N° d'ordre : 40234

# THÈSE

**Présentée à**

**UNIVERSITÉ DES SCIENCES ET TECHNOLOGIES DE LILLE**

Pour obtenir le titre de

## DOCTEUR DE L'UNIVERSITÉ

**Spécialité : Micro et nanotechnologies, Acoustique et Télécommunication**

par

**Xiao TANG**

# OPTIMISATION THÉORIQUE ET EXPÉRIMENTALE DE COMPOSANTS HYPERFRÉQUENCES DE LA FILIÈRE NITRURE DE GALLIUM À PARTIR D'ÉTUDES PHYSICO-THERMIQUES ET ÉLECTRIQUES

Soutenue le 22 Janvier 2010 devant la commission d'examen

| | | |
|---|---|---|
| Membres du jury : | Mr. Paul-Alain ROLLAND | Président du jury |
| | Mme. Nathalie LABAT | Rapporteur |
| | Mr. Frédéric ANIEL | Rapporteur |
| | Mr. Jean-Claude DE JAEGER | Directeur de thèse |
| | Mr. Michel ROUSSEAU | Co-directeur de thèse |
| | Mr. Robert LANGER | Examinateur |
| | Mr. Jean-Claude JACQUET | Examinateur |
| | Mr. Ali SOLTANI | Examinateur |

# REMERCIEMENTS

Ce travail a été réalisé à l'Institut d'Électronique, de Microélectronique et de Nanotechnologie (IEMN) dirigé par Monsieur Lionel BUCHAILLOT, au sein du groupe Composants et Dispositifs Microondes de Puissance, dirigé par le Professeur Jean-Claude DE JAEGER.

Je remercie Monsieur Paul-Alain ROLLAND, Professeur à l'Université des Sciences et Technologies de Lille, de me faire l'honneur de présider la commission d'examen.

Je tiens à exprimer toute ma reconnaissance à Madame Nathalie LABAT, Professeur au Laboratoire de l'Intégration du Matériau au Système (IMS) et à Monsieur Frédéric ANIEL, Professeur à l'Institut d'Électronique Fondamental (IEF), pour m'avoir fait l'honneur de rapporter ce travail.

Je remercie sincèrement Monsieur Robert LANGER, Ingénieur de Recherche à Soitec, Jean-Claude JACQUET, Ingénieur de Recherche à Alcatel-Thales III-V Lab, qui me font l'honneur de participer à la commission d'examen.

La direction de ce travail a été assurée par Monsieur Jean-Claude DE JAEGER, Professeur à l'Université des Sciences et Technologies de Lille, à qui j'exprime ma vive et sincère gratitude pour m'avoir accueilli dans son groupe. J'exprime toute ma reconnaissance et ma sympathie pour sa confiance, sa disponibilité et sa gentillesse. Je lui suis reconnaissant pour la qualité de ses relations humaines, ses compétences, et la générosité dont il a fait preuve dans la direction de ce travail.

Ce travail a été mené sous la co-direction scientifique de Monsieur Michel ROUSSEAU, Professeur Agrégé. Je lui exprime toute ma gratitude pour son aide, ses encouragements et pour son encadrement durant ces trois années. Je le remercie particulièrement pour sa patience, sa disponibilité et son expérience qu'il a su me faire partager.

Je remercie Monsieur Ali SOLTANI, Maître de conférences à l'Université des Sciences et Technologies de Lille et membre de notre groupe de recherche, pour son encadrement scientifique. Il m'a enseigné la précision et la rigueur dans la rédaction des textes scientifiques.

Mes remerciements vont également à mes collèges et amis, He, Ling, Mingming, Mingdong, Jiejia, Qing, Brahim, Nicolas, Jean-Claude, Hassan-Ali et toutes celles et ceux que j'ai certainement oublié, pour leur amitié et pour tous les bons moments passés en leur compagnie.

Mes derniers remerciements s’adressent évidemment à ma mère, mon père et tous les membres de ma famille pour leurs soutiens tout au long de cette période.

# INTRODUCTION GÉNÉRALE

Dès les années 1960, il a été reconnu que l'utilisation de semiconducteurs binaires III-V à large bande interdite pouvait apporter un gain considérable au niveau des performances globales des dispositifs pour des applications de puissance en hyperfréquence.

En 1966, le premier transistor MESFET (Metal Semiconductor Field Effect Transistor) de la filière nitrure de gallium a été conçu, et en 1993, le premier transistor HEMT (High Electron Mobility Transistor) AlGaN/GaN a été réalisé et a montré qu'il était très prometteur pour cette filière en raison d'une vitesse de saturation et d'un champ critique élevés. Récemment, des densités de puissance de 40 W/mm et 10,5 W/mm ont été obtenues respectivement sur substrat SiC monocristallin à 4 GHz et 40 GHz.

Les propriétés électriques exceptionnelles qu'offre le matériau semiconducteur GaN avec notamment une vitesse pic élevée et un temps de relaxation de l'énergie court ont permis d'envisager la conception d'une nouvelle filière de diodes Gunn fonctionnant à haute fréquence. À l'heure actuelle, ces composants présentent des fréquences d'oscillation dans le domaine du THz.

Comme les composants de la filière nitrure de gallium sont souvent utilisés à forte puissance, ils sont le siège d'effet d'auto-échauffement important. L'augmentation de la température de réseau dégrade les propriétés de transport et diminue la fiabilité des composants. Il apparaît donc nécessaire d'étudier les performances thermiques soigneusement pour les structures de la filière nitrure de gallium. Dans ce cadre, un modèle physico-thermique basé sur le couplage d'un modèle énergie-balance avec le modèle thermique a été développé. Ce modèle prend en compte la température de réseau en tout point du composant et décrit bien les performances électriques et thermiques des composants.

Ce travail de thèse a été réalisé au sein de l'IEMN. Pendant ce travail, nous nous sommes fixés deux objectifs : d'une part, une étude sur la compréhension et l'optimisation du comportement des contacts Schottky TiN sur l'hétérostructure AlGaN/GaN sur substrat Si (111) par pulvérisation magnétron, ce qui est la base pour la fabrication de transistors HEMT AlGaN/GaN de bonne qualité, et d'autre part, le management thermique de composants de la filière nitrure de gallium (hétérostructures AlGaN/GaN et diodes Gunn GaN).

Ce mémoire comprend l'ensemble des résultats obtenus au cours de ce travail et est décomposé en cinq parties :

Le premier chapitre est consacré aux rappels des propriétés électriques et thermiques des semiconducteurs nitrures à large bande interdite, à savoir, leur structure cristallographique, ainsi que leurs effets de polarisation dans le cristal. Nous présentons ensuite l'état de l'art des substrats utilisés pour la croissance du nitrure de gallium, ainsi que leurs techniques de croissance. Nous présentons également les principes fondamentaux de fonctionnement électriques et thermiques d'un transistor HEMT AlGaN/GaN et d'une diode Gunn GaN. Dans le détail, pour les HEMTs AlGaN/GaN, nous décrivons les différentes polarités de l'hétérostructure, le gaz d'électrons bidimensionnel et les limitations des HEMTs. Notamment, pour étudier le gaz d'électrons bidimensionnel, un modèle de Schrödinger-Poisson à une dimension est utilisé afin d'étudier les évolutions de la densité électronique en fonction du taux d'aluminium, de l'épaisseur de la couche barrière AlGaN et du dopage de la couche barrière. Nous décrivons aussi l'effet d'auto-échauffement sur les HEMTs AlGaN/GaN. Pour les diodes Gunn GaN, nous présentons les avantages des diodes Gunn de cette filière ainsi que le critère de l'oscillation de type Gunn.

Le deuxième chapitre est consacré exclusivement aux aspects liés à la formation du contact Schottky TiN sur l'hétérostructure AlGaN/GaN sur substrat Si (111) obtenu par pulvérisation magnétron. Ce chapitre débute par un bref rappel concernant la formation du contact ohmique lequel est utile à la compréhension qui suivra sur la formation du contact Schottky TiN. La théorie relative aux diagrammes énergétiques d'un contact métal/semiconducteur ainsi que les mécanismes de conduction à travers le contact redresseur y sont rappelés. Nous présentons alors les résultats de mesures pour le contact redresseur TiN suivis d'une analyse détaillée permettant d'optimiser ses caractéristiques. L'effet tunnel assisté par effet de champ et le courant limité par charge d'espace montrent être dominants.

Le troisième chapitre décrit la modélisation physico-thermique. Pour cette modélisation, nous présentons les équations utilisées, le couplage du modèle physique (modèle énergie-balance) avec le modèle thermique, et les conditions aux limites. Nous décrivons aussi les propriétés de transport en fonction de la température de réseau, obtenues à partir d'une modélisation Monte Carlo développée au sein de notre laboratoire depuis de nombreuses années. Pour implémenter les données Monte Carlo dans notre modèle, nous utilisons des fonctions analytiques obtenues grâce à des algorithmes génétiques. Enfin, nous présentons la méthode de discrétisation (éléments finis) ainsi que le logiciel COMSOL® utilisé pour nos travaux de simulation.

Le quatrième chapitre rassemble les résultats obtenus pour l'étude des performances électriques et

thermiques des hétérostructures AlGaN/GaN de type TLM (Transmission Line Model) sur différents substrats : Si, GaN avec peu de dislocations, SiC monocristallin, diamant monocristallin et substrats composites (SopSiC, SiCopSiC, GaNopSiC et Sopdiamant). Les performances électriques et thermiques des structures TLM basées sur les hétérostructures InAlN/GaN sur différents substrats : SiC monocristallin, diamant monocristallin et substrat composite (Si/poly-diamant), sont aussi exposées. Nous présentons également dans ce chapitre nos essais pour l'étude des transistors HEMTs AlGaN/GaN et le problème auquel nous avons été confronté (l'apparition de densités négatives d'électrons en dessous de la grille). Nous analysons les raisons de cette apparition de densités négatives d'électrons et envisageons d'utiliser la méthode des volumes finis pour remédier à ce problème.

Dans le dernier chapitre, nous présentons les résultats de simulation des diodes Gunn GaN. Nous étudions l'impact de la longueur et de l'épaisseur des diodes Gunn sur les performances électriques (statiques et microondes) et thermiques. Une optimisation de l'épaisseur s'appuyant sur un compromis entre le rendement de conversion et la résistance dynamique, pour une longueur entre deux contacts ohmiques de 2 µm a également été effectuée. Quelques résultats sur une diode plus courte de 0,3 µm ont permis de montrer que la fréquence d'oscillation peut attendre 750 GHz.

# TABLE DES MATIÈRES

**Chapitre 1**

**Propriétés des semiconducteurs III-N et des dispositifs de la filière nitrure** ..... 1

1.1. Introduction ..... 3

1.2. Principales propriétés des semiconducteurs III-N ..... 3

1.2.1. Structure cristalline du nitrure de gallium ..... 3

1.2.2. Structure de bandes ..... 4

1.2.3. Effets de polarisation dans le cristal ..... 6

1.2.3.1. Polarisation spontanée ..... 6

1.2.3.2. Polarisation piézoélectrique ..... 8

1.3. Substrats utilisés pour la croissance du nitrure de gallium ..... 9

1.3.1. Le saphir ..... 10

1.3.2. Le silicium ..... 11

1.3.3. Le carbure de silicium ..... 11

1.3.4. Les substrats composites ..... 12

1.3.5. Le diamant ..... 12

1.4. Techniques de croissance du matériau nitrure de gallium ..... 13

1.4.1. Croissance par MOCVD du GaN sur saphir ..... 13

1.4.2. Croissance par MBE du GaN sur Si ..... 13

1.5. Propriétés des transistors à effet de champ ..... 14

1.5.1. Présentation générale ..... 14

1.5.1.1. Le MESFET ..... 14

1.5.1.2. Le HEMT ..... 14

1.5.2. Le HEMT AlGaN/GaN ..... 15

1.5.3. Topologie du HEMT AlGaN/GaN ..... 16

1.5.4. Propriétés électriques du HEMT AlGaN/GaN ..... 18

1.5.4.1. Polarités dans une hétérostructure ..... 18

1.5.4.2. Gaz d'électrons bidimensionnel ..... 19

1.5.4.3. Effets des paramètres technologiques sur la densité d'électrons surfacique $N_S$ ..... 22

1.5.4.4. Limitations des composants ..... 24

1.5.5. Propriétés thermiques des HEMTs AlGaN/GaN ..... 26

1.5.5.1. Transfert thermique ..... 26

1.5.5.2. Résistance thermique en volume ..... 29

1.5.5.3. Effet d'auto-échauffement ..... 31

1.6. Propriétés des diodes Gunn de la filière nitrure de gallium ..... 32

1.6.1. Présentation générale ..... 32

1.6.2. Avantages des diodes Gunn GaN ..... 33

1.6.3. Modèle du transfert intervallée ..... 33

1.6.4. Critère d'oscillation de type Gunn ..... 36

1.7. Conclusion ..... 36

**Chapitre 2**

**Étude du contact redresseur** ..... 43
2.1. Introduction ..... 45
2.2. Formation du contact ohmique ..... 45
2.2.1. Rappel du procédé de fabrication du contact ohmique ..... 45
2.2.2. Principes de formation du contact ohmique ..... 46
2.2.2.1. Cas de Ti/GaN recuit à basse température ..... 46
2.2.2.2. Cas de Ti/GaN recuit à haute température ..... 47
2.2.2.3. Cas de Al/Ti/GaN recuit à basse température ..... 48
2.2.2.4. Cas de Al/Ti/GaN recuit à haute température ..... 48
2.2.2.5. Cas de Ti/AlGaN recuit à basse température ..... 49
2.2.2.6. Cas de Ti sur AlGaN recuit à haute température ..... 50
2.2.2.7. Cas de Al/Ti sur AlGaN recuit à basse et haute températures ..... 51
2.2.3. Conclusion sur la formation du contact ohmique ..... 52
2.3. Propriétés physiques du contact redresseur ..... 53
2.3.1. Diagramme énergétique d'un contact métal/semiconducteur ..... 53
2.3.1.1. Diagramme énergétique sans présence d'états d'interface ..... 53
2.3.1.2. Diagramme énergétique en présence d'états d'interface ..... 54
2.3.2. Descriptions des mécanismes de conduction au travers d'un contact redresseur ..... 56
2.3.2.1. Conduction en polarisation directe ..... 57
2.3.2.2. Conduction en polarisation inverse ..... 57
2.3.2.3. Courant dans un contact redresseur ..... 58
2.4. Détermination de la hauteur de barrière ..... 60
2.5. Étude du contact redresseur TiN sur AlGaN/GaN/Si (111) réalisé par pulvérisation magnétron ..... 64
2.5.1. Topologie de la structure étudiée ..... 66
2.5.2. Optimisation du procédé technologique ..... 67
2.5.2.1. Effet de l'épaisseur de la couche de TiN ..... 67
2.5.2.2. Effet de la température de recuit et de la passivation ..... 68
2.5.2.3. Effet du prétraitement de surface ..... 70
2.3.2.4. Effet de la longueur de grille ..... 71
2.6. Mécanismes de conduction dominants du contact Schottky ..... 72
2.6.1. Mécanisme par effet tunnel assisté par effet de champ ..... 73
2.6.1.1. Caractérisations électriques $C_{GS}(V_{GS}, \omega)$ ..... 74
2.6.1.2. Distribution de la densité d'électrons ..... 75
2.6.1.3. Évolution de la résistance série ..... 76
2.6.1.4. Détermination de la densité de dislocations en surface de la couche barrière AlGaN ..... 76
2.6.1.5. Limitation du mécanisme par effet tunnel assisté par effet de champ ..... 77
2.6.2. Mécanisme du courant limité par charge d'espace ..... 78
2.6.2.1. Courants limités par charge d'espace (CLCE) ..... 78
2.6.2.2. Évolutions de la hauteur de barrière et du coefficient d'idéalité ..... 82
2.6.2.3. Détermination de la largeur de la zone de charge d'espace ..... 83
2.7. Conditions pour la formation des contacts ohmique et Schottky ..... 83

2.8. Conclusion ..... 84

**Chapitre 3**

**Modélisation physico-thermique des composants à base de nitrure de gallium** ..... 87

3.1. Introduction ..... 89

3.2. Modélisation ..... 89

3.2.1. Objectifs de la modélisation ..... 89

3.2.2. Résultats de la modélisation ..... 90

3.3. Modélisation physico-thermique ..... 90

3.3.1. Modèle physique ..... 90

3.3.1.1. Équation de Poisson ..... 91

3.3.1.2. Équation de transport de Boltzmann (ETB) ..... 91

3.3.2. Modèle thermique ..... 94

3.3.3. Couplage du modèle physique et du modèle thermique ..... 94

3.3.3.1. Contraintes pendant la modélisation ..... 94

3.3.3.2. Couplage physico-thermique ..... 95

3.4. Paramètres d'entrée du modèle ..... 96

3.5. Propriétés de transport des matériaux à base de nitrures ..... 97

3.3.1. Propriétés de transport obtenues ..... 98

3.5.2. Détermination des relations analytiques pour les propriétés de transport ..... 102

3.5.2.1. Expression analytique de la mobilité des électrons ..... 103

3.5.2.2. Expression analytique du temps de relaxation de l'énergie ..... 109

3.6. Domaine simulé et conditions aux limites ..... 110

3.6.1. Conditions aux limites pour le modèle physique ..... 111

3.6.1.1. Conditions aux limites sur les contacts ohmiques ..... 111

3.6.1.2. Conditions aux limites sur le contact Schottky ..... 112

3.6.1.3. Conditions aux limites sur les surfaces libres ..... 113

3.6.1.4. Conditions aux limites au niveau de l'interface AlGaN/GaN ..... 113

3.6.2. Conditions aux limites pour le modèle thermique ..... 115

3.6.2.1. Conditions aux limites sur la frontière base du substrat ..... 116

3.6.2.2. Conditions aux limites sur les surfaces libres ..... 116

3.6.2.3. Conditions aux limites sur les frontières internes au composant ..... 116

3.7. Méthodes de résolution ..... 116

3.7.1. Présentation générale ..... 116

3.7.1.1. Différences finies ..... 117

3.7.1.2. Éléments finis ..... 117

3.7.1.3. Volumes finis ..... 117

3.7.2. Méthode des éléments finis ..... 118

3.7.2.1. Logiciel COMSOL® ..... 118

3.7.2.2. Discrétisation par la méthode des éléments finis ..... 119

3.7.2.3. Normalisation des équations utilisées ..... 120

3.8. Conclusion ..... 123

**Chapitre 4**

**Analyses physico-thermiques des hétérostructures AlGaN/GaN et InAlN/GaN** ..... 127
4.1. Introduction ..... 129
4.2. Analyses physico-thermiques des structures HEMT AlGaN/GaN ..... 130
4.2.1. Topologie de la structure étudiée ..... 130
4.2.2. Problèmes rencontrés pendant la modélisation ..... 131
4.2.3. Nos essais pour résoudre les problèmes rencontrés ..... 132
4.2.3.1. Raffinement de la maille ..... 132
4.2.3.2. Modification de la normalisation de la densité d'électrons ..... 132
4.2.4. Perspectives ..... 134
4.3. Analyses physico-thermiques des structures TLM AlGaN/GaN avec un doigt ..... 134
4.3.1. Substrats massifs ..... 134
4.3.3.1. Topologie des structures étudiées ..... 134
4.3.3.2. Caractéristiques électriques $I(V)$ ..... 136
4.3.3.3. Évolution de la température de réseau maximale ..... 137
4.3.3.4. Évolution de la résistance thermique ..... 138
4.3.3.5. Distribution de la température de réseau ..... 139
4.3.3.6. Distributions des quatre grandeurs électriques et thermiques dans la zone active ..... 142
4.3.3.7. Effet de la température de socle ..... 144
4.3.2. Substrats composites ..... 147
4.3.2.1. Topologie des structures étudiées ..... 147
4.3.2.2. Caractéristiques électriques $I(V)$ ..... 148
4.3.2.3. Évolution de la température de réseau maximale ..... 149
4.3.2.4. Évolution de la résistance thermique ..... 150
4.3.2.5. Distribution de la température de réseau ..... 151
4.3.2.6. Distributions des quatre grandeurs électriques et thermiques dans la zone active ..... 154
4.3.2.7. Effet de l'épaisseur de la couche de Si pour le substrat SopSiC ..... 156
4.3.2.8. Effet de l'épaisseur de la couche de $SiO_2$ pour le substrat SopSiC ..... 158
4.4. Analyses physico-thermiques des structures TLM AlGaN/GaN avec deux doigts ..... 160
4.4.1. Topologies des structures étudiées ..... 161
4.4.2. Caractéristiques électriques $I(V)$ ..... 162
4.4.3. Évolution de la température de réseau maximale ..... 163
4.4.4. Évolution de la résistance thermique ..... 164
4.4.5. Distribution de la température de réseau ..... 165
4.5. Analyses physico-thermiques des structures TLM InAlN/GaN avec un doigt ..... 167
4.5.1. Topologie des structures étudiées ..... 167
4.5.2. Caractéristiques électriques $I(V)$ ..... 168
4.5.3. Évolution de la température de réseau maximale ..... 169
4.5.4. Évolution de la résistance thermique ..... 170
4.5.5. Distribution de la température de réseau ..... 171
4.5.6. Distributions des quatre grandeurs électriques et thermiques dans la zone active ..... 173
4.6. Conclusion ..... 174

**Chapitre 5**

**Analyses physico-thermiques des diodes Gunn de la filière nitrure de gallium** ..... 177
5.1 Introduction ..... 179
5.2 Diode Gunn avec une distance entre les deux contacts ohmiques de 2 µm ..... 180
5.2.1 Topologie des diodes Gunn étudiées ..... 180
5.2.2 Résultats pour une couche de GaN de 0,1 µm d'épaisseur ..... 181
5.2.2.1. Caractéristiques statiques ..... 181
5.2.2.2. Caractéristiques microondes ..... 186
5.2.2.3. Performances thermiques ..... 189
5.2.3 Résultats pour une couche de GaN de 0,05 µm d'épaisseur ..... 190
5.2.3.1. Caractéristiques statiques ..... 190
5.2.3.2. Caractéristiques microondes ..... 194
5.2.2.3. Performances thermiques ..... 195
5.2.4 Résultats pour une couche de GaN de 0,15 µm d'épaisseur ..... 196
5.2.4.1. Caractéristiques statiques ..... 196
5.2.4.2. Caractéristiques Microondes ..... 198
5.2.4.3. Performances thermiques ..... 198
5.2.5. Étude de l'impact des effets thermiques sur les performances électriques ..... 200
5.3. Diode Gunn avec une distance entre les deux contacts ohmiques de 0,3 µm ..... 201
5.3.1. Caractéristiques statiques ..... 201
5.3.2. Caractéristiques microondes ..... 202
5.3.3. Performances thermiques ..... 202
5.4. Conclusion ..... 204

# LISTE DES SYMBOLES ET ABRÉVIATIONS

| | |
|---|---|
| Al | Aluminium |
| AlGaN | Alliage nitrure gallium aluminium |
| AlN | Nitrure d'aluminium |
| $A^*$ | Constante de Richardson |
| Au | Or |
| $C_P$ | Capacité calorifique massique |
| $c_{11}$, $c_{12}$, $c_{13}$, $c_{33}$ | Coefficients élastiques |
| $D_{it}$ | Densité d'états d'interface |
| DRX | X-ray diffraction |
| E | Champ électrique |
| $E_C$ | Bande de conduction |
| $E_{CNL}$ | Condition de neutralité électrique de charge en surface |
| EDS | Energy Dispersive Spectroscopy |
| $E_F$ | Niveau de Fermi |
| $E_g$ | Énergie de la bande interdite |
| $E_V$ | Bande de valence |
| $E_0$ | Première sous-bande de conduction dans le gaz 2D |
| $E_{00}$ | Énergie caractéristique |
| $e_{31}$, $e_{33}$ | Coefficients piézoélectriques |
| $f_{osc}$ | Fréquence d'oscillation |
| GaAs | Arséniure de gallium |
| GaN | Nitrure de gallium |
| h | Constante de Planck |
| H | Terme source de chaleur |
| ħ | Constante de Planck réduite |
| $h_C$ | Facteur de transfert thermique par convection |
| HRTEM | High Resolution Transmission Electron Microscopy |
| I | Courant |
| $I_{RF}$ | Courant alternatif |
| J | Densité de courant |
| k | Vecteur d'onde |
| $k_B$ | Constante de Boltzmann |
| $L_{ZCE}$ | Largeur de la zone de charge d'espace |
| MBE | Molecular Beam Epitaxy |
| $m_n^*$ | Masse effective de l'électron |

| | |
|---|---|
| MOCVD | Metal Organic Chemical Vapour Deposition |
| n | Concentration d'électrons libres dans le semiconducteur |
| $N_A$ | Densité des accepteurs |
| $N_A^-$ | Densité des accepteurs ionisés |
| $N_D$ | Densité des donneurs |
| $N_D^+$ | Densité des donneurs ionisés |
| Ni | Nickel |
| $N_S$ | Densité d'électrons surfacique |
| $n_{t0}$ | Densité de porteurs minoritaires en électrons |
| $O_N$ | Oxygène en site substitutionnel d'azote |
| $P_{CV}$ | Transfert de chaleur par convection |
| $P_{RF}$ | Densité de puissance émise |
| $P_{PZ}$ | Polarisation piézoélectrique |
| $P_{SP}$ | Polarisation spontanée |
| $p_{t0}$ | Densité de porteurs majoritaires en trous |
| q | Charge élémentaire d'électron |
| $Q_L$ | Flux de chaleur de réseau |
| $Q_n$ | Flux de chaleur |
| $qV_K$ | Potentiel de diffusion du contact Schottky |
| $q\Phi_{Bn}$ | Hauteur de barrière |
| $q\Phi_m$ | Travail de sortie du métal |
| $q\Phi_{SC}$ | Travail de sortie du semiconducteur |
| $q\chi$ | Affinité électronique du semiconducteur |
| $R_{RF}$ | Résistance dynamique |
| $R_{th}$ | Résistance thermique |
| Si | Silicium |
| SiC | Carbure de silicium |
| SiN | Nitrure de silicium |
| $SiO_2$ | Oxyde du silicium |
| $S_n$ | Flux d'énergie |
| t | Temps |
| T | Température |
| $T_e$ | Température électronique |
| $T_L$ | Température de réseau |
| TEM | Transmission Electron Microscopy |
| TFE | Effet tunnel assisté par effet de champ |
| Ti | Titane |
| TiN | Nitrure de titane |

| | |
|---|---|
| $TiO_2$ | Oxyde du titane |
| $T_0$ | Température ambiante |
| V | Tension |
| $v_D$ | Fréquence de Debye |
| $V_{DC}$ | Tension continue |
| $V_{RF}$ | Tension alternative |
| $V_N$ | Lacune d'azote |
| $V_p$ | Tension de pincement |
| $v_{pic}$ | Vitesse pic des électrons |
| $V_{TFL}$ | Tension de seuil |
| $w_n$ | Énergie moyenne des électrons |
| $w_0$ | Énergie moyenne des électrons à l'équilibre thermodynamique |
| w-AlN | Nitrure d'aluminium wurtzite |
| w-GaN | Nitrure de gallium wurtzite |
| $\Delta E_C$ | Discontinuité de la bande de conduction |
| $\varepsilon_0$ | Permittivité du vide |
| $\varepsilon_r$ | Permittivité relative du semiconducteur |
| $\eta$ | Coefficient d'idéalité |
| $\kappa_e$ | Conductivité thermique électronique |
| $\kappa_L$ | Conductivité thermique |
| $\mu_n$ | Mobilité des électrons |
| $\rho$ | Masse volumique du matériau |
| $\rho_D$ | Densité de dislocations |
| $\varphi_n$ | Fonction d'onde de l'électron |
| $\tau$ | Temps de relaxation du moment |
| $\tau_w$ | Temps de relaxation de l'énergie |

# CHAPITRE I

# PROPRIÉTÉS DES SEMICONDUCTEURS III-N ET DES DISPOSITIFS DE LA FILIÈRE NITRURE DE GALLIUM

# 1.1. Introduction

Les composants actifs sont les éléments de base de la conception de circuits intégrés monolithiques microondes. Les éléments actifs sont constitués de transistors et de diodes. Aujourd'hui, on doit concevoir des transistors et des diodes capables de répondre aux besoins en termes de puissance et de montée en fréquence [1][2][3].

Les matériaux semiconducteurs III-N sont de bons candidats pour la fabrication de ces types de transistors et de diodes. Les matériaux semiconducteurs III-N présentent plusieurs avantages tels qu'une large bande interdite, une grande stabilité chimique, des propriétés mécaniques exceptionnelles ainsi que d'autres propriétés physiques remarquables. Ces semiconducteurs possèdent les qualités indispensables pour fabriquer des composants de puissance.

L'objet de ce chapitre est de rappeler quelques éléments pertinents connus de la physique concernant les matériaux semiconducteurs de la filière III-N utiles pour notre étude. Dans un premier temps, nous rappelons les principales propriétés des semiconducteurs III-N, telles que la structure cristalline du nitrure de gallium (GaN), la structure de bandes et les effets de polarisation dans le cristal. Nous décrivons aussi les substrats utilisés pour la croissance du GaN, les techniques de croissance ainsi que les problèmes liés aux choix du substrat. Nous présentons ensuite, les différents types de transistors à effet de champ avant de développer plus particulièrement la formation et le fonctionnement du transistor HEMT AlGaN/GaN, qui reste le composant privilégié pour l'amplification de puissance. Nous faisons aussi un bilan sur les principales causes qui limitent les performances de ce type de transistor. Enfin, nous présentons le fonctionnement de la diode Gunn GaN, notamment le phénomène de la résistance différentielle négative ainsi que le critère d'oscillation de type Gunn.

# 1.2. Principales propriétés des semiconducteurs III-N

## 1.2.1. Structure cristalline du nitrure de gallium

Le nitrure de gallium cristallise sous deux formes différentes, intéressantes pour la microélectronique, mais également pour l'optoélectronique. La première forme cristalline correspond à la structure hexagonale (structure wurtzite). La seconde est la forme cubique (structure zinc-blende). Nous nous intéresserons principalement à la structure wurtzite qui reste la plus stable et donc la plus utilisable. La structure wurtzite

a une maille élémentaire hexagonale de paramètres de maille $a$ = 0,3188 nm et $c$ = 0,5185 nm à température ambiante (Fig. 1.1). La maille élémentaire contient six atomes de chaque type. Elle est composée de deux sous réseaux hexagonaux imbriqués l'un dans l'autre, où chaque type d'atome est décalé suivant l'axe $c$ de 62 % de la maille élémentaire.

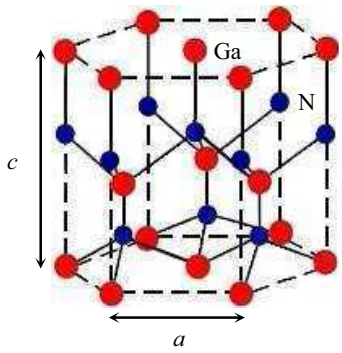
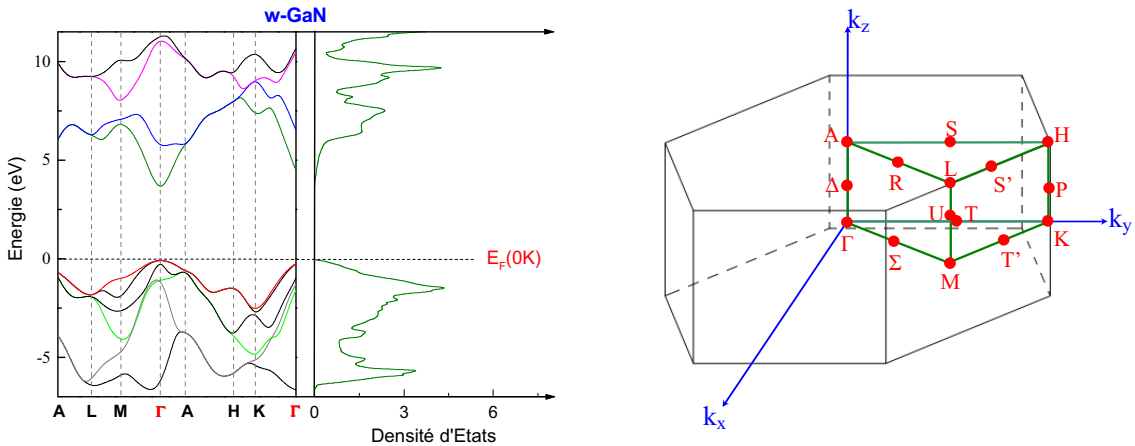



Figure 1.1. Représentation du réseau cristallin du GaN dans sa structure hexagonale de type wurtzite.

## 1.2.2. Structure de bandes

Les bandes d'énergie donnent les états d'énergie possibles pour les électrons et les trous en fonction de leur vecteur d'onde. Elles se décomposent en bandes de valence et bandes de conduction (Fig. 1.2) [4]. Nous les représentons dans l'espace réciproque et, pour simplifier, suivant des directions de plus hautes symétries. La densité d'états est représentée au centre de la première zone de Brillouin $\Gamma$.




(a) (b)

Figure 1.2. (a) Structure de bandes et densité d'états du w-GaN et (b) Schématisation de la première zone de Brillouin dans un cristal de w-GaN.

L'allure générale des bandes est la même pour tous les composés III-N considérés. La structure de bandes est directe, c'est-à-dire que le maximum de la bande de valence et le minimum de la bande de conduction sont situés au centre de la zone de Brillouin $\Gamma$ ($k$ = 0). Le minimum central de la bande de conduction correspond à des électrons ayant une faible masse effective, donc très mobiles.

II existe par ailleurs des minima secondaires en bordure de la zone de Brillouin dans la direction *L*-*M* et *K*. Ces minima sont beaucoup plus plats, les électrons y ont une masse effective plus grande et donc une plus faible mobilité. Quant à la largeur de bande interdite, elle augmente lorsque la température diminue.

Les principales propriétés physiques des deux composés binaires nitrure d'aluminium (w-AlN) et nitrure de gallium (w-GaN), sont regroupées dans le tableau 1.1 et comparées à celles du silicium (Si), du carbure de silicium (SiC) et de l'arséniure de gallium (GaAs) [5].

Tableau 1.1. Récapitulatif de quelques propriétés physiques importantes de différents semiconducteurs AlN, GaN, Si, SiC et GaAs à température ambiante.

| Matériaux | w-AlN | w-GaN | Si | SiC | GaAs |
|---|---|---|---|---|---|
| Bande interdite (eV) | 6,1 | 3,4 | 1,12 | 2,36 | 1,43 |
| Champ de claquage (V/cm) | $1,8\times10^6$ | $5\times10^6$ | $3\times10^5$ | $3,5\times10^6$ | $4\times10^5$ |
| Conductivité thermique (W/m·K) | 285 | 150 | 150 | 370 | 46 |
| Vitesse de saturation (cm/s) | $1,4\times10^7$ | $1,8\times10^7$ | $1\times10^7$ | $2,2\times10^7$ | $0,9\times10^7$ |
| Permittivité relative | 8,5 | 9 | 12 | 9,66 | 11,5 |
| Masse effective de l'électron ($\times m_0$) | 0,4 | 0,2 | 1,06 | 0,29 | 0,066 |

Les matériaux AlN et GaN sont donc des matériaux très prometteurs compte tenu de leurs excellentes propriétés, adéquates pour de nombreuses applications. À titre indicatif, il semble intéressant de comparer les propriétés électriques de cette famille de matériaux III-V avec celles de la filière GaAs, qui constitue à l'heure actuelle, celle qui est la plus utilisée par les fonderies compte tenu de sa maturité pour le développement de composants et circuits de puissance hyperfréquence (tableau 1.1). Il ressort de ces indications que les éléments nitrurés de par leurs gaps importants, leurs conductivités thermiques satisfaisantes et leurs champs de claquages élevés, présentent de nombreux avantages pour ce type d'applications. Associées à une vitesse de saturation des porteurs deux fois supérieure à celle du GaAs, leurs potentialités en font des candidats de choix pour les applications de puissance hyperfréquence.

### 1.2.3. Effets de polarisation dans le cristal

L'une des spécificités des composés d'éléments III-N, comparés aux autres composés III-V tels que les arséniures (GaAs par exemple), est l'existence d'une polarisation spontanée et d'une polarisation piézoélectrique [6]. M. Asif Khan et al. ont été les premiers à mettre à profit cette propriété pour réaliser le premier transistor AlGaN/GaN en 1993 [7]. O. Ambacher et al. ont expliqué quantitativement les effets induits par les polarisations spontanée et piézoélectrique dans une hétérostructure AlGaN/GaN (dopée ou non-dopée) [8].

#### 1.2.3.1. Polarisation spontanée

Dans une structure cristalline GaN de type wurtzite, les électrons de la bande de valence sont plus attirés par l'azote que par le gallium à cause de sa forte électronégativité (Fig. 1.3). Cette attraction entraîne la déformation de la structure tétraédrique et le rapport des paramètres de maille ($c/a$) devient plus faible que la valeur attendue ($c/a$ = 1,633). La non-concordance des barycentres des charges positives et négatives entraîne donc la création d'une polarisation appelée polarisation spontanée.

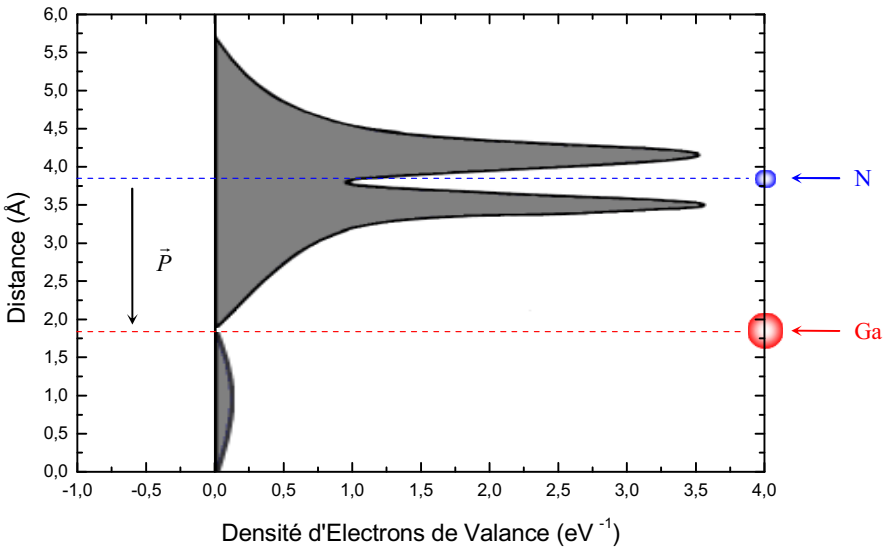



Figure 1.3. Distribution des électrons de la bande de valence d'un atome GaN.

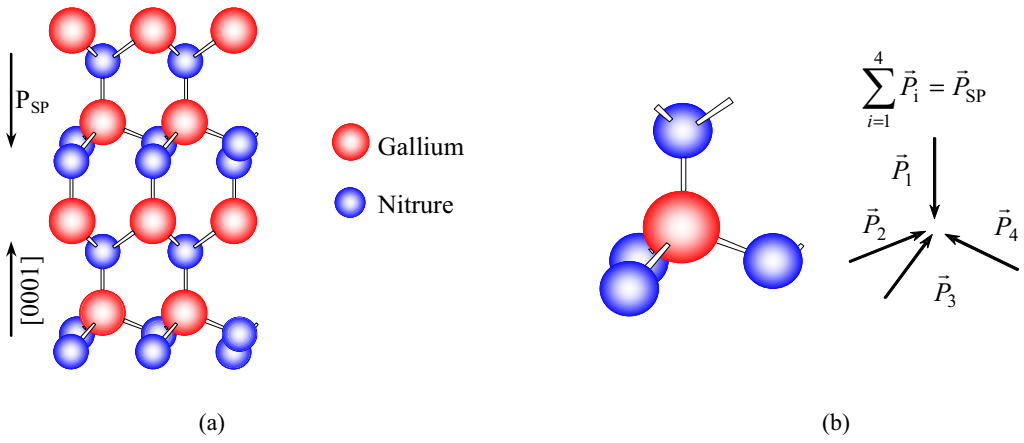
Plus précisément, l'atome de gallium possède quatre atomes d'azote voisins. Parmi ces quatre atomes, trois se trouvent être dans le même plan cristallographique perpendiculaire à l'axe $c$ et le quatrième se situe quant à lui, sur l'axe $c$. Un atome de gallium associé aux quatre atomes d'azote voisins forme un

dipôle tel que :

$$\sum_{i=1}^{4} \vec{P}_i = \vec{P}_{SP} \tag{1.1}$$

La figure 1.4 (a) montre la contribution des moments dipolaires autour d'un atome de gallium.

La somme vectorielle des moments dipolaires $\vec{P}_2$, $\vec{P}_3$ et $\vec{P}_4$, forme un moment dipolaire $\vec{P}_R$ parallèle à l'axe *c*, c'est-à-dire, parallèle au moment dipolaire $\vec{P}_1$ mais de sens opposé (Fig. 1.4 (b)). Pour une structure GaN wurtzite relaxée, le moment dipolaire $|\vec{P}_1| > |\vec{P}_R|$ entraîne un vecteur de polarisation spontanée $|\vec{P}_{SP}| = |\vec{P}_1| - |\vec{P}_R|$ qui est non nul et dirigé suivant l'axe de croissance du matériau (0001).




(a) (b)

Figure 1.4. (a) Structure GaN wurtzite et (b) Polarisation spontanée dans une structure GaN wurtzite.

L'effet de cette polarisation spontanée dans le GaN de type wurtzite en volume se traduit par la création d'une succession de dipôles électriques qui sont à l'origine du champ électrique interne $\vec{E}$ (Fig. 1.5) orienté dans la direction opposée à l'axe de croissance (0001) et ceci sans excitation extérieure.

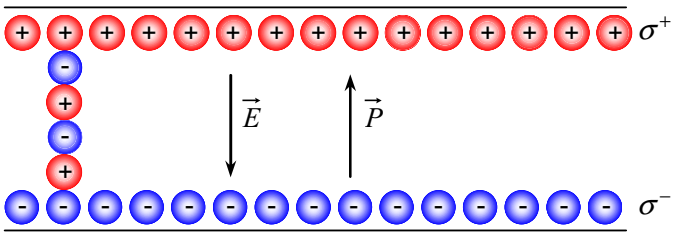



Figure 1.5. Charges en surface d'une couche GaN wurtzite.

Le GaN cristallin possède une symétrie suivant l'axe optique *c* tel que le gradient de polarisation ($\nabla\vec{P} = -\rho = 0$) et la densité de charges en volume soient nuls. La densité de charges associée en surface est déterminée en écrivant l'équation de continuité du vecteur déplacement à l'interface, soit : $\vec{D}_{\text{int}} = \vec{D}_{\text{ext}}$ où $\vec{D}_{\text{int}}$ et $\vec{D}_{\text{ext}}$ sont respectivement le vecteur de déplacement dans le semiconducteur et à l'extérieur de ce dernier à l'interface semiconducteur/air. Comme la densité de charge en volume est nulle, la relation de continuité s'écrit :

$$\sigma^{+} = \left|\vec{P}\right| = \varepsilon_0\varepsilon_{\text{r}}\left|\vec{E}_{\text{int}}\right| - \varepsilon_{\text{r}}\left|\vec{E}_{\text{ext}}\right| \tag{1.2}$$

Si le champ extérieur appliqué et/ou ambiant est nul ($\vec{E}_{\text{ext}} = 0$), alors l'équation 1.2 se réduit à :

$$\sigma^{+} = \left|\vec{P}\right| = \varepsilon_0\varepsilon_{\text{r}}\left|\vec{E}_{\text{int}}\right| \tag{1.3}$$

Les valeurs de la polarisation spontanée ($\vec{P}_{\text{SP}}$) pour le GaN, l'AlN et l'$Al_xGa_{1-x}N$ sont regroupées dans le tableau 1.2 [9].

Tableau 1.2. Valeurs de polarisation spontanée dans le GaN, l'AlN et l'$Al_xGa_{1-x}N$.

| Matériaux | w-GaN | w-AlN | $Al_xGa_{1-x}N$ |
|---|---|---|---|
| $c_0/a_0$ | 1,6259 | 1,6010 | -0,0249x - 1,6259 |
| $\vec{P}_{\text{SP}}$ (C/m$^2$) | -0,029 | -0,081 | -0,052x - 0,029 |

En conclusion, un échantillon de GaN wurtzite épitaxié suivant l'axe *c*, présente sur chacune de ses deux faces, des densités de charges fixes identiques mais de signes opposés, valeur de polarisation spontanée dans le GaN, l'AlN et l'$Al_xGa_{1-x}N$.

### 1.2.3.2. Polarisation piézoélectrique

Tous les composés III-V non centro-symétriques sont piézoélectriques. En ce qui concerne la filière nitrure de gallium, cette piézoélectricité est très importante car la liaison III-N est fortement polaire. Les électrons sont essentiellement localisés sur l'atome d'azote [10].

La piézoélectricité est l'aptitude à produire une charge électrique proportionnelle à une contrainte élastique (en tension ou en compression). Ce phénomène est réversible. Son origine résulte de la brisure de la symétrie du cristal. En effet, l'existence de dipôles électriques internes provient de la séparation à

l'échelle de la maille, du centre de gravité des charges positives et négatives sous l'action d'une contrainte extérieure.

Le tableau 1.3 présente les paramètres de polarisation piézoélectrique pour les matériaux à base de semiconducteur III-N à large bande interdite [11] utiles à notre étude.

Tableau 1.3. Coefficients piézoélectriques et élastiques d'AlN, de GaN et d'$Al_xGa_{1-x}N$.

| Matériaux | AlN | GaN | $Al_xGa_{1-x}N$ |
|---|---|---|---|
| $e_{31}$ (C/m$^2$) | -0,60 | -0,49 | -0,11x - 0,49 |
| $e_{33}$ (C/m$^2$) | 1,46 | 0,73 | 0,73x + 0,73 |
| $c_{11}$ (GPa) | 396 | 367 | 29x + 367 |
| $c_{12}$ (GPa) | 137 | 135 | 2x + 135 |
| $c_{13}$ (GPa) | 108 | 103 | 5x + 103 |
| $c_{33}$ (GPa) | 373 | 405 | -32x + 405 |

Dans le cas où la couche de GaN est soumise à une contrainte biaxiale en tension ($a > a_0$) : le rapport $c/a$ décroît créant une polarisation piézoélectrique dans le même sens que la polarisation spontanée (Fig. 1.6 (a)). Au contraire, si elle est soumise à une contrainte compressive ($a < a_0$) : le rapport $c/a$ augmente créant une polarisation opposée à la polarisation spontanée (Fig. 1.6 (b)).

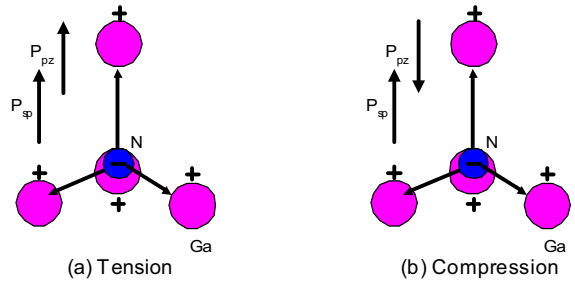



Figure 1.6. Sens de la polarisation piézoélectrique dans le GaN pour deux contraintes données : (a) en tension et (b) en compression.

## 1.3. Substrats utilisés pour la croissance du nitrure de gallium

Contrairement aux semiconducteurs tels que le Si ou le GaAs, il n'existe jusqu'alors, que peu de substrats GaN monocristallins massifs disponibles dans le commerce et ils sont un peu chers. Le

développement de cette filière a été opéré sur des substrats choisis en fonction de paramètres liés aux conditions de croissance et de manière à minimiser le fort désaccord en paramètre de maille avec GaN. Les tests ont été réalisés sur substrats saphir ($Al_2O_3$), carbure de silicium (SiC) et Si (111). Quelques caractéristiques essentielles de ces substrats sont répertoriées dans le tableau 1.4 [5][12][13].

Tableau 1.4. Caractéristiques cristallographiques et conductivités thermiques des substrats utilisés pour la croissance du GaN.

| Substrats | Structure cristalline | Paramètres de maille (Å) | Conductivité thermique (W/m·K) | Coefficients de dilatation thermique $\Delta a/a$ ($\times 10^{-6}$ K$^{-1}$) | $\Delta c/c$ ($\times 10^{-6}$ K$^{-1}$) |
|---|---|---|---|---|---|
| $Al_2O_3$ | Hexagonale | $a$ = 4,76 ; $c$ = 12,99 | 50 | 7,5 | 8,5 |
| 4H-SiC | Wurtzite | $a$ = 3,08 ; $c$ = 15,12 | 370 | 4,2 | 4,68 |
| Si (111) | Cubique | $a$ = 5,43 | 150 | 3,59 | 3,59 |

## 1.3.1. Le saphir

Le saphir est le premier substrat à avoir été utilisé pour la croissance du GaN. Ce substrat présente l'avantage d'être bon marché par rapport au substrat SiC, d'être un bon isolant et facilement disponible. Il est facilement disponible sur deux pouces avec un coût relativement faible ($ 60 le wafer) [14]. Malheureusement, le saphir présente une faible conductivité thermique et surtout un grand désaccord de maille avec le GaN [15]. Ce désaccord de maille est de à 14 % lors d'une croissance suivant l'axe *c*. Cela s'explique par le fait que pendant la croissance, il se produit une rotation de 30° de la maille du GaN par rapport à la maille du saphir comme le montre la figure 1.7.

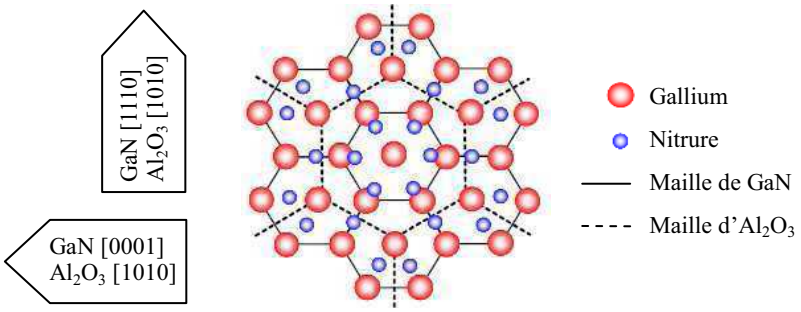



Figure 1.7. Orientation prise lors de l'épitaxie du GaN sur saphir.

Malgré les grandes différences en termes de paramètre de maille (14 %) et de dilatation thermique (de l'ordre de 35 %) entre le saphir et le GaN, ce substrat a été largement utilisé pour la croissance du GaN ces dernières années. Il a ainsi permis d'optimiser une technologie de composants en optoélectronique et en électronique.

### 1.3.2. Le silicium

Le Si (111) "Résistance élevée" (> 20 kΩ·cm) offre l'avantage d'une grande disponibilité en taille associée à un coût très compétitif vis-à-vis des autres substrats d'accueil, une conductivité thermique de 150 W/m·K à température ambiante. Néanmoins, la croissance du GaN est plus ardue et le désaccord en paramètre de maille avec GaN est encore plus élevé (17 % au mieux). Le taux de dislocations est supérieur à $10^9$ $cm^{-2}$ et la particularité de ces couches est de présenter une contrainte résiduelle élevée qui a tendance à former une mosaïque de craquelures en surface. Pour limiter la formation des dislocations et des craquelures beaucoup plus importantes qu'avec le saphir, il a fallu développer une technique de croissance différente. Néanmoins, des résultats performants et à l'état de l'art ont été obtenus pour des applications de puissance en hyperfréquence du laboratoire.

Les épitaxies de GaN réalisées sur les substrats de silicium intègrent une couche de nucléation complexe, composée d'un empilement. Cet empilement est constitué d'une succession de couches GaN/AlN épitaxiées dans des conditions de croissance optimisées [16].

### 1.3.3. Le carbure de silicium

Le SiC est le substrat le plus prometteur pour la réalisation des dispositifs de puissance. Il présente un désaccord de maille de 4 % avec le GaN. Il est très stable thermiquement, avec une excellente conductivité thermique. Les couches de GaN épitaxiées sur ce type de substrat présentent une bonne qualité cristalline avec un taux de dislocation de l'ordre de $3\times10^9$ $cm^{-2}$. Étant donné que l'AlN présente un désaccord de maille plus faible avec le GaN et un coefficient de dilatation thermique identique avec le SiC, la qualité cristalline est encore améliorée par l'épitaxie d'une couche tampon (couche de nucléation) en AlN entre le SiC et le GaN. Ainsi, la mobilité des électrons est plus élevée. La conductivité thermique du SiC est relativement très élevée, ce qui le rend très attractif pour les applications de puissance. Cependant,

le coût de ce substrat reste toujours très élevé ($ 2000 par wafer [14]).

### 1.3.4. Les substrats composites

Les substrats dénommés “composites” constituent une nouvelle approche récente et innovante pour pallier au coût élevé du SiC et conserver en partie de bonnes propriétés thermiques et un faible désaccord en paramètre de maille avec le GaN. Ces substrats sont fabriqués à partir de la technologie SmartCut$^{TM}$ développée par la société SOITEC : Le SopSiC (mono-silicon/poly-SiC) est constitué d’une fine couche de silicium (111) sur un substrat de SiC polycristallin. Le SiCopSiC (mono-SiC/poly-SiC) est de même nature sauf que la première couche correspond au SiC monocristallin. Dans les deux cas, le procédé de fabrication nécessite l’introduction d’une fine couche de $SiO_2$ entre les deux matériaux.

Ce procédé permet de réaliser des couches tampon de GaN d’excellente qualité cristallographique. La couche de SiC polycristallin permet une meilleure dissipation de la chaleur qu’avec un substrat en saphir ou en Si, mais la fine couche de $SiO_2$ peut constituer une limitation pour la dissipation thermique.

Cette technologie devrait être très compétitive pour une utilisation pour les applications de puissance à moindre coût et constituer une avancée technologique d’envergure.

### 1.3.5. Le diamant

Le management thermique du composant est un défi considérable mobilisant de nombreuses équipes. La dissipation de la chaleur dans les composants de puissance est essentiellement liée à la conductivité thermique du substrat. C’est pourquoi, l’utilisation d’un substrat de diamant polycristallin a été récemment exploitée pour la fabrication de HEMTs GaN. En effet, le diamant possède une excellente conductivité thermique de l’ordre de 2000 W/m·K à température ambiante (six fois meilleure que le SiC) et devrait permettre d’améliorer les performances des transistors. Cette technique s’apparente à une technologie à couche reportée précédente à la différence que le SiC polycristallin est remplacé par un dépôt de diamant polycristallin épais. Cette nouvelle filière innovante présente de nombreux inconvénients notamment liés au coût et à la qualité du GaN épitaxié sur Si. La viabilité économique reste à démontrer [17].

## 1.4. Techniques de croissance du matériau nitrure de gallium

La croissance consiste à déposer sur un substrat (saphir, Si ou SiC), des couches de GaN en conservant l'ordre cristallographique et la nature monocristalline de ce dernier. Pour une couche de type HEMT AlGaN/GaN, les techniques les plus utilisées pour la croissance sont la MOCVD (Metal-Organic Chemical Vapor Deposition) dans les cas d'un substrat de saphir ou SiC et la MBE (Molecular Beam Epitaxy) dans le cas du substrat de Si.

### 1.4.1. Croissance par MOCVD du GaN sur saphir

L'épitaxie par MOCVD consiste à réaliser une pyrolyse de l'ammoniac avec un composé organométallique à la surface du substrat chauffé. Ces composés sont généralement liquides à température ambiante. Cette méthode permet de réaliser des couches de GaN d'environ 10 µm d'épaisseur à des vitesses de quelques µm/h. On utilise notamment le triéthylgallium (TEGa) ou le triméthylgallium (TMGa), comme source du gallium. L'ammoniac ($NH_3$), est utilisé comme source d'azote. L'hydrogène purifié est utilisé comme gaz vecteur pour entraîner les composés organiques vers le réacteur.

Pour réaliser la croissance, le substrat est tout d'abord chauffé à haute température (environ 1000 °C) sous un flux d'ammoniac. Il se produit alors une nitruration du substrat qui permettra une meilleure nucléation de la couche tampon. Cette couche est ensuite déposée à plus basse température, environ 550 °C. Elle est ensuite cristallisée à la température de croissance de la couche, environ 1000 °C, avant l'épitaxie d'une couche épaisse de GaN. Les paramètres de croissance optimaux tels que les températures de croissance où l'épaisseur de la couche tampon varient suivant les bâtis d'épitaxie, et donc, suivant les laboratoires. Pour la MOCVD, la croissance s'effectue dans la direction (0001) et le dernier plan atomique est constitué d'atomes de gallium (face Ga).

### 1.4.2. Croissance par MBE du GaN sur Si

Les applications électroniques nécessitent des matériaux d'une très grande qualité cristallographique. Les hétérojonctions doivent être les plus abruptes possibles. L'épitaxie par MBE, est une méthode de croissance permettant de respecter ces exigences. Dans le principe, les bâtis de MBE sont constitués d'une chambre à ultra vide ($10^{-10}$ Torr).

Les différents éléments de croissance sont fournis par des cellules d'effusion situées en face du substrat. Étant donné le vide très poussé, il y a entre les cellules et le substrat des flux moléculaires caractérisés par un angle solide. Les flux émergeants des différentes cellules convergent à la surface du substrat. Des caches situés devant les cellules permettent de protéger ou d'exposer le substrat au flux des différents éléments. La combinaison d'ouverture et de fermeture des caches ainsi que le contrôle des flux des différents éléments par l'intermédiaire des températures des cellules d'effusion, permet alors la croissance des différents matériaux. La qualité des couches obtenues par cette méthode repose pour beaucoup sur la qualité du vide, mais surtout sur la pureté des matériaux sources et des gaz employés. Pour la MBE, la croissance s'effectue dans la direction (0001) et le dernier plan atomique est constitué d'atomes de nitrure (face Ga).

