nos simulations, on a considéré le transport des porteurs aux interfaces des semiconducteurs de la double hétérostructure seulement dans les bandes de plus basse énergie. Une mise en évidence d'une injection des électrons de la vallée  $\Gamma$  à la vallée  $\Gamma$  à l'interface entre le semiconducteur de barrière (par exemple le GaAs) et le germanium pourrait limiter l'influence de la vallée L du germanium pour obtenir l'inversion de population, et ainsi réduire le courant de seuil. L'injection électrique doit se faire dans un volume important de germanium. Le transfert de contrainte doit être homogène dans la couche de germanium, pour obtenir du gain optique. La difficulté est de pouvoir concilier une injection électrique sans dégrader le transfert de contrainte. J'ai développé différentes approches pour répondre à cette problématique, en utilisant des films de SiN contraint déposés sur des cavités optiques. La première proposition de structure utilise une injection verticale. Grâce à une optimisation de sa topologie, on peut obtenir des structures avec un transfert de contrainte non dégradé pour la réalisation des contacts métalliques. J'ai ensuite mis au point le procédé de fabrication permettant de réaliser ces dispositifs. Pour mener à bout le procédé de fabrication qui s'est révélé complexe à cause du nombre important d'étapes, il a fallu débloquent plusieurs points problématiques sur chaque étape de fabrication. On a réalisé différents types de structures optiques contraintes à savoir des guides d'ondes avec et sans sous-gravure du substrat, et des micropiliers. Pour les structures en guide d'onde, on a montré que le transfert de contrainte avec une couche de SiN n'était pas dégradé par la réalisation des contacts métalliques. Dans des structures en micropiliers, on a pu atteindre un niveau record de déformation biaxiale de 0.72% pour un dispositif fonctionnant sous injection électrique et possédant une cavité optique. En l'état, cette structure permettrait d'obtenir l'inversion de population dans le germanium avec un courant de seuil inférieur à 10 kA/cm<sup>2</sup> en utilisant un dopage de  $5 \times 10^{19}$  cm<sup>-3</sup>. Avec une

couche de germanium épitaxiée sur silicium possédant une déformation initiale de 0.25%, cela permettrait de réduire le dopage à une densité de  $4 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ .

Les propriétés d'interface du germanium sont très critiques, et rendent difficile la réalisation de contact ou d'une hétérostructure. Les propriétés anormales des hétérostructures ont perturbé le plan de marche des travaux. J'ai pu développer une technique alternative pour générer de l'électroluminescence dans le germanium en utilisant des contacts Schottky. Grâce à une passivation des contacts en utilisant une couche d'interface en  $\text{Al}_2\text{O}_3$  entre le germanium et le métal, on a pu améliorer les propriétés électriques et d'émission radiative des dispositifs. Ces résultats montrent les directions à approfondir pour obtenir des couches de germanium de meilleure qualité grâce à la passivation des états d'interface. C'est d'ailleurs un point bloquant pour son intégration dans les transistors NMOS. La passivation de la surface de germanium peut être aussi la clé pour diminuer les recombinaisons non radiatives dans le germanium. Cette méthode alternative d'injection en utilisant des contacts Schottky sur le germanium dopé de type n m'a permis d'établir et de démontrer la validité du procédé de fabrication pour obtenir des structures contraintes en germanium sous injection électrique. J'ai fait une proposition d'un modèle d'injection de porteurs minoritaires de manière latérale dans le germanium grâce aux mesures d'électroluminescence sur des structures contraintes. Seulement cette approche souffre du manque d'efficacité d'injection des porteurs minoritaires pour que leur distribution soit uniforme dans des dispositifs avec des cavités optiques. Pour remédier à cela, on a développé une approche qui permet d'obtenir des hétérostructures à base de SiGe sur germanium. On a identifié les points expérimentaux permettant d'obtenir des couches de SiGe de bonne qualité, et les premiers résultats d'électroluminescence montrent que les problèmes d'homogénéité d'injection sont résolus par cette approche. Les structures à injection verticale sont bien adaptées à la réalisation d'un démonstrateur, mais peuvent être difficiles à intégrer pour des futurs dispositifs. Les propositions faites pour des structures à injection latérale sont plus appropriées pour cette problématique. Elles permettent d'augmenter le niveau de contrainte dans le germanium. Pour cela, il faut résoudre le défi d'obtenir des couches de germanium de bonne qualité par épitaxie localisée sur silicium, notamment aux interfaces latérales. L'injection latérale ouvre la voie à l'adaptation de la technique de report du germanium sur une couche de SiN contraint comme développée dans l'équipe, et qui permet d'atteindre des niveaux de déformation record. Une perspective pour le futur est l'étude des alliages GeSn. Le GeSn permet de modifier les bandes d'énergie et obtenir un semiconducteur à bande d'énergie directe pour une concentration de Sn de 13%. Cette valeur peut être réduite en introduisant une contrainte externe comme étudié dans ce manuscrit. Par ailleurs, le germanium souffre de manque de liberté pour former une double hétérostructure avec une interface de bonne qualité, au contraire des semiconducteurs III-V. Il est également possible de former des couches de SiGeSn, qui avec la bonne composition permettent de moduler les propriétés de bande, pour obtenir un confinement des porteurs dans la zone active tout en étant en accord de maille. Cette approche ouvre la voie à la formation de puits quantique relaxé en Ge pur ou en GeSn. Cela pourrait permettre de diminuer les courants de fonctionnement des dispositifs.

