



République Algérienne Démocratique et Populaire
Ministère de l'enseignement supérieur et de la recherche scientifique

Université Abou-Bakr Belkaïd-Tlemcen

Faculté de Technologie

Département de Génie Electrique et Electronique

Mémoire présenté par

Melle ABDELMOUMENE Mestaria

Pour obtenir le diplôme de Magister en Microélectronique

Thème

**Etude et modélisation d'un transistor HEMT
AlGa_N/Ga_N**

Soutenu en Juin 2012 devant la commission d'examen

Président : Mr. GHAF FOUR Kheir-Eddine

Professeur à l'université de Tlemcen

Examineurs :

Mr. BOUAZZA Benyounès

Maître de conférences à l'université de Tlemcen

Mme. BOUAZZA Ahlam

Maître de conférences à l'université de Tlemcen

Directeur : Mr. HAMDOUNE Abdelkader

Maître de conférences à l'université de Tlemcen

Année universitaire : 2011-2012

الدُّعاء

يا رب لا تدعني أصاب بالغرور إذا نجحت و لا أصاب باليأس إذا فشلت، بل ذكّرني دائما أنّ الفشل هو التجربة تسبق النّجاح. يا رب علّمني أنّ التّسامح هو أكبر مراتب القوّة و أنّ حب الانتقام هو أوّل مظاهر الضّعف.

يا رب إذا جرّدتني من المال فاترك لي الأمل، و إذا جرّدتني من النّجاح أترك لي العناد حتّى أتغلّب على الفشل. و إذا جرّدتني من نعمة الصّحة أترك لي نعمة الإيمان. يا رب إذا أسأت إلى النّاس أعطني شجاعة الاعتذار، و إذا أساء إليّ النّاس أعطني شجاعة العفو. يا رب إذا نسيتك فلا تنساني.

REMERCIEMENTS

Tout d'abord, nous remercions ALLAH, le tout puissant, l'omnipotent, pour le courage et la volonté qu'il nous a inspiré.

J'exprime toute ma gratitude à monsieur HAMDOUNE Abdelkader le directeur de cette mémoire pour ces conseils éclairés et attentionnés, sa disponibilité et de m'avoir guidé pendant toute cette recherche en m'incitant à développer plus d'effort. Grace à la confiance qu'il m'a témoignée, j'ai pu mener à bout ce travail, qu'il trouve ici l'expression de toute ma reconnaissance et mes remerciements.

J'exprime ma profonde reconnaissance à monsieur GHAFfour Kheir-Eddine professeur à l'université Abou-Bakr Belkaïd Tlemcen, de m'avoir fait l'honneur de présider le jury de soutenance.

J'adresse mes sincères remerciements à monsieur BOUAZZA Benyounès maître de conférences à l'université Abou-Bakr Belkaïd Tlemcen, membre de mon jury pour m'avoir fait l'honneur d'examiner ce travail.

Je remercie vivement madame BOUAZZA Ahlam maître de conférences à l'université Abou- Bakr Belkaïd Tlemcen, pour avoir accepté de juger ce travail

Je tiens à remercier sincèrement, tous les membres de la faculté de Technologie et aussi tous mes collègues de poste graduation Microélectronique pour leurs encouragements sans oublier mes amies.

A mes parents pour leur confiance et leur soutien.

A mes frères et mes sœurs.

A tous mes amis.

Table des matières

Table des matières

Table des matières	i
Liste des figures	vi
Liste des tableaux	ix
Introduction générale.....	1
Chapitre I : Semi-conducteurs III-V et nitrure de gallium	3
I.1 Introduction.....	3
I.2 Présentation des composés III-V	3
I.2.1 Structure cristalline	7
I.2.2 Saturation de vitesse	8
I.2.3 Phénomène d'ionisation par impact.....	8
I.3 Avantages du GaN	9
I.4 Historique du GaN	10
I.5 Propriétés du GaN.....	11
I.5.1 Propriétés mécanique	12
I.5.2 Propriétés thermiques.....	14
I.5.2.1 Dilatation thermique	14
I.5.2.2 Chaleur spécifique.....	15
I.5.2.3 Température de Debye	16
I.5.2.4 Conductivité thermique.....	16
I.5.3 Propriétés chimiques	17
I.5.4 Structure cristallographique	18
I.5.4.1 Structure de type wurtzite	18
I.5.4.2 Structure de type blende de zinc	19
I.5.5 Structure de bande, propriétés optiques et électroniques du GaN	21
I.5.5.1 Zones de Brillouin.....	21
I.5.5.2 Structure de bandes électroniques.....	22
I.5.5.3 Propriétés optiques.....	26
I.5.5.4 Propriétés de transport électrique.....	29
I.6 Substrats classiques pour la croissance de GaN	30
❖ Le saphir (Al ₂ O ₃)	31
❖ Le carbure de silicium (SiC)	32
❖ Le silicium.....	33

❖ Les substrats reportés – SopSiC et SiCopSiC	33
I.6.1 Substrats utilisés pour la croissance de h-GaN	34
I.6.2 Substrats utilisés pour la croissance de c-GaN	35
I.7 Techniques de croissance.....	37
I.7.1 Croissance en EPVH.....	37
I.7.2 Croissance en MOCVD	38
I.7.2.1 Couches tampon pour la croissance MOCVD	40
I.7.2.2 Etapes de la croissance sur substrat saphir	40
I.7.2.2.1 Phase de nucléation.....	40
I.7.2.2.2 Phase de nitruration du substrat	41
I.7.2.2.3 Croissance du GaN	41
I.7.2.3 Analyse thermodynamique de la croissance de films minces.....	42
I.7.3 Croissance en EJM.....	44
I.7.3.1 Diagramme de croissance de GaN	45
I.7.3.2 Croissance sur substrat saphir	46
I.7.3.3 Analyse thermodynamique de la croissance de films minces.....	46
I.7.4 Avantages et inconvénients des différentes techniques d'épitanie	48
I.7.5 Croissance en ELO	50
➤ Procédé PENDE	51
I.8 Stabilité thermique et réaction de décomposition	52
I.9 Contraintes dans les couches de GaN	55
I.10 Polarisation spontanée et piézoélectrique.....	56
I.11 Problème de relaxation, défauts ponctuels et étendus	58
I.11.1 Défauts ponctuels.....	58
I.11.2 Défauts étendus dans GaN	59
I.11.3 Réduction de la densité de dislocations	60
I.12 Dopage de GaN.....	60
I.12.1 Dopage résiduel	61
➤ Lacunes d'azote.....	61
➤ Atomes en site interstitiel.....	61
➤ Atomes d'impuretés en site substitutionnel	61
I.12.2 Dopage intentionnel	62
I.12.2.1 Dopage de type N.....	63
I.12.2.2 Dopage de type P	63

I.12.3 Self compensation	65
I.13 Propriétés fondamentales de GaN, AlN, InN et leurs alliages.....	66
I.14 Conclusion	72
Références du chapitre I.....	73
Chapitre II : Transistor HEMT AlGaN/GaN.....	80
II.1 Introduction	80
II.2 Etude d'une hétérojonction.....	80
II.2.1 Définition de l'hétérojonction.....	80
II.2.2 Diagramme des bandes d'une hétérojonction.....	81
II.2.3 Fonctionnement physique d'une hétérojonction.....	82
➤ Hétérojonction à l'équilibre thermodynamique	82
II.3 Hétérostructure AlGaN/GaN	87
II.3.1 Hétérostructure classique AlGaN/GaN.....	87
II.3.2 Hétérostructure avec couche espaceur AlGaN/AlN/GaN.....	90
II.3.3 Le gaz électronique à deux dimensions	92
II.3.3.1 Polarisation spontanée	92
II.3.3.2 Polarisation piézoélectrique.....	93
II.3.3.3 Effet du taux d'aluminium dans la barrière d'AlGaN sur la densité de charges superficielles.....	95
II.4 Le transistor HEMT	96
II.4.1 Historique du transistor HEMT	96
II.4.2 Structure d'un HEMT	98
II.5 Le transistor HEMT AlGaN/GaN.....	101
II.5.1 Principe de fonctionnement du HEMT AlGaN/GaN	101
II.5.2 Caractéristiques électriques du HEMT	103
II.5.2.1 Propriétés fondamentales.....	103
II.5.2.2 Modèle petit-signal d'un HEMT	104
II.5.2.2.1 Eléments intrinsèques	105
II.5.2.2.2 Eléments extrinsèques	107
II.5.2.3 Caractéristiques électriques et figures de mérite	108
II.5.2.3.1 Caractéristiques statiques $I_{ds} V_{ds}$	108
II.5.2.3.2 Figures de mérite pour un fonctionnement en hautes-fréquences	109
➤ La fréquence de transition	109
➤ La fréquence maximale d'oscillation	110

➤ Le facteur de bruit	110
II.5.2.3.3 Figures de mérite pour un fonctionnement en puissance.....	110
➤ La densité de puissance de sortie	110
➤ Le gain en puissance	110
➤ Le rendement en puissance	111
II.5.3 La fonction de transfert.....	111
II.5.4 Comportement thermique	112
II.5.5 Limitations du HEMT AlGaIn/GaN	114
II.5.5.1 Les Effets de pièges	115
➤ Les pièges responsables du « gate-lag ».....	115
➤ Les pièges responsables du « drain-lag »	116
II.5.5.2 Effet de la température.....	116
II.5.6 Influence positive de la passivation.....	119
II.6 Les contacts	120
II.6.1 Contact Schottky.....	121
II.6.2 Contacts ohmique	121
II.7 Etat de l’art	122
II.8 Conclusion	124
Références du chapitre II.....	125
Chapitre III : Simulation d’un HEMT AlGaIn/GaN.....	131
III.1 Introduction	131
III.2 Structure du HEMT AlGaIn/GaN étudié et paramètres physiques.....	132
III.3 Simulation par le logiciel SILVACO	133
III.4 Maillage.....	136
III.5 Influence des paramètres technologiques.....	138
III.5.1 Variation de la largeur L_g	138
III.5.2 Variation de la distance L_{gs}	138
III.5.3 Variation du taux d’aluminium	139
III.5.4 Variation de la largeur de la couche donneuse.....	141
III.5.5 Variation de dopage de la couche donneuse	141
III.5.6 Variation de dopage de la couche tampon.....	143
III.6 Etude statique	144
III.6.1 Caractéristiques I_{ds} en fonction de V_{ds}	144
III.6.2 Fonction de transfert I_{ds} en fonction de V_{gs}	146

III.7 Etude dynamique.....	148
III.7.1 Fréquence de transition	148
III.7.2 Fréquence maximale	148
III.7.3 Fréquence de transition et maximale en fonction de la tension grille-source	150
III.7.4 Fréquence de transition et maximale en fonction de la tension drain-source	151
III.7.5 Comportement transitoire.....	152
III.7.5.1 Gate lag	152
III.7.5.2 Drain lag	153
III.8 Influence de la température sur les caractéristiques de HEMT AlGaIn/GaN.....	154
III.8.1 Caractéristique électriques statiques I_{ds} - V_{ds} -T	154
III.8.2 Fonction de transfert I_{ds} - V_{gs} -T.....	155
III.8.3 Fréquence de transition et maximale en fonction de la température	158
III.9 Conclusion.....	160
Conclusion générale et perspectives.....	161

Liste des figures

Liste des figures

Figures I.1 a), b) : La variation du gap en fonction du paramètre de maille.....	6
Figure I.2 : Structure cristallines possibles pour les semi-conducteurs III-V.....	7
Figure I.3 : phénomène d'ionisation par choc (ei-: électron à l'état initial, ef : électron à l'état final, es : électron secondaire créé, es+: trou créé).....	9
Figure I.4 : Conductivités thermiques de GaN et d'autres composés importants.....	16
Figure I.5 : Maille cristalline de GaN dans sa phase wurzite.	18
Figure I.6 : Polarités gallium et azote dans GaN hexagonal.....	19
Figure I.7 : Structure zinc blende du GaN.	20
Figure I.8 : Seconds voisins dans les structures wurzite et blende de zinc.....	20
Figure I.9 : Les zones de Brillouin des deux structures : (a) wurzite et (b) zinc blende.	22
Figure I.10 : Structures de bandes électroniques : (a) wurzite ; (b) blend.....	23
Figure I.11 : (a) Eclatement au sommet de la BV sous l'influence du champ cristallin et du couplage spin-orbite. (b et c) Structures de bandes schématiques autour du haut de la BV.	25
Figure I.12 : Mobilité, par effet Hall, en fonction de la concentration en électrons à 300K pour un certain nombre d'échantillons réalisés par MOVPE et MBE.(○ : GaNn.i.d. ● : GaN dopé Si ou Ge).	30
Figure I.13 : Projection des plans de base des cations du saphir et de h-GaN dans l'orientation prise lors de l'épitaxie.	34
Figure I.14 : Schéma synoptique d'un bâti de MOCVD.	39
Figure I.15 : Croissance par l'épitaxie par jets moléculaires.	44
Figure I.16 : Régimes de croissance de GaN pour un flux d'azote de 0.28 monocouche (mc)par seconde.	45
Figure I.17 : Principe de la technique ELO-1.	50
Figure I.18 : Lignes de dislocations.....	50
Figure I.19 : Principe du procédé PENDEO.	51
Figure I.20 : Observation au MEB d'une croissance par PENDEO sur substrat 6H-SiC.	52
Figure I.21 : (a) Energie libre de Gibbs de GaN et de ses constituants en fonction de la température, selon J. Karpinski et al. (1kcal=4.18kJ). (b) Pressions d'équilibre des phases Ga(l)-N2-GaN(s) en fonction de l'inverse de la température selon I. Grzegory (1bar=0.1MPa).	53
Figure I.22 : Champs de polarisations piézoélectrique et spontanée.	57
Figure I.23 : Structures de h-GaN et c-GaN, à l'équilibre et sous contrainte.....	58
Figure I.24 : Images TEM de la section de couches épitaxiées de GaN.....	59
Figure I.25 : Image TEM de 5 puits quantiques dans la couche tampon d'une SCH.....	60

Figure I.26 : Energies de formation de défauts en fonction du niveau de Fermi pour tous défauts natifs dans GaN sous conditions riche en azote. $E_F = 0$ correspond au sommet de la bande de valence.	64
Figure II.1 : Les trois types d'hétérojonctions entre deux semiconducteurs A et B ayant des énergies de bande interdite $E_g(A)$ et $E_g(B)$. E_c et E_v désignent la bande de conduction et la bande de valence. ΔE_c et ΔE_v sont les discontinuités de bande de conduction et de valence.	81
Figure II.2 : Diagramme des bandes d'une hétérojonction à l'équilibre.	81
Figure II.3 : Diagramme de bande d'une hétérojonction en polarisation directe.	82
Figure II.4 : Champ et potentiel électriques à l'interface d'une hétérojonction.	84
Figure II.5 : Niveaux d'énergie d'AlGaN et GaN, mis en jeu dans l'hétérojonction.	87
Figure II.6 : Niveaux d'énergie des matériaux à l'hétérojonction pour une tension appliquée nulle.	89
Figure II.7 : Niveaux d'énergie des matériaux à l'hétérojonction pour une tension appliquée non nulle.	90
Figure II.8 : Structure épitaxiale d'une hétérostructure AlGaN/AlN/GaN.	91
Figure II.9 : Diagramme de bande d'énergie de conduction et distribution des charges dans une hétérostructure AlGaN/AlN/GaN.	91
Figure II.10 : Polarisation spontanée et piézoélectrique dans une couche d'AlGaN (face Ga), en tension sur une couche de GaN.	93
Figure II.11 : Structure d'un transistor HEMT.	98
Figure II.12 : Influence de la tension de commande sur le diagramme de bande.	102
Figure II.13 : Topologie usuelle d'un HEMT AlGaN/GaN.	103
Figure II.14 : Etalement du champ électrique dans le canal pour deux températures différentes.	104
Figure II.15 : Origine physique des éléments du modèle électrique petit signal du HEMT.	105
Figure II.16 : Modèle électrique petit signal simplifié du HEMT.	105
Figure II.17 : caractéristiques $I(V)$ classiques d'un HEMT.	109
Figure II.18 : Caractéristique de transfert $I_{ds}(V_{gs})$ mesurée d'un HEMT AEC1388.	111
Figure II.19 : Distribution spatiale de la température en régime de fonctionnement, pour 3 substrats différents (A : SiC, B : Si, C : Saphir).	113
Figure II.20 : Mise en évidence des effets thermiques sur une caractéristique $I(V)$ en régime continu.	114
Figure II.21 : Réseau $I_{ds} V_{ds}$ obtenus par des mesures en statique et en impulsions.	118
Figure II.22 : Schéma d'un transistor avec technologie de grille de type « Field-plate ».	120
Figure III.1 : Structure générale du HEMT AlGaN/GaN étudié.	133

Figure III.2 : Structure du transistor HEMT AlGa _N /Ga _N simulé.	135
Figure III.3 : Maillage du transistor HEMT AlGa _N /Ga _N	137
Figure III.4 : La variation du courant I_{dsmax} en fonction la largeur de grille L_g	138
Figure III.5 : La variation du courant I_{dsmax} en fonction la distance Grille-Source.	139
Figure III.6 : Evolution du courant de drain en fonction de la tension Drain-Source pour différents taux d'aluminium à V_{gs} nulle.....	140
Figure III.7 : Evolution du courant de drain en fonction de la tension Drain-Source pour différentes épaisseurs de lala couche donneuse, à V_{gs} nulle.....	141
Figure III.8 : Evolution du courant de drain en fonction de la tension Drain-Source pour différentes valeurs de dopage de la couche donneuse AlGa _N , à V_{gs} nulle.....	142
Figure III.9 : Evolution du courant de drain en fonction de la tension Drain-Source pour différentes valeurs de dopage de la couche tampon Ga _N à V_{gs} nulle.....	143
Figure III.10 : Caractéristique I_{ds} en fonction de V_{ds} à des tensions V_{gs} constantes.	145
Figure III.11 : Evolution du courant de drain en fonction de la tension grille, à $V_{ds}=20V$	147
Figure III.12 : Evolution du gain en courant, en fonction de la fréquence.	148
Figure III.13 : Evolution du gain en puissance, en fonction de la fréquence.	149
Figure III.14 : Evolution de la fréquence de transition en fonction de la tension Grille-Source.	150
Figure III.15 : Evolution de la fréquence maximale en fonction de la tension Grille-Source.	150
Figure III.16 : Evolution de la fréquence de transition en fonction de la tension Drain-Source.	151
Figure III.17 : Evolution de la fréquence maximale en fonction de la tension Drain-Source.	151
Figure III.18 : le courant drain en régime transitoire Gatelag.	153
Figure III.19 : le courant drain en régime transitoire Drainlag.....	154
Figure III.20 : Caractéristiques I_{ds} - V_{ds} en fonction de la température, à V_{gs} nulle.....	155
Figure III.21 : Caractéristiques I_{ds} - V_{gs} en fonction de la température à $V_{ds} = 20V$	156
Figure III.22 : Evolution de la transconductance en fonction de la température.....	158
Figure III.23 : Evolution de la fréquence de transition en fonction de la température.	158
Figure III.24 : Evolution de la fréquence maximale en fonction de la température.	159

Liste des tableaux

Liste des tableaux

Tableau I.1 : Les principaux éléments des rangées III, IV et V, qui constituent les semiconducteurs.....	4
Tableau I.2 : Propriétés des principaux composés binaires III-V à 300K.	4
Tableau I.3 : Paramètres de maille des trois nitrures.	5
Tableau I.4 : Constantes d'élasticité C_{ij} expérimentales, et module de compressibilité volumique B théorique, pour GaN de type wurtzite.	13
Tableau I.5 : Coefficients de dilatation thermique de GaN et divers substrats selon Krukowski et al.	15
Tableau I.6 : Paramètres de la structure wurtzite idéale et réelle de GaN.	19
Tableau I.7 : Couplage spin-orbite et champ cristallin, pour GaN.	24
Tableau I.8 : Coefficients de Sellmeier pour l'indice de réfraction ordinaire, dans h-GaN et h-AlN.	28
Tableau I.9 : Les paramètres de maille et les coefficients de dilatation thermique de différents substrats employés pour la croissance de h-GaN.	35
Tableau I.10 : Désaccords thermoélastiques et de maille entre les différents substrats utilisés et les trois nitrures dans la phase cubique.	36
Tableau I.11 : Avantages et inconvénients de l'EPVH, de la MOCVD, et de la MBE, pour la croissance de GaN.....	49
Tableau I.12 : La polarisation spontanée et les coefficients d'élasticité et piézoélectriques.....	57
Tableau I.13 : Paramètres de GaN, AlN et InN de type wurtzite; paramètres de maille, coefficients élastiques et de dilatation thermique.	71
Tableau II.1 : Températures électroniques et de réseau, moyennes pour une TLM sur 3 substrats différents.	113
Tableau II.2 : Coefficient thermique en fonction du dopage.	117
Tableau II.3 : Etat de l'art des transistors HEMT sur nitrure de gallium.	123
Tableau III.1 : Epaisseurs et dopages des différentes couches du HEMT.....	132
Tableau III.2 : la tension de pincement V_{gs0} et la transconductance en fonction de la température.	157

Introduction générale

Introduction générale

Durant ces dernières années, le développement des composées III-V a été spectaculaire. En effet, ces composés présentent des performances bien supérieures à celles des semiconducteurs plus classiques comme le silicium. Ce sont des matériaux de choix pour toutes les applications microélectroniques et optoélectroniques. Or les caractéristiques de ces matériaux et de leurs composants sont sensibles à l'état de surface et à l'interface. L'étude du fonctionnement des différents types de composants électroniques passe par une maîtrise préalable des phénomènes physiques régissant les propriétés des électrons dans le semiconducteur. Il est donc essentiel de comprendre les mécanismes de formation des hétérostructures et des nanostructures pour maîtriser au mieux la technologie des composants réalisés, à l'heure où les nanotechnologies ouvrent de nouvelles voies.

En effet, l'intérêt aux composées III-V tels que l'arséniure de gallium (GaAs) ou le nitrure de gallium (GaN) a été spectaculaire. Cependant, de nos jours, la microélectronique et l'optoélectronique ne cessent de se développer et de nombreuses études sont effectuées afin de disposer de semiconducteurs toujours plus performants.

Le nitrure de gallium (GaN) admet une bande interdite large et directe, une grande stabilité chimique et thermique, de très bonnes propriétés mécaniques, et des propriétés physiques très intéressantes pour opérer en haute température, haute puissance et haute fréquence. Il est très prometteur pour des applications en microélectronique et en optoélectronique. Allié éventuellement autres composés III-V, il permet de réaliser divers dispositifs pour un très vaste domaine d'applications, entre autres les transistors HEMT.

Outre ces propriétés physiques, GaN présente la particularité d'être un matériau pyroélectrique et piézoélectrique. Cette spécificité permet de réaliser des transistors HEMT type AlGaIn/GaN dont la densité d'électrons à l'interface peut aisément dépasser 1.10^{13}cm^{-2} sans dopage intentionnel de la barrière AlGaIn.

En contre partie, les procédés de fabrication utilisés pour les HEMT AlGaIn/GaN sont complexes et entraînent la formation de nombreux défauts cristallins. Des effets parasites de fonctionnement sont induits par des mécanismes physiques qui pénalisent le transport des porteurs dans la structure. A l'heure actuelle, ces effets parasites ont une influence négative sur les performances de ces transistors. Ils sont principalement liés aux pièges à électrons induits par des impuretés présentes dans le matériau ou des défauts cristallins.

Les travaux présentés dans ce manuscrit sont consacrés à l'étude et à la modélisation d'un transistor HEMT AlGaIn/GaN. Ce dernier est utilisé dans les applications militaires,

Introduction générale

spatiales ou civiles, dans le domaine des hautes fréquences. Afin d'améliorer les performances de ces transistors, il est nécessaire de déterminer les mécanismes de transport des porteurs.

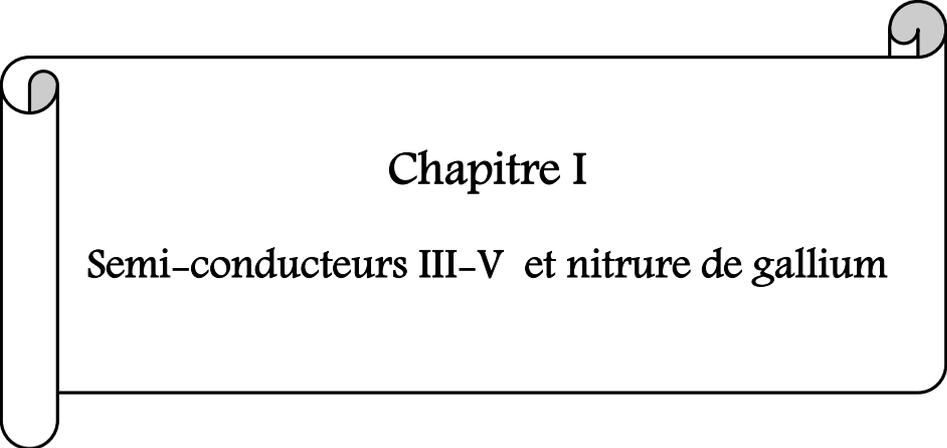
Dans cet objectif, la simulation physique de type TCAD, avec le logiciel SILVACO de Synopsis, est utilisée. Il est donc nécessaire de définir les modèles qui décrivent au mieux les mécanismes impliqués dans le transport des porteurs tout en prenant en compte les spécificités des HEMTs et des matériaux nitrurés (telles que les phénomènes de polarisations spontanée et piézoélectrique). Notre mémoire se décompose en trois parties :

Dans le premier chapitre ; nous traitons les semiconducteurs III-V d'une manière générale, et le nitrure de gallium particulièrement. Nous exposons toutes ses propriétés physiques, optiques mécaniques et thermiques dans ses deux phases, ses différentes techniques d'élaboration, son dopage et ses défauts. Nous étudions alors les propriétés fondamentales de GaN, AlN, InN et leurs alliages.

Dans le deuxième chapitre ; nous menons une étude théorique détaillée sur le transistor à hétérostructure HEMT AlGaIn/GaN : fonctionnement, avantages, défauts et limites.

Au troisième chapitre, nous présentons la structure épitaxiale du HEMT implémentée pour la simulation, et les hypothèses simplificatrices. Puis nous simulons l'influence des paramètres internes du transistor sur ses performances, ainsi que les caractéristiques statiques et dynamiques.

Enfin ; nous terminons notre mémoire par une conclusion générale et des perspectives.



Chapitre I

Semi-conducteurs III-V et nitrure de gallium

I. Semi-conducteurs III-V et nitrure de gallium

I.1 Introduction

Les composés III-N présentent un intérêt fondamental pour les applications en électronique de puissance, haute température et haute fréquence ; ainsi qu'en optoélectronique dans les domaines spectraux qui couvrent tout le spectre visible aussi bien que l'ultraviolet proche et l'ultraviolet lointain (LEDs, Lasers, Photodétecteurs), du fait de leurs exceptionnelles propriétés électroniques, physiques et optiques.

Dans ce premier chapitre, nous présentons d'abord les composés III-V, avec leurs structures cristallines. Nous expliquons aussi le phénomène de saturation de la vitesse des porteurs libres et le phénomène d'ionisation par impact. Après ; nous donnons un bref historique du nitrure de gallium, et nous présentons ses avantages sur les autres semi-conducteurs III-V. Puis ; nous donnons ses principales propriétés physico-chimiques : mécaniques, thermiques, chimiques, structurales, optiques et électroniques. Nous citons aussi les techniques de sa croissance et les différents substrats. Enfin, nous donnons les propriétés fondamentales de GaN, InN, AlN et leurs alliages.

I.2 Présentation des composés III-V

Les semi-conducteurs de la famille des matériaux III-V sont constitués d'un élément de la colonne IIIA et d'un autre de la colonne VA du tableau périodique de Mendeleïev (tableau I.1) qui regroupe un extrait de cette classification (les chiffres en haut et en bas représentent respectivement le nombre atomique et la masse atomique). Les énergies de leurs bandes interdites sont inférieures à $100k_B T$. Ils ont prouvé leur importance dans tous les domaines de l'électronique et l'optoélectronique où ils trouvent un champ d'application très vaste.

En combinant les éléments III et V, il est possible de former des composés binaires (GaN, GaAs, ...), ternaires ($Al_x Ga_{1-x} N$, GaInAs, ...) et quaternaires (AlGaInN, GaInAsP, ...) dont les propriétés physiques, électriques et optiques sont diverses et peuvent être ajustées avec le choix des éléments et des compositions. Parmi eux, les semi-conducteurs nitrurés tels que le nitrure de gallium (GaN), le nitrure d'aluminium (AlN), le nitrure d'indium (InN) et leurs composés ternaires et quaternaires.

Dans une même colonne ; quand la masse atomique augmente (du haut vers le bas), l'élément considéré donne un composé à bande interdite plus petite, et une masse effective

Chapitre I : Semi-conducteurs III-V et nitrure de gallium

d'électrons plus faible. Par exemple, les composés contenant du bore ou de l'aluminium sont moins intéressants que le gallium ou l'indium pour l'électronique rapide.

IIIA	IVA	VA
$10.81^{5}B$	$12.01^{6}C$	$14.01^{7}N$
$26.98^{13}Al$	$28.09^{14}Si$	$30.97^{15}P$
$69.74^{31}Ga$	$72.59^{32}Ge$	$74.92^{33}As$
$114.82^{49}In$	$118.69^{50}Sn$	$121.75^{51}Sb$

Tableau I.1 : Les principaux éléments des rangées III, IV et V, qui constituent les semiconducteurs.

Nous répertorions dans le tableau I.2, quelques paramètres essentiels des principaux composés binaires III-V, à 300K [1]. E_g est la largeur de la bande interdite ; m^* et m_0 sont respectivement la masse effective et la masse de l'électron dans le vide, du bas de la bande de conduction ; μ est leur mobilité électronique à faible champ ; a est le paramètre de maille.

Composé III-V	$E_g(eV)$	m^*/m_0	$\mu(cm^2/V.S)$	$a(A)$
BN	7.5			3.6150
AlP	2.45			5.4510
AlAs	2.16			5.6605
AlSb	1.58	0.12	200	6.1355
BP	2.0			4.5380
GaN	3.36	0.19	380	3.189
GaP	2.26	0.82	110	5.4512
GaAs	1.42	0.067	8500	5.6533
GaSb	0.72	0.042	5000	6.0959
InP	1.35	0.077	4600	5.8686
InAs	0.36	0.023	33000	6.0584
InSb	0.17	0.0145	80000	6.4794

Tableau I.2 : Propriétés des principaux composés binaires III-V à 300K.

Des Semi-conducteurs binaires (Tableau I.2) comme l'arséniure de gallium (GaAs), mais également les alliages ternaires et quaternaires qui en découlent, présentent des

Chapitre I : Semi-conducteurs III-V et nitrure de gallium

propriétés très intéressantes pour un ensemble d'applications en particulier en hyperfréquence de puissance, mais aussi pour des capteurs, des émetteurs planaires ou encore en optoélectronique pour les LEDs ou les lasers. Ces alliages ternaires et quaternaires sont réalisés par substitution partielle de l'un des éléments par un élément de la même colonne. On sait, par exemple, obtenir des alliages du type AlGaAs, InGaAs, InAlAs, ou du type AlGaIn, les filières sont adaptées en maille.

La mobilité μ d'un électron, relie sa vitesse v_0 au champ électrique E appliqué sur le semi-conducteur, $v_0 = \mu E$. La mobilité de ces alliages binaires varie d'un matériau à un autre. La mobilité augmente avec la diminution de la masse effective m^* : selon le modèle de Drude, la mobilité s'exprime en fonction de la masse effective $\mu = q\tau/m^*$ (voir tableau II.2), où q et τ sont respectivement la charge électronique et le temps de transit.

Pour les trois nitrures qui nous intéressent le plus ; nous préférons donner les paramètres de maille à part, dans le tableau I.3. Pour la phase cubique, les valeurs diffèrent beaucoup selon les auteurs ; nous en donnons les plus communes.

	GaN	AlN	InN	Références
Phase cubique (ZB)	a= 4.50 Å° a= 4.53 Å° a=4.452 Å°	a= 4.38 Å° a=4.3996 Å° a= 4.34 Å°	a= 4.98 Å° / a=4.981 Å°	[Strite'1991; Xu'2000 ; Meyer'2003] [Powell'1993 ; Okumura'1998] [Pugh'1991]
Phase hexagonale (WZ)	a=3.189 Å° c=5.185 Å°	a= 3.112 Å° c= 4.982 Å°	a=3.548 Å° c=5.760 Å°	[Strite'1992]

Tableau I.3 : Paramètres de maille des trois nitrures.

Pour un élément donné du groupe V ; lorsque le nombre atomique de l'élément du groupe III augmente, la constante de maille diminue. Par conséquent ; l'énergie du gap et la masse effective des porteurs libres diminuent. Il en résulte alors une augmentation de la mobilité de ces porteurs.

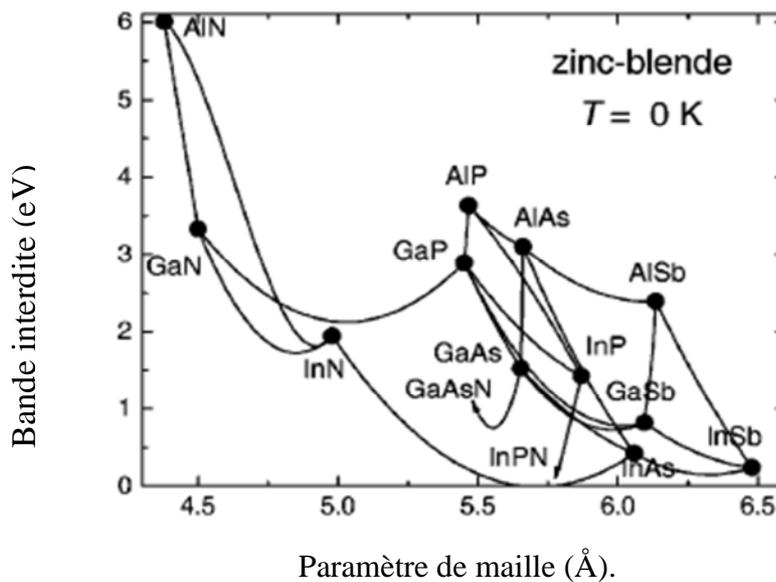
Pour un élément donné du groupe III ; quand le nombre atomique de l'élément V augmente, la constante de maille augmente et la masse effective des porteurs libres diminue. Cette règle est valable pour les semi-conducteurs III-V classiques ; mais elle n'est plus respectée par le nitrure de gallium.

Dans les figures I.1 (a) [2] et (b) [3]; nous donnons la variation de la bande interdite en fonction du paramètre de maille. Dans la première figure, sont représentés les composés III-V

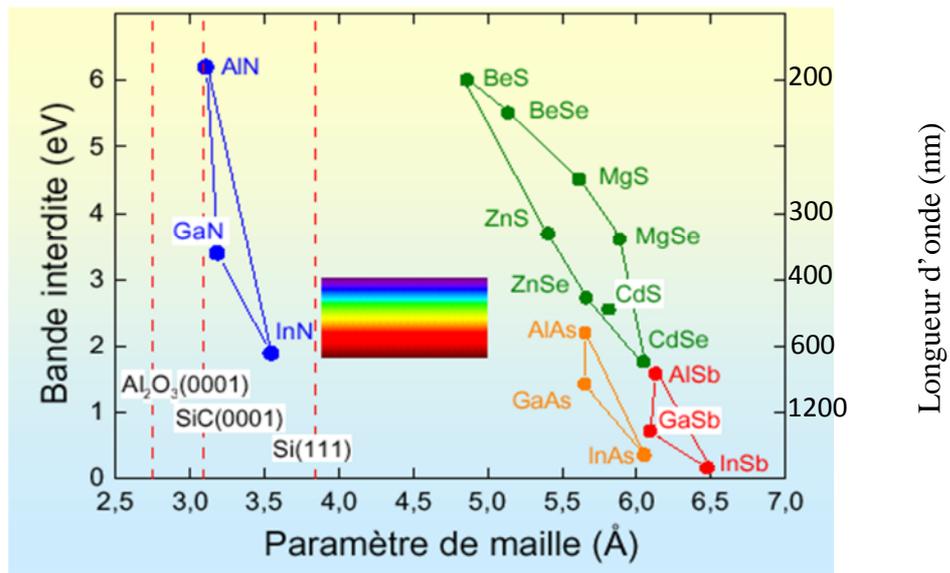
de phase cubique, à 0K. Les lignes entre les composés représentent l'évolution du gap et du paramètre cristallin en fonction de la composition. Un point anguleux indique une transition entre un gap direct et un gap indirect. Ce diagramme est utile dans le sens où il permet de connaître la composition de tout alliage ternaire susceptible d'être déposé en couche mince par épitaxie, sur un substrat binaire comme par exemple GaAs ou InP.

Dans la figure b); nous trouvons des semi-conducteurs II-VI et III-V, avec les différentes couleurs qu'ils sont capables d'émettre.

a) Les semi- conducteurs III-V cubiques.



b) Les semi- conducteurs II-VI et III-V, à 300K.



Figures I.1 a), b) : La variation du gap en fonction du paramètre de maille.

I.2.1 Structure cristalline

La plupart des matériaux III-V cristallisent sous deux formes : blende de zinc (ZnS) ou sphalérite (cubique), et hexagonale ou wurtzite. La majeure partie des matériaux III-V cristallise dans la structure dite blende de zinc (ZnS). Cet arrangement est constitué de deux sous-réseaux cubiques à faces centrées, l'un étant constitué d'un élément III et l'autre d'un élément V, les deux sous réseaux étant décalés du quart de la diagonale principale, c'est-à-dire $a \times \sqrt{3}/4$ [111], où a représente le paramètre de maille du matériau (figure I.2).

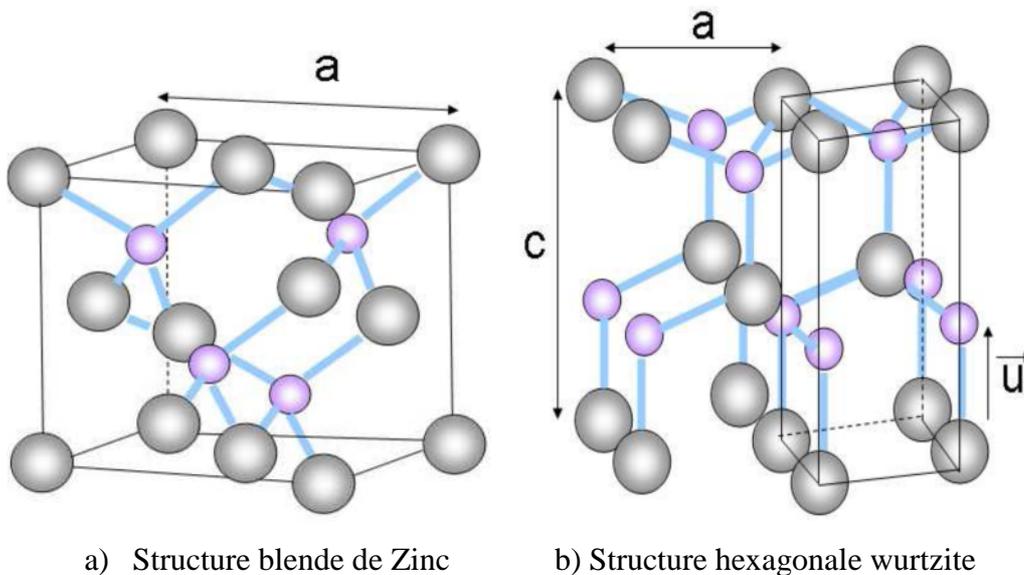


Figure I.2 : Structure cristallines possibles pour les semi-conducteurs III-V.

Dans cette configuration, les liaisons atomiques sont en général de type covalent, c'est-à-dire que les deux atomes voisins mettent leurs électrons en commun, comme dans le cas du silicium, qui cristallise sous la structure dite diamant : chaque atome est entouré de quatre premiers voisins formant un tétraèdre. Chacun des deux atomes participant à la liaison, apporte un électron à cette liaison qui est donc saturée. Dans le cas des III-V, une des quatre liaisons reçoit deux électrons de l'élément V.

Cependant ; pour la famille des nitrures, la structure la plus stable thermodynamiquement, à température ambiante et pression atmosphérique, est la structure hexagonale. La stabilité de cette configuration est due à la petite taille de l'anion [4].

Dans la configuration hexagonale, la structure du cristal est définie par les paramètres a et c , correspondant respectivement à la longueur du côté de la base hexagonale et à la hauteur du prisme (figure I.1 b)). Un vecteur interne \vec{u} permet ensuite de caractériser la distance anion-cation selon l'axe [0001].

Dans le cas de la famille des nitrures, les liaisons présentent des propriétés partiellement ioniques. Ce type de liaison correspond au transfert d'un ou de plusieurs électrons d'un atome vers un atome voisin. Ces électrons sont fortement liés aux ions dans les solides ioniques.

I.2.2 Saturation de vitesse

Dans certains matériaux comme GaAs et InP, les minima des vallées satellites sont séparés du minimum de la vallée Γ par une énergie de l'ordre de quelques dixièmes d'électronvolt. Ils sont donc accessibles à des électrons ayant gagné de l'énergie par un quelconque mécanisme. Dans d'autres matériaux, en particulier GaN, l'énergie de séparation est grande ; il faut alors y appliquer un grand champ électrique pour que les électrons puissent gagner ces vallées satellites. Considérons par exemple, un ensemble d'électrons possédant une énergie ε au voisinage du minimum Γ ; leur masse effective y est faible et leur mobilité élevée. S'ils gagnent de l'énergie en s'échauffant dans un champ électrique intense, ils vont monter dans la vallée Γ et peuvent être portés à un niveau énergétique égal ou supérieur au minimum de L ou X. Une collision avec un phonon, leur communiquant le complément d'impulsion nécessaire, peut alors les transférer dans l'une des vallées satellites. L'énergie cinétique de ces électrons va alors diminuer de l'énergie de transfert $\Delta\varepsilon$ et leur masse effective augmentera ; ils sont alors brusquement ralentis. Ce phénomène est à l'origine de la saturation de vitesse de transport des électrons, observée dans les matériaux III-V, lorsque le champ électrique E augmente.

Dans certains matériaux comme GaAs et InP, les minima des vallées satellites sont séparés du minimum de la vallée Γ par une énergie de l'ordre de quelques dixièmes d'électronvolt. Ils sont donc accessibles à des électrons ayant gagné de l'énergie par un quelconque mécanisme.

I.2.3 Phénomène d'ionisation par impact

L'ionisation par impact ou par choc apparaît dans un matériau, pour des champs électriques intenses. En effet ; un électron qui dérive dans un matériau sous l'effet d'un champ électrique, gagne de l'énergie sous forme cinétique et la transmet progressivement au cristal par le biais des nombreux chocs qu'il effectue avec les phonons du réseau. Ce processus assure la dissipation thermique de l'énergie potentielle perdue par les électrons. Cependant ; si le champ électrique est suffisamment intense, certains électrons pourront, au cours d'un vol

libre, acquérir une énergie telle que leur impact sur un atome du réseau cristallin aboutit à la rupture d'une liaison et à la création d'une paire électron-trou. Ce processus, illustré sur la figure I.3, peut devenir cumulatif et conduire au phénomène d'avalanche. Cet effet est d'autant plus important que le gap du matériau est plus petit (l'énergie de seuil de l'ionisation par choc est approximativement égale à $3/2 E_g$).

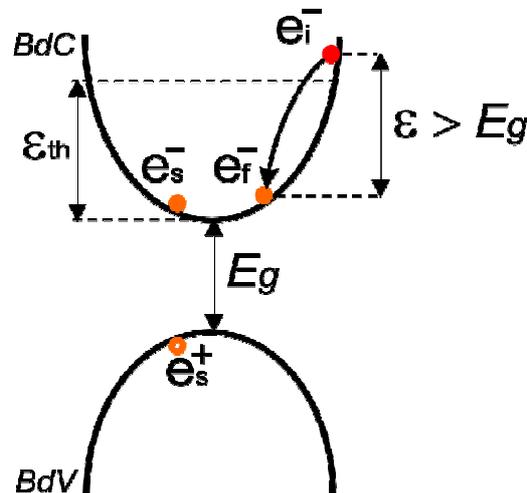


Figure I.3 [5] : phénomène d'ionisation par choc (e_i^- : électron à l'état initial, e_f^- : électron à l'état final, e_s^- : électron secondaire créé, e_s^+ : trou créé).

I.3 Avantages du GaN

Le GaN a l'avantage d'avoir une bande interdite directe et large de 3,4 eV à 300K. De plus ; par le fait de sa structure cristalline wurtzite et sa forte ionicité, il exhibe une variété de propriétés qui n'est pas présente(ou d'une façon moins importante) dans les semiconducteurs conventionnels. L'élément principal est l'effet de la polarisation spontanée et de la polarisation piézoélectrique dont plusieurs études expérimentales et théoriques ont révélé leurs importances dans les performances des composants à base d'hétérostructures de nitrures [6].

Un champ de claquage élevé associé à un faible taux d'ionisation par impact, permet d'obtenir des puissances de sortie élevées (8 fois plus par rapport aux technologies III-V GaAs).

La forte conductivité thermique du GaN ($1.3 \text{ W.cm}^{-1}.\text{K}^{-1}$ contre $0.5 \text{ W.cm}^{-1}.\text{K}^{-1}$ pour le GaAs) et de certains substrats (diamant $>9 \text{ W.cm}^{-1}.\text{K}^{-1}$, SiC : $5 \text{ W.cm}^{-1}.\text{K}^{-1}$) est avantageuse pour l'évacuation des calories.

De plus, des densités d'électrons supérieures à 10^{13} cm^{-2} (gaz d'électrons à 2 dimensions '2DEG' avec hétérostructure AlGaN) grâce à de fortes polarisations spontanée et piézoélectrique sans dopage intentionnel, sont un atout pour l'amplification des signaux.

Une autre figure importante de mérite pour les dispositifs électroniques et les détecteurs à base de GaN : c'est leur grande vitesse électronique de saturation qui est de l'ordre de $3 \times 10^7 \text{ cm.s}^{-1}$. On note aussi que les III-N forment des hétérostructures ayant un gap direct, et des contacts ohmiques meilleurs que les autres semi-conducteurs III-V. Les composés III-N sont alors très prometteurs.

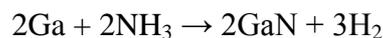
GaN présente de nombreuses applications vouées à un grand développement, dont certaines sont déjà commercialisées [7-8] :

les LED bleues ou vertes pour l'affichage couleur ou la signalisation, les LED blanches pour l'éclairage, les LD bleues ou violettes pour l'impression (laser) ou le stockage optique de données (CD et DVD), les détecteurs UV "solar blind" pour la détection des incendies, l'identification ou le guidage des missiles, ou encore le dosage personnel des UV, et enfin les transistors "haute fréquence – haute puissance" pour la communication ou les radars fonctionnant à haute température (applications spatiales).

I.4 Historique du GaN

Les nitrures d'éléments III ont été synthétisés pour la première fois entre la fin des années 1920 et le début des années 1930 par Tiede *et al.* [9] et Johnson *et al.* [10].

Johnson a décrit la conversion du gallium (Ga) sous forme de métal en nitrure de gallium (GaN) dans un cours d'ammoniac (NH_3), selon la réaction :



- Les premiers cristaux étaient produits en 1932, à haute température (1173-1273K) soit (900-1000°C) [5].
- Tiede et al. ont synthétisé AlN à partir de l'aluminium (Al) métallique.
- Par la même technique ; Juza et hahn ont obtenu InN à partir de $\text{InF}_6(\text{NH}_4)_3$.

Presque tous les échantillons en poudre de GaN et AlN étaient synthétisés en plaçant un matériau convenable dans un four, sous un flux d'ammoniac. Plusieurs techniques de croissance épitaxiale, utilisées dans l'élaboration des III-N, ont évolué de cette approche.

Cependant, ce n'est qu'en 1971 que Pankove *et al.* [11], [12], [13] ont pu obtenir des monocristaux de GaN de grande surface sur substrat saphir ; ce qui, entre autres, a permis de mesurer la valeur de la bande interdite du GaN [14], [15]. Une année plus tard, le premier

dispositif électro-luminescent à base de GaN était né [16], [17] ; il était constitué d'une structure métal-isolant-semiconducteur. En raison de nombreuses difficultés technologiques (comme l'absence de substrat adapté en maille, la difficulté d'obtenir le dopage de type p , et un dopage résiduel n trop élevé).

Les premiers films minces de GaN monocristallin étaient réalisés par cette méthode. Le taux de croissance était élevé (0.5 $\mu\text{m}/\text{min}$), permettant la croissance de films épais, dont les propriétés étaient moins influencées par les désaccords thermiques et de réseau entre GaN et le substrat. Cependant; GaN élaboré par cette technique avait une très grande concentration résiduelle en porteurs de type n , de l'ordre de 10^{19}cm^{-3} .

La deuxième grande découverte était en 1986 : on a trouvé que le dépôt à basse température d'une couche tampon d'AlN [18], apportait de nettes améliorations dans les propriétés électriques et optiques de la couche active de GaN. Plus tard, on a trouvé qu'une couche tampon de GaN apportait les mêmes résultats [19].

D'autres découvertes ont été faites entre 1989 et 1992 :

- En 1989 ; on a pu obtenir GaN de type p , par irradiation à basse énergie par faisceau électronique (Low Energy Electron Beam Irradiation LEEBI), en utilisant le magnésium (Mg) comme dopant.
- En 1992 ; on a obtenu GaN par recuit à haute température, dans une atmosphère d'hydrogène [20].

Les premières diodes électroluminescentes à base de GaN émettant dans le bleu et dans l'UV ont été développées en 1989 par Amano *et al.* [21] et commercialisées en 1993.

En 1997, les premières diodes lasers sont apparues [22][23]. Aujourd'hui les hétérostructures de nitrures sont à la base des nombreuses applications optoélectroniques comme les émetteurs de lumière dans le bleu (Blu-Ray, HD-DVD, Play Station 3,...) et dans l'UV, l'éclairage en lumière blanche, les photodétecteurs ultraviolets aveugles à la lumière visible ("solar-blind"), les transistors radiofréquence de puissance, etc. [24][25][26].

I.5 Propriétés du GaN

Les nombreuses propriétés mécaniques, thermodynamiques, optiques, électroniques, structurales, thermiques et électriques du GaN, font de ce semiconducteur un élément attractif dans plusieurs domaines d'utilisation.

Nous citerons dans ce paragraphe un ensemble de propriétés jugées utiles pour la suite de notre étude : la structure cristalline, les propriétés électriques et plus exactement la

polarisation induite dans les cristaux de nitrures, cette polarisation qui est l'élément clé de toute l'importance accordée à ce matériau.

I.5.1 Propriétés mécanique

Les propriétés mécaniques de GaN sont mal connues ; cependant plusieurs auteurs (Perlin et al. [2], Xia et al. [7], Ueno et al. [8], Uehara et al. [27], Savastenko et al. [28], Polian et al. [29], Tagaki et al. [30], Yamaguchi et al. [31], Schwarz et al. [32], Leszczynski et al. [33]), ont caractérisé ses propriétés élastiques par des méthodes indirectes, réalisées à pression atmosphérique (diffusion Brillouin et ultrasons), et en fonction de la pression [spectroscopie d'absorption des rayons X (XAS), diffraction des rayons X par dispersion d'énergie (EDXD) et diffraction des rayons X (XRD)] [34].

Le tableau I.4 donne les valeurs des constantes d'élasticité C_{ij} de GaN, ainsi que son module de compressibilité volumique B , obtenus par diffusion Brillouin et ultrasons. Au travers de ces deux méthodes, les constantes d'élasticité sont déduites de la vitesse respectivement des phonons acoustiques et du son : $X = \rho v^2$, avec ρ la densité du matériau et X une combinaison de constantes d'élasticité C_{ij} dépendant de la direction de propagation des phonons en respectant les axes cristallographiques. Pour les phases hexagonales ; cinq constantes d'élasticité définissent le matériau : C_{11} , C_{33} , C_{13} , C_{44} et C_{12} . Les quatre premières correspondent respectivement à des modes selon les directions [100], [001], [001] et [011]. C_{12} apparaît en combinaison, par exemple $(C_{12}+C_{11})/2$ gouverne un mode dans la direction [100]. Le module de compressibilité volumique est alors déduit des constantes d'élasticité selon l'équation:

$$B = \frac{(C_{11} + C_{12}) \times C_{33} - 2 \times (C_{13})^2}{(C_{11} + C_{12} + 2 \times C_{33} - 4 \times C_{13})} \quad (I.1)$$

Technique		C₁₁ (GPa)	C₁₂ (GPa)	C₄₄ (GPa)	C₃₃ (GPa)	C₁₃ (GPa)	B (GPa)	Auteurs
XRD		296	130	241	267	158	190	Savastenko et al.[28]
Monocristaux	Brillouin	390	145	105	398	106	210	Polian et al.[29]
	Brillouin	374	106	101	379	70	180	Tagaki et al.[30]
	Brillouin	365	135	109	381	114	204	Yamaguchi et al.[31]
	Ultrasons	377	160	81.4	209	114	173	Schwarz et al.[32]

Tableau I.4 [34]: Constantes d'élasticité C_{ij} expérimentales, et module de compressibilité volumique B théorique, pour GaN de type wurtzite.

Les mesures ultrasoniques présentent un écart important pour C_{33} , certainement du fait de la trop faible épaisseur de l'échantillon étudié. D'une façon générale ; les écarts entre les valeurs obtenues, de C_{ij} et de B , proviennent d'une part de la technique de caractérisation utilisée, et d'autre part du type de l'échantillon étudié. Plus l'échantillon analysé contiendra de défauts ou sera caractérisé par une forte concentration en électrons libres, plus ses propriétés mécaniques en seront affectées [31]. Les valeurs des C_{ij} suivent globalement la tendance suivante : C_{11} et C_{33} sont nettement plus élevées que C_{12} , C_{13} et C_{44} . Ceci montre une anisotropie des propriétés élastiques de GaN entre les deux directions, ce qui peut être directement reliée à l'anisotropie de la structure cristalline de type wurtzite selon ces directions.

Savastenko et al. ont calculé le module de Young (ou module d'élasticité) et le coefficient de Poisson à partir des constantes d'élasticité. Leurs valeurs sont respectivement de 150GPa et 0.372 [28].

Les valeurs expérimentales, caractérisant les propriétés mécaniques, montrent que GaN possède des constantes élastiques et un module de compressibilité volumique assez proches de ceux du AlN et supérieurs à ceux du InN [35]. Il faut noter aussi qu'ils sont plus grands pour h-GaN que pour c-GaN. Toutes ces valeurs sont généralement nettement plus faibles que celles d'un autre matériau du type III-V tel que BN cubique, dit matériau ultra dur, qui présente des propriétés mécaniques très proches de celles du diamant [36]. Il manque cependant des données sur la résistance à la rupture pour savoir plus sur la tenue mécanique de GaN.

I.5.2 Propriétés thermiques

La dilatation thermique, la chaleur spécifique, la température de Debye et la conductivité thermique permettent de définir les propriétés thermiques du nitrure de gallium.

I.5.2.1 Dilatation thermique

Tout matériau soumis à un changement de température se déforme : c'est le phénomène de la dilatation thermique. Il convient d'en tenir compte lorsque l'on étudie les propriétés des semiconducteurs à des températures différentes mais également lors de la croissance du matériau car celle-ci se fait à haute température. Ainsi une couche hétéroépitaxiée complètement relaxée à la température de croissance peut être contrainte à la température ambiante. Les coefficients de dilatation thermique permettent d'évaluer la déformation de la maille cristalline en fonction de la variation de température [37].

La dilatation thermique a été mesurée en fonction de la température sur monocristaux. Selon a : le coefficient de dilatation thermique est constant sur toute la gamme de température. Selon c : la composante principale, parallèle à l'axe c, dépend de la température ; la dilatation thermique connaît une rupture de pente à 700K [36].

Le tableau I.5 donne les coefficients de dilatation thermique de GaN et ceux des substrats les plus souvent utilisés lors de l'hétéroépitaxie de GaN.

On peut trouver d'autres valeurs dans la littérature, comme par exemple :

Dans la gamme 300-900K : $\frac{\Delta a}{a} = 5.59 \times 10^{-6} \text{K}^{-1}$ et $\frac{\Delta c}{c} = 3.17 \times 10^{-6} \text{K}^{-1}$ [Strite'93]

$$\frac{\Delta a}{a} = 5.11 \times 10^{-6} \text{K}^{-1} \text{ et } \frac{\Delta c}{c} = 4.47 \times 10^{-6} \text{K}^{-1} \text{ [Wang'99]}$$

Matériau	GaN Maruska et al. [27]		Saphir	6H-SiC	3C-siC	ZnO	GaAs
Température	300-700K	700-900K	300k	300K	300K	300K	300k
$\frac{\Delta a}{a} (10^{-6} \text{K}^{-1})$	5.59		7.5	4.2	2.7	2.9	6
$\frac{\Delta c}{c} (10^{-6} \text{K}^{-1})$	3.17	7.75	8.5	4.7	2.7	4.75	6

Tableau I.5 [36]: Coefficients de dilatation thermique de GaN et divers substrats selon Krukowski et al.

I.5.2.2 Chaleur spécifique

Le coefficient de chaleur spécifique permet de calculer la variation de température d'un système auquel on apporte une quantité connue de chaleur. Dans les semi-conducteurs ; l'énergie apportée a pour effet d'augmenter le nombre de phonons présents. Les électrons des bandes de conduction et les trous des bandes de valence sont généralement insuffisants en nombre, pour jouer un rôle important par rapport aux phonons. La concentration en porteurs libres et la présence de défauts ponctuels ou étendus, affectent la chaleur spécifique.

La chaleur spécifique (à pression constante) a été mesurée en fonction de la température. Il en résulte l'équation suivante :

$$C_p(T) = 9.1 + 2.15 \times 10^{-3} \times T(\text{en cal. mol}^{-1} \text{K}^{-1}) \quad (I.2)$$

Il y a une forte déviation par rapport à la courbe prévue par la théorie de Debye, dans laquelle la capacité calorifique suit la loi suivante :

$$C_p = [12\pi^4 > R/5] \times (T/\theta_D)^3 \times C \quad (I.3)$$

Avec $R = 8.3144 \text{J. mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ et θ_D la température de Debye. La différence observée serait due à la forte concentration en électrons libres des échantillons (allant jusqu'à $5 \times 10^{19} \text{cm}^{-3}$) [36].

I.5.2.3 Température de Debye

La température de Debye θ_D caractérise la valeur maximale des énergies des vibrations. Elle a été calculée par Polian et al. [29] à partir de la chaleur spécifique, et par Demidienko et al. [38] à partir des propriétés élastiques. Les valeurs obtenues sont respectivement de 700K et 650K. Ces valeurs sont cohérentes avec les calculs de Kim et al. [39], Christensen et al. [40], et Azuhaka et al. [41], qui prédisent θ_D entre 620 et 690K [35].