## 1.5. Propriétés des transistors à effet de champ

### 1.5.1. Présentation générale

Un transistor à effet de champ consiste en deux contacts ohmiques (source et drain) et un contact Schottky (grille) entre les deux contacts ohmiques. Le canal du transistor est défini par la structure considérée qui induit des charges mobiles. Quant à la commande du dispositif, elle dépend de l'extension de la zone de charge d'espace et donc de la polarisation appliquée sur la grille.

#### 1.5.1.1. Le MESFET

Ce type de transistor, apparu expérimentalement dans les années 1970, consiste à moduler la conductance d'un canal dans une zone dopée située entre deux contacts ohmiques sous l'action électrostatique d'une électrode de commande.

Dès les années 1980 [18], le MESFET a été délaissé petit à petit au détriment d'une nouvelle filière de transistor de type HEMT et à forte densité de porteurs (GaAs, InP, GaN). Cette technologie a donc été abandonnée dans les années 1990, au profit du HEMT pour l'amplification de puissance en hyperfréquence.

#### 1.5.1.2. Le HEMT

Ce type de transistor peut être désigné sous des appellations différentes : HFET, TEGFET ou plus

communément HEMT. Le MODFET est une variante du HEMT pour lequel la couche barrière AlGaN est dopée séquentiellement. La filière nitrure de gallium est développée depuis plusieurs années notamment pour ses potentialités en terme de puissance hyperfréquence.

### 1.5.2. Le HEMT AlGaN/GaN

Le transistor HEMT AlGaN/GaN, est un type de transistor à effet de champ de la filière nitrure de gallium. Les principaux avantages du HEMT AlGaN/GaN par rapport à ses concurrents sont [19][20] :

- Une charge surfacique élevée
- Une tension de claquage élevée
- Une vitesse de saturation élevée

Grâce à la technologie nitrure des HEMTs, il est possible d'améliorer les performances de puissance en hyperfréquence, d'augmenter la tension de claquage et d'avoir un meilleur contrôle sur l'effet des pièges en surface et interfaces du composant. Le tableau 1.5 résume l'état de l'art des différentes technologies obtenu sur GaN.

Tableau 1.5. Récapitulatif de l'état de l'art en fonction du substrat utilisé et de la technologie employée. L'état de l'art TIGER est mentionné en rouge.

| Substrat | HEMT Non Passivé | HEMT Passivé | Field Plate-HEMT* |
|---|---|---|---|
| $Al_2O_3$ | 4 W/mm @ 4 GHz [21]<br>3 W/mm @ 4,2GHz [22] | 4,65 W/mm @ 20 GHz [23] | 12 W/mm @ 4 GHz [24] |
| SiC | 12 W/mm @ 10 GHz [25] | 7,9W/mm @ 18 GHz [26]<br>10,5W/mm @ 40 GHz [27] | 41,4 W/mm @ 4 GHz [28]<br>30 W/mm @ 8 GHz [29]<br>10,4 W/mm @ 10 GHz [30]<br>11 W/mm @ 10 GHz [31]<br>9,1 W/mm @ 18 GHz [32]<br>5,7 W/mm @ 30 GHz [30] |
| GaN | – | 9,4 W/mm @ 10 GHz [33] | – |
| SopSiC | 3,4 W/mm @ 10 GHz [34] | – | – |
| SiCopSiC | 5,4 W/mm @ 10 GHz [34] | – | – |
| Si (111) | 1,9 W/mm @ 10 GHz [35] | 12 W/mm @ 2,14 GHz [36]<br>5,1 W/mm @ 18 GHz [37] | 7 W/mm @ 10 GHz [38] |

Les résultats les plus marquants ont été obtenus aux États Unis avec un record à 41,4 W/mm à 4 GHz pour une tension de polarisation de drain de 135 V [28] et 10,5 W/mm à 40 GHz sur substrat SiC [27]. Cependant le laboratoire commun TIGER (Thales IEMN GaN Electronics Research) a pu obtenir soit en interne, soit en collaboration externe, des résultats à l'état de l'art mondial avec des densités de puissance de 10,4 W/mm en bande *X* (10 GHz), 7,9 W/mm à 18 GHz sur substrat SiC et 5,1 W/mm à 18 GHz sur substrat Si (111).

### 1.5.3. Topologie du HEMT AlGaN/GaN

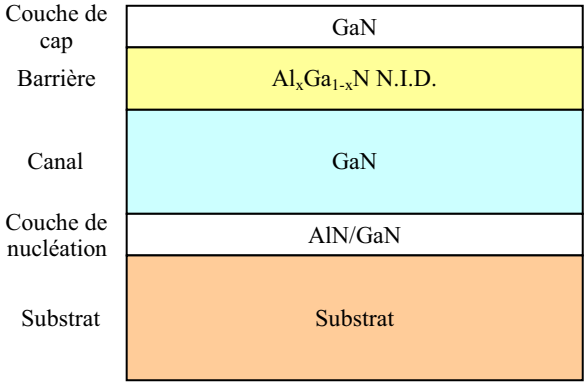



Figure 1.8. Structure typique d'un transistor HEMT AlGaN/GaN.

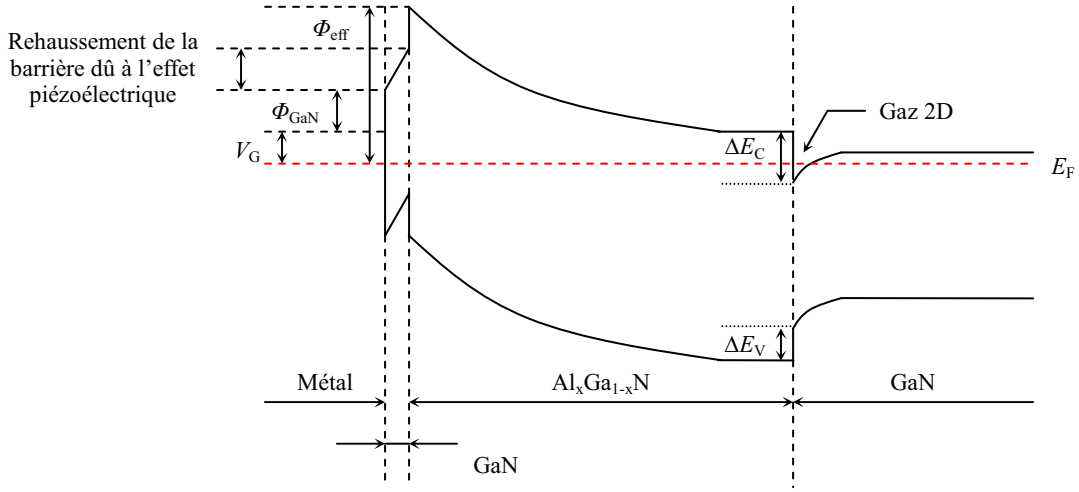



Figure 1.9. Diagramme de bande d'une hétérojonction AlGaN/GaN non dopée.

La structure typique d'un transistor HEMT AlGaN/GaN ainsi que la structure de bande associée sont représentées respectivement (Figures 1.8 et 1.9). Ce transistor est constitué de l'empilement de couches suivant en partant du dessus :

- Une couche de cap de GaN

Cette couche de GaN non-dopée dont l'épaisseur varie de 1 nm à quelques nanomètres d'épaisseur permet de protéger la surface de la couche barrière AlGaN d'une oxydation très probable de l'aluminium ou d'une éventuelle contamination extérieure. La couche de cap peut être ensuite gravée afin de déposer la grille sur la zone active afin de réduire le problème de courant de fuite de grille observé sur le contact Schottky. Notons cependant que l'ensemble des études menées au laboratoire et publiées dans la littérature, ne permet pas de conclure statistiquement de la réelle nécessité de la présence de cette couche de cap.

- Une couche de barrière d'$Al_xGa_{1-x}N$

Cette couche barrière de bande interdite relativement plus élevée dont le rôle est de permettre de construire l'hétérojonction. Pour les HEMTs AlGaN/GaN, cette couche réalisée en AlGaN, est généralement non dopée. En effet, la forte contrainte induit un effet piézoélectrique qui entraîne l'apparition d'électrons dans le puits même si la couche d'AlGaN n'est pas dopée. L'épaisseur de cette couche peut varier de 15 nm à 25 nm.

- Une couche de canal de GaN

La couche de canal est constituée du matériau GaN non intentionnellement dopé. Elle est importante dans la mesure où elle reçoit le gaz bidimensionnel d'électrons (2DEG) qui déterminera les performances du composant. En effet, les performances hyperfréquences dépendent beaucoup de la qualité du transport de charge qu'il présente.

- Une couche de nucléation (super-réseau AlN/GaN)

Elle permet d'adapter en paramètre de maille la couche tampon de GaN et le substrat d'accueil de manière à en minimiser le taux de défauts structuraux (dislocations en particulier).

➢ Un substrat

Le substrat constitue le support de croissance. Comme il a été explicité précédemment, le substrat peut être de différente nature (Si, $Al_2O_3$, SiC etc.…) servant de support mécanique et ayant une résistivité suffisante pour pouvoir présenter un caractère isolant notamment en hyperfréquence.

## 1.5.4. Propriétés électriques du HEMT AlGaN/GaN

### 1.5.4.1. Polarités dans une hétérostructure

Le nitrure de gallium en phase hexagonale présente une orientation de la liaison Ga-N dans la direction (0001) qui définit la polarité de la couche (Fig. 1.10). L'ensemble des échantillons étudiés dans ce travail présente une polarité à face gallium. Cette orientation est imposée par la nature des atomes (Ga ou N) déposés en début de croissance de la couche de nucléation.




Figure 1.10. Polarité des couches de GaN hexagonales : (a) polarité gallium et (b) polarité azote.

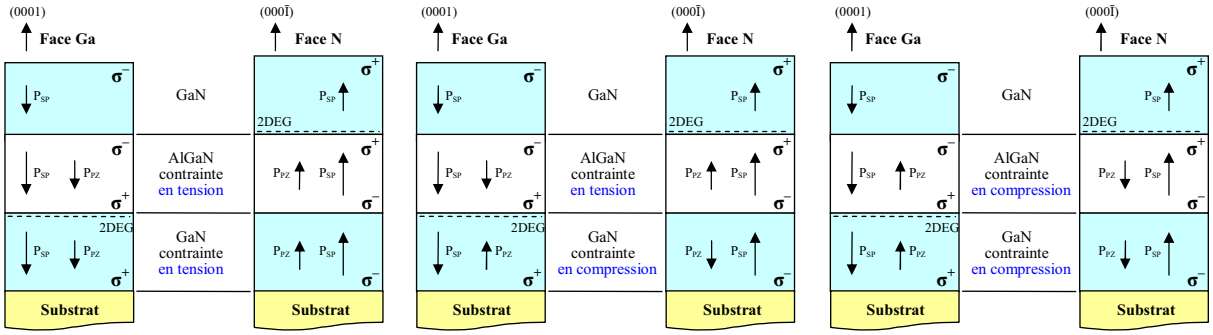



Figure 1.11. Trois représentations des sens des vecteurs de polarisations spontanée et piézoélectrique dans une structure GaN/AlGaN/GaN à face gallium et à face azote en fonction du type de contrainte.

Étant donné que le vecteur de polarisation spontanée est orienté de l'atome azote vers l'atome gallium, les structures à face Ga et à face N, présentent un vecteur de polarisation spontanée de signe opposé. Selon le type de contrainte ajoutée à la polarité cristalline, la polarisation piézoélectrique totale s'oriente différemment comme l'illustre la figure 1.11. La conséquence de ce changement d'orientation de la polarisation totale se répercute sur la position du gaz bidimensionnel (2D).

### 1.5.4.2. Gaz d'électrons bidimensionnel

L'origine du gaz d'électrons dans les transistors de type HEMT au niveau de l'hétérojonction AlGaN/GaN résulte des effets de polarisation spontanée et de polarisation piézoélectrique dans les deux couches : AlGaN et GaN. Les polarisations totales dans les deux couches sont les sommes des polarisations spontanée et piézoélectrique :

$$\vec{P}_{\mathrm{AlGaN}} = \vec{P}^{\mathrm{PZ}}_{\mathrm{AlGaN}} + \vec{P}^{\mathrm{SP}}_{\mathrm{AlGaN}} \tag{1.4}$$

$$\vec{P}_{\mathrm{GaN}} = \vec{P}^{\mathrm{PZ}}_{\mathrm{GaN}} + \vec{P}^{\mathrm{SP}}_{\mathrm{GaN}} \tag{1.5}$$

- Polarisation spontanée

La polarisation spontanée du composé ternaire $Al_xGa_{1-x}N$ est déterminée par une loi linéaire, qui est en fonction du pourcentage d'aluminium $x$ [9] :

$$\left|\vec{P}^{\mathrm{SP}}_{\mathrm{AlGaN}}\right| = -0{,}052x - 0{,}0019\ \mathrm{C/m^2} \tag{1.6}$$

La polarisation spontanée du GaN est résumée dans le tableau 1.2.

- Polarisation piézoélectrique

Pour l'$Al_xGa_{1-X}$ et de la même façon que pour la polarisation spontanée, une loi linéaire peut être établie afin de déterminer les constantes piézoélectriques $e_{31}$ et $e_{33}$ en fonction du taux d'aluminium $x$ [10] :

$$e_{31} = -0{,}11x - 0{,}49\ \mathrm{C/m^2} \tag{1.7}$$

$$e_{33} = -0{,}73x + 0{,}73\ \mathrm{C/m^2} \tag{1.8}$$

Les constantes élastiques de l'AlGaN sont obtenues par des interpolations linéaires à partir des

valeurs obtenues pour l'AlN et le GaN [10] :

$$c_{13}(x) = 5x + 103 \text{ GPa} \tag{1.9}$$

$$c_{33}(x) = -32x + 405 \text{ GPa} \tag{1.10}$$

Les valeurs des constantes piézoélectriques ainsi que les constantes élastiques pour l'AlN et le GaN sont récapitulées dans le tableau 1.3. La polarisation piézoélectrique dans l'AlGaN peut être exprimée en fonction des coefficients piézoélectriques $e_{ij}$ et les constantes élastiques $c_{ij}$ suivant la relation suivante :

$$\left|\vec{P}^{PZ}_{AlGaN}\right| = 2\frac{a - a_0(x)}{a_0(x)}\left(e_{31}(x) - e_{33}(x) \times \frac{C_{13}(x)}{C_{33}(x)}\right) \tag{1.11}$$

où $a$ est le paramètre de maille du matériau contraint.

$a_0$ est le paramètre de maille du matériau relaxé.

- Calcul de la densité d'électrons $N_S$ dans le canal 2DEG

D'après les relations 1.4 et 1.5, pour avoir un confinement optimum des électrons, il faut que les polarisations piézoélectrique et spontanée dans l'AlGaN soient de même direction. La discontinuité de la polarisation totale à l'interface AlGaN/GaN qui induit une densité de charge surfacique s'écrit :

$$|\sigma| = \left|\vec{P}^{SP}_{AlGaN}(x) + \vec{P}^{PZ}_{AlGaN}(x) - \vec{P}^{SP}_{GaN}(x)\right| \tag{1.12}$$

De plus, on peut déterminer la densité d'électrons du gaz 2D à l'aide de la résolution auto-cohérente des équations de Poisson et de Schrödinger. Nous considérons que la commande de charge est basée uniquement par un contact Schottky au niveau de la surface. Nous supposons aussi que la densité d'électrons au niveau de l'hétérojonction AlGaN/GaN peut être déterminée par l'approche du canal progressif. Par conséquent, le potentiel peut être déterminé par la résolution de l'équation de Poisson dans la direction normale à la surface.

En utilisant la théorie des masses effectives, l'équation de Schrödinger peut s'écrire [39][40] :

$$-\frac{\hbar^2}{2}\frac{d}{dz}\left(\frac{1}{m(z)}\frac{d}{dz}\right)\varphi_n + \left(V(z) + \Delta E_C(z)\right)\varphi_n = W_n\,\varphi_n \tag{1.13}$$

où $z$ est l'axe verticale.

$m(z)$ est la masse effective de l'électron.

$V$(z) est le potentiel.

$\Delta E_C$ est la discontinuité de la bande de conduction à l'interface AlGaN/GaN.

$\varphi_n$ est la fonction d'onde de l'électron.

$W_n$ est l'énergie propre associée $\varphi_n$.

En absence du champ électrique externe, la polarisation totale dans l'hétérostructure de type wurtzite AlGaN/GaN est la somme de la polarisation spontanée et piézoélectrique. En fait, le fort gradient de cette polarisation à l'interface AlGaN/GaN est responsable de la formation du gaz 2D même sans dopage de la zone de barrière. Par conséquent l'effet des polarisations spontanée et piézoélectrique doit être inclus dans l'équation de Poisson pour déterminer le déplacement électrique $D(z)$ [40][41].

$$\frac{d}{dz}D(z)=\frac{d}{dz}\left(-\varepsilon(z)\frac{d}{dz}V(z)+P(z)\right)=q(N_D-n(z)) \tag{1.14}$$

où $\varepsilon(z)$ est la constante diélectrique.

$P(z)$ est la polarisation totale.

$n(z)$ est la densité d'électrons.

$N_D$ est la densité de dopage.

Dans la simulation, ces deux équations sont résolues d'une manière itérative auto-cohérente. Le potentiel $V$ est d'abord obtenu par la résolution de l'équation de Poisson, ensuite nous injectons le potentiel ainsi obtenu dans l'équation de Schrödinger afin de déterminer les énergies propres et les fonctions d'ondes du système. La nouvelle densité d'électrons est alors calculée en appliquant des statistiques de Fermi pour trouver l'addition des densités d'électrons dans les sous bandes d'énergie [39][40].

$$n(z)=\frac{m(z)k_BT}{\pi\hbar^2}\sum_i\left|\varphi_i(z)\right|\ln\left[1+\exp\left(\frac{E_F-E_i}{k_BT}\right)\right] \tag{1.15}$$

où $E_F$ est le niveau de Fermi.

$E_i$ est l'i$^{ème}$ énergie propre associée à la fonction d'onde $\varphi_i$.

$T$ est la température.

$k_B$ est la constante de Boltzmann.

La densité d'électrons calculée est alors substituée dans l'équation de Poisson, l'itération est répétée jusqu'à ce que la convergence soit réalisée.

Afin de déterminer la distribution de la densité d'électrons dans le gaz 2D en utilisant les équations

de Schrödinger et de Poisson, la dépendance des paramètres du matériau à l'égard de la composition *x*, de l'aluminium et de la température, devrait être prise en compte. Un paramètre important qui détermine la densité du gaz 2D dans un HEMT est la discontinuité de la bande de conduction $\Delta E_C$. D'une manière générale, une densité du gaz 2D plus élevée peut être atteinte avec un plus grand $\Delta E_C$, à l'interface AlGaN/GaN. La variation de $\Delta E_C$ en fonction du taux d'aluminium *x* et de la température, est donnée par la relation suivante [41] :

$$\Delta E_C(x,T) = 0.75\left(E_g^{AlGaN}(x,T) - E_g^{GaN}(T)\right) \tag{1.16}$$

1.5.4.3. Effets des paramètres technologiques sur la densité d'électrons surfacique $N_S$

En utilisant le modèle Schrödinger-Poisson, la densité d'électrons $N_S$ dans le puits quantique peut être calculée en fonction de la composition *x* de l'$Al_xGa_{1-x}N$, de l'épaisseur de la couche barrière et du dopage de la couche barrière.

- Influence du taux d'aluminium sur $N_S$

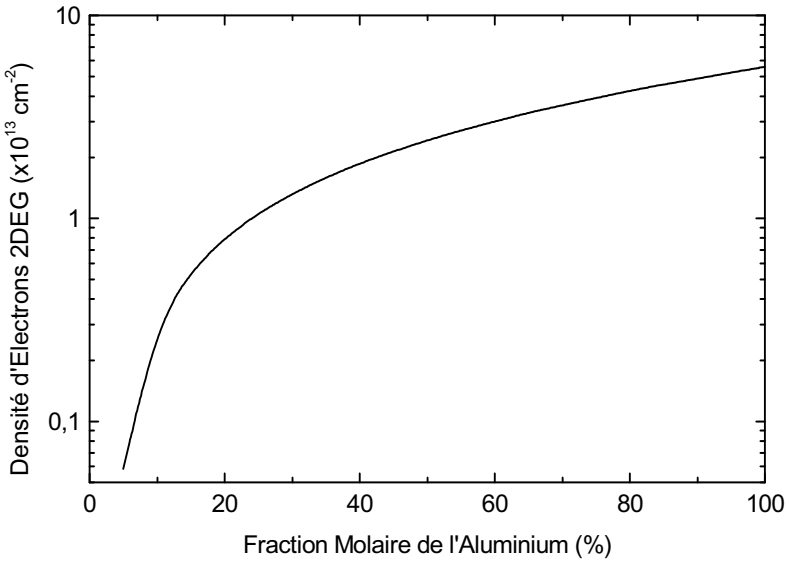



Figure 1.12. Évolution de la densité d'électrons 2DEG en fonction de la fraction molaire de l'aluminium *x*. L'épaisseur de la barrière est de 23 nm avec le dopage de $10^{15}$ $cm^{-3}$.

La figure 1.12 montre qu'une augmentation de la densité d'électrons lorsque la fraction molaire d'aluminium *x* augmente très particulièrement pour un pourcentage d'aluminium inférieur à 35 %, au-delà

de cette valeur la densité d'électrons sature. Ceci est dû d'une part à une diminution du désaccord de maille entre l'AlGaN et le GaN qui se traduit par la baisse de la polarisation piézoélectrique dans la couche barrière AlGaN et d'autre part par la diminution de la discontinuité de la bande de conduction $\Delta E_C$.

- Influence de l'épaisseur de la couche barrière AlGaN sur $N_S$

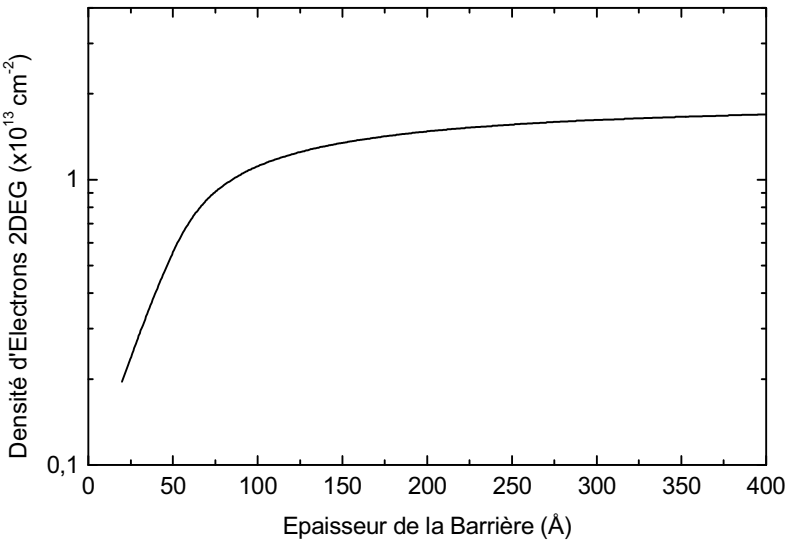



Figure 1.13. Évolution de la densité d'électrons 2DEG en fonction de l'épaisseur de la couche barrière $Al_{0.25}Ga_{0.75}N$ avec le dopage de $10^{15}$ $cm^{-3}$.

Pour comprendre l'effet de l'épaisseur d'AlGaN, nous avons tracé l'évolution de la densité d'électrons 2DEG $N_S$ en fonction de l'épaisseur de la barrière AlGaN (Fig. 1.13). Pour des épaisseurs inférieures à 150 Å, nous observons que la densité $N_S$ augmente d'une manière monotone avec l'épaisseur d'AlGaN et atteint une saturation pour des épaisseurs d'AlGaN supérieures à 250 Å.

- Influence du dopage de la couche barrière AlGaN sur $N_S$

La figure 1.14 montre l'évolution de la densité d'électrons 2DEG $N_S$ avec l'épaisseur de la couche barrière d'$Al_{0.25}Ga_{0.75}N$ relative à différents dopages de cette dernière. En conséquence, il est évident que l'obtention de fortes densités d'électrons nécessite soit un fort dopage ou une épaisseur plus importante de la couche barrière d'AlGaN. Cette dernière solution semble être la plus appropriée puisqu'elle permet de réduire la capacité de grille et minimise les effets indésirables liés aux pièges sous la grille.

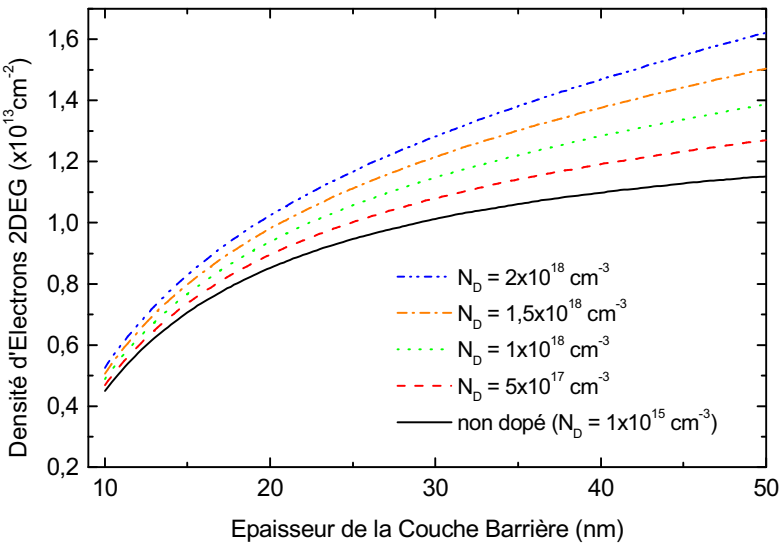



Figure 1.14. Évolution de la densité d'électrons 2DEG en fonction de l'épaisseur de la couche barrière d'$Al_{0.25}Ga_{0.75}N$ pour plusieurs valeurs du dopage.

### 1.5.4.4. Limitations des composants

- Contrainte technologique liée à la grille Schottky

La position du contact Schottky n'est pas anodine. Elle est judicieusement choisie à proximité du contact de source, de manière à l'éloigner du contact de drain pour pouvoir polariser à fort champ électrique et maximaliser la tension de claquage. Cependant, si cette distance est trop grande, la structure est pénalisée pour la montée en fréquence. Pour la distance source-grille, elle doit être la plus courte possible (0,5 µm à 1 µm).

- Ionisation par impact

L'ionisation par impact ou par choc apparaît dans un matériau où règne un champ électrique intense. En effet, un électron, qui dérive dans un solide sous l'effet d'un champ électrique, gagne de l'énergie sous forme d'énergie cinétique et en transmet une partie au cristal par le biais des collisions avec les phonons. Ce processus assure la dissipation thermique de l'énergie cinétique perdue par les électrons. Si le champ électrique est suffisamment intense, certains électrons peuvent acquérir une énergie telle que leur impact sur un atome du réseau conduit à la rupture d'une liaison et à la création d'une paire électron-trou. Ce processus peut devenir cumulatif et conduire au phénomène d'avalanche. Ce phénomène se produit dans le canal du transistor, en sortie de grille côté drain, où le champ électrique est maximum et peut aboutir si la

densité électronique est très grande, au claquage du canal.

Une des possibilités pour repousser cet effet d'avalanche est de réduire l'énergie des porteurs dans le canal en sortie de grille par une redistribution côté drain, grâce à l'ajout d'une plaque de champ (Fieldplate) [42] et permet aussi à bas champ électrique, de réduire les effets de dispersion. Une meilleure répartition du champ électrique dans l'espace grille-drain entraîne des valeurs de l'énergie maximale qui peuvent rester sous la valeur critique pour des tensions drain-source plus élevées. Cette technologie permet donc d'augmenter la tension de claquage.

- Influence des pièges

Les pièges sont habituellement assimilés à une occupation de niveaux d'énergie a priori impossibles, puisqu'ils sont situés à différents niveaux plus ou moins profonds à l'intérieur de la bande interdite du semiconducteur. Ceux-ci sont plus ou moins énergétiques et leur activation est conditionnée bien entendu par un apport en énergie, sous quelque forme que ce soit (énergie potentielle par la polarisation, énergie thermique par échauffement, énergie électromagnétique par luminescence). Néanmoins, leur présence se trouve être une des principales causes de la dégradation des performances électriques des composants de la filière GaN. L'origine physique de ces pièges reste méconnue et est encore aujourd'hui un objet d'investigation. Aussi, de nombreuses techniques de caractérisation permettent la mise en exergue de niveaux d'énergie singuliers, qu'il est possible d'identifier. Nous pouvons citer la DLTS (spectroscopie des transitoires de capacité des défauts profonds), la spectroscopie de photocourant et la technique de photoluminescence. Nous pouvons mettre en évidence de cette manière, que les effets de pièges peuvent résulter de défauts cristallins, tels que les dislocations, les lacunes d'azote, la présence d'impuretés ou des pertes de périodicité. Les défauts structuraux de surface semblent également avoir une implication non négligeable dans ce phénomène parasite [43].

Afin de minimiser l'impact de ces pièges, des améliorations considérables ont été apportées aussi bien au niveau des techniques d'élaboration du matériau, permettant de réduire ainsi l'impact des pièges en volume, qu'au niveau des procédés technologiques permettant de réduire l'effet des pièges de surface : traitements de surface (nettoyage par voie chimique ou par plasma), recuit, ou passivations de la surface par différents diélectriques. Néanmoins, tous ces facteurs peuvent faire l'objet, à eux seules, d'un énorme travail, de mesure et de caractérisation afin d'en améliorer la compréhension.

## 1.5.5. Propriétés thermiques des HEMTs AlGaN/GaN

### 1.5.5.1. Transfert thermique

L'énergie dissipée dans la partie active d'un transistor peut être évacuée selon différents mécanismes vers le milieu extérieur : conduction, convection, radiation.

La chaleur se propage de la partie active du transistor où elle est générée vers l'extérieur essentiellement par conduction thermique. Aux interfaces du composant avec le milieu extérieur, le transfert thermique peut se faire également par convection et radiation.

- Transfert par conduction

La conduction thermique correspond à l'échauffement et à la propagation de la chaleur dans un corps, sans déplacement de matière. Elle est causée par les oscillations des atomes, proportionnelles au gradient de la température et au coefficient caractérisant la conductivité thermique du matériau. Dans le cas d'un milieu solide, homogène et isotrope, les atomes sont liés par le réseau cristallin. Les vecteurs élémentaires du transfert thermique sont les phonons et les électrons libres.

La quantité de chaleur conductif ou flux $\vec{Q}$ traversant le matériau, se déplace de la région à plus haute température vers la région ayant la plus basse température afin de réduire l'auto-échauffement du système [44][45]. Le flux de chaleur est défini par unité de surface et il est directement proportionnel au gradient de température local :

$$\vec{Q} = -\kappa_{\mathrm{L}}(T)\vec{\nabla}T \tag{1.17}$$

où $\kappa_{\mathrm{L}}$ est le coefficient de conductivité thermique qui dépend de la température (W/m·K).

- Transfert par radiation

Ce phénomène correspond au transfert de chaleur par rayonnement électromagnétique dans la gamme allant de l'infrarouge à l'ultraviolet (Fig. 1.15) [46][47].

La quantité de chaleur émise par une surface $S$ de température $T$, à son environnement de température $T_{\mathrm{env}}$, est donnée par la relation suivante :

$$Q_{\mathrm{R}} = \varepsilon \sigma_{\mathrm{SB}} S\left(T^4 - T_{\mathrm{env}}^4\right) \tag{1.18}$$

où $\sigma_{SB}$ est la constante de Stefan Boltzmann qui vaut $5{,}67\times10^{8}$ W/m$^2$·K$^2$.

$\varepsilon$ est l'émissivité de la surface.

L'énergie émise par rayonnement est proportionnelle à la quatrième puissance de sa température. L'énergie rayonnée ne devient donc importante que pour les températures les plus élevées.

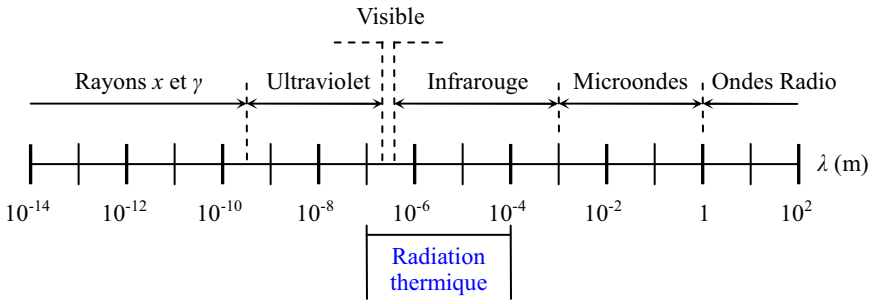



Figure 1.15. Spectre électromagnétique.

➢ Transfert par convection

Lorsqu'un fluide est en contact avec un composant de température différente, le transfert de chaleur du corps le plus chaud au corps le plus froid s'effectue par convection [44][45]. Celle-ci est présente par exemple entre un composant et son environnement. La majorité des composants électroniques sont utilisés dans l'air ambiant. Ce dernier se déplace par rapport à la surface du composant. Les variations de densité qui en résultent provoquent des courants au sein de l'air, animés de mouvements circulaires dans une zone appelée zone de turbulence. Ces courants transportent la chaleur dans tout l'air et ne s'arrêtent que lorsque tout le fluide est à la même température que la surface du composant.

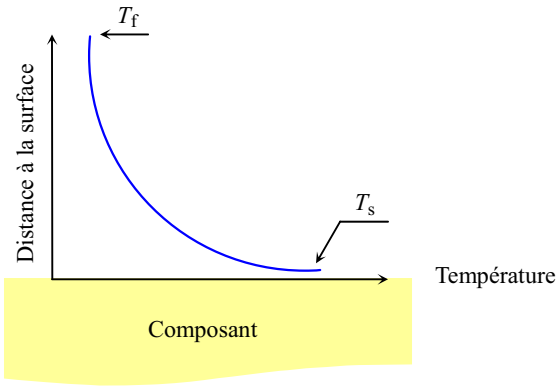



Figure 1.16. Évolution de la température lors de la convection.

La température évolue donc d'une valeur $T_s$ à la surface vers la température de l'air ambiant $T_f$ comme il est montré sur la figure 1.16.

L'évolution de la température n'est pas facile à décrire car les courants de convection dépendent de la forme géométrique de la surface du composant en contact avec l'air. Par contre nous pouvons utiliser comme approximation la loi de refroidissement de Newton qui traduit ce phénomène grâce au facteur $h_C$ de convection [48] :

$$P_{CV} = h_C S(T_s - T_f) \tag{1.19}$$

où $P_{CV}$ est le transfert de chaleur par convection.

$h_C$ est le facteur de transfert thermique par convection (W/m·K$^2$).

Ce facteur ne dépend pas de la nature du matériau mais de celle du fluide en contact ainsi que de l'état de surface du composant. Certaines valeurs de $h_C$ sont données dans le tableau suivant, afin d'avoir l'ordre de grandeur de la contribution de la convection.

Tableau 1.6. Différentes valeurs des facteurs de transfert thermiques par convection.

| | $h_C$ (W/m·K$^2$) |
|---|---|
| Convection naturelle de l'air sur un plan | 4,5 |
| Convection naturelle de l'air dans un cylindre de 2 cm de diamètre | 6,5 |

Afin d'avoir un ordre de grandeur de la contribution des différents mécanismes de transfert de chaleur dans un transistor, un calcul analytique à été réalisé avec des hypothèses simplificatrices sur un transistor HEMT AlGaN/GaN/Si bi-doigts de 250 µm de développement de grille [49][50]. Ce composant est monté dans une puce en silicium dont la surface est de 3 mm$^2$. Le report de la puce est réalisé sur du cuivre doré dont la température est maintenue égale à la température ambiante (300 K).

Dans le cas du transfert thermique par conduction, la valeur de la résistance thermique utilisée dans les calculs est de 62 K/W. Cette résistance thermique est déterminée par des mesures pulsées [51]. Pour le cas du transfert par radiation, nous avons supposé que le composant se comporte comme un corps noir avec une émissivité $\varepsilon = 1$ et qu'il n'y a pas de source de chaleur à proximité du composant, c'est-à-dire, pas de rayonnement absorbé par le transistor. Enfin, pour le transfert thermique par convection, la température de l'air ambiante est de 300 K. La valeur de $h_C$ utilisée dans les calculs est de 12 W/m$^2$·K.

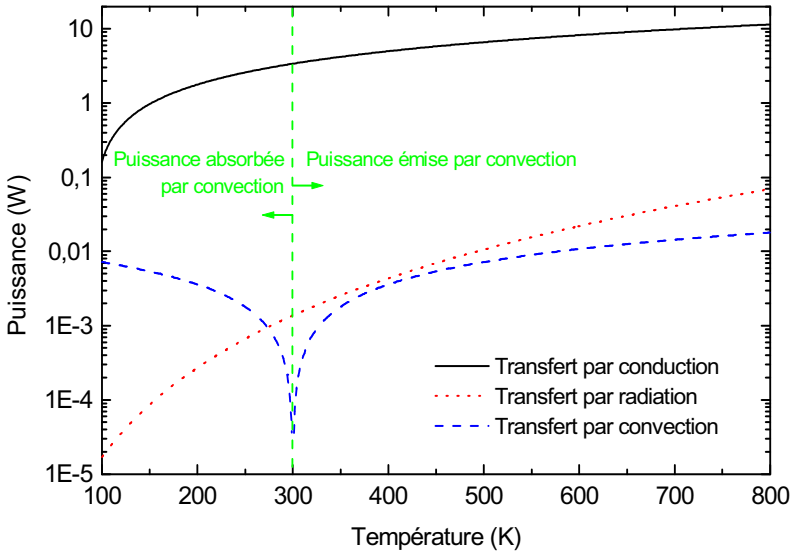



Figure 1.17. Les différents modes de transfert de chaleur pour un HEMT AlGaN/GaN/Si.

La figure 1.17 présente la puissance dissipée pour les trois modes de transfert de chaleur en fonction de la température du composant. Pour les températures supérieures à la température ambiante, on observe que la contribution de la radiation et la convection est de l'ordre de 1,5 % par rapport à la contribution de la conduction. C'est la raison pour laquelle nous avons négligé dans la suite de notre étude le transfert de chaleur par radiation et même par convection [50].

### 1.5.5.2. Résistance thermique en volume

Dans les composants électroniques tels que les transistors HEMT, les zones de dissipation de puissance (sources de chaleur) présentent le plus souvent de très petites volumes par rapport à celle du composant. Si nous prenons le cas d'une source de puissance dissipée d'un transistor HEMT sur un substrat de grande dimension, le flux de chaleur produit par cette source de puissance atteindra le substrat par des chemins divergents.

La combinaison de la puissance dissipée et de la variation de température, permet de définir la résistance thermique du composant ($R_{th}$) [52]. Cette résistance thermique est une grandeur non linéaire notamment en fonction de la température. Elle permet de mesurer l'efficacité thermique du système. En régime établi, la résistance thermique est donnée par la relation suivante :

$$R_{th} = \frac{T_i - T_f}{P_{CD}} \tag{1.20}$$

où $T_i$ est la température initiale.

$T_f$ est la température finale.

$P_{CD}$ est la puissance dissipée par conduction.

Une méthode très approximative permet de déterminer analytiquement la résistance thermique des composants en fonction de la conductivité thermique et des dimensions du composant. Cette méthode est basée sur l'hypothèse que la chaleur se propage à travers le substrat en suivant un chemin conique ou pyramidal suivant que le doigt est rond ou rectangulaire (Fig. 1.18) [53][54].

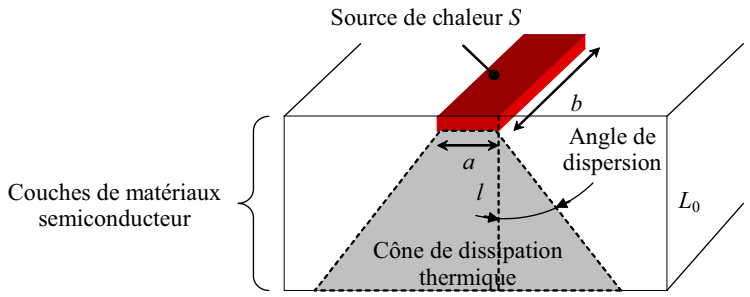



Figure 1.18. Dispersion du flux de chaleur par l'hypothèse du cône de dissipation.

La température, et donc la résistance thermique du composant, est fortement dépendante de la puissance dissipée. Cette dernière est proportionnelle à la surface d'émetteur $S$ et à la densité de puissance $p$ :

$$P_{CD} = p \cdot S \tag{1.21}$$

Si nous considérons que la conductivité thermique du matériau $\kappa_L$ est indépendante de la température, la résistance thermique donnée par [49] :

$$R_{th} = \frac{1}{\kappa_L} \int_0^{L_0} \frac{\partial l}{S(l)} \tag{1.22}$$

où $l$ est l'hauteur du cône de dissipation.

Dans le cas où la source de chaleur est de forme rectangulaire (Fig. 1.18), la résistance thermique se calcule de la façon suivante:

$$R_{th} = \frac{1}{\kappa_L} \int_0^{L_0} \frac{\partial l}{ab + 2b\tan(\alpha)l} \tag{1.23}$$

Ces calculs de résistance thermique ne donnent pas une correspondance parfaite, car l'angle de dispersion $\alpha$ dépend du gradient de température dans la direction du flux principal allant de la source de

chaleur vers la zone la plus froide (base du substrat) et dans le plan perpendiculaire à cette direction. Aussi, les hypothèses que nous somme obligés de faire avec cette méthode analytique comme les valeurs constantes de la conductivité thermique $\kappa_L$ et de l'angle de dispersion $\alpha$ sont incapables de prendre en compte les conditions aux limites réelles d'une part, et de décrire des structures à géométries complexes d'autre part.

Pour plus de précision, il est nécessaire de résoudre numériquement l'équation de la chaleur en tout point de l'espace avec un maillage adéquat de la structure afin de décrire finement les effets thermiques dans les composants.

### 1.5.5.3. Effet d'auto-échauffement

Les effets thermiques dans les transistors HEMTs vont induire des variations dynamiques lentes en régime statique. L'état thermique résulte de la température ambiante et d'auto-échauffement du transistor dû au passage d'un courant drain source qui peut être important.

À partir des mesures en régime statique et en régime d'impulsions des caractéristiques d'un transistor HEMT réalisées au sein de notre équipe (Fig. 1.19), nous observons une décroissance du courant drain-source lorsque $V_{DS}$ augmente entraînant une chute de la transconductance de sortie en statique par rapport à une mesure en impulsions. En effet, en régime d'impulsions, l'échauffement est moins important, en particulier si les impulsions sont courtes et le rapport cyclique est faible.

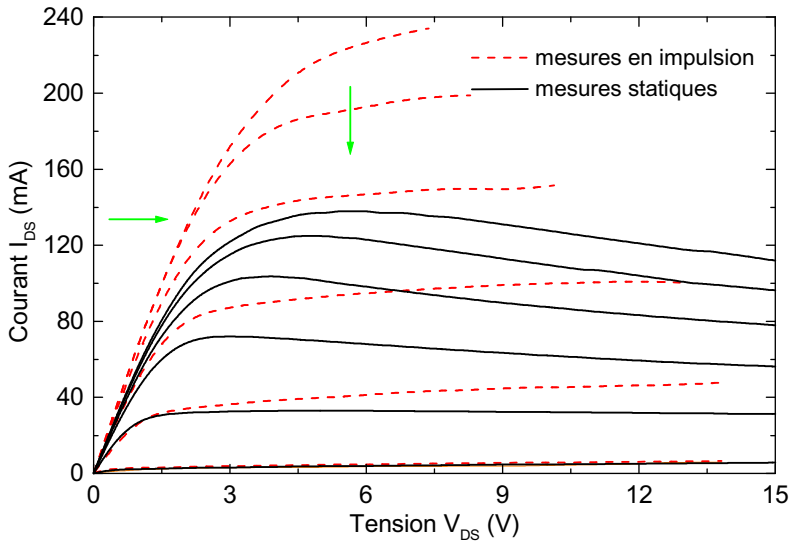



Figure 1.19. Caractéristiques $I(V)$ obtenus par des mesures en statique et en impulsions.

En effet, l'élévation de la température est un phénomène néfaste, car celle-ci entraîne une agitation thermique plus importante et des courants de fuites. Ces courants de fuites sont principalement dus au contact de grille et au substrat [55]. Les courants de fuites de grille, qui dépendent de la hauteur de la barrière Schottky à l'interface métal/semiconducteur, augmentent avec la température via des mécanismes d'émission et de diffusion thermoïoniques, tandis que les fuites de substrat proviennent de l'augmentation de sa conductivité avec la température. De plus l'augmentation de la température conduit à une dégradation des propriétés de transport notamment la vitesse des porteurs essentiellement en raison de l'augmentation des interactions avec les phonons. Il en résulte une diminution de la transconductance.

## 1.6. Propriétés des diodes Gunn de la filière nitrure de gallium

### 1.6.1. Présentation générale

La première diode Gunn est découverte par J.B. Gunn à IBM en 1963. Maintenant, les diodes Gunn deviennent d'excellents candidats pour la génération de microondes en haute fréquence et à fortes puissances. Ce type de diodes exploite l'effet Gunn se produisant dans des semiconducteurs, en particulier les matériaux III-V. Contrairement à la diode *P-N* constituée de deux parties semiconductrices, l'une dopée en accepteur (dopage de type *P*) et l'autre en donneur d'électron (type *N*), la diode Gunn ne nécessite qu'un seul type de dopage de type *N*. Dans une diode Gunn, trois régions existent, deux d'entre elles, proches des contacts ohmiques, sont fortement dopées $N^+$, la partie centrale est quand à elle plus faiblement dopée *N* (Fig. 1.20).

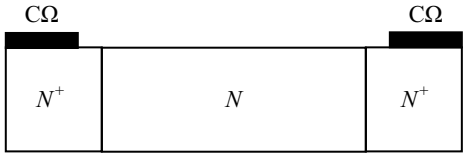



Figure 1.20. Structure de la diode Gunn.

La résistance différentielle négative associée avec les propriétés de la couche intermédiaire, permet la construction d'un oscillateur simplement en appliquant une tension convenable au composant. La fréquence d'oscillation est déterminée en partie par la couche centrale, mais peut être ajustée par des

facteurs externes. Les diodes Gunn sont utilisées dans la construction d'oscillateurs à partir de 10 GHz et une cavité résonante est souvent utilisée pour accorder cet oscillateur.

### 1.6.2. Avantages des diodes Gunn GaN

Le matériau GaN a une grande vitesse de dérive (vitesse pic ~ $3\times10^7$ cm/s [56]) et un temps de relaxation court. Ces propriétés permettent d'obtenir des fréquences d'oscillation très élevées, qui peuvent atteindre le domaine du THz. C'est pourquoi nous avons choisi d'étudier les potentialités de cette filière et d'y analyser en particulier les influences des effets thermiques.

### 1.6.3. Modèle du transfert intervallée

Dans cette section, nous expliquons le principe de l'apparition de la résistance différentielle négative par le modèle du transfert intervallée. Conformément à la théorie de la bande d'énergie, pour le matériau GaN, la structure de bande est exposée figure 1.21 [57].

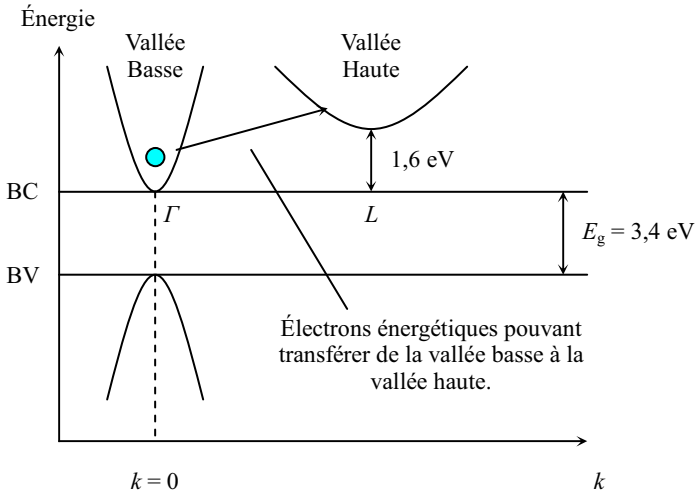



Figure 1.21. Bande d'énergie en fonction du vecteur d'onde pour le GaN.

La masse effective de l'électron est donnée par :

$$m_n^* = \frac{\hbar^2}{\frac{d^2\xi}{dk^2}} \tag{1.24}$$

où $\xi$ est l'énergie.

$k$ est le vecteur d'onde.

À partir de l'expression 1.24, nous pouvons noter que le terme $\frac{d^2\xi}{dk^2}$ représente la courbure de la courbe $\xi(k)$.

La figure 1.21 nous montre que la courbure de la vallée $\Gamma$ est plus petite que celle de la vallée supérieure. Donc la masse effective de l'électron dans la vallée $\Gamma$ doit être plus petite que celle dans la vallée supérieure. Sachant que la mobilité des électrons peut être décrite comme :

$$\mu_{\mathrm{n}} = \frac{q\tau}{m_{\mathrm{n}}^*} \tag{1.25}$$

où $q$ est la charge élémentaire d'électron.

$\tau$ est le temps de relaxation du moment.

La mobilité des électrons dans la vallée $\Gamma$ est plus grande du fait d'une plus petite masse effective de l'électron. La densité de courant s'écrit :

$$\vec{J} = q(\mu_{\mathrm{b}} n_{\mathrm{b}} + \mu_{\mathrm{h}} n_{\mathrm{h}})\vec{E} \tag{1.26}$$

où $\mu_{\mathrm{b}}$ et $\mu_{\mathrm{h}}$ sont les mobilités des électrons dans les vallées $\Gamma$ et latérale respectivement.

$n_{\mathrm{b}}$ et $n_{\mathrm{h}}$ sont les densités d'électrons dans les vallées $\Gamma$ et latérale respectivement.

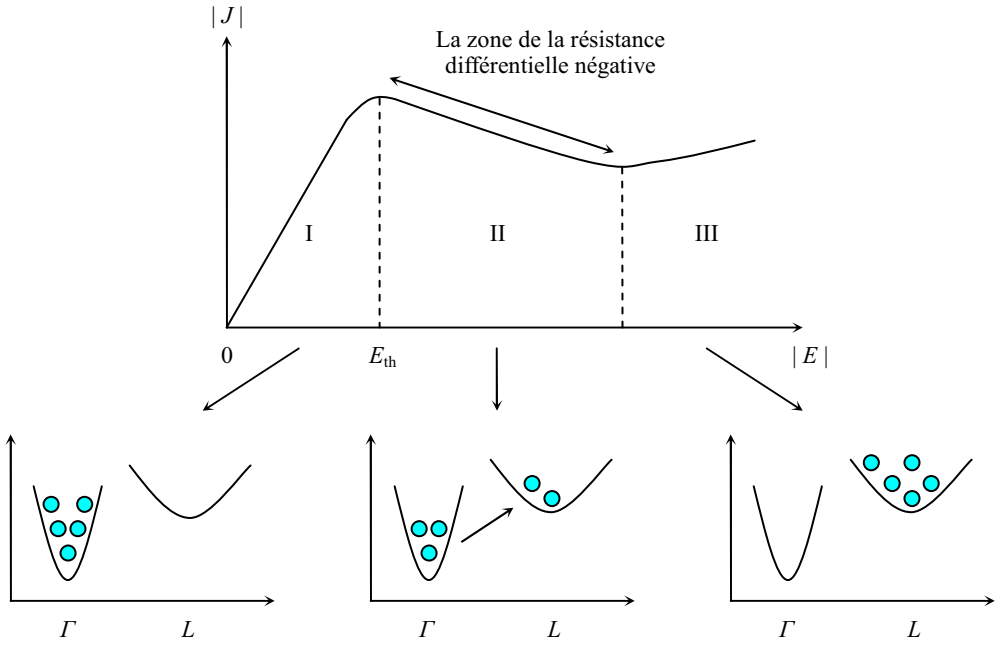



Figure 1.22. Illustration du modèle du transfert intervallée.

Après avoir tracé la densité de courant en fonction du champ électrique, on peut séparer la courbe en trois parties (Fig. 1.22). Dans la partie I, tous les électrons sont situés dans la vallée $\Gamma$ et la densité de courant est quasiment proportionnelle au champ électrique. Avec l'augmentation de la polarisation, nous entrons dans la partie II. Dans cette partie, une partie des électrons transfèrent de la vallée basse vers la vallée haute. Puisque la mobilité des électrons dans la vallée haute est plus petite que celle dans la vallée basse, la densité de courant commence à diminuer lorsque nous augmentons la tension appliquée. Donc, la partie II est la zone où la résistance différentielle devient négative. Si nous continuons à augmenter la polarisation de la diode Gunn, tous les électrons s'accumulent dans la vallée haute et la densité de courant recommence à augmenter (partie III).

La conductivité du GaN est donnée par :

$$\sigma = q\left(\mu_{\mathrm{b}} n_{\mathrm{b}} + \mu_{\mathrm{h}} n_{\mathrm{h}}\right) \tag{1.27}$$

Donc, la résistance différentielle s'écrit :

$$\frac{d\sigma}{dE} = q\left(\mu_{\mathrm{b}} \frac{dn_{\mathrm{b}}}{dE} + \mu_{\mathrm{h}} \frac{dn_{\mathrm{h}}}{dE}\right) + q\left(n_{\mathrm{b}} \frac{d\mu_{\mathrm{b}}}{dE} + n_{\mathrm{h}} \frac{d\mu_{\mathrm{h}}}{dE}\right) \tag{1.28}$$

Selon la loi d'Ohm :

$$\vec{J} = \sigma \vec{E} \tag{1.29}$$

On obtient :

$$\frac{dJ}{dE} = \sigma + \frac{d\sigma}{dE} E \tag{1.30}$$

$$\frac{1}{\sigma}\frac{dJ}{dE} = 1 + \frac{d\sigma}{dE}\frac{E}{\sigma} \tag{1.31}$$

Donc la résistance différentielle négative apparaît lorsque :

$$\frac{d\sigma}{dE} < -\frac{\sigma}{E} \tag{1.32}$$

Pour ce modèle, les matériaux doivent satisfaire à trois conditions :

- La différence d'énergie entre les deux vallées doit être nettement plus élevée que l'énergie thermique ($k_{\mathrm{B}}T_0 \sim 25{,}9$ meV), où $T_0$ est la température ambiante qui vaut 300 K.
- La différence d'énergie entre les deux vallées doit être plus faible que la bande interdite ($E_{\mathrm{g}}$).
- L'électron dans la vallée basse doit avoir une plus grande mobilité et une plus petite masse effective que celui dans la vallée haute.

### 1.6.4. Critère d'oscillation de type Gunn

Pour que la diode puisse osciller, il faut également que le temps de transit des domaines soit plus grand que le temps de relaxation diélectrique [58]. Soit :

$$\frac{l_{\text{dopée}}}{v_{\text{pic}}} > \frac{\varepsilon}{\sigma} = \frac{\varepsilon}{q\mu n} \tag{1.33}$$

où $l_{\text{dopée}}$ est la longueur de la zone dopée *N*.

$v_{\text{pic}}$ est la vitesse pic des électrons.

$\varepsilon$ est la permittivité diélectrique.

$\mu$ est la mobilité des électrons.

$n$ est la densité d'électrons.

Donc, l'expression 1.33 peut se récrire comme :

$$n \times l_{\text{dopée}} > \frac{\varepsilon v_{\text{pic}}}{q\mu} \tag{1.34}$$

Nous appelons l'expression 1.34 la condition d'existence de l'oscillation de type Gunn.

Pour le matériau GaN, la valeur du produit ($n \times l_{\text{dopée}}$) doit être de l'ordre de $10^{13}$ $cm^{-2}$. Plus le composant sera court et plus le dopage de la zone *N* devra donc être élevé.

## 1.7. Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons rappelé les propriétés physiques et thermiques des matériaux semiconducteurs III-N. Nous avons analysé les structures de bandes de ces hétérostructures pour optimiser l'obtention d'un gaz d'électrons bidimensionnel autorisant un transport électronique plus confiné et à haute mobilité. Pour le gaz d'électrons bidimensionnel, nous avons étudié, à l'aide du modèle Schrödinger-Poisson, l'impact de la piézoélectricité sur la densité surfacique d'électrons. Nous avons également étudié l'influence de la contrainte résiduelle du GaN sur la densité de charges ainsi que la variation de cette dernière en fonction du taux d'aluminium, de l'épaisseur et du dopage de la couche barrière AlGaN.

En effet, la filière AlGaN/GaN devrait montrer des performances en puissance hyperfréquence potentielles meilleures que celles obtenues expérimentalement. Ces limitations sont dues principalement à deux phénomènes physiques couplés. Le premier correspond à l'auto-échauffement du composant. Donc,

une brève revue des substrats est exposée notamment sur leur pouvoir de dissipation thermique afin de préserver les performances du transistor lors de son fonctionnement. L'étude plus approfondie de la thermique sera présentée dans le chapitre IV. La seconde limitation provient de la présence de pièges liés aux défauts en surface, aux interfaces et dans la couche tampon de GaN. Les nombreux travaux qui sont développés dans le chapitre II, ont permis d'optimiser des procédés physico-chimiques adéquats afin de concevoir des contacts électriques (Schottky) de qualité optimale de façon à minimiser les états de surface et d'interface métal/semiconducteur associés à des procédés technologiques innovants.