## Chapitre 5

# Liste des publications

### Articles dans des revues avec comité de lecture

- “Tensile-strained germanium microdisk electroluminescence” *Prost M.*, El Kurdi M., Ghrib A., Checoury X., Zerounian N., Aniel F., Beaudoin G., Sagnes I., Baudot C., Boeuf F., Boucaud P, **Opt. Express**, 23, 6722-6730 (2015)
- “All-around SiN Stressor for High and Homogeneous Tensile Strain in Germanium Micro-disk Cavities”, A. Ghrib M. El Kurdi, *M. Prost*, S. Sauvage, X. Checoury, G. Beaudoin, M. Chaigneau, R. Ossikovski, I. Sagnes, P. Boucaud, **Adv. Opt. Mater.**, 2195-1071 (2014)
- “Schottky electroluminescent diodes with n-doped germanium” *Prost M.*, El Kurdi M., Ghrib A., Checoury X., Zerounian N., Aniel F., Beaudoin G., Sagnes I., Baudot C., Boeuf F., Boucaud P, **Appl. Phys. Lett.** 104, 241104 (2014).
- “Recent advances in germanium emission” P. Boucaud, M. El Kurdi, A. Ghrib, *M. Prost*, M. de Kersauson, S. Sauvage, F. Aniel, X. Checoury, G. Beaudoin, L. Largeau, I. Sagnes, G. Ndong, M. Chaigneau, and R. Ossikovski **Photonics Research**, 1, vol. 3, 102 (2013)
- “Tensile-strained germanium microdisks” A. Ghrib, M. El Kurdi, M. de Kersauson, *M. Prost*, S. Sauvage, X. Checoury, G. Beaudoin, I. Sagnes, and P. Boucaud **Appl. Phys. Lett.**, 102, 221112 (2013)
- “Effect of increasing thickness on tensile-strained germanium grown on InGaAs buffer layers” M. de Kersauson, *M. Prost*, A. Ghrib, M. El Kurdi, S. Sauvage, G. Beaudoin, L. Largeau, O. Mauguin, R. Jakomin, I. Sagnes, G. Ndong, M. Chaigneau, R. Ossikovski, and P. Boucaud **J. Appl. Phys.** 113, 183508 (2013)

### Communications avec actes

- “Highly-Doped, Highly-Strained Germanium and Schottky Electroluminescent Diodes” M. El Kurdi, *M. Prost*, A. Ghrib, X. Checoury, S. Sauvage, N. Zerounian, F. Aniel, G. Beaudoin, I. Sagnes, V. Le Thanh, T.P.K. Luong, M. Chaigneau, R. Ossikovski, C. Baudot, F. Boeuf and P. Boucaud, **ECS Trans.** 2014 v. 64, issue 6, 359-364 (2014)

## Chapitre 5. Liste des publications

---

- “Electroluminescent diodes in n-doped germanium with Schottky contacts”, *M. Prost*, M. El Kurdi, A. Ghrib, X. Checoury, N. Zerounian, F. Aniel, G. Beaudoin, I. Sagnes, F. Boeuf, and P. Boucaud, Group IV Photonics (GFP), - Presentation Poster 2014 **IEEE 11th International Conference**, Paris, France (ISBN : 978-1-4799-2283-3/14)
- “Strain engineering in germanium microdisks” Ghrib A., Kurdi M. El, *Prost M.*, Kersauson M. de, Largeau L., Mauguin O., Beaudoin G., Sauvage S., Checoury X., Ndong G., Chaigneau M., Ossikovski R., David S., Sagnes I., Boucaud P., , SPIE Photonics West, 20140201 - 20140206, San Francisco (ISBN 9780819499035)
- “Tensile-strained germanium microdisks using Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> stressors” El Kurdi M., Ghrib A., de Kersauson M, *Prost M.*, Sauvage S., Checoury X., Beaudoin G., Sagnes I., Ndong G., Chaigneau M., Ossikovski R., Boucaud P., **10th International Conference on Group IV Photonics**, 20130828 - 20130830, Séoul Corée (ISBN 978-1-4673-5803-3)
- “Strain engineering for optical gain in germanium” M. El Kurdi, M. de Kersauson, A. Ghrib, *M. Prost*, S. Sauvage, R. Jakomin, G. Beaudoin, O. Mauguin, L. Largeau, I. Sagnes, G. Ndong, M. Chaigneau, R. Ossikovski, P. Boucaud **ECS Transactions** **50**, 363-370 (2012)

### Communications sans actes

- “Schottky electroluminescent diodes with n-doped germanium” *M. Prost*, M. El Kurdi, A. Ghrib, X. Checoury, N. Zerounian, F. Aniel, G. Beaudoin, I. Sagnes, C. Baudot, F. Boeuf, and P. Boucaud, **E-MRS 2014 FALL MEETING**, Warsaw, Poland
- “Optimized design of an electrically pumped germanium laser” *Prost M.*, El Kurdi M., Ghrib A., Zerounian N., Aniel F., Beaudoin G., Sagnes I., Baudot C., Boeuf F., Boucaud P., **SPIE Photonics Europe**, 2014/04/14 – 2014/04/17, Bruxelles – Belgique
- “Optical Sources Based on Tensile-strained Germanium” Boucaud P, El Kurdi M., Ghrib A., *Prost M.*, Checoury X., Sauvage S., Zerounian N., Aniel F., Beaudoin G., Sagnes I., Luong T. P. K., Le Thanh V., Chaigneau M., Ossikovski R., Baudot C., Boeuf F., **\*\* CMOS Emerging technologies symposium\*\***, 20140705 - 20140707, Grenoble

