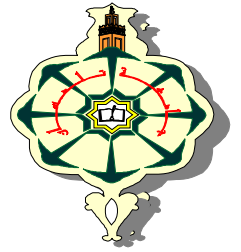




REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA
RECHERCHE SCIENTIFIQUE
UNIVERSITE ABOU-BEKR BELKAID –TLEMCEM-
FACULTE DES SCIENCES
UNITE DE RECHERCHE DES MATERIAUX ET DES ENERGIES
RENOUVELABLES



THESE DE DOCTORAT

Spécialité : Physique énergétique et matériaux
Thème

Etude des composés ternaires à base de nitrures,
en utilisant la méthode de simulation de Monte Carlo.

Présentée par : M^{me} **BACHIR - DAHMANI Nadia**
Soutenue le

Président	B. Benyoucef	Professeur	UAB, Tlemcen
Examineurs	B. Khelifa	Professeur	Université Lenz, France
	M. Kechouane	Professeur	USTHB, Alger
	A. Kadoune	Professeur	U D L, Sidi Bel Abbas
Directeur de thèse	N. E. Chabane Sari	Professeur	UAB, Tlemcen
Co- Directeur de thèse	A. Hamdoune	Maitre de conférences	UAB, Tlemcen

Année Universitaire 2009-2010

REMERCIEMENTS

Ce travail a été effectué, grâce à Dieu tout puissant, au sein de l'unité de recherche des matériaux et des énergies renouvelables du département de physique de la faculté des Sciences de l'Université Abou Bekr Belkaid de TLEMCEM, sous la direction du Professeur N.E Chabane Sari et Mr. A .Hamdoun Maitre de conférences à l'université de Tlemcene.

Je remercie vivement Mr N.E Chabane Sari, Professeur à l'université Abou Bekr Belkaid pour m'avoir dirigé au cours de ce travail et pour m'avoir fait profiter de sa grande culture scientifique. Qu'il trouve ici l'expression de mon profond respect.

J'exprime toute ma reconnaissance à Mr, A. Hamdoune, Maitre de Conférences à l'Université Abou Bekr Belkaid pour m'avoir guidé, pour son aide prestigieuse et pour les conseils qu'il a su me prodiguer.

Je remercie Mr B.Benyoucef, Professeur à l'Université Abou Bekr Belkaid de m'avoir accueilli dans son unité et d'avoir accepté de présider ce jury.

Je remercie également Mr. B. Khelifa, Professeur à l'Université de Lenz, en France pour l'honneur qu'il me fait en acceptant de juger ce travail,

Je remercie Mr. M. Kechouane, Professeur à l'Université des Sciences et technologies Houari Boumediène (USTHB), d'avoir accepté de juger cette thèse.

Je remercie Mr. A. Kadoune, professeur à l'Université Djilali Liabes, qui a accepté de faire parti de ce jury.

Mes remerciements s'adressent aussi à Mr.B. Bouazza, chargé de cours à l'Université Abou Bekr Belkaid, pour l'aide qu'il m'a apporté pour réaliser ce travail.

Enfin je remercie tous ceux qui ont participé à la réalisation de ce travail.

Nous utilisons cette méthode pour étudier le transport électrique dans les deux alliages AlGaN et InGaN pour différentes fractions molaires d'Al et d'In respectivement. Nous commençons par étudier les différentes interactions subies par les électrons durant leur mouvement pour différentes fractions molaires dans les deux alliages, et pour différentes températures. Puis ; nous étudions en régime stationnaire, l'effet de la teneur en aluminium et en indium sur l'énergie et la vitesse des électrons dans les deux alliages. Ensuite, nous calculons la vitesse des électrons pour différentes fractions molaires d'aluminium et d'indium en prenant comme paramètres la température et le dopage. Enfin, nous étudions le transport électrique en régime transitoire, pour différentes fractions molaires tout en faisant la relation des résultats obtenus avec l'application de ces alliages dans le domaine optoélectronique.

Sommaire

INTRODUCTION GENERALE	8
<u>Chapitre 1 : GENERALITES SUR LES TROIS NITRURES GaN, AlN ET InN</u>	
1.1 Introduction	12
1.2 Propriétés des nitrures	12
1.2.1 Propriétés structurales	12
1.2.1.1 Structure cristalline et Zone de Brillouin	12
a. Présentation des deux structures des nitrures	12
b- Zone de Brillouin	14
1.2.1.2 Paramètres de maille	15
1.2.1.3 Coefficients élastiques	15
1.2.1.4 Coefficients de dilatation thermique	16
1.2.1.5 Contraintes dans les couches des nitrures	17
1.2.2 Propriétés chimiques des nitrures	18
1.2.3 Propriétés électriques des nitrures	20
1.2.3.1 Nitrure de gallium	20
1-2-3-1-1 Dopage résiduel	21
1-2-3-1-2 Efficacité du dopage	21
1.2.3.2 Nitrure d'aluminium	21
1.2.3.3 Nitrure d'indium	22
1.2.4 Effet de la température sur la mobilité des porteurs libres	22
1.2.5 Effet de la concentration d'électrons sur la mobilité des porteurs libres	23
1.3 Croissance épitaxiale	23
1.3.1 Epitaxie en phase vapeur par la méthode des halogénures (EPVH)	24
1.3.2 Epitaxie en phase vapeur par pyrolyse d'organométalliques (EPVOM)	24
1.3.3 Epitaxie par jets moléculaires (EJM)	26
1.3.3.1 EJM par craquage d'ammoniac	26
1.3.3.2 EJM sous plasma d'azote	27
1.4 Substrats utilisés pour l'élaboration des nitrures	28
1.4.1 Les substrats les plus utilisés	29
1.4.1.1 Saphir	29
1.4.1.2 Carbure de silicium	30
1.4.1.3 Silicium	30
1.5 Polarisations spontanée et piézoélectrique	31
1.5.1 Propriétés piézoélectriques des nitrures	32
Références	34
<u>Chapitre 2 : PROPRIETES OPTOELECTRONIQUES DES TROIS NITRURES</u>	
2.1 Introduction	39
2.2 Situation des trois nitrures dans la famille des semiconducteurs	39
2.3 Structure des bandes d'énergie	40
2.3.1 Allure générale des bandes d'énergie	40
2.3.2 Forme de la bande de conduction au voisinage des minima	41

2.3.3 Concentration des électrons libres dans la bande de conduction et niveaux d'impuretés	42
2.3.4 Semi-conducteurs à l'équilibre : statistique d'occupation des niveaux profonds, compensation	43
2.3.5 Bandes interdites	43
2.4 Constantes diélectriques et indices de réfraction	44
2.5 Masses effectives	45
2.6 Phonons dans les nitrures en phase hexagonale	46
2.7 Emission de lumière	47
2.8 Propriétés optoélectroniques	49
2.8.1 Structure de bande, propriétés optiques et effets de contrainte	50
2.8.1.1 GaN	51
2.8.1.2 AlN	51
2.8.1.3 InN	54
2.8.2 Effet de la température sur la luminescence dans GaN	55
2.8.3 Effet du dopage sur la luminescence Dans le GaN	56
2.8.3.1 Dopage n	57
2.8.3.2 Dopage p	58
2.8.3.3 Codopage	58
2.9 Diodes électroluminescentes (D.E.L) bleues à base de GaN	59
2.10 Lasers à base de GaN	60
Références	63

Chapitre 3 : PROPRIETES DES ALLIAGES AlGaN ET InGaN

3.1 Introduction	68
3.2 Propriétés du composé ternaire $Al_xGa_{1-x}N$	68
3.2.1 Variation du gap en fonction de la fraction de mole x (Al)	70
3.2.1.1 bowing	71
3.2.2 Dopage	71
3.2.2.1 Dopage de type n	72
3.2.2.2 Dopage de type p	72
3.2.2.3 Codopage	73
3.2.2.4 Dopage modulé spatialement	73
3.2.3 Réalisation de super réseaux	73
3.2.4 Contacts ohmiques	73
3.3 Propriétés du composé ternaire $In_xGa_{1-x}N$	74
3.3.1 Formules de Vegard et Phillips	74
3.3.1.1 Variation du gap en fonction de la fraction de mole x (In)	74
3.3.1.2 Bowing	75
3.3.2 Stabilité et solubilité	75
3.4 Elaboration des alliages ternaires	76
3.4.1 AlGaN	76
3.4.1.1 Principe	76
3.4.1.2 Incorporation d'Al dans GaN	77
3.4.1.3 Incorporation de Ga dans AlN	79

3.4.2 InGaN	80
3.4.2.1 Incorporation d'In dans GaN	80
3.5 Croissance des ternaires $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$	71
3.5.1 Difficultés spécifiques	71
3.5.2 Diagramme de croissance classique d' $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ en MBE	71
3.5.3 Utilisation de l'indium comme surfactant	82
3.6 Croissance du ternaire $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$	83
3.7 Détermination de la composition des alliages	83
3.7.1 Détermination de la composition de l'AlGaN	83
3.7.1.1 Principe	83
3.7.2 Détermination de la composition de l'InGaN	86
3.8 Etude des propriétés optiques d'AlGaN et InGaN	87
3.8.1 Vitesse de saturation dans $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ et $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$, en fonction de x	87
3.8.1.1 Vitesse de saturation des électrons dans $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$	87
3.8.1.2 Vitesse de saturation des électrons dans $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$	88
3.8.2 Mobilité des électrons dans $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ et $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$, en fonction de x	88
3.8.2.1 Mobilité des électrons dans $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$, en fonction de x	89
3.8.2.2 Mobilité des électrons dans $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$, en fonction de x	89
3.8.3 Longueurs d'ondes émises par $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ et $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$, en fonction de x	90
3.8.3.1 Variation de la longueur d'onde émise par $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$, en fonction de x	90
3.8.3.2 Variation de la longueur d'onde émise par $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$, en fonction de x	91
3.9. Détermination de l'énergie de transition	91
3.9.1 Principe	91
3.9.2 Evolution de la transition bord de bande, avec la concentration en aluminium	93
3.9.3 Effet de la température sur l'émission bord de bande	93
3.9.4 Nature du gap dans les alliages AlGaN cubiques	94
3.9.4.1 Etude du seuil d'absorption directe, en réflectivité	94
3.9.4.2 Spectres de photoluminescence pour l'étude de la nature du gap	96
3.10 Spectre de photoluminescence dans AlGaN	97
3.11 Luminescence dans InGaN	98
3.12 Effet de la température sur la photoluminescence dans InGaN	99
Références	100

Chapitre 4 : ETUDE THEORIQUE DU TRANSPORT ELECTRIQUE DANS LES COMPOSES TERNAIRES

4.1 Introduction	104
4.2 Equation de Boltzmann pour un gaz d'électrons	104
4.2.1 Approximation semi classique	104
4.2.2 Formulation de l'équation de Boltzmann	104
4.2.3 Equation de Boltzmann dans l'approximation du temps de relaxation	105
4.2.4 Limites de validité de l'équation de Boltzmann	106
4.2.4.1-Séparation des échelles de temps	106
4.2.4.2 Limitation quantique	106
4.2.5 Probabilité d'interaction	106
4.3 Les interactions subies par les électrons durant leur mouvement	107

4.3.1 Interactions électrons-phonons	107
4.3.1.1 Vibrations réticulaires dans les composés III-V	107
4.3.1.2 Description générale des interactions électron-phonon	108
4.3.1.3 Interactions élastiques	110
4.3.1.3.1 Interactions acoustiques	110
4.3.1.3.2 Interactions piézoélectriques	111
4.3.1.4 Interactions inélastiques	112
4.3.1.4.1 Interactions optiques polaires	112
4.3.1.4.2 Interactions optiques intervallées équivalentes et non équivalentes	114
4.3.1.4.3 Interactions optiques non polaires	116
4.3.2 Interaction avec les impuretés ionisées	116
4.3.3 Interaction des électrons avec les centres Coulombiens	118
4.3.4 Phénomène d'ionisation par impact	119
4.3.5 Interactions prépondérantes dans les semi-conducteurs ternaires	120
4.3.6 Influence de la position de l'électron sur la nature de l'interaction	120
4.3.7 Dépendance des énergies de phonons dans AlGaN, sur la composition	121
4.4 Rendement de la luminescence d'un semiconducteur	122
4.4.1 Le mécanisme de transfert d'énergie avec les phonons	122
4.4.2 Les recombinaison Auger	122
4.5 Mobilité électronique	125
4.5.1 Temps de relaxation du courant	125
4.5.2 Calcul de la mobilité	125
4.6 Transport des charges en régime stationnaire : caractéristique vitesse-champ	126
4.6.1 Vitesse et mobilité différentielles	126
4.6.2 Coefficient de diffusion	128
4.7 Transport en régime non stationnaire	129
4.7.1 Phénomène de survitesse	129
4.7.2 Equations de relaxation de l'impulsion et de l'énergie	131
a) L'équation de relaxation de l'énergie moyenne	132
b) l'équation de relaxation de la quantité de mouvement moyenne	132
Références	134

Chapitre 5 : PRESENTATION DE LA METHODE DE SIMULATION DE MONTE CARLO

5.1 Introduction	136
5.2 Principe de la méthode	136
5.3 Approche et mise en œuvre de la méthode	138
5.4 Présentation du logiciel	139
5.5 Méthode du self scattering	140
5.6 Les différents éléments de la simulation	141
5.7 Temps de vol libre	142
5.8 Mouvement des électrons	143
5.9 Choix des angles de déviation	144
5.10 Procédure du choix d'interaction	145
5.11 Génération des nombres aléatoires	146

5.11.1 Génération des nombres aléatoires, avec une loi de probabilité	147
5.11.1.1 Méthode directe	147
5.11.1.2 Méthode du rejet	147
5.11.1.3 Méthode combinée	148
5.12 Etapes de calcul	149
5.13 Description de logiciel	181
Références	152

Chapitre 6 : RESULTATS DE LA SIMULATION MONTE CARLO SUR LE

<u>TRANSPORT ELECTRIQUE DANS LES COMPOSES TERNAIRES AlGaN et InGaN</u>	
6.1 Introduction	155
6.2 Résultats de la simulation au régime stationnaire	155
6.2.1 Interactions élastiques	156
6.2.1.1 Interactions piézoélectriques	156
6.2.1.2 Interactions acoustiques	160
6.2.2 Interactions inélastiques	164
6.2.2.1 Interactions intervallées d'absorption et d'émission	164
6.2.2.2 Interactions intravallées	168
6.2.2.3 Interactions optiques polaires	171
6.2.3 L'effet de la température sur les interactions	175
6.2.4 Vitesse et énergie en fonction du champ électrique	195
6.2.5 Résultats du transport électrique en régime stationnaire	196
6.2.5.1 Energie en fonction du champ électrique	196
6.2.5.2 Vitesse en fonction du champ électrique	198
6.2.5.2.1 Vitesse en fonction du champ électrique pour différentes températures	200
6.2.5.2.2 Vitesse en fonction du champ électrique pour différentes concentration d'électrons	207
6.2.6 Résultats du transport électrique en régime transitoire	211
6.2.6.1 Vitesse en fonction du temps	212
6.3 Conclusion	216
<u>CONCLUSION GENERALE</u>	218

Introduction générale

Introduction générale

De nombreuses études ont été effectuées, et ne cessent de faire l'objet de plusieurs recherches sur le nitrure de gallium (GaN), le nitrure d'aluminium (AlN), le nitrure d'indium (InN), leurs alliages ternaires AlGaN et InGaN, et aussi leur alliage quaternaire AlInGaN, dans la phase hexagonale et plus récemment dans la phase cubique.

Ces semi-conducteurs qui ont des bandes interdites directes offrent un énorme potentiel pour les dispositifs optoélectroniques. Le gap dans ces matériaux est situé entre 1.8 eV pour InN et 6.2 eV pour AlN. Ils sont de bons candidats à la réalisation des dispositifs émettant aussi bien dans le spectre visible que dans l'ultraviolet proche et l'ultraviolet lointain ; ils sont particulièrement utilisés dans la fabrication des diodes électroluminescentes vertes, bleues et violettes ; ainsi que dans les diodes lasers bleues. Ils trouvent aussi une grande place dans le domaine militaire.

Dans le domaine de l'électronique ; leurs remarquables propriétés de transport électrique ainsi leur possibilité de former des hétérojonctions de type I dans les transistors à effet de champ, les rendent très attrayants pour les applications en haute fréquence, haute température et haute puissance.

Dans notre travail ; nous nous intéressons à l'étude du transport électrique dans les composés ternaires AlGaN et InGaN, en utilisant la méthode de simulation de Monte Carlo. Nous présentons notre travail selon les étapes suivantes :

Dans le premier chapitre, nous donnons des généralités sur les composés III-N, en particulier les trois nitrures GaN, AlN et InN : nous présentons leurs propriétés structurales, chimiques et électriques ainsi que les différentes méthodes de leurs croissances et les différents substrats utilisés.

Dans le second chapitre, nous parlons des propriétés optoélectroniques des trois nitrures : les formes des bandes d'énergies, les différentes techniques de dopage et l'émission de lumière.

Nous consacrons le troisième chapitre aux composés ternaires AlGaN et InGaN, nous présentons leurs propriétés optiques et les différentes techniques de leurs élaborations.

Dans le quatrième chapitre, nous étudions le phénomène de transport et des principales interactions dans les deux alliages.

Au cinquième chapitre, nous donnons les différentes étapes de la méthode de simulation de Monte Carlo.

Enfin dans le dernier chapitre, nous utilisons cette méthode pour déterminer les propriétés dans les composés ternaires AlGaN et InGaN cubiques. Dans le régime stationnaire ; nous

calculons l'évolution de la vitesse et de l'énergie des électrons en fonction du champ électrique, pour différentes températures et différentes concentrations d'électrons. Dans le régime transitoire ; nous calculons la variation de la vitesse en fonction du temps.

Notre étude est portée sur ces alliages dans leurs formes cubiques ; d'intenses recherches y sont menées actuellement car elles présentent des propriétés électriques et optiques plus intéressantes que les formes hexagonales.

Chapitre I :

Généralités sur les nitrures

Chapitre 1 : Généralité sur les nitrures

1.1 Introduction :

Les nitrures d'éléments III ont été très tôt synthétisés (1932) [1] et étudiés. Les premiers monocristaux de GaN de grande surface ont été épitaxiés sur substrats saphir par épitaxie en phase vapeur par la méthode des halogénures (EPVH). Ces couches épaisses ($\geq 100 \mu\text{m}$) ont permis d'obtenir dès 1971[2] les principales propriétés optiques, à savoir une bonne estimation de la bande d'énergie interdite (gap) et l'ordre des trois bandes de valence (la phase la plus stable de GaN est la structure wurtzite). La grande largeur de la bande interdite des nitrures et la possibilité d'alliages entre les trois nitrures GaN, InN et AlN ont rapidement suscité de grands espoirs pour ces matériaux en tant qu'émetteurs ou détecteurs de lumière visible ou ultra-violette (UV). En 1971, Pankove *et al.* [2] ont réalisé un premier dispositif électroluminescent basé sur une structure Schottky métal-isolant-semiconducteur. Mais, malgré d'importants efforts dans le courant des années 1970, notamment dans la recherche de dopants adéquats, les nitrures sont longtemps restés un sujet très marginal par rapport aux autres composés III-V et à leurs développements [3].

1.2 Propriétés des nitrures :

1.2.1 Propriétés structurales :

1.2.1.1 Structure cristalline et zone de Brillouin:

a) Présentation des deux structures des nitrures :

Les nitrures cristallisent sous deux formes : cubique et hexagonale.

- La structure cubique dite "Zinc Blende", thermodynamiquement métastable, est présentée sur la figure 1.1. Cette structure, qui s'apparente à celle du diamant (C, Ge, Si, etc.), est constituée de deux sous réseaux cubiques faces centrées (cfc), l'un comprenant des atomes de la colonne III et l'autre des atomes de la colonne V, interpénétrés et décalés l'un par rapport à l'autre du quart de la diagonale principale, c'est-à-dire de $a\sqrt{3}/4$ [111], où a représente le paramètre de maille du matériau.

De ce fait, dans les matériaux III-N, les liaisons atomiques ne sont pas simplement covalentes comme dans le silicium. Elles reposent sur le transfert d'électrons des atomes du groupe V sur ceux du groupe III. Dans le cas de GaN, AlN et InN, l'azote possède cinq électrons périphériques et le gallium, l'indium et l'Aluminium, trois. Dans le cristal de GaN, chaque atome d'azote est entouré de quatre atomes de gallium, et chaque atome de gallium est entouré de quatre atomes d'azote. Il se produit alors un échange d'électrons, et le cristal se

construit avec les ions N^- et Ga^+ , qui ont tous quatre électrons périphériques. Cette répartition est à l'origine du caractère partiellement ionique et partiellement covalent des liaisons, qui sont orientées dans l'espace suivant les axes de symétrie d'un tétraèdre régulier. On les appelle les semi-conducteurs polaires [4].

- La phase hexagonale dite « wurtzite », est thermodynamiquement stable. Elle est composée de deux réseaux hexagonaux comprenant chacun un type d'atomes, interpénétrés et décalés de $5/8^{\text{ème}}$ de la maille élémentaire.

La phase cubique est caractérisée par une séquence d'empilement des bicouches cation-anion, où chaque cation (anion) est lié avec quatre anions (cations). Les bicouches s'empilent selon trois positions distinctes : ...ABCABC... suivant la direction cristallographique $\langle 111 \rangle$. Pour la structure hexagonale, la séquence d'empilement est ...ABABAB... [5]. Les deux structures diffèrent uniquement au niveau de la séquence d'empilement des plans cristallins : l'entourage cristallographique des atomes ne diffère qu'à partir du troisième voisin.

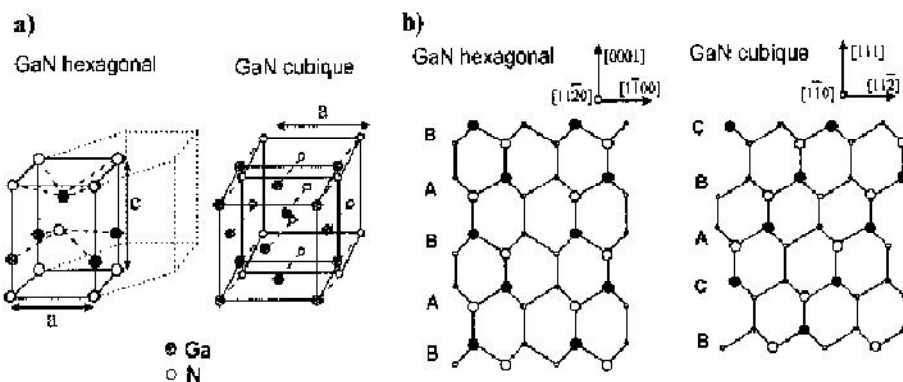


Figure 1.1 a) Arrangement des atomes dans la maille élémentaire de GaN et b) Séquences d'empilement des atomes dans les plans $\{11-20\}$ et $\{1-10\}$ des structures hexagonale et cubique, respectivement [6].

La forme cubique des nitrures, a été observée pour la première fois sous forme d'inclusions dans la structure hexagonale. Cependant, son obtention n'a pas été intentionnelle et n'a pas été prise au sérieux. Mais les calculs théoriques qui ont été faits sur ses paramètres électriques et optiques, ont montré qu'elle présente plusieurs avantages par rapport à l'hexagonale grâce à sa haute symétrie. Du point de vue technologique ; elle est plus facile à cliver pour réaliser des cavités lasers ; et son élaboration sur substrats conducteurs permettrait son intégration microélectronique. Les nitrures hexagonaux sont couramment élaborés sur substrat saphir qui est un isolant thermique et électrique ; ils sont alors difficiles à intégrer dans la microélectronique.

Plusieurs chercheurs se sont intéressés à l'élaboration des nitrures cubiques et à l'étude de leurs paramètres. Cependant, le problème majeur dans la forme cubique est son instabilité thermodynamique ; ce qui la rend difficile à obtenir. Les récents progrès de croissance : l'épitaxie en phase vapeur aux organométalliques (EPVOM) et l'épitaxie par jets moléculaires (EJM) ont permis de déposer des couches épaisses de bonne qualité, et de fabriquer des dispositifs à base des nitrures cubiques.

b- Zone de Brillouin :

Pour un cristal périodique, les paramètres internes ont la périodicité du réseau. Le réseau direct est défini par la première zone de Brillouin.

Les grandeurs physiques dans le cristal 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 dans l'espace réciproque, il suffit de les avoir pour la première zone de Brillouin.

Rappelons que la zone de Brillouin des réseaux cfc a la forme d'un octaèdre tronqué par les six faces d'un cube (figure 1.2). 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).

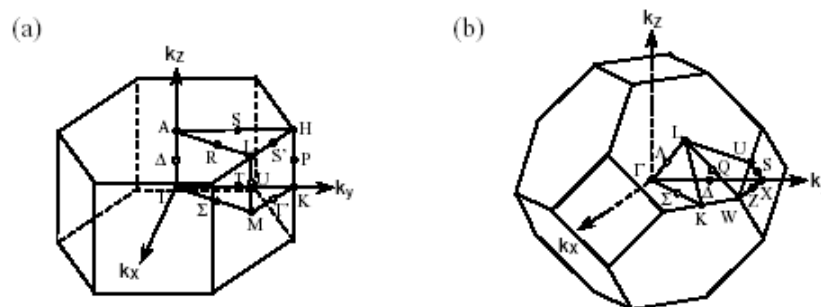


Figure 1.2: Les zones de Brillouin des deux structures : (a) wurtzite et (b) zinc blende [6].

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

Pour la structure hexagonale, la première zone de Brillouin est donnée par la figure 1.3.

1.2.1.2 Paramètres de maille :

Dans la structure hexagonale, il y a deux paramètres de maille : ‘‘a’’ dans le plan et ‘‘c’’ hors plan. Dans la structure cubique, la distance entre les plans atomiques est la même en raison de symétrie dans cette structure. Le tableau 1.1 résume quelques paramètres des nitrures dans leur structure hexagonale.

Phase hexagonale	a en Å	c en Å	c/a expérience	c/a calcul	u en Å
GaN	3.189 ± 0.001	5.185 ± 0.001	1.626	1.633	0.376
AlN	3.110 ± 0.003	4.980 ± 0.003	1.601	1.619	0.38
InN	3.54 ± 0.01	5.70 ± 0.01	1.610	1.627	0.377

Tableau 1.1 : Valeurs expérimentales et théoriques des paramètres de maille et de la distance u entre les anions et les cations pour les nitrures d’élément III en phase hexagonale [7].

En première approximation, la valeur du paramètre du réseau de la structure cubique est donnée en fonction de celle de la structure hexagonale par la formule suivante [5] :

$$a_{zB} = \sqrt{2} a_{wz} \quad (1.7)$$

Le tableau 1.2 donne les paramètres de maille des trois nitrures dans leur phase cubique.

La différence entre les valeurs expérimentales et théoriques est due aux différences dans la qualité structurale et les contraintes existantes dans les couches.

Matériau	Valeur théorique a ₀ (Å) calculée par les méthodes empiriques [8]			Valeur expérimentale a ₀ (Å)
GaN	4.423	4.462	4.452	4.50 [9] 4.53 [10]
AlN	4.301	4.392	4.34	4.38 [11] 4.3996 [12]
InN	4.996	4.392	4.981	4.98 [13] 4.97 [14]

Tableau 1.2 Paramètre de maille a, des structures dans la phase cubique, théorique et expérimental [5].

1.2.1.3 Coefficients élastiques :

Les coefficients élastiques des nitrures cubiques ont été calculés par plusieurs chercheurs ; ils sont donnés par le tableau 1.3

Matériau	Coefficients élastiques (GPa)				Module de compression élastique	Paramètre de Kleinman
	C ₁₁	C ₁₂	C ₁₃	C ₁₄		
GaN	239	159	155	200	203	0.61
	296	154	206	225	201	0.50
AlN	304	160	193	237	208	0.55
	304	152	199	230	203	0.60
	348	168	135			
InN	187	125	86	138	146	0.80
	184	116	177	209	139	0.70

Tableau 1.3 Constantes élastiques des nitrures dans la phase cubique [5].

Les coefficients élastiques de l'AlN sont les plus grands, par ailleurs, ceux du GaN sont plus importants que ceux de l'InN. Il est à noter aussi que le plus petit module de compression élastique B est celui de l'InN, celui du GaN et de l'AlN sont proches. Cela signifie que le GaN et l'AlN sont plus rigides que l'InN. Le Paramètre de Kleinman indique la position relative du cation et de l'anion quand le réseau cristallin est soumis à une contrainte à volume constant.

Pour GaN, AlN et InN hexagonaux : les coefficients élastiques sont donnés dans le tableau 1.4.

Matériau	C ₁₁ (GPa)	C ₁₂ (GPa)	C ₁₃ (GPa)	C ₃₃ (GPa)	C ₄₄ (GPa)	C ₆₆ (GPa)	Paramètre de Kleinman (ζ _{wz})
GaN	390	145	106	398	105	123	0.66
							0.11
AlN	396	137	108	373	116	207	0.76
							0.12
InN	223	115	92	224	48	141	0.88
							0.14

Tableau 1.4 Coefficients élastiques des nitrures dans la phase hexagonale [15].

Dans la structure hexagonale, les coefficients élastiques de l'InN et du GaN sont proches, tandis que ceux de l'AlN sont plus petits.

1.2.1.4 Coefficients de dilatation thermique :

Les paramètres de maille changeront si les coefficients de dilatation thermique de la couche épitaxiée et ceux du substrat sont différents. Pour cela, il est indispensable de connaître les coefficients de dilatation thermique du réseau cristallin de chaque matériau. Pour les nitrures cubiques, ces coefficients n'ont pas été déterminés expérimentalement. Si on considère que la longueur des liaisons est la même dans les deux phases, on pourra supposer que les

coefficients trouvés pour la forme hexagonale sont valables pour la phase cubique. Le tableau 1.5 résume ces paramètres.

Matériau	$\Delta c/c$ ($\times 10^{-6} \text{ K}^{-1}$)
GaN	3.17 (300-700 °K) et 7.75 (700-900 °K)
AlN	1.583 (Linéaire entre 293 et 1700°K)
InN	3.75- 5.7 (260- 800 °K)

Tableau 1.5 Coefficient de dilatation thermique des nitrures dans la phase hexagonale [5].

Le tableau 1.6 résume les paramètres de maille et les coefficients de dilatation thermique des trois nitrures et des différents substrats.

	a (Å)	c (Å)	α (a) ($\times 10^{-6}/\text{K}$)	α (c) ($\times 10^{-6}/\text{K}$)
AlN	3.111	4.980	5.3	4.2
GaN	3.1878	5.1850	5.59	7.75
InN	3.544	5.718		
Al ₂ O ₃	4.758	12.991	7.5	8.5
3C-SiC	4.358		4.7	
6H-SiC	3.080	15.12	4.2	4.0
Si	5.430		2.59	
MgAl ₂ O ₄	8.083		7.45	
γ -LiAlO ₂	5.169	6.267	7.1	7.5
β -LiGaO ₂	5.402, b=6.372	5.007		
ZnO	3.252	5.213	2.90	4.75

Tableau 1.6 Paramètres de maille et coefficients de dilatation thermique des nitrures et de divers substrats utilisés pour leur épitaxie [3].

Les paramètres de maille des nitrures sont proches, avec une légère hausse pour InN. Les coefficients de dilatation thermique d'InN ne sont pas encore bien définis, cela est dû à la difficulté de son élaboration et la complexité de ces paramètres. La différence du coefficient de dilatation thermique α (c) et $\Delta c/c$ dans les tableaux I.5 et I.6, est due à la qualité du matériau et la température à laquelle est mesuré le coefficient.

1.2.1.5 Contraintes dans les couches de nitrure :

Pendant la croissance épitaxiale, la couche (de nitrure) peut être déformée après une certaine épaisseur s'il y a un désaccord entre les paramètres de maille ou entre 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 [5].

Le désaccord de maille entre la couche et le substrat se traduit par l'équation :

$$\frac{\Delta a}{a} = \frac{a_0 - a_s}{a_s} \quad (1.8)$$

où a_0 et a_s sont les paramètres de maille hors plan de la couche entièrement relaxée et du substrat, respectivement.

$$a_0 = \frac{a_{\perp} + \left(\frac{2\nu}{1-\nu}\right)a_{//}}{1 + \left(\frac{2\nu}{1-\nu}\right)} \quad (1.9)$$

$a_{//}$ et a_{\perp} sont les valeurs des paramètres de maille dans le plan et hors plan, de la couche non relaxée. Le coefficient de poisson dans l'axe de croissance (la direction $\langle 111 \rangle$) est donné

$$\text{par : } \nu = \frac{C_{12}}{C_{11} + C_{12}} \quad (1.10)$$

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

$$\left\{ \begin{array}{l} \varepsilon_{\text{dans le plan}} = \frac{a_{//} - a_0}{a_0} \end{array} \right. \quad (1.11)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \varepsilon_{\text{hors plan}} = \frac{a_{\perp} - a_0}{a_0} \end{array} \right. \quad (1.12)$$

La contrainte thermo-élastique emmagasinée par la couche pendant un refroidissement ou un changement de température, est donnée par la formule :

$$\frac{\Delta a}{a} = \Delta T (\alpha_s - \alpha_{\text{couche}}) \quad (1.13)$$

où $\Delta T = (T_i - T_f)$ représente la différence de température, et α_s , α_{couche} sont les coefficients de dilatation thermique du substrat et de la couche, respectivement. T_i et T_f sont les températures de l'état initial et de l'état final.

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

1.2.2 Propriétés chimiques des nitrures [9] :

- GaN a été analysé la première fois par Johnson et al. en 1928 [1] qui a noté que le nitrure de gallium est un composé extrêmement stable. C'est cette stabilité chimique aux

températures élevées, combinée avec son large gap, qui a fait du GaN un matériau attractif pour des dispositifs à hautes températures et dans les environnements caustiques. GaN est également un excellent candidat pour les couches protectrices, en raison de sa dureté. Cependant ; la majorité des travaux sur GaN portent sur ses applications dans les semi-conducteurs. Tandis que la stabilité thermique du GaN pourrait permettre un développement des études à hautes températures, la stabilité chimique du GaN présente un déficit 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.

Seulement deux groupes ont décrit les caractéristiques de gravure chimique humide du GaN connu pour sa haute qualité. Maruska et Tietjen [16] ont rapporté que GaN était insoluble dans l'eau, les acides, ou les bases à température ambiante, mais il se dissout dans les solutions alcalines chaudes à un taux très lent. Pankove [17] n'a pas pu pas graver GaN dans NaOH à cause de la formation d'une couche de GaOH sur la surface. Un matériau de moindre qualité a été observé en 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 de beaucoup de chercheurs.

- AlN présente une résistance à la gravure chimique comme GaN. Il y a eu un grand nombre d'expériences de gravures d'AlN, mais elles ne sont pas nombreuses celle qui ont donnée l'AlN de bonne qualité. La chimie de surface de l'AlN a été étudiée par de nombreuses techniques, (spectroscopie d'électrons d'Auger, spectroscopie de photoémission des rayons X (x-ray Photoemission Spectroscopy) (XPS), spectroscopie de photoélectrons de rayons ultraviolets, et spectroscopie d'électrons). Slack et McNelly [18] ont indiqué que l'AlN développe en surface de l'oxyde d'épaisseur 50 - 100 Å lorsqu'il reste exposé pendant une journée à température ambiante. Toutefois, cette couche d'oxyde sert comme protection, et aucune décomposition des échantillons de l'AlN n'a été observée.

- Il ya eu plusieurs études qui ont indiqué une dissociation rapide de l'InN à des températures supérieures à 500 ° C. Depuis il n'y a pas eu de l'InN de haute qualité développé, la résistance du matériau à la gravure chimique est inconnue. Wakahara et al [19] ont signalé la gravure réussie des films de l'InN dans une solution chaude de H₃P₄: H₂S₄.

1.2.3 Propriétés électriques des nitrures [20] :

1.2.3.1 Nitrure de Gallium :

Le contrôle des propriétés électriques du GaN reste un obstacle devant les chercheurs. On a observé GaN dopé n involontairement dans tous les cas lors de la croissance. Les meilleurs échantillons montrent un taux de concentration d'électrons $n = 4 \times 10^{16}/\text{cm}^3$ [21]. Aucune impureté ne s'est avérée présente en quantité suffisante pour expliquer l'origine des porteurs. Ainsi les chercheurs ont attribué ce dopage aux défauts intrinsèques soupçonnés être dus au manque d'Azote. Tous les efforts, pour obtenir le GaN dopé p ont eu comme conséquence des films fortement compensés et hautement résistants. Le développement d'une technique pour obtenir le GaN de type p demeure un défi pour les chercheurs. Plusieurs groupes de chercheurs ont rapporté les caractéristiques électriques du GaN involontairement dopé. Leurs mesures ont changé considérablement, reflétant la qualité et la pureté de cristal de leur matériau. Nakamura. [21] a rapporté les plus hautes mobilités du GaN. A la température ambiante et liquidation de l'Azote ; il a mesuré les mobilités, avec une concentration de porteurs de $n = 4 \times 10^{16}/\text{cm}^3$ et $n = 8 \times 10^{15}/\text{cm}^3$ et les résultats trouvés étaient $\mu_n = \sim 600 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ et de $\mu_n = \sim 1500 \text{ cm}^2/\text{Vs}$. Ilegems. et Montgomery. [22] ont accompli les mesures de Hall, en fonction de la température variant de 10 à 900 K sur GaN ayant une concentration d'électron de $n = 3 \times 10^{17}/\text{cm}^3$ à la température ambiante et une mobilité de $\mu_n = 300 \text{ cm}^2/\text{Vs}$. Ces résultats sont résumés dans la figure 1.4. Dans leurs meilleures couches, le pic de la mobilité était de $800 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ à une température de 150k, et une mobilité décroissante pour les faibles températures.

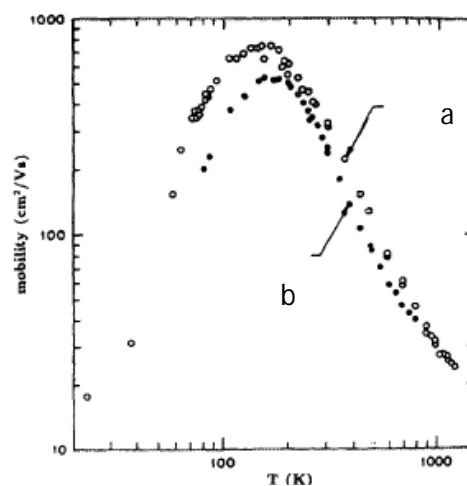


Figure 1.3 : La mobilité en fonction de la température pour des concentrations de GaN : à $n=2 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ et b : $4 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ [20].

1.2.3.1.1 Dopage résiduel [5] :

Le GaN est dopé naturellement n avec une concentration d'électrons variant de 10^{16} à 10^{19} cm^{-3} . Dans le cas où la concentration résiduelle des impuretés est faible, la concentration résiduelle des électrons est de l'ordre de $4 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ pour GaN hexagonal [5]. Pour obtenir un dopage p, il faut réduire la densité des donneurs résiduels pour empêcher le phénomène de compensation. L'auto-compensation peut provenir non seulement d'une variation de la concentration des électrons et des trous des impuretés résiduelles mais aussi d'une variation de la concentration des impuretés natives qui sont des lacunes de Ga et de N.

Pour GaN cubique épitaxié sur GaAs, le dopage résiduel est plus faible que celui du GaN hexagonal. As. et Coll.[23] ont trouvé que pour des films de GaN élaborés dans des conditions riches en Ga, la concentration d'électrons est de l'ordre de 10^{14} cm^{-3} , et pour des films faits dans des conditions riches en N, la concentration des électrons est de l'ordre de 10^{12} cm^{-3} . Cela montre que les problèmes d'auto compensation sont plus faibles pour GaN cubique.

1.2.3.1.2 Efficacité du dopage [5] :

Le dopage intentionnel du GaN hexagonal se fait habituellement avec du Si pour obtenir le type n et avec du Mg pour avoir le type p. Le dopage n ne présente pas de difficultés et le dopage p se fait par la réactivation thermique ou par irradiation d'électrons des films dopés Mg. Ces opérations sont assurées par des techniques utilisant des précurseurs avec de l'hydrogène. Le Mg introduit un niveau accepteur profond, de l'ordre de 200 meV. Ce fait pose une limitation du dopage p basé sur Mg car son efficacité est limitée. Ainsi, une concentration maximale de trous de 10^{17} cm^{-3} a été obtenue pour une concentration de Mg de 10^{19} cm^{-3} ; au delà de cette valeur, on a constaté une dégradation de la cristallographie du film. Pour GaN cubique les niveaux accepteurs seraient superficiels et le dopage p serait plus facile à réaliser.

1.2.3.2 Nitrure d'aluminium :

La caractérisation électrique a généralement été limitée à cause des mesures de résistivité due à la faible concentration des porteurs intrinsèque et la concentration des défauts et les niveaux d'énergie des impuretés dans l'AlN. Les chercheurs ont observé que la le cristal de l'AlN pur transparent, a une résistivité $\rho = 10^{11}-10^{13} \Omega \text{ cm}$ [24, 25]. Toutefois, ils ont constaté que les cristaux impurs, qui présentent une couleur bleue, peut-être en raison de la présence de Al_2OC , a une résistivité beaucoup plus faible $\rho = 10^3-10^5 \Omega \text{ cm}$ [24, 25]. Les chercheurs Chu et al. [26] ont réussi l'obtention de l'AlN de type n et p en introduisant de Hg et du Se,

respectivement, mais la résistivité de leur produit est trop élevée pour permettre la détermination des concentrations des porteurs [20].

1.2.3.3 Nitrure d'indium :

Il y a eu peu de rapports décrivant les propriétés électriques de l'InN. La plupart des échantillons de l'InN étudié à ce jour ont des concentrations d'électrons n supérieure à $10^{18}/\text{cm}^3$ [5]. On croit que les postes vacants de l'azote sont la cause de la grande concentration d'électrons. Les chercheurs ont indiqué l'effet de la température sur la concentration des porteurs et la mobilité des électrons dans l'InN polycristallin. A la température ambiante, la concentration des porteurs est de $5 \times 10^{16}/\text{cm}^3$, qui diminue à un minimum de $3 \times 10^{16}/\text{cm}^3$ à 150 K. La mobilité d'électrons à la température ambiante, est de $2700 \text{ cm}^2/\text{Vs}$, et elle atteint une valeur maximale de $5000 \text{ cm}^2/\text{Vs}$ à 150 K [20].

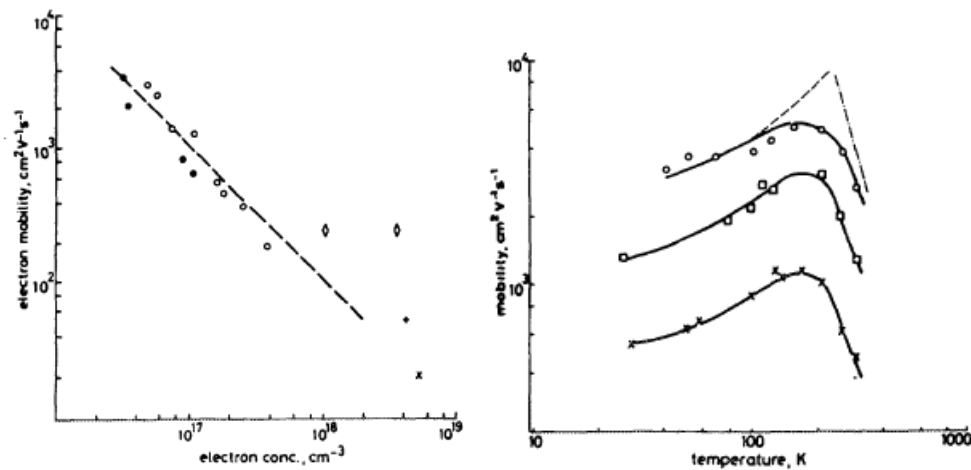


Figure 1.4 : la mobilité en fonction de la concentration et la température [20].

1.2.4 Effet de la température sur la mobilité des porteurs libres

Chin et al. [27] ont calculé les mobilités électroniques dans GaN, InN et AlN, en fonction de la compensation. A basse température ($T < 200 \text{ K}$), les principaux mécanismes de diffusion sont la diffusion sur les phonons acoustiques par effet piézoélectrique, et sur les impuretés ionisées. A plus haute température, la diffusion par phonons optiques polaires domine. Le maximum de mobilité se situe entre 100 et 200K. A 300K, la mobilité électronique maximum prévue est de $1000 \text{ cm}^2/\text{V.s}$ [27] en accord avec les meilleurs résultats expérimentaux, qui sont de l'ordre de $900 \text{ cm}^2/\text{V.s}$, pour des échantillons hétéroépitaxiés par EPVOM [28] (Epitaxie en phase vapeur par pyrolyse d'organo-métalliques) ou EPVH [29] (Epitaxie en phase vapeur par la méthode des halogénures), dans ce dernier cas pour des couches épaisses de $74 \mu\text{m}$.

Dans les nitrures, il est aussi nécessaire de prendre en compte un mécanisme supplémentaire de diffusion : la diffusion par les lignes de dislocations chargées [30]. Les dislocations, notamment les coins, créent des niveaux dans le gap, qui peuvent être peuplés d'électrons [31], ce qui limite la mobilité transversale. *Dans le cadre de la règle de Matthiessen*, ceci ajoute un terme [32]:

$$\mu_{\text{dis}} \approx [30(2\pi)^{1/2}\varepsilon^2 d^2 (kT)^{3/2}] / [N_{\text{dis}} e^3 f^2 \lambda_D m^{1/2}] \quad (1-14)$$

où N_{dis} est la densité de dislocations traversantes, d la distance entre niveaux accepteurs (i.e. le paramètre c), f est la fraction de ces niveaux occupés ($f \sim 1$), [30] et λ_D la longueur de Debye dans l'échantillon ($\lambda_D = (\varepsilon kT / e^2 n)^{1/2}$). Pour GaN de type n, les dislocations doivent donc être aussi prises en compte pour la compensation : elles peuvent être à l'origine de $\sim 2 \times 10^7 N_{\text{dis}}$ niveaux accepteurs occupés/cm³. Le modèle décrit par l'équation (1-14) prévoit une mobilité thermiquement activée.

1.2.5 Effet de la concentration d'électrons sur la mobilité des porteurs libres

La figure 1.6 montre, en fonction de la densité de porteurs, la mobilité électronique à 300 K, de GaN de haute qualité épitaxié sur saphir.

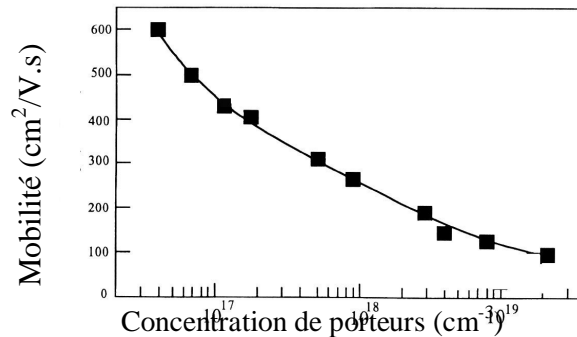


Figure 1.5 : mobilités électroniques en fonction de la densité de porteurs à température ambiante dans GaN de type n dopé Si, épitaxié sur saphir [3].

1.3 Croissance épitaxiale [3] :

La discussion précédente sur les substrats montre déjà combien l'obtention de couches épitaxiales de nitrures de bonne qualité optoélectronique est rude et complexe. La diversité des couches tampons nécessaires, des cycles de température, etc...se traduit par la même diversité selon non seulement les techniques de croissance utilisées, mais aussi selon les auteurs, et chaque type de réacteur nécessite la mise au point de sa propre procédure. Les présentations qui suivent sont des généralités illustrant les possibilités de chaque méthode de croissance.

1.3.1 Epitaxie en phase vapeur par la méthode des halogénures (EPVH) [3] :

C'est historiquement la première technique d'épitaxie utilisée pour la croissance de GaN, et elle a permis les premières études physiques de ce matériau.

Dans la croissance de GaN, l'azote est transporté sous forme d'ammoniac, et le gallium par réaction entre le métal et HCl vers 900°C. Une variante consiste à utiliser le chlorure volatil GaCl₃ introduit par bullage. Les températures de croissance sont typiquement 1050-1100°C [33]. Le gaz vecteur est généralement H₂, N₂ [34] ou un gaz rare. Tous les substrats usuels peuvent être utilisés. Dans le cas du saphir, certains auteurs préconisent un prétraitement sous NH₃ ou GaCl [35] ou ZnO [29]. En EPVH, la croissance d'un tampon basse température n'est pas nécessaire. Cette technique produit des couches de GaN de bonne qualité: les densités de dislocations sont dans la gamme des 10⁸-10⁹ cm⁻². Le dopage n résiduel est autour de 10¹⁷ cm⁻³, d'origine principale l'oxygène [36] et le silicium [37]. Les mobilités électroniques sont supérieures à 500 cm²/V.s.

Outre le fait qu'elle permet l'épitaxie de GaN de bonne qualité, l'EPVH présente un intérêt particulier dans le cas des nitrures : elle permet l'obtention de grandes vitesses de croissance [38], jusqu'à 100 μm/h, sans préjudice pour la qualité électronique du matériau.

1.3.2 Epitaxie en phase vapeur par pyrolyse d'organo-métalliques (EPVOM) [3] :

L'épitaxie en phase vapeur par pyrolyse d'organo-métalliques (EPVOM) a permis l'émergence des nitrures d'éléments III dans le monde de l'électronique. C'est avec cette technique que la croissance à deux étapes a été développée et qu'une conductivité de type p a été obtenue avec le dopage magnésium.

L'EPVOM utilise la réaction, au dessus du substrat chauffé à la température de croissance, d'hydrures d'éléments V (AsH₃, PH₃, NH₃) et de composés organo-métalliques volatils d'éléments III. Pour l'aluminium, le gallium et l'indium, ce sont les composés triméthyl , ou triéthyl qui sont couramment utilisés. La croissance a lieu dans un réacteur à parois froides (contrairement à l'EPVH), à pression atmosphérique ou sous basse pression. Le suscepteur, sur lequel est placé le substrat, est chauffé par induction ou radiation. En EPVOM, la première étape de l'épitaxie de GaN sur saphir est un traitement haute température du substrat, généralement en présence d'ammoniac, puis le dépôt d'un 'tampon' déposé à basse température (typiquement 550-600°C). Ce tampon est indispensable pour l'obtention d'une bonne qualité électronique, quelque soit le substrat. Ce tampon peut être AlN, méthode d'Akasaki [33], ou GaN, méthode de Nakamura [39]. Les deux techniques donnant de bons résultats. Il sert de couche de nucléation pour la couche épitaxiale proprement dite. Ce tampon

polycristallin, polyphasé, est ensuite recuit jusqu'à la température de croissance, subissant de complexes transformations structurales [40]. Dans le but de réduire la densité de dislocations, il est préférable que le tampon se transforme en îlots tridimensionnels, de faible densité, plutôt que de garder une géométrie bidimensionnelle.

Pour une température supérieure à 1000 °C, la croissance de GaN se fait dans un régime de transport de masse [41] et la vitesse de croissance est uniquement fonction du flux de TMG ou TEG (Le triméthyl-gallium ($\text{Ga}(\text{CH}_3)_3$) est couramment nommé TMG et le triéthyl-gallium pour TEG.). Les températures de croissance de GaN typiques utilisées en MOVPE sont de 1050 à 1100 °C [39] en utilisant le TMG, et à peu près 50 °C plus basses en utilisant le TEG. La croissance faite sous un rapport V/III très élevé, limite les réactions parasites. Pour éviter ces dernières, il est nécessaire d'utiliser une admission séparée des organo-métalliques et de l'ammoniac.

Les températures de croissance sont supérieures à 1100°C pour $(\text{Al,Ga})\text{N}$. Là encore, les réactions parasites nécessitent une géométrie spéciale du réacteur. Pour $(\text{Ga,In})\text{N}$, les températures sont sensiblement plus basses ($T \leq 850$ °C). L'usage de H_2 comme gaz vecteur se traduit par une forte déplétion en indium des couches. L'azote est donc utilisé comme gaz vecteur pour la croissance de $(\text{Ga,In})\text{N}$. L'incorporation d'In est aussi fortement dépendante de la température de croissance.

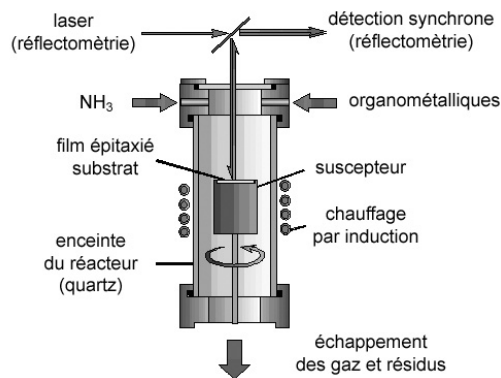


Figure 1.6 : schéma du réacteur d'épitaxie en phase vapeur à base d'organométalliques utilisé les faisceaux lumineux permettant de suivre la réflectivité en cours de croissance ont été illustrés [42].

Les propriétés des couches de GaN épitaxiées par MOVPE sur saphir ou SiC suffisamment épaisses sont bonnes: densité de dislocations dans la gamme des 10^8 cm^{-2} , concentration en électrons à 300 K inférieures à 10^{17} cm^{-3} et mobilités électroniques supérieures à $600 \text{ cm}^2/\text{V.s}$. [39] Récemment, en utilisant des alternances d'épitaxies à haute température et de tampons à

basse température, il a été montré que la densité de dislocations traversantes peut encore être réduite d'une décade [42]. Contrairement à l'EJM, la MOVPE ne bénéficie pas des avantages d'un environnement ultra-vide pour des caractérisations *in situ* de la croissance. L'emploi de cette technique se généralise pour la MOVPE des nitrures [39].

1.3.3 Epitaxie sous jets moléculaires (EJM) [3] :

L'EJM dérive de la 'méthode des trois températures' ; les éléments des colonnes III et V sont introduits par évaporation, chacune à sa température T_{III} ou T_V , et le substrat est chauffé à une température T_{sub} telle que $T_V < T_{sub} < T_{III}$. On comprend immédiatement que le cas des nitrures ne correspond pas à l'EJM 'classique' car la molécule N_2 est trop stable pour participer à la croissance. Deux variantes très différentes de l'EJM se sont alors développées. L'une utilise l'ammoniac, craqué à la surface du substrat, comme précurseur d'azote. Cette variante est donc dérivée de l'EJM source gaz, utilisée pour d'autres semiconducteurs. La deuxième variante utilise comme espèce active un plasma d'azote (EJM assistée par plasma). Ces deux méthodes méritent un traitement séparé. D'une façon générale, la croissance de GaN en EJM se fait à température beaucoup plus basse, de 150°C au moins, par rapport aux autres techniques. Ceci présente à la fois des avantages, par exemple en ce qui concerne l'incorporation d'indium dans les couches, et des inconvénients car les longueurs de diffusion des espèces en croissance sont plus faibles. Les densités de dislocations traversantes sont dans la gamme des 10^9 cm^{-2} ; cependant des mobilités électroniques supérieures à $500 \text{ cm}^2/\text{V.s}$ dans des couches épaisses peuvent être atteintes pour des températures de croissance supérieures à 900°C [43] .

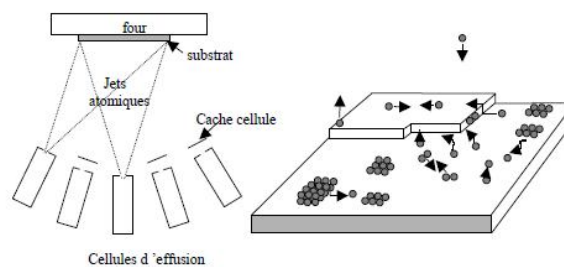


Figure 1.7 : Principe de fonctionnement de l'EJM [5].

1.3.3.1 EJM par craquage d'ammoniac [3] :

L'utilisation de l'ammoniac pour l'EJM des nitrures est assez naturelle. Cependant, les conditions expérimentales doivent être compatibles avec les jets moléculaires pour assurer aux molécules et atomes un libre parcours moyen supérieur à la distance source-substrat. Ceci

impose des limites au flux de NH_3 . De plus, la pression d'ammoniac étant limitée, la température de croissance est aussi limitée, afin d'éviter que l'évaporation de GaN ne l'emporte sur la croissance [44]. Par ailleurs, il faut que l'efficacité de craquage de NH_3 à la surface de GaN soit suffisante. Celle-ci, nulle à température ambiante, commence à augmenter vers 450°C pour atteindre 4 % vers 700°C . Aux températures supérieures, la compétition entre craquage de NH_3 et décomposition thermique de GaN conduit à une saturation de l'incorporation d'azote à partir de NH_3 autour de 4 %. Aussi la qualité cristalline de GaN s'améliorant nettement en augmentant la température de croissance, il existe donc une gamme de températures optimales situées entre 750 et 920°C pour la croissance de GaN [45].

L'EJM des nitrures utilisant l'ammoniac a un point commun avec l'EJM des semiconducteurs traditionnels : la croissance a lieu avec un rapport V/III (en termes de pressions équivalentes) supérieur ou égal à 1, et il s'agit d'un paramètre de croissance sur lequel on peut jouer. La qualité optoélectronique de GaN s'améliore quand le rapport V/III croît ; en particulier, le dopage résiduel décroît ($n < 1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$) du fait d'une moindre incorporation de silicium et d'oxygène. Sur tampon d' AlN , et en utilisant une température de croissance de 920°C , des mobilités électroniques supérieures à $500 \text{ cm}^2/\text{V.s}$ ont été obtenues [43].

1.3.3.2 EJM sous plasma d'azote [3] :

Les sources plasma, utilisant principalement N_2 , sont de deux types, communément appelées radiofréquence (RF, à 13.56 MHz) ou à résonance cyclotron électronique (ECR, à 2.45 GHz). Les progrès réalisés dans leur technologie permettent d'atteindre des vitesses de croissance des nitrures de l'ordre du $\mu\text{m/h}$. Les sources RF sont plus riches en espèces actives neutres que les sources ECR. Pour ces dernières, une polarisation du substrat ou du porte-substrat permet de minimiser les dommages dus aux ions énergétiques [46]. Il semble que contrairement au cas de l'ammoniac précédemment évoqué, l'incorporation d'azote dans GaN à partir d'un plasma est quasiment indépendante de la température de croissance, du moins pour des températures inférieures à la décomposition thermique. Ceci permet notamment la croissance de $(\text{Ga,In})\text{N}$ pour toute composition, jusqu'à InN , et est favorable à la croissance de nitrures en phase cubique [47]. Ceci impose cependant quelques conditions sur le rapport V/III utilisé. Un excès de gallium est nécessaire pour promouvoir une croissance de couches compactes. Cependant ceci peut se traduire par le dépôt de gouttelettes de Ga, qu'il est nécessaire de réévaporer, ou de décaper chimiquement après croissance. Les conditions optimums de croissance sont donc riches en gallium. Ces conditions varieront donc avec la température, du fait de la compétition avec la réévaporation du gallium. Les températures de

croissance couramment utilisées sont dans la gamme de 650°C à 750°C. Il n'est pas indispensable d'utiliser un tampon à basse température pour la croissance de GaN en EJM assistée par plasma. De même, pour les croissances sur saphir, la nitruration n'est pas indispensable. Les propriétés optoélectroniques de GaN obtenu en EJM assistée par plasma sont similaires à celles obtenues de façon standard avec l'ammoniac [3]

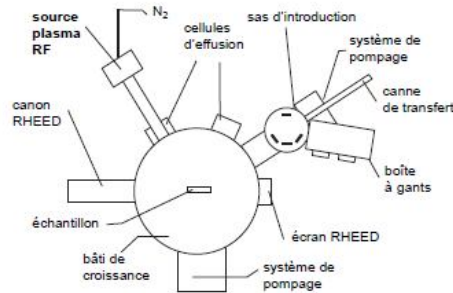


Figure 1.8 : Schéma de la machine d'épitaxie sous jet moléculaire assistée par Plasma [9].

1.4 Substrats pour le dépôt de nitrures cubiques et hexagonaux :

Dans les dernières années, plusieurs substrats de symétrie cubique ont été testés pour l'épitaxie des nitrures cubiques. Dans le tableau 1.7, nous donnons les caractéristiques de chacun de ces substrats en termes de désaccord de maille et thermo-élastiques avec les couches épitaxiales. (L'absence de signe sur les chiffres de colonnes de contrainte indique une contrainte en tension et le signe négatif indique une contrainte en compression).

Substrat	Coefficient de dilatation thermique ($10^{-6}K^{-1}$)	Paramètre de maille	Désaccord thermoélastique avec les nitrures	Désaccord de maille avec les nitrures
GaAs (001)	$\Delta a/a=6.00$	5.6533	GaN : 0.19% AlN : 0.29% InN : 0.01%	GaN : -20.4% AlN : -22.5% InN : -11.9%
Si (001)	$\Delta a/a=3.59$	5.4301	GaN : 0.03% AlN : 0.13% InN : 0.06%	GaN : -17.1% AlN : -19.3% InN : -8.3%
3C-SiC	$\Delta a/a=4.3 - 5.2$ (400-500 K)	4.3569	GaN : 0.14% AlN : 0.02% InN : -0.02%	GaN : 3.3% AlN : 0.4% InN : 14.2%
MgO	$\Delta a/a=10.50$	4.216	GaN : 0.49% AlN : 0.60% InN : 0.25%	GaN : 6.4% AlN : 3.9% InN : 18.1%
GaP	$\Delta a/a=4.65$	5.4512	GaN : 0.10% AlN : 0.21% InN : -0.03%	GaN : -21.0% AlN : -19.6% InN : -8.6%

Tableau 1-7: Désaccords thermo-élastiques et de maille entre les différents substrats utilisés pour l'épitaxie des nitrures dans la phase cubique [5].

Les substrats les plus utilisés dans le cas du GaN hexagonal sont :

Substrats pour GaN hexagonal	Structure cristalline	Paramètre de maille A°	Coefficient de dilatation thermique $\Delta a/a, \Delta c/c$ ($10^{-6} K^{-1}$)
Saphir Al_2O_3	Hexagonal	a=4.758, c=12.99	a :7.5, c :8.5
6H SiC	Hexagonal	a=3.08, c=15.12	a :4.2, c :4.68
Si (1 1 1) (1 0 0)	Cubique	a=5.4301	a :3.29
GaAs (1 1 1) (1 0 0)	Cubique	a=5.6533	a :6
ZnO	Hexagonal	a=3.250, c=5.213	a :8.25, c :4.75
AlN(couche tampon)	Hexagonal	a=3.112, c=4.982	a :4.2, c :5.3

Tableau 1.8 les paramètres de maille et les coefficients de dilatation thermique des différents substrats employés pour la croissance du GaN sous sa structure hexagonale [4].

1.4.1 Les substrats les plus utilisés [3]:

1.4.1.1 Saphir (Al_2O_3) :

C'est le substrat le plus couramment utilisé pour l'épitaxie des nitrures. La majeure partie des fabricants de DEL l'utilise, il est le plus utilisé pour les premières étapes de l'épitaxie des diodes laser, etc.... Ses inconvénients majeurs sont sa faible conductivité thermique et son caractère isolant. Ceci empêche son utilisation pour les dispositifs à géométrie verticale, ou fonctionnant sous haute puissance (DL, transistors de puissance). La rotation de 30° de la maille hexagonale de GaN par rapport à celle du saphir, permet de réduire le désaccord de paramètre de maille, qui reste cependant de 14%.

La croissance de GaN sur saphir débute par un recuit à haute température du saphir, généralement sous ammoniac. Un des effets de ce recuit est de transformer la surface du saphir en AlN [48] ou AlO_xN_{1-x} [49]. Il semble que ceci fixe la polarité du cristal. En effet, que ce soit, le GaN épitaxié sur saphir par MOVPE ou épitaxié sous jets moléculaires (EJM) par pyrolyse d'ammoniac, il a toujours la polarité Ga. Il est nécessaire ensuite de déposer un tampon à basse température en AlN ou GaN, d'épaisseur quelques dizaines de nm. Ce tampon est polycristallin et polyphasé. Il devient monophasé (wurtzite) lors du recuit vers la température de croissance. La maille de GaN épitaxié sur saphir est relaxée ou en compression biaxiale, plus cette compression est élevée, meilleure est la qualité optoélectronique de GaN.

1.4.1.2 Carbure de silicium :

Les polytypes hexagonaux de SiC les plus utilisés pour l'épitanie des nitrures sont le 6H-SiC, principalement, et le 4H-SiC. Le désaccord de paramètre de maille dans le plan de base est faible et sa conductivité thermique élevée. Il est disponible de type n et p ou isolant. La croissance de GaN sur SiC nécessite un tampon d'AlN ou de (Al,Ga)N. Dans ce dernier cas, il se forme naturellement une fine couche de mouillage (≤ 10 nm) très riche en AlN, qui permet de réduire la contrainte interfaciale [50]. La polarité du substrat SiC influe sur celle de GaN : GaN épitanie sur une face de polarité Si (respectivement C) est généralement de polarité Ga (respectivement N) [51]. D'une manière générale, la qualité cristalline et optoélectronique de GaN épitanie sur SiC est similaire à celle de GaN épitanie sur saphir. Des DEL fonctionnant en injection verticale, à travers le substrat et en utilisant des tampons conducteurs en (Al,Ga)N sont commercialisées.

1.4.1.3 Silicium Si(111) :

Malgré un désaccord de paramètre de maille important, le silicium est un substrat pour l'épitanie des nitrures sur lequel on fonde beaucoup d'espoirs, en raison de ses avantages parmi lesquels, sa grande disponibilité, sa grande surface, sa haute qualité cristalline, son faible coût. Il est conducteur n ou p et sa conductivité thermique est élevée. Il est de plus aisé de séparer chimiquement les nitrures de leur substrat. Cependant, il présente des difficultés majeures : il réagit avec l'ammoniac aux températures de croissance pour former Si_xN_y sur lequel la croissance épitanie est impossible. Il présente aussi un très grand désaccord de coefficient de dilatation thermique (Tableau 1.6) qui se traduit par une contrainte biaxiale extensive dans le GaN pouvant provoquer l'apparition de fissures dans les échantillons et il n'est pas polaire.

Pour résoudre ces problèmes, il est nécessaire d'utiliser un tampon d'AlN, obtenu par déposition de quelques monocouches atomiques d'Al, nitrurées ultérieurement [52]. Pour éviter la formation de fissures, il faut compenser la contrainte biaxiale extensive de GaN par une contrainte compressive. Ceci peut être réalisé par des alternances AlN/GaN de géométrie variable selon les auteurs. Des couches non fissurées d'épaisseur jusqu'à 2 μm peuvent être obtenues. Des DEL bleues et vertes ont été réalisées sur Si(111) [53], mais leur efficacité est à l'heure actuelle loin d'égaliser celle des DEL épitanies sur saphir ou SiC.

1.5 Polarisations spontanée et piézoélectrique :

La symétrie de la structure cristalline d'un matériau a des conséquences importantes sur ses propriétés de polarisation. L'une des spécificités des nitrures d'éléments III, comparés aux autres composés III-V tels que les arséniures (GaAs par exemple), est leur structure hexagonale de type wurtzite. Dans la maille cristalline hexagonale, les barycentres des charges positives et négatives ne coïncident pas toujours, créant ainsi un ensemble de dipôles orientés selon une même direction. Il apparaît dès lors, dans le cristal une polarisation macroscopique en l'absence de toute contrainte externe. Cet effet est bien connu dans les matériaux ferroélectriques et est appelé « polarisation spontanée » (Figure 1.11). Il est important de souligner que ce phénomène existe même dans le cas d'une structure hexagonale parfaite ($c/a = \sqrt{8/3}$). Cette polarisation spontanée \vec{p}_{sp} ne se manifeste pas dans le volume, mais aux interfaces du matériau avec le vide ou avec un autre composé. Elle crée une charge monopolaire à l'interface qui vaut $\vec{p}_{sp} \cdot \vec{n}$ entre le matériau et le vide, ou $[\vec{P}_{sp}(A) - \vec{P}_{sp}(B)] \cdot \vec{n}$ à l'interface entre deux matériaux A et B (\vec{n} vecteur unité normal à la surface). Dans ce type de matériaux, le vecteur de polarisation \vec{p}_{sp} est orienté suivant la direction [0001].

	P _{sp} (C/m ²)	d ₁₃ (pm/V)	d ₃₃ (pm/V)	d ₁₅ (pm/V)
GaN	21.6	3.1	3.1	-0.034
AlN	22.1	5.4	3.6	-0.090
InN	23.5	7.6	5.5	-0.042

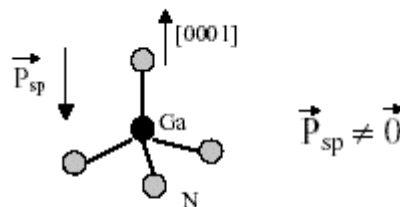
Tableau 1.91 Polarisation spontanée (P_{sp}) et coefficients piézo-électriques (d_{ij}) dans les nitrures de la colonne III en phase hexagonale. [15, 54]

Dans le cas des alliages ternaires, le calcul prévoit l'existence d'une variation non linéaire des coefficients de la polarisation spontanée avec la composition de l'alliage [55].

$$P_{sp_{AlGaN}} = 0.090x + 0.034(1-x) - 0.019x(1-x)$$

$$P_{sp_{InGaN}} = 0.042y + 0.034(1-y) - 0.038y(1-y)$$

POLARISATION SPONTANÉE



Structure GaN wurtzite
à l'équilibre

Figure 1.9 : Polarisation spontanée [56].

En revanche, il n'y a pas de polarisation spontanée dans les semiconducteurs à phase cubique en raison de leur symétrie. Cependant, sous l'action d'une contrainte bi-axiale, par exemple dans le plan (111), la maille cristalline se déforme et brise la symétrie cubique. Il apparaît alors une polarisation dans le cristal, orientée selon l'axe polaire [111]. La manifestation d'un champ électrique sous l'action d'une contrainte est appelée piézoélectricité. Une polarisation piézoélectrique (Figure 1.12) se manifeste aussi dans les semiconducteurs à phase wurtzite lorsqu'une contrainte leur est appliquée. Pour une contrainte bi-axiale e_{xx} dans le plan (0001), le champ de polarisation piézoélectrique selon [0001] s'écrit :

$$P_{pz} = 2 \left[d_{31} + \frac{c_{12} - c_{11}}{c_{11} - c_{12}} d_{33} \right] \epsilon_{xx} \quad [57] \quad (1-15)$$

où d_{31} est le coefficient piézoélectrique et les $c_{ij} = c_{11}, c_{12}, c_{13}, c_{33}$ sont les constantes élastiques.