Ce premier chapitre nous a permis de présenter une vision globale des diodes Gunn de la filière nitrure de gallium. Nous avons étudié les origines de la résistance différentielle négative et de l'oscillation Gunn, ainsi que le critère d'oscillation de type Gunn. Les caractéristiques statiques et microondes des diodes Gunn seront présentées dans le chapitre V.

# Bibliographie

[1] M. E. Levinshtein, S. L. Rumyantsev, "Handbook Series on Semiconductor Parameters", *World Scientific*, vol. 1, London, pp. 77-103, 1996.

[2] A. Dargys, J. Kundrotas, "Handbook on Physical Properties of Ge, Si, GaAs and InP", *Science and Encyclopedia Publishers*, Vilnius, 1994.

[3] C. Duperrier, "Développement d'un Logiciel d'Assistance à la Conception des Circuits Non Linéaires Microondes : Application à l'Amplification Distribuée Non Uniforme de Puissance à Très Large Bande en Technologie MMIC", *Thèse de Doctorant de l'Université de Limoges*, 2001.

[4] Y. C. Yeo, "Electronic Band Structures and Effective Mass Parameters of Wurtzite GaN and InN", *J. Appl. Phys.,* vol. 86, No. 3, pp. 1429-1436, 1998.

[5] G. Popovici, "Deposition and Properties of Group III Nitride by Molecular Beam Epitaxy in Group III Semiconductors Compound : Physics and Applications", Edited by B. Gil, Oxford, *Clarendon Press*, pp. 19-69, 1998.

[6] F. Sacconi, A. Di Carlo, P. Lugli, H. Morkoç, "Spontaneous and Piezoelectric Polarization Effects on the Output Characteristics of AlGaN/GaN Heterojunction Modulation Doped FETs", *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. 48, No. 3, pp. 450-457, 2001.

[7] M. Asif Khan, J. N. Kuznia, A. R. Bhattarai, D. T. Olson, "Metal Semiconductor Field Effect Transistor Based on Single Crystal GaN", *Appl. Phys. Lett.*, vol. 62 ,pp. 1786-1787, 1993.

[8] O. Ambacher, B. Foutz, J. Smart, J. R. Shealy, N. G. Weimann, K. Chu, M. Murphy, A. J. Sierakowski, W. J. Schaff, L. F. Eastman, R. Dimitrov, A. Mitchell, M. Stutzmann, "Two Dimensional Electron Gases Induced by Spontaneous and Piezoelectric Polarization in Undoped and Doped AlGaN/GaN Heterostructures", *J. Appl. Phys.*, vol. 87, No. 1, pp. 334-344, 2000.

[9] O. Ambacher, J. Smart, J. R. Shealy, N. G. Weimann, K. Chu, M. Murphy, W. J. Schaff, L. F. Eastman, R. Dimitrov, L. Wittmer, M. Stutzmann, W. Rieger, J. Hilsenbeck, "Two-Dimensional Electron Gases Induced by Spontaneous and Piezoelectric Polarization Charges in N- and Ga-Face AlGaN/GaN Heterostructures", *J. Appl. Phys*. vol. 85, No. 6, pp. 3222-3233, 1999.

[10] F. Bernardini, V. Fiorentini, D. Vanderbilt, "Spontaneous Polarization and Piezoelectric Constants of III-V Nitrides", *Phys. Rev. B*, vol. 56, No. 16, pp. R10024-R10027, 1997.

[11] Chu, *Thesis M.Sc.*, Hong Kong University of Science and Technology, 2004.

[12] A. Taylor, R. M. Jones, J. R. O'Connor, J. Smiltens, "A High Temperature Semiconductor in Silicon Carbide", Eds. *Pergamon Press*, Oxford, London, New York, Paris, pp. 147, 1960.

[13] Y. Okada, Y. Tokumaru, "Precise Determination of Lattice Parameter and Thermal Expansion Coefficient of Silicon between 300 and 1500 K", *J. Appl. Phys.*, vol. 56, No. 2, pp. 314-320, 1984.

[14] S. J. Heikman, "MOCVD Growth Technologies for Applications in AlGaN/GaN High Electron Mobility Transistors", *Doctor of Philosophy in Electrical and Computer Engineering, University of California*, Santa Barbara.

[15] M. Tchounkeu, "Optical Properties of GaN Epilayers on Sapphire", *J. Appl. Phys*., vol. 80, No. 9, pp. 5352-5360, 1996.

[16] F. Semond, Y. Cordier, N. Grandjean, F. Natali, B. Damilano, S. Vezian, J. Massies, "Molecular Beam Epitaxy of group-II Nitrides on Silicon Substrates: Growth Properties and Device Applications", *Phys. Status Solidi A*, vol. 188, No. 2, pp. 501-510, 2001.

[17] D. C. Dumka, P. Saunier, "AlGaN/GaN HEMTs on Diamond Substrate", *TriQuint Semiconductor*, 500 W. Renner Road, Richardson, USA IEEE, 2007.

[18] M. Bon, A. Scavennec, "Transistors et Circuits Integrés à l'Hétérostructures III-V", *Techniques de l'Ingénieur*, Traité de l'Electronique, vol. 2, pp. 450, 1999.

[19] P. M. Solomon, H. Morkoç, "Modulation-Doped GaAs/AlGaAs Heterojunction Field-Effect Transistors (MODFET's), Ultrahigh-Speed Device for Supercomputers", *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. 31, No. 8, pp. 1015-1027, 1984.

[20] L. D. Nguyen, L. E. Larson, U. K. Mishra, "Ultra-High Speed Modulation-Doped Field-Effect Transistors: a Tutorial Review", *Proc. of IEEE*, pp. 494-518, 1992.

[21] M. Werquin, N. Vellas, Y. Guhel, D. Ducatteau, B. Boudart, J.C. Pesant, Z. Bougrioua, M. Germain, J.C. De Jaeger, C. Gaquiere, "Performances of AlGaN/GaN HEMTs in planar technology", *12th GAAS Symposium*, Amsterdam, 2004.

[22] R. Coffie, D. Buttari, S. Heikman, S. Keller, A. Chini, L. Shen, U. K. Mishra, "P-Capped GaN/AlGaN/GaN High Electron Mobility Transistors (HEMTs)", *IEEE Electron Device Lett.,* vol. 23, No. 10, pp. 588-590, 2002.

[23] V. Kumar, A. Kulieu, R. Schwindt, M. Muir, G. Simin, J. Yang, M. Asif Khan, I. Adesida, "High Performance 0.25 µm Gate Length AlGaN/GaN HEMTs on Sapphire with Power Density of over 4.5 W/mm at 20 GHz", *Solid-State Electronics*, vol. 47, pp. 1577-1580, 2003.

[24] A. Chini, D. Buttari, R. Coffie, S. Heikman, S. Keller, U. Mishra, "12 W/mm Power Density AlGaN/GaN HEMTs on Sapphire Substrate", *IEEE Electronics Lett.*, vol. 40, No. 1, pp. 73-74, 2004.

[25] L. Shen, R. Coffie, D. Buttari, S. Heikman, A. Chakraborty, A. Chini, S. Keller, S. P. DenBaars, U. K. Mishra, "High-Power Polarization-Engineered GaN/AlGaN/GaN HEMTs without Surface Passivation", *IEEE Electron Device Lett.*, vol. 25, No. 1, pp. 7-9, 2004.

[26] D. Ducatteau *et al.,* Résultat interne soumis à *IEEE Electron Device Letters*.

[27] T. Palacios, A. Chakraborty, S. Rajan, C. Poblenz, S. Keller, S. P. DenBaars, J. S. Speck, U. K Mishra, "High-Power AlGaN/GaN HEMTs for Ka-Band Applications", *IEEE Electron Device Lett.*, vol. 26, No. 11, 781-783, 2005.

[28] Y. F. Wu, M. Moore, A. Saxler, T. Wisleder, P. Parikh, "40-W/mm Double Field-Plated GaN HEMTs", *64th Device Research Conference*, pp. 151-152, 2006.

[29] Y. Wang, L. Ma, Z. Yu, L. Tian, "Optimization of Two-Dimensional Electron Gases and I-V Characteristics for AlGaN/GaN HEMT Devices", *Superlattices and Microstructures*, vol. 36, pp. 869-875, 2004.

[30] D. Ducatteau *et al.,* Résultat interne soumis à *IEEE Electron Device Letters*.

[31] J. S. Moon, W. Shihchang, D. Wong, I. Milosavljevic, A. Conway, P. Hashimoto, M. Hu, M. Antcliffe, M. Micovic, "Gate Recessed AlGaN/GaN HEMTs for High Performance Millimetre Wave Applications", *IEEE Electron Device Lett.,* vol. 26, No. 6, pp. 348-350, 2005.

[32] V. Kumar, G. Chen, S. Guo, B. Peres, I. Eliasevich, I. Adesida, "Field-Plated 0.25 µm Gate Length AlGaN/GaN HEMTs on 6H-SiC with Power Density of 9.1 W/mm at 18 GHz", *IEEE Electron Device Lett.*, vol. 41, No. 19, pp. 1080-1081, 2005.

[33] K. K. Chu, P. C. Chao, M. T. Pizzella, R. Actis, D. E. Meharry, K. B. Nichols, R. P. Vaudo, X. Xu, J. S. Flynn, J. Dion, G. R. Brandes, "9.4-W/mm Power Density AlGaN-GaN HEMTs on Free-Standing GaN Substrates", *IEEE Electron Device Lett.*, vol. 25, No. 9, pp. 596-598, 2004.

[34] V. Hoel, N. Defrance, J. C. De Jaeger, H. Gerard, C. Gaquiere, H. Lahreche, R. Langer, A. Wilk, M. Lijadi, S. Delage, "First Microwave Power Performance of AlGaN/GaN HEMTs on SopSiC Composite Substrate", *IEEE Electron Device Lett.*, vol. 44, No.3, pp. 238-239, 2008.

[35] A. Minko, V. Hoel, E. Morvan, B. Grimbert, A. Soltani, E. Delos, D. Ducatteau, C. Gaquiere, D. Theron, J. C. De Jaeger, H. Lahreche, L. Wedzikowski, R. Langer, P. Bove, "AlGaN-GaN HEMTs on Si with Power Density Performance of 1.9 W/mm at 10 GHz"**,** *IEEE Electron Device Lett.*, vol. 25, No. 7, pp. 453-455, 2004.

[36] J. W. Johnson, E. L. Piner, A. Vescan, R. Therrien, P. Rajagopal, J. C. Roberts, J. D. Brown, S. Singhal, K. J. Linthicum, "12 W/mm AlGaN/GaN HFETs on Silicon Substrates", *IEEE Electron device Lett.*, vol. 25, No. 7, pp. 459-461, 2004.

[37] D. Ducatteau, A. Minko, V. Hoel, E. Morvan, E. Delos, B. Grimbert, H. Lahreche, P. Bove, C. Gaquiere, J. C. De Jaeger, S. Delage, "Output Power Density of 5.1W/mm at 18 GHz with an AlGaN/GaN HEMT on Si Substrate", *IEEE Electron Device Lett.*, vol. 27, No. 1, pp. 7-9, 2006.

[38] D. C. Dumka, C. Lee, H. Q. Tserng, P. Saunier, M. Kumar, "AlGaN/GaN HEMTs on Si substrate with 7 W/mm Output Power Density at 10 GHz"**,** *IEEE Electronics Lett.*, vol. 40, No. 16, pp. 1023-1024, 2004.

[39] F. Stern, S. D. Sarma, "Electron Energy Levels in GaAs-$Ga_xAl_{1-x}As$ Heterojunctions", *Physical Review B*, vol. 30, No. 2, pp. 840-848, 1984.

[40] F. Sacconi, A. D. Carlo, P. Lugli, H. Morkoc, "Spontaneous and Piezoelectric Polarization Effects on the Output Characteristics of AlGaN/GaN Heterojunction Modulation Doped FETs", *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. 48, No. 3, pp. 450-457, 2001.

[41] G. Martin, A. Botchkarev, A. Rockett, H. Morkoc, "Valence-Band Discontinuities of Wurtzite GaN, AlN, and InN Heterojunctions Measured by X-Ray Photoemission Spectroscopy", *Appl. Phys. Lett.*, vol. 68, pp. 2541-2543, 1996.

[42] S. Karmalkar, U. K. Mishra, "Enhancement of Breakdown Voltage in AlGaN/GaN High Electron Mobility transistors Using a Field Plate", *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. 48, No. 8, pp. 1515-1521, 2001.

[43] T. Hashizume, S. Ootomo, S. Oyama, M. Konishi, H. Hasegawa, "Chemistry and Electrical Properties of Surfaces of GaN and GaN/AlGaN Heterostructures", *J. Vac. Sci. Technol. B*, vol. 19, No. 4, 1675-1681, 2001.

[44] J. P. Holman, "Heat Transfer", *Mc Graw Hill*, Metric Editions, Mechanical Engineering Series.

[45] V. L. Hein, "Convection and Conduction Cooling of Substrates Containing Multiple Heat Sources", *The Bell System Technical Journal*, vol. 46, No. 8, pp. 1659-1678, 1967.

[46] A. J. Chapman, "Heat Transfer", 4th Edition, *Macmillan*, New York, pp. 358, 1984.

[47] J. Taine, J. P. Petit, "Transferts thermiques, Mécanique des Fluides Anisothermes", *Dunod.*

[48] R. R. Tummala, E. J. Rymaszewski,"Microelectronics Packaging Handbook",*Van Nostrand Reinhard*, New York, pp. 171, 1989.

[49] F. Dhondt, "Modélisation Electrothermique des Transistors Bipolaires à Hétérojonction pour les Appli- cations de Puissance à Haut Rendement de Bande X", *Thèse de doctorat*, USTL, 1997.

[50] R. Meandru, S. Kim, J. Kim, J. R. Lothian, S. J. Pearton, S. S. Park, Y. J. Park, "Thermal Simulation of High Power, Bulk GaN Rectifiers", *Solid-State Electronics*, vol. 47, pp. 1037-1043, 2003.

[51] R. Aubry, “Etude des Aspects Electrothermiques de la Filière HEMT AlGaN/GaN pour Application de Puissance”, Thèse de doctorat, USTL, 2004.

[52] D. H. Smith, A. Fraser, J. O. Neil, “Measurement and Prediction of Operating Temperature of GaAs ICs”, *Semi-Therm Symposium*, Scottsdale, Arisona, pp. 20, 1986.

[53] A. G. Kokkas, “Thermal Analysis of Multiple-Layer Structures”, *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. 21, No. 11, pp. 674-681, 1974.

[54] G. B. Gao, M. Z. Wang, X. Gui, H. Morkoc, “Thermal Design of High-Power Heterojunction Transistors”, *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. 36, No. 5, pp. 854-862, 1989.

[55] S. Islam, A.F. Mehdi Anwar, “Temperature-Dependent Nonlinearities in GaN/AlGaN HEMTs”, *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. 49, No. 5, pp. 710-717, 2002.

[56] U. D. Bhapkar, M. S. Shur, “Monte Carlo Calculation of Velocity-Field Characteristics of Wurtzite GaN”, *J. Appl. Phys.*, vol. 82, No. 4, pp. 1649-1655, 1997.

[57] M. Suzuki, T. Uenoyama, A. Yanase, “First-Principles Calculations of Effective-Mass Parameters of AlN and GaN”, *Physical Review B*, vol. 52, No. 11, pp. 8132-8139, 1995.

[58] E. Alekseev, A. Eisenbach, D. Pavlidis, S. M. Hubbard, W. Sutton, “GaN-Based NDR Devices for THz Generation”, *THz days*, 2000.

# CHAPITRE II

# ÉTUDE DU CONTACT REDRESSEUR

## 2.1. Introduction

Le bon fonctionnement d'un transistor nécessite des contacts ohmiques de faible résistance associés à un contact Schottky permettant de réaliser une commande efficace du canal. Il conditionne directement les caractéristiques majeures comme entre autres, la largeur de la zone désertée, la tenue en température, la puissance de sortie, la linéarité, soit en d'autre terme tous les ingrédients liés à la fiabilité. L'origine physique de ces caractéristiques réside notamment dans la nature du semiconducteur à base de nitrure de gallium, mais aussi dans le procédé technologique et la topologie optique ou submicronique utilisée pour réaliser le contact de grille en fonction de la fréquence de travail envisagée.

## 2.2. Formation du contact ohmique

Dans un premier temps, nous rappelons le procédé de formation du contact ohmique. Ceci aidera à une meilleure compréhension de la formation du contact redresseur tout en mettant l'accent sur les différences et les mécanismes communs avec ceux du contact ohmique.

### 2.2.1. Rappel du procédé de fabrication du contact ohmique

Un contact ohmique sur AlGaN/GaN peut être obtenu par l'une des deux étapes suivantes :

- Doper $N^{++}$ la couche barrière AlGaN (soit par implantation ou in-situ dans le bâti de croissance). Dans ce cas, le dopant de type $N$ le plus adéquat pour ce faire est le silicium. Cependant, il nécessite un recuit d'activation à une température telle que le matériau s'en trouve dégradé et que le taux d'activation reste partiel. Ajoutons que les impuretés non-ionisées peuvent représenter des pièges potentiels lors du fonctionnement du transistor en hyperfréquence.
- Former un alliage sous le contact métallique par un recuit à haute température ou le faciliter par un pré-fossé de contact ohmique pour se rapprocher du gaz d'électrons

La première solution est mal adaptée aux objectifs envisagés en plus d'être onéreuse à la réalisation technologique. Par conséquent, nous nous sommes concentrés sur la seconde méthode.

## 2.2.2. Principes de formation du contact ohmique

Le métal titane (Ti) présente un travail de sortie de 4,33 eV, lequel devrait favoriser l'obtention d'un contact ohmique sur GaN à dopage résiduel de type *N*. Pourtant, c'est le bicouche Al-Ti qui est le plus répandu pour réaliser cette fonction et plus généralement, le contact Ti/Al/Ni/Au. Pour comprendre pourquoi ce schéma de métallisation est en fait plus efficace, il faut traiter le problème pas à pas.

L'étude suivante consiste dans un premier temps, à expliquer le rôle du titane dans la procédure de formation du contact après recuit. Pour cela, nous analysons le contact Ti/GaN recuit à basse (750 °C) et haute température (900 °C) pendant 30 s sous $N_2$.

### 2.2.2.1. Cas de Ti/GaN recuit à basse température

Cette étape permet de comprendre le rôle du titane dans le schéma de métallisation standard. Cela consiste à recuire à basse température un contact de 200 nm de titane évaporé sur une couche de GaN sur substrat Si (111). La figure 2.1 montre une coupe de la structure à l'interface Ti/GaN après recuit. Cette dernière peut être décomposée en quatre zones. Une analyse par EDS (Energy Dispersive Spectroscopy) et nanoDRX (X-ray diffraction) montre que la zone ① est composée de GaN orientée (0002), la zone ② de GaN présente une sous-stœchiométrie azote, la zone ③ se compose d'une nano-couche de TiN parfaitement cristallisée à orientation (111) et la zone ④ correspond au Ti hexagonal orienté (111) polycristallin. Nous nommerons par abus de langage la zone ② "trous" ou vide partiel de matière.

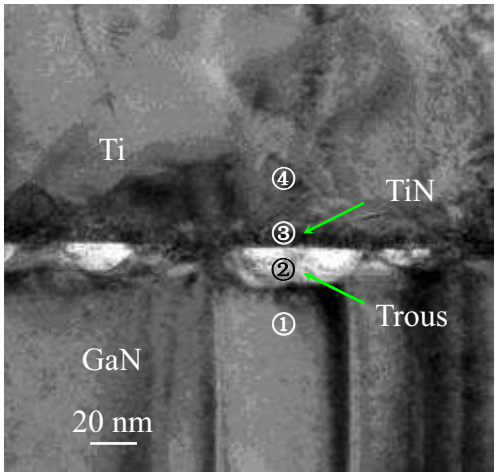



Figure 2.1. Image HRTEM (High Resolution Transmission Electron Microscopy) d'interface Ti/GaN recuit à 750 °C.

Le contact électrique obtenu reste cependant ohmique avec une résistivité spécifique de contact qui se dégrade rapidement avec le volume de trous.

2.2.2.2. Cas de Ti/GaN recuit à haute température

La figure 2.2 montre une image HRTEM du contact Ti/GaN recuit à haute température (900 °C). La structure est composée de bas en haut : de la couche tampon de GaN (0002), d'une zone vide de matière, d'une couche de TiN (111), quelques nano-trous et du Ti (111). L'électrode métallique en surface Ti/TiN semble décollée. En effet, nous constatons clairement que le recuit à haute température a pour effet de coalescer les zones de trous déjà mentionnées lors du recuit à basse température jusqu'à désolidariser le contact du substrat. Dans ce cas, le contact métallique obtenu ne présente plus de caractère ohmique.

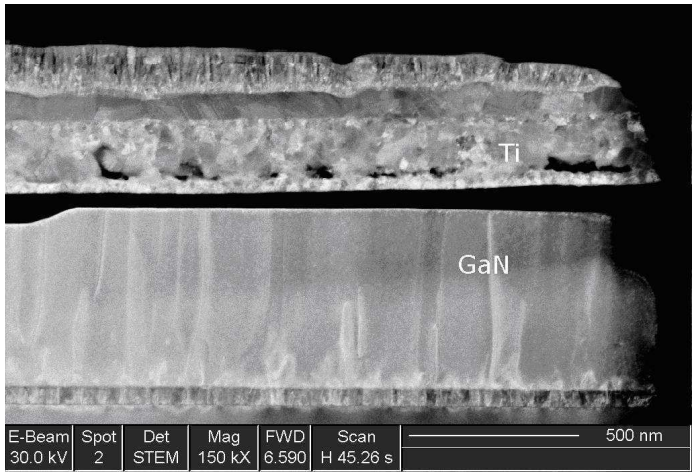



Figure 2.2. Image HRTEM de l'interface Ti/GaN recuit à 900 °C.

L'ensemble de ces analyses permet d'en déduire un mécanisme possible pour la formation du contact ohmique sur GaN. L'activité de l'élément titane au cours du recuit à basse température est faible. Cependant, elle est suffisante pour permettre la formation d'une couche de TiN car l'enthalpie de formation de ce dernier ($\Delta H_{TiN}$ = -265 kJ/mol) est plus élevée que celui de GaN ($\Delta H_{GaN}$ = -111 kJ/mol), en surface de GaN [1]. C'est pourquoi, la surface de GaN se trouve dépourvue d'une partie de son azote et cela explique la sous-stœchiométrie et la formation des trous. Or les lacunes d'azote $V_N$ forment un complexe et constituent avec l'oxygène résiduel $O_N$ des impuretés en surface qui agissent comme des centres donneurs profonds. Ces derniers facilitent le transport des électrons par effet tunnel [2].

Après recuit à haute température, l'activité du titane s'en trouve augmentée ainsi que l'ensemble de ce processus. Les trous coalescent, grossissent et peuvent faire décoller le contact métallique (ou électrique).

### 2.2.2.3. Cas de Al/Ti/GaN recuit à basse température

Cette étape permet de comprendre le rôle de l'aluminium dans le schéma de métallisation. Cela consiste à recuire à basse température (750 °C) un contact métal/GaN sur substrat Si (111) sous $N_2$ pendant 30 s. Le métal est constitué d'un bicouche Al/Ti (190 nm/10 nm) réalisé par évaporation.

La figure 2.3 montre que l'interface est abrupte, parfaitement cristallisée et est limitée par un feuillet de TiN. La zone sombre dans la matrice de GaN et sous la nano-couche de TiN peut être corrélée à une légère sous-stœchiométrie en azote. Les zones blanches constituent de petits vides de matière. Al-Ti forme un alliage polycristallin hexagonal.

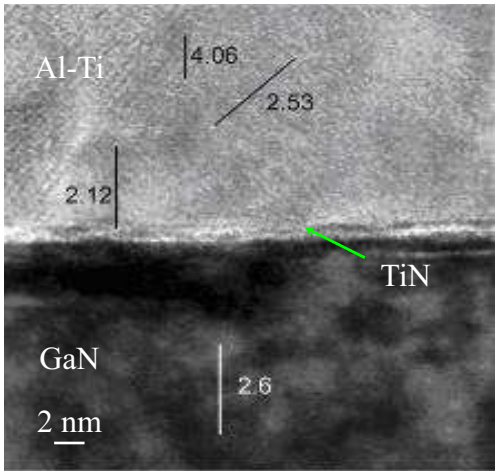



Figure 2.3. Image TEM (Transmission Electron Microscopy) de l'interface Al/Ti/GaN recuit à 750 °C.

Le contact électrique obtenu est parfaitement ohmique et possède des résistivités spécifiques de contact améliorées.

### 2.2.2.4. Cas de Al/Ti/GaN recuit à haute température

Le contact présenté précédemment est maintenant recuit à haute température (900 °C). La figure 2.4 montre une image HRTEM de la structure Al/Ti/GaN/Si (111) recuite où des zones vides de matière

perceptibles en blanc sont espacées par une couche épaisse de TiN cubique (111).

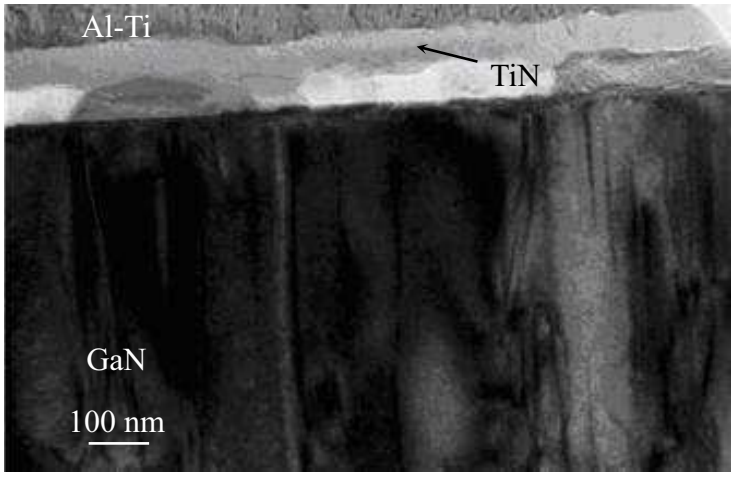



Figure 2.4. Image HRTEM de l'interface Al/Ti/GaN recuit à 900 °C.

À nouveau, le contact électrique obtenu présente un comportement non-ohmique mais symétrique associé à un point d'inflexion.

L'ajout de l'élément aluminium dans le schéma de métallisation semble réduire l'activité du titane lors du recuit. En effet, l'enthalpie de formation d'AlN ($\Delta H_{AlN}$ = -318 kJ/mol) est plus élevée que celui de TiN ($\Delta H_{TiN}$ = -265 kJ/mol). À basse température, l'énergie thermique acquise par le Ti, est tout juste suffisante pour former un feuillet de TiN et produire une zone contrôlée en surface de GaN en sous-stœchiométrie azote. Ce processus contient toutes les conditions pour faciliter la formation d'un contact ohmique optimisé d'autant plus que le travail de sortie du TiN ($q\Phi_m$ = 3,75 eV) est plus petit que celui du Ti.

Le recuit à haute température permet au Ti d'augmenter en réactivité mais pas autant que dans le cas où il n'y a pas d'aluminium dans la métallisation.

#### 2.2.2.5. Cas de Ti/AlGaN recuit à basse température

Cette étape permet de comprendre l'impact de la présence de l'aluminium dans la couche barrière AlGaN après recuit de Ti. Cela consiste à recuire à basse température un contact de 200 nm de Ti évaporé sur une hétérostructure AlGaN/GaN sur substrat Si (111).

La figure 2.5 montre l'interface obtenue après recuit laquelle apparaît être abrupte et composée d'une

nano-couche de TiN contenant aussi quelques éléments en aluminium (~ $AlTi_2N$). La réaction est donc beaucoup plus limitée que dans le cas où la couche tampon ne contenait pas d'aluminium. La couche métallique de titane présente des agrégats Al-Ti juste à l'aplomb de l'interface avec AlGaN. Le contact électrique obtenu est ohmique.

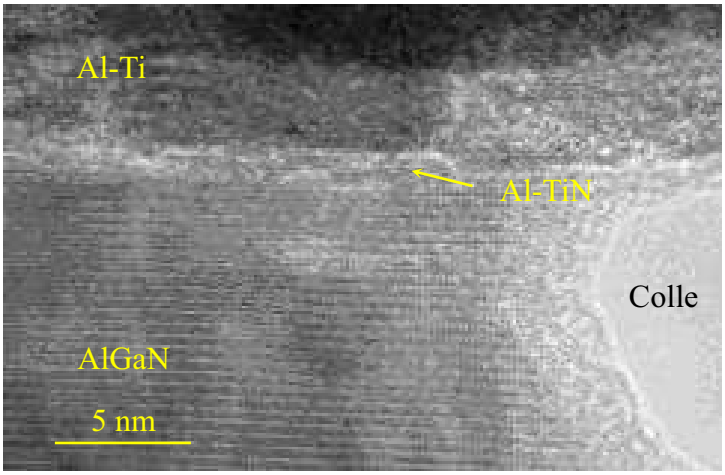



Figure 2.5. Image HRTEM de l'interface Ti/AlGaN/GaN recuit à 750 °C.

2.2.2.6. Cas de Ti sur AlGaN recuit à haute température

Le contact présenté précédemment est maintenant recuit à haute température (900 °C). La figure 2.6 montre une image HRTEM du contact Ti sur une hétérostructure AlGaN/GaN sur substrat Si (111) recuit à haute température.

Dans ce cas, l'effet du recuit est plus complexe. Il y a la diffusion des espèces métalliques dans la couche barrière AlGaN, lesquelles forment un alliage conducteur électrique [3] de la surface jusqu'au gaz d'électrons et même au-delà du puits quantique par endroit. L'interface Ti/AlGaN est composée d'une nano-couche de TiN laquelle est associée à des nano-trous visibles en blanc dans la couche barrière. Une partie des atomes de gallium de la couche barrière AlGaN diffuse dans la couche métallique en surface et forme un alliage Ti-Ga.

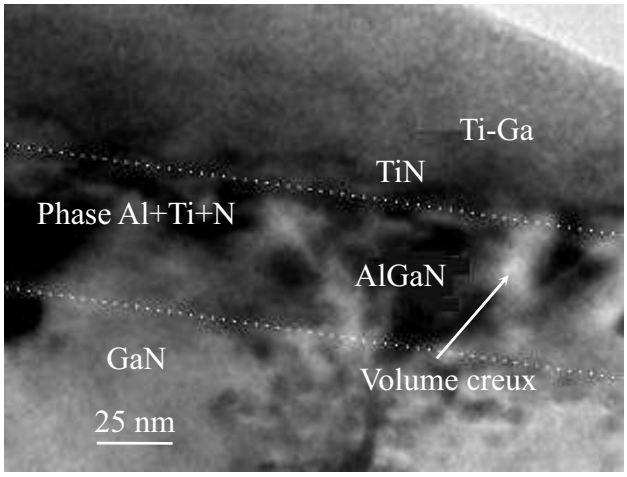



Figure 2.6. Image HRTEM de l'interface Ti/AlGaN/GaN recuit à 900 °C.

À haute température, l'énergie à fournir est suffisante pour que l'élément Ti se substitue aux atomes de Ga pour former du "Ti-N" dans la couche barrière AlGaN. C'est un processus plus long mais qui peut totalement consommer la barrière AlGaN. Une fois que le Ti a diffusé a proximité de la couche tampon de GaN, le processus d'extraction de l'azote du GaN par le Ti est possible et il se forme alors du TiN à sa surface lequel, associé à des lacunes d'azote permet un dopage superficiel favorisant le passage des électrons par effet tunnel. Là encore, l'apparition et le volume de zones vides de matière ($V_N$) situées à l'interface entre la couche de Ti et celle de GaN, peuvent être contrôlés par l'ajout d'aluminium dans la couche barrière AlGaN.

### 2.2.2.7. Cas de Al/Ti sur AlGaN recuit à basse et haute températures

L'ajout d'une couche en aluminium dans le schéma de métallisation aboutit aux mêmes observations que précédemment avec un effet plus prononcé, c'est-à-dire absence ou réduction drastique de la réactivité de Ti lors du recuit. L'aluminium contenu dans l'AlGaN, maintient une très forte liaison avec son azote. En conséquence, l'extraction de l'azote par Ti devient plus difficile, les atomes de Ga qui ne sont plus liés à leur azote, diffusent plus facilement et sont remplacés par des atomes de Ti. Ce processus engendre la formation d'une couche de TiN. Dans ce cas précis, l'épaisseur de TiN se réduit ainsi que le volume des nano-trous. Après recuit à 750 °C, la jonction à l'interface Ti/TiN sur AlGaN/GaN sur substrat Si (111) est parfaitement abrupte alors qu'après recuit à 900 °C, l'électrode en surface se compose d'agrégats métalliques sous forme de $Al_3Ti$ dans la matrice Al-Ti et de nano-céramiques de type $AlO_x$ en surface du

métal (et dans une moindre mesure $TiO_x$). L'alliage $Al_3Ti$ est plus stable thermiquement et meilleur conducteur électrique que les métaux Al et Ti seuls. La présence en surface d'oxydes métalliques n'est évidemment pas en adéquation avec l'obtention d'un contact ohmique de faible résistivité. Afin d'éviter leur formation, une couche métallique réfractaire (comme Ni, Mo etc.…) est déposée sur la couche d'aluminium avant le dépôt de l'électrode d'épaississement en or (Au). Cette barrière métallique permet aussi d'éviter la peste pourpre (alliage friable en Al et Au).

En conséquence, l'ajout de l'élément Al dans le schéma de métallisation et/ou dans la couche barrière induit le même comportement lors du recuit, c'est-à-dire il réduit davantage la réactivité du titane, ce qui a pour effet de diminuer le volume des trous (et l'épaisseur de la couche de TiN) et donc améliore la résistivité spécifique de contact.

### 2.2.3. Conclusion sur la formation du contact ohmique

Cette étude a permis de montrer qu'une augmentation du rapport Ti/Al favorise la formation d'une couche interfaciale de TiN laquelle est favorable à l'obtention du contact ohmique. Cependant, la diminution du même rapport permet de réduire la réactivité de Ti lors du recuit à l'interface avec le semiconducteur et par conséquent, de minimiser le volume des trous dans la matrice Al-GaN. Il est donc nécessaire de trouver un compromis de ce rapport Ti/Al, qui a été déterminé expérimentalement et a été défini sur nos hétérostructures "standard", et ce rapport est égal à 6 %.

Si l'hétérostructure comporte une couche d'exclusion en AlN généralement de 1 nm d'épaisseur, il a été montré que les propriétés de transport ($N_S$, $\mu_n$) dans le gaz 2D sont largement améliorés. Cependant, cette dernière minimise la diffusion des espèces métalliques dans la couche barrière lors du recuit et donc ne permet pas l'obtention d'un contact ohmique. Il a été montré qu'un recess à 6 nm [3] du gaz 2D permet de se retrouver dans la configuration mentionnée au cours de cette étude, c'est-à-dire, celle nécessaire pour la formation du contact ohmique.

# 2.3. Propriétés physiques du contact redresseur

## 2.3.1. Diagramme énergétique d'un contact métal/semiconducteur

### 2.3.1.1. Diagramme énergétique sans présence d'états d'interface

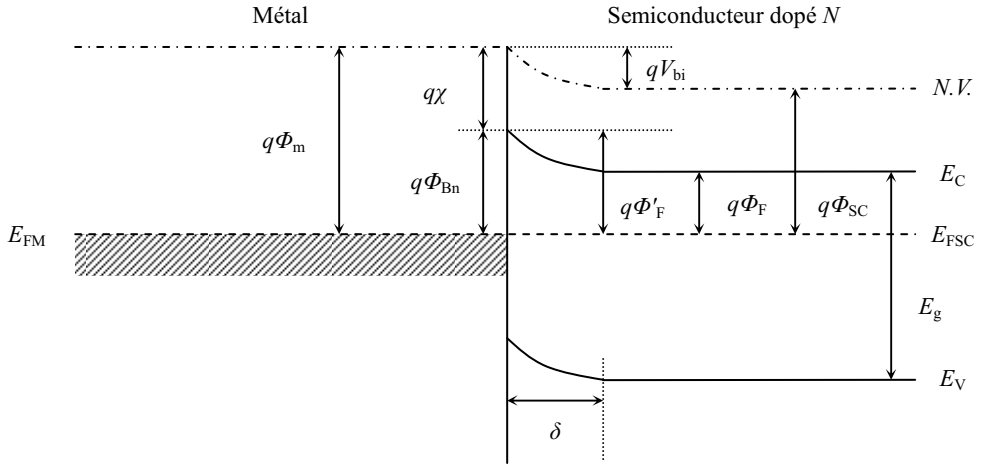



Figure 2.7. Diagramme énergétique à l'équilibre thermodynamique d'une structure métal/semiconducteur (*N*) tel que $q\Phi_m > q\Phi_{SC}$ (sans état d'interface).

La figure 2.7 montre le diagramme énergétique à l'équilibre thermodynamique d'une structure métal/semiconducteur (*N*).

Au voisinage de l'interface, l'écart entre la bande de conduction et le niveau de Fermi est plus important que dans la région neutre du semiconducteur (loin de l'interface) $q\Phi'_F > q\Phi_F$. Cette grandeur est définie comme étant la hauteur de barrière Schottky $q\Phi_{Bn}$. La hauteur de barrière $q\Phi_{Bn}$ est alors donnée en l'absence d'état d'interface par la différence entre le travail de sortie du métal $q\Phi_m$ et l'affinité électronique du semiconducteur $q\chi$ en supposant que l'abaissement de la barrière associé à la force image reste négligeable.

$$q\Phi_{Bn} = q\Phi_m - q\chi \tag{2.1}$$

On peut alors se poser la question suivante: Que devient ce contact en présence d'états de surface et/ou d'une couche d'oxyde natif ?

2.3.1.2. Diagramme énergétique en présence d'états d'interface

Dans le volume du semiconducteur, les états électroniques accessibles sont d'une part les bandes de valence et de conduction résultant de la périodicité du réseau cristallin, et d'autre part les états discrets associés aux donneurs et accepteurs ou aux centres profonds.

À la surface du semiconducteur, les états électroniques sont modifiés car chaque atome n'établit des liaisons que dans un demi-plan, et dans l'autre demi-plan il reste ce que l'on appelle communément des liaisons pendantes. La stabilisation des états électroniques en surface peur alors être réalisée par l'adsorption d'atomes étrangers, comme l'oxygène, entraînant l'oxydation de la surface. La présence d'atomes étrangers associée à la différence de paramètres de maille entre le semiconducteur et son oxyde natif crée des états électroniques en surface différents de ceux du volume.

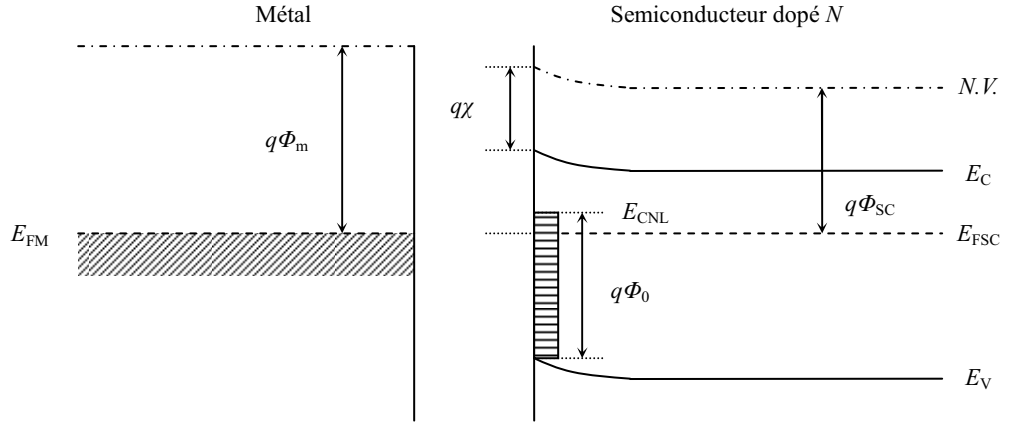



Figure 2.8. Diagramme énergétique à l'équilibre thermodynamique d'une structure métal/air/semiconducteur (*N*) tel que $q\Phi_m > q\Phi_{SC}$ (sans contact et avec états d'interface).

La figure 2.8 montre le diagramme énergétique à l'équilibre thermodynamique d'une structure métal/air/semiconducteur (sans contact et avec états d'interface) tel que $q\Phi_m > q\Phi_{SC}$. Lorsque les deux matériaux sont mis en contact, la représentation du diagramme énergétique de l'ensemble de la structure implique de considérer deux cas [4] :

- $q\Phi_m > q\chi + q\Phi_{Bn}$

Si la nature et la densité des états de surface associées au choix du métal sont telles que

$q\Phi_m > q\chi + q\Phi_{Bn}$ , alors la hauteur de barrière métal/semiconducteur est fixée par l'ancrage du niveau de Fermi par les états de surface (états d'interface). Dans ce cas, le déplacement des électrons des états de surface vers le métal laisse apparaître une charge positive dans le semiconducteur et une charge négative dans le métal. Dès lors, à l'interface métal/semiconducteur et sur une épaisseur $\delta$ de quelques Angströms, le métal équivalent formé présente un travail de sortie $q\Phi_{meq}$ inférieur à celui déposé tel que :

$$q\Phi_{meq} = q\Phi_m - qV_i \tag{2.2}$$

En d'autres termes, une fine couche interfaciale d'épaisseur $\delta$ située entre le métal et le semiconducteur se forme et se comporte comme un dipôle. La hauteur de barrière métal/semiconducteur obtenue est égale à $q\Phi_{Bn}$ mais celle-ci est inférieure à la hauteur de barrière qui serait obtenue sans état de surface avec un écart égal à $qV_i$.

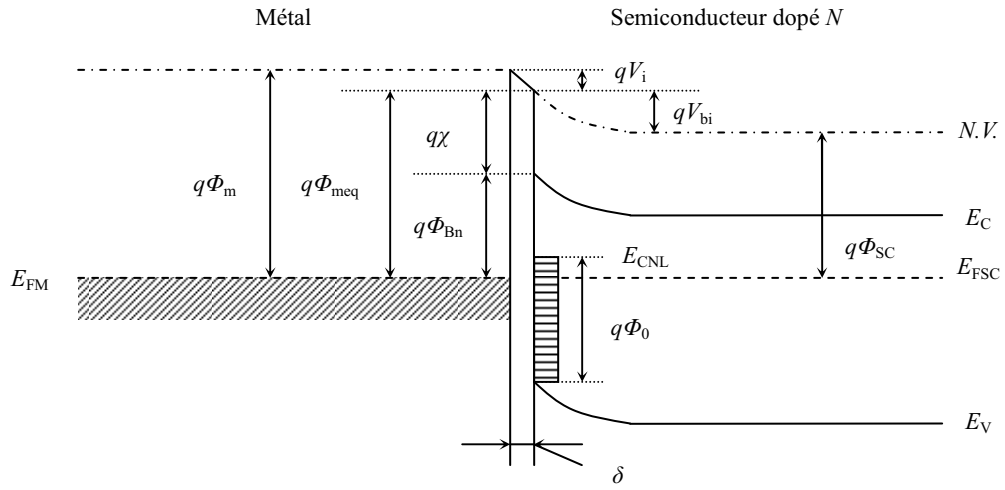



Figure 2.9. Diagramme énergétique à l'équilibre thermodynamique d'une structure métal/semiconducteur (*N*) tel que $q\Phi_m > q\Phi_{SC}$ et $q\Phi_m > q\chi + q\Phi_{Bn}$ (avec contact et états d'interface).

- $q\Phi_m < q\chi + q\Phi_{Bn}$

Lors de la mise en contact des deux matériaux (Fig. 2.10) dans la configuration du second cas, l'équilibre thermodynamique est atteint quand le niveau de Fermi du métal et celui du semiconducteur sont alignés.

La variation du niveau de Fermi $\Delta E_F$ est simplement liée au remplissage des états de surface non occupés et situés en dessous du niveau de Fermi avant contact. Dans ce cas, le déplacement des électrons

du métal vers les états de surface du semiconducteur laisse apparaître une charge positive dans le métal et une charge négative dans le semiconducteur. Dès lors, à l'interface métal/semiconducteur et sur une épaisseur $\delta$ de quelques Angströms, le métal équivalent formé présente un travail de sortie $q\Phi_{meq}$ supérieur à celui déposé tel que :

$$q\Phi_{meq} = q\Phi_m + qV_i \tag{2.3}$$

La hauteur de barrière métal/semiconducteur obtenue est égale à $q\Phi_{Bn}$ mais celle-ci est supérieure à la hauteur de barrière qui serait obtenue sans état de surface avec un écart égal à $qV_i$.

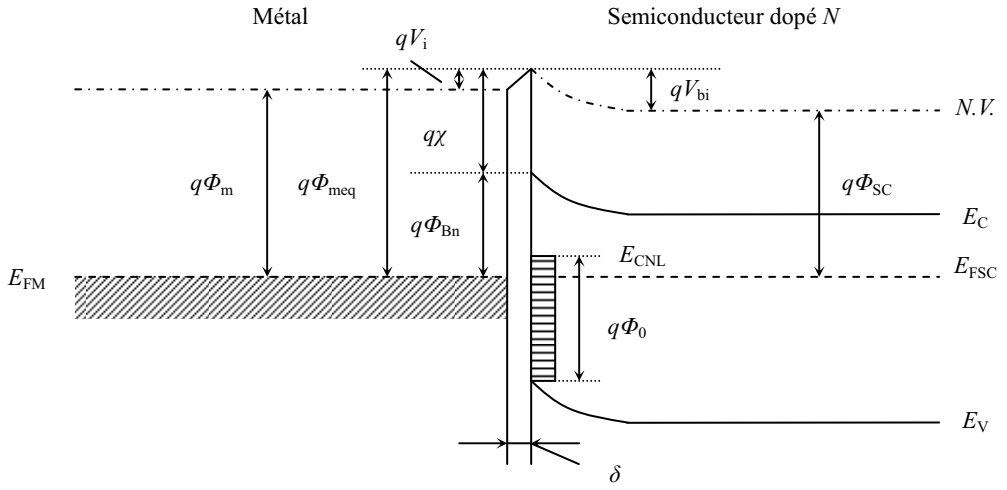
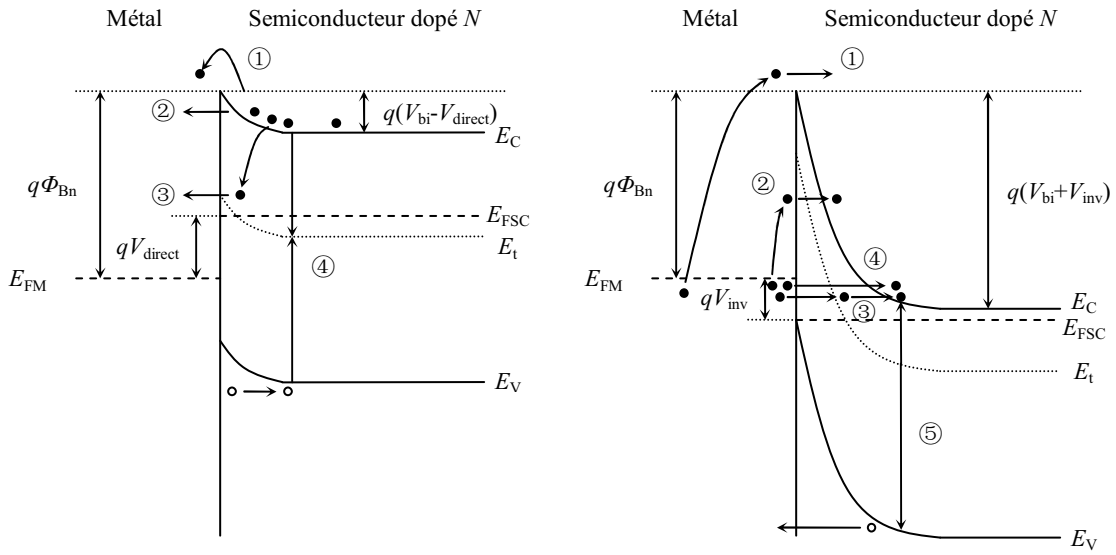



Figure 2.10. Diagramme énergétique à l'équilibre thermodynamique d'une structure métal/semiconducteur (*N*) tel que $q\Phi_m > q\Phi_{SC}$ et $q\Phi_m < q\chi + q\Phi_{Bn}$ (avec contact et états d'interface).

## 2.3.2. Descriptions des mécanismes de conduction au travers d'un contact redresseur

Les mécanismes de conduction électrique au travers d'un contact redresseur métal/semiconducteur sont divers et variés. Les différents processus de conduction intervenant dans un contact redresseur polarisé en direct et en inverse sont représentés figure 2.11. Afin d'alléger la représentation graphique, les états de surface n'ont pas été pris en considération.




(a) Polarisation directe (b) Polarisation inverse

Figure 2.11. Représentation simplifiée des mécanismes de conduction intervenant dans un contact redresseur sous polarisation électrique en : (a) direct et (b) inverse.

### 2.3.2.1. Conduction en polarisation directe

① Lorsque la température est suffisante, l'énergie thermique acquise par certains électrons du semiconducteur leur permet de franchir la barrière de potentiel, c'est l'émission thermoïonique ;

② Lorsque l'énergie thermique acquise par certains électrons est suffisante pour qu'ils atteignent une zone où la barrière métal/semiconducteur est relativement étroite, alors ces derniers peuvent passer à travers la barrière. Il s'agit de l'effet tunnel activé thermiquement ;

③ Les électrons peuvent passer à travers la barrière de potentiel par effet tunnel assisté par des défauts. C'est l'émission par saut de courant (hopping) ;

④ Lorsque le semiconducteur présente des centres profonds de génération-recombinaison, alors sous polarisation directe les porteurs peuvent se recombiner. C'est la recombinaison des paires électron-trou sur des centres profonds agissant comme centres de recombinaison.

### 2.3.2.2. Conduction en polarisation inverse

① Émission thermoïonique ;

② Effet tunnel activé thermiquement ;

③ Effet tunnel assisté par effet de champ via des défauts ;

④ Sous l'action d'une polarisation inverse la courbure de bande augmente et la barrière de potentiel devient de plus en plus étroite contrairement à ce qui se passe lors de la polarisation directe. Par conséquent, les électrons peuvent passer à travers la barrière par effet de champ. C'est l'effet tunnel par effet de champ ;

⑤ Lorsque le semiconducteur présente des centres profonds de génération-recombinaison, alors sous polarisation inverse et dans la zone désertée, des paires électron-trou peuvent être générées. C'est la génération des paires électron-trou assistée par des défauts.

### 2.3.2.3. Courant dans un contact redresseur

Le courant circulant à travers un contact redresseur est la somme de toutes les composantes évoquées précédemment auxquelles il faut ajouter le courant de fuite $I_{rp}$ relié à la chute de potentiel dans la résistance série du contact Schottky.

$$I = I_{tu} + I_{te} + I_{gr} + I_{rp} \tag{2.4}$$

➢ Le terme $I_{tu}$ représentant le courant dû à l'effet tunnel pur et/ou activé thermiquement est exprimé par la relation 2.5 :

$$I_{tu} = I_{tu0}\left[\exp\left(\frac{q\left(V - IR_{Sdiode}\right)}{E_0}\right) - 1\right] \tag{2.5}$$

où $I_{tu0}$ est la valeur du courant tunnel à la saturation. $V$ est la tension appliquée, $R_{Sdiode}$ est la résistance série de la diode due au contact ohmique, au volume du semiconducteur et à l'accès métallique de la grille à ne pas confondre avec la résistance d'accès de source des transistors $R_S$. $I$ est le courant total dans la diode et $E_0$ est un paramètre qui dépend du degré de transparence de la barrière, soit :

$$E_0 = E_{00}\coth\left(\frac{E_{00}}{k_B T}\right) \tag{2.6}$$

$$\text{et} \quad E_{00} = \frac{qh}{4\pi}\sqrt{\frac{N_D}{\varepsilon_S m_n^*}} \tag{2.7}$$

où $N_D$ correspond au dopage du semiconducteur, $k_B$ est la constante de Boltzmann, $T$ est la

température en Kelvin, $\varepsilon_S$ est la constante diélectrique du semiconducteur, $m_n^*$ est la masse effective des électrons dans le semiconducteur, $h$ est la constante de Planck et $q$ est la charge de l'électron.

- Le terme $I_{te}$ dont l'expression est donnée par la relation (2.8) représente l'effet thermoïonique :

$$I_{te} = I_{te0}\left[\exp\left(\frac{q(V - IR_{Sdiode})}{\eta_{te} k_B T}\right) - 1\right] \tag{2.8}$$

où $\eta_{te}$ le coefficient d'idéalité doit être proche de 1 dans le cas d'une émission thermoïonique seule. $I_{te0}$ est la valeur du courant thermoïonique de saturation qui s'exprime par :

$$I_{te0} = A^* T^2 S \exp\left(\frac{-q\Phi_B}{k_B T}\right) \tag{2.9}$$

avec $S$ la surface de la diode, $\Phi_B$ la tension de "built-in" ou la hauteur de barrière car $\eta_{te}$ est proche de 1. $A^*$ est la constante de Richardson donnée par la relation :

$$A^* = \frac{4\pi q m_n^* k_B^2}{h^3} \tag{2.10}$$

- Le terme $I_{gr}$ correspond au courant de génération et de recombinaison suivant le sens de la polarisation est donnée par :

$$I_{gr} = I_{gr0}\left[\exp\left(\frac{q(V - IR_{Sdiode})}{\eta_{gr} k_B T}\right) - 1\right] \tag{2.11}$$

où le coefficient d'idéalité $\eta_{gr}$ vaut 2 dans le cas d'un processus de génération-recombinaison et $I_{gr0}$ est le courant de saturation dont l'expression est :

$$I_{gr0} = \frac{qSw_D n_i}{2\tau} \tag{2.12}$$

avec $S$ la surface du contact Schottky, $w_D$ la largeur de la zone de déplétion, $n_i$ la densité de porteurs intrinsèque et $\tau$ la durée de vie des porteurs. La relation (2.12) correspond à un maximum de recombinaison et est basée sur l'hypothèse que le niveau d'énergie des pièges $E_t$ (centres profonds) se confond avec le niveau de Fermi intrinsèque.

- Le terme $I_{rp}$ (relation 2.13) correspond au courant de fuite dont l'origine peut être discutable. Il peut s'agir :
  - D'un courant par effet tunnel dont le comportement serait celui d'une résistance $R_P$ en parallèle sur la diode, considération qui ne peut être effectuée qu'à très faible tension ;
  - D'un courant surfacique lié à une forte densité d'états de surface, qui serait générée entre le contact ohmique et le contact Schottky sous l'effet de la polarisation. À cause de la forte densité d'électrons piégés, la surface se comporterait comme un matériau à faible conduction (conduction par hopping) et serait assimilable à une résistance $R_P$ en parallèle sur la diode.

  L'impact du terme $I_{RP}$ est visible essentiellement à faible polarisation quand le courant $I$ total est très faible d'où :

$$I_{rp} = \frac{V - R_{Sdiode} I}{R_P} \approx \frac{V}{R_P} \tag{2.13}$$

## 2.4. Détermination de la hauteur de barrière

Pour l'ensemble des transistors réalisés sur des épitaxies MBE sur Si (111), les contacts redresseurs élaborés par évaporation présentent tous une hauteur de barrière qui évolue anormalement avec le travail de sortie du métal constituant l'électrode de commande. L'objectif de cette étude est de définir les mécanismes possibles responsables de ce comportement.

Les valeurs expérimentales des hauteurs de barrière obtenues (Fig. 2.12) sur GaN ne montrent pas d'évolution monotone avec le travail de sortie du métal déposé. Dans un premier temps, nous avons adopté le modèle électrique appliqué au GaAs, lequel permet d'expliquer pourquoi la hauteur de barrière mesurée n'évolue pas avec le travail de sortie du métal. Les diagrammes énergétiques relatifs à ce modèle ont été représentés dans la section 2.3.1.2 (Figures 2.9 et 2.10). Ce dernier consiste à introduire à l'interface métal/semiconducteur une couche isolante extrêmement fine pouvant supporter une différence de potentiel et être transparente aux électrons. Cette couche peut être assimilée à l'oxyde natif du GaN tout comme à toute autre nano-couche de passivation. Elle est caractérisée par son épaisseur et par un continuum d'états à l'interface isolant/semiconducteur admettant un minimum en énergie au niveau de neutralité électrique dans la bande interdite.

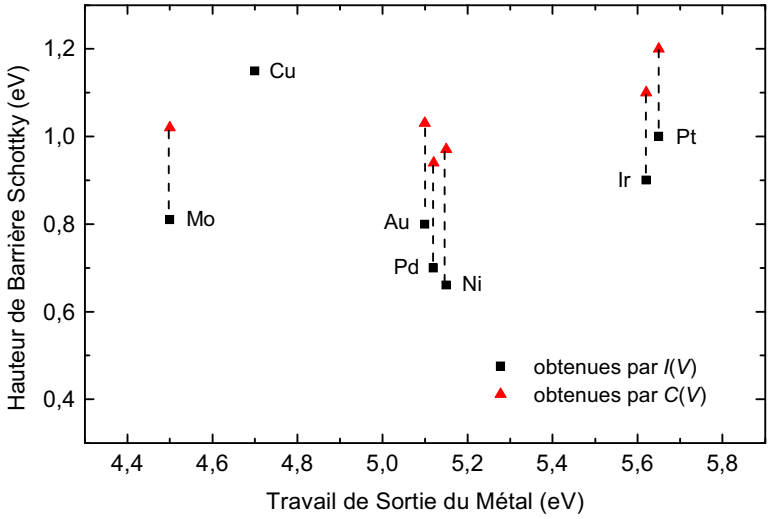



Figure 2.12. Récapitulatif de quelques hauteurs de barrière $q\Phi_{Bn}$ obtenues en fonction des travaux de sortie des métaux utilisés sur GaN/$Al_2O_3$ [5][6]. Les valeurs de $q\Phi_{Bn}$ sont obtenues soit par mesures $I(V)$ ou $C(V)$.