# Bibliographie

- ALDAGHRI, O. et al. (2012). “Optimum strain configurations for carrier injection in near infrared Ge lasers”. In : *Journal of Applied Physics* 111.5, p. 053106. DOI : [10.1063/1.3691790](https://doi.org/10.1063/1.3691790).
- BAKIR, B. Ben et al. (2011). “Electrically driven hybrid Si/III-V Fabry-Pérot lasers based on adiabatic mode transformers”. In : *Opt. Express* 19.11, p. 10317–10325. DOI : [10.1364/OE.19.010317](https://doi.org/10.1364/OE.19.010317).
- CAI, Y. et al. (2013). “Analysis of Threshold Current Behavior for Bulk and Quantum-Well Germanium Laser Structures”. In : *IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics* 19.4, p. 1901009–1901009. DOI : [10.1109/jstqe.2013.2247573](https://doi.org/10.1109/jstqe.2013.2247573).
- CAMACHO-AGUILERA, R. et al. (2013). “Direct band gap narrowing in highly doped Ge”. In : *Applied Physics Letters* 102.15, 152106, p. 152106. DOI : [10.1063/1.4802199](https://doi.org/10.1063/1.4802199).
- CAMACHO-AGUILERA, R. E. et al. (2012). “An electrically pumped germanium laser”. In : *Optics Express* 20.10, p. 11316–11320. DOI : [10.1364/OE.20.011316](https://doi.org/10.1364/OE.20.011316).
- CAPELLINI, G. et al. (2013). “Strain analysis in SiN/Ge microstructures obtained via Si-complementary metal oxide semiconductor compatible approach”. In : *Journal of Applied Physics* 113.1, p. 013513. DOI : [10.1063/1.4772781](https://doi.org/10.1063/1.4772781).
- CARD, H. C. et al. (1973). “The effect of an interfacial layer on minority carrier injection in forward-biased silicon Schottky diodes”. In : *Solid-State Electronics* 16.3, p. 365–374. DOI : [10.1016/0038-1101\(73\)90011-7](https://doi.org/10.1016/0038-1101(73)90011-7).
- CARDONA, M. et al. (1987). “Acoustic deformation potentials and heterostructure band offsets in semiconductors”. In : *Physical Review B* 35 (12), p. 6182–6194. DOI : [10.1103/PhysRevB.35.6182](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.35.6182).
- CARROLL, L. et al. (2012). “Direct-Gap Gain and Optical Absorption in Germanium Correlated to the Density of Photoexcited Carriers, Doping, and Strain”. In : *Physical Review Letters* 109 (5), p. 057402. DOI : [10.1103/PhysRevLett.109.057402](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.109.057402).
- CHENG, S.-L. et al. (2009). “Room temperature 1.6 $\mu$ m electroluminescence from Ge light emitting diode on Si substrate”. In : *Optics Express* 17.12, p. 10019–10024. DOI : [10.1364/OE.17.010019](https://doi.org/10.1364/OE.17.010019).
- CHENG, S.-L. et al. (2011). “Cavity-enhanced direct band electroluminescence near 1550 nm from germanium microdisk resonator diode on silicon”. In : *Applied Physics Letters* 98.21, p. 211101. DOI : [10.1063/1.3592837](https://doi.org/10.1063/1.3592837).