I.5.2.4 Conductivité thermique

La conductivité thermique est la propriété cinétique qui est déterminée par les contributions des degrés de liberté électronique : de rotation et de vibration. Dans les semi-conducteurs, à cause des faibles densités d'électrons et de trous de conduction, la contribution principale au transport de chaleur vient des phonons. Dans un cristal pur, la conductivité thermique est déterminée uniquement par le processus de la diffusion des phonons. Dans un cristal réel, elle est déterminée aussi par les défauts ponctuels. De toutes les propriétés thermiques, la conductivité thermique est la plus affectée par les défauts de structure. Elle a été mesurée sur différents types d'échantillons : couche mince sur substrat saphir, par la méthode MVPE (Sichel et al. [42]) et monocristaux de GaN (Porowski et al. [43]). Les valeurs obtenues sont respectivement $1.3\text{Wcm}^{-1}\text{K}^{-1}$ et $1.7\text{Wcm}^{-1}\text{K}^{-1}$.

La valeur obtenue sur couche mince est inférieure aux calculs théoriques de Slack, prédisant une valeur de $1.7\text{Wcm}^{-1}\text{K}^{-1}$ du fait de la forte concentration en impuretés de l'échantillon (10^{18}cm^{-3}) [36]. Il faudra retenir qu'elle est égale à celle du Si (figure I.4), trois fois plus grande que celle du GaAs et trois fois plus petite que celle du SiC.

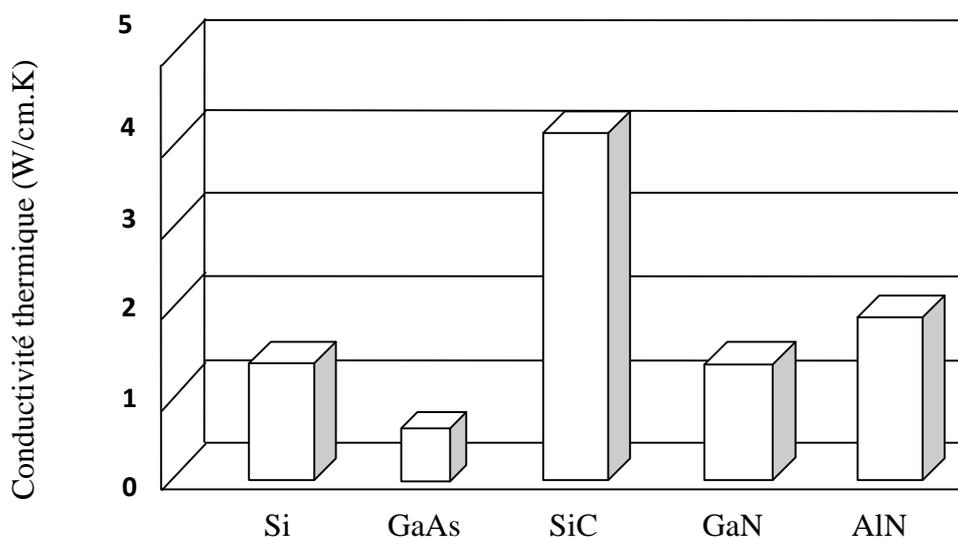


Figure I.4 [44] : Conductivités thermiques de GaN et d'autres composés importants.

I.5.3 Propriétés chimiques [20]

GaN est un composé extrêmement stable. Cette stabilité chimique aux températures élevées, combinée avec son large gap, fait de lui un matériau attractif pour la fabrication de dispositifs opérant en hautes températures, dans les environnements caustiques. GaN est également un excellent candidat pour les couches protectrices, grâce à sa dureté. Cependant ; la majorité des chercheurs se sont intéressés à ses applications dans les semi-conducteurs. Tandis que sa stabilité thermique lui permet d'être utilisé en haute température, sa stabilité chimique présente un challenge technologique. Il y a beaucoup de rapports décrivant la résistance des films de GaN aux techniques de gravures humides conventionnelles utilisées dans le traitement des semi-conducteurs.

Seuls deux groupes ont décrit les caractéristiques de gravure chimique humide du GaN connu pour sa haute qualité. Maruska et Tietjen ont trouvé que GaN est insoluble dans l'eau, les acides, ou les bases à température ambiante ; et qu'il se dissout dans les solutions alcalines chaudes à un taux très lent. Pankove n'a pas pu graver GaN dans NaOH, à cause de la formation d'une couche de GaOH sur la surface ; ainsi une technique de gravure électrolytique a été conçue, permettant d'obtenir de bons résultats. Un matériau de moindre qualité a été observé en le gravant à des taux élevés dans NaOH, H₂SO₄ et H₃PO₄. Ces gravures, qui sont seulement efficaces pour des films de GaN de mauvaise qualité, sont utiles pour l'identification des défauts et l'estimation de leurs densités dans les films de GaN. Jusqu'à présent, il n'existe aucun processus de gravure chimique établi, malgré les efforts des chercheurs. La technologie des dispositifs exige le développement d'un certain procédé. Une possibilité qui n'a pas été encore explorée, c'est la gravure par ions actifs.

Plusieurs groupes ont étudié la chimie de surface de GaN en utilisant les techniques de spectroscopie électronique d'Auger, la spectroscopie de photo-émission par rayons X et la spectroscopie des pertes d'énergie d'électrons. Il y avait également un certain nombre d'études sur la stabilité thermique et la dissociation du GaN. Cependant, le matériau étudié n'était généralement pas bien caractérisé, et les résultats des différents laboratoires diffèrent considérablement.

Des chercheurs ont étudié aussi la stabilité du GaN à haute température ; ils ont remarqué des pertes de poids à une température de 1023K (750°C), alors qu'il n'y avait pas de pertes notables à T=1273K (1000°C). Ils ont observé aussi que GaN était moins stable dans une atmosphère HCl que dans une atmosphère H₂, tandis que les meilleurs résultats étaient obtenus en N₂. Quelques controverses existent à propos de la réaction qui domine la décomposition de GaN.

La stabilité thermique de GaN sera un paramètre critique dans les applications qui exigent l'opération en haute puissance ou haute température.

I.5.4 Structure cristallographique

Le nitrure de gallium se présente sous deux formes cristallines : structure de type Wurtzite (hexagonale) et structure blende de zinc (cubique).

I.5.4.1 Structure de type wurtzite

Dans la structure de type wurtzite (Figure I.5), les atomes d'azote forment un empilement hexagonal compact. Les atomes de gallium occupent la moitié des sites tétraédriques. Il y a deux unités formulaires GaN par maille et le groupe d'espace est P6₃mc. Cette structure est caractérisée par les paramètres de maille a et c , mais aussi par le paramètre $u = l/c$, où l est la longueur de liaison Ga-N suivant c [45].

Pour les monocristaux de GaN élaborés par synthèse sous haute température et haute pression d'azote, a et c varient respectivement entre 3,1881 et 3,1890Å ; et entre 5,1664 et 5,1856Å, exclusivement suivant la concentration en électrons libres dans le cristal[46]. Pour les couches minces de GaN, a et c peuvent varier légèrement en fonction de la pureté chimique, de la concentration en électrons libres et des contraintes [47].

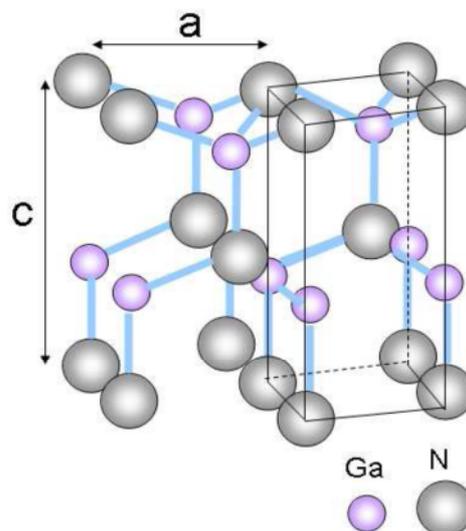


Figure I.5 : Maille cristalline de GaN dans sa phase wurtzite.

La structure du nitrure de gallium ne dévie que légèrement de la structure wurtzite idéale (Tableau I.6). Les atomes de gallium sont donc dans un environnement tétraédrique très

peu distordu [48]. Les cristaux de nitrure de gallium de structure wurtzite adoptent le plus souvent une géométrie en plaquette, avec les faces perpendiculaires à l'axe c , ou en prismes, dont l'axe de croissance est l'axe c .

GaN wurtzite	c/a	u
Structure idéale	1.633	0.376
Structure réelle	1.627	0.377

Tableau I.6 : Paramètres de la structure wurtzite idéale et réelle de GaN.

La structure wurtzite n'est pas symétrique par rapport au plan (0001), on parle alors de polarité. En effet, les directions $[0001]$ et $[000\bar{1}]$ ne sont pas équivalentes. Pour le nitrure de gallium, il existe deux arrangements possibles des atomes de gallium et d'azote lors de la croissance. Dans le cas où la liaison orientée Ga-N pointe vers la surface, on dit que l'on a une polarité gallium (figure I.6). Dans le cas contraire, on a une polarité azote. Il convient de noter que la polarité d'une couche ne présage pas de la nature des atomes en surface. Par exemple, une couche à polarité gallium peut aussi bien se terminer par des atomes de gallium que par des atomes d'azote en surface.

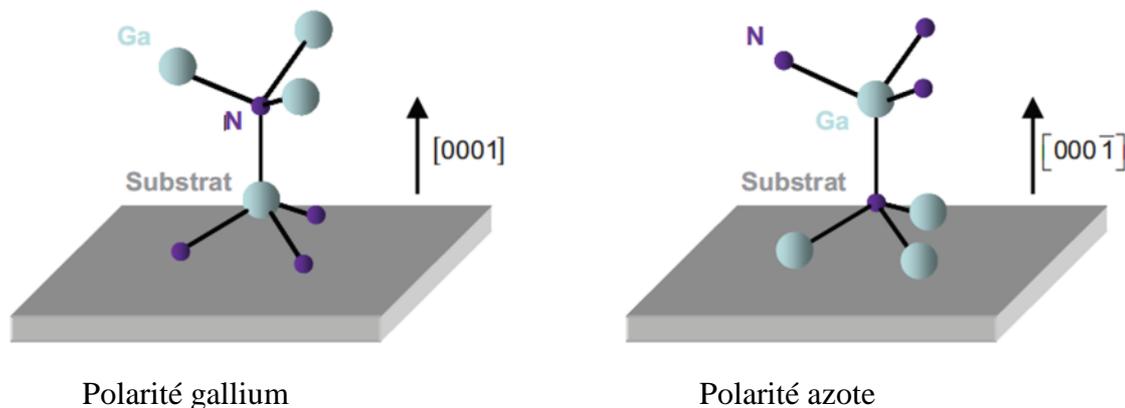


Figure I.6 [49] : Polarités gallium et azote dans GaN hexagonal.

I.5.4.2 Structure de type blende de zinc

Dans la structure de type blende de zinc (Figure I.7), les atomes d'azote forment un empilement cubique faces centrées dans lequel les atomes de gallium occupent la moitié des sites tétraédriques. Il y a quatre unités formulaires GaN par maille et le groupe d'espace est $F\bar{4}3m$. Cette structure est caractérisée par le paramètre de maille a [45].

Le paramètre a observé, varie entre 4,51 et 4,52Å suivant la méthode de synthèse mise en œuvre. Cette phase étant métastable, sa synthèse nécessite le contrôle précis des paramètres expérimentaux. La synthèse ammonothermale de GaN cubique pulvérulent nécessite une

maîtrise des conditions expérimentales (température, minéralisateur : nature et concentration...) [50]. Dans le cas de l'élaboration de couches minces, un substrat généralement de structure cubique et orienté de manière spécifique (afin de désavantager la formation de la phase hexagonale) est en plus nécessaire pour stabiliser la phase cubique. Par exemple, les substrats suivants sont utilisés : MgO (100), Si (100), β -SiC(3C-SiC) (100), GaAs (001) ou encore Al_2O_3 (0001) [51,52].

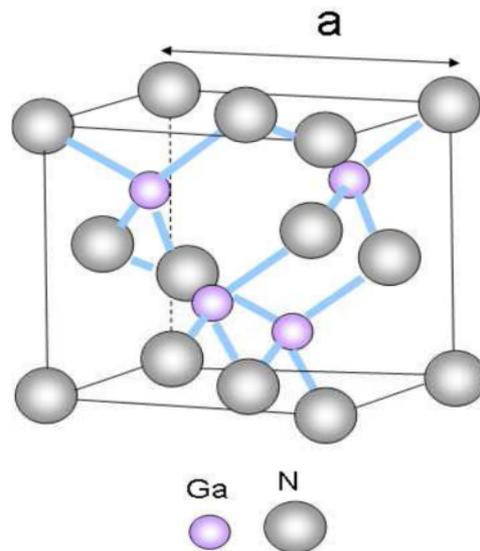


Figure I.7 : Structure zinc blende du GaN.

Comme nous venons de le voir ; les deux structures diffèrent uniquement au niveau de la séquence d'empilement des plans cristallins (figure I.8). L'entourage cristallographique des atomes ne diffère qu'à partir du troisième voisin.

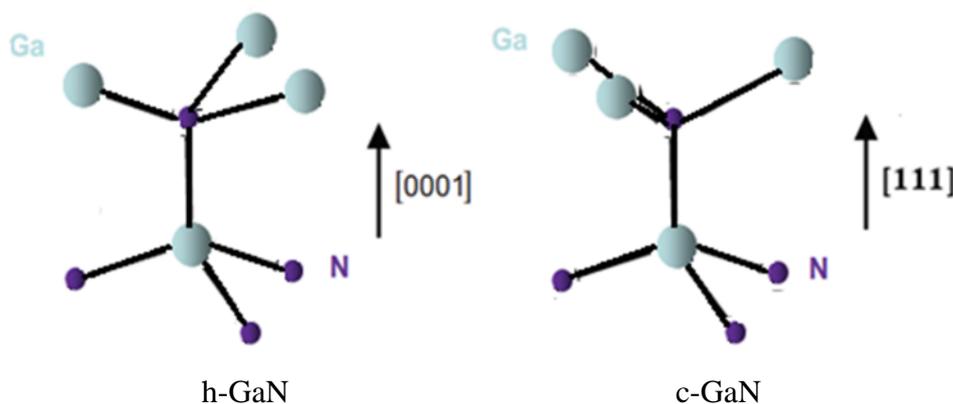


Figure I.8 [46] : Seconds voisins dans les structures wurtzite et blende de zinc.

I.5.5 Structure de bande, propriétés optiques et électroniques du GaN

Les propriétés optiques et électroniques sont gouvernées par la structure de bandes électroniques autour du maximum de la bande de valence et du minimum de la bande de conduction.

I.5.5.1 Zones de Brillouin

Le cristal étant périodique, les paramètres internes (comme la densité d'électrons) ont la périodicité du réseau. Le réseau direct est défini par la première zone de Brillouin. Les grandeurs physiques sont périodiques dans l'espace direct, il suffit de les connaître dans la maille élémentaire du réseau pour les reconnaître dans tout le cristal. Il est de même pour l'espace réciproque, il suffit de les avoir dans la première zone de Brillouin [53].

Les vecteurs primitifs \vec{b}_i du réseau réciproque sont déterminés par les relations :

$$\left\{ \begin{array}{l} \vec{b}_1 = 2\pi \frac{\vec{a}_2 \Lambda \vec{a}_3}{\vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2 \Lambda \vec{a}_3} \quad (\text{I.4}) \\ \vec{b}_2 = 2\pi \frac{\vec{a}_3 \Lambda \vec{a}_1}{\vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2 \Lambda \vec{a}_3} \quad (\text{I.5}) \\ \vec{b}_3 = 2\pi \frac{\vec{a}_1 \Lambda \vec{a}_2}{\vec{a}_1 \cdot \vec{a}_2 \Lambda \vec{a}_3} \quad (\text{I.6}) \end{array} \right.$$

Les vecteurs \vec{a}_1 , \vec{a}_2 et \vec{a}_3 ont pour unités respectives \vec{i} , \vec{j} et \vec{k} ; les vecteurs \vec{b}_1 , \vec{b}_2 et \vec{b}_3 seront donc de la forme :

$$\left\{ \begin{array}{l} \vec{b}_1 = 2\pi(\vec{i} + \vec{j} - \vec{k}) \quad (\text{I.7}) \\ \vec{b}_2 = 2\pi(-\vec{i} + \vec{j} + \vec{k}) \quad (\text{I.8}) \\ \vec{b}_3 = 2\pi(\vec{i} - \vec{j} + \vec{k}) \quad (\text{I.9}) \end{array} \right.$$

Rappelons que la zone de Brillouin, des réseaux cubiques à faces centrées (cfc), à la forme d'un octaèdre tronqué par les six faces d'un cube (figure I.9, b). Elle présente un centre de symétrie à l'origine (noté Γ) et des axes de symétrie :

- Les axes $\langle 100 \rangle$ à symétrie d'ordre 4 (Δ).
- Les axes $\langle 111 \rangle$ à symétrie d'ordre 6 (Λ).
- Les axes $\langle 011 \rangle$ à symétrie d'ordre 2 (Σ).

Les points de rencontre de chacun de ces axes avec les frontières de la zone de Brillouin, jouent un rôle essentiel dans la théorie des bandes. On les note généralement de la manière suivante :

- Points X de coordonnées $(2\pi/a, 0, 0)$ sur les axes $\langle 100 \rangle$.
- Points L de coordonnées $(\pi/a, \pi/a, \pi/a)$ sur les axes $\langle 111 \rangle$.
- Points K de coordonnées $(0, 3\pi/2a, 3\pi/2a)$ sur les axes $\langle 011 \rangle$.

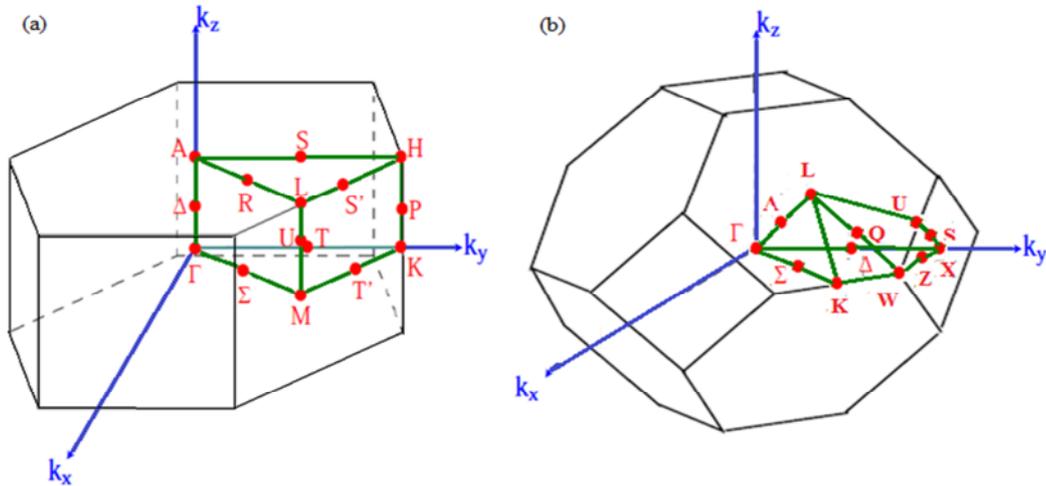


Figure I.9 : Les zones de Brillouin des deux structures : (a) wurtzite et (b) zinc blende.

I.5.5.2 Structure de bandes électroniques

Les structures de bandes présentées ci-après ont été obtenues à l'aide de la méthode FLAPW (Full Potential Linearized Augmented Plan Wave), la plus adaptée en raison de la localisation des densités de charge des bandes de valence, en prenant en compte l'interaction spin-orbite [54]. Cette méthode de calcul quantique ab-initio est basée sur la méthode de la fonctionnelle de densité, dans l'approximation de la densité locale. Dans cette dernière, la résolution de l'équation de Schrödinger $H\Psi=E\Psi$ se fait à l'aide d'une fonction d'onde Ψ exacte, d'un Hamiltonien H approché et d'un système collectif d'électrons. FLAPW (ou FPLAPW) qualifie le type de potentiel utilisé.

La figure I.10 donne les structures de bandes électroniques de GaN de structure (a) wurtzite et (b) blende de zinc.

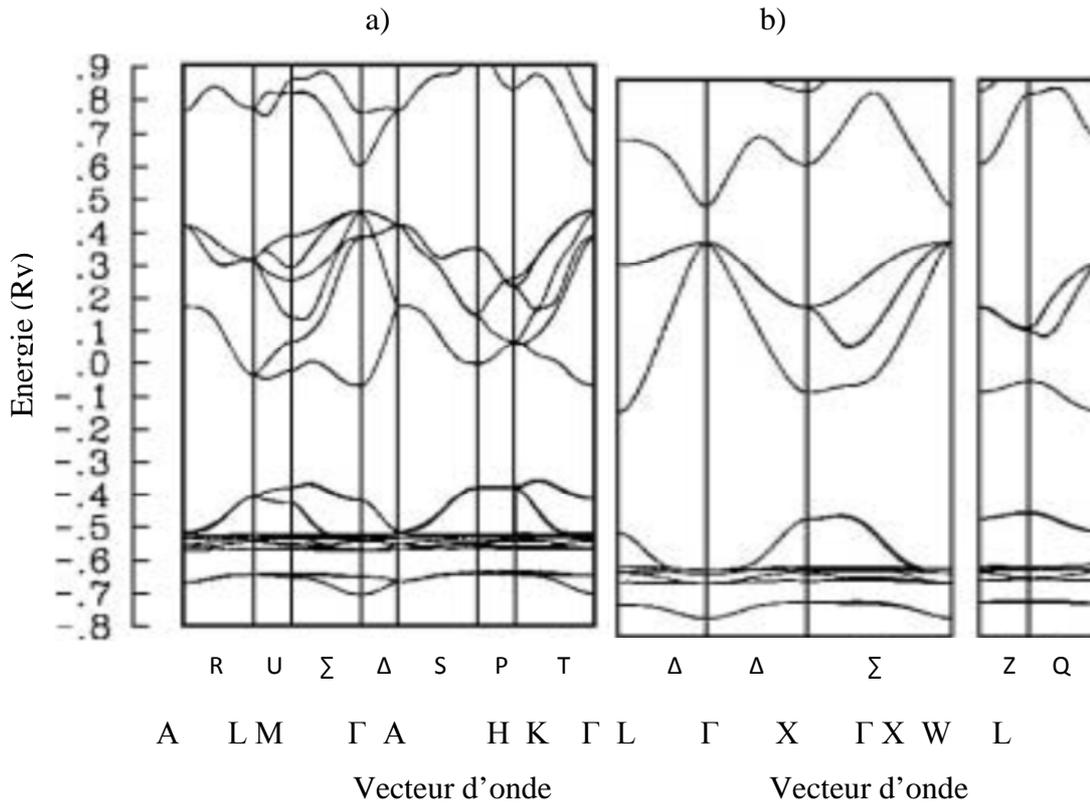


Figure I.10 [38] : Structures de bandes électroniques : (a) wurtzite ; (b) blend.

Une attention particulière sera portée sur la structure de bandes de GaN de type wurtzite, qui est la structure la plus étudiée et utilisée. Les bandes d'énergie sont réparties en quatre groupes, trois étant occupées et une inoccupée. La bande la plus basse ($-0,7\text{Ry}/-0,65\text{Ry}$) est majoritairement originaire des niveaux $N2s$. Les niveaux les plus hauts de cette bande sont hybridés avec les niveaux $Ga3d$. Dans la bande immédiatement supérieure ($-0,55\text{Ry}/-0,38\text{Ry}$), les niveaux les plus bas sont majoritairement issus des niveaux $Ga3d$ assez localisés. Les niveaux les plus hauts en énergie de cette bande correspondent à une hybridation des niveaux $Ga3d$ et $N2s$. En raison de l'hybridation, ces deux bandes sont combinées et ne forment qu'une bande étroite.

La dernière bande occupée d'énergie intermédiaire ($-0,1\text{Ry}/0,5\text{Ry}$) est assez large ; il s'agit de la bande de valence. Les niveaux de cette bande sont issus des niveaux $N2s$, $N2p$, $Ga4s$ et $Ga4p$. Le maximum de cette bande est situé en Γ . Dans cette zone, les niveaux sont majoritairement issus des niveaux $N2s$. La bande de conduction (inoccupée) est à $0,14\text{Ry}$ de plus que la bande de valence. Le minimum de cette bande est aussi situé en Γ ; ainsi le gap de GaN de structure wurtzite est direct, tout comme celui GaN de structure blende.

Dans la structure cubique, au point Γ (siège des transitions radiatives) le couplage spin-orbite (Δ_{so}) divise le haut de la bande de valence en deux niveaux. L'un correspond aux

bandes de trous lourds et de trous légers, dégénérées en Γ . L'autre, décalé de (Δ_{so}), correspond à la bande de trous "split-off". Dans le cas du GaN hexagonal, la non cubicité de la maille donne lieu, de plus, à un champ électrique appelé champ cristallin (Δ_{cr}) qui induit une levée de dégénérescence au point Γ des trous lourds et trous légers.

Ces trois niveaux (figure I.11) sont dits "excitons". CH (crystal field split-off hole) désigne la bande due à l'éclatement du champ cristallin, les deux autres niveaux sont labellisés en fonction de la masse effective des trous : HH (heavy hole) désigne la bande à "trous lourds", et LH (light hole) à "trous légers". On note que la dépendance en vecteurs d'onde k , de l'énergie de ces bandes, est forte et particulière à chacune.

Ces niveaux sont aussi baptisés excitons A pour HH, B pour LH et C pour CH, ayant des écarts d'énergie $\Delta E_{A,B} = 6 \text{ à } 8 \text{ meV}$ et $\Delta E_{B,C} \approx 20 \text{ meV}$.

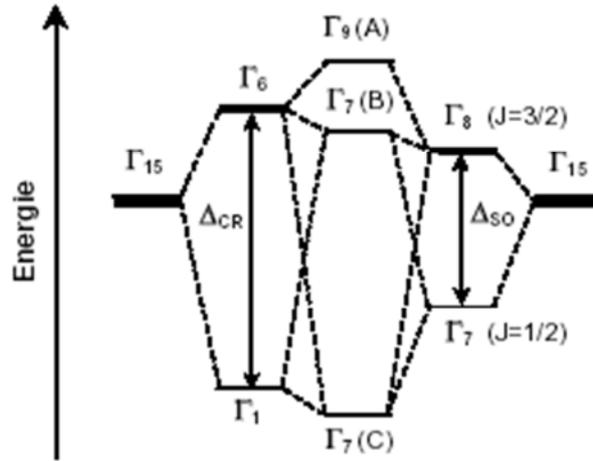
Comme pour tous les autres semi-conducteurs, les propriétés optiques du GaN résultent des transitions électroniques entre les niveaux de la bande de valence la plus haute et de la bande de conduction la plus basse. Les transitions peuvent impliquer des interactions entre les paires électron-trou et les niveaux énergétiques dus à des impuretés ou des défauts. Ses propriétés optiques dépendent donc beaucoup de l'échantillon lui-même. Les mesures optiques donnent des informations sur la structure et la composition du matériau.

Les valeurs mesurées pour le champ cristallin et le couplage spin-orbite sont très variables (tableau I.7) suivant les auteurs et les échantillons étudiés, car les contraintes au sein du réseau cristallin peuvent changer les écarts en énergie entre les trois excitons [55].

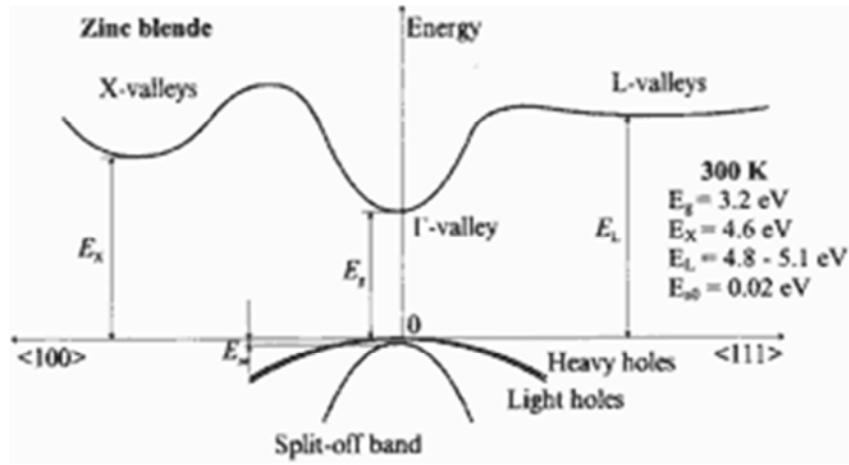
		α -GaN	β -GaN
$\Delta_{so}(\text{meV})$	Théor.	15.6 [Suzuki'98], 13 [Wei'96]	20 [Suzuki'98], 15 [Wei'96]
Split-off	Expér.	11 [Dingle'71], 16 [Chichiku'96]	17 [Ramirez-Flores'94]
$\Delta_{cr}(\text{meV})$	Théor.	72.9 [Suzuki'98], 42 [Wei'96]	0
Chp.cristallin	Expér.	22 [Dingle'71], 21 [Chichiku'96]	Non disponible

Tableau I.7 [55] : Couplage spin-orbite et champ cristallin, pour GaN.

a)



b)



c)

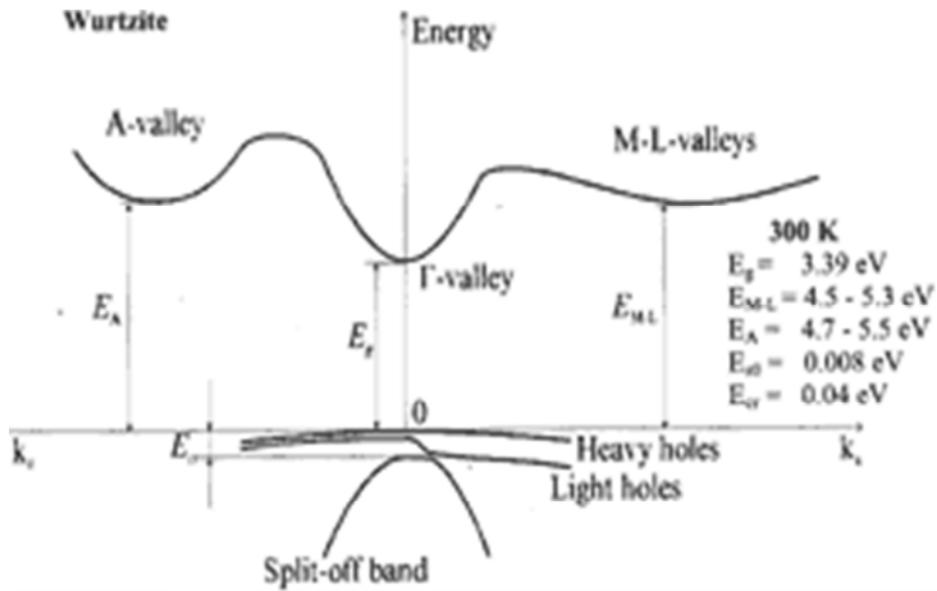


Figure I.11 [55] : (a) Eclatement au sommet de la BV sous l'influence du champ cristallin et du couplage spin-orbite.

(b et c) Structures de bandes schématiques autour du haut de la BV.

I.5.5.3 Propriétés optiques

La valeur du gap est généralement admise autour de 3.4eV (365nm), à température ambiante [56]. Elle a été évaluée par des mesures de transmission optique, en fonction de la température. Son évolution est approchée en fonction de la température T, par l'expression de Varshni [57] :

$$E_g(\text{eV}) = 3.556 - [9.9 \times 10^{-4} \times T^2] \quad (\text{I.10})$$

Maruska et Tietjen [58] étaient les premiers à mesurer, avec précision, l'énergie du gap direct du GaN, soit 3.39eV. Après, Pankove et al. ont rapporté un spectre de photoluminescence à basse température (1.6K). Ils ont observé une forte émission bord de bande à 3.477eV, et une plus faible à 3.37eV qui se divisera en un doublet espacé de 10meV si on augmente la température de 35K. Peu après ; Dingle et al. [59] ont analysé avec détail le spectre optique à basse température (2K) sur des échantillons de haute qualité. Ils ont observé trois excitons à $3.474 \pm 0.002\text{eV}$, $3.480 \pm 0.002\text{eV}$ et $3.49 \pm 0.01\text{eV}$. Le principal pic de photoluminescence à basse température, à $3.467 \pm 0.001\text{eV}$, montrait une largeur à mi-hauteur (LMH) de 5meV. Ils ont pu alors calculer l'énergie de liaison donneur-exciton, qui est de 6 à 8meV. Ils ont observé aussi, comme Pankove et al. que la structure est fragile au voisinage de 3.38eV. En effet ; il apparaît un doublet avec un espacement de 7.8meV : un doublet à 3.38eV et un à 3.39eV, définis comme les pics des répliques des phonons optiques longitudinaux (LO) de l'exciton libre et de l'exciton lié. A partir de l'écart entre les pics des répliques, ils ont déduit une fréquence du phonon LO de 726cm^{-1} . Un autre pic, apparaissant à 3.26eV, était attribué à une transition donneur-accepteur (DA). En élevant la température à 30K, ce pic affaiblit avec le début d'une nouvelle bande à 30meV en dessus du pic DA, qui va persister sur une large gamme de température. Au-dessus de 120K, une nouvelle bande domine complètement ; elle est attribuée à la transition d'un électron libre à un trou lié. A 300K, la plus haute énergie de transition baisse à 3.39eV, en bon accord avec Maruska et Tietjen. Cette petite sous-estimation de gap serait due aux effets de queue de bande qui existeraient dans le matériau lourdement dopé n.

Plusieurs mesures ont été accomplies à l'aide de la spectroscopie sur la transmission, la réflectivité et l'absorption, par photoluminescence (PL) et par cathodo luminescence (CL).

- Monemar a mesuré le spectre excitonique avec une résolution développée à $3.4751 \pm 0.0005\text{eV}$, $3.481 \pm 0.001\text{eV}$ et $3.493 \pm 0.005\text{eV}$, respectivement par les trois dernières méthodes.
- Hvam and Ejder ont étudié le comportement bord de bande à 1.8K, sous une grande intensité d'excitation : la transition de l'exciton à 3.47eV est plus large, et un nouveau pic

d'énergie plus faible apparaît, attribué à une interaction de dispersion exciton-exciton (XX) inélastique.

- Dai et al. ont observé deux nouveaux pics PL : le premier, à $3.476 \pm 0.002 \text{ eV}$, est attribué à une recombinaison donneurs-excitons liés (DX) ; le deuxième, à $3.311 \pm 0.002 \text{ eV}$, est attribué à la recombinaison de la paire donneur-accepteur (DA).

- Pankove et al. ont estimé que le gap varie linéairement avec la température au-dessus de 453 K (180°C), avec un coefficient : $dE_g/dT = -6.0 \times 10^{-4} \text{ eV/K}$.

- Monemar a trouvé que le gap fondamental est $3.503 \pm 0.0005 \text{ eV}$ à 1.6 K , et a ajusté la dépendance du gap sur la température par la relation empirique :

$$E_g(\text{eV}) = 3.503 + (5.08 \times 10^{-4} \times T^2)(T - 996) \quad (\text{I.11})$$

- Camphausen and Connell ont étudié la dépendance du gap sur la température et sur la pression jusqu'à 10 kbar ; ils ont trouvé : $\frac{dE_g}{dP} = 4.2 \pm 0.4 \frac{\text{meV}}{\text{kbar}}$ à la température ambiante, et $\frac{dE_g}{dT} = -6.7 \times 10^{-4} \text{ eV/K}$.

- Matsumoto and Aoki [48] ont rapporté : $\frac{dE_g}{dT} = -3.5 \times 10^{-4} \text{ eV/K}$ jusqu'à 150 K , et $\frac{dE_g}{dT} = -6 \times 10^{-4} \text{ eV/K}$ de 150 à 300 K .

Des mesures de transmission optique ont aussi permis d'étudier son évolution en fonction de la pression [60]:

$$E_g(\text{eV}) = E_g(P = 0) + 0.47P + 0.0018P^2 \quad (\text{I.12})$$

La connaissance de l'indice de réfraction est utile lorsque l'on étudie des structures laser car le confinement optique, et donc la propagation des photons dans le guide d'onde, en dépendent. Les propriétés optiques des nitrures en phase hexagonale sont anisotropes, ce qui se traduit par une biréfringence uni-axiale. Il y a donc deux indices de réfraction : un indice ordinaire correspondant à une polarisation parallèle à l'axe [0001] et un indice dit "extraordinaire" correspondant à une polarisation dans le plan (0001). Toutefois ; on pourrait, en première approximation, négliger l'anisotropie et ne considérer que l'indice ordinaire [49]. La variation de l'indice de réfraction ordinaire n en fonction de la longueur d'onde λ , dans la gamme de transparence, est décrite par une loi de type Sellmeier :

$$n(\lambda) = \left[a + \frac{b \times \lambda^2}{\lambda^2 - c^2} \right]^{\frac{1}{2}} \quad (\text{I.13})$$

	GaN	AlN
Domaine de λ	364-600nm	300-600nm
a	5.15	1.00
b	0.35	3.12
c (nm)	339.8	138.0

Tableau I.8 [49]: Coefficients de Sellmeier pour l'indice de réfraction ordinaire, dans h-GaN et h-AlN.

L'indice de réfraction a été mesuré par ellipsométrie spectroscopique, réflectivité, transmission ou encore luminescence dans le visible et l'infrarouge. Dans cette région, sa partie imaginaire est négligeable. La valeur de sa partie réelle s'exprime de la manière suivante, en fonction de l'énergie E de la source lumineuse (où $A = 385(\text{eV})^2$ et $E_0 = 9\text{eV}$) :

$$n = 1 + \frac{A}{E_0^2 - E^2} \quad \text{[61]} \quad (\text{I.14})$$

• Par des mesures de transmission et d'absorption, Edjer [59] a obtenu $n=2.67$ à 3.38eV et $n=2.33$ à 1.0eV .

De manière générale ; l'indice de réfraction varie de 2.1 (à une épaisseur de 1900nm) à 2.5 (à une épaisseur de 480nm), pour un film cristallin de GaN de bonne qualité [61]. Il est inférieur à celui du GaAs, pour comparaison. Pour une LED, l'émission est alors plus grande.

Pour une épaisseur d'échantillon comprise entre 900 et 2000nm, la dispersion est faible. En dessous de 800nm, elle augmente car l'énergie des phonons approche celle du gap. Il apparaît aussi que la dispersion est très sensible à la teneur en oxygène : elle diminue quand la concentration en oxygène augmente.

La constante diélectrique statique a été mesurée par la réflectivité optique. Elle est de 8.9 donnée par Matsubara and Takagi ; et de 9.5 donnée par Barker and Ilegems [59].

Le coefficient d'absorption a lui aussi, fait l'objet de nombreuses études. Le carré de sa valeur est linéaire avec l'énergie des photons au-dessous de l'énergie du gap :

$$\alpha^2 = (\alpha_0)^2 \times (E - E_g) \quad (\text{I.15})$$

avec : $\alpha_0 = 1.08 \times 10^5 \text{cm}^{-1}$

Ceci confirme le fait que le gap de GaN est direct [61]. Les mesures du coefficient d'absorption de GaN de type wurtzite, au gap excitonique, donnent des valeurs variant

de 3×10^{-4} à $1.5 \times 10^{-5} \text{cm}^{-1}$ [56]. En outre, il faut signaler que les mesures de la réflectivité, dans le visible et l'ultraviolet, sont sensibles aux transitions excitoniques et inter bandes [61].

I.5.5.4 Propriétés de transport électrique

Les bandes de conduction et de valence sont multiples, mais les propriétés de transport électrique dépendent principalement des structures de la bande de conduction la plus basse et de la bande de valence la plus haute. Le transport électrique est caractérisé par la concentration en porteurs libres et la mobilité μ par effet Hall telles que $\mu = \frac{R}{\rho}$, avec R le coefficient de Hall et ρ la résistivité.

Pour le nitrure de gallium non dopé intentionnellement, il existe néanmoins un dopage de type n par l'oxygène, avec au mieux une concentration d'électrons de 10^{16}cm^{-3} et une mobilité de $900 \text{cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$. Dans le cas de monocristaux usuellement synthétisés sous haute température et haute pression d'azote, la concentration d'électrons est de $10^{18} - 10^{19} \text{cm}^{-3}$, et la mobilité de $60 - 100 \text{cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$.

Le dopage volontaire de type n est le plus souvent réalisé avec le silicium (Si) ou le germanium (Ge). En effet, leurs concentrations sont plus facilement contrôlables que celle de l'oxygène [62].

La figure I.12 donne la mobilité en fonction de la concentration d'électrons à 300K, pour des échantillons synthétisés par divers auteurs. La mobilité diminue régulièrement lorsque la concentration en électrons augmente. Elle est de l'ordre de $100 \text{cm}^2/\text{Vs}$ à 10^{20}cm^{-3} et peut aller jusqu'à $900 \text{cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$ pour un dopage de $3 \times 10^{16} \text{cm}^{-3}$. Les valeurs les plus élevées de mobilité ont été obtenues pour un dopage non intentionnel ; une mobilité de $1000 \text{cm}^2 \text{V}^{-1} \text{s}^{-1}$ pourrait être obtenue pour une concentration d'électrons de 10^{14}cm^{-3} . La tendance observée montre aussi que la méthode de synthèse n'influe pas en elle-même, seule la concentration en porteurs détermine la mobilité de Hall.

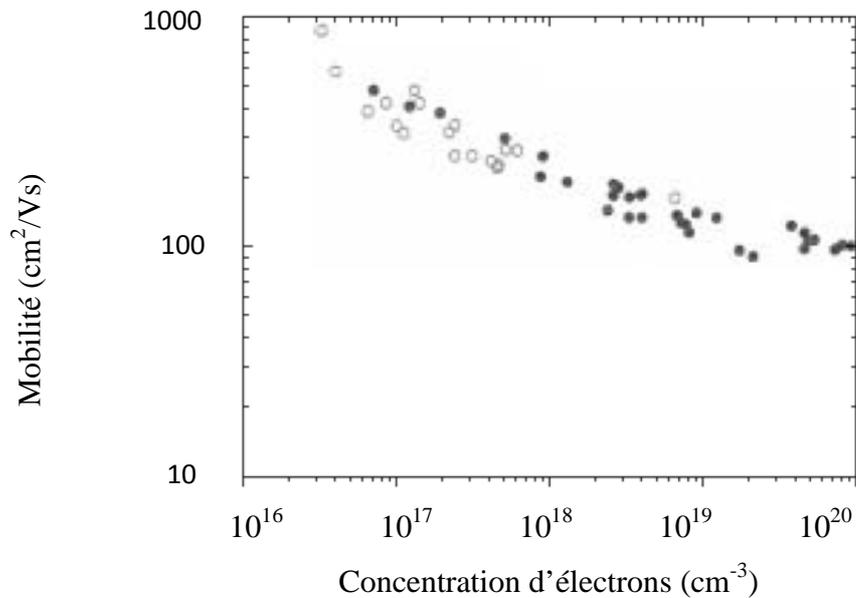


Figure I.12 [62] : Mobilité, par effet Hall, en fonction de la concentration en électrons à 300K pour un certain nombre d'échantillons réalisés par MOVPE et MBE. (○ : GaN n.i.d. ● : GaN dopé Si ou Ge).

Le dopage p de GaN est nettement moins développé que celui de type n, car il est beaucoup plus difficile à réaliser, comme cela est souvent le cas dans les matériaux à large gap. En effet ; il existe une solubilité limitée des dopants accepteurs, due à la réduction de l'énergie de formation et de l'énergie de relaxation du réseau, qui entraîne alors la formation d'ions complexes piégeant les dopants accepteurs [58]. L'accepteur le plus utilisé est le magnésium (Mg). Un recuit ou une irradiation sous faisceau d'électrons à basse énergie permet de libérer le magnésium piégé sous forme de complexe avec l'hydrogène, et ainsi d'activer le dopage. La mobilité maximale obtenue est de $10\text{cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$ avec une concentration de trous de 10^{17}cm^{-3} .

La meilleure mobilité a été obtenue dans le cas de dopage avec le carbone ($175\text{cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1}$) à une concentration de trous de $3.75 \times 10^{16}\text{cm}^{-3}$. Comme dans le cas du dopage n, la mobilité augmente lorsque la concentration des porteurs libres diminue [55].

I.6 Substrats classiques pour la croissance de GaN

A l'inverse des semi-conducteurs connus tels que le Si ou le GaAs, il n'existe pas encore de substrat de GaN monocristallin massif disponible industriellement, quoique certains d'entre eux ont été élaborés avec succès sous haute pression, mais la surface disponible n'excédait pas 100mm^2 pour 200heures de croissance [63], ceci oblige l'utilisation de substrats différents du GaN pour un dépôt de couches sur de grandes surfaces.

Le principal problème, dans l'épitanie du GaN, est qu'il n'existe pas de substrat en accord de maille et ayant le coefficient thermique proche de ceux du GaN. De plus le type de GaN obtenu est étroitement lié au substrat de départ et les conditions de croissance restent primordiales pour favoriser l'une ou l'autre des phases, cubique ou hexagonale [55].

Le paramètre de maille le plus proche de celui de GaN est donc recherché dans le but de minimiser les contraintes mécaniques induites par la désadaptation, celles-ci ayant pour effet de dégrader les performances. Les principaux substrats utilisés sont actuellement le carbure de silicium (SiC) et le saphir (Al_2O_3). La problématique des coûts de production, notamment sur SiC, a incité de nombreuses équipes à développer d'autres filières, telle que la filière silicium (Si [111]) [64][65][66].

La croissance par homo-épitanie de GaN, nécessite des monocristaux de GaN massif qui ne sont produits que par un seul groupe dans le monde : le laboratoire "UNIPRESS" de l'université de Varsovie. Ces substrats, dont la croissance s'effectue à très haute pression et haute température (1.5GPa et 1673-1973K (1400-1700°C)), ont la plus faible densité de dislocations obtenue à ce jour, dans GaN : de l'ordre de $10^2 cm^{-2}$. Toutefois ces substrats ne sont pas encore commercialisés, car leur coût de production reste très élevé et leur taille est relativement modeste (1-2cm pour une épaisseur de 50 μm).

Par conséquent, la croissance de GaN (et des autres nitrures) se fait encore presque exclusivement en hétéro épitanie. Mais comme les paramètres de maille et les coefficients de dilatation thermique des substrats utilisés sont très différents de ceux de GaN, les couches épitanées ont des densités de dislocations très élevées ($10^8-10^{10} cm^{-2}$). Les principaux substrats sont :

❖ *Le saphir (Al_2O_3) :*

C'est le plus utilisé pour la fabrication de diodes électroluminescentes et diodes laser. Il présente pourtant plusieurs défauts majeurs. En effet, le désaccord de maille avec GaN est de 16%(après rotation de la couche épitanée par rapport au substrat)[67].Ce désaccord induit des densités de dislocations de l'ordre de $10^{10} cm^{-2}$. Cependant, avec une nitruration adéquate et une couche tampon optimisée et déposée à faible température, par exemple en AlN, des films de GaN de très bonne qualité avec une densité de dislocations inférieure à $2 \times 10^9 cm^{-2}$ peuvent être obtenus. Sur substrat saphir, la croissance par MOVPE permet d'obtenir du GaN de type face-Ga, tandis que celle par MBE permet d'obtenir du GaN face-Ga ou face-N. Les inconvénients du saphir sont une faible conductivité thermique et une grande difficulté à être découpé. Une des méthodes de découpe consiste à pratiquer un sillon grâce à un laser, puis à

graver dans ce sillon avec une scie en diamant, pour finir par un clivage [68][69][70]. D'ailleurs, le substrat est dans ce cas supprimé par décollage "lift off" et remplacé par un substrat de conductivité thermique plus élevée. Enfin ; le saphir est un isolant, ce qui ne permet pas de poser directement un contact électrique sur le substrat.

❖ *Le carbure de silicium (SiC) :*

Les avantages des substrats en SiC sont multiples. Ils présentent un faible désaccord de maille avec GaN qu'est de 3.5 %, en regard du saphir ou du silicium, et une très bonne conductivité thermique, il est le substrat le plus attractif. Les substrats 4H-SiC et 6H-SiC sont les plus utilisés, et présentent l'avantage d'exister également sous forme wurtzite, ce qui facilite la croissance du GaN sur ces derniers.

Le contrôle de la polarité est un des avantages clef du SiC par rapport au saphir. La polarité électrique de l'interface GaN/SiC influence fortement la morphologie de la surface et la qualité cristalline des films de GaN épitaxiés. Les calculs de la structure électronique de l'interface GaN/SiC [0 0 0 1] indiquent que les liaisons les plus fortes sont les liaisons Si/N et C/Ga. Un film de GaN déposé sur un substrat SiC face-Si sera par conséquent de type face-Ga [0001]. Les inconvénients des substrats en SiC sont d'une part le coût très élevé, et d'autre part la rugosité de surface, qui est en moyenne de 1 nm, contre 0,1 nm pour le saphir. Ceci entraîne le besoin de réaliser des traitements de surface de manière à polir le substrat. Une des méthodes consiste à provoquer l'oxydation du SiC pour former du SiO₂, qui est ensuite enlevé par attaque chimique. Des sociétés comme Sterling Semi-Conductor produisent des substrats de 3 pouces, Nippon Steel parvient à 4 pouces [68][71].

Les couches de GaN épitaxiées sur ce type de substrat démontrent ainsi une excellente qualité cristallographique: le taux de dislocations restant généralement inférieur à 3.10^8 cm^{-2} , notamment grâce à l'ajout d'une couche de nucléation ou couche tampon en AlN, dont les paramètres physiques permettent une plus douce transition entre le réseau cristallin de SiC et celui de GaN. Cette transition est encore améliorée par l'adjonction de super-réseaux de nucléation, technique consistant à intégrer entre le substrat et GaN, une succession de couches AlN/GaN [72]. Il est ainsi, de tous les substrats, celui qui préfigure en tête lorsque sont envisagées des applications de puissance hyperfréquences. Malheureusement, il demeure extrêmement onéreux.

Pour le type 6H, le désaccord de maille avec GaN est de 3.5 %. C'est un matériau conducteur électriquement que l'on peut doper n ou p et sa conductivité thermique est nettement supérieure à celle du saphir.

❖ *Le silicium :*

Les avantages du substrat en silicium sont nombreux. Les substrats Si sont bon marché et disponibles en grand diamètre. De plus, la conductivité thermique offerte par le silicium est légèrement inférieure à celle du nitrure de gallium. Ceci signifie qu'une attention particulière devra être apportée au management thermique lors d'une conception. Des substrats de type n ou de type p, ou très résistifs sont disponibles. Une des principales raisons motivant les travaux sur les substrats silicium dans la filière GaN, malgré 17% de désaccord de maille entre ces deux matériaux, est la possibilité de réaliser sur une même puce des composants de puissance ou des composants optoélectroniques, couplés à des circuits en silicium performants. Les substrats en silicium doivent être orientés dans la direction [111] [68]. En revanche, le procédé de fabrication des substrats de silicium est mûre puisqu'il est utilisé depuis des années dans l'univers de la RF.

❖ *Les substrats reportés – SopSiC et SiCopSiC*

L'idée génératrice de la conception de ces nouveaux substrats exploite l'utilisation de carbure de silicium polycristallin (poly-SiC ou pSiC), en remplacement du SiC classiquement utilisé. De conductivité thermique certes moins bonne que celle du SiC monocristallin, le poly-SiC présente l'avantage extrême de son moindre coût. La croissance du GaN ne pouvant s'effectuer directement sur du polycristal ; on reporte par le procédé SmartCut®, une couche de monocristal de Si (cas du SopSiC) ou de SiC (cas du SiCopSiC) [73]. Plusieurs avantages, inhérents aux propriétés des matériaux, peuvent être cités :

De meilleure conductivité thermique que le Silicium, l'utilisation du SopSiC permettra une évacuation des charges caloriques plus efficace dans le substrat.

- La présence de SiC monocristallin dans les couches de SiCopSiC permettra d'envisager de faibles taux de dislocations dans les épitaxies.
- Comme évoqué ci-dessus, le coût d'un substrat SiCopSiC reste bien inférieur à celui d'un substrat de SiC monocristallin.

Le principal inconvénient reste le procédé même de report des matériaux : cette technique requiert l'hydrogénation du Silicium avant clivage, et engendre donc l'apparition d'une mince couche de SiO₂ à l'interface pSiC/SiC ou pSiC/Si. Cette dernière, bien qu'extrêmement fine, constitue une véritable barrière thermique et empêche potentiellement le transfert de la chaleur du buffer vers le bas de substrat. Les propriétés électriques de ces substrats sont également des paramètres qu'il est indispensable de connaître [74].

D'autres matériaux tels que LiGa₂ ou ZnO, présentent des désadaptations de paramètres de maille de l'ordre de 2 % mais ont pour inconvénient d'être instables thermiquement, notamment aux températures supérieures à 1100°C que nécessite la croissance de GaN.

I.6.1 Substrats utilisés pour la croissance de h-GaN

La majorité des couches de h-GaN élaborées à l'heure actuelle, sont déposées sur substrat saphir. Ce substrat présente les avantages d'un coût relativement faible et surtout d'une grande stabilité en température, mais il a l'inconvénient d'être un isolant électrique et thermique. Le désaccord de maille, entre les plans de base de h-GaN et du saphir, est de 30%. Cependant ; lors de l'épitaxie, la maille élémentaire de h-GaN est en fait tournée de 30° par rapport à la maille des atomes d'Al du saphir (figure I.13) [55].

Malgré les grandes différences dans paramètres de maille et de dilatation thermique entre GaN et le saphir ; ce substrat est celui qui a permis l'élaboration des dispositifs, à base de GaN, présentant les meilleures performances jusqu'alors.

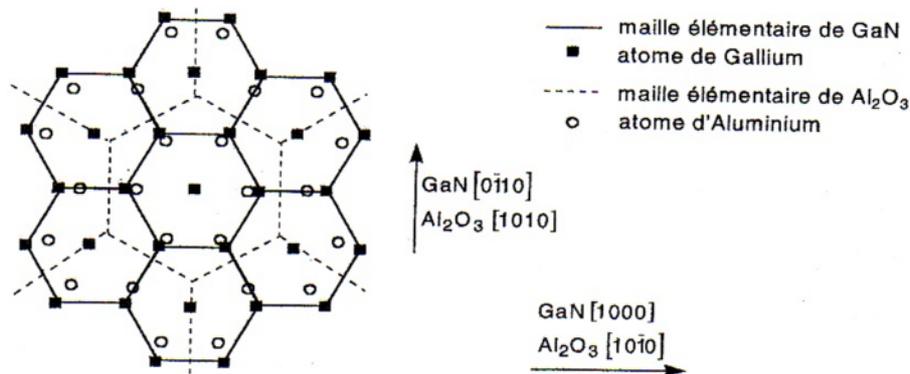


Figure I.13 : Projection des plans de base des cations du saphir et de h-GaN dans l'orientation prise lors de l'épitaxie.

- La croissance sur substrat 6HSiC était récemment développée. Ce substrat est celui qui présente les paramètres de maille et coefficients de dilatation thermique les plus proches de ceux de GaN. Toutefois, il n'existe pas de technique de gravure permettant d'obtenir un état de surface approprié à l'hétéroépitaxie du GaN, et ce substrat est encore très coûteux.
- Les substrats silicium sont très attractifs, non seulement parce qu'ils présentent une bonne morphologie de surface et sont disponibles à bas prix, mais également parce qu'ils permettront, à terme, une intégration des dispositifs à base de GaN dans la microélectronique

silicium. Néanmoins ; les couches de GaN, élaborées sur Si, présentent une concentration de défauts considérable du fait des différences trop importantes de paramètres de maille et de coefficients de dilatation thermique.

- Une alternative peut pallier aux problèmes de relaxation de contrainte de GaN sur substrat (Si) : c'est l'utilisation d'un substrat "SOI" (Silicon On Insulator). Avec ce substrat, c'est la fine couche superficielle de (Si) qui devrait encaisser la majeure partie de la contrainte, et donc le nombre de défauts structuraux de GaN sera réduit.

On peut aussi utiliser GaAs, ZnO ou encore AlN. Tous ces substrats sont répertoriés dans le tableau I.9, avec les paramètres de maille et les coefficients de dilatation thermique respectifs.

Substrats pour GaN Hexagonal	Structure crystalline	Paramètres de maille (Å)	Coefficients de dilatation thermique $\Delta a/a$, $\Delta c/c$ ($\times 10^{-6} \text{ K}^{-1}$)
Saphir Al_2O_3	hexagonal	$a=4.758$; $c=12.99$	$\Delta a/a=7.5$; $\Delta c/c=8.5$
6H-SiC	wurtzite	$a=3.08$; $c=15.12$	$\Delta a/a=4.2$; $\Delta c/c=4.68$
Si (111) (100)	cubique	$a=5.4301$	$\Delta a/a = 3.59$
GaAs (111) (100)	cubique	$a=5.6533$	$\Delta a/a = 6$
ZnO	wurtzite	$a=3.250$; $c=5.213$	$\Delta a/a=8.25$; $\Delta c/c=4.75$
AlN (couche tampon)	wurtzite	$a=3.112$; $c=4.982$	$\Delta a/a=4.2$; $\Delta c/c=5.3$

Tableau I.9 [74] : Les paramètres de maille et les coefficients de dilatation thermique de différents substrats employés pour la croissance de h-GaN.

I.6.2 Substrats utilisés pour la croissance de c-GaN

Durant les dernières années, plusieurs substrats de symétrie cubique ont été essayés pour l'épitaxie des nitrures cubiques ; les plus courants sont : MgO (100), Si (100), β -SiC (3C-SiC) (100), GaAs (001) ou encore Al_2O_3 (0001) [1]. GaP a été rarement utilisé.

- Le substrat le plus employé pour la croissance de GaN cubique est l'arséniure de gallium (GaAs). L'épitaxie est donc faite avec un désaccord de maille très important (de l'ordre de 20%).

•Le 3C-SiC est le matériau présentant le paramètre de maille le plus proche de c-GaN. Toutefois, il n'existe pas à l'heure actuelle de substrat massif 3C-SiC [59]. Dans ce contexte, l'utilisation de pseudo-substrat 3C-SiC déposé sur silicium peut s'avérer une alternative intéressante, car elle permet de cumuler les avantages d'un faible coût, d'un substrat compatible avec la technologie silicium, et du faible désaccord de maille entre c-GaN et 3C-SiC (environ 3.3-3.5%).