Le niveau énergétique des états remplis dans la bande interdite à l'interface isolant/semiconducteur par rapport à la bande de valence est donné par $q\Phi_0$. Ce niveau coïncide avec le niveau de Fermi à la surface du semiconducteur avant la formation du contact. Ces états de surface sont remplis afin de satisfaire à la condition de neutralité électrique de charge en surface $E_{CNL}$ et $E_{CNL} - E_V = q\Phi_0$ (cf. Figure 2.9 et 2.10).

Si le niveau d'énergie $q\Phi_0$ est situé au dessus du niveau de Fermi du semiconducteur en volume alors le niveau de Fermi en surface isolant/semiconducteur est bloqué à $q\Phi_0$ et la hauteur de barrière devient indépendante du travail de sortie du métal. La hauteur de barrière Schottky tenant compte de l'ensemble de ces paramètres ($D_{it}$, $E_{CNL}$, $\delta$ et $\varepsilon_i$) peut s'exprimer par [7] :

$$\Phi_{Bn} = c_2(\Phi_m - \chi) + (1 - c_2)\left(\frac{E_g}{q} - \Phi_0\right) - V_i = c_2\Phi_m + c_3 \tag{2.14}$$

où $c_2$ est donné par : $c_2 = \dfrac{\varepsilon_i\varepsilon_0}{\varepsilon_0\varepsilon_i + q^2\delta D_{it}}$ (2.15)

$\varepsilon_i$ est la constante diélectrique de la couche de passivation.

$\delta$ est l'épaisseur de la couche d'interface et est de l'ordre de quelques Angströms.

$D_{it}$ est la densité d'états d'interface ($cm^{-2}eV^{-1}$).

La relation (2.14) peut être réécrite sous la forme :

$$q\Phi_0 = E_g - q\left(\frac{c_2\chi + c_3 + V_i}{1 - c_2}\right) \tag{2.16}$$

Ainsi, les deux cas particuliers extrêmes peuvent être analysés.

- Cas d'une densité d'états d'interface infinie :

  Si $D_{it} = \infty$, $c_2 = 0$ conformément à la relation (2.15). La hauteur de barrière Schottky devient :

$$\Phi_{Bn} = \left(\frac{E_g}{q} - \Phi_0\right) - V_i \tag{2.17}$$

  Dans ce cas, la hauteur de barrière montre être indépendante de $\Phi_m$.

- Cas où soit la densité d'états d'interface ou soit l'épaisseur du diélectrique d'interface est négligeable : $D_{it} = 0$ ou $\delta = 0$. Sous cette condition, à partir de la relation (2.15), la hauteur de barrière peut se simplifier comme :

$$\Phi_{Bn} = \Phi_m - \chi \tag{2.18}$$

  On retrouve le résultat obtenu avec la structure de diode Schottky sans état d'interface.

Ce modèle a été appliqué au semiconducteur $Al_{0.32}Ga_{0.68}N$ massif en prenant en compte la présence de pièges en surface et une couche d'oxyde native interfaciale caractérisée par sa haute permittivité diélectrique ($\varepsilon_i = 10$ pour $Ga_2O_3$) dans le cas de trois épaisseurs possibles (0,1 nm, 0,5 nm et 1 nm).

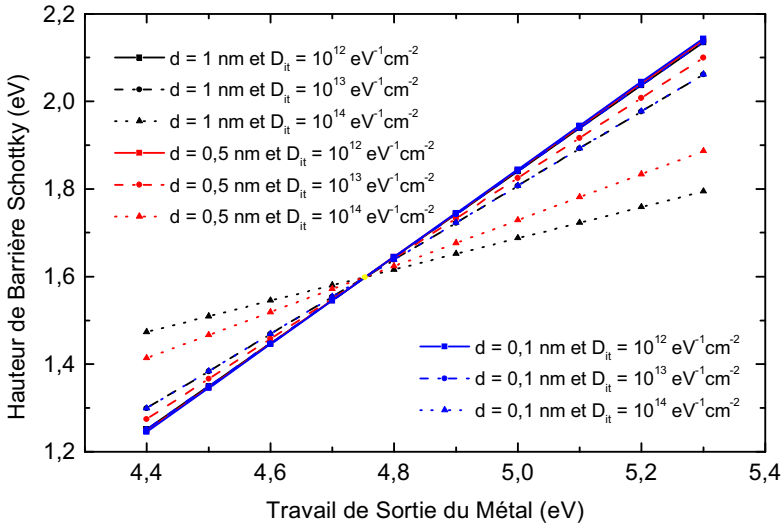



Figure 2.13. Évolution de la hauteur de barrière Schottky sur MESFET $Al_{0.32}Ga_{0.68}N$ en fonction du travail de sortie du métal en présence d'une couche d'oxyde natif $Ga_2O_3$ d'épaisseur $\delta$ et pour une densité de pièges en surface $D_{it}$.

La figure 2.13 montre l'évolution de la hauteur de barrière Schottky d'un MESFET $Al_{0.32}Ga_{0.68}N$ en fonction du travail de sortie du métal en présence d'une couche d'oxyde natif $Ga_2O_3$ d'épaisseur $\delta$ et pour une densité de pièges donnée en surface $D_{it}$.

On peut noter que la hauteur de barrière augmente linéairement avec le travail de sortie du métal. Ainsi, plus la densité d'états d'interface est élevée, plus la hauteur de barrière Schottky est sensible et augmente avec le travail de sortie du métal utilisé et cette évolution est d'autant plus marquée que l'épaisseur de la couche de diélectrique interfaciale est faible. Cette évolution correspond à des travaux de sortie du métal supérieurs à 4,75 eV et le phénomène est inversé en deçà de cette valeur. En effet, pour ce point particulier $q\Phi_m^*$, $V_i$ est négligeable devant les autres grandeurs.

$q\Phi_0 \# 2{,}564$ eV [8], $E_g = 4{,}164$ eV, $q\chi = 3{,}155$ eV, alors $q\Phi_m^* - q\chi = \left(E_g - q\Phi_0\right)$ d'où $q\Phi_m^* = 4{,}75\,\text{eV}$ et $q\Phi_{Bn} = \left(E_g - q\Phi_0\right) = 1{,}6\,\text{eV}$. La chute de potentiel à travers l'isolant devient nulle et la présence de pièges n'affecte pas la hauteur de barrière.

Cependant, ces résultats donnent des hauteurs de barrières relativement hautes et n'expliquent ni le comportement, ni les valeurs obtenues expérimentalement et ne constituent qu'une première approche pour comprendre l'évolution de la hauteur de barrière en fonction du continuum d'états à l'interface isolant/semiconducteur ($D_{it}$, $E_{CNL}$), ainsi que des caractéristiques du diélectrique de passivation et du travail de sortie du métal.

Ceci est d'autant plus vrai que la hauteur de barrière Schottky dans le cas des transistors HEMT AlGaN/GaN dépend en plus des caractéristiques de l'hétérostructure. Les paramètres les plus importants à prendre en considération sont l'épaisseur de la couche barrière $Al_xGa_{1-x}N$, sa fraction molaire en aluminium $x$, son dopage résiduel $N_D$, la densité d'électrons dans le gaz 2D et la contrainte résiduelle en surface de la couche d'AlGaN.

Les mécanismes de formation et de conduction électrique du contact Schottky TiN/HEMT, tenant compte de l'ensemble de ces paramètres, sont présentés par la suite.

## 2.5. Étude du contact redresseur TiN sur AlGaN/GaN/Si (111) réalisé par pulvérisation magnétron

Cette étude a débuté par l'optimisation technologique de contacts redresseurs déposés par évaporation sur des épitaxies AlGaN/GaN/Si (111). L'ensemble du processus utilisé pour chaque métal de grille et les caractéristiques électriques associées sont regroupés dans les tableaux 2.1-2.4. Quelles que soient les structures mesurées, le développement et la longueur de grille sont respectivement de 100 µm et de 2 µm. Les résultats obtenus restent médiocres à l'exception de la métallisation Mo/Au qui reste acceptable en polarisation directe mais dont le courant de fuite en polarisation inverse est élevé.

Tableau 2.1. Caractéristiques ($\Phi_{Bn}$, $\eta$ et $I_{GS}$ à -5 V) des contacts Schottky Mo/Au réalisés en fonction des prétraitements de surface, des recuits successifs et de la passivation sur la couche PTC058 AlGaN/GaN/Si (111).

| | Mo/Au (400/3000 Å) | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|
| | Désoxydation | | | Etching | | |
| | $\Phi_{Bn}$ (V) | $\eta$ | $I$ (~A) | $\Phi_{Bn}$ (V) | $\eta$ | $I$ (~A) |
| Avant recuit | 0,54 | 2,69 | 6,2 m | 0,5 | 2,76 | 4,4 m |
| Recuit 300 °C 20 min sous $N_2$ | 0,59 | 2,64 | 5,4 m | 0,58 | 2,79 | 2 m |
| Recuit 400 °C 20 min sous $N_2$ | – | – | – | 0,54 | 2,71 | 3,4 m |
| Recuit 500 °C 20 min sous $N_2$ | 0,69 | 2,55 | 2 µ | – | – | – |
| Passivation $SiO_2/Si_3N_4$ | 0,76 | 2,55 | 58 µ | 0,79 | 2,44 | 30 µ |
| Recuit 350 °C 2 semaines sous vide | 0,77 | 2,39 | 2 µ | 0,75 | 2,23 | 4 µ |

Tableau 2.2. Caractéristiques ($\Phi_{Bn}$, $\eta$ et $I_{GS}$ à -5 V) des contacts Schottky Mo/Au et Au réalisés en fonction des prétraitements de surface, des recuits successifs et de la passivation sur la couche PTC058 AlGaN/GaN/Si (111).

| | Mo/Au (400/3000 Å) | | | Au (420 Å) | | |
|---|---|---|---|---|---|---|
| | Désoxydation et etching | | | Désoxydation | | |
| | $\Phi_{Bn}$ (V) | $\eta$ | $I$ (~A) | $\Phi_{Bn}$ (V) | $\eta$ | $I$ (~A) |
| Avant recuit | 0,53 | 2,44 | 2,3 m | 0,55 | 5,42 | 4,6 m |
| Recuit 300 °C 20 min sous $N_2$ | 0,61 | 2,77 | 1,12 m | 0,54 | 6,39 | 6,6 m |
| Recuit 400 °C 20 min sous $N_2$ | 0,66 | 2,77 | 0,64 m | 0,51 | 8,68 | 5,7 m |
| Recuit 500 °C 20 min sous $N_2$ | 0,67 | 2,75 | 0,7 m | 0,57 | 5,85 | 2,52 m |
| Passivation $SiO_2/Si_3N_4$ | 0,62 | 3,96 | 0,84 m | – | – | – |
| Recuit 350 °C 2 semaines sous vide | 0,63 | 3,58 | 1,02 m | 0,56 | 5,54 | > 1 m |

Tableau 2.3. Caractéristiques ($\Phi_{Bn}$, $\eta$ et $I_{GS}$ à -5 V) des contacts Schottky Pt/Au réalisés en fonction des prétraitements de surface, des recuits successifs et de la passivation sur la couche PTC058 AlGaN/GaN/Si (111).

| | Pt/Au (100/1000 Å) | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|
| | Désoxydation | | | Désoxydation et etching | | |
| | $\Phi_{Bn}$ (V) | $\eta$ | $I$ (~A) | $\Phi_{Bn}$ (V) | $\eta$ | $I$ (~A) |
| Avant recuit | 0,55 | 5,17 | > 1 m | 0,56 | 5,31 | 0,72 m |
| Recuit 300 °C 20 min sous $N_2$ | 0,54 | 4,83 | 2,37 m | 0,61 | 6,17 | 1,2 m |
| Recuit 400 °C 20 min sous $N_2$ | 0,63 | 4,37 | 37 µ | 0,58 | 6,02 | 0,44 m |
| Recuit 500 °C 20 min sous $N_2$ | 0,65 | 4,09 | 0,8 m | 0,69 | 4,73 | 0,4 m |
| Passivation $SiO_2/Si_3N_4$ | 0,66 | 2,4 | > 1 m | – | – | – |
| Recuit 350 °C 2 semaines sous vide | 0,63 | 2,32 | > 1 m | – | – | – |

Tableau 2.4. Caractéristiques ($\Phi_{Bn}$, $\eta$ et $I_{GS}$ à -5 V) des contacts Schottky Ni/Mo/Au et Pt/Ti/Au réalisés en fonction des prétraitements de surface, des recuits successifs et de la passivation sur la couche PTC058 AlGaN/GaN/Si (111).

| | Ni/Mo/Au (50/400/1500 Å) | | | Pt/Ti/Au (200/250/1500 Å) | | |
|---|---|---|---|---|---|---|
| | Désoxydation et etching | | | Désoxydation et etching | | |
| | $\Phi_{Bn}$ (V) | $\eta$ | $I$ (~A) | $\Phi_{Bn}$ (V) | $\eta$ | $I$ (~A) |
| Avant recuit | 0,58 | 8,8 | > 1 m | – | – | – |
| Recuit 300 °C 20 min sous $N_2$ | 0,56 | 5,89 | 0,33 m | – | – | – |
| Recuit 400 °C 20 min sous $N_2$ | 0,6 | 5,48 | 98 µ | 0,705 | 2,29 | > 1 m |
| Recuit 500 °C 20 min sous $N_2$ | 0,69 | 4,4 | 0,13 m | 0,644 | 2,35 | > 1 m |
| Passivation $SiO_2/Si_3N_4$ | 0,7 | 4,82 | 0,24 m | – | – | – |
| Recuit 350 °C 2 semaines sous vide | 0,65 | 4,89 | 0,26 m | – | – | – |

Le second procédé technologique utilisé pour réaliser cette électrode de commande a été la pulvérisation magnétron. Parmi l'ensemble des métallisations disponibles et réalisées, le Nitrure de Titane (TiN) est celui qui présente les caractéristiques d'un contact redresseur le plus proche d'un comportement Schottky. La source de TiN utilisée est pure à 99,9 % et présente une stœchiométrie 1:1.

La première partie de cette étude comporte une description de l'hétérostructure utilisée. La seconde partie décrit l'effet des différents paramètres du procédé technologique sur le comportement du contact redresseur. À partir de l'ensemble de cette analyse, il est possible de donner les conditions optimales pour l'obtention d'un contact Schottky TiN sur AlGaN/GaN/Si (111). La dernière partie se compose d'une

description des mécanismes de conduction électrique afin de modéliser au mieux le fonctionnement de ce contact Schottky.

### 2.5.1. Topologie de la structure étudiée

La topologie de l'hétérostructure HEMT $Al_{0.32}Ga_{0.68}N$/GaN sur substrat Si (111) utilisée pour l'étude du contact redresseur est présentée ci-dessous (figure 2.14).

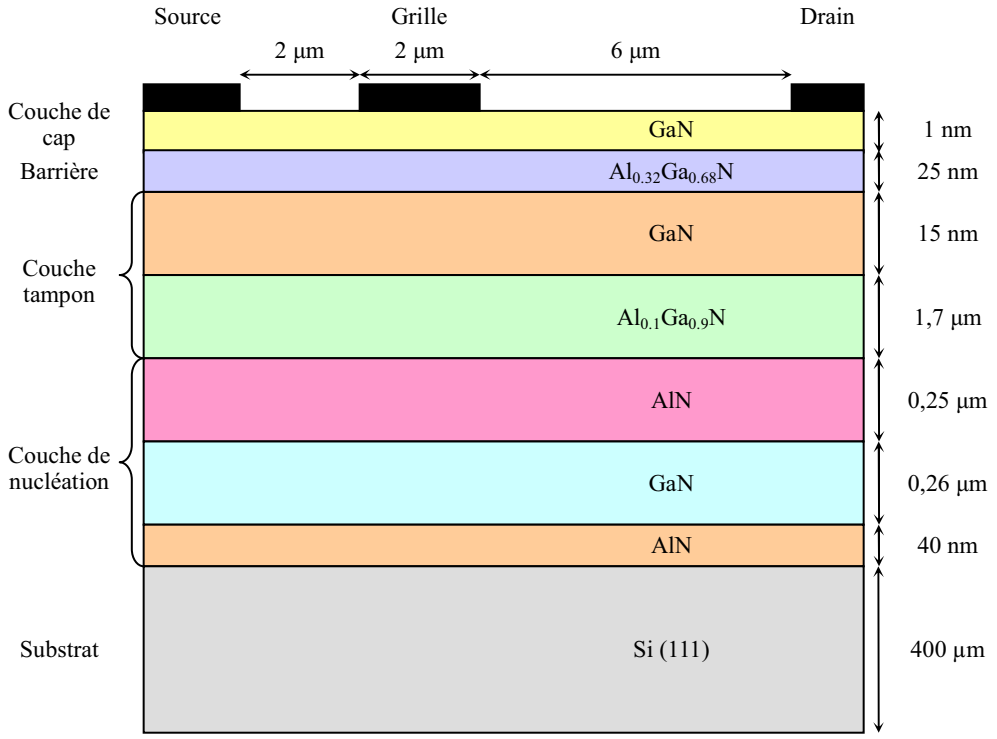



Figure 2.14. Topologie du contact Schottky TiN sur $Al_{0.32}Ga_{0.68}N$/GaN/Si (111).

La composition de l'hétérostructure L446 utilisée reste somme toute relativement standard. Cependant, la couche tampon est composée d'AlGaN avec 10 % d'aluminium pour accentuer son caractère résistif et minimiser les fuites de courant du canal.

Les transistors sont fabriqués sur cette épitaxie (Fig. 2.14). L'optimisation technologique a été réalisée avec des longueurs de grille de 1 µm et 2 µm. La technologie optimisée a été appliquée avec succès pour l'obtention de grilles en Té de 100 nm et 150 nm, nécessaires à la montée en fréquence. Les autres paramètres des transistors correspondent à : $L_{DS}$ = 5 µm, 10 µm, 15 µm et 20 µm, $L_{GS}$ = 1 µm et 2 µm, et $W$ = 100 µm et 150 µm.

## 2.5.2. Optimisation du procédé technologique

Nous étudions dans cette section, l'influence de certains paramètres comme l'épaisseur de la couche de TiN, la température et le procédé de recuit, le prétraitement de surface, la passivation de surface, et la longueur de grille sur le comportement du contact Schottky, à savoir la hauteur de barrière et le courant de fuite en polarisation inverse.

### 2.5.2.1. Effet de l'épaisseur de la couche de TiN

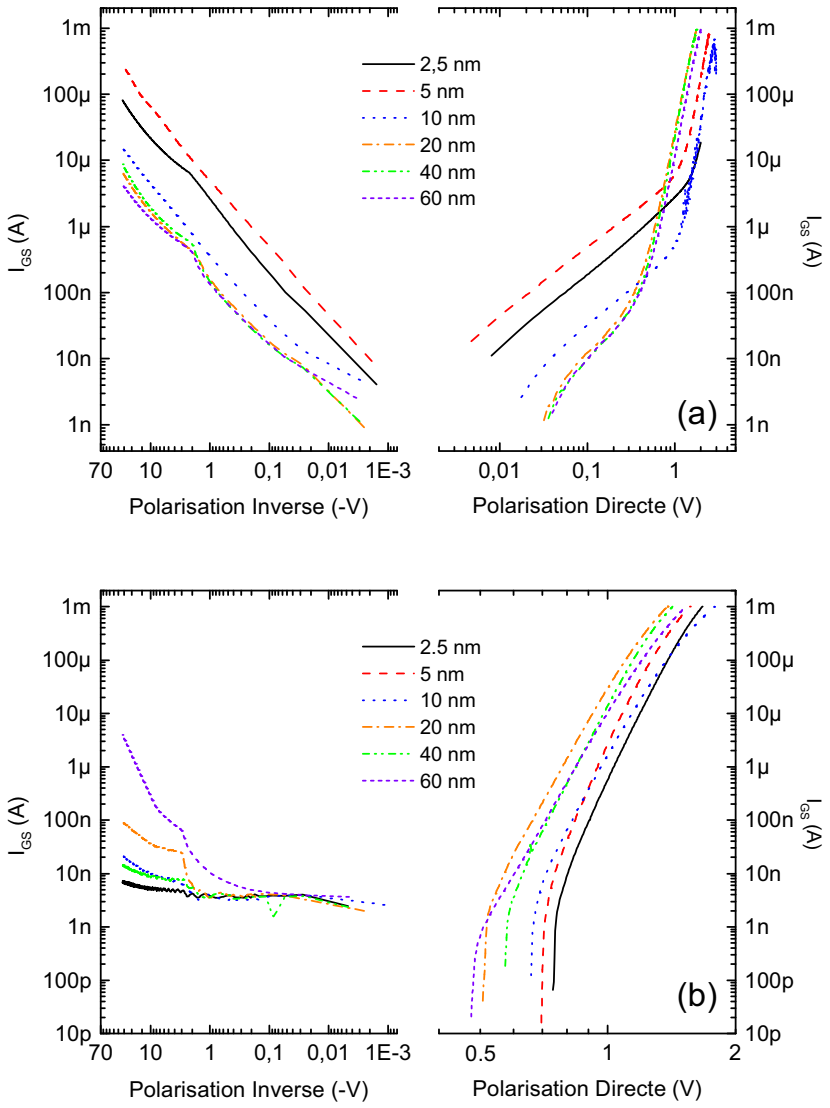



Figure 2.15. Évolution des caractéristiques $I_{GS}(V_{GS})$ du contact Schottky Au/TiN/HEMT en fonction de l'épaisseur du métal de TiN : (a) avant recuit et (b) après recuit à 500 °C. ($L_G$ = 2 µm, $L_{DS}$ = 10 µm, $L_{GS}$ = 2 µm et $W$ = 100 µm).

L'objectif est d'étudier l'impact de l'épaisseur de la couche de TiN sur les caractéristiques du contact de grille $I_{GS}(V_{GS})$ en direct et en inverse. Six différentes épaisseurs de la couche de TiN sont étudiées (2,5 nm, 5 nm, 10 nm, 20 nm, 40 nm et 60 nm) avant (figure. 2.15 (a)) et après recuit à 500 °C pendant 40 minutes sous $N_2$ (figure. 2.15 (b)).

On peut constater figure 2.15 (a) que si l'électrode de grille n'est pas recuite, le contact électrique obtenu s'apparente davantage à un contact ohmique fortement dégradé. En polarisation inverse, les courants de fuite sont extrêmement élevés, de l'ordre de quelques µA à quelques centaines de µA à -30 V.

Avant recuit, le courant de fuite en polarisation inverse évolue de près de deux ordres de grandeur entre les épaisseurs les plus petites et les plus élevées de la couche de TiN. Le phénomène est identique en polarisation directe.

Après recuit, le comportement des caractéristiques est inversé vis-à-vis de la structure non recuite. Le courant de fuite en polarisation inverse est largement amélioré et s'apparente à un courant de génération recombinaison extrêmement réduit (Fig. 2.15 (b)).

L'épaisseur de TiN optimale semble comprise entre 5 nm et 10 nm. Elle permet d'obtenir des fuites de courant minimales et des hauteurs de barrière maximales. Pour ces épaisseurs, en polarisation inverse et avant recuit, les courants de fuite sont supérieurs à 10 µA et passent après recuit bien en deçà des 10 nA à -30 V. La hauteur de barrière la plus élevée est obtenue pour une épaisseur de TiN de 5 nm et est supérieure à 1,06 eV.

### 2.5.2.2. Effet de la température de recuit et de la passivation

Une fois l'ensemble des contacts de grille réalisés (épaisseur de TiN variant de 2,5 nm à 60 nm), il est nécessaire de trouver les conditions expérimentales permettant d'optimiser le contact Schottky en fonction du procédé de recuit et de la passivation. C'est pourquoi, après dépôt du métal de grille, tous les composants réalisés subissent un recuit à différentes températures (350 °C, 500 °C, 690 °C et 800 °C) ainsi qu'une passivation standard $SiO_2/Si_3N_4$ (100 nm/50 nm). Les recuits sont généralement réalisés sous $N_2$, et quant au recuit sous vide, il est réalisé à $2\times10^{-7}$ Torr. Le prétraitement de surface utilisé pour tous les composants est une désoxydation ($HCl:H_2O$) et un décapage physique à l'argon avant la métallisation de la grille.

Après chaque recuit, les caractéristiques $I_{GS}(V_{GS})$ sont relevées et répertoriés dans les tableaux

2.5-2.7 pour un transistor avec $L_G$ = 2 µm, $L_{DS}$ = 10 µm, $L_{GS}$ = 2 µm et $W$ = 100 µm.

Tableau 2.5. Tableau récapitulatif des caractéristiques ($\Phi_{Bn}$, $\eta$ et $I_{GS}$ à -30 V) du contact Schottky TiN/Au en fonction des conditions de recuit et de passivation pour les épaisseurs de la couche de TiN de 2,5 nm et de 5 nm.

| | Épaisseur TiN 2,5 nm | | | Épaisseur TiN 5 nm | | |
|---|---|---|---|---|---|---|
| | $\Phi_{Bn}$ (V) | $\eta$ | $I$ (~A) | $\Phi_{Bn}$ (V) | $\eta$ | $I$ (~A) |
| Avant recuit | 0,584 | 14,31 | 81 µ | 0,507 | 9,69 | 284 µ |
| Recuit 500 °C 40 min sous $N_2$ | 0,878 | 2,17 | 7 n | 1,059 | 1,60 | 6 n |
| Passivation $SiO_2/Si_3N_4$ | 0,821 | 2,05 | 388 n | 0,869 | 1,99 | 37 n |
| Recuit 350 °C 72 h sous $N_2$ | 0,769 | 2,57 | 56 n | **1,064** | **1,46** | **10 n** |
| Recuit 350 °C 3 semaines sous vide | 0,695 | 7,64 | 27 n | 0,905 | 1,87 | 13 n |
| Recuit 690 °C 40 min sous $N_2$ | 0,433 | 14,42 | 84 µ | 0,386 | 15,84 | 198 µ |

Tableau 2.6. Tableau récapitulatif des caractéristiques ($\Phi_{Bn}$, $\eta$ et $I_{GS}$ à -30 V) du contact Schottky TiN/Au en fonction des conditions de recuit et de passivation pour les épaisseurs de la couche de TiN de 10 nm et de 20 nm.

| | Épaisseur TiN 10 nm | | | Épaisseur TiN 20 nm | | |
|---|---|---|---|---|---|---|
| | $\Phi_{Bn}$ (V) | $\eta$ | $I$ (~A) | $\Phi_{Bn}$ (V) | $\eta$ | $I$ (~A) |
| Avant recuit | 0,637 | 8,70 | 15 µ | 0,635 | 4,15 | 7 µ |
| Recuit 500 °C 40 min sous $N_2$ | 0,810 | 2,37 | 21 n | 0,800 | 1,97 | 91 n |
| Recuit 690 °C 40 min sous $N_2$ | 0,896 | 1,61 | 15 n | 0,793 | 2,23 | 37 n |
| Recuit 800 °C 40 min sous vide | | non réalisé | | 0,477 | 6.53 | 38 µ |
| Passivation $SiO_2/Si_3N_4$ | 0,892 | 1,60 | 85 n | | non mesuré | |
| Recuit 350 °C 72 h sous $N_2$ | 0,889 | 1,63 | 13 n | 0,777 | 2,07 | 215 n |
| Recuit 350 °C 3 semaines sous vide | 0,899 | 1,61 | 12 n | 0,717 | 2,63 | 66 n |

Tableau 2.7. Tableau récapitulatif des caractéristiques ($\Phi_{Bn}$, $\eta$ et $I_{GS}$ à -30 V) du contact Schottky TiN/Au en fonction des conditions de recuit et de passivation pour les épaisseurs de la couche de TiN de 40 nm et de 60 nm.

| | Épaisseur TiN 40 nm | | | Épaisseur TiN 60 nm | | |
|---|---|---|---|---|---|---|
| | $\Phi_{Bn}$ (V) | $\eta$ | $I$ (~A) | $\Phi_{Bn}$ (V) | $\eta$ | $I$ (~A) |
| Avant recuit | 0,661 | 4,21 | 9 µ | 0,644 | 4,66 | 4 µ |
| Recuit 500 °C 40 min sous $N_2$ | 0,829 | 1,97 | 15 n | 0,796 | 2,13 | 4 µ |
| Recuit 690 °C 40 min sous $N_2$ | 0,819 | 2,04 | 37 n | 0,811 | 2,33 | 13 n |
| Passivation $SiO_2/Si_3N_4$ | 0,845 | 1,95 | 34 n | 0,809 | 2,39 | 13 n |
| Recuit 350 °C 72 h sous $N_2$ | 0,845 | 1,91 | 57 n | non réalisé | | |
| Recuit 350 °C 3 semaines sous vide | 0,832 | 1,98 | 36 n | | | |

Les paramètres caractéristiques retenus permettant de qualifier le contact redresseur sont la hauteur de barrière, son coefficient d'idéalité et le courant de fuite en polarisation inverse à -30 V. Ces grandeurs sont mesurées sur les caractéristiques $I_{GS}(V_{GS})$.

Cette étude permet de constater que le contact Schottky le plus performant est celui ayant une épaisseur de TiN de 5 nm soumis à un recuit à 500 °C pendant 40 min. Aussi, la température de recuit optimale est d'autant plus élevée que l'épaisseur de TiN est épaisse.

La passivation a tendance à pratiquement toujours dégrader les propriétés électriques du contact Schottky et un recuit de 3 jours sous $N_2$ est nécessaire pour réparer les défauts d'interface isolant/semiconducteur et améliorer ainsi les caractéristiques du contact. Les recuits successifs après ce dernier recuit de 3 jours, ne font que dégrader davantage les paramètres du contact redresseur.

### 2.5.2.3. Effet du prétraitement de surface

Cette étude est destinée à définir les conditions de prétraitement physico-chimique de la surface avant le dépôt de la métallisation de grille par pulvérisation. Le prétraitement correspond à une désoxydation HCl standard et/ou à un décapage physique à l'argon. Ce travail a été réalisé sur le contact Schottky optimisé de l'étude précédente avec une épaisseur de TiN de 5 nm. Il est nécessaire de rappeler ici que tous les composants obtenus dans les sections précédentes s'appuient sur la présente étude.

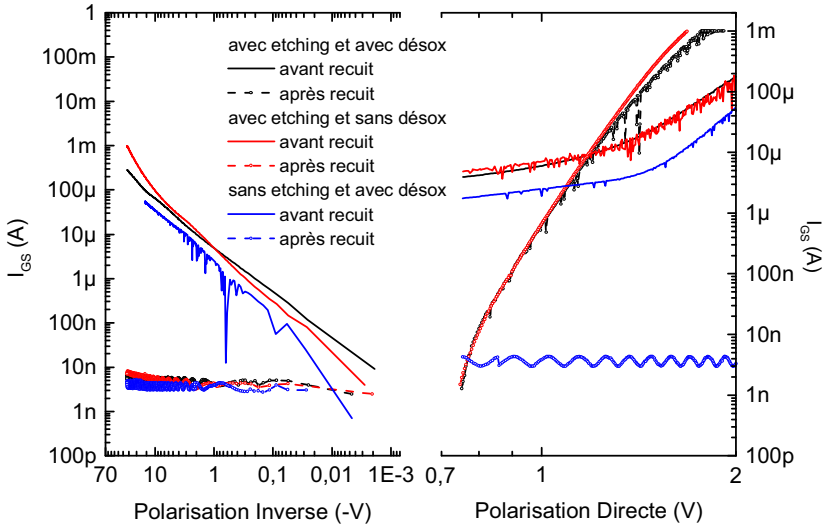



Figure 2.16. Effet du prétraitement de surface sur les caractéristiques $I_{GS}(V_{GS})$ d'un transistor HEMT (L446) non passivé ($L_G$ = 2 µm, $L_{DS}$ = 10 µm, $L_{GS}$ = 2 µm et $W$ = 100 µm).

La figure 2.16 présente l'effet du prétraitement de surface sur les caractéristiques $I_{GS}(V_{GS})$ des contacts de grille TiN/Au. Quel que soit le cas étudié, si le recuit n'est pas réalisé, le contact redresseur n'est pas optimum et présente un courant de fuite en volume en polarisation inverse et un courant de surface en polarisation directe. Sans décapage de la surface au préalable, le contact présente après recuit un comportement isolant (pointillé en bleu). À contrario, la désoxydation montre ne pas avoir d'influence particulière sur ces caractéristiques. Contrairement aux grilles réalisées par évaporation où seul une désoxydation ou un décapage physique permet l'obtention d'une caractéristique Schottky acceptable, il s'avère que pour les grilles réalisées par pulvérisation seul un décapage physique à l'argon permet l'obtention d'un comportement Schottky après recuit.

### 2.3.2.4. Effet de la longueur de grille

Le contact Schottky optimisé nécessite donc un décapage physique à l'argon avant métallisation, suivi d'un dépôt d'un bicouche TiN/Au (5 nm/150 nm) et d'un recuit à 500 °C pendant 40 min. Ce procédé a ensuite été transféré pour une technologie en lithographie électronique afin de réaliser des grilles en Té avec des longueurs du pied de grille de 100 nm et 150 nm. Cependant, ces grilles submicroniques requièrent une réévaluation de la température de recuit étant donné la faible surface de contact. Dans ce cas, la température optimale s'est révélée être de 600 °C. Les valeurs reportées dans le tableau 2.8 présentent les évolutions de la hauteur de barrière et du coefficient d'idéalité en fonction de la longueur de grille et de la température de recuit.

Tableau 2.8. Évolutions de la hauteur de barrière $q\Phi_{Bn}$ et du coefficient d'idéalité $\eta$ en fonction de la température de recuit dans le cas des longueurs de grille Schottky de 100 nm et de 2 µm.

| | $L_G$ = 100 nm | | | | $L_G$ = 2 µm | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| T (°C) | $\Phi_{Bn}$ (V) | $\eta$ | Contact | T (°C) | $\Phi_{Bn}$ (V) | $\eta$ | Contact |
| Avant recuit | 0,549 | 5,60 | quasi-ohmique | avant recuit | 0,507 | 9,69 | quasi-ohmique |
| 600 | 0,938 | 1,41 | Schottky | 500 | 1,064 | 1,46 | Schottky |
| 650 | – | – | isolant | 690 | 0,386 | 15,84 | quasi-ohmique |

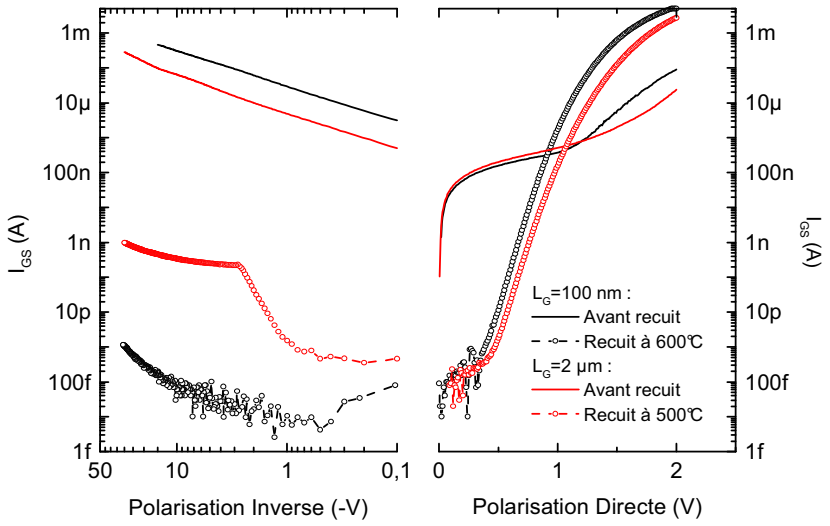



Figure 2.17. Évolution des caractéristiques $I_{GS}(V_{GS})$ du contact Schottky TiN pour différentes longueurs de grille : 100 nm ($L_{DS}$ = 10 µm, $L_{GS}$ = 1 µm et $W$ = 150 µm) et 2 µm ($L_{DS}$ = 10 µm, $L_{GS}$ = 2 µm et $W$ = 100 µm).

La figure 2.17 montre les caractéristiques $I_{GS}(V_{GS})$ en polarisation directe et inverse du contact Schottky optimisé pour une grille en Té de 100 nm et 2 µm, avant et après recuit.

Le courant de fuite en polarisation inverse obtenu avec une grille en Té de 100 nm est de 1,1 pA/mm à -30 V, soit une amélioration drastique après recuit de plus de neuf décades à -30 V. Pour une grille longue de 2 µm, le courant de fuite diminue après recuit de plus de cinq décades à -30 V.

En conclusion, le contact Schottky présente une commande plus efficace pour les grilles submicroniques. À contrario, la hauteur de barrière Schottky pour la grille micrométrique est plus élevée que celle obtenue avec une grille submicronique (tableau 2.8).

## 2.6. Mécanismes de conduction dominants du contact Schottky

Les mécanismes de conduction dominants des contacts Schottky obtenus sur les semiconducteurs III-N à large bande interdite sont essentiellement l'effet tunnel assisté par effet de champ et/ou le mécanisme du courant limité par charge d'espace.

### 2.6.1. Mécanisme par effet tunnel assisté par effet de champ

La figure 2.18 montre un mécanisme possible de conduction du contact Schottky TiN/HEMT avant et après recuit. La structure est polarisée en direct. Les impuretés introduites par l'oxygène substitutionnel et les lacunes d'azote en surface et en volume de la barrière AlGaN, surdopent la surface et favorise la fuite de courant à travers la barrière de potentiel par effet tunnel.

Une analyse de l'interface par XPS et HRTEM montre qu'après recuit, l'interface se compose d'une nano-couche de $TiO_2$ et que les dopants ($V_N$ et $O_N$) deviennent extrêmement minoritaires. Une explication possible pourrait être que l'azote de la couche de TiN viendrait combler les lacunes d'azotes en surface d'AlGaN et que le Ti restant consomme l'oxygène résiduel pour former cette nano-couche de $TiO_2$ de façon à passiver ainsi les états de surface (liaisons pendantes et autres complexes) [3].

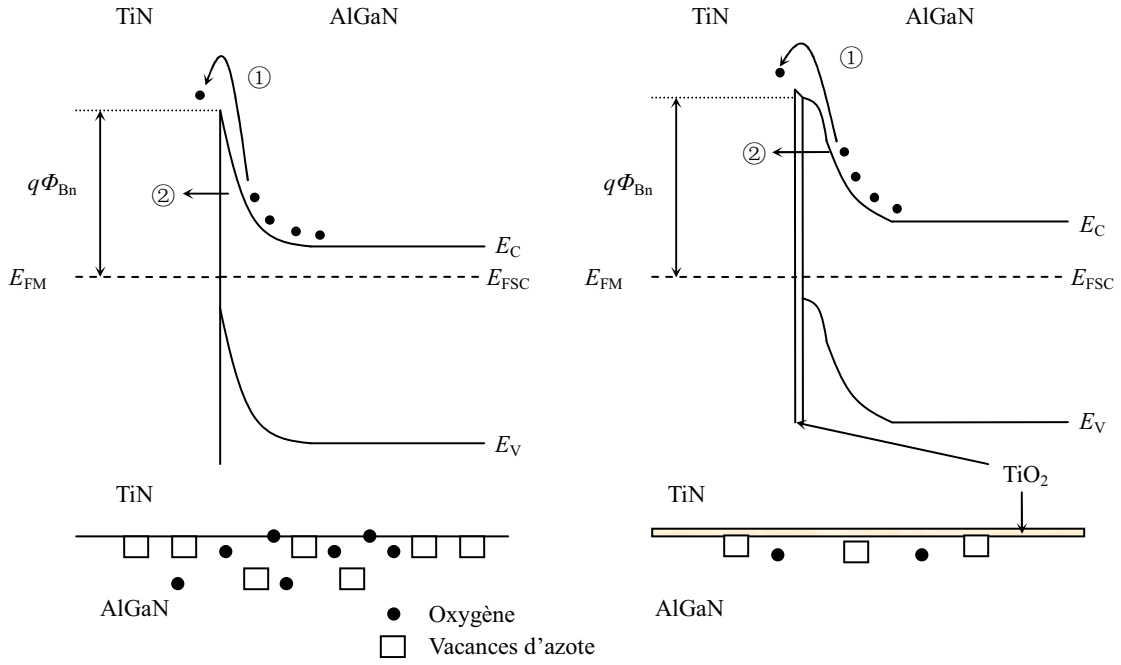



Figure 2.18. Diagrammes énergétiques et mécanismes de conduction du contact TiN Schottky sur l'hétérostructure $Al_{0.32}Ga_{0.68}N$/GaN. (a) avant recuit, les étapes nommées ① et ② décrivent le transport du courant par émission thermoïonique pure ou assistée par effet de champ (TFE). La réduction de la largeur de barrière est causée par les donneurs de surface ; (b) après recuit, TFE et FE sont les mécanismes dominants. La nano-couche de passivation de $TiO_2$ permet de supprimer le courant de fuite par effet tunnel.

2.6.1.1. Caractérisations électriques $C_{GS}(V_{GS}, \omega)$

La figure 2.19 montre les caractéristiques $C_{GS}(V_{GS})$ d'un contact Schottky TiN de 2 µm de longueur de grille recuit à 500 °C pendant 40 min, mesurées à plusieurs fréquences variant de 10 kHz à 1 MHz.

On peut constater que la capacité varie très peu quelles que soit la fréquence et les rampes de tension utilisées, ce qui prouve qu'il n'y a pas de diffusion marquée du TiN au travers de la barrière AlGaN même après recuit. Quelles que soient les fréquences inférieures à 1MHz, les mesures sont réversibles et ne montrent pas de phénomène d'hystérésis lors d'un cycle de balayage entre 0 V et -3,5 V. Ce qui pourrait impliquer que l'impact des pièges subsistants reste mineur sous la grille.

Une capacité résiduelle de 0,7 pF environ est observée pour des tensions de polarisation au delà de la tension de pincement du transistor dont la valeur mesurée est $V_p$ = -2,8 V. Cette capacité résiduelle est générée par les plots métalliques d'accès (grille et source). Elle peut être directement retranchée de la capacité totale mesurée.

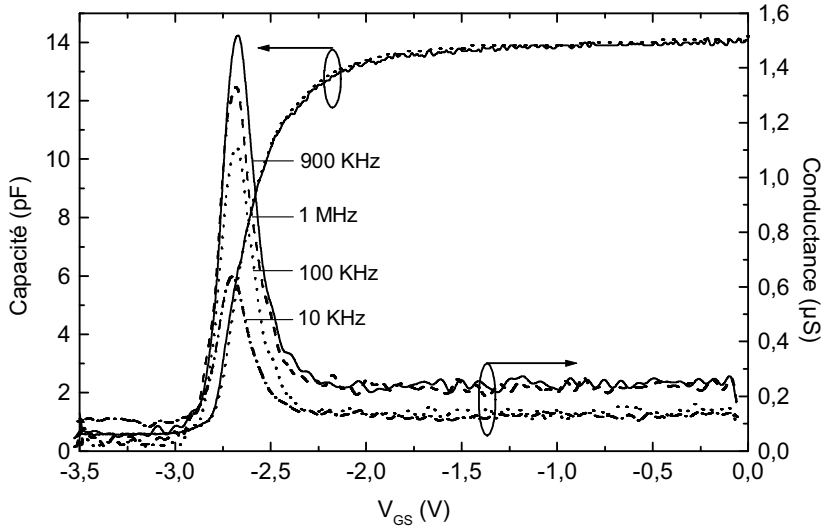



Figure 2.19. Caractéristiques $C_{GS}(V_{GS})$ et $G_{GS}(V_{GS})$ après recuit du contact Schottky TiN pour différentes fréquences comprises entre 10 kHz et 1 MHz ($L_G$ = 2 µm, $L_{DS}$ = 10 µm, $L_{GS}$ = 2 µm et $W$ = 100 µm).

L'évolution de la conductance associée en fonction de la tension montre la réponse probable d'un piège ponctuel profond localisé dans la couche tampon de GaN [9].

2.6.1.2. Distribution de la densité d'électrons

Le profil de densité d'électrons (Fig. 2.20) en profondeur de l'hétérostructure $y_n$ peut être déterminé à partir des caractéristiques $C_{GS}(V_{GS})$ en polarisation inverse selon les relations [10] établies pour une structure MIS (Metal/Insulator/Semiconductor) :

$$N_D = -\frac{2}{q\varepsilon_0\varepsilon_{SC}}\left(\frac{d\left(1/C_{GS}^2\right)}{dV_{GS}}\right)^{-1} \tag{2.19}$$

$$y_n = S\frac{\varepsilon_0\varepsilon_{SC}}{C} \tag{2.20}$$

où $S$ est la surface du contact Schottky.

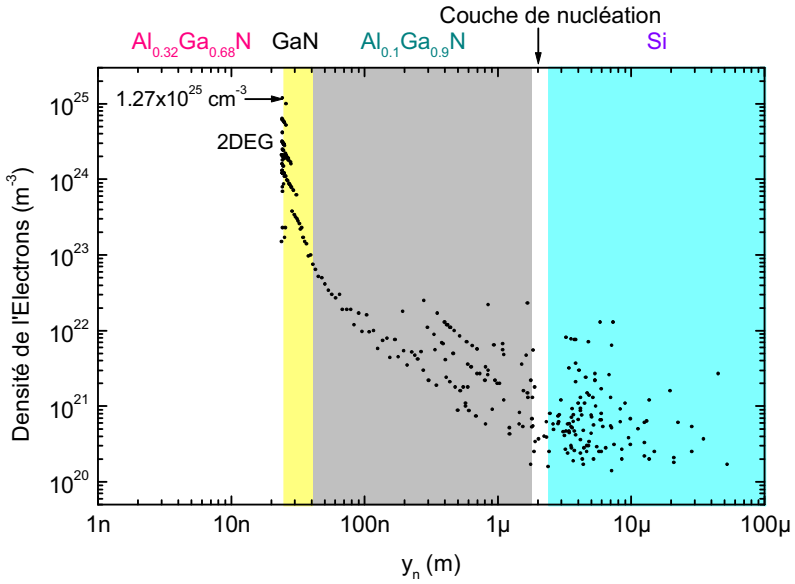



Figure 2.20. Évolution du profil de densité d'électrons sous le contact Schottky TiN/HEMT L446 ($L_G$ = 2 µm, $L_{DS}$ = 10 µm, $L_{GS}$ = 2 µm et $W$ = 100 µm).

La figure 2.20 permet d'estimer la position du gaz 2D dans l'hétérostructure. Il est possible de constater que le gaz d'électrons est confiné dans un puits de quelques nanomètres de large et que le dopage résiduel de GaN à 8 nm sous l'interface AlGaN/GaN est de $10^{15}$ cm$^{-3}$. La densité d'électrons maximale de $1{,}27\times10^{19}$ cm$^{-3}$ est située à l'interface AlGaN/GaN et correspond approximativement à une densité d'électrons dans le gaz 2D de $10^{13}$ cm$^{-2}$.

### 2.6.1.3. Évolution de la résistance série

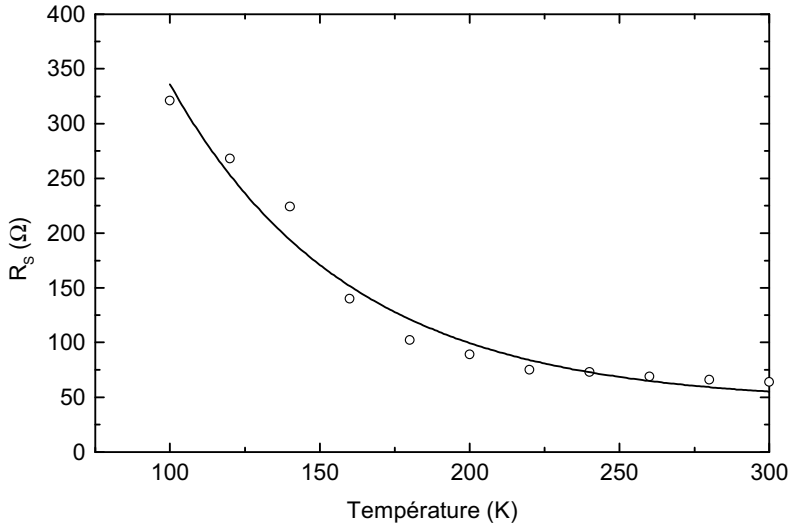



Figure 2.21. Évolution de la résistance série du contact Schottky en fonction de la température pour une longueur de grille de 100 nm et un développement de 150 µm.

La figure 2.21 donne un exemple d'évolution de la résistance série $R_S$ en fonction de la température pour une longueur de grille de 100 nm et un développement de 150 µm. $R_S$ est estimée à 64 Ω à température ambiante.

### 2.6.1.4. Détermination de la densité de dislocations en surface de la couche barrière AlGaN

Certains auteurs ont montré que la constante de Richardson est liée dans le cas de contacts Schottky sur GaN au taux de dislocations [11][12]. À partir du courant de fuite à saturation par effet tunnel, il est alors possible de remonter à cette grandeur physique. Les caractéristiques $I(V)$ d'un contact Schottky peuvent être mises sous la forme de l'équation suivante :

$$I = I_0\left[\exp\left(\frac{qV}{\eta k_B T}\right) - 1\right] \tag{2.21}$$

où $I_0$ et la valeur du courant de saturation qui s'exprime par :

$$I_0 = q\rho_D v_D S \exp\left(\frac{-qV_K}{\eta k_B T}\right) \tag{2.22}$$

où $\rho_D$ est la densité de dislocations.

$v_D$ est la fréquence de Debye (et vaut dans notre cas $1{,}5\times10^{13}$ $s^{-1}$).

$qV_K$ est le potentiel de diffusion du contact Schottky et peut s'écrire :

$$qV_K = q\Phi_{Bn} - k_B T \ln\left(\frac{N_C}{N_D}\right) \approx q\Phi_{Bn} \tag{2.23}$$

Ceci est justifié par le fait que le second terme est négligeable devant le premier. Il est donc possible d'exprimer la densité de dislocations $\rho_D$ comme :

$$\rho_D = \frac{I_0}{qv_D S}\exp\left(\frac{q\Phi_{Bn}}{\eta k_B T}\right) \tag{2.24}$$

Pour un contact Schottky TiN/Au optimisé, on obtient une densité de dislocation $\rho_D$ de $7{,}1\times10^9$ $cm^{-2}$ ($q\Phi_{Bn}$ = 1,064 eV et $\eta$ = 1,46, cf. tableau 2.5). Cette valeur semble cohérente avec le taux de dislocations ($8\times10^9$ $cm^{-2}$) de la couche tampon (synthétisée par MBE) augmentée du désordre d'alliage de la couche barrière AlGaN.

Cependant, Il est important de noter ici que la densité de dislocations est très sensible au rapport $\Phi_{Bn}/\eta$. La validité de ce résultat repose sur des valeurs fiables de la hauteur de barrière et du coefficient d'idéalité. Soulignons le fait que la connaissance du taux de dislocations lié aux paramètres du contact Schottky permet une meilleure compréhension de sa formation et de ses imperfections.

#### 2.6.1.5. Limitation du mécanisme par effet tunnel assisté par effet de champ

La conduction par effet tunnel assisté par effet de champ ne peut pas expliquer pourquoi un contact Schottky est formé sur un semiconducteur à dopage résiduel de type *N* avec un métal de grille TiN dont le travail de sortie $q\Phi_m$ est de 3,75 eV. En effet, l'affinité électronique de l'AlN n'est pas définie avec certitude dans la littérature. Elle varie selon les auteurs de 0,6 à 2,1eV, ce qui est considérable. Par conséquent, il n'est pas possible de déterminer le travail de sortie du semiconducteur $Al_{0.32}Ga_{0.68}N$. Notons cependant qu'il est communément admis que le TiN sur une hétérostructure HEMT AlGaN/GaN forme une jonction métal/semiconducteur, laquelle devrait se comporter comme un dipôle ohmique. Pourtant, l'expérience montre le contraire dans notre cas. Il y a donc nécessité à introduire un second mécanisme de conduction permettant d'expliquer en partie cette incohérence. C'est le mécanisme du courant limité par charge d'espace.

Rappelons que nous ne tenons pas compte dans notre modélisation analytique de la présente d'un champ de surface à l'interface TiN/HEMT, ni de la présence du gaz d'électrons 2D à l'interface AlGaN/GaN à proximité du contact redresseur, ni de l'abaissement de la hauteur de barrière par la force image. L'ensemble de ces facteurs contribue à diminuer la hauteur de barrière du contact redresseur.

### 2.6.2. Mécanisme du courant limité par charge d'espace

Le mécanisme du courant limité par charge d'espace s'appuie sur la déplétion provoquée par le contact de grille sur le semiconducteur de manière à repousser les charges résiduelles et inverser localement sous cette électrode le dopage majoritaire. Cet état de dopage résiduel permet d'expliquer pourquoi avec un métal dont le travail de sortie est plus petit que le travail de sortie du semiconducteur, le contact obtenu devient de type redresseur. Par conséquent, le dopage résiduel de type *N* sous la surface d'AlGaN (sous la grille et dont l'origine sont les lacunes d'azote et l'oxygène résiduel) est compensé après recuit et la composante résiduel $N_D$-$N_A$ devient négative et présente alors un dopage majoritaire de type *P*. Dans ces conditions, le contact formé par le métal de TiN est bien un contact Schottky.

Dans les sections suivantes, le contact Schottky TiN sur AlGaN/GaN/Si (111) est analysé avec plus de détails et particulièrement ce type de mécanisme.

#### 2.6.2.1. Courants limités par charge d'espace (CLCE)

Le mécanisme de conduction par des courants limités par charge d'espace a été étudié pour la première fois par Lampert et Mark en 1970 [13] et a porté sur des diélectriques isolants. Depuis, quelques publications ont utilisé ce modèle pour expliquer la conduction dans les semiconducteurs III-V (GaAs etc.…) puis les matériaux III-N à large bande interdite (GaN etc.…).

Pour analyser les mécanismes de conduction du contact Schottky, nous avons mesuré les caractéristiques $I_{GS}(V_{GS})$ en fonction de la température de 80 K à 300 K en polarisation inverse et directe (Fig. 2.22). Le transistor analysé est réalisé avec une technologie grille nitrure $Si_3N_4$ submicronique telle que $L_G$ = 100 nm, $L_{GS}$ = 1 µm et $W$ = 150 µm. La structure d'étude AlGaN/GaN présente une épaisseur de la couche barrière AlGaN de 25 nm.

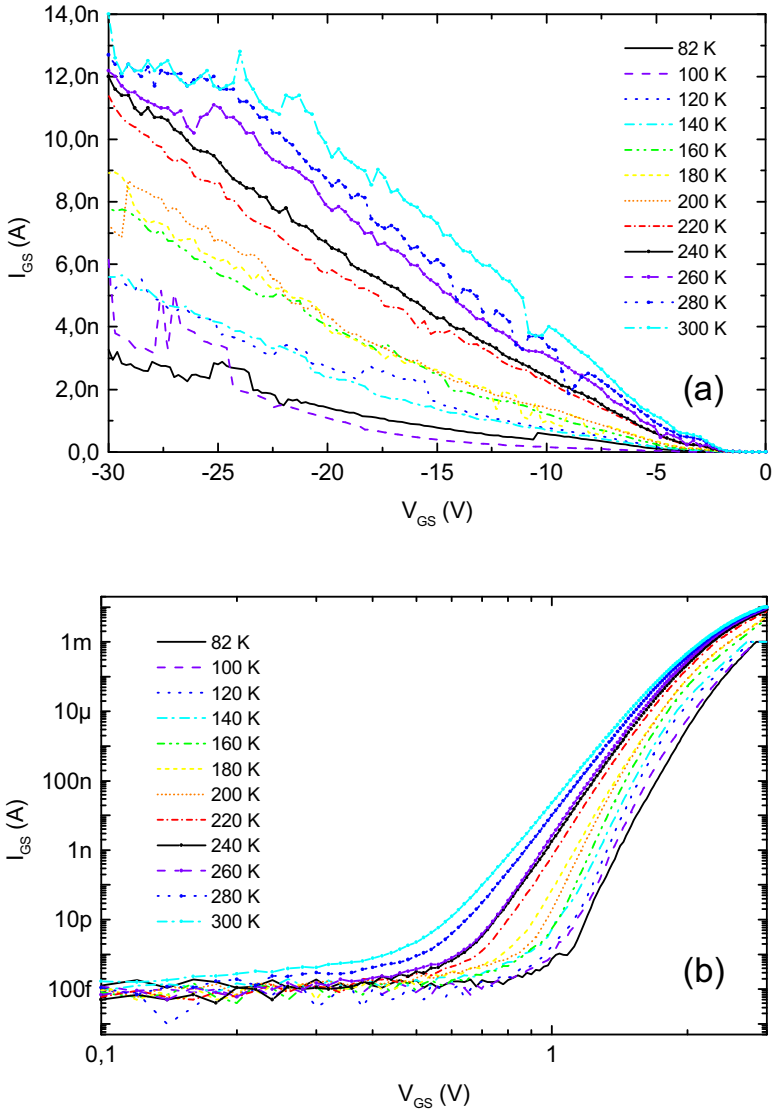



Figure 2.22. Caractéristiques $I_{GS}(V_{GS})$ pour différentes températures entre 80 K et 300 K d'un contact Schottky TiN sur HEMT L446 ($L_G$ = 100 nm, $L_{GS}$ = 1 µm et $W$ = 150 µm) : (a) en polarisation inverse et (b) en polarisation directe.