## Bibliographie

---

- CHRONEOS, A. et al. (2012). “Impurity diffusion, point defect engineering, and surface/interface passivation in germanium”. In : *Annalen der Physik* 524.3-4, p. 123–132. DOI : [10.1002/andp.201100246](https://doi.org/10.1002/andp.201100246).
- CHUANG, S.L. (1995). *Physics of Optoelectronic Devices*. Wiley Series in Pure and Applied Optics. Wiley.
- COLOMBO, L. et al. (1991). “Valence-band offsets at strained Si/Ge interfaces”. In : *Physical Review B* 44 (11), p. 5572–5579. DOI : [10.1103/PhysRevB.44.5572](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.44.5572).
- CROWELL, C. R. et al. (1966). “Current transport in metal-semiconductor barriers”. In : *Solid-State Electronics* 9.11-12, p. 1035–1048. DOI : [10.1016/0038-1101\(66\)90127-4](https://doi.org/10.1016/0038-1101(66)90127-4).
- CZERWINSKI, A. et al. (1998). “Optimized Diode Analysis of Electrical Silicon Substrate Properties”. In : *Journal of the Electrochemical Society* 145.6, p. 2107–2112. DOI : [10.1149/1.1838604](https://doi.org/10.1149/1.1838604).
- DIMOULAS, A. et al. (2006). “Fermi-level pinning and charge neutrality level in germanium”. In : *Applied Physics Letters* 89.25, p. 252110. DOI : [10.1063/1.2410241](https://doi.org/10.1063/1.2410241).
- DUTT, B. et al. (2012). “Roadmap to an Efficient Germanium-on-Silicon Laser : Strain vs. n-Type Doping”. In : *IEEE Photonics Journal* 4.5, p. 2002–2009. DOI : [10.1109/JPHOT.2012.2221692](https://doi.org/10.1109/JPHOT.2012.2221692).
- DUTT, B. et al. (2013). “Theoretical Analysis of GeSn Alloys as a Gain Medium for a Si-Compatible Laser”. In : *IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics* 19.5, p. 1502706–1502706. DOI : [10.1109/JSTQE.2013.2241397](https://doi.org/10.1109/JSTQE.2013.2241397).
- EL KURDI, M. et al. (2009). “Enhanced photoluminescence of heavily n-doped germanium”. In : *Applied Physics Letters* 94.19, p. 191107. DOI : [10.1063/1.3138155](https://doi.org/10.1063/1.3138155).
- EL KURDI, M. et al. (2010a). “Band structure and optical gain of tensile-strained germanium based on a 30 band kp formalism”. In : *Journal of Applied Physics* 107.1, p. 013710. DOI : [10.1063/1.3279307](https://doi.org/10.1063/1.3279307).
- EL KURDI, M. et al. (2010b). “Control of direct band gap emission of bulk germanium by mechanical tensile strain”. In : *Applied Physics Letters* 96.4, p. 041909. DOI : [10.1063/1.3297883](https://doi.org/10.1063/1.3297883).
- FISCHETTI, M. V. et al. (1996). “Band structure, deformation potentials, and carrier mobility in strained Si, Ge, and SiGe alloys”. In : *Journal of Applied Physics* 80.4, p. 2234–2252. DOI : [10.1063/1.363052](https://doi.org/10.1063/1.363052).
- FRANCIOSI, A. et al. (1996). “Heterojunction band offset engineering”. In : *Surface Science Reports* 25.1-4, p. 1–140. DOI : [10.1016/0167-5729\(95\)00008-9](https://doi.org/10.1016/0167-5729(95)00008-9).
- FRANK, M. M. et al. (2006). “Hafnium oxide gate dielectrics on sulfur-passivated germanium”. In : *Applied Physics Letters* 89.11, 112905, p. –. DOI : [10.1063/1.2338751](https://doi.org/10.1063/1.2338751).
- GAJULA, D. R. et al. (2014). “Fermi level de-pinning of aluminium contacts to n-type germanium using thin atomic layer deposited layers”. In : *Applied Physics Letters* 104.1, 012102, p. –. DOI : [10.1063/1.4858961](https://doi.org/10.1063/1.4858961).
- GALLACHER, K. et al. (2012). “Ohmic contacts to n-type germanium with low specific contact resistivity”. In : *Applied Physics Letters* 100.2, 022113, p. –. DOI : [10.1063/1.3676667](https://doi.org/10.1063/1.3676667).

- GAUBAS, E. et al. (2006). “Carrier lifetime studies in Ge using microwave and infrared light techniques”. In : *Materials Science in Semiconductor Processing* 9.4-5, p. 781–787. DOI : [10.1016/j.mssp.2006.08.023](https://doi.org/10.1016/j.mssp.2006.08.023).
- GEIGER, R. et al. (2014). “Excess carrier lifetimes in Ge layers on Si”. In : *Applied Physics Letters* 104.6, p. 062106. DOI : [10.1063/1.4865237](https://doi.org/10.1063/1.4865237).
- GHRIB, A. (2014). “Ingénierie de contrainte dans des cavités germanium : vers une application de laser intégré sur silicium”. Thèse de doct. Université Paris 11.
- GHRIB, A. et al. (2012). “Control of tensile strain in germanium waveguides through silicon nitride layers”. In : *Applied Physics Letters* 100.20, p. 201104. DOI : [10.1063/1.4718525](https://doi.org/10.1063/1.4718525).
- GHRIB, Abdelhamid et al. (2014). “All-Around SiN Stressor for High and Homogeneous Tensile Strain in Germanium Microdisk Cavities”. In : *Advanced Optical Materials*, n/a–n/a. DOI : [10.1002/adom.201400369](https://doi.org/10.1002/adom.201400369).
- GREEN, M. A. et al. (1973). “Minority carrier effects upon the small signal and steady-state properties of Schottky diodes”. In : *Solid-State Electronics* 16.10, p. 1141–1150. DOI : [10.1016/0038-1101\(73\)90141-X](https://doi.org/10.1016/0038-1101(73)90141-X).
- HAAS, C. (1962). “Infrared Absorption in Heavily Doped n-Type Germanium”. In : *Physical Review* 125 (6), p. 1965–1971. DOI : [10.1103/PhysRev.125.1965](https://doi.org/10.1103/PhysRev.125.1965).
- HARTMANN, J. M. et al. (2011). “Critical thickness for plastic relaxation of SiGe on Si(001) revisited”. In : *Journal of Applied Physics* 110.8, p. 083529. DOI : [10.1063/1.3656989](https://doi.org/10.1063/1.3656989).
- HEINE, Volker (1965). “Theory of Surface States”. In : *Physical Review* 138 (6A), A1689–A1696. DOI : [10.1103/PhysRev.138.A1689](https://doi.org/10.1103/PhysRev.138.A1689).
- HELLINGS, G. et al. (2010). “Electrical TCAD Simulations of a Germanium pMOSFET Technology”. In : *Electron Devices, IEEE Transactions on* 57.10, p. 2539–2546. DOI : [10.1109/TED.2010.2060726](https://doi.org/10.1109/TED.2010.2060726).
- HU, J. et al. (2011). “Impact of fixed charge on metal-insulator-semiconductor barrier height reduction”. In : *Applied Physics Letters* 99.25, p. 252104. DOI : [10.1063/1.3669414](https://doi.org/10.1063/1.3669414).
- HUDAIT, M. K. et al. (2012). “In situ grown Ge in an arsenic-free environment for GaAs/Ge/GaAs heterostructures on off-oriented (100) GaAs substrates using molecular beam epitaxy”. In : *Journal of Vacuum Science & Technology B : Microelectronics and Nanometer Structures* 30.5, p. 051205. DOI : [10.1116/1.4742904](https://doi.org/10.1116/1.4742904).
- HUDAIT, M. K. et al. (2013). “Structural, morphological, and band alignment properties of GaAs/Ge/GaAs heterostructures on (100), (110), and (111)A GaAs substrates”. In : *Journal of Vacuum Science & Technology B : Microelectronics and Nanometer Structures* 31.1, p. 011206. DOI : [10.1116/1.4770070](https://doi.org/10.1116/1.4770070).
- HUTIN, L. et al. (2009). “Schottky Barrier Height Extraction in Ohmic Regime : Contacts on Fully Processed GeOI Substrates”. In : *Journal of the Electrochemical Society* 156.7, H522–H527. DOI : [10.1149/1.3121562](https://doi.org/10.1149/1.3121562).
- JAIN, S.C. et al. (1991). “A simple expression for band gap narrowing (BGN) in heavily doped Si, Ge, GaAs and  $\text{Ge}_x\text{Si}_{1-x}$  strained layers”. In : *Solid-State Electronics* 34.5, p. 453–465. DOI : [10.1016/0038-1101\(91\)90149-S](https://doi.org/10.1016/0038-1101(91)90149-S).