Substrat (cubique)	Coefficient de dilatation thermique $\Delta a/a (\times 10^{-6} K^{-1})$	Paramètre de maille a (Å)	Désaccord thermoélastique avec les nitrures	Désaccord de maille avec les nitrures
GaAs (100)	6.00	5.6533	GaN : 0.19% AlN : 0.29% InN : 0.01%	GaN : -20.4% AlN : -22.5% InN : -11.9%
Si (100)	3.59	5.4301	GaN : 0.03% AlN : 0.13% InN : 0.06%	GaN : -17.1% AlN : -19.3% InN : -8.3%
3C-SiC	4.3 à 5.2 (400-500 K)	4.3569	GaN : 0.14% AlN : 0.02% InN : -0.02%	GaN : 3.3% AlN : 0.4% InN : 14.2%
MgO	10.50	4.216	GaN : 0.49% AlN : 0.60% InN : 0.25%	GaN : 6.4% AlN : 3.9% InN : 18.1%
GaP	4.65	5.4512	GaN : 0.10% AlN : 0.21% InN : -0.03%	GaN : -21.0% AlN : -19.6% InN : -8.6%

Tableau I.10 [75] : Désaccords thermoélastiques et de maille entre les différents substrats utilisés et les trois nitrures dans la phase cubique.

Dans le tableau I.10 ; nous donnons le coefficient de dilatation thermique et le paramètre de maille de ces substrats, ainsi que leurs désaccords thermoélastiques et de maille avec les couches épitaxiées des trois nitrures (GaN, AlN et InN). L'absence de signe, sur les chiffres de colonnes de contraintes, indique une contrainte en tension ; et le signe négatif indique une contrainte en compression. Les coefficients de dilatation thermique sont donnés autour de 1073K (800°C).

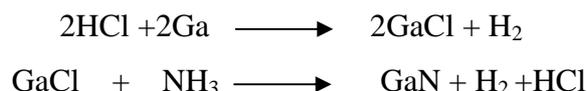
I.7 Techniques de croissance

Les nitrures d'éléments III sont des matériaux durs, très stables, quasiment inertes chimiquement. Leur problématique de croissance réside en grande partie dans la stabilité très élevée de la liaison III-N à l'origine de la faible mobilité des atomes lors de leur croissance. L'autre problème est lié à la production de radicaux libres d'azote. Si l'on utilise le gaz N₂ par exemple comme source d'azote, la température du substrat de croissance (773-1773K) (500-1500°C) est trop faible pour la dissocier efficacement (énergie de liaison d'environ 5eV par molécule). Pour permettre une réaction avec un métal de la colonne III du tableau périodique, il faut alors fournir des radicaux libres en quantité suffisante : les molécules source doivent donc être dissociées par un procédé particulier, tel qu'un plasma radiofréquence (RF) en MBE. Une autre possibilité consiste à utiliser de l'ammoniac comme source azote puisqu'il se dissocie à des températures plus faibles [76].

Les premiers films de GaN ont été obtenus par épitaxie en phase vapeur aux hydrures (EPVH) sur substrat saphir [77][78]. Cette technique de dépôt où le gallium est entraîné par le HCl gazeux pour s'allier à l'azote de l'ammoniac, présente l'avantage de donner des vitesses de croissances très grandes (de l'ordre de μm/min), ce qui a permis d'obtenir des films très épais, de l'ordre de 100 μm. Cependant, il y a des succès plus récents en épitaxie en phase vapeur aux organométalliques MOCVD (metal organic chemical vapor deposition), puis en épitaxie en jet moléculaire EJM ou MBE (molecular beam epitaxy).

I.7.1 Croissance en EPVH

L'EPVH est une technique de croissance adaptée pour l'élaboration des couches épaisses (quelques centaines de μm). Les premiers films de GaN ont été obtenus par ce mode de croissance. Les réacteurs utilisés pour la EPVH possèdent deux zones, une zone de source et une zone de croissance. Des gaz HCl et NH₃ sont injectés dans le réacteur à travers la zone de source, où la température est de 860°C, HCl passe dans une zone contenant du Ga à l'état solide pour former du GaCl qui est ensuite injecté dans la zone de croissance. Il rentre alors en réaction avec NH₃ à la surface du substrat pour former GaN, selon les réactions :



La température de croissance est habituellement comprise entre 950 et 1050°C. Le saphir est le substrat le plus souvent utilisé pour la croissance de couches épaisses de GaN par HVPE. De manière à augmenter la densité de nucléation de la couche GaN sur le saphir

[0001], un prétraitement au GaCl peut être fait, ou une couche tampon en ZnO peut être déposée.

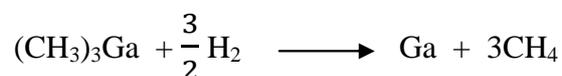
Cette méthode présente l'avantage de donner de très grandes vitesses de croissance, par exemple, Nataf et co-auteurs [79] ont montré la possibilité d'obtenir une vitesse de croissance de 100 $\mu\text{m}/\text{h}$ avec un dopage de type n de 10¹⁷cm⁻³; elle a, par conséquent, permis d'obtenir des films très épais, de l'ordre de 100 μm . Par contre ; on y contrôle difficilement les faibles épaisseurs (<10nm).

Les potentiels de cette technique ont conduit les chercheurs à optimiser cette technique pour la fabrication de substrats GaN autosupportés. Le matériau GaN épais est alors séparé de son substrat saphir par des méthodes adaptées. Cette technique donne un substrat GaN appelé free standing ou autosupporté.

I.7.2 Croissance en MOCVD

La déposition chimique en phase vapeur a été rapportée pour la première fois par Tietjen et Amick en 1966, pour la croissance des alliages GaAsP. La méthode, appelée maintenant CVD de transport de chlore, a été appliquée par Maruska et Tietjen en 1969, pour la croissance de GaN [76].

La technique MOCVD (Metal Organic Chemical VaporDeposition) ou MOVPE (Metal Organic Vapor Phase Epitaxy) est la méthode de croissance généralement utilisée dans l'industrie. Elle utilise comme précurseurs des composés organométalliques. Dans le cas du gallium, les composés fréquemment utilisés restent le triéthylgallium (TEGa) ou le triméthylgallium (TMGa). Il en est de même pour l'indium (TMI) ou l'aluminium (TMA), mais avec les molécules associées. Ces composés sont en général liquides à température ambiante ; l'hydrogène purifié peut donc être utilisé comme gaz vecteur pour les entraîner vers le réacteur. La réaction de décomposition de ces molécules est donnée ci-après :



La croissance du GaN se fait à une température comprise entre 1273k et 1423k (1000°C et 1150°C), sous pression réduite, avec des vitesses élevées de 0.5 $\mu\text{m}/\text{min}$. A cette température, le taux de décomposition de l'ammoniac est faible; il faut donc envoyer au réacteur beaucoup d'ammoniac : ce qu'on appelle une croissance riche en azote [55].

L'azote, dont la disponibilité naturelle apparaît évidente, peut être extrait de plusieurs composés. La molécule diazote, qui semble en être la source la plus triviale, s'avère beaucoup trop stable; elle ne se décompose guère et ne donne donc lieu à aucune incorporation d'azote

dans les couches. A contrario, La molécule d'ammoniac se désagrège thermiquement, mais la cinétique de décomposition demeure très lente (quelques pourcents à 1300K). Naturellement, d'autres composés azotés existent (hydrazine...), mais les difficultés d'emploi sont telles qu'elles rendent leur utilisation extrêmement délicate. L'ammoniac reste donc le meilleur choix. GaN se forme alors en suivant la réaction :



L'ammoniac stabilise la surface du GaN qui, spontanément, aurait tendance à se décomposer vu la température de croissance élevée et sous pression d'azote inférieure à la pression d'équilibre. Le schéma synoptique typique d'un bâti de MOCVD est représenté sur la figure I.14.

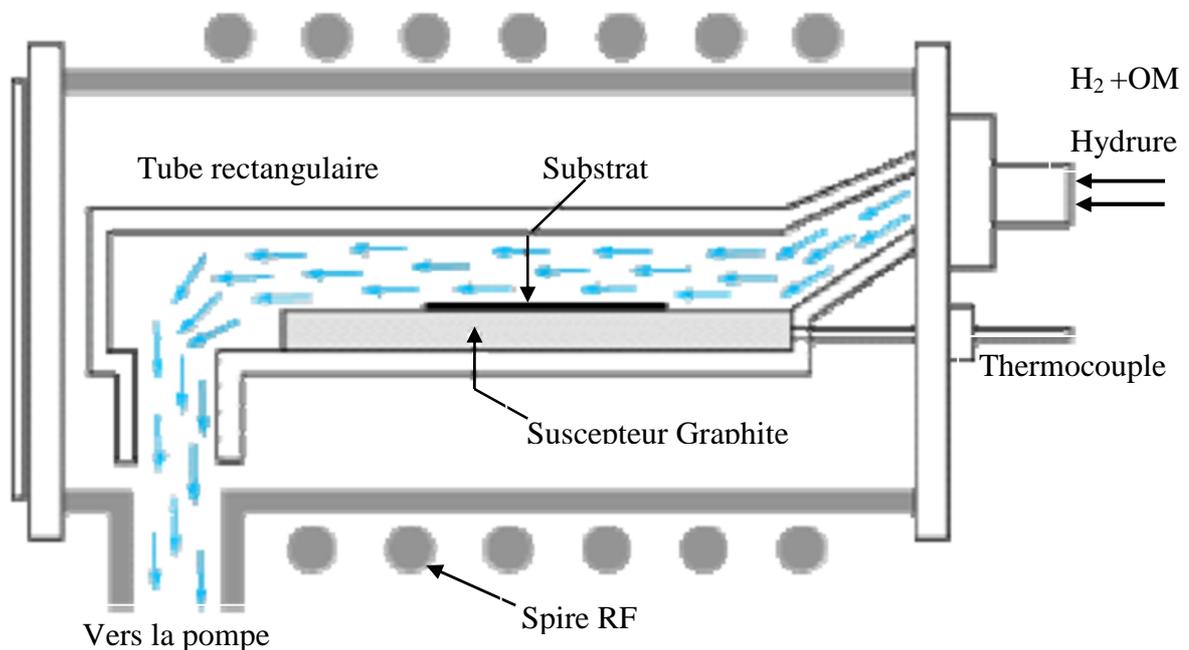


Figure I.14 [80] : Schéma synoptique d'un bâti de MOCVD.

Pour doper les couches pendant la croissance, il est nécessaire d'ajouter un flux de molécules contenant le dopant. S'il s'agit de doper p, on utilisera généralement le biscyclopentadienylmagnésium (ou Cp_2Mg) ; si le dopage désiré est de type n, la molécule utile sera probablement le silane (SiH_4).

La croissance des alliages ternaires se fait suivant le même procédé, leur composition étant contrôlée par la dynamique des flux. Il est aussi nécessaire d'adapter les paramètres de croissance (pression et température) pour chaque couche considérée.

D'une manière générale, la température est plus faible pour les alliages d'InGaN (environ 800 °C) et plus haute pour les alliages d'AlGaN (1100°C). Il convient de souligner le fait que les vitesses de croissance dépendent évidemment des ajustements réalisés, spécifiques aux opérateurs et au matériel utilisé. Cependant, elles restent généralement de l'ordre de quelques microns par heure [74].

- Les avantages de la MOCVD sont :
- Préparation de couches monocristallines :
 - uniformes en épaisseurs, en dopage et en composition.
 - d'épaisseurs précisément contrôlables.
 - présentant des interfaces abruptes.
 - Mise en œuvre simple, par rapport à la technique MBE.

I.7.2.1 Couches tampon pour la croissance MOCVD

La qualité du GaN épitaxial est conditionnée par les premiers stades de la croissance. Yoshida *et al.* ont montré que le dépôt à basse température de 773k à 1073k (500 °C à 800 °C) d'une couche Tampon de AlN sur le substrat saphir, avant la croissance de la couche active, apporterait une amélioration significative de la qualité du GaN en EJM. L'adoption de cette technique à la MOVPE par Amano *et al.* Par la suite, Nakamura *et al.* ont mis en évidence que le même type d'amélioration pouvait être obtenu avec une couche tampon de GaN. Ces faibles températures de croissance permettent de limiter la diffusion des espèces en surface, et par conséquent d'obtenir une distribution homogène des atomes sur toute la surface du substrat.

Ainsi la couche obtenue est amorphe et cristallise lorsqu'elle est portée à la température de croissance du GaN.

Les conditions de croissance des couches tampons sont primordiales pour obtenir une bonne cristallisation avant la reprise d'épitaxie. Par exemple, une couche tampon trop épaisse ne cristallisera pas entièrement lors de la montée en température; si la température de dépôt est élevée, la mobilité de surface accrue permettra aux atomes de se regrouper par îlots et la couche ne sera pas homogène [80].

I.7.2.2 Etapes de la croissance sur substrat saphir

I.7.2.2.1 Phase de nucléation

La croissance directe de GaN, sur substrat saphir présentant un désaccord de paramètre de maille de 16%, est tridimensionnelle. La croissance se fait par îlots qui ne coalescent pas

entre eux et de nombreux défauts étendus de forme hexagonale apparaissent. Ce comportement a toujours représenté un obstacle important au développement des nitrures.

Pour surmonter cette difficulté, la croissance du GaN s'effectue en deux étapes principales. Une couche d'AlN de très faible épaisseur (quelques centaines d'Å) épitaxiée à basse température est tout d'abord déposée sur le substrat. Cette couche de nucléation joue le rôle de couche tampon, destinée à absorber la majorité des contraintes liées à la désadaptation entre le substrat et la couche de GaN. La nature de cette couche n'est pas exactement identifiée. Des études montrent qu'elle peut être cristalline et cubique ou encore amorphe. Il est possible aussi d'épitaxier une couche de nucléation en GaN. Celle-ci a été identifiée comme cristalline et hexagonale. En résumé, nous retiendrons que la couche de nucléation favorise la croissance bidimensionnelle d'une couche de GaN épitaxiée à haute température, et réduit la densité de défauts et de dislocations liées à la désadaptation entre le substrat et la couche de GaN. Cette densité de dislocations reste très élevée (environ 10^{10} - 10^{11} cm⁻²).

I.7.2.2 Phase de nitruration du substrat

Une autre étape peut également être insérée avant la croissance de la couche de nucléation : c'est la phase de nitruration du substrat. Cette procédure consiste à placer le substrat saphir à haute température (usuellement celle de la croissance de GaN soit environ 1373K) sous un flux d'ammoniac. Dans ces conditions, il est démontré qu'une fine couche d'AlN (Al provient du saphir Al₂O₃ et N est apporté par NH₃) croît à la surface du saphir. Cette couche mono-cristalline a une épaisseur d'environ 4nm pour une nitruration de 5minutes. Toutefois, cette étape de nitruration du substrat n'est pas réalisée systématiquement.

I.7.2.3 Croissance du GaN

La croissance MOCVD du GaN pose des problèmes différents de la croissance des III-V classiques, notamment en raison de l'utilisation de l'ammoniac comme précurseur d'azote atomique. La dissociation de la molécule de NH₃ nécessite que l'ammoniac soit porté à une température très élevée. Cette condition n'est toutefois pas suffisante car même à 1223K (950°C), seulement 4% de l'ammoniac est décomposé. En outre, l'atome N est très réactif. On peut en produire beaucoup, mais il est difficile d'en maintenir une concentration importante. La température de croissance est donc souvent supérieure à 1273K (1000°C).

Celle-ci n'est pas seulement destinée à craquer le précurseur d'azote, mais aussi à assurer une mobilité suffisante des atomes sur la surface de croissance. A titre de comparaison, la décomposition des précurseurs de Ga ne pose aucun problème : dans l'hydrogène, il a été

montré que le TMG et le TEG sont complètement décomposés à 723K (450°C) et 623K (350°C) respectivement. C'est pourquoi pour pallier le manque d'atomes N, des rapports molaires N/Ga en phase gazeuse sont très élevés (jusqu'à 6000) durant la croissance. Autre problème majeur lié à l'ammoniac, la pureté disponible actuellement sur le marché n'est pas équivalente à celle d'autres hydrures tels que l'arsine AsH_3 et la phosphine PH_3 , et l'utilisation de purificateurs très performants est impérative.

L'utilisation de l'ammoniac présente tout de même quelques atouts. Sa décomposition s'effectue principalement à la surface du GaN ce qui a pour effet de stabiliser la surface du matériau (très instable à plus de 1273K). De plus, l'ammoniac est beaucoup moins toxique que les principaux précurseurs d'éléments V utilisés en MOCVD (arsine et phosphine). L'ammoniac reste donc de loin le plus utilisé des précurseurs d'azote pour la croissance MOCVD des nitrures [81].

II.7.2.3 Analyse thermodynamique de la croissance de films minces

Pour la plupart des systèmes de matériaux ; la technique CVD a pris considérablement plus de temps que les autres techniques de croissance de films minces, à se développer. Il était nécessaire de développer les précurseurs, de minimiser le taux des réactions concurrentes et de contrôler les transitions impliquées dans la croissance.

La thermochimie de la croissance de GaN, utilisant la CVD, a été écrite par Ban en 1972 et, par Liu et Stevenson en 1978. Ces auteurs ont modélisé la thermodynamique et les facteurs cinétiques pour la croissance CVD, en utilisant la CVD par transport de chlore (CTCVD). Cette dernière technique utilise un processus de réaction à deux temps, pour produire GaN(s) :

1/ Le gaz GaCl est synthétisé quand le gaz HCl est débité sur Ga liquide dans la zone source (Ban, 1972), selon la réaction :



Dans les conditions typiques, cette réaction est très efficace. En utilisant la spectroscopie de masse :

- En 1972 ; Ban a trouvé que GaCl(g) est le seul produit de réaction, qui contient le gallium généré. En 1973 ; il a trouvé un rendement de conversion en GaCl(g) inférieur à 83%, pour des températures entre 973 et 1073K (700 et 800°C).
- En 1978 ; Liu et Stevenson ont démontré que le rendement de conversion en GaCl(g) est d'environ 97 à 99%, à 1223K (950°C).

2/ Lorsque le gaz GaCl(g) vient se mélanger à l'ammoniac NH₃ dans la zone de déposition, GaN(s) est alors synthétisé selon la réaction :



- En 1972 ; Ban a trouvé expérimentalement que 80% de GaCl(g) introduit, réagit quand l'hélium (He) est le gaz porteur, et seulement 50% du produit réagit quand on utilise l'hydrogène (H₂) comme gaz porteur.

Cette différence a été attribuée à l'effet de la loi de l'action de masse dans l'équation précédente.

Il apparaît que l'énergie libre de Gibbs (d'après Thurmond et Logan) augmente avec la température, et la réaction devient défavorable du point de vue thermodynamique ($\Delta G > 0$) aux températures excédant 1273K (1000°C). La réaction de décomposition de GaN, en Ga(l) et 1/2 N₂(g), joue aussi un rôle dans la limitation de la température de croissance malgré la grande barrière cinétique qui empêcherait la décomposition. Une autre réaction de concurrence induit la décomposition de NH₃ qui est instable thermodynamiquement aux températures élevées, utilisées dans la croissance. La réaction de décomposition de l'ammoniac aboutit à la production de N₂(g), une espèce chimique qui ne réagit pas avec GaCl(g) dans l'environnement du réacteur CVD (Ban`1972 ; Liu et Stevenson`1978). Cette réaction de décomposition doit être alors empêchée pour faciliter la synthèse de GaN.

L'ammoniac est dissocié à plus de 99.9925% dans les conditions de la croissance CVD, à rappeler : ~1273-1373K (~1000-1100°C), et ~0.1-1.0bar. La réaction CVD dépend du taux de la réaction de dissociation de NH₃ qui est extrêmement lente, dû à la barrière cinétique de cassure de la liaison N-H.

Ban (1972) ; Rocasecca, Saul et LOrimor (1974) ; Liu et Stevenson (1978) ; tous ont trouvé expérimentalement que le taux de décomposition de l'ammoniac décroît avec la température, et dépend des catalyseurs utilisés (habituellement : le tungstène, le platine et le graphite). Ils ont trouvé aussi que la combinaison de Ga(l) et GaN(s) est étonnamment efficace comme catalyseur ; alors que Ga(l) seul ou bien GaN(s) seul, n'augmente pas le taux de décomposition. Cela suggère que la déposition du matériau sur les parois du réacteur sera préjudiciable à la croissance sous les conditions où GaN(s) et Ga(l) sont présents. Sous ces conditions ; on a constaté une chute du taux de croissance, due probablement à la réduction de la concentration en NH₃ [76].

I.7.3 Croissance en EJM

La technique EJM ou MBE (Molecular Beam Epitaxy) est une technique de croissance sous ultravide, Elle utilise l'évaporation ou de la sublimation sous vide de matériaux sources solides portés à haute température, lesquels se déposent sur un substrat (à température plus faible qu'en MOCVD, de l'ordre de 973K (700°C)). Cette technique nécessite donc la mise en œuvre d'un ultra vide dans le bâti ($\sim 10^{-10}$ Torr) avec une pression de dépôt de 10^{-6} Torr. Les particules arrivant avec une certaine énergie sont adsorbées à la surface sur laquelle elles vont pouvoir se mouvoir (figure I.15). Le temps pendant lequel les atomes restent sur la surface du substrat dépend de la température de celui-ci : une température trop élevée va favoriser la désorption des atomes. Les atomes en surface se déplacent pour rejoindre soit un autre petit groupe d'atomes et former un nucleus, soit un bord de marche déjà existant. L'évolution de la surface, pendant la croissance, peut être suivie par un dispositif, in situ, de diffraction des électrons de haute énergie en incidence rasante RHEED (reflection high energy electron diffraction). Les nucléi continuent de se former (phase de nucléation) pour atteindre une densité critique à partir de laquelle on assiste à la formation de petits îlots. Les îlots vont ensuite coalescer pour former une mono-couche épitaxiale. Le processus ainsi répété donne le film épitaxié final.

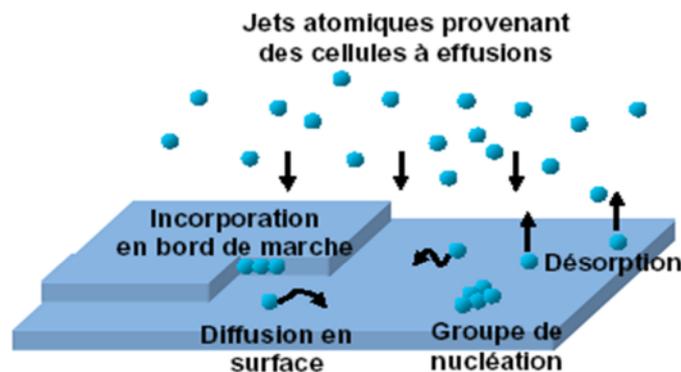


Figure I.15 [49] : Croissance par l'épitaxie par jets moléculaires.

Il est notamment possible de connaître en temps réel, le nombre de couches déposées, la variation du paramètre de maille, la rugosité du front de croissance, les transitions 2D-3D (croissance de boîtes quantiques) et les reconstructions de surface.

Dans le cas des matériaux nitrurés, le gallium et l'aluminium atomiques sont obtenus par sublimation de sources solides. L'azote quant à lui est obtenu à partir d'un précurseur gazeux qui peut être soit de l'ammoniac NH_3 soit la molécule N_2 . Dans ce dernier cas, la molécule N_2 très stable chimiquement est dissociée soit par radio fréquence (source d'azote

RF) soit par résonance électron-cyclotron (ECR). La température de substrat pour le dépôt de nitrure par EJM est classiquement comprise entre 723K et 1123K (450°C et 850°C).

L'EJM présente l'avantage de permettre un contrôle de la croissance et des épaisseurs des couches. De plus, elle est particulièrement adaptée à l'obtention d'interfaces abruptes. En revanche, les vitesses de croissance sont lentes (de l'ordre de 1µm/h à des températures de l'ordre de 973K) et l'entretien des bâtis est coûteux.

I.7.3.1 Diagramme de croissance de GaN

En épitaxie par jets moléculaires assistée par plasma, deux types de paramètres permettent de contrôler la croissance d'une couche donnée : les flux des différentes espèces émises par les cellules à effusion, et la température du substrat. Le choix de ces paramètres va déterminer la nature de la couche épitaxiée, mais également sa qualité cristalline. Dans le cas d'une couche épaisse de GaN, il existe quatre régimes de croissance dont un seul est optimal pour obtenir une couche de bonne qualité. On peut représenter ces différents régimes sur un diagramme montrant le flux de gallium en fonction de la température du substrat (T_s) pour un flux d'azote donné (figure I.16) [49].

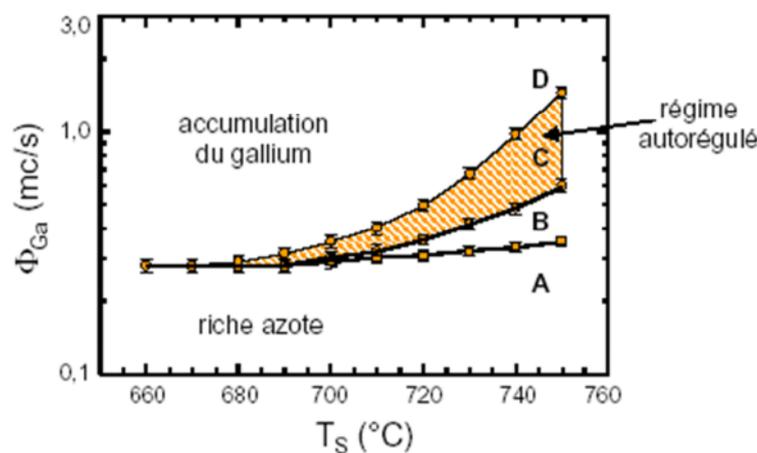


Figure I.16 : Régimes de croissance de GaN pour un flux d'azote de 0.28 monocouche (mc)par seconde.

- A.** Le régime "riche azote" conduit à une surface très rugueuse et augmente la densité de dislocations.
- B.** Le régime "riche gallium", avec un taux de couverture du gallium inférieur à une monocouche, est similaire au précédent.
- C.** Le régime autorégulé représente les conditions optimales. C'est également un régime "riche gallium" avec un taux de couverture de 2.5 monocouches de gallium en surface, pendant la croissance.

D. Dans le régime d'accumulation du gallium ; l'excès de métal en surface, finit par former des gouttelettes de plusieurs dizaines de microns de diamètre qui dégradent localement les propriétés du matériau de façon très significative.

La croissance se fait donc dans le régime autorégulé C. Par ailleurs ; il a été montré que la présence d'indium, à des températures suffisamment élevées pour éviter l'incorporation qui formerait $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ dans ce cas, modifie la cinétique de surface en favorisant une croissance bidimensionnelle. Cet effet, qualifié de surfactant (catalyseur de surface), permet d'améliorer notablement la qualité des couches de GaN.

I.7.3.2 Croissance sur substrat saphir

Les substrats saphir sont généralement nitrurés avant la croissance de GaN par une exposition de leur surface chauffée typiquement vers 1073K (800°C), à un flux d'ammoniac. Il semble qu'une monocouche d'AlN se forme durant cette étape. Une couche tampon d'AlN peut éventuellement être déposée avant la croissance. Notons que ce type de couche tampon est épitaxié à une température comparable à celle de croissance de GaN et diffère, de ce fait, des couches tampon utilisées en MOCVD.

I.7.3.3 Analyse thermodynamique de la croissance de films minces

La croissance par EJM a été initialement développée par Chao et al. dans les années 1970. En quelques années de sa conception, on a trouvé qu'elle offre plusieurs avantages sur les autres techniques de croissance de films minces : on peut contrôler avec précision l'épaisseur et la composition de l'alliage, couche par couche ; la qualité du matériau ainsi développé est relativement insensible aux conditions de croissance, ce qui permet de fabriquer des structures complexes.

Dans une analyse chimique, Tsao (en 1993) a montré que la thermodynamique prédit avec précision les conditions qui permettent la synthèse d'une seule phase de semiconducteurs III-V conventionnels. Il a démontré que le composé III-V et la vapeur doivent être stables thermodynamiquement, pour obtenir des films de haute qualité. Malgré son utilité, cette approche n'inclut pas directement la diffusion en surface, la nucléation et l'incorporation d'adatoms. La cinétique microscopique n'est pas modélisée avec précision ; mais on a utilisé un grand nombre d'observations pratiques afin de maîtriser les barrières cinétiques de l'épitaxie. Par exemple ; la température optimale du substrat, utilisée pour développer des films de haute qualité, est comprise entre 50 et 75% de la température de fusion du matériau. Cette approximation est applicable aussi aux autres méthodes de croissance, notamment la

déposition chimique en phase vapeur des métaux organiques, la pulvérisation et la déposition par laser pulsé.

Les concepts utilisés pour la synthèse des semiconducteurs III-V conventionnels ne peuvent pas être directement appliqués à la croissance du GaN.

La synthèse de GaN a lieu dans des conditions où GaN(s) n'est pas stable thermodynamiquement. Il faut noter que la température de croissance EJM (typiquement < 1123K soit 850°C) est très en dessous de 50% de la température de fusion théorique de GaN, qui est de l'ordre de 2793K.

Les conditions typiques pour GaN correspondent à la plus faible énergie libre de Gibbs de Ga(l) et N₂(g). Pour fournir l'énergie suffisante à la formation de GaN, il faut utiliser des espèces actives d'azote. Pour l'élément III, la source la plus commune est l'évaporation de Ga à partir d'une cellule de Knudsen (Paisley et al.'1989 ; Martin et al.'1991 ; Lei et al.'1992 ; Fu et al.'1995 ; Yang, Li and Wang'1995). A cause de la rapide atteinte de la chaleur de condensation de Ga sur la surface de GaN, et de la nature non réactive de la molécule d'azote à l'état fondamental ; on ne s'attend pas à une formation facile de GaN.

Les concepts utilisés pour la synthèse des semiconducteurs III-V conventionnels ne peuvent pas être directement appliqués à la croissance du GaN.

On a constaté expérimentalement qu'on ne peut pas développer GaN par cette technique sous vide, en utilisant seulement l'azote moléculaire à l'état fondamental (i.e. sans activation) ; par contre, avec le gaz NH₃ utilisé comme source d'azote, GaN est capable de se former.

Du moment que GaN(s) est instable thermodynamiquement dans les conditions de croissance par EJM ; il va se décomposer durant la croissance, mais lentement à cause de la grande barrière cinétique de la réaction inverse. Cela en permet alors une synthèse avec succès. Ga(l) agit comme catalyseur et augmente le taux de décomposition ; il faut donc éviter une croissance sous conditions riches en Ga et à hautes températures, pour empêcher la réaction inverse. Sous de telles conditions (avec $T \gg 1123\text{K}$ (850°C)), on a une rapide diminution dans le taux de croissance et une formation de gouttelettes de Ga sur la surface du film. A cause des limitations pratiques dans la production d'un grand flux d'azote actif ; le taux de décomposition fixe la température maximale limite de la croissance de GaN à environ 40% (1173K ou 900°C) de la température de fusion. Un autre effet préjudiciable est attribué à la présence de la réaction de décomposition : c'est la rapide augmentation de la concentration des porteurs libres à température élevée.

Finalelement ; la croissance a été limitée par la réaction de décomposition à environ 33% de la température de fusion, avec l'utilisation de faisceaux d'azote à basse énergie, pour améliorer la qualité des films minces de GaN. Si cette énergie est trop faible, elle sera insuffisante à produire le déplacement en surface ; si elle est trop importante, elle produira des déplacements en profondeur et la création de défauts aussi bien qu'une augmentation du taux de la réaction inverse. Elle est approximativement égale à 27eV (Weast'1973) [76].

I.7.4 Avantages et inconvénients des différentes techniques d'épitaxie

De ces trois techniques, la MBE est celle qui permet de déposer des couches ultra minces tout en contrôlant parfaitement la concentration de dopage des couches, la MOCVD est la plus courante, et la EPVH est celle qui présente la vitesse de croissance la plus élevée. Le tableau I.11 résume les principaux avantages et inconvénients de ces trois techniques d'épitaxie [82].

Epitaxie	Avantages	Inconvénients
EPVH	Technique de croissance simple. Très approprié pour les films GaN épais grâce à la très grande vitesse de croissances (>200 μ m/h). Intérêt accru pour produire des couches tampons épaisses, avec des contraintes relaxées. Bonne qualité des films.	Très haut température de croissance du procédé, entre 1000 et 1200°C, entraînant une forte concentration d'impureté de type Si ou O. Atmosphère sous Hydrogène. Pas d'interface abrupte.
MOCVD	Haut vitesse de croissance. Réalisation d'interfaces abruptes. Possibilité de croissance d'aires de grande taille. Contrôle de l'épaisseur in-situ. Bonne capacité de production. Très haut qualité de film. Cout intermédiaire.	Nécessite une grande quantité de NH ₃ . Le dopage de type p par Mg entraine la formation de complexes Mg-H qui nécessitent un procédé technologique supplémentaire pour être activés. Haut température.
MBE	Haut pureté du substrat. Environnement libre en hydrogène. Réalisation d'interfaces abruptes. Possibilité d'utiliser un plasma ou un laser pour assister la croissance. Faible température.	Besoin d'ultra vide. L'azote ne peut être directement utilisé pour la croissance du GaN. De l'azote doit être d'abord décomposé pour réagir avec la surface du substrat de manière à incorporer le GaN. Faible vitesse de croissance (1 μ m/h). Faible capacité de production, très cher.

Tableau I.11 [82] : Avantages et inconvénients de la EPVH, de la MOCVD, et de la MBE, pour la croissance de GaN.

Une nouvelle technique d'épitaxie émerge et semble très prometteuse. Elle rassemble les avantages de la MOCVD et de la MBE : l'épitaxie par jets moléculaires à partir de matériaux organométalliques (MOMBE) citée plus haut, appelée encore épitaxie par jets chimiques (CBE).

I.7.5 Croissance en ELO

Mise au point vers la fin des années 1970 ; cette méthode a permis d'élaborer des structures SOI, et d'améliorer la croissance de GaAs et InP sur silicium [Jastrzelski'1983]. Les premières couches de GaN développées par ELO (Epitaxial Lateral Overgrowth) ont été rapportées, par Kato et al. en 1994, dans la technique de croissance EPVOM sur substrat saphir.

C'est un procédé d'épitaxie qui privilégie la croissance latérale. Cette technique, qui permet de réduire la densité de défauts au niveau de l'hétéro-épitaxie, se décline en deux versions [69].

Procédé ELO-1 : Dans le procédé ELO à une étape, la technique consiste à faire croître par MOCVD une couche de GaN, suivie d'une couche amorphe de SiO_2 ou de Si_3N_4 , sur une épaisseur de 100-200 nm. Ensuite, des petites "fenêtres" de forme rectangulaire ou circulaire sont ouvertes, sur une profondeur permettant d'atteindre la première couche de GaN. On fait alors croître un film de GaN. La croissance épitaxiale se fait uniquement dans les ouvertures pratiquées entre les masques, en privilégiant une croissance latérale. Au-dessus des masques, les lignes de dislocations ne peuvent se propager dans les couches supérieures ; tandis que le matériau GaN qui croît au-dessus des ouvertures, présente la même densité de défauts que la première couche. Avec la technique ELO-1, on arrive à atteindre des densités de dislocations de 10^7 cm^{-2} . Certaines équipes de recherche utilisent des masques en tungstène, et non en SiO_2 [83]. Les figures I.17 et I.18 illustrent le procédé ELO-1.

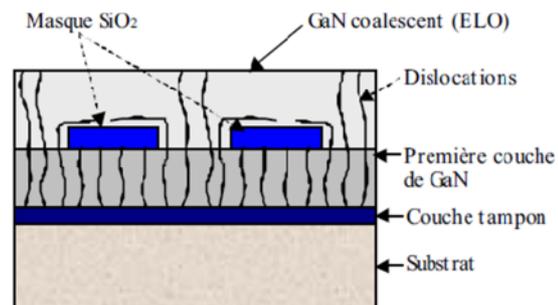
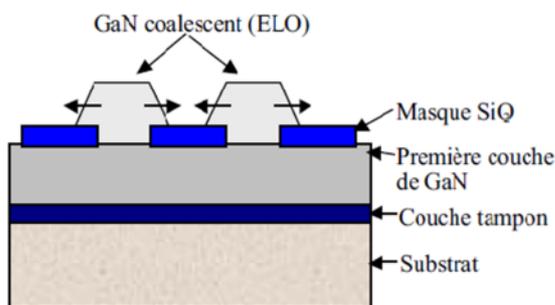


Figure I.17 : Principe de la technique ELO-1. Figure I.18 : Lignes de dislocations.

Procédé ELO-2 : Dans le procédé ELO à deux étapes, les conditions de croissance de la première étape sont contrôlées pour obtenir des formes triangulaires. A l'intérieur de ces motifs, les lignes de dislocations arrivant du substrat sont déviées de 90° quand elles rencontrent une face latérale inclinée. Au cours de la seconde étape, les conditions de croissance sont modifiées pour obtenir une coalescence complète (la croissance du GaN est préférentiellement latérale, et les îlots formés entre les masques se rejoignent par-dessus les

masques, et leurs points de rencontre forment une zone dite coalescente). La technologie ELO-2 produit du GaN de haute qualité, avec des densités de dislocation de l'ordre de 10^6 cm^{-2} , et une concentration de pièges profonds à électrons inférieure à 10^{14} cm^{-3} (pour les films GaN sans recours à l'ELO, elle est de l'ordre de 10^{15} cm^{-3}).

D'autres procédés dérivés de la technique ELO existent également. Parmi eux, on peut citer le procédé ELO sans masque ; ce procédé consiste en un dépôt d'une couche d'AlN à faible température, rendant rugueuse la surface de cette dernière. Le GaN est ensuite déposé, en favorisant la croissance latérale. Ce procédé a le mérite de diminuer le nombre d'étapes technologiques, à l'inverse du procédé PENDEO qui en ajoute.

➤ Procédé PENDEO

L'épitaxie PENDEO est basée sur le principe du procédé ELO. On arrive grâce à ce procédé, à obtenir des couches de GaN de grandes qualités, avec des densités de dislocations aussi faibles que 10^5 cm^{-2} . Des travaux ont également été réalisés pour retirer les masques lors du procédé, de manière à supprimer les problèmes de différence de dilatation thermique entre GaN et le matériau diélectrique, améliorant ainsi la fiabilité des échantillons. La figure I.19 illustre le principe de l'épitaxie PENDEO, et la figure I.20 montre une image au MEB d'une croissance par épitaxie PENDEO d'une couche GaN sur un substrat 6HSiC [84][85].

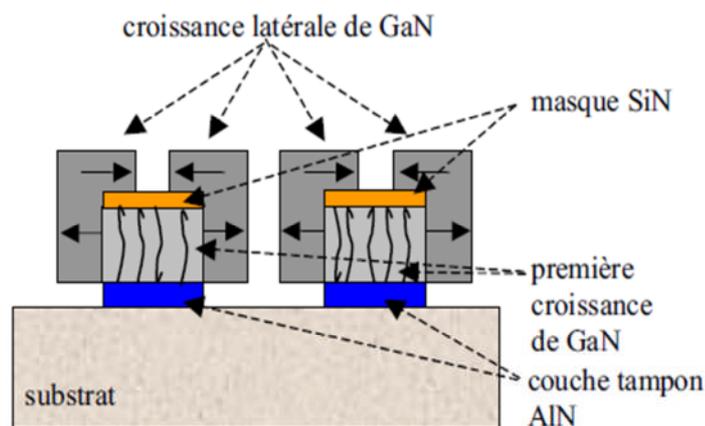


Figure I.19 [85] : Principe du procédé PENDEO.

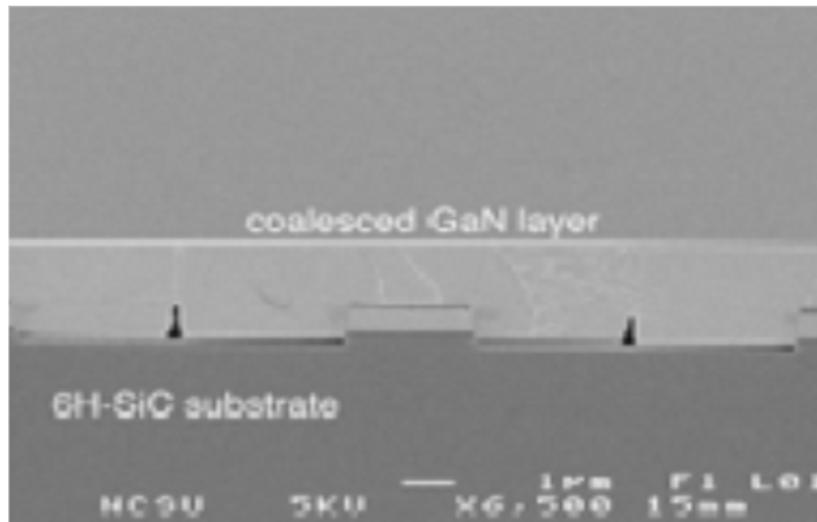


Figure I.20 [85] : Observation au MEB d'une croissance par PENDEO sur substrat 6H-SiC.

I.8 Stabilité thermique et réaction de décomposition

Grâce à son énergie de liaison importante (9.12eV/at), le nitrure de gallium présente des valeurs élevées de la température et de la pression de fusion [$T_f=2793$ à 3073K (2520 à 2800°C) et $P_f=4.5\text{GPa}$ (45000bar)]. Ceci se traduit par une très basse énergie libre de Gibbs, du cristal. Par conséquent, l'énergie libre de Gibbs, des corps constitutifs purs de GaN (Ga et N_2), devient assez proche de celle du cristal ; l'énergie de liaison de la molécule d'azote étant elle aussi très élevée (4.9-5eV/at).

La figure I.21 (a) donne l'énergie libre de Gibbs de GaN et celle de ses constituants en fonction de la température et de la pression d'azote. Quand la température augmente, l'énergie libre de Gibbs de "Ga + 1/2 N_2 " diminue plus rapidement que celle de GaN lui-même ; et pour des valeurs élevées, GaN devient thermodynamiquement instable. L'intersection entre les courbes d'énergie libre de Gibbs détermine la température à laquelle GaN coexiste avec ses constituants, à une pression donnée. A pression ambiante, GaN est stable jusqu'à 1200K (927°C), au-delà de laquelle il se décompose. Une augmentation de la pression permet alors de le stabiliser à plus haute température [29-30].

La figure I.21 (b) donne, en traits pointillés, la pression partielle de Ga(g) sur GaN et, en traits pleins, la pression d'équilibre d'azote pour la réaction $\text{Ga(l)} + 1/2\text{N}_2(\text{g}) = \text{GaN}$. La pression de Ga suit la loi de "Van't Hoff", ce qui se traduit par une linéarité en fonction de l'inverse de la température. En revanche, la pression de N_2 présente une forte déviation à cette loi à haute température, car l'azote ne se comporte plus comme un gaz parfait. Ceci est bénéfique pour stabiliser GaN, car la pression d'azote est alors plus faible d'un ordre de grandeur, que dans le cas d'un gaz parfait [86].

Madar et al. [87], et Karpinski et al. [88] ont déterminé l'enthalpie standard de formation H_f et l'entropie standard de formation S_f , à partir de la pression d'équilibre de l'azote sur GaN. A 298K (25°C), elles sont respectivement de $157\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$ pour H_f [87-88] et $136\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}\text{K}^{-1}$ pour S_f [88]. La valeur de H_f est cohérente avec celle déterminée récemment par Edwel et al. [89] par mesures calorimétriques : $157\text{kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$.

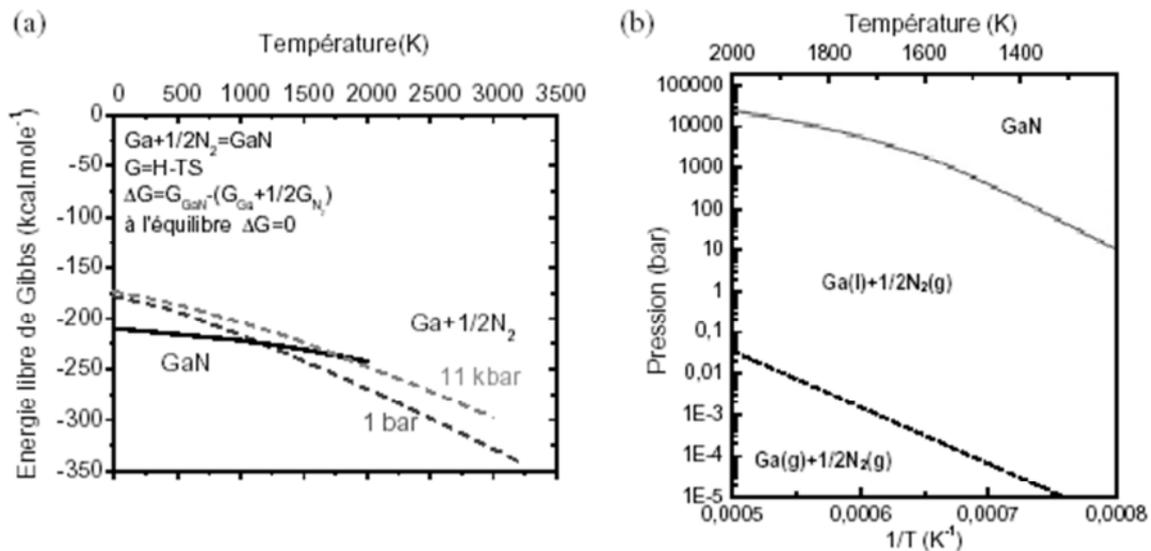


Figure I.21 : (a) Energie libre de Gibbs de GaN et de ses constituants en fonction de la température, selon J. Karpinski et al. [90] (1kcal=4.18kJ).

(b) Pressions d'équilibre des phases Ga(l)-N₂-GaN(s) en fonction de l'inverse de la température selon I. Grzegory [86] (1bar=0.1MPa).

Pour les composés III-N d'une manière générale, les caractéristiques d'évaporation sont très en contraste avec celles de tous les autres matériaux III-V. Le pourcentage du taux de décomposition observé au taux prédit thermodynamiquement est appelé coefficient d'évaporation α (Langmuir'1913 ; Knudsen'1915 ; Hertz'1882) tel que :

$$J = \alpha \times J_{\text{eq}} = \alpha \times (2\pi MRT)^{-1/2} \times P_{\text{eq}} \quad [91] \quad (\text{I.16})$$

Où J est le flux ; M est la masse de l'espèce gazeuse ; P_{eq} est la pression d'équilibre ; RT est la constante des gaz parfaits (avec $R=8.3144\text{J}/\text{mole}\cdot\text{K}$).

Pour AlN (Hildenbrand and Hall'1964) et GaN (Munir and Searcy'1965, Groh et al.'1974) ; la présence d'une forte liaison chimique métal-N à la surface, est le facteur le plus important qui induit un faible coefficient d'évaporation : $\alpha < 6 \times 10^{-3}$. Munir et Searcy ont rapporté que ce coefficient peut descendre jusqu'à 10^{-8} Torr, sous condition du vide et en l'absence de catalyseurs. La présence de la barrière cinétique à la décomposition du GaN fait

que le taux d'évaporation de Ga(v) à partir d'une surface de GaN(s) (Munir and Searcy' 1965) est plus lent que celui de Ga(l) (Dushman' 1949), à températures comparables.

Où J est le flux ; M est la masse de l'espèce gazeuse ; P_{eq} est la pression d'équilibre ; RT est la constante des gaz parfaits (avec $R=8.3144\text{J/mole.K}$).

Dans les travaux menés par Zuhair, Munir et Searcy en 1965 ; et par Mar et Searcy en 1968 ; la spectrométrie a confirmé la présence d'espèces de Ga et N_2 dans la vapeur. Groh et al. (en 1974) ont détecté seulement l'azote durant la décomposition du GaN, sous vide ; cependant, du Ga sous forme métallique a été détecté sur les parois du four de recuit et cela implique qu'une espèce contenant Ga se développe à partir de la surface de GaN et qui n'est pas détectée par le spectromètre. Ils ont aussi annoncé la présence de gouttelettes de Ga sur la surface de GaN, durant la décomposition sous vide. Par une étude d'Arrhénius ; les premiers auteurs ont trouvé une énergie d'activation de l'ordre de 73kcal/mole, Groh a trouvé 74.72kcal/mole. Cette énergie est très petite devant celle de liaison des adatoms ; ceci signifie que le processus de décomposition implique l'interaction avec une autre espèce sur la surface.

Ga(l) et In(l) sont connus comme catalyseurs qui augmentent le taux de décomposition de GaN(s). Cette action entraîne la formation des liaisons Ga-N ou In-N à travers l'interface liquide-solide, qui aboutit à une énergie de liaison réduite de la dernière couche atomique du solide.

De même ; GaN est thermodynamiquement instable dans un environnement d'hydrogène : phénomène observé par Morimoto en 1974 et par Sun et al. en 1994. Après recuit dans l'hydrogène pendant une heure, à 1273K (1000°C), les films de GaN élaborés sur saphir (0001) se décomposent complètement, laissant Ga(l) condensé sur la surface du substrat.

Développé sur 6H-SiC terminé par Si, GaN se décompose moins. Sun a montré que GaN (11 $\bar{2}$ 0) déposé sur saphir (0 $\bar{1}$ 12) a un taux de décomposition plus grand que celui de GaN (0001) déposé sur saphir (0001). Les auteurs ont expliqué cette différence dans le taux de décomposition par le fait que GaN (0001) terminé par N est plus stable que le premier terminé par Ga. L'influence de l'hydrogène sur le taux de décomposition n'est pas claire.

Somorjai and Lester' 1967, et Somorjai' 1968, ont montré que le taux de décomposition dépend de la densité des dislocations et des impuretés.

I.9 Contraintes dans les couches de GaN [32]

Pendant la croissance épitaxiale ; la couche déposée peut être déformée après une certaine épaisseur, à cause du désaccord entre les paramètres de mailles et les coefficients de dilatation thermique de la couche et du substrat. A partir des lois de l'élasticité ; nous pouvons calculer l'état de contrainte d'un film, en utilisant les constantes élastiques.

Le désaccord de maille $\frac{\Delta a_{cs}}{a_s}$, entre la couche et le substrat, se traduit par l'équation :

$$\frac{\Delta a_{cs}}{a_s} = \frac{a_c - a_s}{a_s} \quad (I.17)$$

Où a_c et a_s sont les paramètres de maille de la couche entièrement relaxée et du substrat, respectivement.

$$a_c = \frac{a_{c\perp} + \left(\frac{2\nu}{1-\nu}\right)a_{c//}}{1 + \left(\frac{2\nu}{1-\nu}\right)} \quad (I.18)$$

Où le coefficient de poisson est donné, en fonction des constantes d'élasticité C_{11} et C_{12} (I.5.1) dans l'axe de croissance (direction $\langle 111 \rangle$), par :

$$\nu = \frac{C_{12}}{C_{11} + C_{12}} \quad (I.19)$$

Les contraintes résiduelles dans le film, dans le plan et hors plan, sont données par :

$$\left\{ \begin{array}{l} \varepsilon_{dansleplan} = \frac{a_{c//} - a_c}{a_c} \quad (I.20) \\ \varepsilon_{horsplan} = \frac{a_{c\perp} - a_c}{a_c} \quad (I.21) \end{array} \right.$$

$a_{c//}$ et $a_{c\perp}$ sont les valeurs des paramètres de maille de la couche non relaxée, dans le plan et hors plan.

La contrainte thermoélastique, emmagasinée par la couche pendant un refroidissement ou un changement de température, est donnée par :

$$\frac{\Delta e_{cs}}{e} = \Delta T(\alpha_s - \alpha_c) \quad (I.22)$$

Où $\Delta T = (T_i - T_f)$ représente la différence de températures initiale et finale. α_s et α_c sont les coefficients de dilatation thermique du substrat et de la couche, respectivement.

Il est nécessaire de prévoir et connaître ces contraintes, pour mieux interpréter les résultats.

I.10 Polarisation spontanée et piézoélectrique

A cause de la nature ionique de la liaison métal-azote et de l'absence de centre d'inversion, les nitrures en phase hexagonale (wurtzite) sont caractérisés par la présence d'une polarisation interne intense qui consiste en deux contributions : la polarisation spontanée et la polarisation piézoélectrique.

Les barycentres des charges positives (portées par les atomes de métal) et négatives (portées par les atomes d'azote) ne coïncident pas dans la cellule élémentaire de wurtzite et forment un ensemble de dipôles électriques orientés selon l'axe c. Ainsi, une polarisation électrique macroscopique apparaît et cela même dans une structure wurtzite idéale [91]. Ce phénomène existe dans le cristal à l'équilibre en l'absence de toute contrainte externe. Bernardini et al. [92] montrent que la polarisation spontanée dans les nitrures est très élevée. Cette polarisation spontanée P_{sp} se manifeste aux interfaces du matériau avec le vide ou avec un autre matériau de nature différente. Elle crée une charge monopolaire $[P_{sp} \cdot n]$ à l'interface entre le matériau et le vide, ou $[P_{sp}(A) - P_{sp}(B)] \cdot n$ à l'interface entre deux matériaux A et B (n : vecteur unité normal à la surface).

Dans tous les nitrures d'éléments III, le vecteur de la polarisation P_{sp} est orienté suivant la direction [0001]. Il n'existe aujourd'hui aucune mesure expérimentale absolue de la polarisation spontanée dans les nitrures. Seul un calcul ab-initio, développé par Bernardini et al. donnent des valeurs numériques de P_{sp} qui est représentée dans le tableau I.12.

La polarisation spontanée n'existe pas dans les semi-conducteurs à phase cubique par raison de symétrie. En revanche, l'action d'une contrainte bi-axiale exercée dans le plan (111) brise la symétrie cubique et fait apparaître une polarisation orientée suivant l'axe [111]. Ce phénomène est connu sous le nom de piézoélectricité. Une polarisation piézoélectrique se manifeste aussi dans les semi-conducteurs à phase wurtzite lorsqu'une contrainte leur est appliquée. L'application d'une contrainte qui fait varier la distance entre les barycentres de charge positive et négative dans la maille élémentaire. La polarisation macroscopique obtenue est proportionnelle à la déformation $P_i^{pe} = \sum_j e_{ij} E_j$, où e_{ij} est le tenseur piézoélectrique. Pour un matériau soumis à une contrainte bi-axiale e_{xx} dans le plan (0001), la polarisation piézoélectrique est donnée par $P_{pz} = 2d_{31} \times \left[C_{11} + C_{12} - \frac{2C_{13}^2}{C_{33}} \right] \times e_{xx}$; où d_{31} est le coefficient piézoélectrique et les C_{ij} sont les constantes élastiques.

Le tableau I.12 donne les valeurs des coefficients d'élasticité et des coefficients piézoélectriques pour GaN, AlN et InN.

	GaN	AlN	InN
$P_{sp}(C/m^2)$	-0,029	-0,081	-0,032
$C_{13}(GPa)$	106	108	92
$C_{33}(GPa)$	389	373	224
$e_{31}(C/m^2)$	-0,35	-0,5	-0,57
$e_{33}(C/m^2)$	1,27	1,79	1,79

Tableau I.12 [93] : La polarisation spontanée et les coefficients d'élasticité et piézoélectriques.

Dans les nitrures d'éléments III, la polarisation totale du milieu est donc la somme algébrique de deux contributions, l'une existant à l'équilibre (la polarisation spontanée), l'autre sous l'action d'une contrainte extérieure (la polarisation piézoélectrique) (figure I.22). Ces deux polarisations étant de même nature physique, il est très difficile de déterminer expérimentalement la contribution de chacune d'entre elles.

Les deux structures de GaN sont représentées à la figure I.23, à l'équilibre et sous contrainte.

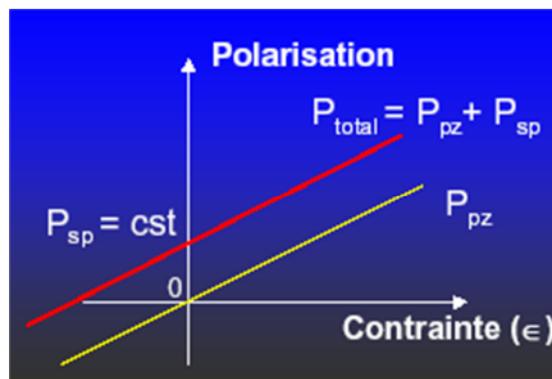


Figure I.22 [3] : Champs de polarisations piézoélectrique et spontanée.

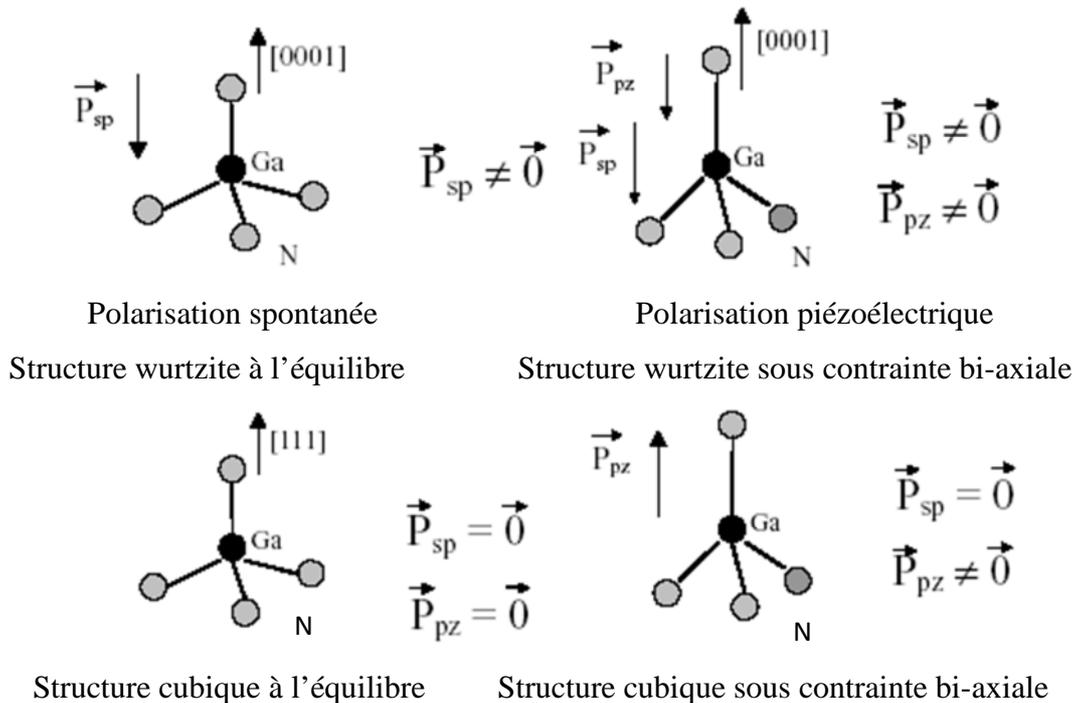


Figure I.23 [94] : Structures de h-GaN et c-GaN, à l'équilibre et sous contrainte.