Les caractéristiques $I_{GS}(V_{GS})$ à 300 K en polarisation directe peuvent être dissociée en deux parties (Fig. 2.23). Un comportement ohmique est observé ($I \sim V^{1,1}$) jusqu'à la tension $V_{GS}$ égale à $V_{TFL}$, alors que le courant limité par charge d'espace ($I \sim V^{18,5}$) devient dominant à partir de la tension $V_{GS} > V_{TFL}$. $V_{TFL}$ est définie comme la tension limite entre ces deux régimes.

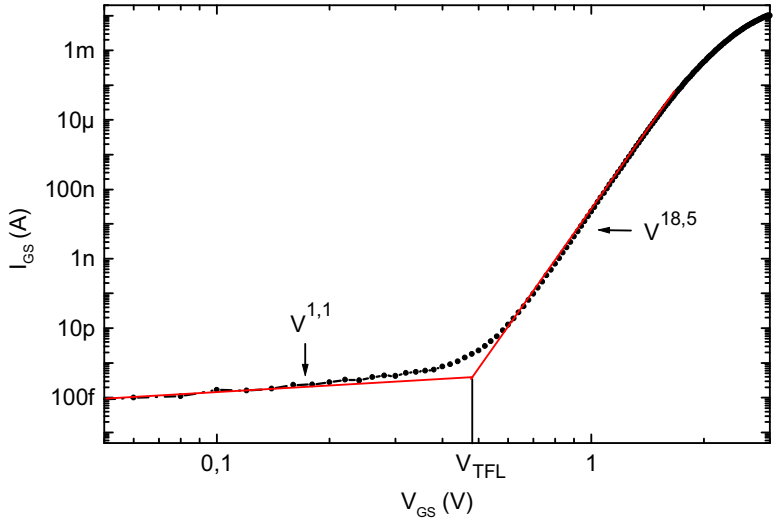



Figure 2.23. Caractéristiques $I_{GS}(V_{GS})$ d'un contact Schottky TiN sur HEMT L446 ($L_G$ = 100 nm, $L_{GS}$ = 1 µm et $W$ = 150 µm) à 300 K sous polarisation directe.

La tension $V_{TFL}$ est déterminée graphiquement sur la figure 2.23 et est estimée approximativement autour de 0,49 V pour une température ambiante. Cette grandeur permet de quantifier la concentration des pièges $p_{t0}$ non occupés par les électrons dans la zone de la charge espace. Ainsi $p_{t0}$ peut être obtenue par la relation suivante [14] :

$$p_{t0} = \frac{V_{TFL}\varepsilon_r\varepsilon_0}{qL_{ZCE}^2} \tag{2.25}$$

où $L_{ZCE}$ est la largeur de la zone de charge d'espace.

Si on suppose la largeur de la zone de charge d'espace $L_{ZCE}$ comprise entre 5 nm et 10 nm, on obtient les valeurs limites pour $p_{t0}$ égales respectivement à $9{,}74\times10^{18}$ cm$^{-3}$ et $2{,}43\times10^{18}$ cm$^{-3}$. À partir de ces résultats, il est possible de remonter à la densité d'électrons $n_0$ laquelle est donnée par la relation (Éq. 2.26) :

$$n_{t0} = p_{t0}\frac{J(2V_{TFL})}{J(V_{TFL})} \tag{2.26}$$

Les valeurs de $n_0$ sont estimées à $1{,}07\times10^{15}$ cm$^{-3}$ et $2{,}67\times10^{14}$ cm$^{-3}$ pour deux différentes largeurs de la zone de charge d'espace $L_{ZCE}$ égales à 5 nm et 10 nm respectivement. Ces calculs sont développés pour toutes les températures de mesure et les résultats sont répertoriés dans le tableau 2.9.

Tableau 2.9. Récapitulatif des densités de charges résiduelles pour deux différentes largeurs de la zone de charge d'espace à différentes températures.

| Température (K) | $V_{TFL}$ (V) | $L_{ZCE}$ = 5 nm | | $L_{ZCE}$ = 10 nm | |
|---|---|---|---|---|---|
| | | $p_{t0}$ (cm$^{-3}$) | $n_0$ (cm$^{-3}$) | $p_{t0}$ (cm$^{-3}$) | $n_{t0}$ (cm$^{-3}$) |
| 82 | 1 | $1{,}99\times10^{19}$ | $3{,}83\times10^{12}$ | $4{,}97\times10^{18}$ | $9{,}57\times10^{11}$ |
| 100 | 0,98 | $1{,}95\times10^{19}$ | $3{,}32\times10^{12}$ | $4{,}87\times10^{18}$ | $8{,}29\times10^{11}$ |
| 120 | 0,97 | $1{,}93\times10^{19}$ | $2{,}26\times10^{12}$ | $4{,}82\times10^{18}$ | $5{,}65\times10^{11}$ |
| 140 | 0,93 | $1{,}85\times10^{19}$ | $4{,}24\times10^{12}$ | $4{,}62\times10^{18}$ | $1{,}06\times10^{12}$ |
| 160 | 0,90 | $1{,}79\times10^{19}$ | $2{,}50\times10^{12}$ | $4{,}47\times10^{18}$ | $6{,}26\times10^{11}$ |
| 180 | 0,85 | $1{,}69\times10^{19}$ | $3{,}51\times10^{12}$ | $4{,}22\times10^{18}$ | $8{,}78\times10^{11}$ |
| 200 | 0,76 | $1{,}51\times10^{19}$ | $1{,}73\times10^{13}$ | $3{,}78\times10^{18}$ | $4{,}44\times10^{12}$ |
| 220 | 0,68 | $1{,}35\times10^{19}$ | $4{,}39\times10^{13}$ | $3{,}38\times10^{18}$ | $1{,}10\times10^{13}$ |
| 240 | 0,65 | $1{,}29\times10^{19}$ | $6{,}90\times10^{13}$ | $3{,}23\times10^{18}$ | $1{,}73\times10^{13}$ |
| 260 | 0,63 | $1{,}25\times10^{19}$ | $7{,}72\times10^{13}$ | $3{,}13\times10^{18}$ | $1{,}93\times10^{13}$ |
| 280 | 0,55 | $1{,}09\times10^{19}$ | $3{,}30\times10^{14}$ | $2{,}73\times10^{18}$ | $8{,}25\times10^{13}$ |
| 300 | 0,49 | $9{,}74\times10^{18}$ | $1{,}07\times10^{15}$ | $2{,}43\times10^{18}$ | $2{,}67\times10^{14}$ |

Les résultats mentionnés dans le tableau 2.9 montrent que la densité de charges positives diminue de moitié avec la température (80 K–300 K) et est légèrement inférieures à $10^{19}$ cm$^{-3}$ à la température ambiante (Quel que soit la température, nous prenons comme hypothèse que la largeur de la zone de charge d'espace $L_{ZCE}$ n'évolue pas et égale à 5 nm). Sa variation reste néanmoins sujette à caution. Alors que la densité d'électrons augmente avec la température de plusieurs ordres de grandeur jusqu'à atteindre $10^{15}$ cm$^{-3}$ à température ambiante (toujours pour $L_{ZCE}$ = 5 nm). Les charges positives dans la zone de charge d'espace devenant majoritaires, il y a donc une inversion de dopage sous le contact redresseur.

Rappelons que la largeur de la zone de charge d'espace est obtenue expérimentalement après calcul (paragraphe 2.6.2.3). La densité des porteurs majoritaires est très sensible à la précision portée à cette grandeur ainsi qu'à celle de $V_{TFL}$. Une erreur de 10 % sur la lecture de $V_{TFL}$ engendre une variation d'un ordre de grandeur sur la densité de porteurs.

Quantitativement, la valeur des densités de trous obtenue semble élevée, mais il faut relativiser par rapport aux erreurs de mesures et de lecture. Néanmoins, cette étude permet d'expliquer par ce mécanisme de charge d'espace pourquoi un contact Schottky est obtenu avec un travail de sortie du métal inférieur au travail de sortie du semiconducteur.

2.6.2.2. Évolutions de la hauteur de barrière et du coefficient d'idéalité

À partir des courants mesurés (Fig. 2.22), il est possible de déterminer les évolutions de la hauteur de barrière $q\Phi_{Bn}$ et du coefficient d'idéalité $\eta$ en fonction de la température (Fig. 2.24).

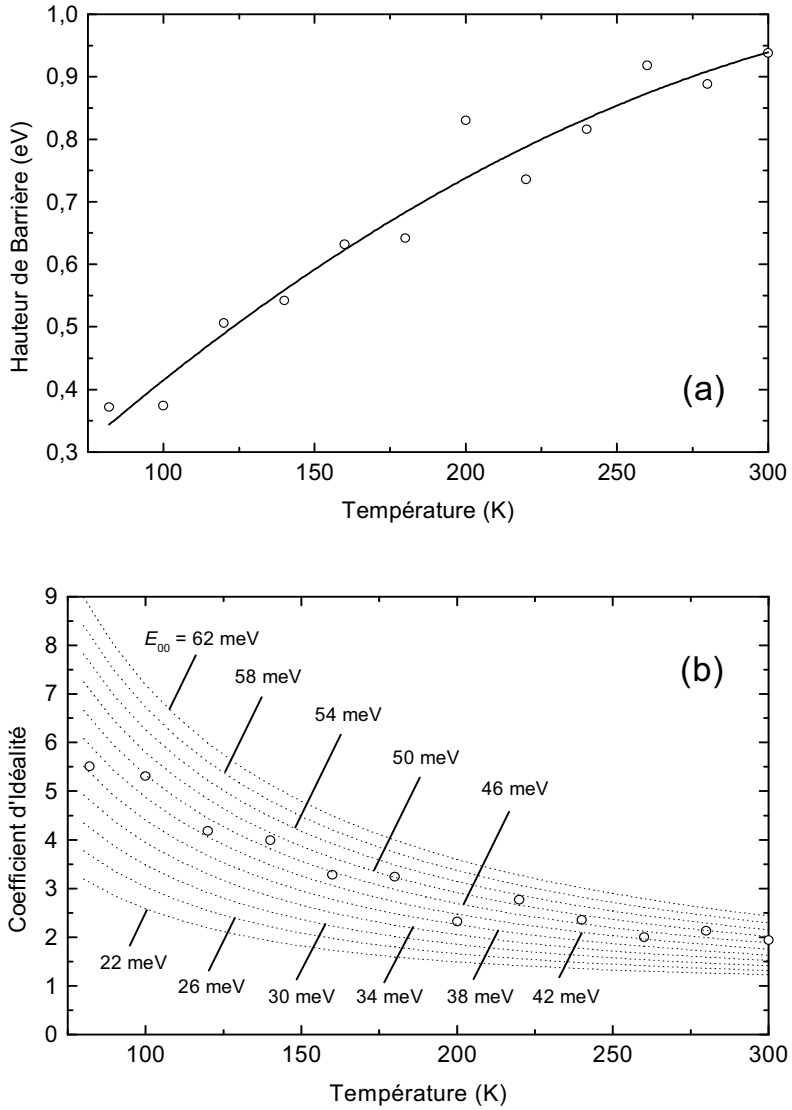



Figure 2.24. Évolutions de la hauteur de barrière $q\Phi_{Bn}$ (a) et du coefficient d'idéalité $\eta$ (b) en fonction de la température dans le cas d'un contact Schottky TiN sur HEMT L446 ($L_G$ = 100 nm, $L_{GS}$ = 1 µm et $W$ = 150 µm).

La figure 2.24 montre que la hauteur de barrière augmente avec la température, et le coefficient d'idéalité diminue lorsque la température augmente.

2.6.2.3. Détermination de la largeur de la zone de charge d'espace

La figure 2.24 (b) montre l'évolution du coefficient d'idéalité en fonction de la température et pour différentes énergies caractéristiques $E_{00}$ liées à la probabilité de transmission des porteurs à travers la barrière de potentiel. Les courbes en pointillés montrent l'évolution du coefficient d'idéalité en fonction de la température pour $E_{00}$ variant de 22 meV à 62 meV avec un pas de 4 meV. Ceci permet d'encadrer l'évolution de l'énergie $E_{00}$ relatif à notre contact Schottky laquelle est comprise $E_{00}$ entre 38 meV et 54 meV. Selon l'équation 2.7, la densité de dopage résiduel peut être estimée après transposition par :

$$N_A = \varepsilon_S m_n^* \left( \frac{4\pi E_{00}}{qh} \right)^2 \tag{2.27}$$

On peut évaluer que la densité de trous entre 80 K et 300 K varie de $1\times10^{19}$ cm$^{-3}$ à $2{,}02\times10^{19}$ cm$^{-3}$. Ces résultats corroborent parfaitement ceux obtenus dans le tableau 2.9 (densité de trous variant entre $0{,}974\times10^{19}$ cm$^{-3}$ et $1{,}99\times10^{19}$ cm$^{-3}$). Dans ce cas, la largeur de la zone de charge d'espace peut être estimée par analogie à 5 nm.

## 2.7. Conditions pour la formation des contacts ohmique et Schottky

L'ensemble de cette étude permet de clarifier les mécanismes de formation du contact ohmique et Schottky sur AlGaN/GaN/Si (111). Elle permet de constater des similitudes sur les mécanismes de formation mais aussi des différences essentielles. Le premier paramètre physique à prendre en considération est la température de recuit et les conditions extérieures apportées expérimentalement.

Le bicouche Al/Ti déposé par évaporation et recuit à haute température permet de former à l'interface métal/semiconducteur une nano-couche de TiN caractérisée par une très forte concentration de centres donneurs sous la surface lesquelles sont composés de lacunes d'azote et d'oxygène en site substitutionnel d'azote. Ce processus associé à la formation d'un alliage dans la couche barrière AlGaN entre le métal et le gaz 2D, permet d'obtenir un contact ohmique optimisé dans la gamme de température comprise entre 750 °C et 950 °C. Le dépôt d'une couche de TiN directement en surface du semiconducteur par pulvérisation magnétron ne permet pas de réunir toutes les conditions pour former un contact ohmique même après recuit mais peu présenter pour des températures de recuit comprises approximativement entre 350 °C et 450 °C, un comportement quasi-ohmique. Cependant, l'énergie thermique acquise lors d'un

recuit entre 500 °C et 700 °C, permet aux espèces à l'interface de former une nano-couche de $TiO_2$, laquelle passive les états de surface et compense les lacunes d'azote de manière à inverser le dopage sous le métal. Ce processus ne permet pas la diffusion des espèces métalliques dans la couche barrière et permet de former un contact Schottky optimisé ($q\Phi_{Bn}$ # 1,06 eV, $\eta$ # 1,4), robuste en température, parfaitement homogène et une morphologie très peu rugueuse (équivalente à celle de l'épitaxie). Au-delà de 750 °C, ce contact électrique présente un comportement plutôt isolant.

## 2.8. Conclusion

Une étude sur la formation et les mécanismes de conduction des contacts Schottky de transistors HEMT AlGaN/GaN sur substrat Si (111) a été entreprise.

Plusieurs procédés technologiques ont été utilisés pour réaliser ces électrodes de commande. Le dépôt par évaporation ne permet pas d'obtenir des contacts efficaces sur des épitaxies réalisées par MBE sur substrats Si (111). Les dépôts par pulvérisation ont permis d'obtenir des résultats remarquables notamment avec la métallisation TiN/Au. Le procédé optimisé comporte un prétraitement de surface par décapage physique à l'argon in-situ dans le bâti de métallisation, le dépôt d'une couche de TiN dont l'épaisseur est comprise entre 5 nm et 10 nm et recuit à 500 °C sous $N_2$ ou sous vide pour une technologie optique et 600 °C pour une technologie submicronique (largeur du pied de grille). La passivation post-grille montre une dégradation de comportement du contact Schottky et nécessite un recuit longue durée pour réparer l'essentiel des défauts de surface et ainsi récupérer les caractéristiques initiales du contact.

Une analyse électrique en température des contacts Schottky optimisés a montré que le mécanisme de conduction dominant est l'effet tunnel assisté par effet de champ. Cependant, cela n'est pas suffisant pour expliquer pourquoi il est possible d'obtenir un contact Schottky avec le métal TiN sur une hétérostructure HEMT AlGaN/GaN. Un courant limité par charge d'espace a été observé et a permis de quantifier la concentration des pièges à l'interface métal/semiconducteur et de mettre ainsi en évidence une couche d'inversion de type *P* sous le contact Schottky.

Les caractéristiques capacité-tension à différentes fréquences montrent que l'interface comporte une densité de pièges actifs pratiquement non décelable et un piège ponctuel situé dans la couche tampon de GaN.

# Bibliographie

[1] B. Van Daele, G. Van Tendeloo, W. Ruythooren, J. Derluyn, M. R. Leys, M. Germain, “The Role of Al on Ohmic Contact Formation on N-Type GaN and AlGaN/GaN”, *Appl. Phys. Lett.*, vol. 87, pp. 061905, 2005.

[2] J. S. Jang, T. Y. Seong, S. R. Jeon, “Electronic Transport Mechanism for Nonalloyed Ti-based Ohmic Contacts to N-AlGaN”, *J. Appl. Phys.*, vol. 100, pp. 046106, 2006.

[3] J. C. Gerbedoen, “Conception et Réalisation Technologique de Transistors de la Filière HEMTs AlGaN/GaN sur Substrat Silicium pour l’Amplification de Puissance Hyperfréquence”, *Thèse de doctorat*, USTL, 2009.

[4] N. Vellas, “Etudes Expérimentales de Transistors HFET de la Filière Nitrure de Gallium pour des Applications de Puissance Hyperfréquence”, *Thèse de doctorat*, USTL, 2003.

[5] S. C. Binari, H. B. Dietrich, G. Kelner, L. B. Rowland, K. Doverspike, D. K. Gaskill, “Electrical Characterisation of Ti Schottky Barriers Can N-Type GaN”, *Electron Lett.*, vol. 30, No. 11, pp. 909-911, 1994.

[6] J. P. Ao, D. Kikuta, N. Kubota, Y. Naoi, Y. Ohno, “Copper Gate AlGaN/GaN HEMT with Low Gate Leakage Current”, *Electron Device Letters*, vol. 24, No. 8, pp. 500-502, 2003.

[7] A. M. Cowley, S. M. Sze, “Surface States and Barrier Height of Metal-Semiconductor Systems”, *J. Appl. Phys.*, vol. 36, pp. 3212-3220, 1965.

[8] H. Hasegawa, T. Inagaki, S. Otomo, T. Hashizume, “Mechanisms of Current Collapse and Gate Leakage Currents in AlGaN/GaN Heterostructure Field Effect Transistors”, *J. Vac. Sci. Technol. B*, vol. 21, pp. 1844-1855, 2003.

[9] J. P. Nougier, Méthodes de calcul Numérique. Paris : *Masson*, 1987.

[10] D. Delahaye, “Optimisation de la Sectorisation de l’Espace Aérien par Algorithmes Génétiques”, *Thèse de doctorat*, ENSAE, 1995.

[11] V. V. Evstropov, Y. V. Zhilyaev, M. Dzhumaeva, N. Nazarov, “Tunnel Excess Current in Non-degenerate Barrier (p–n and m–s) Silicon-Containing III–V structures”, *Semiconductors*, vol. 31, No. 2, pp. 115-120, 1997.

[12] A. E. Belyaev, N. S. Boltovets, V. N. Ivanov, V. P. Klad’ko, R. V. Konakova, Y. Y. Kudrik, A. V. Kuchuk, V. V. Milenin, Y. N. Sveshnikov, V. N. Sheremet, “Mechanism of Dislocation-Governed Charge Transport in Schottky Diodes Based on Gallium Nitride”, *Semiconductors*, vol. 42, No. 6, pp. 689-693, 2008.

[13] M. A. Lampert, P. Mark, “Current Injection in Solid”, *Academic Press Inc.*, New York, pp. 3, 1970.

[14] H. P. Hall, M. A. Awaah, K. Das, “Deep-Level Dominated Rectifying Contacts for N-Type GaN Films”, *Phys. Stat. Sol. A*, vol. 201, No. 3, pp. 522-528, 2004.

# CHAPITRE III

# MODÉLISATION PHYSICO-THERMIQUE DES COMPOSANTS À BASE DE NITRURE DE GALLIUM

# 3.1. Introduction

Dans ce chapitre, nous présentons d'abord les motivations et les intérêts de la modélisation de composants. Ensuite nous effectuons un tour d'horizon du modèle physico-thermique basé sur un modèle de transport couplé avec un modèle thermique. Après avoir présenté les équations considérées, nous examinerons les étapes successives conduisant à leur résolution numérique. À savoir :

- Les paramètres d'entrée du modèle
- Les propriétés de transport des matériaux à base de nitrure
- Le domaine simulé et les conditions aux limites
- Les méthodes de résolution des équations du modèle

# 3.2. Modélisation

Pour connaître les potentialités d'un composant, il est nécessaire de le caractériser. Avec les progrès des méthodes de caractérisation dus aux automatisations des bancs de mesures, il est devenu assez aisé de déterminer rapidement les caractéristiques de différentes structures. Par contre, si l'on veut faire une étude en faisant varier un des paramètres lié à la technologie, le problème se complique, car le processus d'élaboration du matériau et le processus technologique sont coûteux et ils demandent un temps de réalisation relativement long. Le comportement d'un composant peut en quelque sorte se résumer à l'étude de l'influence de tous ces paramètres. Pour la mettre en œuvre, deux solutions se présentent à nous :

- Réaliser systématiquement les structures puis les caractériser ;
- Modéliser le fonctionnement à l'aide de modèles fiables et prédictifs.

C'est la deuxième solution que nous avons retenue, compte tenu du nombre élevé de paramètres à analyser, tout en sachant qu'elle peut à tout moment être validée par la première méthode.

## 3.2.1. Objectifs de la modélisation

Les principales motivations qui nous poussent à utiliser la simulation pour l'étude et l'analyse de composants semiconducteurs à base de nitrure de gallium sont :

- La connaissance plus ou moins rapide des caractéristiques d'un composant sans passer par la procédure de fabrication technologique qui reste encore chère et qui peut être relativement

longue ;

- La possibilité de faire varier les paramètres indépendamment les uns des autres pour les étudier et comprendre leurs influences sur les structures afin de les optimiser ;
- La course effrénée vers des applications nécessitant des puissances et des fréquences de plus en plus élevées, rendues possible par les progrès de la technologie, fait apparaître des effets thermiques n'intervenant pas pour les plus faibles puissances ;
- L'introduction de ces phénomènes dans un modèle, permet donc une meilleure compréhension du management thermique et du fonctionnement physique d'un composant ;
- La complémentarité avec l'analyse expérimentale basée sur la caractérisation des dispositifs.

### 3.2.2. Résultats de la modélisation

À partir d'un ensemble de données paramétriques d'un composant, nous obtenons après traitement numérique des équations des semiconducteurs, un ensemble de grandeurs physiques décrivant le fonctionnement du composant, dont les principales sont : le potentiel, la densité de porteurs, la densité de courant, la vitesse des porteurs et l'énergie des porteurs.

Grâce à elles, il est possible d'effectuer une analyse physique et d'optimiser les structures simulées pour un fonctionnement dans le domaine des microondes.

## 3.3. Modélisation physico-thermique

L'analyse des phénomènes de transport dans les dispositifs semiconducteurs est obtenue à partir d'une modélisation mathématique. Dans ce chapitre, nous effectuons un tour d'horizon des principales équations utilisées dans notre modélisation. Notre modèle se décompose en deux parties :

- Une partie physique qui décrit le transport des électrons dans la zone active du composant ;
- Une partie thermique qui détermine la température de réseau dans tout le composant, y compris le substrat.

### 3.3.1. Modèle physique

Le modèle physique est de type énergie balance. Il est constitué de l'équation de Poisson couplée

avec des équations de conservation macroscopiques, dérivées de l'équation de transport de Boltzmann par la méthode des moments.

### 3.3.1.1. Équation de Poisson

Il est rappelé ici, la forme que prend l'équation de Poisson dans le cas particulier d'un dispositif semiconducteur de type *N* [1] :

$$div\left(\varepsilon_r \varepsilon_0 \vec{\nabla}(V)\right) = q\left(n - N_D^+\right) \tag{3.1}$$

où $\varepsilon_0$ est la permittivité du vide.

$\varepsilon_r$ est la permittivité relative du semiconducteur.

$V$ est le potentiel.

$q$ est la charge électrique élémentaire.

$n$ est la densité volumique d'électrons.

$N_D^+$ est la concentration des impuretés ionisées de type donneur.

### 3.3.1.2. Équation de transport de Boltzmann (ETB)

Elle est l'aboutissement en 1872 de travaux effectués par Louiville, Vlasov et Boltzmann [2]. L'ETB s'écrit :

$$\frac{\partial f\left(\vec{x},\vec{k},t\right)}{\partial t} + \vec{v}\vec{\nabla}_{\vec{x}}\left(f\left(\vec{x},\vec{k},t\right)\right) + q\frac{\vec{E}}{\hbar}\vec{\nabla}_{\vec{k}}\left(f\left(\vec{x},\vec{k},t\right)\right) = \left(\frac{\partial f\left(\vec{x},\vec{k},t\right)}{\partial t}\right)_{coll} \tag{3.2}$$

où $\vec{E}$ est le champ électrique.

$\hbar$ est la constante de Planck réduite.

Cette équation régit l'évolution d'un système de particules représenté par sa fonction de distribution $f\left(\vec{x},\vec{k},t\right)$. Cette fonction de distribution établit la proportion de particules libres présentes à un instant $t$ dans un volume élémentaire de l'espace des phases autour du point $\left(\vec{x},\vec{k}\right)$. De plus, $\vec{\nabla}_{\vec{x}}$ (respectivement $\vec{\nabla}_{\vec{k}}$ ) représente l'opérateur de gradient par rapport aux coordonnées spatiales (respectivement par rapport aux coordonnées de l'espace des vecteurs d'onde).

L'ETB est d'abord multipliée par 1, $\hbar\vec{k}$ ou $\hbar^2 k^2$ menant à un système ayant trois équations. Ensuite, l'intégration de chaque équation dans l'espace réciproque permet d'obtenir un système d'équations

pour chaque vallée de la structure de bandes. Pour simplifier le système ainsi obtenu, on utilise le modèle de la vallée équivalente où les moyennes des différentes grandeurs physiques sont calculées en fonction de la population des électrons relative à chaque vallée. Ceci est justifié dans le cas où les différentes vallées sont indépendantes. Dans ce cas, la totalité des électrons peut être assimilée à un gaz unique équivalent dont les grandeurs caractéristiques sont la densité d'électrons $n$, la température électronique $T_e$ et son énergie $w_n$. Ainsi, dans le cadre de la simulation de dispositifs semiconducteurs, les trois équations de conservations sont les suivantes [3][4] :

- Équation de conservation des électrons

Pour l'équation de conservation des électrons, si l'on néglige les effets de génération et recombinaison, elle peut être décrite par l'équation ci-dessous :

$$\frac{\partial n}{\partial t} + div(n\vec{v}) = 0 \tag{3.3}$$

où $\vec{v}$ est la vitesse de dérive des électrons.

- Équation de conservation du moment

$$\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} = \frac{q}{m_n^*}\left[-\vec{E} - \frac{1}{n}\vec{\nabla}\left(\frac{nk_B T_e}{q}\right)\right] - \vec{v}\cdot\vec{\nabla}(v) - \frac{\vec{v}}{\tau} \tag{3.4}$$

où $m_n^*$ est la masse effective de l'électron.

$k_B$ est la constante de Boltzmann.

$T_e$ est la température électronique.

$\tau$ est le temps de relaxation du moment.

Dans le modèle énergie balance, on néglige les effets inertiels, ce qui revient à ne pas prendre en compte les termes suivants dans l'équation 3.4 :

$\frac{\partial \vec{v}}{\partial t}$ et $\vec{v}\cdot\vec{\nabla}(v)$

On obtient donc une expression analytique, mais approchée, de la vitesse donnée par :

$$\vec{v} = \mu_n\left[-\vec{E} - \frac{1}{n}\vec{\nabla}\left(\frac{nk_B T_e}{q}\right)\right] \tag{3.5}$$

où $\mu_n$ est la mobilité des électrons.

Cette relation contient deux termes : l'un décrivant la dérive des porteurs sous l'effet du champ électrique et l'autre décrivant les phénomènes de diffusion liés à une inhomogénéité de la densité de porteurs ou de la température électronique.

- Équation de conservation de l'énergie

$$\frac{\partial(nw)}{\partial t} = -div\left(\vec{S}_n\right) - n\vec{v}\cdot\vec{E} - n\frac{w_n - w_0}{\tau_w} \tag{3.6}$$

où $w_n$ est l'énergie moyenne des électrons.

$w_0$ est l'énergie moyenne des électrons à l'équilibre thermodynamique [5][6].

$\tau_w$ est le temps de relaxation de l'énergie.

$\vec{S}_n$ est le flux d'énergie qui est défini par : $\vec{S}_n = \vec{Q}_n + \left(w_n + k_B T_e\right)n\vec{v}$ (3.7)

où $\vec{Q}_n$ est le flux de chaleur donné par : $\vec{Q}_n = -\kappa_e \vec{\nabla} T_e$ (3.8)

où $\kappa_e$ est la conductivité thermique électronique donnée par [7] :

$$\kappa_e = \left(\frac{5}{2} + c\right)\frac{k_B^2}{q}\mu_n n T_e \tag{3.9}$$

où $c$ est un paramètre ajustable.

$w_n$ et $w_0$ peuvent s'écrire sous les formes suivantes :

$$w_n = \frac{1}{2}m_n^* v^2 + \frac{3}{2}k_B T_e \tag{3.10}$$

$$w_0 = \frac{3}{2}k_B T_L \tag{3.11}$$

où $T_L$ est la température de réseau.

Le dernier terme du membre de droite de l'équation 3.6 décrit la perte d'énergie moyenne du gaz d'électrons sous l'effet des interactions inélastiques avec le réseau. C'est ce terme qui va intervenir comme terme source de chaleur dans l'équation thermique. Les paramètres de transport des matériaux à base de nitrures, tels que la mobilité des électrons, la masse effective de l'électron et le temps de relaxation de l'énergie, sont obtenus par la simulation Monte Carlo volumique stationnaire pour différentes températures de réseau pour les matériaux considérés. Ces paramètres seront présentés dans le paragraphe 3.5.

### 3.3.2. Modèle thermique

Sachant que l'augmentation de la température de réseau dans la zone active est la principale responsable de la dégradation des propriétés de transport, il est alors judicieux d'estimer l'importance de cette élévation de la température. Des méthodes de mesures de la température de réseau telles que le Micro-Raman existent, mais elles s'appliquent difficilement aux structures de faibles dimensions. Parce que pour le Micro-Raman, la surface bombardée par le faisceau laser fait environ 1 $\mu m^2$. Pour un composant dont la zone chaude est très petite par rapport aux dimensions du composant, un modèle thermique a été développé afin de bien comprendre la distribution de la température de réseau dans le composant entier. Le principe de cette modélisation repose sur la résolution de l'équation de Fourier [8] rappelée ci-dessous :

$$\rho C_P \frac{\partial T_L}{\partial t} + div\left(\vec{Q}_L\right) = H \tag{3.12}$$

où $\rho$ est la masse volumique du matériau.

$C_P$ est la capacité calorifique massique.

$\vec{Q}_L$ est le flux de chaleur de réseau, qui est donné par : $\vec{Q}_L = -\kappa_L \vec{\nabla}(T_L)$ (3.13)

où $\kappa_L$ est la conductivité thermique du matériau.

Le terme de génération de chaleur dans la zone active est défini par :

$$H = n \frac{w_n - w_0}{\tau_w} \tag{3.14}$$

Ce terme fait intervenir la température électronique $T_e$ déterminée par l'équation de conservation de l'énergie. Il est lié aux interactions inélastiques entre le gaz d'électrons et le réseau. Ce terme n'existe que dans la zone active du composant, là où circule le courant.

### 3.3.3. Couplage du modèle physique et du modèle thermique

#### 3.3.3.1. Contraintes pendant la modélisation

Le modèle que nous avons développé résulte d'un couplage entre un modèle physique et un modèle thermique. Cependant, les constantes de temps des deux modèles sont très différentes.

Pour le modèle physique, la constante de temps est limitée par l'équation de Reiser [9] :

$$\Delta t_{phy} < 2 \frac{\varepsilon_r \varepsilon_0}{q \mu_n n} \tag{3.15}$$

Tandis que pour le modèle thermique, la constante de temps est limitée par l'équation suivante :

$$\Delta t_{\text{ther}} < \frac{\rho C_{\text{P}}}{k_{\text{B}}} \frac{\delta l^2}{4} \tag{3.16}$$

où $\delta l$ est la dimension d'une maille.

La valeur de la constante de temps pour les équations de conservation dans la zone active est environ de 0,1 fs alors que pour l'équation thermique elle est de l'ordre de 1 ns. Cela introduit des tailles de maillage spatial qui sont très différentes pour les deux modèles. Plus la constante de temps est petite et plus le maillage spatial doit être fin. Donc, pour satisfaire à la condition de Debye dans la zone active, la taille des mailles doit être très petite (surtout à l'interface AlGaN/GaN), mais en dehors de cette zone, la taille des mailles peut devenir beaucoup plus grande parce qu'elle n'est utilisée que pour le modèle thermique.

### 3.3.3.2. Couplage physico-thermique

Pour des raisons de commodité d'implémentation, ce modèle a été développé à l'aide du logiciel COMSOL®. Ce logiciel est bien adapté pour la résolution d'équations différentielles couplées. La discrétisation des équations est faite par une méthode des éléments finis. Dans cette implémentation, les deux parties (physique et thermique) sont résolues alternativement, mais c'est le régime transitoire du modèle thermique qui est décrit, car il est le plus lent. À chaque pas de temps du modèle thermique, on résoud le modèle physique.

À l'instant initial, la température de réseau est uniforme et égale à 300 K. On résoud le modèle physique de façon à déterminer le potentiel, la densité d'électrons et la température électronique dans la zone active. En même temps, le terme source $H$ est calculé. Puis, la température de réseau dans tout le composant, est déterminée par résolution de l'équation thermique en utilisant le terme de source obtenu précédemment. Ensuite, le modèle physique est résolu à nouveau en utilisant les paramètres ($\mu_{\text{n}}$ et $\tau_{\text{w}}$) mis à jour en fonction de la température de réseau. Ainsi, les deux modèles sont résolus alternativement jusqu'à la convergence de toutes les grandeurs électriques et thermiques.

La figure 3.1 montre le couplage entre le modèle physique et le modèle thermique.

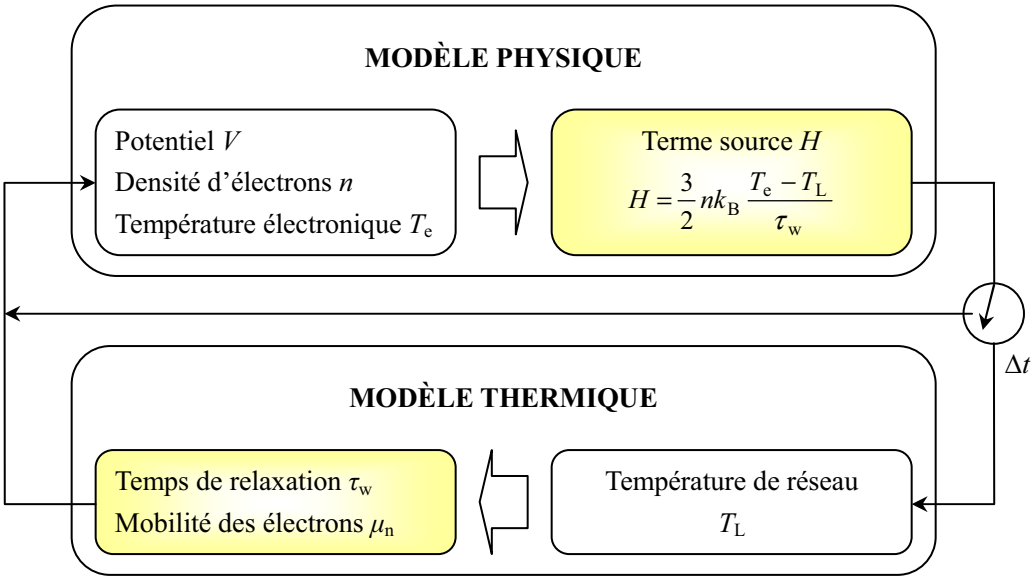



Figure 3.1. Couplage physico-thermique.

## 3.4. Paramètres d'entrée du modèle

Avant d'effectuer la simulation d'un composant, il est indispensable d'introduire dans le modèle les paramètres physiques et thermiques des matériaux utilisés, ainsi que la topologie de la structure à étudier, d'une manière adéquate. Les principales entrées du modèle sont :

- La vitesse des porteurs en fonction de la température électronique et de la température de réseau
- Le temps de relaxation de l'énergie en fonction de la température électronique et de la température de réseau
- La conductivité thermique des matériaux en fonction de la température de réseau
- La masse effective de l'électron
- Les constantes diélectriques
- La densité de donneurs ionisés

Sauf mention explicite du contraire, on suppose que la totalité des donneurs est ionisée à raison d'une charge positive par atome, de sorte que : $N_D^+ = N_D$, où $N_D$ est la densité d'atomes donneurs introduits par dopage dans le semiconducteur [10].

- Les conductivités thermiques et capacités calorifiques massiques

Les conductivités thermiques des matériaux dépendent de la température de réseau, et sont

présentées dans le tableau 3.1 et la figure 3.2 [11][12][13][14][15].

Tableau 3.1. Conductivités thermiques pour chaque matériau pour une température de réseau de 300 K.

| Matériau | $\kappa_L$ (W/m·K) |
|---|---|
| Si | 150 |
| GaN | 150 |
| GaN avec peu de dislocations | 230 |
| SiC monocristallin | 370 |
| SiC polycristallin | 300 |
| $SiO_2$ | 1,4 |
| Diamant monocristallin | 2400 |
| Diamant polycristallin | 2200 |

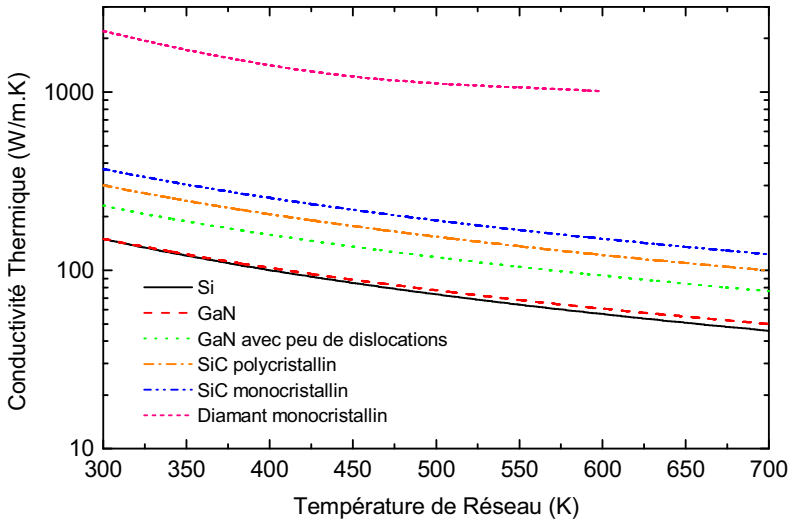



Figure 3.2. Conductivités thermiques en fonction de la température de réseau pour chaque matériau.

## 3.5. Propriétés de transport des matériaux à base de nitrures

La base de toutes modélisations en microélectronique est la connaissance des propriétés physiques des matériaux semiconducteurs. Dans notre étude, la modélisation repose sur l'analyse du comportement des électrons soumis à différentes excitations dans les matériaux tels que le nitrure de gallium (GaN), le nitrure d'aluminium (AlN) et leur composé ternaire $Al_xGa_{1-x}N$. Les propriétés de transport dans ces matériaux sont obtenues par une modélisation Monte Carlo.

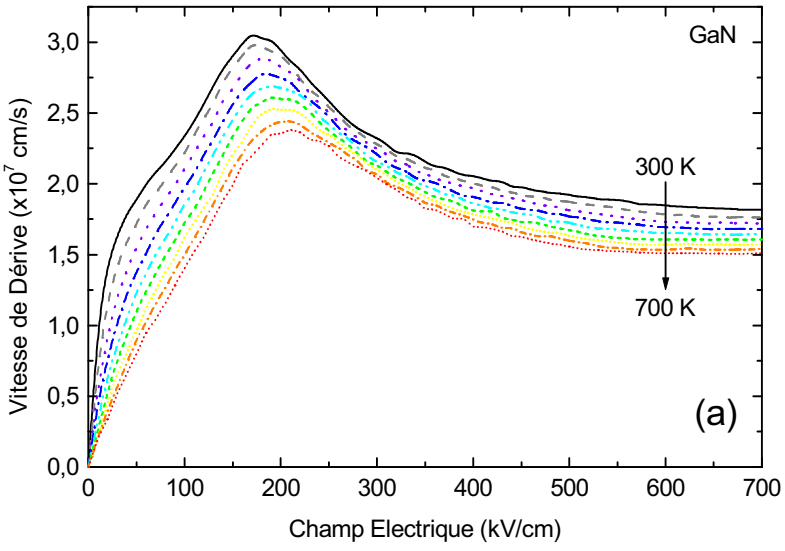
### 3.3.1. Propriétés de transport obtenues

En raison de l'auto-échauffement des composants à base de nitrures utilisés pour les applications de puissance, il est nécessaire de connaître la dépendance des paramètres de transport en fonction de la température de réseau (supérieure ou égale à la température ambiante). Les caractéristiques de transport des matériaux GaN et AlN sont déterminées pour des températures de réseau variant entre 300 K et 700 K. Les évolutions des propriétés de transport dans ces matériaux sont obtenues par une simulation Monte Carlo stationnaire en volume. On en déduit les évolutions des paramètres, telles que la vitesse de dérive $v_{MC}$ et l'énergie $w_{MC}$ en fonction du champ électrique qui sont décrites sur les figures 3.3 et 3.4, ainsi que l'évolution de la masse effective de l'électron $m_n^*$ en fonction de l'énergie qui est décrite sur la figure 3.5. De plus, le temps de relaxation de l'énergie $\tau_w$ en fonction de l'énergie est aussi présenté sur la figure 3.6. Il est obtenu par le calcul à partir de l'expression ci-dessous :

$$\tau_w(T_e,T_L)=\frac{w_{MC}-w_0}{qv_{MC}(T_e,T_L)E_{MC}(T_e,T_L)} \tag{3.17}$$

où $E_{MC}$ est le champ électrique en régime stationnaire.

Ces grandeurs physiques sont déterminées pour une température de réseau variant de 300 K à 700 K avec un pas de 50 K pour un dopage de $10^{15}$ $cm^{-3}$.



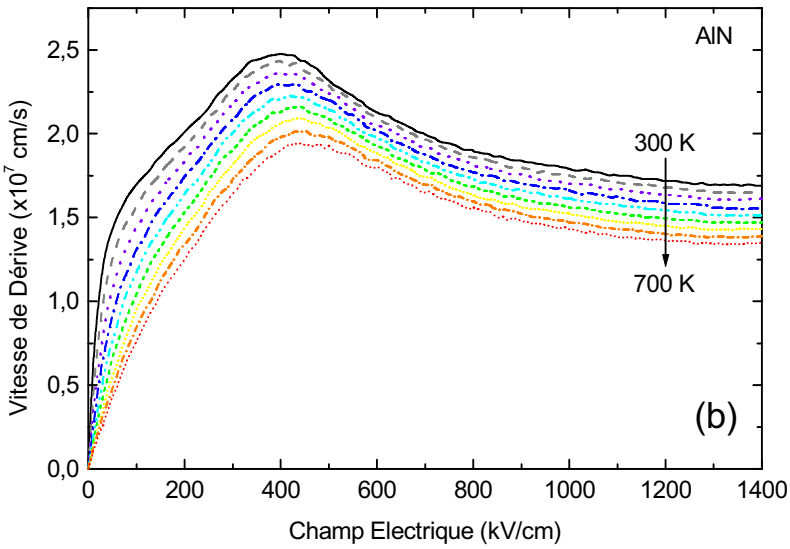



Figure 3.3. Caractéristiques vitesse en fonction du champ électrique pour différentes températures de réseau (de 300 K à 700 K avec un pas de 50 K) : (a) GaN et (b) AlN.

Sur la figure 3.3, nous remarquons une nette diminution de la vitesse des électrons lorsque la température de réseau augmente. Cela prouve que l'augmentation de la température de réseau dégrade les propriétés de transport. Sur la figure 3.3, nous pouvons aussi noter que le champ critique pour le GaN est égal à 180 kV/cm, alors que celui pour l'AlN est égal à 400 kV/cm pour une température de réseau de 300 K. Le champ critique pour l'AlN est deux fois plus grand que celui pour le GaN. De plus, il apparaît des décalages du champ critique lorsque les températures de réseau des deux matériaux augmentent. Pour la vitesse pic, elle passe de $3{,}0\times10^7$ cm/s à 300 K à $2{,}3\times10^7$ cm/s à 700 K pour le GaN et de $2{,}4\times10^7$ cm/s à 300 K à $1{,}9\times10^7$ cm/s à 700 K pour l'AlN. À fort champ électrique, la vitesse de saturation passe de $1{,}8\times10^7$ cm/s à 300 K à $1{,}5\times10^7$ cm/s à 700 K pour le GaN et de $1{,}7\times10^7$ cm/s à 300 K à $1{,}3\times10^7$ cm/s à 700 K pour l'AlN. Nous pouvons donc constater que les vitesses pic de l'AlN sont environ 23 % en deçà de celles du GaN. Quand aux vitesses de saturation de l'AlN, elles sont inférieures à celles du GaN d'environ 10 %.

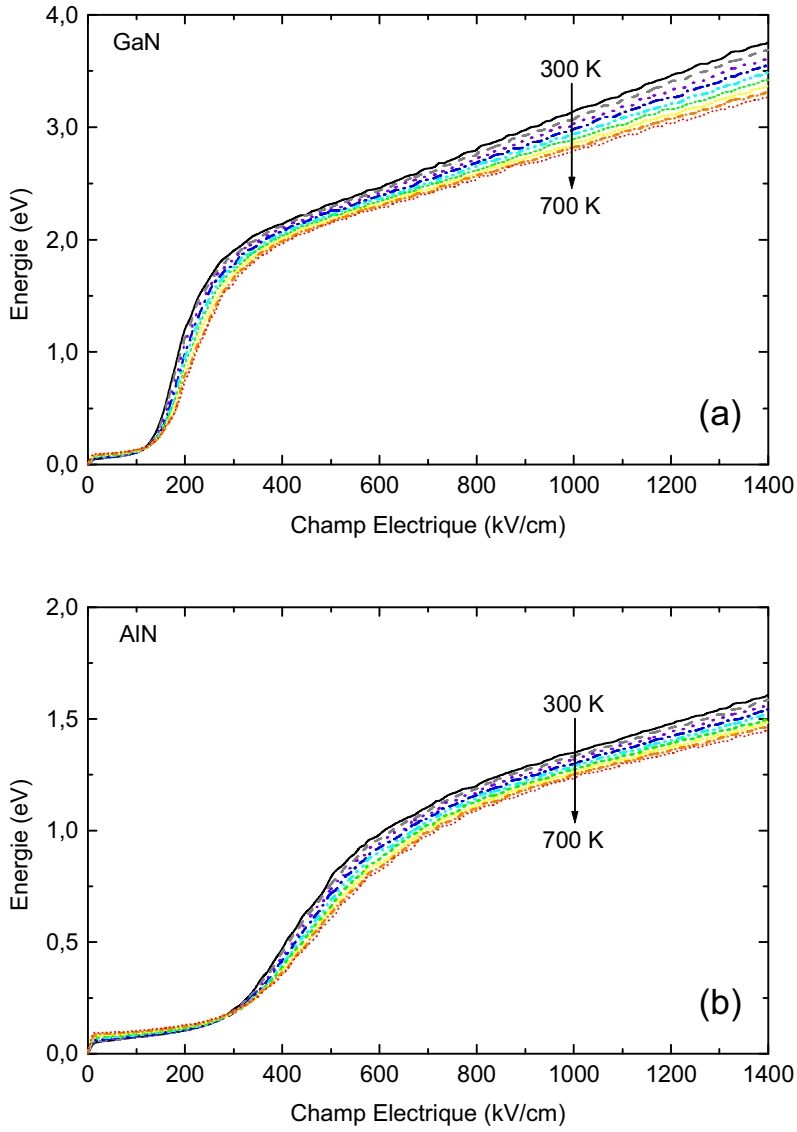



Figure 3.4. Caractéristiques énergie en fonction du champ électrique pour différentes températures de réseau (de 300 K à 700 K avec un pas de 50 K) : (a) GaN et (b) AlN.

La figure 3.4 présente l'évolution de l'énergie en fonction du champ électrique pour les deux matériaux (GaN et AlN). Pour un champ électrique donné, la valeur de l'énergie obtenue pour l'AlN est beaucoup plus faible que celle obtenue pour le GaN. Nous pouvons aussi noter que les énergies présentent des changements importants de pente autour des champs critiques pour les deux matériaux. À fort champ (surtout lorsque la vitesse sature), l'énergie présente une évolution sensiblement linéaire.

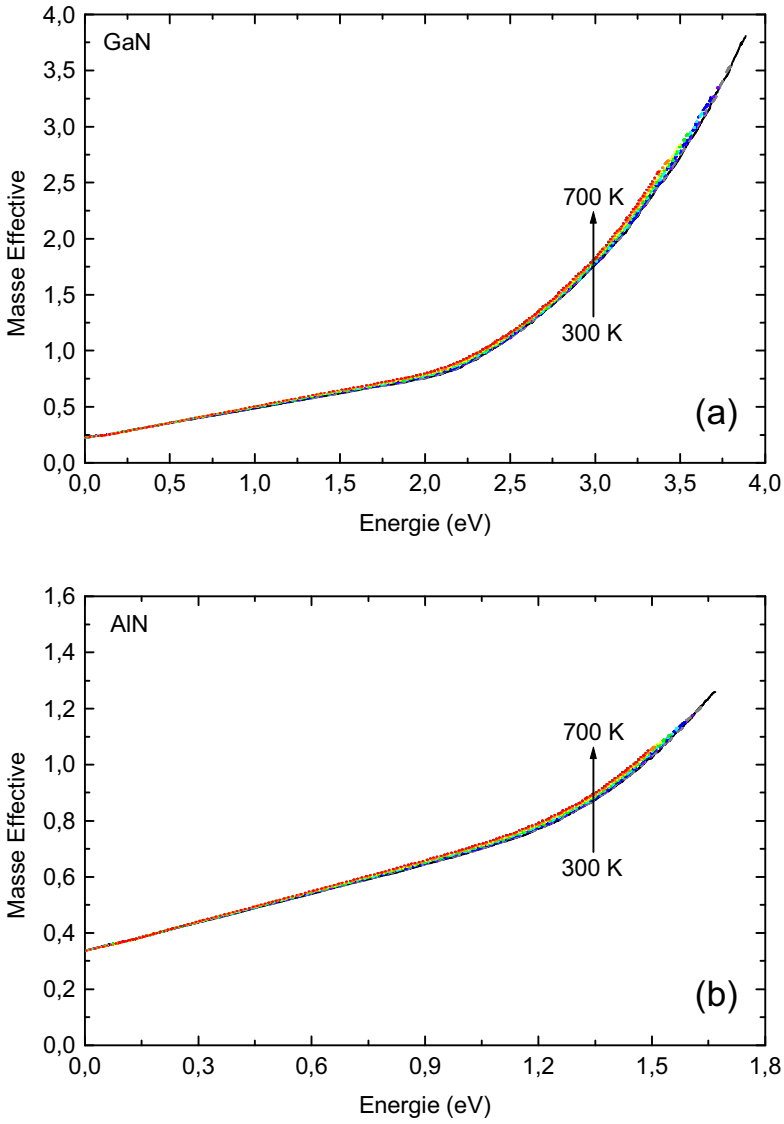



Figure 3.5. Caractéristiques masse effective en fonction de l'énergie pour différentes températures de réseau (de 300 K à 700 K avec un pas de 50 K) : (a) GaN et (b) AlN.

Les évolutions de la masse effective et du temps de relaxation de l'énergie en fonction de l'énergie pour les deux matériaux (GaN et AlN), sont reportées sur les figures 3.5 et 3.6 respectivement. Comme la vitesse de dérive et l'énergie montrées précédent, la masse effective et le temps de relaxation de l'énergie pour l'AlN sont plus faibles que celles pour le GaN. Nous pouvons aussi noter que ces deux paramètres augmentent lorsque la température de réseau augment, mais les variations en fonction de la température de réseau sont très petites par rapport à celles de la vitesse de dérive.

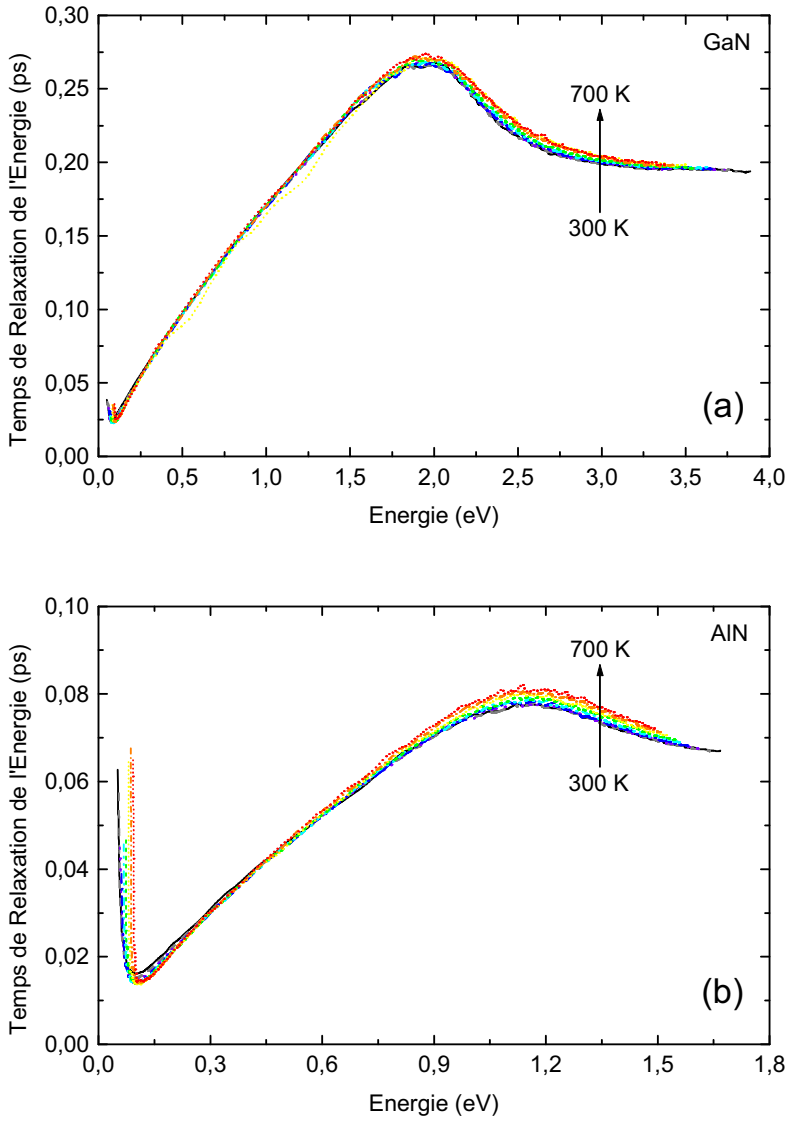



Figure 3.6. Caractéristiques temps de relaxation de l'énergie en fonction de l'énergie pour différentes températures de réseau (de 300 K à 700 K avec un pas de 50 K) : (a) GaN et (b) AlN.

### 3.5.2. Détermination des relations analytiques pour les propriétés de transport

Les caractéristiques des matériaux données par la simulation Monte Carlo ne sont déterminées que pour quelques points discontinus aussi, il est nécessaire d'ajuster des fonctions mathématiques continues pour être utilisées sous COMSOL®.

Dans notre modèle, il est nécessaire d'introduire deux paramètres : la vitesse des électrons et le temps de relaxation de l'énergie en fonction de la température électronique et de la température de réseau. L'optimisation des paramètres est faite dans une gamme de température de réseau variant entre 300 K et 700 K pour un dopage de $10^{15}$ $cm^{-3}$.

3.5.2.1. Expression analytique de la mobilité des électrons

À partir des données Monte Carlo, il est possible de déterminer deux fonctions analytiques, qui décrivent les variations de la vitesse de dérive des électrons en fonction du champ électrique et les variations du champ électrique en fonction de la température électronique. La mobilité des électrons introduite dans notre modèle dépend de la température électronique et de la température de réseau, qui peut être décrite comme ceci :

$$\mu_{\mathrm{n}}(T_{\mathrm{e}},T_{\mathrm{L}})=\frac{v(T_{\mathrm{e}},T_{\mathrm{L}})}{E(T_{\mathrm{e}},T_{\mathrm{L}})} \tag{3.18}$$

où $v(T_e, T_L)$ est la vitesse de dérive des électrons.

$E(T_e, T_L)$ est le champ électrique.