POLARISATION PIÉZOÉLECTRIQUE

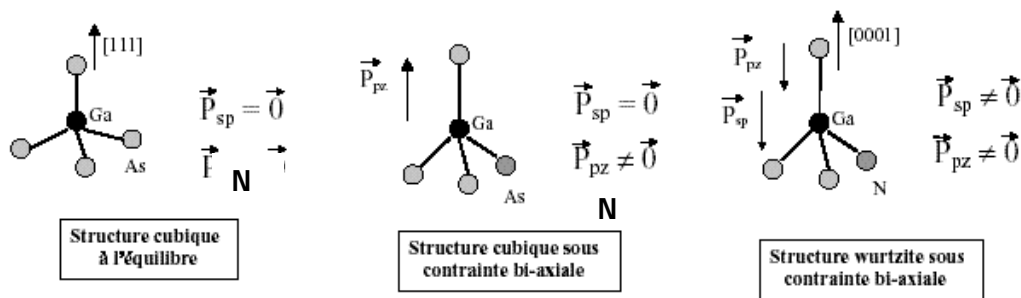


Figure 1.10 : Polarisation piézoélectrique [56].

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).

1.5.1 Propriétés piézoélectriques des nitrures :

Le coefficient piézoélectrique dans le GaN est très grands (Figure 1.12), environ dix fois supérieurs à ceux mesurés dans les semiconducteurs III-V traditionnels, et c'est le cas des deux autres nitrures qui ont des constantes piézoélectriques très élevées devant les autres matériaux surtout l'AlN (tableau 1.9).

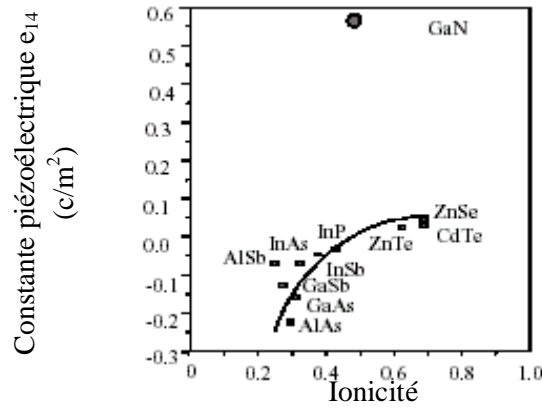


Figure 1.11 : La constante piézoélectrique en fonction de l'ionicité [58] .

Matériau	e_{33} (C/m ²)	e_{31} (C/m ²)	Références
GaN	0.73	-0.49	[59]
AlN	1.46	-0.60	[59]
InN	0.97	-0.57	[59]
GaAs	-0.12	0.06	[59]
AlAs	-0.01	0.01	[59]
InAs	-0.03	0.01	[59]
GaP	0.07	-0.03	[60]
ZnS	-0.1	0.05	[61]
CdTe	0.03	-0.01	[62]

Tableau 1.10 les constantes piézoélectriques dans les trois nitrures.

Les valeurs théoriques de ces coefficients sont en bon accord avec les valeurs mesurées expérimentalement. Les travaux de F. Bernardini et al. [63] mettent en évidence la non linéarité de la polarisation avec la déformation dans les couches. Pour les alliages ternaires, la loi de Vegard s'applique de la façon suivante :

Pour un alliage $A_xB_{1-x}N$: $P^{PZ}_{A(x)B(1-x)N}(\xi(x)) = x P^{PZ}_{AN}(\xi(x)) + (1-x) P^{PZ}_{BN}(\xi(x))$ [7]

Avec : $P^{PZ}_{AlN} = 1.808 \xi - 5.624 \xi^2$ pour $\xi < 0$ [7], $P^{PZ}_{AlN} = 1.808 \xi + 7.888 \xi^2$ pour $\xi > 0$ [7]

$P^{PZ}_{GaN} = 0.918 \xi - 9.541 \xi^2$ [7], $P^{PZ}_{InN} = 1.373 \xi - 7.5591 \xi^2$ [7]

La valeur de la polarisation se trouve modifiée de façon notable suivant que l'on tient compte ou non de cette non linéarité [7].

Référence :

- [1] Johnson W.C., Parsons J.B., Crew M.C., J. Phys. Chem. 234 (1932) 2651.
- [2] Dingle R., Sell D.D., Stokowski S.E., Ilegems M. Phys. Rev. B 4, (1971), 1211.
- [3] M. Leroux, Matériaux pour l'Optoélectronique, Traité EGEM série Optoélectronique, tome 7, édité par G.Roosen, (Hermes Science Publications, Paris, 2003).
- [4] Laure Siozade, étude expérimentale et théorique de structure semi-conducteur à base de Nitrure De Gallium, Ecole doctorale des Sciences Fondamentales, Université Blaise Pascal, Clermont-Ferrand II.
- [5] Martinez_Guerrero, Esteban Elaboration en épitaxie par jets moléculaires des nitrures d'éléments III en phase cubique, Institut nationale des sciences appliquées Lyon, 2002.
- [6] Philippe Agnès, Caractérisation électrique et optique du nitrure de gallium hexagonal et cubique en vue de l'obtention d'émetteurs bleus (Thèse) : Institut national des sciences appliquées de Lyon, 1999.
- [7] Stéphanie Anceau, Etude des propriétés physiques des puits quantiques d'alliages quaternaires (Al,Ga,In)N pour la conception d'émetteurs ultraviolets, thèse de doctorat de l'universite Montpellier , 2004
- [8] Pugh S. K, Dugdale D. J, Brand S and Abram R.A, Electronic structure calculation on nitride semiconductors. Semicond. SCI, Technol, 1999, VOL 14, p23-31.
- [9] XuD.P, Whang, Y.T, Yang, H, Li, S F, Zho, D.G, Fu, Y.Zhang, Sm, Wu, RHJia, S.J Zheng, WL and Jiang XM. Anomalous strans in the cubic phase GaN films grown on GaAs (001) by metalorganic chemical vapour deposition , J.Appl, Phys, 2000, Vol 88, No 6, P3762-3764.
- [10] Powell, R.C, Lee N.E, Kim Y.W, and Greene J. Heteroepitaxial wurtzite and zinc blende structure GaN grown by reactive ion molecular beam epitaxy, growth kinetic microstructure and proprieties.J. Appl , phys, 1993, vol73, No1, p 189-204.
- [11] Petrov I, Majob E, Powell R.C and Greene J.E. Synthesis nof metastable epitaxial zinc blende structure AlN by solid reaction. Appl, Phys Letters 1992. Vol 60. No 20. P 2491-2493
- [12] Okumaru H, Hamagushi H, Koizumi T, Balakrishnan K, Ishida Y, Akita M, Chichibu S, Nakanishi H, Nagatoma T, Yoshida S. Growth of cubic III- nitrides by gas source MBE using atomic nitrogen plasma : GaN AlGaN and AlN. J.Gryst. Growth 1998.Vol 198/190.P 390-394.

- [13] Strites S., Chandrasekhr D., Smith D. J., Sariel J., Chen H., Terhguch N., and Morkoç H. structural proprieties of InN films grown on GaAs subtracts: observations of the Zinblende polytype. *J. Gryst. Growth* 1993, vol 127, p 204-208.
- [14] Tabata A., Lima A. P., Teles L. K., Scolfaro L. M. R., Lette J. R., Lemos V., Schotteker B., Frey T., Schikora D. and Lischka K. Structural proprieties and Raman modes of Zinblende epitaxial layers. *Apply. Phys. Lett.* 1999, vol 74, N°3, p. 362-364.
- [15] Fabrice ENJALBERT, Etude des hétérostructures semi-conductrices III-nitrures et application au laser UV pompé par cathode à micropointes, thèse pour obtenir le grade de Docteur de l'Université Joseph Fourier – Grenoble 1, 2004.
- [16] Maruska H.P., Tietjen J.J., *Appl. Phys. Lett.* 15, (1969) 327.
- [17] Pankove J.I., Leksono M., Chang S.S., Walker C., Van Zeghbroeck B., Mrs Internet J. Nitride Semicond. Res. 1, (1996) 39.
- [20] S. Strite and H. Morkoç , GaN, AlN, and InN: A Review, Materials Research Laboratory and Coordinated Science Laboratory, University of Illinois at Urbana-Champaign, Urbana, Illinois 61801, 1992.
- [21] S.Nakamura, *JPN. J. Appl.Phys.*30, L1705 (1991).
- [22] M.ILegems and H. C. Montgomery, *J. Phys. chem. Solids* 34, 885 (1973).
- [23] D.J. As, D. Schikora, A. Greiner, M. Lubbers, J. Mimkes, and K. Lischka, p and n type cubic GaN epilayers on GaAs, *Phys. Rev. B* 1996, vol.54, No. 16,p R11118-R11120.
- [24] K.Kawabe, R.H. Tredgold, and Y. Inuishi, *Elect. Eng. Jpn.* 87, 62 (1967)
- [25] J. Edwards, K. Kawabe, G. Stevens, and R. H. Trdgold, *Solid State Commu.*3, 99 (1965).
- [26] T. L. Chu, D. W. Ing. And A. j. Noreika, *Solid State electron* 10, 1023 (1967).
- [27] Chin V.W.L., Tansley T.L., Osotchan T., *J. Appl. Phys.* 75, (1994) 7365.
- [28] Nakamura S., Senoh M., Iwasa N., Nagahama S., Yamada T., Mukai T., Nakamura *Jpn. J. Appl. Phys.* 34, (1995) L1332.
- [29] Götz W., Romano L/T., Walker J., Johnson N.M., Molanar R.J., *Appl. Phys. Lett.* 72, (1998) 1214.
- [30] Look D.C., Sizelove J.R., *Phys. Rev. Lett.* 82, (1999) 1237.
- [31] Leung K., Wright A.F., Stechel E.B., *Appl. Phys. Lett.* 74, (1999) 2495.
- [32] Ng H.M., Doppalapudi D., Moustakas T.D., Weimann N.G., Eastman L.F., *Appl. Phys. Lett.* 73, (1998) 821.
- [33] Akasaki I., Amano H., Koide Y., Hiramatsu K., Sawaki N., *J. Cryst. Growth*, 98, (1989), 209.

- [34] Melnik Y.V., Vassilevski K.V., Nikitina I.P., Babanin A.I., Davydov V.Y., Dmitriev V.A., *Mrs Internet J. Nitride Semicond. Res.* 2, (1997) 39.
- [35] Molnar R.J., Aggarwal R., Liao Z.L., Brown E.R., Melngailis I., Götz W., Romano L.T., Johnson N.M., *Mat. Res. Soc. Symp. Proc.* 395, (1996) 189.
- [36] Meister D., Böhm M., Topf M., Kriegseis W., Burkhardt W., Dimstorfer I., Rösel S., Farangis B., Meyer B.K., Hoffmann A., Siegle H., Thomsen C., Christen J., Bertram F., *J. Appl. Phys.* 88, (2000) 1811.
- [37] Götz W., Johnson N.M., Walker J., Bour D.P., Street R.A., *Appl. Phys. Lett.* 68, (1996) 667.
- [38] Cadoret R., *J. Cryst. Growth*, 205, (1999) 123.
- [39] Nakamura S., Fasol G., *The Blue Laser Diode* (Springer-Verlag, Berlin, 1997).
- [40] Vennegues P., Beaumont B., Vaille M., Gibart P. *J. Cryst. Growth* 173, (1997) 249.
- [41] Kaufmann U., Kunzer M., Obloh H., Maier M., Manz C., Ramakrishnan A., Santic B., *Phys. Rev. B* 59, (1999) 5561.
- [42] Jean-Marc Bethoux, *Relaxation des contraintes dans les hétérostructures épaisses (Al,Ga)N : une piste originale pour la réalisation de diodes électroluminescentes a cavité résonante*, Thèse pour obtenir le titre de docteur en sciences de l'université de Nice Sophia-Antipolis, 2004
- [42] Benamara M., Liliental-Weber Z., Kellermann S., Swider W., Washburn J., Mazur J., Bourret-Courchesne E.D., *J. Cryst. Growth* 218, (2000) 447.
- [43] Tang H., Webb J.B., *Appl. Phys. Lett.* 74, (1999) 2373
- [44] Grandjean N., Massies J., Semond F., Karpov S.Y., Talalaev R.A., *Appl. Phys. Lett.* 74, (1999) 1854.
- [45] Kim W., Aktas Ö., Botchkarev A.E., Salvador A., Mohammad S.N., Morkoc H., *J. Appl. Phys.* 79, (1996) 7657.
- [46] Krtschil A., Witte H., Lisker M., Christen J., Birkle U., Einfeldt S., Hommel D., *Appl. Phys. Lett.* 74, (1999) 2032.
- [47] Daudin B., Feuillet G., Hubner J., Samson Y., Widmann F., Philippe A., Bru-Chevallier C., Guillot G., Bustarret E., Bentoumi G., Deneuille A., *J. Appl. Phys.* 84, (1998) 2295.
- [48] Grandjean N., Massies J., Leroux M., *Appl. Phys. Lett.* 69, (1996) 2071.
- [49] Widmann F., Feuillet G., Daudin B., Rouviere J.L., *J. Appl. Phys.* 85, (1999) 1550.
- [50] Bremser M.D., Perry W.G., Zheleva T., Edwards N.V., Nam O.H., Parikh, N., Aspnes D.E., Davis R.F., *Mrs Internet J. Nitride Semicond. Res.* 1, (1996) 8.
- [51] Hellmann E., *Mrs J. Internet J. Nitride Semicond. Res.* 3, (1998) 11.

- [52] Semond F., Damilano B., Vezián S., Grandjean N., Leroux M., Massies Phys. Stat. Sol (B) 216, (1999) 101.
- [53] Dalmaso S., Feltin E., De Mierry P., Beaumont B., Gibart P., Leroux M., Electronic Letters 36, (2000) 1728.
- [54] I. Vurgaftman, J. R. Meyer “Band parameters for nitrogen-containing semiconductors” J. Appl. phys.94, 3675 (2003).
- [55] V. Fiorentini, F. Bernardini, O. Ambacher, Appl. Phys. Lett. 80, 1204 (2002)
- [56] Bernardini (F.), Fiorentini (V.) and Vanderbilt (D.), Phys. Rev.B 56, R10024 (1997).
- [57] Julien Barjon, Etude d’un laser Uv compact à semiconducteurs (Al,Ga)N pompé par micropointes, Thèse de doctorat, Grenoble, 2002.
- [58] Michael S. Shur Chapter 5, GaN-based electronic devices ,61-86.
- [59] F. Bernardini, V. Fiorentini and D. Vanderbilt, Phys. Rev. B 56, R10024 (1997).
- [60] S. de Gironcoli, S. Baroni and R. Resta, Phys. Rev. Lett. 62, 2853 (1989)
- [61] A. Dal Corso, R. Resta, and S. Baroni, Phys. Rev. B 47, 16252 (1993)
- [62] S. De Gironcoli, S. Baroni, R. Resta, Ferroelectrics, 111, 19 (1990)
- [63] F. Bernardini, V. Fiorentini, Phys. Rev. B 64 n° 085207, (2001).

Chapitre II :

Propriétés optoélectroniques des trois nitrures

Chapitre 2 : Propriétés optoélectroniques des trois nitrures

2. 1. Introduction

Les composés nitrurés d'élément III, en particulier GaN, AlN, InN et leurs alliages, sont des matériaux très en vue dans le monde de l'optoélectronique car ils présentent une bande d'énergie interdite relativement grande par rapport aux autres semi-conducteurs (surtout pour le cas de GaN et AlN), ce qui permet de générer de la lumière dans le spectre visible et l'ultraviolet. Par conséquent ; on dispose d'un large éventail de possibilités pour les applications optiques. En dépit d'une percée dans le domaine des dispositifs, beaucoup reste à faire sur le plan de la physique fondamentale de ces systèmes.

Ces nitrures sont des semi-conducteurs remarquables car ils couvrent l'ensemble du spectre visible ainsi que les ultraviolets A et B. Ils permettent de réaliser des dispositifs optoélectroniques qui présentent de très bonnes performances, malgré une densité de dislocations très élevée ($>10^8 \text{cm}^{-2}$) et des champs électriques intrinsèques géants (plusieurs MV/cm).

2.2 Situation des trois nitrures dans la famille des semiconducteurs

La nature et l'énergie de bande interdite sont des données fondamentales en optoélectronique car les matériaux à gap direct ont une force d'oscillateur très importante et l'émission lumineuse se fait généralement à une énergie proche de celle du gap. La grande majorité des semi-conducteurs ont une énergie de gap située dans le visible ou dans le proche infrarouge. La famille des nitrures se détache dans le domaine UV (figure 2.1).

GaN, AlN, InN et leurs alliages, sont donc des semi-conducteurs aux propriétés remarquables. La plus importante est sans conteste leur bande interdite directe qui varie de 1.9eV pour InN à 3.4eV pour GaN [2], et atteint 6.2eV pour AlN (figure 2.1) [2]. Grâce aux concepts de l'ingénierie de bande interdite, développés dans le cadre des semi-conducteurs III-V traditionnels (arséniures, phosphures, antimoniures), il est ainsi possible de couvrir entièrement la gamme spectrale visible depuis le rouge (650nm), et atteindre le domaine des ultraviolets A (320-400nm) et B (280-320nm). Ce point complété par la très forte stabilité du matériau de base GaN, est à l'origine de la réalisation industrielle de diodes électroluminescentes (DELs) bleues et vertes de haute brillance, et de diodes laser (DLs) émettant à 0,4 μm . Tout cela fait de ces nitrures, des matériaux de choix pour les diodes électroluminescentes et les diodes laser.

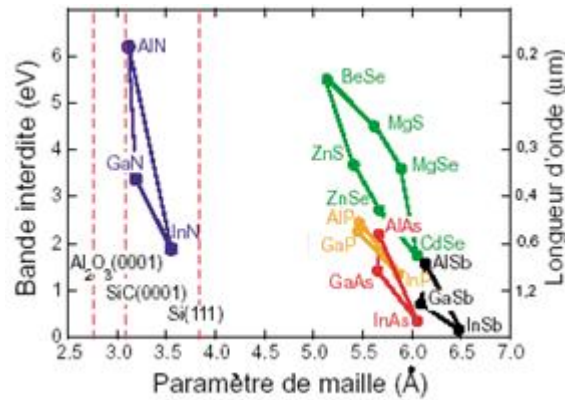


Figure 2.1 Bande interdite et longueur d'onde des divers composés semi-conducteurs en fonction de leurs paramètres de maille [2].

2.3 Structure des bandes d'énergie

2.3.1 Allure générale des bandes d'énergie

Dans les figures 2.2 et 2.3 ; sont données les structures de bandes des trois nitrures, pour les deux phases.

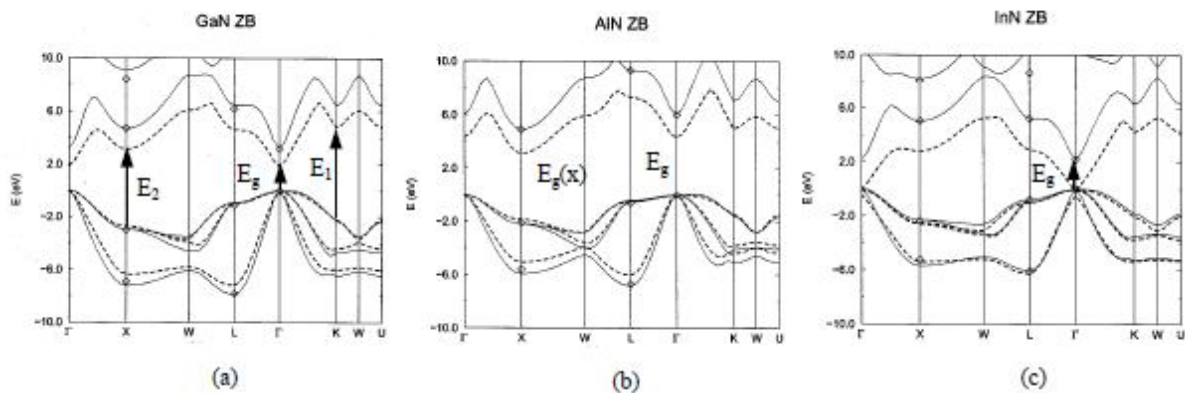


Figure 2.2 Structures de bandes des trois nitrures (GaN, AlN et InN) dans leurs phases cubiques. Les lignes pointillées correspondent aux résultats obtenus par la méthode "first-principles" en utilisant l'environnement VASP. Les lignes continues sont celles de la méthode "semi-empirical pseudopotential" [3].

- GaN cubique : En plus de la vallée Γ , il y a la vallée L dans la direction $\langle 111 \rangle$ et la vallée X dans la direction $\langle 100 \rangle$, en bordure de la zone de Brillouin. Ces vallées sont caractérisées par une courbure plus faible et, par conséquent, la masse effective des électrons est plus élevée et leur mobilité est plus faible. Les minima de ces vallées par rapport à la bande Γ , sont de l'ordre de 2.6eV et 1.3eV [3] respectivement pour L et X ; ils sont très grands comparés aux autres composés III-V classiques.

- AlN cubique : Il existe deux minima entre la bande de conduction et la bande de valence. Cependant, la structure de bande présente une transition directe entre les points Γ correspondant au gap.

- InN cubique : Les deux minima entre la bande de conduction et la bande de valence, présentent une très faible différence.

Dans la phase hexagonale, les semi-conducteurs AlN, GaN et InN sont à gap direct. Le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction sont tous les deux situés au centre de la zone de Brillouin (point Γ). La bande de valence se subdivise en trois bandes nommées HH, LH et CH (de symétries respectives Γ_9 , Γ_7 et Γ_7). Les présentations de la structure de bande pour la phase hexagonale des trois nitrures, sont données par la figure 2.3.

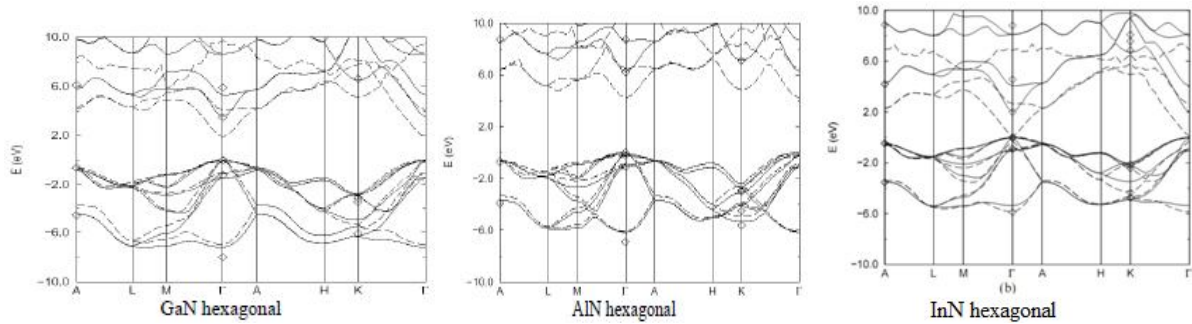


Figure 2.3 Structures de bandes des trois nitrures (GaN, AlN et InN) dans leurs phases hexagonales [4].

2.3.2 Forme de la bande de conduction au voisinage des minima [5] :

Les bandes de conduction ne sont pas parfaitement paraboliques. La méthode de perturbation appliquée à l'Hamiltonien de l'électron, permet de mettre en évidence cette non-parabolicité et de ramener la relation entre l'énergie ε et le module du vecteur d'onde k , à une formule de type :

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} = E(1 + \alpha E) \quad (2.1)$$

Où m^* est la masse effective des électrons, et α est le coefficient de non parabolicité de la vallée considérée. Cette formule n'est valable qu'au voisinage du minimum considéré. Elle indique qu'au-delà d'un certain point d'inflexion, la cavité de la bande de conduction s'inverse. C'est à ce point que la vitesse atteint son maximum pour un champ électrique appliqué sur les électrons. La masse effective de l'électron dans la vallée Γ est liée à l'énergie

de gap E_g et l'énergie Δ qui sépare les sous-bandes de valence au centre de la zone de Brillouin. Elle est donnée par la formule (2.2).

$$\frac{m_0}{m^*} = 1 + \theta_0 \left(\frac{2}{E_g} + \frac{1}{E_g + \Delta} \right) \quad (2.2)$$

m_0 est la masse de l'électron libre dans le vide, m^* sa masse effective, θ_0 (en eV) est un coefficient et E_g est l'énergie du gap.

Les vallées L et X ne présentent pas une symétrie sphérique ; cela implique que la masse transversale des électrons m_t^* est différente de leurs masses longitudinales m_l^* . La masse effective de densité d'état est donnée par l'équation (2.3) :

$$m^* = \left(m_l^* (m_t^*)^2 \right)^{\frac{1}{3}} \quad (2.3)$$

La vallée Γ est à symétrie sphérique, le coefficient d'inertie et la masse effective de densité d'état, y sont alors confondus.

2.3.3 Concentration des électrons libres dans la bande de conduction, et niveaux d'impuretés (pièges) [5]:

La densité des électrons libres est donnée par l'intégrale de Fermi :

$$n = \int_0^{\infty} n_c(\varepsilon) \cdot f(\varepsilon) d\varepsilon \quad (2.4)$$

ε est l'énergie de l'électron par rapport au bas de la bande de conduction, et $n_c(\varepsilon)$ est la densité d'état dans la bande. Pour une bande parabolique, cette dernière est donnée par :

$$n_c(E) = \frac{4\pi}{h^3} (2m^*)^{\frac{3}{2}} E^{\frac{1}{2}} \quad (2.5)$$

$f(\varepsilon)$ est la fonction de distribution de Fermi, donnée par l'équation :

$$f(\varepsilon) = \left(1 + \exp\left(\frac{\varepsilon - E_F}{k_B T} \right) \right)^{-1} \quad (2.6)$$

Pour les faibles densités d'états (n faible), la différence d'énergie entre le niveau d'énergie ε et le niveau de Fermi E_F est très grande devant le produit $k_B.T$ ($\varepsilon - E_F \gg k_B.T$), on peut donc utiliser l'approximation de Boltzmann pour déterminer la densité d'état :

$$n = N_C \exp\left((E_F - E_C) / k_B T \right) \quad (2.7)$$

N_C étant la densité effective d'états dans la bande de conduction, donnée par :

$$N_C = \frac{2\pi}{h^3} (2m^* k_B T)^{3/2}$$

(2.8)

Dans le cas du GaN ; le minimum de la bande de conduction Γ présente une courbure accentuée, la densité effective d'états N_c est faible. Pour GaN hexagonal : $N_c=2.23 \times 10^{18} \text{cm}^{-3}$ [6] et pour le cubique, $N_c=1.195 \times 10^{18} \text{cm}^{-3}$ [6]. C'est la raison pour laquelle ; dans ces matériaux, il est difficile d'obtenir de très fortes concentrations sans la pénétration du niveau de Fermi dans la bande de conduction.

Pour InN : $N_c = 4.82 \times 10^{15} \times (m_\Gamma/m_0)^{3/2} \times T^{3/2} \text{cm}^{-3} = 1.76 \times 10^{14} \times T^{3/2} \text{cm}^{-3}$ [6]

$$N_v = 10^{16} \times T^{3/2} \text{cm}^{-3} [6].$$

Pour AlN : $N_c \cong 4.82 \times 10^{15} \times (m_\Gamma/m_0)^{3/2} \times T^{3/2} \text{cm}^{-3} \cong 1.2 \times 10^{15} \times T^{3/2} \text{cm}^{-3}$ [6]

$$N_v = 9.4 \times 10^{16} \times T^{3/2} (\text{cm}^{-3}) [6].$$

Les semi-conducteurs à grand gap, en l'occurrence GaN et AlN, sont sensibles à la présence des impuretés et des défauts introduisant des niveaux d'énergie profonds situés dans la bande interdite. Ces impuretés et défauts peuvent se manifester de deux façons :

- A l'équilibre ; ils interviennent sur la position du niveau de Fermi, et donc sur la concentration des porteurs libres : c'est le phénomène de compensation.
- En régime transitoire ou permanent ; ce sont les phénomènes de piégeage ou d'émission de porteurs.

Ces effets peuvent provoquer des modifications dans le comportement des dispositifs. Pour cela, il faut connaître ces mécanismes et leur caractérisation est essentielle pour l'élaboration des circuits intégrés.

2.3.4 Semi-conducteurs à l'équilibre : statistique d'occupation des niveaux profonds, compensation :

Pour déterminer les concentrations des porteurs libres et l'état d'occupation des centres introduisant des niveaux profonds, il suffit de connaître la position du niveau de Fermi. Cette position peut être déterminée par le diagramme de Shockley qui traduit la neutralité électrique. En ordonnée : le logarithme de chacun des deux membres de l'équation de neutralité ; et en abscisse, la position du niveau de Fermi. Nous examinons deux cas pour un semi-conducteur de type n, ayant une concentration des impuretés de dopage N_D et un niveau d'énergie E_D .

- a) Présence d'un accepteur profond :

Ce niveau a une concentration N_{TA} et un niveau d'énergie E_{TA} , l'équation de neutralité électrique s'écrit :

$$n + N_{TA}^- = p + N_D^+ \quad (2.9)$$

N_{TA}^- est la concentration des accepteurs ionisés, donnée par l'équation :

$$N_{TA}^- = N_{TA} f(E_{TA}) \quad (2.10)$$

N_D^+ est la concentration des donneurs ionisés positivement, donnée par l'équation :

$$N_D^+ = N_D (1 - f(E_D))$$

(2.11)

n et p sont les concentrations des électrons et des trous, respectivement. $f(E_j)$ est la fonction d'occupation de Fermi du niveau E_j

Le niveau de Fermi se situe au voisinage du niveau profond. C'est le phénomène de compensation par piège profond. La concentration des électrons est inférieure à N_D . Tant que N_{TA} est inférieur à N_D , on a $p < N_D^+$ et donc :

$$n \cong N_D - N_{TA} \quad (2.12)$$

b) Cas de deux impuretés de types opposés :

L'une des impuretés est de type donneur avec une densité N_{TD} est l'autre de type accepteur avec une densité N_{TA} voisine de N_{TD} . Cette situation est rencontrée dans GaN avec C comme donneur, et Mg comme accepteur :

$$p + N_D^+ + N_{TD}^+ = n + N_{TA}^- \quad (2.13)$$

Dans le cas où $N_D < N_{TD} < N_{TA}$, le matériau se trouve fortement compensé et le niveau de Fermi se trouve au milieu de la bande interdite.

2.3.5 Bandes interdites [7]

Les premières mesures de la bande interdite du GaN à basse température datent des années 1970 [8]. Elles ont donné une valeur de l'ordre de 3.5eV à basse température. A température ambiante, la bande interdite est égale à 3.39eV environ. Depuis, l'énergie de bande interdite des nitrures a été le sujet de nombreuses études [9]. La largeur de la bande interdite d'AlN correspond aux longueurs d'onde très courtes dans l'UV profond, à 300K (6.2 eV ↔ 200nm). A 2K, cette bande interdite est de l'ordre de 6.28eV [10].

La dépendance en température de la bande interdite, est décrite par la loi de Varshni [7] :

$$E_g(T) = E_g(0) - \frac{\alpha}{\beta} \quad (2.14)$$

Où $E_g(0)$ est l'énergie de bande interdite à température nulle ; α et β sont des constantes déterminées expérimentalement (tableau 2.1).

Matériau		E_g (0K)	E_g (300K)	α (eV/K)	β (K)
GaN	Cubique	3.28 [11]	3.2 [11]	0.593[12]	600 [12]
	Hexagonal	3.51 [13]	3.510 [14]	0,909[13]	830 [13]
AlN	Cubique	6 [12]	5.94 [15]	0.593[12]	600 [12]
	Hexagonal	6.25 [13]	6.2 [14]	1.799[13]	1462 [13]
InN	Cubique	0.69 [16]	0.64 [16]	0.41 [16]	454 [16]
	Hexagonal	0.78 [13], 1.89 [18]	0.8 [14], [17]	0.245[13]	624 [13]

Tableau 2.1 L'énergie de gap à $T=0$ et les paramètres α et β des trois nitrures dans les deux phases.

La largeur de la bande interdite dépend des contraintes appliquées au matériau. Pour GaN, la contrainte bi-axiale compressive se traduit par une augmentation de l'énergie de bande interdite qui est en première approximation linéaire avec la contrainte appliquée. Puisque le paramètre de maille "a" de l'AlN est plus petit que celui du GaN (figure 2.4), les couches de ce dernier se trouvent en compression bi-axiale dans l'alliage AlGaN, se traduisant par l'augmentation de l'énergie de bande interdite $\sim 3,46-3,48$ eV [7] à la température ambiante. En conséquence ; la discontinuité de potentiel en bande de conduction entre GaN et AlN, est réduite.

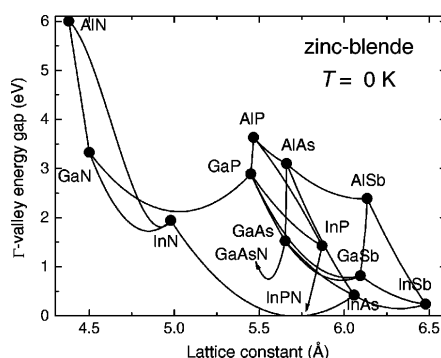


Figure 2.4 L'énergie de gap en fonction de la constante du réseau des différents composés cubiques à $T=0$ K [12] .

2.4 Constantes diélectriques et indices de réfraction [7] :

Dans les semi-conducteurs cristallisant dans la phase wurtzite ; les composantes du tenseur diélectrique, parallèle et perpendiculaire à l'axe c, sont différentes. Il y a une dispersion

importante des valeurs des constantes diélectriques citées dans la littérature : la dispersion entre les différentes mesures peut excéder 10 %. Le tableau 2.2 regroupe quelques valeurs expérimentales des constantes diélectriques à haute fréquence (ϵ'' et ϵ^+) et statique (ϵ'' et ϵ^+) pour GaN et AlN. Nous remarquons que les constantes diélectriques à haute fréquence ϵ_∞ et statiques ϵ_{stat} diffèrent dans GaN, de presque un facteur de deux.

Matériau	n ($\lambda=1.55\mu\text{m}$)	ϵ''	ϵ^+	ϵ''	ϵ^+
GaN	2.3 - 2.335	5.61	5.18	10.4	9.5
AlN	2.03 - 2.3	4.27	4.13	8.5	8.5
InN	2.65 - 3.12			13.1	14.4

Tableau 2.2 Indice de réfraction et constantes diélectriques expérimentaux, des trois nitrides[19].

2.5 Masses effectives :

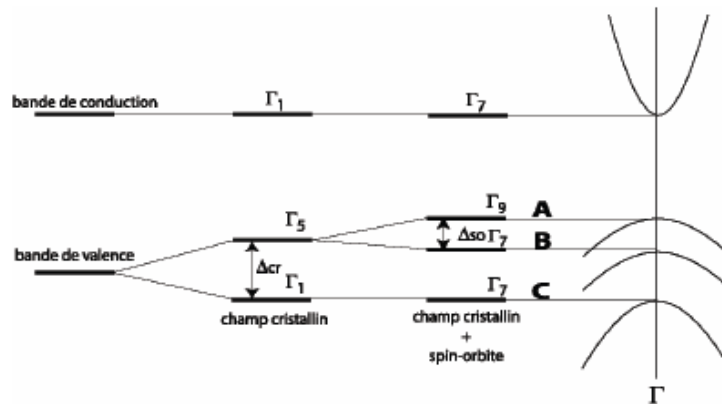


Figure 2.5 Structure de bandes du GaN en phase wurtzite au voisinage de $k = 0$ [7, 20].

Chuang et al. [21] ont calculé la dispersion pour les trois bandes de valence de GaN, en utilisant un modèle $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ à 8 bandes. La dispersion suivant l'axe c , est presque parallèle pour les bandes hh (trous lourds) et lh (trous légers). Elle est parabolique selon cet axe et correspond à la masse effective de $1.1m_0$. Pour la bande ch, la masse effective selon l'axe c , est plus faible : $m_{\text{ch}}^* = 0.15m_0$.

La masse effective des électrons dans GaN, en bord de bande de conduction, a été mesurée par plusieurs auteurs en utilisant des techniques expérimentales très variées. Les valeurs obtenues varient entre $0.1m_0$ et $0.28m_0$ [12], avec la majorité des résultats convergeant vers $0.2-0.23m_0$. Vurgaftman et al. [10] conseillent la valeur $0.22m_0$.

Dans AlN, la masse effective est prédite anisotrope mais sa valeur n'est pas bien connue.

Vurgaftman et al. [10] conseillent les valeurs $m^{\perp} = 0.3m_0$ et $m^{\parallel} = 0.32m_0$ pour les masses effectives perpendiculaire et parallèle à l'axe c. Les masses des trous sont très mal connues ; elles sont prédites fortement anisotropes avec des valeurs calculées pour les masses selon l'axe de croissance : $m^*_{hh} = 3.7m_0$, $m^*_{lh} = 0.26m_0$ et $m^*_{ch} = 2.9m_0$ [21].

Dans AlN ; l'éclatement dû au champ cristallin, est négatif. La bande de valence la plus haute en énergie, est la bande C [22].

Pour InN et à 300K ; la masse effective des électrons dans la direction Z et la direction perpendiculaire, sont similaires : $m_e = 0.11m_0$ [23]. Celle des trous est :

$m_{hh} = 1.63m_0$ [27], $m_{lh} = 0.27m_0$ [28], m_s (split-off band) = $0.65m_0$ [23].

Paramètre	AlN	GaN	InN
E_g (eV)	6.25	3.510	~0.8
Δ_{cr} (eV)	-0.169	0.010	0.040
Δ_{so} (eV)	0.019	0.017	0.005
m^*e_{\parallel} ; m^*e_{\perp} (m_0)	0.32 ; 0.30	0.20 ; 0.20	0.07 ; 0.07
m^*hh_{\parallel} ; m^*hh_{\perp} (m_0)	3.57 ; 0.64	2.0 ; 0.34	1.67 ; 1.61
m^*lh_{\parallel} ; m^*lh_{\perp} (m_0)	3.51 ; 0.64	1.19 ; 0.35	1.67 ; 0.11
m^*sh_{\parallel} ; m^*sh_{\perp} (m_0)	0.26 ; 4.03	0.17 ; 1.27	0.10 ; 1.67

Tableau 2.3 Paramètres de bande et masses effectives d'AlN, GaN et InN dans la phase wurtzite. Les symboles \parallel et \perp indiquent respectivement la direction parallèle et perpendiculaire à kz [17].

2.6 Phonons dans les nitrures en phase hexagonale [7]

Le groupe d'espace du GaN en phase hexagonale, est situé au centre de la zone de Brillouin (point Γ) ; la théorie des groupes prévoit 8 modes de phonons : 2A1, 2E1, 2E2, et 2B1. Les modes A1 et E1 ont chacun un mode de vibration acoustique (A et E A) et un mode optique (A et E). Les autres modes E2 et B1 sont optiques. Les modes optiques (A et E sont observables en spectroscopie infrarouge et Raman, mais le mode E2 (high et low) est observable uniquement en spectroscopie Raman. B1 (high et low) n'est pas actif [25].

Les modes de phonons optiques sont découplés en deux modes, longitudinaux (LO) et transversales (TO) qui sont de type A1 ou E1 suivant la direction de vibration. A regroupe les phonons LO// et TO// polarisés parallèlement à l'axe c du cristal. Les phonons E sont polarisés perpendiculairement (\perp) à l'axe c. Les modes de phonons dans GaN et AlN, ont été

très étudiés par de nombreuses équipes ; un bon accord a été trouvé entre les expériences et les calculs. Ces différents modes (nombre d'onde et énergie correspondante) sont donnés par le tableau 2.4.

	Nombre d'onde en cm^{-1} / Energie en meV (à 300K)	
Mode	GaN	AlN
E2 (low)	143-146 cm^{-1} / 17.7-18.1meV	241-252 cm^{-1} / 29.9-31.2meV
B1 (low)	337 cm^{-1} / 41.8meV (théorique)	580 cm^{-1} / 71.9meV (théorique)
A1 (TO)	533-534 cm^{-1} / 66.1-66.2meV	607-614 cm^{-1} / 75.3-76.1meV
E1 (TO)	556-559 cm^{-1} / 68.9-69.3meV	657-673 cm^{-1} / 81.5-83.4meV
E2 (high)	560-579 cm^{-1} / 69.4-71.8meV	655-660 cm^{-1} / 81.2-81.8meV
B1 (high)	720 cm^{-1} / 89.3meV (théorique)	765 cm^{-1} / 94.8meV (théorique)
A1 (LO)	710-735 cm^{-1} / 88.0-91.1meV	888-910 cm^{-1} / 110-113meV
E1 (LO)	741-742 cm^{-1} / 91.9-92.0meV	895-924 cm^{-1} / 111-115meV

Tableau 2.4 Les modes de dispersion dans GaN et AlN [7].

Pour InN, les modes de phonons et leurs nombres d'ondes à 300K, sont groupés dans le tableau 2.5.

Modes	Longueur d'onde
$\nu_{\text{TO}}(\Gamma)$. Reflectivity, Kramers-Kronig analysis.	478 cm^{-1} [26] 694 cm^{-1} [26]
A ₁ - LO	586 cm^{-1} [27]
A ₁ - TO	447 cm^{-1} [27]
E ₁ - LO	593 cm^{-1} [27]
E ₁ - TO	476 cm^{-1} [27]
E ₂ (low)	87 cm^{-1} [27]
E ₂ (high)	488 cm^{-1} [27]

Tableau 2.5 Les modes de dispersions de phonons dans InN.

La croissance épitaxiale des couches nitrures se fait généralement sur des substrats désaccordés en maille (Saphir, SiC, Si). Cela génère une compression ou une tension des couches qui peut être très importante. L'influence des états de contraintes sur l'énergie des phonons a été étudiée numériquement (ab initio) et expérimentalement [28].

L'évolution en fréquence des modes de phonons en fonction de la contrainte, est représentée sur la figure 2.6 [29]. Pour résumer ; mis à part le mode E2 (low), on observe un décalage de la fréquence de vibration vers les basses énergies de $\Delta\omega \cong 30\text{m}^{-1}$ (3.7meV) pour tous les autres modes, lorsqu'une compression biaxiale de $\sim 2\%$ s'exerce sur GaN.

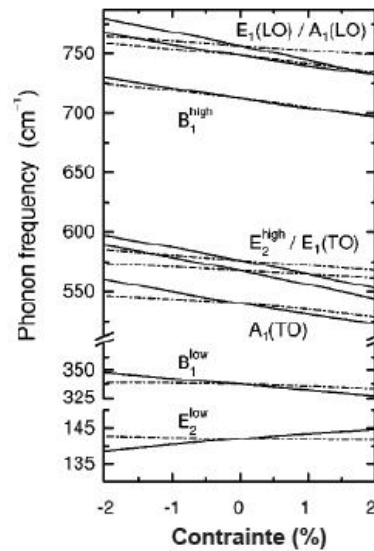


Figure 2.6 Evolution des fréquences de vibration des différents modes de phonon du GaN, en fonction d'une contrainte bi-axiale dans le plan xy (lignes continues) et d'une contrainte verticale suivant l'axe z (lignes discontinues) [7].

2.7 Emission de lumière

Au regard de l'optoélectronique, un semi-conducteur peut être schématisé par un système à deux bandes d'énergie séparées par un intervalle d'énergie caractéristique appelé : Energie de bande interdite (E_g) comme le montre la figure 2.7.

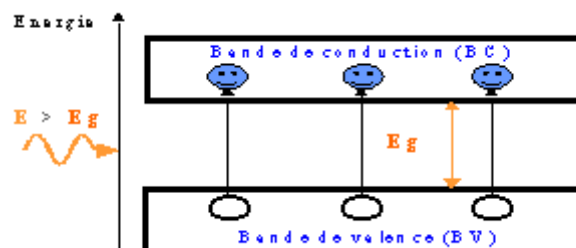


Figure 2.7 Représentation schématique de la structure de bande d'un semi-conducteur soumis à une énergie lumineuse ε [30].

En absence d'énergie extérieure, les électrons sont localisés dans le niveau de plus basse énergie (bande de valence) et ne pourront atteindre la bande d'énergie supérieure (bande de conduction) que si un flux lumineux de photons leur fournit l'énergie nécessaire pour le faire. En effet, si l'on soumet ce matériau à un flux lumineux d'énergie $E < E_g$, les électrons restent dans la bande de valence. Si l'énergie incidente E est supérieure à E_g , les électrons passeront dans le niveau d'énergie supérieur. Ce phénomène de transition d'électrons vers des états de plus haute énergie s'appelle « l'absorption induite » et le système sera dans un état excité. Le retour à son état de plus basse énergie (état fondamental) s'accompagne de l'émission d'un photon d'énergie E_g . Ce phénomène est appelé « émission spontanée ». C'est le processus d'émission le plus fréquemment rencontré et qui est à l'origine de la majorité des éclairages traditionnels. En particulier, il est responsable de l'émission des diodes électroluminescentes. L'énergie du rayonnement émis (E_g) est inversement proportionnelle à la longueur d'onde λ qui, comprise entre 350 et 800 nm, est caractéristique d'une couleur visible. La couleur, ou en d'autres termes la longueur d'onde d'émission, est donc une caractéristique du matériau semi-conducteur utilisé dans le dispositif.

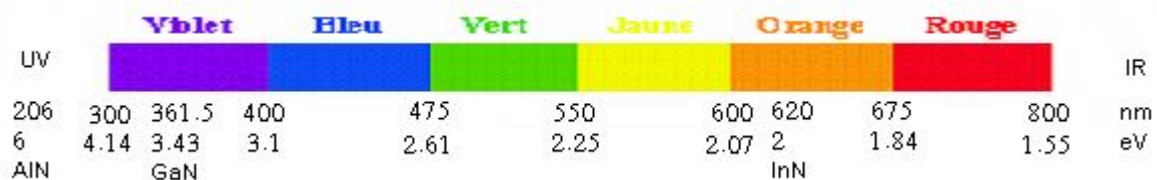


Figure 2.8 Correspondance entre longueur d'onde d'émission (en nm) et couleur dans le domaine du spectre visible [31] .

Les énergies de bande interdite des nitrures de gallium (GaN) et d'indium (InN) sont respectivement égales à 3.4eV (émission dans le bleu-violet : $\lambda = 365\text{nm}$) et 1.9eV (émission dans le rouge : $\lambda = 653\text{nm}$). On peut alors espérer couvrir toute la gamme du spectre visible avec des matériaux semi-conducteurs à base de nitrure.

2.8 Propriétés optoélectroniques

Dans les prochains paragraphes, seront abordées les propriétés optoélectroniques des nitrures d'éléments III, principalement dans leur phase hexagonale. Une grande partie sera consacrée à GaN. Ensuite seront abordées les autres nitrures AlN et InN. AlN était surtout connu et employé en tant que céramique pour sa stabilité thermique et chimique. InN quant à lui,

semble être un des semiconducteurs III-V les moins bien connus, à cause des difficultés posées par sa croissance.

2.8.1 Structure de bande, propriétés optiques et effets de contrainte

2.8.1.1 GaN

Comme pour tout semiconducteur des groupes IV, III-V ou II-VI, le sommet de la bande de valence en $k=0$, est constitué d'orbitales hybrides liantes de type p, et le minimum de la bande de conduction d'orbitales antiliantes de type s.

J.J.Hopfield [32] a développé un modèle simple, en $k=0$, du sommet de la bande de valence d'un tel semiconducteur, prenant en compte le couplage spin-orbite et une anisotropie spatiale, et qui peut donc s'appliquer aux structures wurtzite pour lesquelles l'axe c est une direction privilégiée. Les résultats sont particulièrement simples, fonction de peu de paramètres : le sommet de la bande de valence est éclaté en trois doublets d'énergies.

Un développement plus détaillé, prenant en compte l'anisotropie du couplage spin-orbite, ainsi que le développement autour de $k=0$ en approximation $k.P$ est schématisé dans la figure 2.9. Le minimum de la bande de conduction, en $k=0$, est de symétrie Γ_7 [32], [33].

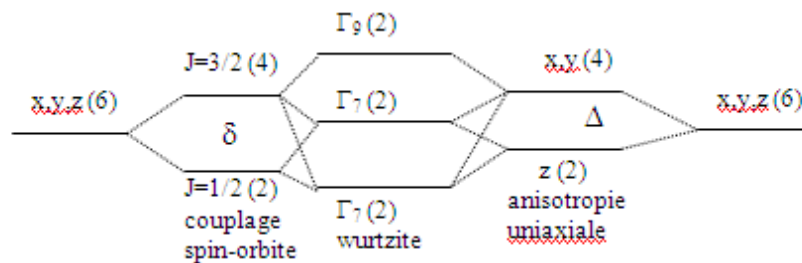


Figure 2.9 Schéma d'éclatement d'un multiplet p sous l'effet d'une anisotropie et du couplage spin-orbite (les dégénérescences sont indiquées entre parenthèses) : bande de valence d'une wurtzite en $k=0$ [33].

L'examen des fonctions d'onde montre que les transitions entre la bande de valence de symétrie Γ_9 notée souvent A, et la bande de conduction, seront interdites pour des photons polarisés parallèlement à l'axe c (Z). Les transitions mettant en jeu les bandes de valence de symétrie Γ_7 (notées B et C), sont autorisées pour toutes polarisations des photons.

Les transitions observées en réflectivité en figure 2.10 ne sont pas des transitions bande à bande, mais des transitions excitoniques. L'énergie d'une transition excitonique est égale au gap diminué de l'énergie de liaison de l'exciton.

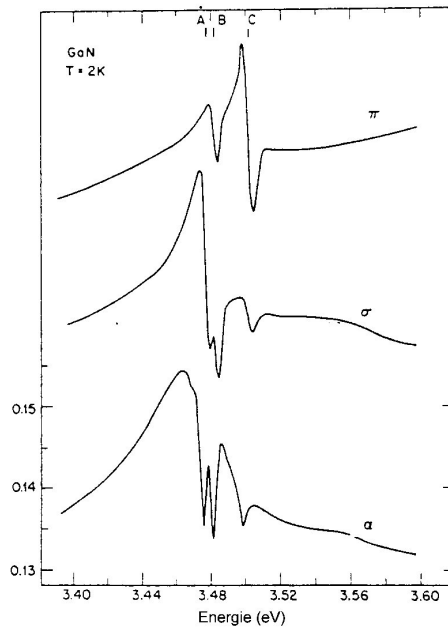


Figure 2.10 Spectres de réflectivité de GaN pour des photons incidents de polarisation notées π ($E//c, k\perp c$), σ ($E\perp c, k\perp c$) et α ($E\perp c, k//c$) illustrant les règles de sélection optiques liées aux symétries des bandes de valence de la wurtzite. A, B et C sont les trois excitons issus de ces trois bandes [34].

Donner la valeur exacte du gap fondamental de GaN se heurte à une difficulté, les échantillons de GaN de haute pureté disponibles sont toujours épitaxiés. Rappelons aussi que les substrats de GaN massif sont aussi fortement dopés, intentionnellement ou non, ce qui influe sur leurs paramètres de maille. L'hétéro-épitaxie selon (0001) se traduit par une contrainte biaxiale dans le plan de base, ceci ne change pas la symétrie du cristal et, contrairement au cas des cristaux cubiques, il est difficile de discerner la situation correspondant à un cristal relaxé. Les déformations ε_{ij} et les contraintes σ_{ij} sont reliées dans une structure wurtzite par la relation matricielle (2.19) où les C_{ij} sont les constantes de rigidité du matériau (données en GPa) :

$$\begin{pmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \sigma_3 \\ \sigma_4 \\ \sigma_5 \\ \sigma_6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\ C_{13} & C_{13} & C_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{66} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \varepsilon_3 \\ \varepsilon_4 \\ \varepsilon_5 \\ \varepsilon_6 \end{pmatrix} \quad (2.19)$$

Pour une contrainte hétéroépitaxiale dans le plan de base (\perp à c), ε_1 ($=\varepsilon_2$) est la vraie variable expérimentale et ce système se réduit à :

$$\begin{cases} \sigma_3 = \sigma_4 = \sigma_5 = \sigma_6 = 0 & ; & \sigma_1 = \sigma_2 = (C_{11} + C_{12} - 2C_{13}^2/C_{33})\varepsilon_1 \\ \varepsilon_4 = \varepsilon_5 = \varepsilon_6 = 0 & ; & \varepsilon_3 = -2(C_{13}/C_{33})\varepsilon_1 \end{cases} \quad (2.20)$$

Les valeurs des C_{ij} reportées dans le tableau 2.6 ont été mesurées par diffusion Brillouin [35]. Pour GaN sous contrainte biaxiale selon l'axe c , on déduit que $\varepsilon_3/\varepsilon_1 \approx -0.5$ [36].

L'hétéroépitaxie de GaN sur saphir, SiC ou Si peut se traduire par des déformations à température ambiante. Au premier ordre, ceci aura un effet sur les gaps E_c - E_v et sur le paramètre du champ cristallin Δ_{cr} . Ces effets sont variables selon les substrats et les conditions de croissance ; ils ont été à l'origine d'incertitudes concernant le gap de GaN, jusqu'à leur interprétation en termes de contraintes résiduelles en 1995 [37].

Le gap excitonique fondamental de GaN peut s'étendre de 3.49eV (gap A, épitaxie sur saphir) à 3.42eV (gap B, épitaxie sur SiC), soit une variation de 70meV [38].

Le tableau 2.5 donne quelques grandeurs physiques de GaN en phase wurtzite. Les gaps excitoniques A, B et C

	GaN	AlN	InN
E_A (eV)	3.477		1.91
E_B (eV)	3.482		
E_C (eV)	3.497	6.28	
Δ_{cr} (meV)	8.4	-210	41
ε_0 ($//$; \perp)	10.4 ; 9.5	9	
ε_∞ ($//$; \perp)	5.01 ; 5.04	4.84	9.3
m_e/m_0 ($//$; \perp)	0.228 ; 0.237	0.32	0.11 ; 0.10
m_{hh}/m_0 ($//$; \perp)	2.0 ; 0.33	3.53	1.67 ; 1.61
m_{lh}/m_0 ($//$; \perp)	1.19 ; 0.35	3.53	1.67 ; 0.11
m_{sh}/m_0 ($//$; \perp)	0.17 ; 1.27	0.25	0.10 ; 1.67
ω_{TO} ($//$; \perp) (cm^{-1})	537 ; 561	614 ; 673	436 ; 471

$\omega_{LO} (// ; \perp) (\text{cm}^{-1})$	735 ; 743	893 : 916	593 ; 572
$\omega_{E2} (l ; h) (\text{cm}^{-1})$	144 ; 569	252	high : 488
$C_{11} (\text{GPa})$	390	396	223
$C_{12} (\text{GPa})$	145	137	115
$C_{13} (\text{GPa})$	106	108	92
$C_{33} (\text{GPa})$	398	373	224
$C_{44} (\text{GPa})$	105	116	48
$C_{66} (\text{GPa})$	123	207	141

Tableau 2.6 Quelques grandeurs physiques des nitrures GaN, AlN et InN à basse température. Les symboles // et \perp signifient parallèlement et perpendiculairement à k_z [21].

Les constantes diélectriques statiques et hautes fréquences de GaN, ont été mesurées dès 1973 par Barker et Ilegems [39], par réflectivité infra-rouge. Au voisinage du gap, le coefficient d'absorption est de l'ordre de 10^5cm^{-1} , plus grand que dans les semiconducteurs usuels type GaAs [40].

Le bord de bande du GaN cubique a été déterminé au cours des dernières années. Sa valeur est autour de 3.2eV à la température ambiante, légèrement au-dessous de celle du GaN hexagonal. Cette valeur correspond à un gap direct [21].

2.8.1.2 AlN

Le gap d'AlN est de 6.2 eV à 300 K [41], et de 6.28 eV [42] à basse température, il est donc situé dans les UV durs. Les valeurs du coefficient de couplage spin-orbite δ et du champ cristallin Δ_{cr} , donnés dans le tableau 2.6, sont théoriques [43]. Il faut noter l'inversion du signe de Δ_{cr} entre GaN et AlN. C'est pourquoi la valeur du gap donnée est dans la ligne correspondant à E_B dans ce tableau, et ne correspond pas en fait à un gap excitonique. Il y a des valeurs théoriques différentes pour le champ cristallin, mais toutes sont en accord sur le signe. La valeur du coefficient de couplage spin-orbite est voisine de celle de GaN [44].

Les masses effectives d'électrons et des trous sont aussi calculées. Comme dans GaN, l'interaction spin-orbite rend la dispersion des bandes de valence non parabolique. D'une manière générale, AlN est considéré comme isolant, et peu d'éléments sont connus sur ses propriétés de transport. Les valeurs des énergies de phonons, données dans le tableau 2.6, sont déduites d'expériences de diffusion Raman [45].

2.8.1.3 InN

Le composé InN est très difficile à synthétiser, et ses propriétés ont donc été principalement étudiées sur des échantillons polycristallins orientés. Quelques grandeurs physiques sont résumées dans le tableau 2.6 ; comme dans le cas d'AlN, le gap a été mesuré par des mesures de coefficient d'absorption, et il ne correspond donc pas à un gap excitonique. Les valeurs du couplage spin-orbite, du paramètre de champ cristallin [46], des masses effectives de trous [47] sont théoriques. Tous les auteurs donnent le même signe au terme de champ cristallin, et la symétrie de la bande de valence d'InN relaxé est donc la même que celle de GaN relaxé. Très peu de spectres de luminescence d'InN ont été publiés, ce qui illustre les difficultés présentées par la croissance de ce composé.

Chin et al. [48] ont analysé la mobilité des électrons dans InN pour des densités de Hall comprises entre 10^{16} et 10^{17}cm^{-3} . Les mécanismes principaux de diffusion sont, comme pour GaN, la diffusion piézoélectrique et par impuretés ionisées à basse température, et la diffusion par les phonons optiques polaires à température ambiante.

Nous donnons au tableau 2.7, les transitions bord de bande E_g (eV) des nitrures cubiques et le paramètre spin orbite Δ_{so} .

Matériau		Valeur de E_g (en eV) [24] calculée par :			Eg expérimentale (en eV)
		Current first principes	Current semi empirical	Autres méthodes	
GaN	E_g	1.9	3.17	3.1	3.2 [49]
	Δ_{so}		11	15	
AlN	E_g	4.3	6.02	6-5.94	5.34 [50]
	Δ_{so}		11	19	
InN	E_g		2.18	2.2	
	Δ_{so}		11	6	

Tableau 2.7 transitions de bord de bande E_g (eV) des nitrures cubiques. (Δ_{so} est le paramètre spin orbite donné en meV) [3].

2.8.2 Effet de la température sur la luminescence dans GaN

La figure 2.11 présente la dépendance en température des spectres de luminescence typiques de GaN non dopé intentionnellement, épitaxié sur saphir.

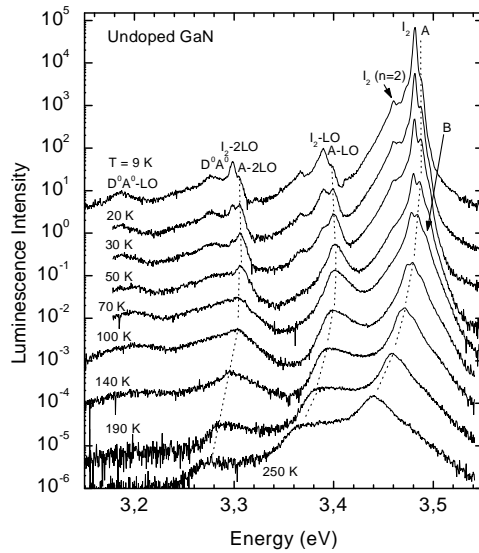


Figure 2.11 Spectres typiques de photoluminescence bord de bande de GaN non intentionnellement dopé épitaxié sur saphir, en fonction de la température [33].

A basse température ($T \leq 10$ K), les spectres sont usuellement dominés par la recombinaison d'excitons liés aux donneurs neutres, souvent notée I_2 (GaN non dopé est de type n). Dans GaN épitaxié sur saphir, cette raie a une largeur de 3 à 4 meV [54]. Dans GaN homoépitaxié, cette largeur est de quelques μ eV et les recombinaisons d'excitons liés à différents donneurs peuvent être résolues [51]. La transition I_2 est accompagnée de plusieurs répliques phonon mettant en jeu les phonons LO, séparées les unes des autres de ~ 91.5 meV (I_2 -LO, I_2 -2LO, etc...). Lorsque l'on augmente la température, la luminescence I_2 disparaît progressivement, avec une énergie d'activation correspondant au dépiégeage des excitons ($E_{act} \sim 6$ meV) et le spectre de luminescence est alors dominé par les excitons libres à partir d'une certaine température, qui dépend de la densité de donneurs et de centres de recombinaisons non radiatives (à peu près 100K en figure 2.11). Quand la température augmente, l'élargissement homogène dû aux interactions avec les phonons acoustiques, puis optiques (principalement longitudinaux) domine. A température ambiante, la largeur du pic excitonique A est légèrement inférieure à 30 meV. Seuls les excitons libres ayant un vecteur k voisin de 0, sont responsables de la luminescence. La luminescence de GaN non dopé à la température ambiante est dominée par les recombinaisons d'excitons libres et leurs répliques.

2.8.3 Effet du dopage sur la luminescence dans GaN

Dans GaN non dopé ou dopé type n ; on observe fréquemment une bande de luminescence très large, dont le maximum se situe vers 2.2 ± 0.1 eV : la bande jaune. Le rapport d'intensité

entre cette bande et la luminescence bord de bande peut être utilisé pour estimer la qualité optoélectronique de l'échantillon. Ce rapport varie avec le dopage et le niveau d'injection [52]. La luminescence jaune étant souvent plus intense près des interfaces hétéroépitaxiaux, les dislocations peuvent jouer un rôle sur l'intensité de cette bande. Des calculs d'énergie totale favorisent la lacune de gallium comme responsable de la bande jaune [53]. Lorsque GaN est dopé n, le dopage résiduel étant de l'ordre de 10^{17} cm^{-3} , les transitions de type I_2 s'élargissent, et se décalent légèrement vers le rouge. Pour des dopages très grands ($n \gg N_c \sim 10^{18} \text{ cm}^{-3}$), les spectres de luminescence présentent un décalage vers le bleu [54].

Le dopage p (par magnésium) se traduit tout d'abord pour les faibles dopages, par l'augmentation de la luminescence liée aux transitions donneurs - et/ou électrons-accepteurs résiduels vers 3.27eV, et de la luminescence des excitons liés aux accepteurs (raie I_1). Pour de plus forts dopages, tels que ceux nécessaires dans les dispositifs ($> 10^{17} \text{ cm}^{-3}$), la bande de recombinaisons donneurs-accepteurs est décalée vers le rouge (typiquement $E \sim 3.1 \text{ eV}$) [55], ceci pouvant être dû à la perturbation dans l'espace direct de la structure de bande liée aux grandes densités de dopants. Les recombinaisons excitoniques sont aussi décalées vers le rouge. Il est à noter que dans le cas de GaN de type p épitaxié par EPVOM (ce n'est pas le cas en EJM), la photoluminescence est souvent dominée par une bande émettant dans le bleu (2.8-2.9eV) de largeur de l'ordre de 300 meV [55].

2.8.3.1 Dopage n

Le dopage résiduel de GaN est de type n. La lacune d'azote dans GaN étant un donneur et l'azote étant difficile à incorporer dans le cristal, une grande densité de lacunes d'azote a été longtemps rendue responsable du dopage n de GaN.

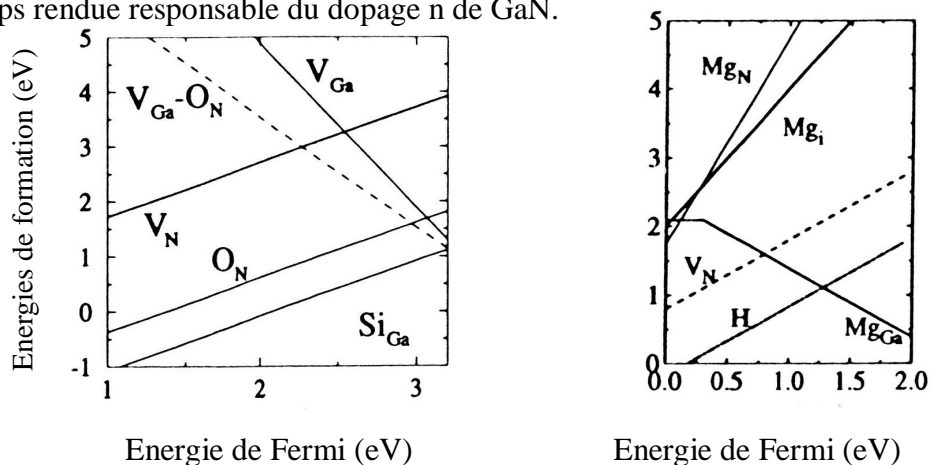


Figure 2.12 Energies de formation calculées de divers niveaux ponctuels en fonction du niveau de Fermi dans GaN de types n et p [56] [57].

La figure 2.12 montre que la lacune d'azote, simple donneur, a une très grande énergie de formation dans GaN de type n, bien plus que celles de donneurs substitutionnels tels que le silicium ou l'oxygène, celles-ci pouvant donc être considérées comme les principales responsables du dopage résiduel n de GaN. Le principal défaut ponctuel pouvant jouer le rôle d'accepteur compensateur dans GaN de type n est la lacune de Ga, qui est un accepteur triple, ou son complexe avec l'oxygène premier voisin, qui est un accepteur double (figure 2.12). L'énergie de liaison calculée de ces accepteurs (1.1eV) en font donc de bons candidats pour être l'accepteur profond responsable de la 'bande jaune' de luminescence [56].

2.8.3.2 Dopage p

Ainsi que le montre la figure 2.12, les principaux donneurs résiduels pouvant compenser les accepteurs dans GaN de type p, en dehors des impuretés donatrices usuelles (O, Si) sont la lacune d'azote et H en site antiliant azote [56]. En situation où l'hydrogène est absent, la lacune d'azote étant le principal centre compensateur, le dopage p est d'autant plus efficace que la température de croissance est faible. En présence d'hydrogène, l'incorporation de magnésium (ou autre accepteur), en baissant le niveau de Fermi, favorise l'incorporation d'hydrogène et cette interaction permet une meilleure incorporation de l'accepteur cependant compensé par l'hydrogène [58]. Toutes ces remarques, ainsi que la formation de complexes (Mg, H), expliquent les difficultés rencontrées initialement pour le dopage p en EPVOM : il est nécessaire de recuire les échantillons sous une atmosphère de N₂ pour activer le magnésium. En revanche ; en EJM, le dopage p peut être obtenu sans recuit : cette technique de croissance n'utilise pas H₂ (bien qu'une des variantes utilise NH₃), et elle utilise des températures de croissance plus faibles que l'EPVOM.

D'autres accepteurs potentiels de GaN ont été étudiés théoriquement et expérimentalement.

Le dopage avec C, Ca et Be ont donc été tentés, sans grand succès pour la conductivité. La photoluminescence a clairement montré que le béryllium crée un niveau accepteur peu profond (~90meV) dans GaN [60], mais la formation de complexes profonds à fort dopage prohibe l'obtention d'une conductivité de type p. Le zinc induit un niveau accepteur profond (~340meV) et des complexes responsables de bandes de luminescence profondes [61].

2.8.3.3 Codopage [13]

Dans GaN, le codopage Mg-O permet de gagner un ordre de grandeur sur la concentration en trous libres ($2 \times 10^{18} \text{cm}^{-3}$) par rapport au dopage simple au magnésium. La résistivité chute

alors de 8 Ω .cm à 0.2 Ω .cm. Cette concentration plus élevée de trous est due à une diminution de l'énergie d'ionisation de l'accepteur [62].

2.9 Diodes électroluminescentes (D.E.L) bleues à base de GaN

Depuis 1997, la disponibilité sur le marché de diodes électroluminescentes bleues, vertes et ambrées, permet d'espérer à terme, l'obtention de toute la gamme du spectre visible avec des dispositifs semi-conducteurs. Compte tenu de leur faible énergie de consommation et de leur haute fiabilité, leur utilisation pour le contrôle routier (feux tricolores) et l'éclairage domestique, pourrait succéder à l'emploi des lampes conventionnelles à incandescence ou fluorescentes. De plus ; la possibilité qu'offrent les nitrures, du fait de leurs propriétés intrinsèques d'élaborer des lasers bleus et ultraviolets, permet la fabrication de systèmes qui présentent de plus grandes capacités de stockage et de lecture des informations digitales (densités supérieures au gigabit par centimètre carré) : la capacité est multipliée par quatre.

Le développement des émetteurs bleus est très important car l'émission bleue est le dernier émetteur solide qui manquait pour la reconstitution de la lumière blanche. Les composants à base de nitrure de gallium (GaN) sont les plus performants dans ce domaine.

Les recherches sur GaN ont débuté dans les années 60 et la première DEL (diode électroluminescente) bleue à base de GaN a été réalisée en 1971 [1]. Le développement du GaN a été limité par la mauvaise qualité du matériau obtenu, et par les échecs dans les tentatives de dopage p. Des recherches récentes ont abouti à avoir un GaN de bonne qualité, et à la mise au point du dopage p. Ces deux réussites ont développé les DEL et lasers à base de nitrure. GaN a une bande interdite directe, une grande stabilité chimique, de très bonnes propriétés mécaniques et physiques ; ce qui lui permet d'être non seulement attractif pour les émetteurs bleus mais aussi pour l'électronique haute température, haute puissance et haute fréquence.

L'élaboration des alliages InGaN a permis au nitrure de concurrencer le GaP pour l'obtention de DEL vertes. Le tableau 2.8 représente les performances des DEL à base de nitrure, comparées à celles obtenues par d'autres matériaux (ils ont un rendement plus important).

	Matériau	Longueur d'onde d'émission	Intensité lumineuse	Puissance émise	Rendement quantique externe
Rouge	GaAlAs	660nm	1790mCd	4855 μ W	12.83%
Vert	GaP	555nm	63mCd	30 μ W	0.07%
Vert	InGaN	500nm	2000mCd	1000 μ W	2.01%
Bleu	SiC	470nm	9mCd	11 μ W	0.02%
Bleu	InGaN	450nm	2500mCd	3000 μ W	11%

Tableau 2.8: Comparaison des performances des DEL à base de nitrure avec les autres matériaux [63].