I.11 Problème de relaxation, défauts ponctuels et étendus

GaN est relaxé lors de l'épitaxie. Cette relaxation induit une forte concentration de dislocations et de fautes d'empilement dans les couches. En plus de l'utilisation de substrats fortement désaccordés, la différence de dilatation entre le substrat et GaN donne lieu à une contrainte résiduelle lors du refroidissement des échantillons de la température de dépôt à l'ambiante. Cette contrainte est en partie relaxée par la propagation des dislocations. De tout ceci, il en résulte que même les couches de GaN de bonne qualité contiennent une très forte concentration de défauts étendus comparativement aux autres semiconducteurs III-V tels que GaAs ou InP. A cause de cette densité de défauts, la durée de vie des porteurs est nécessairement réduite et les caractéristiques des dispositifs ne sont plus optimales [6].

I.11.1 Défauts ponctuels

Ponctuellement, des défauts peuvent être introduits dans le réseau cristallin lors de l'épitaxie (faute d'empilement, lacune, inclusions d'impuretés,...).

La problématique de croissance vis à vis des défauts ponctuels est beaucoup moins évidente. On peut seulement évoquer certains principes : leur nombre dépend de la pureté des espèces chimiques employées et de la quantité de gaz résiduel au cours de la croissance.

Comme les défauts ponctuels se forment généralement à l'équilibre thermodynamique, ils seront d'autant moins nombreux que sera grande la température de croissance [76].

I.11.2 Défauts étendus dans GaN

Les clichés de microscopie électronique en transmission (TEM) [95] (figure I.24 (a)) révèlent dans les couches de GaN hexagonal, un important réseau de dislocations vis se propageant parallèlement à la direction de croissance. Dans GaN épitaxié sur saphir, la densité des dislocations est de l'ordre de 10^{10}cm^{-2} (et 10^8cm^{-2} dans les meilleurs des cas).

Il a été remarqué que leur dispersion latérale est du même ordre de grandeur que les largeurs des régions actives des composants. Les zones actives sont donc nécessairement traversées par une ou plusieurs dislocations.

Sur substrat 6HSiC, la concentration de ces dislocations semble plus faible, (probablement du fait d'un meilleur accord de maille) mais elle reste assez importante.

Les images TEM de GaN (Figure I.24 (b)) cubique présentent de nombreux défauts planaires à l'interface entre c-GaN et le substrat, que ce dernier soit GaAs, 3C SiC ou MgO. Ces défauts se propagent suivant les directions (111) du nitrure de gallium. L'intersection de deux de ces défauts peut les amener à s'annihiler. Par conséquent, la qualité cristalline du GaN cubique est améliorée loin du substrat. Notons que toute rugosité du substrat induit une zone cristalline défectueuse dans GaN où la formation d'inclusions hexagonales est favorisée [95].

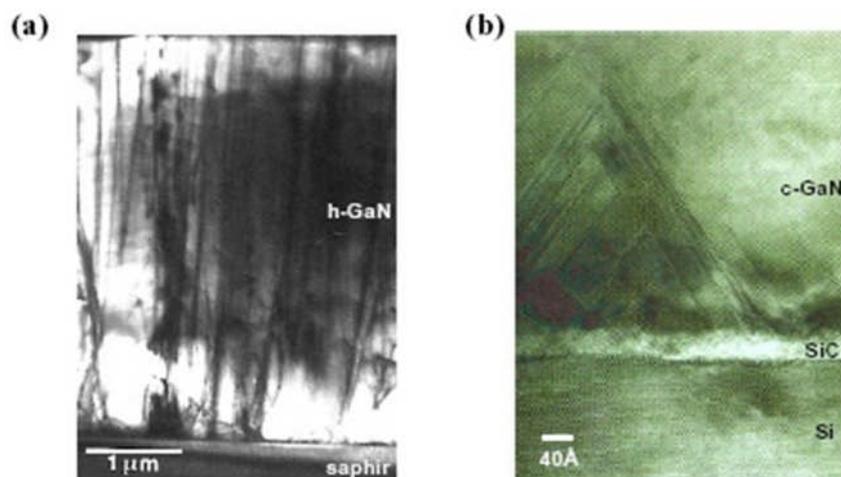


Figure I.24 [55] : Images TEM de la section de couches épitaxiées de GaN.

(a) : h-GaN de bonne qualité sur substrat saphir ; (b) : c-GaN sur substrat Silicium carburé.

I.11.3 Réduction de la densité de dislocations [55]

A défaut de substrats donnant une faible densité de dislocations, on a cherché à réduire le nombre de celles qui se propagent à travers la structure. Une possibilité intéressante consiste à introduire des hétérostructures (puits ou boîtes quantiques) dans la couche tampon. Ainsi une partie des dislocations se courbent aux interfaces et se propagent dans le plan perpendiculaire à la direction de croissance. Des images de microscopie électronique à transmission (TEM) (figure I.25) ont montré que l'on avait réussi à diviser le nombre de dislocations traversantes par 2. Cette diminution est encourageante mais insuffisante pour avoir des effets notables sur les propriétés optiques de la structure.

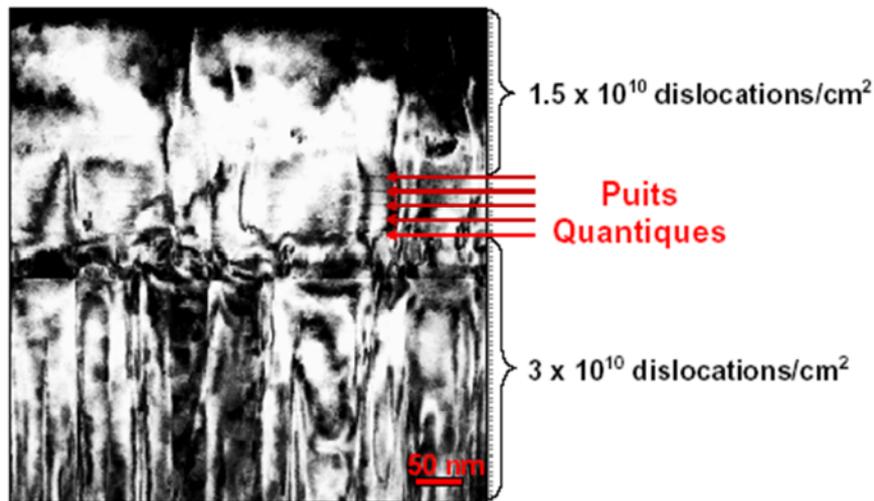


Figure I.25 [49] : Image TEM de 5 puits quantiques dans la couche tampon d'une SCH.

I.12 Dopage de GaN

Les propriétés électriques des nitrures III-N sont directement reliées à la concentration des porteurs libres (électrons et trous) dans le semi-conducteur, à leur mobilité et aux défauts structuraux étendus ou ponctuels présents dans le matériau. La concentration de porteurs libres, dans le meilleur des cas, est fixée par le dopage intentionnel dans la couche. Cependant ;il existe dans les nitrures III-N, un dopage résiduel non intentionnel lié à la présence d'impuretés et de défauts structuraux, difficile à contrôler. La maîtrise du niveau de dopage résiduel et intentionnel dans les nitrures III-N est un point clé pour la réalisation de dispositifs.

I.12.1 Dopage résiduel

Quelle que soit la méthode d'élaboration employée ; lorsqu'on réalise la croissance d'une couche de GaN, sans aucun désir de dopage intentionnel, on obtient toujours une concentration résiduelle de type n variant de $4 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ à 10^{19} cm^{-3} .

L'étude d'un défaut isolé est difficile et nécessite la corrélation d'études théoriques et expérimentales. Il en résulte que la nature de la plupart des défauts électriquement actifs dans GaN n'est pas déterminée avec certitude. Il existe dans la littérature plusieurs théories qui s'opposent pour expliquer ce dopage résiduel. Ces théories font intervenir les défauts structuraux, nombreux dans les nitrures. Nous reportons ici les principaux défauts ponctuels susceptibles d'être à l'origine du dopage résiduel dans les nitrures III-N:

➤ **Lacunes d'azote**

P. Perlin a montré par le calcul [96] que les lacunes d'azote peuvent être à l'origine d'un niveau donneur léger simple dans le matériau GaN et par conséquent peuvent fournir le dopage résiduel n observé.

Ces lacunes se forment plus facilement avec des conditions de croissance riche en gallium et vice versa pour les lacunes de gallium. Des calculs ont montré que l'énergie de formation de lacunes d'azote est de 4eV, impliquant qu'elles ne devraient pas être assez nombreuses à température ambiante pour expliquer une telle concentration de porteurs. Cependant, ces calculs aboutissent également à une faible énergie de formation des lacunes de gallium (accepteur profond) dans une couche de type N et à une faible énergie de formation des lacunes d'azote dans une couche de type P. Les lacunes semblent être les meilleurs candidats pour expliquer le phénomène de compensation observé dans GaN.

➤ **Atomes en site interstitiel**

Une impureté en site interstitiel est supposée donner un niveau peu profond dans un cas et un niveau profond dans l'autre. Les atomes interstitiels d'azote ou de gallium ont des énergies de formation très élevées. Leur formation est peu probable.

➤ **Atomes d'impuretés en site substitutionnel**

Le silicium, l'oxygène et le carbone sont souvent présents dans la couche épitaxiée. Les éléments en silice présents dans le bâti peuvent être l'origine du silicium et probablement de l'oxygène qui peut aussi provenir directement ou indirectement des gaz vecteurs ou du NH_3 quand il est utilisé comme précurseur. Le silicium, donneur dans les nitrures, se place

préférentiellement en site Ga. L'oxygène se place en site azote et agit comme donneur simple, favorisé sous conditions de croissance riche en gallium. Son énergie d'activation, d'après Meyer et al. est de 80 meV. Chung et al. ont montré que l'incorporation de l'oxygène diminue, en augmentant la température de croissance. Comme la différence des rayons des atomes de carbone et de l'azote est faible, le carbone se place préférentiellement en site d'azote et se comporte comme un accepteur.

Pour expliquer l'origine du dopage résiduel, plusieurs méthodes expérimentales ont été utilisées. Par des mesures SIMS, Popovici et son équipe ont montré que la concentration en impuretés dans les couches déposées par MBE (Epitaxie par Jet Moléculaires) n'était pas corrélée avec la concentration en dopants résiduels, mesurée par effet Hall. Ils ont aussi montré une diminution de la concentration des porteurs lorsque la concentration en azote augmente. Ce qui confirme que les lacunes d'azote sont source du dopage résiduel. Cependant des résultats contradictoires ont été rapportés par Abernathy *et al.* qui ont observé une grande concentration d'électrons pour des conditions riches en azote. Une contribution des deux phénomènes pourrait être à l'origine du dopage résiduel comme le suggère Xu et al. L'origine du dopage résiduel n'est donc pas nettement établie, même si la plupart des auteurs l'attribue aux lacunes d'azote. Le dopage résiduel est néfaste pour les applications en micro et optoélectronique (HEMT, Photodétecteurs...), tout d'abord parce que ces dispositifs nécessitent des couches semi-isolantes et ensuite parce que dopage résiduel rend le dopage intentionnel (N ou P) particulièrement délicat. Il y'a deux possibilités très difficiles à mettre en œuvre en pratique, pour éliminer ce dopage résiduel :

- (i) élimination des défauts intrinsèques qui en sont à l'origine mais la méconnaissance de ces défauts rend leur élimination difficile ;
- (ii) la compensation par des impuretés extrinsèques de type P. C'est cette dernière méthode qui est utilisée, notamment en dopant avec le fer.

I.12.2 Dopage intentionnel

La fabrication des dispositifs micro et optoélectroniques à base de nitrures III-N nécessite le contrôle de la concentration d'impuretés résiduelles dans le matériau, ainsi que la maîtrise de l'incorporation d'impuretés spécifiques pour le dopage N et P. Le dopage s'effectue habituellement par trois techniques : l'incorporation lors de la croissance, la diffusion à l'état solide et l'implantation ionique. Toutefois, des problèmes spécifiques dans le cas des nitrures font encore l'objet d'une intense recherche. En effet, la grande complexité du

dopage de type P constitue un obstacle au développement de diodes et détecteurs dans l'ultraviolet lointain.

I.12.2.1 Dopage de type N

Le dopage de type n est plus facile à contrôler que celui de type p, d'une part parce que le dopage résiduel du matériau GaN est de type n et d'autre part parce qu'il y a beaucoup d'éléments bien adaptés. Le dopant utilisé en général est le silicium (Si) qui a un caractère amphotère. Il est connu pour son efficacité à atteindre une large gamme de dopage dans le matériau GaN. En effet, plusieurs travaux ont rapporté des taux de dopage de 10^{17} à 10^{20}cm^{-3} avec une énergie d'ionisation de 12 à 27 meV [97][98][99][100]. Le précurseur le plus courant en EPVOM, comme nous l'avons vu dans la partie précédente de ce chapitre, est le silane (SiH_4). Pour l'EJM, c'est une source solide de silicium.

I.12.2.2 Dopage de type P

Le dopage de type P des nitrures est particulièrement complexe. Divers accepteurs ont été étudiés (notamment Li, Na, K, Be, Zn et Ca) mais le seul efficace semble être le magnésium du fait de sa plus grande solubilité dans les nitrures III-N. Le problème majeur du magnésium est que son énergie d'activation est élevée et augmente avec la concentration en aluminium dans AlGaN. Mg introduit un niveau accepteur profond, de l'ordre de 200 meV. L'efficacité de ce dopant est très faible. Ainsi à température ambiante, seulement quelques pourcents des atomes de Mg sont ionisés. Les valeurs typiques pour le dopant, $[\text{Mg}] = 10^{19} - 10^{20} \text{cm}^{-3}$ donnent une concentration de trous de l'ordre de $10^{17} - 10^{18} \text{cm}^{-3}$. Pour c-GaN, les niveaux accepteurs seraient superficiels et le dopage p serait plus facile à réaliser. Il apparaît que l'incorporation de Mg sature autour de $5 \times 10^{18} \text{cm}^{-3}$; au-delà de cette valeur, on a constaté une dégradation de la cristallographie du film. En effet, les atomes de magnésium ont tendance à s'accumuler au centre des dislocations. Ceci laisse autour de celles-ci, des régions appauvries en magnésium, dont les propriétés électriques sont altérées. La qualité cristalline du matériau dopé est également dégradée car le magnésium facilite l'apparition de défauts structuraux (inclusions, domaines d'inversion).

L'hydrogène, souvent présent pendant la croissance, joue un rôle important lors du dopage au magnésium. Dans le cas de la croissance par dépôt en phase vapeur avec précurseurs organométalliques (MOCVD), les atomes de magnésium doivent être activés par irradiation électronique ou par recuit thermique sous atmosphère N_2 , pour dissocier les complexes Mg-H. Par contre ; dans le cas de la croissance par épitaxie par jets moléculaires

(MBE), la présence d'atomes d'hydrogène catalyse l'incorporation du magnésium sans que l'hydrogène ne soit lui-même incorporé. Le taux d'incorporation dépend également beaucoup de la polarité de la surface, et le cas le plus favorable est la polarité gallium (jusqu'à 30 fois plus d'atomes incorporés par rapport à la polarité azote).

Des mesures par effet Hall, ont donné une énergie de liaison de Mg de l'ordre de 170-180meV. Les premières expériences optiques ont donné une énergie de liaison de 190meV ; cependant, les dernières données théoriques et expérimentales pour l'énergie de liaison de l'accepteur Mg_{Ga} indiquent une valeur de 200-250meV.

Des études théoriques récentes ont montré qu'il existe une grande concentration de défauts ponctuels et de complexes de défauts dans les deux types de GaN, n et p.

Plusieurs travaux théoriques ont été publiés sur le sujet ; nous mentionnons l'étude menée en 1994 par Neugebauer et Van de Walle (figure I.26) qui ont calculé les énergies de formation des défauts [101]. Les manques vont être les défauts natifs dominants ; particulièrement, le manque de gallium (V_{Ga}) a l'énergie de formation la plus faible de tous les défauts natifs dans GaN de type n, et le manque d'azote (V_N) a l'énergie de formation la plus basse dans GaN de type p.

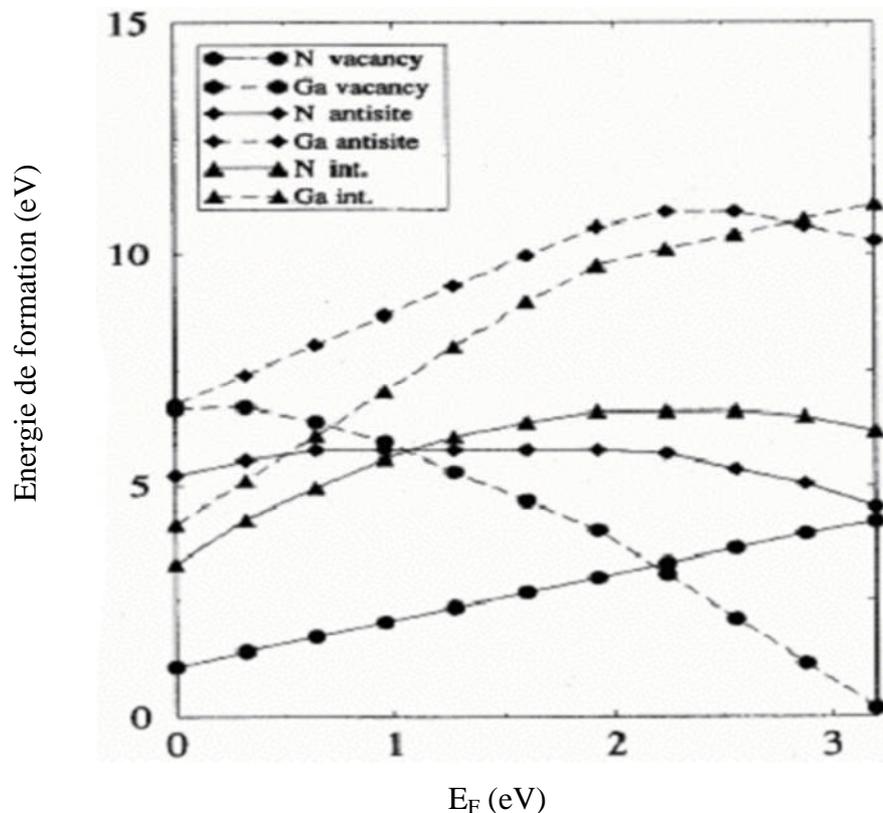


Figure I.26 [101] : Energies de formation de défauts en fonction du niveau de Fermi pour tous défauts natifs dans GaN sous conditions riche en azote. $E_F = 0$ correspond au sommet de la bande de valence.

II.12.3 Self compensation

GaN dopé Mg peut être auto-compensé. Ceci est un phénomène par lequel, la présence d'un type de défaut (qui pourrait être par exemple un dopant superficiel) crée un autre type de défaut (qui est souvent un complexe de défauts profonds). Ainsi ; un dopage par une impureté superficielle, peut donner une hausse au pic de luminescence à une énergie très en dessous du gap. Ceci est bien connu dans les composés II-VI tels que ZnS, où il a été appelé la luminescence "self-activated" (SA). Dans ces matériaux ; il y a une évidence que la luminescence, qui est bien en dessous du gap, implique une transition entre un donneur superficiel et un complexe accepteur éloigné. Le complexe, dont la formation est induite par la présence de donneurs superficiels, est un manque de groupe II adjacent à un donneur superficiel, et il est parfois appelé un "centre A". La luminescence SA est typiquement très large et gaussienne, tout à fait comme les luminescences jaune et bleue (YL et BL) de GaN. La possibilité de la formation de tels défauts auto-induits dans GaN, est vue dans les énergies de formation des défauts natifs (figure I.26). On y voit qu'un manque d'azote est plus probable de se former quand l'énergie de Fermi est près de la bande de valence (BV) ; contrairement, un manque de gallium est plus probable de se former quand l'énergie de Fermi est près de la bande de conduction (BC).

Comme le matériau est dopé p, le niveau de Fermi est abaissé vers la BV, et les manques d'azote deviennent plus faciles à se former. Du moment que les manques d'azote sont des donneurs profonds, ils compensent les dopants de type p.

Neugebauer et Van de Walle ont montré que la self compensation et les limitations imposées par la solubilité de Mg (due à la formation des précipités Mg_3N_2), sont les deux plus probables considérations qui limitent les concentrations en trous libres dans GaN, aux alentours de $10^{19}cm^{-3}$. Mais il faut mentionner qu'il y en a ceux qui ne mettent pas en cause la solubilité de Mg.

Obloh et al. ont montré expérimentalement que la self compensation doit arriver dans GaN : Mg. Ils ont mesuré la densité de trous sur un nombre d'échantillons : lorsque le dopage Mg augmente, la densité de trous atteint un maximum à $[Mg] \approx 2-3 \times 10^{19}cm^{-3}$; puis elle diminue pour un plus grand dopage de Mg. L'émergence rapide du pic BL coïncide avec le maximum de la densité des trous, cette BL domine la VL pour $[Mg] > 3 \times 10^{19}cm^{-3}$. Les deux observations sont en accord avec la formation de défauts auto compensés. Dans une analogie directe avec la luminescence SA, ils ont trouvé que les défauts induits peuvent être des complexes $MgGa-V_N$, avec la BL résultant d'une transition DAP entre les accepteurs superficiels $MgGa$ et les donneurs profonds $MgGa-V_N$.

Appuyant la thèse du complexe MgGa-V_N comme un donneur, Van de Walle et al. ont prédit le pouvoir d'un V_N isolé d'être à la fois comme un simple et un triple donneur, et ils ont montré que des complexes V_N peuvent être des donneurs compensateurs [76].

I.13 Propriétés fondamentales de GaN, AlN, InN et leurs alliages

Les nitrures d'éléments III (GaN, AlN, InN et leurs alliages) suscitent de l'intérêt pour les perspectives qu'ils ouvrent en optique, ainsi qu'en électronique. En dépit d'une percée dans le domaine des dispositifs, beaucoup reste à faire en effet sur le plan de la physique fondamentale de ces systèmes. Leur originalité tient à la structure anisotrope, au caractère ionique marqué, et au fort désaccord paramétrique de leurs constituants. Les propriétés spécifiques de ces matériaux de base sont à l'origine des charges induites, par les effets de polarisations spontanée et piézo-électrique, aux interfaces des puits quantiques et des super-réseaux. Ces charges génèrent dans les structures, d'intenses champs électriques qui influencent considérablement leurs propriétés.

Jusqu'à présent ; ils sont les matériaux à grand gap les plus prometteurs pour les applications en haute température, haute puissance et haute fréquence. GaN et InN admettent une bande interdite directe dans les deux phases hexagonale et cubique, alors que AlN possède une bande interdite indirecte dans sa phase cubique. Ils ont tous les trois, des bandes de conduction non dégénérées et des bandes de valence compliquées. GaN et spécialement AlN, possèdent des propriétés piézoélectriques fortement prononcées [76].

Les paramètres de mailles de la phase hexagonale non contrainte, sont relativement bien connus. Le paramètre c/a est important car il représente une mesure de la séparation relative des deux réseaux hexagonaux qui s'interpénètrent pour former la structure wurtzite. La structure est idéale quand elle est composée de tétraèdres réguliers, ce qui est le cas lorsque l'on a : $\frac{c}{a} = \sqrt{8/3} (\approx 1.63)$ [49] (I.23)

- ❖ AlN, ayant 6.2eV de gap, émet la lumière dans la région de l'ultraviolet du spectre. Il possède la plus grande vitesse de l'onde acoustique en surface (vitesse transversale égale à 6-6.2km/s, et vitesse longitudinale de 11-12km/s).
 - Il a un coefficient de couplage électromécanique de 1%.
 - Il est aussi distingué par sa dureté élevée (1800 sur l'échelle "Knoop") et par sa grande stabilité chimique.
 - Il a une température de fusion excédant les 2275K (2002°C), une grande résistivité électrique ($\rho \geq 10^{13} \Omega \cdot \text{cm}$), une excellente conductivité thermique et une constante diélectrique

statique $\epsilon_0 \approx 9$. Il n'est pas affecté par les radiations électromagnétiques, les bombardements électroniques et ioniques, et les chocs d'ondes [76].

- la masse effective est prédite anisotrope mais sa valeur n'est pas bien connue. Vurgaftman et al. [93] conseille les valeurs $m_{\perp}^* = 0,3m_0$ et $m_{//}^* = 0,32m_0$ pour les masses effectives perpendiculaires et parallèles à l'axe c. Les masses des trous dans AlN sont très mal connues, elles sont prédites fortement anisotropes [102] avec des valeurs calculées pour les masses selon l'axe de croissance de $m_{HH}^* = 3,7m_0$, $m_{LH}^* = 0,26m_0$ et $m_{CH}^* = 2,9m_0$.

- Dans AlN, l'éclatement dû au champ cristallin est négatif de sorte que la bande de valence la plus haute en énergie est la bande C [103].

Toutes ces propriétés (spécialement acoustiques) le mettent au premier rang dans les applications comme détecteur en hautes températures et hautes pressions, et comme dispositifs acousto-optiques.

Pour son élaboration, deux problèmes majeurs existent avec le saphir :

1. la grande différence entre leurs coefficients de dilatation.
 2. les anisotropies dans leurs coefficients, pour les cristaux hexagonaux, sont en sens inverses : pour AlN $\alpha_{\perp c} > \alpha_{// c}$; alors que pour Al_2O_3 , $\alpha_{\perp c} < \alpha_{// c}$.
- ❖ InN est le composé le moins étudié des III-N, du fait qu'il admet un gap existant déjà dans la famille des semiconducteurs III-V classiques. Il admet une grande pression de vapeur N_2 à l'équilibre. Comme pour GaN, les problèmes des propriétés électriques sont associés au manque d'azote et aussi à la grande pression de vapeur de ce composant. L'argument de la self compensation, pour expliquer le manque du caractère type p dans InN et GaN, n'a jamais été utilisé bien qu'il explique apparemment ce phénomène dans ZnO et ZnSe. On a employé plusieurs méthodes de déposition de films à basse température, avec des résultats différents.
 - Hovel et Cuomo (1972) étaient apparemment les premiers à pulvériser InN par réaction RF. Ils ont employé une cible d'indium (In), de l'azote pur (N_2), le saphir (0001) et Si(111) chauffés dans une gamme de température 300-873K. Les films obtenus étaient polycristallins, ayant une conduction de type n avec une concentration en électrons de $7 \times 10^{18} \text{cm}^{-3}$ et une mobilité par effet Hall de $250 \pm 50 \text{cm}^2/\text{Vs}$ [$\rho = (3-5) \times 10^{-3} \Omega \text{cm}$].
 - Une vaste caractérisation du processus de pulvérisation avec réactifs, d'InN et des matériaux alliés, a été conduite par Natarajan et al. (1979).
 - Dans une recherche sur la pulvérisation avec réactifs, Tansley et Foley (1986) ont rapporté une corrélation directe entre les cibles complètement nitrurées et les grandes mobilités d'électrons (et les faibles concentrations d'électrons). Ces auteurs ont trouvé :

$$\mu = 3000\text{cm}^2/\text{Vs} \text{ et } n = (2-10)\times 10^{16}\text{cm}^{-3}.$$

- Cependant ; la pulvérisation à partir d'une cible incomplètement nitrurée, produisait des films à mobilités plus faibles et à concentrations plus élevées ($>10^{17}\text{cm}^{-3}$). Cette relation entre les cibles pauvrement nitrurées et les concentrations en électrons plus élevées, ont été apparemment confirmées par Sullivan et al. en 1988.
- La vaporisation par jets d'électrons d'indium dans un plasma d'azote, sur substrat saphir(0001) à $T = 300-650\text{K}$, a été utilisée par Trainor et Rose en 1974. Les taux de croissance étaient de l'ordre $1.0-1.2\mu\text{m/h}$. Le meilleur matériau avait une mobilité de $20\text{cm}^2/\text{Vs}$ à 300K , et une concentration de porteurs vers 10^{20}cm^{-3} .
- Ces résultats sont similaires à ceux de Marasina et al. (1977) qui ont employé l'interaction d' InCl_3 et NH_3 sur saphir (0001). Les auteurs précédents ont trouvé aussi qu'un recuit d' InN dans N_2 , à 773K , causait une rapide décomposition. Cependant ; ceci ne se produisait pas en moins d'une heure, à une pression de 10^{-3} torr, en présence d'azote atomique.
- Une recherche similaire a été conduite par Masaki et al. en 1989 ; leur principale modification était l'utilisation d'ions au lieu d'un plasma direct, pour fournir les espèces actives d'azote. La liaison In-N a été observée par absorption infrarouge, seulement après avoir chauffé le film déposé à 450K . Les défauts et/ou les impuretés dominaient les caractéristiques électriques, spécialement à des températures inférieures ou égales à la température ambiante.

Leurs grandes vitesses de saturation et de dérive, leurs faibles constantes diélectriques et leurs grands gaps ; toutes ces propriétés qui dépendent de la composition de l'alliage, permettent à ces trois nitrures de réaliser des jonctions opérant à hautes températures, et possédant des intensités de rupture au champ électrique, beaucoup plus grandes que dans le silicium ou l'arséniure de gallium.

Deux caractéristiques supplémentaires augmentent leur potentiel électronique en haute puissance, sur les autres semi-conducteurs à large gap tels que les poly-types du SiC :

1. GaN peut former des hétérojonctions de type-1 avec les alliages ternaires AlGaN et InGaN, permettant l'utilisation des techniques de dopage par modulation, et la réalisation des transistors à effet de champ dopés par modulation (MODFET) et les transistors HEMT.
2. Le désaccord de maille entre GaN et AlN, peut être exploité pour modifier la concentration des porteurs de charge près de l'hétéro-interface, par l'action de l'effet piézoélectrique. La polarisation induite par la contrainte, peut augmenter la concentration des porteurs libres dans la région du canal d'une hétérojonction FET, bien au-delà de la

densité obtenue par le dopage de modulation seul. Il existe actuellement des MESFET à base de α -GaN ayant une fréquence de coupure de 100GHz, et à base de β -GaN avec une fréquence de coupure allant de 135GHz jusqu'à 180GHz (HEMT).

La réalisation des dispositifs optoélectroniques actuels tire grand profit de ce qu'il est convenu d'appeler l'ingénierie de la bande interdite : l'utilisation judicieuse d'hétérostructures de matériaux binaires/ternaires, permet en effet d'ajuster la longueur d'onde de fonctionnement des dispositifs dans une large gamme.

Il est possible d'envisager des dispositifs d'optoélectronique à base de GaN fonctionnant à des longueurs d'ondes allant du rouge à l'ultraviolet. En effet ; les alliages AlInGaN des nitrures des éléments du groupe III, ont un gap variant entre 1,9eV (650nm) et 6,2eV (200nm), en fonction de leur composition :

- Pour les alliages $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$: $Eg(x) = 1.95x + 3.4(1 - x) - bx(1 - x)$

- Pour les alliages $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$: $Eg(x) = 6.2x + 3.39(1 - x) - bx(1 - x)$

Où b est le paramètre de courbure ; il est égal à 1.0(3)eV, pour x entre 0 et 0.4. Il représente la déviation à la linéarité en fonction de x, que l'on aurait pu attendre pour Eg [3].

On sait à l'heure actuelle, doper n les alliages $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ pour toutes les teneurs en aluminium y compris 100% (AlN). Lorsque l'on dope avec du silicium, ces alliages à forte teneur en aluminium ; on constate une forte augmentation de la conductivité n à partir de $[\text{Si}] > 10^{18} \text{cm}^{-3}$. Mais il existe une limite supérieure dans le dopage du AlN par le silicium ; si la concentration atomique de ce dernier dépasse $3 \times 10^{19} \text{cm}^{-3}$, un phénomène d'auto compensation se produit et AlN devient à nouveau résistif (voire isolant).

La réalisation de contacts ohmiques de bonne qualité sur les alliages $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ à forte teneur en aluminium dopés n et p, est essentielle pour l'injection de courant. Depuis une vingtaine d'années ; on sait déposer des contacts ohmiques à base d'Au, Ag, Ti/Al, Ti/Al/(Ti, Ni, Mo, Pt)/Au sur GaN dopé n, dont la résistivité surfacique est de l'ordre de $4 \times 10^{-7} \Omega \text{cm}^2$ à $10^{-8} \Omega \text{cm}^2$. En guise de comparaison, les contacts AuGeNi utilisés pour GaAs permettent d'atteindre une résistivité surfacique de l'ordre de $10^{-9} \Omega \text{cm}^2$.

En ce qui concerne les alliages $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$; le problème de la résistivité se pose pour les fortes concentrations en aluminium. Ainsi, entre 45% et 50% d'aluminium, la résistivité passe de $374 \Omega \text{cm}$ à plus de $10^5 \Omega \text{cm}$. Lorsque ces alliages sont dopés n, divers empilements de couches métalliques telles que Ti/Al, Ta/Ti/Al, Ti/Ta/Al et Al/(Ti, Ni, Mo, Pt)/Au permettent d'atteindre typiquement des résistivités surfaciques entre $10^{-5} \Omega \text{cm}^2$ et $10^{-8} \Omega \text{cm}^2$.

La réalisation de contacts ohmiques sur $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ dopé p, pose des problèmes propres qui ne sont que partiellement surmontés :

Le premier problème est la difficulté de faire croître des alliages dopés p à grandes concentrations de trous, et de bonne qualité. Le second problème est l'absence de métaux dont le travail de sortie électronique est supérieur à celui de GaN dopé p et de ses dérivés. Des contacts à base de nickel et d'or ont été réalisés avec succès. Puis le palladium a également été utilisé sur $\text{Al}_{0,06}\text{Ga}_{0,94}\text{N}$: De même, un contact Pd/Au a été réalisé sur $\text{Al}_{0,15}\text{Ga}_{0,85}\text{N}$: Mg. Plus récemment, un contact Pt/Pd/Au a permis d'atteindre une résistivité surfacique de $3.1 \times 10^{-4} \Omega\text{cm}^2$ sur $\text{Al}_{0,11}\text{Ga}_{0,89}\text{N}$: Mg [76].

Nous répertorions, dans le tableau I.13, les valeurs disponibles expérimentales ou théoriques des paramètres les plus communs, pour les trois nitrures dans leur phase wurtzite.

	Unité	GaN	AlN	InN
Densité	g/cm	6.15	3.23	6.81
Constante diélectrique statique	ϵ_s	8.9	8.5	15.3
Constante diélectrique dynamique	ϵ_∞	5.35	4.77	8.4
Energie du gap (vallée Γ)	eV	3.43	6.2	1.89
Masse effective (vallée Γ)	m_e^*	0.20	0.48	0.11
Energie du phonon optique polaire	meV	91.2	99.2	89.0
Constante du réseau : a (c)	Å	3.189 (5.185)	3.11 (4.98)	3.54 (5.70)
Mobilité des electrons	cm ² /Vs	1000	135	3200
Mobilité des trous	cm ² /Vs	30	14	
Vitesse de saturation	cm/s	2.5×10^7	1.4×10^7	2.5×10^7
Vitesse de pic	cm/s	3.1×10^7	1.7×10^7	4.3×10^7
Champ critique	kV/cm	150	450	67
Champ de claquage	V/cm	$>5 \times 10^6$		
Masse des trous legers	m_{LH}	0.259	0.471	
Conductivité thermique	W/cmK	1.3-1.5	2	
Température de fusion	K (°C)	2803(2530)	3273(3000)	1373(1100)
A	(Å)	3.189	3.112	3.545
C	(Å)	5.185	4.982	5.703
c/a		1.626	1.601	1.609
C₁₁	(GPa)	390	396	223
C₁₂	(GPa)	145	137	115
C₁₃	(GPa)	106	108	92
C₃₃	(GPa)	398	373	224
C₄₄	(GPa)	105	116	48
$\Delta a/a (\times 10^{-6})$	(K ⁻¹)	5.59	4.2	4
$\Delta c/c (\times 10^{-6})$	(K ⁻¹)	3.17	5.3	3

Tableau I.13 : Paramètres de GaN, AlN et InN de type wurtzite [104] ; paramètres de maille, coefficients élastiques et de dilatation thermique [49].

I.14 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons rappelé les caractéristiques physiques de nitrure de gallium et l'influence des différents substrats de croissance. Ce matériau possède des propriétés physiques très intéressantes telles que la largeur de la bande d'énergie interdite, la vitesse de saturation des porteurs, et les stabilités thermique et chimique...

L'élément important est la polarisation spontanée et la polarisation piézoélectrique et leur influence sur les propriétés et le comportement des composants.

Nous avons également étudié l'influence de la contrainte résiduelle du GaN sur la densité de charges de polarisation développée à l'interface.

Références du chapitre I

- [1] P. Chevalier «Propriétés des matériaux III-V», chp.B, Université de Lille (1999).
- [2] I. Vurgaftman, L.R. Ram-Mhan and J.R. Meyer, Journal Of Applied Physics, vol. 89, n° 11 (June 2001).
- [3] N. Grandjean «Composants optiques à base de GaN», CNRS-CRHEA, Sophia Antipolis, 2002.
- [4] C.-Y. Yeh, Z.W.Lu, S.Froyen, and A.Zunger,«Zinc-blende–wurtzite polytypism in Semiconductors» Phys.Rev.B, vol. 46, pp. 10086–10097, Oct 1992.
- [5] S.N. Mohammad, Arnel A. Salvador, and H. Morkoc « Emerging gallium nitride based Devices», Journal paper, Res. Lab., Illinois Univ., Urbana, IL, USA. Vol. 83, n°10 (Oct. 1995), p. 1306-1355.
- [6] A.F.Zakia «Caractérisation électrique des HEMTs à base de Nitrure de Gallium AlGaN/GaN », Magister, Université Mentouri de Constantine, Juin 2005.
- [7] S.J. Pearton, F. Ren, A.P. Zhang and K.P. Lee «Fabrication and performance of GaN electronic devices», Mat. Sci. Eng. R, Vol. 30 (2000), p. 55-212.
- [8] J. Y. Duboz «GaN as seen by the industry», Acad. Sci. Paris, t. 1, Série IV (2000), p. 71-80.
- [9] E. Tiede, M. Thimann, and K. Sensse.Ueber phosphorencenzfaehiges, durch Silicium aktiviertes Aluminiumnitrid.Chemische Berichte, **61**,1568, (1928).
- [10] Warren C. Johnson, James B. Parsons, and M. C. Crew, Nitrogen compounds of gallium III. J. Phys. Chem., **36**, 2651 (1932).
- [11] J. I. Pankove, E. A. Miller, and J. E. Berkeyhe,GaNelectroluminescent diodes RCA Review, **32**, 383, (1971).
- [12] J. I. Pankove, E. A. Miller, D. Richman and J. E. Berkeyheiser, Electroluminescence in GaN. Journal of Luminescence, **4**, 63 (1971).
- [13] J. I. Pankove, Luminescence in GaN. Journal of Luminescence, **7**, 114 (1973).
- [14] R. Dingle, D. D. Sell, S. E. Stokowski, M. Ilegems, Absorption, Reflectance, and Luminescence of GaN Epitaxial Layers, Phys. Rev. B, **4**, 1211 (1971).
- [15] M. Ilegems, R. Dingle, R. A. Logan, Luminescence of Zn- and Cd-doped GaN J. Appl. Phys. **43**, 3797 (1972).
- [16] J. I. Pankove, E. A. Miller and J. E. Berkeyheiser,GaN blue light-emitting diodes Journal of Luminescence, **5**, 84, (1972).

- [17] J. I. Pankove, UV dc electroluminescence from GaN. *Journal of Luminescence*, **5**, 482 (1972).
- [18] H.P. Maruska and J.J.Tietjen, *Journal of Appl. Lett.* (1969), p. 315-327.
- [19] S.Nakamura and G.Fasol «The Blue Laser Diode», Springer-Verlag, New York (1997).
- [20] J.I.Pankov, E.A. Miller, and J.E. Berkeyheiser. *RCA Review* (1971), p. 32-383.
- [21] H. Amano, M. Kito, K. Hiramatsu, et I. Akasaki, P-Type Conduction in Mg-Doped GaN Treated with Low-Energy Electron Beam Irradiation (LEEBI). *Jpn. J. Appl. Phys.* **28**, L2112 (1989).
- [22] S. Nakamura, M. Senoh, S. Nagahama, N. Iwasa, T. Yamada, T. Mukai, T. Matsushita, Y. Sugimoto, et H. Kiyoku, Room-temperature continuous-wave operation of InGaN multi-quantum-well structure laser diodes with a lifetime of 27 hours. *Appl. Phys. Lett.* **70**, 1417 (1997).
- [23] S. Nakamura, et G. Fasol, *The blue laser diode* Springer-Verlag, Berlin (1997).
- [24] Bernard Gil, *Group III nitride semiconductor compounds* Ed. Oxford Science Publication, (1998).
- [25] Bernard Gil, *Low-dimensional nitride semiconductors* Ed. Oxford Science Publication, (2002).
- [26] J.-Y. Duboz, et J. C. Garcia, édité par B. Gil, GaN or the history of a scientific explosion driven by applications and markets, in *Low- dimensional nitride semiconductors*. Oxford University Press (2002).
- [27] P. Perlin, I. Gorczyca, N. E. Christensen, I. Grzegory, H. Teisseyre and T. Suski «Pressure studies of gallium nitride: crystal growth and fundamental electronic Properties», *Phys. Rev. B*, Vol. 45 (1992), p13307-13313.
- [28] V. A. Savastenko and A. U. Sheleg. *Phys. Status Solidii A* (1978), p. 135-148.
- [29] P. Polian, M. Grimsditch and I. Grzegory «Elastic constants of gallium nitride», *J. Appl. Phys.* N°6, Vol. 79 (1996), p. 3343-3344.
- [30] Y. Tagaki, M. Ahart, T. Azuata, T. Sota, K. Suzuki and S. Nakamura «Brillouin scattering study in the GaN epitaxial layers», *Physical B* (1996), p. 219-220 et 547-549.
- [31] M. Yamaguchi, T. Yagi, T. Azuhata, T. Sota, K. Suzuki, S. Chichibu and S. Nakamura «Brillouin scattering study of gallium nitride: elastic stiffness constants», *J. Phys. Condens. Matter* 1, Vol. 9 (1997), p. 241-248.
- [32] R. B. Schwartz, K. Khachaturian and E. R. Weber «Elastic modules of gallium nitride», *Appl. Phys. Lett.* 9, Vol. 70 (1997), p. 1122-1124.

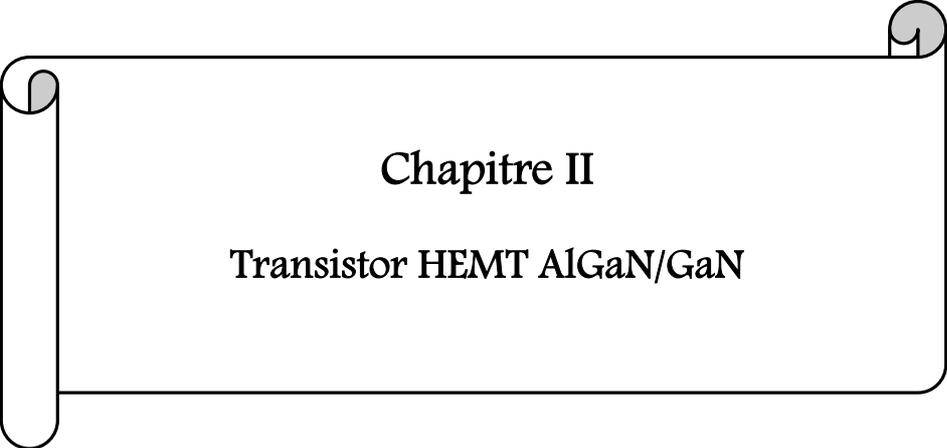
- [33] M. Leszczynski, T. Suski, P. Perlin, H. Teisseyre, I. Grzegory, M. Bockowski, J. Jun, S. Porowski and J. Majo «Lattice constants, thermal expansion and compressibility of gallium nitride», J. Phys. D, Vol. 28 (1995), A 149.
- [34] A. Polian «Mechanical properties of the group III nitrides», Publication INSPEC, Datareview series n°23 (1998), p. 11-20.
- [35] I. Akasaki and H. Amano «Crystal structure, mechanical properties and thermal properties of BN», Publication INSPEC, Datareview series n°11 (1994), p. 7-21.
- [36] S. Krukowski, M. Leszczynski and S. Porowski «Thermal properties of the group III Nitrides», publication INSPEC, Datareview series n°23 (1998), p. 21-28.
- [37] H. Morkoc, S. Strite, G. B. Gao, M. E. Lin, B. Sverdlov, and M. Burns, « Large-bandgap SiC, III-V nitride, and II-VI ZnSe-based semiconductor device technologies, » Journal of Applied Physics, vol. 76, pp.1363-1398, 1994.
- [38] Annaïg Denis «Elaboration, cristallogenèse et caractérisations physico-chimiques des nitrures des éléments de la colonne III_A et en particulier de GaN», Université Bordeaux I, (octobre 2003).
- [39] K. Kim, R. L. Lambrecht and B. Segall «Elastic constants and related properties of tetrahedrally bonded BN, AlN, GaN and InN», Phys. Rev. B, Vol. 53 (1996), p. 16310-16326.
- [40] N. E. Christensen and I. Gorczyca «Optical and structural properties of III-V nitrides under pressure», Phys. Rev. B 7, Vol. 50 (1994), p. 4397-4415.
- [41] T. Azuhata, T. Sota and K. Suzuki «Elastic constants of III-V compound semiconductors : modification of Keyes' relation», J. Phys. Condens. Matter, Vol. 8 (1996), p. 3111-3119.
- [42] E. K. Sichel and J. J. Pankove «Thermal conductivity of GaN, 25–360 K», J. Phys. Chem. Solids (1977), p. 330-338.
- [43] S. Porowski and I. Grzegory «Thermodynamical properties of III–V nitrides and crystal growth of GaN at high N₂ pressure», J. Cryst. Growth, 1-2, Vol. 178 (1997), p. 174-188.
- [44] Michael S. Shur «GaN-Based Electronic Devices», chp.5, Japan (1998).
- [45] M. Leszczynski, J. Edgar, S. Strite, I. Akasaki, H. Amano and C. Wetzel, Common crystal structure of the group III nitrides, Properties, processing and applications of gallium nitride and related semiconductors, 1998, Publication INSPEC, Datareview series n°23, p3-5.
- [46] S. Porowski, Bulk and homoepitaxial GaN-growth and characterizations, J. Cryst. Growth, 189/190(1998), p153-158.

- [47] M. Leszczynski, T. Suski, J. Domagala and P. Prytawko, J. Edgar, S. Strite, I. Akasaki, H. Amano and C. Wetzel, Lattice parameters in the group III nitrides, Properties, processing and applications of gallium nitride and related semiconductors, 1998, Publication INSPEC, Data review series n°23, p6-10.
- [48] I. Akasaki and H. Amano, Common crystal structure of group III nitride, Properties of group III nitride, 1994, J. EDGAR, Publication INSPEC, Data review series n°11, p3-6.
- [49] Joseph Fourier «Physique des matériaux», thèse d'état à Grenoble 1 (décembre 2004).
- [50] W.Y. Wang, Y.P. Xu, D.F. Zhang and X.L. Chen, Synthesis and dielectric properties of cubic GaN nanoparticles, Mat. Res. Bul., 36(2001), p2155-2162.
- [51] O. Brandt, Cubic group III nitride, Group III nitride semiconductor compounds – physics and applications, 1998, B. GIL, Oxford Science Publication, p417-459.
- [52] L. Liu and J. H. Edgar, Substrates for gallium nitride epitaxy, Mat. Sci. Eng. R, 37(2002), p61-127.
- [53] N. Bachir «Application de la méthode de Monte Carlo à l'étude du phénomène de transport dans GaN», Magister à l'URMER, Tlemcen (2004).
- [54] M. Suzuki and T. Uenoyama, Electronic and optical properties of GaN-based quantum wells, Group III nitride semiconductor compounds – physics and applications, 1998, B. GIL, Oxford Science Publication, p307-342.
- [55] Philippe Agnès «Caractérisation électrique et optique du nitrure de gallium hexagonal et cubique en vue de l'obtention d'émetteurs bleus», thèse à l'INSA, Lyon (1999).
- [56] M. Leroux and B. Gil «Band edge and optical function of GaN», Publication INSPEC, Data review series n°23 (1997), p. 45-51.
- [57] C.H. Su, W. Palosz, S. Zhu, S. L. Lehoczky, I. Grzegory, P. Perlin and T. Susuki «Energy gap in GaN bulk crystal between 293 and 1237K», J. Cryst. Growth, Vol. 235 (2002), p. 111-114.
- [58] T. Yamamoto and H. Katayama-Yoshida «Theory of co-doping of acceptors and reactive donors in GaN», Publication INSPEC, Data review series n°23 (1998), p. 306-312.
- [59] S. Strite and H. Morkoç «GaN, AlN, and InN: A review», J. Vac. Sci. Technol. B, University of Illinois vol. 10 (2000), p. 1237-1266.
- [60] W. R. L. Lambrecht and B. Segall «Band structure of pure GaN», Publication INSPEC, Data review, series n°11 (1994), p. 141-150.
- [61] J.A. Miragliotta «Optical function of GaN», Properties of group III nitride, J. EDGAR, Publication INSPEC, Data review series n°11 (1994), p. 190-194.

- [62] D. K. Gaskil, L. B. Rowland and K. Doverspike «Electrical transport of AlN, GaN and AlGaN», Properties of group III nitride, J. EDGAR, Publication INSPEC, Data review series n°11 (1994), p. 101-116.
- [63] S.Porowski, « Near defect free GaN substrates », MRS Internet J.Nitride Semicond. Res. [on line: <http://nsr.mij.mrs.org/4S1/G1.3/>], 1999, volume 4S1, number G1.3.
- [64] J.W. Johnson, E.L.Piner, A. Vescan, R.Therrien, P. Rajagopal, J.C. Roberts, J.D. Brown, S. Singhal, and K.J. Linthicum. 12 W/mm AlGaIn-GaN HFETs on silicon substrates. IEEE Electron Device Letters (2004) **25**: p. 459.
- [65] S. Arulkumaran, M. Miyoshi, T. Egawa, H. Ishikawa, and T. Jimbo. Electrical characteristics of AlGaIn/GaN HEMTs on 4-in diameter sapphire substrate. IEEE Electron Device Lett. (2003) **24**: pp. 497-499.
- [66] D. Ducatteau, A. Minko, V. Hoël, E. Morvan, E. Delos, B. Grimbert, H. Lahreche, P. Bove, C. Gaquière, J.C. DeJaeger, and S. Delage. Output power density of 5.1 W/mm at 18 GHz with an AlGaIn HEMT on Si substrate. IEEE Electron Device Letters (2006) **27**: pp. 7-9.
- [67] O.Lancry «Etude par microspectrométrie raman de matériaux et de composants microélectronique à base de semi-conducteur III-V grand gap» thèse, Univ. Lille Déc. 2009.
- [68] L. Liu, J.H. Edgar. Substrates for Gallium Nitride epitaxy. Materials Science and Engineering, R37, pp 112, 2002.
- [69] I. Moerman, Z. Bougrioua, “ATHENA”-ESA Contract Status. ESTEC-ESA - Wide Band Gap Technology Meeting, Octobre 2001.
- [70] H. Liu, W. So, K. Ma, B. Yuan, C. Chern. nHigh volume AlInGaIn LED manufacturing at AXT. Compound Semi-Conductor. Vol 7. No. 10, pp 59-61, Novembre 2001.
- [71] TDI makes large bulk GaN wafers. Compound Semi-Conductor. Vol. 7, No. 10, pp. 11-13, 2001.
- [72] S. Boeykens et al., « Investigation of AlN nucleation layers for AlGaIn/GaN heterostructures on 4H-SiC » phys. stat. sol. (c) 3, No. 6, 1579–1582 (2006).
- [73] T. J. Anderson et al., « AlGaIn/GaN high electron mobility transistors on Si/SiO₂/poly-SiC substrates » J. Vac. Sci. Technol. B 24, Sep/Oct 2006.
- [74] D. Nicolas «Caractérisation et modélisation de dispositif de la filière Nitrure pour la conception de circuits intégrés de puissance Hyperfréquences» thèse, Université de Lille Décembre 2007.

- [75] Martinez Guerrero «Elaboration par épitaxie par jets moléculaires des nitrures III en phase cubique», INSA, Lyon (2002).
- [76] H. Abdelkader «Elaboration du nitrure de gallium, Etude des ses propriétés et application» thèse, Université Tlemcen, Juin 2006.
- [77] R.Dingle et Al. «Absorption, Reflectance and Luminescence of GaN Epitaxial Layers ». Physical review B. 1974. volume 4. number 4. Pp1211-1218.
- [78] B.Monemar, « Fundamental energy gap of GaN from luminescence excitation spectra », Physical review B. 1974. volume 10. number 2. pp 676-681.
- [79] G.Nataf et al.J.Cryst. Growth, 192 :73 (1998).
- [80] B. Tewfik «Etude des propriétés structurales et électroniques de nouveaux matériaux à base d'alliages III-N pour l'optoélectronique» thèse, Université Tlemcen Juillet 2009.
- [81] T.Salim«Conception, réalisation et caractérisation de composants de puissance hyperfréquence de la filière nitrure de gallium» thèse, Université Lille Décembre 2007.
- [82] Nasser N.M, Ye Zhi zhen, Li Jiawei and Xu Ya bou. GaN Heteroepitaxial Growth Techniques. Journal of Microwaves and Optoelectronics, Vol. 2, No. 3, Juillet 2001.
- [83] K. Hiramatsu, A. Motogaito, H. Miyake, Y. Honda, Y. Iyechika, T. Maeda, F. Bertram, J. Christen, and A. Hoffman. Crystalline and Optical Properties of ELO GaN by HVPE Using Tungsten Mask. IEICE Trans. Electron., Vol. E83-C, No.4, pp. 488-490, Avril 2000.
- [84] T. S. Zheleva, S. A. Smith, D.B. Thomson, T. Gehrke, K.J. Linthicum, P.Rajagopal, E.Carlson, W.M. Ashmawi, and R.F. Davis. PENDEO Epitaxy : a new approach forlateral growth of Gallium Nitride structures.MRS Internet J. Nitride Semicond. Res. 4S1, G3.38, 1999.
- [85] T. Gehrke, K. J. Linthicum, D. B. Thomson, P. Rajagopal, A. D. Batchelor *, R. F. Davis.Pendeo-Epitaxy of Gallium Nitride and Aluminum Nitride Films and Heterostructures on Silicon Carbide Substrate. MRS Internet J. Semicond. Res. 4S1, G3.2, 1999.
- [86] I. Grzegory «Annealing of GaN under high pressure of nitrogen», J. Phys. Condens. Matter, Vol. 14 (2002), p. 11097-11110.
- [87] R. Madar, G. Jacobs, J. Jallais and R. Fruchart «High pressure solution growth of GaN», J. Cryst. Growth, Vol. 31 (1975), p. 197-203.

- [88] J. Karpinski and S. Porowski «High pressure thermodynamics of GaN», *J. Cryst. Growth*, Vol. 66 (1984), p. 11-20.
- [89] M. R. Ranade, F. Tessier, A. Navrotsky, V.J. Leppert, S. H. Risbud, F. J. Disalvo and C. M. Balkas «Enthalpy of formation of gallium nitride», *J. Phys. B*, Vol. 104 (2000), pp. 4060-4063.
- [90] J. Karpinski, S. Jun and S. Porowski «Equilibrium pressure of N₂ over GaN and high pressure solution growth of GaN», *J. Cryst. Growth*, Vol. 66 (1984), pp. 1-10.
- [91] J. F. Nye, « Physical properties of crystals », Oxford Univ. Press, Oxford (1985).
- [92] F. Bernardini, V. Fiorentini, et D. Vanderbilt, *Phys. Rev. B* 56, R100024 (1997).
- [93] I. Vurgaftman, et J. R. Meyer, *J. Appl. Phys.* 94, 3675 (2003).
- [94] M. Leroux, B. Damilano et F. Semond «Les nitrures d'éléments III : des semiconducteurs III-V singuliers», article, université de Montpellier II (2000).
- [95] S. Augaudy, « Caractérisation et modélisation des transistors micro-ondes, application à l'étude de la linéarité des amplificateurs à fort rendement », université de Limoges, 2002.
- [96] Perlin et al. «Towards the identification of the dominant donor in GaN » *Phys. rev. Lett.*, vol. 75, n°2, pp. 296-299 (1995).
- [97] M. Senoh S. Nakamura, T. Mukai *Jpn. J. Appl. Phys.*, 31:L2883 (1992).
- [98] N. Koide, H. Kato, M. Sassa, S. Yamasasaki, K. Manabe, M. Hashimoto, H. Amano, K. Hiaramatsu et I. Akasaki: *J. Cryst. Growth*, 115:639, (1991).
- [99] Z. Benzarti, I. Halidou, O. Tottereau, T. Boufaden et b. El Jani *Microelectron. J.*, 33 :995 (2002).
- [100] M. Leroux et al *J. Appl. Phys.*, 86 :372 (1999).
- [101] John Snyder, Colton B.S. (Brigham Young University), M.A. (University of California, Berkeley) «Selective Excitation of the Yellow and Blue Luminescence in n- and p-doped Gallium Nitride », degree of Doctor of Philosophy in Physics. (2000).
- [102] S. L. Chuang, et C. S. Chang, *Phys. Rev. B* 54, 2491 (1996).
- [103] M. Leroux, S. Dalmaso, F. Natali, S. Helin, C. Touzi, S. Laugt, M. Passerel, F. Omnes, F. Semond, J. Massies, et P. Gibart, *Phys. Stat. Sol. B* 234, 887 (2002).
- [104] Michael S. Shur «GaN-based electronic devices», chapter 5 (1998), p. 61-86.



Chapitre II

Transistor HEMT AlGa_N/Ga_N

II. Transistor HEMT AlGaN/GaN

II.1 Introduction

Le nitrure de gallium, grâce à sa bande d'énergie interdite importante et à son champ de claquage élevé (supérieur à $3 \times 10^6 \text{V/cm}$ c-à-d 7 à 8 fois supérieur à celui de GaAs), permet de réaliser des transistors possédant des tensions de claquages importantes de l'ordre de 100V. Les stabilités thermique et chimique de ce matériau font de lui, le candidat de choix pour la réalisation de transistors fonctionnant dans des environnements très chauds et corrosifs comme les réacteurs de fusées, ou encore dans les moteurs d'automobile.

Outre ces propriétés physiques, GaN présente la particularité d'être pyroélectrique et piézoélectrique. Cette spécificité permet de réaliser des transistors HEMT type AlGaN/GaN dont la densité d'électrons à l'interface peut aisément dépasser 1.10^{13}cm^{-2} sans dopage intentionnel de la barrière AlGaN.