Cette expression de la mobilité des électrons est valable quelque soit la valeur du champ électrique incluant le fort champ électrique. Donc, à partir des données Monte Carlo $v_{MC}(E_{MC}, T_L)$ et $E_{MC}(T_e, T_L)$, la mobilité des électrons peut être récrite comme ceci :

$$\mu_{\mathrm{n}}(T_{\mathrm{e}},T_{\mathrm{L}})=\frac{v(T_{\mathrm{e}},T_{\mathrm{L}})}{E(T_{\mathrm{e}},T_{\mathrm{L}})}=\frac{v_{\mathrm{MC}}\left(E_{\mathrm{MC}}(T_{\mathrm{e}},T_{\mathrm{L}}),T_{\mathrm{L}}\right)}{E_{\mathrm{MC}}(T_{\mathrm{e}},T_{\mathrm{L}})} \tag{3.19}$$

- Expression analytique de la vitesse de dérive des électrons

Dans la gamme de température de réseau 300 K–700 K, la vitesse des électrons dans le nitrure de gallium en fonction du champ électrique et de la température de réseau peut être décrite par l'équation suivante :

$$v_{\mathrm{MC}}(E_{\mathrm{MC}},T_{\mathrm{L}})=\frac{\dfrac{\mu_{n0}}{1+E_{\mathrm{MC}}/E_3(T_{\mathrm{L}})}E_{\mathrm{MC}}+\dfrac{v_0+v_2(T_{\mathrm{L}})[E_{\mathrm{MC}}/E_2(T_{\mathrm{L}})]^4}{1+[E_{\mathrm{MC}}/E_2(T_{\mathrm{L}})]^4}[E_{\mathrm{MC}}/E_1(T_{\mathrm{L}})]^{\alpha}}{1+[E_{\mathrm{MC}}/E_1(T_{\mathrm{L}})]^{\alpha}} \tag{3.20}$$

$$\text{avec}\quad v_0=\left[2v_1(T_{\mathrm{L}})-\frac{\mu_{n0}(T_{\mathrm{L}})E_1(T_{\mathrm{L}})}{1+E_1(T_{\mathrm{L}})/E_3(T_{\mathrm{L}})}\right]\left[1+(E_1(T_{\mathrm{L}})/E_2(T_{\mathrm{L}}))^4\right]-v_2(T_{\mathrm{L}})(E_1(T_{\mathrm{L}})/E_2(T_{\mathrm{L}}))^4 \tag{3.21}$$

où $\mu_{n0}$ est la mobilité des électrons à faible champ.

$v_1$ est la vitesse pic.

$E_1$ est le champ critique.

$v_2$ est la vitesse de saturation.

$\alpha$, $E_2$ et $E_3$ sont des paramètres en fonction de la température de réseau obtenus à l'aide de

l'algorithme génétique.

$E_1$, $v_1$, $E_2$, $v_2$, $E_3$, $\mu_{n0}$ et $\alpha$ sont déterminés pour chaque valeur de température de réseau $T_L$. On cherche ensuite une expression analytique de chaque paramètre en fonction de la température de réseau. Dans la gamme de température 300 K–700 K, les variations des paramètres en fonction de la température de réseau sont données par les expressions suivantes :

$$E_1 = 130000 + 100 \times T_L \tag{3.22}$$

$$v_1 = 3{,}38\times10^7 - 12699 \times T_L - 2{,}47 \times T_L^2 \tag{3.23}$$

$$E_2 = -32716 + 15228 \times \exp(0{,}0038 \times T_L) \tag{3.24}$$

$$v_2 = 2{,}14\times10^7 - 12109 \times T_L + 4{,}24 \times T_L^2 \tag{3.25}$$

$$E_3 = 210000 \tag{3.26}$$

$$\mu_{n0} = 665 - 0{,}67 \times T_L + 53164 \times \exp(-0{,}013 \times T_L) \tag{3.27}$$

$$\alpha = 5 \tag{3.28}$$

L'évolution de la vitesse en fonction du champ électrique pour différentes températures de réseau (de 300 K à 700 K avec un pas de 50 K) est représentée sur la figure 3.7. Les pointillés sont les données obtenues par la simulation Monte Carlo et les traits pleins sont leurs approximations.

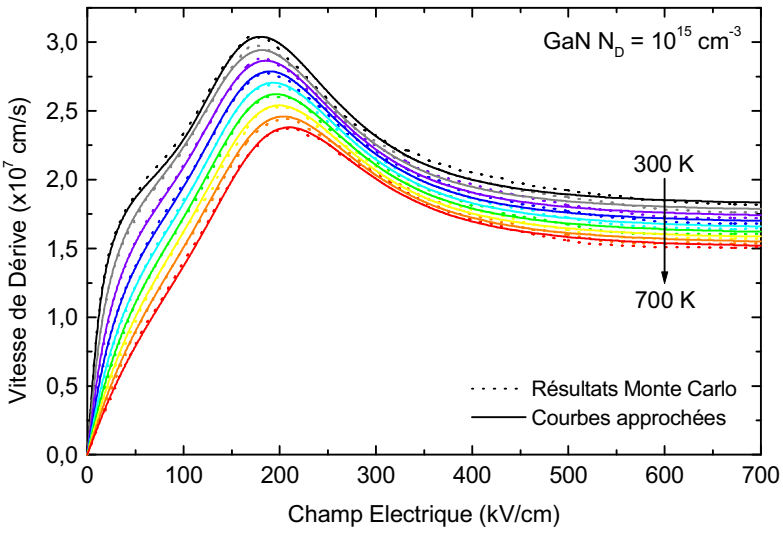



Figure 3.7. Évolution de la vitesse en fonction du champ électrique pour différentes températures de réseau (de 300 K à 700 K avec un pas de 50 K) : résultats Monte Carlo (pointillés) et approximations des données Monte Carlo (traits pleins).

- Expression analytique du champ électrique

À partir des simulations Monte Carlo, nous avons obtenu l'évolution de l'énergie en fonction du champ électrique. Pour les nitrures, nous constatons sur les données Monte Carlo que l'énergie cinétique macroscopique est beaucoup plus faible que l'énergie cinétique microscopique, soit :

$$\frac{1}{2}m_{\mathrm{n}}^{*}v_{\mathrm{MC}}^{2} << \frac{3}{2}k_{\mathrm{B}}T_{\mathrm{e}}\text{, donc } w_{\mathrm{n}} \approx \frac{3}{2}k_{\mathrm{B}}T_{\mathrm{e}}$$

L'évolution de l'énergie en fonction du champ électrique est approchée par l'équation analytique suivante :

$$w_{\mathrm{n}}\left(E_{\mathrm{MC}},T_{\mathrm{L}}\right)=\begin{cases} en0 + B\left[1-\dfrac{1}{1+\left(E_{\mathrm{MC}}/E_4\left(T_{\mathrm{L}}\right)\right)}\right] & \text{si } E_{\mathrm{MC}} \le E_5\left(T_{\mathrm{L}}\right) \\ \left[\dfrac{\gamma}{E_5\left(T_{\mathrm{L}}\right)}\left(C-en0\right)\left(1-\dfrac{C-en0}{B}\right)\right]\left(E_{\mathrm{MC}}-E_5\left(T_{\mathrm{L}}\right)\right)+C & \text{si } E_{\mathrm{MC}} > E_5\left(T_{\mathrm{L}}\right) \end{cases} \tag{3.29}$$

où $en0$ est l'énergie moyenne des électrons à l'équilibre thermodynamique, qui est définie par :

$$en0 = \frac{3}{2}k_{\mathrm{B}}T_{\mathrm{L}}$$

$B$, $C$, $E_4$ et $E_5$ sont des paramètres en fonction de la température de réseau obtenus à l'aide de l'algorithme génétique.

$en0$, $B$, $C$, $E_4$ et $E_5$ sont déterminés pour chaque valeur de température de réseau $T_{\mathrm{L}}$. On cherche ensuite une expression analytique de chaque paramètre en fonction de la température de réseau. Dans la gamme de température 300 K–700 K, les variations des paramètres en fonction de la température de réseau sont données par les expressions suivantes :

$$en0 = -1{,}29\times10^{-7} + 1{,}29\times10^{-4}\times T_{\mathrm{L}} \tag{3.30}$$

$$B = 2{,}18 - 4{,}9\times10^{-4}\times T_{\mathrm{L}} + 3{,}6\times10^{-7}\times T_{\mathrm{L}}^{2} \tag{3.31}$$

$$C = 2{,}08 - 3{,}8\times10^{-4}\times T_{\mathrm{L}} + 2{,}7\times10^{-7}\times T_{\mathrm{L}}^{2} \tag{3.32}$$

$$E_4 = 173334 + 98\times T_{\mathrm{L}} \tag{3.33}$$

$$E_5 = 300507 + 94\times T_{\mathrm{L}} + 0{,}055\times T_{\mathrm{L}}^{2} \tag{3.34}$$

L'évolution de l'énergie en fonction du champ électrique pour différentes températures de réseau (de 300 K à 700 K avec un pas de 50 K) est représentée sur la figure 3.8. Les pointillés sont les données obtenues par la simulation Monte Carlo et les traits pleins sont leurs approximations.

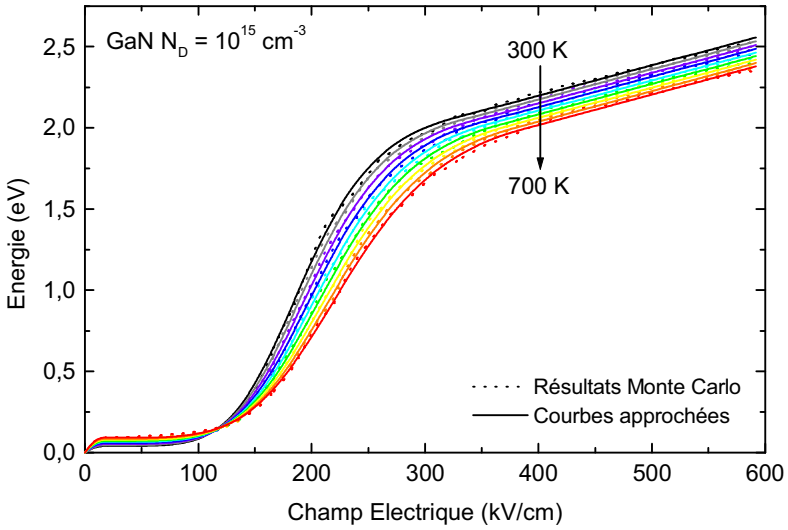



Figure 3.8. Évolution de l'énergie en fonction du champ électrique pour différentes températures de réseau (de 300 K à 700 K avec un pas de 50 K) : résultats Monte Carlo (pointillés) et approximations des données Monte Carlo (traits pleins).

Ensuite, à partir de ces fonctions analytiques, nous déterminons la fonction inverse, qui nous donne la fonction analytique du champ électrique en fonction de l'énergie (donc en fonction de la température électronique) (Fig. 3.9). Les pointillés sont les données obtenues par la simulation Monte Carlo et les traits pleins sont leurs approximations.

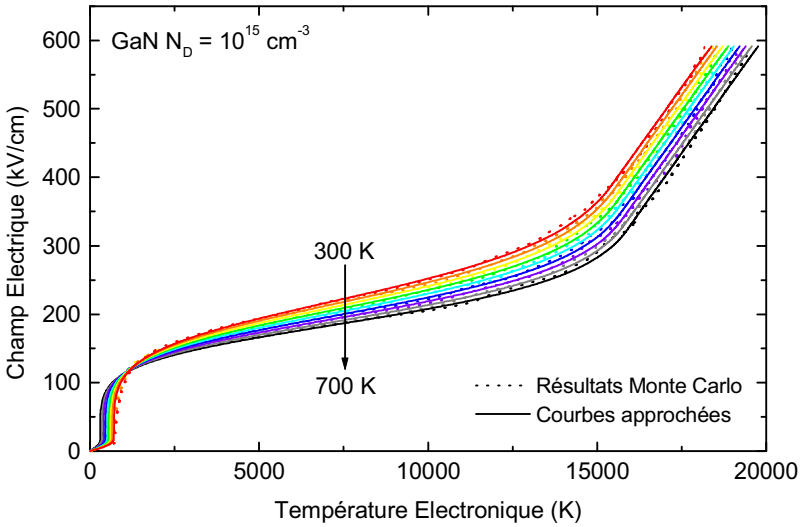



Figure 3.9. Évolution du champ électrique en fonction de la température électronique pour différentes températures de réseau (de 300 K à 700 K avec un pas de 50 K) : résultats Monte Carlo (pointillés) et approximations des données Monte Carlo (traits pleins).

➢ Expression analytique de la mobilité des électrons

Pour une énergie donnée en un point caractérisé par une température électronique $T_e$ et une température de réseau $T_L$, nous déterminons le champ équivalent $E_{MC}$ grâce aux résultats précédents, puis à l'aide de la relation 3.18, nous obtenons $\mu_n(T_e, T_L)$.

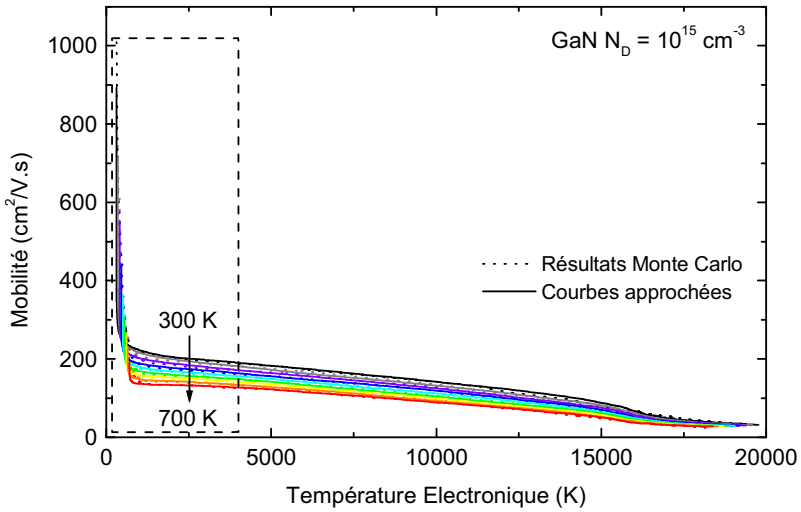



Figure 3.10. Évolution de la mobilité en fonction de la température électronique pour différentes températures de réseau (de 300 K à 700 K avec un pas de 50 K) : résultats Monte Carlo (pointillés) et approximations des données Monte Carlo (traits pleins).

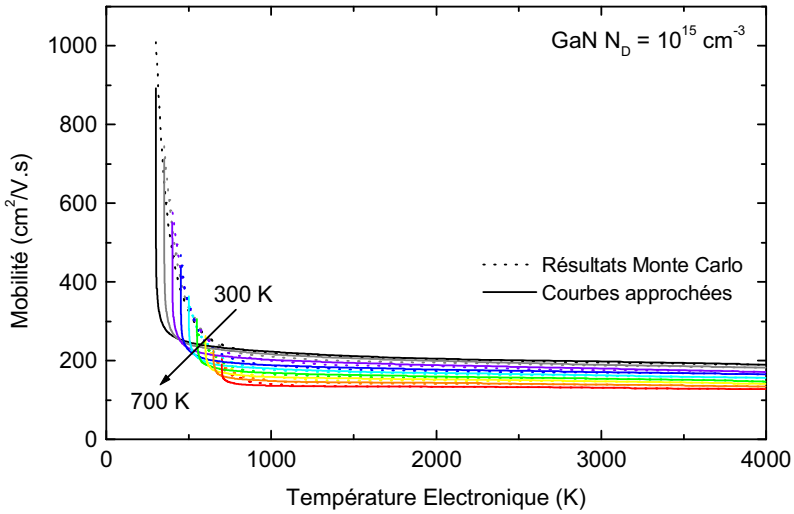



Figure 3.11. Zoom de la figure 3.10 (partie indiquée par le pointillé).

La figure 3.10 nous montre un très bon accord pour les résultats Monte Carlo et leurs approximations analytiques aux hautes températures électroniques. Mais nous pouvons aussi voir sur la figure 3.11 qu'il existe un écart aux basses températures électroniques.

Au départ l'expression analytique de l'énergie en fonction du champ électrique $w_n(E_{MC}, T_L)$ Éq. 3.29 a été développée pour le matériau GaAs [16]. Son avantage est qu'elle est inversible analytiquement et elle permet d'obtenir l'expression analytique du champ électrique en fonction de la température électronique $E_{MC}(T_e, T_L)$. Une autre formule analytique de l'énergie en fonction du champ électrique a été développée pour le matériau GaN [16]. Elle conduit à une bonne représentation des courbes Monte Carlo, mais malheureusement, cette formule n'est pas inversible analytiquement. Elle est donc inutilisable pour notre modèle. Pour résoudre ce problème aux basses températures électroniques, nous remplaçons l'expression de la mobilité des électrons Éq. 3.18 par la fonction décrite par l'équation 3.35 lorsque la température électronique est inférieure à 4000 K afin de corriger le défaut constaté sur la figure 3.11 entre les valeurs de mobilité des électrons obtenues par la simulation Monte Carlo et les valeurs approximées.

$$\mu_n(T_e, T_L) = \frac{\mu_t}{\left[1 + r_n^2 (T_e - T_L)^2\right]^{0,5}} + \mu_{sat} \tag{3.35}$$

où $r_n$ est définit par : $r_n = \dfrac{1{,}5 k_B \mu_t}{q\left(\dfrac{2\times10^7}{v_s + 0{,}0006 \cdot T_L}\right)^2 \cdot 1\times10^{-13}}$ (3.36)

$\mu_t$, $v_s$ et $\mu_{sat}$ en fonction de la température de réseau sont des paramètres obtenus à l'aide de l'algorithme génétique. Dans la gamme de température 300 K à 700 K, les variations des paramètres en fonction de la température de réseau sont données par les expressions suivantes :

$$\mu_t = 59 + 60644 \times \exp(-7{,}7\times10^3 \times T_L) \tag{3.37}$$

$$v_s = -2{,}4 + 0{,}023 \times T_L - 4{,}47\times10^{-5} \times T_L^2 + 3{,}76\times10^{-8} \times T_L^3 \tag{3.38}$$

$$\mu_{sat} = 223 - 0{,}138 \times T_L \tag{3.39}$$

La figure 3.12 montre l'évolution de la mobilité en fonction de la température électronique pour différentes températures de réseau (de 300 K à 700 K avec un pas de 50 K). Les pointillés sont les données obtenues par la simulation Monte Carlo et les traits pleins sont leurs approximations.

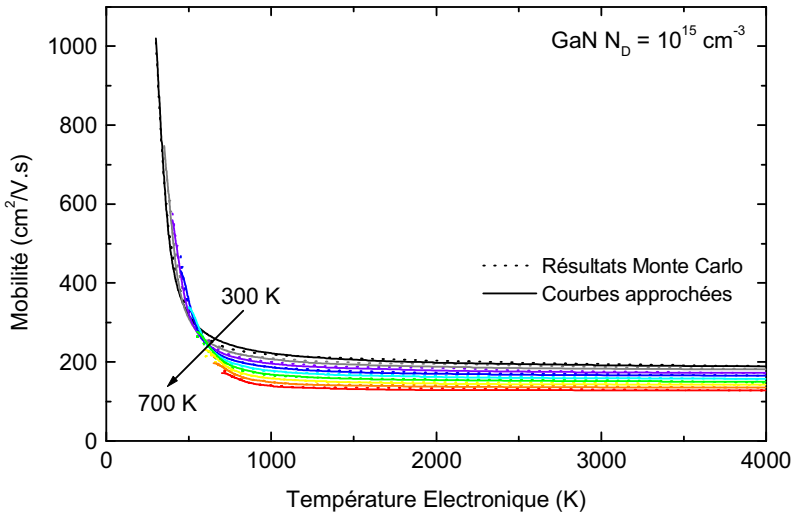



Figure 3.12. Évolution de la mobilité en fonction de la température électronique pour différentes températures de réseau (de 300 K à 700 K avec un pas de 50 K) : résultats Monte Carlo (pointillés) et approximations corrigées des données Monte Carlo après la modification à bas champ (traits pleins).

### 3.5.2.2. Expression analytique du temps de relaxation de l'énergie

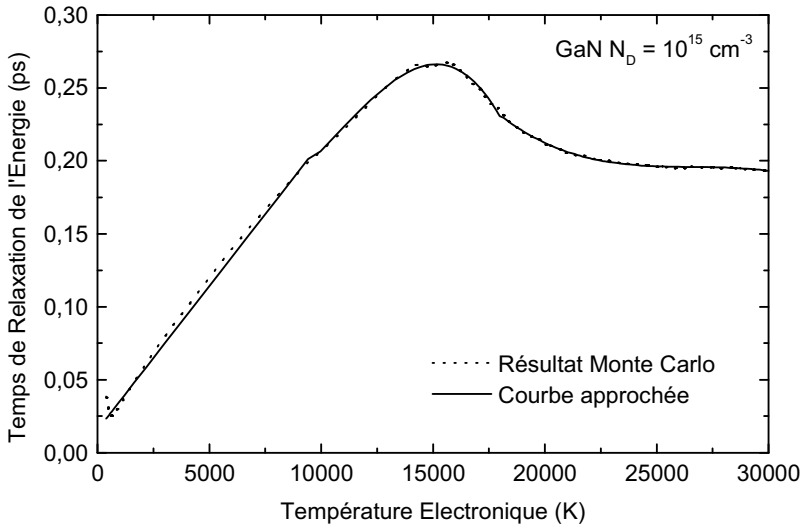



Figure 3.13. Évolution du temps de relaxation en fonction de la température électronique pour une température de réseau de 300 K : résultat Monte Carlo (pointillé) et approximation des données Monte Carlo (trait plein).

La figure 3.13 montre que le temps de relaxation de l'énergie ne dépend pratiquement pas de la température de réseau. Donc, dans notre modèle nous n'approchons les données Monte Carlo que pour la température de réseau de 300 K. L'approximation s'appuie sur l'équation suivante :

$$\tau_w(T_e) = \begin{cases} a_0 + a_1 \times T_e & \text{si } 300\,\text{K} \le T_e \le 9500\,\text{K} \\ b_0 + b_1 \times T_e + b_2 \times T_e^2 + b_3 \times T_e^3 & \text{si } 9500\,\text{K} \le T_e \le 18000\,\text{K} \\ c_0 + c_1 \times T_e + c_2 \times T_e^2 + c_3 \times T_e^3 & \text{si } T_e \ge 18000\,\text{K} \end{cases} \quad (3.40)$$

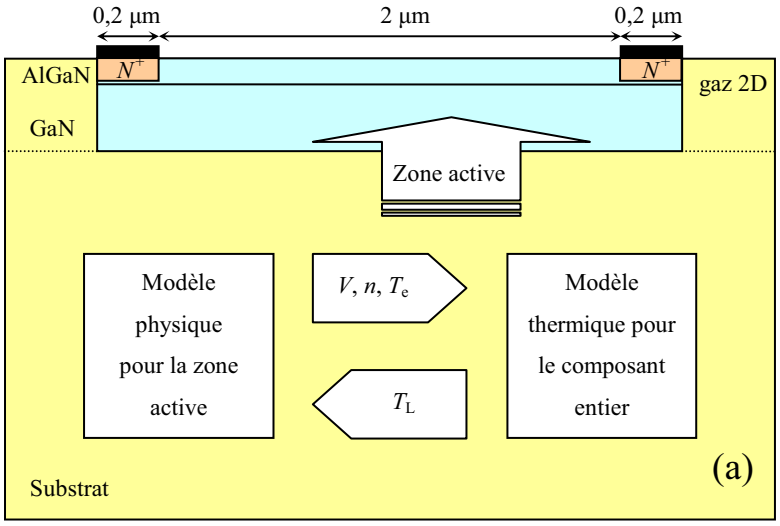
où $a_0$, $a_1$, $b_0$, $b_1$, $b_2$, $b_3$, $c_0$, $c_1$, $c_2$ et $c_3$ sont des constantes dont les valeurs sont récapitulées dans le tableau suivant :

Tableau 3.2. Tableau récapitulatif des valeurs des constantes.

| $300\,\text{K} \le T_e \le 9500\,\text{K}$ | $9500\,\text{K} \le T_e \le 18000\,\text{K}$ | $T_e \ge 18000\,\text{K}$ |
|---|---|---|
| $a_0 = 1{,}6\times10^{-14}$ | $b_0 = 3{,}8\times10^{-13}$ | $c_0 = 1{,}2\times10^{-12}$ |
| $a_1 = 2{,}0\times10^{-17}$ | $b_1 = -7{,}7\times10^{-17}$ | $c_1 = -1{,}1\times10^{-16}$ |
| | $b_2 = 8{,}7\times10^{-21}$ | $c_2 = 4{,}2\times10^{-21}$ |
| | $b_3 = -2{,}7\times10^{-25}$ | $c_3 = -5{,}3\times10^{-26}$ |

## 3.6. Domaine simulé et conditions aux limites

Pour des raisons de temps de calcul, il est difficilement envisageable de simuler un composant entier. C'est pourquoi, seulement la partie active est prise en compte pour le modèle physique (Fig. 3.14). La zone de simulation étant définie, il est alors nécessaire de préciser les conditions aux limites pour les grandeurs intervenant dans les équations hydrodynamiques des semiconducteurs et l'équation de Poisson.



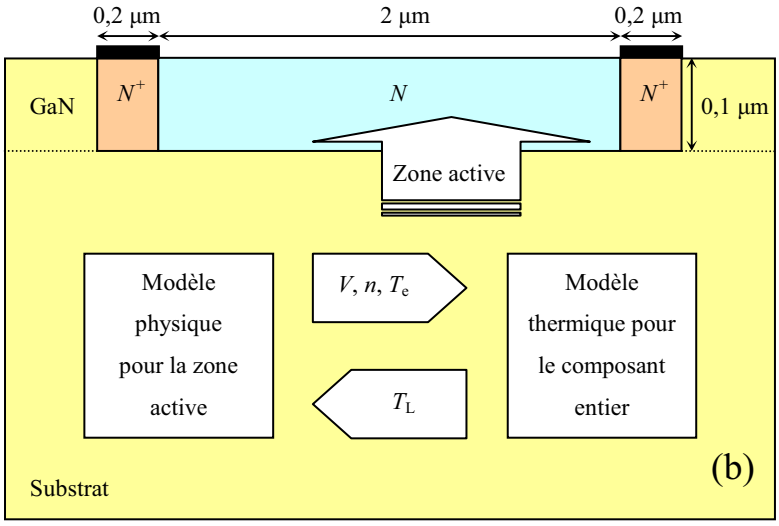



Figure 3.14. Méthodologie du modèle physico-thermique : (a) TLM AlGaN/GaN et (b) diode Gunn.

## 3.6.1. Conditions aux limites pour le modèle physique

### 3.6.1.1. Conditions aux limites sur les contacts ohmiques

Un contact ohmique est une jonction métal/semiconducteur, dont le semiconducteur est fortement dopé. La modélisation physique précise d'un contact ohmique est ici exclue. On est donc amené à préciser des conditions aux limites à la frontière du composant. Pour cela, on part de l'hypothèse que la zone de charge d'espace dans le semiconducteur est négligeable. Avec l'hypothèse supplémentaire qui considère que tous les atomes donneurs (par unité de volume) sont ionisés, il peut être pris les conditions aux limites suivantes :

- Potentiel

Les électrodes sont considérées comme des contacts ohmiques parfaits, ce qui correspond à des conditions de Dirichlet pour le potentiel :

$V = 0$ ou $V_{DS}$

où $V_{DS}$ est la tension appliquée sur le drain.

- Densité d'électrons

Les conditions aux limites pour la densité d'électrons se déduisent des hypothèses d'équilibre thermodynamique et de neutralité de charge au voisinage du contact. Dans le cas des dispositifs qui nous

intéressent, la densité intrinsèque d'électrons est négligeable devant la densité totale d'impuretés ionisées, de sorte que les conditions aux limites sur les contacts ohmiques se réduisent à :

$n = N_D^+$, si le dopage du dispositif est réalisé à l'aide d'atomes donneurs uniquement.

- Température électronique

Pour cette grandeur physique, on admet que les électrons sont à l'équilibre thermodynamique au voisinage du contact ohmique. Leur température ne peut qu'être égale à celle du réseau cristallin, qui joue le rôle d'un réservoir infini à température fixée. La condition pour la température électronique est donc :

$T_e = T_L$, où $T_L$ est la température de réseau, susceptible de varier.

### 3.6.1.2. Conditions aux limites sur le contact Schottky

- Potentiel

L'électrode est considérée comme un contact Schottky parfait, ce qui correspond à une condition de Dirichlet pour le potentiel :

$$V = V_{GS} + \Phi_{Bn}$$

où $V_{GS}$ est la tension appliquée sur la grille et $\Phi_{Bn}$ est la hauteur de barrière.

- Densité d'électrons

Le passage du courant à travers le contact métal/semiconducteur est principalement limité par deux mécanismes :

- Les phénomènes de dérive-diffusion lorsque les électrons traversent la zone de déplétion située sous le contact ;
- Effet thermoïonique et/ou tunnel.

Lors du transport des électrons du semiconducteur vers le métal, ces processus ont lieu en série. Le principal facteur limitant le courant sera soit le premier mécanisme soit le second mécanisme selon les conditions de polarisation.

Dans notre modélisation, pour simplifier le modèle, on suppose d'abord que le flux des électrons à travers le contact Schottky est nul.

- Température électronique

En supposant que le flux de chaleur est nul en chaque point de la surface, la condition sur la température électronique est :

$$\frac{\partial T_e}{\partial x} \text{ ou } \frac{\partial T_e}{\partial y} = 0$$

### 3.6.1.3. Conditions aux limites sur les surfaces libres

Les surfaces libres sont des frontières correspondant soit à des interfaces avec un isolant, soit à des frontières artificielles du composant. Sur ces frontières, les différentes grandeurs ne devant plus évoluer, des conditions de Neumann, sont ici imposées afin d'y annuler les différents flux :

- Potentiel

L'absence de charges de surface implique la condition pour le potentiel :

$$\frac{\partial V}{\partial x} \text{ ou } \frac{\partial V}{\partial y} = 0$$

- Densité d'électrons

La condition pour la densité d'électrons est :

$$\frac{\partial n}{\partial x} \text{ ou } \frac{\partial n}{\partial y} = 0$$

- Température électronique

La condition sur la température électronique est également une condition de Neumann :

$$\frac{\partial T_e}{\partial x} \text{ ou } \frac{\partial T_e}{\partial y} = 0$$

### 3.6.1.4. Conditions aux limites au niveau de l'interface AlGaN/GaN

Pour la structure HEMT, au niveau de l'hétérojonction, la densité d'électrons ainsi que l'énergie sont discontinues. En conséquence, on envisage de séparer les variables dans chaque région de part et d'autre de l'interface (exemple sur la figure 3.15).

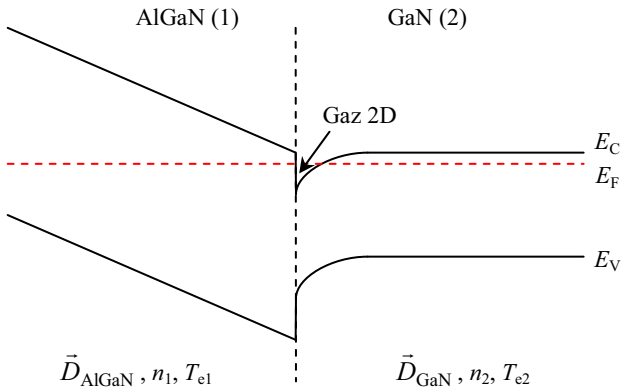



Figure 3.15. Allure du diagramme à l'interface AlGaN/GaN.

- Potentiel

À l'interface AlGaN/GaN et du coté de la couche GaN, il y a un gaz d'électrons. La charge piézoélectrique imposée est de l'ordre $10^{13}$ $cm^{-2}$. Donc on impose la condition limite :

$$\vec{n} \cdot \left(\vec{D}_{GaN} - \vec{D}_{AlGaN}\right) = \sigma_s \tag{3.41}$$

où $\vec{n}$ est le vecteur unitaire à l'interface AlGaN/GaN.

$\vec{D}_{AlGaN}$ et $\vec{D}_{AlGaN}$ sont les vecteurs déplacements électriques des couches d'AlGaN et de GaN respectivement.

$\sigma_s$ est la charge piézoélectrique surfacique.

- Densité d'électrons

Pour la densité d'électrons, la condition limite est définie par l'expression du courant thermoïonique [17] :

$$\left(J_y\right)^{TH+} = \left(J_y\right)^{TH-} = \frac{m_1^*}{m_2^*} v_2 n_2 \exp\left(-\frac{q\Delta E_C}{k_B T_{e2}}\right) - v_1 n_1 \tag{3.42}$$

$$\text{avec :} \quad v_i = \sqrt{\frac{k_B T_{ei}}{2\pi m_i^*}} \text{ et i = 1 ou 2} \tag{3.43}$$

où $J_y$ est le courant thermoïonique.

$n_1$ et $n_2$ sont les densités d'électrons des couches d'AlGaN et de GaN respectivement.

$v_1$ et $v_2$ sont les vitesses thermiques moyennes des électrons des couches d'AlGaN et de GaN à

travers l'interface AlGaN/GaN respectivement.

$m_1^*$ et $m_2^*$ sont les masses effectives d'électron de l'AlGaN et du GaN respectivement.

$T_{e1}$ et $T_{e2}$ sont les températures électroniques des couches d'AlGaN et de GaN respectivement.

$\Delta E_C$ est la discontinuité de la bande de conduction.

Afin de permettre aux électrons de se déplacer du puits quantique au drain, on utilise les profils de densité d'électrons de chaque côté vertical de la zone active pour des polarisations nulles ($V_{GS} = V_{DS} = 0$ V). Ces répartitions sont ensuite utilisées comme les conditions aux limites pour une polarisation $V_{DS}$ quelconque.

- Température électronique

La température électronique à l'interface AlGaN/GaN est définie par l'expression thermoïonique du flux d'énergie [17] :

$$\left(S_{2y}\right) = \left(S_{1y}\right) + q\Delta E_C \left(n_1 v_1\right) \tag{3.44}$$

$$\text{avec : } \left(S_{1y}\right) = -2\left[k_B T_{e1} v_1 n_1 - \frac{m_1^*}{m_2^*} k_B T_{e2} v_2 n_2 \exp\left(\frac{-q\Delta E_C}{k_B T_{e2}}\right)\right] \tag{3.45}$$

où $S_{1y}$ et $S_{2y}$ sont les flux d'énergie des couches d'AlGaN et de GaN à travers l'interface AlGaN/GaN respectivement.

Concernant la simplification du modèle, on suppose le flux d'énergie par effet thermoïonique nul. Donc, la température électronique est continue. Soit :

$T_{e1} = T_{e2}$

## 3.6.2. Conditions aux limites pour le modèle thermique

Dans le premier chapitre, nous avons déjà conclu que la contribution de la radiation et la convection est de l'ordre de 1,5 % par rapport à la contribution de la conduction pour les températures supérieures à la température ambiante. Donc, dans notre modèle, on prend en compte uniquement le transfert de chaleur par conduction.

#### 3.6.2.1. Conditions aux limites sur la frontière base du substrat

- Température de réseau

La température de réseau sur la base du substrat est supposée constante, prise égale à 300 K (température de socle) :

$T_L = 300$ K

Mais on a aussi regardé ce que l'on obtient en imposant une température de réseau sur la base du substrat égale à 50 °C. Cette valeur de la température de réseau est souvent utilisée comme température de socle par les thermiciens. Nous avons donc voulu étudier les deux cas pour analyser l'impact d'une température de socle plus élevée sur le fonctionnement du composant.

#### 3.6.2.2. Conditions aux limites sur les surfaces libres

- Température de réseau

Pour les surfaces libres, la condition sur la température de réseau est :

$$\frac{\partial T_L}{\partial x} \quad \text{ou} \quad \frac{\partial T_L}{\partial y} = 0$$

#### 3.6.2.3. Conditions aux limites sur les frontières internes au composant

- Température de réseau

Pour les frontières internes au composant, la condition sur la température de réseau est la condition de continuité.

## 3.7. Méthodes de résolution

### 3.7.1. Présentation générale

En vue du passage d'un problème exact (continu) au problème approché (discret), on dispose de plusieurs techniques concurrentes et complémentaires : les différences finies, les éléments finis et les

volumes finis. Chacune de ces trois méthodes correspond à une discrétisation différente des équations de la physique [18][19] :

- Équilibre des forces en chaque point pour les différences finies ;
- Minimisation de l'énergie ou principe des travaux virtuels pour les éléments finis ;
- Loi de conservation et calcul des flux pour la méthode des volumes finis.

#### 3.7.1.1. Différences finies

La méthode des différences finies consiste à remplacer les dérivées apparaissant dans le problème continu par des différences divisées ou combinaisons de valeurs ponctuelles de la fonction en un nombre fini de points discrets ou nœuds du maillage.

- Avantage : grande simplicité d'écriture.
- Inconvénients : limitation de la géométrie des domaines de calculs, difficultés de prise en compte des conditions aux limites portant sur les dérivées ou les gradients de l'inconnue et en général absence de résultats de majoration.

#### 3.7.1.2. Éléments finis

La méthode des éléments finis consiste à approcher, dans un sous-espace de dimension finie, un problème écrit sous forme variationnelle (comme la minimisation de l'énergie, en général). La solution approchée est dans ce cas une fonction déterminée par un nombre fini de paramètres, par exemple, ses valeurs en certains points (les nœuds du maillage).

- Avantages : traitement possible de géométries complexes, détermination plus naturelle des conditions aux limites, possibilité de démonstrations mathématiques de convergence et de majoration d'erreurs.
- Inconvénients : complexité de mise en œuvre et coût en temps de calcul et en mémoire.

#### 3.7.1.3. Volumes finis

La méthode des volumes finis intègre, sur des volumes élémentaires de forme simple, les équations écrites sous forme de loi de conservation. Elle fournit ainsi de manière naturelle des approximations discrètes conservatives.

- Avantages : sa mise en œuvre est simple si les volumes sont des rectangles. Elle permet d'utiliser des volumes élémentaires de forme quelconque, donc, de traiter des géométries complexes. De plus, il existe une grande variété de méthodes selon le choix des formules de calcul des flux.
- Inconvénients : on dispose de peu de résultats théoriques de convergence.

### 3.7.2. Méthode des éléments finis

La méthode des éléments finis est l'une des méthodes adaptées à la résolution des équations aux dérivées partielles avec des conditions aux limites, telles que l'équation de Poisson. Toutefois, elle est mal adaptée à l'équation de conservation des électrons ou à l'équation de conservation de l'énergie. Elle permet de transformer un système d'équations différentielles en un système numérique pouvant être résolu par des techniques numériques.

Afin d'implémenter le couplage entre les modèles physique et thermique, la solution a été effectuée en utilisant une discrétisation par la méthode des éléments finis des équations de transport dans la zone active du composant et de la partie thermique dans toute la structure à étudier à l'aide du logiciel COMSOL®.

#### 3.7.2.1. Logiciel COMSOL®

COMSOL® est un environnement interactif pour la modélisation d'applications industrielles et scientifiques avec la méthode des éléments finis. Il est basé sur la résolution des systèmes d'équations aux dérivées partielles (EDP), stationnaires ou temporelles, linéaire ou non linéaire : équations fondamentales pour la description de très nombreux phénomènes physiques. Ce logiciel a été écrit en C++ et est utilisable sous un système d'exploitation Unix ou Windows. Différents types de problèmes peuvent être résolus : en mécanique des fluides, en électronique, en thermique, en diffusion, en diffusion convection, etc.… Le couplage de plusieurs équations peut également être réalisé. L'avantage majeur de ce logiciel est la rapidité des calculs avec une bonne précision. Il permet d'effectuer des simulations en deux ou trois dimensions. Il ne nécessite pas de grandes ressources informatiques. À titre d'exemple nos calculs ont été réalisés sur un ordinateur ayant 2 Go de RAM.

### 3.7.2.2. Discrétisation par la méthode des éléments finis

La méthode des éléments finis est bien adaptée pour effectuer un couplage entre les modèles. Car au contraire de la discrétisation par les différences finies, la taille des éléments peut varier en deux dimensions avec des écarts importants entre la valeur minimale et la valeur maximale tout en ayant un nombre de points de maillage qui reste réaliste comme nous le montre la figure 3.16. Le pas de maillage compte tenu des conditions physiques à respecter telle que la condition de Debye, doit être suffisamment fin dans la zone active. Par contre, au-delà de la zone active le pas de maillage augmente pour atteindre quelques microns en bas du substrat puisque il n'est limité que par la condition requise pour le modèle thermique (Éq. 3.16).

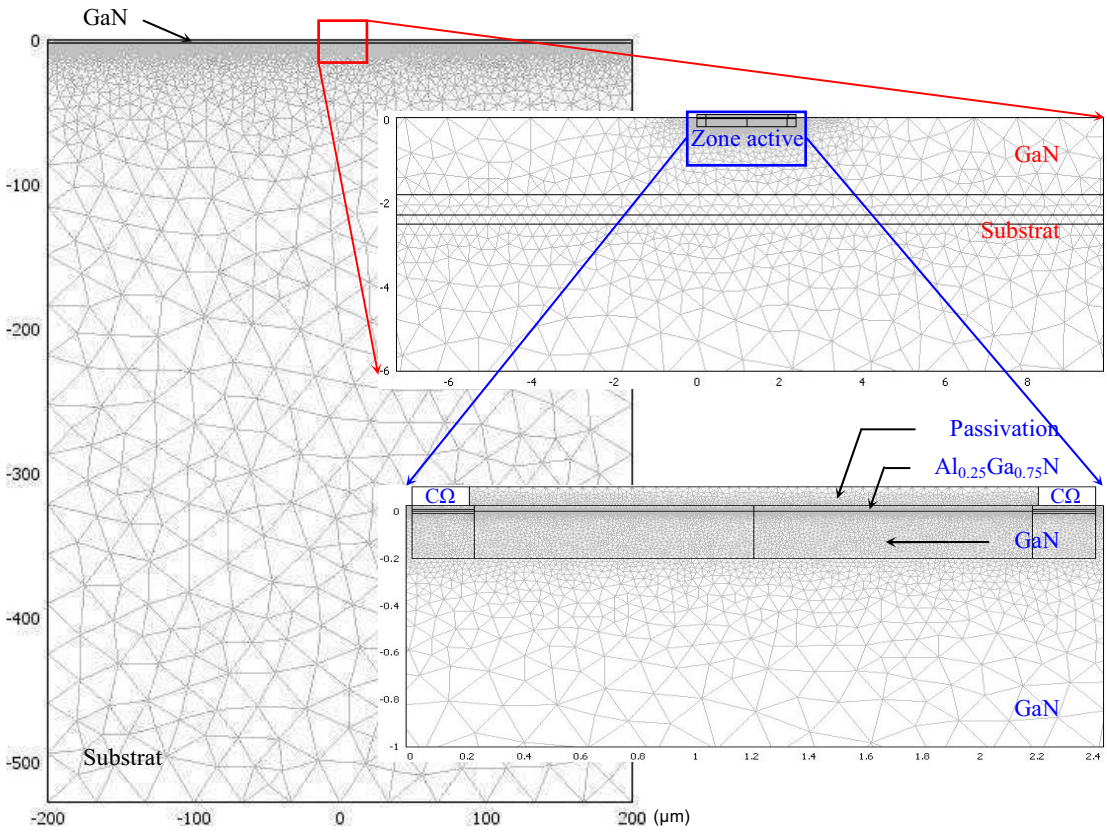



Figure 3.16. Évolution du maillage de la zone active vers le bas du substrat.

En utilisant la méthode des éléments finis, le résultat dépend principalement de deux critères :

L'adaptation du maillage : il est nécessaire de faire un compromis entre le nombre de mailles (pas trop élevé pour minimiser le temps de calcul) et la précision. Il est entendu qu'un nombre important de

mailles fournira des résultats meilleurs mais un trop grand nombre augmentera le taux d'erreur. Une étude préalable sur la densité du maillage est donc nécessaire afin d'établir le meilleur compromis.

Les zones de génération de la chaleur sont importantes à prévoir car elles vont influer sur de nombreux effets physiques. Cependant, afin de réduire le temps de calcul, nous avons supposé que le terme source n'existe que dans la zone active du composant.

### 3.7.2.3. Normalisation des équations utilisées

Avant d'implémenter les deux modèles (physique et thermique), les équations doivent être normalisées afin d'éviter la forte divergence des grandeurs physiques et thermiques pour que le programme puisse bien converger en utilisant la méthode des éléments finis.

Toutes les grandeurs sont adimensionnées. Dans le modèle physique, les trois inconnues naturelles sont le potentiel $V$, la densité d'électrons $n$ et l'énergie ou bien la température électronique $T_e$. En revanche, pour le modèle thermique, la seule inconnue est la température de réseau $T_L$.

Nous effectuons les changements d'inconnues suivants :

$$x = L_0 \tilde{x} \tag{3.46}$$

$$y = L_0 \tilde{y} \tag{3.47}$$

$$V = \frac{k_B T_0}{q} \tilde{V} \tag{3.48}$$

$$n = n_0 e^{\tilde{n}} \tag{3.49}$$

$$T_e = T_0 \tilde{T}_e \tag{3.50}$$

$$T_L = T_0 \tilde{T}_L \tag{3.51}$$

où $L_0$, $T_0$ et $n_0$ sont les constantes de normalisation.

On normalise la densité d'électrons en exponentiel pour éviter les densités négatives. Par conséquent, les équations dans les deux modèles peuvent être récrites de la manière suivante :

- Équation de Poisson :

$$div\left(\varepsilon_r \varepsilon_0 \vec{\nabla}(V)\right) = q\left(n - N_D^+\right)$$

Après normalisation :

$$di\tilde{v}\left(\hat{\varepsilon}\tilde{\vec{\nabla}}\tilde{V}\right)=e^{\tilde{n}}-\frac{N_D^+}{n_0} \tag{3.52}$$

avec : $\hat{\varepsilon}=\dfrac{\varepsilon_r\varepsilon_0 V_0}{qL_0^2 n_0}$ (3.53)

On peut aisément vérifier, grâce à une équation aux dimensions que $\hat{\varepsilon}$ est une grandeur sans dimension.

- Équation de conservation pour les électrons :

$$\frac{\partial n}{\partial t}+div(n\vec{v})=0$$

avec : $\vec{v}=\mu_n\dfrac{k_B}{q}\left(\dfrac{q}{k_B}\vec{\nabla}V-\vec{\nabla}T_e-\dfrac{T_e}{n}\vec{\nabla}n\right)$

Après normalisation :

$$e^{\tilde{n}}\frac{\partial\tilde{n}}{\partial\tilde{t}}+di\tilde{v}\left(e^{\tilde{n}}\tilde{\vec{v}}\right)=0 \tag{3.54}$$

avec : $\tilde{\vec{v}}=\tilde{\mu}_n\left(\tilde{\vec{\nabla}}\tilde{V}-\tilde{\vec{\nabla}}\tilde{T}-\tilde{T}\tilde{\vec{\nabla}}\tilde{n}\right)$ (3.55)

- Équation de conservation pour l'énergie :

$$\frac{\partial(nw_n)}{\partial t}+div\vec{S}_n=-qn\vec{E}\cdot\vec{v}-n\frac{w_n-w_0}{\tau_w}$$

où : $w_n=\dfrac{3}{2}k_BT_e$ et $w_0=\dfrac{3}{2}k_BT_0$

$$\vec{S}_n=\vec{Q}_n+(w_n+k_BT_e)n\vec{v}$$

$$\vec{Q}_n=-k_e\vec{\nabla}T_e \quad \text{avec :} \quad k_e=\left(\frac{5}{2}+c\right)\frac{k_B^2}{q}\mu_n nT_e$$

Après normalisation :

$$e^{\tilde{n}}\frac{\partial\left(\tilde{T}_e\right)}{\partial\tilde{t}}+\frac{2}{3}di\tilde{v}\left[-\left(\frac{5}{2}+c\right)\tilde{\mu}_n e^{\tilde{n}}\tilde{T}\tilde{\vec{\nabla}}\left(\tilde{T}_e\right)+\tilde{T}_e e^{\tilde{n}}\tilde{\vec{v}}\right]=e^{\tilde{n}}\tilde{\vec{v}}\cdot\left(\frac{2}{3}\tilde{\vec{\nabla}}\tilde{V}-\tilde{\vec{\nabla}}\tilde{T}_e\right)-e^{\tilde{n}}\frac{\tilde{T}_e-\tilde{T}_0}{\tilde{\tau}_w} \tag{3.56}$$

avec : $\tilde{\vec{S}}_n=\left[-\left(\dfrac{5}{2}+c\right)\tilde{\mu}_n e^{\tilde{n}}\tilde{T}_e\tilde{\vec{\nabla}}\left(\tilde{T}_e\right)+\dfrac{5}{2}\tilde{T}_e e^{\tilde{n}}\tilde{\vec{v}}\right]$ (3.57)

- Courant thermoïonique :

$$\left(n_1 v_{1y}\right)^{TH+} = \left(n_2 v_{2y}\right)^{TH-} = \frac{m_1^*}{m_2^*} v_2 n_2 \exp\left(-\frac{q\Delta E_C}{k_B T_{e2}}\right) - v_1 n_1$$

avec : $v_i = \sqrt{\frac{k_B T_{ei}}{2\pi m_i^*}}$

Après normalisation :

$$\left(e^{\tilde{n}_1}\tilde{v}_{1y}\right)^{TH+} = \left(e^{\tilde{n}_2}\tilde{v}_{2y}\right)^{TH-} = \frac{m_1^*}{m_2^*}\tilde{v}_2 e^{\tilde{n}_2} \exp\left(-\frac{q\Delta E_C}{k_B T_0 \tilde{T}_{e2}}\right) - \tilde{v}_1 e^{\tilde{n}_1} \tag{3.58}$$

avec : $\tilde{v}_i = \sqrt{\frac{\tilde{T}_{ei}}{2\pi m_i^*}}$ (3.59)

- Équation de la chaleur :

$$\rho C_P \frac{\partial T_L}{\partial t} + div\left(\vec{Q}_L\right) = H$$

avec : $\vec{Q}_L = -\kappa_L \vec{\nabla}\left(T_L\right)$ et $H = \frac{3}{2} n k_B \frac{T_e - T_L}{\tau_w}$

Après normalisation :

$$\rho C_P \frac{\partial \tilde{T}_L}{\partial \tilde{t}} + \frac{t_0}{L_0^2} di\tilde{v}\left(\tilde{\vec{Q}}_L\right) = \frac{3}{2} n_0 k_B e^{\tilde{n}}\left(\frac{\tilde{T}_e - \tilde{T}_L}{\tilde{\tau}_w}\right) \tag{3.60}$$

avec : $\tilde{\vec{Q}}_L = -\kappa_L \tilde{\vec{\nabla}}\left(\tilde{T}_L\right)$ (3.61)

- Flux d'énergie par effet thermoïonique :

$$\left(S_{2y}\right) = \left(S_{1y}\right) + q\Delta E_C \left(n_1 v_{1y}\right)$$

avec : $\left(S_{1y}\right) = -2\left[k_B T_{e1} v_1 n_1 - \frac{m_1^*}{m_2^*} k_B T_{e2} v_2 n_2 \exp\left(\frac{-q\Delta E_C}{k_B T_{e2}}\right)\right]$

Après normalisation :

$$\left(\tilde{S}_{2y}\right) = \left(\tilde{S}_{1y}\right) - \frac{q\Delta E_C}{k_B T_0}\left[\tilde{v}_1 e^{\rho_1} - \frac{m_1^*}{m_2^*}\tilde{v}_2 e^{\rho_2} \exp\left(-\frac{q\Delta E_C}{k_B T_0 \tilde{T}_{e2}}\right)\right] \tag{3.62}$$

$$\text{avec :}\quad \left(\widetilde{S}_{1y}\right) = -2\left[\widetilde{T}_{e1}\widetilde{v}_1 e^{\rho_1} - \frac{m_1^*}{m_2^*}\widetilde{T}_{e2}\widetilde{v}_2 e^{\rho_2}\,\exp\left(\frac{-q\Delta E_C}{k_B T_0 \widetilde{T}_{e2}}\right)\right] \tag{3.63}$$

## 3.8. Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons présenté le modèle physico-thermique destiné à l'optimisation des structures étudiées dans le cadre de ce travail et au management des composants de la filière nitrure de gallium. Ce modèle est une solution pour obtenir des résultats fiable avec un temps de calcul raisonnable par rapport à des modèles microscopiques.

Nous décrivons les étapes préparatoires de la simulation, qui consistent à obtenir les propriétés de transport données par la simulation Monte Carlo puis à en déduire des fonctions analytiques par un algorithme génétique, afin de permettre leur introduction dans le modèle.

Enfin, nous comparons les avantages et les inconvénients pour les trois différentes méthodes de discrétisation : méthode de différences finies, méthode des éléments finis et méthode des volumes finis. De plus, parmi les trois méthodes, nous présentons en détail la méthode des éléments finis utilisée pour notre modélisation.

# Bibliographie

[1] H. Mathieu, “Physique des Semiconducteurs et des Composants Electroniques”, 3ème édition, *Mason*, 1996.

[2] R. Hakim, “Introduction à la Mécanique Statistique”, *Mason*, 1996.

[3] J. Jyegal, T. A. Demassa, “Correct and Rigorous Single-Electron-Gas Hydrodynamic Transport Model for Multi-Valley Semiconductors”, *Solid State Electronics*, vol. 37, No. 9, pp. 1603-1609, 1994.

[4] T. Shawki, G. Salmer, O. El-Sayed, “MODFET 2-D Hydrodynamic Energy Modelling: Optimization of Subquarter-Micron-Gate Structures”, *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. 37, No. 1, pp. 21-30, 1990.

[5] G. Baccarini, “An Investigation of Steady-State Velocity Overshoot in Silicon”, *Solid State Electronics*, vol. 28, No. 4, pp. 407-416, 1985.

[6] T. Similinger, H. Brecht, T. Grave, S. Selberherr, “Simulation of Submicron Double-Heterojunction High Electron Mobility Transistor with MINIMOS-NT”, *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. 44, No. 5, pp. 700-707, 1997.

[7] L. Varani, C. Palermo, J. C. Vaissiere, A. Greiner, L. Reggiani, “Avoiding Spurious Velocity Overshoot in Hydrodynamic Simulation of Deep Submicron Devices by a Physical Modeling of Heat Transport”, *Semiconductor Science and Technology*, vol. 19, pp. S142-S144, 2004.

[8] M. Liang, M. E. Law, “Influence of Lattice Self-Heating and Hot-Carrier Transport on Devices Performance”, *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. 41, No. 12, pp. 2391-2397, 1994.

[9] M. Reiser, “On the Stability of Finite Difference Schemes in Transient Semiconductor Problems”, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. 2, pp. 65, 1973.

[10] S. Wang,“Fundmentals of Semiconductor Theory and Devices Physics”,*Prentice-Hall*,Inc. Englewood Cliffs, New Jersey, pp. 204-209, 1998.

[11] E. K. Sichel, D. I. Pankove, “Thermal conductivity of GaN, 25–360 K”, *J. Phys. Chem. Solids*, vol. 38, pp. 330, 1977.

[12] S. S. Dahlgren, H. T. Hall, J. Novatek, “High-Pressure Polycrystalline Diamond as a Cost Effective Heatspreader”, *Thermal and Thermomechanical Phenomena in Electronic System*, 2000.

[13] O. Nilsson, H. Mehling, R. Horn, J. Fricke, R. Hofmann, S. G. Muller, R. Eckstein, D. Hofmann, “Determination of the Thermal Diffusivity and Conductivity of Monocrystalline Silicon Carbide (300–2300 K)”, *High Temperatures and High Pressures*, vol. 29, pp. 93-97, 1997.

[14] C. Mion, J. F. Muth, E. A. Preble, D. Hanser, “Accurate Dependence of Gallium Nitride Thermal Conductivity on Dislocation Density”, *Appl. Phys. Lett.*, vol. 89, pp. 092123, 2006.

[15] A. L. Edwards, “For Computer Heat-Conduction Properties Data”, *UCRL-505*.

[16] M. Elkhou, “Modélisation Hydrodynamique Bidimensionnel de Transistors à Effet de Champ. Analyse Physique des Limitations et des Performances Hyperfréquences des Filières pHEMT sur GaAs et HEMT sur GaN pour l’Amplification de Puissance”, *Thèse de doctorat*, USTL, 2004.

[17] D. Schroeder, “Three-Dimensional Nonequilibrium Interface Conditions for Electron Transport at Band Edge Discontinuities”, *IEEE Trans. Computer Aided Design*, vol. 9, No. 11, pp. 1136-1140, 1990.

[18] B. Mohammadi, J. H. Saiac, “Pratique de la Simulation Numérique”, *Série Industrie et Technologies*, Dunod, 2003. ISBN 2 10 006407 X.

[19] F. Jedrzejewski, “Introduction aux Méthodes Numériques”, *Springer*, 2005. ISBN 2 287 59711 5.

# CHAPITRE IV

# ANALYSES PHYSICO-THERMIQUES DES HÉTÉROSTRUCTURES AlGaN/GaN ET InAlN/GaN

## 4.1. Introduction

À l'heure actuelle, les transistors de type HEMT à base de nitrure de gallium constituent les composants les plus prometteurs pour les applications de puissance : ils permettent d'obtenir des densités de puissance supérieures à 40 W/mm sur substrat SiC monocristallin. Malheureusement, lors du fonctionnement de ce type de transistors, la puissance dissipée produit un auto-échauffement qui devient très significatif pour de grandes tensions appliquées. L'effet d'auto-échauffement engendre une dégradation des propriétés de transport dans les matériaux et donc une détérioration des performances en puissance et peut également entraîner la destruction du composant. Dans ce cadre, il est nécessaire d'étudier les performances électriques en prenant en compte l'influence de la température de réseau sur les propriétés de transport en tout point du composant. Ce chapitre est constitué de deux parties.