Compte tenu des performances obtenues avec les nitrures, l'industrialisation de DELs bleues et vertes a alors été très rapide; elle a précédé la compréhension des phénomènes physiques mis en jeu dans ces matériaux. Aujourd'hui, l'un des objectifs majeurs de la recherche fondamentale sur les nitrures d'éléments III est d'identifier les paramètres clés qui gouvernent l'émission de lumière dans les nanostructures (puits ou boîtes quantiques) utilisées comme couches actives des dispositifs électroluminescents. Les deux problématiques récurrentes concernent, d'une part les effets de polarisation liés à la structure hexagonale de ces matériaux, et d'autre part les effets de localisation des porteurs dans l'alliage InGaN.

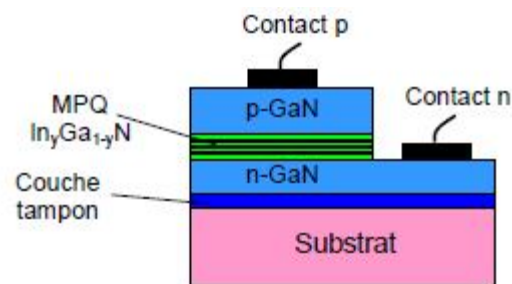


Figure 2.13 Diode électroluminescente (LED) à multi-puits quantiques (MPQ) [13].

2.10 Lasers à base de GaN

Les diodes LASER, dont l'acronyme « LASER » signifie « amplification de lumière par émission stimulée de rayonnement » (Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation), utilisent un processus d'émission appelé "EMISSION STIMULEE" où un photon d'énergie E est nécessaire pour induire, ou stimuler la désexcitation. Le photon émis lors du retour à un état d'énergie inférieur, a la particularité de posséder la même direction de propagation que le photon incident et d'être en phase avec lui. Au cours de ce processus, il y a amplification de la lumière avec un gain élémentaire égal à deux (Figure 2.14).

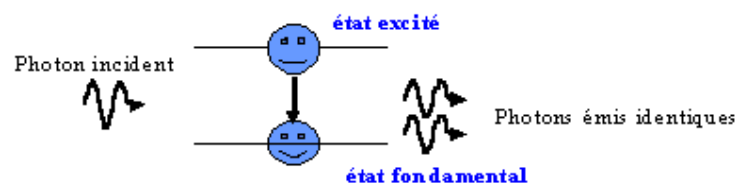


Figure 2.14 Principe de l'émission stimulée [30].

On démontre que cette amplification de lumière par émission stimulée dans un milieu matériel excité ne peut avoir lieu que si le nombre d'électrons dans la BC (états excités) est supérieur à celui dans la BV (états fondamentaux), le processus d'émission stimulée ayant ainsi une

probabilité supérieure à celle de l'absorption et de l'émission spontanée. Il faut pour cela, réaliser une inversion de population entre deux niveaux d'énergie, inversion rendue possible grâce à un «POMPAGE» d'origine électrique ou optique (Figure 2.15).

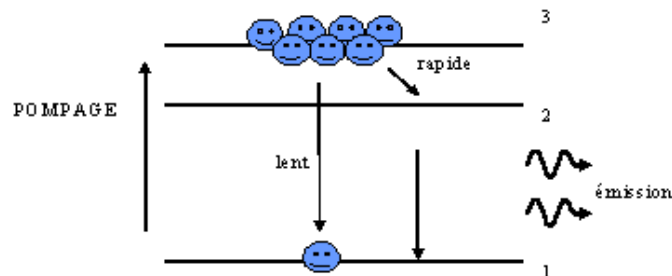


Figure 2.15 Inversion de population par pompage et retour à l'équilibre [30].

Pour réaliser une inversion de population, il faut disposer de matériaux possédant au moins trois niveaux électroniques disposés suivant le schéma de la figure 2.15. Un flux lumineux d'énergie E permet d'exciter les électrons du niveau le plus bas au niveau le plus haut (pompage 1-3). Les électrons doivent alors se désexciter plus rapidement sur le niveau 2 que sur le 1, de façon à ce que l'émission stimulée puisse se produire entre les niveaux.

LA CAVITE LASER (figure 2.16) permet d'entretenir le phénomène d'émission et de conférer au LASER ses caractéristiques particulières. Elle est constituée de deux surfaces réfléchissantes, normales au flux émis de photons, qui sont distantes de $d = n (\lambda/2)$ où n est un entier quelconque. Les miroirs dont la réflectivité est proche de 100 % vont renvoyer, suivant une direction perpendiculaire, la lumière émise dans le milieu actif (semi-conducteur), il y aura donc, après chaque réflexion, amplification de l'émission stimulée. Un des deux miroirs réfléchissant va permettre de laisser sortir l'émission LASER qui présente les caractéristiques suivantes :

- DIRECTIONNALITE : le faisceau émergent est fortement parallèle grâce à un alignement le plus précis possible des miroirs de la cavité.
- PONTUALITE : spot LASER ($< 500\mu\text{m}$ de diamètre).
- MONOCHROMATISME : seule les photons de longueur d'onde λ seront retenus dans la cavité, en raison de sa condition de résonance ($d = n (\lambda/2)$) ; l'émission laser sera ainsi constituée d'une seule longueur d'onde, c'est à dire d'une seule couleur.
- BRILLANCE : très supérieure à celle des sources conventionnelles (mille soleils).

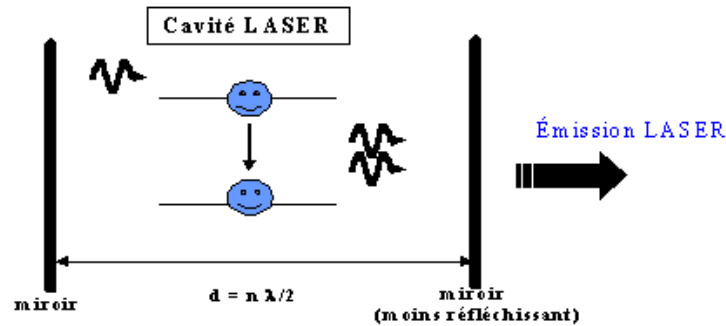


Figure 2.16 Schéma d'une cavité LASER [30].

La figure 2.17 représente le schéma d'une diode laser bleue dans laquelle la couche active (responsable de l'émission) est une structure à multi-puits quantiques (In,Ga)N/GaN.

Malgré l'avancée technologique et commerciale de ces dispositifs, certains paramètres fondamentaux des matériaux utilisés restent fort peu connus. La difficulté d'élaboration de ces matériaux et du contrôle de leurs propriétés électriques (maîtrise du dopage) a longtemps limité la détermination de ces paramètres ainsi que leur utilisation dans les composants électroniques. Le nitrure de gallium (GaN), par exemple, n'existe pas à l'état naturel, il doit donc être déposé sur un autre matériau (saphir, silicium ...) qui ne présente pas les mêmes propriétés structurales que le substrat. Ce désaccord altère les qualités optiques et électroniques de ces matériaux. L'optimisation des dispositifs nécessite donc une connaissance approfondie des paramètres fondamentaux et des effets physiques qui régissent les propriétés optiques et électroniques de ces semi-conducteurs nitrurés.

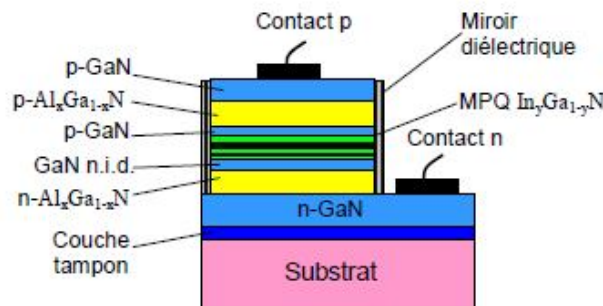


Figure 2.17 Diode laser de type SCH (hétérostructure à confinement séparé) à multi-puits quantiques (MPQ) [13].

Référence :

- [1] J.I Pankov., E.A Miller., J.E Berkeyheiser., RCA Review32, (1971) 383.
- [2] Nakamura (S.) and Fasol (G), The Blue Laser Diode, Springer – Berlin, 1997
- [3] Martinez Guerrero, Esteban Elaboration en épitaxie par jets moléculaires des nitrures d'éléments III en phase cubique, thèse de doctorat, INSA Lyon, 2002.
- [4] Stephan Fanget, matériaux et hétérostructures à base de nitrures d'éléments III en phase cubique et hexagonale pour l'optoélectronique, thèse de doctorat, INSA Lyon, 2002.
- [5] R. Castagné, J.P Duchemin, M.Gloanie, Ch.Rhumelhard, Circuits integers en Arsenic de Gallium, Physique, technologie et conception, édition Masson, Mars 1989.
- [6] NSM Archives, Semiconductors on NSM, 2003.
- [7] Laurent Nevou, Emission et modulation intersousbande dans les nanostructures de nitrures, thèse de doctorat, Faculté des sciences d'Orsay, 2008.
- [8] R. Dingle, D. D. Sell, S. E. Stokowski, M. Ilegems, Absorption, Reflectance, and Luminescence of GaN Epitaxial Layers, Phys. Rev. B, 4, 1211 (1971)
- [9] V.Yu. Davydov, A.A. Klochikhin, V.V. Emtsev, D.A. Kurdyukov, S.V. Ivanov, V.A. Vekshin, F. Bechstedt, J. Furthmüller, J. Aderhold, J.Graul, A.V. Mudryi, H. Harima, A. Hashimoto, A. Yamamoto, E.E. Haller, Band Gap of Hexagonal InN and InGaN Alloys Phys. Stat. Sol. (b) 234, 787 (2002)
- [10] I. Vurgaftman, et J. R. Meyer, Band parameters for nitrogen-containing semiconductors, J. Appl. Phys. 94, 3675 (2003)
- [11] Bougrov V., Levinshtein M.E., Rumyantsev S.L., Zubrilov A., in Properties of Advanced Semiconductor Materials GaN, AlN, InN, BN, SiC, SiGe . Eds. Levinshtein M.E., Rumyantsev S.L., Shur M.S., John Wiley & Sons, Inc., New York, 2001, 1-30.
- [12] I. Vurgaftman, J. R. Meyer, et L. R. Ram-Mohan, Band parameters for III–V compound semiconductors and their alloys, J. Appl. Phys. 89, 5815 (2001)
- [13] Fabrice Enjalbert, Etude des hétérostructures semi-conductrices III-nitrures et application au laser UV pompé par cathode à micropointes, these de doctorat, l'U. Grenoble 1, 2004.
- [14] Jean-Marc Bethoux, Relaxation des contraintes dans les hétérostructures épaisses (Al,Ga)N : une piste originale pour la réalisation de diodes électroluminescentes à cavité résonante, T H E S E de Docteur en Sciences de l'U. Nice, 2004
- [15] François Dessene, Etude thermique et optimisation des transistors à effet de champ de la filière InP et de la filière GaN, thèse de doctorat, U. de Lille 1, 1998.
- [16] Languy Fabian, Caractérisation de nanocolonnes d'In(1-x)Ga(x)N en vue d'étudier l'origine de la haute conductivité de l'InN, 2007

- [17] Ana Helman, Puits et boîtes quantiques de GaN/AlN pour les applications en optoélectronique à $\lambda \approx 1,55 \mu\text{m}$, these de doctorat, l'U. de paris XI d'orsay, 2004.
- [18] Stéphanie Anceau, Etude des propriétés physiques des puits quantiques d'alliages quaternaires (Al,Ga,In)N pour la conception d'émetteurs ultraviolets, thèse de doctorat, U. Montpellier II, 2004.
- [19] W. J. Moore, J. A. Freitas Jr., R. T. Holm, O. Kovalenkov, V. Dmitriev, Infrared dielectric function of wurtzite aluminum nitride, *Appl. Phys. Lett.*, 86, 141912 (2005)
- [20] Bernard Gil, Group III nitride semiconductor compounds, Ed. Oxford Science Publication, (1998)
- [21] S. L. Chuang, C. S. Chang, k·p method for strained wurtzite semiconductor, *Phys. Rev. B* 54, 2491 (1996)
- [22] M. Leroux, S. Dalmaso, F. Natali, S. Helin, C. Touzi, S. Laugt, M. Passerel, F. Omnes, F. Semond, J. Massies, et P. Gibart, Optical Characterization of $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ Alloys ($x < 0.7$) Grown on Sapphire or Silicon, *Phys. Stat. Sol. (b)* 234, 887 (2002).
- [23] Lambrecht, W.R., Segall B., Anomalous band-gap behavior and phase stability of c-BN-diamond alloys, *Phys. Rev. B* 47 (1993), 9289-9296.
- [24] Pugh, S.K., Dugdale D.J., Brand S., Abram R.A., *Semicond. Sci. Techn.* 14 (1999), 23-31.
- [25] C. A. Arguello, D. L. Rouseau, S. P. S. Porto, First-Order Raman Effect in Wurtzite-Type Crystals, *Phys. Rev.*, 181, 1351 (1969)
- [26] Osamura, K., Naka, S., Murakami, Y., *J. Appl. Phys.* 46 (1975), 3432-3437
- [27] Davydov, V.Yu., Klochikhin A.A., Emtsev V.V., Kurdyukov D.A., Ivanov S.V., Vekshin V.V., Bechstedt F., Furthmuller J., Aderhold J., Graul J., Mudryi A.V., Harima H., Hashimoto A., Yamamoto A., Haller E.E., Band Gap of Hexagonal InN and InGaN Alloys. *Phys. Stat. Solidi (b)* 234(3), (2002 c), 787-795
- [28] V. Darakchieva, E. Valcheva, P. P. Paskov, M. Schubert, T. Paskova, B. Monemar, H. Amano, I. Akasaki, Phonon mode behavior in strained wurtzite AlN/GaN superlattices, *Phys. Rev. B* 71, 115329 (2005)
- [29] J.-M. Wagner, et F. Bechstedt, Properties of strained wurtzite GaN and AlN: Ab initio studies, *Phys. Rev. B* 66, 115202 (2002)
- [30] Laure Siozade, étude expérimentale et théorique de structure semi-conducteur à base de nitrure de gallium, Ecole doctorale des Sciences Fondamentales, U. Clermont-Ferrand II.
- [31] Hamdoune AEK, Elaboration du nitrure de gallium ; Etude de ses propriétés et Applications". U. Tlemcen, 2006.

- [32] Hopfield J.J. *J. Phys. Chem. Solids* 15, (1960) 97.
- [33] M. Leroux, *Matériaux pour l'Optoélectronique, Traité EGEM série Optoélectronique*, tome 7, édité par G.Roosen, (Hermes Science Publications), Paris,2003.
- [34] Dingle R., Sell D.D., Stokowski S.E., Ilegems M. *Phys. Rev. B* 4, (1971), 1211.
- [35] Polian A., Grimsditch M., Grzegory I., *J. Appl. Phys.* 79, (1996) 343.
- [36] Lahreche H., Leroux M., Laügt M., Vaille M., Beaumont B., Gibart P., *J. Appl. Phys.* 87, (2000) 577.
- [37] Gil B., Briot O., Aulombard R-L., *Phys. Rev. B* 52, (1995) R17028.
- [38] Gil B., GaN (II), édité par J.Pankove et T.Moustakas, *Semiconductor and Semimetals*, Vol. 57, Academic, New York, 1999, Vol. 57, p. 209.
- [39] Ilegems M., *J. Cryst. Growth*, 13/14, (1972) 360.
- [40] Muth J.F., Lee J.H., Shmagin I.K., Kolbas R.M., Casey Jr. H.C., Keller B.P., Mishra U.K., Denbaars S.P., *Appl. Phys. Lett.* 71, (1997) 2572.
- [41] Yim W.M., Stofko E.J., Zanzucchi P.J., Pankove J.I., Ettenberg M., Gilbert S.L., *J. Appl. Phys.* 44, (1973) 292.
- [42] Perry P.B., Rutz R.F., *Appl. Phys. Lett.* 33, (1978) 319.
- [43] Suzuki M., Uenoyama T., *Gallium Nitride and Related Semiconductors*, Edited by J.H.Edgar, S.Strite, I.Akasaki, H.Amano and C.Wetzel, EMIS Datareviews series n°23 (INSPEC, IEE, Londres, 1999) p.175.
- [44] Kim K., Lambrecht W.R.L., Segall B., Van Schilfgaarde M., *Phys. Rev. B* 56, (1997) 763.
- [45] Yoshida A., *Gallium Nitride and Related Semiconductors*, Edited by J.H.Edgar, S.Strite, I.Akasaki, H.Amano and C.Wetzel, EMIS Datareviews series n°23 (INSPEC, IEE, Londres, 1999) p.35.
- [46] Wei S.H., Zunger A., *Appl. Phys. Lett.* 69, (1996) 2719.
- [47] Yeo Y.C., Chong T.C., Li M.F., *J. Appl. Phys.* 83, (1998) 1429.
- [48] Chin V.W.L., Tansley T.L., Osotchan T., *J. Appl. Phys.* 75, (1994) 7365.
- [49] T. Lei, M. Fanciulli, R.J. Molnar, T.D. Graham and J.Scanlon, Epitaxial growth of zinc blende and wurtzitic gallium nitride thin film on (001) silicon, *Appl. Phys. Lett.* 1991, Vol. 59, No. 8, p 944-946.
- [50] M.P Thompson, G.W. Auner, T.S. Zheleva, K.A. Jones, S.J. Simko and N.J. Hilfiker, Deposition factors and band gap of zincblende AlN, *J. Appl. Phys.* 2001, Vol. 89, No.6 p3331- 3336

- [51] Kornitzer K., Ebner T., Thonke K., Sauer R., Kirchner C., Schwegler V., Kamp M., Leszczynski M., Grzegory I., Porowski S., Phys. Rev. B 60, (1999) 1471.
- [52] Grieshaber W., Schubert E.F., Goepfert I.D., Karlicek R.F., Schuman M.J., Tran C., J. Appl. Phys. 80, (1996) 4615.
- [53] Toshio Ogino And Masaharu Aoki: "Mechanism of yellow luminescence in GaN" Jap. J. of Appl. Phys., Vol. 19, No. 12, 5 December 1980.
- [54] Topf M., Kriegseis W., Burkhardt W., Dirnstorfer I., Meister D., Meyer B.K., Materials Science Forum 264-268, (1998) 1323.
- [55] Leroux M., Grandjean N., Beaumont B., Nataf G., Semond F., Massies J., Gibart P., J. Appl. Phys. 86, (1999) 3721.
- [56] Van De Walle C.G., Neugebauer J., Mater. Res. Symp. Proc. 449, (1997) 861.
- [57] Neugebauer J., Van De Walle C.G., Proc. 23rd Int. Conf. On The Physics Of Semiconductors, Édité Par M.Scheffler Et R. Zimmermann (World Scientific Publishing, Singapore 1996) P.2849.
- [58] Neugebauer J., Van De Walle C.G., Proc. 23rd Int. Conf. on the physics of semiconductors, édité par M.Scheffler et R. Zimmermann (World Scientific Publishing, Singapore 1996) p.2849.
- [59] Strite S., Jpn. J. Appl. Phys. 33, (1994) L699.
- [60] Sanchez-Garcia M.A., Calleja E., Monroy E., Sanchez F.J., Calle F., Munoz E., Beresford R., J. Cryst Growth 183, (1998) 2.
- [61] B. Monemar, O. Lagerstrdt, H.P Gislason, J. Appl. Phys. 51 (1980) 625.
- [62] R. Y. Korotkov, J. M. Gregie, B. W. Wessels, "Electrical properties of p-type GaN:Mg codoped with oxygen", Appl. Phys. Lett. 78, 222 (2001).
- [63] Philippe, Agnès Caractérisation électrique et optique du nitrure de gallium hexagonal et cubique en vue de l'obtention d'émetteurs bleus (Thèse) : INSA Lyon, 1999.

Chapitre III :
PROPRIETES DES ALLIAGES
AlGaN ET InGaN

Chapitre 3 : Propriétés des alliages AlGaN et InGaN

3.1 Introduction :

Devant les enjeux économiques et stratégiques importants générés par les multiples applications de semiconducteurs nitrurés dans les domaines civils et militaires, un effort s'est porté sur les matériaux à base de nitrure d'éléments III (GaN, InGaN, AlGaN).

La solution solide (Al,Ga)N est utilisée dans de nombreux dispositifs : couche de confinement optique dans les lasers, couche d'étalement du courant dans les DEL, couche active de photodétecteurs UV, couches génératrices d'électrons dans les transistors à effet de champ à gaz bidimensionnel, dispositifs à ondes acoustiques de surface, etc....

Les effets de contrainte hétéroépitaxiale et de variation du paramètre de champ cristallin avec la composition, ne sont pas encore connus. La proximité des trois sommets de bande de valence dans les nitrures, ainsi que l'inversion du signe du champ cristallin entre GaN et AlN, indiquent qu'il faut en effet prendre en compte les coefficients de courbure des trois gaps.

3.2 Propriétés du ternaire $Al_xGa_{1-x}N$:

AlGaN a reçu le plus d'attention des alliages de la famille des nitrures III-V, en raison de son potentiel d'applications en hétérostructure AlGaN / GaN. Depuis le premier rapport d'une solution solide GaN-AlN en 1976 [1], de nombreux groupes ont fait la synthèse d'AlGaN. Baranov [2] a pu obtenir en 1978, $Al_xGa_{1-x}N$ avec une concentration atteignant 45% d'aluminium. Les mesures par rayons X ont montré que tous les échantillons sont de conductivité de type n, ayant une mobilité décroissante en fonction de la fraction molaire x ; et ils contiennent de petites régions d'AlGaN cubiques [3].

L'étude la plus complète à ce jour sur les propriétés d'AlGaN a été réalisée par Yoshida [4], il a signalé la variation de la concentration des électrons, la mobilité, la résistivité, la constante de réseau et le gap, en fonction de x sur toute la gamme d'alliage (Figure 3.1).

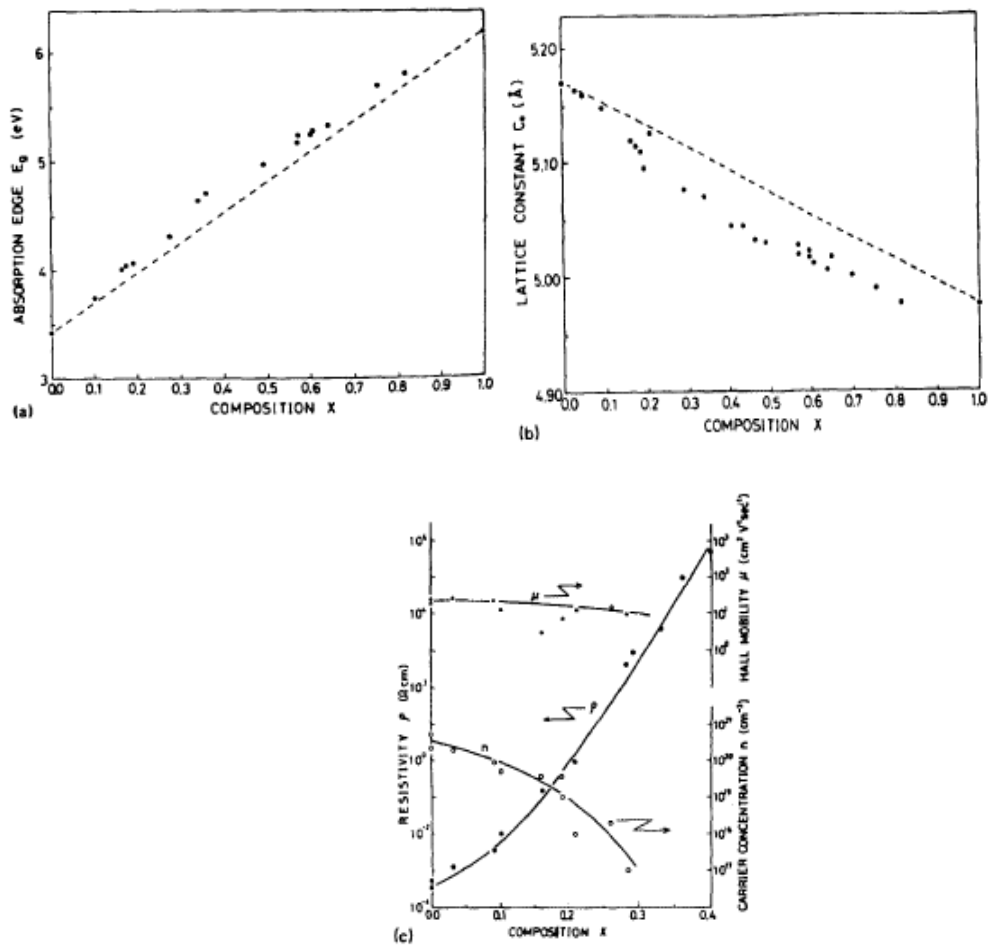


Figure 3.1: La dépendance, à la température ambiante, par rapport à la teneur en aluminium dans l'alliage AlGaN de : a) l'énergie de gap, b) la constante de réseau, c) la résistivité ρ , la concentration n et la mobilité des électrons μ [3].

Pour une concentration d'Al allant de zéro à 0.40, la constante de réseau d' $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ a tendance à être plus petite. La résistivité passe de $10^4 \Omega\cdot\text{cm}$ à $10^6 \Omega\cdot\text{cm}$, et la concentration de transporteurs diminue, passant de $n = 2 \times 10^{20}/\text{cm}^3$ à $n = 10^{17}/\text{cm}^3$.

L'alliage $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ sert souvent de barrière de confinement dans les structures optoélectroniques à base de nitrures. La connaissance de ses propriétés et la maîtrise de sa croissance sont donc des objectifs impératifs pour développer de nouveaux composants, en particulier dans le domaine de l'UV lointain. En première approximation, ses paramètres de maille peuvent se déduire des paramètres de GaN et AlN, par interpolation linéaire (la loi de Végard). Les masses effectives, ses coefficients mécaniques et ses coefficients de Varshni peuvent souvent être approximés par interpolation linéaire des coefficients de GaN et AlN selon l'équation (3.1). Mais pour obtenir des valeurs plus précises, cette interpolation n'est pas suffisante.

$$a_{\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}} = x \cdot a_{\text{AlN}} + (1-x) \cdot a_{\text{GaN}} \quad (3.1)$$

3.2.1 Variation du gap d' $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$, en fonction de la fraction de mole x (Al)

Une des propriétés clés d'un alliage est la dépendance du gap sur la composition. Ce gap augmente avec la fraction molaire Al, selon la relation (3.2).

$$E_g(x) = xE_g(\text{AlN}) + (1-x)E_g(\text{GaN}) - bx(1-x) \quad (3.2)$$

En remplaçant $E_g(\text{AlN})$ et $E_g(\text{GaN})$ par leurs valeurs à 300K, $b=1$, dans la relation (3.2), nous trouvons les équations suivantes [5] qui donnent le gap du $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ en fonction de x :

$$\left\{ \begin{array}{l} E_{g_1}(x) = x^2 - 1.64x + 3.3 \text{ eV} \quad (\text{cubique}) \\ E_{g_2}(x) = x^2 + 1.98x + 3.43 \text{ eV} \quad (\text{hexagonal}) \end{array} \right. \quad (3.3)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} E_{g_1}(x) = x^2 - 1.64x + 3.3 \text{ eV} \quad (\text{cubique}) \\ E_{g_2}(x) = x^2 + 1.98x + 3.43 \text{ eV} \quad (\text{hexagonal}) \end{array} \right. \quad (3.4)$$

L'énergie du gap augmente, et le sommet de la bande de valence au point Γ , se déplace vers le bas quand le taux d'aluminium augmente.

Dans la figure 3.2, nous représentons la variation du gap d' $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ en fonction de la fraction de mole Al.

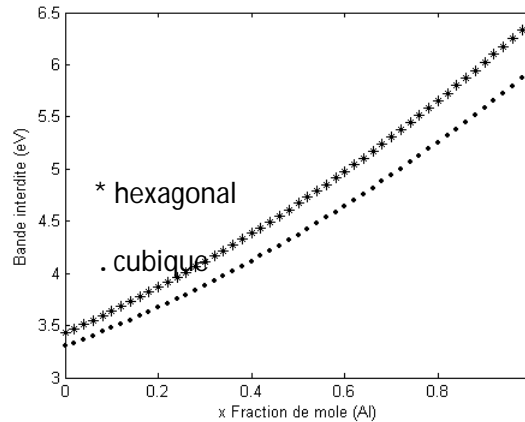


Figure 3.2: Variation du gap dans $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$, en fonction de la mole Al [5].

Pour le gap direct, il ya une variation linéaire par rapport à la composition ; tandis que pour le gap indirect, il ya une variation non linéaire. Les deux courbes se croisent pour une composition de 57% d'aluminium comme le montre la figure 3.3, représentant la variation des énergies des vallées Γ et X en fonction de x (a), ainsi que la variation de l'énergie de gap en fonction de x avec et sans contraintes (b).

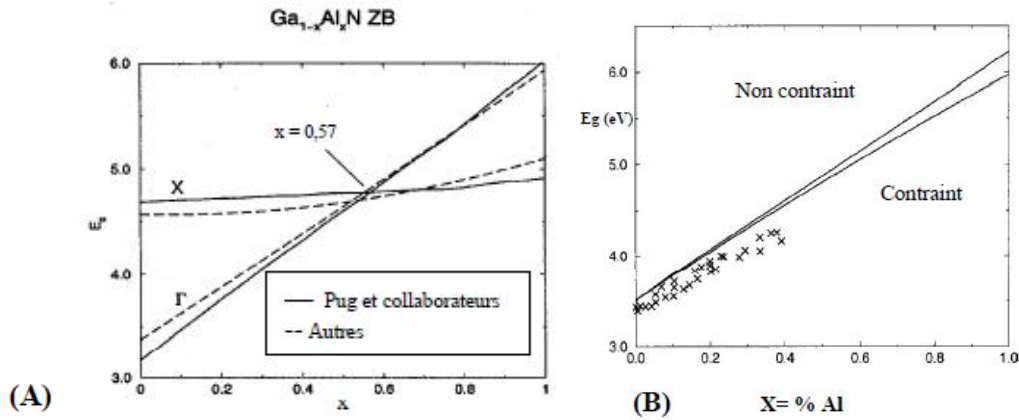


Figure 3.3: A : Variation du gap en fonction de la composition de l'alliage $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ cubique en fonction de la concentration en aluminium [6], B : même variation calculée pour la phase hexagonale des alliages avec et sans contraintes [7].

3.2.1.1 Bowing :

Le bowing est généralement positif pour les alliages III-V, c'est-à-dire que le gap de l'alliage est plus petit que le résultat de l'interpolation linéaire, et peut en principe être fonction de la température. L'origine physique du bowing peut être attribuée à des troubles effets créés par la présence de différents cations-anions. Le bowing a été généralisé pour les termes quadratiques dans la composition de l'alliage. Il exprime les extensions de plusieurs paramètres de bande ; ainsi, dans certains cas il peut être attribué à des mécanismes physiques spécifiques. Mais parfois, il peut simplement correspondre aux paramètres empiriques ou données expérimentales.

Les premières études de la dépendance énergétique sur la composition, ont signalé un bowing petit. Comme pour tout alliage, la mesure du paramètre de courbure du gap est difficile, et donne des valeurs différentes selon les conditions de croissance. Il faut noter que la barre d'incertitude est large, et une des raisons supplémentaires de cette incertitude est l'élargissement inhomogène des transitions optiques, qui suit une loi simple due à l'effet de désordre d'alliage [8], [9]. D'après les spectres de PL et les mesures d'absorption, le paramètre de bowing est de 1.0eV [10], cette valeur continue d'être largement utilisée dans les calculs de la structure de bandes, même si un certain nombre d'études plus récentes mettent en question les conclusions de ces travaux.

3.2.2 Dopage [11]:

Du fait de l'approfondissement des niveaux donneurs et accepteurs avec la composition en Al, le dopage du $(\text{Al,Ga})\text{N}$ est plus difficile que celui du GaN. Il ne pose

cependant pas de problème jusqu'à $x_{Al} = 0.42$ pour le dopage n, et jusqu'à $x_{Al} = 0.13$ pour le dopage p.

3.2.2.1 Dopage de type n [11]

Les nitrures d'éléments du groupe III ont un dopage résiduel de type n, avec une concentration en porteurs libres supérieure ou égale à 10^{16} cm^{-3} [12]. Ce dopage résiduel est principalement dû à certaines impuretés (Si et O). Divers éléments peuvent être utilisés pour le dopage de type n mais le plus courant est le silicium. Dans GaN, les atomes de Si se logent principalement sur les sites du Ga, car Si a un rayon de covalence plus proche de celui de Ga que de celui de N.

Dans l'alliage $Al_xGa_{1-x}N$ non dopé, l'effet de localisation des porteurs augmente avec la concentration en aluminium ; et au-delà de 50%, l'alliage n'est plus semi-conducteur mais isolant. Lorsqu'on dope avec du silicium, cet alliage à forte teneur en aluminium ; on constate une forte augmentation de la conductivité à partir d'une concentration de Si dépassant 10^{18} cm^{-3} . On a alors un semi-conducteur dopé n. On sait à l'heure actuelle doper n les alliages $Al_xGa_{1-x}N$ pour toutes les teneurs en aluminium, y compris 100% (AlN). Il est toutefois important de noter qu'il existe une limite supérieure dans le dopage de type n 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.

3.2.2.2 Dopage de type p [11]

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 (Mg) du fait de sa plus grande solubilité dans GaN. Le problème majeur du Mg est que son énergie d'activation est élevée, et elle augmente encore avec la concentration en aluminium. Ainsi à la température ambiante, seulement quelques pourcents d'atomes de Mg sont ionisés. Pour une concentration typique de 10^{19} cm^{-3} , la concentration des trous est de l'ordre de quelques 10^{17} cm^{-3} [13]. Par ailleurs ; les atomes de Mg ont tendance à s'accumuler sur les cœurs des dislocations, ce qui laisse autour de celles-ci des régions appauvries en Mg dont les propriétés électriques sont altérées. La qualité cristalline du matériau dopé est également dégradée, car Mg 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 Mg. Dans le cas de la croissance par dépôt en phase vapeur avec précurseurs organométalliques (MOCVD), les atomes de Mg doivent être activés par irradiation

électronique ou par recuit thermique sous N_2 pour dissocier les complexes Mg-H. En outre ; dans le cas de la croissance par épitaxie par jets moléculaires (MBE), la présence d'atomes d'hydrogène catalyse l'incorporation du Mg, sans que l'hydrogène 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). Les progrès dans le dopage p, sont toutefois très encourageants.

3.2.2.3 Codopage [11]

Dans $Al_{0.08}Ga_{0.92}N$ le codopage Mg-O a permis d'atteindre des concentrations de dopants $[Mg] = 1.3 \times 10^{20} \text{cm}^{-3}$ et $[O] = 3.4 \times 10^{18} \text{cm}^{-3}$ correspondant également à une concentration en trous de $2 \times 10^{18} \text{cm}^{-3}$ [14].

3.2.2.4 Dopage modulé spatialement [11]

Le dopage modulé spatialement (appelé δ -dopage) augmente la conductivité dans l'échantillon, et améliore la qualité du matériau (réduction de la densité de défauts, de compensation et de dislocations).

3.2.3 Réalisation de super réseaux [11]

Dans un super réseau ; les effets des polarisations spontanée et piézoélectrique créent une oscillation périodique des bandes, qui entraîne l'ionisation des accepteurs profonds. Il en résulte une accumulation de porteurs dans des nappes de trous (hole sheets). La concentration des porteurs augmente d'un ordre de grandeur par rapport au matériau massif.

3.2.4 Contacts ohmiques [11]

La réalisation de contacts ohmiques de bonne qualité sur $Al_xGa_{1-x}N$ à forte teneur en aluminium dopé n et p, est essentielle pour l'injection de courant.

Les contacts ohmiques à base de Au, Ag, Ti/Al, Ti/Al/(Ti, Ni, Mo, Pt)/Au, sur GaN dopé n, admettent une résistivité surfacique de l'ordre de $4 \times 10^{-7} \Omega \cdot \text{cm}^2$ à $10^{-8} \Omega \cdot \text{cm}^2$ [15].

En ce qui concerne $Al_xGa_{1-x}N$, un problème se pose pour les fortes concentrations en aluminium car le matériau devient isolant. Entre 45% et 50% d'aluminium, la résistivité passe de $374 \Omega \cdot \text{cm}$ à plus de $10^5 \Omega \cdot \text{cm}$ [16]. Lorsque cet alliage est dopé n, divers empilements de couches métalliques tels que Ti/Al, Ta/Ti/Al, Ti/Ta/Al et Al/(Ti, Ni, Mo, Pt)/Au, permettent d'atteindre typiquement des résistivités surfaciques entre $10^{-5} \Omega \cdot \text{cm}^2$ et $10^{-8} \Omega \cdot \text{cm}^2$ [17]. Toutefois ; la réalisation de contacts ohmiques sur $Al_xGa_{1-x}N$ dopé p, pose des problèmes

propres qui ne sont que partiellement surmontés. Le premier problème que nous avons déjà évoqué, est la difficulté de faire croître des alliages dopés p de bonne qualité ayant des concentrations élevées de trous. Le second problème est l'absence de métaux dont le travail de sortie électronique soit supérieur à celui de $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ dopé p, et de ses dérivés. Des contacts à base de nickel et d'or, ont été réalisés avec succès.

3.3 Propriétés du composé ternaire $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ [3]

L'alliage InGaN est essentiel pour reconstituer la lumière bleue dans les diodes lasers (LD) et électroluminescentes (LED). Cette importance justifie la recherche d'une compréhension approfondie de la majeure partie de ses propriétés. Malheureusement, il y'a encore beaucoup de désaccord sur les paramètres fondamentaux comme par exemple le bowing de l'énergie de gap.

3.3.1 Formules de Vegard et Phillips

Certaines propriétés (Y) comme le paramètre de maille, la polarisation et les constantes piézoélectriques, peuvent être déduites par interpolation linéaire suivant la loi de Vegard :

$$Y(\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{N}) = (1-x) Y(\text{In}) + x \cdot Y(\text{GaN}) \quad (3.5)$$

Avec une erreur inférieure à 2% pour n'importe quelle valeur de x ($0 \leq x \leq 1$).

3.3.1.1 Variation du gap d' $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$, en fonction de la fraction de mole x (In)

Pour l'énergie de bande interdite, l'équation (3.5) ne convient pas, il faut utiliser la relation quadratique de J.C. Phillips :

$$E_g = x \cdot E_g(\text{InN}) + (1-x) \cdot E_g(\text{GaN}) - x \cdot (1-x) \cdot b \quad (3.6)$$

Où b est le paramètre de courbure (bowing parameter).

En remplaçant $E_g(\text{InN})$ et $E_g(\text{GaN})$ par leurs valeurs à 300K, et en prenant $b=1$, nous trouvons les équations qui donnent le gap d' $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ en fonction de x [5] :

$$\begin{cases} E_{g1}(x) = x^2 - 2.41x + 3.3 \text{ eV} & \text{(cubique)} \\ E_{g2}(x) = x^2 - 2.43x + 3.43 \text{ eV} & \text{(hexagonal)} \end{cases} \quad (3.7)$$

L'énergie du gap diminue, et le sommet de la bande de valence au point Γ se décale vers le haut, quand la composition d'indium augmente.

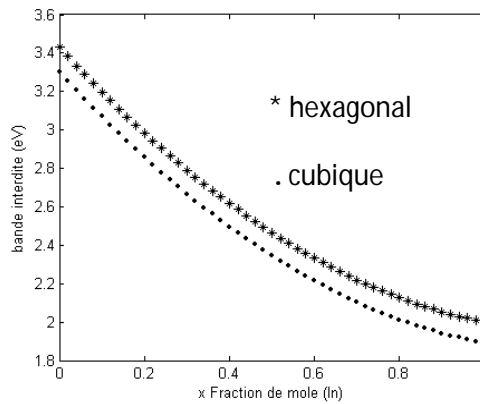


Figure 3.4 : Variation du gap d' $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$, en fonction de la fraction de mole In [5].

3.3.1.2 Bowing

Le comportement exceptionnel du gap de cet alliage reste une issue à controverses. Le paramètre b mesuré, varie de 1 à 5eV [17] ; cette variation serait due partiellement à la qualité des films d'alliages étudiés. Il y'a aussi des difficultés expérimentales rapportées à la méthode utilisée pour mesurer le gap optique. Les incertitudes sont en partie une conséquence du fait que la plupart des études expérimentales ont été portées sur des échantillons où la concentration d'In était assez petite ($x \leq 0.25$) [18].

Les premières études suggèrent un bowing entre 0 et 1.0eV [19]. D'autres recherches plus récentes prévoient $b=1\text{eV}$ pour InGaN cubique [20], alors qu'on s'attendait à la même valeur pour les deux structures. Beaucoup d'études annoncent un bowing égal à 1eV pour l'alliage InGaN.

3.3.2 Stabilité et solubilité [21]

La réalisation d'un alliage ternaire (InGaN) à partir des deux composés binaires (GaN et InN) ayant des énergies et des longueurs de liaison différentes, n'est pas chose facile. Pour certaines valeurs de x , des problèmes de miscibilité se posent et dès lors, il y a ségrégation pour minimiser l'énergie totale. A une température de croissance de 800°C, Ho [22] a trouvé théoriquement une miscibilité de 6% de l'indium dans GaN. En diminuant la température, on augmente la miscibilité mais au détriment de la cristallinité [23].

La température critique (température à partir de laquelle tous les composés sont stables) est atteinte pour une composition en In de 0.39, et vaut 1417°C [24] ; alors qu'à partir de 500°C, des gouttelettes métalliques d'indium se forment en surface. Ces études montrent donc qu'à température ambiante (de même qu'aux températures habituelles de croissance), presque tous les composés d' $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ sont instables, or la croissance d'InGaN pauvre en indium ($x_{\text{In}} < 0,3$) est réalisée facilement de nos jours.

3.4 Elaboration des alliages ternaires [13]

3.4.1 AlGaN

La performance des dispositifs électroniques ou optoélectroniques, est optimisée au moyen d'hétérostructures obtenues à partir des alliages. Les dispositifs à base de nitrures des éléments III, consistent par exemple, en une structure de puits quantiques AlGaN/GaN ou InGaN/GaN. L'élaboration des alliages ternaires est intéressante pour les applications en optoélectronique puisque l'énergie du gap des nitrures peut aussi être modulée. Les applications potentielles du GaN à la réalisation des dispositifs optoélectroniques dans la gamme du bleu à l'UV du spectre, dépendent fortement de l'élaboration des alliages contenant du GaN avec InN et AlN.

3.4.1.1 Principe

Le principe d'élaboration des alliages ternaires à partir d'un composé binaire est illustré sur la figure 3.5. Partant de la couche binaire (BC), on se place dans des conditions riches en élément C (N dans le cas des nitrures) et on envoie ensuite l'autre métal A (In ou Al) pour compléter le déficit du métal B (Ga dans le GaN).

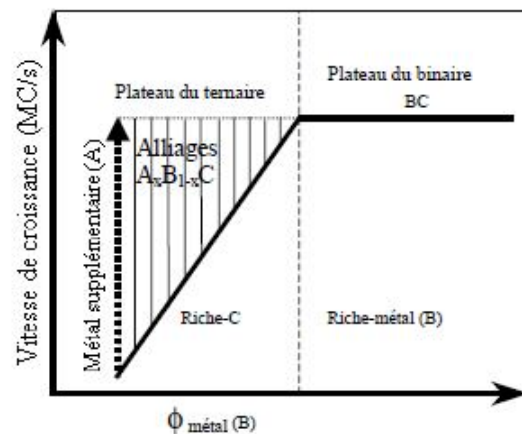


Figure 3.5 : Principe d'élaboration des alliages ternaires [13].

En changeant le rapport des deux matériaux concernés, il est possible d'avoir des alliages dans toute la gamme de composition. Mais le mécanisme est complexe, et implique la mobilité des espèces en surface, la dépendance du coefficient d'incorporation à la température de substrat, les possibles effets surfactants... Ces facteurs rendent difficile le contrôle de l'élaboration des alliages, à la fois pour une composition désirée et pour une bonne qualité optique.

3.4.1.2 Incorporation d'Al dans GaN [13]

Etant donné que GaN et AlN hexagonales sont thermiquement stables dans la gamme de température 600 à 750°C, on peut supposer que le coefficient d'incorporation de Ga et d'Al est grand dans des conditions de déficit de métal, à une température donnée. On ajuste le flux de Ga pour déposer GaN dans des conditions riche N, puis on ajoute un flux supplémentaire d'Al pour déposer AlGaN. Les oscillations de RHEED permettent d'estimer la vitesse de croissance de cet alliage et de suivre le comportement de ces espèces quand elles sont sur le front de croissance. L'évolution des oscillations de REED dans le cas de l'alliage AlGaN est représentée sur la figure 3.6.

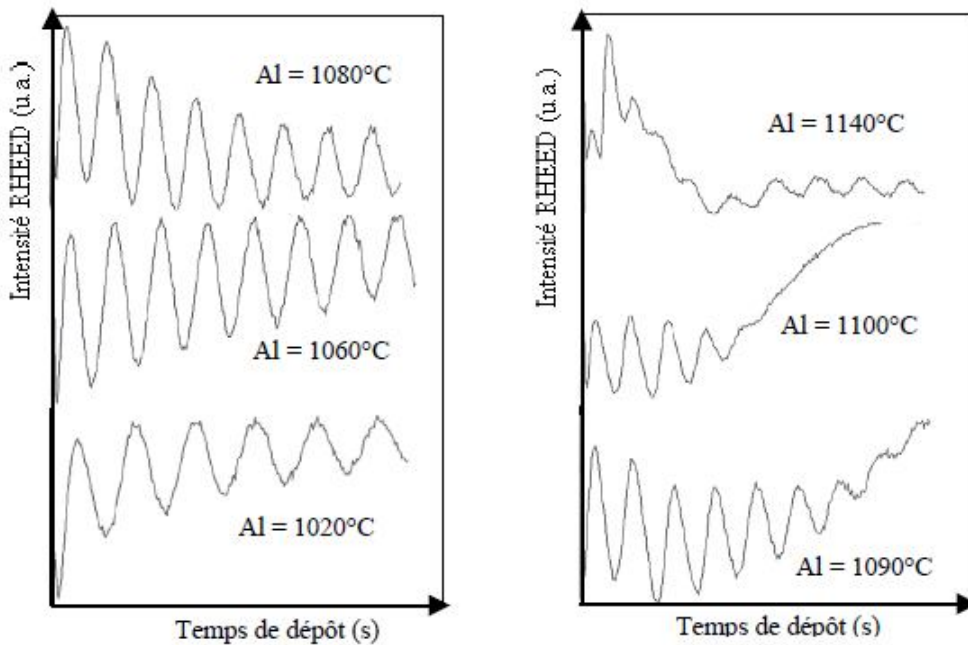


Figure 3.6 : Evolution des oscillations de RHEED en fonction de la température de la cellule d'Al en présence de Ga sur GaN. Pour l'ajustement des conditions riche N du GaN, la température de la cellule de Ga est fixée à 980°C, le flux de N₂ est de 0.5ccm. La température du substrat est de 700°C [13].

A faible flux d'Al ; pour une température d'aluminium supérieure à 1090°C, la période dans l'ensemble des oscillations RHEED est constante. Ceci permet de déterminer la vitesse de croissance d'AlGaN en prenant l'inverse de la période des oscillations de RHEED. Pour des températures inférieures ou égales à 1090°C, il y a apparition de trois transitions au début de la variation de l'intensité de RHEED. Dans la gamme de températures (1100-1130°C) de la cellule d'Al, on n'observe que ce transitoire. Pour un flux d'Al plus grand et une température supérieure à 1130°C, on remarque à nouveau les oscillations au-delà du

transitoire, avec une période plus grande que ce dernier. Cette différence des oscillations de RHEED pour différentes températures d'Al, indique une modification de la cinétique des espèces en surface. Dans la figure 3.7 a, on remarque que le transitoire d'une seule oscillation est présent quand la surface de GaN est exposée à l'Aluminium seul ; tandis que lorsqu'elle est exposée à l'ensemble d'Al et Ga, il ya trois oscillations (Figure 3.7 b).

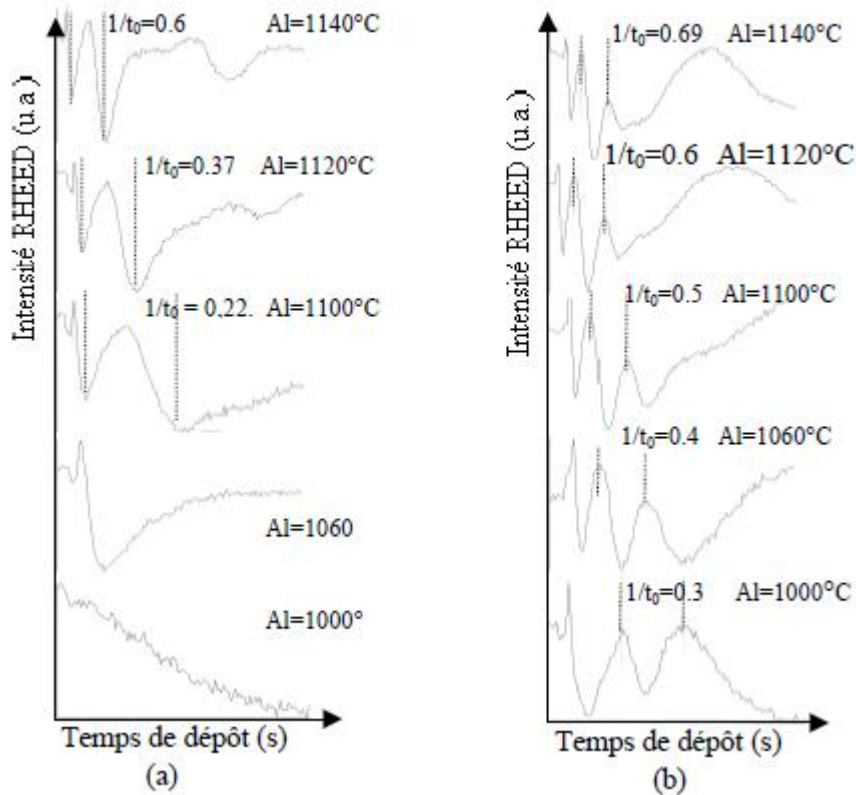


Figure 3.7 : Evolution du transitoire en fonction du flux d'Al quand la surface de GaN est exposée (a) à Al seul, (b) à l'ensemble Al et Ga sur la surface de GaN. Pour ce dernier cas, la température de la cellule de Ga est fixée à 1030°C [13].

La variation de l'inverse du temps du transitoire correspond à la variation de pression de vapeur d'Al qui change quand on varie la température de la cellule. En effet ; quand la quantité d'Al devient importante sur la surface de GaN, Al a tendance à s'accumuler sans s'incorporer.

La vitesse de croissance est déterminée à partir des oscillations de période constante. Pour les faibles flux d'Al, la vitesse de croissance est similaire à celle du binaire même si le flux de Ga est important, car l'incorporation d'Al complète le déficit de Ga et mène vers le binaire. Lorsque la quantité d'Al est importante sur le front de croissance, l'aluminium ne s'incorpore

pas entièrement et il a tendance à s'accumuler en surface. Ceci est dû au fait que la réduction d'Al peut être induite par le Ga.

En conclusion, la variation de la vitesse de croissance observée par les oscillations de RHEED jusqu'au plateau, reflète une variation de la composition de l'alliage. Au delà du plateau, un transitoire dû à la formation d'une couche métallique perturbe l'analyse des oscillations RHEED. A fort flux d'Al en présence de Ga, l'incorporation de Ga est fortement réduite due à sa grande taille ; et l'incorporation d'Al devient préférentielle, due à sa petite taille. Ceci implique que pour les forts flux d'Al, on aura tendance à déposer AlN plutôt que AlGaN.

3.4.1.3 Incorporation de Ga dans AlN [13]

Pour la situation inverse ; quand on incorpore Ga dans AlN, les résultats d'oscillations de RHEED sont reportés sur la figure 3.8.

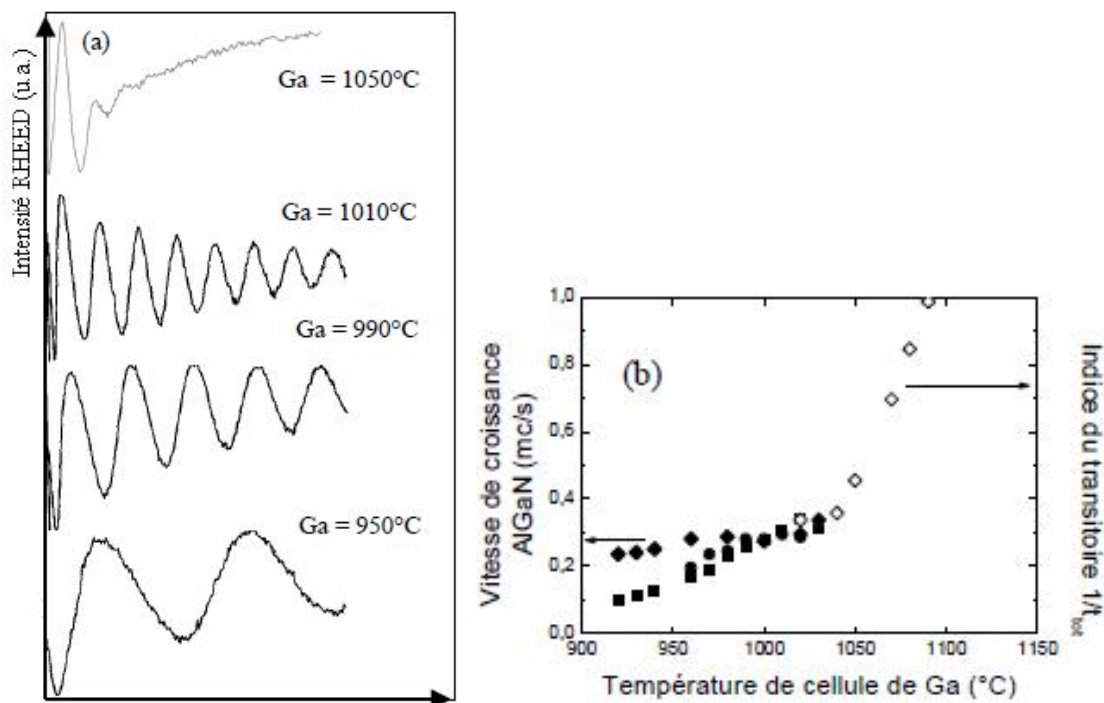


Figure 3.8 : (a) Evolution des oscillations de RHEED en fonction de la température de la cellule de Ga en présence d'Al. La température du substrat est de 700°C et le flux de N₂ est de 0.5. (b) Vitesse de croissance de l'alliage AlGaN en fonction de la température de Ga en présence d'Al avec les températures suivantes 1020°C (carrés fermés), 1060°C (cercles fermés), 1100°C (losanges fermés) et transitoire avec 1100°C (losanges ouverts) [13].

On remarque une grande similitude avec le cas précédent. La période des oscillations reste constante pour une température de Ga donnée, et elle augmente quand T_{Ga} augmente. Ce comportement est observé jusqu'à une température de Ga équivalente au plateau de la

stœchiométrie. Donc ; la croissance de l'alliage en présence d'Al se fait dans le mode couche par couche, et l'incorporation de Ga n'est pas limitée par la présence d'Al. Lorsque T_{Ga} est petite et T_{Al} est élevée, la vitesse de croissance atteint le plateau de la stœchiométrie, car l'incorporation de Ga complète le déficit de métal jusqu'à la vitesse de saturation (losanges fermés et carrés fermés sur la figure 3.8 b). Pour un fort flux de Ga et une température $T_{\text{Ga}} \geq 1040$ °C, les oscillations disparaissent et seul le transitoire est observé.

En conclusion, les remarques sur l'ajout de Ga dans AlN sont similaires à celles observées dans le cas de l'ajout de l'Al dans GaN. L'augmentation de la vitesse de croissance jusqu'au plateau doit correspondre à une variation de la composition de l'alliage, alors que le transitoire observé à fort flux de Ga reflète une accumulation de métal en surface.

3.4.2 InGaN

3.4.2.1 Incorporation d'In dans GaN [13]

Les mesures des oscillations de RHEED en régime riche N, sont représentées par la figure 3.9.

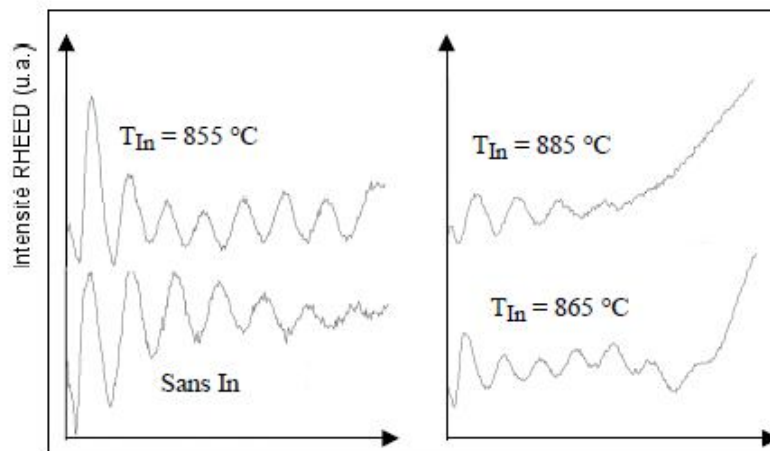


Figure 3.9 : Evaluation des oscillations de RHEED en fonction de la température d'In lors de la croissance d'une couche d'InGaN à 650°C. Le flux de N_2 est fixé à 0.5. La croissance de la couche de GaN a été préalablement ajustée sous condition de déficit de métal avec le gallium à 1020°C [13].

La vitesse de croissance augmente légèrement avec la température d'In pour une température du substrat de 650°C alors qu'elle reste constante pour une température de 700°C. L'incorporation d'In est négligeable à la température de 700°C. Ce comportement est en accord avec les observations sur les alliages InGaN hexagonaux.

3.5 Croissance des ternaires $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ [11]

3.5.1 Difficultés spécifiques

La croissance d' $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ est relativement complexe car la mobilité des atomes d'Al en surface est plus faible que celle des atomes de Ga ; et Al tend à réagir préférentiellement avec l'azote. De plus, les fluctuations locales dans la composition de l'alliage sont relativement importantes. Premièrement ; l'alliage peut subir un réarrangement atomique pendant la croissance, générant spontanément une succession de super réseaux AlN/GaN de périodicité variable selon les rapports des flux des différentes espèces [25]. Deuxièmement, Al a tendance à s'accumuler autour des dislocations, ce qui crée des régions appauvries en Al à quelques nanomètres des cœurs des dislocations [26]. Les zones riches en Al ont des teneurs jusqu'à 70% supérieures aux zones appauvries.

3.5.2 Diagramme de croissance classique d' $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ en MBE [11]

Pour obtenir des couches d' $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ ayant de bonnes propriétés structurales sans utiliser de surfactant, il est nécessaire d'effectuer la croissance à haute température de substrat ($>700^\circ\text{C}$) et dans des conditions "riche métal". Comme avec GaN, on peut tracer un diagramme de croissance donnant les flux des différentes espèces, en fonction de la composition de l'alliage visée (figure 3.10). Lorsque le flux des deux métaux est trop élevé (au-dessus de la ligne de triangles inversés), il y a accumulation de métal en surface puis formation de gouttelettes. Lorsque l'on est au contraire en régime "riche azote" (en dessous de cette ligne), la surface est rugueuse.

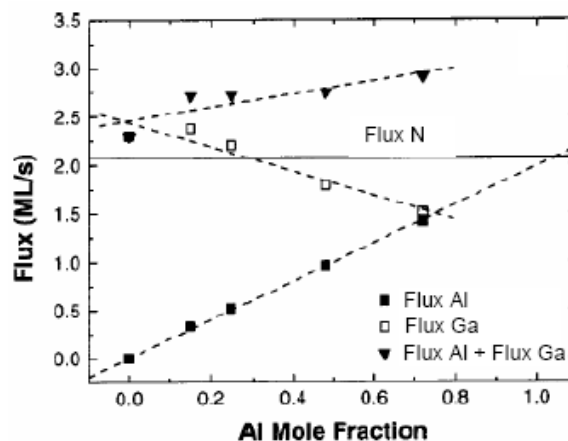


Figure 3.10 : Diagramme de croissance d' $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ ($T_{\text{substrat}} = 730^\circ\text{C}$) [27].

3.5.3 Utilisation de l'indium comme surfactant [9]

L'indium peut jouer le rôle de surfactant dans la croissance des alliages $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ comme dans celle de GaN. Dans ce cas, une monocouche d'indium recouvre la surface de l'échantillon en cours de croissance et modifie la cinétique de diffusion des différentes espèces. La qualité structurale du matériau est améliorée. Le nouveau diagramme de croissance, modifié par la présence d'indium, est représenté sur la figure 3.11.

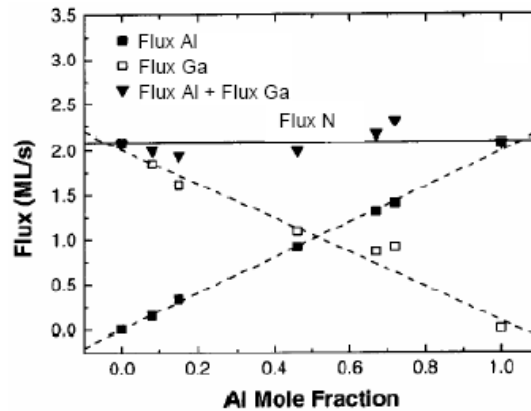


Figure 3.11 : Diagramme de croissance d' $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ avec In comme surfactant (Flux indium = 0.08 mc/s et $T_{\text{substrat}} = 680^\circ\text{C}$) [27].

Le flux d'indium nécessaire pour maintenir une monocouche stable en surface dépend de la température du substrat et de la composition visée de l'alliage (figure 3.13). A ces températures, la ségrégation de l'indium sur le front de croissance se fait sans incorporation. On a donc bien un alliage ternaire et non un quaternaire.

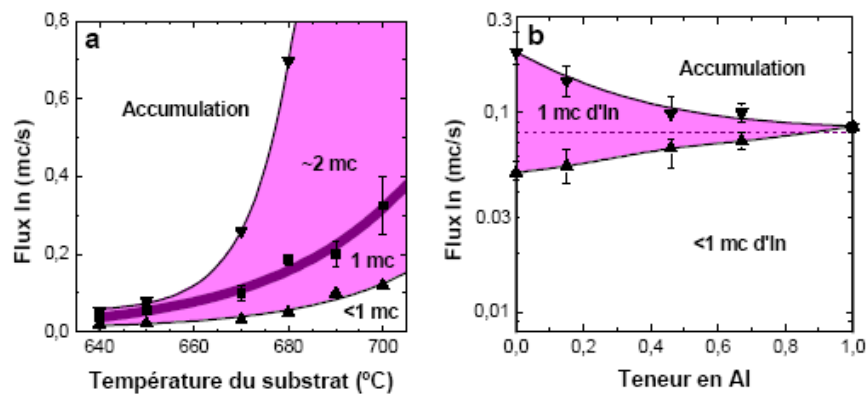


Figure 3.12 : Flux d'indium en fonction de la température du substrat (a) et en fonction de la composition de l'alliage (b) [9].

3.6 Croissance de l'InGaN

La solution solide $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ pose plusieurs problèmes. Tout d'abord, elle est l'objet d'une décomposition dès les faibles concentrations en In pour les températures de croissance typiques, ce qui a été vérifié expérimentalement. Cette décomposition de l'alliage fait que les propriétés de la solution solide (Ga,In)N sont fortement dépendantes des conditions et des méthodes de croissance. Les propriétés sont très variables selon la littérature [9].

Le désaccord de maille entre GaN et InN étant important, une croissance pseudomorphique se traduit par une forte élongation selon l'axe c, dont il faut tenir compte dans les mesures de composition usuelles en diffraction de rayons X [3].

3.7 Détermination de la composition des alliages [13]

3.7.1 Détermination de la composition de l'AlGaIn

La croissance de l'alliage ternaire $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ cubique s'effectue à la stœchiométrie, en partant de la courbe de croissance du binaire (AlN ou GaN) dans des conditions "riche azote" ; puis l'élément manquant (Ga ou Al) est ajouté pour combler le déficit de métal. Le rapport des flux des deux métaux (qui dépend des températures des cellules d'effusion) permet de contrôler la composition de l'alliage. Cette composition est très importante pour l'ajustement de la longueur d'onde d'émission de la couche active à base d'AlGaIn ou d'InGaIn. Les oscillations de RHEED permettent de calibrer la composition des alliages et d'étudier d'autres phénomènes liés à la croissance de couches d'alliage. Cette composition dépend également de plusieurs autres facteurs notamment la mobilité des espèces en surface, leur coefficient d'incorporation pour une température donnée de substrat et de possibles effets surfactants [28].

3.7.1.1 Principe [13]

Il y a trois méthodes pour trouver la composition d'un alliage :

- Une mesure in situ au moyen des vitesses de croissance, à partir des oscillations de RHEED : cette méthode est peu précise.
- Une mesure du rapport des flux des deux composés de l'alliage en temps réel (par exemple Ga et Al ou In et Ga). Cette méthode suppose que les coefficients de collage de ces deux espèces sont identiques. En pratique, cette hypothèse est vérifiée et la composition obtenue par cette méthode est assez précise.

- Une analyse à partir du spectre rétrodiffusion de Rutherford (RBS) obtenue sur une série d'échantillons correspondant à des couches épaisses de l'alliage. C'est la technique est la plus précise mais elle ne peut se faire qu'à postériori [11].

Pour trouver la composition en utilisant la deuxième méthode qui est assez précise, plusieurs approximations doivent être faites :

1/ Il faut faire la croissance en excès d'azote ; en effet, la croissance est limitée par les éléments III et les vitesses mesurées sont directement proportionnelles à l'incorporation des métaux Ga et Al.

2/ Il faut aussi faire des hypothèses sur les coefficients de collage du Ga et d'Al.

En utilisant le rapport des flux pour déterminer la composition X dans l'AlGaN (en excès de N), nous avons :

$$\frac{X_{Ga}}{X_{Al}} = \frac{\alpha_{Ga}\phi_{Ga}}{\alpha_{Al}\phi_{Al}} \quad (3.9)$$

$$D'où : x_{Al} = \frac{1}{1 + \frac{\alpha_{Ga}\phi_{Ga}}{\alpha_{Al}\phi_{Al}}} \quad (3.10)$$

Nous supposons que les coefficients de collage α du Ga et d'Al sont identiques :

$$x_{Al} = \frac{1}{1 + \frac{\phi_{Ga}}{\phi_{Al}}} \quad (3.11)$$

Les flux sont évalués à partir de pressions partielles équivalentes, l'équation (3.11) devient :

$$x_{Al} = \frac{1}{1 + \frac{\sigma_{Ga}}{\sigma_{Al}} \frac{P_{Ga}}{P_{Al}} \sqrt{\frac{m_{Al}}{m_{Ga}}} \sqrt{\frac{T_{Ga}}{T_{Al}}}} \quad (3.12)$$

Le terme $(\sigma_{Ga}/\sigma_{Al}) = 0.93/1.67$ vient de la sensibilité de Jauge pour chaque élément, le terme

$\sqrt{\frac{m_{Al}}{m_{Ga}}} = 0.6221$ est le rapport des masses des éléments III concernés, P_{Ga}/P_{Al} est le rapport

des pressions, T_{Al}/T_{Ga} est le rapport des températures [13]. L'équation (3.12) devient alors :

$$x_{Al} = \frac{1}{1 + 0.346 \frac{P_{Ga}}{P_{Al}} \sqrt{\frac{T_{Ga}}{T_{Al}}}} \quad (3.13)$$

A l'aide de cette formule, on peut ajuster la composition des couches d'AlGaN en fonction des flux de Ga et d'Al.

L'obtention de la composition de l'alliage par les mesures RBS, est indépendante de ces hypothèses. La figure 3.13 présente un spectre RBS d'une structure de trois couches ayant des compositions d'Al différentes.

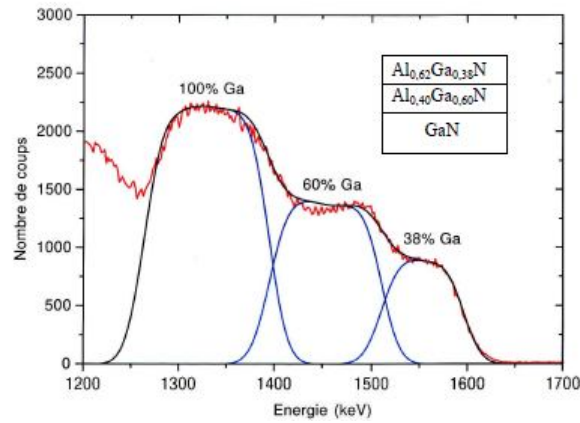


Figure 3.13 : Spectre RBS d'une structure de deux couches : $\text{Al}_{0,62}\text{Ga}_{0,38}\text{N}$ et $\text{Al}_{0,4}\text{Ga}_{0,6}\text{N}$ déposées sur une couche tampon de GaN [13].

La hauteur de marche indique la composition X_{Al} , alors que la largeur de chacune des marches donne une information sur l'épaisseur de la couche analysée.

Les résultats obtenus avec les trois méthodes sont représentés sur la figure 3.15.

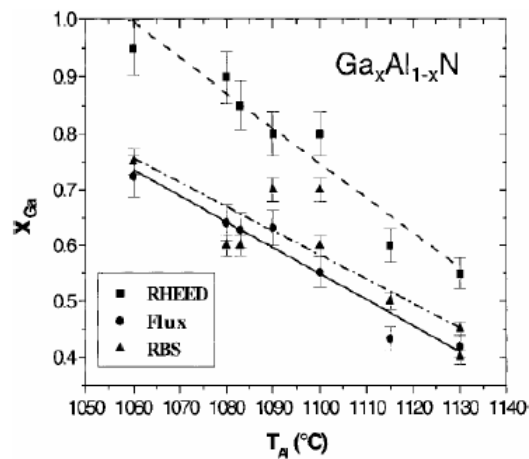


Figure 3.14 : Teneur en gallium d' $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ (déterminée selon 3 méthodes), en fonction de la température de la cellule d'aluminium [29].