Ce deuxième chapitre décrit formellement une étude générale d'une hétérojonction. Nous expliquons aussi la formation de 2DEG dans l'hétérostructure AlGaN/GaN, la polarisation spontanée et piézoélectrique, la vitesse des porteurs libres et le phénomène d'ionisation par impact. Après ; nous présentons le transistor HEMT à base de AlGaN/GaN : la structure physique, le principe de fonctionnement et les caractéristiques électriques. Puis, nous expliquons les effets limitatifs du HEMT. Enfin, nous citons l'état de l'art du transistor HEMT à base de AlGaN/GaN.

II.2 Etude d'une hétérojonction

II.2.1 Définition de l'hétérojonction

Par définition, l'hétérojonction est obtenue lorsque deux matériaux semi-conducteurs de gaps différents sont associés. Si les deux semi-conducteurs sont de même type, on dira que l'hétérojonction est isotype ; et s'ils sont différents, on dira qu'elle est anisotype. La réalisation d'une hétérojonction s'effectue par croissance cristalline d'un matériau sur l'autre et nécessite l'utilisation de semi-conducteurs ayant des propriétés cristallines voisines (la taille des atomes doit être notamment assez proche) de manière à minimiser la densité de dislocations parce que l'épitaxie se réalise à haute température.

L'intérêt d'une telle structure réside dans la création d'un décalage entre les bandes d'énergie permises des deux semi-conducteurs. Les énergies de bande interdite des deux

matériaux n'étant pas égales, il y a création de discontinuités en bandes de conduction ΔE_c et de valence ΔE_v à l'interface.

En fonction de la position des bandes interdites, l'hétérojonction peut être de trois types différents :

- type I : la bande interdite E_g^B est entièrement dans E_g^A .
- type II : Une des discontinuités est plus grande que $E_g^A - E_g^B$ mais inférieure à E_g^A .
- type III : une des discontinuités est supérieure à E_g^A .

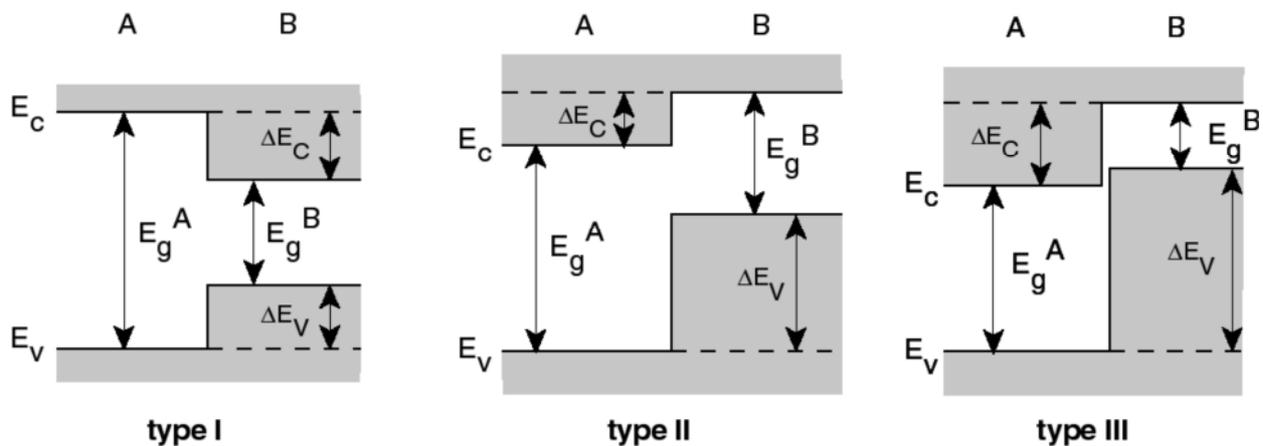


Figure II.1 [1] : Les trois types d'hétérojonctions entre deux semiconducteurs A et B ayant des énergies de bande interdite $E_g(A)$ et $E_g(B)$. E_c et E_v désignent la bande de conduction et la bande de valence. ΔE_c et ΔE_v sont les discontinuités de bande de conduction et de valence.

II.2.2 Diagramme des bandes d'une hétérojonction :

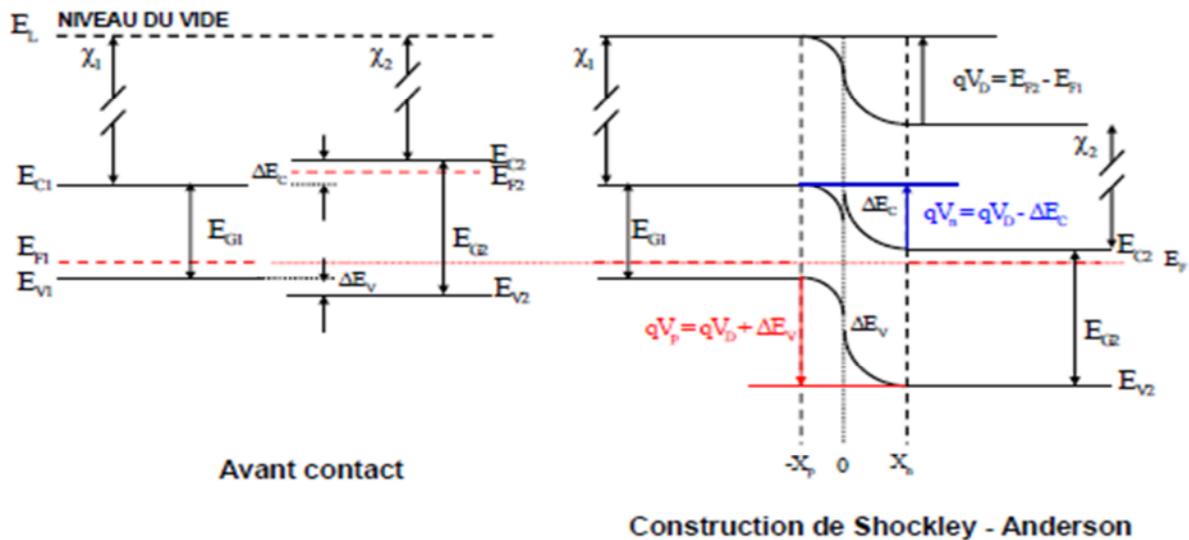


Figure II.2 : Diagramme des bandes d'une hétérojonction à l'équilibre.

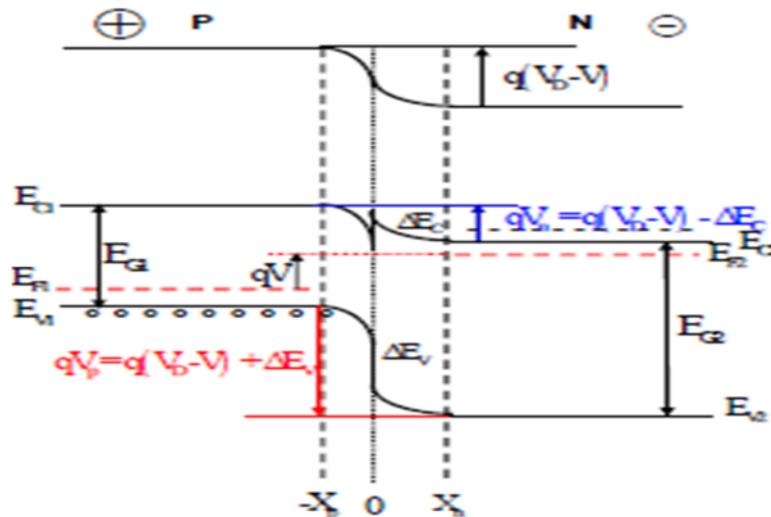


Figure II.3 [2] : Diagramme de bande d'une hétérojonction en polarisation directe.

II.2.3 Fonctionnement physique d'une hétérojonction :

➤ Hétérojonction à l'équilibre thermodynamique

Lorsque deux semi-conducteurs différents sont en contact, les électrons du semi-conducteur de type n diffusent vers celui de type p et les trous diffusent dans le sens inverse. La diffusion des porteurs de charge, est traduite par un courant électrique de porteurs majoritaires, appelé courant de diffusion.

Les électrons qui arrivent dans la zone p se recombinent avec les trous au voisinage de la jonction, les trous libres disparaissent et il reste des accepteurs ionisés par des charges négatives. Du côté n, les électrons libres disparaissent et il reste des donneurs ionisés par des charges positives. De ce phénomène, découle une zone déplétée de charges libres : c'est la zone de charges d'espace (la ZCE).

A l'équilibre thermodynamique, les niveaux de Fermi s'alignent. Un champ électrique est engendré à l'interface et une courbure de bande apparaît à son voisinage. Une barrière de potentiel est créée, s'opposant à la diffusion des porteurs et définissant l'état d'équilibre (la tension de diffusion V_d).

Quatre grandeurs fondamentales gouvernent le fonctionnement de la jonction, à savoir : le champ électrique, le potentiel, la largeur de la ZCE et la capacité différentielle.

Le calcul de la distribution du potentiel au voisinage de l'interface se fait comme dans le cas de l'homo-jonction PN par l'intégration de l'équation de Poisson. Il est relativement compliqué dans le cas où la charge d'espace résulte d'un régime d'accumulation pour plusieurs raisons. D'abord parce que le potentiel est fonction de la distribution de charges, mais les charges étant des porteurs libres, leur distribution est fonction du potentiel. Il en

résulte que le calcul doit être auto-cohérent et ne présente pas de solution analytique. Ensuite, étant donnée la grande densité de porteurs dans la couche d'accumulation, il faut tenir compte des corrélations électron-électron. Enfin et en raison du fait que cette charge est localisée très près de l'interface ; il faut tenir compte du potentiel image, associé à ces charges.

Le calcul peut être développé en régime de déplétion en supposant, comme dans le cas de l'homo-jonction PN, que la zone de déplétion est vide de porteurs libres. Pour que la zone de charges d'espace soit de déplétion dans chacun des semi-conducteurs, il faut que ces derniers soient de types différents.

Nous supposons les semiconducteurs dopés de manière homogène. Nous appelons N_{d1} l'excès de donneurs $N_d - N_a$ dans le semiconducteur 1, et N_{a2} l'excès d'accepteurs $N_a - N_d$ dans le semiconducteur 2.

L'équation de poisson s'écrit :

$$\frac{d^2V(x)}{dx^2} = -\frac{\rho(x)}{\varepsilon} \quad (\text{II.1})$$

❖ Dans le semiconducteur 1 :

$$\rho(x) = q N_{d1} \quad (\text{II.2})$$

$$\frac{d^2V(x)}{dx^2} = -\frac{qN_{d1}}{\varepsilon_1} \quad (\text{II.3})$$

En intégrant une fois avec la condition $E = 0$ en $x = x_1$, on obtient :

$$\frac{dv(x)}{dx} = -\frac{qN_{d1}}{\varepsilon_1}(x - x_1) = -E(x) \quad (\text{II.4})$$

$$\text{En } x = 0 \quad E_{sc1} = -\frac{qN_{d1}}{\varepsilon_1}x_1 \quad (\text{II.5})$$

En intégrant une deuxième fois et en appelant V_1 le potentiel de la région neutre du semiconducteur1, on obtient :

$$V(x) = -\frac{qN_{d1}}{2\varepsilon_1}(x - x_1)^2 + V_1 \quad (\text{II.6})$$

❖ Dans le semiconducteur 2 :

$$\rho(x) = -qN_{a2} \quad (\text{II.7})$$

$$\frac{d^2V(x)}{dx^2} = \frac{qN_{a2}}{\varepsilon_2} \quad (\text{II.8})$$

En intégrant une fois avec la condition $E = 0$ en $x = x_2$, on obtient :

$$\frac{dv(x)}{dx} = \frac{qN_{a2}}{\varepsilon_2} (x - x_2) = -E(x) \quad (\text{II.9})$$

$$\text{En } x = 0 \quad E_{sc2} = \frac{qN_{a2}}{\varepsilon_2} x_2 \quad (\text{II.10})$$

En intégrant une deuxième fois et en appelant V_2 le potentiel de la région neutre du semiconducteur2, on obtient :

$$V(x) = \frac{qN_{a2}}{2\varepsilon_2} (x - x_2)^2 + V_2 \quad (\text{II.11})$$

Le champ et le potentiel électriques sont représentés sur la figure suivante :

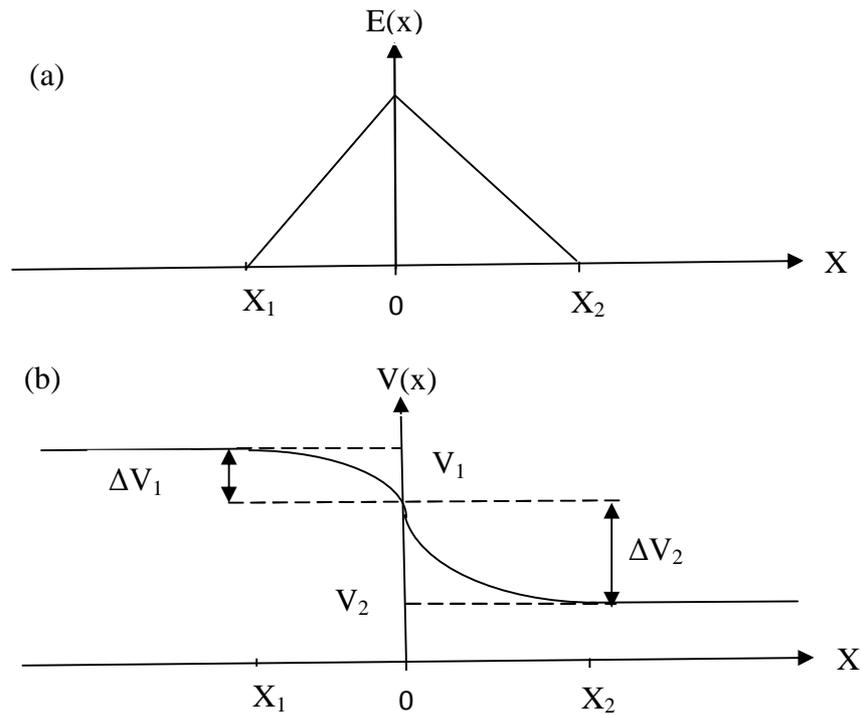


Figure II.4 : Champ et potentiel électriques à l'interface d'une hétérojonction.

La continuité du vecteur déplacement à l'interface s'écrit :

$$\varepsilon_1 E_{sc1} = \varepsilon_2 E_{sc2} \quad (\text{II.12})$$

$$\Rightarrow -qN_{d1}x_1 = qN_{a2}x_2 \quad (\text{II.13})$$

La continuité du potentiel en $x = 0$ s'écrit :

$$-\frac{qN_{d1}}{2\varepsilon_1}x_1^2 + V_1 = \frac{qN_{a2}}{2\varepsilon_2}x_2^2 + V_2 \quad (\text{II.14})$$

$$\Rightarrow V_1 - V_2 = \frac{qN_{d1}}{2\varepsilon_1}x_1^2 + \frac{qN_{a2}}{2\varepsilon_2}x_2^2 \quad (\text{II.15})$$

En posant $W_1 = |x_1|$ et $W_2 = |x_2|$;

$$(\text{II.13}) \Rightarrow N_{d1}W_1 = N_{a2}W_2 \quad (\text{II.16})$$

La relation (II.15) devient alors :

$$V_1 - V_2 = \frac{qN_{d1}}{2\varepsilon_1}W_1^2 \left(\frac{\varepsilon_2 N_{a2} + \varepsilon_1 N_{d1}}{\varepsilon_2 N_{a2}} \right) = \frac{qN_{a2}}{2\varepsilon_2}W_2^2 \left(\frac{\varepsilon_1 N_{d1} + \varepsilon_2 N_{a2}}{\varepsilon_1 N_{d1}} \right) \quad (\text{II.17})$$

D'où les expressions de la largeur de la zone de charges d'espace dans chacun des semiconducteurs :

$$W_1 = \left(\frac{2N_{a2}\varepsilon_1\varepsilon_2}{qN_{d1}(\varepsilon_1 N_{d1} + \varepsilon_2 N_{a2})} \right)^{\frac{1}{2}} (V_1 - V_2)^{1/2} \quad (\text{II.18})$$

$$W_2 = \left(\frac{2N_{d1}\varepsilon_1\varepsilon_2}{qN_{a2}(\varepsilon_1 N_{d1} + \varepsilon_2 N_{a2})} \right)^{\frac{1}{2}} (V_1 - V_2)^{1/2} \quad (\text{II.19})$$

La largeur totale de la zone de déplétion est donnée par :

$$W = W_1 + W_2$$

$$W = \left[\frac{2\varepsilon_1\varepsilon_2(N_{d1} + N_{a2})^2}{qN_{d1}N_{a2}(\varepsilon_1 N_{d1} + \varepsilon_2 N_{a2})} \right]^{1/2} (V_1 - V_2)^{1/2} \quad (\text{II.20})$$

La différence de potentiel ($V_1 - V_2$) s'établit en partie dans chacun des semiconducteurs, le rapport des chutes de potentiel correspondantes est donnée par :

$$\frac{\Delta V_1}{\Delta V_2} = \frac{[V(x=0) - V_1]_{sc1}}{[V(x=0) - V_2]_{sc2}} = \frac{qN_{d1}W_1^2/2\varepsilon_1}{qN_{a2}W_2^2/2\varepsilon_2} = \frac{\varepsilon_2 N_{d1}W_1^2}{\varepsilon_1 N_{a2}W_2^2} \quad (\text{II.21})$$

Soit en utilisant les relations (II.18) et (II.19)

$$\frac{\Delta V_1}{\Delta V_2} = \frac{\varepsilon_2 N_{a2}}{\varepsilon_1 N_{d1}} \quad (\text{II.22})$$

En l'absence de polarisation extérieure, la différence de potentiel ($V_1 - V_2$) correspond à la tension de diffusion. En présence d'une polarisation V de semiconducteur 2 par rapport au semiconducteur 1, cette différence devient :

$$V_1 - V_2 = V_d - V$$

La tension de diffusion V_d est distribuée entre les deux semiconducteurs dans le rapport suivant:

$$\frac{\Delta V_{d1}}{\Delta V_{d2}} = \frac{\varepsilon_2 N_{a2}}{\varepsilon_1 N_{d1}} \quad (\text{II.23})$$

Comme dans le cas de l'homo-jonction PN ou de la diode Schottky, toute variation de V entraîne une modulation de la largeur W de la zone de charges d'espace, et par suite une modulation de la charge développée dans chacun des semi-conducteurs. Il en résulte que la structure présente une capacité différentielle. La charge d'espace est donnée par :

$$Q_{sc1} = -Q_{sc2} = qN_{d1}W_1 = qN_{a2}W_2$$

En utilisant l'équation (II.17) et remplaçant $V_1 - V_2$ par $V_d - V$:

$$Q = \left(\frac{2q\varepsilon_1\varepsilon_2N_{d1}N_{a2}}{\varepsilon_1N_{d1} + \varepsilon_2N_{a2}} \right)^{\frac{1}{2}} (V_d - V)^{1/2} \quad (\text{II.24})$$

La capacité différentielle est donnée par:

$$C(V) = \left| \frac{dQ}{dV} \right| = \left(\frac{q\varepsilon_1\varepsilon_2N_{d1}N_{a2}}{2(\varepsilon_1N_{d1} + \varepsilon_2N_{a2})} \right)^{\frac{1}{2}} (V_d - V)^{-1/2} \quad (\text{II.25})$$

Cette expression se simplifie dans le cas où l'un des semi-conducteurs est beaucoup plus dopé que l'autre. Supposons par exemple $N_{a2} \gg N_{d1}$;

$$C(V) = \left(\frac{2q\varepsilon_1\varepsilon_2N_{d1}N_{a2}}{2\varepsilon_2N_{a2}(1 + \varepsilon_1N_{d1}/\varepsilon_2N_{a2})} \right)^{\frac{1}{2}} (V_d - V)^{-1/2} \quad (\text{II.26})$$

Dans la mesure où les constantes diélectriques sont de même ordre de grandeur pour les semi-conducteurs, si $N_{a2} \gg N_{d1}$ l'expression de $C(V)$ s'écrit finalement [3]:

$$C(V) \approx \left(\frac{q\varepsilon_1N_{d1}}{2} \right)^{1/2} (V_d - V)^{-1/2} \quad (\text{II.27})$$

II.3 Hétérostructure AlGaN/GaN

II.3.1 Hétérostructure classique AlGaN/GaN

L'hétérojonction formée par la juxtaposition de deux matériaux dont les largeurs de bande interdite sont différentes entraîne la formation d'une discontinuité de la bande de conduction à l'interface (ΔE_c). AlGaN présente un gap supérieur à 3,4eV et allant jusqu'à 6,2eV, et GaN admet un gap un peu plus faible égal à 3,4eV. Cette structure permet la création d'un gaz d'électrons dans un canal peu dopé favorisant ainsi la montée en fréquence.

La Figure II.5 présente les niveaux d'énergie mis en jeu dans chacun des matériaux de l'hétérojonction avant contact.

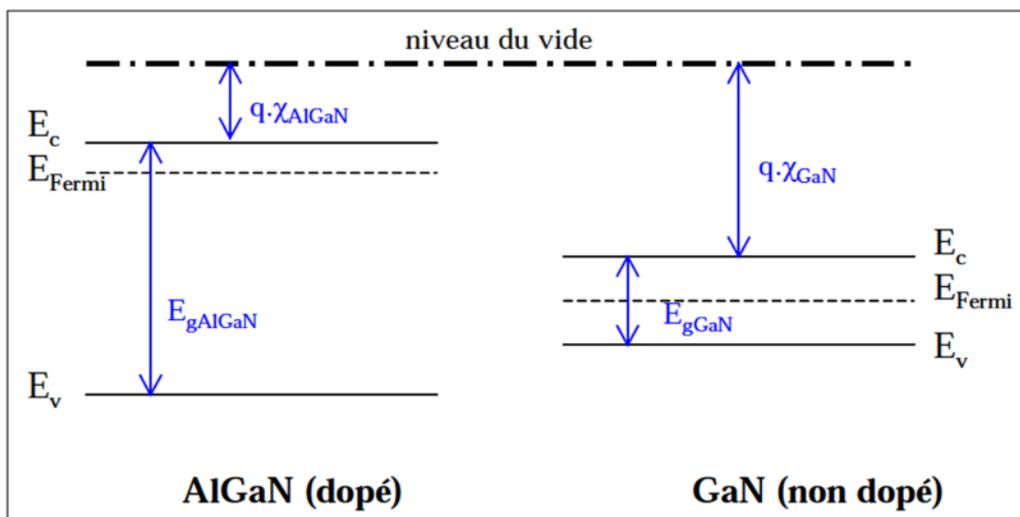


Figure II.5 : Niveaux d'énergie d'AlGaN et GaN, mis en jeu dans l'hétérojonction.

Du fait des règles d'Anderson, les niveaux de Fermi des deux matériaux s'alignent lors de la jonction. Le niveau du vide ne pouvant pas subir de discontinuités, il en résulte une discontinuité de la structure de bande d'énergie à l'interface. On se limite ici au cas simplifié d'une hétérojonction idéale où il n'y a pas de charges à l'interface, dues par exemple à des pièges associés à un désaccord de maille, à une non stœchiométrie ou encore à des impuretés accumulées à l'interface lors de la croissance par épitaxie de l'hétérojonction.

La Figure II.5 représente les diagrammes de bandes des deux semiconducteurs supposés fictivement séparés par un espace infinitésimal suffisant. Les deux semi-conducteurs sont supposés homogènes (composition, dopage...) et électriquement neutres. Tous les niveaux d'énergie y sont plats [4][5][6] :

- E_0 : niveau du vide.
- E_{cAlGaN} et E_{cGaN} : niveaux du bas de bandes de conduction.
- E_{FAlGaN} et E_{FGaN} : niveaux de Fermi.
- E_{vAlGaN} et E_{vGaN} : niveaux du haut de bandes de valence.

Les « affinités électroniques » sont les énergies requises pour extraire un électron du bas de la bande de conduction:

$$\chi_{AlGaN} = E_0 - E_{cAlGaN} \quad (\text{II.28})$$

$$\chi_{GaN} = E_0 - E_{cGaN} \quad (\text{II.29})$$

Ce sont des grandeurs intrinsèques caractéristiques des deux matériaux, au même titre que leur « énergie de bande interdite » ou gap :

$$E_{gAlGaN} = E_{cAlGaN} - E_{vAlGaN} \quad (\text{II.30})$$

$$E_{gGaN} = E_{cGaN} - E_{vGaN} \quad (\text{II.31})$$

La figure II.6 représente les diagrammes de bande raccordés après avoir « recollé » les deux semi-conducteurs formant ainsi une hétérojonction. Les porteurs de charges sont à présent libres de se redistribuer entre les deux semi-conducteurs. Ceux-ci ne forment plus qu'un seul système dont le niveau de Fermi E_F est constant, puisque nous le considérons à l'équilibre thermodynamique ($E_F = E_{FAlGaN} = E_{FGaN}$). Le niveau du vide étant continu, le bas de bande de conduction doit présenter la même discontinuité que l'affinité électronique :

$$\Delta E_c = \chi_1 - \chi_2 \quad (\text{II.32})$$

Le haut de la bande de valence doit, par conséquent, présenter une discontinuité complémentaire par rapport à celle du gap :

$$\Delta E_v = \Delta E_g - \Delta E_c \quad (\text{II.33})$$

Notons que la répartition $\frac{\Delta E_c}{\Delta E_v}$ est une constante puisqu'elle ne dépend que des affinités électroniques et des gaps des deux matériaux.

Loin de l'interface ; de chaque côté de l'hétérojonction, le diagramme de bande doit tendre asymptotiquement vers chacun des diagrammes initiaux. Cela implique donc que les bandes de conduction et de valence sont courbées au voisinage de l'hétérojonction. Cette courbure de bande et la constance du niveau de Fermi sont assurées par la redistribution des porteurs et la création associée d'une zone de charges d'espace possédant les épaisseurs x_{Tn} et x_{Tp} .

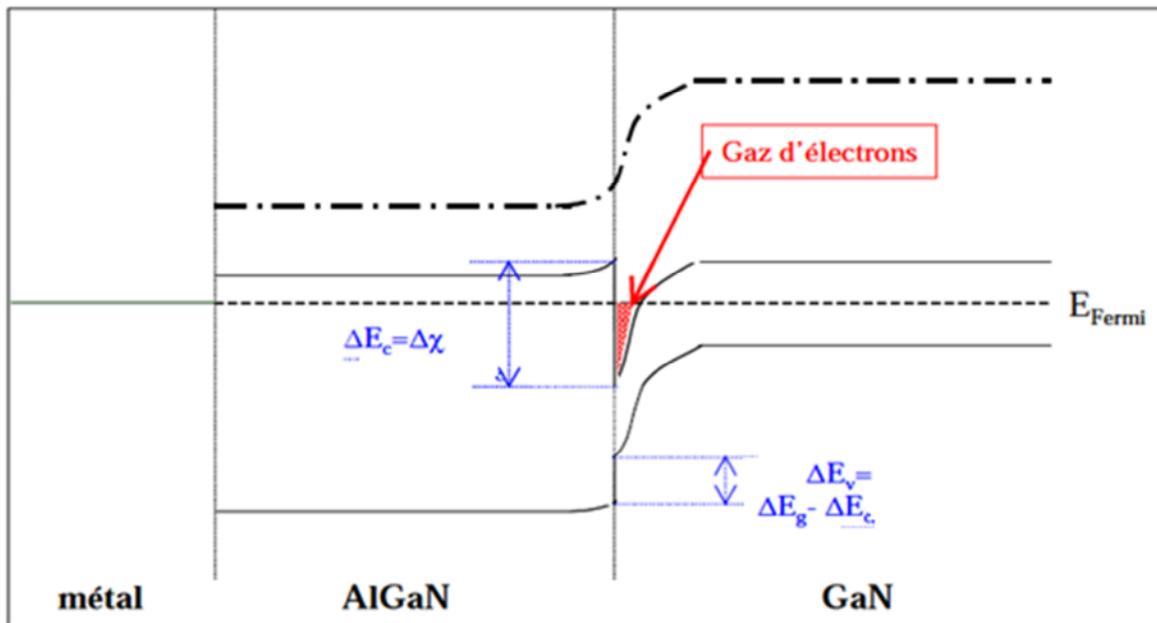


Figure II.6 : Niveaux d'énergie des matériaux à l'hétérojonction pour une tension appliquée nulle.

Comme nous pouvons l'observer, un puits de potentiel est formé à l'interface, dans le matériau de plus faible largeur de bande interdite. Ce puits reste écartelé dans le côté supérieur du matériau à plus faible gap non dopé ; car le matériau de grand gap forme à son tour, la barrière énergétique de ce puits. Pour une largeur de puits inférieure à la longueur d'onde de DeBroglie ($\lambda_{th} = \frac{h}{\sqrt{2kTm^*}}$ avec h constante de Plank, k la constante de Boltzman, T la température et m^* la masse effective de l'électron), des effets quantiques apparaissent. Ces effets se traduisent par la quantification des niveaux d'énergie des électrons et par la restriction du mouvement des porteurs dans le plan perpendiculairement à l'hétérojonction. Les charges libres vont se regrouper à l'intérieur de ce puits, formant ainsi un gaz d'électrons bidimensionnel. Cela va donc entraîner le phénomène de conduction. Ce puits quantique n'est tout simplement que le canal.

La densité de porteurs des charges dans le canal dépend donc du niveau de Fermi, de la différence de largeur de bandes interdites entre les deux matériaux (ΔE_g) et du dopage considéré.

L'hétérojonction permet de réaliser la séparation spatiale des atomes donneurs ionisés et des électrons libres. Ces électrons ne sont donc plus soumis aux interactions avec les

impuretés ionisées et peuvent alors atteindre des mobilités importantes, équivalentes à celle du matériau intrinsèque.

Nous pouvons décrire brièvement le comportement de la jonction sous polarisation :

Lorsqu'on applique une tension positive du côté du matériau à grande largeur de bande interdite, le niveau de Fermi augmente et fait monter les niveaux d'énergie. Il en résulte un confinement plus important des porteurs dans le puits de potentiel.

En revanche ; si une tension négative est appliquée au même matériau, le phénomène inverse se produira et une partie des porteurs sera libérée dans le matériau à petite largeur de bande interdite. On peut constater effectivement une modulation de gaz d'électrons et donc de la concentration de porteurs dans le canal.

La figure II.7 illustre l'hétérojonction lorsqu'une tension non nulle est appliquée côté matériau à grand gap [7].

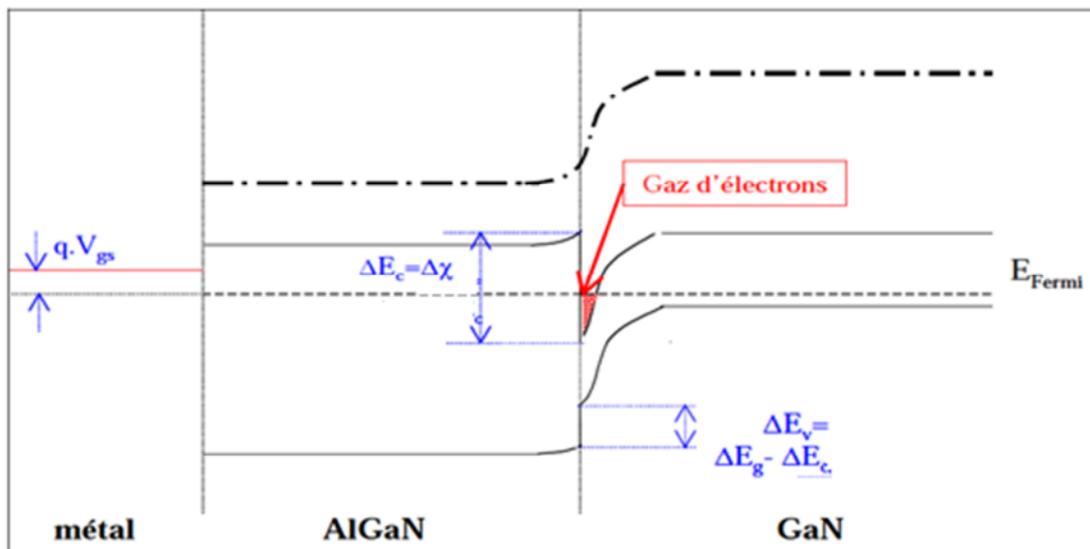


Figure II.7 : Niveaux d'énergie des matériaux à l'hétérojonction pour une tension appliquée non nulle.

II.3.2 Hétérostructure avec couche espaceur AlGa_N/AlN/GaN

L'utilisation d'une couche espaceur en AlN permet d'augmenter la densité et la mobilité des porteurs dans le canal. La couche AlN permet notamment d'améliorer la qualité du cristal. La figure II.8 montre la structure épitaxiale d'une hétérostructure AlGa_N/AlN/GaN.

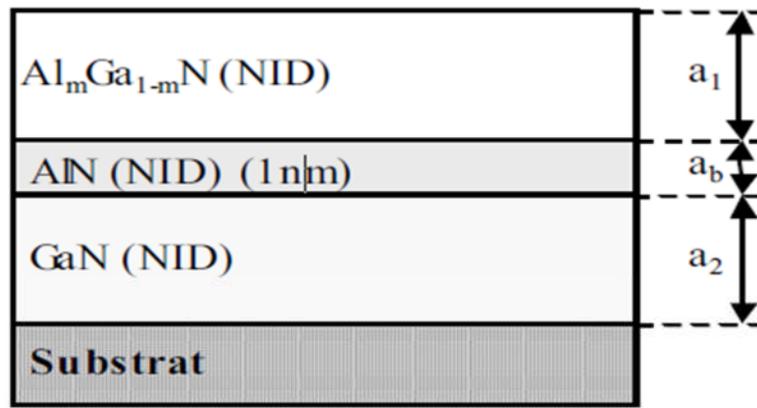


Figure II.8 : Structure épitaxiale d'une hétérostructure AlGa_xN/AlN/GaN.

Une épaisseur d'AlN comprise entre 0,5 et 1 nm est la plus couramment employée [8].

La figure II.9 présente le diagramme de bande d'énergie de conduction et la distribution des charges dans une hétérostructure AlGa_xN/AlN/GaN [9].

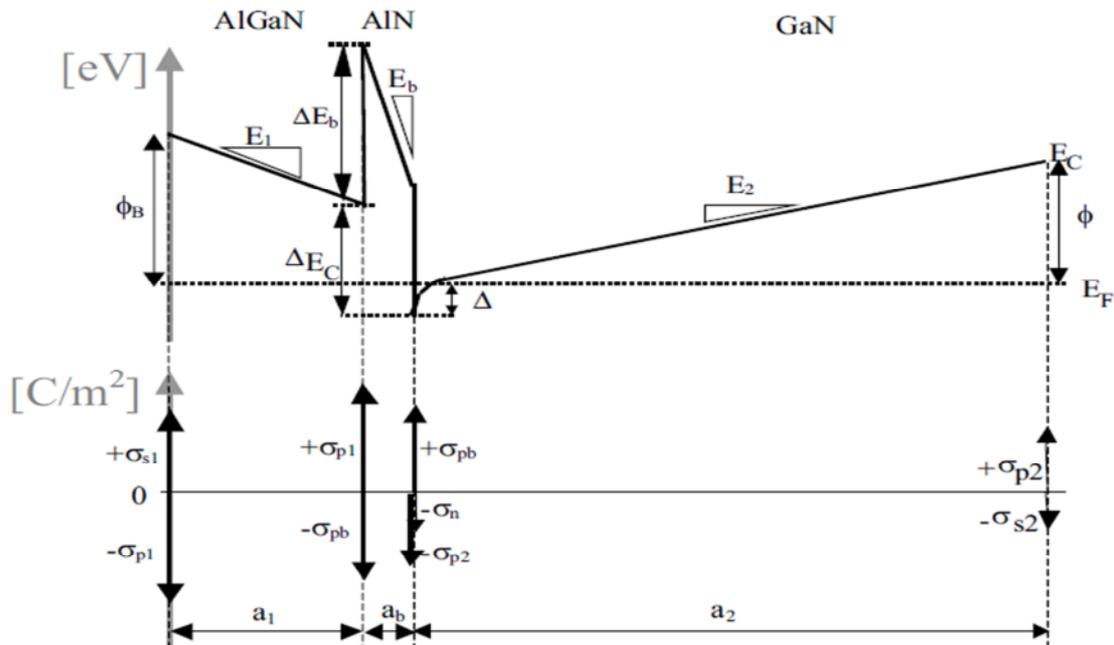


Figure II.9 [9] : Diagramme de bande d'énergie de conduction et distribution des charges dans une hétérostructure AlGa_xN/AlN/GaN.

Où ΔE_c est la discontinuité de la bande de conduction entre Al_xGa_{1-x}N et GaN, ϕ_B est la hauteur de la barrière de potentiel à la surface, ϕ est la hauteur de la barrière de potentiel entre la couche GaN et le substrat, Δ est l'énergie séparant le bas du puits de potentiel du niveau de Fermi, E_1 et E_2 sont respectivement l'intensité du champ électrique dans la couche AlGa_xN et dans la couche GaN, $+\sigma_{s1}$ est une charge positive de surface qui participe à la compensation de la charge $-\sigma_{p1}$, et $-\sigma_{s2}$ est une charge négative située sur la face inférieure de la couche GaN, qui participe à la compensation de la charge $+\sigma_{p2}$.

La couche AlN est associée aux notations supplémentaires suivantes : a_b est l'épaisseur de la couche AlN, $+\sigma_{pb}$ et $-\sigma_{pb}$ sont respectivement les charges induites par les effets de polarisation piézoélectrique de AlN aux interfaces de AlN/GaN et AlN/AlGaN, E_b est le champ électrique dans AlN, et ΔE_b est la discontinuité de bande d'énergie de conduction entre AlGaN et AlN. On peut voir sur la figure II.9 que la bande de conduction de l'hétérostructure AlGaN/AlN/GaN présente un pic très marqué au niveau de la couche AlN. Cela est dû d'une part à la grande énergie de bande interdite de l'AlN (6,2 eV), et d'autre part aux très forts effets de polarisation dans cette couche. Par rapport à une hétérostructure classique, la discontinuité de la bande de conduction entre AlGaN et GaN, ΔE_c est augmentée. La variation de potentiel aux bornes de la couche AlN peut atteindre 0,9 V, ce qui conduit à ΔE_c de l'ordre de 1,4 eV, valeur deux fois plus élevée que dans un HEMT standard [8]. Cette augmentation de la discontinuité de la bande de conduction ΔE_c entraîne une diminution du champ électrique E_1 dans la couche AlGaN, et donc une augmentation de la densité des porteurs du 2DEG. Enfin, l'augmentation de la discontinuité de la bande de conduction induit une amélioration de la mobilité des électrons.

II.3.3 Gaz électronique à deux dimensions

Ce gaz électronique à deux dimensions est aussi appelé « gaz d'électrons », « canal d'électrons » ou « gaz 2DEG » pour « Two-Dimensional Electron Gas ». Celui-ci se forme à l'interface AlGaN/GaN grâce à l'effet cumulé de la polarisation spontanée et de la polarisation piézoélectrique qui règnent dans les semi-conducteurs AlGaN et GaN.

II.3.3.1 Polarisation spontanée

Il est primordial de maîtriser parfaitement lors de la croissance, l'ordre de la séquence des couches atomiques afin d'orienter le vecteur de la polarisation spontanée dans le bon sens pour obtenir un gaz bidimensionnel d'électrons à l'interface d'une hétérostructure AlGaN/GaN.

Il faut préciser que le sens d'orientation de la polarisation spontanée dans le matériau AlGaN est le même que celui du matériau GaN. Cette orientation est appelée polarité de la couche.

A partir des valeurs de polarisation spontanée de l'AlN et du GaN, une loi linéaire peut être établie pour représenter l'évolution de la polarisation spontanée du composé ternaire $Al_xGa_{1-x}N$ en fonction du taux d'aluminium x .

$$P_{SP}(x) = (-0.052x - 0.029) C / m^2 \quad (\text{II.34})$$

En d'autres termes, plus le taux d'aluminium x est important et plus la valeur absolue de la polarisation spontanée dans le matériau AlGa_xN est importante [10].

II.3.3.2 Polarisation piézoélectrique

Dans les hétérostructures AlGa_xN/GaN, les contraintes sont générées par le désaccord de maille existant entre les deux matériaux. La polarisation piézoélectrique pour des matériaux à structure wurtzite est donnée par :

$$P_i^{pz} = e_{ik} \varepsilon_k \quad (\text{II.35})$$

Où P_i^{pz} est la composante i du vecteur de polarisation piézoélectrique, e_{ik} est le tenseur piézoélectrique et ε_k est le tenseur de contraintes. Dans le cas des hétérostructures à base de nitrure de gallium, la contrainte est biaxiale et les contraintes de cisaillement sont négligeables, la polarisation piézoélectrique a seulement une composante qui est dirigée le long de l'axe [0001] et qui dépend linéairement du paramètre de maille a .

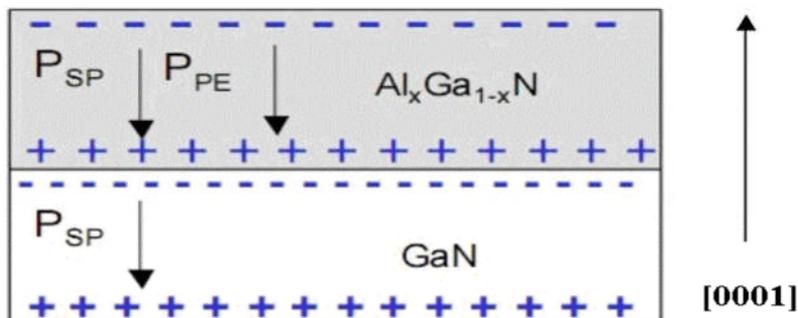


Figure II.10 : Polarisation spontanée et piézoélectrique dans une couche d'AlGa_xN (fâce Ga), en tension sur une couche de GaN.

La figure II.10 schématise les orientations des polarisations pour une couche de l'alliage AlGa_xN pseudomorphique sur une couche épaisse de GaN. Lorsque la couche d'AlGa_xN est en tension, les polarisations piézoélectrique et spontanée ont la même direction et sont orientées en sens contraire de l'axe [0001]. Si la couche d'AlGa_xN était en compression, la polarisation piézoélectrique aurait une direction opposée à la polarisation spontanée [11].

A condition que la croissance du matériau soit orientée selon l'axe positif [0001] (fâce Ga), le bilan global dans l'hétérostructure (figure II.10) conduit à une polarisation positive à

l'interface AlGa_xN/GaN. En effet, la polarisation globale à l'interface est équivalente à la somme algébrique des composantes piézoélectriques et spontanées. Dans l'hypothèse où la couche tampon de GaN est non contrainte, la valeur de la polarisation à l'interface AlGa_xN/GaN est donc donnée par la formule suivante :

$$\Delta P = P_{sp,Al_xGa_{1-x}N} + P_{pez,Al_xGa_{1-x}N} - P_{sp,GaN} \quad (\text{II.36})$$

Les électrons disponibles dans la structure, en particulier ceux qui occupent les états de surface d'AlGa_xN, ont tendance à venir compenser la charge positive issue des polarisations à l'interface. La densité de charge σ induite par la variation du vecteur de polarisation par rapport à l'espace est donnée par [12] :

$$\sigma = P_{haut} - P_{bas} \quad (\text{II.37})$$

Pour le GaN en phase hexagonale de type Wurtzite, la polarisation est dirigée perpendiculairement à l'interface de l'hétérojonction AlGa_xN/GaN le long de l'axe « c », induisant une densité de charge fixe à l'interface σ_{int} [6][12] :

$$\sigma_{int} = P_{tot,couche\ 1} - P_{tot,couche\ 2} \quad (\text{II.38})$$

$$\sigma_{int} = [P_{SP} + P_{PZ}]_{couche\ 1} - [P_{SP} + P_{PZ}]_{couche\ 2} \quad (\text{II.39})$$

La présence d'une charge fixe attire une charge mobile vers l'interface pour la compenser. Si la charge fixe est positive, elle induira une charge mobile négative, et vice versa.

La densité de charge augmente fortement lorsque le pourcentage d'aluminium x de la couche AlGa_xN augmente. Cette évolution est due à l'accroissement des polarisations spontanée et piézoélectrique de l'AlGa_xN lorsque x augmente. Cependant ces résultats restent théoriques car au-delà de x=0,5, la qualité cristalline se dégrade et une relaxation partielle de la couche AlGa_xN apparaît.

Cette densité de charge positive induite par les champs de polarisation doit être compensée par une charge de signe opposée : le canal d'électrons.

Dans le cas de l'hétérostructure AlGa_xN/GaN, la discontinuité de bande de conduction donne naissance à un puits de potentiel dans lequel les électrons, attirés par la polarisation relative positive, sont confinés. Ainsi, la création d'un gaz bidimensionnel (2D) d'électrons à l'interface AlGa_xN/GaN est rendue possible par l'effet combiné de la polarisation spontanée, de la polarisation piézoélectrique et du décalage de la bande de conduction. Il n'est ainsi pas

nécessaire de doper le matériau AlGaIn pour obtenir la formation d'un gaz bidimensionnel d'électrons en raison de la forte valeur du champ de polarisation interne existant dans cette filière de matériau. L'origine des électrons est généralement attribuée aux états de surface de type donneur [13].

Les porteurs étant présents en l'absence de dopants ionisés, la mobilité des électrons est donc améliorée par rapport à celle mesurée dans le matériau massif. Ainsi ; alors que les mobilités dans GaN massif sont de l'ordre de 900 cm²/V.s, la création d'un gaz d'électrons à l'interface AlGaIn/GaN permet d'atteindre des mobilités supérieures à 1500-2000 cm²/V.s à température ambiante, avec des densités de porteurs de l'ordre de 1.10¹³cm⁻². Cette densité de porteurs est de 2 à 5 fois supérieure à celle obtenue dans la filière GaAs.

Contrairement aux gaz bidimensionnels obtenus par dopage (cas du système à base de GaAs), le dopage n'est pas indispensable dans le cas de GaN. Il peut cependant être utilisé pour augmenter la densité de porteurs. Celle-ci peut aussi être contrôlée en faisant varier les épaisseurs et concentrations en aluminium d'AlGaIn [14][15].

II.3.3.3 Effet du taux d'aluminium dans la barrière d'AlGaIn sur la densité de charges superficielles

Al_xGa_{1-x}N est un alliage cationique, solution solide d'AlN et de GaN. Le taux d'aluminium dans AlGaIn est un élément important car il permet d'augmenter la densité de porteur ns. Le paramètre de maille, en fonction de la composition en aluminium x, est donné pour GaN par la relation II.40, et pour AlGaIn par la relation II.41:

$$a(x) = a_0^{GaN} - x(a_0^{GaN} - a_0^{AlN})(\text{\AA}) \quad (\text{II.40})$$

$$a_{AlGaIn} = 3.189 - 0.077x \quad (\text{\AA}) \quad (\text{II.41})$$

Le désaccord en maille entre les deux matériaux s'exprime de la manière suivante :

$$\frac{\Delta a}{a} = \frac{a_{AlGaIn} - a_{GaN}}{a_{GaN}} \quad (\text{II.42})$$

Il est possible de faire croître le matériau AlGaIn sur GaN pour un taux d'aluminium assez important ; cela a permis de développer des composants à hétérojonction AlGaIn/GaN. Cependant, lorsque le taux d'aluminium augmente, le paramètre de maille de l'AlGaIn diminue. Cela conduit à une augmentation du désaccord de maille. Ce dernier est maximum pour un taux d'aluminium de 100% qui correspond à AlN. Le désaccord de maille est de 2,4% entre AlN et GaN, ce qui est relativement élevé. Cela peut générer des contraintes importantes

dans les alliages limitant l'épithaxie d'une couche d'AlGa_xN sur GaN à des épaisseurs assez faibles. Le but est d'éviter la relaxation de la contrainte. L'épaisseur de la couche AlGa_xN avec un taux d'aluminium de 20 à 30% est typiquement de l'ordre de 250-350 Å.

Nous venons de voir que la contrainte en tension sera d'autant plus grande que le taux d'aluminium sera important comme on peut le constater à partir de la relation (2). En effet plus le taux d'aluminium augmente, plus le paramètre de maille du matériau AlGa_xN diminue.

En conclusion ; la polarisation spontanée et la polarisation piézoélectrique augmentent avec le taux d'aluminium, donc implicitement la densité de charges d'électrons s'accroît aussi.

La teneur en aluminium est limitée à environ 30% pour éviter la génération de dislocations et de fissures. De plus, l'augmentation de la concentration d'aluminium a pour effet de réduire la mobilité des porteurs. Les structures optimales présentent des concentrations d'aluminium entre 15% et 30% et permettent d'obtenir des concentrations électroniques de l'ordre de 10^{13} cm^{-2} dans le gaz d'électrons 2D avec des mobilités de 1500-2000 cm²/Vs. La combinaison de cette forte densité électronique et de cette forte mobilité permet d'atteindre des performances remarquables aussi bien en régime dynamique qu'en statique [16].

II.4 Transistor HEMT

Le HEMT (High Electron Mobility Transistors) appartient à la famille des transistors à effet de champ. Il est un cas particulier du MESFET (Metal Semiconductor Field Effect Transistor).

Ce composant possède plusieurs dénominations dans la terminologie anglo-saxonne, TEGFET (Two-dimensional Electron Gas Field Effect Transistor), MODFET (MODulation Doped Field Effect Transistor) mais également HFET (Heterojunction Field Effect Transistor). Ce dernier terme est toutefois généralement plutôt réservé à un autre composant à hétérostructure dans lequel le transport s'effectue dans un matériau dopé alors qu'il est non dopé pour le HEMT.

II.4.1 Historique du transistor HEMT

La naissance du transistor HEMT (High Electron Mobility Transistor) date de peu après 1979 où Dingle et al. [17] ont eu l'idée d'utiliser des hétérojonctions du type GaAs/Al_xGa_{1-x}As, pour séparer spatialement les électrons libres des impuretés, ce qui favorise

la mobilité dans ces hétérostructures à gaz d'électrons. Une invention conjointe entre Thomson CSF (France) et Fujitsu (Japon) [18] permet, par la suite, la conception des premiers transistors HEMT en 1980.

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

Le HEMT constitue une évolution majeure du MESFET (Fet à jonction métal/semiconducteur) et prend le pas sur ce dernier depuis le début des années 1990.

Les premiers HEMTs GaN sur substrat saphir, silicium et carbure de silicium, apparaissent au milieu des années 90 [19]. Cependant; des résultats très intéressants en termes de puissance et de fréquence sont trouvés seulement la fin des années 90 [20].

En 1999, S.T. Sheppard présente des travaux sur un transistor HEMT GaN (substrat SiC) avec une densité de puissance de 6,9 W/mm à 10GHz [21]. Au sein du laboratoire IRCOM, un transistor HEMT GaN sur substrat SiC issu du laboratoire Tiger de 1,2mm de développement de grille a délivré une puissance de sortie de 6,7 W (5,6 W/mm) avec un *PAE* de 40 % et un gain en puissance associé de 6,5dB à une fréquence de 10GHz lors de mesures grand signal en régime CW [22]. De très bons résultats sont aussi obtenus à partir de transistors HEMTs GaN sur substrat silicium avec des densités de puissance de 1,9 W/mm à 10GHz [23] allant jusqu'à 12 W/mm à 2,14GHz [24].

Très récemment, des sociétés comme CREE et SOITEC commencent à proposer des wafers GaN, tout en continuant leur production de wafers SiC beaucoup plus matures. Les travaux de K.K. Chu font état d'un transistor HEMT AlGa_N/Ga_N sur substrat GaN polarisé à 50 V sur le drain, ayant une densité de puissance de 9,4 W/mm avec un *PAE* associé de 40 % à 10 GHz [25].

Nous constatons donc que tous les résultats présentés jusqu'ici, et obtenus avec des transistors HEMTs à structure conventionnelle, ne dépassent pas les 10W/mm pour des applications bande X [26].

Or début 2004, un saut technologique vient d'être accompli avec l'ajout d'une métallisation de grille, appelée « Field plate » ou « overlapping gate », située au-dessus de la

couche de passivation du composant. Ces nouvelles structures Field plate permettent d'atteindre des densités de puissance exceptionnelles [27][28].

Ce composant est désormais largement utilisé en tant que composant faible bruit dans les systèmes de télécommunications terrestres et spatiales, dans les radiotélescopes, dans les récepteurs de télévision par satellite, ..., dans bon nombre de systèmes électroniques, des téléphones portables aux véhicules automobiles.

II.4.2 Structure d'un HEMT

La structure d'un HEMT (Figure II.11) est constituée essentiellement de trois matériaux différents : le substrat, un matériau à large bande interdite et un matériau à plus faible bande interdite.

Comme nous l'avons vu précédemment, la jonction de ces deux derniers matériaux engendre la formation du gaz bidimensionnel d'électrons à l'interface, dont la densité est modulée par la tension appliquée à la grille du composant.

L'autre phénomène caractéristique du fonctionnement d'un HEMT, outre l'existence d'un gaz d'électrons, c'est la jonction Schottky créée par la jonction métal de grille et semiconducteur du substrat.

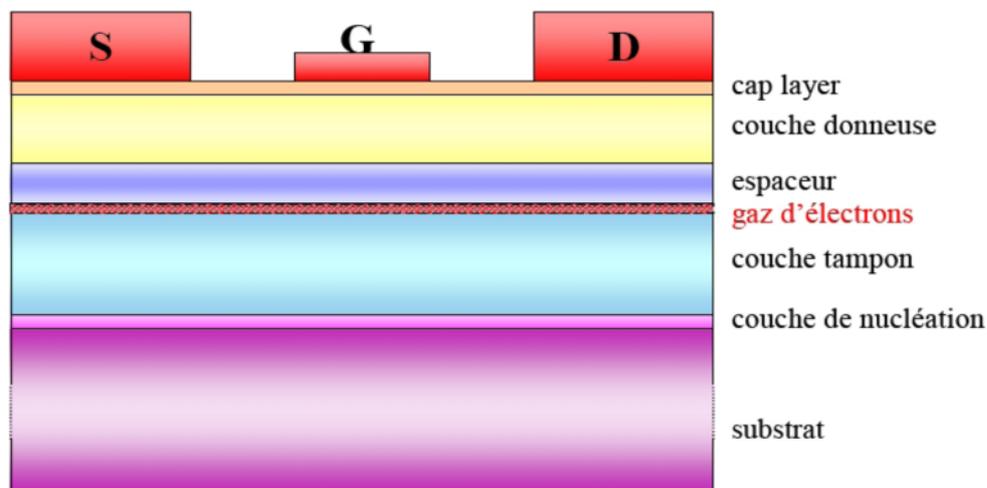


Figure II.11 : Structure d'un transistor HEMT.

- **Le substrat:** C'est la couche sur laquelle on fait croître les matériaux par épitaxie. Dans notre cas un bulk GaN n'est pas à ce jour disponible à faible coût et en grande taille, les substrats de nitrure de gallium sont encore très peu utilisés ; on a alors recours à des substrats

autres que GaN. Un mauvais choix de substrat peut causer lors de la croissance, des dislocations qui peuvent rendre le composant non fonctionnel. Les matériaux souvent utilisés sont le silicium, le saphir et le carbure de silicium.

- **La couche de nucléation:** C'est une couche mince de GaN qui sert à minimiser le désaccord de maille entre la couche tampon et le substrat, et pour s'assurer d'avoir une bonne qualité cristallographique afin de faire croître la couche du cristal de GaN.
- **La couche tampon ou « buffer » :** Cette couche est constituée du matériau de plus faible largeur de bande interdite, dans notre cas il s'agit du nitrure de gallium (3.4eV); c'est dans la partie supérieure de cette couche que le gaz bidimensionnel est formée. Elle permet d'améliorer le confinement des électrons dans le canal en réduisant l'injection des porteurs vers le substrat.
- **Le canal :** Le canal est situé dans la couche de matériau à petit gap non intentionnellement dopée. C'est la plus importante partie du HEMT : c'est là où se crée le gaz bidimensionnel d'électrons. C'est la couche qui détermine les performances du composant à travers les propriétés de transport des électrons dans le matériau.
- **L'espaceur:** En anglais **spacer** ; cette couche est réalisée dans notre cas par le matériau de plus large gap (le nitrure de gallium-aluminium AlGaIn). Ce film non intentionnellement dopé possède une épaisseur de quelques nanomètres et permet de réduire les interactions électrons-donneurs entre le gaz d'électrons et la couche dopée (donneuse). En effet, la proximité de ces particules entraînerait une interaction électrostatique connue sous le nom de Coulomb Scattering.

Sans cette couche, les électrons du canal seraient fortement attirés par les atomes donneurs de la couche donneuse et seraient donc confinés à l'interface AlGaIn/GaN. Cette zone d'interface présente des défauts cristallins qui limitent la mobilité des électrons.

Plus cette couche est fine plus la concentration des charges dans le canal augmente, présentant ainsi une forte densité de courant, et réduisant aussi la résistance de source. Plus elle est épaisse, plus la densité des porteurs de charge diminue, augmentant ainsi la mobilité des électrons. Il y a donc un compromis par rapport à son épaisseur.

- **La couche donneuse** : C'est dans cette couche que la zone d'espace de charge se forme au niveau de la jonction Schottky de grille ainsi qu'aux abords de l'hétérojonction.

C'est une couche de matériau grand gap AlGaIn dopée et qui fournit des électrons libres à la structure. Son dopage est généralement élevé, en utilisant le silicium qui y joue un rôle important car il contribue à l'augmentation de la concentration des électrons fournis.

- **La couche Cap layer** : C'est une couche superficielle fine, formée par un matériau de faible bande interdite (le nitrure de Gallium), sur laquelle sont réalisés de bons contacts ohmiques de drain et de source. Cette couche est généralement fortement dopée, la finesse de son épaisseur permet de réduire la valeur des résistances de contact et donc celle des résistances d'accès. Elle permet aussi d'empêcher l'oxydation de la couche AlGaIn. Afin d'obtenir une bonne jonction Schottky de grille, un recess complet de cette épaisseur doit être réalisé sous le contact de grille.