## Bibliographie

---

- JAKOMIN, R. et al. (2011). “High quality tensile-strained n-doped germanium thin films grown on InGaAs buffer layers by metal-organic chemical vapor deposition”. In : *Applied Physics Letters* 98.9, p. 091901. DOI : [10.1063/1.3559231](https://doi.org/10.1063/1.3559231).
- KASAHARA, K. et al. (2011). “Mechanism of Fermi level pinning at metal/germanium interfaces”. In : *Physical Review B* 84 (20), p. 205301. DOI : [10.1103/PhysRevB.84.205301](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.84.205301).
- KASAHARA, K. et al. (2014). “Reliable reduction of Fermi-level pinning at atomically matched metal/Ge interfaces by sulfur treatment”. In : *Applied Physics Letters* 104.17, 172109, p. —. DOI : [10.1063/1.4875016](https://doi.org/10.1063/1.4875016).
- KASCHEL, M. et al. (2013). “Room-temperature electroluminescence from tensile strained double-heterojunction Germanium pin LEDs on Silicon substrates”. In : *Solid-State Electronics* 83, p. 87–91. DOI : [10.1016/j.sse.2013.01.041](https://doi.org/10.1016/j.sse.2013.01.041).
- KENNEY, C. R. (2010). “Exploiting non-linear Arrhenius dependence of diode IV curves to determine Schottky barrier band diagrams”. Thèse de doct. Stanford University. Department of Electrical Engineering.
- KERSAUSON, M. de et al. (2010). “Direct and indirect band gap room temperature electroluminescence of Ge diodes”. In : *Journal of Applied Physics* 108.2, p. 023105. DOI : [10.1063/1.3462400](https://doi.org/10.1063/1.3462400).
- KERSAUSON, M. de et al. (2011). “Optical gain in single tensile-strained germanium photonic wire”. In : *Optics Express* 19.19, p. 17925–17934. DOI : [10.1364/OE.19.017925](https://doi.org/10.1364/OE.19.017925).
- KERSAUSON, M. de et al. (2013). “Effect of increasing thickness on tensile-strained germanium grown on InGaAs buffer layers”. In : *Journal of Applied Physics* 113.18, p. 183508. DOI : [10.1063/1.4804266](https://doi.org/10.1063/1.4804266).
- KERSAUSON, Malo de (2013). “Towards a tensile strained, N doped germanium laser”. Theses. Université Paris Sud - Paris XI.
- KIM, Ki Bum et al. (1988). “Interfacial reactions in the Ti/GaAs system”. In : *Journal of Vacuum Science & Technology A* 6.3, p. 1473–1477. DOI : [10.1116/1.575728](https://doi.org/10.1116/1.575728).
- KOBAYASHI, M. et al. (2009). “Fermi level depinning in metal/Ge Schottky junction for metal source/drain Ge metal-oxide-semiconductor field-effect-transistor application”. In : *Journal of Applied Physics* 105.2, 023702, p. —. DOI : [10.1063/1.3065990](https://doi.org/10.1063/1.3065990).
- KOCINIEWSKI, Thierry et al. (2011). “Pseudomorphic and relaxed SiGe/Si(001) layer synthesis by gas immersion laser doping (GILD)”. In : *Phys. Status Solidi (c)* 8.3, p. 915–918. DOI : [10.1002/pssc.201000345](https://doi.org/10.1002/pssc.201000345).
- LAUX, S.E. (1985). “Techniques for small-signal analysis of semiconductor devices”. In : *Electron Devices, IEEE Transactions on* 32.10, p. 2028–2037. DOI : [10.1109/T-ED.1985.22235](https://doi.org/10.1109/T-ED.1985.22235).
- LIANG, Di et al. (2010). “Recent progress in lasers on silicon”. In : *Nature Photon* 4.8, p. 511–517. DOI : [10.1038/nphoton.2010.167](https://doi.org/10.1038/nphoton.2010.167).
- LIAO, M. H. et al. (2006). “Strained Pt Schottky diodes on n-type Si and Ge”. In : *Applied Physics Letters* 88.14, p. 143509. DOI : [10.1063/1.2191831](https://doi.org/10.1063/1.2191831).