3.7.2 Détermination de la composition de l'InGaN [13]

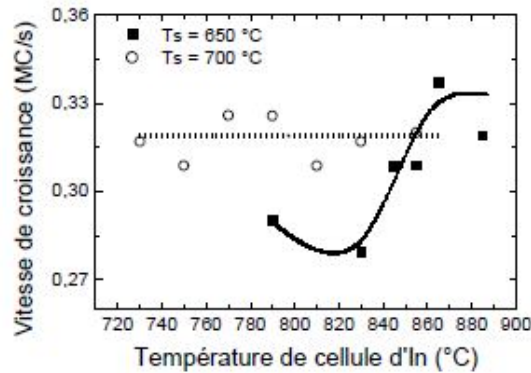


Figure 3.15 : Vitesse de croissance de l'alliage InGaN, déterminée à partir des oscillations de RHEED pour deux températures de substrats utilisées. Les cercles fermés correspondent à la vitesse déterminée à $T_s = 700^\circ\text{C}$, et les carrés fermés à $T_s = 650^\circ\text{C}$ [13].

La vitesse de croissance est faible entre le binaire et le ternaire avec la composition mesurée par RBS (figure 3.16).

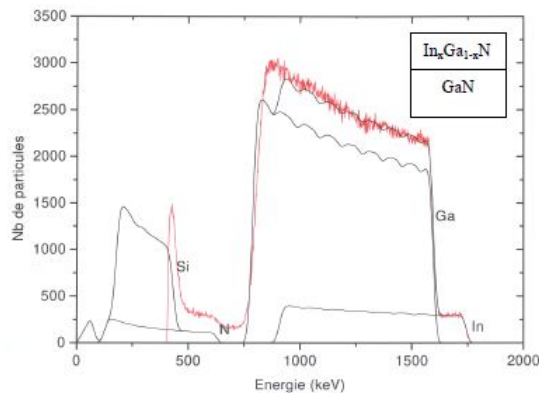


Figure 3.16 : Spectre de RBS d'une couche de β -InGaN déposée à 650°C . Avant le dépôt de la couche InGaN, la couche de GaN a été ajustée dans des conditions de croissance sous déficit de métal avec Ga fixé à 1020°C ($v_{\text{GaN}}^0 = 0.225$). Un flux supplémentaire d'In a été ajouté avec $T_{\text{In}} = 815^\circ\text{C}$ (qui fait remonter la vitesse de croissance à $V_{\text{InGaN}} = 0.27$) [13].

Une composition en In de 6% a été obtenue, alors qu'on s'attendait à 17% d'après le rapport de vitesse de croissance. Cet écart s'explique par une augmentation de l'incorporation de Ga en présence d'In, c'est-à-dire que l'indium joue le rôle de surfactant dans les conditions de croissance. Les mesures de RBS montrent que l'incorporation d'In dans GaN est nulle pour des températures supérieures à 670°C . En effet ; l'utilisation de basses températures est préférable pour la fabrication des couches d'InGaN avec une forte composition d'In. Mais la

qualité structurale des couches déposées à basse température est moins bonne que celle des couches déposées à des températures élevées. Un compromis doit être établi entre qualité et composition maximale en In. Pour 670°C, il y a une teneur nulle en indium [13] ; et pour 650°C, une teneur de 6% [13]. Ceci met en évidence l'effet surfactant de l'In pour la croissance de GaN à une température de croissance élevée.

3.8 Etude des priorités optiques d'AlGaN et d'InGaN

En raison de la présence des défauts qui introduisent des niveaux d'énergie dans la bande interdite, la mesure du gap n'est pas très précise et donc l'étude des propriétés optiques des alliages est difficile. Par ailleurs, les mesures de photoluminescence sont limitées jusqu'à une composition en Al de 70%.

3.8.1 Vitesse de saturation dans $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ et $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$, en fonction de x

Selon l'ajustage fait par Anwar et al. [30] ; la vitesse de saturation est donnée par le tableau 3.1, où les constantes a, b et c dépendent du dopage.

$V_s(x)=a+bx+cx^2 (\times 10^7 \text{cm/s})$						
N_d	$\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$			$\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$		
	a	b	c	a	b	c
10^{17}cm^{-3}	1.3425	0.574	-0.3215	1.3286	0.3657	-0.2857
10^{18}cm^{-3}	1.3045	0.646	-0.3545	1.3064	0.3668	-0.2767
10^{19}cm^{-3}	1.290	0.3708	-0.3632	1.2675	0.4309	-0.3081

Tableau 3.1 : Les constantes a, b et c, pour le calcul de la vitesse de saturation en fonction de la fraction molaire [30].

3.8.1.1 Vitesse de saturation des électrons dans $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ [5]

Avec l'augmentation de la fraction de mole Al, la vitesse de saturation augmente indépendamment de la température. Elle montre une faible dépendance sur la concentration de dopage.

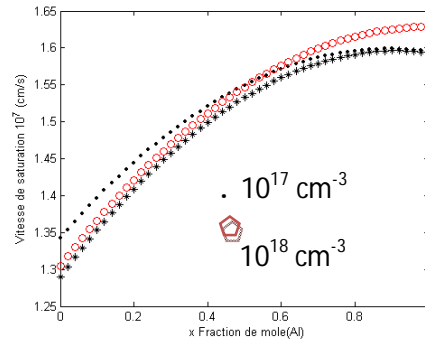


Figure 3.17 : Vitesse de saturation des électrons dans $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$, en fonction de la fraction de mole Al [5].

3.8.1.2 Vitesse de saturation des électrons dans $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$

La vitesse de saturation varie peu avec la concentration de dopage dans InGaN.

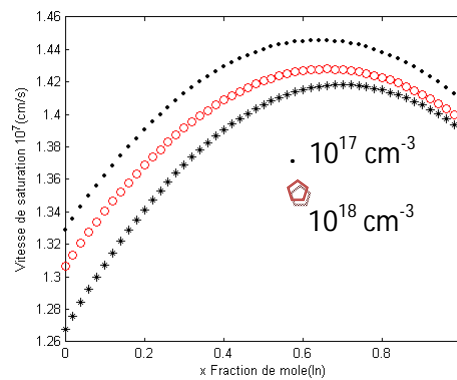


Figure 3.18 : Vitesse de saturation des électrons dans InGaN, en fonction de la fraction de mole In [5].

3.8.2 Mobilité des électrons dans $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ et $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$, en fonction de x

A faible champ, selon l'ajustage fait par Anwar et al. [30]; la courbe décrivant la mobilité des électrons dans ces alliages, est approchée par l'équation donnée dans le tableau 3.2 où a, b et c sont des paramètres dépendant de la température.

T	$\mu(x) = a + bx + cx^2 + dx^3 \text{ cm}^2/\text{V}\cdot\text{s}$							
	$\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$				$\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$			
	a	b	c	d	a	b	c	d
100 K	1787.9	-1925.6	1071.4	-520.8	480.1	595.9	4563.5	1273.2
300 K	1157.9	-1329.6	-283.7	671.3	465.3	755.1	-61.5	676.4
500 K	815.6	-1331.6	427.6	298.4	347.1	244.1	279.4	226.9

Tableau 3.2 : Les constantes a, b et c, pour le calcul de la mobilité en fonction de la fraction molaire [30].

3.8.2.1 Mobilité des électrons dans $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$, en fonction de x [5]

Sous condition faible champ ; en augmentant la fraction de mole Al, la mobilité chute (figure 3.19). Cela est dû en partie à la masse effective qui est plus grande dans la vallée centrale dans AlN, comparée au GaN. De plus ; quand x augmente, la dispersion des phonons acoustiques augmente pendant que la dispersion des phonons optiques polaires décroît. La dispersion des impuretés ionisées reste le troisième processus compétitif.

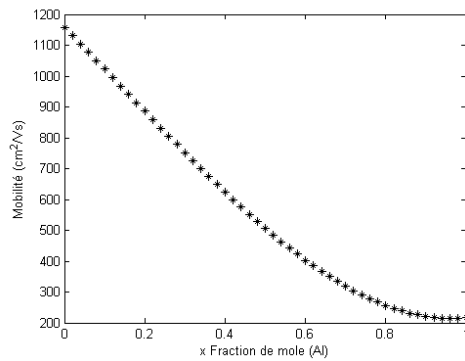


Figure 3.19 : Mobilité des électrons dans $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$, en fonction de la fraction de mole Al[5].

3.8.2.2 Mobilité des électrons dans $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$, en fonction de x [5]

Nous représentons la mobilité, à faible champ, en fonction de la fraction de mole In dans $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$, à la température ambiante (figure 3.20).

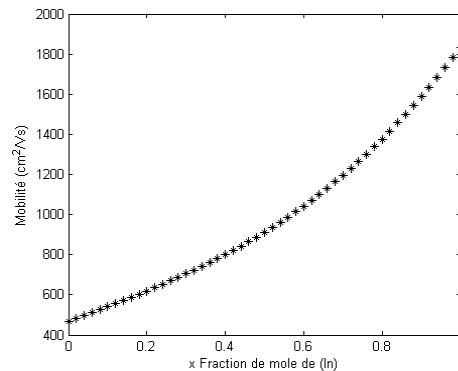


Figure 3.20 : Mobilité des électrons dans $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$, en fonction de la fraction de mole In [5] .

En augmentant la fraction de mole In, la mobilité croît, due à la diminution de la masse effective dans la vallée centrale. Contrairement à l'AlGaIn, la dispersion des phonons optiques polaires est le mécanisme de dispersion dominant, sans tenir compte du dopage et de la fraction de mole In. La dispersion des phonons acoustiques dépend peu de la concentration de dopage et de la fraction de mole In. Cependant, la dispersion des impuretés ionisées décroît avec la fraction de mole In et dépend légèrement de la concentration de dopage.

3.8.3 Longueurs d'onde émises par $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ et $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$, en fonction de x [5]

Un grand progrès a été accompli en optoélectronique avec les diodes luminescentes bleues, vertes et rouges, pour le stockage optique ; en électronique, avec des dispositifs opérants en haute puissance, haute température et haute fréquence. Les diodes émettrices de la lumière, à base de semi-conducteurs, constituent un potentiel considérable pour remplacer les sources lumineuses classiques. Les diodes émettant dans la gamme infrarouge et le visible allant du rouge au vert sont maîtrisées. En revanche, l'élaboration de structures permettant d'émettre dans les plus courtes longueurs d'onde afin de couvrir la gamme optique bleue et UV est moins avancée.

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 ternaires des nitrures des éléments du groupe III, ont un gap variant entre 1.9eV (650nm) et 6.2eV (200nm), en fonction de leurs compositions. La première caractéristique d'un dispositif optoélectronique est sa longueur d'onde d'émission qui définit le type de rayonnement. Si le rayonnement est visible, elle correspond à une couleur, le blanc étant la somme de ces couleurs. Les trois couleurs fondamentales (rouge, verte et bleue) permettent de générer n'importe quelle couleur, avec des taux bien déterminés. De la raie d'émission, on détermine la pureté de la couleur émise par une source monochromatique.

La longueur d'onde λ et l'énergie du gap E_g sont reliées par la relation : $E_g = h \times \nu = h \times c / \lambda$, où h est la constante de Planck et c est la vitesse de la lumière. λ est alors donnée par : $\lambda = h \times c / E_g$. Nous calculons la longueur d'onde émise par $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ (et $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$), en fonction de la fraction de mole Al (et In). En appliquant la relation (3.14) [5] (où λ sera en nm et E_g en eV), nous allons commettre une erreur relative qui sera inférieure ou égale à 5×10^{-4} .

$$\lambda(x) = 1240 / E_g(x) \quad (3.14)$$

3.8.3.1 Variation de la longueur d'onde émise par $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$, en fonction de x [5]

La longueur d'onde d'émission d' $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ est représentée par la figure 3.21. Elle diminue en augmentant la fraction de mole Al ; elle est de l'ordre de 380nm pour $x = 0$ (GaN), et de 210nm pour $x = 1$ (AlN), pour la phase cubique. Pour la phase hexagonale, les valeurs sont respectivement aux alentours de 360nm et 190nm.

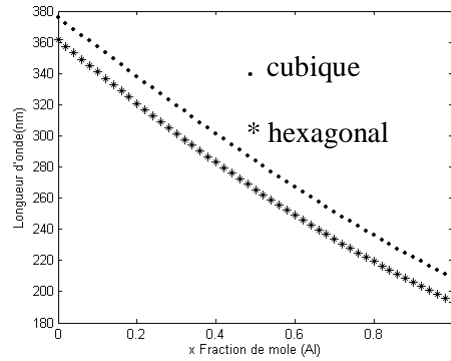


Figure 3.21 : Longueur d'onde d'émission de l'alliage $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$, en fonction de x [5].

3.8.3.2 Variation de la longueur d'onde émise par $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$, en fonction de x [5]

InGaN est beaucoup plus étudié que le premier alliage ; pour la fabrication des dispositifs optiques tels que les LED et LD pouvant émettre la lumière verte et bleue, pour le stockage optique à haute densité. D'importantes études théoriques et expérimentales ont été menées sur les propriétés optiques extraordinaires de cet alliage. En effet, sa constante de réseau est 11% plus grande que celle du GaN et elle varie linéairement avec la fraction de mole In jusqu'à au moins 0.42.

Le même calcul (éq. 3.14) donne la longueur d'onde émise par l'alliage $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$, en fonction de la fraction de mole In (x) (fig. 3.22). La longueur d'onde augmente avec la fraction de mole In. Elle est de 380nm pour $x = 0$ (c-GaN), et de 660nm pour $x = 1$ (InN) ; elle est inversement proportionnelle à la variation du gap.

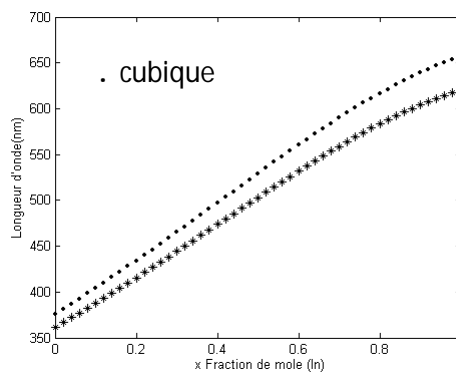


Figure 3.22 : Longueur d'onde d'émission de l'alliage $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$, en fonction de x [5].

3.9 Détermination de l'énergie de transition [31] :

3.9.1 Principe

Les spectres de photoluminescence obtenus à 8°K sur des couches d'alliages ayant une concentration d'aluminium allant de 21% à 70%, sont représentés dans la figure 3.23.

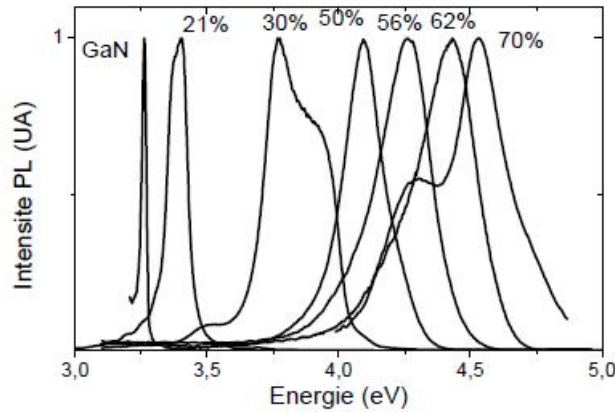


Figure 3.23: Spectres de photoluminescence obtenus à 8°K sur des couches d’alliages AlGaN cubique ayant une concentration d’aluminium allant de 21% à 70% [31].

On remarque un décalage vers les hautes énergies lorsque la concentration en Al augmente, l’élargissement des spectres de PL dans le cas des basses énergies est dû à l’apparition d’une queue de bande provenant d’états localisés dans la bande interdite. Ils sont dus à des fluctuations locales de concentrations en Al. Pour certaines concentrations, il y a deux pics. Pour déterminer l’origine de ces pics et l’énergie de transition bande à bande, il faut savoir la variation de la photoluminescence en fonction de la puissance d’excitation. Des mesures de réflectivité et d’excitation de photoluminescence ont été réalisées sur les mêmes couches d’AlGaN. Sur la figure 3.24, sont représentés un spectre de photoluminescence à température ambiante, et un spectre de réflectivité.

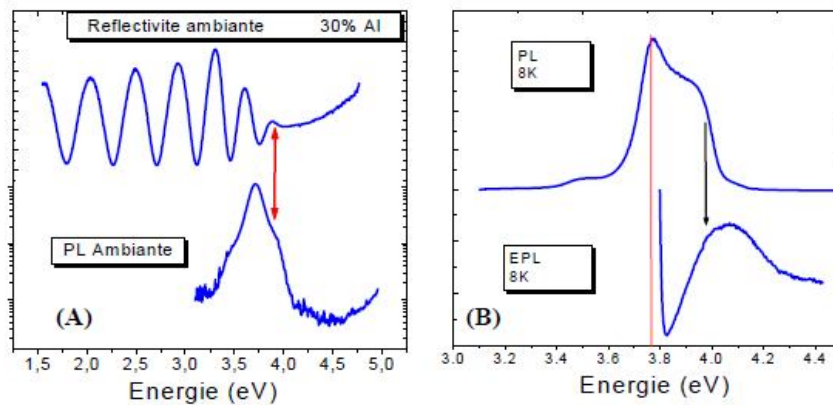


Figure 3.24 : (A) Comparaison des signaux de PL et de réflectivité en incidence normale, obtenus pour un alliage de 30% d’aluminium à la température ambiante. (B) Spectre EPL réalisé à 8K sur le même alliage comparé au spectre de PL, pour la même température [31].

Dans le spectre de PL, il y a un épaulement à haute énergie dont la position énergétique correspond à un point d’inflexion repéré sur le spectre de réflectivité. Ce point

correspond à l'énergie à partir de laquelle la couche absorbe, il fournit donc l'énergie du gap du matériau ; ainsi, nous attribuons l'énergie du pic de PL à une luminescence bord de bande. L'énergie du seuil d'absorption (gap du matériau) présent sur le spectre d'EPL, correspond à l'énergie du pic de PL à haute énergie.

3.9.2 Evolution de la transition bord de bande avec la concentration en aluminium :

L'évolution de l'émission bord de bande en fonction de la concentration en aluminium dans la couche d'AlGa_N, est donnée par la figure 3.25. On a une variation linéaire de cette énergie avec la concentration.

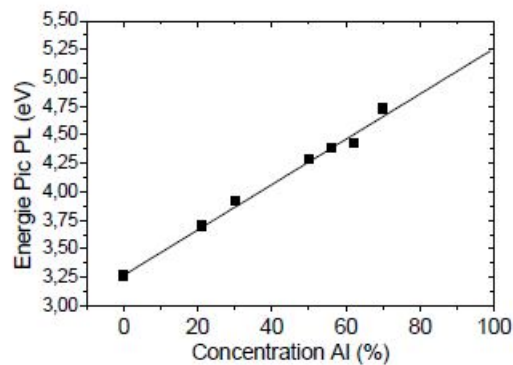


Figure 3.25 : Evolution de recombinaison bord de bande à 8K de l'alliage c-AlGa_N, en fonction de la concentration en aluminium [31].

3.9.3 Effet de la température sur l'émission bord de bande [31]

La température modifie les énergies de transitions, il y a une diminution de l'énergie en augmentant la température. Deux mécanismes sont à l'origine de ce phénomène :

- La dilatation thermique modifie les distances interatomiques dans le réseau cristallin, ce qui engendre un changement des positions de la bande de valence et de la bande de conduction. Ce phénomène est à l'origine d'environ un quart de la variation totale de la bande interdite en fonction de la température.

- Les interactions électron-phonon, modifient aussi la largeur de la bande interdite.

Ces prédictions sont confirmées sur la variation du pic de photoluminescence bord de bande, pour les deux concentrations en aluminium 50 % et 70% qui sont représentées dans la figure 3.26.

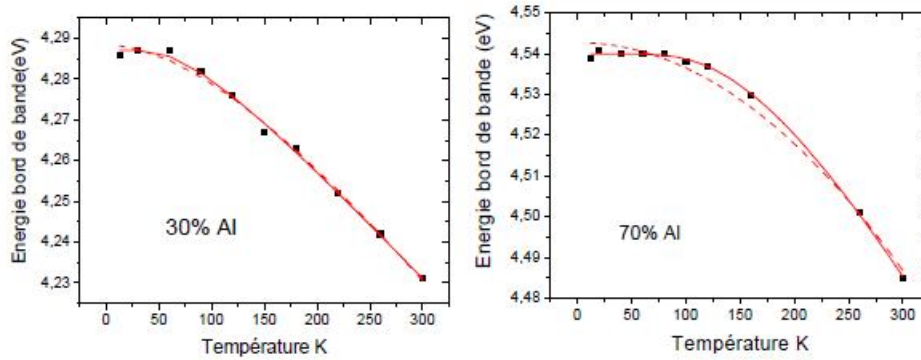


Figure 3.26 : Evolution du pic de luminescence bord de bande en fonction de la température, pour des concentrations en aluminium de 30% et 70%, respectivement [31].

L'énergie E_{PL} , correspondant à l'énergie bord de bande, diminue en augmentant la température. Ceci est valable pour les deux structures cubiques et hexagonales. En effet, la symétrie du cristal n'affecte pas la loi de variation du gap en fonction de la température [31].

3.9.4 Nature du gap dans les alliages AlGaIn cubique

3.9.4.1 Etude du seuil d'absorption directe en réflectivité

L'objectif de cette étude est de déterminer la nature du gap d' $Al_xGa_{1-x}N$ en fonction de la concentration d'aluminium. Les mesures de réflectivité permettent de déterminer le seuil minimal d'absorption directe (c'est-à-dire au point Γ) du matériau. Ce seuil correspond au gap lorsque celui-ci est direct [11].

Par ailleurs, les raies obtenues par cathodoluminescence dans une couche épaisse de semi-conducteur ($\sim 500\text{nm}$) se situent à une énergie inférieure ou égale au gap du matériau, que celui-ci soit direct ou indirect. On constate sur la figure 3.27, que les énergies des seuils d'absorption en réflectivité et celles des raies de cathodoluminescence (obtenues sous 10 kV), divergent à partir d'une teneur en aluminium d'environ 55%.

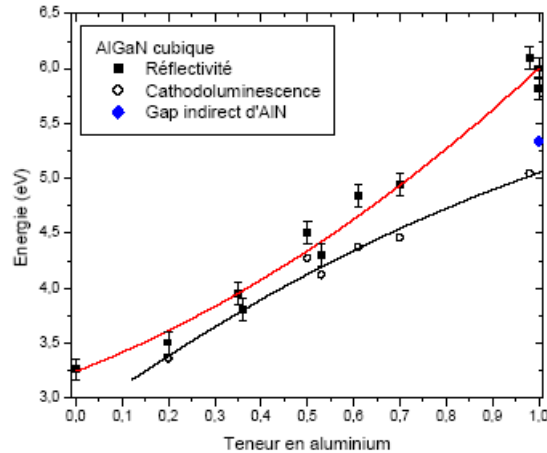


Figure 3.27 : Seuil d'absorption directe en réflectivité et énergies des raies de CL à 300 K, en fonction de la composition en aluminium. Le substrat est du Si carburé. Le gap indirect d'AlN déterminé par éllipsométrie, par Thompson et al. [32] a également été indiqué [11].

Ceci implique que le gap d' $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ est direct jusqu'à une teneur en Al d'environ 50%. Par contre, on ne peut rien conclure pour les teneurs plus élevées car l'écart entre les valeurs de cathodoluminescence et celles de réflectivité peut être dû à la mauvaise qualité de l' $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$, qui entraîne une forte localisation des porteurs sur les défauts, impuretés et fluctuations d'alliage. La figure 3.28 permet de comparer le seuil d'absorption directe d' $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ cubique avec l'énergie de gap (direct) d' $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ hexagonal. Les coefficients de bowing n'étant pas identiques, la différence d'énergie n'est pas constante en fonction de la composition. Elle est maximale pour une teneur de 55% d'aluminium.

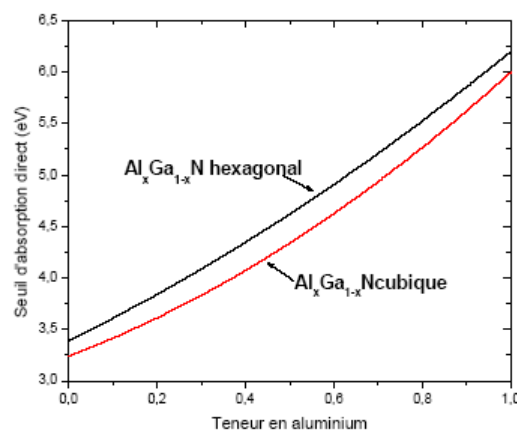


Figure 3.28 : Seuils d'absorption directe d' $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ hexagonal et cubique [9].

3.9.4.2 Spectres de photoluminescence pour l'étude de la nature du gap

Pour des concentrations en aluminium de 30, 50 et 70% ; les spectres de photoluminescence réalisés avec la même densité de puissance d'excitation, sont donnés par la figure 3.29.

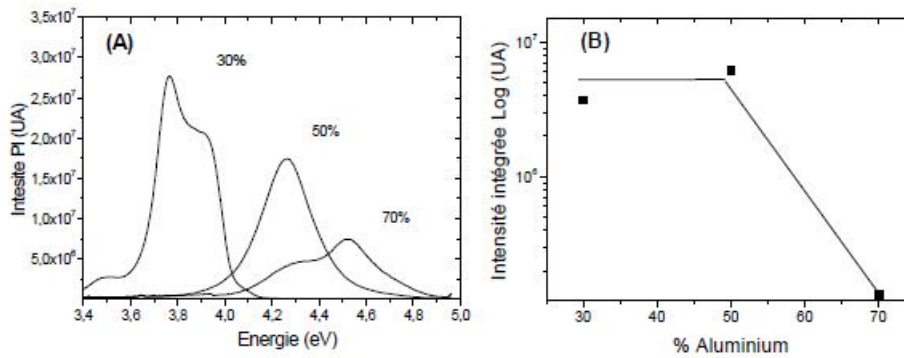


Figure 3.29 : (A) Evolution de photoluminescence des couches d'alliages AlGaIn cubiques pour plusieurs concentrations en aluminium sous la même puissance d'excitation. (B) Intensité intégrée des transitions bord de bande des alliages en fonction de leur concentration en aluminium [31].

L'intensité de PL bord de bande diminue environ d'un facteur de 40 entre les alliages avec des concentrations en Al de 50% et 70%. Ceci peut être dû au passage de l'alliage du gap direct vers un gap indirect pour lequel le rendement radiatif est largement diminué. Il y a un changement de la nature de la recombinaison entre 50% et 70% d'Al.

Dans le spectre de PL à basse température pour l'alliage avec 70% d'Al, le pic attribué au bord de bande se situe à 4.740 eV [31].

Dans la figure 3.30b regroupant les énergies au bord de bandes pour les différentes concentrations en aluminium, il apparaît une nouvelle variation linéaire de l'énergie du pic de PL. Ce changement de pente dans l'évolution de l'énergie peut s'expliquer par analogie avec ce qui a été observé pour l'alliage AlGaAs [32] par un changement de la nature de gap. Pour une concentration voisine de 52%, plusieurs recherches confirment ce changement de gap (les recherches de PUGH et FAN) [31].

Pour l'alliage hexagonal, les études trouvent que la nature du gap ne change pas en fonction de la concentration en aluminium.

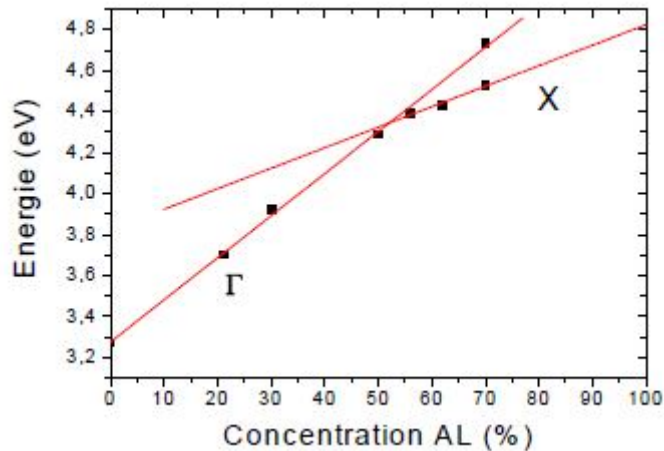


Figure 3.30 : Evolution des gaps directs (transition Γ) et indirect (transition X) des alliages AlGaN cubiques en fonction de leur concentration en Aluminium [39].

3.10 Spectre de photoluminescence de l'AlGaN [9].

La luminescence à basse température de l'alliage AlGaN sur toute la gamme de composition, a été étudiée par Bremser et al. [33] dans des échantillons épitaxiés sur SiC. Les transitions observées sont les mêmes que celles observées le plus souvent dans GaN. A basse température, les spectres sont dominés par la recombinaison d'excitons liés, élargis (et approfondis) par le désordre d'alliage. La luminescence des paires donneurs-accepteurs résiduels est aussi observée, s'approfondissant par rapport au bord de bande. Ceci est dû à l'approfondissement des donneurs et/ou des accepteurs. Il faut noter que le couplage avec les phonons optiques de cette transition se renforce aussi avec la composition en aluminium, la bande à un phonon devenant dominante quand $x_{Al} > 0.15$, ce qui traduit l'approfondissement des accepteurs résiduels. La bande de niveaux profonds responsables de la luminescence jaune de GaN s'approfondit aussi de façon non linéaire, devenant verte, bleue puis ultraviolette pour des compositions croissantes en aluminium. La figure 3.31 montre les spectres de luminescence bord de bande, d'échantillons non intentionnellement dopés d'AlGaN, pour diverses compositions jusqu'à $x_{Al} \sim 50\%$.

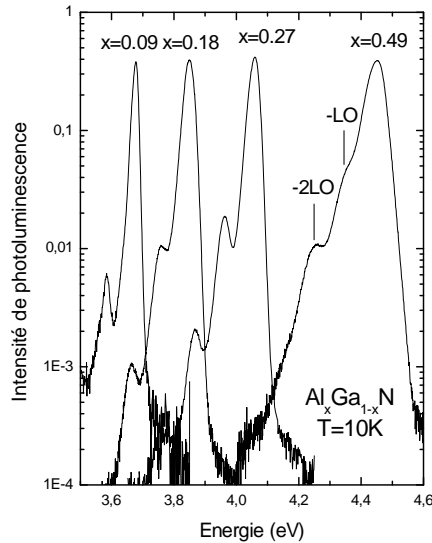


Figure 3.31 : Spectres de luminescence à 10 K d'échantillons (Al,Ga)N non intentionnellement dopés, pour diverses compositions en aluminium. L'élargissement et l'augmentation du couplage avec le réseau de la luminescence d'excitons liés pour des compositions en Al croissantes [9].

3.11 Luminescence dans InGaN.

La largeur à mi-hauteur des spectres de luminescence dans InGaN croît fortement avec la composition en In, quelle que soit la température. Il ya aussi un fort couplage avec les phonons de l'état initial et/ou final de la transition optique. En fait ; les spectres de luminescence d'échantillons dont la luminescence est peu large, montrent un couplage très modéré avec les phonons optiques. Le fort désordre accompagné d'une forte localisation, fait que la luminescence est dominée par les états peuplés, qui se situe à plus ou moins basse énergie, selon la température et selon la possibilité qu'ont les porteurs hors équilibre de peupler ces états. L'absorption, quant à elle, n'est significative que vers le maximum de la densité d'états. Ces effets de désordre sont très importants dans InGaN. D'autre part, il ya des transitions pour lesquelles l'état de base est interdit optiquement, totalement ou partiellement. Dans un tel cas, les états de basse énergie les seuls principalement peuplés, sont responsables de la luminescence plus ou moins intense ; tandis que les états excités autorisés optiquement, dominant le spectre d'absorption [34].

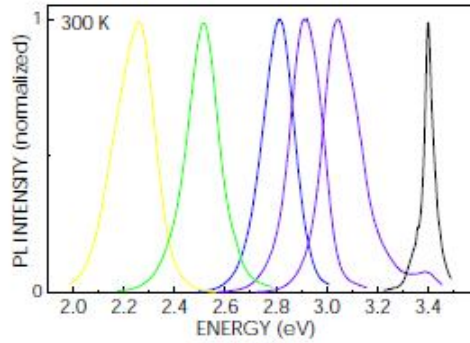


Figure 3.32 : Le spectre de PL à 300 K pour InGaN. (Les paramètres de croissance sont systématiquement modifiés pour obtenir une émission dans la gamme spectrale allant du violet au jaune, avec des raies fines et un rendement quantique élevé, à 300K) [35].

3.12 Effet de la température sur la photoluminescence dans InGaN [14]

L'étude de la variation de l'énergie de PL avec la température (Figure 3.33) permet aussi de suivre les mécanismes liés aux fluctuations de potentiel dans InGaN. Une première diminution de l'énergie de PL à basse température T_0 , correspond à la migration des porteurs depuis des fluctuations de potentiels de faible ampleur, vers des fluctuations plus profondes. Ceci est rendu possible grâce à l'activation thermique jusqu'à la température de transition T_1 . Ensuite, l'énergie de photoluminescence augmente. En effet ; à partir de T_1 , les excitons se libèrent progressivement des centres localisants, l'énergie de transition rejoint ensuite l'évolution de l'énergie de la bande interdite avec la température correspondant aux excitons libres. Cette dernière est une diminution parabolique avec la température. Pour cette variation totale de l'énergie, les valeurs des températures T_0 et T_1 sont caractéristiques de la localisation des porteurs.

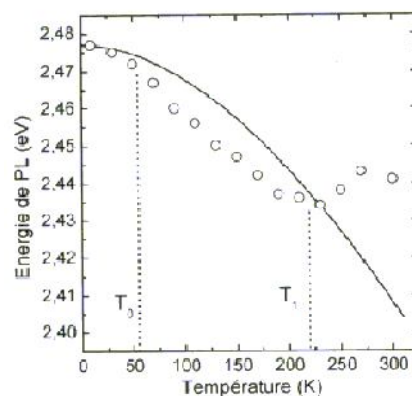


Figure 3.33 : Evolution de l'énergie de PL, en fonction de la température pour $\text{In}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{N}$ [6].

Références

- [1] M D. Lyutaya and T.S. BArtnitskaya, *Inorg. Mater.* 9, 1052 (1973).
- [2] B. Burgov, L.Daweritz, V. B. Gutan, G. Jungk, H.Neuman and H.Raidt, *Phys. Status Solidi AZ* 49, 629 (1978).
- [3] S. Strite and H. Morkoç , GaN, AlN, and InN: A Review, Materials Research Laboratory and Coordinated Science Laboratory, University of Illinois at Urbana-Champaign, Urbana, IL 61801, 1992.
- [4] S. Yoshida, S. Misawa and S. Gonda, *J. Appl. Phys.*53, 6844 (1982).
- [5] Hamdoune AEK, *Elaboration du nitrure de gallium ; Etude de ses propriétés et Applications". U. Tlemcen, 2006.*
- [6] Martinez Guerrero, Esteban *Elaboration en épitaxie par jets moléculaires des nitrures d'éléments III en phase cubique, INSA Lyon, 2002.*
- [7] Stéphanie Anceau, *Etude des propriétés physiques des puits quantiques d'alliages quaternaires (Al,Ga,In)N pour la conception d'émetteurs ultraviolets, thèse de doctorat de U. Montpellier , 2004.*
- [8] Steude G., Meyer B.K., Glödner A., Hoffmann A., (1999) Gbertram F., Christen J., Amano H., Akasaki I., *Appl. Phys. Lett.* 74, (1999) 2456.
- [9] M. Leroux, *Matériaux pour l'Optoélectronique, Traité EGEM série Optoélectronique, tome 7, édité par G.Roosen, (Hermes Science Publications, Paris, 2003).*
- [10] I. Vurgaftman L. R. Ram-Mohan and J. R. Meyer, *Band parameters for III–V compound semiconductors and their alloys, J. appl. Phy. vol 89, n 11, 2001.*
- [11] Fabrice Enjalbert, *Etude des hétérostructures semi-conductrices III-nitrures et application au laser UV pompé par cathode à micropointes, thèse de Doctorat, U. Grenoble 1, 2004.*
- [12] K. H. Ploog, O. Brandt, *Doping of group III nitrides, J. Vac. Sci. Technol. A* 16,1609 (1998).
- [13] J. K. Sheu, G. C. Chi, *The doping process and doping characteristics of GaN, J. Phys.: Condens. Matter* 14, R657 (2002).
- [14] R. Y. Korotkov, J. M. Gregie, B. W. Wessels, *Electrical properties of p-type GaN:Mg codoped with oxygen, Appl. Phys. Lett.* 78, 222 (2001).
- [15] Q. Z. Liu, S. S. Lau, *A review of the metal-GaN contact technology, Solid-State Electron.* 42, 677 (1998).
- [16] H.X. Jiang, J.Y. Lin, *AlGaIn and InAlGaIn alloys – Epitaxial growth, optical and electrical properties, and applications, Opto-electron. Rev.* 10, 271(2002).

- [17] H. K. Kim, T. Y. Seong, I. Adesida, C. W. Tang, K. M. Lau, Low-resistance Pt/Pd/Au ohmic contacts to p-type AlGa_xN, *Appl. Phys. Lett.* 84, 1710 (2004).
- [18] M. Frehat, J. Furthmuller and F. Bechstedt, «Gap bowing and Stokes shift in In_xGa_{1-x}N alloys : First-principles studies», *Appl. Phys. Lett.* Vol.80, n°8 (2002), p. 1394-1396.
- [19] M. Ferhat and F. Bechstedt «First- principles calculations of gap bowing in In_xGa_{1-x}N and In_xAl_{1-x}N alloys : Relation to structural and thermodynamic properties», *Physical review B*, vol. 65, 075213 (2002), p. 1-6.
- [20] A. F. Wright and J. S. Nelson, *Appl. Phys. Lett.* 66, 3051,1995.
- [21] Languy Fabian, Caractérisation de nanocolonnes d'In(1-x)Ga(x)N en vue d'étudier l'origine de la haute conductivité de l'InN, 2007.
- [22] I-h. Ho et G.B. Stringfellow, *Appl.Phys.Lett.* 69, 2701 (1996)
- [23] T. Matsuoka, *Appl. Phys. Lett.* 71, 105 (1997)
- [24] T. Saito et Y. Arakawa, *Phys. Rev. B* 60, 1701 (1999)
- [25] E. Iliopoulos, K. F. Ludwig Jr., T. D. Moustakas, S. N. G. Chu, Chemical ordering in AlGa_xN alloys grown by molecular beam epitaxy, *Appl. Phys. Lett.*, 78, 463 (2001).
- [26] L. Chang, S. K. Lai, F. R. Chen, J. J. Kai, Observations of Al segregation around dislocations in AlGa_xN, *Appl. Phys. Lett.*,79, 928 (2001).
- [27] E. Monroy, B. Daudin, E. Bellet-Amalric, N. Gogneau, D. Jalabert, F. Enjalbert, J. Brault, J. Barjon, Le Si Dang, Surfactant effect of In for AlGa_xN growth by plasma-assisted molecular beam epitaxy, *J. Appl. Phys.*93, 1550 (2003).
- [28] E.Martinez Guerrero, F. Chabuel, D. Jalabert, B. Daudin, G. Feuillet, H. Mariette, P. Abouche-Nze and Y. Monteil, Growth control of cubic GaN and cubic InGa_xN (AlGa_xN) alloy by RHEED oscillations, *Physica Status Solidi (a)* 1999, Vol 176, P 497-501
- [29] E. Martinez-Guerrero, F. Chabuel, D. Jalabert, B. Daudin, G. Feuillet, H. Mariette, P. Aboughé-Nzé, Y. Monteil, Growth Control of Cubic GaN and GaAlN (GaInN) Alloys by RHEED Oscillations, *phys. stat. sol. (a)* 176, 497 (1999).
- [30] A. F. M. Anwar, Senior Member, IEEE, Shangli Wu, and Richard T. Webster, Member, IEEE, Temperature Dependent Transport Properties in GaN,Al_xGa_{1-x}N, and In_xGa_{1-x}N Semiconductors, *IEEE Transactions On Electron Devices*, Vol. 48, No. 3, 2001
- [31] Stephan Fanget, matériaux et hétérostructures à base de nitrides d'éléments III en phase cubique et hexagonale pour l'optoélectronique, thèse de doctorat, INSA Lyon, 2002.
- [32] M. P. Thompson, G. W. Auner, T. S. Zheleva, K. A. Jones, S. J. Simko, J. N. Hilfiker, Deposition factors and band gap of zinc-blende AlN, *J. Appl. Phys.*89, 3331 (2001).

- [33] Bremser M.D., Perry W.G., Zheleva T., Edwards N.V., Nam O.H., Parikh, N., Aspnes D.E., Davis R.F., MRS Internet J. Nitride Semicond. Res. 1, (1996) 8.
- [34] Kietkova J., Disseix P., Siozade L., Vasson A., Leymarie J., Damilano B., Grandjean N. and Massies J. - Optical investigations and absorption coefficient determination of InGaN/GaN quantum wells - Physica Status Solidi a, 190, 2002, pp. 135-140.
- [35] Patrick Waltereit, (Al,Ga,In)N heterostructures grown along polar and non-polar directions by plasma-assisted molecular beam epitaxy, thèse de doctorat, U. Berlin (Allemagne), 2001.

Chapitre IV :
ETUDE THEORIQUE DU TRANSPORT ELECTRIQUE
DANS LES COMPOSES TERNAIRES

Chapitre 4 : Etude théorique du transport électrique dans les composés ternaires

4.1 Introduction

Le phénomène de transport dans ces semi-conducteurs ternaires à base de nitrures, résulte du comportement des électrons de la bande de conduction et de la bande interdite. Une étude analytique du problème nécessite la connaissance de la fonction de distribution de l'énergie des électrons, une fonction obtenue en résolvant l'équation de Boltzmann. Cette dernière, aux dérivées partielles, n'admet de solutions analytiques que dans un nombre de cas limité.

4.2 Equation de Boltzmann pour un gaz d'électrons [1]

4.2.1 Approximation semi-classique

Dans l'approximation semi-classique, l'électron est repéré par sa position r , par son vecteur d'onde \vec{k} et par un indice de bande n . En présence d'un champ électrique $E(r, T)$ et d'un champ magnétique $B(r, T)$; n , r et \vec{k} évoluent de la manière suivante :

- L'indice de bande est une constante de mouvement : il n'y a pas de transition inter-bandes.
- Le mouvement d'un électron entre deux collisions dans une bande donnée, est régi par les équations semi classiques du mouvement :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial r}{\partial t} = v_k = \frac{1}{\hbar} \nabla_k \varepsilon_k \\ \hbar \dot{k} = e[\varepsilon(r, T) + v_k \times B(r, T)] \end{array} \right. \quad (4.1)$$

Où e est la charge de l'électron, v_k et ε_k étant sa vitesse moyenne et son énergie dans l'état k .

La fonction de distribution des électrons dans une bande, est donnée par :

$$n = \frac{2}{(2\pi)^3} \int f(r, k, t) dk \quad (4.3)$$

$\frac{2}{(2\pi)^3} f(r, k, t) dr dk$ est le nombre moyen d'électrons qui se trouvent, à l'instant t , dans

l'élément de volume dr centré en r ayant un vecteur d'onde dans l'élément dk centré en k . Le facteur 2 pour prendre en compte les deux orientations du spin.

4.2.2 Formulation de l'équation de Boltzmann [1]

L'étude du transport électronique dans les semi-conducteurs est difficile, car il faut étudier un ensemble d'électrons dont on ignore la distribution.

En absence de collisions, le théorème de Liouville prouve que le volume d'un élément de l'espace de phase reste constant :

$$f_k(r+dr, t+dt) = f_k(r, t) \quad (4.3)$$

En présence des collisions ; la variation de $f_k(\vec{r}, t)$ dans le volume $d\vec{r}.d\vec{k}$ à l'instant t , est due aux collisions avec les impuretés. Elle est donnée par l'équation différentielle :

$$f_k(r+dr, t+dt) - f_k(r, t) = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll} \quad (4.4)$$

En passant à la dérivé de $f_k(r, t)$ par rapport à toutes les variables du système, on obtient :

$$d f_k(\vec{r}, t) = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right) dt + \left(\frac{\partial f}{\partial k} \right) dk + \left(\frac{\partial f}{\partial r} \right) dr \quad (4.5)$$

$$\frac{\partial f_k(\vec{r}, t)}{\partial t} = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right) + \left(\frac{\partial f}{\partial k} \right) \frac{dk}{dt} + \left(\frac{\partial f}{\partial r} \right) \frac{dr}{dt} = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll} \quad (4.6)$$

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{V} \cdot \vec{\nabla}_r f + \vec{F} \cdot \vec{\nabla}_k f = \left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll} \quad (4.7)$$

Où $F(r, t) = e[\varepsilon(r, t) + v_k \times B(r, t)]$ est la force de Lorentz.

Cette équation est celle du transport de Boltzmann. L'intégrale de collisions $\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll}$ est

valable pour les différentes collisions que peuvent subir les électrons.

Les électrons sont des fermions, donc la fonction de distribution globale est celle de Fermi-Dirac :

$$f_0(\varepsilon_k) = \left[1 + \exp\left(\frac{\varepsilon - \mu}{K T}\right) \right]^{-1}$$

(4.8)

Avec μ , le potentiel chimique (ou niveau de Fermi).

4.2.3 Equation de Boltzmann dans l'approximation du temps de relaxation [1]

Le terme $\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll}$ a un rôle de relaxer la fonction de distribution vers une fonction de distribution d'équilibre local, qui est une distribution de Fermi-Dirac que l'on écrit :

$$f^{(0)}(r, k, t) = \left[1 + \exp\left(\frac{\varepsilon_k - \mu(r, t)}{K_B T}\right) \right]^{-1} \quad (4.9)$$

Dans cette expression, T et $\mu(r, t)$ sont les valeurs de la température et du potentiel chimique, respectivement.

Dans l'approximation du temps de relaxation, la dérivée de collision est exprimée par :

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{coll}} \approx \frac{f - f^{(0)}}{\tau} \quad (4.10)$$

Le temps de relaxation τ dépend du vecteur d'onde \vec{k} (ou de l'énergie ε_k) ; cette dépendance est liée aux mécanismes de collision.

4.2.4 Limites de validité de l'équation de Boltzmann [1]

4.2.4.1 Séparation des échelles de temps

Pour que l'équation de Boltzmann soit valable, il faut considérer les collisions comme locales et instantanées. En particulier ; la durée d'une collision τ_0 doit être négligeable devant l'intervalle de temps entre deux collisions τ (temps de collision), sinon l'électron pourrait se trouver au même temps sous l'influence de deux centres diffuseurs différents.

Autrement dit, il faut qu'il y ait deux échelles de temps bien séparées, l'une est la durée d'une collision et l'autre est l'intervalle de temps typique séparant deux collisions.

4.2.4.2 Limitation quantique

Ces limitations sont de deux ordres : la diffusion par chaque centre est décrite par la mécanique quantique. La probabilité de diffusion de l'électron d'un état $|k\rangle$ vers un état $|k'\rangle$ est calculée par l'équation de Fermi. Pour pouvoir considérer une collision unique, il faut que l'intervalle de temps Δt sur lequel on étudie l'évolution de la fonction de distribution, soit plus petit que le temps de collision τ . Dans les semi-conducteurs, cette condition s'écrit sous la forme du critère de Peirls.

$$\frac{\hbar}{\tau} \ll K T \quad (4.11)$$

4.2.5 Probabilités d'interactions [1]

Les paramètres nécessaires pour décrire une collision sont : le vecteur d'onde de l'électron \vec{k} , la position r et le temps t .

La probabilité conditionnelle, pour réaliser la transition entre k et k' , dans l'intervalle du temps dt , est obtenue par la formule de Fermi :

$$W_{k,k'} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle k | v_i | k' \rangle|^2 \delta(\varepsilon_k - \varepsilon_{k'}) \quad (4.12)$$

$|\langle k | v_i | k' \rangle|$ est le module de l'élément de la matrice de potentiel (V_i) perturbateur d'un centre diffuseur entre les états k et k' .

La probabilité d'une transition d'un état k vers un état k' qui était initialement vide, dans l'intervalle du temps dt , est le produit de $W_{k, k'}$ par f_k ; f_k étant la probabilité pour que l'état k soit occupé.

• Dans le cas de collision avec les impuretés : l'intégrale de collision est donnée par :

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll} = \sum [W_{k, k'} f_k (1 - f_{k'}) - W_{k', k} f_{k'} (1 - f_k)] \quad (4.13)$$

Ou encore

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right)_{coll} = \frac{V}{(2\pi)^3} \int [W_{k, k'} f_k (1 - f_{k'}) - W_{k', k} f_{k'} (1 - f_k)] dk' \quad (4.14)$$

Où V est le volume de l'échantillon considéré.

4.3 Les interactions subies par les électrons durant leur mouvement :

4.3.1 Interactions électrons-phonons [2]

Dans un matériau ; quand les électrons se déplacent, ils sont perturbés par des collisions sur les imperfections du réseau cristallin. Les perturbations les plus efficaces sont celles dues à la vibration du réseau donnant naissance aux collisions électrons-phonons.

4.3.1.1 Vibrations réticulaires dans les composés III-V [2]

Un mode de vibration est caractérisé par sa pulsation ω et son vecteur d'onde q . Le graphe qui représente les relations de dispersion $\omega(q)$ dans les matériaux III-V est composé de six branches : trois branches optiques et trois acoustiques. Ces relations changent avec la direction de propagation dans le cristal. Les vibrations optiques ont une énergie $\hbar\omega_0$ qui varie peu avec le vecteur d'onde q . Les vibrations acoustiques ont une énergie nulle au centre de la zone de Brillouin ; cette énergie augmente avec le module du vecteur d'onde et peut atteindre les branches optiques aux limites de la zone.

Dans ces composés, le couplage entre un électron et un mode de vibration peut être polaire ou non polaire :

- Couplage polaire : il s'effectue par des interactions coulombiennes. Il apparaît par des déplacements des barycentres positifs et négatifs à l'intérieur de la maille élémentaire.
- Couplage non polaire : il s'effectue à travers une déformation locale du potentiel cristallin, induite par la vibration des distances inter atomiques.

Chaque mode de vibration j associé à une fréquence $\omega_j(q)$, peut être considéré comme un oscillateur harmonique avec une énergie quantifiée $\varepsilon_j(q,n)$ qui peut prendre des valeurs :

$$\varepsilon_j(q, n) = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega_j(q) \quad (4.15)$$

(Où n est la concentration des électrons)

Cette quantification montre que le mode ne peut perdre ou gagner de l'énergie, que par un quantum $\hbar \omega_j$ appelé « **phonon** »

L'émission ou l'absorption d'un phonon par un électron, est régie par une probabilité qui dépend de la densité des phonons présents à la température T .

4.3.1.2 Description générale des interactions électrons-phonons [2]

L'analyse des collisions entre les électrons et les phonons, nous permet de connaître l'état de l'électron après le choc, et la probabilité (ou la fréquence) de collisions.

L'électron possède au début, un vecteur d'onde \vec{k} et une énergie ε . Après collision, ces grandeurs deviennent \vec{k}' et ε' . Le phonon est caractérisé par son énergie $\varepsilon_q = \hbar \omega_j(q)$ et son vecteur d'onde \vec{q} .

Les transitions $\vec{k} \longrightarrow \vec{k}'$ doivent vérifier les relations de conservation :

$$\begin{cases} \varepsilon' = \varepsilon \pm \hbar \omega_j(q) \\ \vec{k}' = \vec{k} \pm \vec{q} \end{cases} \quad (4.16)$$

Ces transitions doivent être compatibles avec la structure des bandes d'énergie du matériau.

Au cours de la collision, l'électron se déplace dans son diagramme de bandes. Il y a deux types de transitions :

- Les transitions intravallées : Elles concernent les phonons de faible vecteur d'onde qui occupent le centre de la zone de Brillouin. L'électron reste toujours dans la vallée où il se trouvait avant le choc.
- Les transitions intervallées : elles provoquent le passage de l'électron d'une vallée à une autre qui peut être équivalente à la première (transition $X \longleftrightarrow X$ ou $L \longleftrightarrow L$) ou non équivalente ($\Gamma \longleftrightarrow X$, $\Gamma \longleftrightarrow L$ ou $X \longleftrightarrow L$). Ces transitions nécessitent des phonons qui ont un grand vecteur d'onde dont le point représentatif est situé au bord de la zone de Brillouin.

Chaque processus de collisions a une densité de probabilité $s_j(k, k')$ qui caractérise la probabilité, par unité de temps, pour que le processus j fasse passer l'électron de l'état défini

par le vecteur d'onde \vec{k} , à un autre état défini par le vecteur d'onde \vec{k}' . La probabilité par unité de temps, pour avoir l'interaction j, est donnée par [4] :

$$\lambda_j(\vec{k}) = \int_{\substack{\text{sur tous les états} \\ k' \text{ possibles}}} s_j(\vec{k}, \vec{k}') d_3 k' \quad (4.17)$$

L'expression de $s_j(k, k')$ dépend uniquement des modules des vecteurs d'ondes \vec{k} et \vec{k}' , et de l'angle θ qui les sépare, car les vallées sont considérées isotropes.

La probabilité $\lambda(k)$ pour qu'un électron, se trouvant dans l'état k , subisse une interaction par unité de temps, se calcule en intégrant sur tous les états finaux, la densité de probabilité $S(\vec{k}, \vec{k}')$ du passage de l'état \vec{k} à l'état \vec{k}' :

$$\lambda(k) = \frac{V}{8\pi^3} \times 2\pi \times \int_0^\pi \left[\int_0^\infty S(\vec{k}, \vec{k}') \times k'^2 \cdot dk' \right] \sin \beta \cdot d\beta \quad (4.18)$$

Où $\frac{V}{8\pi^3}$ désigne la densité d'état dans l'espace des moments, et le facteur 2π traduit la symétrie de révolution autour de \vec{k} , de l'ensemble des états possibles.

Dans un premier temps, l'intégration se fait par rapport au module k' . Nous savons que le module du vecteur d'onde et l'énergie de l'électron sont reliés par la relation :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} = \varepsilon(1 + \alpha \cdot \varepsilon) \\ \frac{\hbar^2 k'^2}{2m^*} = \varepsilon'(1 + \alpha \cdot \varepsilon') \end{array} \right. \quad (4.19)$$

Il est donc possible d'exprimer la probabilité en fonction des énergies ε et ε' . Après intégration sur l'énergie, la probabilité $\lambda(\varepsilon)$ peut s'écrire sous la forme :

$$\lambda(\varepsilon) = C_\varepsilon \cdot \int_0^\pi P_\varepsilon(\beta) d\beta \quad (4.21)$$

Pour obtenir l'angle de déviation β suivant la distribution $P_\varepsilon(\beta)$; le paramètre rm (pour dire random) est tiré au hasard entre 0 et 1, et l'on résout l'équation :

$$\int_0^\beta P_\varepsilon(\beta') d\beta' = rm \times \int_0^\pi P_\varepsilon(\beta) d\beta \quad (4.22)$$

4.3.1.3 Interactions élastiques [5]

Ces interactions n'influent pas de façon essentielle sur le comportement de l'électron. Elles sont néanmoins introduites pour obtenir une description aussi quantitative que possible, de la dynamique électronique.

4.3.1.3.1 Interactions acoustiques [6]

Ces interactions sont élastiques et très importantes dans les vallées latérales. Leurs effets sont souvent masqués par les interactions intervallées qui prédominent en vallées latérales.

Elles se manifestent à énergie constante ; et quand un porteur subit ce type d'interactions, son module de vecteur d'onde reste constant.

La densité de probabilité s'écrit :

$$S(\vec{k}, \vec{k}') = \frac{2\pi}{\hbar} \times B_{ac}(\vec{k}, \vec{k}') \times N_{ac} \times \delta(\varepsilon(k') - \varepsilon(k)) \quad (4.23)$$

$$\text{Avec } \left\{ \begin{array}{l} B_{ac}(\vec{k}, \vec{k}') = \frac{2\hbar}{2\rho \cdot s \cdot V} \times E_{ac}^2 \times |\vec{k} - \vec{k}'| \times G(k, k') \end{array} \right. \quad (4.24)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} N_{ac} = \frac{1}{\exp(\hbar \cdot s \cdot |k - k'| / K_B \cdot T) - 1} \approx \frac{K_B \cdot T}{|\vec{k} - \vec{k}'| \cdot \hbar \cdot s} \end{array} \right. \quad (4.25)$$

$G(k, k')$ est toujours la même relation (4.39) ; ε_∞ et ε_s sont les permittivités diélectriques relatives dynamique et statique ; T est la température du réseau ; k_B est la constante de Boltzmann ; \hbar est la constante de Planck ; e est la charge de l'électron ; E_{ac} désigne le potentiel de déformation acoustique ; s est la vitesse du son ; ρ est la masse volumique du matériau.

L'intégration sur l'énergie donne :

$$\lambda_{ac}(\varepsilon) = \frac{K_B \cdot T \cdot E_{ac}^2 \cdot m^{3/2}}{\pi \cdot \rho \cdot s^2 \cdot \hbar^4 \cdot \sqrt{2}} \times \delta^{1/2}(\varepsilon) \times \int_0^\pi (1 + \alpha \cdot \varepsilon + \alpha \cdot \varepsilon \cdot \cos \beta)^2 \times \sin \beta \cdot d\beta \quad (4.26)$$

Après une intégration complète ; la probabilité d'interaction acoustique, par unité de temps, est finalement donnée par la relation :

$$\lambda_{ac}(\varepsilon) = \frac{K_B \cdot T \cdot E_{ac}^2 \cdot m^{3/2}}{\rho \cdot s^2 \cdot \hbar^4 \cdot 3\pi \cdot \sqrt{2}} \times \delta^{1/2}(\varepsilon) \times \frac{3(1 + \alpha \varepsilon)^2 + (\alpha \varepsilon)^2}{(1 + 2\alpha \varepsilon)} \quad (4.27)$$

Avec : $\delta(\varepsilon) = \varepsilon(1 + \alpha \varepsilon)$ et $\delta(\varepsilon') = \varepsilon'(1 + \alpha \varepsilon')$

L'expression (4.40) fait apparaître la fonction de distribution de l'angle β . Après tirage au sort d'un réel rm compris entre 0 et 1, l'angle β s'obtient en résolvant l'équation :

$$rm \times \int_0^\pi (1 + \alpha\varepsilon + \alpha\varepsilon \cos \beta)^2 \times \sin \beta \cdot d\beta = \int_0^\beta (1 + \alpha\varepsilon + \alpha\varepsilon \cos \beta)^2 \times \sin \beta \cdot d\beta \quad (4.28)$$

On trouve alors :

$$\cos \beta = \frac{\left((1 + 2\alpha\varepsilon)^3 \times (1 - rm) + rm \right)^{1/3} - 1}{\alpha\varepsilon} - 1 \quad (4.29)$$

La plupart du temps, $\alpha\varepsilon$ est négligeable devant 1 ; cette distribution est alors quasi-uniforme.

4.3.1.3.2 Interactions piézoélectriques [1]

Ces interactions existent dans les cristaux piézoélectriques, mettant en jeu un phonon acoustique de faible longueur d'onde. Elles ont un effet négligeable sur le comportement de l'électron car elles sont élastiques et ne provoquent aucune déviation.

La densité de probabilité relative au passage d'un état \vec{k} à un état \vec{k}' s'écrit :

$$S(\vec{k}, \vec{k}') = \frac{e^2 \cdot k_B \cdot T \cdot P_{pi}^2 \times G(k, k')}{4\pi^2 \cdot \hbar \cdot \varepsilon_0 \cdot \varepsilon_s \cdot |\vec{k} - \vec{k}'|^2} \times \delta(\varepsilon - \varepsilon') \quad (4.30)$$

P_{pi}^2 est le potentiel piézoélectrique qui est un coefficient sans dimension, et qui s'exprime en fonction des constantes piézoélectriques connues h_{14} , c_{11} , c_{12} et c_{44} par la relation :

$$P_{pi}^2 = \frac{1}{35} \cdot h_{14}^2 \cdot \varepsilon_0 \cdot \varepsilon_s \cdot \left(\frac{12}{c_l} + \frac{16}{c_t} \right) \quad (4.31)$$

$$\text{Où } c_l = \frac{3c_{11} + 2c_{12} + 4c_{44}}{5} \quad \text{et} \quad c_t = \frac{c_{11} - c_{12} + 3c_{44}}{5} \quad (4.32)$$

Après intégration sur l'énergie, l'expression de la probabilité d'interaction devient :

$$\lambda(\varepsilon) = \frac{e^2 k_B T \cdot P_{pi}^2 \cdot m^{*1/2}}{4\sqrt{2} \cdot \pi \cdot \hbar^2 \cdot \varepsilon_0 \cdot \varepsilon_s \cdot (1 + 2\alpha\varepsilon) \cdot \delta^{1/2}(\varepsilon)} \times \int_0^\pi \frac{(1 + \alpha\varepsilon + \alpha\varepsilon \cos \beta)^2 \cdot \sin \beta \cdot d\beta}{1 - \cos \beta} \quad (4.33)$$

Par rapport à l'énergie, on constate que l'interaction piézoélectrique est la plus improbable parmi toutes les interactions étudiées.

L'intégrale sur β présente une indétermination à l'origine. Cette difficulté est purement mathématique ; car $\lambda(\varepsilon) \rightarrow \infty$ quand $\beta \rightarrow 0$. Pour contourner cette difficulté purement liée aux limites du modèle mathématique ; la borne inférieure est ramenée à une valeur à suffisamment petite, pour que la perturbation apportée par cette approximation soit

inopérante : on prend en l'occurrence $a=0.01$ radians. L'expression de la probabilité d'interaction s'écrit alors, après intégration (où P_{pi}^2 est le potentiel piézoélectrique) :

$$\lambda_{pi}(\varepsilon) = \frac{e^2 \cdot k_B \cdot T \cdot P_{pi}^2 \cdot m^{*1/2}}{4\sqrt{2} \cdot \pi \cdot \hbar^2 \cdot \varepsilon_0 \cdot \varepsilon_s \cdot \delta^{1/2}(\varepsilon)} \times \frac{I}{(1+2\alpha\varepsilon)} \quad (4.34)$$

$$\text{Avec : } I = (1+2\alpha\varepsilon)^2 \operatorname{Ln} \left| \frac{2}{1-\cos a} \right| - 2\alpha\varepsilon(1+\alpha\varepsilon)(1+\cos a) + \frac{(\alpha\varepsilon)^2}{2} [4 - (1-\cos a)^2] \quad (4.35)$$

L'équation (4.47) met en évidence la fonction de distribution de l'angle β . Après avoir tiré au sort le nombre rm compris entre 0 et 1 ; l'angle de déviation β et rm obéissent à l'équation [6] :

$$rm = \frac{1}{I} \times \int_a^\beta \frac{(1+\alpha\varepsilon + \alpha\varepsilon \cos \beta')^2}{1-\cos \beta'} \times \sin \beta' d\beta' \quad (4.36)$$

Et l'on obtient alors :

$$\begin{aligned} & \frac{\alpha^2 \varepsilon^2}{2} [(1-\cos \beta)^2 - (1-\cos a)^2] - 2\alpha\varepsilon(1+2\alpha\varepsilon)[(1-\cos \beta) - (1-\cos a)] \\ & + (1+2\alpha\varepsilon)^2 \times \operatorname{Ln} \left(\frac{1-\cos \beta}{1-\cos a} \right) - rm \times I = 0 \end{aligned} \quad (4.37)$$

C'est une équation qui n'admet pas de solution analytique simple. Elle est résolue numériquement par une méthode de dichotomie initialisée à la valeur la plus probable $\beta=a$.

4.3.1.4 Interactions inélastiques [5]

Ces interactions sont dues essentiellement aux transitions intervallées, qui permettent le transfert des porteurs d'une vallée à une autre vallée équivalente ou non-équivalente ; elles sont accompagnées d'absorption ou d'émission d'un phonon intervallée dont la valeur dépend de la vallée de départ et de la vallée d'arrivée [7].

Une interaction intervallée ne peut avoir lieu que si l'énergie après absorption ou émission du phonon, est supérieure à l'énergie du fond de la vallée d'accueil ; les énergies étant repérées par rapport au bas de la vallée centrale Γ .

4.3.1.4.1 Interactions optiques polaires [5]

Ce sont des interactions très importantes dans toutes les vallées. L'énergie du phonon $\hbar\omega$ est comparable à celle de l'électron, à température ambiante. Ce type d'interactions a un grand effet sur l'évolution de la mobilité, à faible champ électrique. Les seules énergies possibles après interaction sont donc :

$$\varepsilon' = \varepsilon \pm \hbar\omega_0 \quad (4.38)$$

Au cours d'une interaction optique polaire, le passage d'un état \vec{k} à un état \vec{k}' est décrit par la densité de probabilité :

$$S(\vec{k}, \vec{k}') = \frac{2\pi}{\hbar} B_0(\vec{k}, \vec{k}') \times \left(N_0 + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) \times \delta[\varepsilon(k')] \times \delta[\varepsilon(k') - \varepsilon(k) \pm \hbar\omega_0] \quad (4.39)$$

$$\text{Où } \left\{ \begin{array}{l} B_0(\vec{k}, \vec{k}') = \frac{2\pi e^2 \hbar \omega_0}{4\pi \varepsilon_0 |\vec{k} - \vec{k}'|^2} \left(\frac{1}{\varepsilon_\infty} - \frac{1}{\varepsilon_s} \right) G(\vec{k}, \vec{k}') \end{array} \right. \quad (4.40)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} N_0 = \frac{1}{\exp(\hbar\omega_0 / K_B \cdot T) - 1} \end{array} \right. \quad (4.41)$$

N_0 est la fonction de répartition des phonons ; $G(\vec{k}, \vec{k}')$ est l'intégrale de recouvrement en tenant compte de la non parabolicité des bandes d'énergie ; ε_∞ et ε_s sont les permittivités diélectriques relatives ; T est la température du réseau ; K_B est la constante de Boltzmann ; \hbar est la constante de Planck ; e est la charge de l'électron.

Après les changements de variables

$$\varepsilon'(1 + \alpha\varepsilon') = \frac{\hbar^2 k'^2}{2m^*}, \quad \delta(\varepsilon) = \varepsilon(1 + \alpha\varepsilon) \quad \text{et} \quad \delta(\varepsilon') = \varepsilon'(1 + \alpha\varepsilon'); \quad (4.42)$$

On intègre immédiatement sur ε' , compte tenu des propriétés de la fonction de Dirac, et l'on trouve :

$$\lambda(\varepsilon) = \frac{e^2 m^{*1/2} \omega_0}{\hbar \sqrt{2} 4\pi \varepsilon_0} \times \left(\frac{1}{\varepsilon_\infty} - \frac{1}{\varepsilon_s} \right) \times \frac{\sqrt{\delta(\varepsilon')}}{1 + 2\alpha\varepsilon} \quad (4.43)$$

$$\times \int_0^\pi \frac{(\sqrt{1 + \alpha\varepsilon} \sqrt{1 + \alpha\varepsilon'} + \alpha\sqrt{\varepsilon\varepsilon'} \cos\beta)^2}{\delta(\varepsilon) + \delta(\varepsilon') - 2\cos\beta \sqrt{\delta(\varepsilon)\delta(\varepsilon')}} \sin\beta d\beta \times \left(N_0 + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right)$$

Après intégration sur β ; la probabilité d'interaction optique polaire par unité de temps, est donnée par la relation :

$$\lambda_{op}(\varepsilon) = \frac{e^2 m^{*1/2} \omega_0}{4\sqrt{2} \pi \hbar \varepsilon_0} \left(\frac{1}{\varepsilon_\infty} - \frac{1}{\varepsilon_s} \right) \frac{1 + 2\alpha\varepsilon}{\sqrt{\delta(\varepsilon)}} F(\varepsilon, \varepsilon') \left(N_0 + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) \quad (4.44)$$

$$\text{Avec : } \left\{ \begin{array}{l} F(\varepsilon, \varepsilon') = \frac{1}{A} \left(B \operatorname{Ln} \left(\frac{\delta^{1/2}(\varepsilon) + \delta^{1/2}(\varepsilon')}{\delta^{1/2}(\varepsilon) - \delta^{1/2}(\varepsilon')} \right) + C \right) \end{array} \right. \quad (4.45)$$

$$A = 4(1+\alpha\varepsilon)(1+\alpha\varepsilon') + (1+2\alpha\varepsilon)(1+2\alpha\varepsilon') \quad (4.46)$$

$$B = [2(1+\alpha\varepsilon) \times (1+\alpha\varepsilon') + \alpha \times (\delta(\varepsilon) + \delta(\varepsilon'))]^2 \quad (4.47)$$

$$C = -2\alpha[\delta(\varepsilon) \cdot \delta(\varepsilon')]^{1/2} \times [4(1+\alpha\varepsilon)(1+\alpha\varepsilon') + \alpha \times (\delta(\varepsilon) + \delta(\varepsilon'))]^2 \quad (4.48)$$

L'équation (4.43) fait apparaître la fonction de distribution $P_\varepsilon(\beta)$ de l'angle β , qui peut s'écrire :

$$P_\varepsilon(\beta) = \frac{(\sqrt{1+\alpha\varepsilon} \cdot \sqrt{1+\alpha\varepsilon'} + \alpha\sqrt{\varepsilon\varepsilon'} \cdot \cos\beta)^2}{\delta(\varepsilon) + \delta(\varepsilon') - 2\cos\beta \cdot \sqrt{\delta(\varepsilon)\delta(\varepsilon')}} \times \sin\beta \quad (4.49)$$

Pour rm tiré au hasard entre 0 et 1, on détermine l'angle β qui vérifie toujours la même relation (4.22).