Dans la première partie, nous décrivons le modèle physico-thermique pour les structures HEMT AlGaN/GaN. Pendant la modélisation, nous avons été confrontés à un problème lié à l'apparition de densités négatives de porteurs en dessous de la grille. Il semble finalement que la discrétisation de type "upwind" généralement utilisée pour obtenir des schémas stables ne soit pas compatible avec la méthode des éléments finis utilisée par le logiciel COMSOL®.

Dans la seconde partie, nous étudions les performances électriques et thermiques pour des structures TLM AlGaN/GaN en utilisant le modèle physico-thermique pour différents substrats : Si, GaN avec peu de dislocations, SiC monocristallin, substrats composites (SopSiC, SiCopSiC, GaNopSiC et Sopdiamant) et diamant monocristallin. Les caractéristiques statiques, les distributions de la température de réseau et les résistances thermiques obtenues sont analysées dans cette partie. Nous comparons les performances électriques et thermiques des substrats mentionnés précédemment et faisons un bilan de cette étude. Afin de mieux approcher la situation réelle, nous modélisons également des structures TLM avec deux doigts sur un substrat SiC monocristallin. Trois topologies différentes sont étudiées. À la fin de ce chapitre, nous étudions les performances électriques et thermiques pour la structure TLM InAlN/GaN. Pour cette hétérostructure, la densité d'électrons dans le puits est beaucoup plus importante que celle présente dans l'hétérostructure AlGaN/GaN influant sur le comportement thermique.

## 4.2. Analyses physico-thermiques des structures HEMT AlGaN/GaN

La forte puissance dissipée dans le composant produit un effet d'auto-échauffement qui devient très significatif pour les composants de puissance à base de nitrure de gallium. Le modèle physico-thermique développé permet de prendre en compte l'influence des effets thermiques sur les propriétés de transport et de comprendre les phénomènes physiques influençant les résultats expérimentaux.

### 4.2.1. Topologie de la structure étudiée

La topologie de la structure étudiée est celle d'un HEMT AlGaN/GaN épitaxié sur un substrat SiC monocristallin. La taille de substrat est de 400×400 $\mu m^2$. La figure 4.1 représente la topologie de cette structure. L'épitaxie se compose d'une couche de GaN n.i.d., suivie de 22,5 nm d'$Al_{0.25}Ga_{0.75}N$ n.i.d. constituant la couche de barrière. Les largeurs des contacts de source, grille et drain sont de 0,2 µm. Les distances source-grille et grille-drain sont de 0,5 µm. La charge piézoélectrique à l'interface AlGaN/GaN est fixée à $1\times10^{13}$ $cm^{-2}$. Les dopages sous les contacts ohmiques sont de $10^{18}$ $cm^{-3}$.

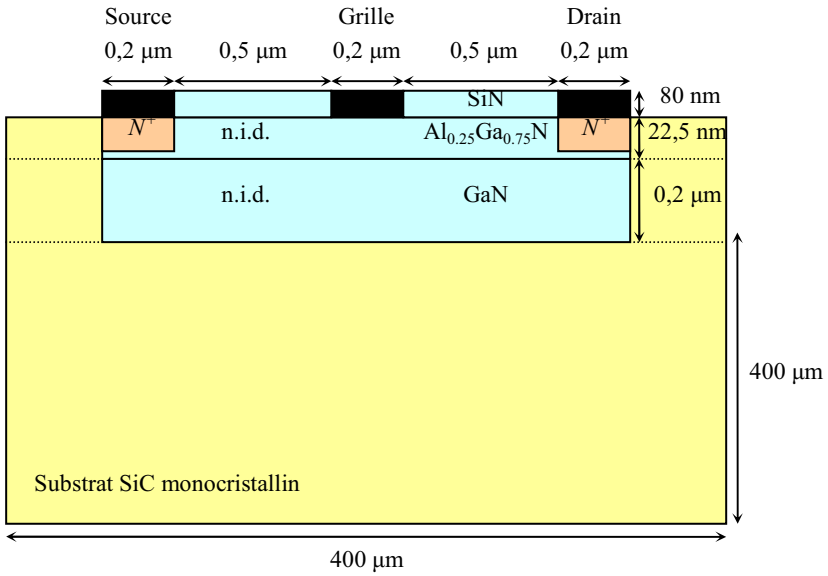



Figure 4.1. Topologie de la structure HEMT AlGaN/GaN étudiée.

L'approche basée sur le modèle de transport couplé avec le modèle thermique a été appliquée. Le modèle de transport est résolu uniquement dans la zone active qui est la zone en bleu sur la figure 4.1. Le modèle thermique est résolu dans le composant entier y compris le substrat. La clé principale de cette approche provient de la détermination de la température de fonctionnement et de l'utilisation des propriétés de transport non seulement en fonction de la température électronique mais aussi en fonction de la

température de réseau en chaque point de la zone active.

### 4.2.2. Problèmes rencontrés pendant la modélisation

Le modèle physico-thermique développé est implémenté à l'aide du logiciel COMSOL® en utilisant la méthode des éléments finis. Pendant la modélisation, nous avons été confrontés à un problème lié à l'apparition de densités négatives de porteurs en dessous de la grille. Physiquement, il y a seulement une zone désertée à cet endroit. Pour bien décrire une équation de transport, il faut des schémas de discrétisation particuliers. Sur les modèles développés au laboratoire, une discrétisation de type "upwind" donne un schéma stable. L'utilisation de tel schéma dans la méthode des éléments finis n'a semble-t-il pas été implémentée et on a donc une discrétisation qui conduit à ces problèmes de densités négatives.

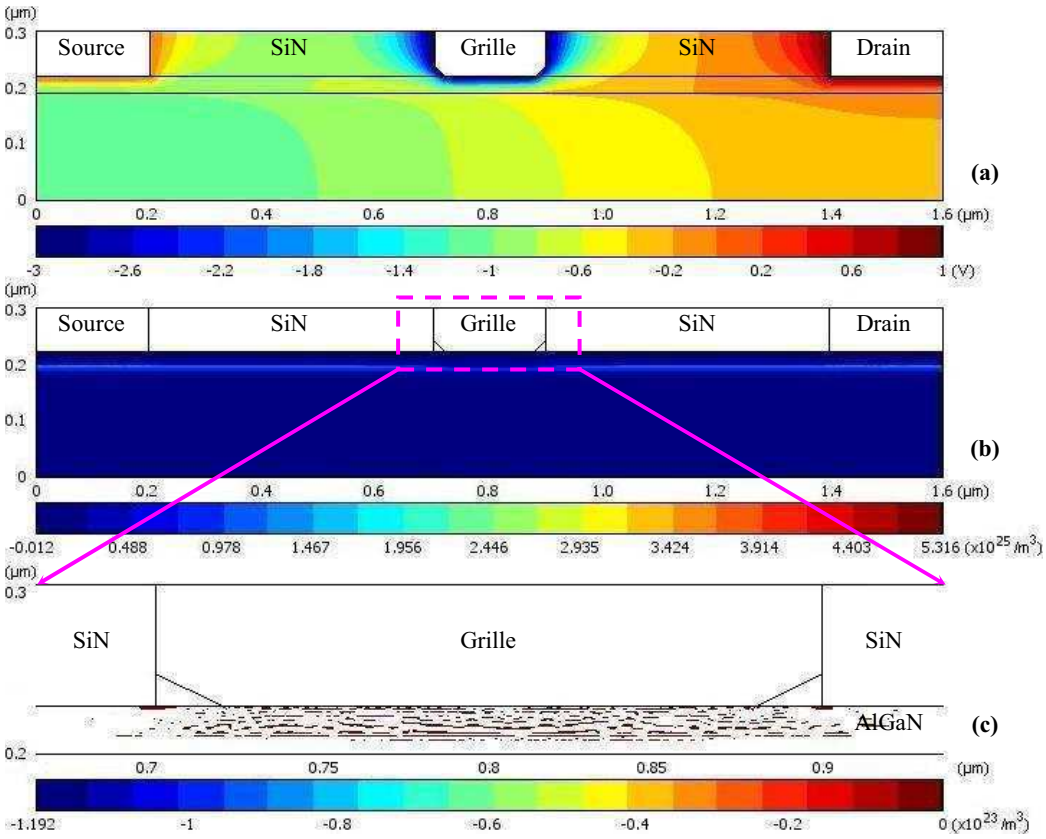



Figure 4.2. Cartes 2D des grandeurs électriques dans la zone active de la structure HEMT AlGaN/GaN : (a) potentiel, (b) densité d'électrons et (c) distribution de la densité négative d'électrons dans la barrière.

La figure 4.2 montre les cartes 2D des grandeurs électriques (telles que : le potentiel et la densité d'électrons) dans la zone active d'une structure HEMT AlGaN/GaN, et la distribution de la densité négative d'électrons dans la barrière AlGaN. Les polarisations sont : $V_{GS}$ = -3 V et $V_{DS}$ = 1 V. Sous cette polarisation,

on peut voir que la densité d'électrons dans la barrière diminue fortement et devient négative. La zone de la densité négative d'électrons est indiquée sur la figure 4.2 (c). Avec l'augmentation de la polarisation du drain, la densité négative d'électrons est de plus en plus importante. Cette valeur n'est pas physique, et en même temps, elle induit des problèmes mathématiques dans le modèle. Le programme ne converge pas si une densité négative d'électrons se trouve dans l'équation de conservation de l'énergie.

### 4.2.3. Nos essais pour résoudre les problèmes rencontrés

Pour résoudre le problème de la densité négative d'électrons, nous avons essayé deux méthodes :

- Raffiner la maille.
- Modifier la normalisation de la densité d'électrons.

#### 4.2.3.1. Raffinement de la maille

Dans la méthode des éléments finis, si la variation d'une certaine variable est trop forte, le modèle peut diverger. Donc, nous raffinons la maille dans la barrière ainsi qu'à l'interface AlGaN/GaN, afin de diminuer les effets liés au fort gradient de la densité d'électrons. Pendant la modélisation, nous avons constaté que le raffinement de la maille a vraiment amélioré les résultats sans toutefois résoudre complètement le problème. On a raffiné la maille le plus finement possible, mais la densité d'électrons devient toujours négative quand la tension appliquée sur le drain augmente. Nous avons en fait été limités dans cette étude par la méthode utilisée.

#### 4.2.3.2. Modification de la normalisation de la densité d'électrons

Dans la section 3.7.2.3, on a déjà déduit la normalisation des inconnues :

$$x = L_0 \tilde{x} \tag{3.45}$$

$$y = L_0 \tilde{y} \tag{3.46}$$

$$V = \frac{k_B T_0}{q} \tilde{V} \tag{3.47}$$

$$n = n_0 e^{\tilde{n}} \tag{3.48}$$

$$T_e = T_0 \tilde{T}_e \tag{3.49}$$

$$T_L = T_0 \tilde{T}_L \tag{3.50}$$

Pour la densité d'électrons, le choix de poser $n = n_0 e^{\tilde{n}}$ (Éq. 3.48) doit empêcher l'apparition de

densités négatives d'électrons. Mais en fait, $\tilde{n}$ avait alors tendance à tendre vers moins l'infini entraînant le modèle ne converge pas. Pour éviter l'apparition de cette situation, nous avons essayé une autre normalisation :

$$n = n_0 \exp\left(\frac{q\tilde{V}}{k_B\tilde{T}}\right) \tag{4.1}$$

En utilisant cette normalisation, la densité d'électrons apparaît plus logique et physique. Elle reste toujours positive lorsqu'on polarise la grille et le drain. Cependant, pour cette normalisation, comme la relation entre la densité d'électrons et le potentiel est très non linéaire, c'est la distribution du potentiel qui devient peu réaliste (Fig. 4.3 (b)). Sur cette figure, on peut noter que les variations du potentiel sont très faibles, et elles sont localisées autour des contacts.

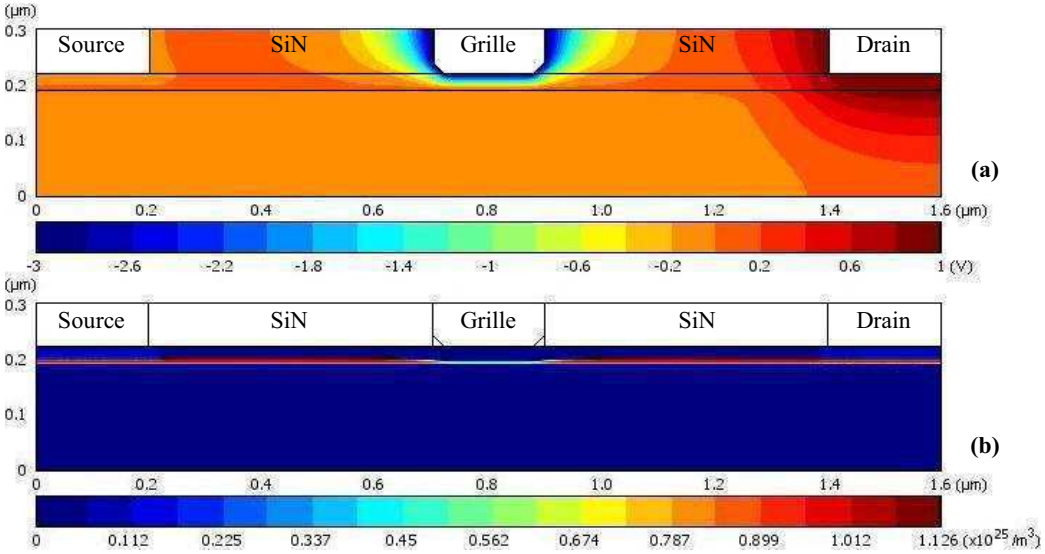



Figure 4.3. Cartes 2D des grandeurs électriques avec la normalisation sous forme Éq. 4.1 : (a) potentiel et (b) densité d'électrons.

## 4.2.4. Perspectives

Les deux essais présentés précédemment ne peuvent pas résoudre totalement le problème rencontré, mais le premier essai de raffinement de la maille est vraiment utile pour la modélisation d'un transistor HEMT.

En fait, il y a une autre méthode possible pour étudier les effets thermiques pour les structures HEMT AlGaN/GaN. C'est le développement d'un modèle physico-thermique basé sur la méthode des volumes finis. La discrétisation par la méthode des volumes finis des équations de conservation permet d'utiliser une

méthode de type “upwind” donnant des schémas de discrétisation stables.

## 4.3. Analyses physico-thermiques des structures TLM AlGaN/GaN avec un doigt

En raison de la densité négative d’électrons observée, notre modèle n’a pas permis d’étudier les effets thermiques sur des structures HEMTs AlGaN/GaN. Par contre, nous pouvons étudier les propriétés thermiques de différents substrats associés à une épitaxie, telles que la température de réseau et la résistance thermique en considérant des structures TLM AlGaN/GaN. Pour la structure TLM, il y a uniquement deux contacts ohmiques. Comme il n’y a pas de contact Schottky, on s’affranchit du problème de la déplétion des électrons dans la barrière AlGaN. Nous pouvons ainsi analyser les performances thermiques des substrats.

### 4.3.1. Substrats massifs

Dans cette section, plusieurs substrats massifs sont étudiés, tels que : Si, GaN avec peu de dislocations de type “free standing”, SiC monocristallin et diamant monocristallin.

#### 4.3.3.1. Topologie des structures étudiées

La topologie des structures TLM AlGaN/GaN étudiées est montrée sur la figure 4.4. Les structures TLM sont réalisées sur des épitaxies similaires constituées d’une couche tampon en GaN de 1,8 µm d’épaisseur, d’une couche de GaN n.i.d. de 200 nm et enfin d’une couche barrière $Al_{0.25}Ga_{0.75}N$ de 22,5 nm. Ces structures sont épitaxiées sur des substrats Si, GaN avec peu de dislocations, SiC monocristallin et diamant monocristallin, de 525 µm d’épaisseur. Chaque structure TLM étudiée comporte deux contacts ohmiques séparés de 2 µm. Chaque contact ohmique a une largeur de 0,2 µm avec un dopage en dessous de $1\times10^{18}$ $cm^{-3}$.

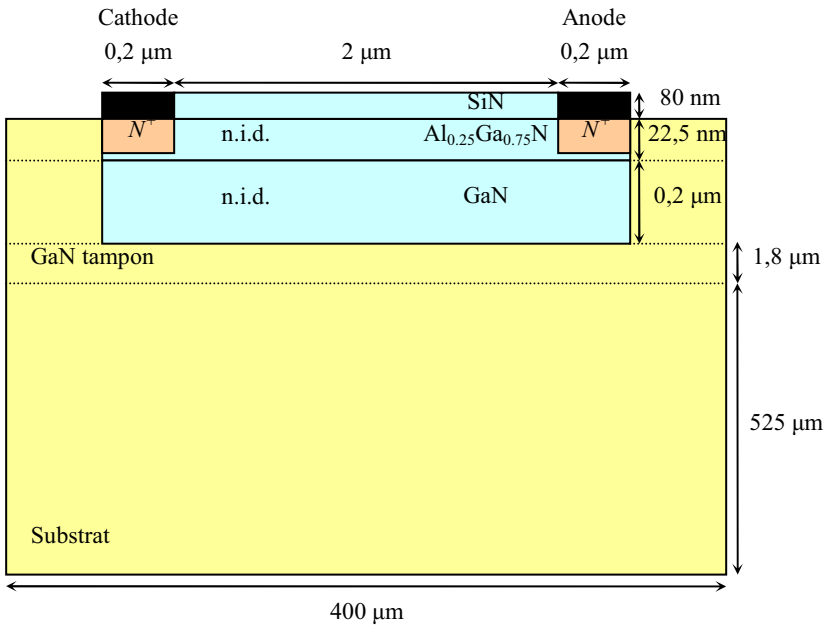



Figure 4.4. Topologie des structures TLM AlGaN/GaN étudiées sur substrats massifs.

Les conductivités thermiques des différents matériaux utilisées sont représentées sur la figure 4.5 et les valeurs à 300 K sont listées dans le tableau 4.1 [1][2][3][4][5].

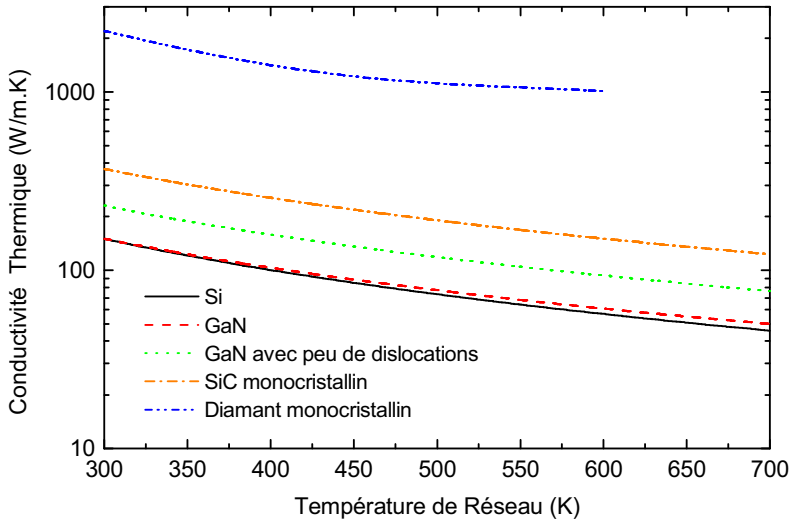



Figure 4.5. Conductivités thermiques en fonction de la température de réseau pour chaque matériau.

Tableau 4.1. Conductivités thermiques pour chaque matériau pour une température de réseau de 300 K.

| Matériau | $\kappa_L$ (W/m·K) |
|---|---|
| Silicium | 150 |
| GaN | 150 |
| GaN avec peu de dislocations | 230 |
| SiC monocristallin | 370 |
| Diamant monocristallin | 2400 |

Sur le tableau, on peut noter que le développement de substrats en GaN massif contenant peu de dislocations, améliore nettement la conductivité thermique qui peut atteindre 230 W/m·K à 300 K. De ce fait, les substrats en GaN deviennent d'excellents candidats pour la fabrication de HEMT AlGaN/GaN. De plus, le diamant monocristallin possède une excellente conductivité thermique de l'ordre de 2000 W/m·K à température ambiante (six fois meilleure que celle du SiC monocristallin) et devrait permettre d'améliorer les performances des transistors de puissance.

### 4.3.3.2. Caractéristiques électriques *I*(*V*)

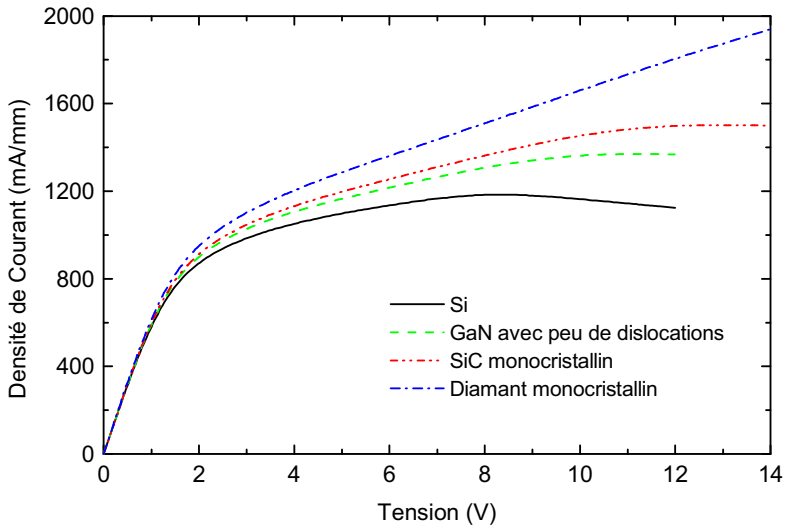



Figure 4.6. Caractéristiques *I*(*V*) pour les différents substrats.

Les caractéristiques *I*(*V*) pour les différents substrats sont montrées sur la figure 4.6. On peut constater que le substrat GaN avec peu de dislocations apporte une amélioration vis-à-vis du Si. La valeur maximale de la densité de courant passe de 1198 mA/mm à 1322 mA/mm, soit un gain de 10 %.

Quant au substrat SiC monocristallin, la densité de courant sature à 12 V, et la densité de courant maximale vaut 1506 mA/mm. En conclusion, le substrat avec une bonne conductivité thermique améliore nettement les comportements électriques.

De plus, la densité de courant obtenue avec le diamant monocristallin ne sature pas jusqu'à une tension appliquée de 14 V. Par rapport aux autres substrats, le composant sur le substrat diamant

monocristallin possède la densité de courant la plus importante.

#### 4.3.3.3. Évolution de la température de réseau maximale

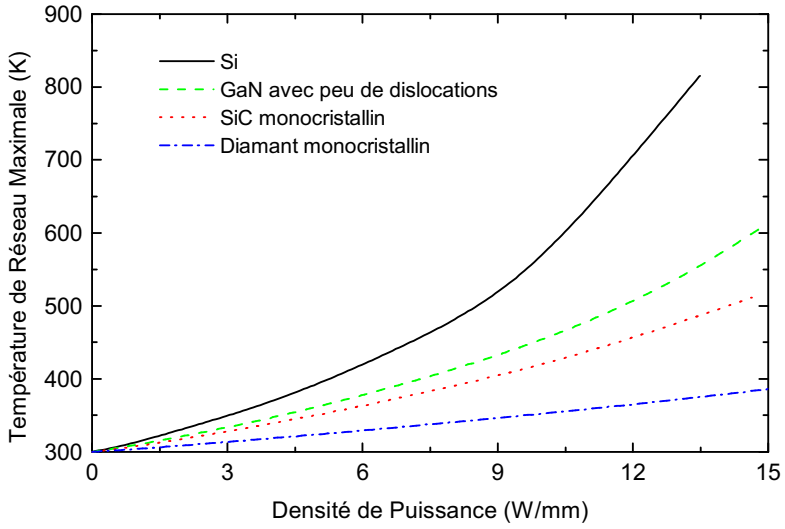



Figure 4.7. Évolution de la température de réseau maximale en fonction de la densité de puissance dissipée pour les différents substrats.

L'évolution de la température de réseau maximale en fonction de la densité de puissance dissipée pour les différents substrats massifs est montrée sur la figure 4.7. On peut constater que le composant sur substrat Si s'échauffe fortement due à une conductivité thermique modérée.

Le substrat SiC monocristallin possède une évolution de la température de réseau maximale similaire que celle obtenue avec le substrat GaN avec peu de dislocations, mais la valeur obtenue est plus faible. Pour une densité de puissance dissipée de 12 W/mm, la température de réseau maximale est égale à 460 K. C'est plus faible que celle obtenue avec un substrat GaN avec peu de dislocations (507 K).

On peut aussi noter que le composant sur substrat diamant monocristallin ne s'échauffe pratiquement pas. La température de réseau maximale est seulement de 386 K pour une densité de puissance égale à 15 W/mm.

#### 4.3.3.4. Évolution de la résistance thermique

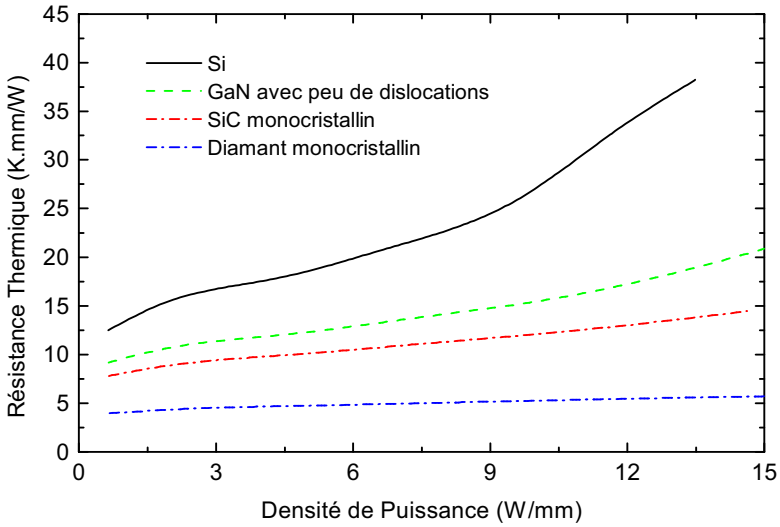



Figure 4.8. Évolution de la résistance thermique en fonction de la densité de puissance dissipée pour les différents substrats.

La figure 4.8 montre l'évolution de la résistance thermique en fonction de la densité de puissance dissipée pour les différents substrats. On peut constater que la résistance thermique augmente avec la densité de puissance. C'est logique puisque, quand la densité de puissance augmente, la température de réseau augmente.

L'évolution de la résistance thermique pour les différents substrats est très cohérente avec celle de la température de réseau maximale (Fig. 4.7). C'est-à-dire, le composant sur substrat diamant monocristallin possède de meilleurs comportements thermiques, et le substrat GaN avec peu de dislocations apporte une nette amélioration vis à vis du Si, mais toujours moins bon que le substrat SiC monocristallin, notamment aux fortes densités de puissance dissipée.

Les valeurs des résistances thermiques simulées et mesurées pour les différents substrats dans le cas d'une densité de puissance dissipée de 7,5 W/mm sont récapitulées dans le tableau 4.2.

Tableau 4.2. Résistance thermique pour les différents substrats dans le cas d'une densité de puissance dissipée de 7,5 W/mm. $R_{th1}$ et $R_{th2}$ sont les résistances thermiques déduites respectivement par la température de réseau maximale et moyenne dans la zone active.

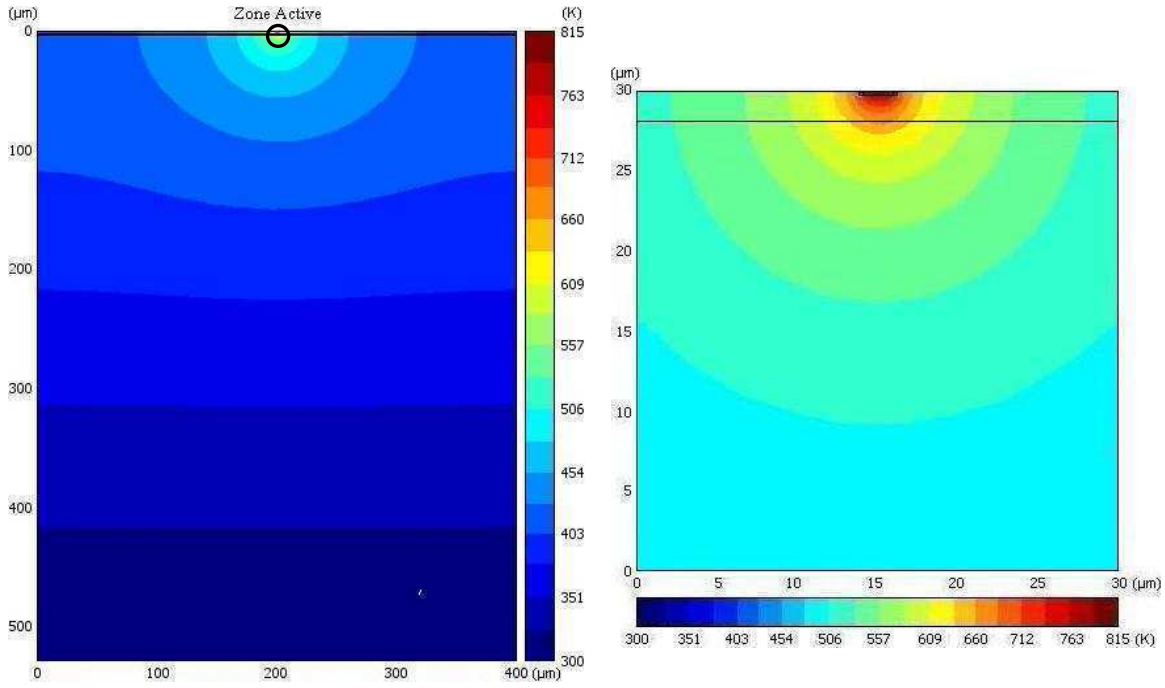
| Substrat | Densité de puissance dissipée (W/mm) | $R_{th1}$ (K·mm/W) simulation | $R_{th2}$ (K·mm/W) simulation | $R_{th}$ (K·mm/W) mesure |
|---|---|---|---|---|
| Si | 7,5 | 21,8 | 20,8 | 21,2 |
| GaN avec peu de dislocation | 7,5 | 13,9 | 13,2 | |
| SiC monocristallin | 7,5 | 11 | 10 | 9,4 |
| Diamant monocristallin | 7,5 | 5 | 4,1 | |

Les mesures basées sur la méthode de coïncidence électrique ont été effectuées sur les épitaxies similaires sur différents substrats. Pour la comparaison entre la théorie et l'expérimentation, deux résistances thermiques ont été déduites à partir de notre modèle physico-thermique, basées respectivement sur la température de réseau soit maximale soit moyenne dans la zone active.

Les valeurs de simulation apparaissent en accord avec les résultats expérimentaux et on peut noter que les valeurs $R_{th2}$ sont plus proches que celles déduites par la méthode de coïncidence électrique [6]. Parce que dans ce type de mesure, la résistance thermique est estimée à partir d'une température de réseau moyenne dans la zone active.

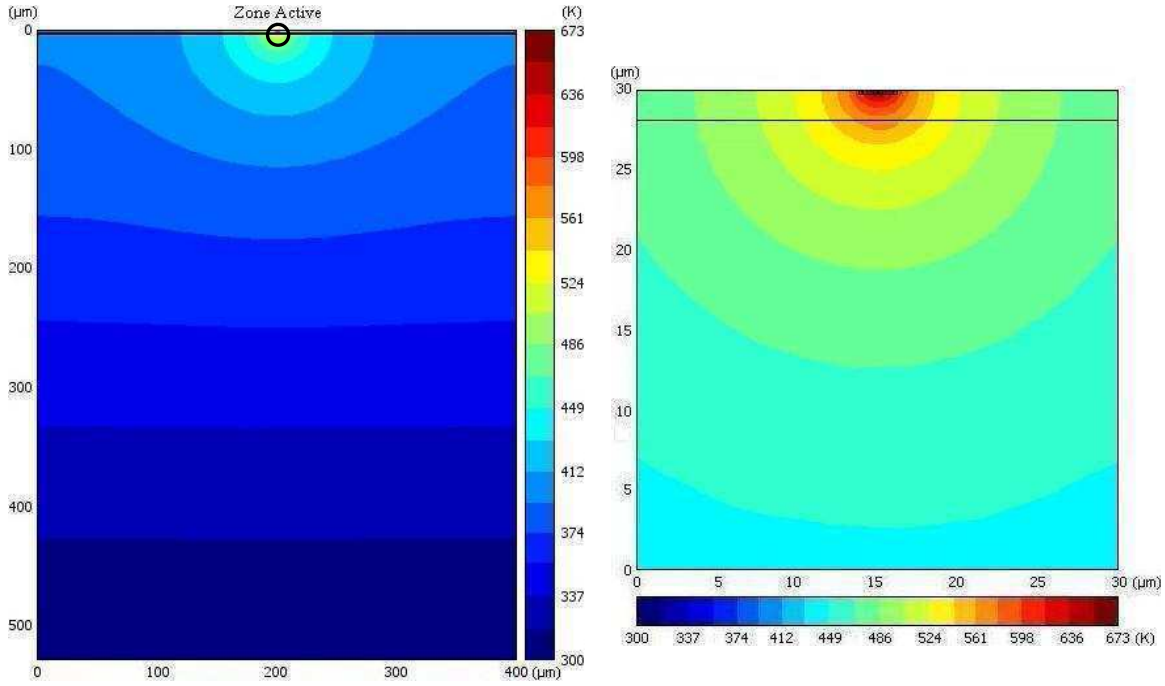
### 4.3.3.5. Distribution de la température de réseau

Pour mieux connaître la distribution de la température de réseau, nous avons tracé les cartes 2D (Figures 4.9-4.12) de la température de réseau pour ces différents substrats pour une tension appliquée de 12 V montrant ainsi un maximum dans la zone active.



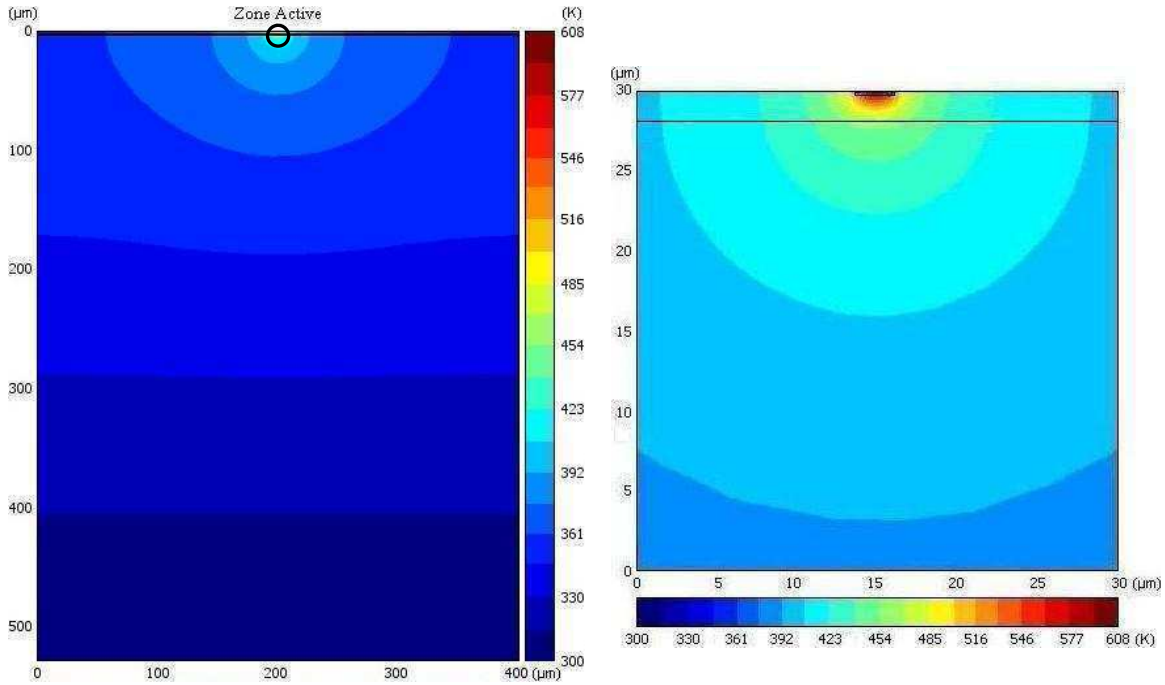

**(a)** **(b)**

Figure 4.9. Cartes 2D de la température de réseau pour une tension appliquée de 12 V avec un substrat en Si : (a) le composant entier et (b) zoom proche de la zone active.



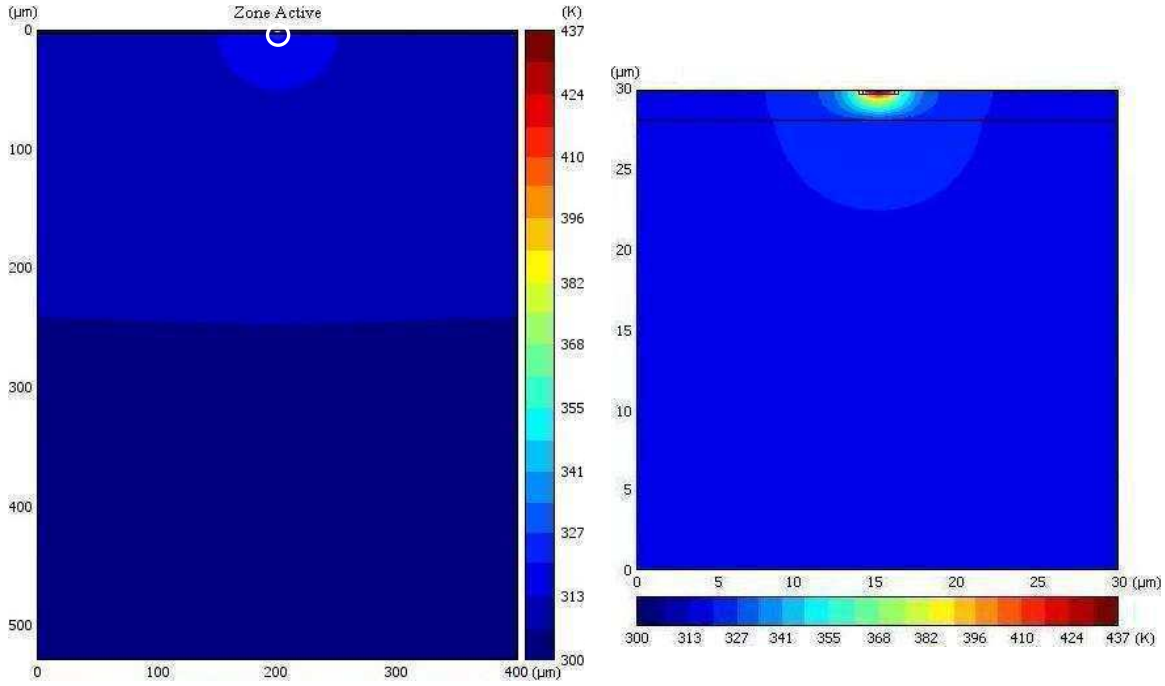

**(a)** **(b)**

Figure 4.10. Cartes 2D de la température de réseau pour une tension appliquée de 12 V avec un substrat en GaN avec peu de dislocations : (a) le composant entier et (b) zoom proche de la zone active.




**(a)** **(b)**

Figure 4.11. Cartes 2D de la température de réseau pour une tension appliquée de 12 V avec un substrat en SiC monocristallin : (a) le composant entier et (b) zoom proche de la zone active.




**(a)** **(b)**

Figure 4.12. Cartes 2D de la température de réseau pour une tension appliquée de 12 V avec un substrat en diamant monocristallin : (a) le composant entier et (b) zoom proche de la zone active.

On peut remarquer que proche de la zone active, les formes des isothermes sont des cercles, puis elles évaluent linéairement quand elles rapprochent le socle du composant, parce que la température de celui-ci est fixée. La température de réseau diminue d'une manière très rapide quand on va de la zone active vers le bas du substrat. On peut aussi voir que parmi les quatre substrats, le composant sur substrat Si s'échauffe très fortement. En revanche, le composant sur diamant monocristallin ne s'échauffe pratiquement pas avec une zone de température élevée très concentrée autour de la zone active dû au fait que le diamant monocristallin possède les meilleures performances thermiques.

#### 4.3.3.6. Distributions des quatre grandeurs électriques et thermiques dans la zone active

Pour mieux comprendre les performances électriques et thermiques dans la zone active, nous montrons les cartes des différentes grandeurs électriques et thermiques (potentiel, température électronique, terme source de chaleur et température de réseau) pour une structure TLM AlGaN/GaN sur SiC monocristallin pour une tension appliquée de 12 V sur la figure 4.13.

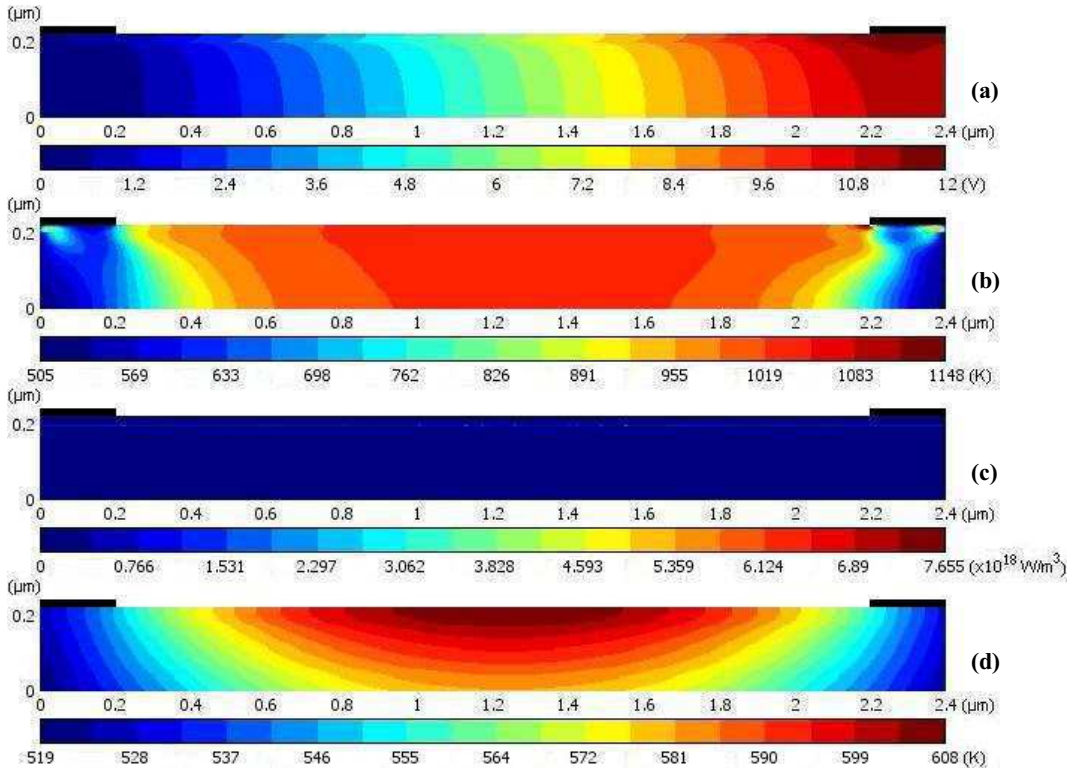



Figure 4.13. Cartes 2D des quatre grandeurs électriques et thermiques dans la zone active pour une structure TLM AlGaN/GaN sur SiC monocristallin pour une tension appliquée de 12 V : (a) potentiel, (b) température électronique, (c) terme source de chaleur et (d) température de réseau.

La figure 4.13 (a) montre la distribution du potentiel dans la zone active. On peut noter que le gradient de potentiel est à peu près constant dans toute la zone active dans la direction longitudinale, par contre il présente une discontinuité au niveau de l'interface AlGaN/GaN suivant la direction transversale principalement en raison de la charge piézoélectrique. La distribution de la température électronique est presque symétrique entre les deux plots de contacts ohmiques (Fig. 4.13 (b)). Sur la figure 4.13 (c), on observe que le terme source de chaleur est homogène entre les deux plots de contacts ohmiques, et une augmentation significative du terme source *H* apparaît au niveau de l'interface AlGaN/GaN. Cette augmentation est liée à la forte densité d'électrons à cet endroit. Le maximum de la température de réseau est situé au centre des deux contacts ohmiques proche de la surface (Fig. 4.13 (d)). Les comportements des distributions de ces grandeurs électriques et thermiques dans la zone active pour les structures TLM AlGaN/GaN sur les autres substrats sont très voisins.

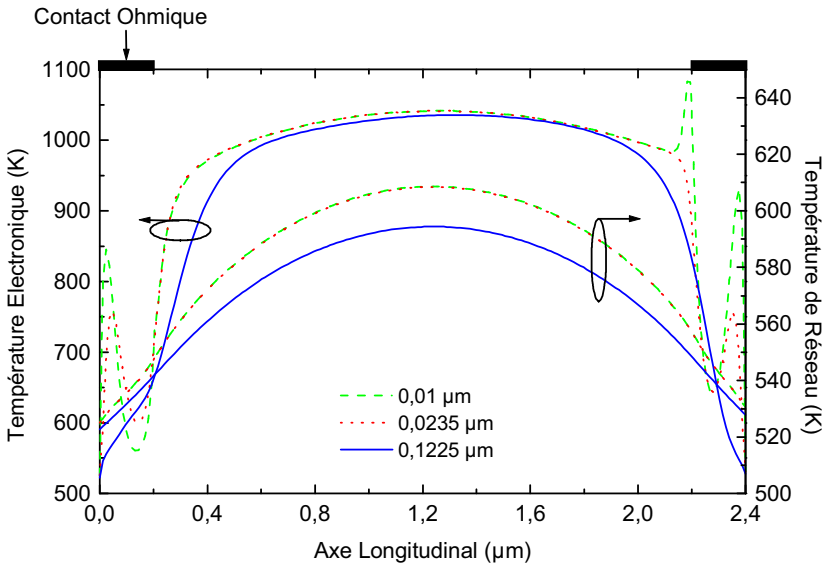



Figure 4.14. Profils de température électronique et de température de réseau dans la zone active pour trois profondeurs au dessous de la surface pour la structure TLM AlGaN/GaN sur SiC monocristallin pour une tension appliquée de 12 V.

La figure 4.14 montre les distributions longitudinales de la température électronique et de la température de réseau entre les contacts ohmiques pour la structure TLM AlGaN/GaN sur SiC monocristallin pour une tension appliquée de 12 V. Il y a deux groupes de courbes (températures électroniques et températures de réseau), et les trois courbes de chaque ensemble correspondent à trois profondeurs différentes au dessous de la surface :

- 0,01 µm ~ au milieu de la barrière AlGaN.
- 0,0235 µm ~ dans le puits quantique.
- 0,1225 µm ~ au milieu de la couche de GaN.

Il est important de noter que la température électronique est pratiquement constante entre les deux contacts ohmiques, elle est de l'ordre de 1040 K pour les trois profondeurs. Il y a quelques pics de la température électronique dus aux forts champs électriques autour des contacts ohmiques. Concernant la température de réseau, la valeur maximale située au milieu de la zone active est de 608 K près de la surface. Cette valeur diminue jusqu'à 594 K à une profondeur de 0,1225 µm, et la température de réseau moyenne dans la zone active est égale 572 K.

### 4.3.3.7. Effet de la température de socle

Dans cette partie, nous étudions le substrat SiC monocristallin avec une température de socle du

composant de 50 °C (soit 323 K), ce qui correspond à une valeur moyenne rencontrée en pratique. Nous avons voulu voir en quoi ce choix influence le comportement thermique du composant.

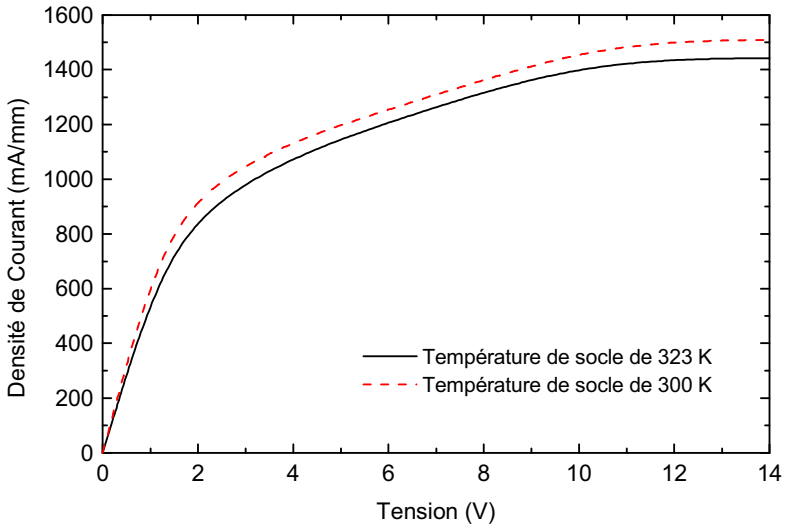



Figure 4.15. Caractéristiques $I(V)$ pour le substrat SiC monocristallin avec différentes températures de socle.

Les caractéristiques $I(V)$ pour les deux températures de socle différentes (Fig. 4.15) montrent que la densité de courant obtenue avec la température de socle de 323 K est plus faible que celle obtenue avec la température de socle égale à la température ambiante. Une température de réseau globalement plus élevée entraîne une dégradation plus importante des propriétés de transport et la densité de courant est donc plus faible.

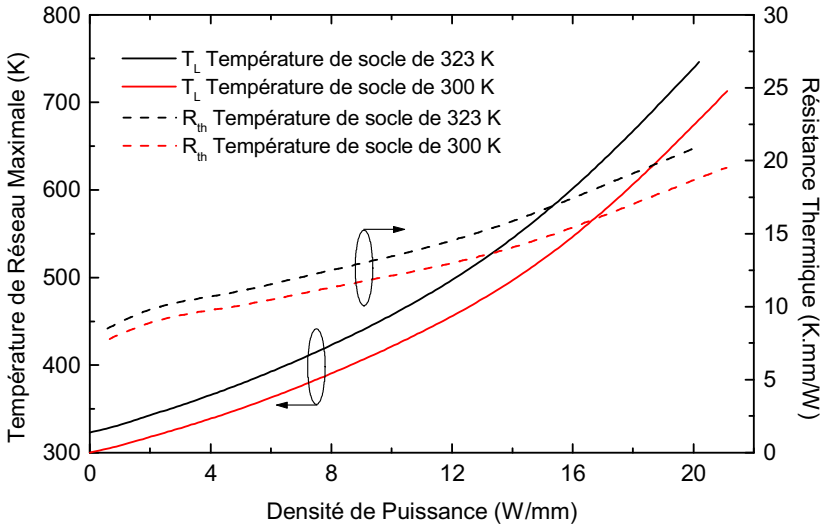



Figure 4.16. Évolutions de la température de réseau maximale et de la résistance thermique en fonction de la

densité de puissance dissipée pour le substrat SiC monocristallin avec différentes températures de socle.

La figure 4.16 montre les évolutions de la température de réseau maximale et de la résistance thermique en fonction de la densité de puissance dissipée avec les deux températures de socle différentes. On peut constater que l'augmentation de la température de socle dégrade les performances thermiques du composant, et cette dégradation est de plus en plus importante lorsque la densité de puissance dissipée augmente.

La figure 4.17 montre les distributions longitudinales de la température électronique et de la température de réseau entre les contacts ohmiques pour la structure TLM AlGaN/GaN sur SiC monocristallin avec une température de socle de 323 K pour une tension appliquée de 12 V. Il y a deux groupes de courbes (températures électroniques et températures de réseau), et les trois courbes de chaque ensemble correspondent à trois profondeurs différentes au dessous de la surface, sont déterminées au même endroit que pour la figure 4.14. La température électronique montrée sur la figure 4.17 est pratiquement constante entre les deux contacts ohmiques, elle est de l'ordre de 1050 K pour les trois profondeurs, et la température de réseau maximale située au milieu de la zone active est de 643 K près de la surface. Cette valeur diminue jusqu'à 628 K à une profondeur de 0,1225 µm.

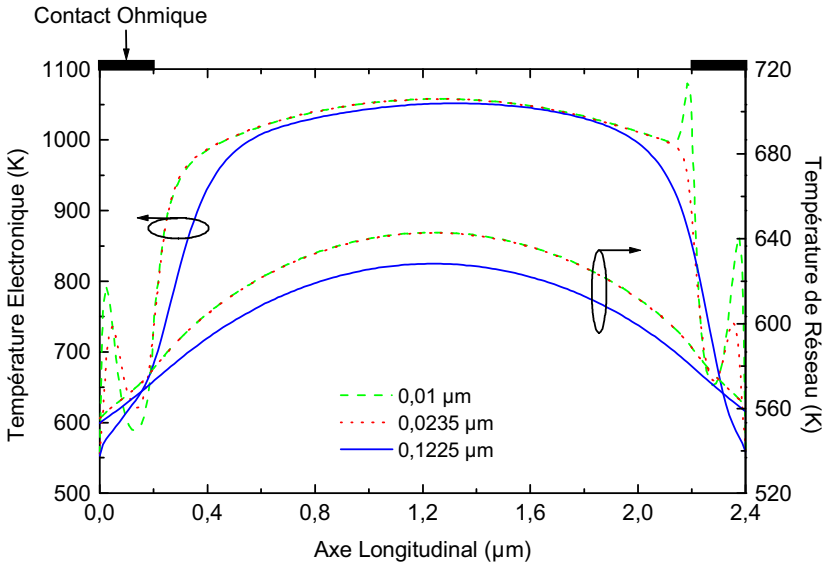



Figure 4.17. Profils de température électronique et de température de réseau dans la zone active pour trois profondeurs au dessous de la surface pour la structure TLM AlGaN/GaN sur SiC monocristallin avec une température de socle de 323 K pour une tension appliquée de 12 V.

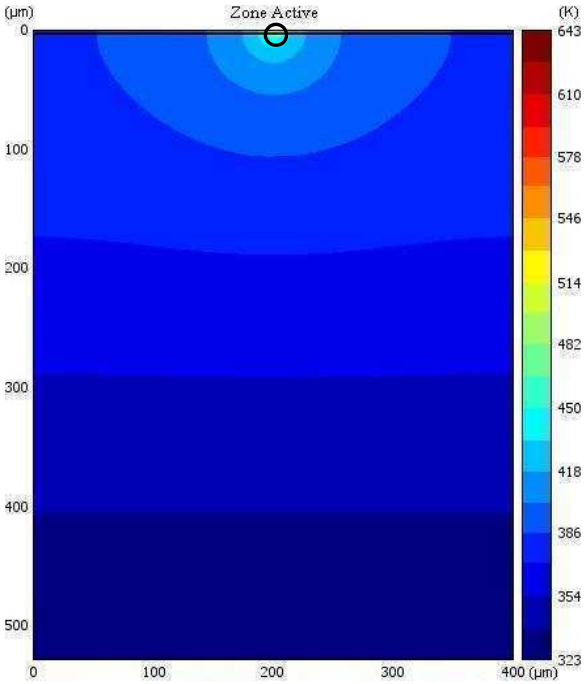



Figure 4.18. Carte 2D de la température de réseau pour une tension appliquée de 12 V avec un substrat en SiC monocristallin. La température de socle est fixée à 323 K.

Enfin, la distribution de la température de réseau dans le composant entier est représentée sur la figure 4.18. On peut noter que la température de réseau maximale est de 643 K avec une température de socle de 323 K.

## 4.3.2. Substrats composites

### 4.3.2.1. Topologie des structures étudiées

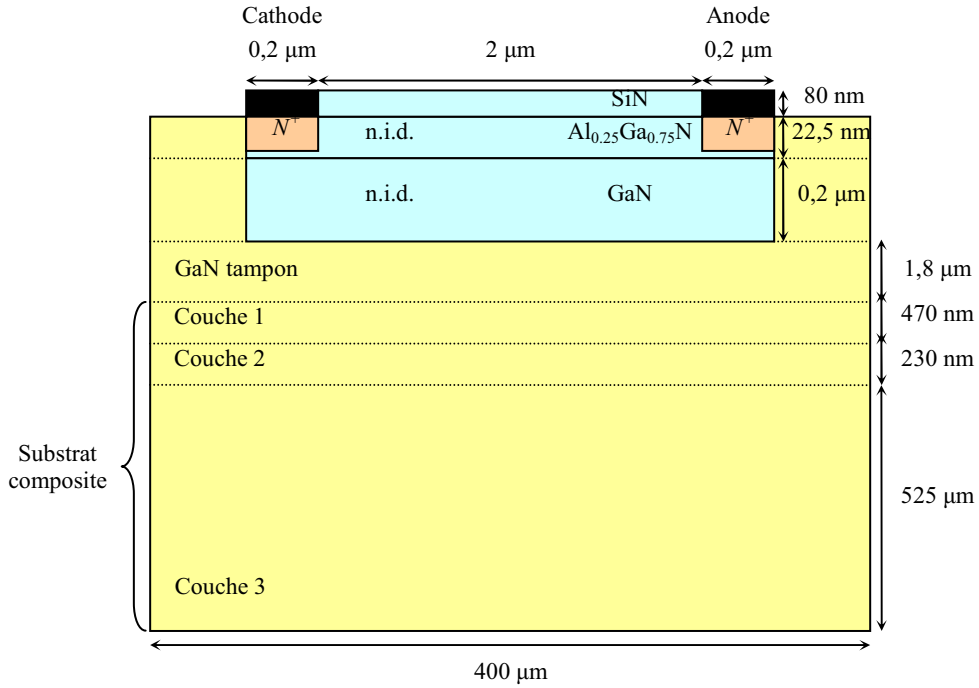



Figure 4.19. Topologie des structures TLM AlGaN/GaN étudiées sur substrats composites.