On peut ajouter une couche supplémentaire à grand gap AlGaIn non intentionnellement dopée : elle permet de réaliser un contact Schottky de grille, ou redresseur de bonne qualité. Elle est initialement épaisse et creusée par la suite pour améliorer le facteur de forme (rapport de la longueur de grille sur l'épaisseur totale de couche à grand gap) et ainsi mieux contrôler la densité des porteurs du canal par le potentiel de grille. En outre, le « recess » de la grille a pour but de réduire le phénomène de conduction parallèle connu sous le nom de MESFET parasite. En effet ; lorsque la couche dopée sous le contact Schottky n'est pas totalement dépeuplée de porteurs, la courbure de bande de conduction favorise le passage du courant par effet tunnel et il s'y crée un canal parallèle à celui de la couche non dopée à petit gap qui n'est autre que celui d'un transistor MESFET. Dans ce cas ; le courant contrôlé par l'électrode de grille est plus ou moins partiellement associé à des porteurs à faible mobilité, ce qui dégrade les performances du dispositif. Notons que cet effet parasite, qui détériore la transconductance g_m du transistor, apparaît lorsque le creusement de grille est insuffisant vis-à-vis de l'épaisseur et du dopage de la couche dopée à grand gap, ou que la grille n'est pas suffisamment polarisée en inverse.

Il est important de noter que des structures non dopées sont également étudiées présentant une mobilité supérieure et une densité plus faible, dues aux phénomènes de polarisations spontanée et piézoélectrique [4].

II.5 Transistor HEMT AlGaIn/GaN

Un point fort du HEMT AlGaIn/GaN est la facilité de réaliser un gaz bidimensionnel d'électrons à l'interface avec une concentration d'électrons supérieure à 10^{13}cm^{-2} sans doper intentionnellement la couche AlGaIn. Cette forte densité s'obtient grâce aux polarisations spontanée et piézoélectrique. Ces concentrations d'électrons dans le gaz 2D ne peuvent être atteintes avec les semi-conducteurs conventionnels comme le GaAs, même si la couche donneuse est fortement dopée.

Un autre point fort de ce composant : la vitesse de saturation des porteurs libres dans GaN est beaucoup plus importante que dans GaAs, ce qui est parfaitement adapté pour des applications de puissance en hyperfréquence. Les transistors HEMTs AlGaIn/GaN permettent de fournir une puissance importante jusqu'en bande Ka (40GHz) et au delà.

Le point faible de ce type de composant par rapport aux autres filières est son prix. Les hétérostructures à base de GaN sont fabriquées sur des substrats en carbure de silicium SiC (2000\$ la plaquette 2 pouces) ou en saphir Al_2O_3 (70\$ la plaquette 2 pouces) qui sont très coûteux. Ces dernières années, on a réalisé des couches d'AlGaIn/GaN sur des substrats silicium de type Si (111) ou Si (001) qui sont moins chers. La société Nitronex vient d'annoncer un transistor HEMT GaN sur silicium destiné aux applications WiMax dans la bande de fréquence 2,3GHz à 2,7GHz. Ce transistor franchirait la barre psychologique du dollar par watt [29].

II.5.1 Principe de fonctionnement du HEMT AlGaIn/GaN [30][31][32]

Le principe de fonctionnement du HEMT est basé sur la modulation de la conductance entre les deux contacts ohmiques source et drain, par l'action électrostatique d'une électrode de commande dénommée grille (jonction de type Schottky) pouvant contrôler en nombre la densité de porteurs présents dans le gaz bidimensionnel. La variation de cette conductance est proportionnelle au nombre de porteurs libres dans le canal, et donc au courant entre source et drain. C'est l'effet d'amplification transistor qui permet de transformer un faible signal appliqué sur la grille en un signal plus fort récupéré sur le drain. La différence avec le transistor classique est que le HEMT utilise une hétérojonction.

L'hétérojonction repose sur le principe de création et de contrôle d'un gaz d'électrons dans un matériau faiblement dopé où les électrons peuvent se déplacer plus rapidement (mobilité d'électrons élevée). Cette couche appelée gaz d'électrons à deux dimensions (origine du nom TEGFET) est la conséquence des polarisations spontanée et piézoélectrique.

La qualité de la commande dépend en grande partie de la qualité du contact Schottky, à l'interface entre la barrière AlGa_xN et le métal de grille (rappelons que parfois, la couche superficielle est un cap de GaN ; le cas échéant, elle est gravée localement de sorte que le métal se dépose directement sur AlGa_xN). On a donc intérêt à rechercher les alliages métalliques présentant les meilleures caractéristiques, et se prêtant au mieux à leur dépôt sur le semiconducteur. Cet effet de contrôle du gaz bidimensionnel à l'hétérojonction trouve son explication physique dans l'exploitation des diagrammes de bandes d'énergie suivant la direction verticale (figure II.12).

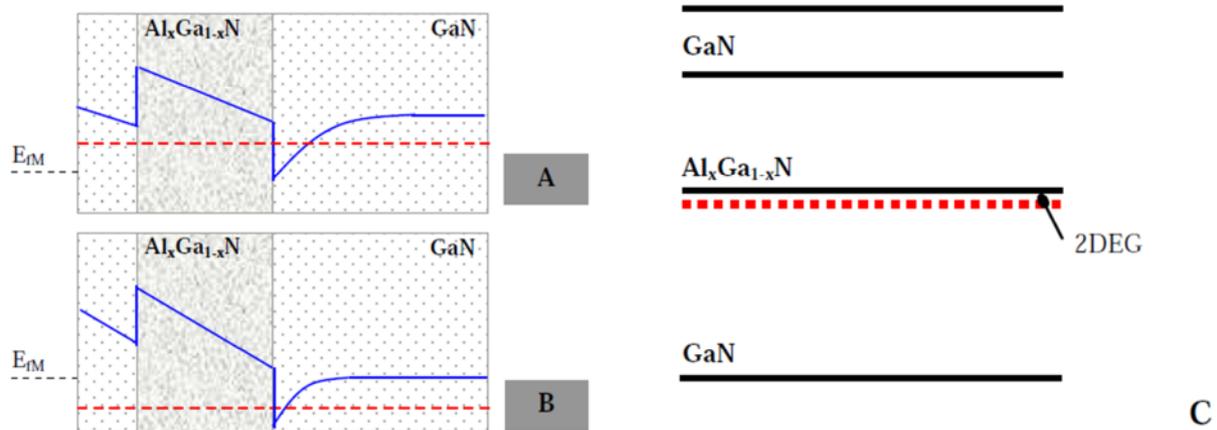


Figure II.12 : Influence de la tension de commande sur le diagramme de bande.

A, $V_{GS} > 0$

B, $V_{GS} < 0$

C, Structure de couche d'un HEMT.

Il apparaît clairement que la zone constitutive du canal de porteurs s'amointrit localement, par l'application d'un potentiel négatif sur le métal (à gauche sur le schéma). On devine donc que pour des tensions de grille inférieures à une valeur seuil, la densité surfacique de charge deviendrait négligeable et ne pourrait guère plus participer à la conduction. Cette valeur particulière du potentiel est appelée « tension de pincement ».

Ainsi, les électrons constituant le courant drain-source dans un semi-conducteur non dopé ont un temps de transit très faible, ce qui permet des performances en fréquence remarquables. La structure favorable aux applications hautes fréquences ainsi que l'utilisation de matériaux grand gap de forte conductivité thermique, tel que GaN par exemple, font de ce composant un candidat très intéressant pour les applications de puissance micro-ondes.

II.5.2 Caractéristiques électriques du HEMT

II.5.2.1 Propriétés fondamentales

L'effet souhaité dans la réalisation de tels dispositifs reste un effet d'amplification, ou effet transistor ; celui-ci procède de l'application simultanée du signal à amplifier (sur la grille) et d'une tension de polarisation continue de part et d'autre de la structure, entre source et drain. Le courant total résultant du déplacement des porteurs situés à l'hétérojonction peut être modulé par le potentiel appliqué sur la grille du composant. Il est évident que, comme tout phénomène physique, celui-ci se voit confronté à un certain nombre d'effets limitatifs. Dans l'optique de comprendre certains d'entre eux, il peut être important de décrire plus en détail la topologie des dispositifs HEMTs employés.

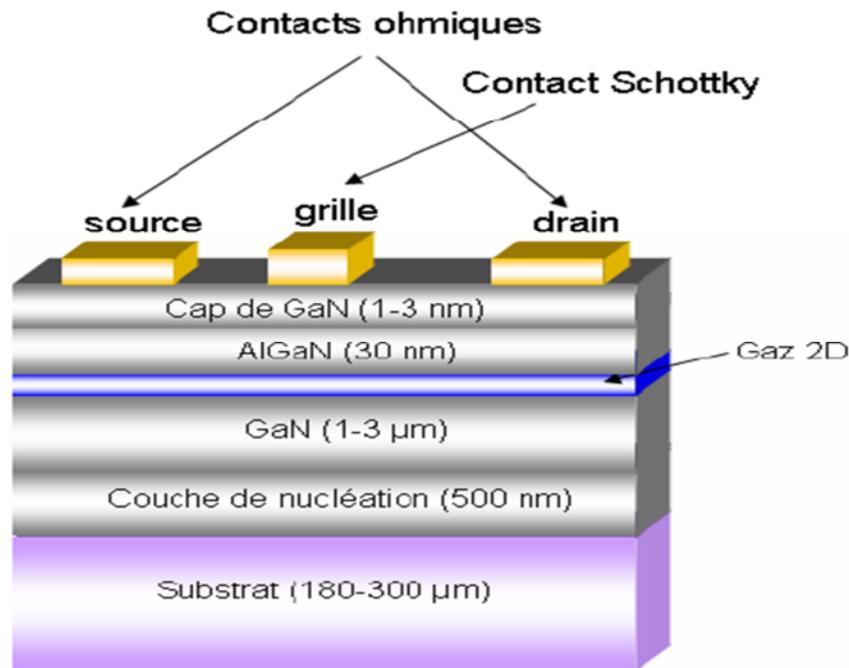


Figure II.13 : Topologie usuelle d'un HEMT AlGaN/GaN.

Sur la figure II.13, il est aisé de constater que l'apposition de la grille métallique ne s'effectue pas de manière symétrique. Elle se trouve plus proche du contact de source que du contact de drain. Pour mieux comprendre cette singularité dans la structure, analysons la carte du champ électrique régnant dans le dispositif, suite à l'application d'une différence de potentiel entre drain et source (figure II.14) [33].

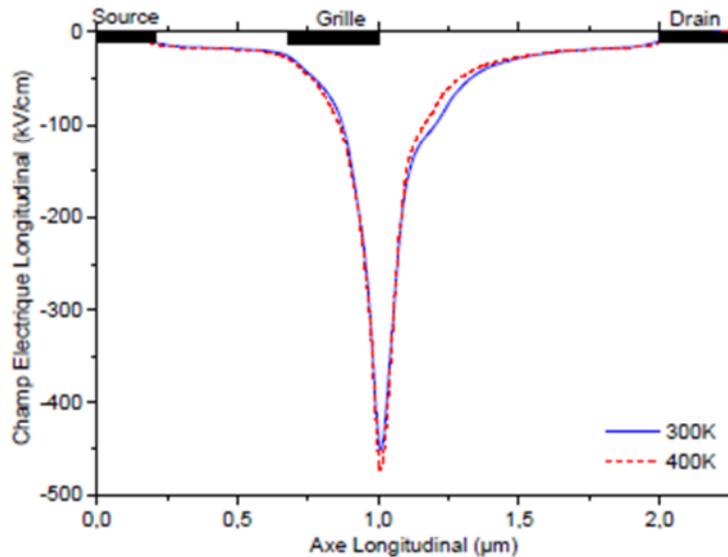


Figure II.14 : Etalement du champ électrique dans le canal pour deux températures différentes.

Nous constatons un étalement ostensible du champ électrique dans l'espace grille - drain, avec un maximum absolu en sortie immédiate de grille. Il est aisé de se figurer que la répartition de l'énergie dans la structure évolue suivant la même allure que le champ électrique. On parvient donc à expliquer le désaxement de l'électrode commande par la nécessaire distribution du champ, laquelle permet d'amoinrir la valeur du champ « pic », et donc d'augmenter significativement la tension de claquage du transistor. A noter que cette distance grille - drain ne peut être augmentée indéfiniment : celle-ci détermine directement les performances en hyperfréquences des composants (notamment la fréquence de coupure).

II.5.2.2 Modèle petit-signal d'un HEMT [4][34]

Afin de concevoir et simuler des circuits à base de ces composants, il faut construire un modèle électrique du transistor. Le modèle le plus souvent utilisé est un modèle électrique en éléments localisés pour son adaptation à la CAO. La Figure II.15 montre l'origine physique de ce modèle équivalent en éléments localisés d'un transistor HEMT. La Figure II.16 représente ce modèle tel qu'il peut être utilisé en simulation dans un logiciel de CAO.

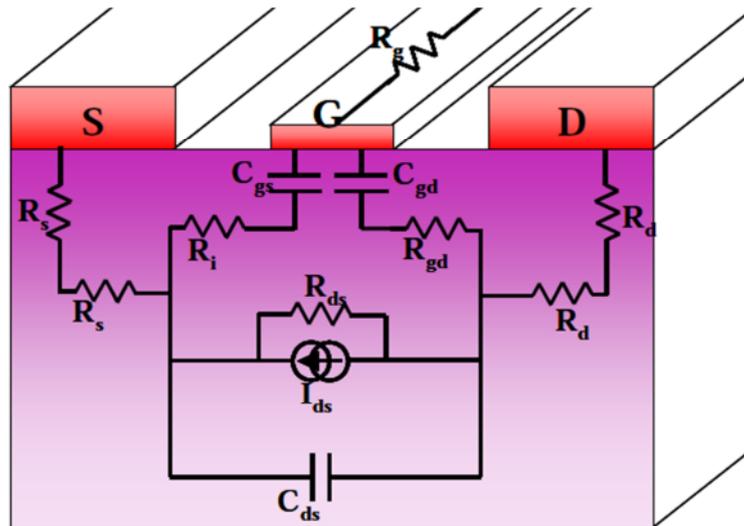


Figure II.15 : Origine physique des éléments du modèle électrique petit signal du HEMT.

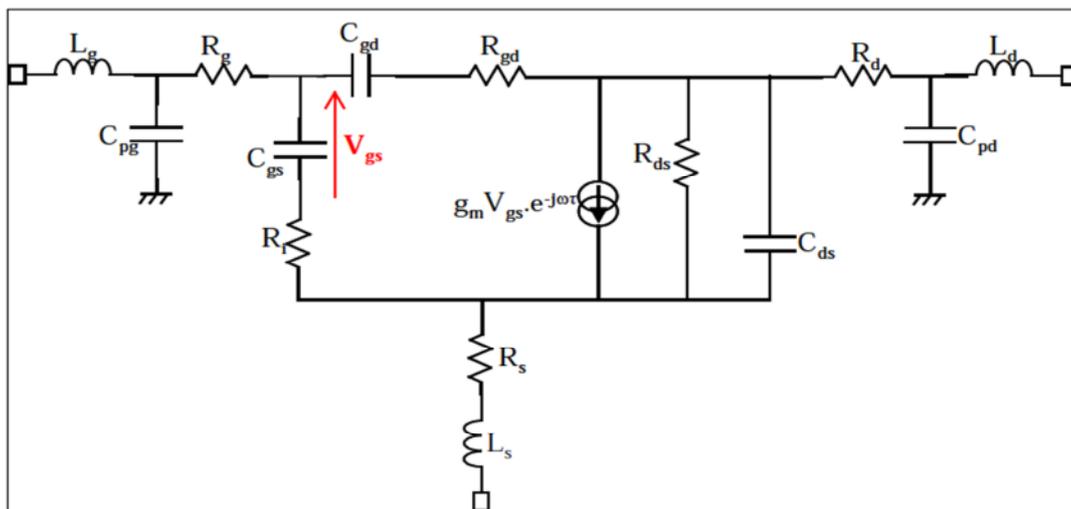


Figure II.16 : Modèle électrique petit signal simplifié du HEMT.

II.5.2.2.1 Eléments intrinsèques

Ce sont les éléments décrivant l'aspect actif intrinsèque du transistor.

➤ La transconductance

Le générateur de courant $I_{ds} = g_m V_{gs} e^{-j\omega\tau}$ représente l'effet fondamental du transistor. Il constitue une source de courant contrôlée en tension, modélisant le phénomène de gain au sein du composant. Le retard τ imposé à la source traduit le temps de transit des électrons dans le canal. La transconductance g_m , caractéristique fondamentale d'un transistor,

représente la variation du courant dans le canal en fonction de la polarisation de grille, à tension drain-source constante. Les HEMTs se distinguent de tous les autres transistors à effets de champ par leur transconductance élevée. Elle est définie comme suit :

$$g_m = \left. \frac{\partial I_{ds}}{\partial V_{gs}} \right|_{V_{ds}=cte} \quad (\text{II.43})$$

➤ **La conductance**

La conductance de sortie $g_d = 1/R_{ds}$, représente la variation du courant dans le canal en fonction de la tension V_{ds} à polarisation de grille constante. Elle est un indicateur de la saturation du courant drain source. Cette valeur traduit la résistance du canal.

$$g_d = \left. \frac{\partial I_{ds}}{\partial V_{ds}} \right|_{V_{gs}=cte} \quad (\text{II.44})$$

➤ **La capacité grille-source**

La capacité grille-source C_{gs} représente la variation de la charge accumulée dans la zone dépeuplée, située sous la grille. C_{gs} détermine cette variation modulée par la tension grille-source pour une tension grille-drain constante :

$$C_{gs} = \left. \frac{\partial Q_g}{\partial V_{gs}} \right|_{V_{gd}=cte} \quad (\text{II.45})$$

Avec Q_g , la charge de la zone dépeuplée sous la grille.

➤ **La capacité grille-drain**

Cette capacité grille-drain représente les effets réactifs entre les deux électrodes. Restant très faible en régime saturé, son influence apparaît surtout en hautes fréquences ou lorsque la grille est chargée par une haute impédance. Elle est définie par :

$$C_{gd} = \left. \frac{\partial Q_g}{\partial V_{gd}} \right|_{V_{gs}=cte} \quad (\text{II.46})$$

Cette capacité détériore les performances dynamiques de deux façons :

- Par effet Miller : Une partie de C_{gd} se retrouve reportée sur l'impédance d'entrée du transistor. Il en résulte une addition avec la capacité C_{gs} et donc une diminution de la bande passante d'un amplificateur.

- Par couplage direct : A hautes fréquences, C_{gd} relie directement la sortie du transistor à son entrée et court-circuite la source de courant commandée.

➤ **La capacité drain-source**

La capacité drain-source C_{ds} décrit le couplage capacitif entre les deux régions du canal sous les contacts ohmiques de drain et de source.

➤ **Les résistances R_i et R_{gd}**

Les résistances R_i et R_{gd} décrivent le caractère distribué du canal. La résistance R_i est la résistance d'entrée, permettant de modéliser l'impédance d'entrée du transistor. La résistance R_{gd} quant à elle permet de modéliser la rétroaction du composant ; elle est parfois négligée.

II.5.2.2.2 Eléments extrinsèques

Ce sont les éléments parasites qui dépendent principalement des accès à la partie intrinsèque, et sont donc liés à la géométrie du transistor.

➤ **Les résistances R_s, R_d et R_g**

Les résistances de source R_s et de drain R_d , traduisent l'effet résistif des contacts ohmiques et des zones du substrat situées entre les électrodes externes de source ou de drain et la zone active du canal.

La résistance de grille R_g représente les pertes dues à l'effet distribué le long de l'électrode de grille du signal de commande.

➤ **Les éléments parasites d'accès**

L_g, L_s, L_d et C_{pg}, C_{ps} et C_{pd} (cf. Figure 11) sont les inductances et les capacités parasites d'accès aux électrodes, respectivement de grille, de source et de drain. Elles ne dépendent que de la largeur du transistor.

II.5.2.3 Caractéristiques électriques et figures de mérite

II.5.2.3.1 Caractéristiques statiques $I_{ds}(V_{ds})$

La figure II.17 représente les caractéristiques statiques classiques d'un HEMT. Il s'agit ici de définir le courant I_{ds} circulant entre le drain et la source lorsque l'on fait croître la tension V_{ds} en maintenant la tension de commande grille-source V_{gs} à une valeur constante.

Sur ces courbes, trois régimes de fonctionnement sont observés :

- Le régime ohmique (a) : le courant I_{ds} croît de façon linéaire en fonction des tensions V_{ds} et V_{gs} . Cette zone est délimitée par les valeurs V_{knee} et I_{dsmax} .
- Le régime de saturation (b) : le courant I_{ds} est quasi-constant vis-à-vis de la tension drain-source mais croît avec la tension grille-source.
- L'avalanche (c) : le courant I_{ds} " s'emballe " jusqu'à destruction du composant.

Nous apportons ici quelques détails sur ces trois zones de fonctionnement du transistor :

(a) Pour de faibles valeurs de la tension drain-source : plus cette tension augmente et plus la mobilité des électrons dans le canal augmente, induisant un accroissement du courant I_{ds} . Plus la vitesse de saturation des électrons est faible et plus la limite supérieure V_{knee} de cette zone sera petite.

(b) Au-delà de la tension $V_{ds} = V_{knee}$ (appelée tension de coude) : les électrons du canal atteignent leur vitesse de saturation. En conséquence, le courant I_{ds} atteint un certain niveau de saturation pour une tension de commande donnée.

(c) Lorsque le champ dans le canal atteint la valeur du champ critique de claquage, un phénomène d'avalanche se produit. En effet ; lorsque le champ atteint cette valeur correspondant à une tension drain-source V_{bd} (appelée tension de claquage ou breakdown voltage en anglais), de plus en plus d'électrons et de trous sont libérés jusqu'à une augmentation brutale et irréversible du courant I_{ds} ; le composant est finalement détruit. Cette caractéristique est particulièrement importante en grand signal, car elle indique la limite des tensions de commande du transistor.

Pour modéliser le courant drain-source d'un HEMT, il faut prendre en compte la contribution de trois éléments :

- Le courant principal résultant du déplacement des électrons du gaz bidimensionnel dans le puits quantique à l'interface de l'hétérojonction.
- Le courant de l'effet MESFET parasite sous la grille, dû à une déplétion incomplète.

- Les éléments parasites résistifs des chemins d'alimentation de drain, grille et source du transistor qui induisent des chutes des tensions V_{ds} et V_{gs} , et donc une diminution du courant I_{ds} et de la transconductance extrinsèque.

On observe que le courant I_{ds} croît quand la tension de commande V_{gs} augmente.

Lorsque l'on applique une tension de grille de plus en plus négative, le niveau de Fermi baisse par rapport aux énergies mises en jeu dans le canal, entraînant une diminution de la densité d'électrons dans le canal et donc une diminution du courant I_{ds} .

La concentration des porteurs dans le canal dépend fortement de l'épaisseur et du dopage de la zone de grand gap.

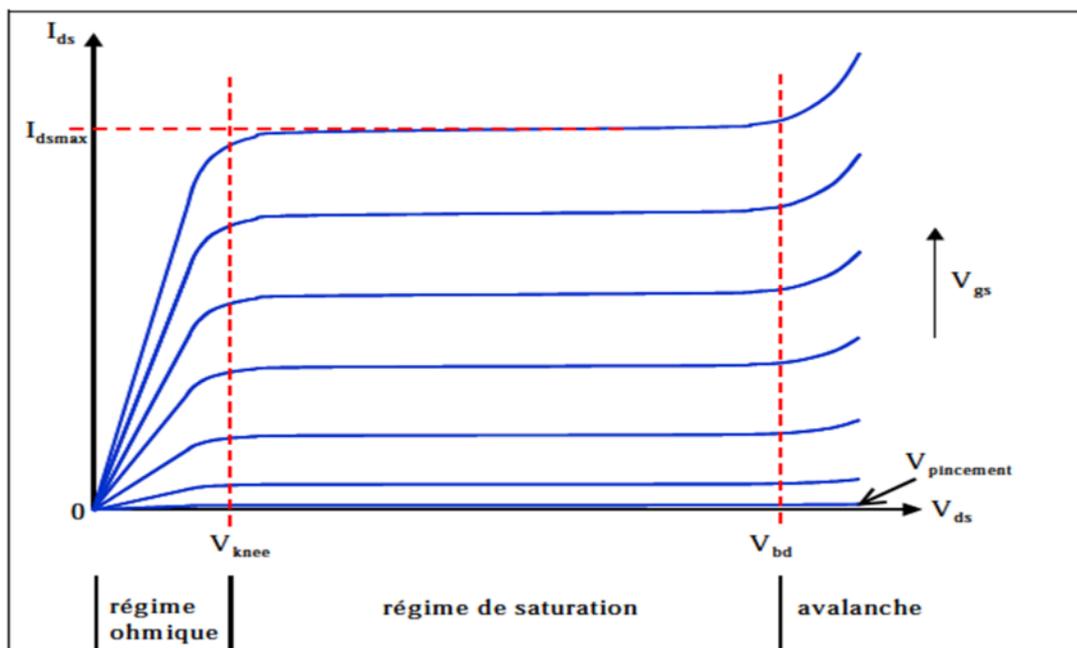


Figure II.17 : caractéristiques I(V) classiques d'un HEMT.

II.5.2.3.2 Figures de mérite pour un fonctionnement en hautes-fréquences.

On détermine principalement trois figures de mérite pour un fonctionnement du composant en hautes fréquences :

➤ La fréquence de transition

Les HEMTs se caractérisent en dynamique par deux paramètres importants : la fréquence de transition et la fréquence maximale d'oscillation. La fréquence de transition

f_t est définie pour le module du gain en courant égal à 1. Elle est définie pour le transistor intrinsèque (transistor sans ses éléments d'accès), soit :

$$f_t = \frac{g_m}{2\pi(C_{gs} + C_{gd})} \quad (\text{II.47})$$

➤ La fréquence maximale d'oscillation

La fréquence maximale d'oscillation f_{max} caractérise en général la qualité de la technologie. Elle correspond à la fréquence maximale d'utilisation du transistor, pour laquelle le gain en puissance est égal à 1. Cette fréquence est donnée par la formule suivante :

$$f_{max} = \frac{f_t}{2\sqrt{(R_i + R_s)G_d + 2\pi f_t R_i C_{gd}}} \quad (\text{II.48})$$

➤ Le facteur de bruit

Le facteur de bruit est un autre critère à prendre en compte. On le définit comme :

$$NF = 2\pi \cdot f \cdot C_{gs} \left(\frac{R_g + R_i}{g_m} \right)^{1/2} \quad (\text{II.49})$$

II.5.2.3.3 Figures de mérite pour un fonctionnement en puissance.

On détermine principalement trois critères descriptifs d'un transistor pour un fonctionnement en puissance.

➤ La densité de puissance de sortie

La densité de puissance de sortie : elle représente la puissance de sortie par unité de longueur de grille du transistor. Elle s'exprime en général en W/mm et permet ainsi une comparaison aisée entre transistors de développements différents.

La puissance de sortie maximale théorique en classe A est estimée en fonction des paramètres relevés sur les caractéristiques $I_{ds}(V_{ds})$:

$$P_{Smax} = \frac{1}{8} I_{dsmax} (V_{bd} - V_{knee}) \quad (\text{II.50})$$

➤ Le gain en puissance

Le gain en puissance est le gain opéré par le composant lorsqu'il est attaqué par une puissance P_e . Il dépend de la fréquence, de la classe de fonctionnement et du niveau de la puissance d'entrée :

$$G_{P_{dB}} = P_{S_{dBm}} - P_{e_{dBm}} \quad (\text{II.51})$$

➤ Le rendement en puissance

Le rendement en puissance ajoutée (appelé également P.A.E. : Power Added Efficiency) exprime le pourcentage de puissance de polarisation DC apportée au composant converti en puissance RF. Ce critère s'exprime comme suit :

$$\eta = \frac{P_s - P_e}{P_{DC}} \quad (\text{II.52})$$

Ce rendement présente un maximum théorique de 50% pour un fonctionnement en classe A et 78,5% pour un fonctionnement en classe B.

II.5.3 Fonction de transfert

La caractéristique de transfert consiste à mesurer le courant Drain-Source I_{ds} en fonction de la tension Grille-Source V_{gs} pour une tension Drain-Source V_{ds} donnée. Il est possible de déterminer ainsi la tension de seuil V_{TH} définie comme étant la tension de grille à appliquer afin de vider le puits de potentiel de ses porteurs. On définit aussi la transconductance comme étant la pente de la caractéristique définie par l'équation

$$g_m = \frac{\Delta I_{ds}}{\Delta V_{gs}} \quad (\text{II.53})$$

Toutes ces grandeurs évoquées sont illustrées par la figure II.18.

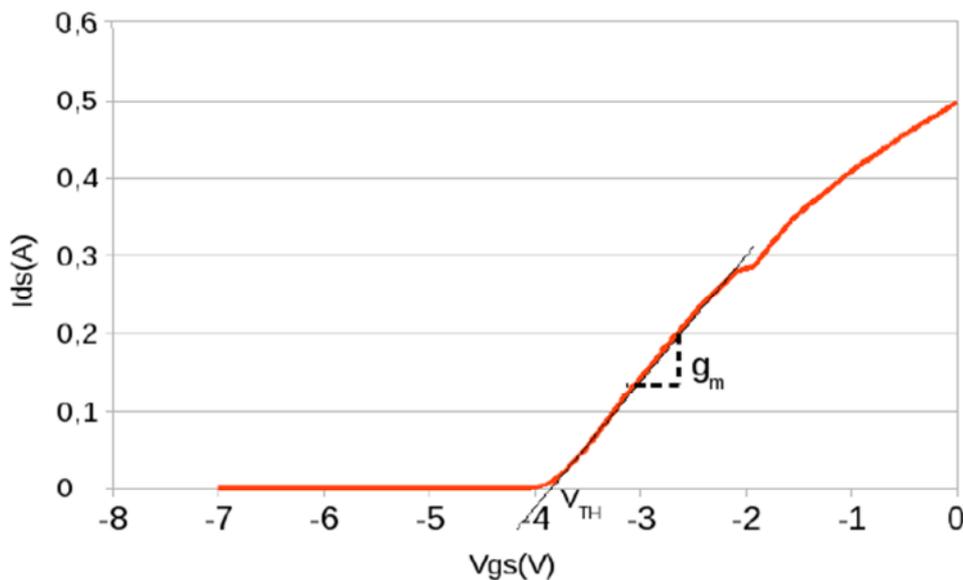


Figure II.18 : Caractéristique de transfert $I_{ds}(V_{gs})$ mesurée d'un HEMT AEC1388.

La tension de seuil V_{TH} représente le potentiel nécessaire à appliquer sur la grille pour vider le puits de potentiel, par une élévation de la bande de conduction par rapport au niveau de Fermi. En effet la densité de porteurs dans le canal, N_{2DEG} , est dépendante du niveau de Fermi qui est défini par la relation II.54 [3]:

$$E_F = kT \log \left(\frac{N_{2DEG}}{2 \frac{m_e kT}{\pi h^2}} \right) \quad (II.54)$$

Pour cela ; le potentiel appliqué sur la grille doit compenser le potentiel du canal lié à la discontinuité de la bande de conduction à l'hétérojonction, ΔE_c , et à la densité d'électrons dans le canal, N_{2DEG} . La charge Q_{inter} est liée aux polarisations piézoélectriques et spontanées des couches AlGaIn et GaN. N_{2DEG} étant la densité d'électrons dans le canal provenant des états donneurs à la surface, $N_{surf} = N_{2DEG}$. La tension de seuil est donc définie par l'équation II.55 [35], en négligeant l'influence du dopage des couches GaN et AlGaIn puisque les transistors étudiés sont non intentionnellement dopés :

$$V_{th} = \frac{\phi_B}{q} - \frac{\Delta E_c}{q} - \frac{d_{AlGaIn} Q_{inter}}{\epsilon_{AlGaIn}} - \frac{q d_{AlGaIn} N_{surf}}{\epsilon_{AlGaIn}} \quad (II.55)$$

Où d_{AlGaIn} est l'épaisseur de la couche AlGaIn, ϵ est sa permittivité diélectrique.

$$Q_{inter} = P_{sp+pz}(AlGaIn) + P_{sp}(GaN) \quad (II.56)$$

L'intérêt d'un HEMT est l'obtention d'une forte densité d'électrons, N_{2DEG} , liée à leur confinement dans le puits de potentiel. N_{2DEG} est donc dépendant de la polarisation de la grille, et de N_{surf} . Cette relation entre N_{2DEG} et les polarisations, est donnée par l'équation (II.57):

$$N_{2DEG} = \frac{\epsilon_{AlGaIn}}{q d_{AlGaIn}} (V_{GS} - V_{th}) \quad (II.57)$$

II.5.4 Comportement thermique

Le comportement des composants de puissance relativement aux stress thermiques auxquels ils sont confrontés dépend, en grande partie, des propriétés des substrats sur lesquels s'est effectuée la croissance. Il est donc bon de rappeler ici les conductivités thermiques du Carbure de Silicium, du Saphir et du Silicium. A ces données, ajoutons des cartographies du champ scalaire « température », et sa distribution dans la structure. Notons que ces études découlent de simulations de structures TLM (Transmission Line Measurement) pour lesquelles, par définition, il n'existe aucune électrode de grille :

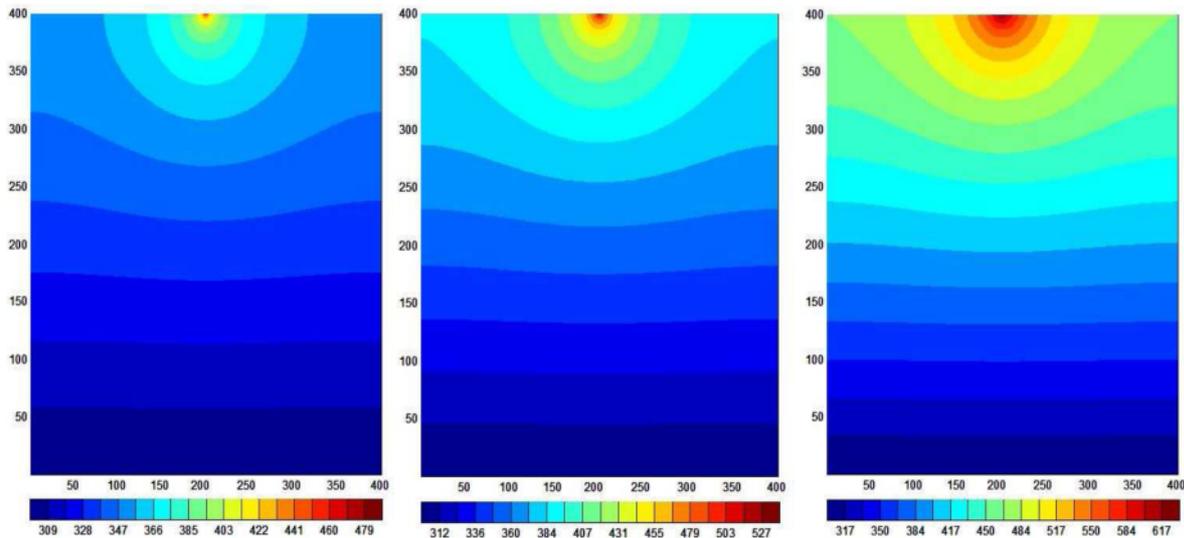


Figure II.19 : Distribution spatiale de la température en régime de fonctionnement, pour 3 substrats différents (A : SiC, B : Si, C : Saphir).

On remarque que l'évacuation des calories s'effectue de manière nettement plus efficace dans le cas du SiC que pour le Saphir [33]. Ces simulations, implémentées sous l'environnement COMSOL et obtenues par la méthode des éléments finis, permettent d'insister sur l'excellence du Carbure de Silicium en tant que candidat aux applications de puissance pour lesquelles le point de repos et les larges excursions de tension amènent irrémédiablement à un échauffement du composant.

La plus ou moins bonne distribution du champ de température dans la structure se répercute directement sur les propriétés électriques du gaz bidimensionnel. En effet, les différentes corrélations existant entre la mobilité, la densité surfacique ou la vitesse de saturation amènent à considérer, à nouveau, tout l'intérêt de choisir le SiC comme substrat privilégié. Le tableau II.1 compare les différentes températures électroniques (représentatives en grande partie de l'énergie cinétique des porteurs) et de réseau obtenues par simulation, pour trois substrats différents, et moyennées entre les contacts ohmiques.

Substrat	SiC	Si	Al ₂ O ₃
Température de réseau(K)	460	530	630
Température électronique (K)	930	890	860

Tableau II.1 : Températures électroniques et de réseau, moyennes pour une TLM sur 3 substrats différents.

L'ensemble de ces effets possède un impact fort sur les caractéristiques $I(V)$ d'une structure TLM ou d'un composant sous test. En régime continu, l'accroissement de la puissance dissipée (du produit $I.V$) produit une diminution notable de la mobilité des porteurs, et donc une décroissance notable du courant total résultant. Un réseau de caractéristiques classique est présenté par la figure II.20. L'effet d'auto-échauffement d'un transistor y est discernable.

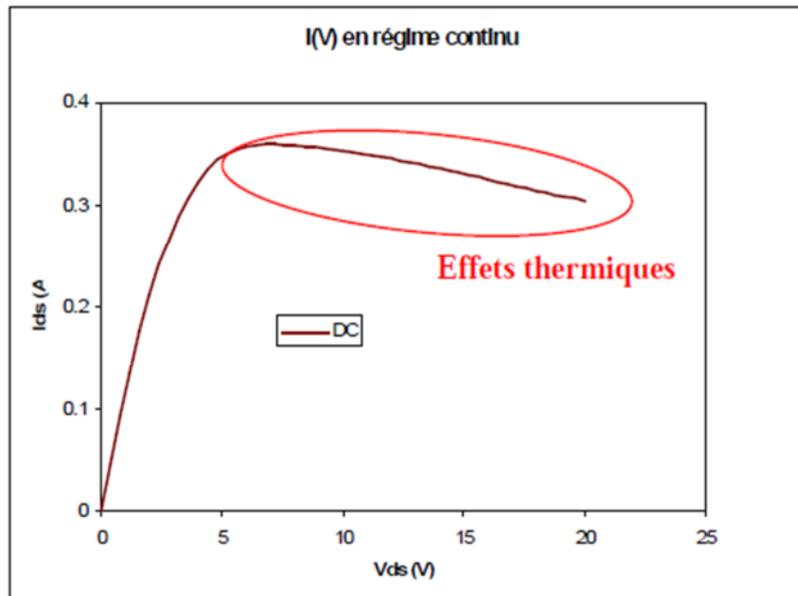


Figure II.20 : Mise en évidence des effets thermiques sur une caractéristique $I(V)$ en régime continu.

II.5.5 Limitations du HEMT AlGaN/GaN

Un transistor HEMT idéalement linéaire serait un transistor pour lequel le courant de drain serait proportionnellement commandé par la tension de grille et de drain pour n'importe quelle fréquence du signal. Bien entendu, cette perspective reste utopique car un certain nombre d'effets non linéaires viennent perturber cette fonction. Précédemment, nous avons vu que le courant était limité par la vitesse de saturation que peuvent atteindre les électrons et la concentration n_s . La tension est limitée par les phénomènes de claquage.

On retrouve, synthétisés ci-dessous, les principaux effets limitatifs du fonctionnement du transistor HEMT AlGaN/GaN :

- L'auto-échauffement.
- Les pièges en surface et en volume.

II.5.5.1 Effets de pièges

Les niveaux profonds usuellement appelés pièges, sont une cause de détérioration des performances d'un transistor. L'origine physique de ces pièges reste un objet d'investigation, tant elle s'avère disparate. Aussi, certaines techniques de caractérisation permettent la mise en évidence de niveaux d'énergie singuliers, qu'il est possible d'identifier. On aura, de cette manière découvert que les effets de pièges peuvent résulter de défauts cristallins, tels que les dislocations, les lacunes d'azote, la présence d'impuretés ou des pertes de périodicité. Les défauts structuraux de surface semblent avoir une implication non négligeable dans ce phénomène parasite [36]. En effet, ces derniers ont pour propriété de capturer ou d'émettre des charges. N'ayant pas des temps de réponse aussi rapides que les fréquences imposées, leurs processus de charge-décharge ne sont pas en phase avec la fréquence de fonctionnement. Ainsi en régime de polarisation instantané, le transistor peut délivrer un courant inférieur à celui obtenu en régime continu. Ces processus de charge-décharge nuisent aux performances du transistor en modifiant le nombre de porteurs impliqués dans le bon fonctionnement du composant. Les dégradations observées sont alors des chutes de courant et une augmentation de V_{knee} (tension de coude), tension à laquelle le transistor parvient à saturation.

Les pièges peuvent intervenir à différents endroits dans la profondeur de la couche épitaxiée. Des pièges actifs proches du substrat peuvent créer une grille « virtuelle » en face arrière (back-gate) et faire chuter le courant de drain. Des pièges peuvent aussi être associés aux dislocations mais cette origine reste controversée. De nombreuses publications tendent à démontrer que la principale source de pièges pénalisant les composants serait la surface libre de la couche AlGaN : des liaisons pendantes ou des défauts de surface pourraient être à l'origine de niveaux situés dans la bande interdite du AlGaN. Le concept de grille « virtuelle » a été proposé pour décrire l'accumulation d'électrons ou l'émission de trous, causée par des pièges de surface à proximité de la grille métallique. Dans ces cas, la polarisation de surface est négative et joue le même rôle que la grille en créant une extension de la zone de déplétion diminuant encore plus le nombre de porteurs du gaz 2D d'électrons[37].

➤ Les pièges responsables du « gate-lag »

Les pièges responsables du « gate-lag » sont généralement situés en dessous de la grille. L'interface entre le semiconducteur et le contact métallique doit être de très bonne qualité. Cette zone est très sensible aux effets de surface qui sont liés à la fois à la nature du cristal et à la technologie utilisée pour le dépôt métallique du contact Schottky. Ces effets de pièges de surface [38] sont causés par les effets de surface, eux même créés par des défauts et

dislocations dans le cristal, proches de la surface. Des électrons sont alors piégés à la surface de la couche AlGaIn ; ce phénomène affecte les caractéristiques du composant et dégrade les performances en puissance.

➤ **Les pièges responsables du « drain-lag »**

Ce phénomène est lié à la présence de pièges dans le substrat semi-isolant et en surface dans l'espace grille-drain lors d'une variation rapide du champ électrique entre le drain et la source, les électrons provenant du canal peuvent alors être piégés. Ces électrons peuvent être ensuite réémis avec des constantes de temps plus longues. Au niveau du substrat, l'équilibrage des charges implique alors l'apparition d'une zone chargée positivement à l'interface buffer-substrat dans le buffer GaN. Le gaz 2D est alors momentanément pincé par une deuxième grille au niveau de cette interface. Ce phénomène est appelé « self-backgating ». Ce phénomène dépend de la qualité résistive du substrat et de la qualité cristallographique du buffer.

Afin de minimiser l'impact de ces pièges, des améliorations considérables ont été apportées aussi bien au niveau des techniques d'élaboration du matériau, permettant de réduire ainsi l'impact des pièges en volume, qu'au niveau des procédés technologiques permettant de réduire l'effet des pièges de surface : traitements de surface (nettoyage par voie chimique ou par plasma), recuits, passivations de la surface par différents diélectriques, ou implémentations de structures Field Plate (plaque de champ).

II.5.5.2 Effet de la température

Tout composant semi-conducteur est sujet à des problèmes d'auto-échauffement lorsqu'il est soumis à des contraintes électriques. Trois principaux phénomènes sont à l'origine de la création de chaleur. Il y a tout d'abord l'effet Joule des électrons et des trous ; il existe ensuite les phénomènes de radiation; enfin, le processus de génération-recombinaison des paires électrons/trous libère une quantité de chaleur proportionnelle au gap d'énergie entre les niveaux donneurs et accepteurs. Lorsque la puissance dissipée augmente, la température augmente faisant chuter la mobilité. En effet, l'expression pour la mobilité μ_n des électrons à bas champ en fonction de la température de réseau est donnée par :

$$\mu_n(T) = A_1 - A_2 \frac{T}{300} - A_3 \exp\left(A_4 \frac{T}{300}\right) \quad (\text{II.58})$$

Où A_1 , A_2 , A_3 et A_4 sont des constantes, T est la température du réseau.

GaN	A ₁	A ₂	A ₃	A ₄
N _D =10 ¹⁵ /cm ³	634	204	80.9×10 ³	4
N _D =10 ¹⁷ /cm ³	120	0	4.9×10 ³	1.88

Tableau II.2 : Coefficient thermique en fonction du dopage.

Cette équation montre que la mobilité des électrons diminue avec la température. Les paramètres de l'équation sont donnés pour deux dopages différents; cela se traduit par une chute de la puissance de sortie du dispositif ainsi que par une baisse des fréquences de transition et maximale d'oscillation.

En parallèle, l'effet de la température conduit à une fluctuation du courant; cette dernière est souvent liée à des fuites par le contact de grille et par le substrat. Les courants de fuites de grille dépendent de la hauteur de la barrière Schottky à l'interface métal/semiconducteur. Ils augmentent avec la température via des mécanismes d'émission et de diffusion thermoïoniques, ainsi que de l'effet tunnel. Enfin, l'augmentation de la conductivité du substrat avec la température est aussi responsable de ces fuites. Ce phénomène est très marqué pour les substrats qui ne sont pas semi-isolants à l'état naturel. Le cas du silicium hautement résistif élaboré à l'aide de la méthode FZ (Floating Zone) est un bon exemple. Il est de type p et est rendu résistif avec du Bore [39]. Sa résistivité est de l'ordre de 5 à 20 kΩ.cm.

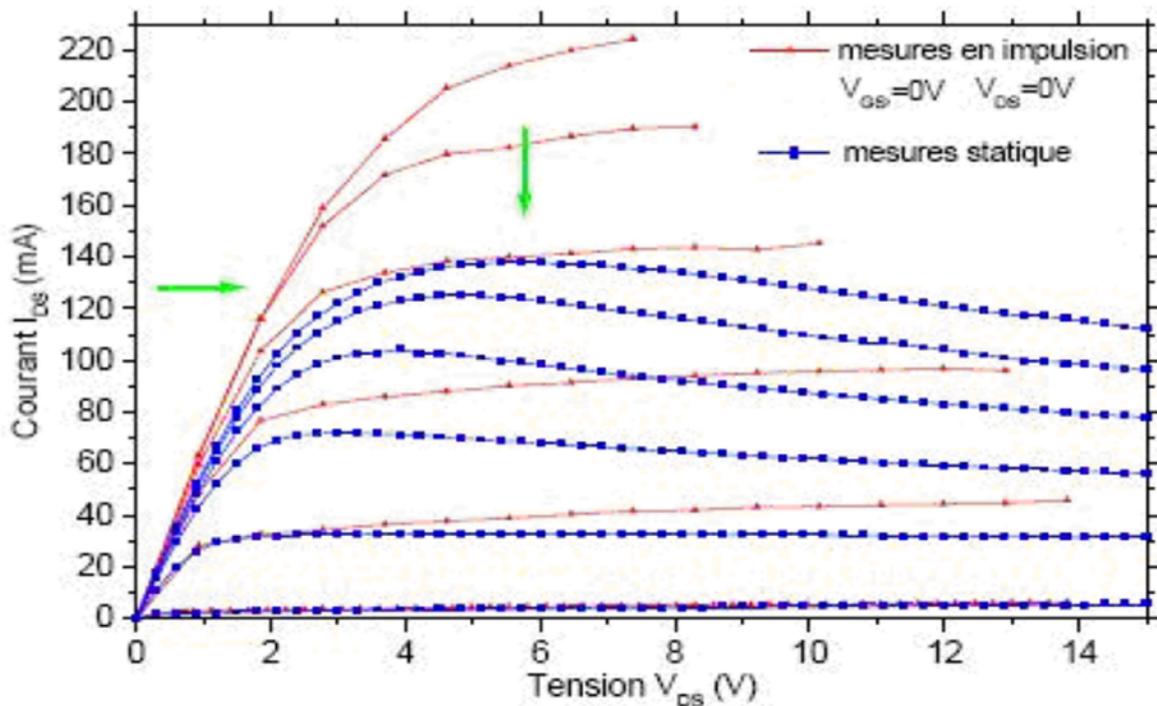


Figure II.21 : Réseau $I_{DS}(V_{DS})$ obtenus par des mesures en statique et en impulsions.

Pour illustrer ce phénomène, des mesures en régime statique et en impulsion des caractéristiques d'un transistor HEMT ont été réalisées (figure II.21).

En statique (courbes bleues), on observe une décroissance du courant drain lorsque V_{DS} augmente, entraînant une chute de la transconductance de sortie par rapport à la mesure en impulsions (avec $V_{DS0} = 0$, $I_{DS0} = 0$).

Dans le cas de la mesure pulsée (couleur rouge), la température est seulement fixée par la température du support chauffant (on considère qu'il n'y a quasiment pas d'auto-échauffement dû aux pulses), la mobilité des porteurs n'est plus fonction que de la tension V_{DS} appliquée. Par conséquent, on retrouve la forme classique du courant de sortie des transistors à effet de champ.

Il est donc important de dissiper la chaleur pour diminuer la température en fonctionnement. L'utilisation de substrats bons conducteurs thermiques tels que SiC est fortement souhaitable pour atteindre les meilleures performances et fiabilités possibles.

Pour pouvoir réaliser une conception à partir de ces composants, il est donc nécessaire d'avoir un modèle électrique traduisant les effets thermiques et les effets de pièges du composant. Cette modélisation électrique est abordée dans le chapitre III.

II.5.6 Influence positive de la passivation

Plusieurs solutions sont actuellement à l'étude pour diminuer les effets de ces dégradations, en particulier la passivation utilisée pour réduire les effets de chutes de courant attribuées aux charges de surface. Le but visé est en effet d'éviter la formation de la grille virtuelle précédemment décrite. Plusieurs matériaux ont été étudiés pour jouer le rôle de passivant de surface. Ainsi, de nombreux diélectriques tels que MgO, Sc₂O₃[40], AlN[41], Al₂O₃ et HfO₂ ont montré leur efficacité dans ce domaine. SiO₂ et Si₃N₄ demeurent cependant les matériaux les plus fréquemment utilisés sur les HEMTs à base de GaN[42]. Un autre effet serait, plutôt que de diminuer les états de surface, d'abaisser l'énergie d'ionisation de ces derniers. Ceci permettrait d'expliquer la hausse de densité de porteurs du gaz bidimensionnel d'électrons lors de l'ajout d'une passivation [43].

Plusieurs mécanismes expliquant l'effet de la passivation sur la diminution des chutes de courant sont décrits dans la littérature. L'un d'entre eux serait d'empêcher les électrons provenant de la grille d'atteindre les pièges de surface en les rendant plus profonds. Un autre serait dû au silicium provenant de SiN qui s'incorporerait en tant que dopant peu profond de type n et qui remplacerait les donneurs de surface [44]. Ces mécanismes ne sont pas les seuls expliquant l'effet de la passivation. Ainsi, il a été montré que les contraintes apportées par la couche de passivation peuvent aussi jouer un rôle selon qu'elles sont en tension ou en compression [45]. Par conséquent, l'épaisseur et les conditions de dépôt telles que la température ou la fréquence dans le cas de PECVD sont des facteurs essentiels à l'obtention d'une bonne passivation. De même, la qualité et la propreté des surfaces sont aussi des éléments sensibles à surveiller très particulièrement lors des procédés technologiques, en particulier lors de l'utilisation des traitements aussi bien chimiques que physiques, qui peuvent être envisagés pour contrôler tant que possible les propriétés des surfaces. Les phénomènes physiques engagés ne sont pas encore clairement compris à ce jour. Néanmoins ; l'effet positif de la passivation pour diminuer les chutes de courant, prouve une implication de la surface dans les phénomènes de dégradation de composants dans le fonctionnement en fréquence.

Cependant, il a été constaté que l'ajout de passivation contribuait généralement à une hausse des courants de fuite de grille. Cette hausse a été attribuée à l'augmentation des courants à la surface de la couche AlGaIn [46]. De même, la passivation a aussi pour effet de réduire le champ de claquage des structures. Une amélioration technologique a été mise au point pour diminuer l'impact de la passivation sur la baisse du champ de claquage. Les plaques de champ (figure II.22) (« field plate ») sont donc utilisées conjointement à la

passivation pour étaler le champ électrique en sortie de grille, côté drain [47]. C'est à cet endroit que les stigmates de claquage sont généralement observés. Il consiste à ajouter une électrode métallique plus longue au dessus de la grille.

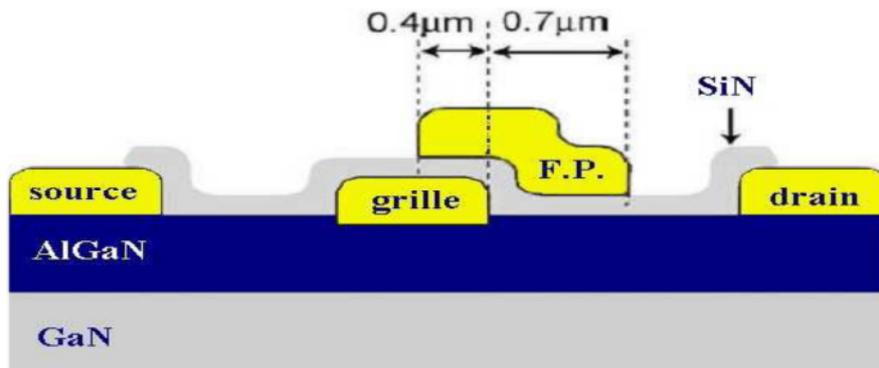


Figure II.22 : Schéma d'un transistor avec technologie de grille de type « Field-plate ».

L'ajout du « field-plate » augmente le champ de claquage du dispositif [48][49] et diminue le piégeage de surface dû aux forts champs électriques. En contrepartie, il a tendance à diminuer le gain et les fréquences de coupure car il a pour effet d'augmenter la valeur de la capacité grille-drain. Ce système est cependant utilisé dans les meilleurs composants actuels [50].

II.6 Contacts

Les contacts utilisés pour la réalisation des connexions, nécessitent généralement une métallisation préalable des zones concernées. En effet, la réalisation d'une jonction M-S forme une barrière Schottky qui présente un effet redresseur, mais le niveau de potentiel de cette barrière peut être rendu pratiquement négligeable, par un choix correct du métal utilisé et un dopage suffisamment élevé du semi-conducteur. On obtient alors un contact à faible résistance et de caractéristique symétrique que l'on appelle contact ohmique. La qualité du contact ohmique est contrôlée par plusieurs paramètres, le plus important est la résistance spécifique qui permet l'accès possible au dispositif sans perturbation de l'information originale reçue.

II.6.1 Contact Schottky

Le transistor étudié étant de type FET (transistor à effet de champ), un contact de grille est nécessaire pour contrôler la charge du canal et donc le courant. Ce contact est de type Schottky dans les HEMTs. Il est constitué d'un métal déposé sur la couche AlGaN, dont le travail de sortie est supérieur à celui du semi-conducteur. Cette différence des travaux de sortie induit une différence de potentiel électrostatique et la formation d'une zone de déplétion, la ZCE.

Dans le cas des composants étudiés, ce contact est réalisé par le dépôt d'un alliage Mo/Au sur une couche AlGaN épitaxiée sur une couche GaN. A savoir l'or admet un travail de sortie de l'ordre de 4,8eV. L'intérêt de ce contact Schottky est de permettre le contrôle de la charge du canal en contrôlant la position du niveau de Fermi dans le puits de potentiel, par rapport à celui de la bande de conduction. Il est donc nécessaire que lorsqu'aucun potentiel n'est appliqué sur la grille, la couche AlGaN soit complètement déplétée afin que l'application d'un potentiel entraîne une variation du diagramme de bandes d'énergie dans le canal.

II.6.2 Contacts ohmique

Historiquement l'or et l'aluminium ont été les premiers métaux étudiés dans la réalisation de contacts sur du GaN dopé N. Plus tard, des contacts en multiples couches ont été réalisés dans le but d'arrêter la diffusion, et le recuit qui augmentait la résistance du contact. La réalisation des contacts ohmiques est reliée principalement au faible travail de sortie du métal. Des études ont été entreprises pour la réalisation de contact sur GaN, utilisant plusieurs métaux : l'aluminium dont le travail de sortie $\phi_M = 4,28\text{eV}$, le titane ($\phi_M = 4,28\text{eV}$) et la multicouche Ti/Al ; l'inconvénient de ces contacts est l'oxydation rapide. Dans plusieurs travaux, l'or est en général ajouté pour protéger l'aluminium de l'oxydation, mais l'or pénètre dans la couche d'aluminium après le recuit.

Actuellement du fait de la relation chimique complexe entre l'aluminium et GaN, les propriétés des contacts d'aluminium sur GaN (N) ne sont pas complètement comprises et maîtrisées. Même si certains résultats montrent que la diffusion, après recuit, de l'aluminium à travers le titane, peut être responsable de la bonne ohmicité des contacts, il est généralement admis que le titane réagit avec GaN pour former après recuit, une couche de TiN (métal plus conducteur que le titane), qui permet la diminution de la résistance du contact. Cette réaction créerait une fine région riche en sites vacants d'azote (donneurs) formant une région superficielle dopé N. De plus, le titane en piégeant l'oxyde surfacique, favoriserait l'adhérence du contact métallique.

Plusieurs facteurs interviennent pour l'obtention d'une bonne qualité de contact ; bien sûr la qualité de la couche épitaxie (désaccord de maille), ainsi que la préparation de surface avant l'évaporation. Une large bibliographie révèle l'étude du traitement de surface avant le dépôt des contacts et du recuit des contacts, une étude très large sur l'épaisseur et le recuit a été traitée par Wang et al., ainsi que plusieurs études ont été entreprises pour la réalisation des contacts ohmiques en utilisant l'aluminium sur GaN, Wang et al. n'ont pas utilisé de recuit pour le contact ohmique d'aluminium. Wang et al. ont utilisé des contacts ohmiques d'Indium [51].

II.7 Etat de l'art

La technologie de filière nitrure de gallium, est en constant développement. Beaucoup de résultats sont publiés chaque année, des transistors de plus en plus performants sont réalisés. Le Tableau II.3 recense l'état de l'art des transistors HEMT sur nitrure de gallium publiés à ce jour, à notre connaissance.

Certains composants présentent l'insertion d'une métallisation appelée "field-plate". Il s'agit d'une extension de la métallisation de grille, située au-dessus de la couche de passivation du composant. Ce procédé permet d'obtenir une tension d'avalanche V_{bd} plus élevée et par conséquent des puissances supérieures.