Après intégration, on obtient une équation (où L et M sont des constantes) sous la forme :

$$\begin{aligned} \frac{L}{2} \times \operatorname{Ln} \left(1 + \frac{2\sqrt{\delta(\varepsilon)\delta(\varepsilon')}(1-\cos\beta)}{(\sqrt{\delta(\varepsilon)} - \sqrt{\delta(\varepsilon')})^2} \right) + \frac{M}{2} (1-\cos\beta) - \alpha^2 \cdot \delta(\varepsilon)\delta(\varepsilon')(1-\cos^2\beta) = \\ rm \times \left[L \times \operatorname{Ln} \frac{\sqrt{\delta(\varepsilon)} + \sqrt{\delta(\varepsilon')}}{|\sqrt{\delta(\varepsilon)} - \sqrt{\delta(\varepsilon')}|} + M \right] \end{aligned} \quad (4.50)$$

Cette expression ne permet pas d'exprimer $\cos\beta$ sous forme analytique. On peut toutefois remarquer que α a été introduit en développant la relation de dispersion en série du premier ordre en ε . On peut alors faire de même pour la dernière équation ; en la développant au second ordre en α , on obtient :

$$\cos\beta = \frac{1+f - (1+2f)^r}{f} \quad (4.51)$$

$$\text{Avec : } f = \frac{2\sqrt{\varepsilon\varepsilon'}}{(\sqrt{\varepsilon} - \sqrt{\varepsilon'})^2} \quad (4.52)$$

4.3.1.4.2 Interactions optiques intervallées équivalentes et non équivalentes [1]

Dans ces interactions inélastiques, l'état initial et l'état final ne sont pas dans la même vallée, et la probabilité de transfert est proportionnelle au nombre des vallées équivalentes. Dès que les conditions sur l'énergie sont satisfaites, ces interactions jouent le rôle le plus important parmi toutes les autres interactions. Cela est dû à leur forte probabilité et à leurs conséquences

sur le comportement de l'électron. Ces interactions exigent que l'énergie après interaction, soit supérieure à l'énergie du fond de la vallée d'accueil.

$$\varepsilon_i \pm \hbar W_{ij} + \Delta_i \Delta_j \geq 0 \quad (4.53)$$

Δ_i est l'écart d'énergie entre les bas de la vallée de départ Γ et de la vallée d'arrivée X.

Δ_j est l'écart d'énergie entre les bas de la vallée de départ Γ et de la vallée d'arrivée L.

ε_i est l'énergie mesurée par rapport au bas de la vallée Γ .

L'électron transféré dans une vallée, subit les effets directs de l'interaction : variation de l'énergie et du vecteur d'onde, et toutes les discontinuités dues à la non-équivalence entre la vallée d'origine et la vallée d'arrivée : masse effective et coefficient de non parabolicité qui changent. Ce transfert provoque aussi une variation de l'énergie cinétique qui correspond à la différence de niveaux entre les deux vallées.

La densité de probabilité de passage de l'état \vec{k} à l'état \vec{k}' , permettant le transfert de la vallée i vers la vallée j équivalente ou non, s'écrit [6] :

$$S_{ij}(\vec{k}, \vec{k}') = \frac{2\pi}{\hbar} \cdot B_{ij}(k, k') \left(N_{ij} + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) \cdot \delta[\varepsilon_j(k') - \varepsilon_i(k) + \Delta_j - \Delta_i \pm \hbar\omega_{ij}] \quad (4.54)$$

$$\text{Où } \left\{ \begin{array}{l} B_{ij}(\vec{k}, \vec{k}') = \frac{Z_{ij} \cdot \hbar \cdot E_{ij}^2 \cdot (1 + \alpha_i \cdot \varepsilon_i) \cdot (1 + \alpha_j \cdot \varepsilon_j)}{2\rho \cdot \omega_{ij} \cdot V \cdot (1 + 2\alpha_i \cdot \varepsilon_i) \cdot (1 + 2\alpha_j \cdot \varepsilon_j)} \end{array} \right. \quad (4.55)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} N_{ij} = \frac{1}{\exp(\hbar\omega_{ij}/K_B \cdot T) - 1} \end{array} \right. \quad (4.56)$$

$\hbar\omega_{ij}$ est l'énergie du phonon échangé ; Δ_i et Δ_j sont les énergies relatives aux fonds des vallées i et j ; ε_i et ε_j sont les énergies relatives dans chaque vallée ; α_i et α_j sont les coefficients de non parabolicité des vallées ; Z_{ij} est le nombre de vallées d'arrivée de type j quand on part de la vallée i ; E_{ij} est le potentiel de déformation intervallée entre la vallée i et la vallée j ; ρ est la masse volumique du matériau.

L'intégration sur tous les états \vec{k}' finaux nous conduit à la probabilité d'interaction par unité de temps et qui est donnée par :

$$\lambda_{ij}(\varepsilon_i) = \frac{Z_{ij} \cdot m_j^{*3/2} \cdot E_{ij}^2}{\pi \cdot \sqrt{2} \cdot \rho \cdot \omega_{ij} \cdot \hbar^3} \times \left(N_{ij} + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) \times \frac{\delta_j(\varepsilon') \cdot (1 + \alpha_i \cdot \varepsilon_i) \cdot (1 + \alpha_j \cdot \varepsilon'_j)}{(1 + 2\alpha_i \cdot \varepsilon_i)} \quad (4.57)$$

On remarque que $S(\vec{k}, \vec{k}')$ ne dépend pas de l'angle β de déviation, sur la sphère représentative de l'énergie finale, tous les états \vec{k}' finaux sont équiprobables. L'angle β est alors obtenu en tirant au hasard un réel rm entre 0 et 1 tel que :

$$rm = \int_0^\beta \frac{\sin \beta' . d\beta'}{2} \quad (4.58)$$

$$\text{Soit } \cos \beta = 1 - 2rm \quad (4.59)$$

4.3.1.4.3 Interactions optiques non polaires [2]

Elles sont inélastiques, et leurs effets sur l'électron sont comparables à ceux causés par les interactions optiques intervallées équivalentes avec $Z_{ij} = 1$.

Elle n'a lieu que dans les vallées de symétrie L (L ou M-L), et elle est accompagnée d'une absorption ou d'une émission d'un phonon optique non polaire. Le traitement de ce type d'interaction est alors le même que celui des interactions optiques polaires intervallées avec $j=i$.

4.3.2 Interaction avec les impuretés ionisées

Le modèle choisi ne tient compte que d'interactions avec les impuretés totalement ionisées. La densité de probabilité relative au passage d'un état \vec{k} à un état \vec{k}' , au cours de cette interaction élastique, s'écrit :

$$S(\vec{k}, \vec{k}') = \frac{32\pi^3 e^4 N_{imp}}{(4\pi\epsilon_0\epsilon_s)^2 \hbar V} \times \frac{G(k, k')}{\left(|\vec{k} - \vec{k}'| + \theta\right)^2} \times \delta(\epsilon(k') - \epsilon(k)) \quad (4.60)$$

N_{imp} est la concentration en impuretés. θ est l'inverse de la distance d'écran ; elle est reliée à la concentration en impuretés par la relation :

$$\theta = e \sqrt{\frac{N_{imp}}{\epsilon_0 \epsilon_s K_B T}} \quad (4.61)$$

$G(k, k')$ est l'intégrale de recouvrement, en tenant compte de la non parabolicité des bandes d'énergie :

$$G(k, k') = \left[\left(\frac{1 + \alpha \cdot \epsilon(k)}{1 + 2\alpha \cdot \epsilon(k)} \times \frac{1 + \alpha \cdot \epsilon(k')}{1 + 2\alpha \cdot \epsilon(k')} \right)^{1/2} + \left(\frac{\alpha \cdot \epsilon(k)}{1 + 2\alpha \cdot \epsilon(k)} \times \frac{\alpha \cdot \epsilon(k')}{1 + 2\alpha \cdot \epsilon(k')} \right)^{1/2} \times \cos \beta \right]^2 \quad (4.62)$$

A partir de l'équation (4.17) qui est l'intégration sur tous les états \vec{k} , on intègre sur l'énergie et l'on obtient la probabilité d'interaction en fonction de ε :

$$\lambda(\varepsilon) = \frac{e^4 N_{imp} \times m^{*3/2} \cdot \delta^{1/2}(\varepsilon)}{\sqrt{2\pi}(\varepsilon_0 \varepsilon_s)^2 \cdot \hbar^4} \times \int_0^\pi \frac{(1 + \alpha\varepsilon + \alpha\varepsilon \cos \beta)^2}{(2k^2(1 - \cos \beta) + \theta^2)^2} \times \sin \beta \cdot d\beta \quad (4.63)$$

Après intégration complète, la probabilité d'interaction avec les impuretés par unité de temps, est de la forme :

$$\lambda(\varepsilon) = \frac{\sqrt{2\pi} N_D e^4 \varepsilon^{-1/2} (1 + 2\alpha\varepsilon)}{(4\pi \varepsilon_0 \varepsilon_s)^2 m^{*1/2} (1 + \alpha\varepsilon)^2} I \quad (4.64)$$

N_D est la concentration des impuretés.

$$I = \frac{[1 + 2e_k^4 (\theta/2k)^2]^2}{4(\theta/2k)^2 [1 + (\theta/2k)^2]} + e^2 [1 + 2e_k^4 (\theta/2k)^2] \text{Ln} \left[\frac{(\theta/2k)^2}{1 + (\theta/2k)^2} \right] + e_k^4 \quad (4.65)$$

$$\text{Avec : } \quad e_k = \left(\frac{\alpha \varepsilon}{1 + 2\alpha \varepsilon} \right)^{1/2} \quad (4.66)$$

$$\theta = e \sqrt{\frac{N_D}{\varepsilon_0 \varepsilon_s K_B T}} \quad (4.67)$$

$$\varepsilon(1 + \alpha \varepsilon) = \delta(\varepsilon) \quad (4.68)$$

L'équation de la probabilité (4.14) devient alors :

$$\lambda(\varepsilon) = \frac{e^2 m^{*1/2} K_B T}{4\sqrt{2\pi} \varepsilon_0 \varepsilon_s \hbar^2} \frac{1 + 2\alpha \varepsilon}{\sqrt{\delta(\varepsilon)}} \quad (4.69)$$

Où ε_s et ε_0 sont les permittivités diélectriques, et e est la charge de l'électron.

L'équation (4.63) fait apparaître la fonction de distribution de l'angle β de déviation. En utilisant la relation (4.22), et après avoir tiré au hasard un réel rm entre 0 et 1, l'angle β est donné finalement par la relation :

$$\cos \beta = 1 - \frac{2rm}{1 + (1 - rm)(4k^2/\theta^2)} \quad (4.70)$$

4.3.3 Interactions des électrons avec les centres coulombiens [2]

Parmi les causes de perturbation de la trajectoire électronique ; il y a aussi les interactions coulombiennes sur les impuretés chargées électroniquement, qui jouent un rôle important dans les composés nitrures.

Ce problème est délicat à cause de la présence du phénomène d'écrantage des centres coulombiens par les porteurs libres.

La figure (4.1) donne la déviation de l'électron ayant une vitesse initiale \vec{v} , par un centre coulombien de charge Q . L'angle de déviation θ de cet électron, après son passage au voisinage du centre, est donné par la relation :

$$\operatorname{tg} \frac{\theta}{2} = \frac{Qq}{\varepsilon_0 \varepsilon_r m^* v^2 b} \quad (4.71)$$

Où m^* est la masse de l'électron, q sa charge, Q la charge du centre, et b la distance du centre coulombien par rapport à la droite portant la trajectoire initiale de l'électron.

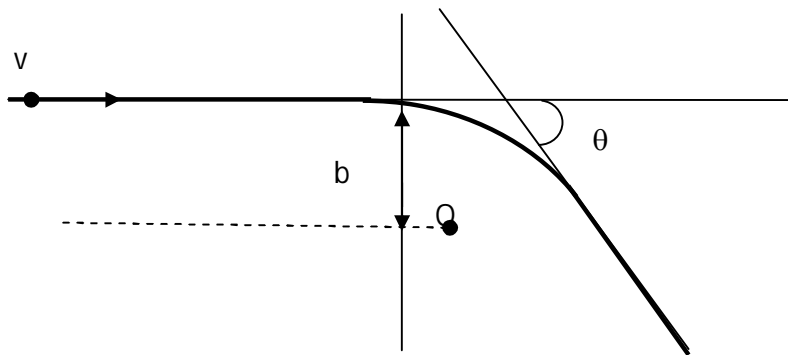


Figure 4.1: La déviation d'un électron par un centre coulombien [2].

L'électron change complètement sa direction initiale lorsque $\theta > \frac{\pi}{2}$, soit :

$$b < \left(Qq / \varepsilon_0 \varepsilon_r m^* v^2 \right) = b_c \quad (4.72)$$

La direction du vecteur d'onde de l'électron, après le choc, devient complètement aléatoire. Le temps de relaxation du courant sur les impuretés, est approché par l'expression de Bulman:

$$\tau_{imp} = (\pi b_c^2 N v)^{-1} \approx (2\varepsilon)^{\frac{3}{2}} (\varepsilon_0 \varepsilon_r)^2 m^{*\frac{1}{2}} / \pi Q^2 N \quad (4.73)$$

$\sigma = \pi b_c^2$ représente la section efficace, N est la densité des centres coulombiens présents dans le cristal, et $\varepsilon = 1/2 m v^2$ est l'énergie de l'électron.

L'interaction électron-impureté ionisée, est élastique (elle conserve l'énergie de l'électron).

L'expression du temps de relaxation du courant montre que la perturbation provoquée par les impuretés ionisées dans un semi-conducteur, est plus importante lorsque la densité des centres coulombiens est plus grande et l'énergie des électrons est plus petite.

Les collisions électrons-électrons, sont dans le groupe des diffusions coulombiennes. Elles sont donc d'une importance moindre car elles conservent l'énergie totale de la population électronique. Elles ont le rôle de redistribuer l'énergie dans cette population. Elles agissent sur la forme de la fonction de distribution, ce qui a pour effet de changer l'interaction de la population avec les autres mécanismes. L'interaction électron-électron n'est importante que si la densité des électrons dépasse 10^{18}cm^{-3} .

Les trois nitrures sont des matériaux à grande densité d'électrons libres, ce type d'interaction tend à y distribuer l'énergie et le moment, sous la forme d'une maxwellienne déplacée.

4.3.4 Phénomène d'ionisation par impact [7]

L'ionisation par impact (ou par choc) apparaît dans un matériau, pour des champs électriques intenses. En effet ; un électron qui dérive dans un solide 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 4.2](#), 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 $3/2 E_g$). Le gap d'InN est plus petit que ceux de GaN et AlN, ce phénomène y est donc plus important.

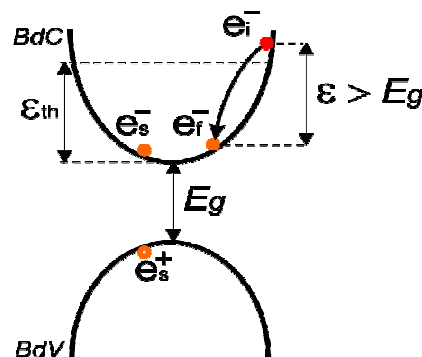


Figure 4.2 [8] : Phénomène d'ionisation par choc (e_i^- : électron à l'état initial, e_f^- : électron à l'état final, e_s^- : électron secondaire créé, e_s^+ : trou créé).

4.3.5 Interactions prépondérantes dans les semi-conducteurs ternaires [3]

Parmi toutes les interactions pouvant survenir à l'électron au cours de son évolution ; certaines ont un impact décisif sur son comportement, par leurs fréquences et leurs effets marqués : ce sont principalement les interactions optiques polaires en vallée centrale à faible champ, et les interactions intervalles en champ fort. Ces interactions sont inélastiques, et la probabilité d'émission est supérieure à la probabilité d'absorption dès que l'électron possède suffisamment d'énergie pour émettre un phonon.

L'électron a tendance à transmettre au réseau une partie de l'énergie que lui a fournie le champ électrique. Les collisions sur les phonons acoustiques de grande longueur d'onde, autorisent des transferts $\vec{K} \rightarrow \vec{K}'$ avec échange de phonons de faible énergie. Ces transitions intravallées sont considérées comme quasiment élastiques aux températures étudiées.

4.3.6 Influence de la position de l'électron sur la nature de l'interaction [1]

La nature, la probabilité et l'efficacité des processus d'interactions, dépendent de la position de l'électron dans son diagramme de bande.

- Dans la vallée Γ , à faible énergie :

Si l'énergie ε de l'électron est plus faible que l'énergie d'émission $\hbar\omega_0$ du phonon optique polaire, les interactions acoustiques ou piézoélectriques prédomineront. Ce sont des collisions élastiques et isotopes. Elles rendent la direction du vecteur-vitesse des électrons, aléatoire. Elles sont d'une grande influence sur le transport de charges, sous l'action d'un champ électrique. Leur probabilité totale est $\lambda \approx 10^{12} \text{ s}^{-1}$. Dans le cas d'absorption d'un phonon, cette probabilité décroît rapidement avec la température. L'absorption des phonons optiques polaires (OPA) est possible avec une probabilité de 10^{12} s^{-1} .

- Dans la vallée Γ , à plus forte énergie :

Lorsque l'énergie ε de l'électron est supérieure à $\hbar\omega_0$, l'émission d'un phonon optique polaire est possible (OPE). Cette interaction a une probabilité de l'ordre de $5 \cdot 10^{12} \text{ s}^{-1}$. Elle donne une déviation du vecteur-vitesse de l'électron, qui décroît quand l'énergie ε augmente.

L'émission d'un phonon optique polaire devient le processus dominant quand l'énergie cinétique de l'électron dépasse ($\hbar \dots$) [9] ; soit 91.2 meV pour GaN, 99.2 meV pour AlN et 89 meV pour InN. Quand son énergie augmente et donc le module de sa vitesse augmente, l'électron est de moins en moins dévié de sa trajectoire. En dépit de la perte d'énergie due à l'émission de phonon, l'électron va se transporter de plus en plus vite dans la direction du

champ électrique qui l'accélère. Cette particularité de l'interaction optique polaire est une des raisons qui expliquent les valeurs élevées de la mobilité électronique dans les nitrures.

- Les transferts d'électrons de la vallée Γ dans les vallées L ou X :

Quand l'électron possède une énergie supérieure à l'un des écarts intervallées $\Delta E_{\Gamma L}$ ou $\Delta E_{\Gamma X}$, il peut être transféré vers les vallées supérieures de la bande de conduction (L ou X). La probabilité est très importante, au point où ces processus dominent à leur tour l'ensemble des collisions.

Les transferts intervallées mettent en jeu les phonons du bord de la zone de Brillouin, dont le vecteur d'onde k_0 est grand devant celui de l'électron dans la vallée Γ . Les vecteurs \vec{k}' sont répartis sur un cercle de rayon k_0 . Les transferts s'accompagnent d'une variation d'énergie ($\hbar \omega$) qui s'ajoute à la transformation de l'énergie cinétique en énergie potentielle $\Delta E_{\Gamma L}$ ou $\Delta E_{\Gamma X}$.

- Electrons dans les vallées supérieures :

La masse des électrons transférés dans L ou dans X, est plus grande que celle de la vallée Γ . Les interactions électron-phonon sont de trois types :

- Intervallées mettant en jeu des phonons acoustiques ou piézoélectriques, ou l'absorption d'un phonon optique polaire.
- Intervallées équivalentes qui consistent en un transfert d'une vallée X dans l'une des deux autres vallées équivalentes, ou d'une vallée L dans l'une des trois autres.
- Intervallées non équivalentes qui consistent en un transfert dans les vallées non équivalentes ($\Gamma \leftrightarrow X$, $\Gamma \leftrightarrow L$ ou $X \leftrightarrow L$).

Ces interactions sont isotropes et d'une probabilité élevée. Elles influent beaucoup sur le déplacement de l'électron dans un champ électrique. La croissance de la masse effective associée à ces propriétés, peuvent réduire la mobilité des électrons dans les vallées satellites.

4.3.7 Dépendance des énergies de phonons dans AlGa_xN, sur la composition [10]

Des mesures de Raman ont été effectuées sur Al_xGa_{1-x}N pour $x = 0.15$. L'augmentation de la fréquence des phonons avec la fraction molaire d'Al, est plus petite que prévue d'une extrapolation linéaire pour les modes A et E₂, alors qu'elle est légèrement plus grande pour le mode E₁ (LO). AlGa_xN semble être un alliage unique de mode, car aucune scission de l'un des sommets n'a été observée.

Dans (Al,Ga)_xN, la dépendance des énergies de phonons sur la composition, a été étudiée par plusieurs groupes par réflectivité ou effet Raman. La variation est monomode, sauf pour le

phonon E_2 . L'indice de réfraction qui est un paramètre fondamental pour la fonction des lasers, en fonction de l'énergie et de la composition de l'alliage, a été mesuré par divers auteurs mais l'incertitude expérimentale reste importante.

4.4 Rendement de la luminescence d'un semiconducteur [11] :

Le rendement est limité par les transitions non radiatives comme la transition par transfert d'énergie avec les phonons du réseau cristallin. Puisque l'énergie des phonons est généralement plus faible que celle du gap, il faut des échanges d'énergie avec plusieurs phonons pour une seule transition. On peut estimer que pour descendre tout le gap (soit une énergie de l'ordre de 1eV), l'électron doit céder son énergie à 30-40 phonons. Ceci ne peut pas se faire en une seule fois car la probabilité d'interaction entre un tel nombre de particules est infime. En pratique, l'échange a lieu par étape grâce à l'existence de niveaux électroniques intermédiaires (Figure 4.3). Si de tels niveaux intermédiaires n'existaient pas, une telle émission de phonons en cascade ne pourrait pas se produire et les transitions radiatives seraient alors privilégiées. On comprend ainsi l'importance des défauts et des impuretés dans les S-C destinés aux applications optiques. En pratique, on cherchera à éviter les dislocations, les lacunes, les impuretés chimiques et les interactions avec les surfaces du matériau S-C.

4.4.1 Le mécanisme de transfert d'énergie avec les phonons (collisions réseau cristallin)

$E_g \approx 1\text{eV} \approx 30 \text{ à } 40$ phonons

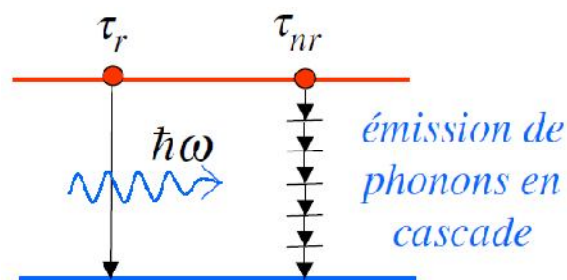


Figure 4.3 : émission des phonons par cascades (Niveaux intermédiaires nécessaires et rôle essentiel des impuretés et des défauts) [11].

4.4.2 Les recombinaison Auger

La recombinaison Auger est un mécanisme très important de recombinaisons non radiatives responsables de limitation de rendement des S-C et des DEL. Lors d'une recombinaison Auger, l'électron cède son énergie à un autre électron de la bande de conduction. Ce dernier monte donc dans la bande mais il est très vite thermalisé (10^{-13} sec) par

interaction avec le réseau cristallin (cascade de phonons). L'énergie est donc perdue sous forme de phonons (échauffement) et aucun photon n'est émis. Ce mécanisme de recombinaison non radiative est représenté schématiquement à la figure 4.4 a, ci-dessous. On notera que l'interaction entre l'électron qui descend et l'électron Auger doit respecter la conservation de la quantité de mouvement.

La figure 4.4b illustre le même phénomène avec un électron Auger dans la bande de valence : l'électron qui descend donne son énergie et sa quantité de mouvement à un électron profond de la bande de valence, celui-ci est thermalisé par cascade de phonons. Il est habituel d'interpréter ce mécanisme en termes de transition de trous. L'électron qui descend est vu comme un trou qui monte grâce à un échange d'énergie avec un trou de la bande de valence. Ce trou « Auger » est alors thermalisé et remonte dans la bande par cascade de phonons.

Le premier effet « Auger eet » : recombinaison électron-trou par l'intermédiaire d'un électron Auger.

Le second effet « Auger ett » : recombinaison électron-trou par l'intermédiaire d'un trou Auger (la particule Auger étant représentée par les lettres du milieu e et t dans eet et ett, respectivement).

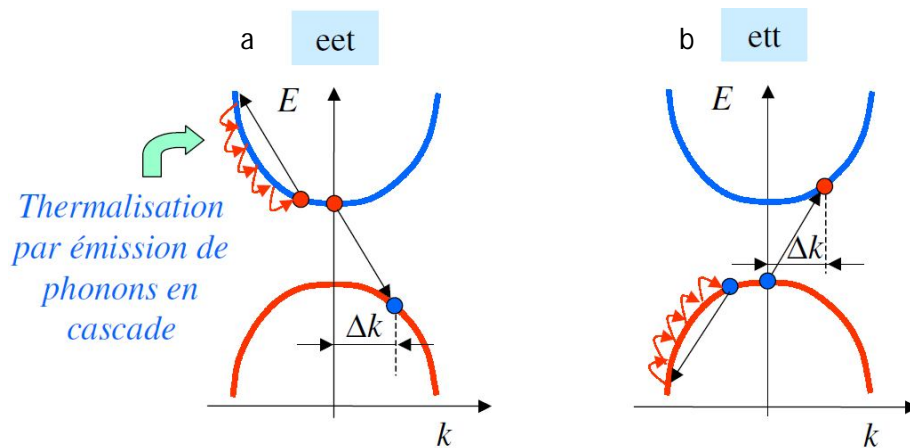


Figure 4.4 : Mécanisme de recombinaison Auger a- recombinaison électron-trou par l'intermédiaire d'un électron Auger (Auger eet), b- recombinaison électron-trou par l'intermédiaire d'un trou Auger (Auger ett) [11].

Sur la figure 4.5, on illustre les deux mécanismes de recombinaison Auger dans une jonction p-n polarisée. Puisque le mécanisme eet fait intervenir deux électrons simultanément, sa probabilité est proportionnelle au carré de la densité électronique, soit n^2 . Ce mécanisme affectera donc plus particulièrement les recombinaisons qui se font en région de type n. De même le mécanisme Auger ett, faisant intervenir deux trous simultanément, est proportionnel

au carré de la densité de trous, soit p^2 . Il affecte donc les recombinaisons du côté p et est négligeable du côté n. Puisque le mécanisme eet exige la présence d'un état électronique libre, c'est à dire un trou dans la bande de valence, sa probabilité est également proportionnelle à p, soit une probabilité globale proportionnelle à n^2p . Il en est de même pour le mécanisme ett qui met en jeu un électron de la bande de conduction (il faut un électron dans la bande de conduction pour que le trou puisse y monter). La probabilité associée à l'effet Auger ett est donc proportionnelle à p^2n .

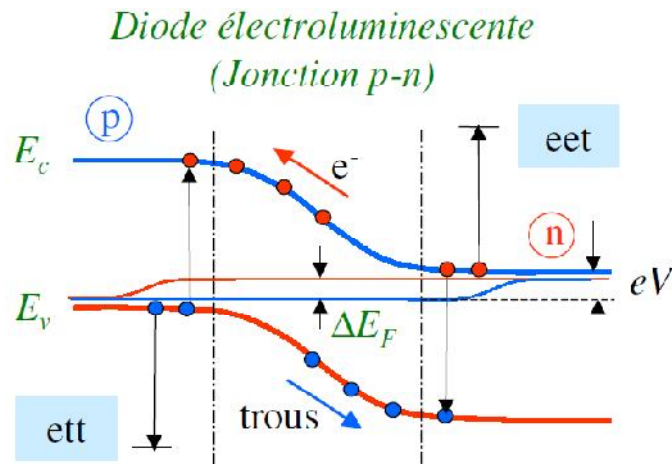


Figure 4.5: les deux mécanismes de recombinaison Auger dans une jonction p-n polarisée[11]

$$n \rightarrow R = C_n n p = \dots \Leftrightarrow \tau = \dots \quad (4.74)$$

$$p \rightarrow R = C_p p n = \dots \Leftrightarrow \tau = \dots \quad (4.75)$$

Les taux de recombinaison Auger R_A pour les deux mécanismes eet et ett sont donnés par les relations ci-dessus. Les constantes de proportionnalité C_n et C_p sont appelées les coefficients Auger. Comme le taux R représente le nombre de trous qui disparaissent par unité de temps du côté n, soit $R = -dp/dt$, on peut définir la durée de vie Auger eet comme étant $\tau = \dots$. De même pour l'effet Auger ett, on a $\tau = \dots$. Ces durées de vie conditionneront le rendement des DEL (les autres mécanismes de recombinaison non radiative sont en général négligeables).

Pour les applications optiques, on utilise des semiconducteurs fortement dopés afin d'atteindre aisément des degrés d'excitation élevés, c'est le cas des nitrures ce qui rend ces recombinaisons très importantes dans notre cas.

Comme les durées de vie Auger sont inversement proportionnelles aux concentrations de porteurs, on voit qu'il faudra être attentif à l'effet Auger en ce qui concerne le rendement de la génération de lumière : un compromis devra être établi entre rendement et excitabilité.

Pour estimer le rendement, il faut comparer les temps de vie radiative τ_r et Auger τ_A . Les formules ci-dessous expriment la compétition entre les deux effets. Les deuxièmes termes des membres de droite représentent les contributions à la génération de photons.

Les taux de recombinaison total sont donnés par les équations :

$$n \rightarrow \dots = \dots \quad (4.76)$$

$$p \rightarrow \dots = \dots \quad (4.77)$$

4.5 Mobilité électronique [2]

4.5.1 Temps de relaxation du courant

La connaissance de la probabilité totale d'interactions des électrons avec les phonons, est insuffisante pour déterminer la mobilité électronique, car on doit tenir compte des déviations des trajectoires au cours des collisions. Pour calculer la vitesse électronique ou la mobilité électronique, il faut connaître la fréquence des chocs et l'angle de déviation. Ces deux paramètres sont regroupés en un seul appelé « temps de relaxation du courant τ_m ».

Pour un choc élastique en une bande d'énergie parabolique, I étant le courant associé à un groupe de porteurs dont l'énergie est ε , on peut établir une équation de relaxation :

$$\frac{dI}{dt} = -\frac{I}{\tau_m} \quad (4.72)$$

Schrockley a montré que τ_m peut être donnée par l'équation :

$$\tau_m = \left(\lambda_j(\varepsilon) \langle 1 - \cos \theta_j(\varepsilon) \rangle \right)^{-1} \quad (4.79)$$

θ_j est l'angle de déviation de la trajectoire de l'électron, et $\langle 1 - \cos \theta_j(\varepsilon) \rangle$ est la valeur moyenne sur un grand nombre d'interactions.

L'expression du temps de relaxation fait apparaître la fréquence des chocs $\lambda(\varepsilon)$ et les déviations angulaires. La durée de relaxation s'accroît pour des collisions à petits angles de déviation.

4.5.2 Calcul de la mobilité [2]

La vitesse moyenne d'entraînement de la population électronique soumise à un champ électrique E , est donnée par :

$$v_e = q \frac{\tau_m}{m^*} E \quad (4.80)$$

La mobilité « sécante » est le facteur de proportionnalité de la vitesse d'entraînement au module de champ. Elle s'écrit :

$$\mu = q \frac{\tau_m}{m^*} \quad (4.81)$$

et l'on a : $v_e = \mu E$ (4.82)

Pour une population d'électrons ayant une énergie distribuée autour d'une valeur moyenne $\bar{\varepsilon}$; la notion du temps de relaxation, affectée à une valeur déterminée ε de l'énergie, doit être remplacée par le temps de relaxation moyen. Le calcul doit être fait pour l'ensemble des collisions et pour chaque valeur d'énergie ε , pour tenir compte de la distribution.

4.6 Transport de charges en régime stationnaire : caractéristique vitesse-champ

4.6.1 Vitesse et mobilité différentielles [2]

Quand le matériau semi-conducteur est soumis à un champ électrique, les électrons sont accélérés ; et une composante d'entraînement va s'ajouter à leur vitesse aléatoire d'agitation thermique. Après une phase transitoire très brève, à la suite de l'apparition du champ, un régime stationnaire est atteint, caractérisé par le fait qu'en tout point et à tout instant, l'énergie gagnée par les électrons dans le champ est exactement compensée par l'énergie perdue lors des collisions.

La distribution de l'énergie des électrons, est déplacée dans le sens des énergies croissantes, par rapport à la maxwellienne de l'équilibre. L'écart entre la valeur moyenne de l'énergie stationnaire ε_{st} de cette distribution, et l'énergie moyenne d'agitation thermique $\frac{3}{2}k_B T$, est plus important quand le champ est plus intense. Lorsque cet écart atteint plusieurs fois $\frac{3}{2} k_B \cdot T$, on dit que les électrons sont « chauds ».

La fréquence et l'efficacité des chocs sur les phonons, croient avec l'énergie des électrons. Pour l'ensemble des électrons, cette croissance se traduit par la variation non linéaire de la vitesse stationnaire d'entraînement, en fonction de l'intensité du champ électrique appliqué.

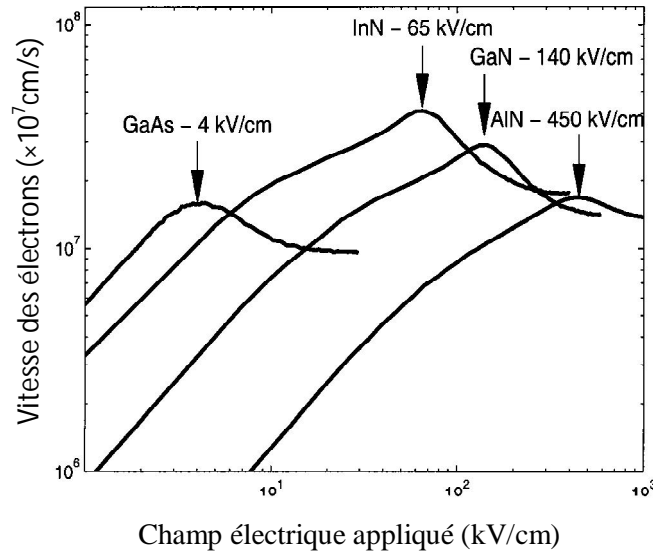


Figure 4.6: Vitesse de dérive des électrons, en régime stationnaire, en fonction du champ électrique appliqué, pour GaN, AlN, InN et GaAs [12].

Le maximum de la vitesse pour GaN est autour de 2.9×10^7 cm/s à la température ambiante, et apparaît quand l'énergie moyenne avoisine l'énergie de transfert dans la vallée X. Ce maximum est atteint pour un champ de 140 kV/cm dans GaN cubique. Pour InN : le maximum est de 4.1×10^7 cm/s pour un champ de 65 kV/cm; il est de 1.7×10^7 cm/s pour un champ de 450 kV/cm dans AlN ; alors qu'il ne dépasse pas 1.6×10^7 cm/s pour un champ seulement de 4 kV/cm dans le cas de GaAs. Après le maximum, la vitesse décroît pour atteindre une valeur stationnaire.

Cette distribution de la vitesse peut s'expliquer de la manière suivante : pour un champ faible, la mobilité est déterminée plutôt par les interactions avec les phonons optiques polaires (absorption comme émission puisque, à la température ambiante, l'énergie thermique moyenne des électrons dépasse $\hbar\omega_0$). Quand on dépasse le champ critique (ou de seuil), l'énergie atteint $\Delta E_{\Gamma X}$, et une partie des électrons sont transférés dans les vallées supérieures à la bande de conduction. La masse effective des électrons dans ces vallées est plus grande que celle dans la vallée Γ , et les chocs qu'ils subissent avec les phonons du bord de la zone de Brillouin (interactions intervallées), sont plus nombreux. Cela cause une dispersion quasi isotrope des vitesses, qui va ralentir les électrons. La vitesse moyenne d'entraînement est donnée par l'équation :

(4.83)

$$v_{st} = \frac{n_1 v_1 + n_2 v_2}{n_1 + n_2}$$

Où n_1 est le nombre des électrons restés dans la vallée Γ avec la vitesse v_1 , n_2 est le nombre des électrons transférés dont la vitesse chute à v_2 .

Quand on augmente le champ électrique considérablement, n_2 va devenir plus grand et n_1 va diminuer. De ce fait, la vitesse d'entraînement va tendre vers une limite voisine à la vitesse v_2 . Cette limite représente « la vitesse de saturation ».

La présence des impuretés ionisées réduit la valeur initiale de la mobilité sans changer la valeur de la vitesse de saturation (au delà de 300kV/cm pour GaN, 150kV/cm pour InN et 600 kV/cm pour AlN). Ceci est dû aux interactions coulombiennes qui n'agissent qu'aux basses énergies.

La vitesse stationnaire peut être exprimée par la formule [2] :

$$v(E) = \frac{\mu_0 E + v_{\text{sat}} (\varepsilon / E_c)^4}{1 + (\varepsilon / E_c)^4} \quad (4.84)$$

Où E_c est l'énergie cinétique et l est la longueur de diffusion des porteurs libres.

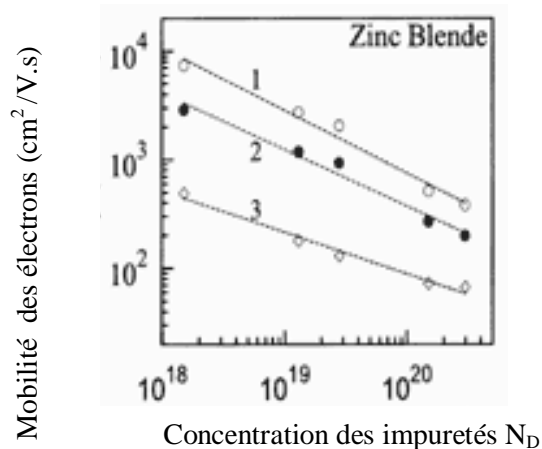


Figure 4.7 [13] : Evolution de la mobilité en fonction de la concentration en impuretés de dopage pour différentes températures 1 :80K ; 2 :150K ; 3 :300K.

La mobilité est plus importante à basses températures, elle décroît quand la concentration des impuretés augmente.

4.6.2 Coefficient de diffusion [2]

La dispersion du vecteur-vitesse par les collisions, donne naissance au phénomène de diffusion. Quand l'énergie des électrons est proche de l'énergie thermique, les collisions les

plus importantes sont soit avec des phonons acoustiques soit avec les impuretés ionisées ; ces chocs sont isotropes. Le coefficient de diffusion suit la loi d'Einstein :

$$D = \frac{kT}{q} \mu_d \quad (4.85)$$

avec μ_d la mobilité différentielle $\frac{dv}{dE}$.

Pour les champs électriques faibles, la mobilité différentielle est proche de la mobilité sécante : $\mu_d = \mu_0$.

Quand l'énergie dépasse 91.2 meV (pour GaN), il y a apparition des émissions optiques polaires qui conduisent à une dispersion anisotrope du vecteur-vitesse, dont la direction parallèle au champ électrique appliqué est la plus favorisée. La diffusion diffère alors selon que l'on considère la direction parallèle ou la direction perpendiculaire au champ électrique.

4.7 Transport en régime non stationnaire [2]

Quand la vitesse et l'énergie, moyennes des électrons ne sont pas stabilisées après l'application d'un échelon de champ électrique par exemple, nous sommes dans le cas du régime non stationnaire. Au cours des transitions dans ce régime ; il peut y avoir l'apparition du phénomène de survitesse ou des phénomènes balistiques, qui conduisent à des vitesses de transport très supérieures aux vitesses stationnaires.

4.7.1 Phénomène de survitesse [2]

Les technologies submicroniques ont permis la fabrication de dispositifs dans lesquels le champ électrique peut croître rapidement jusqu'à atteindre des valeurs très grandes sur des petites distances. Une partie du parcours des électrons, est effectuée en survitesse.

Le champ électrique évolue en échelon ; et quand des électrons sont soumis à cet échelon, ils ne peuvent acquérir instantanément la vitesse stationnaire correspondant à la valeur maximale du champ. L'explication réside dans l'évolution de l'énergie cinétique des électrons : à cause des chocs, l'énergie ne peut pas évoluer très vite comme elle le ferait lors d'un vol balistique.

La mobilité des électrons ne passe des valeurs élevées à des valeurs faibles d'une façon instantanée quand le champ électrique augmente : la fréquence et l'efficacité des chocs suivent l'énergie des électrons. Au début de leur parcours, les électrons ont une mobilité élevée ; et puisque le champ est intense, les électrons vont avoir des vitesses très grandes : c'est **la survitesse** (figure 4.8).

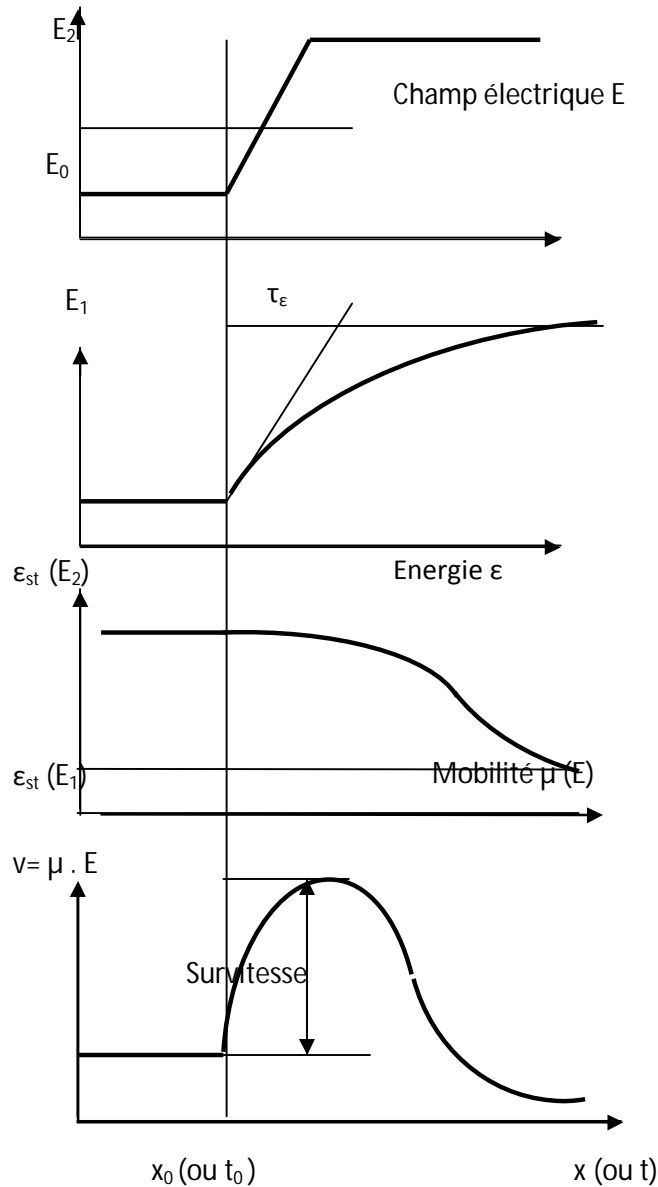


Figure 4.8 [2] : Phénomène de survitesse dans GaN.

En appliquant un échelon de champ électrique à la position x_0 (ou à $t=t_0$), l'énergie des électrons ne croît pas instantanément à partir de la position x_0 (t_0) et leur mobilité conserve des valeurs élevées pendant un certain temps, puis elle décroît au delà de x_0 (t_0).

La vitesse d'entraînement des électrons, présente des valeurs en excès par rapport à l'état stationnaire : c'est le phénomène de survitesse.

Le pic de survitesse peut atteindre 9.10^7 cm/s dans GaN cubique pour un champ de 400kV/cm, sur une durée de 0.05ps.

Le phénomène inverse (sous-vitesse) peut être observé quand les électrons chauds franchissent un échelon décroissant de champ électrique. Les électrons ayant une énergie qui

ne décroît pas instantanément, conservent une mobilité faible et vont être ralentis très rapidement.

4.7.2 Equations de relaxation de l'impulsion et de l'énergie [2] :

L'étude du transport en régime transitoire ne peut pas s'effectuer à base des grandeurs habituelles de l'électrocinétique. La résolution de l'équation de Boltzmann se fait avec certaines approximations et nous permet d'avoir certains paramètres comme les temps de relaxation, de l'impulsion τ_m et de l'énergie τ_E .

L'électron est caractérisé par sa position $\vec{r}(x, y, z)$ et son impulsion $\hbar\vec{k} (\vec{k}(k_x, k_y, k_z))$. La donnée du vecteur d'onde et du diagramme de bandes, permettent de connaître l'énergie E et

$$\text{la vitesse } \vec{v} = \frac{1}{\hbar} \vec{\nabla}_k \varepsilon \quad (4.86)$$

Où $\vec{\nabla}_k$ désigne l'opérateur $\frac{\partial}{\partial k_x}, \frac{\partial}{\partial k_y}, \frac{\partial}{\partial k_z}$. L'action des forces extérieures, se traduit par la

dérivée de l'impulsion :

$$\hbar \frac{d\vec{k}}{dt} = q\vec{E} + q\vec{v} \times \vec{B} \quad (4.87)$$

où E est le champ électrique, et B est le champ magnétique.

L'équation de Boltzmann établit le bilan des flux des particules entrant ou sortant d'un élément de volume de l'espace des phases. La population électronique est désignée par $f(\vec{r}, \vec{k})$ dn est le nombre d'électrons ayant un vecteur de position \vec{r} et un vecteur d'onde \vec{k} compris dans le volume élémentaire d_3r et d_3k , il est donné par la formule :

$$dn = N f(\vec{r}, \vec{k}) d_3r d_3k \quad (4.88)$$

N est le nombre total des particules.

A l'aide de l'équation de répartition, l'équation de Boltzmann devient :

$$\frac{d}{dt} f d_3r d_3k = \underbrace{\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right) d_3r d_3k}_{\text{diffusion}} + \underbrace{\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right) d_3r d_3k}_{\text{Forces extérieures}} + \underbrace{\left(\frac{\partial f}{\partial t} \right) d_3r d_3k}_{\text{collisions}} \quad (4.89)$$

Les trois termes du second membre, désignent les bilans des entrées et des sorties dans le volume élémentaire.

L'équation de Boltzmann permet de déterminer la fonction f qui à son tour, nous donne la possibilité de connaître un certain nombre de paramètres comme des moyennes sur

l'ensemble de la population située en un point donné ; en particulier, l'énergie moyenne en un point r :

$$\varepsilon(\vec{r}) = \int \varepsilon(k) f(k) d_3 k \quad (4.90)$$

La quantité de mouvement moyenne :

$$\bar{p}(r) = \overline{m^* v(r)} = \hbar \int \vec{k} f(k) d_3 k \quad (4.91)$$

L'étude directe de ces grandeurs au cours du temps, peut s'avérer plus simple que la résolution complète de l'équation de Boltzmann.

a) L'équation de relaxation de l'énergie moyenne [2] :

$$\frac{\partial}{\partial t} n\varepsilon + \frac{\partial}{\partial x} (n v_x \varepsilon) = q n E_x v_x - n \frac{\varepsilon - \varepsilon_0}{\tau_\varepsilon(\varepsilon)} \quad (4.92)$$

ε_0 est l'énergie thermique des électrons, $\tau_\varepsilon(\varepsilon)$ est le temps de relaxation de l'énergie moyenne qui est aussi fonction de l'énergie. $\frac{\partial}{\partial x} (n v_x \varepsilon)$ présente le bilan du flux d'énergie transportée par les électrons. Le produit $(q n E_x v_x)$ présente le gain d'énergie dans le champ électrique, par unité de temps. $\frac{\varepsilon - \varepsilon_0}{\tau_\varepsilon \varepsilon}$ est le terme de relaxation.

b) l'équation de relaxation de la quantité de mouvement moyenne [2] :

$$\frac{\partial}{\partial t} n m^* v_x + \frac{\partial}{\partial x} (n m^* v_x^2) = q n E_x - \frac{n m^* v_x}{\tau_m(\varepsilon)} \quad (4.93)$$

$\tau_m(\varepsilon)$ est le temps de relaxation de la quantité de mouvement. $\frac{\partial}{\partial x} (n m^* v_x^2)$ est le bilan du flux de la quantité de mouvement et $(q n E_x)$ est la force appliquée au système.

Dans ces équations, τ_m et τ_ε sont en fonction de l'énergie, et ils sont indépendants du chemin suivi par la population de porteurs pour parvenir à l'énergie moyenne instantanée ε . En effet ; quand un régime stationnaire est atteint avec une valeur ε_{st} , les temps de relaxation doivent vérifier les équations :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial}{\partial t} (n v_x \varepsilon_{st}) = q n E v_x - n \frac{\varepsilon_{st} - \varepsilon_0}{\tau_\varepsilon(\varepsilon_{st})} \end{array} \right. \quad (4.94)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial}{\partial t} (n m^* v_x) = q n E - \frac{n m^* v_x}{\tau_m(\varepsilon)} \end{array} \right. \quad (4.95)$$

Dans le cas d'un matériau homogène et un champ uniforme, τ_m et τ_ε sont donnés par les expressions suivantes :

$$\left\{ \begin{array}{l} \tau_m(\varepsilon_{st}) = \frac{m^* v_x}{q} \end{array} \right. \quad (4.96)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \tau_\varepsilon(\varepsilon_{st}) = \frac{\varepsilon_{st} - \varepsilon_0}{q E_x v_x} \end{array} \right. \quad (4.97)$$

La mobilité en fonction de $\tau_m(\varepsilon)$ et de la masse effective $m^*(\varepsilon)$, est donnée par l'expression :

$$\mu(E) = \frac{q \tau_m(\varepsilon)}{m^*(\varepsilon)} \quad (4.98)$$

Bien que le régime stationnaire pour la quantité de mouvement soit atteint rapidement, la mobilité reste en régime transitoire pendant une durée τ_ε , c'est à dire que l'énergie n'a pas atteint sa valeur stationnaire. C'est le phénomène de survitesse qui montre chaque fois que τ_ε est supérieur à τ_m .

Références :

- [1] Fatima Zohra Othmani, Etude du transport par la méthode de Monte Carlo : application :Silicium, Germanium, $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$, Mémoire de magister, U. de Tlemcen, 2003.
- [2] R.castagné, J.P Duchemin, M.Gloanie, Ch.Rhumelhard, Circuits integrs en Arsenic de Gallium, Physique, technologie et conception, edition Masson, Mars 1989.
- [3] Abdel Hafid Lallam, Simulation des propriétés électriques des composés ternaires par la méthode de Monte Carlo , Mémoire de magister, U. de Tlemcen, 2005.
- [4] Jerome Saint-Martin, Etude par simulation Monte Carlo d'architectures de MOSFET ultracourts a grille multiple sur SOI, These de Doctorat, U.Pris-Sud (2005).
- [5] Wassila Debbal, Simulation des propriétés électriques des composés ternaires par la méthode de Monte Carlo.Application à l'InAlAs, Mémoire de magister, U.de Tlemcen, 2007.
- [6] C. Sayah «Application de la méthode de Monte Carlo aux composés III-V», Mémoire de magister, U. de Tlemcen,(2002).
- [7] A.E.K Hamdoune, B. Bouazza, A. Guen-Bouazza, A. Lallam et N.E. Chabane-Sari, Développement de la méthode de Monte Carlo pour le calcul des interactions et du transport électrique dans les semiconducteurs ternaires, Afrique Science 03(2),(2007)186– 200
- [8] V. W. L. Chin, T. L. Tansley, and T. Osotchan,&J. Appl. Phys. **75**, 7365 (1994).F
- [9] *Pascal CHEVALIER*, Propriétés des matériaux III-V chapitreI B U. de Lille (1999).
- [10] S. Strite and H. Morkoç , GaN, AlN, and InN: A Review, Materials Research Laboratory and Coordinated Science Laboratory, IL 61801, 1992.
- [11] “Optoélectronique”, Cours de Mr A. -HAMDOUNE
- [12] B.E Foutz, S.K O’leary, M.S.Shur and L.F Eastman J.Appl Phys 85, 7727 (1999).
- [13] Kim, J.G, Frenkel A.C., Liu H., Park R.M., Growth by molecular beam epitaxy and electrical characterization of Si-doped zinc blende GaN films deposited on -SiC coated (001) Si substrates, Appl. Phys. Lett. 65(1) (1994), 91-93

Chapitre V :
PRTESENTATION DE LA METHODE DE SIMULATION
DE MONTE CARLO

Chapitre 5 : Présentation de la méthode de simulation de Monte Carlo

5.1 Introduction

La simulation par la méthode de Monte Carlo est aujourd'hui l'une des techniques les plus utilisées pour étudier le fonctionnement physique des composants électroniques, offrant la possibilité de reproduire fidèlement les divers phénomènes microscopiques qui se produisent dans les matériaux semi-conducteurs [1].

La méthode de Monte Carlo permet de réaliser trois objectifs. Premièrement ; elle facilite l'étude des phénomènes de mobilité ou de diffusion dans les matériaux, par la comparaison des résultats obtenus théoriquement avec les données expérimentales. Elle peut nous apporter des éléments utiles et nouveaux sur les mécanismes physiques qui déterminent la dynamique électronique dans un semi-conducteur. Deuxièmement ; elle permet de faire une étude précise des variations de la vitesse de dérive et du coefficient de diffusion en régimes stationnaire et transitoire. Elle peut fournir les données de base nécessaires à la résolution numérique des composants à partir des équations de l'électrocinétique. Troisièmement ; elle permet la simulation directe de certains de ces composants et s'avèrent, en définitive, des méthodes d'approche plus précise, plus fiable et même parfois plus simple que les techniques numériques classiques [2]. Ses qualités se définissent par la rapidité de l'exécution et la souplesse d'emploi dans les diverses applications.

La méthode de Monte Carlo est basée sur un processus de tirage au sort à partir de lois de probabilités calculées. Ces lois sont les probabilités d'interactions subies par les porteurs durant leur mouvement dans le semi-conducteur.

Il y a deux approches possibles pour simuler le comportement des électrons dans un semi-conducteur : Déterminer la fonction de répartition des électrons en résolvant l'équation de Boltzmann ; et suivre le comportement de chaque électron au cours du temps.

5.2 Principe de la méthode

L'idée de base de la méthode consiste à simuler le mouvement dans le temps, un ou plusieurs porteurs dans l'espace des vecteurs d'ondes des points représentatifs de ces porteurs, tenant compte :

a. De l'accélération due aux forces appliquées aux porteurs

$$\frac{\partial \vec{k}}{\partial t} = \frac{q \vec{E}}{\hbar} \quad (5.1)$$

La connaissance de la bande d'énergie permet de calculer l'énergie du porteur, à chaque instant.

$$\varepsilon(\vec{K}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2 m^*} \quad (5.2)$$

b. Des collisions subies par ces porteurs induisant des transitions brutales entre les états. Connaissant la position d'un porteur de charge dans l'espace des vecteurs d'onde \vec{K} , il est possible de la connaître dans l'espace géométrique réel ; et la connaissance de la structure de bande d'énergie $\varepsilon(\vec{K})$ permet de calculer la vitesse des porteurs à chaque instant :

$$\vec{v} = \frac{\partial \varepsilon}{\hbar \partial \vec{k}} \quad (5.3)$$

Par intégration, nous calculons la position des porteurs, au cours du temps.

Il est possible d'accéder à toutes les grandeurs moyennes ; énergie moyenne, vitesse de dérive...Celles-ci peuvent être déduites de deux façons différentes : soit par l'observation d'un grand nombre de particules permettant de calculer les moyennes d'ensemble (cette définition est utile quand les conditions d'étude changent dans le temps), soit par observation d'un seul électron pendant une durée suffisamment grande. La trajectoire de chaque électron sera constituée par une suite de vols libres effectués sous l'influence de la force externe, puis des chocs sur les différents obstacles présentés par le milieu où évolue le porteur.

L'avantage des méthodes de Monte Carlo est de pouvoir obtenir à la fois la durée de vol libre, et les états du porteur après les chocs en utilisant un procédé basé d'une part sur le tirage de nombres aléatoires et d'autre part sur la connaissance des densités de probabilités correspondant aux interactions auxquelles est soumis le porteur.

Un des principaux avantages de ces méthodes est leur souplesse d'utilisation. Une fois le processus élémentaire de simulation est mis au point, les conditions d'utilisation de celui-ci peuvent être variées à l'infini. L'application la plus simple que l'on puisse imaginer est l'étude de la dynamique électronique dans un matériau supposé infini et homogène soumis à des conditions stationnaires, en fonction du temps. La situation peut se compliquer singulièrement quand le matériau est inhomogène, ou lorsque le champ appliqué n'est plus constant dans le temps ni uniforme dans l'espace. Dans le cas où les concepts habituels de bande d'énergie et de collisions instantanées restent valides, la méthode de Monte Carlo montre sa supériorité lorsque les phénomènes se compliquent quelque peu. En effet ; elle permet de tenir compte facilement des non stationnarités spatiales ou temporelles que l'on veut étudier. Cette méthode est actuellement la seule susceptible d'étudier les manifestations

des porteurs chauds quelque soient les régimes de champ appliqué. Elle tient compte de façon complète, des formes de bandes d'énergie même complexes ; et c'est le cas particulier de l'étude des alliages ternaires et de tous les détails de la dynamique microscopique avec des hypothèses simplificatrices réduites au minimum.

En contre partie, la méthode de Monte Carlo est attachée d'erreur statistique. Comme pour tout phénomène statistique, on peut améliorer la précision en augmentant la durée d'observation t . Malheureusement, l'amélioration de l'erreur n'évolue qu'en $1/\sqrt{t}$; et ceci peut être un gêne important quand on étudie des comportements fins : estimation d'une mobilité différentielle négative ou vitesse de pic en fonction de certains paramètres (température ou dopage du matériau, par exemple). Ce problème nécessite un soin particulier en absence d'une relation analytique. Il découle que cette méthode nécessite parfois des moyens de calcul importants.

Une autre propriété caractéristique jouant en défaveur de la méthode de Monte Carlo est que celle-ci fonctionne moins bien en champ faible qu'en champ fort, au moins quand on s'intéresse à la vitesse de dérive. Une bonne estimation de la moyenne exigera une longue intégration, et par conséquent un allongement du temps de calcul.

5.3 Approche et mise en œuvre de la méthode [3]

L'approche de la méthode de Monte Carlo consiste à suivre le comportement de chaque électron dans l'espace réel et dans l'espace des vecteurs d'ondes. Considérons un électron d'énergie $\varepsilon(t)$ et de vecteur d'onde $k(t)$, placé en $r(t)$ ou règne un champ électrique $E(r, t)$. Sous l'action du champ électrique E , les échanges d'énergie et d'impulsion de l'électron avec le réseau cristallin, et la déviation de sa trajectoire par les impuretés, vont modifier son énergie, son vecteur d'onde et sa position. En appliquant les lois de la mécanique et de l'électrodynamique, nous pouvons déterminer théoriquement le comportement de chaque électron dans le temps et dans l'espace des vecteurs d'ondes. Mais, une telle approche, compte tenu de la très grande densité d'atomes dans les cristaux, est irréaliste avec ces moyens de calcul [4]. Afin de rendre le problème plus réaliste :

a)- Nous faisons une étude statistique des échanges d'énergie possibles, entre les électrons, les modes de vibrations du réseau et les impuretés, ce qui nous permet de calculer la probabilité de ces interactions et leur action sur l'énergie et le vecteur d'onde de l'électron. Chaque processus de collision a une densité $s(\vec{k}, \vec{k}')$ qui caractérise la probabilité pour qu'un électron passe de l'état défini par le vecteur d'onde k à un autre état défini par le vecteur d'onde k' , par

unité de temps. La probabilité pour qu'un électron, se trouvant dans l'état k , ait une interaction par unité de temps, est donnée par l'équation (5.4) [5] :

$$\lambda(k(t)) = \int_{\substack{\text{sur tous les états} \\ k' \text{ possibles}}} s(\vec{k}, \vec{k}') dk' \quad (5.4)$$

b)- Nous supposons que ces interactions sont instantanées, les électrons sont alors déplacés en vol libre sous le seul effet du champ électrique, entre deux chocs. La probabilité d'avoir un vol libre de durée Δt , suivi d'un choc, est donnée par l'équation (5.5) [6] :

$$P(\Delta) = 1 - \int_0^{\Delta} \lambda(k(t)) dt \quad (5.5)$$

La procédure adoptée initialement par Kurosawa [7] pour déterminer les temps de libre parcours Δt , est de tirer au sort des nombres aléatoires r à distribution uniforme entre 0 et 1 [8], et de résoudre l'équation intégrale (5.6) :

$$\int_0^{\Delta} \lambda(k(t)) dt = -\ln(r) \quad (5.6)$$

c)- Lorsqu'une interaction a lieu, nous déterminons sa nature par tirage au sort, et nous modifions, en conséquence, l'énergie et le vecteur d'onde de l'électron. Calculée par l'équation de Boltzmann, la répartition des électrons change; nous calculons alors le champ électrique qui en résulte à des intervalles de temps suffisamment petits, pour pouvoir supposer ce champ constant entre deux calculs [4],[9].

Nous considérons un modèle simplifié à trois vallées non paraboliques mais isotropes. Dans les vallées supérieures, nous calculons la masse des électrons par la relation [10] :

$$\alpha = (1 - m^*/m_0) \times \varepsilon \quad (5-7)$$

Où m_0 est la masse de l'électron dans le vide, m^* sa masse effective, ε son énergie et α le coefficient de non parabolicité de la vallée où il se trouve. Cette relation n'est pas exactement celle appliquée dans le cas du modèle complet ; mais elle est suffisante pour décrire le comportement électrique du composé.

5.4 Présentation du logiciel :

Le logiciel de cette méthode permet de remplir deux fonctions essentielles. La première est consacrée au calcul des probabilités à partir des expressions usuelles. La deuxième fonction est destinée à déterminer les grandeurs instantanées définies sur un ensemble d'électrons (l'énergie, la vitesse, la position) par la procédure « Self-Scattering » [2] pour laquelle, les durées de vol libre sont distribuées pour chaque électron. La mise en œuvre a été adoptée initialement par Kurosawa [11], puis améliorée par d'autres auteurs [12]. Elle

est basée sur un processus de tirage au sort à partir de lois de probabilités d'interactions subies par les porteurs durant leur mouvement dans le composé [13].

5.5 Méthode du self scattering

Cette méthode consiste à introduire une interaction fictive supplémentaire dite « Self Scattering λ_{SC} » qui est sans effet sur le mouvement de l'électron. La probabilité λ_{SC} est choisie de manière à ce que la probabilité totale d'interaction $\Gamma = \lambda_{SC} + \sum_i \lambda_i$ soit une constante (figure 5.1). Ceci fournit une expression particulièrement simple pour $p(\Delta t)$:

$$p(\Delta t) = \Gamma e^{-\Gamma \Delta t} \quad (5.8)$$

Si r est un nombre aléatoire à distribution uniforme entre 0 et 1, on aura d'après (5.6) :

$$\Delta t = -\frac{1}{\Gamma} \cdot \text{Lnr} \quad (5.9)$$

La succession des opérations est alors sans changement, mais le Self-Scattering doit maintenant figurer parmi les interactions susceptibles de se produire à la fin du vol libre.

Il faut cependant que Γ soit au moins égale aux plus grandes sommes $\sum_i \lambda_i$ susceptibles d'être atteintes, de telle manière à éviter des valeurs négatives de λ_{SC} .

Etant donné que pour utiliser la relation (5.8), il faut se fixer à l'avance la valeur de Γ ; il est nécessaire de connaître à priori la valeur maximum que prendra la quantité $\sum_i \lambda_i$ dans la simulation envisagée. Une fois la durée de vol libre Δt déterminée, on calcule l'ensemble des probabilités des interactions susceptibles de se produire à l'instant considéré. Comme on a nécessairement par définition :

$$\sum_{i=0}^N \lambda_i(\vec{k}) = \Gamma \quad (5.10)$$

Le tirage d'un nouveau nombre aléatoire r à distribution uniforme entre 0 et 1 permet d'écrire, par le test de l'inégalité :

$$r < \sum_{i=0}^m \lambda_i(\vec{k}) = \lambda_{SC} + \sum_{i=1}^m \lambda_i(\vec{k}) \quad (5.11)$$

Pour toute valeur m , il y a un processus d'interaction choisi qui interviendra. Il apparaît dans ce test que la collision choisie peut être une collision fictive dont la probabilité est λ_{SC} . Si c'est le cas, elle laissera le vecteur d'onde inchangé et le mouvement se poursuivra directement pour le Δt suivant. Dans le cas contraire ; de nouveaux nombres aléatoires

permettent de définir la position du vecteur d'onde, après le choc. L'avantage de cette procédure est le choix de la valeur de Γ de manière à minimiser le nombre de collisions fictives, puisque ces collisions ne jouent aucun rôle sur la trajectoire de l'électron. Il faut signaler que cette première méthode a été utilisée par de nombreux auteurs, pour étudier un grand nombre de matériaux [2].

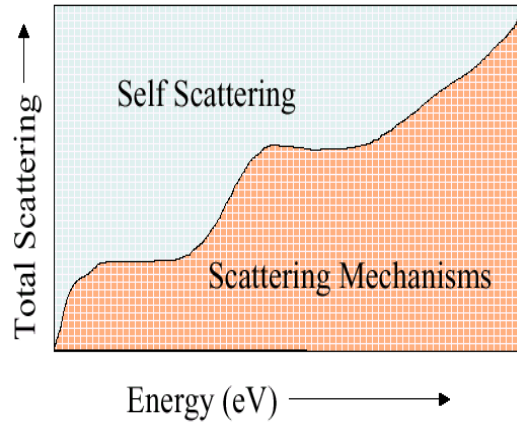


Figure 5.1 : Probabilité totale d'interactions et Self Scattering [14].

5.6 Les différents éléments de la simulation [15]

Nous voulons déterminer la probabilité pour qu'un porteur effectue un vol libre de durée quelconque Δt , sachant qu'il est soumis à un champ électrique \vec{E} et à N processus de collisions de types quelconques. La relation entre le champ et le vecteur d'onde, est donnée par le principe de la dynamique :

$$\frac{\partial \vec{k}}{\partial t} = \frac{q \vec{E}}{\hbar} \quad (5.12)$$

$\Gamma(\vec{K})$ est la probabilité par unité de temps, pour que le porteur ayant le vecteur d'onde \vec{K} , subisse une collision de type quelconque l'amenant à un autre état \vec{K}' . Cette probabilité est donnée par la relation :

$$\Gamma(\vec{k}) = \int d^3 k' \sum_{q=1, \dots, N} S_q(\vec{k}, \vec{k}') \quad (5.13)$$

Supposons qu'à l'instant $t=0$, le porteur est dans l'état décrit par \vec{K} .

La probabilité $P(t)$ pour que le porteur effectue un vol libre de durée supérieure à t , est le produit de deux probabilités statistiquement indépendantes. L'une est la probabilité pour que le porteur effectue un vol libre de durée supérieure à $t - dt$ et t .

$$1 - \Gamma(\bar{k}(t - dt)) dt \quad (5.14)$$

$$\text{Ainsi } p(t) = p(t - dt) \left[1 - \Gamma(\bar{k}(t - dt)) dt \right] \quad (5.15)$$

En faisant tendre dt vers 0 :

$$\frac{dp}{dt} = - \Gamma[\bar{k}(t)] p(t) \quad (5.16)$$

Après intégration, on obtient :

$$p_n(t) = \exp \left\{ - \int_0^t \Gamma(\bar{k}(t')) dt' \right\} \quad (5.17)$$

La probabilité pour que le même électron ait une interaction pendant la même période de temps dt après le temps initial, peut s'écrire :

$$p(t) dt = \Gamma(k(t)) \exp \left\{ - \int_0^t \Gamma(k(t')) dt' \right\} dt \quad (5.18)$$

La résolution de cette équation afin de générer la distribution du temps libre pour ces particules pour une simulation Monte Carlo standard, nous ramène à utiliser la technique de self Scattering.

5.7 Temps de vol libre [16]

Le mouvement des particules est décrit comme étant une succession de vols libres (sous l'action du seul champ électrique), entrecoupée d'interactions instantanées [17].

$\lambda(k(t))\partial t$ présente la probabilité pour qu'un électron ait une interaction entre t et $t+\partial t$. la probabilité $P_f(t)$ pour que l'interaction ne se produise pas au temps t , est donnée par [18] :

$$p_f(t) = \prod_i (1 - \lambda(k(t))\partial t) \quad (5.19)$$

$$\text{En prenant } t = \sum_i \partial t_i \quad (5.20)$$

On a alors :

$$p_f(t) = \exp \left(- \sum_i \lambda(k(t))\partial t_i \right) \quad (5.21)$$

$$\text{Ou bien } p_f(t) = \exp \left(- \int_0^t \lambda(k(t'))\partial t' \right) \quad (5.22)$$

On déduit alors la probabilité pour que l'électron ait un vol libre pendant Δt :

$$p(\Delta t) = \int_0^{\Delta t} \lambda(k(t)) \cdot \exp\left[-\int_0^t \lambda(k(t')) \partial t'\right] \partial t \quad (5.23)$$

$$p(\Delta t) = 1 - \exp\left[-\int_0^{\Delta t} \lambda(k(t)) \partial t\right] \quad (5.24)$$

La relation (5.24) nous donne les durées de vol libre qui seront effectivement suivies d'un choc. La procédure adoptée initialement par Kurosawa pour déterminer les temps de libre parcours est de tirer des nombres r à distribution uniforme entre 0 et 1 et de résoudre l'équation intégrale suivante :

$$\int_0^{\Delta t} \lambda(k(t)) \partial t = -Lnr \quad (5.25)$$

Dans le cas général, l'expression (5.24) est assez complexe, et l'équation (5.25) n'est pas intégrable analytiquement. Pour simplifier l'expression (5.24), Rees a suggéré d'ajouter à l'ensemble des mécanismes de collisions réelles, le processus du Self Scattering [2].

5.8 Mouvement des électrons

Durant son vol libre, l'électron se déplace dans l'espace réel et l'espace des vecteurs d'onde, sous l'action d'un champ électrique constant E (figures 5.2 et 5.3). L'évolution de son vecteur d'onde, suivant l'axe des x , est donnée par l'équation fondamentale de la dynamique :

$$k(t) = k(0) - \frac{e.E}{\hbar} . t \quad (5.26)$$

En notant m^* sa masse effective, et α le coefficient de non parabolicité de la vallée dans laquelle il se trouve ; l'énergie de l'électron est liée à son vecteur d'onde par la relation :

$$\frac{\hbar^2 . k^2(t)}{2m^*} = \varepsilon(t) . (1 + \alpha . \varepsilon(t)) \quad (5.27)$$

D'où l'on tire son énergie :

$$\varepsilon(t) = \frac{1}{2\alpha} \left[\sqrt{1 + \frac{2\alpha . \hbar^2 . k^2(t)}{m^*}} - 1 \right] \quad (5.28)$$

La vitesse de l'électron est donc donnée par l'expression :

$$v(t) = \frac{1}{\hbar} \cdot \frac{\partial \varepsilon(t)}{\partial k} = \frac{\hbar . k(t)}{m^* (1 + 2\alpha . \varepsilon(t))} \quad (5.29)$$

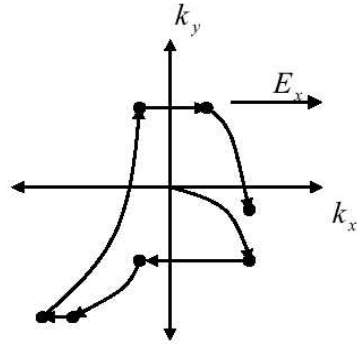


Figure 5.2 : Mouvement d'un électron dans l'espace des vecteurs d'onde [19].