- LIETEN, R. R. et al. (2008). “Ohmic contact formation on n-type Ge”. In : *Applied Physics Letters* 92.2, 022106, p. –. DOI : [10.1063/1.2831918](https://doi.org/10.1063/1.2831918).
- LIJADI, Melania et al. (2005). “Floating contact transmission line modelling : An improved method for ohmic contact resistance measurement”. In : *Solid-State Electronics* 49.10, p. 1655–1661. DOI : [10.1016/j.sse.2005.06.023](https://doi.org/10.1016/j.sse.2005.06.023).
- LIN, J.-Y. J. et al. (2011). “Increase in current density for metal contacts to n-germanium by inserting TiO<sub>2</sub> interfacial layer to reduce Schottky barrier height”. In : *Applied Physics Letters* 98.9, p. 092113. DOI : [10.1063/1.3562305](https://doi.org/10.1063/1.3562305).
- LIU, J. et al. (2007). “Tensile-strained, n-type Ge as a gain medium for monolithic laser integration on Si”. In : *Optics Express* 15.18, p. 11272–11277. DOI : [10.1364/OE.15.011272](https://doi.org/10.1364/OE.15.011272).
- LIU, J. et al. (2010). “Ge-on-Si laser operating at room temperature”. In : *Optics Letters* 35.5, p. 679–681. DOI : [10.1364/OL.35.000679](https://doi.org/10.1364/OL.35.000679).
- LUONG, T. K. P. et al. (2013). “Control of tensile strain and interdiffusion in Ge/Si(001) epilayers grown by molecular-beam epitaxy”. In : *Journal of Applied Physics* 114.8, p. 083504. DOI : [10.1063/1.4818945](https://doi.org/10.1063/1.4818945).
- MASETTI, G. et al. (1983). “Modeling of carrier mobility against carrier concentration in arsenic, phosphorus, and boron-doped silicon”. In : *Electron Devices, IEEE Transactions on* 30.7, p. 764–769. DOI : [10.1109/T-ED.1983.21207](https://doi.org/10.1109/T-ED.1983.21207).
- MONCH, Winfried (2012). “On the alleviation of Fermi-level pinning by ultrathin insulator layers in Schottky contacts”. In : *Journal of Applied Physics* 111.7, p. 073706. DOI : [10.1063/1.3699180](https://doi.org/10.1063/1.3699180).
- NAM, D. et al. (2011). “Strained germanium thin film membrane on silicon substrate for optoelectronics”. In : *Optics Express* 19.27, p. 25866–25872. DOI : [10.1364/OE.19.025866](https://doi.org/10.1364/OE.19.025866).
- NAM, D. et al. (2012). “Electroluminescence from strained germanium membranes and implications for an efficient Si-compatible laser”. In : *Applied Physics Letters* 100.13, p. 131112. DOI : [10.1063/1.3699224](https://doi.org/10.1063/1.3699224).
- NAM, D. et al. (2013). “Strain-Induced Pseudoheterostructure Nanowires Confining Carriers at Room Temperature with Nanoscale-Tunable Band Profiles”. In : *Nano Letters* 13.7, p. 3118–3123. DOI : [10.1021/nl401042n](https://doi.org/10.1021/nl401042n).
- NG, W. T. et al. (1990). “Schottky barrier diode characteristics under high level injection”. In : *Solid-State Electronics* 33.1, p. 39–46. DOI : [10.1016/0038-1101\(90\)90007-2](https://doi.org/10.1016/0038-1101(90)90007-2).
- NISHIMURA, T. et al. (2007). “Evidence for strong Fermi-level pinning due to metal-induced gap states at metal/germanium interface”. In : *Applied Physics Letters* 91.12, p. 123123. DOI : [10.1063/1.2789701](https://doi.org/10.1063/1.2789701).
- (2008). “A Significant Shift of Schottky Barrier Heights at Strongly Pinned Metal/Germanium Interface by Inserting an Ultra-Thin Insulating Film”. In : *Applied Physics Express* 1.5, p. 051406.
- PEOPLE, R. et al. (1985). “Calculation of critical layer thickness versus lattice mismatch for Ge<sub>x</sub>Si<sub>1-x</sub>/Si strained-layer heterostructures”. In : *Applied Physics Letters* 47.3, p. 322–324. DOI : [10.1063/1.96206](https://doi.org/10.1063/1.96206).