Substrat	Fréquence (GHz)	Densité de puissance (W/mm)	Rendement (%)	Commentaires	Laboratoires	Date de publication	Références
s.i.SiC	4 8	32.2 30.6	54.8 49.6	Field plated	CREE	March2004	[52]
s.i.SiC	4 10	6.6 7.3	57 36		UCSB	May2004	[53]
s.i.SiC	10	16.5	47	Field plated	Cornell	Febreury 2004	[54]
Saphire	4	12	58	Field plated	UCSB	January 2004	[55]
Si	2	6.6	49		Daimle Chrysler CRHEA	April 2003	[56]
Si	10	1.9	18		TIGER	July 2004	[57]
Si	10	7	38	Field plated	TriQuint Semi Conductor	October 2004	[58]
s.i.GaN	10	9.4	40		BAE systems/ CREE	September 2004	[59]
/	2.8	2.8	58	/	/	2005	[60]
/	1.5	3.5	49	/	/	2006	[61]
/	2.14	3.9	/	/	/	2006	[62]
/	3.3-3.6	9.5	66	/	/	2007	[63]
/	2.9-3.5	9	42-49	/	/	2008	[63]
/	3.3	9.9	56	/	/	2008	[64]
/	/	3.1	50	/	/	2008	[65]
/	2.14	7.5	59	/	/	2008	[66]

Tableau II.3 : Etat de l'art des transistors HEMT sur nitrure de gallium.

II.8 Conclusion

L'hétérojonction est la base des composants HEMT utilisés dans le domaine hyperfréquence, haut puissance et haut température....

Nous menons une étude théorique détaillée sur le transistor à hétérostructure HEMT AlGaN/GaN tels que la structure, son principe de fonctionnement, les caractéristiques électrique, les défauts et les limites.

Références de chapitre II

- [1] F. Frédéric «Spectroscopie infrarouge des fils et boîtes quantiques d'AnAs/InAlAs/Inp (001)»
Thèse de doctorat, Université de Paris-Sud Octobre 2002.
- [2] W. Fuhs ; K. Niemann ; and J. Stuke. «Heterojunctions of amorphous silicon and silicon single crystals». Bull. Am. Phys. Soc., 19 :345–349, (1974).
- [3] H. Mathieu « Physique des semiconducteurs et des composants électroniques » Dunod Edition 5. 2004.
- [4] S. De Mayer « Etude d'une nouvelle filière de composants HEMTs sur technologie nitrure de gallium. Conception d'une architecture flip-chip d'amplificateur distribué de puissance à très large bande », Thèse de doctorat, Université de Limoges, 2005.
- [5] R.L. Anderson, IBM. J. Res and Dev., 4, p. 283 (1960).
- [6] H. Mathieu « Physique des semiconducteurs et des composants électriques », Édition Masson, Paris 1996.
- [7] P. Chevalier « Transistors à effet de champ à hétéro jonction sur matériaux III-V pour application Hyperfréquences » Ecole polytechnique universitaire de Lille, 1999.
- [8] L. Shen. Advanced Polarization-Based Design of AlGa_N/Ga_N HEMTs. ICNF 5th conference. Japan, Mai 2003.
(ONR/MURI CANE report <http://my.ece.ucsb.edu/lkshen/chapter2.doc>).
- [9] H. Wong, ECE 499 : Directed studies in ECE : Ga_N materials and applications (Prof. Lester Eastman). M. School of Electrical and Computer Engineering, Cornell University, Mai 2004.
- [10] O. Ambacher, J. Smart, J. R. Shealy, N. G. Weimann, K. Chu, M. Murphy, W. J. Schaff, L. F. Eastman, R. Dimitrov, L. Wittmer, M. Stutzmann, W. Rieger, and J. Hilsenbeck, «Two-dimensional electron gases induced by spontaneous and piezoelectric polarization charges in N- and Ga-face AlGa_N/Ga_N heterostructures,» Journal of Applied Physics, vol. 85, pp. 3222-3233, 1999.
- [11] O. Ambacher et al.. Two-dimensional electron gases induced by spontaneous and piezoelectric polarization charges in N- and Ga-face AlGa_N/Ga_N heterostructures. J. Appl. Phys. (1999) 85: pp. 3222-3232.
- [12] Rashmi, Abhinav Kranti, S. Haldar, R.S.Gupta; «An accurate charge control model for spontaneous and piezoelectric polarization dependent two-dimensional electron gas sheet charge density of lattice-mismatched AlGa_N/Ga_N HEMTs», Solid- State Electronics 46 621-630, 2002

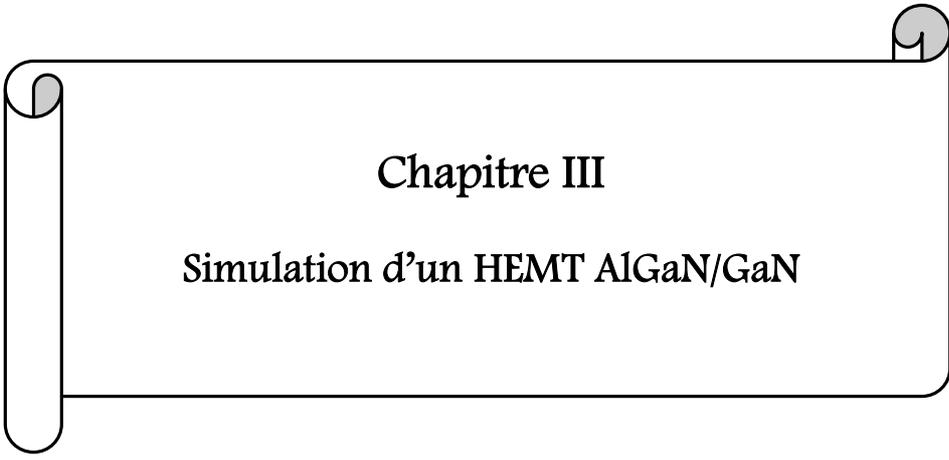
- [13] I.P. Smorchkova, C.R. Elsass, J.P. Ibbetson, et al.. Polarization-induced charge and electron mobility in AlGa_N/Ga_N heterostructures grown by plasma-assisted molecular-beam epitaxy. *J. Appl. Phys.* (1999) 86: pp. 4520-4526.
- [14] W. S. Chen, S. J. Chang, Y. K. Su, R. L. Wang, C. H. Kuo, S. C. Shei. AlGa_N/Ga_N heterostructure field effect transistors with various Al mole fractions in AlGa_N barrier. *J. Crystal Growth* (2005) 275: pp. 398-403.
- [15] S. Arulkumaran, T. Egawa, H. Ishikawa, and T. Jimbo. Characterization of different- Al-content AlGa_NGa_N heterostructures and high-electron-mobility transistors on sapphire. *J. Vac. Sci. Technol. B* (2003) 21: pp. 888-894.
- [16] T. Salim « Conception, réalisation et caractérisation de composants de puissance hyperfréquence de la filière nitrure de gallium » thèse, Université Lille Décembre 2007.
- [17] R. Dingle ; H.L. Stormer ; A.C. Gossard ; and W. Wiegmann « Electron mobilities in modulation-doped semiconductor heterojunction superlattices » *Applied Physics Letters*, vol. 33, no. 7, pp. 665–667, 1978.
- [18] T. Mimura, S. Hiyamizu, T. Fujii, and K. Nanbu « A new field-effect transistor with selectively doped GaAs/n-Al_xGa_{1-x}As heterojunctions » *Japanese Journal of Applied Physics*, vol. 19, pp. L225–227, May 1980.
- [19] Y.F. Wu, B.P. Keller, S. Keller, D. Kapolnek, S.P. Denbaars, U.K. Mishra « Measured microwave power performance of AlGa_N/Ga_N MODFET » *IEEE Electron Device Lett.*, vol. 17, pp. 455-457, 1996.
- [20] S.T. Sheppard, K. Doverspike, W.L. Pribble et al. «High power microwave AlGa_N/Ga_N HEMTs on semi-insulating silicon carbide substrates» *IEEE Electron Device Lett.*, vol. 20, pp. 161-163, April 1999.
- [21] S. T. Sheppard, K. Doverspike, W. L. Pribble, S. T. Allen, J. W. Palmour, L. T. Kehias, T.J. Jenkins, High-power microwave AlGa_N/Ga_N HEMTs on semi-insulating silicon carbide substrates, *IEEE Electron Device Lett.*, vol. 20, pp. 161-163, Apr. 1999.
- [22] C. Charbonniaud, T. Gasseling, S. De Meyer, R. Quéré, J.P. Teyssier, D. Barataud, J.M Nébus, T.Martin, B. Grimbert, V. Hoel, N. Caillas, E. Morvan, « Power Performance Evaluation of AlGa_N/Ga_N HEMTs through Load Pull and Pulsed I-V Measurements», GAAS 2004, 11-12 Oct, 2004 Amsterdam.
- [23] A. Minko, V. Hoël, E. Morvan, B. Grimbert, A. Soltani, E. Delos, D. Ducatteau, C. Gaquière, D.Théron, J. C. De Jaeger, H. Lahreche, L. Wedzikowski, R. Langer, and P. Bove, « AlGa_N-Ga_N HEMTs on Si With Power Density Performance of 1.9

- W/mm at 10 GHz », IEEE Electron Device Letters, VOL. 25, NO. 7, pp. 453–455, July 2004.
- [24] W. Johnson, Member, IEEE, E. L. Piner, A. Vescan, Member, IEEE, R. Therrien, P. Rajagopal, J. C. Roberts, Member, IEEE, J. D. Brown, Member, IEEE, S. Singhal, and K. J. Linthicum, «12 W/mm AlGa_N–Ga_N HFETs on Silicon Substrates», IEEE Electron Device Letters, VOL. 25, NO. 7, pp. 459–461, July 2004.
- [25] K. K. Chu, P. C. Chao, M. T. Pizzella, R. Actis, D. E. Meharry, K. B. Nichols, R. P. Vaudo, X. Xu, J. S. Flynn, J. Dion, and G. R. Brandes, «9.4-W/mm Power Density AlGa_N–Ga_N HEMTs on Free-Standing Ga_N Substrates», IEEE Electron Device Letters, VOL. 25, NO. 9, September 2004.
- [26] Yi-Feng Wu, Member, IEEE, David Kapolnek, James P. Ibbetson, Primit Parikh, Member, IEEE, Bernd P. Keller, and Umesh K. Mishra, Fellow, IEEE, «Very-High Power Density AlGa_N/Ga_N HEMTs», IEEE Transactions on Electronic Devices, VOL. 48, NO. 3, March 2001.
- [27] A. Chini, D. Buttari, R. Coffie, S. Heikman, S. Keller ; U.K. Mishra, «12W/mm power density AlGa_N/Ga_N HEMTs on sapphire substrate», Electronics Letters, Vol. 40, No 1, January 2004.
- [28] Y. F. Wu, A. Saxler, M. Moore, P. Smith, S. Sheppard, P. M. Chavarkar, T. Wisleder, U. K. Mishra, and P. Parikh, “30-W/mm Ga_N HEMTs by field plate optimization”, IEEE Electron Device Lett, vol. 25, pp. 117–119, Mar. 2004.
- [29] www.nitronex.com.
- [30] O. Lancry «Etude par microspectrométrie raman de matériaux et de composants microélectronique à base de semi-conducteur III-V grand gap» thèse, Univ. Lille Déc. 2009.
- [31] D. Nicolas «Caractérisation et modélisation de dispositif de la filière Nitrure pour la conception de circuits intégrés de puissance Hyperfréquences» thèse, Université de Lille Décembre 2007.
- [32] M. Audrey Philippe « Etude d’une nouvelle filière de composants sur technologie nitrure de gallium. Conception et réalisation d’amplificateurs distribués de puissance large bande à cellules cascade en montage flip-chip et technologie MMIC » thèse, Université Limoges Décembre 2007.
- [33] B. Benbakhti, “Analyse physique et thermique de transistors à effet de champ de la filière Ga_N: optimisation de structures pour l’amplification de puissance hyperfréquence”, Thèse de Doctorat, Université de Lille, Dec. 2006.

- [34] G.Le. Coustre «Contribution au développement d'une filière de transistor de forte puissance à base de technologie HEMT GaN pour application télécoms et radar» thèse, Université de Lille 2009.
- [35] Rashmi, A. Kranti, S. Haldar, and R. Gupta, _An accurate charge control model for spontaneous and piezoelectric polarization dependent two-dimensional electron gas sheet charge density of lattice-mismatched AlGaIn/GaN HEMTs,_ Solid-State Electronics, no. 46, pp. 621_630, 2002.
- [36] H. Tamotsu et al., "Chemistry and electrical properties of surfaces of GaN and GaIn/AlGaIn heterostructures", J. Vac. Sci. Technol. B 19.4., Jul/Aug 2001.
- [37] K. Horio et al, Two Dimensional Analysis of Substrate-Trap Effect on Turn-On characteristics in GaAs MESFETs IEEE Trans. On Electron. Devices, vol 47, n°3, pp. 617-624 (2000).
- [38] Certificat de vente de la société A.C.M (Application Couches Minces) 9 r Gare 78640 VILLIERS SAINT FREDERIC (France).
- [39] B. Luo et al. Influence of MgO and Sc₂O₃ passivation on AlGaIn/GaN high-electronmobility transistors. Appl. Phys. Lett. (2002) 80: pp. 1661-1663.
- [40] J. Hwang, W.J. Schaff, B.M. Green, H. Cha, L.F. Eastman. Effects of a molecular beam epitaxy grown AlN passivation layer on AlGaIn/GaN heterojunction field effect transistors. Solid-State Electronics (2004) 48: pp. 363-366.
- [41] Green, B.M.; Chu, K.K.; Chumbes, E.M.; Smart, J.A.; Shealy, J.R.; Eastman, L.F.;. The effect of surface passivation on the microwave characteristics of undoped AlGaIn/GaN HEMTs. IEEE Electron Device Lett. (2000) 21: pp. 268-270.
- [42] B. Jogai. Influence of surface states on the two-dimensional electron gas in AlGaIn/GaN heterojunction field-effect transistors. J. Appl. Phys. (2003) 93: pp. 1631-1635.
- [43] R. Vetury, N. Q. Zhang, S. Keller and U. K. Mishra. the impact of surface states on the DC and RF characteristics of AlGaIn/GaN HFETs. IEEE Trans. Electron Devices (2001) 48: pp. 560-566.
- [44] P. Kordos, P. Kudela, D. Gregusova and D. Donoval. The effect of passivation on the performance of AlGaIn/GaN heterostructure field-effect transistors. Semicond. Sci. Technol. (2006) 21: pp. 1592-1596.
- [45] W.S. Tan, M.J. Uren, P.A. Houston, R.T. Green, R.S. Balmer, and T. Martin. Surface leakage currents in SiN_x passivated AlGaIn/GaN HFETs. IEEE Electron Device Lett. (2006) 27: pp. 1-3.

- [46] S. Karmalkar, M. S. Shur, G. Simin and M. A. Khan. Field-plate engineering for HFETs. IEEE Trans. Electron Devices (2005) 52: pp. 2534-2540.
- [47] Huili Xing, Y. Dora, A. Chini, S. Heikman, S. Keller, and U. K. Mishra. High breakdown voltage AlGaIn-GaN HEMTs achieved by multiple field plates. IEEE electron device lett. (2004) 25: pp. 161-163.
- [48] Y. Dora, A. Chakraborty, L. McCarthy, S. Keller, S. P. DenBaars, and U. K. Mishra. High Breakdown Voltage Achieved on AlGaIn/GaN HEMTs With Integrated Slant Field Plates. IEEE electron device lett. (2006) 27: pp. 713-715.
- [49] Y.-F. Wu, A. Saxler, M. Moore, R. P. Smith, S. Sheppard, P. M. Chavarkar, T. Wisleder, U. K. Mishra and P. Parikh. 30-W/mm GaN HEMTs by Field Plate Optimization. IEEE Electron Device lett. (2004) 25: pp. 117-119.
- [50] Y.F. Wu, M. Moore, A. Saxler, T. Wisleder and P. Parikh. 40-W/mm double fieldplated GaN HEMTs. IEEE Device Research Conference (2006).
- [51] B. Tewfik «Etude des propriétés structurales et électroniques de nouveaux matériaux à base d'alliages III-N pour l'optoélectronique» thèse, Université Tlemcen Juillet 2009.
- [52] S. Rajan ; P. Waltereit ; C. Poblenz ; S.J. Heikman ; D.S. Green ; J.S. Speck ; U.K. Mishra «Power performance of AlGaIn-GaN HEMTs grown on SiC by plasma-assisted MBE» IEEE Electron Device Letters, Vol. 25, No 5, Mai 2004, pages : 247 à 249.
- [53] R. Thompson ; T. Prunty ; V. Kaper ; J.R. Shealy «Performance of the AlGaIn HEMT structure with a gate extension» IEEE Transactions on Electron Devices, Vol. 51, No 2, Février 2004, pages : 292 à 295.
- [54] A. Chini ; D. Buttari ; R. Coffie ; S. Heikman ; S. Keller ; U.K. Mishra «12W/mm power density AlGaIn/GaN HEMTs on sapphire substrate» Electronics Letters, Vol. 40, No 1, Janvier 2004.
- [55] A. Minko ; V. Hoel ; E. Morvan ; B. Grimbert ; A. Soltani ; E. Delos ; D. Ducatteau ; C. Gaquiere ; D. Theron ; J.C. Dejaeger ; H. Lahreche ; L. Wedzikowski ; R. Langer ; P. Bove «AlGaIn-GaN HEMTs on Si with power density performance of 1.9 W/mm at 10 GHz» IEEE Electron Device Letters, Vol. 25, No7, Juillet 2004, pages : 453 à 455.
- [56] K.K. Chu ; P.C. Chao ; M.T. Pizzella ; R. Actis ; D.E. Meharry ; K.B. Nichols ; R.P. Vaudo ; X. Xu ; J.S. Flynn ; J. Dion ; G.R. Brandes «9.4-W/mm power density AlGaIn-GaN HEMTs on free-standing GaN substrates» IEEE Electron Device Letters, Vol. 25, No 9, Septembre 2004, pages : 596 à 598.

- [57] R. Behtash ; H. Tobler ; M. Neuburger ; A. Schurr ; H. Leier ; Y. Cordier ; F. Semond ; F. Natali ; J. Massies «AlGaIn/GaN HEMTs on Si(111) with 6.6 W/mm output power density» Electronics Letters, Vol. 39, No 7, Avril 2003, pages : 626 à 627.
- [58] Y.F. Wu ; A. Saxler ; M. Moore ; R.P. Smith ; S. Sheppard ; P.M. Chavarkar ; T. Wisleder ; U.K. Mishra ; P. Parikh «30-W/mm GaN HEMTs by field plate optimization» IEEE Electron Device Letters, Vol. 25, No 3, Mars 2004, pages : 117 à 119.
- [59] P. Saunier «GaN Technology Overview : Accomplishments and Challenges» 12th GaAs Symposium, Amsterdam, 2004, pages : 543 à 546.
- [60] A. Maekawa, M. Nagahara, T. Yamamoto, S. Sano, «A 100W high-efficiency GaN HEMT amplifier for S-Band wireless system» Microwave Conference, 4-6 Oct. 2005, Vol 3.
- [61] A. Maekawa, T. Yamamoto, E. Mitani, S. Sano «A 500W Push-Pull AlGaIn/GaN HEMT Amplifier for L-Band High Power Application» IEEE MTT-S International, 11-16 June 2006, pp 722-725.
- [62] A. Wakejima, T. Nakayama, K. Ota, Y. Okamoto, Y. Ando, N. Kuroda, M. Tanomura, K. Matsunaga, H. Miyamoto «Pulsed 0.75 kW output single-ended GaN-FET amplifier for L/S band applications» Electronics Letters, 2006, Vol 42, No 23 pp 1349-1350.
- [63] Y.F. Wu, S.M. Wood, R.P. Smith, S. Sheppard, S.T. Allen, P. Parikh and J. Milligan «An Internally-matched GaN HEMT Amplifier with 550-watt Peak Power at 3.5 GHz» Electron Devices Meeting, 2006, pp 1-3.
- [64] K. Krishnamurthy, J. Martin, B. Landberg, R. Vetry, M.J. Poulton «Wideband 400 W Pulsed Power GaN HEMT Amplifiers» Microwave Symposium Digest, 2008, pp 303-306.
- [65] H. Otsuka, K. Yamanaka, H. Noto, Y. Tsuyama, S. Chaki, A. Inoue, M. Miyazaki «Over 57% efficiency C-band GaN HEMT high power amplifier with internal harmonic manipulation circuits» IEEE MTT-S International, 11-15 June 2008, pp 311-314.
- [66] B.M. Green, H. Henry, J. Selbee, F. Clayton, K. Moore, M. CdeBaca, J. Abdou, C.L. Liu, O. Hartin, D. Hill, M. Miller, C.E. Weitzel, «Characterization and thermal analysis of a 48 V GaN HFET device technology for wireless infrastructure applications» IEEE MTT-S International, 15-20 June 2008, pp 651-654.



Chapitre III

Simulation d'un HEMT AlGaN/GaN

III. Simulation d'un HEMT AlGaIn/GaN

III.1 Introduction

Durant ces dernières années, et cause des coûts élevés de l'expérimentation, les chercheurs se sont orientés vers la simulation. La simulation est donc largement utilisée dans le domaine électronique et permet en effet de déterminer les paramètres les plus importants pour le fonctionnement des dispositifs, de minimiser les pertes et d'optimiser les paramètres physiques et géométriques de ces dispositifs.

L'objectif de ce chapitre est d'étudier la modélisation d'un HEMT AlGaIn/GaN à l'aide du logiciel SILVACO-TCAD.

Le terme TCAD est l'acronyme anglo-saxon de «Technology Computer Aided Design». Cet outil de conception assistée par ordinateur permet dans notre cas, de simuler le comportement électrique du composant électronique en tenant compte de sa structure (dopage, nature des matériaux, géométrie,...). La TCAD permet donc d'aider à la conception des composants et/ou de comprendre les mécanismes physiques qui régissent leur fonctionnement.

Nous utilisons ce logiciel pour résoudre de façon auto-cohérente les équations de continuité et de Poisson en tout point de la structure simulée. Les équations des différents modèles physiques que l'on veut prendre en compte (modèles de mobilité, effet des pièges,...) sont résolues en s'appuyant sur les paramètres des matériaux tels que la mobilité, la largeur de bande interdite, les densités d'états, etc.

La précision quantitative des simulations dépend de la finesse du maillage que l'on applique à la structure : plus celui-ci est fin, meilleure est la précision. Cependant le temps de calcul de ces simulations est proportionnel au nombre de nœuds composant le maillage. Comme la résolution des équations, est effectuée par la méthode de Newton ; la convergence et donc la résolution de nos équations, se complique grandement avec un élargissement du maillage. Il s'agit donc de trouver un juste milieu entre précision, temps de calcul et convergence.

Les simulations par différences finies sont donc très consommatrices de ressources informatiques en comparaison des modèles compacts. Mais leur intérêt réside dans le fait qu'elles permettent de connaître spatialement les différentes grandeurs physiques utiles à la compréhension du fonctionnement du composant, telles que le champ électrique, les densités d'électrons et de trous, les bandes de conduction et de valence, et du niveau de Fermi.

Les limites des simulations TCAD sont donc liées au maillage ainsi qu'aux approximations induites par les modèles utilisés.

SILVACO propose un large choix de modèles pré-implémentés; malheureusement, ceux-ci ont été développés principalement pour le silicium et l'arséniure de gallium. Il est donc nécessaire d'adapter ces modèles et de les choisir avec justesse pour le nitrure de gallium (GaN) et le nitrure de gallium-aluminium (AlGaN) utilisés dans notre dispositif.

III.2 Structure du HEMT AlGaN/GaN étudié et paramètres physiques

Dans le tableau (III.1), nous donnons les profils de dopage et les dimensions de la structure, qui représenteraient au mieux la réalité, à notre sens. L'influence de la variation de certains paramètres constitutionnels dont l'étude permet d'en affiner la définition, pourrait être analysée.

Couche	Epaisseur	Dopage
Cap layer GaN (N^+)	1nm	$5.10^{21} \text{ cm}^{-3}$
Couche supplémentaire AlGaN	3nm	n.i.d
Couche donneuse AlGaN (N)	15nm	$2.10^{20} \text{ cm}^{-3}$
Couche espaceur AlGaN	2nm	n.i.d
Couche tampon GaN	$1\mu\text{m}$	n.i.d
Couche de nucléation GaN	250nm	n.i.d
Substrat (Al_2O_3)	$180\mu\text{m}$	n.i.d

Tableau III.1 : Epaisseurs et dopages des différentes couches du HEMT.

Nous donnons à la figure III.1, une vue en coupe schématique de la structure du transistor que nous allons simuler sous SILVACO. La structure se compose d'un substrat de (saphir), d'une couche mince de GaN (250nm) qui permet de réduire les contraintes et ainsi limiter la quantité de dislocations, d'une couche non intentionnellement dopé (nid) de GaN d'épaisseur $1\mu\text{m}$, d'une couche AlGaN de 15nm d'épaisseur dopée n, et d'une couche cap-layer de GaN d'épaisseur 1nm dopée n.

Les épaisseurs de la couche supplémentaire et espaceur, on a enta mine d'après une étude sur la variation de ses épaisseurs. Les meilleurs résultats sont effectués avec une épaisseur de 3nm de la couche supplémentaire et 2nm de la couche espaceur.

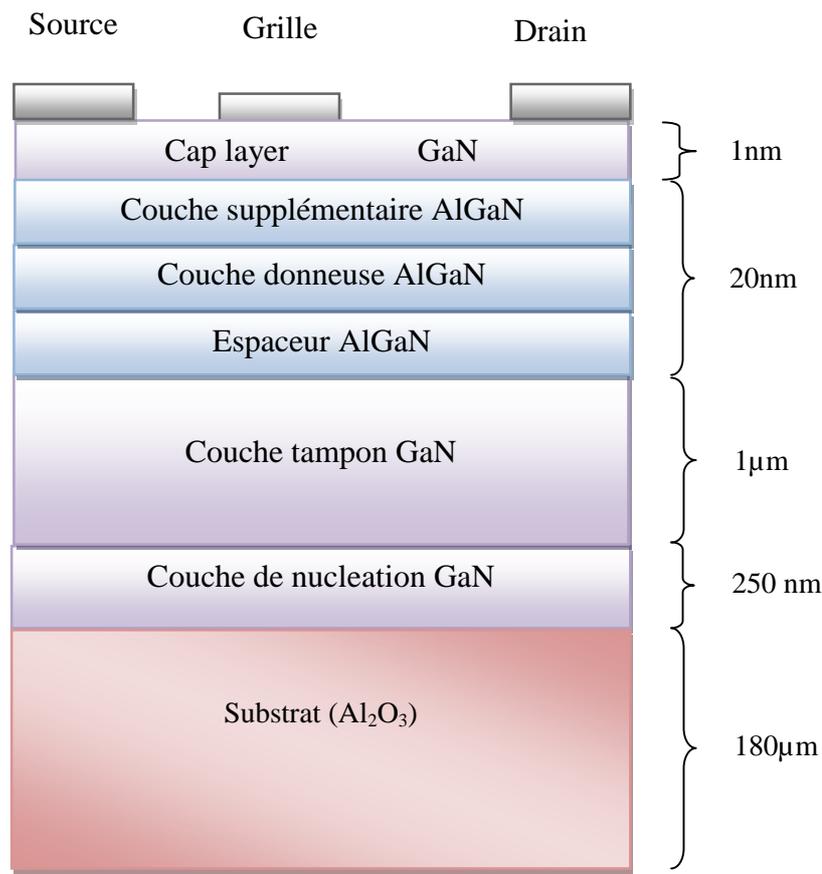


Figure III.1 : Coupe schématique du HEMT AlGaN/GaN étudié.

III.3 Simulation par le logiciel SILVACO

La figure III.2 représente la structure simulée, montrant les différentes couches qui constituent le transistor et leurs épaisseurs.

Dans notre HEMT AlGaN/GaN, nous utilisons un fossé de grille nommé communément « recess de grille » et qui contribue à améliorer deux aspects :

- Le cap layer parce qu'il est fortement dopé, permet d'améliorer la caractéristique des contacts ohmiques. Cependant, dans le cas d'une structure planaire, le contact Schottky se retrouve posé sur une couche fortement dopée, ce qui entraîne par conséquent la dégradation du contact de grille. Grâce au recess, on parvient à graver le cap layer qui recouvre la couche barrière AlGaN non dopée. La grille est déposée sur un matériau non dopé ce qui permet d'avoir peu de courant de fuite de grille. Le recess permet donc d'avoir de bons contacts ohmiques sur une couche dopée et un bon contact Schottky sur une couche non dopée. La

difficulté majeure dans la gravure de ce fossé de grille vient du fait que l'on ne sait pas arrêter la gravure précisément à l'interface entre la couche « cap » et la couche d'AlGaN.

Il est à noter également que le « recess » de grille déplace l'arrête du pied de grille côté drain, qui ne se trouvera plus au niveau de l'interface très sensible isolant / semiconducteur mais dans le volume du semiconducteur qui est une zone moins sensible. C'est un avantage supplémentaire qui peut contribuer à améliorer aussi les performances du composant.

- Le deuxième aspect concerne la diminution de la longueur de grille L_g afin d'améliorer les performances hyperfréquences du HEMT. Cette diminution doit se faire en respectant le rapport d'aspect $L_g / a > 5$ où L_g est la longueur de grille et a est l'épaisseur de la couche barrière. Si l'on diminue la longueur de grille, il faut diminuer l'épaisseur de la couche active sous la grille pour conserver un rapport d'aspect supérieur à 5. Ce problème de rapport d'aspect est un des verrous majeurs de l'optimisation des performances du composant.

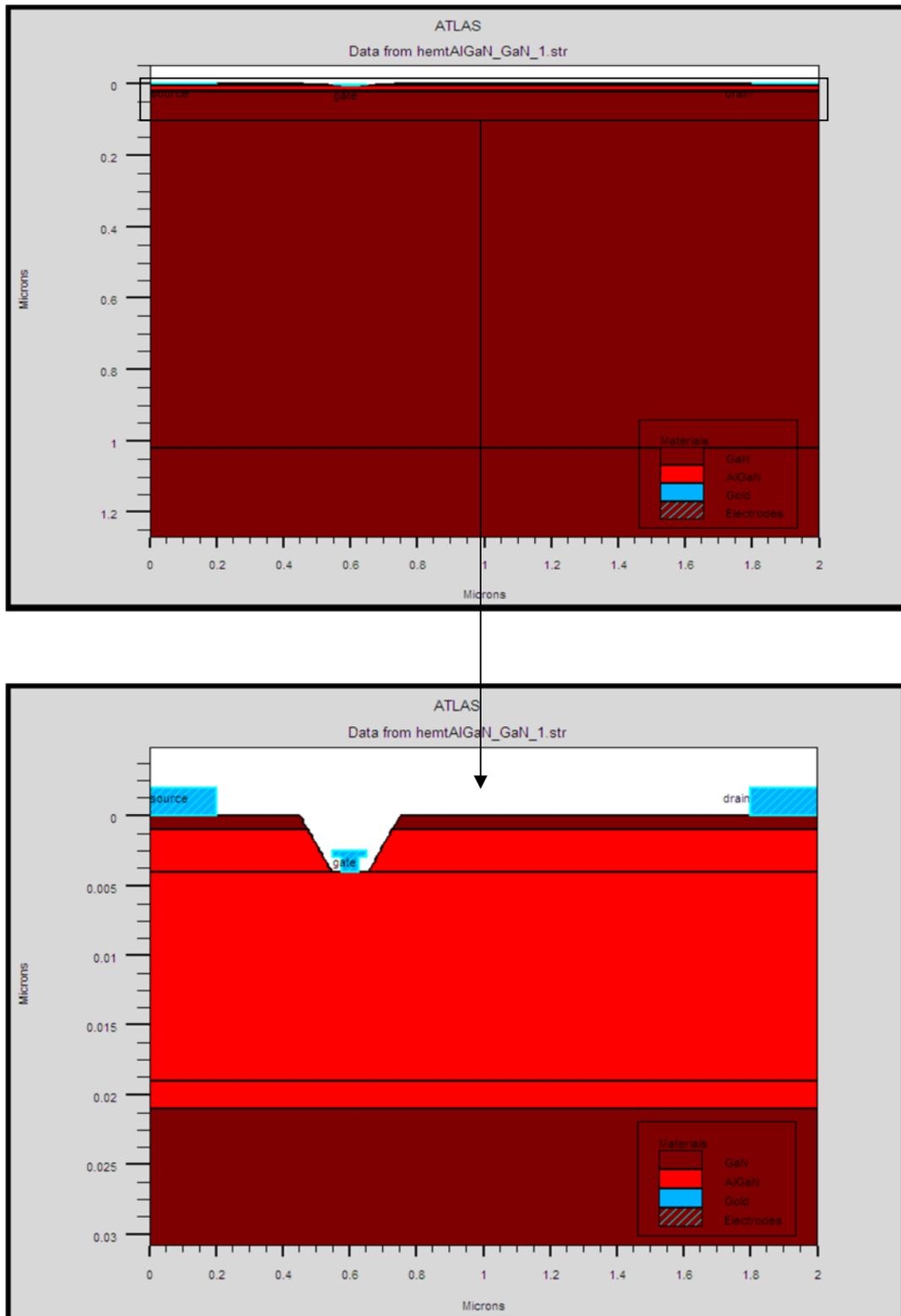


Figure III.2 : Structure du transistor HEMT AlGaN/GaN simulé.

III.4 Maillage

La définition du maillage est primordiale pour la validité et la précision des résultats. Ceux-ci ainsi que le temps de calcul, sont grandement dépendants du nombre d'intersections. Chaque intersection, ou nœud, représente le point où les équations sont résolues. Le temps de calcul, la précision et donc la validité des résultats dépendent de la qualité du maillage. En effet, une maille trop large permet d'avoir moins de nœuds et donc de diminuer le temps de calcul. En revanche, ces nœuds sont plus éloignés les uns des autres, entraînant ainsi des évolutions des différentes grandeurs physiques plus importantes d'un nœud à l'autre. Les imprécisions sur le résultat final sont donc accentuées ainsi que les risques de divergence lors de la résolution des équations. Ceci peut mener à des résultats incohérents. Une maille trop fine augmente de façon exponentielle le temps de calcul mais permet d'avoir une solution très précise.

Dans ce dernier cas de maillage, les évolutions des différentes grandeurs physiques sont moins grandes et donc la résolution des équations est simplifiée. Il s'agit donc de trouver un juste milieu entre la précision des résultats, la convergence et le temps de calcul. Il est donc nécessaire de connaître les différents mécanismes physiques qui ont lieu ainsi que leur localisation dans la structure afin d'affiner le maillage dans les zones qui connaissent des mécanismes déterminants pour le composant étudié et «relâcher» le maillage dans les zones qui n'influencent pas le comportement du composant. Ces règles de maillage mènent par exemple à mailler finement l'hétérojonction et à «relâcher» le maillage à mesure que l'on s'éloigne de la jonction dans la partie inférieure de la couche Ga_N.

Dans le cas des HEMTs, on doit donc mailler de façon très fine l'hétérointerface AlGa_N/Ga_N puisque l'extension de la ZCE doit être déterminée avec précision. En effet celle-ci influe directement sur le courant de drain. Il faut aussi mailler finement la couche AlGa_N et en particulier la surface de cette couche puisque les électrons du canal proviennent des pièges et des charges situés à la surface de la couche barrière.

L'optimisation du maillage est donc une étape importante pour la calibration des simulations, qui se répète à chaque changement de la géométrie de la structure ou la prise en compte d'un nouveau mécanisme physique. La figure III.3 montre le maillage de notre transistor HEMT AlGa_N/Ga_N ; il est très fin dans les régions de contacts métalliques ohmiques et Schottky, la région de la couche donneuse et la partie de formation de gaz à deux dimensions.

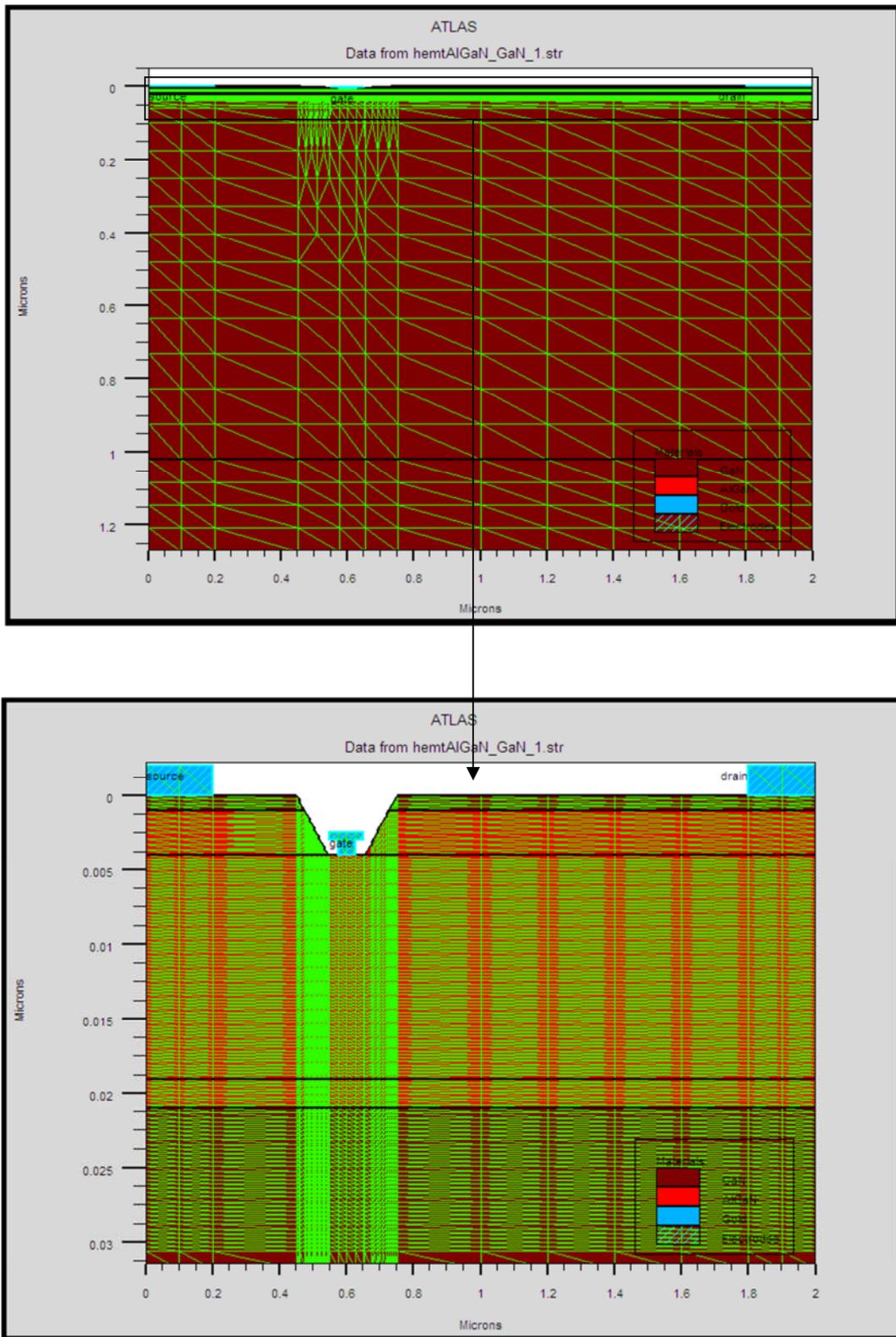


Figure III.3 : Maillage du transistor HEMT AlGa_N/Ga_N.

III.5 Influence des paramètres technologiques

Dans l'objectif de mettre en œuvre une méthodologie de calibration des simulations sur les mesures électriques statiques, il est nécessaire de quantifier l'influence des principaux paramètres technologiques. Une étude est donc effectuée sur l'influence de la distance entre la grille et la source, du taux d'aluminium, de l'épaisseur de la couche AlGaIn, ainsi que du dopage des couches AlGaIn et GaN.

III.5.1 Variation de la largeur L_g

Dans cette partie, nous varions la largeur de pied de la grille et nous tirons le courant drain-source maximal à une tension Grille-Source nulle. Les résultats sont représentés par la figure III.4.

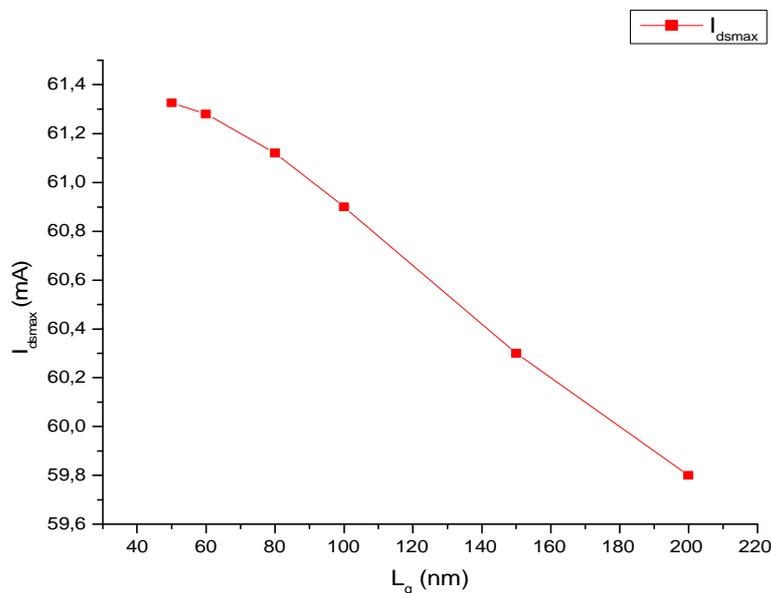


Figure III.4 : La variation du courant I_{dsmax} en fonction la largeur de grille L_g .

Le courant de Drain-Source maximal augmente quand la largeur de pied de la grille diminue jusqu'à une valeur de 50nm. Si le pied de la grille est très fin, il y aura l'effet de perçage.

III.5.2 Variation de la distance L_{gs}

Pour une grille implantée au milieu entre la source et le drain, ou quand elle est plus proche de la source ; on n'obtient pas le même courant de drain, ni les mêmes performances.

Nous allons alors calculer le courant maximum pour différentes distances inter-électrodes Source-Grille. Les résultats sont représentés par la figure III.5.

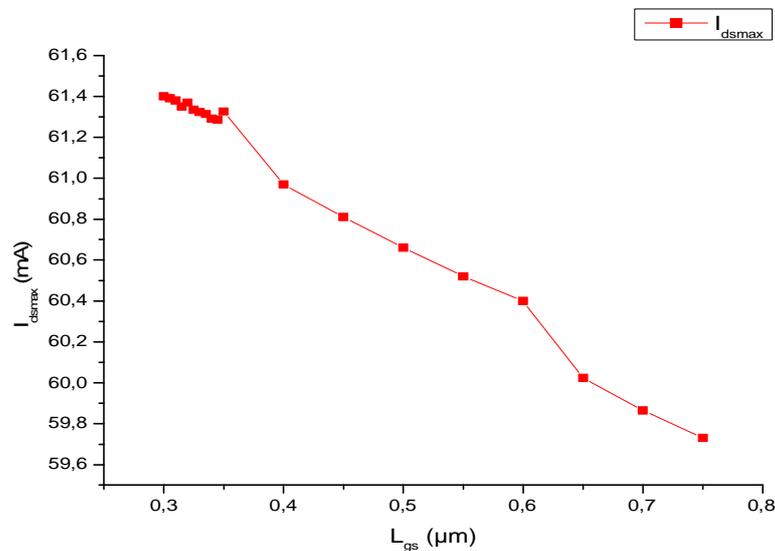


Figure III.5 : La variation du courant I_{dsmax} en fonction la distance Grille-Source.

Le courant de drain augmente quand la distance Grille-Source diminue jusqu'à une valeur de $0,35\mu m$. En-deçà de cette valeur, le courant I_{ds} diminue. Pour comprendre le phénomène, il suffit de regarder le champ interne. Ce dernier est maximal sous l'électrode Grille et il diminue d'intensité quand il s'approche des autres électrodes, mais il est plus aplati côté Drain. Autrement dit ; le courant de drain augmente jusqu'à ce que l'espacement Grille-Drain devienne plus grand que la zone de charge d'espace entre la grille et le drain.

Dans l'hypothèse de la grille virtuelle, au point de repos, la jonction Grille-Drain est polarisée en inverse. Dès lors, sous l'effet du champ électrique latéral lié à la polarisation Grille-Drain, une injection d'électrons du métal de grille se produit en surface dans les espacements Grille-Source et Grille-Drain. Ces électrons se recombinent alors avec les ions positifs situés en surface, et empêchent la charge piézoélectrique négative d'être compensée. Cette dernière exerce donc un potentiel négatif qui déserte le canal dans les espacements Grille-Source et Grille-Drain. Cet effet provoque la diminution du courant de drain et l'augmentation de la tension coude.

III.5.3 Variation du taux d'aluminium

Dans ce cas, nous fixons les paramètres de notre transistor HEMT AlGaIn/GaN tels que le dopage de cap layer est de 5.10^{21} atomes/cm⁻³, l'épaisseur de la couche donneuse est de

20nm et son dopage est de 2.10^{20} atomes/cm⁻³, ainsi la couche tampon non intentionnellement dopée. Puis nous faisons varier le taux d'aluminium de 0.07 à 0.2, pour tension Grille-Source V_{gs} nulle. Les résultats sont représentés par la figure III.6.

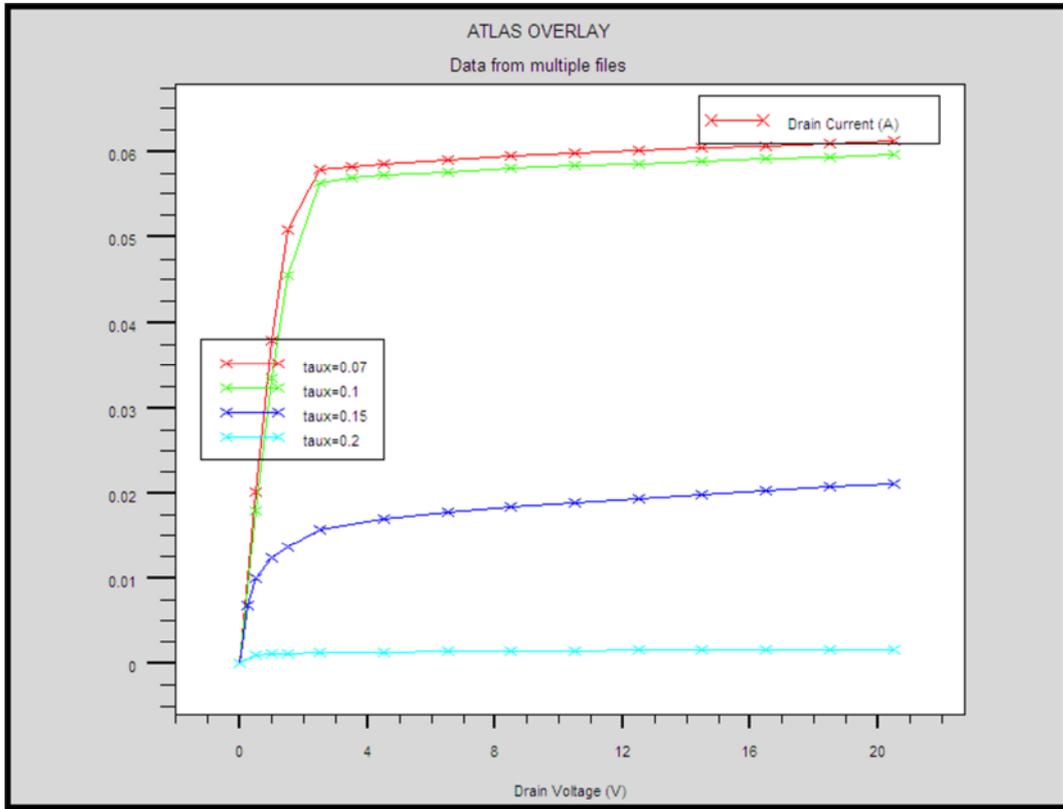


Figure III.6 : Evolution du courant de drain en fonction de la tension Drain-Source, pour différents taux d'aluminium à V_{gs} nulle.

Pour les taux d'aluminium de 7 et 10%, on a pratiquement le même courant de l'ordre de 60mA. Puis il chute brutalement pour des taux plus élevés. Cela est dû à l'augmentation des dislocations par l'introduction de l'aluminium, suite au désaccord de maille entre AlN et GaN.

Une augmentation du taux d'aluminium provoque une hausse de la densité de porteurs. En revanche, la mobilité atteint un maximum pour une certaine concentration d'aluminium. Au-delà de cette concentration, les contraintes deviennent trop importantes et les effets de dispersion ainsi que les rugosités d'interface provoquent une baisse de la mobilité. Une concentration qui donne une discontinuité de bande de conduction entre 0,1 et 0,2eV, suffit.

III.5.4 Variation de l'épaisseur de la couche donneuse

Avec les paramètres donnés suivants : le dopage de cap layer est de 5.10^{21} atomes/cm³, la couche tampon non intentionnellement dopée, le taux d'aluminium est de 0.07, le dopage de la couche donneuse est de 2.10^{20} atomes/cm³; nous faisons varier l'épaisseur de cette dernière couche pour voir son influence sur la caractéristique courant Drain-Source en fonction de la tension Drain-Source, à une tension Grille-Source nulle (Figure III.7).

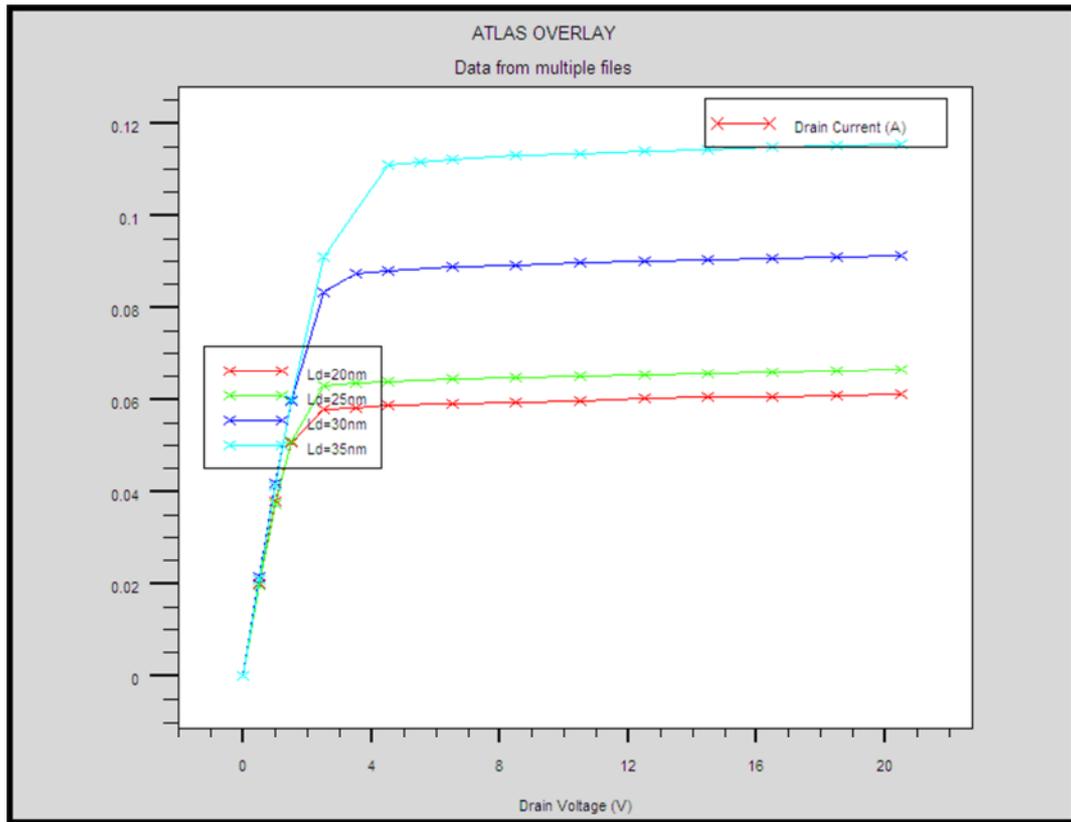


Figure III.7 : Evolution du courant de drain en fonction de la tension Drain-Source, pour différentes épaisseurs de la couche donneuse, à V_{gs} nulle.

Pour les épaisseurs respectives 20 et 35nm de la couche donneuse, le courant passe de 60 à 115mA environ à cause de l'augmentation de la densité de charge.

III.5.5 Variation de dopage de la couche donneuse

Avec les paramètres donnés suivants : le dopage de cap layer est de 5.10^{21} atomes/cm³, la couche tampon non intentionnellement dopée, le taux d'aluminium est de 0.07, l'épaisseur de la couche donneuse est de 20nm ; nous étudions l'influence du dopage de la

couche donneuse AlGaN sur la caractéristique courant Drain-Source en fonction de la tension Drain-Source, à une tension Grille-Source nulle. Les résultats sont donnés par la figure III.8.

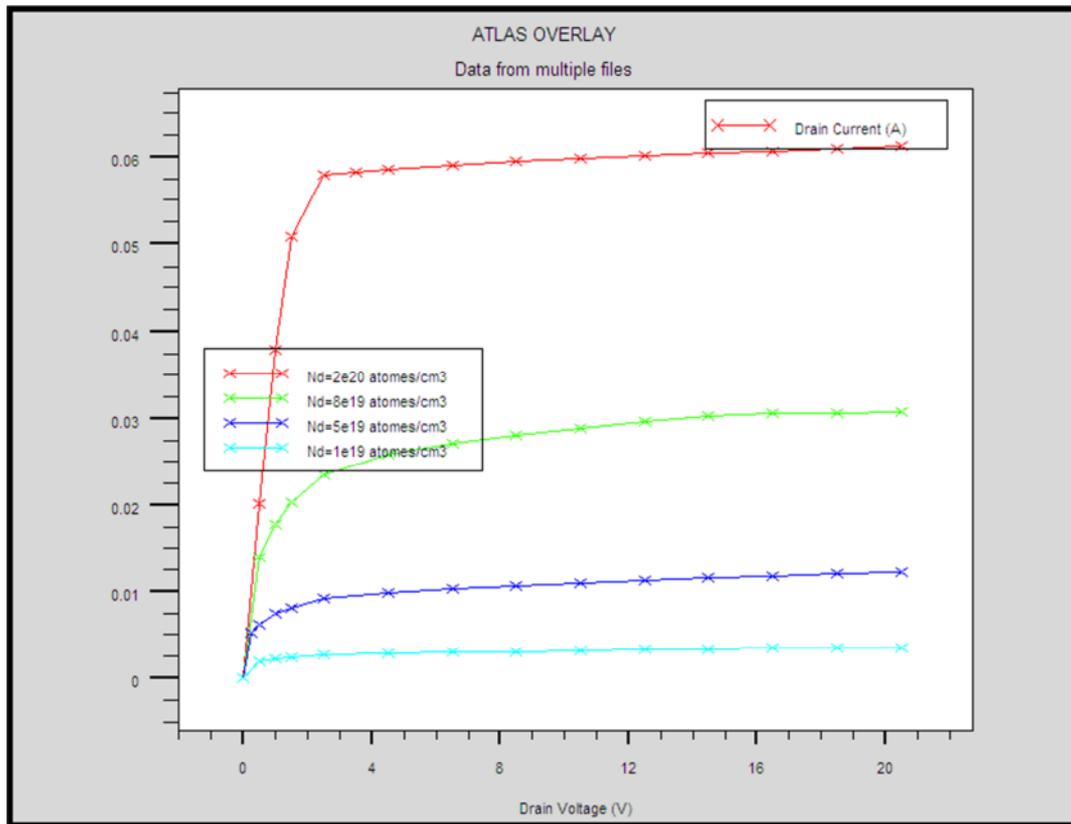


Figure III.8 : Evolution du courant de drain en fonction de la tension Drain-Source, pour différentes valeurs de dopage de la couche donneuse AlGaN, à V_{gs} nulle.

D'après la figure III.8, on remarque que le courant Drain-Source maximal varie en fonction de la variation de dopage de la couche donneuse AlGaN. Le courant I_{dsmax} augmente quand le dopage augmente, à cause de l'augmentation de la densité de charge dans le canal DEG.

Une augmentation du dopage type n dans la couche AlGaN, doit entraîner une baisse de la bande de conduction et donc une augmentation de la densité d'électrons dans le puits quantique. Cette augmentation de la densité d'électrons est associée à une diminution de leur mobilité dans le canal et donc à une diminution des fréquences de transition et maximale.

III.5.6 Variation du dopage de la couche tampon

Dans ce cas, nous fixons les paramètres de notre transistor HEMT AlGaIn/GaN tels que le dopage de cap layer est de $5 \cdot 10^{21}$ atomes/cm⁻³, l'épaisseur de la couche donneuse est de 20nm et son dopage est de $2 \cdot 10^{20}$ atomes/cm⁻³, ainsi le taux d'aluminium est de 0.07. Puis nous faisons varier le dopage de la couche tampon GaN et nous tirons la caractéristique courant drain-source en fonction de la tension drain-source, à une tension grille-source nulle (Figure III.9).

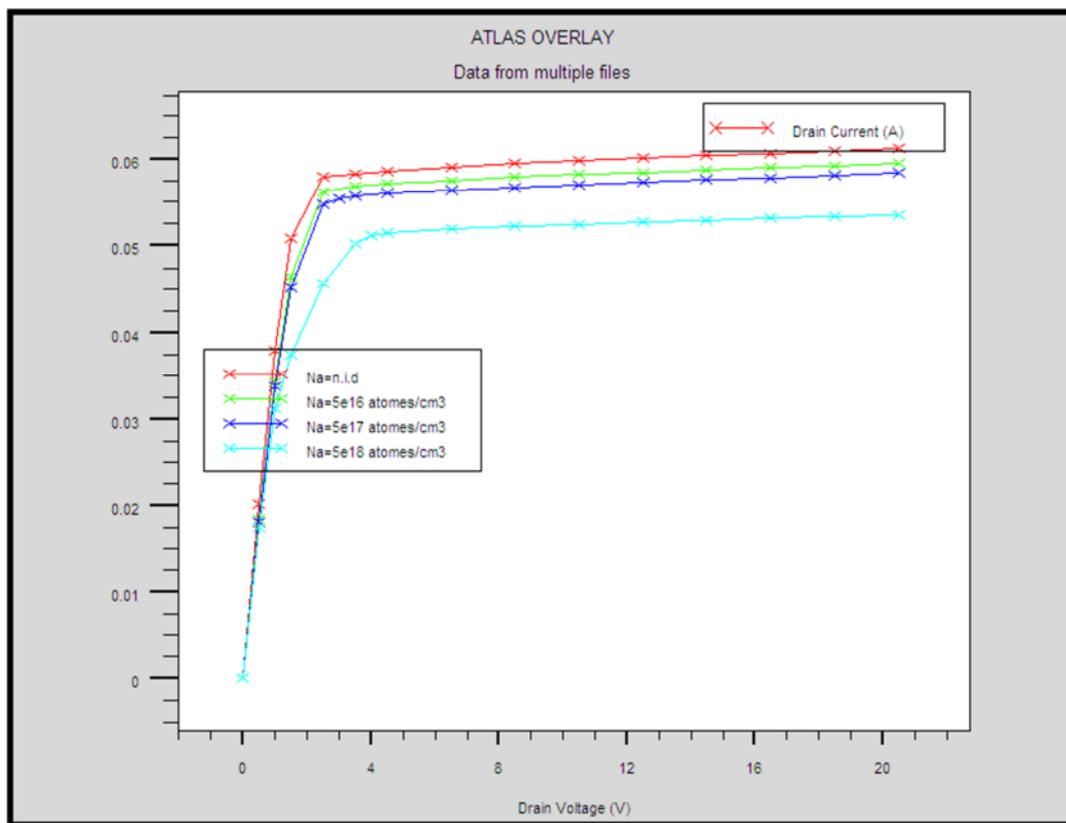


Figure III.9 : Evolution du courant de drain en fonction de la tension Drain-Source pour différentes valeurs de dopage de la couche tampon GaN à V_{gs} nulle.