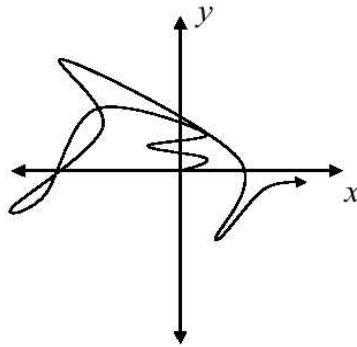


Figure 5.3 : Mouvement d'un électron dans l'espace réel [19].

5.9 Choix des angles de déviation [18]

Quand une interaction est choisie, elle est supposée instantanée ; et son effet provoque une discontinuité dans l'évolution de l'état de l'électron. Cet effet se manifeste à la fois par un éventuel échange d'énergie, et par un brusque changement d'orientation de la vitesse de l'électron. Il se traduit dans l'espace des moments, par une variation instantanée du vecteur d'onde, en module et en direction.

Tout échange éventuel d'énergie au cours de l'interaction, se traduit donc au niveau du vecteur d'onde par une variation brutale de son module qui ne dépend que des énergies initiale ε et finale ε' .

C'est un changement d'orientation du vecteur d'onde (figure 5.4) qui décrit la déviation subie par l'électron. Le vecteur d'onde \vec{k}' est repéré par rapport au vecteur d'onde initial \vec{k} , par un angle de déviation β .

L'angle de déviation du vecteur d'onde est déterminé par tirage au sort, suivant une loi de probabilité caractéristique de l'interaction [19]. Pour cela, on tire deux nombres aléatoires r_1 et r_2 suivant des distributions dépendant du type de l'interaction qui vient d'être choisie, en se

plaçant dans un repère lié au vecteur d'onde \vec{k} , avant la collision (figure 5.5). Ces deux nombres sont tels que :

$$\begin{cases} \varphi = 2\pi r_1 \\ \cos\beta = 1 - 2r_2 \end{cases} \quad (5.30)$$

$$\cos\beta = 1 - 2r_2 \quad (5.31)$$

Il arrive pour certaines interactions, que la détermination de l'angle β en fonction du réel r , ne soit pas immédiate. Les méthodes utilisées alors, font appel à des techniques d'analyse numérique et sont développées en annexe B.

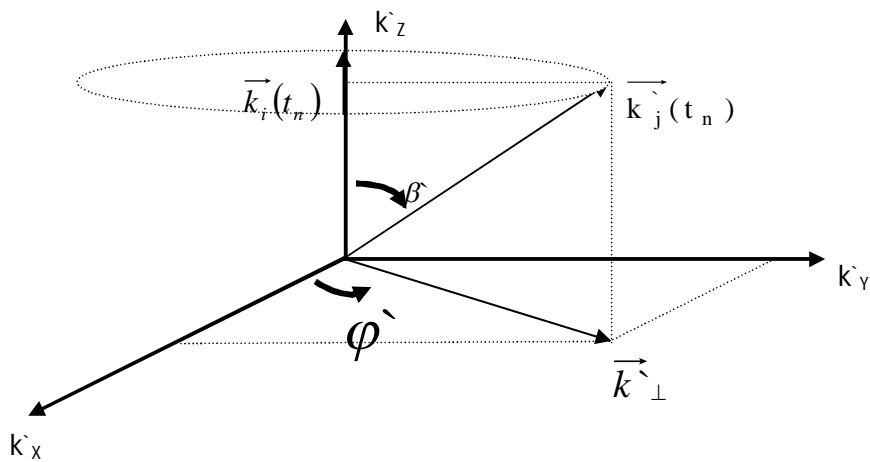


Figure 5.4 : Orientation du vecteur d'onde [16].

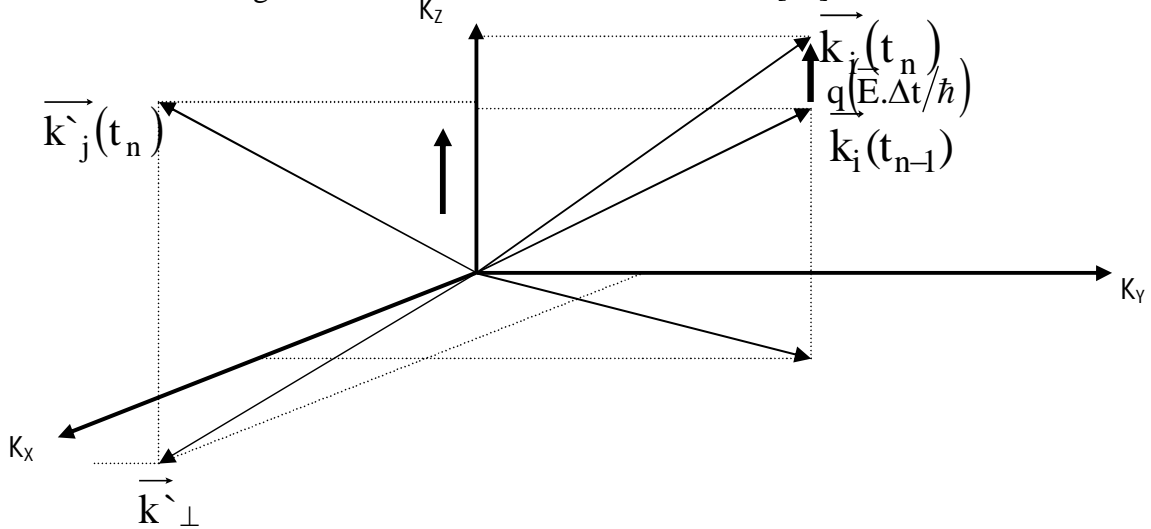


Figure 5.5: Angles de déviation [16].

5.10 Procédure du choix d'interaction [20]

Plus récemment, cette méthode a été utilisée en champ statique et variable, en particulier pour tenir compte de la nouvelle énergie entre deux collisions successives. A chaque instant $t_n = n\delta t$, la probabilité $p[\vec{k}(t_n)]$ pour que le porteur subisse une collision, sera

connue et pourra être utilisée pour déterminer par tirage au sort, si une collision a effectivement eu lieu ou non à la fin du δt considéré. Dans ce but ; nous comparons la quantité $p[\vec{k}(t_n)] \delta t$ à un nombre r tiré au hasard, dans une distribution uniforme entre 0 et 1. Ce nombre r sert aussi au choix de l'interaction qui aura effectivement lieu dans le cas où le test est positif (figure 5.6).

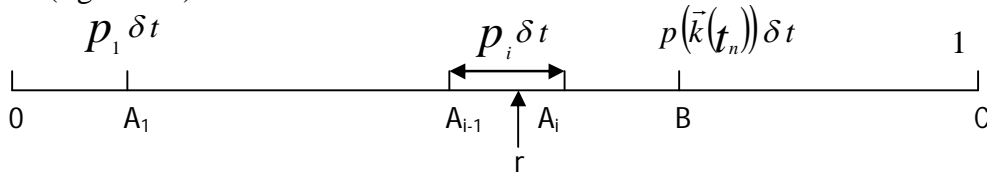


Figure 5.6 : Le schéma indique la procédure de choix de l'interaction. Quand r se situe entre les points A_{i-1} et A_i , le $i^{\text{ème}}$ type d'interaction a lieu. Le segment BC représente la probabilité qu'il ne se passe rien après le pas δt .

Dans le cas où une collision a effectivement lieu, la procédure de choix du vecteur d'onde après choc est en tout point, identique à celle décrite précédemment. Le porteur continue ensuite son parcours pour le δt suivant.

La première constatation est que les libres parcours vécus par le porteur sont nécessairement constitués d'un nombre aléatoire de pas δt . Plus δt est petit, meilleure est la valeur approchée de la durée de parcours. Il en résulte que δt doit être beaucoup plus petit que le plus court des libres parcours. Cette condition garantit également que la quantité $p[\vec{k}(t_n)] \delta t$ ne peut jamais être plus grande que 1. De plus, le tirage de r se fait selon une distribution uniforme ; le fait de tirer l'interaction de rang i ne dépend pas de l'ordre dans lequel ces interactions sont effectuées, le résultat de test ne dépend que de la largeur $p_i(\vec{k}) \delta t$ du segment correspondant, soit en pratique de l'énergie du porteur au moment considéré.

5.11 Génération des nombres aléatoires

La méthode de Monte Carlo est basée sur la génération de nombres aléatoires qui suivent une loi uniforme dans l'intervalle $[0,1]$ où p et q sont des constantes appropriés :

$$r_i = pr_{i-1} \pmod{q} \quad (5.32)$$

Le premier élément de cette suite est choisi par l'utilisateur, et les autres nombres sont donnés par un algorithme mathématique.

5.11.1 Génération des nombres aléatoires, avec une loi de probabilité

Les nombres aléatoires x suivant une loi de probabilité $f(x)$ dans l'intervalle $[a,b]$, peuvent être obtenus à partir des nombres aléatoires r distribués dans l'intervalle $[0,1]$, par plusieurs méthodes [20].

5.11.1.1 Méthode directe [19].

Si $f(x)$ est normalisée pour $x \in [a, b]$:

$$r = F(x_r) = \int_a^{x_r} f(x) dx$$

(5.33)

Si $f(x)$ n'est pas normalisée, alors :

$$r = \frac{\int_a^{x_r} f(x) dx}{\int_a^b f(x) dx} \quad (5.34)$$

Cette méthode permet d'avoir un nombre aléatoire x_r tel que $a < x_r < b$, et qui est donné par :

$$x_r = a + (b-a)r \quad (5.35)$$

Parfois on ne peut pas utiliser cette méthode, car les intégrales précédentes sont difficiles à calculer par la méthode analytique.

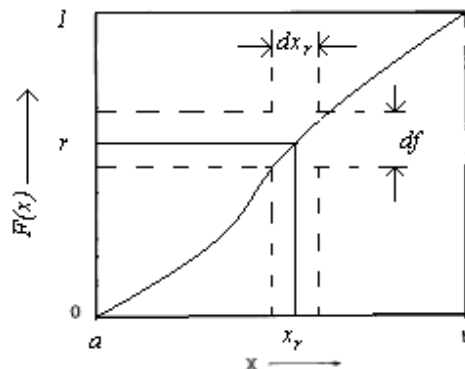


Figure 5.7 : Technique directe : génération de la variable aléatoire x_r avec une fonction de probabilité $f(x) = dF(x)/dx$ [20]

5.11.1.2 Méthode du rejet [19].

Soient C un nombre positif tel que $C \geq f(x)$ pour $x \in [a, b]$, r_1 et r_1' deux nombres aléatoires suivant une loi uniforme sur $[0,1]$; on a alors :

$$x_1 = a + (b-a)r_1 \text{ et } f_1 = r_1' C \quad (5.36)$$

Où x_1 et f_1 sont des nombres aléatoires suivant respectivement une loi uniforme sur $[a, b]$ et $[0, C]$

Si $f_1 \leq f(x_1)$, alors $x = x_1$ (5.37)

Dans le cas contraire, on prend une nouvelle paire r_2 et r_2' ; et les itérations sont poursuivies jusqu'à avoir l'équation $f_i \leq f(x_i)$.

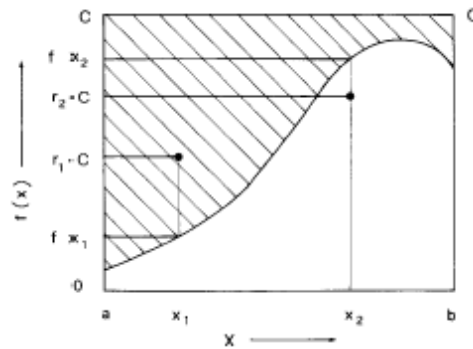


Figure 5.8 : Technique de rejet, génération de la variable aléatoire x_r , avec une fonction de probabilité $f(x)$ [20].

5.11.1.3 Méthode combinée [19]

Soit x_1 un nombre aléatoire généré par la méthode directe de loi de probabilité $g(x)$ et soit K une constante telle que $K g(x) \geq f(x)$ pour $x \in [a, b]$ et r_1 un nombre aléatoire $\in [0, 1]$; x_1 n'est pas rejeté si $r_1 \cdot K \cdot g(x_1) \geq f(x_1)$

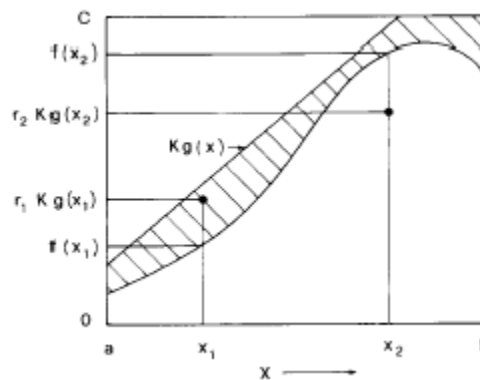


Figure 5.9 : Technique combinée, génération de la variable aléatoire x_r avec une fonction de probabilité $f(x)$ [20].

5.12 Etapes de calcul [16]

Pour permettre une meilleure compréhension de la méthode de Monte Carlo utilisée, nous présentons son organigramme sur la figure 5.6.

Le traitement du problème comporte deux étapes, pour chaque porteur :

1. Une étape de vol libre entre l'instant t et $t+\Delta t$, pendant laquelle l'état du porteur est donné par les lois de la dynamique, compte tenu de son état à l'instant t . Pour le porteur p , on connaît donc la position du vecteur d'onde $\vec{k}_p(t)$, sa position \vec{r}_p à l'instant t et son énergie ε qui est fonction de la position du vecteur d'onde [20] :

$$\varepsilon_p(t) = \varepsilon(\vec{k}_p(t)) \quad (5.38)$$

On effectue un vol libre de durée Δt , et l'on a :

$$\left\{ \begin{array}{l} \vec{k}_p(t + \Delta t) = \vec{k}_p(t) + \frac{e \cdot \vec{E}}{\hbar} \Delta t \end{array} \right. \quad (5.39)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \vec{r}_p(t + \Delta t) = \vec{r}_p(t) + \int_t^{t+\Delta t} \vec{v}_p(t') dt' \end{array} \right. \quad (5.40)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \varepsilon_p(t + \Delta t) = \varepsilon(\vec{k}_p(t + \Delta t)) \end{array} \right. \quad (5.41)$$

2. La deuxième étape de calcul consiste à rechercher si le porteur a subi ou non une collision :

S'il y a eu collision (recherche de l'interaction pendant l'intervalle de temps Δt par tirage au sort d'un nombre aléatoire), nous calculons son nouvel état.

S'il n'y a pas eu d'interaction, l'état du porteur n'est pas modifié.

- S'il y a eu interaction, on place l'interaction précisément à l'instant $t+\Delta t$ et on cherche le nouveau vecteur d'onde \vec{k}_p^{\prime} après le choc, par tirage au sort. Son état est maintenant défini

par :

$$\left\{ \begin{array}{l} \vec{k}_p^{\prime}(t + \Delta t) \end{array} \right. \quad (5.42)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \varepsilon_p^{\prime}(t + \Delta t) = \varepsilon(\vec{k}_p^{\prime}(t + \Delta t)) \end{array} \right. \quad (5.43)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \vec{r}_p^{\prime}(t + \Delta t) = \vec{r}_p(t + \Delta t) \end{array} \right. \quad (5.44)$$

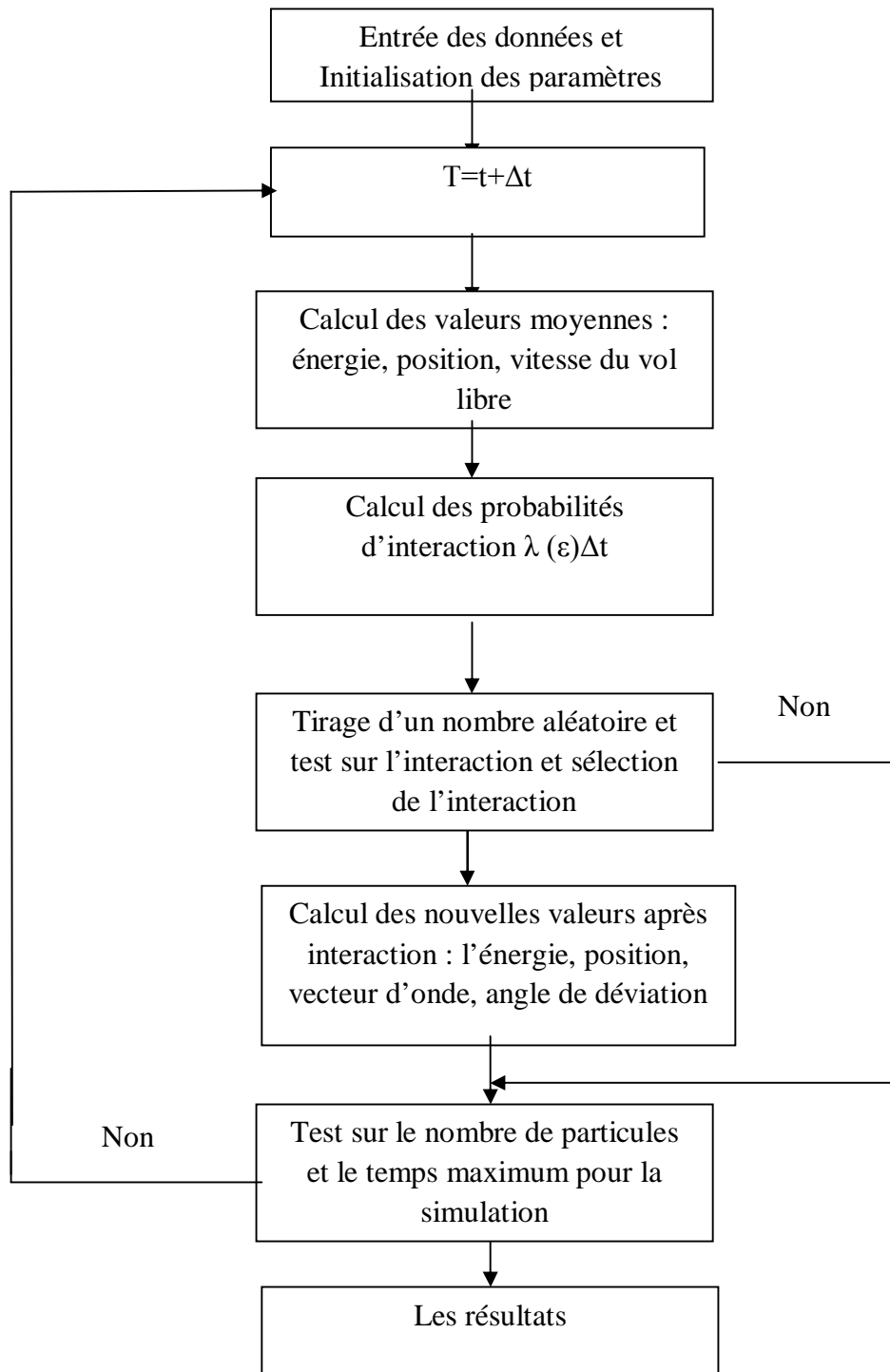


Figure 5.10 : Organigramme de la méthode de Monte Carlo [14].

5.13 Description du logiciel [14]

Dans notre thèse, nous utilisons un programme écrit en langage Fortran 90 MSDEV, afin de simuler 20000 électrons.

Ce logiciel permet de remplir deux fonctions essentielles. La première est consacrée au calcul des probabilités à partir des expressions usuelles, en considérant dans notre cas, un modèle à trois vallées (Γ , L, X), isotropes mais non paraboliques. Les interactions prises en compte sont dues aux phonons acoustiques, aux phonons optiques polaires intervallées et aux impuretés. La deuxième fonction est destinée à déterminer les grandeurs instantanées définies sur un ensemble d'électrons (l'énergie, la vitesse, la position) par la procédure « Self Scattering » pour laquelle les durées de vol libre sont distribuées pour chaque électron.

Les résultats obtenus sont fortement dépendants de nombreux paramètres qui caractérisent le matériau et qui, malheureusement, sont parfois très mal connus.

Le développement au niveau software, a permis de rendre notre programme plus convivial et plus simple. La procédure générale d'exécution de ce logiciel est composée de trois étapes essentielles qui peuvent être résumées comme suit:

1. Lecture du fichier de données concernant les paramètres du matériau utilisé, tels que les énergies du gap, les masses effectives, les potentiels de déformation, les coefficients de non parabolicité, la vitesse du son, la concentration des impuretés, la température du réseau, les champs électrique appliqués, etc....., dans un fichier.txt (Annexe C).
2. Exécution du logiciel.
3. Fourniture des fichiers de sorties : les valeurs des probabilités d'interaction, les vitesses dans les différentes vallées, les énergies...

Références

- [1] A.Negol, A.Guyot, J.Zimmermann, A dedicated circuit for changed particles simulation using the Monte Carlo, Proceeding of IEEE International conference on application specific systems, architectures and processors (AASAP 97), IEEE, 1997.
- [2] J. Zimmermann, étude par la méthode de Monte Carlo des phénomènes de transport électronique dans le Silicium de type N en régimes stationnaire et non stationnaire. Application à la simulation des composants submicroniques, Thèse de doctorat d'état, U.de Lille 1,1980.
- [3] A.E.K Hamdoune, B. Bouazza, A. Guen-Bouazza, A. Lallam et N.E. Chabane-Sari, Développement de la méthode de Monte Carlo pour le calcul des interactions et du transport électrique dans les semiconducteurs ternaires, Afrique Science 03(2), (2007), 186 - 200
- [4] J.L.Thobel, simulation Monte Carlo du transport électronique et des phénomènes de diffusion dans les systèmes à base de semi-conducteurs III-V, Thèse d'habilitation à diriger des recherches en science physique, U de Lille 1, 2000.
- [5] Jérôme Saint-Martin, "Etude par simulation Monte Carlo d'architectures de MOSFET ultracourts a grille multiple sur SOI", Thèse de doctorat, U.Pris-Sud (2005).
- [6] S. Galden "Etude du transistor bipolaire a double heterojonction Si/SiGe/Si par la simulation Monte Carlo", These de doctorat, U. Paris sud (1992).
- [7] P. J. Price, IBM Journal of Research and Development, Vol 17 (1973) 39
- [8] O. Mouton, J. L. Thobel, and R. Fauquemberg "Monte Carlo simulation of high-field electron transport in GaAs using an analytical band structure model", J. Appl.Phys., 74 (10) (1993).
- [9] W. Fawcett, A. D. Roardman and S. Swain, Journal of Physics and Chemistry of solids, Vol 31 (1970)
- [10] A. F. M. Anwar, Wu. Shangli and T. Richard,"Temperature dependent transport properties in GaN, Al_xGa_{1-x}N, and In_xGa_{1-x}N semiconductors", IEEE Transactions on Electron Devices, Vol.48, N°3 (2001) 567-572.
- [11] T. Kurosawa, Journal of the physical society of Japan, supplement 21 (1966) 424
- [12] P. J. Price, IBM Journal of Research and Development, Vol 17 (1973) 39
- [13] O. Mouton, J. L. Thobel, and R. Fauquemberg "Monte Carlo simulation of high-field electron transport in GaAs using an analytical band structure model", J. Appl.Phys., 74 (10) (1993)

- [14] Josan harris Dragica Vasileska, « Monte Carlo simulation of GaAs devices using high generality object-oriented code and encapsulated scattering tables » department of electrical engineering , Arizona state university. Tempe, AZ85287-5706 USA.
- [15] Wassila Debbal, , Simulation des propriétés électriques des composés ternaires par la méthode de Monte Carlo. Application à l'InAlAs, Mémoire de magister U. de Tlemcen, 2007.
- [16] Sayah Choukria, Application de la méthode de Monte Carlo aux composés III-V, Mémoire de magister U. de Tlemcen, 2002.
- [17] S.Galden, étude du transistor dipolaire à double hétérojonction Si/SiGe/Si par simulation Monte Carlo, Thèse de doctorat, U. de Paris sud, 1992.
- [18] O.Mouton, J.L Thobel, and R. Fauquemberg, “Monte Carlo simulation of high-field electron transport in GaAs using an analytical band structure model “J.Apl.Phys. 74, (10), 1993.
- [19] P.Arifin, E.M Glodys, T.L. Tansley, Electron mobility in low temperature grown gallium arsenide, semiconductor science and technology Laboratories, physics Department, Macqarie University, NSW 2109, Australia, 1995.
- [20] Abdel Hafid Lallam, Simulation des propriétés électriques des composés ternaires par la méthode de Monte Carlo, Mémoire de magister U. de Tlemcen, 2005.

Chapitre VI :
Résultats de la simulation Monte Carlo sur le transport
électrique dans les composés ternaires AlGaN et InGaN

Chapitre 6 : Résultats de la simulation Monte Carlo sur le transport électrique dans les composés ternaires AlGaN et InGaN

6.1 Introduction :

Pour simuler le phénomène de transport électrique dans les semi-conducteurs, on utilise des méthodes numériques, et le plus fréquemment celle de Monte Carlo écrite en langage Fortran. Ce langage n'est pas nécessairement le meilleur en programmation scientifique, mais il est certainement le plus répandu : les programmes et sous-programmes existants et relatifs à cette méthode, sont en Fortran.

Les alliages ternaires AlGaN et InGaN font, à l'heure actuelle, l'objet de plusieurs investigations à cause de leurs avantages très intéressants dans l'électronique et l'optoélectronique. La structure de bande des trois nitrides, GaN, AlN, InN et leurs alliages, peut être classiquement décrite par le modèle de qui considère trois vallées Γ , L et X quasi paraboliques, et qui est suffisant pour décrire le comportement électrique des composés.

Pour calculer le transport électrique dans ces ternaires, nous utilisons la méthode de simulation de Monte Carlo en tenant compte de tous les mécanismes de dispersions dans les alliages.

Nous allons examiner les deux régimes, permanent et transitoire :

- Dans le régime stationnaire, nous calculons les différentes interactions, l'énergie en fonction du champ électrique appliqué ainsi que la vitesse en fonction du champ électrique pour plusieurs températures et pour plusieurs concentrations d'électrons.
- Dans le régime transitoire, nous étudions l'évolution de la vitesse en fonction du temps pour plusieurs champs électriques.

Lorsque les électrons sont portés à une température T , ils sont soumis à l'effet de l'agitation thermique et ils sont animés d'un mouvement brownien dont la vitesse moyenne est nulle. Sous l'effet d'un champ électrique, les électrons sont accélérés. Leur énergie augmente et ils peuvent passer aux niveaux supérieurs, dans la bande de conduction. Cependant, les collisions inélastiques vont faire diminuer cette énergie et leur modifier la direction de propagation. En effet ces collisions vont ralentir leur mouvement parallèle au champ électrique.

6.2 Résultats de la simulation Monte Carlo

Le régime stationnaire est atteint quand il y a un équilibre entre l'accélération fournie par le champ électrique appliqué, et le freinage dû aux collisions. Dans ce régime ; la vitesse moyenne a une composante non nulle dans la direction du champ électrique : c'est «la vitesse

de dérive». L'énergie cinétique globale a deux composantes : la première est liée à l'effet de l'agitation thermique, et la deuxième est due à l'effet du champ électrique appliqué. Ces composantes dépendent des collisions. Nous allons calculer dans l'ordre :

- Les probabilités des interactions élastiques, piézoélectriques et acoustiques ; elles seront représentées dans les figures 6.1 à 6.18.
- Les probabilités des interactions inélastiques, intervallées et intravallées (d'émission comme d'absorption) ; elles seront représentées dans les figures 6.19 à 6.34
- Les probabilités des interactions optiques polaires ; seront illustrées dans les figures 6.35 à 6.43.
- Les vitesses des électrons en fonction du champ électrique appliqué, pour différentes températures seront données dans les figures 6.44 à 6.63.
- Les vitesses des électrons en fonction du temps pour différents champs électriques appliqués (régime transitoire) seront présentées par les figures 6.64 à 6.72.

Toutes ces grandeurs seront calculées dans les alliages $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ et $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$, pour quelques valeurs de la fraction de mole x comprise entre 0 et 1.

6.2.1 Interactions élastiques

Ces interactions n'influent pas de façon essentielle sur le comportement de l'électron du fait qu'il n'est pas dévié de sa trajectoire. Elles sont néanmoins introduites pour obtenir une description aussi quantitative que possible, de la dynamique électronique.

6.2.1.1 Interactions piézoélectriques

Ces interactions dans les alliages $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ et $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ pour $x=0, 0.2, 0.5, 0.8$ et 1 , en fonction de l'énergie de l'électron, dans les trois vallées Γ , X et L , sont illustrées respectivement par les figures : 6.1 à 6.5 pour le premier alliage et 6.6 à 6.9 pour le deuxième.

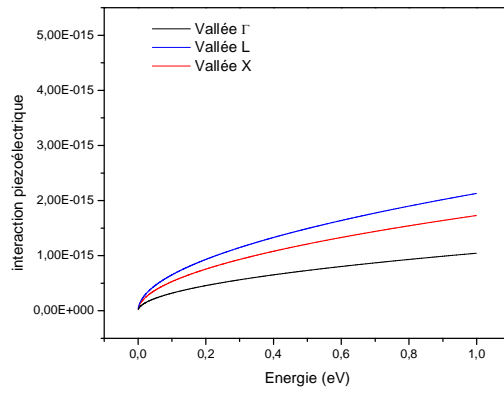


Figure 6.1 : Interactions piézoélectriques dans GaN.

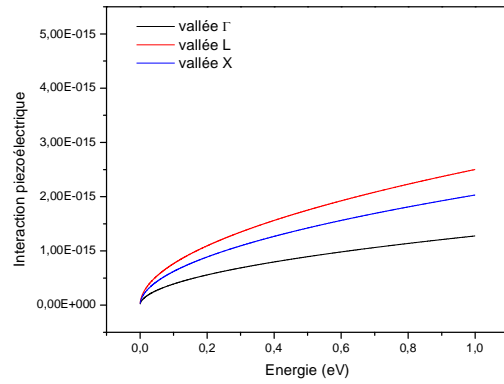


Figure 6.2 : Interactions piézoélectriques dans Al_{0.2}Ga_{0.8}N.

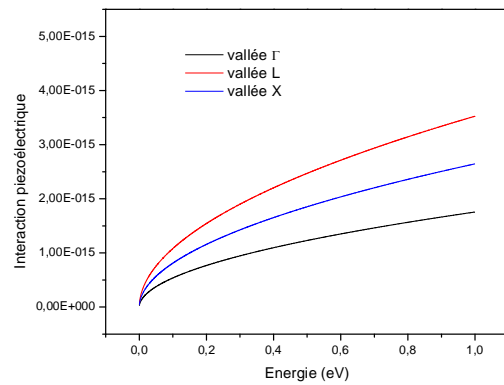


Figure 6.3 : Interactions piézoélectriques dans Al_{0.5}Ga_{0.5}N.

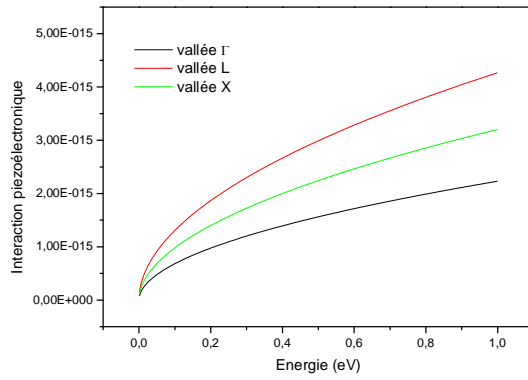


Figure 6.4 : Interactions piézoélectriques $\text{Al}_{0.8}\text{Ga}_{0.2}\text{N}$.

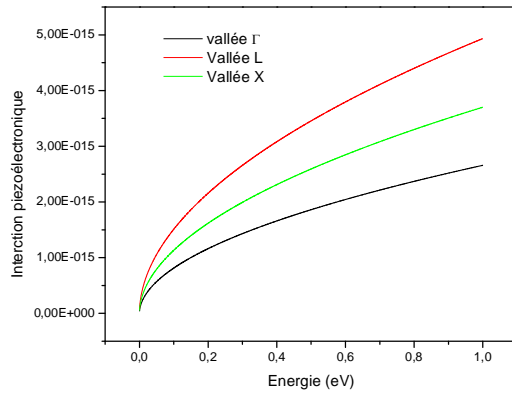


Figure 6.5 : Interactions piézoélectriques dans AlN.

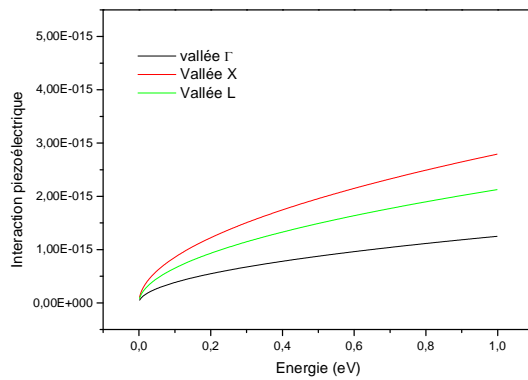


Figure 6.6 : Interactions piézoélectriques dans $\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}$.

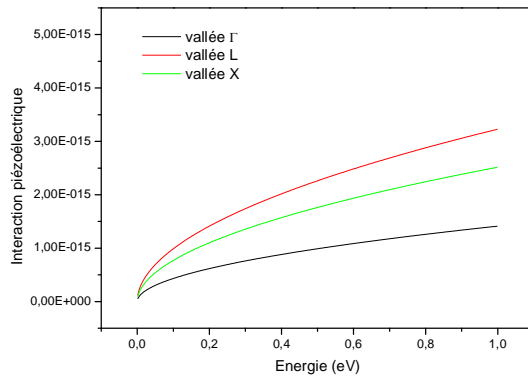


Figure 6.7 : Interactions piézoélectriques dans $\text{In}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{N}$.

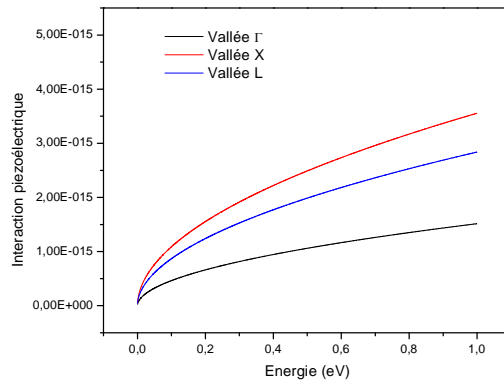


Figure 6.8 : Interactions piézoélectriques dans $\text{In}_{0.8}\text{Ga}_{0.2}\text{N}$.

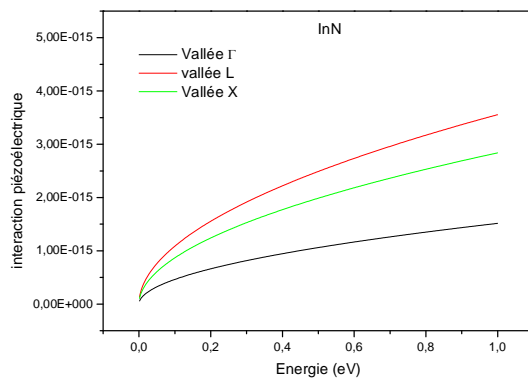


Figure 6.9 : Interactions piézoélectriques dans InN .

Dans les deux alliages $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ et $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$, ces interactions augmentent avec l'augmentation de la fraction molaire de l'aluminium et de l'indium respectivement. En effet ; ces interactions dépendent peu de l'énergie, cependant, ils dépendent beaucoup du coefficient

piézoélectrique (Tableau 1.10). Ce coefficient est plus important dans le cas de l'AlN, puis InN et enfin GaN, ce qui explique l'augmentation des probabilités de ces interactions en ajoutant Al ou In, et le fait que ces interactions sont plus importantes dans l'alliage AlGaN par rapport à InGaN.

Ces interactions dans les deux matériaux, augmentent légèrement dans les vallées supérieures, à cause de l'augmentation de la masse effective des électrons dans ces vallées, mais elles restent très faibles (de l'ordre de 10^{-15}) parce que les alliages que nous étudions sont dans la phase cubique.

6.2.1.2 Interactions acoustiques

Pour les mêmes fractions de mole x dans $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ et $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$; nous calculons les probabilités d'interactions acoustiques en fonction de l'énergie, dans les trois vallées. Les résultats sont illustrés par les figures 6.10 à 6.14, pour AlGaN et 6.15 à 6.18 pour InGaN.

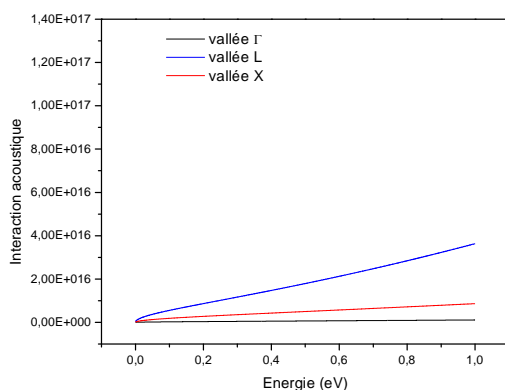


Figure 6.10 : Interactions acoustiques GaN.

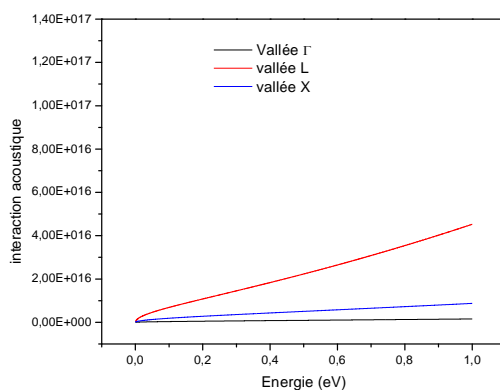


Figure 6.11 : Interactions acoustiques dans $\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}$.

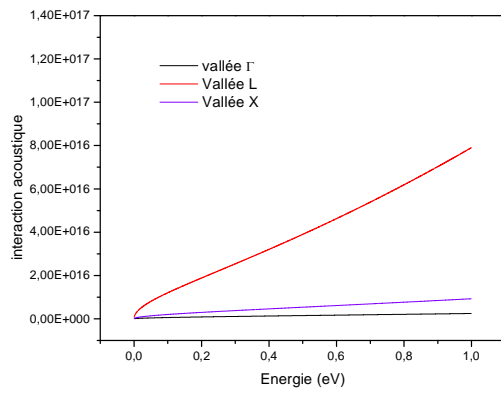


Figure 6.12 : Interactions acoustiques dans $\text{Al}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{N}$.

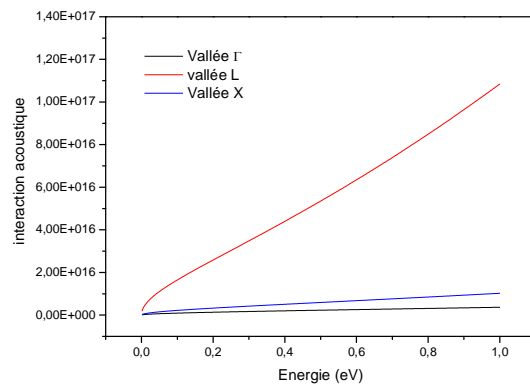


Figure 6.13 : Interactions acoustiques dans $\text{Al}_{0.8}\text{Ga}_{0.2}\text{N}$.

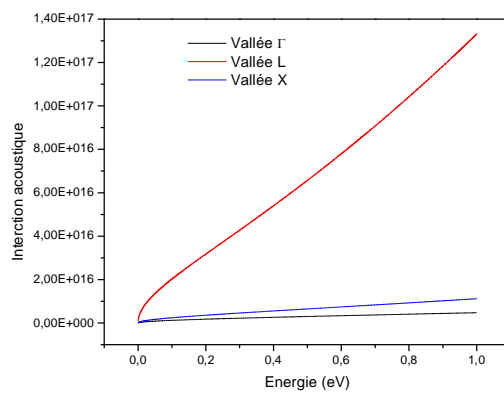


Figure 6.14 : Interactions acoustiques dans AlN .

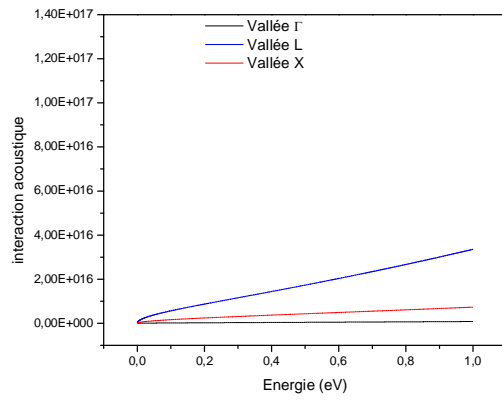


Figure 6.15 : Interactions acoustiques dans $\text{In}_{0,2}\text{Ga}_{0,8}\text{N}$.

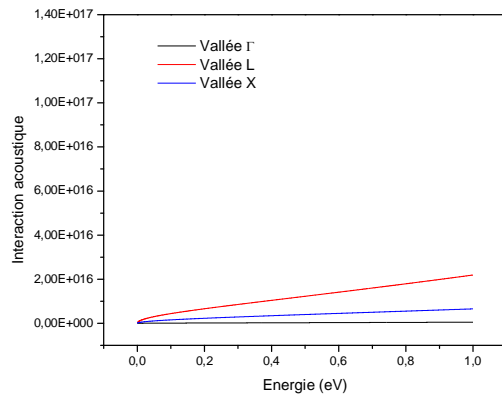


Figure 6.16 : Interactions acoustiques dans $\text{In}_{0,5}\text{Ga}_{0,5}\text{N}$.

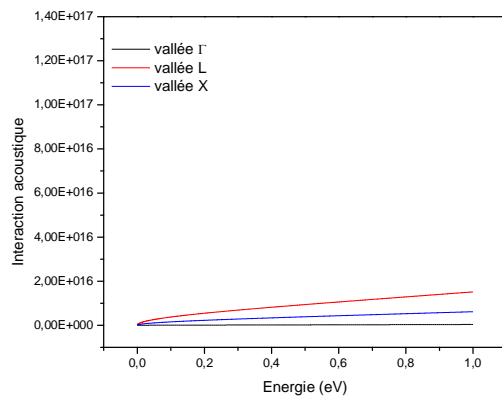


Figure 6.17 : Interactions acoustiques dans $\text{In}_{0,8}\text{Ga}_{0,2}\text{N}$.

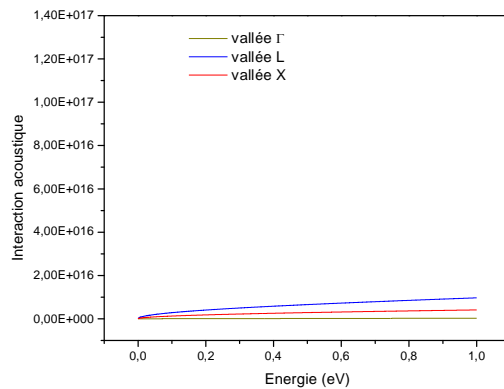


Figure 6.18 : Interactions acoustiques dans InN.

Ces interactions sont les plus dominantes parmi les interactions élastiques et elles sont provoquées essentiellement par les effets du dopage en électrons. Dans la vallée Γ , ce type d'interactions est presque inexistant. Dans la vallée X, la probabilité augmente peu ; et dans la vallée L, elle augmente considérablement avec l'énergie.

Pour des températures ou des champs électriques très élevés ; l'interaction acoustique devient prédominante, l'énergie de l'électron est plus importante que celle d'un phonon optique. L'électron a ainsi tendance à transmettre au réseau une partie de l'énergie que lui a fournie le champ électrique.

Dans AlGaN, ces interactions, qui sont proportionnelle au carré de l'énergie, d'une part, augmentent avec la fraction molaire Al, puisque les énergies de gap et des autres vallées augmentent aussi. D'autre part, l'écart entre les probabilités des interactions dans les vallées latérales L et X augmente avec l'augmentation de la fraction molaire de l'Al, parce que l'énergie E_{LX} augmente en ajoutant l'Al, tandis que l'écart entre les probabilités des interactions dans les vallées latérales Γ et X diminue parce que l'écart entre ces deux vallées diminue en ajoutant l'Al (il est de 1.19 eV pour GaN et 0.83 eV pour AlN).

Dans InGaN ; l'énergie diminue quand la fraction de l'Indium augmente, ce qui induit à une réduction de l'intensité de ces interactions et l'écart d'énergie E_{LX} diminue en ajoutant l'In ce qui mène à une diminution de l'écart entre les probabilités des interactions dans les vallées latérales L et X. Par ailleurs, l'écart entre la vallée Γ et la vallée X augmente ce qui explique l'augmentation de l'écart entre probabilités des interactions dans ces vallées.

6.2.2 Interactions inélastiques

6.2.2.1 Interactions intervalles d'absorption et d'émission

Ces interactions sont dues essentiellement aux transitions intervalles qui permettent le transfert des porteurs, d'une vallée à une autre vallée équivalente ou non équivalente. Elles sont accompagnées d'absorption ou d'émission d'un phonon dont la valeur dépend de l'écart d'énergie entre la vallée de départ et la vallée d'arrivée. Une interaction intervalle ne peut avoir lieu que si l'énergie après absorption ou émission du phonon, est supérieure à l'énergie du fond de la vallée d'accueil (les énergies étant repérées par rapport au bas de Γ). Sur les figures 6.19 à 6.23 pour AlGaN et les figures 6.24 à 6.27 pour InGaN, nous représentons toutes les transitions possibles entre les vallées Γ -L, Γ -X, L-X, X-L, L- Γ et X- Γ (absorptions et émissions).

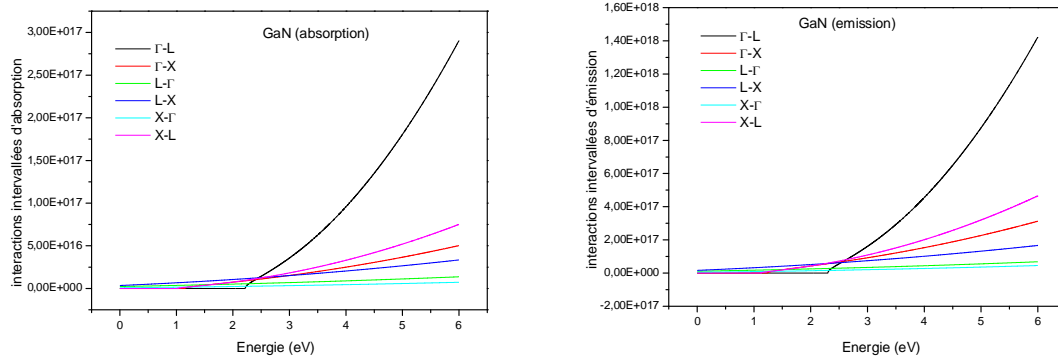


Figure 6.19 : Interactions intervalles dans GaN.

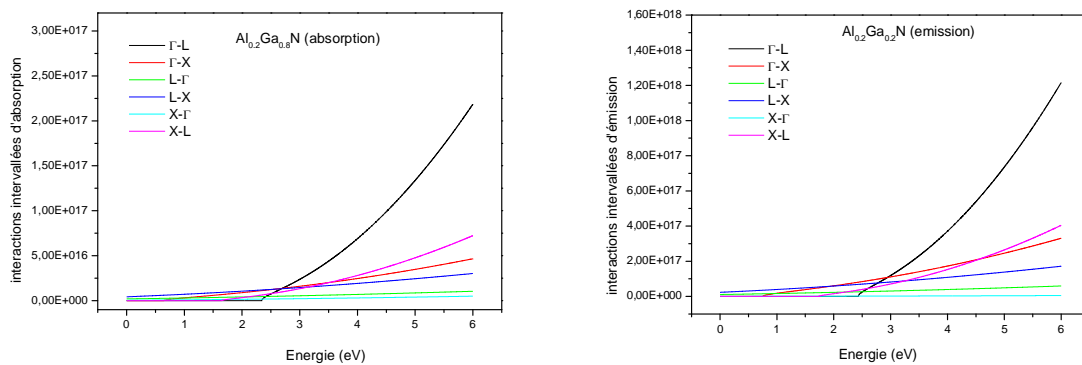


Figure 6.20 : Interactions intervalles pour $\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}$.

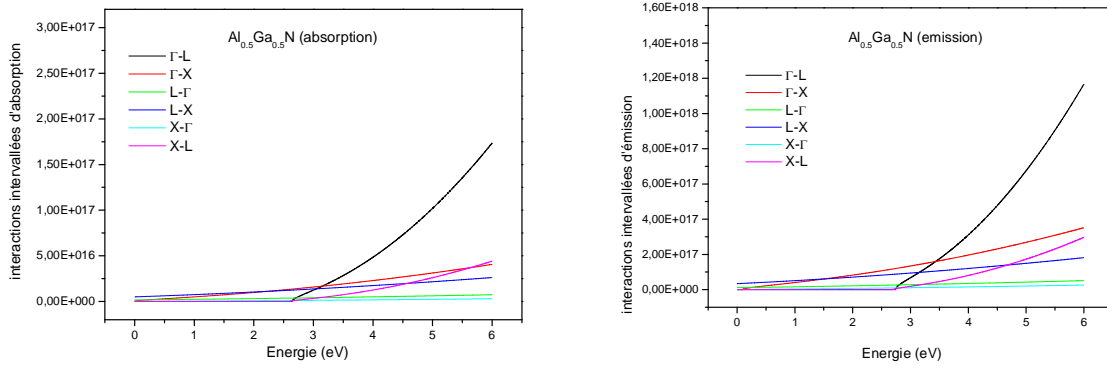


Figure 6.21 : Interactions intervalées pour $\text{Al}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{N}$.

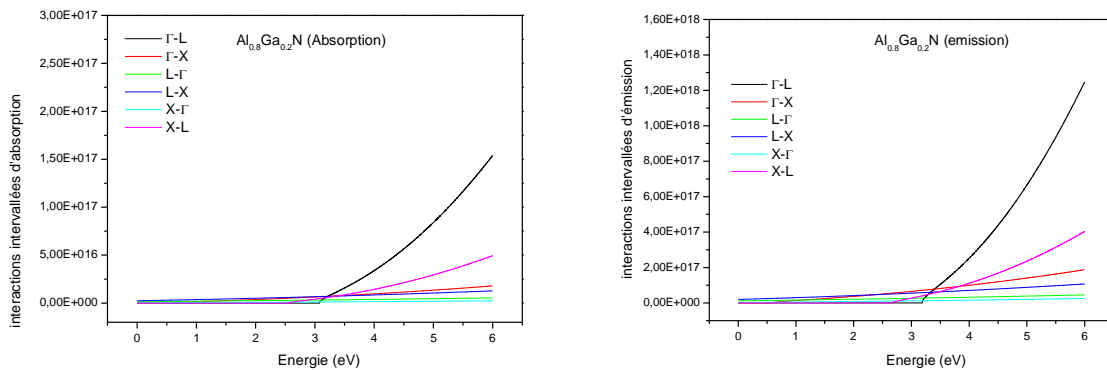


Figure 6.22 : Interactions intervalées pour $\text{Al}_{0.8}\text{Ga}_{0.2}\text{N}$.

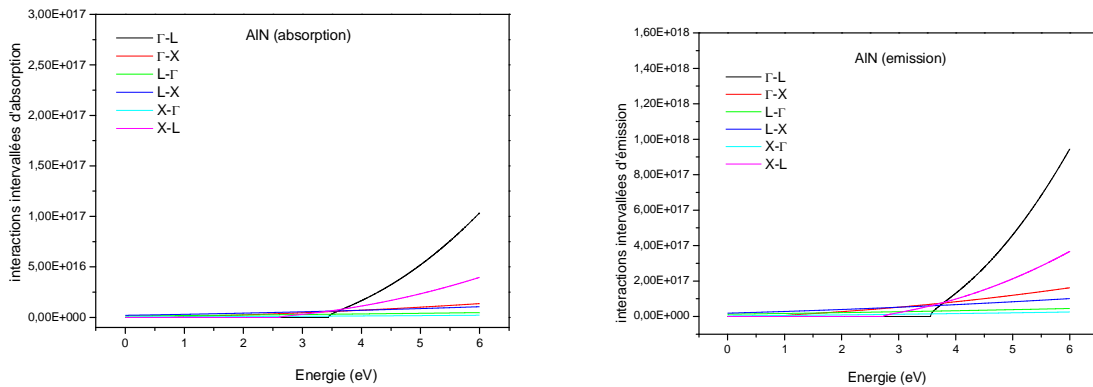


Figure 6.23 : Interactions intervalées pour AlN.

Les interactions Γ -L sont les plus importantes dans l'alliage AlGaN quelque soit la fraction molaire Al.

Pour des petites énergies ($E < 3.5$ eV), c'est l'interaction L-X qui domine parce que d'une part, la vallée L est supérieure à la vallée X, d'autre part la vallée X est plus proche par rapport à la vallée Γ . Les électrons ont tendance à perdre une petite énergie pour être plus stable, donc ils passent de la vallée L à la vallée X. La probabilité de cette interaction reste faible car ce sont que quelques électrons qui ont eu une énergie suffisante pour aller dans les vallées supérieures et ces électrons ont tendance à revenir dans la vallée inférieure.

Quand l'énergie augmente ($E > 3.5$ eV), l'interaction Γ -L qui était nulle commence à augmenter rapidement car les électrons ont acquis une énergie suffisante pour aller dans les vallées supérieures qui sont quasiment vides ($3.4\text{eV} < E_g < 6.2\text{eV}$). Les électrons vont ainsi pouvoir émigrer dans ces derniers, et surtout dans la vallée L, qui est la vallée la plus haute.

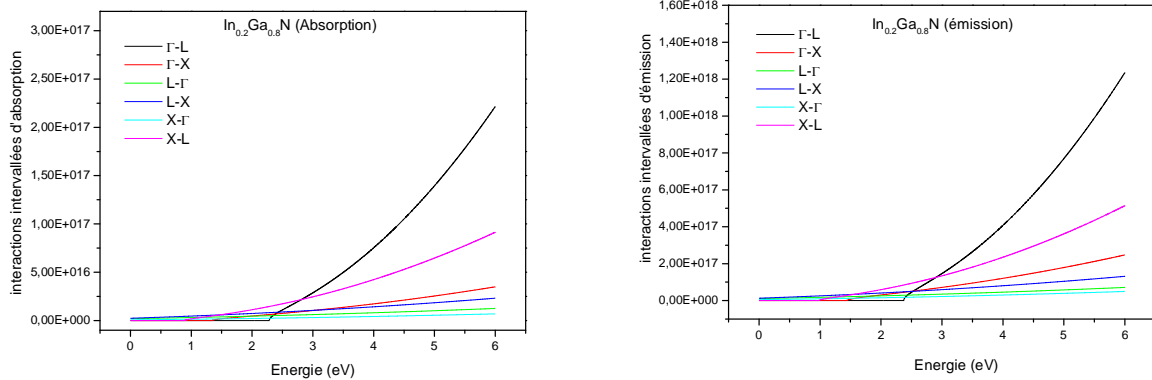


Figure 6.24 : Interactions intervallées pour $\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}$.

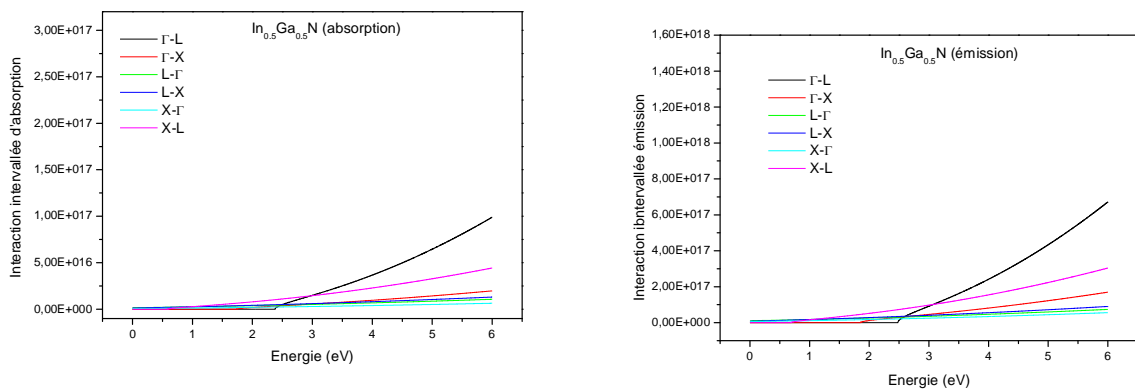


Figure 6.25 : Interactions intervallées pour $\text{In}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{N}$.

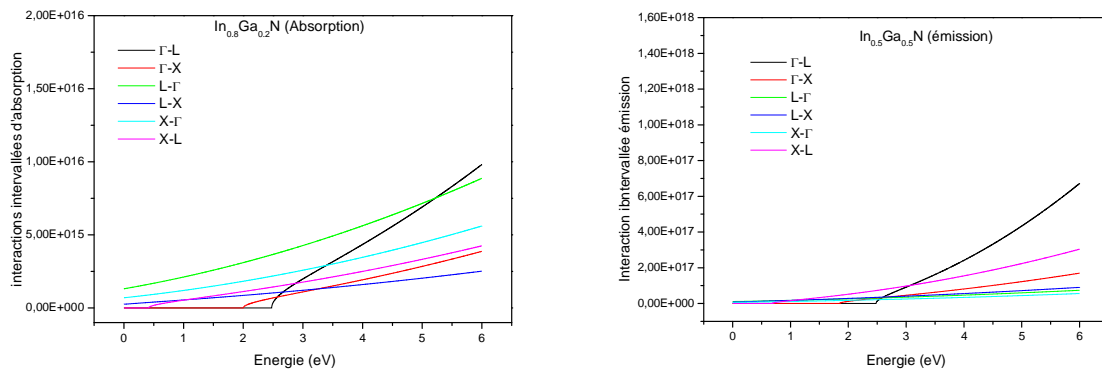


Figure 6.26 : Interactions intervalées pour $\text{In}_{0.8}\text{Ga}_{0.2}\text{N}$

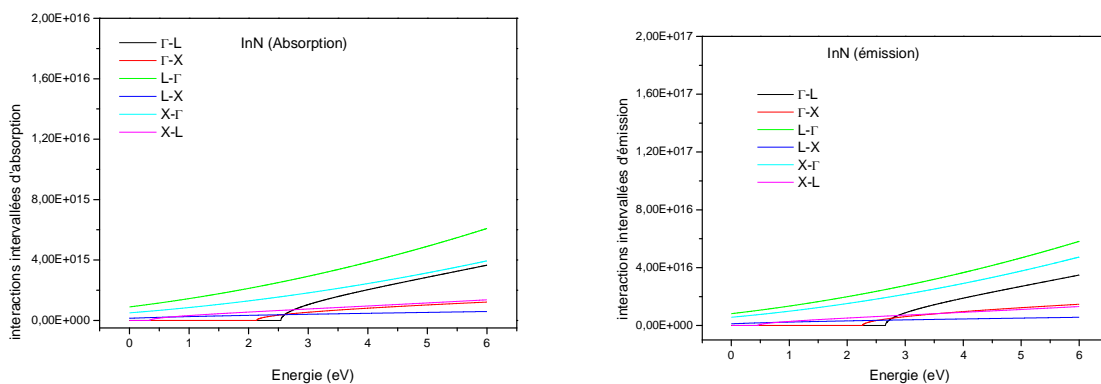


Figure 6.27 : Interactions intervalées pour InN

Dans l'alliage InGaN, pour des fractions molaires d'In inférieurs à 0.8 ($x < 0.8$), les interactions Γ -L sont les plus importantes comme le cas de GaN car le gap est relativement grand. Cependant, en augmentant la fraction molaire ($x \geq 0.8$), les interactions L- Γ et X- Γ prennent le dessus. En effet, dans ce cas le gap devient très petit ($E \approx 1.9$ eV), ainsi les électrons peuvent aller dans les vallées supérieures pour les occuper. Ces électrons ont tendance à revenir alors à la vallée Γ pour devenir plus stable.

Les interactions intervalées ne peuvent se produire que lorsque l'énergie des porteurs est suffisamment grande. Elles sont donc très peu probables à faible champ. Quand un électron est transféré vers une autre vallée, aux effets directs de l'interaction elle-même, viennent s'ajouter toutes les discontinuités dues à la non équivalence éventuelle des vallées d'origine et d'arrivée. En particulier, comme l'énergie cinétique de l'électron se mesure à partir du minimum de la vallée qu'il occupe, un transfert vers une vallée non équivalente

provoque une importante variation d'énergie cinétique correspondant à la différence de niveaux entre les deux vallées.

Dans l'alliage AlGa_N, la probabilité des interactions diminuent en augmentant la fraction molaire d'Al par ce que le gap augmente, en effet, ces interactions dépendent surtout de l'énergie de la vallée d'accueil et dans cet alliage, l'énergie séparant les vallées latérales devient de plus en plus grande en ajoutant de l'Al.

Dans le cas de l'InGa_N, la probabilité de ces interactions diminue considérablement en augmentant la fraction molaire de l'In, surtout pour ≥ 0.8 parce que l'énergie de gap et des autres vallées diminuent en ajoutant l'In mais l'écart entre les vallées augmente toujours. Pour ≥ 0.8 le gap devient très petit.

Nous pouvons tirer deux conclusions :

- Les probabilités de transitions intervalles Γ -L (absorptions comme émissions) sont les plus importantes pour l'alliage AlGa_N et l'alliage InGa_N pour < 0.8 , et l'interaction L- Γ devient la plus importante pour ≥ 0.8 .
- Les probabilités d'émissions sont plus grandes que celles d'absorptions car les électrons ont tendance à émettre de l'énergie pour être plus stable.

6.2.2.2 Interactions intravallées

Nous calculons pour les deux alliages les interactions intravallées en fonction de l'énergie des électrons, elles sont données par les figures 6.28 à 6.32 pour AlGa_N et 6.33 à 6.34 pour InGa_N.

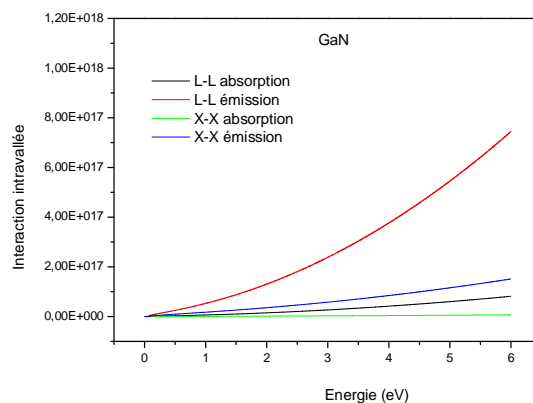


Figure 6.28: Interactions intravallées dans GaN.

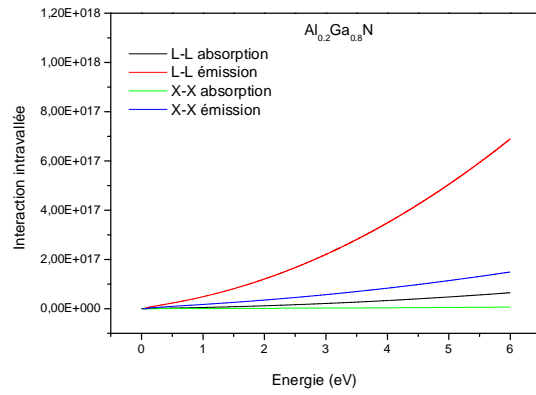


Figure 6.29 : Interactions intravallées dans $\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}$.

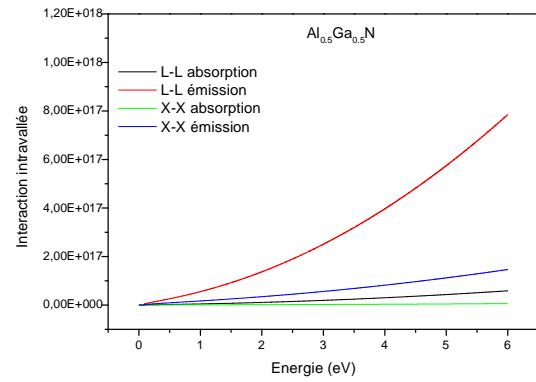


Figure 6.30 : Interactions intravallées dans $\text{Al}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{N}$.

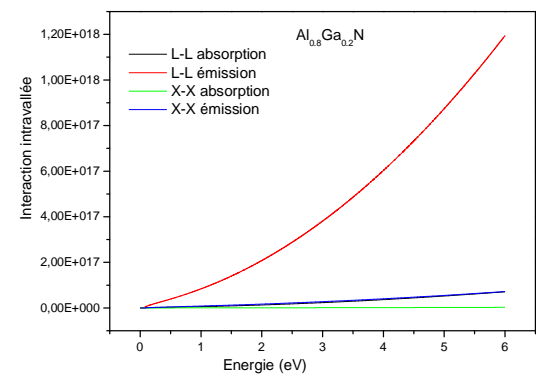


Figure 6.31 : Interactions intravallées dans $\text{Al}_{0.8}\text{Ga}_{0.2}\text{N}$.

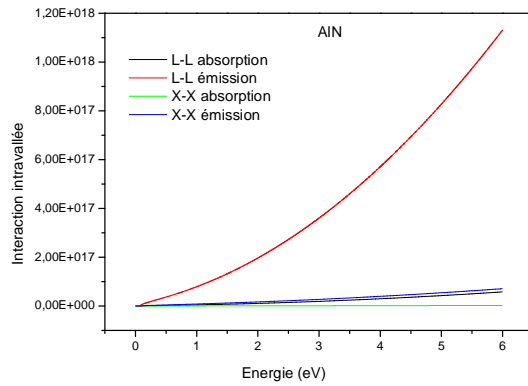


Figure 6.32 : Interactions intravallées pour AlN.

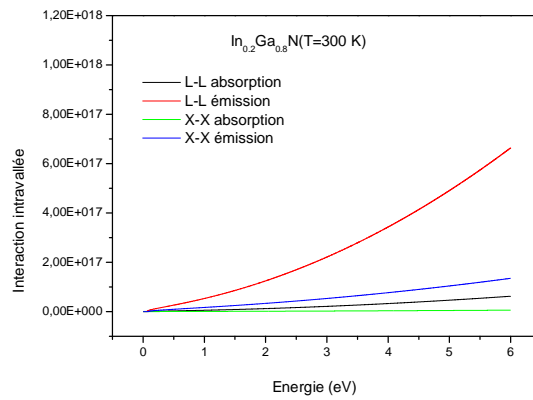


Figure 6.33: Interactions intravallées dans In_{0,2}Ga_{0,8}N.

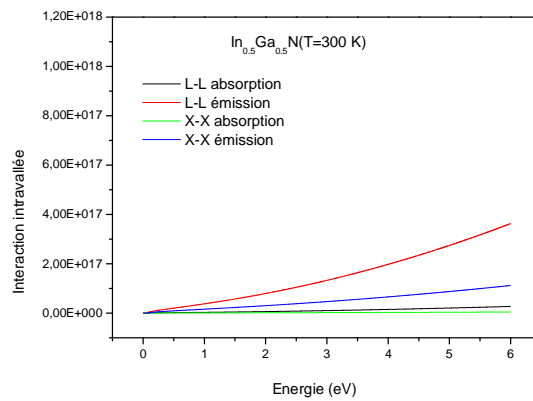


Figure 6.34: Interactions intravallées dans In_{0,5}Ga_{0,5}N.

Ces interactions augmentent avec l'énergie des porteurs, et elles sont plus importantes dans les vallées supérieures où la masse effective des électrons est plus grande. Là aussi, les probabilités d'émissions sont plus grandes que celles d'absorptions.

Ces interactions augmentent dans le cas de l'AlGaN car l'énergie de gap ainsi que l'énergie des autres vallées augmentent en ajoutant l'Al, et elles diminuent dans l'InGaN en ajoutant l'In parce que les énergies de gap et des autres vallées diminuent.

Pour $\text{In}_{0.8}\text{Ga}_{0.2}\text{N}$ et InN , les valeurs de ces interactions sont négligeables, l'explication de ce résultat se fait en deux points

- 1- l'énergie de gap et l'énergie des vallées L et X deviennent très petites pour $x \geq 0.8$ devant celles de GaN et AlN.
- 2- Les interactions L- Γ et X- Γ deviennent très importants pour $x \geq 0.8$, ainsi les électrons dans ce cas ont tendance à revenir à leur vallée d'origine (la vallée la plus basse) que de rester dans la même vallée.
- 3-

6.2.2.3 Interactions optiques polaires

Les figures 6.35 à 6.39 pour l'alliage AlGaN et les figures de 6.40 à 6.43 InGaN, illustrent l'évolution des interactions optiques polaires (absorptions et émissions) dans les trois vallées.

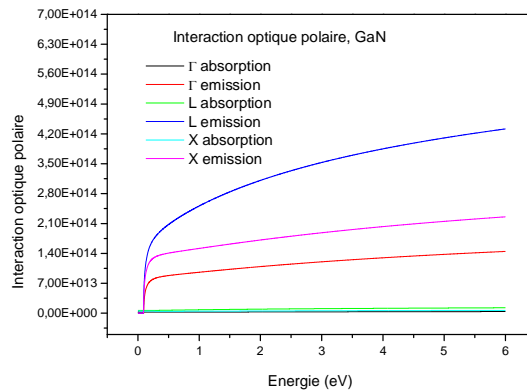


Figure 6.35 : Interactions optiques polaires dans GaN (les interactions d'absorptions sont négligeables devant celles d'émission).