## Bibliographie

---

- PROST, M. et al. (2014). “Schottky electroluminescent diodes with n-doped germanium”. In : *Applied Physics Letters* 104.24, p. 241104. DOI : [10.1063/1.4883466](https://doi.org/10.1063/1.4883466).
- RIEDER, G. et al. (1980). “Minority-carrier injection and extraction in *n*-type germanium”. In : *Physical Review B* 21 (2), p. 723–729. DOI : [10.1103/PhysRevB.21.723](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.21.723).
- ROBERTSON, J. (2000). “Band offsets of wide-band-gap oxides and implications for future electronic devices”. In : *Journal of Vacuum Science & Technology B* 18.3, p. 1785–1791. DOI : [10.1116/1.591472](https://doi.org/10.1116/1.591472).
- SANCHEZ-PEREZ, J. R. et al. (2011). “Direct-bandgap light-emitting germanium in tensilely strained nanomembranes”. In : *Proceedings of the National Academy of Sciences* 108.47, p. 18893–18898. DOI : [10.1073/pnas.1107968108](https://doi.org/10.1073/pnas.1107968108).
- SCHARFETTER, D. L. (1965). “Minority carrier injection and charge storage in epitaxial Schottky barrier diodes”. In : *Solid-State Electronics* 8.3, p. 299–311. DOI : [10.1016/0038-1101\(65\)90146-2](https://doi.org/10.1016/0038-1101(65)90146-2).
- SCHMID, M. et al. (2014). “Effect of heavy doping and strain on the electroluminescence of Ge-on-Si light emitting diodes”. In : *Thin Solid Films* 557, p. 351–354. DOI : [10.1016/j.tsf.2013.08.041](https://doi.org/10.1016/j.tsf.2013.08.041).
- SCHRODER, D. (2006). *Semiconductor material and device characterization*. 3rd edition. Piscataway NJ ; Hoboken N.J. : IEEE Press ; Wiley.
- SCHUBERT, E. F. (2006). *History of light-emitting diodes*. 0521823307.
- SCOPECE, Daniele et al. (2014). “Straining Ge bulk and nanomembranes for optoelectronic applications : a systematic numerical analysis”. In : *Semiconductor Science and Technology* 29.9, p. 095012.
- SHAMBAT, G. et al. (2010). “Direct band Ge photoluminescence near 1.6  $\mu\text{m}$  coupled to Ge-on-Si microdisk resonators”. In : *Applied Physics Letters* 97.24, p. 241102. DOI : [10.1063/1.3526732](https://doi.org/10.1063/1.3526732).
- SUESS, M. J. et al. (2013). “Analysis of enhanced light emission from highly strained germanium microbridges”. In : *Nature Photon* 7.6, p. 466–472. DOI : [10.1038/nphoton.2013.67](https://doi.org/10.1038/nphoton.2013.67).
- SUKHDEO, D. S. et al. (2014a). “A Nanomembrane-Based Bandgap-Tunable Germanium Microdisk Using Lithographically-Customizable Biaxial Strain for Silicon-Compatible Optoelectronics”. In : *ArXiv e-prints*.
- SUKHDEO, D. S. et al. (2014b). “Direct bandgap germanium-on-silicon inferred from 5.7% tensile strain”. In : *Photon. Res.* 2.3, A8–A13. DOI : [10.1364/PRJ.2.0000A8](https://doi.org/10.1364/PRJ.2.0000A8).
- SUN, X. et al. (2009). “Room-temperature direct bandgap electroluminescence from Ge-on-Si light-emitting diodes”. In : *Optics Letters* 34.8, p. 1198–1200. DOI : [10.1364/OL.34.001198](https://doi.org/10.1364/OL.34.001198).
- SZE, Simon M. (1981). *Physics of Semiconductor Devices*. Wiley-Interscience.
- TEHERANI, J. T. et al. (2012). “Extraction of large valence-band energy offsets and comparison to theoretical values for strained-Si/strained-Ge type-II heterostructures on relaxed SiGe substrates”. In : *Physical Review B* 85 (20), p. 205308. DOI : [10.1103/PhysRevB.85.205308](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.85.205308).
- TERSOFF, J. (1984). “Schottky Barrier Heights and the Continuum of Gap States”. In : *Physical Review Letters* 52 (6), p. 465–468. DOI : [10.1103/PhysRevLett.52.465](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.52.465).