Le courant I_{dsmax} diminue quand le dopage augmente, à cause de la diminution de la densité de charge dans le puits quantique. En effet ; une augmentation du dopage, de type accepteur, dans la couche GaN doit entraîner une diminution du niveau de Fermi, d'où une diminution de la densité d'électrons dans le puits quantique.

Cette diminution de la densité d'électrons entraîne par contre, une augmentation de leur mobilité et une amélioration dans le comportement dynamique du dispositif.

En conclusion, une augmentation du dopage de type P dans la couche GaN entraîne une déplétion du puits quantique. Ceci est confirmé par une tension de seuil qui diminue fortement avec l'augmentation du dopage. Cependant, la transconductance augmente avec la diminution de la concentration de dopants, en raison de l'augmentation de la mobilité électronique.

III.6 Etude statique

III.6.1 Caractéristiques I_{ds} en fonction de V_{ds}

La figure III.10 représente les caractéristiques statiques de notre transistor HEMT AlGaIn/GaN. Il s'agit ici de calculer le courant I_{ds} circulant entre le Drain et la Source lorsque l'on fait croître la tension V_{ds} en maintenant la tension de commande Grille-Source V_{gs} à une valeur constante.

Sur ces courbes, trois régimes de fonctionnement sont observés :

- Le régime ohmique (a) : le courant I_{ds} croît de façon linéaire en fonction des tensions V_{ds} et V_{gs} . Cette zone est délimitée par la tension coude V_{knee} et I_{dsmax} .
- Le régime de saturation (b) : le courant I_{ds} est quasi-constant vis-à-vis de la tension Drain-Source mais croît avec la tension Grille-Source.
- L'avalanche (c) : le courant I_{ds} " s'emballe " jusqu'à destruction du composant.

Nous apportons ici quelques détails sur ces trois zones de fonctionnement du transistor :

(a) Pour de faibles valeurs de la tension Drain-Source : plus cette tension augmente et plus la mobilité des électrons dans le canal augmente, induisant un accroissement du courant I_{ds} . Plus la vitesse de saturation des électrons est faible et plus la tension coude V_{knee} sera petite.

(b) Au-delà de la tension coude : les électrons du canal atteignent leur vitesse de saturation. En conséquence, le courant I_{ds} atteint un certain niveau de saturation pour une tension de commande donnée.

(c) Lorsque le champ dans le canal atteint la valeur du champ critique de claquage, un phénomène d'avalanche se produit. En effet ; lorsque le champ atteint cette valeur correspondant à une tension Drain-Source V_{bd} (appelée tension de claquage ou breakdown voltage en anglais), de plus en plus d'électrons et de trous sont libérés jusqu'à une augmentation brutale et irréversible du courant I_{ds} ; le composant est finalement détruit. Cette

caractéristique est particulièrement importante en grand signal, car elle indique la limite des tensions de commande du transistor.

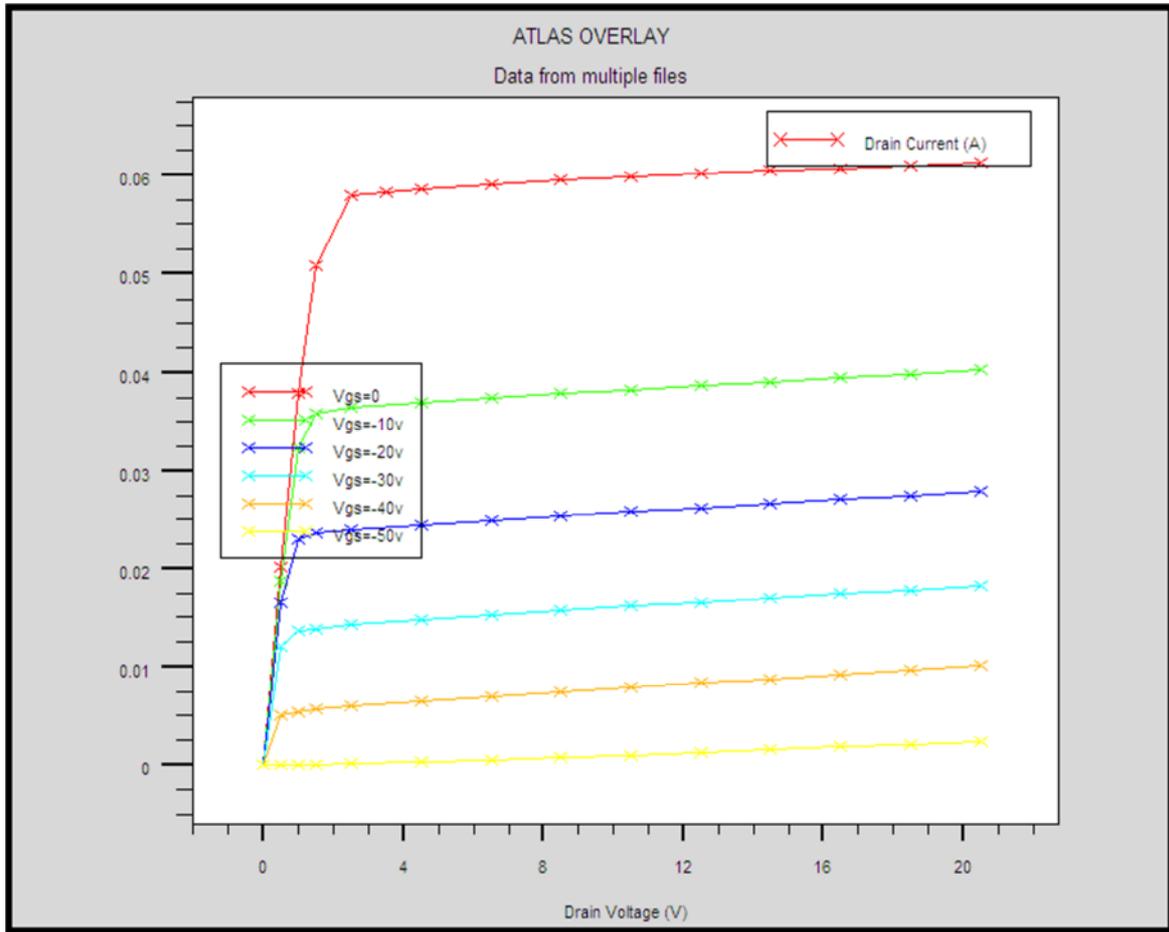


Figure III.10 : Caractéristique I_{ds} en fonction de V_{ds} , à des tensions V_{gs} constantes.

Lorsque l'on applique une tension de grille de plus en plus négative, le niveau de Fermi baisse par rapport aux énergies mises en jeu dans le canal, entraînant une diminution de la densité d'électrons dans le canal et donc une diminution du courant I_{ds} .

La concentration des porteurs dans le canal dépend fortement de l'épaisseur et du dopage de la zone de grand gap.

Pour obtenir une excursion courant/tension la plus grande possible, il faut que la tension coude V_{knee} soit la plus faible possible. La tension de coude étant dépendante de la résistance série R_{on} ; plus cette résistance est faible, plus faible est la tension de coude.

Ron étant inversement proportionnelle à la mobilité des porteurs ; avoir une faible valeur de V_{knee} , cela signifie que la mobilité des électrons est grande. Nous en trouvons une valeur de 2V, une très bonne valeur comparée à celles de la littérature.

L'effet Kink reste un phénomène peu expliqué dans les HEMTs et semble être lié à un phénomène d'ionisation par impact et d'effets de pièges. Il se traduit par une augmentation du courant de sortie au sein de la zone de saturation, même pour des valeurs de tensions Grille-Source très faibles. Cette augmentation de courant est à peine de 4mA dans notre simulation.

Dans les transistors à effet de champ, le mécanisme d'ionisation se produit dans le canal entre la Grille et le Drain, là où existent les plus forts champs électriques. Ce phénomène serait lié à la présence des états de pièges de surface, agrandissant la région déplétée entre Grille et Drain. Donc dans notre cas, nous n'avons pas dû observer une tension de claquage, car la distance Grille-Drain est supérieure à la zone déplétée.

L'augmentation de la température a pour conséquence de diminuer la mobilité des porteurs. Comme le claquage du canal est principalement dû à l'ionisation par impact qui dépend de la mobilité des porteurs. Donc, sous l'effet de la température, le phénomène d'ionisation par impact devrait intervenir à des tensions de polarisation plus élevées du fait d'une diminution de la mobilité, ce qui va entraîner une augmentation de la tension de claquage.

III.6.2 Fonction de transfert I_{ds} en fonction de V_{gs}

La caractéristique de transfert consiste à représenter le courant Drain-Source I_{ds} en fonction de la tension Grille-Source V_{gs} , pour une tension Drain-Source V_{ds} donnée. Il est possible de déterminer ainsi la tension de pincement V_{gs0} définie comme étant la tension de grille à appliquer, afin de vider le puits de potentiel de ses porteurs. On définit aussi la transconductance comme étant la pente de la caractéristique I_{ds} - V_{gs} . Toutes ces grandeurs sont illustrées par la figure III.11.

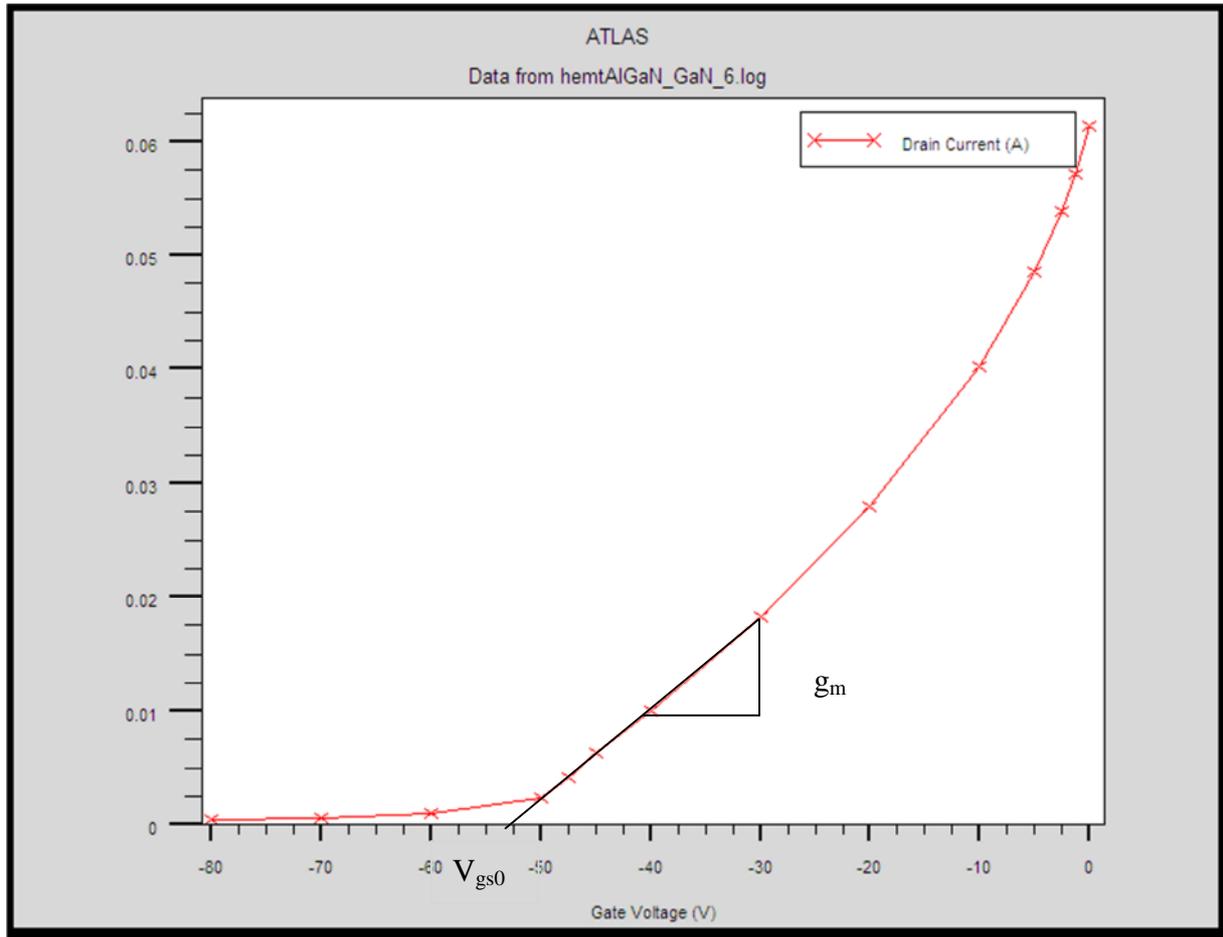


Figure III.11 : Evolution du courant de drain en fonction de la tension grille, à $V_{ds} = 20V$.

Nous trouvons une tension grille à partir de laquelle le courant de sortie I_{ds} est nul :

$$V_{gs0} = -53,5V$$

La transconductance est donnée par :

$$g_m = \frac{\Delta I_{ds}}{\Delta V_{gs}} = \frac{40.198 - 27.875}{-10 + 20} = 1.23mA/V$$

$$g_m = 1.23 \text{ mA/V}$$

$$\text{Soit : } g_m = 615 \text{ mS/mm}$$

Le HEMT se distingue des autres transistors à effet de champ par sa transconductance élevée.

La valeur que nous trouvons est parmi les meilleurs que nous avons trouvés dans la littérature.

III.7 Etude dynamique

III.7.1 Fréquence de transition

Les HEMTs se caractérisent également par deux autres paramètres généraux, la fréquence de transition et la fréquence maximale d'oscillation. La fréquence de transition f_t est la fréquence pour laquelle le module du gain en courant est égal à 1 (0dB).

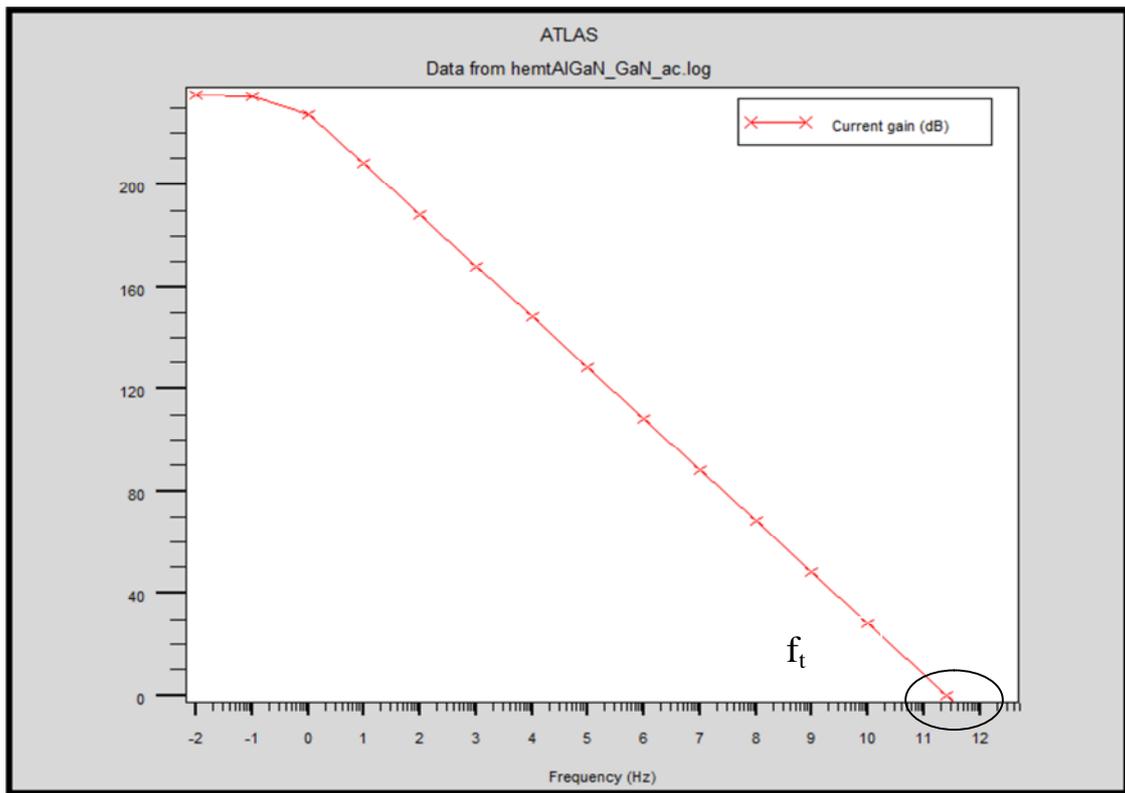


Figure III.12 : Evolution du gain en courant en fonction de la fréquence.

D'après la figure III.12, 0dB correspond à $\log(f_t) = 11,5$

Soit $f_t \approx 331$ GHz

III.7.2 Fréquence maximale

La fréquence maximale d'oscillation f_{max} caractérise en général la qualité de la technologie. Elle correspond à la fréquence maximale d'utilisation du transistor, pour laquelle le gain en puissance est égal à 1 (0dB).

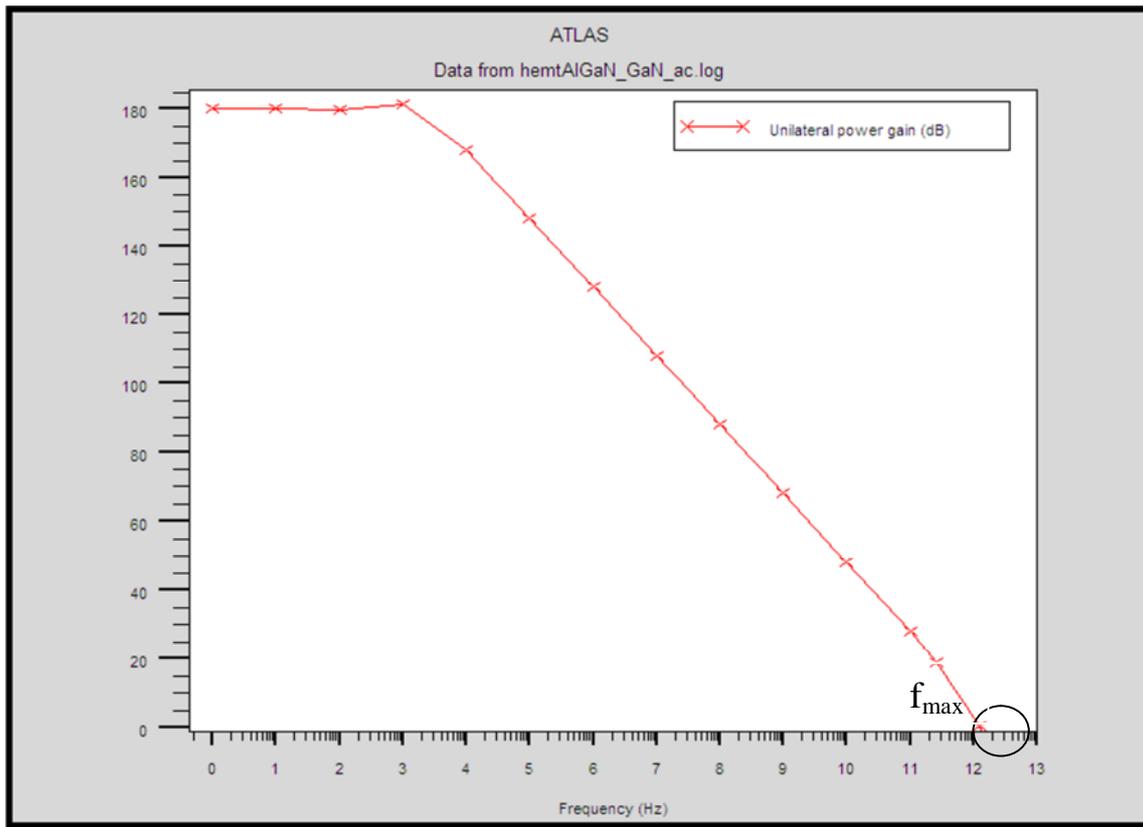


Figure III.13 : Evolution du gain en puissance, en fonction de la fréquence.

D'après la figure III.13, 0dB correspond environ à $\log(f_{\max}) = 12$

$$f_{\max} \approx 1\text{THz}$$

III.7.3 Fréquences de transition et maximale, en fonction de la tension Grille-Source

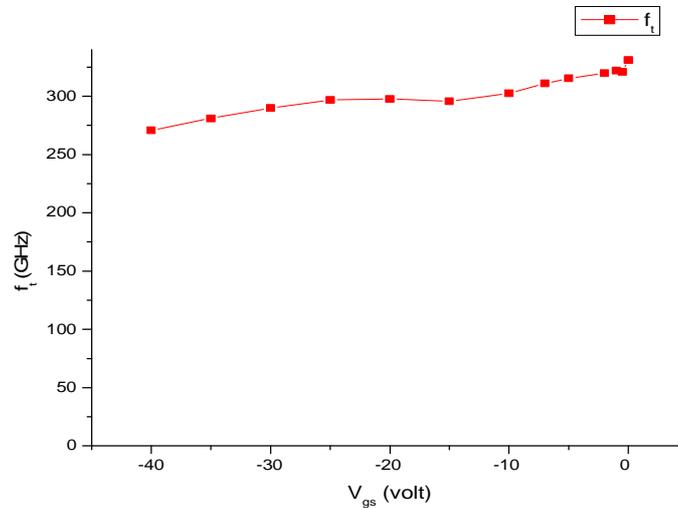


Figure III.14 : Evolution de la fréquence de transition en fonction de la tension Grille-Source.

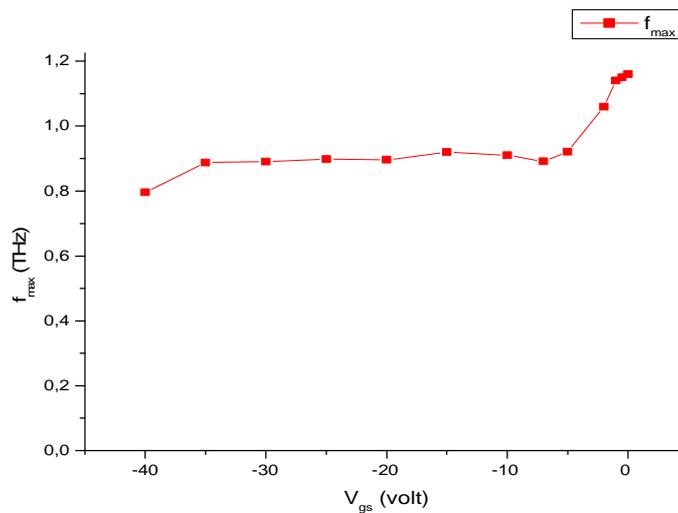


Figure III.15 : Evolution de la fréquence maximale en fonction de la tension Grille-Source.

Augmenter la tension grille revient à augmenter le champ interne qui agit sur le gaz d'électrons. De ce fait, la vitesse de saturation de ces derniers va diminuer ; et de même, la fréquence de transition va diminuer pratiquement d'une façon linéaire.

Il en est de même pour la fréquence maximale, surtout pour une tension de grille comprise entre 0 et -5V qui correspond à une grande diminution du courant de sortie.

III.7.4 Fréquences de transition et maximale, en fonction de la tension Drain-Source

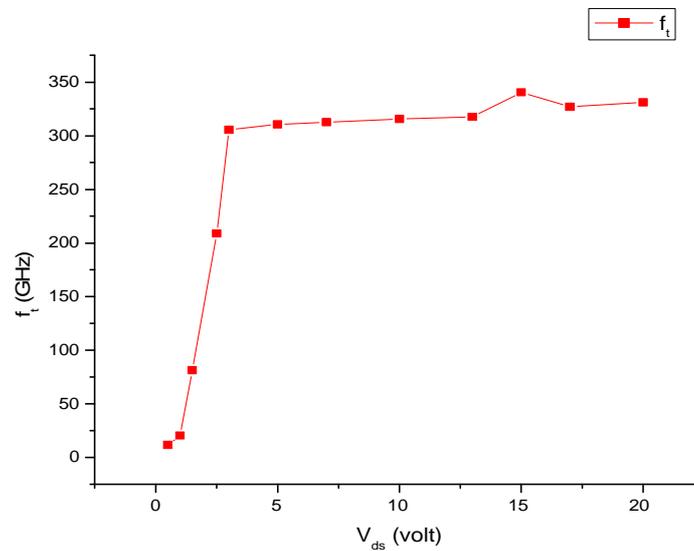


Figure III.16 : Evolution de la fréquence de transition en fonction de la tension Drain-Source.

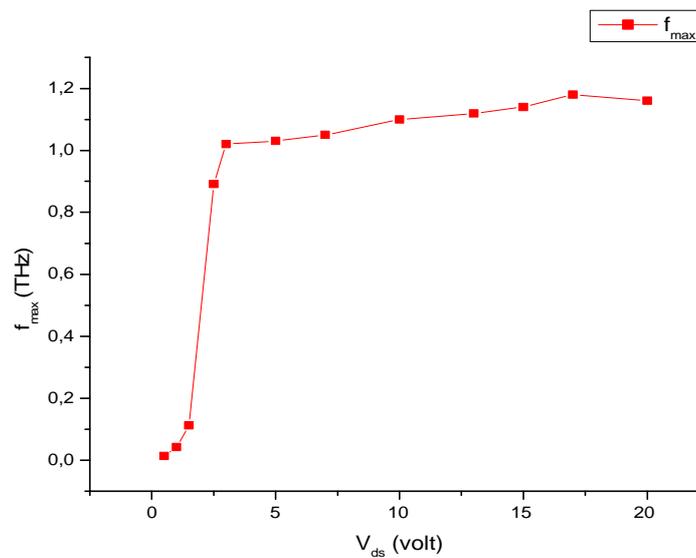


Figure III.17 : Evolution de la fréquence maximale en fonction de la tension Drain-Source.

A partir de la tension de coude, la fréquence de transition et la fréquence maximale augmentent avec la tension drain-source. Cela est dû à l'augmentation de la mobilité des électrons.

III.7.5 Comportement transitoire

Les pièges jouent un très grand rôle dans la dégradation des performances. Ils résultent de l'existence d'impuretés ou de défauts localisés à la surface de la structure et également dans le réseau cristallin. Les mesures en mode pulsé permettent de séparer les effets de piégeage et les effets thermiques. On évalue ainsi l'influence des pièges sur le comportement électrique des transistors HEMTs. Le « gate lag » et le « drain lag » sont deux phénomènes résultant de l'existence des pièges.

III.7.5.1 Gate lag

Les pièges responsables du « gate lag » sont généralement situés en dessous de la grille. L'interface entre le semiconducteur et le contact métallique doit être de très bonne qualité. Cette zone est très sensible aux effets de surface qui sont liés à la fois à la nature du cristal et à la technologie utilisée pour le dépôt métallique du contact Schottky. Ces effets de pièges de surface sont causés par les effets de surface, eux même créés par des défauts et dislocations dans le cristal proche de la surface. Des électrons sont alors piégés à la surface de la couche d'AlGaN, et ils affectent les caractéristiques du composant et dégradent les performances en puissance.

En effet ; lorsque la tension de grille passe de l'état OFF à l'état ON, le courant de sortie met plusieurs dizaines de microsecondes pour atteindre son état établi : c'est le comportement transitoire du courant de drain.

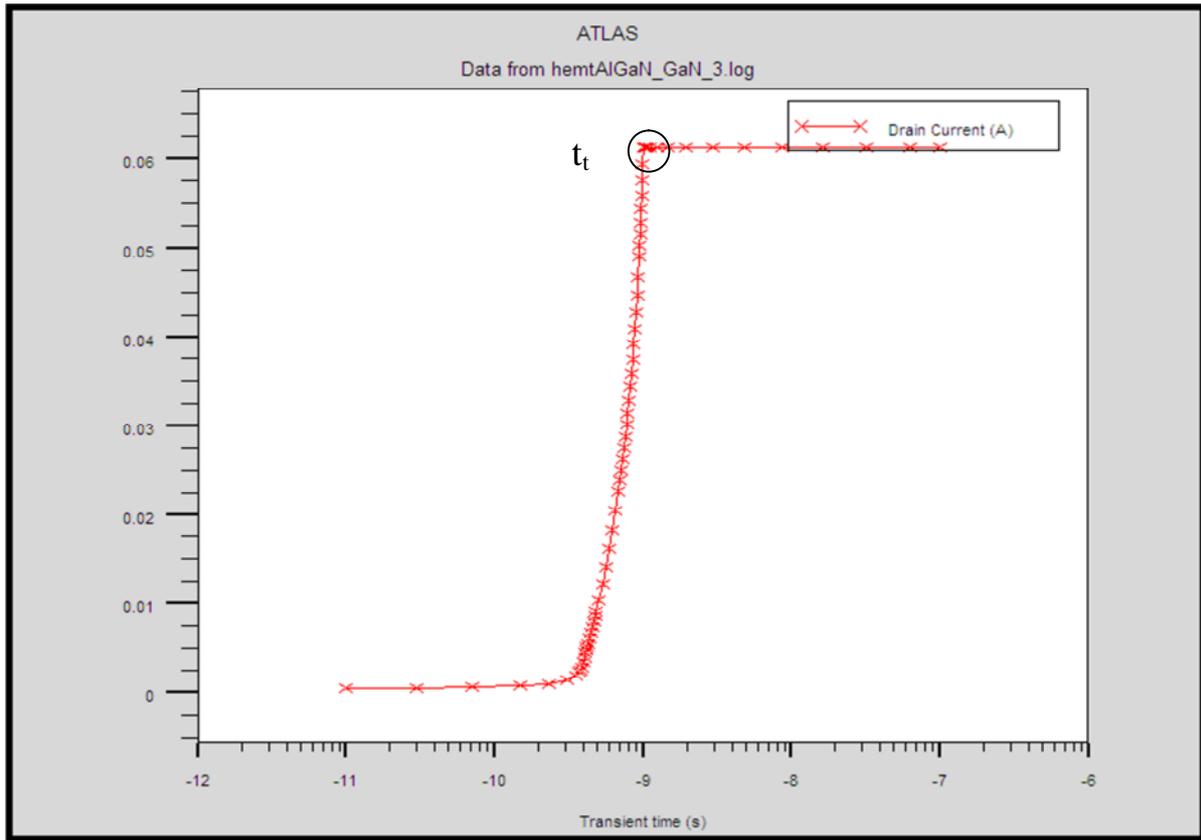


Figure III.18 : le courant drain en régime transitoire Gate lag.

III.7.5.2 Drain lag

Le terme « drain lag » est utilisé pour décrire le phénomène transitoire du courant de drain lorsque la tension de drain est pulsée de l'état OFF ($V_{ds} = 0$) à l'état ON ($V_{ds} > 0V$) pour une tension de grille constante. On observe alors une décroissance du courant I_d durant cette impulsion, si celle-ci est suffisamment longue.

Ce phénomène est lié à la présence de pièges dans le substrat semi-isolant et en surface dans l'espace grille-drain lors d'une variation rapide du champ électrique entre le drain et la source, les électrons provenant du canal peuvent alors être piégés. Ces électrons peuvent être ensuite réémis avec des constantes de temps plus longues. Au niveau du substrat l'équilibrage des charges implique alors l'apparition d'une zone chargée positivement à l'interface buffer-substrat dans le buffer GaN. Le gaz 2D est alors momentanément pincé par une deuxième grille au niveau de cette interface. Ce phénomène est appelé également « self-backgating », il dépend de la qualité résistive du substrat et de la qualité cristallographique du buffer.

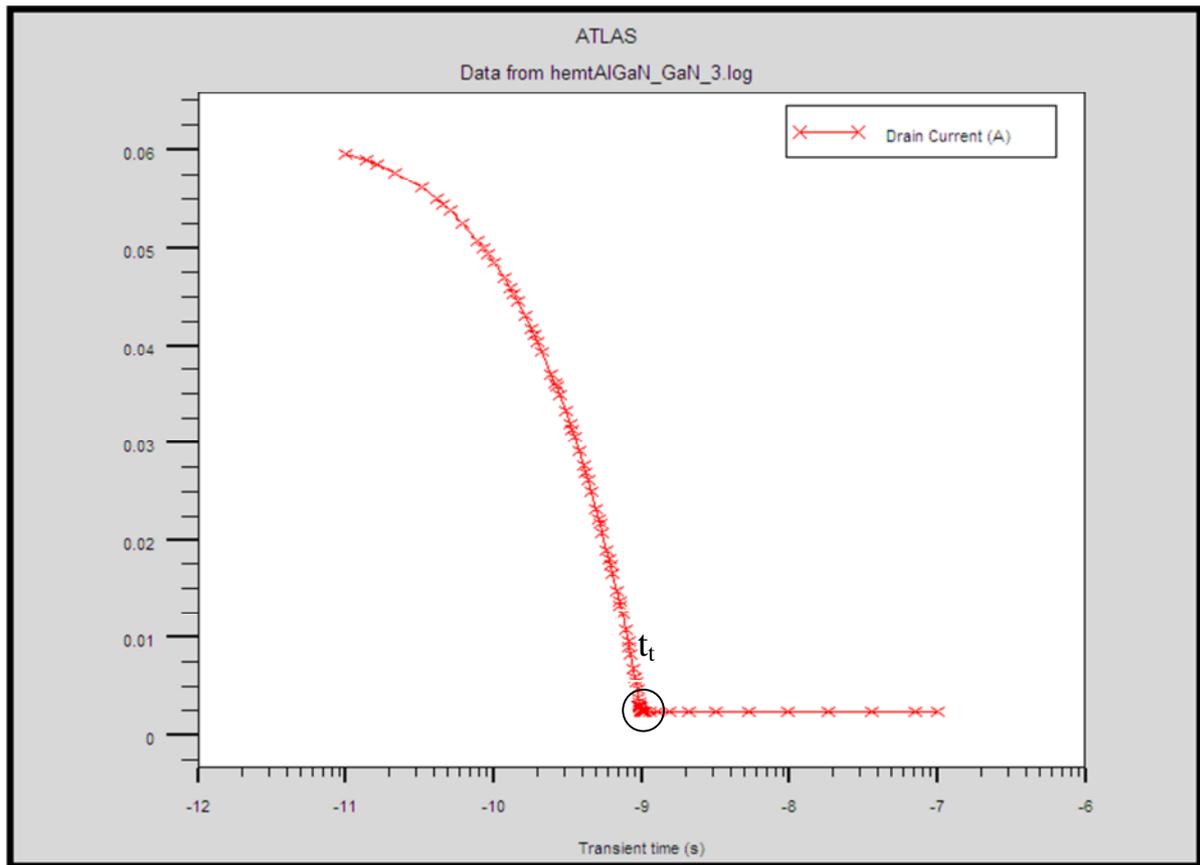


Figure III.19 : le courant drain en régime transitoire Drain lag.

Nous trouvons un temps transitoire responsable du gate lag égal à 1ns. Nous trouvons le même temps pour le drain lag ; c'est une bonne valeur, comparée à la littérature.

III.8 Influence de la température sur les caractéristiques de HEMT AlGaIn/GaN

III.8.1 Caractéristiques électriques statiques I_{ds} - V_{ds} - T .

Nous représentons dans ce paragraphe le réseau direct $I_{ds} = f(V_{ds})$ de notre transistor HEMT AlGaIn/GaN en fonction de la température, à V_{gs} nulle.

Les résultats sont présentés sur la figure III.20.

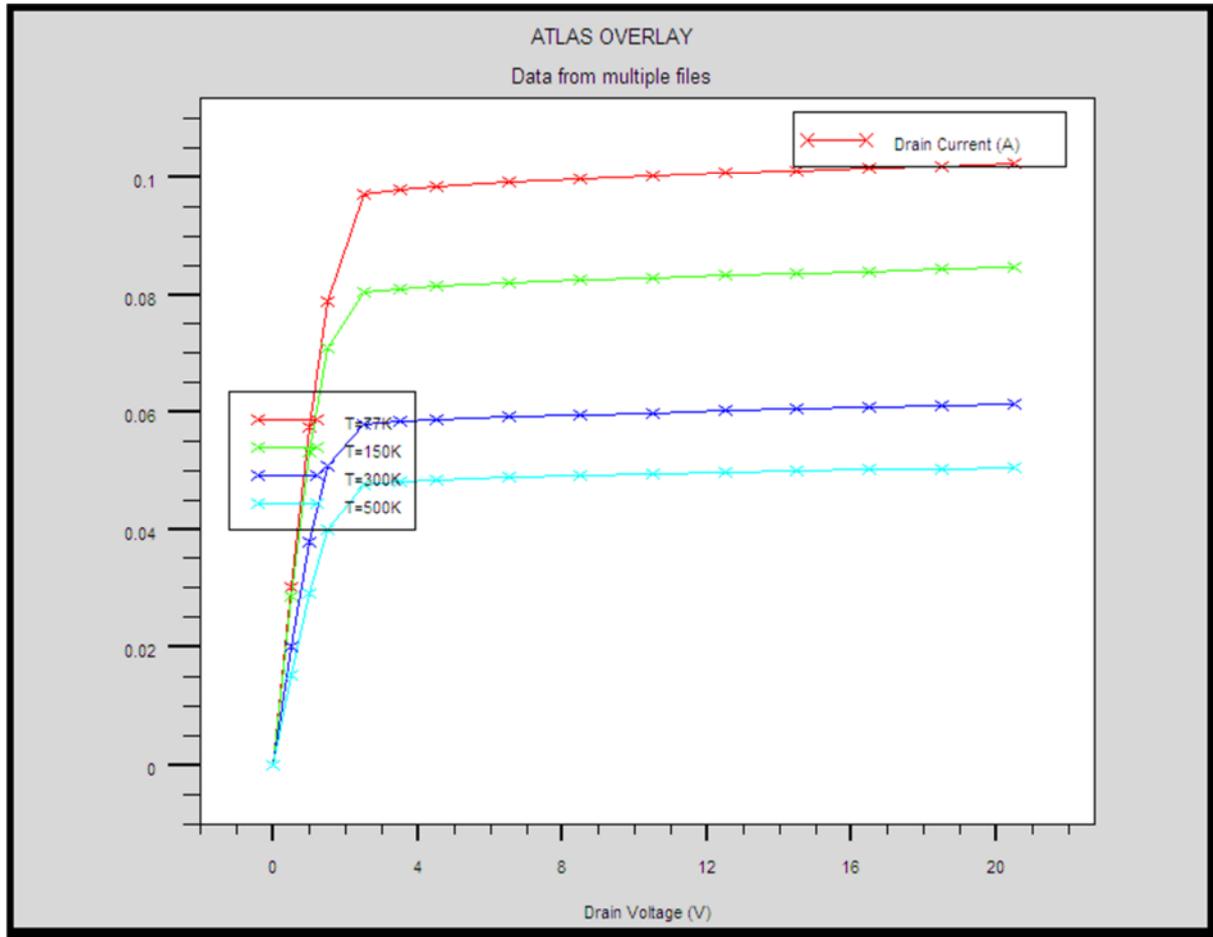


Figure III.20 : Caractéristiques I_{ds} - V_{ds} en fonction de la température, à V_{gs} nulle.

Le courant diminue lorsque la température augmente. La réduction du courant de saturation est provoquée par la dégradation de la mobilité des électrons en fonction de la température qui est due à l'augmentation des interactions. Il faut noter que la densité d'électrons reste insensible à la température.

III.8.2 Fonction de transfert I_{ds} - V_{gs} - T .

Nous représentons dans ce paragraphe la fonction $I_{ds} = f(V_{ds})$ de notre transistor HEMT AlGaN/GaN en fonction de la température, à $V_{ds} = 20$ Volts.

Les résultats sont présentés par la figure III.21.

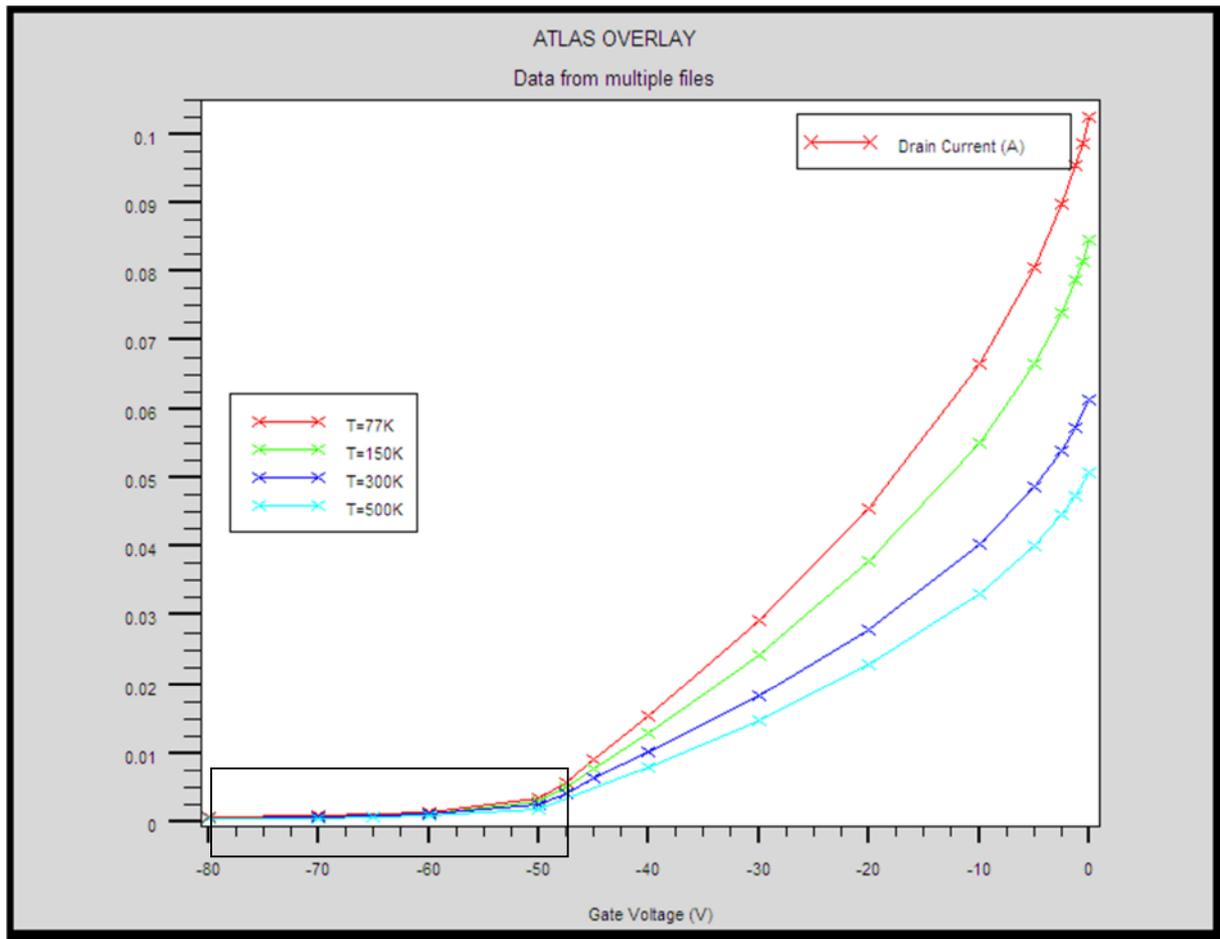
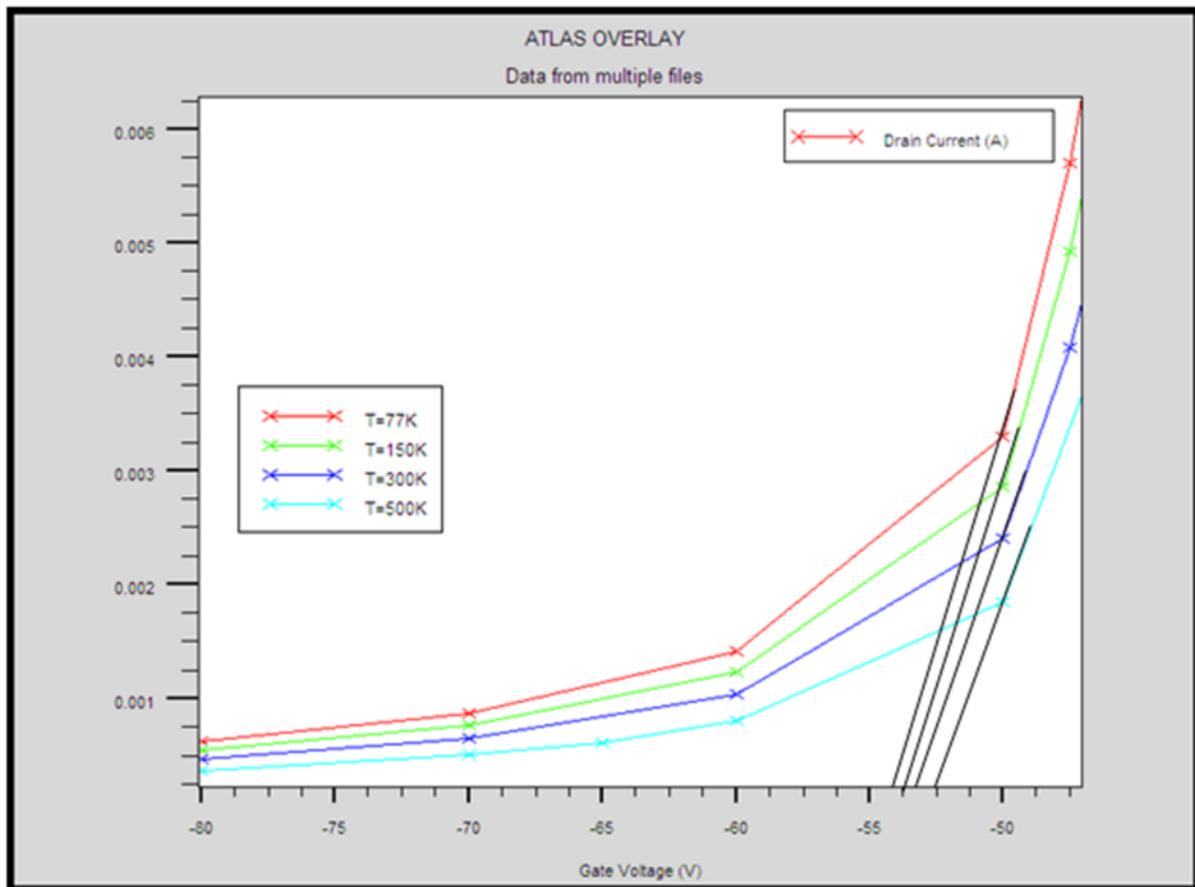


Figure III.21 : Caractéristiques I_{ds} - V_{gs} en fonction de la température à $V_{ds} = 20V$.

Nous faisons un zoom sur la partie encadrée pour tirer la tension V_{gs0} à chaque température, et tirer la transconductance aussi.



Les valeurs obtenues sont reportées dans le tableau ci-contre : la tension de pinch-off et la transconductance diminuent quand la température augmente ; cela signifie que les performances du transistor se dégradent.

Température (K)	77	150	300	500
Tension V_{gs0} (V)	-54	-53.75	-53.5	-52.5
Transconductance (mS/mm)	1045.45	858.9	616.15	512.95

Tableau III.2 : la tension de pincement V_{gs0} et la transconductance en fonction de la température.

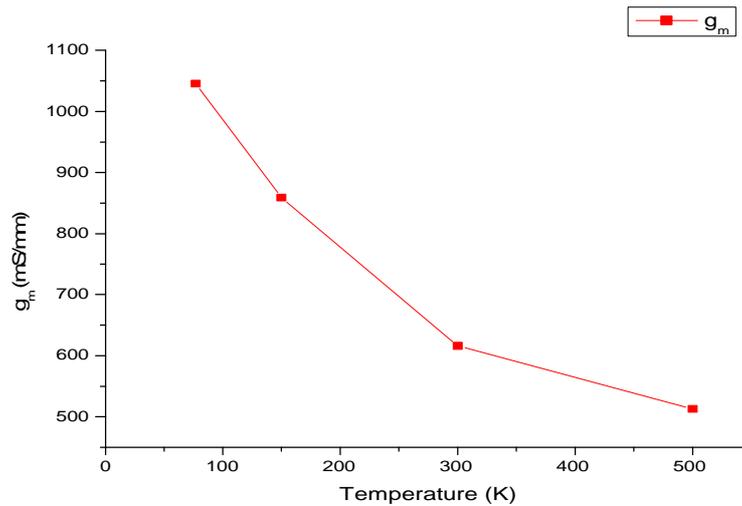


Figure III.22 : Evolution de la transconductance en fonction de la température.

III.8.3 Fréquences de transition et maximale, en fonction de la température

Il est utile aussi de voir l'évolution dynamique du transistor, notamment la variation des deux fréquences en fonction de la température ; les figures III.23 et III.24 illustrent le phénomène.

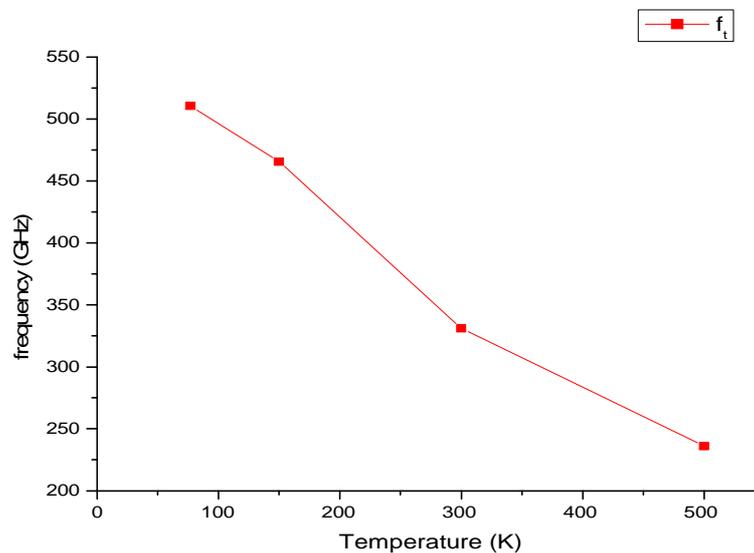


Figure III.23 : Evolution de la fréquence de transition en fonction de la température.

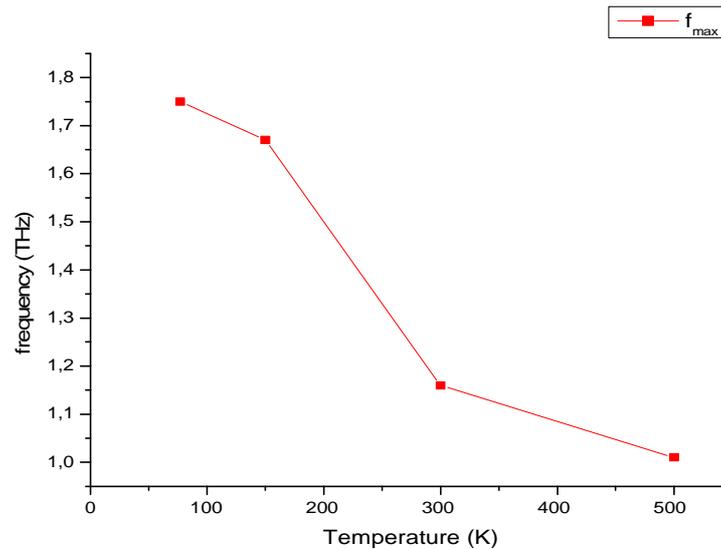


Figure III.24 : Evolution de la fréquence maximale en fonction de la température.

La fréquence de transition et la fréquence maximale diminuent considérablement quand la température augmente, ceci est logique car la mobilité des électrons diminuent aussi.

Le point le plus important qu'on peut tirer de ces dernières courbes, c'est le comportement dynamique du transistor à haute température. En effet ; à 500K qui est considérée comme une grande température de fonctionnement, on a une fréquence de transition de l'ordre de 230GHz et une fréquence maximale de l'ordre de 1THz. Cela signifie que le dispositif peut fonctionner dans des milieux hostiles à haute température.

III.9 Conclusion

Nous avons préféré de commencer directement notre travail avec une grille enterrée car elle donne de meilleures performances qu'une grille planaire. Cela est publié dans beaucoup de travaux. Nous avons aussi optimisé les espacements Grille-Source et Grille-Drain car ces derniers influencent aussi les performances de transistor.

Nous avons calculé les différentes caractéristiques en fonction des grandeurs internes du dispositif : les épaisseurs et les dopages des différentes couches. Ainsi, nous pourrions dire qu'un transistor HEMT AlGaN/GaN est optimisé pour ces grandeurs :

- La grille enterrée à $0.35\mu\text{m}$ de la largeur est de $0.1\mu\text{m}$.
- L'épaisseur de Cap layer GaN est de 1nm et son dopage est 5×10^{21} atomes/ cm^{-3} de type n.
- L'épaisseur de la couche supplémentaire AlGaN est de 3nm et non intentionnellement dopé.
- L'épaisseur de la couche donneuse AlGaN est de 15nm et son dopage est de 2×10^{20} atomes/ cm^{-3} de type n.
- L'épaisseur de la couche espaceur AlGaN est de 2nm et non intentionnellement dopé.
- L'épaisseur de la couche tampon GaN est de $1\mu\text{m}$ et non intentionnellement dopé.
- L'épaisseur de la couche de nucléation est de 250nm et non intentionnellement dopé.
- Le substrat est de saphir de l'épaisseur de $180\mu\text{m}$.

Conclusion générale et perspectives

Conclusion générale et perspectives

Nous avons exposé dans ce manuscrit les résultats de l'optimisation de la technologie des transistors HEMTs AlGa_N/Ga_N afin de fabriquer des composants performants.

Dans le premier chapitre, nous avons rappelé les propriétés physiques du matériau Ga_N. Cette analyse a montré les différences fondamentales existant entre ce matériau et les semiconducteurs III-V plus conventionnels tel que l'arséniure de gallium. Sa grande bande d'énergie interdite, sa vitesse de saturation élevée ainsi que ses aspects piézoélectriques en font un candidat idéal pour les applications de fortes puissances en hyperfréquence. Contrairement à d'autres semiconducteurs à grand gap tel que le carbure de silicium ou le diamant, le nitrure de gallium offre la possibilité de réaliser des alliages ternaires type AlGa_N, InGa_N ou AlIn_N, ce qui permet de réaliser des hétérojonctions à haute mobilité électronique utilisables pour la fabrication de transistors à effet de champ plus rapides.

Cependant ; au vu de ses paramètres physiques, ce matériau bénéficie d'un effort de recherche mondial important.

Dans le deuxième chapitre, nous avons expliqué la formation de 2DEG dans l'hétérostructure AlGa_N/Ga_N. Puis, nous avons étudié le principe de fonctionnement du transistor HEMT à base de AlGa_N/Ga_N, ainsi que ses caractéristiques électriques. Puis, nous avons expliqué les effets limitatifs du HEMT.

Au troisième chapitre, nous avons modélisé notre dispositif qui est le HEMT AlGa_N/Ga_N : nous avons calculé et interprété les différentes grandeurs. Pour cela, nous avons utilisé le logiciel de simulation : SILVACO.

L'optimisation de transistor HEMT comprend donc l'étude de l'influence des différents paramètres internes du transistor, tels que la configuration des contacts, les dopages résiduels dans les différentes couches, l'épaisseur de la couche donneuse AlGa_N et le taux d'aluminium, sur les caractéristiques électriques afin d'obtenir une structure conduisant un bon fonctionnement.

Nous avons obtenu des performances que nous jugeons très bonnes, comparées à celles de la littérature. Nous signalons que la fréquence maximale de 1THz n'a été obtenue que dans un seul travail.

Il serait souhaitable d'approfondir encore plus l'étude du transistor, en quête de meilleurs résultats. On pourrait utiliser le ternaire AlIn_N qui admet un meilleur accord de maille avec Ga_N, et diminuer les dimensions du dispositif pour aller vers la « Nanotechnologie ».

ملخص

تعتبر الترانزستورات عالية الحركة الالكترونية غير متجانسة البنية (HEMT) ذات أساس آزوتي من نوع AlGaN/GaN من بين أفضل الأنواع المستخدمة في الترددات المرتفعة، الاستطاعة، و الحرارة المرتفعة. لهذا المركب فوائد ذاتية تكمن في توتر الانفصام و سرعة التشبع العاليتين، ذات ثبات جيد و عالي في المجال الحراري و الكيميائي.

يعتمد عملنا على الدراسة بالمحاكاة للترانزستور HEMT، مع الاخذ بالاعتبار جميع التركيبات التي تؤثر على النتائج. كذلك يمكننا تحسين المركب.

الكلمات الرئيسية : ترانزستور (HEMT)، نترات الغاليوم (GaN)، نترات الالمينيوم القاليوم (AlGaN)،
.SILVACO

Résumé

A l'heure actuelle, les transistors à hétérostructures HEMT (High Electron Mobility Transistor) à base de nitrure type AlGaN/GaN apparaissent comme les meilleurs candidats pour les applications hyperfréquences, de puissance, et haut température. Les avantages intrinsèques de ces transistors résident dans une tension de claquage et une vitesse de saturation élevée, une grande linéarité, une bonne stabilité à haute température, une grande stabilité chimique.

Notre travail consiste à simuler un transistor HEMT AlGaN/GaN, on tenant compte de toutes les grandeurs qui puissent influencer ses performances. Ainsi, nous pourrions optimiser notre dispositif.

Mots clés : transistor à haute mobilité électroique (HEMT), nitrure de gallium (GaN), nitrure d'aluminium de gallium (AlGaN), SILVACO.

Abstract

At present, the heterostructures HEMT transistors (High Electron Mobility Transistor) of AlGaN/GaN type are the best candidates for the ultra high frequencies applications, high power, and high temperature. The intrinsic advantages of these transistors lie in a large breakdown voltage and a high saturation velocity of electrons, a great linearity, a good stability at high temperature, a great chemical stability.

Our work consists in simulating a transistor HEMT AlGaN/GaN, we take account of all the sizes which can influence its performances. Thus, we could optimize our device.

Keywords : High Electron Mobility Transistor (HEMT), gallium nitride (GaN), gallium aluminum nitride (AlGaN), SILVACO.