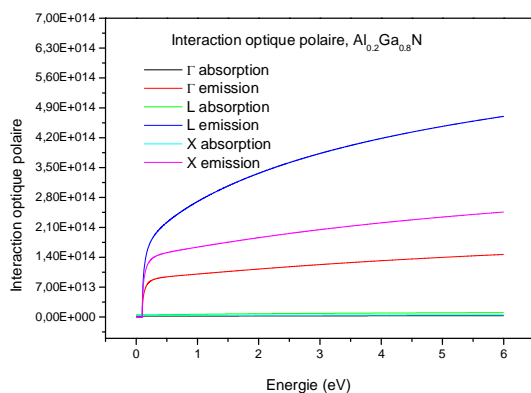


Figure 6.36: Interactions optiques polaires dans $\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}$ (les interactions d'absorptions sont très petites devant celles d'émission).

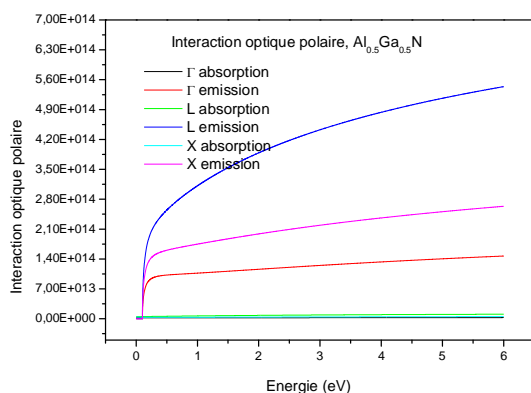


Figure 6.37 : Interactions optiques polaires dans $\text{Al}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{N}$ (les interactions d'absorptions sont négligeables devant celles d'émission).

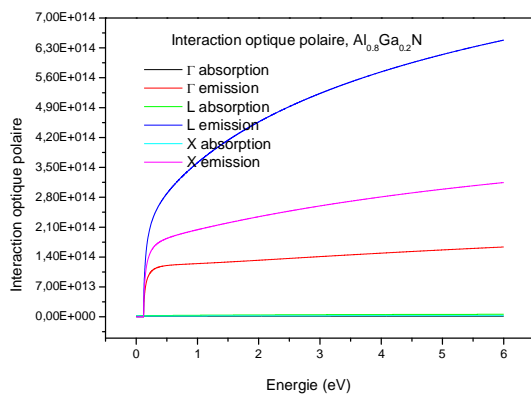


Figure 6.38: Interactions optiques polaires dans $\text{Al}_{0.8}\text{Ga}_{0.2}\text{N}$ (les interactions d'absorptions sont négligeables devant celles d'émission).

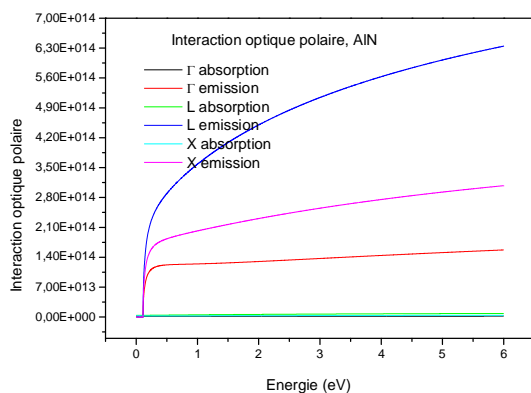


Figure 6.39 : Interactions optiques polaires dans AlN (les interactions d'absorptions sont négligeables devant celles d'émission).

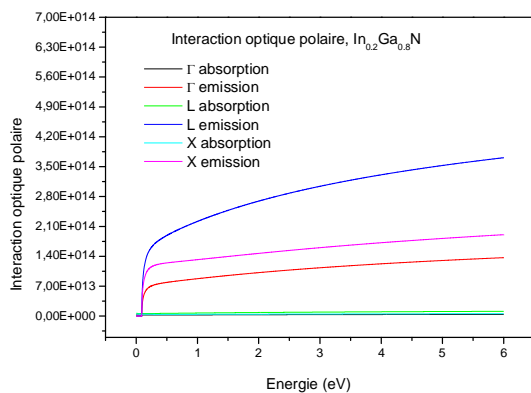


Figure 6.40 : Interactions optiques polaires dans $\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}$ (les interactions d'absorptions sont négligeables devant celles d'émission).

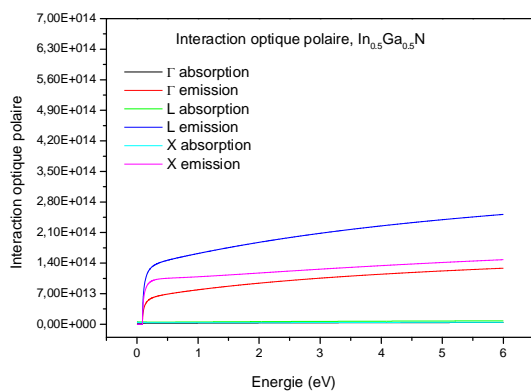


Figure 6.41 : Interactions optiques polaires dans $\text{In}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{N}$ (les interactions d'absorptions sont négligeables devant celles d'émission).

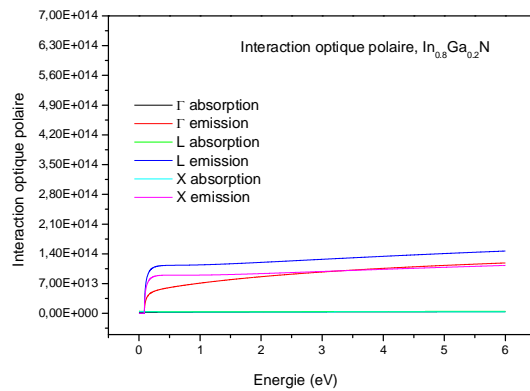


Figure 6. 42 : Interactions optiques polaires dans $\text{In}_{0.8}\text{Ga}_{0.2}\text{N}$ (les interactions d'absorptions sont négligeables devant celles d'émission).

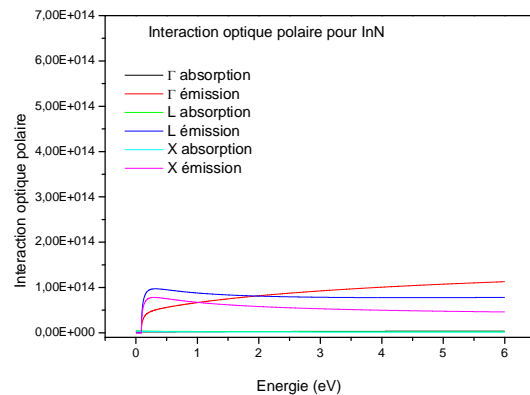


Figure 6.43 : Interactions optiques polaires dans InN (les interactions d'absorptions sont négligeables devant celles d'émission).

L'interaction optique polaire prédomine en vallée centrale en champ faible. Elle est caractérisée par un échange de phonon optique polaire (d'énergie $\hbar \omega$), et par une forte anisotropie sur l'ensemble des états finaux probables : les états correspondant à une déviation quasi nulle du vecteur d'onde, sont très fortement favorisés. L'électron, entraîné dans la direction du champ pendant la phase de vol libre, ne sera donc que détourné de cette direction sous l'effet de cette interaction. A faible énergie ($<0.5\text{eV}$), seules les interactions optiques polaires (émissions et absorptions), les interactions piézoélectriques et les interactions acoustiques, influent sur le comportement des porteurs. Tant que l'énergie est inférieure à $E_g + E_{\Gamma X}$, aucun porteur ne peut être transféré dans la vallée supérieure X. Nous trouvons aussi que les interactions d'absorptions sont négligeables devant celles d'émissions.

En comparant les deux alliages AlGaN et InGaN; les probabilités des interactions sont plus importantes dans le premier et augmentent avec la fraction molaire Al. Dans le deuxième alliage, les interactions diminuent encore plus avec l'augmentation de la fraction molaire In. De ce fait ; dans l'alliage InGaN, les électrons auront une plus grande mobilité et aussi une plus grande durée de vie, des performances recherchées pour des applications en optoélectronique.

6.2.3 L'effet de la température sur les interactions :

Durant leurs mouvements, les électrons peuvent subir plusieurs interactions. La probabilité de ces interactions changent avec la température dans ce paragraphe, nous illustrons les différentes interactions déjà évoqué pour trois températures : $T=77$ K (température de l'ébullition de l'azote), $T=300$ K (température ambiante) et $T=1000$ K, nous faisons ce travail pour les GaN, $\text{Al}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{N}$, AlN, $\text{In}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{N}$ et InN. Les résultats seront présentés pour les interactions acoustiques (figures 6.44 - 6.48), interactions piézoélectriques (figures 6.49 -6.53) interactions intervalles d'absorption et d'émission (figures 6.54 - 6.63), interactions intravallées (figures 6.64 - 6.67) et interactions optiques polaires (figures 6.68 - 6.72).

a. Interaction acoustiques

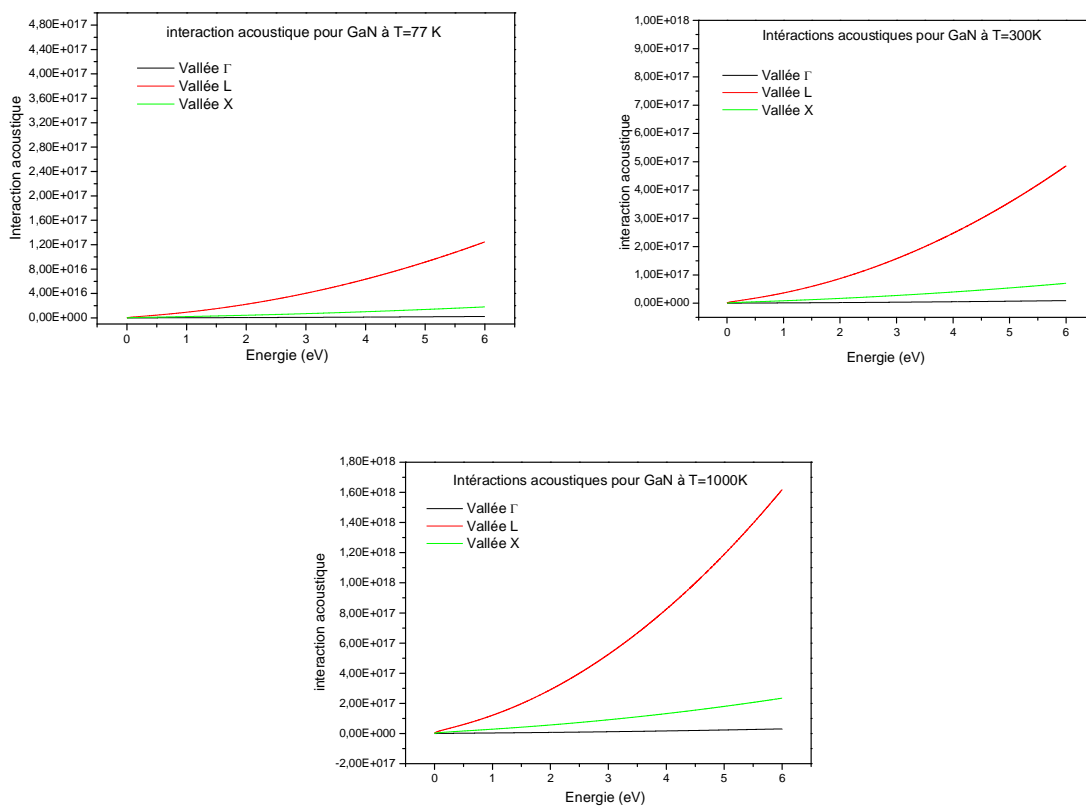


Figure 6.44: les interactions acoustiques pour GaN à des températures de 77, 300 et 1000 K

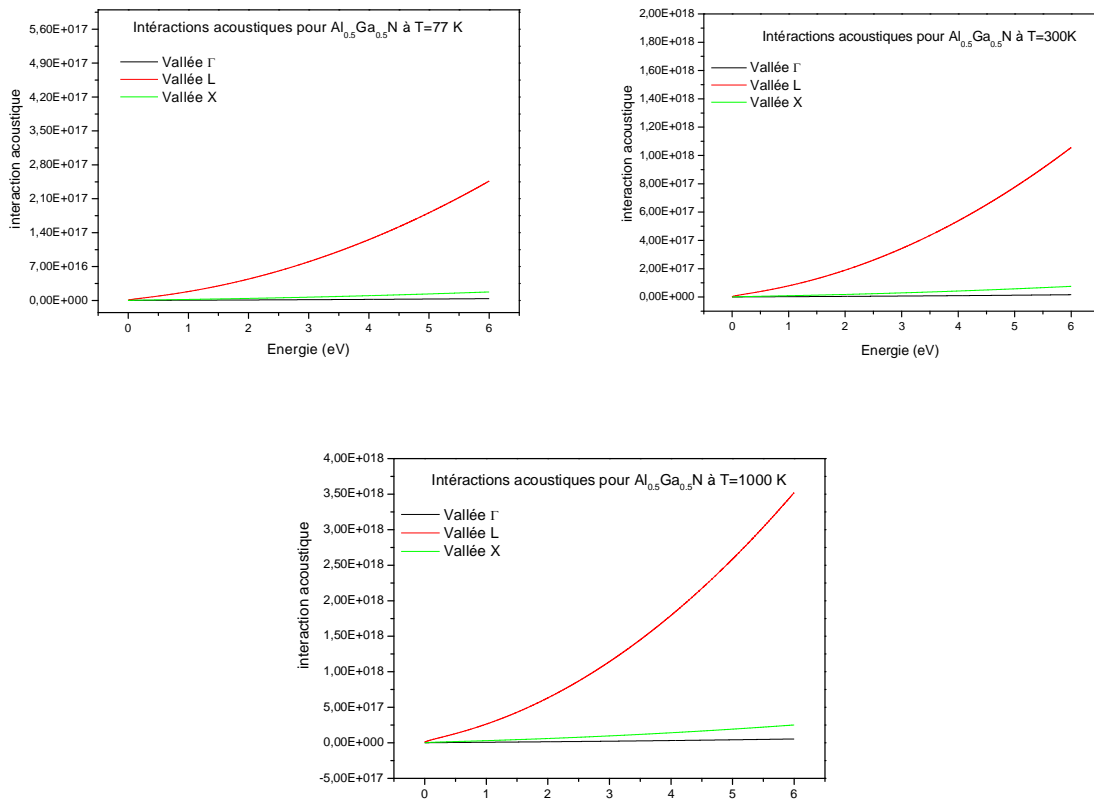
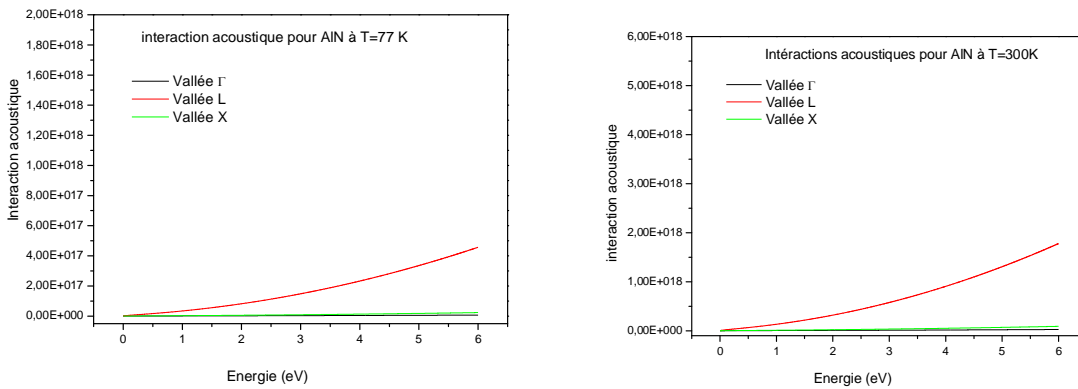


Figure 6. 45: les interactions acoustiques pour $\text{Al}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{N}$ à des températures de 77, 300 et 1000K.



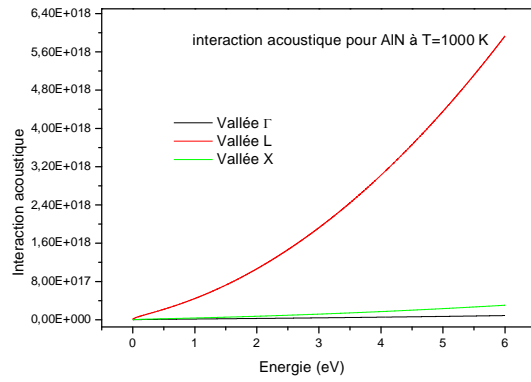


Figure 6.46: les interactions acoustiques pour l'AlN à des températures de 77, 300 et 1000K

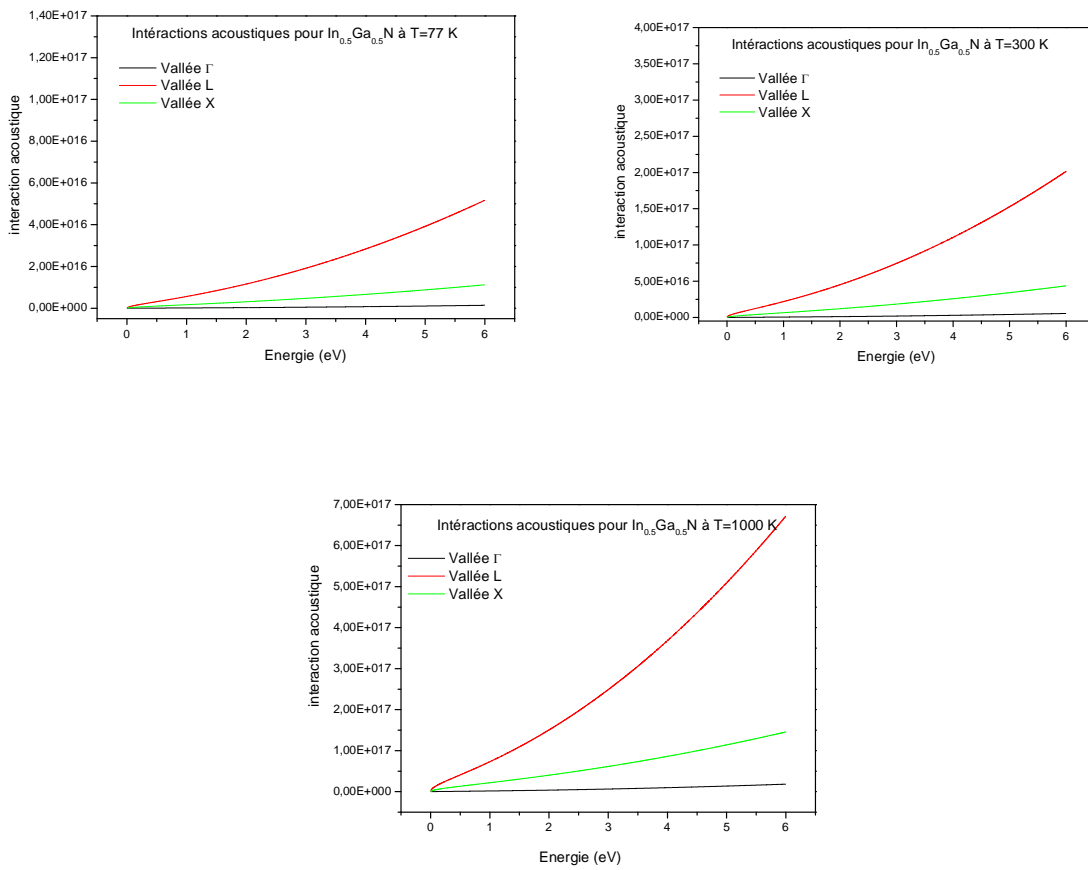


Figure 6.47: les interactions acoustiques pour l'In_{0,5}Ga_{0,5}N à des températures de 77, 300 et 1000K.

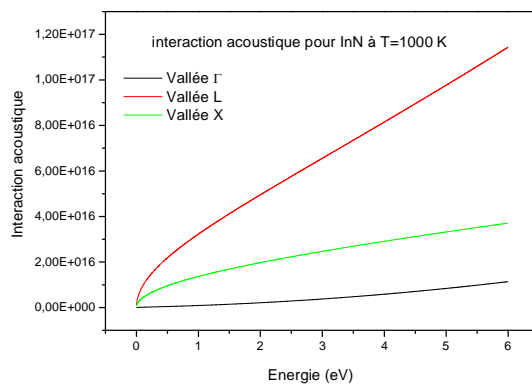
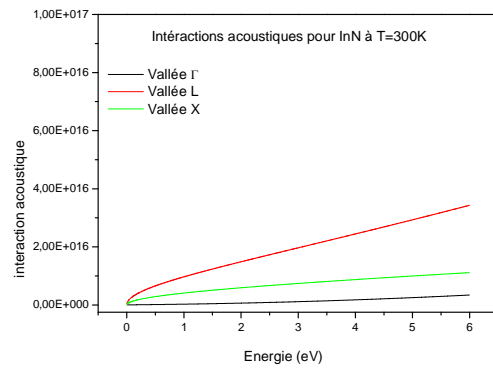
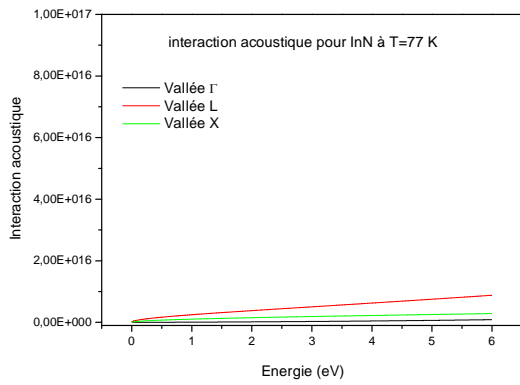
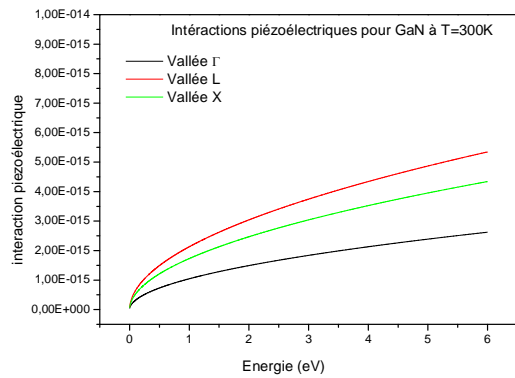
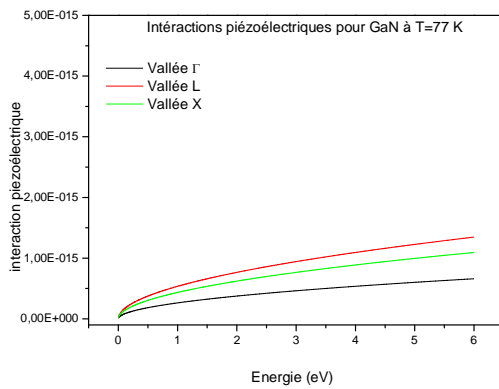


Figure 6.48: les interactions acoustiques pour InN à des températures de 77, 300 et 1000K.

Il ya une importante augmentation de la probabilité des interactions acoustiques en augmentant la température.

b. Interaction piézoélectriques



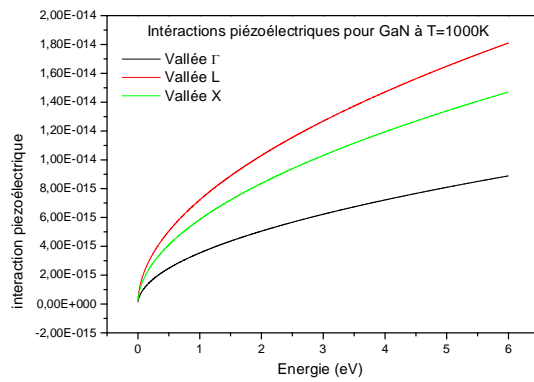


Figure 6.49: les interactions piézoélectriques pour GaN à des températures de 77, 300 et 1000 K

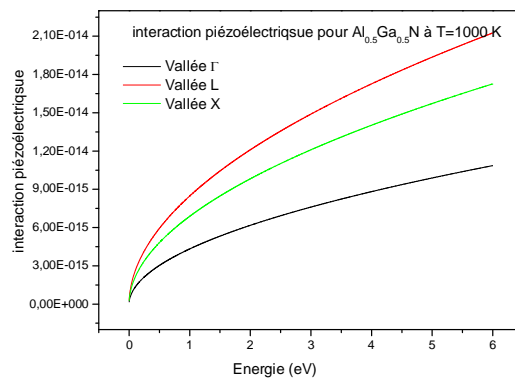
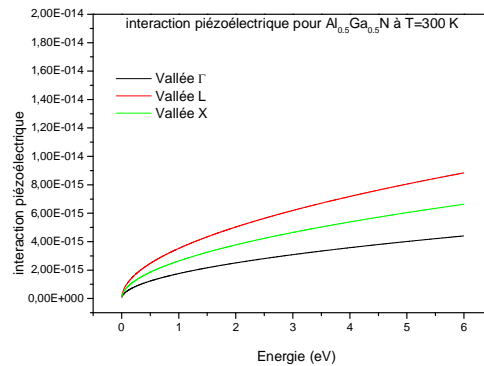
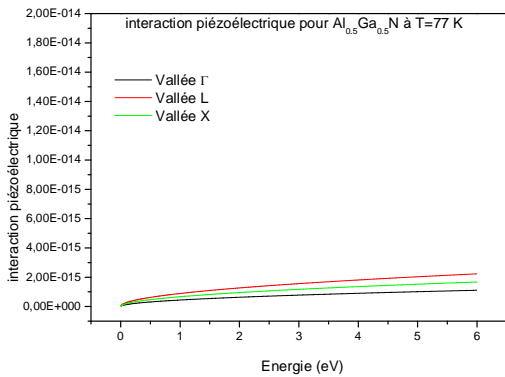


Figure 6.50: les interactions piézoélectriques pour $Al_{0,5}Ga_{0,5}N$ à des températures de 77, 300 et 1000K.

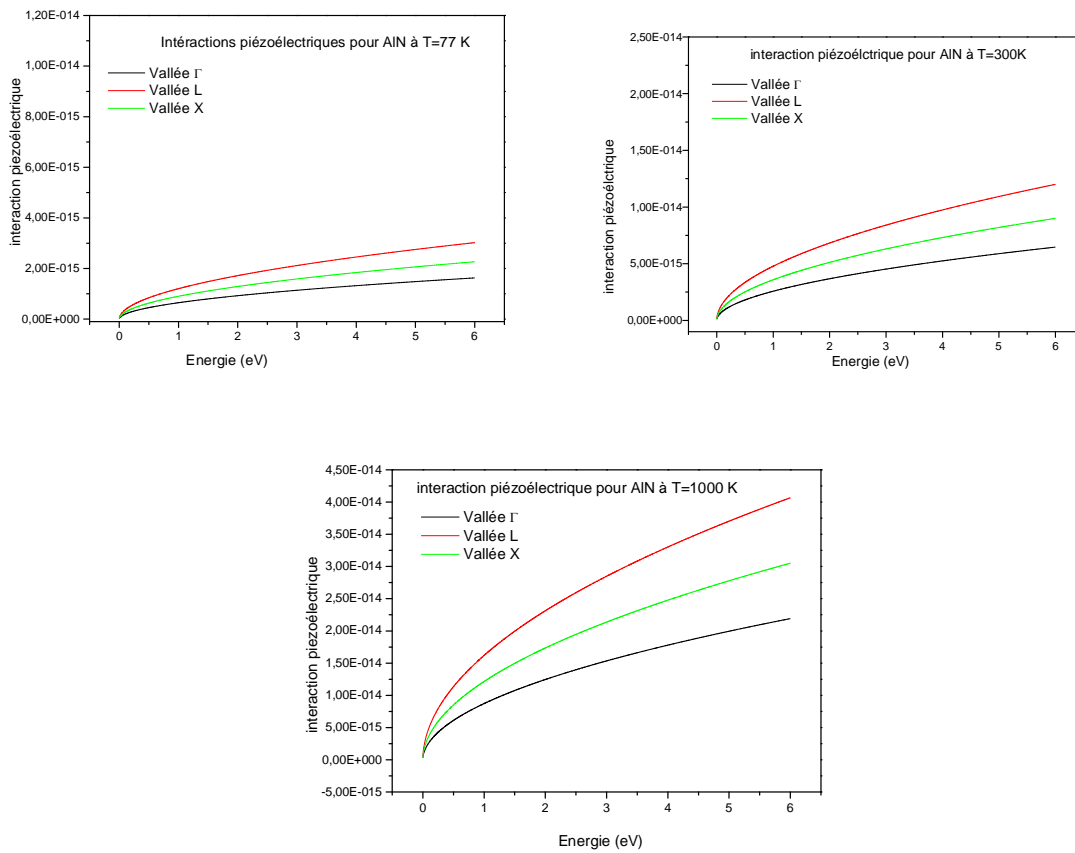
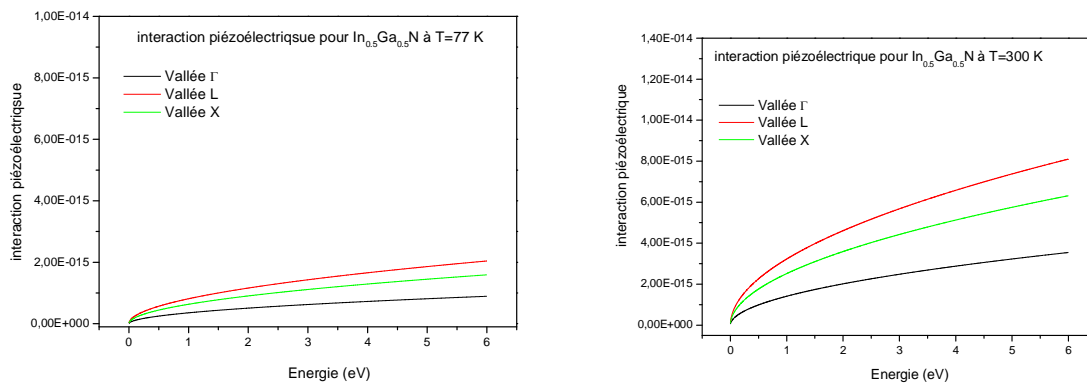


Figure 6.51: les interactions piézoélectriques pour l'AlN à des températures de 77, 300 et 1000K



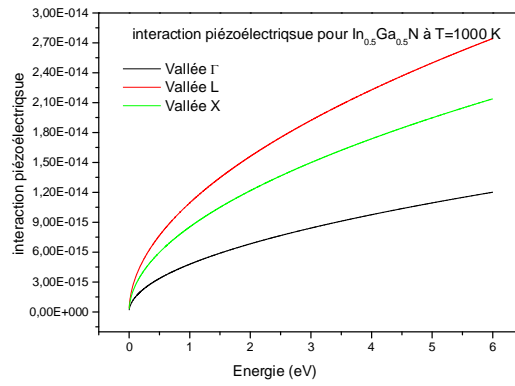


Figure 6.52: les interactions piézoélectriques pour l' $\text{In}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{N}$ à des températures de 77, 300 et 1000K.

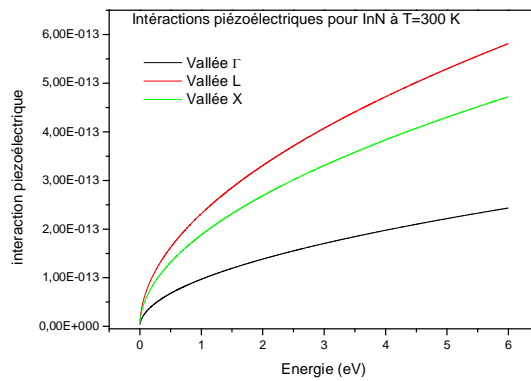
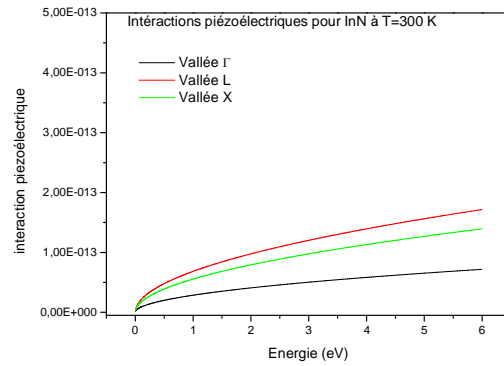
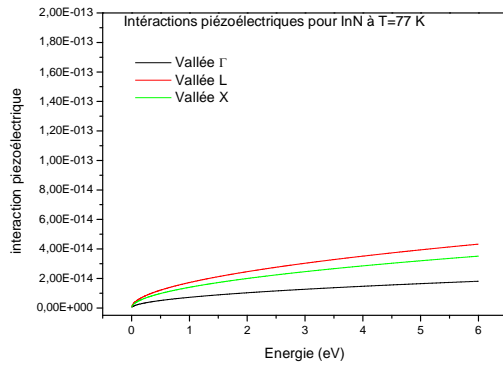


Figure 6.53: les interactions piézoélectriques pour l' InN à des températures de 77, 300 et 1000K.

En augmentant la température la probabilité des interactions piézoélectriques devient de plus en plus grande.

c. Interaction intervalées d'absorption et d'émission :

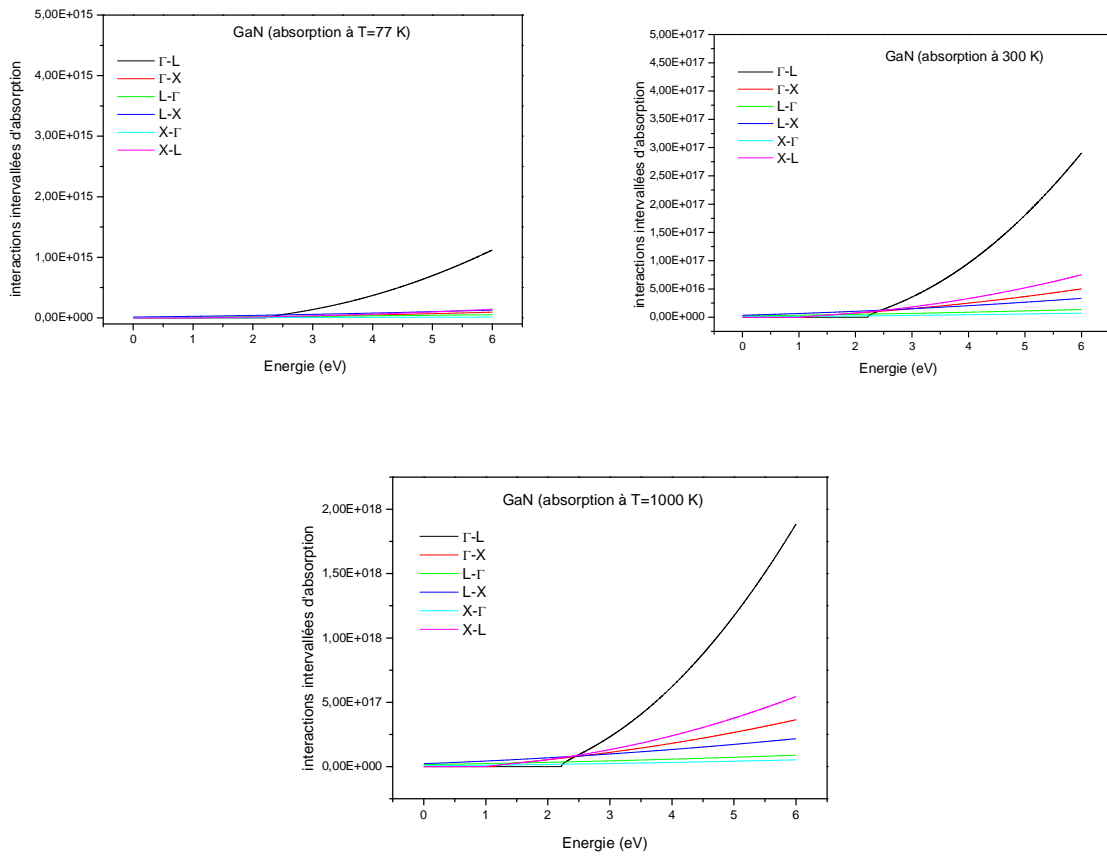
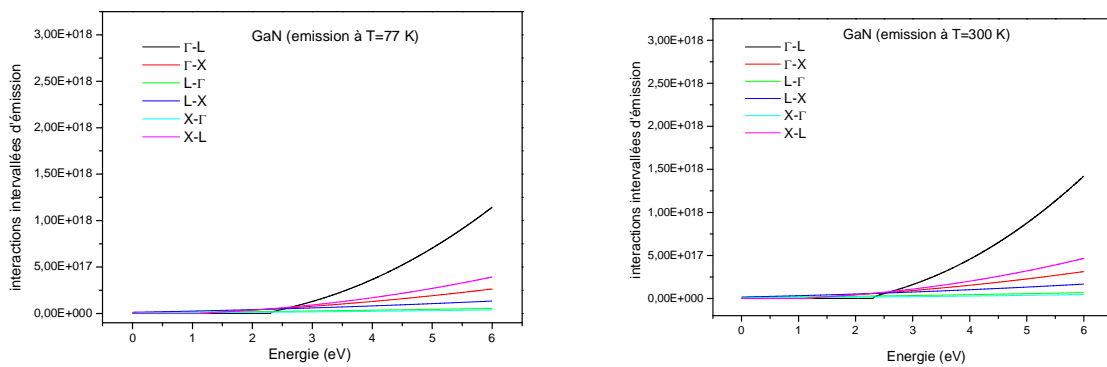


Figure 6.54 : les interactions intervalées d'absorption pour GaN à des températures de 77, 300 et 1000 K



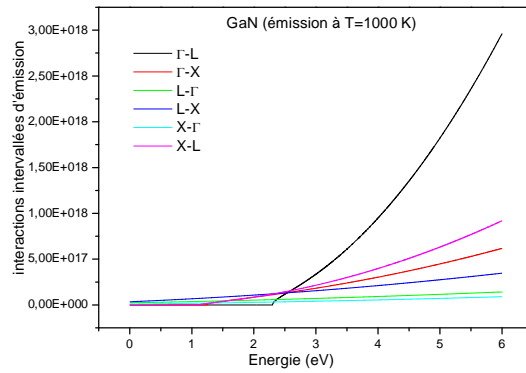


Figure 6.55: les interactions intervalles d'émission pour GaN à des températures de 77, 300 et 1000 K

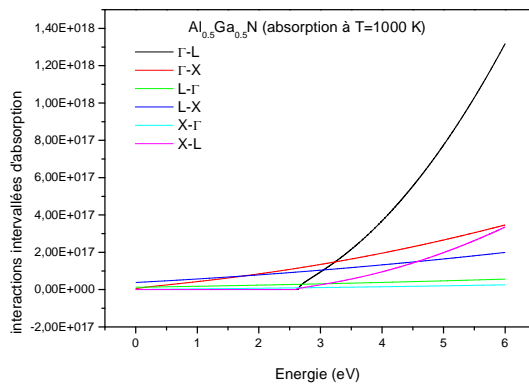
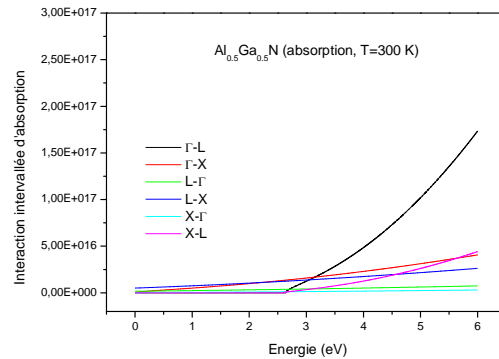
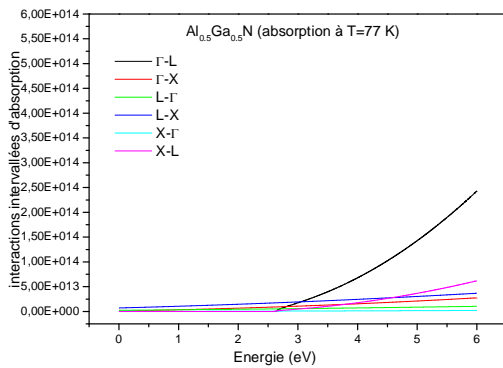


Figure 6.56: les interactions intervalles d'absorption pour $Al_{0.5}Ga_{0.5}N$ à des températures de 77, 300 et 1000K

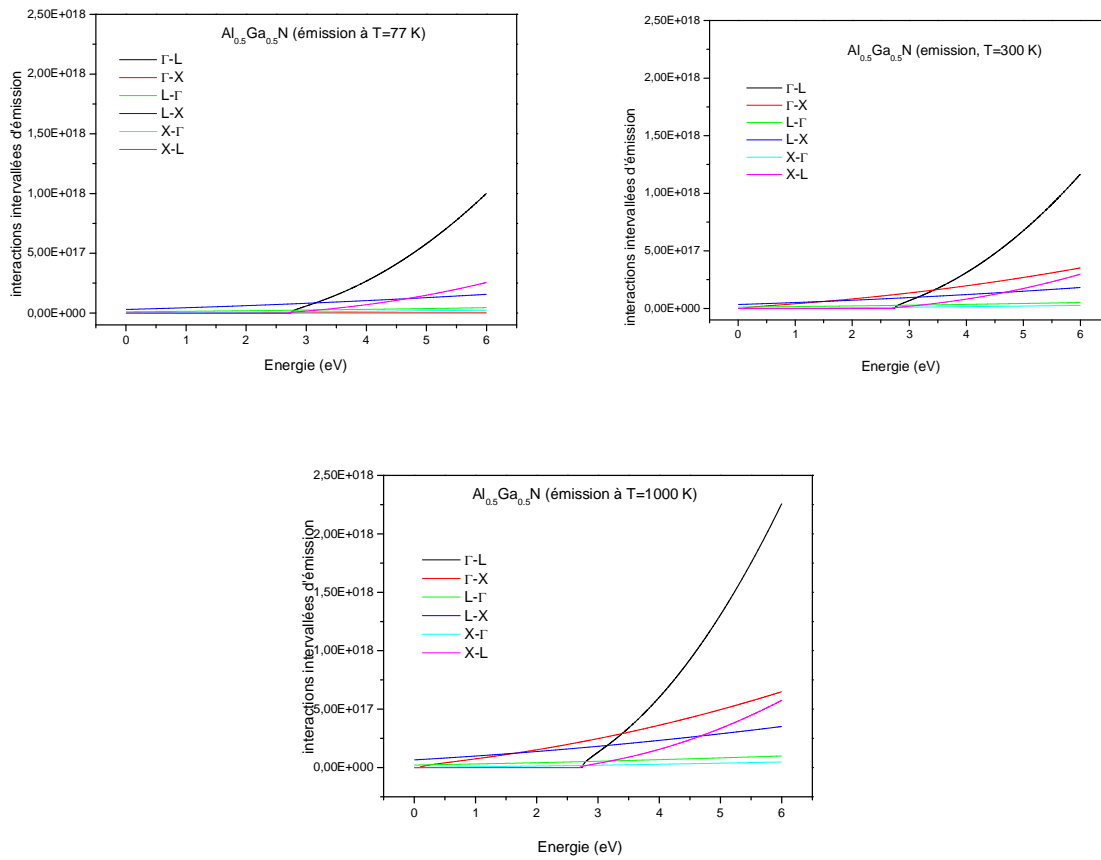
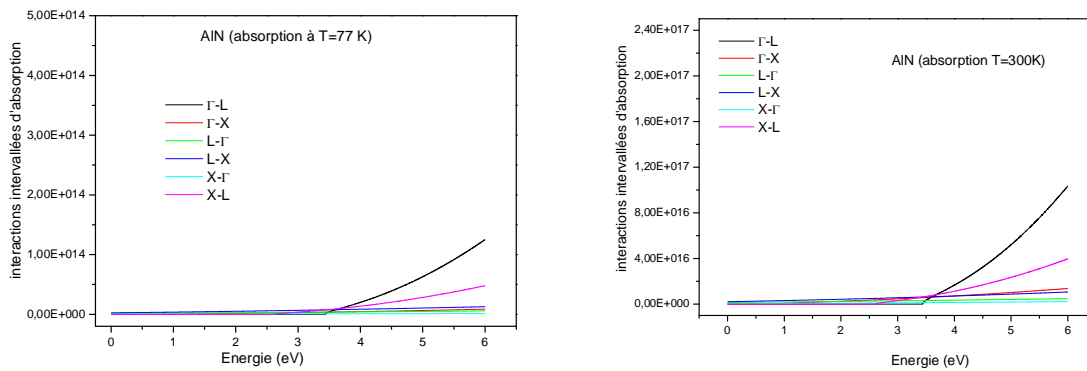


Figure 6.57: les interactions intervalles d'émission pour $\text{Al}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{N}$ à des températures de 77, 300 et 1000K



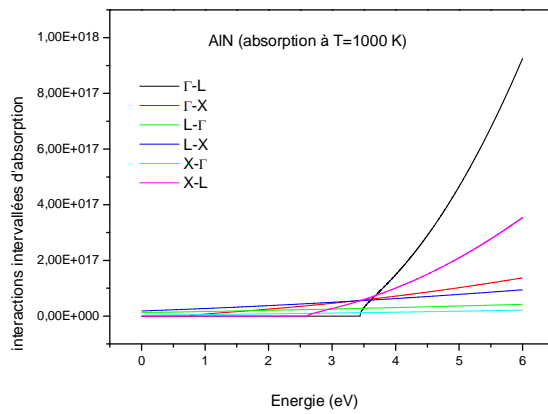


Figure 6.58: les interactions intervalées d'absorption pour l'AlN à des températures de 77, 300 et 1000K

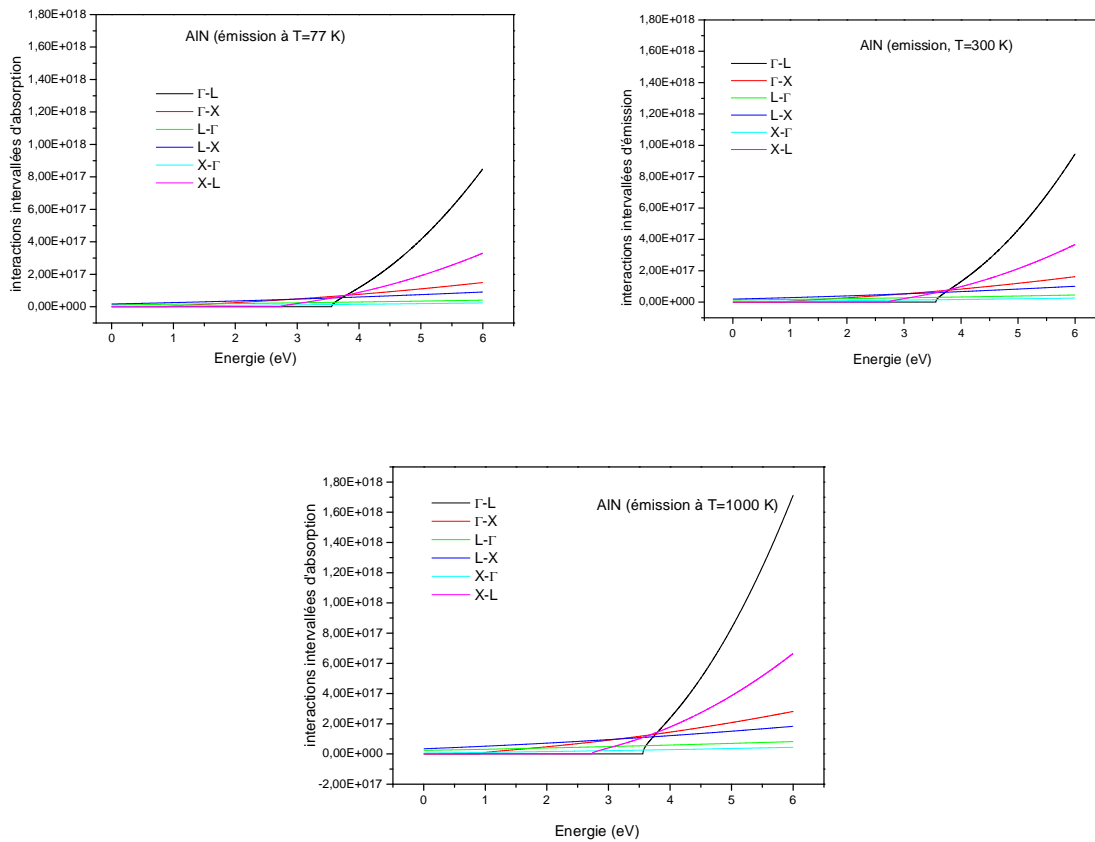


Figure 6.59: les interactions intervalées d'émission pour l'AlN à des températures de 77, 300 et 1000K

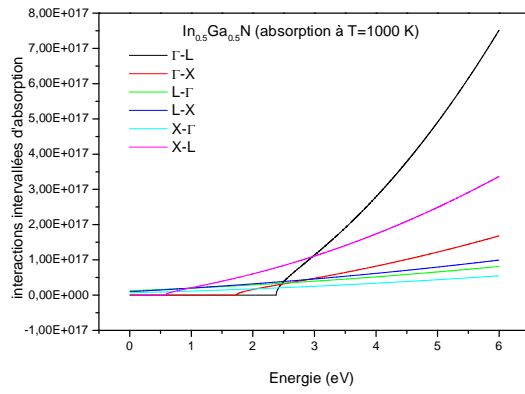
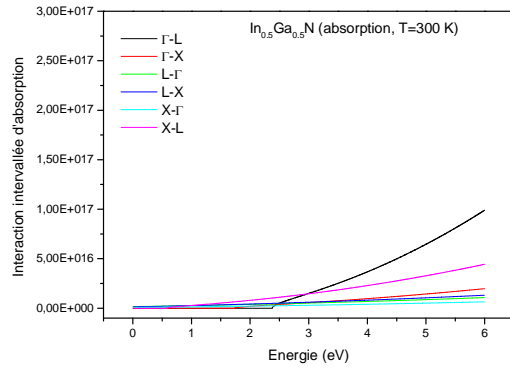
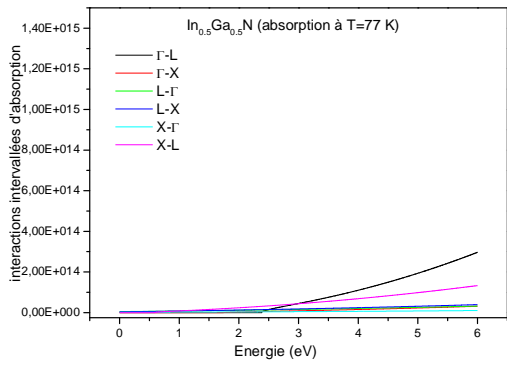
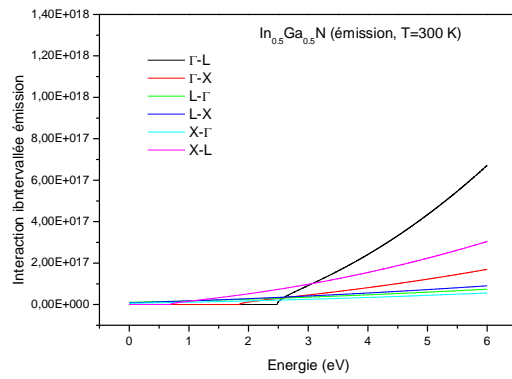
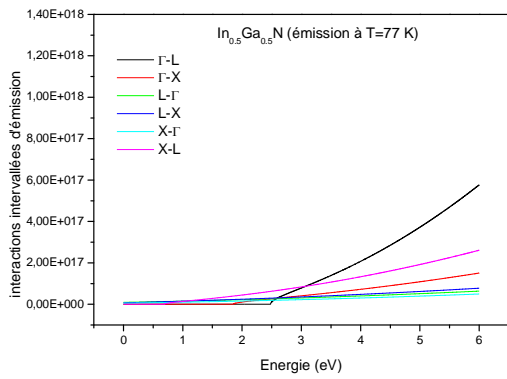


Figure 6.60: les interactions intervalées d'absorption pour l' $\text{In}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{N}$ à des températures de 77, 300 et 1000K



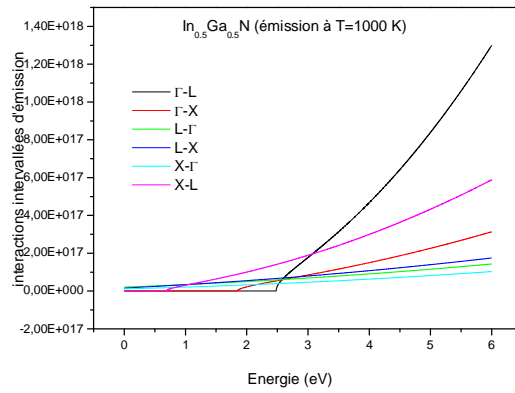


Figure 6.61: les interactions intervalles d'émission pour l' $\text{In}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{N}$ à des températures de 77, 300 et 1000K.

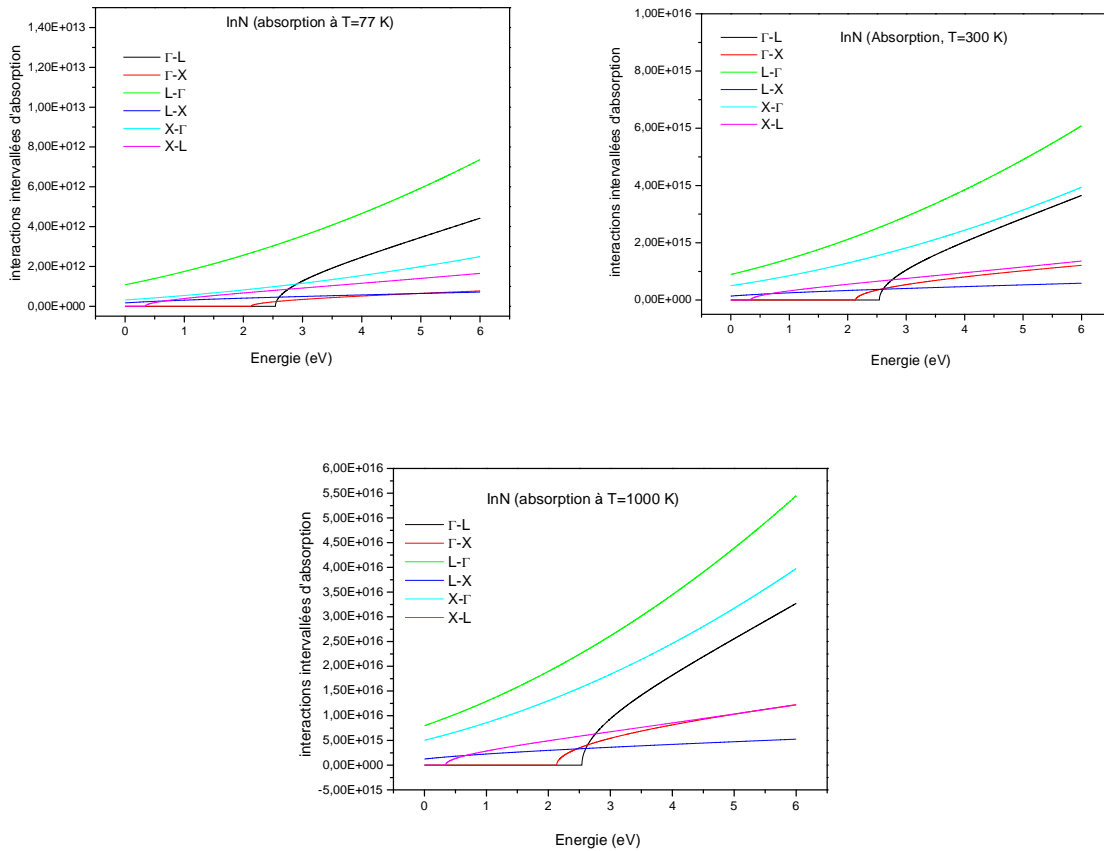


Figure 6.62: les interactions intervalles d'absorption pour l' InN à des températures de 77, 300 et 1000K

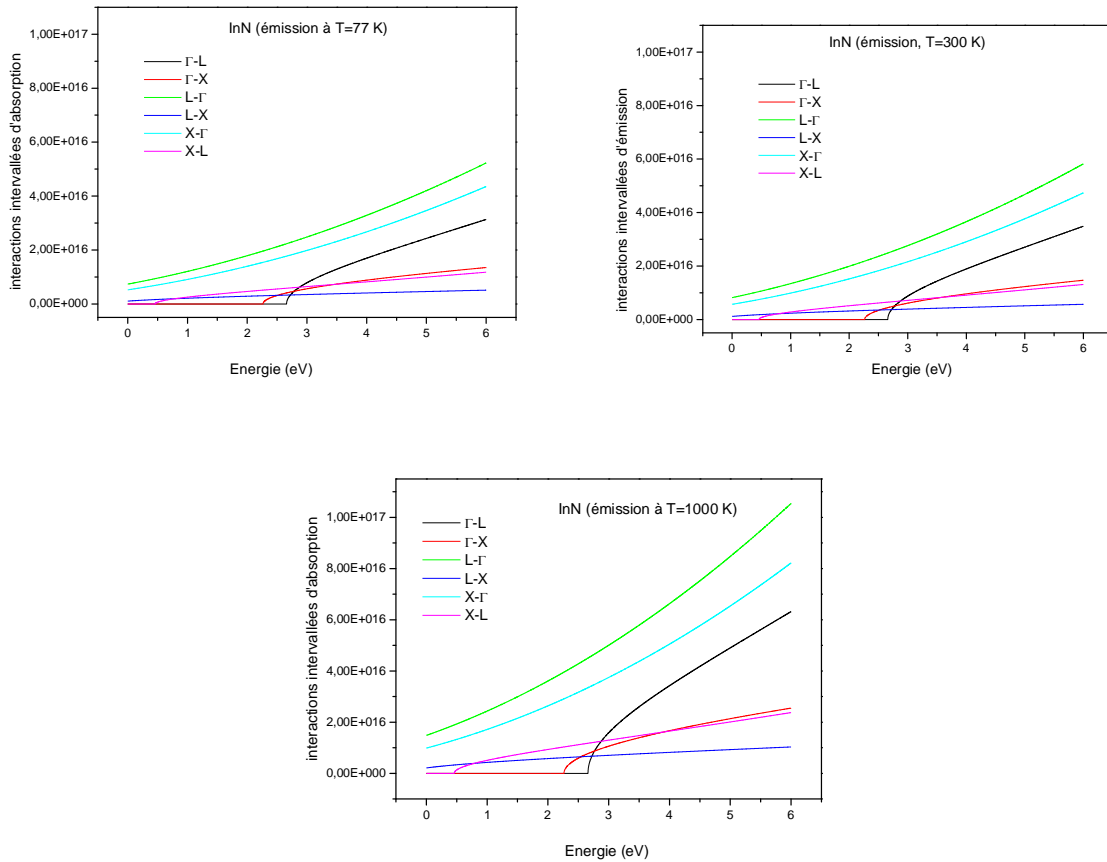


Figure 6.63: les interactions intervalles d'émission pour l'InN à des températures de 77, 300 et 1000K.

L'effet de la température est plus important dans le cas des interactions intervalles d'absorption et il est très faible dans le cas d'émission par ce qu'en augmentant la température le gap devient plus petit et les électrons peuvent ainsi aller occuper les vallées supérieures (le cas d'absorption) mais le cas d'émission est indépendant de la température car à n'importe quelle température, l'électron peut revenir aux vallées plus basses.

d. Interaction intravallées

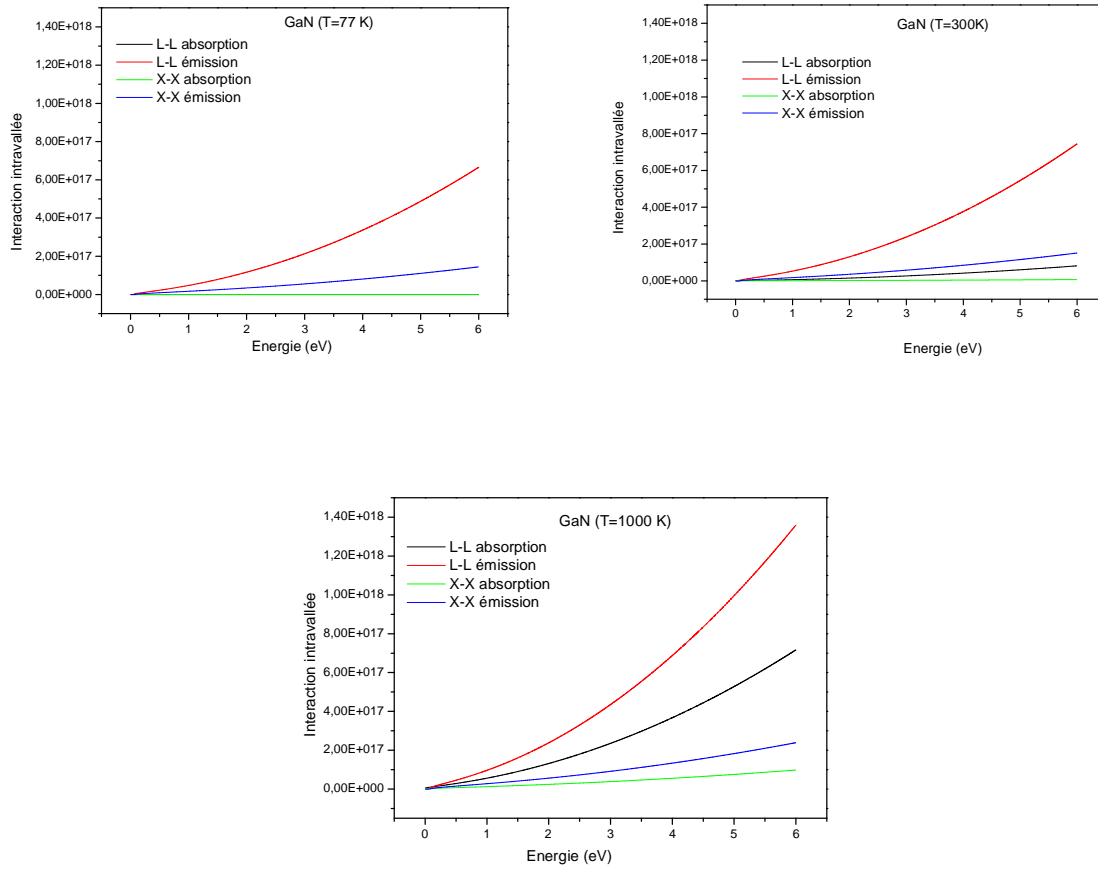
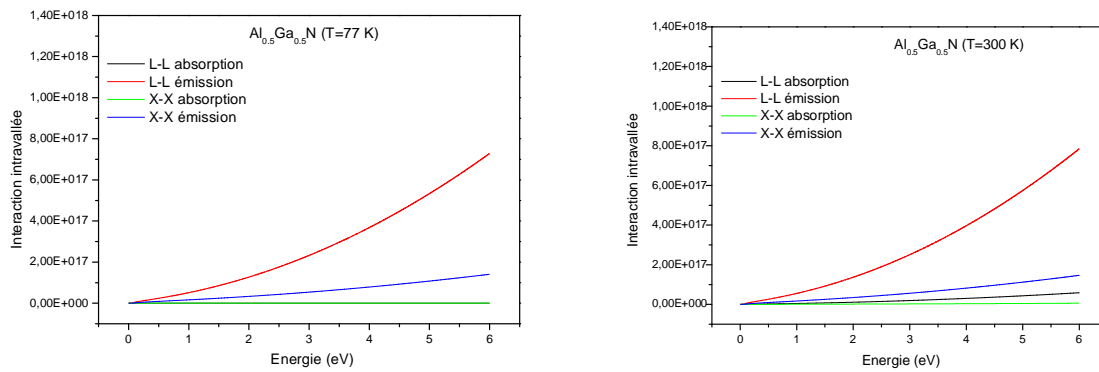


Figure 6.64: les interactions intravallées pour GaN à des températures de 77, 300 et 1000 K



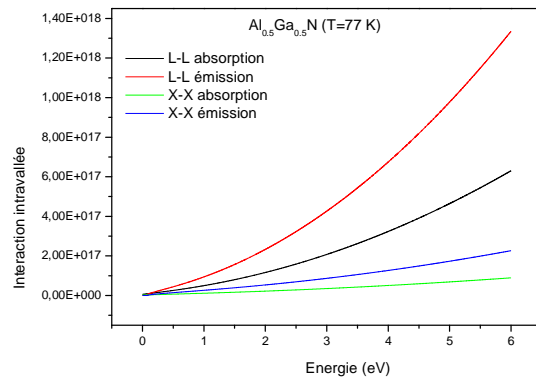


Figure 6.65: les interactions intravallées pour Al_{0.5}Ga_{0.5}N à des températures de 77, 300 et 1000K

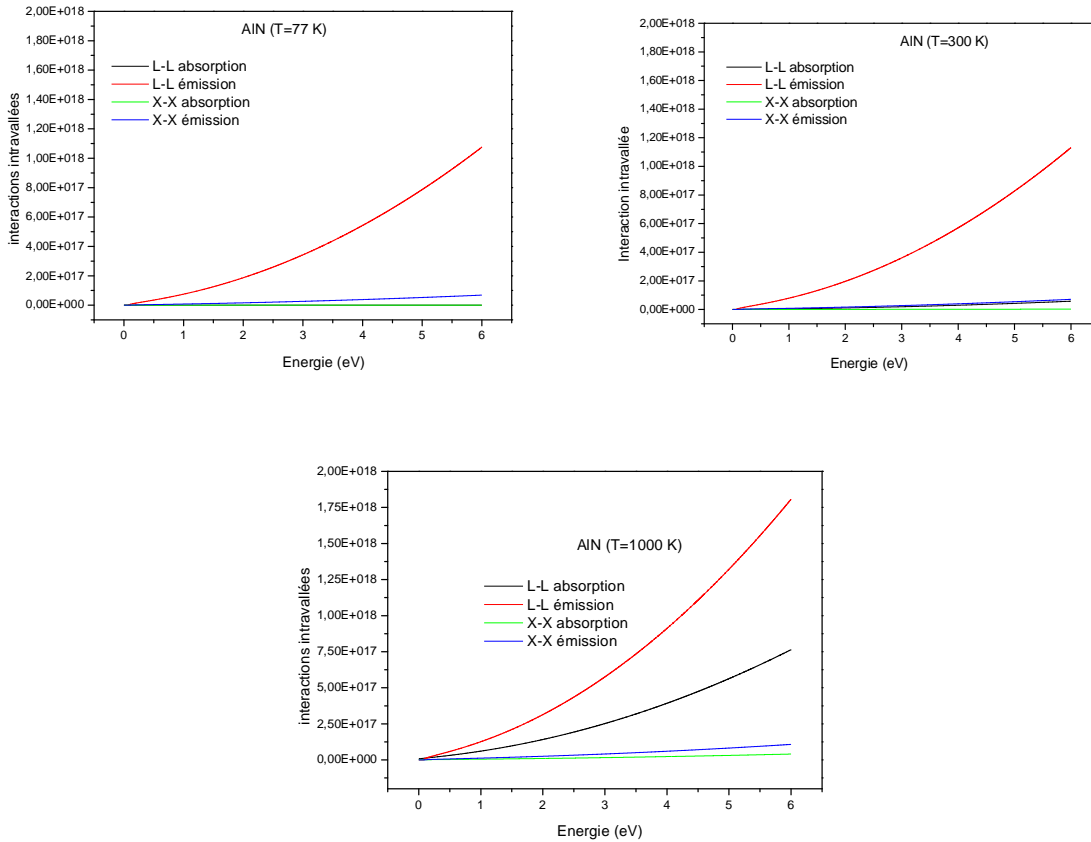


Figure 6.66: les interactions intravallées pour l'AlN à des températures de 77, 300 et 1000K

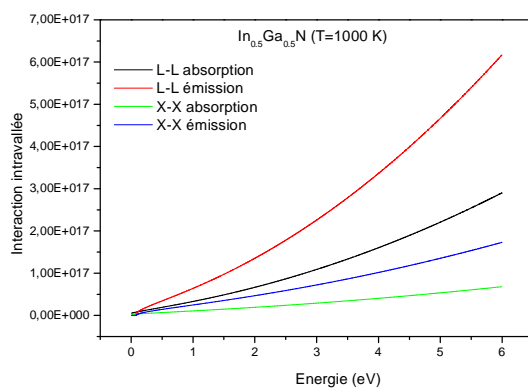
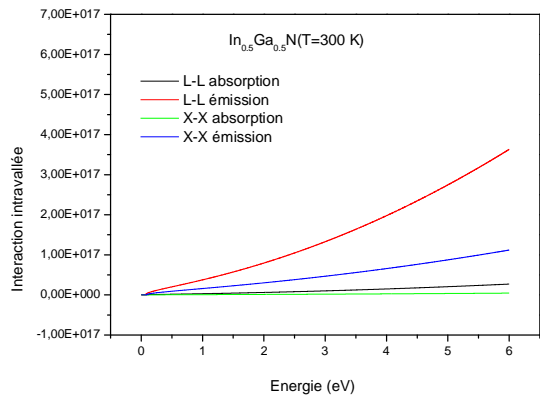
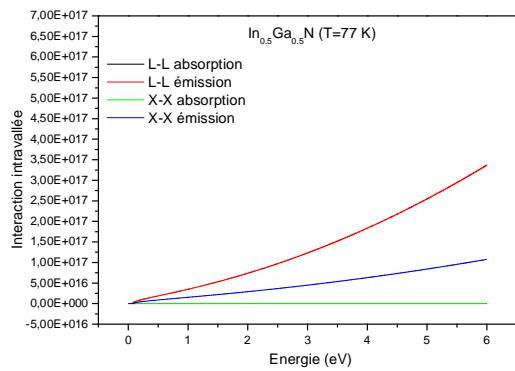
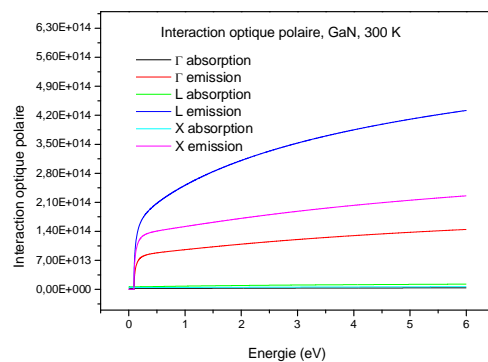
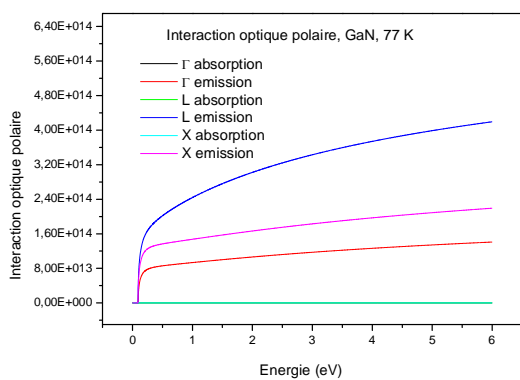


Figure 6.67: les interactions intravallées pour l' $\text{In}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{N}$ à des températures de 77, 300 et 1000K.