- THATHACHARY, A. V. et al. (2010). “Fermi level depinning at the germanium Schottky interface through sulfur passivation”. In : *Applied Physics Letters* 96.15, 152108, p. –. DOI : [10.1063/1.3387760](https://doi.org/10.1063/1.3387760).
- THOMPSON, S.E. et al. (2004). “A 90 nm Logic Technology Featuring Strained-Silicon”. In : *IEEE Transactions on Electron Devices* 51.11, p. 1790–1797. DOI : [10.1109/ted.2004.836648](https://doi.org/10.1109/ted.2004.836648).
- WALLE, Ch. G. Van de et al. (1986). “Theoretical calculations of heterojunction discontinuities in the Si/Ge system”. In : *Physical Review B* 34 (8), p. 5621–5634. DOI : [10.1103/PhysRevB.34.5621](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.34.5621).
- WALLE, Ch. G. Van de et al. (2003). “Universal alignment of hydrogen levels in semiconductors, insulators and solutions”. In : t. 423, p. 626–628.
- WERNER, J. et al. (1988). “Origin of the Excess Capacitance at Intimate Schottky Contacts”. In : *Physical Review Letters* 60 (1), p. 53–56. DOI : [10.1103/PhysRevLett.60.53](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.60.53).
- WIRTHS, S. et al. (2014). “Strain engineering for direct bandgap GeSn alloys”. In : *Group IV Photonics (GFP), 2014 IEEE 11<sup>th</sup> International Conference on*, p. 13–14. DOI : [10.1109/Group4.2014.6962004](https://doi.org/10.1109/Group4.2014.6962004).
- XIA, J. S. et al. (2007). “Silicon-based light emitters fabricated by embedding Ge self-assembled quantum dots in microdisks”. In : *Applied Physics Letters* 91.1, p. 011104. DOI : [10.1063/1.2754356](https://doi.org/10.1063/1.2754356).
- ZHANG, Chong et al. (2014). “Low threshold and high speed short cavity distributed feedback hybrid silicon lasers”. In : *Optics Express* 22.9, p. 10202. DOI : [10.1364/oe.22.010202](https://doi.org/10.1364/oe.22.010202).
- ZHOU, Y. et al. (2008). “Alleviation of Fermi-level pinning effect on metal/germanium interface by insertion of an ultrathin aluminum oxide”. In : *Applied Physics Letters* 93.20, p. 202105. DOI : [10.1063/1.3028343](https://doi.org/10.1063/1.3028343).



## Résumé

L'utilisation du germanium dopé de type  $n$  et contraint en tension ouvre la possibilité d'obtenir une source laser monolithique pour la photonique sur silicium. Mes travaux étudient l'injection électrique dans le germanium pour sonder la réalisation d'un laser contraint. J'ai dimensionné les performances des futurs dispositifs en fonction de la contrainte et du dopage. Pour cela, j'ai simulé le transport des porteurs au travers de doubles hétérostructures afin d'obtenir l'inversion de population dans la couche de germanium a été mis en évidence. Un régime de fonctionnement qui permet de réduire de deux ordres de grandeur le courant de seuil d'inversion de population. En appliquant une déformation de 0.9%, avec un dopage de  $4 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ , on peut obtenir des densités de courant de seuil inférieures à  $10 \text{ kA/cm}^2$ . La formation d'hétérostructure est critique. Afin d'étudier expérimentalement l'électroluminescence du germanium, j'ai dû établir des méthodes alternatives d'injection des porteurs à la double hétérostructure GaAs-p/Ge-n/GaAs-n. On utilise des contacts redresseurs (Schottky) sur des couches de germanium dopées de type  $n$ . Cette méthode a été optimisée par la passivation de la surface du germanium avec une couche d'oxyde, qui permet l'amélioration des propriétés électriques et d'émission radiative. On a aussi développé une approche permettant de former des couches de SiGe sur germanium par épitaxie induite par recuit laser pour obtenir une double hétérostructure. J'ai réalisé plusieurs types de cavités en germanium qui permettent de combiner le transfert de la contrainte avec l'injection électrique. J'ai établi le procédé de fabrication pour des structures en guide d'onde et en micropilier en utilisant un transfert de déformation par des couches de SiN contraintes. Un niveau de déformation biaxial de 0.72% pour des cavités en micropilier sous injection électrique a été atteint. L'évaluation de la déformation à partir des spectres d'électroluminescence a été confrontée à des simulations de déformation mécanique par éléments finis, tout en considérant l'injection électrique des porteurs dans la structure.

**Mots clefs** : photonique sur silicium, germanium, injection électrique, transfert de contrainte, SiN, dopage  $n$

## Abstract

Tensile strained and  $n$ -doped germanium can be used as an active material for the realization of an optical source for silicon photonics. I have investigated electroluminescence of device as a function of tensile strain and  $n$ -doping. For that, I have performed modeling of the carrier transport through double heterostructures to obtain population inversion in the germanium layer. An operating point that reduces by two orders of magnitude the population inversion current threshold has been evidenced. For a germanium layer doped at  $4 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$  with a 0.9% biaxial strain, the current density threshold could be reduced below the  $10 \text{ kA/cm}^2$  range. The germanium interface properties are critical. To experimentally investigate electroluminescence in germanium, I had to establish different methods of carrier injection to offer an alternative to the double heterostructure p-GaAs/n-Ge/n-GaAs. We first propose to use a Schottky heterostructure to inject carriers in  $n$ -doped germanium. We show that carrier injection and electroluminescence devices can be optimized by depositing a thin interfacial oxide layer on top of  $n$ -doped germanium. We have also developed an approach to form SiGe layers on germanium by epitaxial laser induced annealing in order to obtain a double heterostructure. I have developed several clean room processes to fabricate germanium cavities which can combine electrical injection and strain transfer, including waveguides and micropilars structures. We show that a biaxial tensile strain up to 0.72% can be transferred in micropillar cavities under electrical pumping. The evaluation of strain level was confronted to finite element simulations of mechanical deformation, taking into account the electrical carrier injection.

**Key words** : silicon photonics, germanium, electrical injection, strain engineering, SiN,  $n$ -doping,