Ces interactions aussi dépendent peu de la température par ce qu'elles se passent dans la même vallée.

e. Interaction optiques polaires



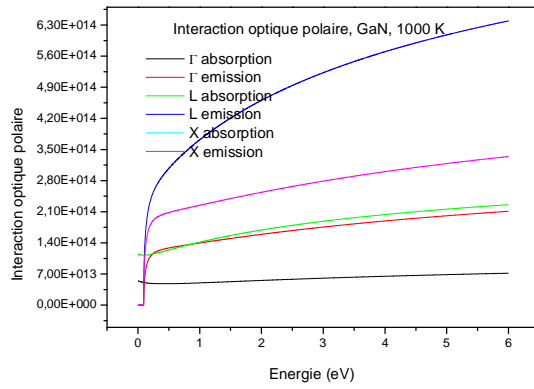


Figure 6.68: les interactions optiques polaires pour GaN à des températures de 77, 300 et 1000 K

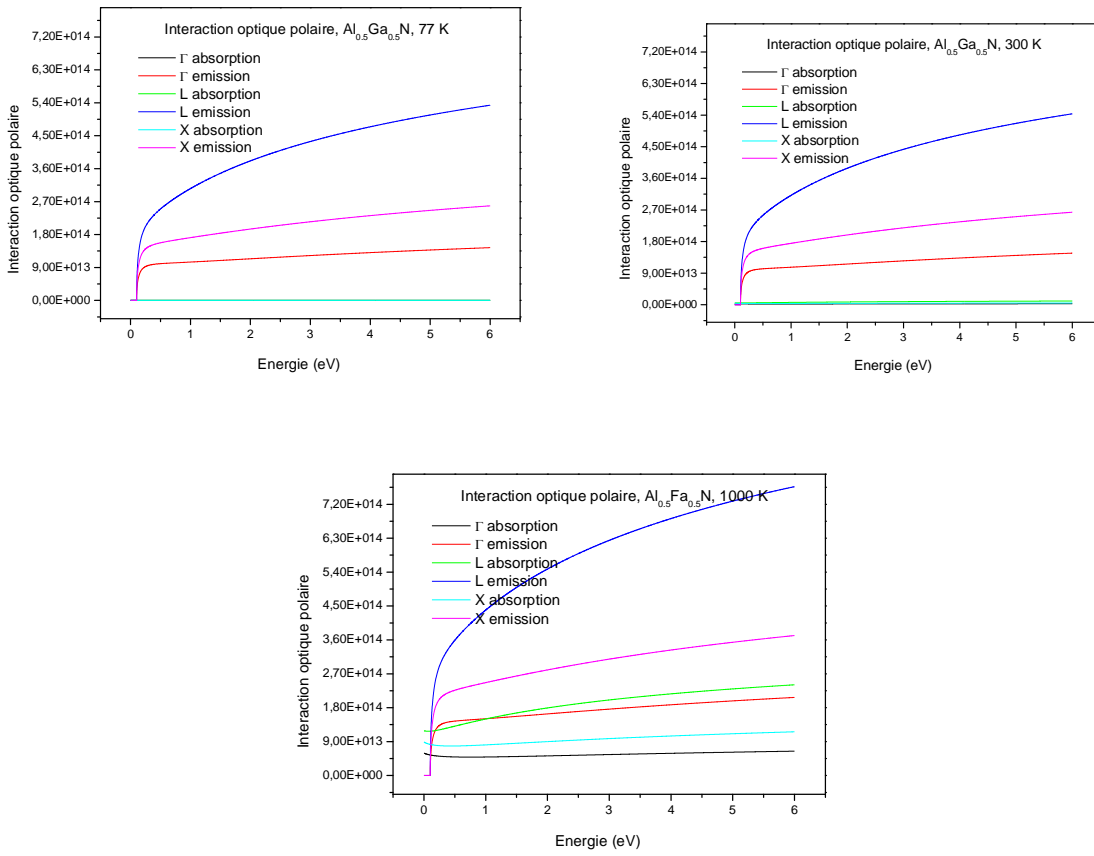


Figure 6.69 : les interactions piézoélectriques pour $Al_{0.5}Ga_{0.5}N$ à des températures de 77, 300 et 1000 K

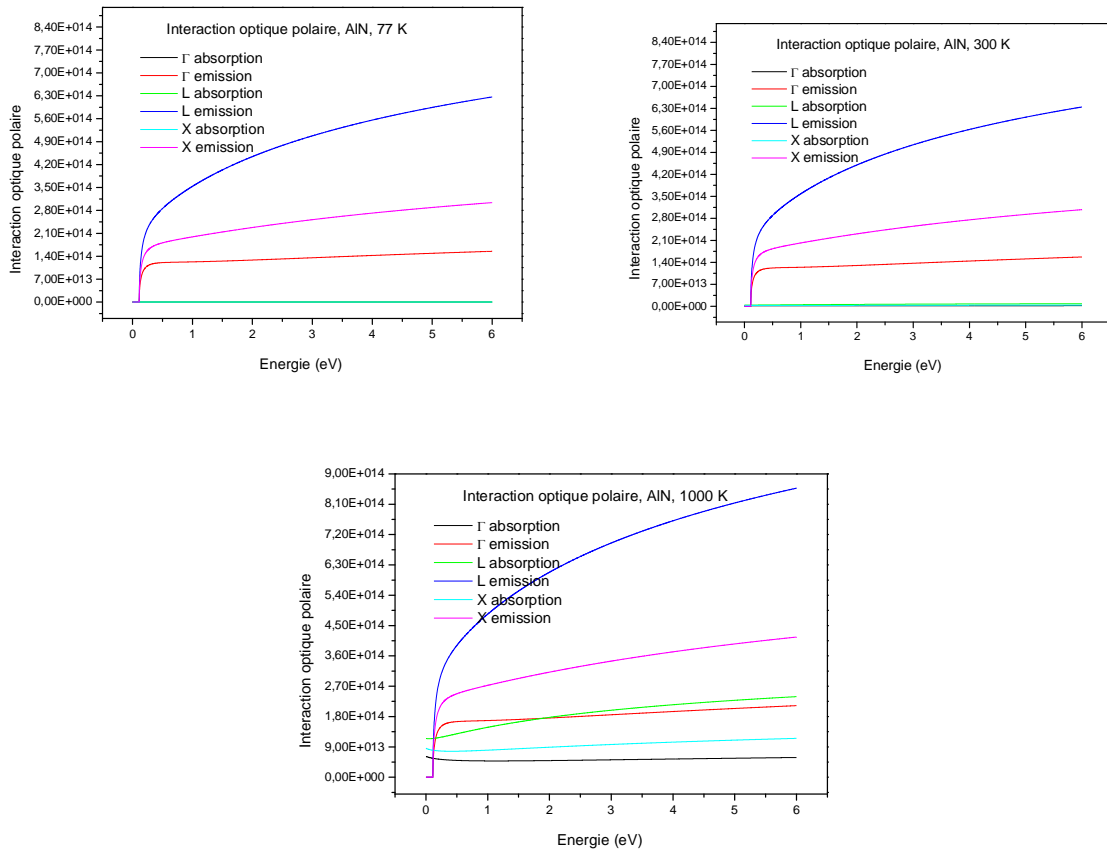
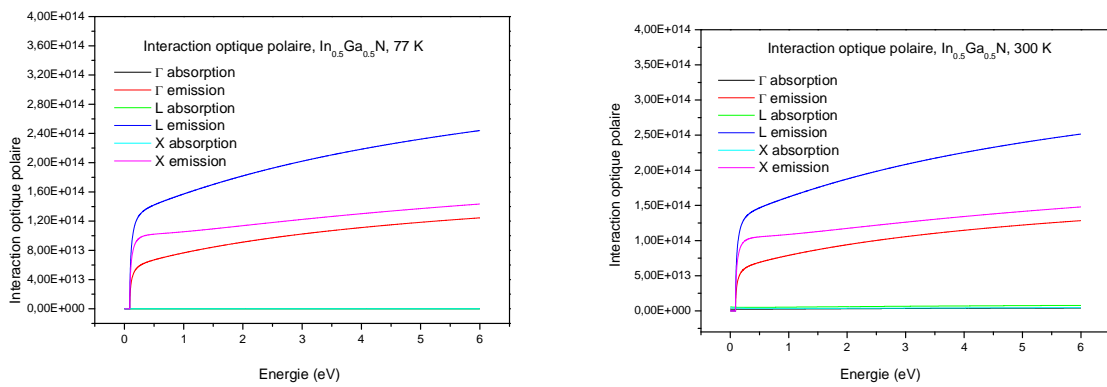


Figure 6.70 : les interactions piézoélectriques pour AlN à des températures de 77, 300 et 1000 K



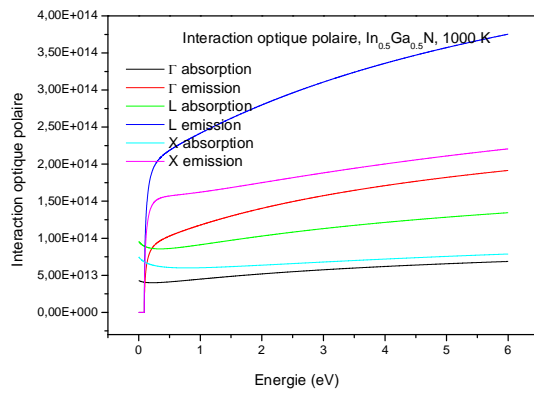


Figure 6.71: les interactions optiques polaires pour l' $\text{In}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{N}$ à des températures de 77, 300 et 1000K

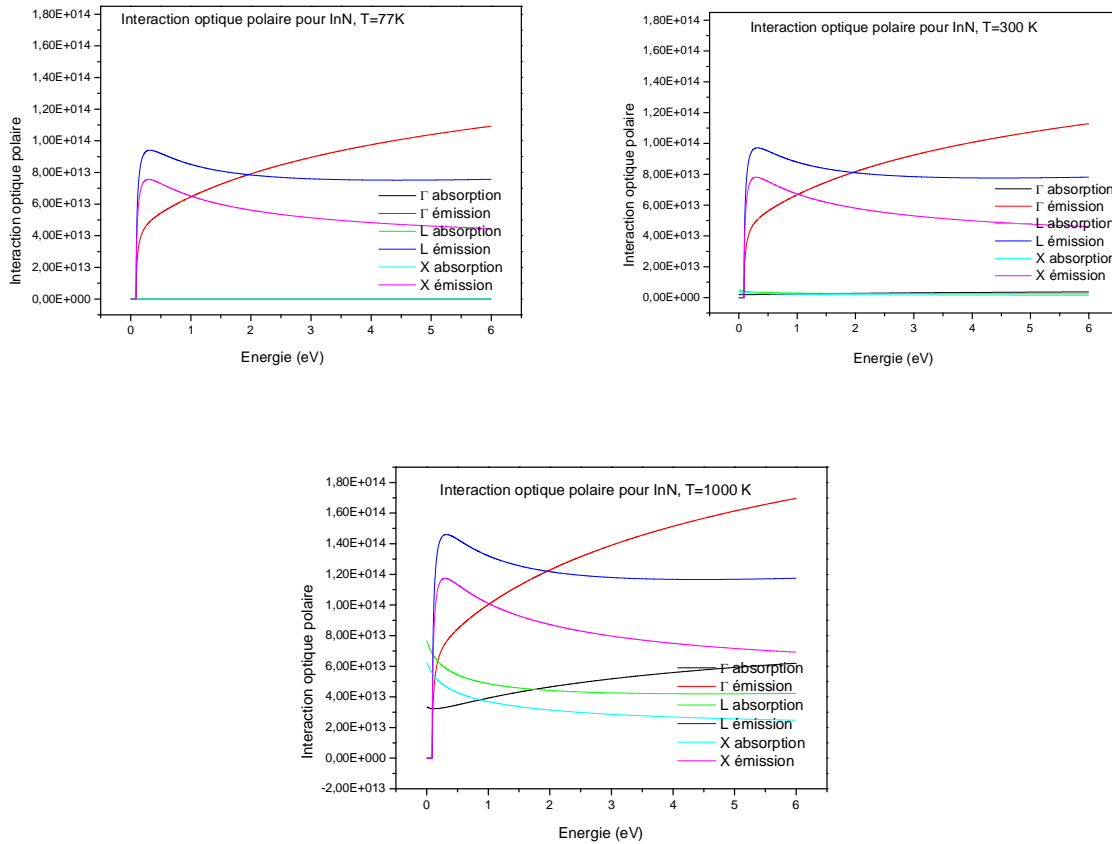


Figure 6.72: les interactions optiques polaires pour l' InN à des températures de 77, 300 et 1000K.

En augmentant la température, il ya une faible augmentation de la probabilité de ces interactions.

L'effet de la température est plus important dans le cas des interactions intervallées d'absorption, interactions acoustiques et piézoélectriques c.a.d les interactions qui dépendent beaucoup de l'énergie de gap.

6.2.4 Vitesse et énergie en fonction du champ électrique

La vitesse des électrons est un des paramètres essentiels pour décrire le comportement d'un composé. Dans notre étude ; nous nous intéressons à la vitesse de dérive des électrons, qui est une vitesse moyenne de parcours. En effet ; les électrons, sous l'influence de l'énergie thermique, vont avoir un parcours aléatoire et par conséquent nul (la somme est nulle) ; mais quand ils sont soumis à l'action d'un champ électrique, leur chemin n'est plus aléatoire et la distance parcourue n'est pas nulle. Après un choc subi par un électron, ce dernier va avoir une composante de vitesse nulle dans le sens parallèle au champ électrique, mais l'effet de l'agitation thermique fait que l'électron reprend de la vitesse. Les électrons se déplacent dans le sens contraire de celui du champ électrique.

Les effets des collisions perturbent le mouvement de l'électron. Einstein [6], dans son modèle, a supposé que chaque atome est constitué d'un oscillateur harmonique vibrant d'une manière indépendante. Ces oscillateurs ont un mouvement sinusoïdal et une énergie quantifiée.

Le modèle d'Einstein est parfait pour les grandes températures, mais il reste insuffisant pour les très faibles températures car il néglige les interactions entre les atomes. Debye a amélioré ce modèle en tenant compte des interactions entre les plus proches voisins.

Le libre parcours moyen est la distance moyenne parcourue par l'électron entre deux collisions successives (la distance traversée par l'électron). Elle s'approche de la distance d'équilibre entre les ions avec lesquels les électrons entrent en collision dans un gaz d'électrons. La vitesse instantanée est donnée par l'équation :

$$v = \frac{l.e}{t} \quad (6.1)$$

Avec l . est le libre parcours moyen et t est temps entre deux collisions.

La mobilité est définie comme le rapport de la vitesse de dérive sur le champ électrique, et elle dépend des collisions :

$$\mu = \frac{V}{E} \quad (6.2)$$

Dans un cristal parfait à $T=0$ K, il y a des directions où l'électron peut se déplacer sans subir de chocs. Lorsque la température augmente, il apparaît l'effet de l'agitation thermique qui va perturber cet ordre. En effet ; les atomes vont se mettre à vibrer autour de leur position

d'équilibre, ce qui va réduire leur libre parcours moyen et par conséquent, la vitesse et la mobilité des électrons libres vont diminuer.

6.2.5 Résultats du transport électrique en régime stationnaire :

Pour les composés ternaires AlGaN et InGaN Zinc Blende, nous entreprenons une étude en fonction du champ électrique de l'énergie, et la vitesse des électrons pour différentes fractions molaires. Nous calculons aussi les variations de la vitesse en fonction de la température.

6.2.5.1 Energie en fonction du champ électrique :

Les énergies en fonction du champ électrique dans les alliages AlGaN et InGaN, pour différentes fractions molaires sont illustrées par les figures 6.73 et 6.74 respectivement.

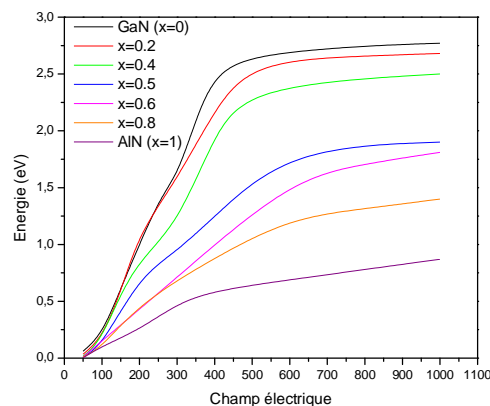


Figure 6.73: L'énergie dans AlGaN, en fonction du champ électrique pour différentes fractions molaires.

Si nous examinons la moyenne d'énergie d'électrons en fonction du champ électrique appliqué, nous voyons qu'il y a une augmentation soudaine, à environ 100 kV / cm dans le cas de GaN. Initialement, la moyenne d'énergie des électrons reste faible, à peine plus élevée que l'énergie thermique, $3/2 K_B T$ (K_B désigne la constante de Boltzmann).

Afin de comprendre les raisons de cette augmentation, nous notons que le mécanisme dominant de perte d'énergie pour un grand nombre de composés III-V, y compris les nitrures est dû aux interactions des phonons optiques polaires. Lorsque le champ électrique appliqué est inférieur à 100 kV/cm, toute l'énergie que les électrons gagnent de l'application de champ électrique est perdue par interactions des phonons optiques polaires. Les autres mécanismes de dispersion : les interactions des impuretés ionisées, les interactions piézoélectriques,

acoustiques et potentielles de diffusion de déformation, ne suppriment pas l'énergie de l'électron, c'est-à-dire, ils sont des mécanismes de diffusion élastique. Au-delà d'un certain champ électrique critique, le mécanisme des interactions des phonons optiques polaires ne peut plus supprimer l'ensemble de l'énergie tirée de l'application de champ électrique. D'autres mécanismes de diffusion commencent à jouer un rôle. La moyenne d'énergie d'électrons augmente jusqu'à ce que la dispersion intervallée commence et un équilibre est rétabli. Comme le champ électrique appliqué est augmentée au-delà de 100 kV/cm, la moyenne d'énergie des électrons augmente jusqu'à ce qu'une fraction des électrons ont acquis assez d'énergie en vue d'un transfert dans la vallée la plus haute (c'est-à-dire une énergie qui correspond à l'énergie intervallée entre la vallée Γ et X).

En ajoutant des fractions molaire de l'Al, l'énergie de gap augmente, donc il faut appliquer un champ électrique plus fort, par conséquent le champ électrique critique (pour lequel l'énergie commence à augmenter) devient plus grand, il est de 300 kV/cm pour l'AlN. Par ailleurs, l'énergie intervallée diminue en augmentant la fraction molaire de l'Al, ce qui fait que l'énergie moyenne diminue, elle ne dépasse pas 1 eV dans le cas de l'AlN.

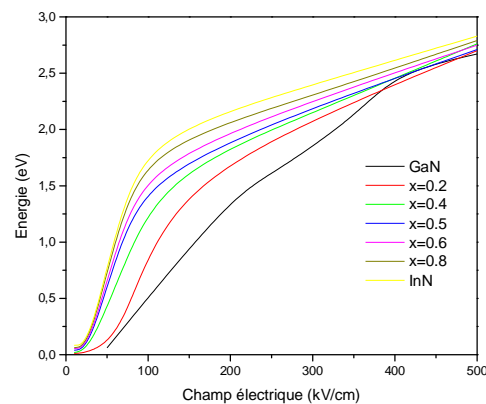


Figure 6.74: L'énergie dans InGaN, en fonction du champ électrique pour différentes fractions molaires.

En ajoutant des fractions molaire de l'In, l'énergie de gap diminue, donc le champ électrique critique (pour lequel l'énergie commence à augmenter) est plus petit dans ce cas, il est de 50 kV/cm pour l'InN. D'autre part, l'énergie intervallée en augmentant la fraction molaire de l'In, devient un peu plus grande et donc l'énergie moyenne augmente légèrement, elle est autour de 2.85 eV pour l'InN.

En augmentant la fraction molaire d'In dans l'alliage InGaN, l'énergie des électrons devient plus importante pour des champs électriques relativement petits par rapport à l'alliage

AlGa_xN, il suffit donc d'une petite excitation pour que l'électron ait une énergie importante, ce qui est un point important dans le domaine de l'optoélectronique.

6.2.5.2 Vitesse en fonction du champ électrique :

Les vitesses en fonction du champ électrique dans les alliages AlGa_xN et InGa_xN, pour une température 300 K (la température ambiante) et une concentration d'électrons de 10^{17} cm^{-3} pour différentes fractions molaires sont illustrées par les figures 6.75 et 6.76 respectivement.

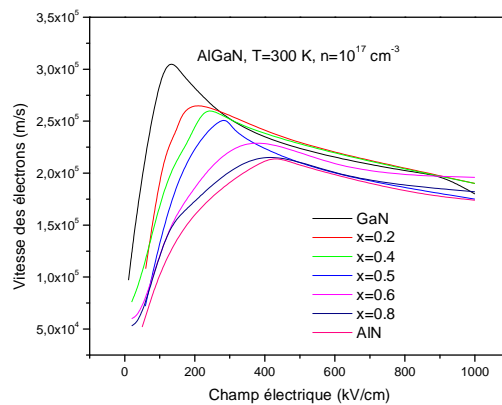


Figure 6.75 : Vitesse des électrons dans AlGa_xN, en fonction du champ électrique pour différentes fractions molaires (x=0, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8, 1) à une température de 300K.

L'augmentation la fraction molaire de l'aluminium dans l' $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ donne une croissance de l'énergie du gap, de l'énergie qui sépare les vallées Γ et L, et de la masse effective. La croissance de la masse de l'électron dans la vallée centrale, en augmentant la fraction molaire (x), entraîne une décroissance de la mobilité et une diminution de la vitesse de dérive des électrons. Quand la fraction molaire augmente, l'énergie qui sépare les vallées Γ et L augmente, il y a alors une augmentation du champ électrique critique pour lequel la vitesse atteint son pic. L'augmentation de cette énergie entraîne aussi une réduction du taux de dispersion des électrons, et donc une décroissance de la population dans les vallées supérieures et des grandes vitesses pour les grands champs électriques.

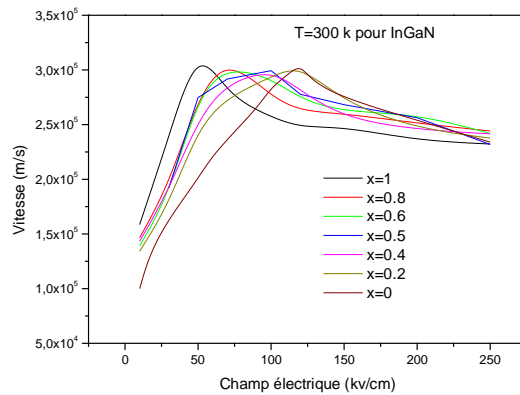


Figure 6.76 : La vitesse des électrons dans InGaN, en fonction du champ électrique pour différentes fractions molaires ($x=0, 0.2, 0.4, 0.5, 0.6, 0.8, 1$) et pour une température de 300K.

La vitesse de dérive pour InGaN est tracée en fonction du champ électrique et pour différentes fractions molaires de l'Indium. Avec l'augmentation de la fraction de l'indium, la vitesse augmente d'abord puis diminue progressivement, cela peut s'expliquer comme suit :

Avec l'augmentation de la fraction molaire de l'In ; l'énergie séparant les vallées Γ et L, et la masse effective des électrons dans la vallée centrale diminuent, tandis que la masse effective des électrons dans les vallées supérieures augmente. La diminution de la masse effective des électrons dans la vallée centrale, entraîne une augmentation de la vitesse de ces électrons. Toutefois, en raison de la diminution de l'énergie séparant les vallées Γ et L et l'augmentation des collisions intervalles qui est due à l'augmentation de la population dans les vallées supérieures, on a une baisse de la vitesse de dérive.

De ces deux processus, l'augmentation de la vitesse de dérive est due à la réduction de la masse effective dans la vallée centrale pour des fractions molaires de l'In jusqu'à 0.8 ($x \leq 0.8$). Pour une fraction molaire supérieure ($x > 0.8$), la réduction de la vitesse de dérive est due à la forte densité de population dans les vallées supérieures. Il est important de signaler que la population dans la haute vallée pour un champ électrique de 500KV/cm, augmente de 58% dans GaN, à 85.7% dans InN. Pour InGaN, la vitesse de saturation dépend faiblement du dopage.

En conclusion, la vitesse des électrons est plus importante en augmentant la fraction molaire d'In dans l'alliage InGaN, mais les électrons dans cet alliage arrivent à la vitesse de saturation pour des champs électriques relativement petits ($E \leq 500$ kV/cm) . Dans l'alliage AlGaIn, la vitesse des électrons est plus petite par rapport à celle dans l'alliage InGaN mais dans ce cas les électrons atteignent la vitesse de saturation pour des champs électriques beaucoup plus

élevés ($E \geq 1000 \text{ kV/cm}$). Ainsi, l'alliage InGaN est plus efficace pour des petites excitations et l'alliage AlGaN pour les grandes excitations.

6.2.5.2.1 Vitesse des électrons en fonction du champ électrique pour différentes températures :

Quand on porte le cristal à des températures très basses, l'énergie de l'agitation thermique des électrons ($k_B T$) devient nettement plus petite que l'énergie du phonon optique polaire ($\hbar \omega_0 = 91.2 \text{ meV}$). A $T=77\text{K}$ qui est la température de l'azote liquide, l'énergie de l'agitation thermique ne dépasse pas 9.96 meV . Pour les électrons de basses énergies, les interactions dominantes se produisent avec les phonons acoustiques ou par absorption d'un phonon optique. Dans les deux cas, la densité des phonons est très réduite, les probabilités d'interactions sont alors très faibles. Les vitesses des électrons pour différentes températures sont données par les figures 6.77 à 6.80 pour AlGaN et 6.81 à 6.83 pour InGaN.

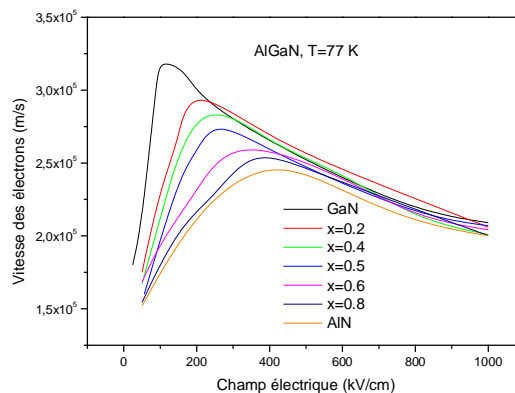


Figure 6.77 : Vitesse des électrons dans AlGaN, en fonction du champ électrique pour différentes fraction molaires (x=0, 0.2, 0.4, 0.5, 0.6, 0.8, 1) à une température de 77 K.

On peut diviser la gamme du champ électrique appliqué (Figure 6.48) en trois :

- Pour les faibles champs électriques ($E < 50 \text{ kV/cm}$) : l'énergie moyenne des électrons est inférieure à $\hbar \omega_0$. Les interactions ont lieu sur les phonons acoustiques, piézoélectriques ou optiques avec une probabilité très réduite, ou bien sur les impuretés. La mobilité a une relation anti-proportionnelle avec N_D .
- La région des champs moyens ($50 \text{ kV/cm} < E < 250 \text{ kV/cm}$) : l'énergie moyenne est supérieure à $\hbar \omega_0$ et inférieure à ΔE_{TL} , l'interaction optique polaire est possible. La mobilité est de même ordre que celle à une température ordinaire.

- La région des champs élevés ($E > 250\text{kV/cm}$) : le transfert dans les vallées supérieures est possible, et la vitesse diminue quand le champ augmente.

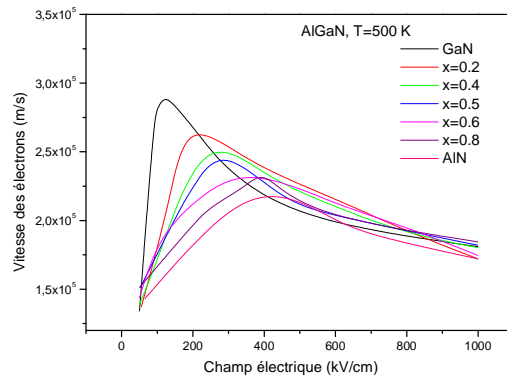


Figure 6.78 : La vitesse des électrons dans AlGaIn, en fonction du champ électrique pour différentes fraction molaires ($x=0, 0.2, 0.4, 0.5, 0.6, 0.8, 1$) et pour une température de 500K.

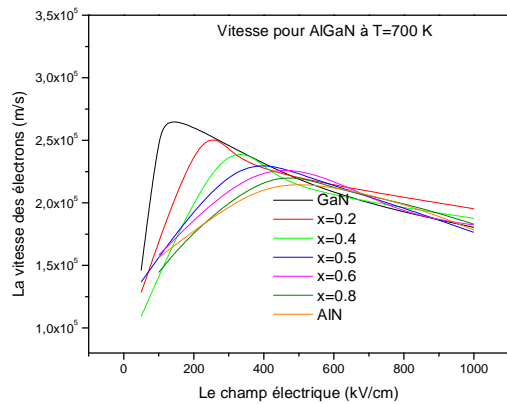


Figure 6.79 : La vitesse des électrons dans AlGaIn, en fonction du champ électrique pour différentes fraction molaires ($x=0, 0.2, 0.4, 0.5, 0.6, 0.8, 1$) et pour une température de 700K.

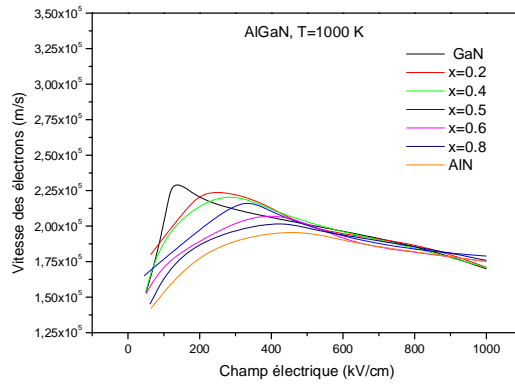


Figure 6.80 : la vitesse des électrons dans AlGaIn, en fonction du champ électrique pour différentes fraction molaires ($x=0, 0.2, 0.4, 0.5, 0.6, 0.8, 1$) à une température de 1000K.

La température maximale qu'on peut appliquer dans le cas de l'InGaIn ne dépasse pas 700 °K. En effet, l'InN à un gap relativement petit par rapport aux autres nitrures, et donc même l'alliage InGaIn présente un petit gap (L'énergie de gap de l'InN est de 1.89 eV et celle du GaN est de 3.39 eV, et donc $1.89 \leq E_{\text{InGaIn}} \leq 3.39$) ; d'autre part, nous avons :

$$E_g = E_{g(T=0)} - \alpha T^2 / (T + \beta) \quad (6.3)$$

(Avec : α et β sont les constantes de Varshni voir tableau 2.1 paragraphe 2.3.5)

En augmentant la température, le rapport $A = \alpha T^2 / (T + \beta)$ augmente, ce qui implique que la différence $E_g(T=0) - A$ diminue.

Puisque le gap de l'InN est petit, en augmentant la température, il devient très petit. Pour cette raison, dans le cas de l'InGaIn, on ne peut pas augmenter la température au delà de 700 K.

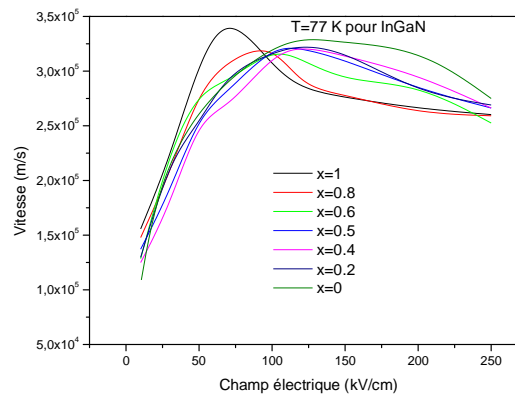


Figure 6.81 : La vitesse des électrons dans InGaIn, en fonction du champ électrique pour différentes fraction molaires ($x=0, 0.2, 0.4, 0.5, 0.6, 0.8, 1$) et pour une température de 77K.

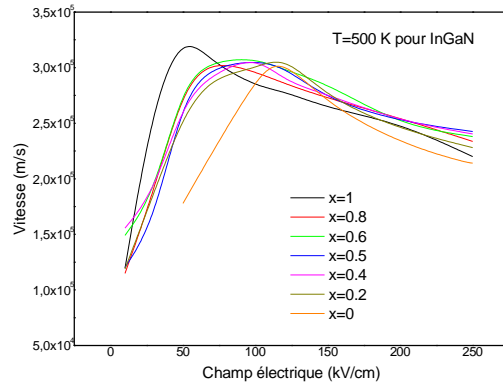


Figure 6.82 : La vitesse des électrons dans InGaN, en fonction du champ électrique pour différentes fraction molaires ($x=0, 0.2, 0.4, 0.5, 0.6, 0.8, 1$) et pour une température de 500K.

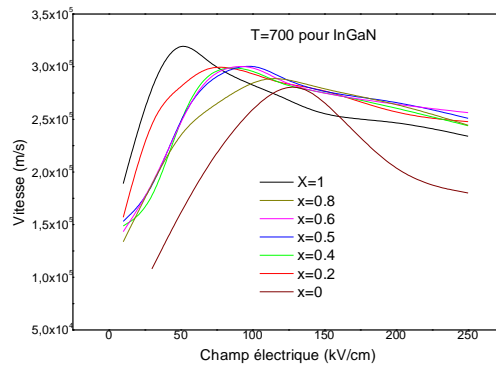


Figure 6.83 : La vitesse des électrons dans InGaN, en fonction du champ électrique pour différentes fraction molaires ($x=0, 0.2, 0.4, 0.5, 0.6, 0.8, 1$) et pour une température de 1000K.

Nous fixons maintenant la fraction molaire x dans les deux alliages et nous faisons varier la température, nous obtenons les résultats illustrés par les figures 6.84 à 6.88 pour AlGaIn et 6.83 à 6.92 pour InGaIn.

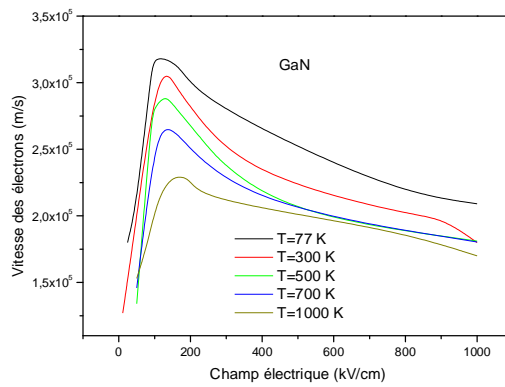


Figure 6.84 : Vitesse des électrons dans GaN, en fonction du champ électrique pour une concentration d'électrons 10^{17} cm^{-3} et pour différentes températures.

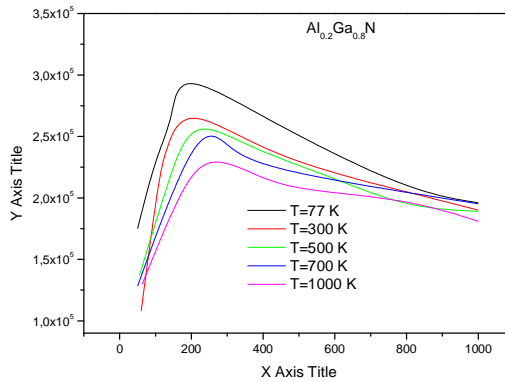


Figure 6.85 : La vitesse des électrons dans $\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}$ ($x = 0.2$), en fonction du champ électrique pour une concentration d'électrons 10^{17} cm^{-3} et pour différentes températures.

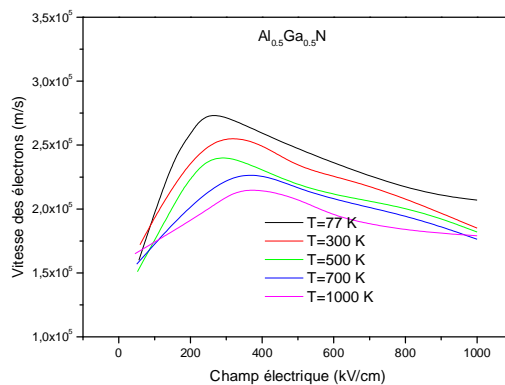


Figure 6.86 : La vitesse des électrons dans $\text{Al}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{N}$ ($x = 0.5$), en fonction du champ électrique pour une concentration d'électrons 10^{17} cm^{-3} et pour différentes températures.

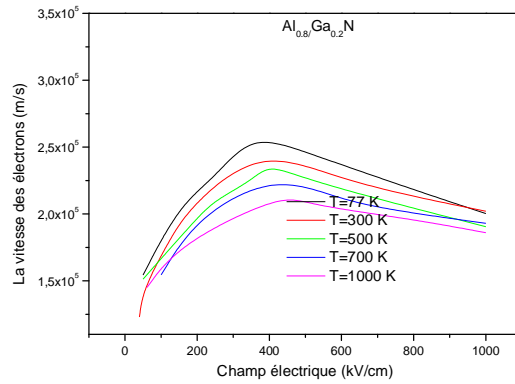


Figure 6.87 : Vitesse des électrons dans $\text{Al}_{0.8}\text{Ga}_{0.8}\text{N}$ ($x = 0.8$), en fonction du champ électrique pour une concentration d'électrons 10^{17}cm^{-3} et pour différentes températures.

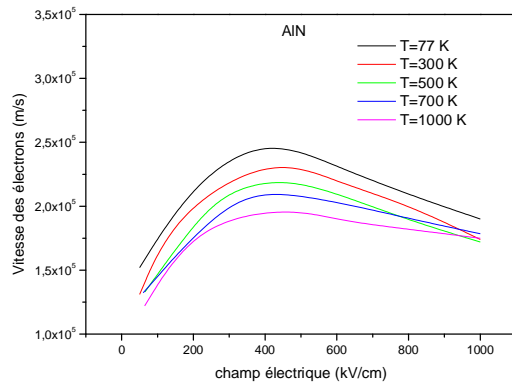


Figure 6.88 : Vitesse des électrons dans AlN , en fonction du champ électrique pour une concentration d'électrons 10^{17}cm^{-3} et pour différentes températures.

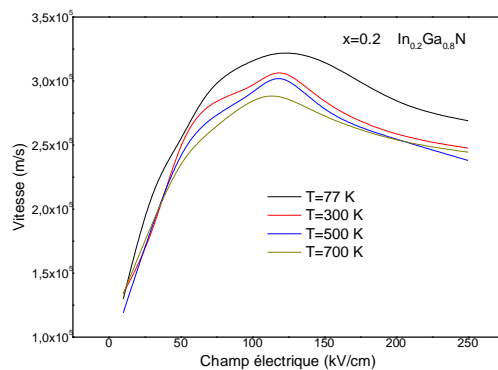


Figure 6.89: La vitesse pour $\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}$ ($x=0.2$), en fonction du champ électrique pour une concentration d'électrons 10^{17}cm^{-3} et pour différentes températures

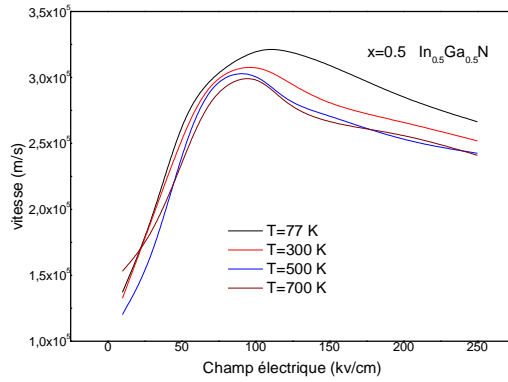


Figure 6.90: La vitesse pour $\text{In}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{N}$ ($x=0.5$), en fonction du champ électrique pour une concentration d'électrons 10^{17}cm^{-3} et pour différentes températures

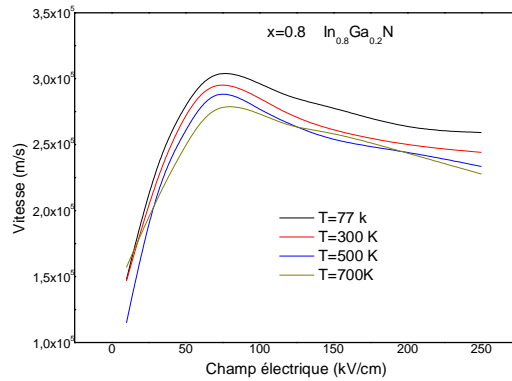


Figure 6.91: La vitesse pour $\text{In}_{0.8}\text{Ga}_{0.2}\text{N}$ ($x=0.8$), en fonction du champ électrique pour une concentration d'électrons 10^{17}cm^{-3} et pour différentes températures.

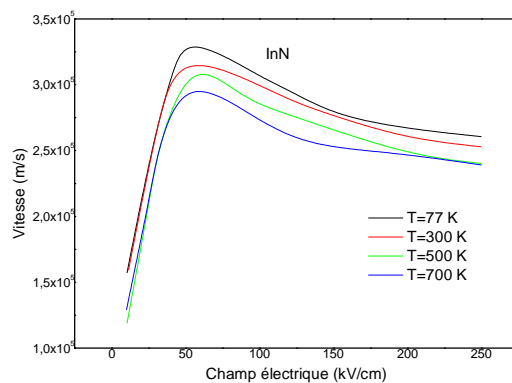


Figure 6.92: La vitesse pour InN ($x=1$), en fonction du champ électrique pour une concentration d'électrons 10^{17}cm^{-3} et pour différentes températures.

La vitesse garde pratiquement la même allure. Les plus grandes vitesses sont atteintes pour les faibles températures ; en effet, la vitesse est maximale pour la température de 77K qui correspond à la température d'ébullition de l'azote.

La variation de la vitesse en fonction de la température se traduit par le fait que l'augmentation de la température permet un gain en énergie cinétique pour les électrons ; ils se déplacent alors plus et entrent en collisions avec d'autres atomes en leur transférant leurs énergies. Cette augmentation de la température fait croître l'effet de l'agitation thermique subi par les atomes et augmente les possibilités de chocs entre eux. Cela va entraîner une diminution de la vitesse des électrons libres.

La dispersion des électrons est dominée par les collisions des phonons acoustiques, impuretés ionisés, et l'absorption des phonons optiques polaires qui sont tous supprimés à des températures très basses, conduisant à l'amélioration de la mobilité et de la vitesse. À bas champ électrique et pour des températures allant jusqu'à 300K, il n'y a que la dispersion des impuretés et donc il y a une augmentation de la vitesse. À des températures élevées, la bosse disparaît en raison de la dominance des collisions des phonons optiques polaires avec une réduction des collisions des impuretés. Pour les grands champs, le transport est dominé par les collisions des phonons optiques polaires qui ont une faible dépendance sur la température.

La vitesse des électrons dans de l'alliage InGaN augmente en ajoutant l'indium. Cette vitesse est plus importante pour les faibles températures, mais dans cet alliage la température ne peut pas dépasser 700 K par contre dans l'alliage AlGaIn, elle peut aller au-delà de 1000 K. Donc pour les faibles températures l'alliage InGaIn est plus efficace et pour les grandes températures, c'est l'alliage AlGaIn qui devient plus intéressant.

6.2.5.2.2 La vitesse en fonction du champ électrique pour différentes concentration d'électrons

Les vitesses en fonction du champ électrique dans les alliages AlGaIn et InGaIn, pour une température 300 k (la température ambiante) et des concentrations d'électrons de 10^{16} cm^{-3} et 10^{18} cm^{-3} pour différentes fractions molaires sont illustrées par les figures 6.93, 6.94 pour AlGaIn et 6.95 et 6.96 pour InGaIn.

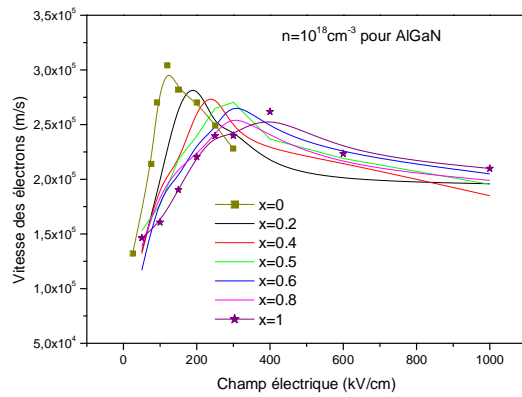


Figure 6.93: La vitesse des électrons dans AlGaN, en fonction du champ électrique pour différentes fraction molaires ($x=0, 0.2, 0.4, 0.5, 0.6, 0.8, 1$) et pour un dopage de 10^{16} cm^{-3}

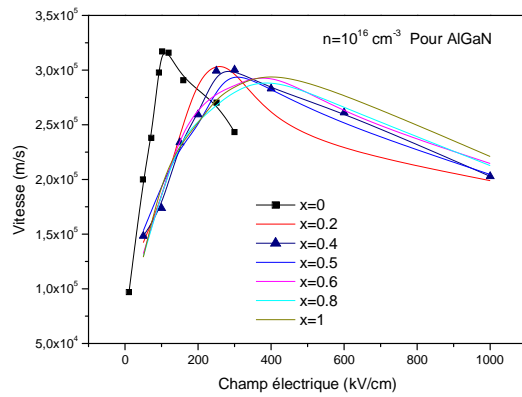


Figure 6.94: La vitesse des électrons dans AlGaN, en fonction du champ électrique pour différentes fraction molaires ($x=0, 0.2, 0.4, 0.5, 0.6, 0.8, 1$) et pour un dopage de 10^{18} cm^{-3}

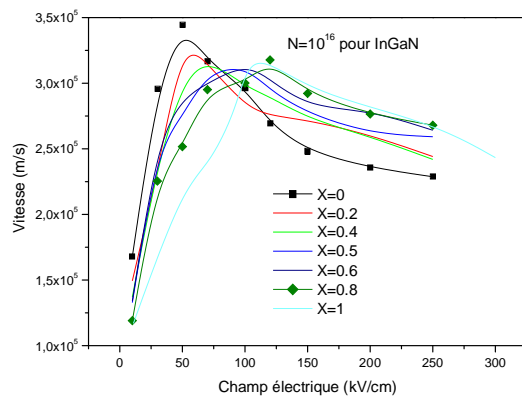


Figure 6.95: La vitesse des électrons dans InGaN, en fonction du champ électrique pour différentes fraction molaires ($x=0, 0.2, 0.4, 0.5, 0.6, 0.8, 1$) et pour un dopage de 10^{16} cm^{-3}

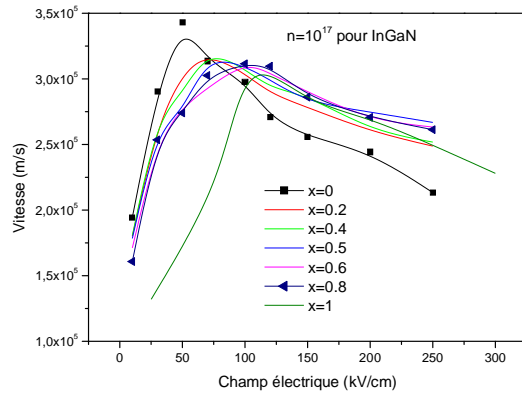


Figure 6.96: La vitesse des électrons dans InGaN, en fonction du champ électrique pour différentes fraction molaires ($x=0, 0.2, 0.4, 0.5, 0.6, 0.8, 1$) et pour un dopage de 10^{18} cm^{-3}

Nous fixons maintenant la fraction molaire x dans les alliages $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$ et $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$, et nous faisons varier le dopage des électrons, nous obtenons les résultats illustrés par les figures 6.97 à 6.99 pour AlGaN et 6.100 à 6.101 pour InGaN.

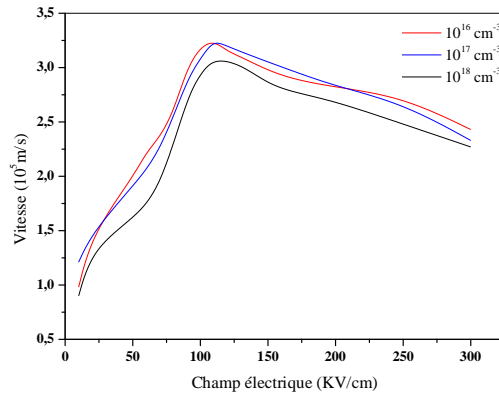


Figure 6.97: La vitesse du GaN en fonction du champ électrique pour une température de 300 K et une concentrationnaire d'électrons de $10^{16}, 10^{17}$ et 10^{18} cm^{-3} .

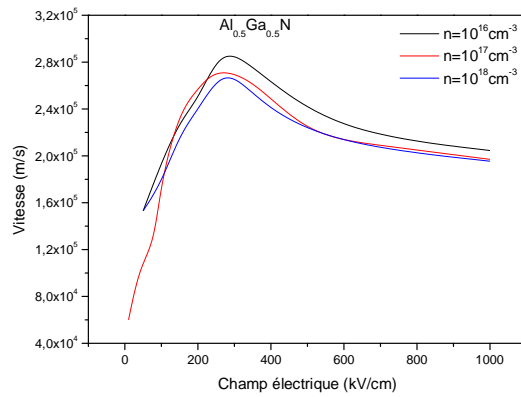


Figure 6.98: La vitesse pour $\text{Al}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{N}$ ($x=0.5$), en fonction du champ électrique pour une température de 300 K et une concentrationnaire d'électrons de 10^{16} , 10^{17} , 10^{18} cm^{-3} .

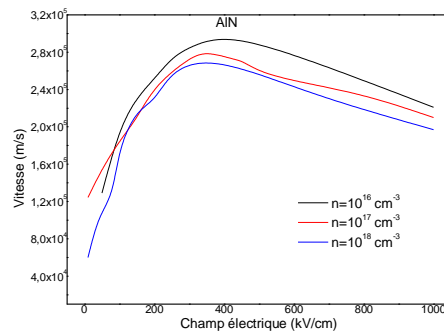


Figure 6.99 La vitesse pour AlN ($x=1$), en fonction du champ électrique pour une température de 300 K et une concentrationnaire d'électrons de 10^{16} , 10^{17} , 10^{18} cm^{-3} .

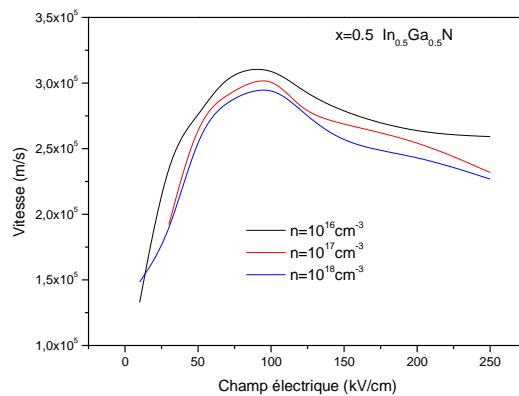


Figure 6.100: La vitesse pour $\text{In}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{N}$ ($x=0.5$), en fonction du champ électrique pour une température de 300 K et une concentrationnaire d'électrons de 10^{16} , 10^{17} , 10^{18} cm^{-3} .

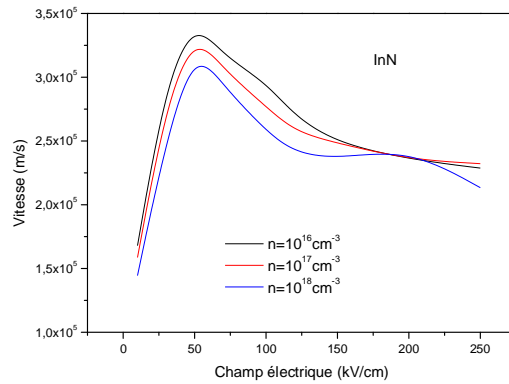


Figure 6.101: La vitesse pour InN ($x=1$), en fonction du champ électrique pour une température de 300 K et une concentrationnaire d'électrons de 10^{16} , 10^{17} , 10^{18} cm^{-3}

L'allure de la vitesse pour les différents dopages est la même pour toutes les concentrations (pour cette raison on s'est limité à ces concentrations seulement), mais les valeurs de la vitesse diminuent, en général, quand la concentration augmente. Ce phénomène peut être expliqué par le fait que l'augmentation du dopage va augmenter les possibilités de collisions entre les électrons ce qui va diminuer leurs vitesses. Aussi, nous remarquons une diminution du pic de la vitesse et une légère augmentation du champ de seuil. L'effet du dopage se fait ressentir à faibles champs ; mais quand le champ est très fort, les courbes ont tendance à se rejoindre. En effet, quand le champ électrique atteint des valeurs très grandes, les porteurs s'échauffent et subissent de moins en moins l'influence des centres ionisés. La vitesse de saturation montre seulement une faible dépendance sur le dopage, reflétant la faible dépendance des mécanismes de collisions pour les grands champs sur le dopage.

À la différence avec AlGaIn, dans l'InGaIn, la collision des phonons optiques polaires est le mécanisme dominant indépendamment du dopage et de la fraction molaire. La collision des phonons acoustiques dépend faiblement du dopage et de la fraction molaire. Cependant, la collision des impuretés ionisées diminue avec la fraction molaire de l'In et dépend faiblement du dopage.

6.2.6 Résultats du transport électrique en régime transitoire :

Le régime stationnaire est atteint après que les électrons aient subi plusieurs interactions, et la distance qu'ils ont parcourue est plus grande que le libre parcours moyen. Pour cela, il est nécessaire d'étudier le comportement de ces électrons, quand ils sont brusquement soumis à

l'effet du champ électrique, par rapport au temps. Cette étude se fait dans le régime transitoire.

Au début, il y a peu d'interactions et l'accélération dans le champ est effective. La vitesse est plus importante dans le régime transitoire par rapport au régime stationnaire.

6.2.6.1 Vitesse en fonction du temps :

Pour mettre en évidence les effets de transport non stationnaire qui peuvent apparaître dans les deux alliages AlGaIn et InGaIn, nous étudions le comportement d'un paquet d'électrons soumis à des variations brutales du champ électrique ; autrement dit, nous appliquons des échelons de champ.

Après un temps de dérive de 1 ps dans un champ de 10 kV/cm, afin d'assurer un comportement stabilisé au paquet, les électrons subissent un échelon de champ de nature variable. Les résultats sont illustrés par les figures 6.102 à 6.106 pour l'alliage AlGaIn, et par les figures 6.107 à 6.110 pour l'alliage InGaIn.

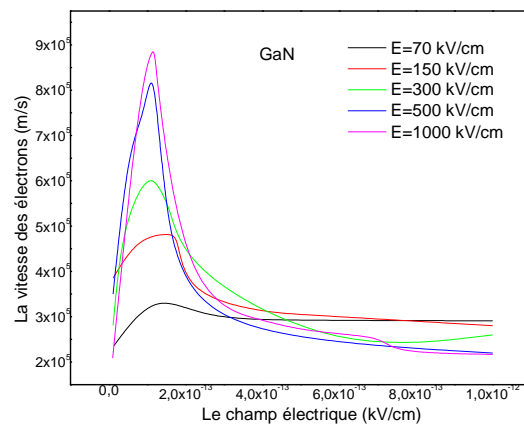


Figure 6.102 : Vitesse des électrons en fonction du temps, pour différents échelons de champs dans le cas de GaN.

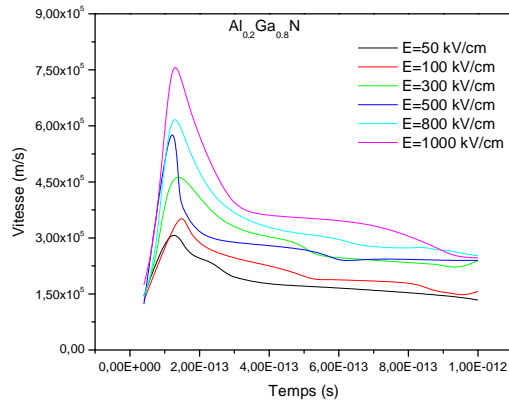


Figure 6.103: Vitesse des électrons en fonction du temps, pour différents échelons de champs dans le cas de l' $Al_{0.2}Ga_{0.8}N$.

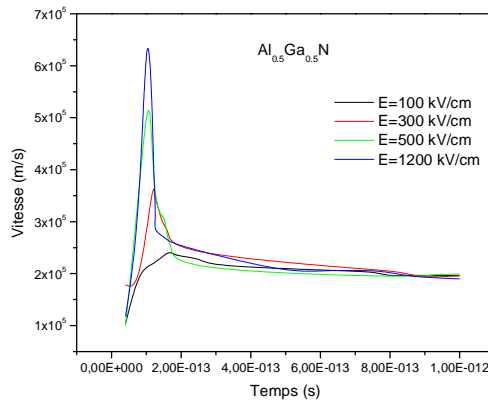


Figure 6.104 : Vitesse des électrons en fonction du temps, pour différents échelons de champs dans le cas de l' $Al_{0.5}Ga_{0.5}N$.

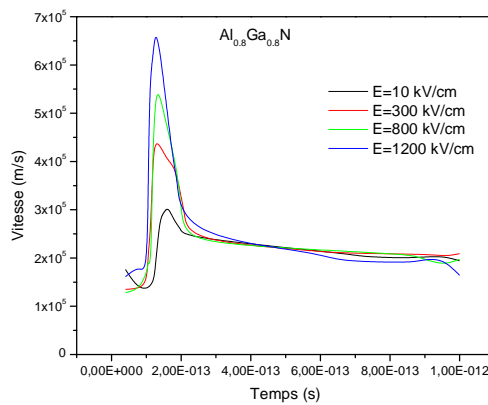


Figure 6.105: Vitesse des électrons en fonction du temps, pour différents échelons de champs dans le cas de l' $Al_{0.8}Ga_{0.2}N$.

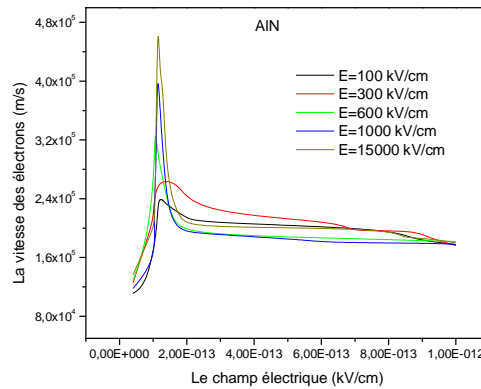


Figure 6.106: Vitesse des électrons en fonction du temps, pour différents échelons de champs dans le cas de l'AlN.

Pour un champ électrique inférieur au champ critique (<110 kV/cm), l'effet de survitesse n'est pas observable dans l'alliage AlGaN quelque soit la fraction molaire de l'Al.

- A partir de 150 kV/cm jusqu'à 400 kV/cm, les vitesses commencent à présenter un pic franc dans le cas de l'alliage AlGaN pour toute les fractions molaires de l'Al. Dans le cas de GaN, ce pic, pour le champ 150kV/cm, est de 5×10^7 cm/s pour un temps de 0.1ps. Pour le champ de 300kV/cm, la vitesse maximale est de 6×10^7 m/s pour un temps de 0.1ps. Pour ces deux champs, le pic de vitesse est atteint pour le même temps.

En augmentant la fraction molaire de l'Al, le champ critique, pour lequel la vitesse des électrons arrive à son maximum, devient de plus en plus grand, ce qui fait qu'en augmentant la fraction molaire de l'Al, le phénomène de survitesse (ou les pics de vitesses), commencent à apparaitre pour des champs de plus en plus grand. Pour AlN, ce phénomène commence pour des champs supérieurs à 600 kV/cm.

- Pour 600 kV/cm, AlN cubique présente une vitesse maximale de 3.2×10^7 cm/s pour un temps de 0.05ps. Le temps de réponse dans ce cas est très petit. Après ce temps, la vitesse va chuter jusqu'à 2×10^7 cm/s pour un temps de 0.6ps

Au début ; le gain d'énergie acquis par le porteur libre dans la vallée Γ , va lui donner une accélération jusqu'à atteindre la vitesse maximale. Dans cette vallée, l'électron a une masse faible et une mobilité élevée. Mais quand l'énergie de l'électron atteint l'énergie de transfert vers les autres vallées, sa masse augmente (et il sera plus lourd), sa mobilité va diminuer et il sera bloqué par les autres porteurs existants déjà dans cette vallée. Sa vitesse va alors diminuer pour tendre vers une valeur stationnaire.

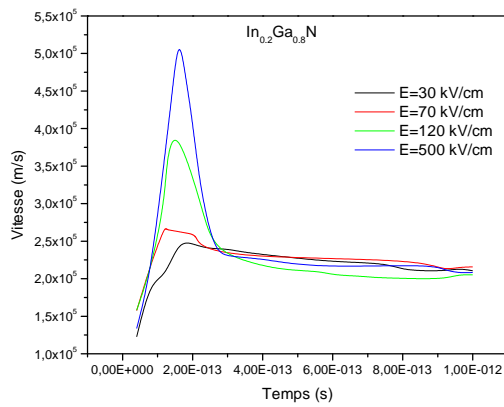


Figure 6.107 : Vitesse des électrons en fonction du temps, pour différents échelons de champs dans le cas de l' $\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{N}$.

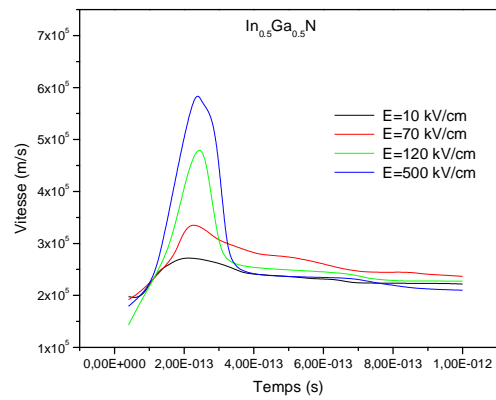


Figure 6.108 : Vitesse des électrons en fonction du temps, pour différents échelons de champs dans le cas de l' $\text{In}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{N}$.

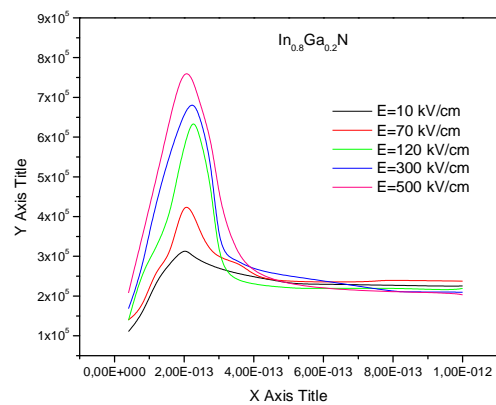


Figure 6.109 : Vitesse des électrons en fonction du temps, pour différents échelons de champs dans le cas de l' $\text{In}_{0.8}\text{Ga}_{0.2}\text{N}$.

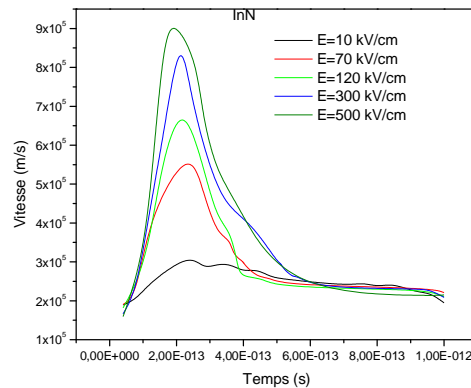


Figure 6.110 : Vitesse des électrons en fonction du temps, pour différents échelons de champs dans le cas de l’InN.

En augmentant la fraction molaire de l’In dans l’alliage InGaN, le champ critique, pour lequel la vitesse des électrons arrive à son maximum, devient de plus en plus petite, ce qui fait qu’en augmentant la fraction molaire de l’In, le phénomène de survitesse, commence à apparaitre pour des champs de plus en plus petit. Pour InN, ce phénomène commence pour des champs supérieurs à 70 kV/cm.

D’après ces figures, nous pouvons faire quatre constatations :

1. Les pics de survitesse apparaissent à partir de 70 kV/cm.
2. Les pics de survitesse deviennent de plus en plus importants lorsque le champ électrique augmente.
3. Les pics se déplacent vers les temps faibles quand le champ augmente.
4. Le régime stationnaire est atteint plus vite pour les grands champs.

Les survitesses dans l’alliage InGaN sont très grandes et augmentent avec la fraction molaire In. Par contre, cette vitesse est relativement plus petite dans l’alliage AlGaN et diminue en ajoutant l’Al. Le pic de vitesse dans ce cas est très pointu par rapport à l’alliage InGaN donc la durée de vie des électrons devient plus grande en présence d’In, et augmente en ajoutant l’In ce qui est très important en optoélectronique.

6.3 Conclusion :

- La probabilité des interactions piézoélectriques augmente avec la fraction molaire d’Al dans AlGaN, et diminue en augmentant la fraction molaire d’In dans InGaN. Ces interactions ont des faibles probabilités dans le cas d’Al_{0.2}Ga_{0.8}N et In_{0.5}Ga_{0.5}N.

- Interaction acoustique : dans l'alliage AlGaN, ces interactions augmentent en augmentant la fraction molaire d'Al, par contre dans l'alliage InGaN, ces interactions diminuent en augmentant la fraction molaire d'In.
- La même interprétation pour les interactions intervallées et intravallées et les interactions polaires
 - La grande probabilité d'interaction correspond à une courte durée de vie des électrons mais quand cette probabilité des interactions est faible, l'électron aura une durée de vie plus importante, ce qui est le cas dans l'alliage InGaN en augmentant la fraction molaire d'In
 - L'énergie des électrons dans l'alliage InGaN est plus grande que celle dans l'alliage AlGaN, mais elle se stabilise pour un champ beaucoup plus petit que celle dans AlGaN.
 - Même remarque pour la vitesse, elle est plus importante dans InGaN mais arrive à la vitesse de saturation pour un champ beaucoup plus petit que celle d'AlGaN.
 - Dans l'alliage AlGaN, on peut appliquer des températures allant au-delà de 1000 K par contre dans l'alliage InGaN, la température ne peut pas dépasser 700 K.

Les deux alliages sont complémentaires, InGaN est plus intéressant pour les petits champs électriques et les petites températures et AlGaN pour les grands champs électriques et les grandes températures. Quand la vitesse dans l'InGaN arrive à la saturation, celle de l'AlGaN augmente toujours et elle est atteinte pour des champs très élevés.

Conclusion générale

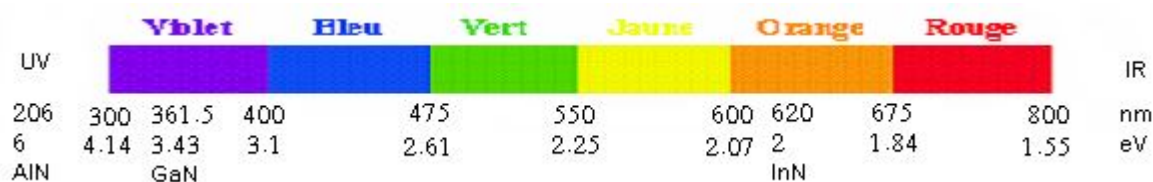
Conclusion générale

Dans ce travail nous avons étudié le phénomène de transport électrique dans les composés ternaires à base de nitrures : AlGaN et InGaN. Cette étude est un domaine de recherche majeur pour leurs applications en électronique et en optoélectronique.

Les avantages intrinsèques de ces matériaux résident dans les points suivants :

- Tension de claquage élevée grâce à la grande bande interdite, permettant des impédances de sortie élevées.
- Vitesses de saturation et de pic élevées.
- Grande linéarité, résistance aux pulses électromagnétiques, stabilité à haute température, stabilité chimique, surtout pour l'alliage AlGaN, car ce dernier présente un gap relativement élevé par rapport à l'alliage InGaN. AlGaN peut résister à des températures allant au-delà de 1000 K. InGaN ne peut pas résister à des températures supérieures à 700 K.

Les deux alliages ne sont pas encore très bien maîtrisés surtout l'alliage InGaN, et on trouve beaucoup de contradictions parfois considérables dans la littérature. Les recherches sont donc loin d'être terminées, elles sont toujours en course pour tout savoir sur ces matériaux surtout dans le domaine de l'optoélectronique car en utilisant ces alliages, on peut couvrir tout le spectre visible et l'UV.



Pour l'étude du transport électrique dans les deux matériaux AlGaN et InGaN sous la structure cubique, nous avons utilisé la méthode de simulation de Monte Carlo qui consiste à simuler le comportement des électrons dans la bande de conduction. Dans le régime stationnaire ; nous avons calculé l'évolution de la vitesse et de l'énergie en fonction du champ électrique, pour différentes températures et différentes concentrations d'électrons. Dans le régime transitoire ; nous avons calculé la variation de la vitesse en fonction du temps.

Cette étude nous a permis aussi de calculer l'influence de la température et du dopage sur la vitesse des électrons.

Cette méthode de simulation est utilisée par plusieurs chercheurs qui lui ont apporté des améliorations par l'augmentation du nombre de particules étudiées par exemple, pour qu'elle soit plus précise.

Des résultats trouvés, nous pouvons tirer quelques conclusions :

- InGaN qui présente des probabilités d'interactions plus petites que AlGaN.
- La vitesse de dérive des électrons dans l'alliage InGaN est plus importante que dans AlGaN
- La vitesse de dérive des électrons dans l'alliage InGaN est grande pour des petites valeurs du champ électrique, tandis que dans AlGaN, elle est plus faible mais elle se produit pour des grandes valeurs du champ électriques.
- Le champ critique est plus grand dans l'alliage AlGaN que dans InGaN.
- La vitesse diminue en augmentant la température.
- Pour l'alliage AlGaN, la température excède 1000 K alors qu'elle n'est que de 77 K pour InGaN.
- L'alliage InGaN est plus intéressant pour les petites valeurs de champs électriques et les petites températures, tandis que l'alliage AlGaN est plus recommandé pour les grandes valeurs des champs électriques et les grandes températures.