La figure 4.19 montre la topologie des structures TLM AlGaN/GaN étudiées sur substrats composites. Cette topologie d'épitaxie est une épitaxie classique qui est fabriquée par la société PICOGIGA. Sauf le substrat, l'épitaxie des structures est identique au cas sur les substrats massifs. Le substrat composite se décompose en trois couches différentes : une couche ayant bon accord de maille avec le GaN (couche 1), une couche fine d'oxyde (couche 2) et une couche avec bonne conductivité thermique (couche 3). Quatre substrats différents sont étudiés : SopSiC (Si/$SiO_2$/poly-SiC), SiCopSiC (mono-SiC/$SiO_2$/poly-SiC), GaNopSiC (GaN/$SiO_2$/poly-SiC) et Sopdiamant (Si/$SiO_2$/poly-diamant).

Les conductivités thermiques des différents matériaux à 300 K utilisées dans cette section sont récapitulées dans le tableau 4.3 [7][8].

Tableau 4.3. Conductivités thermiques pour chaque matériau pour une température de réseau de 300 K.

| Matériau | $\kappa_L$ (W/m·K) |
|---|---|
| Silicium | 150 |
| GaN | 150 |
| GaN avec peu de dislocations | 230 |
| SiC monocristallin | 370 |
| SiC polycristallin | 300 |
| $SiO_2$ | 1.4 |
| Diamant polycristallin | 2200 |

### 4.3.2.2. Caractéristiques électriques $I(V)$

Les caractéristiques $I(V)$ pour les six substrats différents sont montrées sur la figure 4.20.

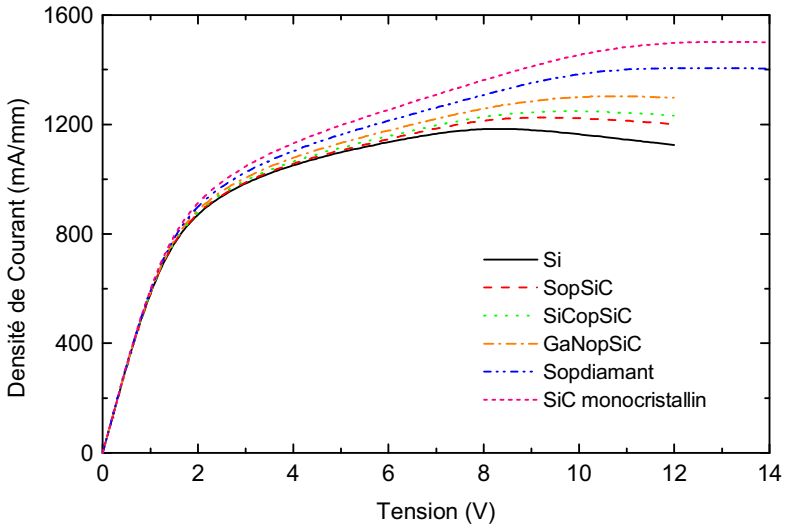



Figure 4.20. Caractéristiques $I(V)$ thermiques pour les différents substrats.

On peut constater que les densités de courant obtenues avec les substrats SopSiC et Si, sont identiques pour une polarisation inférieure à 6 V. Cependant, quand la tension appliquée continue à augmenter, la densité de courant avec un substrat SopSiC devient plus grande que celle obtenue avec un substrat Si. À ce point, l'influence de la bonne conductivité thermique du SiC polycristallin émerge. Par contre, par rapport au substrat SiC monocristallin, la densité de courant avec un substrat SopSiC est beaucoup plus faible.

La densité de courant avec un substrat SiCopSiC est un peu plus importante que celle obtenue avec un substrat SopSiC, mais elle est toujours beaucoup plus faible que celle obtenue avec un substrat SiC monocristallin. Pour le substrat SiCopSiC, le remplacement du matériau Si par le matériau SiC monocristallin n'améliore que très légèrement le courant. Comme le coût du SiC monocristallin est beaucoup plus élevé que celui du Si, il semble que d'un point de vue thermique, ce type de substrat composite n'apporte pas, en terme de rapport gain de performances prix, d'amélioration notable, sauf éventuellement pour les fortes densités de puissance.

La densité de courant obtenue avec un substrat GaNopSiC est plus élevée que celles obtenues avec des substrats SopSiC et SiCopSiC. La densité de courant sature pour une tension appliquée de 10 V, qui est

aussi plus élevée que celles pour le substrat SopSiC (8 V).

Quant au substrat Sopdiamant, la densité de courant sature pour une tension appliquée de 12 V contre 8 V pour le substrat SopSiC, et 10 V pour les substrats SiCopSiC et GaNopSiC. Parmi ces substrats, la valeur maximale de la densité de courant est la plus proche que celle obtenue avec un substrat SiC monocristallin.

### 4.3.2.3. Évolution de la température de réseau maximale

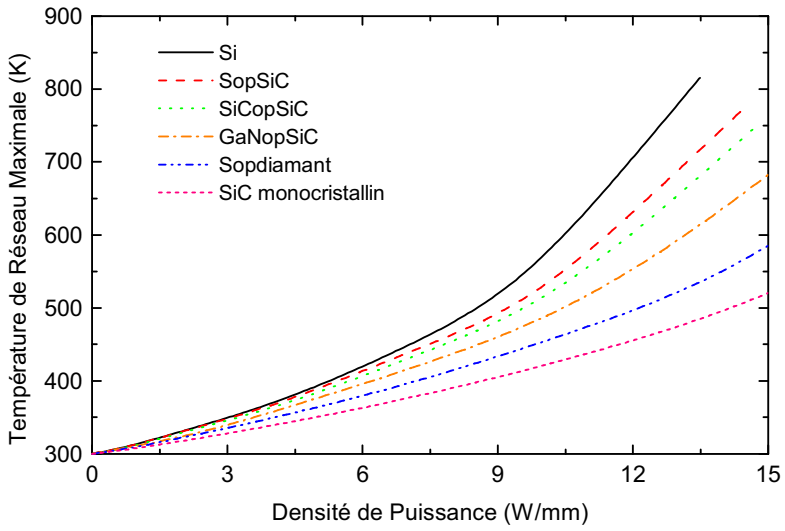



Figure 4.21. Évolution de la température de réseau maximale en fonction de la densité de puissance dissipée pour les différents substrats.

L'évolution de la température de réseau maximale en fonction de la densité de puissance dissipée pour les différents substrats massifs est montrée sur la figure 4.21. On peut constater que la température de réseau maximale obtenue avec un substrat SopSiC est plus faible que celle obtenue avec un substrat Si, mais largement plus élevée que celle obtenue avec un substrat SiC monocristallin.

Quant au substrat SiCopSiC, il apporte une amélioration thermique visible quand la densité de puissance dissipée est supérieure à 6 V. Aux faibles densités de puissance dissipée, cette amélioration est faible.

Le substrat GaNopSiC présente une évolution de la température de réseau maximale plus basse que celle obtenue avec un substrat SopSiC liée au fait que la couche de Si est remplacée par une couche de GaN ayant une meilleure conductivité thermique.

Le substrat Sopdiamant apporte une amélioration thermique très marquée, due à une très bonne conductivité thermique du diamant polycristallin.

### 4.3.2.4. Évolution de la résistance thermique

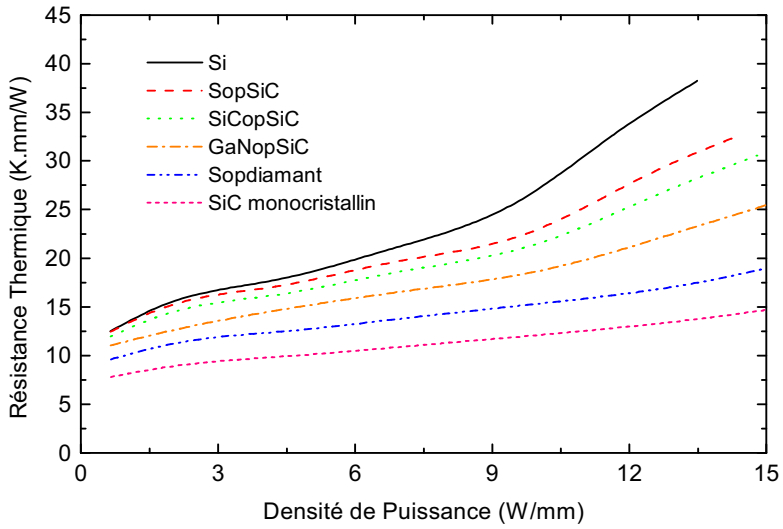



Figure 4.22. Évolution de la résistance thermique en fonction de la densité de puissance dissipée pour les différents substrats.

L'évolution de la résistance thermique en fonction de la densité de puissance dissipée pour les différents substrats, est montrée sur la figure 4.22. Cette évolution est en accord avec l'évolution de la température (Fig. 4.21), à savoir que plus la résistance thermique est faible, plus l'échauffement est limité. Par conséquent, on dégrade moins les propriétés de transport et la densité de courant reste plus élevée (Fig. 4.20). Les valeurs des résistances thermiques simulées et mesurées pour ces substrats composites sont récapitulées dans le tableau 4.4.

Tableau 4.4. Résistance thermique pour les différents substrats pour différentes densités de puissance dissipée. $R_{th1}$ et $R_{th2}$ sont les résistances thermiques déduites respectivement par la température de réseau maximale et moyenne dans la zone active.

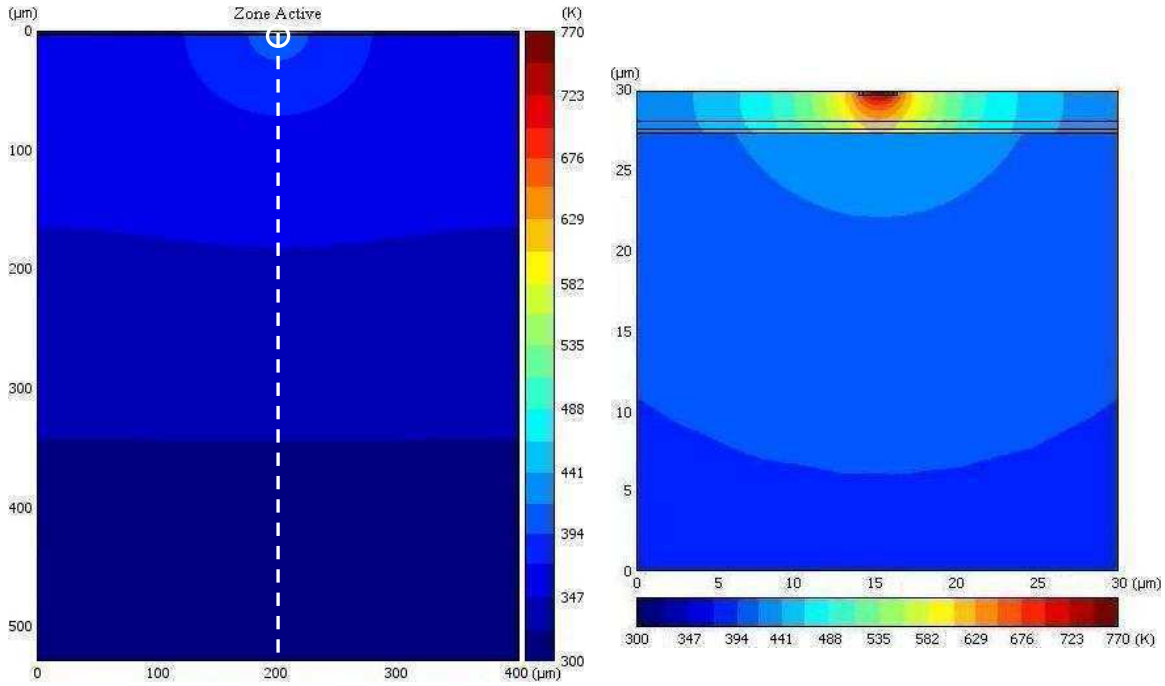
| Substrat | Densité de puissance dissipée (W/mm) | $R_{th1}$ (K·mm/W) simulation | $R_{th2}$ (K·mm/W) simulation | $R_{th}$ (K·mm/W) mesure |
|---|---|---|---|---|
| SopSiC | 7,5 | 20,2 | 18,9 | 18,1 |
| SiCopSiC | 5 | 16,7 | 15,8 | 15,9 |
| GaNopSiC | 7,5 | 16,8 | 15,7 | |
| Sopdiamant | 7,5 | 14 | 13,2 | |

Comme décrit dans la section précédente, deux résistances thermiques ont été déduites respectivement à partir de la température de réseau maximale ($R_{th1}$) et moyenne ($R_{th2}$) dans la zone active dans le cas d'une densité de puissance de 7,5 W/mm.

Il est nécessaire de noter ici que pour le substrat SiCopSiC, la mesure a été faite pour une densité de puissance de 5 W/mm due à l'effet des pièges. Les valeurs de simulation présentent un bon accord avec les résultats expérimentaux.

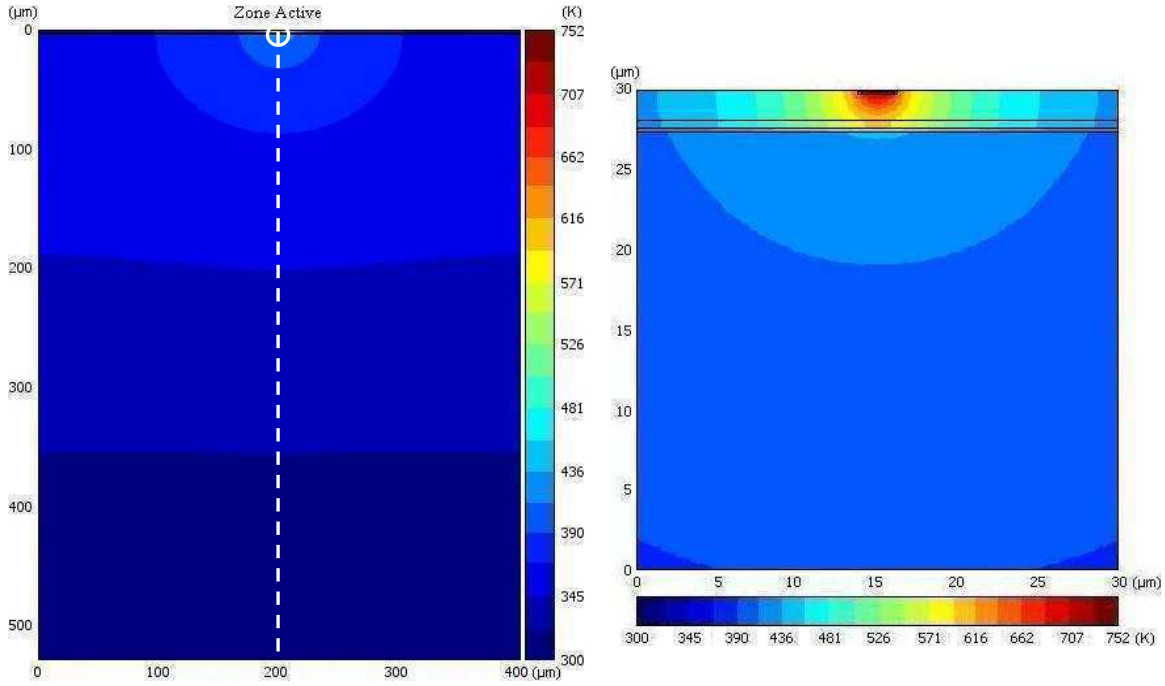
### 4.3.2.5. Distribution de la température de réseau

Les distributions de la température de réseau dans le composant entier ainsi des zooms proches de la zone active pour les différents substrats, sont montrés sur les figures 4.23-4.26. La tension appliquée sur l'anode est de 12 V.



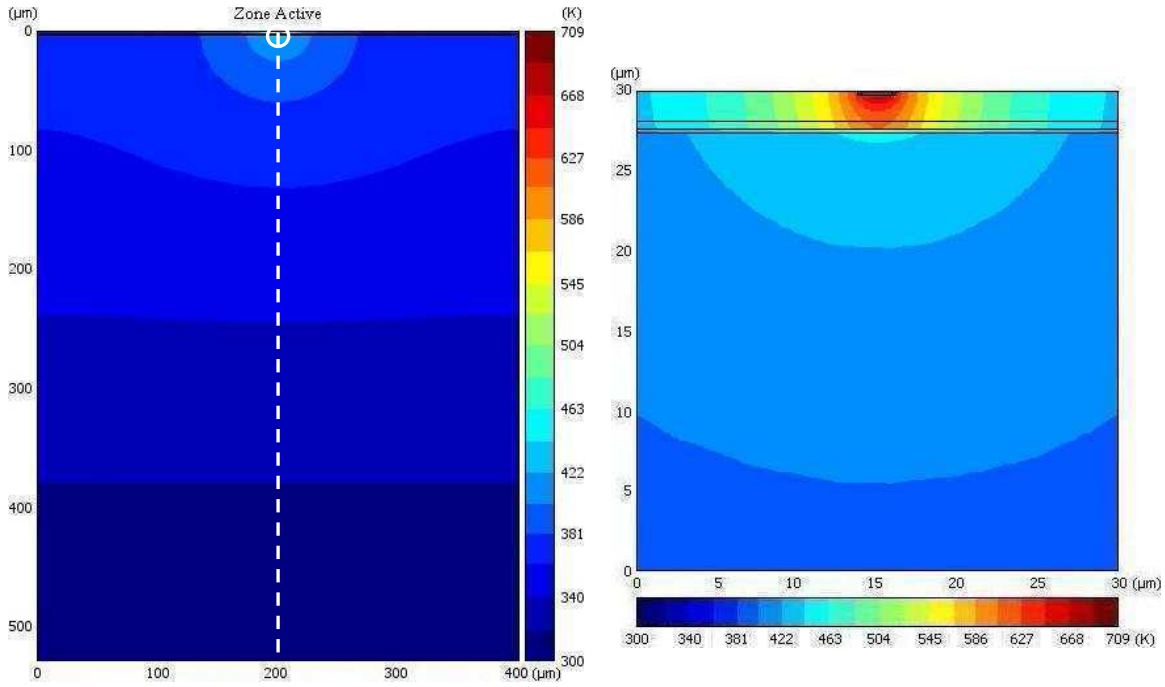

**(a)** **(b)**

Figure 4.23. Cartes 2D de la température de réseau pour une tension appliquée de 12 V avec un substrat en SopSiC : (a) le composant entier et (b) zoom proche de la zone active.



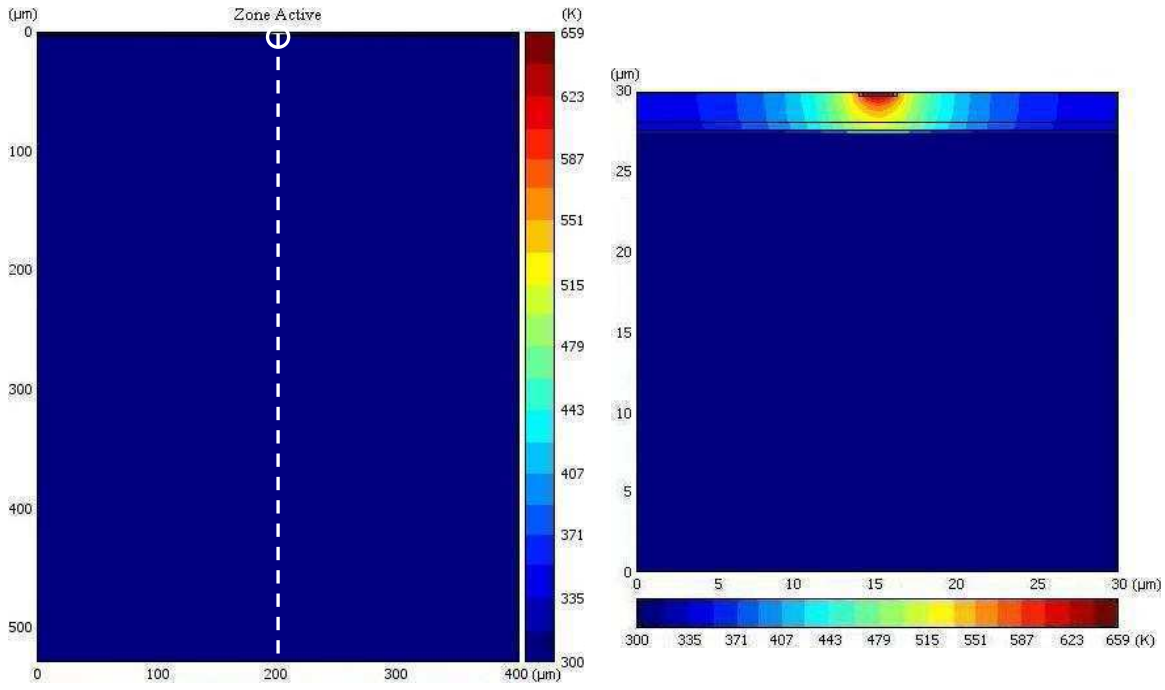

**(a)** **(b)**

Figure 4.24. Cartes 2D de la température de réseau pour une tension appliquée de 12 V avec un substrat en SiCopSiC : (a) le composant entier et (b) zoom proche de la zone active.




**(a)** **(b)**

Figure 4.25. Cartes 2D de la température de réseau pour une tension appliquée de 12 V avec un substrat en GaNopSiC : (a) le composant entier et (b) zoom proche de la zone active.




**(a)** **(b)**

Figure 4.26. Cartes 2D de la température de réseau pour une tension appliquée de 12 V avec un substrat en Sopdiamant : (a) le composant entier et (b) zoom proche de la zone active.

Sur les figures, on voir qu'il y a une grande variation au niveau de la couche de $SiO_2$. Donc, pour mieux comprendre l'impact de la couche $SiO_2$ sur les effets thermiques, nous avons tracé l'évolution de la température de réseau en fonction de la profondeur pour les différents substrats composites (Fig. 4.27). Les positions sont indiquées sur les figures 4.23-4.26 avec les pointillés en blanc. L'insert de la figure 4.27 est un zoom pour le domaine de 0 à 10 µm.

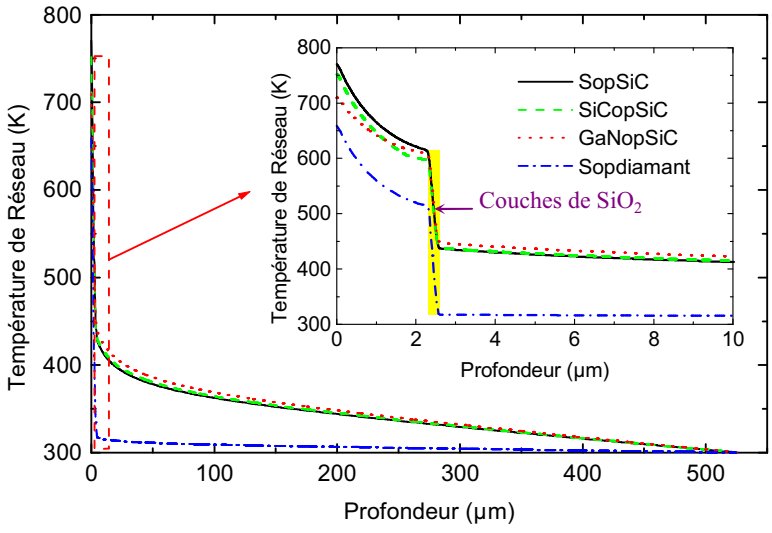



Figure 4.27. Évolution de la température de réseau en fonction de la profondeur pour les différents substrats composites pour une tension appliquée de 12 V. L'insert est un zoom pour le domaine de 0 à 10 µm.

Sur l'insert de la figure 4.27, une diminution importante de la température de réseau apparaissant au niveau de la couche de $SiO_2$ peut être observée. Cette forte variation de la température est due à la mauvaise conductivité thermique du $SiO_2$. Cependant, cette couche est assez fine pour que les performances thermiques du substrat SopSiC soient malgré tout meilleures que celles du Si grâce à la bonne conductivité thermique du SiC polycristallin. Par rapport aux autre substrats composites, la température de réseau obtenue avec un substrat Sopdiamant à l'interface $SiO_2$/poly-diamant évolue plus fortement à cause de la très bonne conductivité thermique du diamant polycristallin.

### 4.3.2.6. Distributions des quatre grandeurs électriques et thermiques dans la zone active

Les cartes des différentes grandeurs électriques et thermiques (potentiel, température électronique, terme source de chaleur et température de réseau) pour une structure TLM AlGaN/GaN sur SopSiC pour une tension appliquée de 12 V sont montrées sur la figure 4.28.

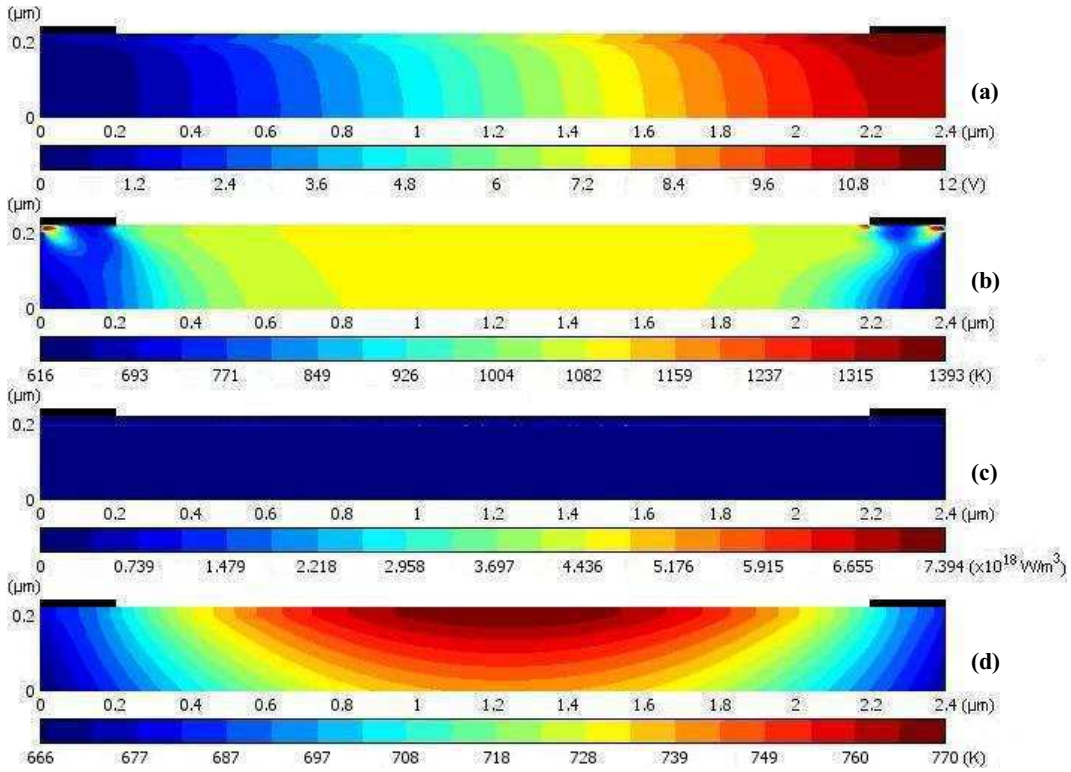



Figure 4.28. Cartes 2D des quatre grandeurs électriques et thermiques dans la zone active pour une structure TLM AlGaN/GaN sur SopSiC pour une tension appliquée de 12 V : (a) potentiel, (b) température électronique, (c) terme source de chaleur et (d) température de réseau.

Par rapport au substrat SiC monocristallin (Fig. 4.13), la température électronique pour le SopSiC est plus élevée. En raison de la mauvaise conductivité thermique du $SiO_2$, la température de réseau pour le SopSiC est plus faible que celle pour le SiC monocristallin. Les maxima termes sources pour les deux substrats sont du même ordre de grandeur, parce que les charges piézoélectriques sont presque identiques dans les deux cas.

La figure 4.29 montre les distributions longitudinales de la température électronique et de la température de réseau entre les deux contacts ohmiques pour la structure AlGaN/GaN sur SopSiC pour une tension appliquée de 12 V. Il y a deux groupes de courbes (températures électroniques et températures de réseau), et les trois courbes de chaque ensemble correspondent à trois profondeurs différentes au dessous de la surface (0,01 µm, 0,0235 µm et 0,1225 µm). Les températures électroniques entre les deux contacts pour les trois profondeurs sont presque identiques et constantes de l'ordre de 1100 K. Concernant la température de réseau, la valeur maximale située au milieu de la zone active est d'environ 770 K près de la surface.

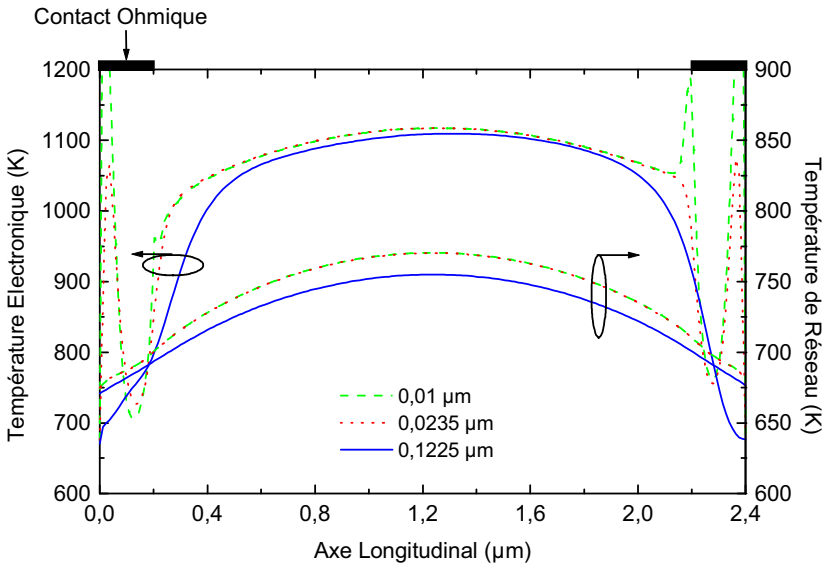



Figure 4.29. Profils de température électronique et de température de réseau dans la zone active pour trois profondeurs au dessous de la surface pour la structure TLM AlGaN/GaN sur SopSiC pour une tension appliquée de 12 V.

### 4.3.2.7. Effet de l'épaisseur de la couche de Si pour le substrat SopSiC

Dans cette partie, nous étudions l'influence de l'épaisseur de la couche de Si pour le substrat SopSiC. Trois épaisseurs de Si ont été étudiées : 470 nm, 2 µm et 5µm.

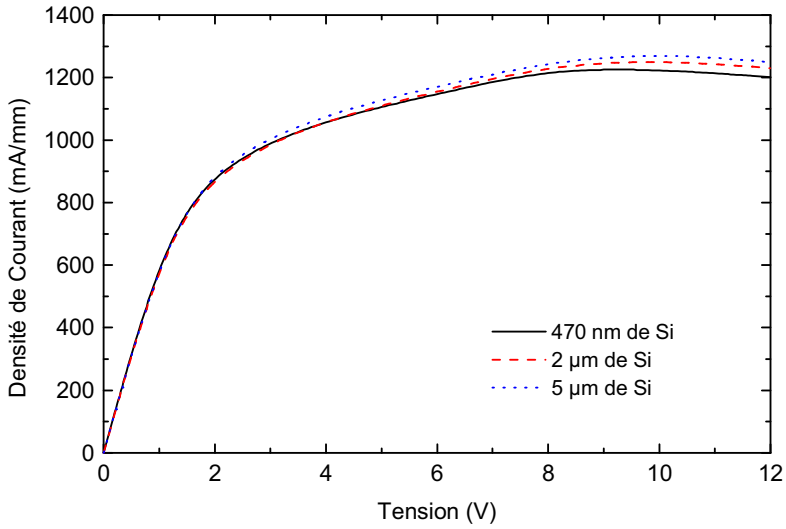



Figure 4.30. Caractéristiques *I*(*V*) pour les substrats SopSiC avec différentes épaisseurs de Si.

La figure 4.30 montre que le substrat SopSiC avec une couche de Si plus épaisse possède une plus grande densité de courant, mais la différence n'est pas très marquée.

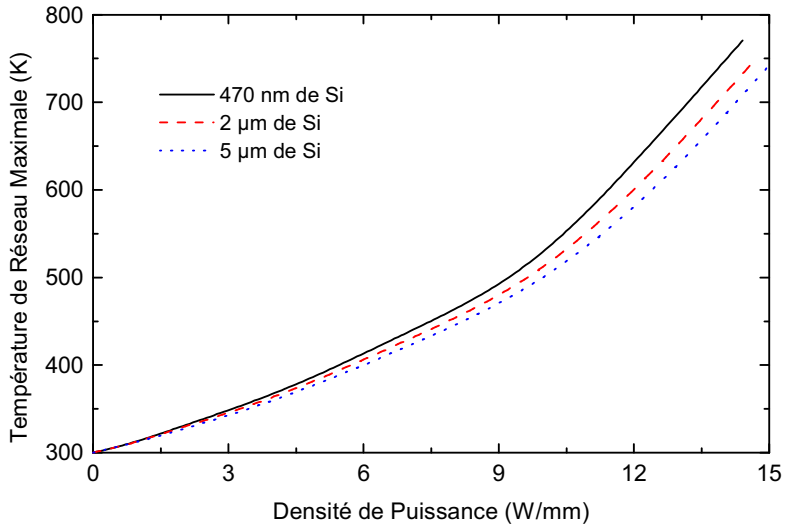



Figure 4.31. Évolution de la température de réseau maximale en fonction de la densité de puissance dissipée pour les substrats SopSiC avec différentes épaisseurs de Si.

# CHAPITRE V

# ANALYSES PHYSICO-THERMIQUES DES DIODES GUNN DE LA FILIÈRE NITRURE DE GALLIUM

# 5.1 Introduction

Nous avons déjà présenté les principes de fonctionnement et les avantages des diodes Gunn de la filière nitrure de gallium dans le premier chapitre. Dans ce chapitre, nous allons analyser les performances électriques et thermiques grâce à notre modèle physico-thermique.

Concernant la topologie des diodes Gunn analysées, nous étudions deux longueurs (~ distance entre deux contacts ohmiques) différentes, à savoir 0,3 µm et 2 µm, afin de mettre en évidence des fréquences d'oscillation différentes. En particulier, les études sur la diode Gunn de 0,3 µm, ont montré que l'on obtient une fréquence d'oscillation de 750 GHz, ce qui lui permet d'être utilisée dans les applications THz [1][2]. Sachant que la distribution de la température de réseau est définie par le terme de source de chaleur $H$ dans la zone active, celui-ci étant lié à la densité de puissance dissipée, nous faisons varier l'épaisseur de la couche de GaN afin de modifier la densité de puissance dissipée, et par conséquent d'analyser la distribution de la température de réseau. Cette étude permet de connaître l'impact des effets thermiques sur les performances électriques des diodes Gunn GaN.

La modélisation complète consiste en deux parties :

- Partie électrique. Pour la partie électrique, deux études ont été effectuées :
  - Étude statique, dans laquelle nous étudions les caractéristiques $I(V)$ et les évolutions des trois grandeurs physiques telles que la densité d'électrons, la température électronique et la vitesse de dérive des électrons pendant une période des oscillations pour une tension de polarisation continue.
  - Étude en microondes, dans laquelle nous superposons à la tension de polarisation continue un signal sinusoïdal. Nous calculons la résistance dynamique, la densité de puissance émise et le rendement de conversion pour différentes amplitudes de la tension microonde. Parmi les résultats obtenus, nous avons essayé d'optimiser la topologie des diodes Gunn, en effectuant un compromis entre les différentes contraintes.
- Partie thermique. Dans cette partie, nous étudions la distribution de la température de réseau dans le composant entier incluant le substrat, et nous en déduisons la résistance thermique pour différentes tensions de polarisation.

## 5.2 Diode Gunn avec une distance entre les deux contacts ohmiques de 2 µm

Dans cette section, nous présentons les résultats obtenus pour une distance entre les deux contacts ohmiques de 2 µm. Pour cette distance, nous étudions trois structures en faisant varier l'épaisseur de la couche active de GaN. Trois épaisseurs 0,05 µm, 0,1 µm et 0,15 µm sont étudiées afin de pouvoir comparer l'influence de la température locale sur les performances électriques.

### 5.2.1 Topologie des diodes Gunn étudiées

La topologie des diodes Gunn étudiées est représentée sur la figure 5.1. La distance entre les deux contacts ohmiques est de 2 µm. La largeur de chaque contact métallique est de 0,2 µm. Pour satisfaire au critère d'oscillation de type Gunn, le dopage de la couche de GaN est fixé à $1\times10^{17}$ $cm^{-3}$ et le dopage de la zone fortement dopée est de $1\times10^{18}$ $cm^{-3}$. De plus, l'épaisseur de la couche de GaN *l* peut varier pour étudier l'influence de la température de réseau sur les performances électriques et thermiques. Le substrat en SiC monocristallin fait 400×400 $\mu m^2$.

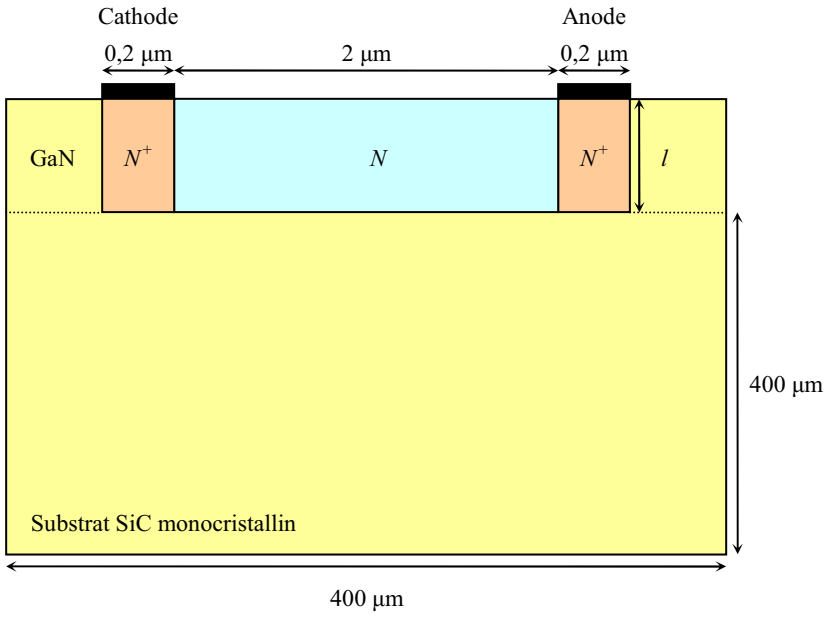



Figure 5.1. Topologie des diodes Gunn GaN étudiées.

## 5.2.2 Résultats pour une couche de GaN de 0,1 µm d'épaisseur

Dans un premier temps, nous avons étudié une diode Gunn avec une épaisseur de la couche de GaN de 0,1 µm. Nous présentons ici les caractéristiques statiques et microondes, ainsi que les performances thermiques obtenues avec cette topologie.

### 5.2.2.1. Caractéristiques statiques

Pour les caractéristiques statiques, deux cas ont été étudiés : avec et sans effets thermiques.

- Dans l'étude sans effet thermique, la température de réseau est fixe et égale à 300 K ;
- Dans l'étude avec effets thermiques, la température de réseau en tout point du composant est obtenue par la résolution du modèle thermique, et les propriétés de transport en chaque point recalculées pour la nouvelle température de réseau obtenue en tout point.

Les caractéristiques $I(V)$ obtenues dans les deux cas sont présentées sur la figure 5.2.

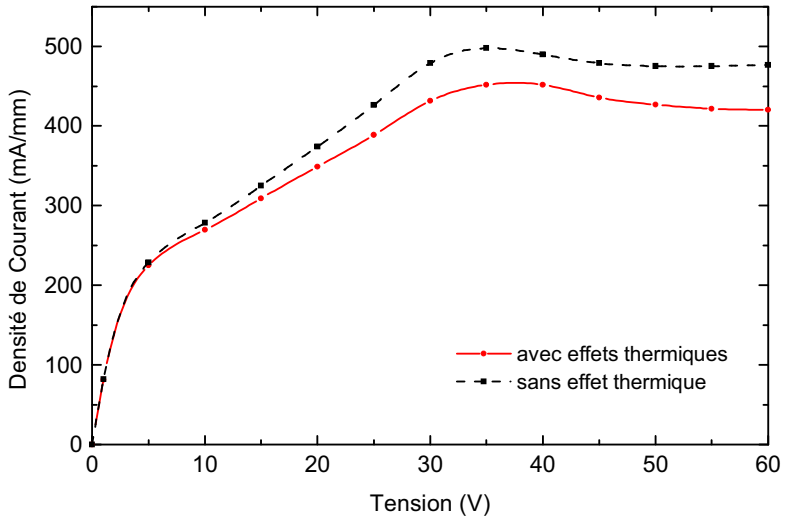



Figure 5.2. Caractéristiques $I(V)$ avec (trait plein) et sans (pointillé) effets thermiques.

On peut noter sur cette figure que le courant avec effets thermiques est plus faible que celui sans effet thermique. Ceci s'explique par la dégradation des propriétés de transport lors de l'augmentation de la température de réseau. De plus, le champ critique sans effet thermique est égal à 175 kV/cm alors que celui avec effets thermiques est un peu plus élevé, à 200 kV/cm. Cette différence est liée au décalage du champ critique lorsque la température de réseau augmente (Fig. 3.3). De plus, le champ critique avec effets

thermiques de 200 kV/cm présente un bon accord avec celui obtenu expérimentalement [3]. Cette mesure a été effectuée sur une diode Gunn GaN avec une distance entre les deux contacts ohmiques de 5 µm et les caractéristiques *I*(*V*) sont montrées sur la figure 5.3.

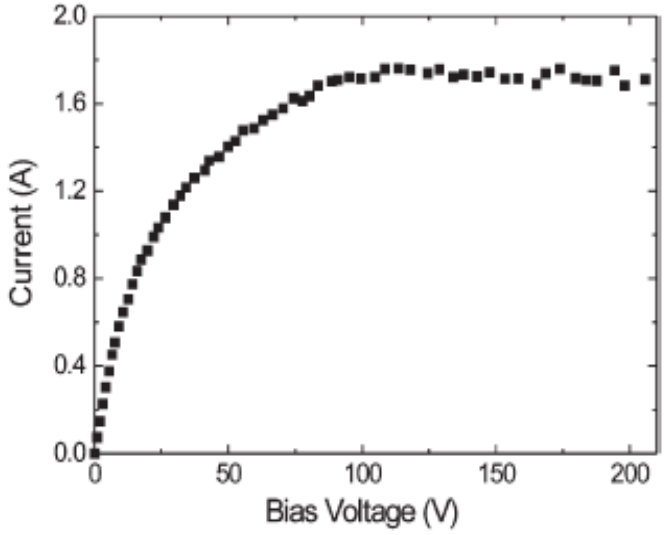
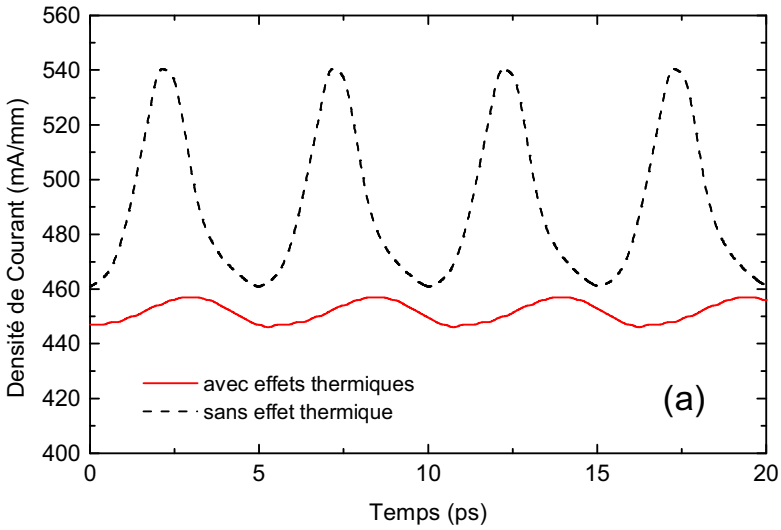



Figure 5.3. Caractéristiques *I*(*V*) avec la distance entre les deux contacts ohmiques de 5 µm.

Il faut également noter que le composant présente des oscillations de courant, même avec une tension de polarisation continue. Les évolutions de ces courants pour deux tensions de polarisation différentes, 40 V et 50 V, sont présentées sur les figures 5.4 (a) et (b).



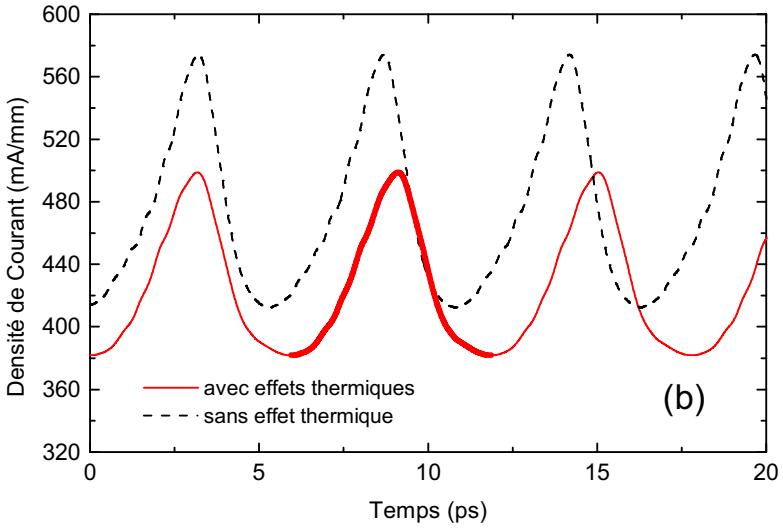



Figure 5.4. Évolution de la densité de courant en fonction du temps avec (trait plein) et sans (pointillé) effets thermiques pour différentes tensions appliquées : (a) 40 V et (b) 50 V. La partie grasse est une période des oscillations pour l'analyse des évolutions de trois grandeurs physiques.

À 40 V, l'amplitude des oscillations avec effets thermiques est beaucoup plus petite que celle sans effet thermique, parce que le champ électrique est proche du champ critique. Dans le cas de la polarisation de 50 V, lorsque la température de réseau locale est prise en compte, l'amplitude des oscillations est toujours plus petite en raison de la dégradation des propriétés de transport. De plus, la période des oscillations quand on prend en compte les effets thermiques, est un peu plus longue car le temps de transit est plus long. Pour une tension appliquée de 50 V, la période des oscillations avec effets thermiques est de 5,93 ps, correspondant à une fréquence d'oscillation de 169 GHz, alors que la période des oscillations sans effet thermique est de 5,49 ps, correspondant à une fréquence d'oscillation de 182 GHz.

Le principe des oscillations Gunn peut être analysé en regardant les distributions des grandeurs physiques telles que la densité d'électrons, la température électronique et la vitesse de dérive dans la zone active [4]. Les évolutions de ces grandeurs physiques pendant une période des oscillations, pour une tension appliquée de 50 V, sont montrées sur les figures suivantes. La période des oscillations analysée indiquée sur la figure 5.4 (b) (partie grasse) permet de situer les temps d'observation au cours de cette période.

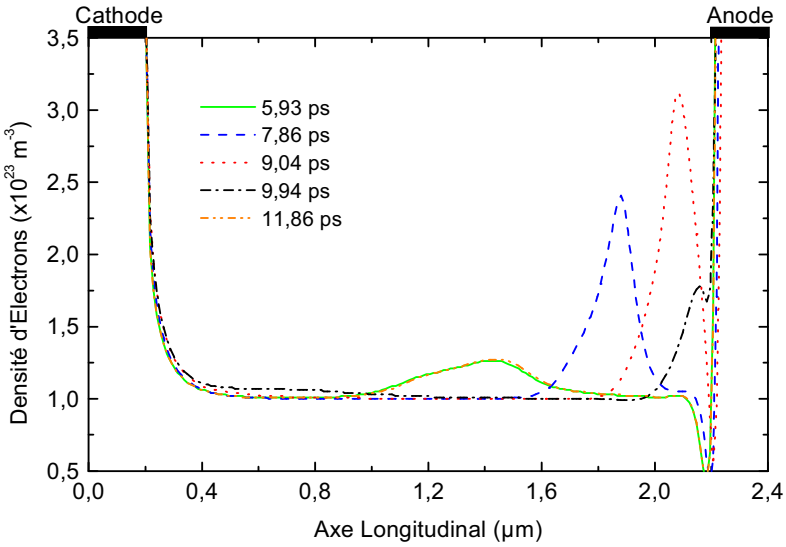



Figure 5.5. Profils de la densité d'électrons dans la zone active pour différents instants d'une période des oscillations avec effets thermiques. (La polarisation entre les deux électrodes est de 50 V.)

La première grandeur physique présentée est la densité d'électrons (Fig. 5.5). Les instants indiqués sur la figure 5.5 sont cohérents avec l'abscisse de la figure 5.4 (b). On peut noter sur cette figure, que le domaine Gunn apparaît au voisinage du milieu de la zone active et se déplace vers l'anode (l'électrode de droite). La densité d'électrons dans le domaine croît au fur et à mesure du déplacement du domaine vers l'anode. Une densité d'électrons maximale est observée quand le domaine arrive au niveau de la jonction $NN^+$ où il est absorbé par le contact.

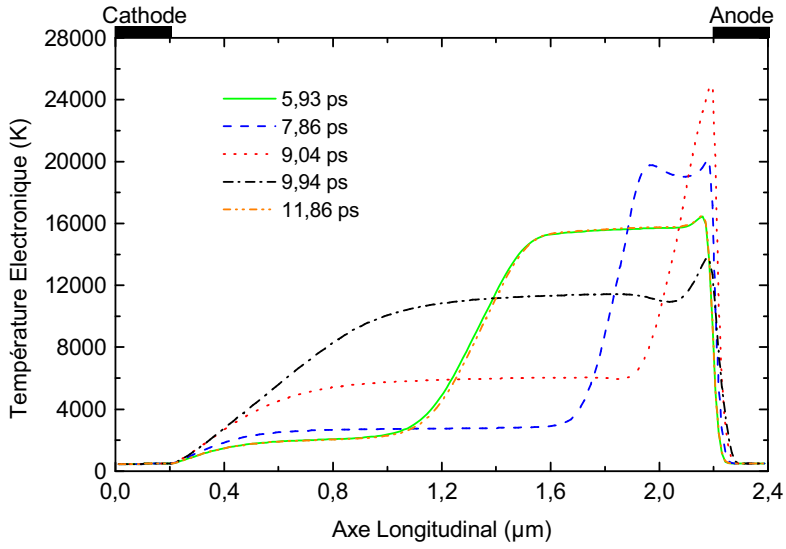



Figure 5.6. Profils de la température électronique dans la zone active pour différents instants d'une période des oscillations avec effets thermiques. (La polarisation entre les deux électrodes est de 50 V.)

La figure 5.6 montre l'évolution de la température électronique dans la zone active pour différents instants d'une période des oscillations pour une tension appliquée de 50 V. Une forte augmentation de la température électronique est observée là où se trouve le domaine Gunn. Ceci est à relier au profil de champ électrique. Une température électronique maximale est observée au niveau de la jonction $NN^+$, là où le champ électrique est très élevé. L'évolution du champ électrique dans la zone active pendant une période des oscillations est montrée sur la figure 5.7.

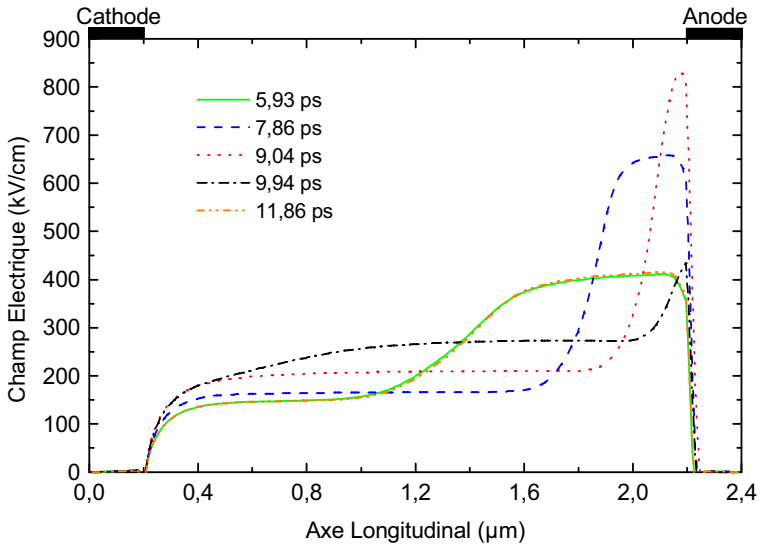



Figure 5.7. Profils du champ électrique dans la zone active pour différents instants d'une période des oscillations avec effets thermiques. (La polarisation entre les deux électrodes est de 50 V.)

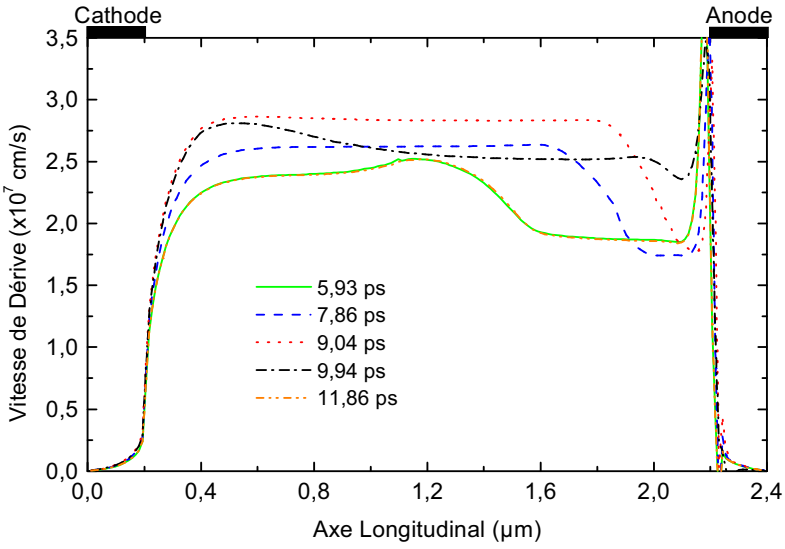



Figure 5.8. Profils de la vitesse de dérive des électrons dans la zone active pour différents instants d'une période des oscillations avec effets thermiques. (La polarisation entre les deux électrodes est de 50 V.)

La dernière grandeur physique dont l'évolution en fonction de l'axe longitudinal est étudiée, est la vitesse de dérive des électrons. La figure 5.8 nous montre une nette diminution de la vitesse de dérive des électrons lorsque la température électronique augmente, car on dégrade alors les propriétés de transport. De plus, la vitesse de dérive moyenne est environ de $2{,}5\times10^{7}$ cm/s, ce qui explique que la fréquence d'oscillation est reliée à la vitesse pic du matériau (GaN) (Fig. 3.3).

### 5.2.2.2. Caractéristiques microondes

Un oscillateur électrique sinusoïdal à l'état solide est un dispositif électronique permettant la conversion d'une puissance continue d'alimentation $P_{DC}$ en une puissance $P_{RF}$ alternative à une fréquence $f_{osc}$ déterminée. Ainsi, un oscillateur à dipôle à temps de transit peut être schématiquement représenté par un dispositif comprenant (Fig. 5.9) :

- Un circuit de polarisation continue fournissant la puissance d'alimentation $P_{DC}$ ;
- Un élément électronique actif. Ce type de composant semiconducteur est, sous certaines conditions de polarisation continue, capable de convertir une partie de la puissance continue qui lui est fournie en puissance hyperfréquence $P_{RF}$ dans une certaine bande de fréquences ;
- Un circuit passif de charge dont le rôle est la stabilisation du fonctionnement de l'oscillateur à la fréquence $f_{osc}$ désirée et le transfert optimal de la puissance émise par l'élément actif vers la charge utile à l'utilisateur.

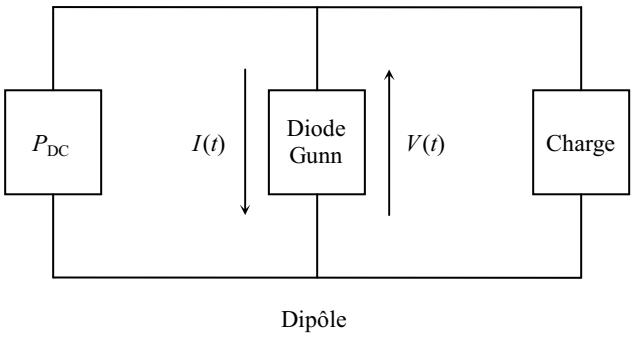



Figure 5.9. Schéma de principe d'un oscillateur à temps de transit.

En approximation, on peut admettre que la forme d'onde de la tension appliquée aux bornes du dipôle actif est de la forme :

$$V(t) = V_{DC} + V_{RF} \cdot \sin(2\pi f_{osc} t) \tag{5.1}$$

où $V_{DC}$ est la tension de polarisation continue. Dans notre étude, elle est égale à 50 V.

$V_{RF}$ est l'amplitude de la tension alternative, qui varie de 0 à 5 V dans notre étude afin de trouver l'amplitude optimale.

$f_{osc}$ est la fréquence d'oscillation. Comme $V_{DC}$ est égale à 50 V, $f_{osc}$ est définie par le résultat obtenu en régime statique soit 169 GHz (Fig. 5.3 (b)).

$t$ est le temps.

En régime de fonctionnement permanent, la décomposition en série de Fourier sur une période à la fréquence $f_{osc}$ de la tension instantanée $V(t)$ appliquée aux bornes du dipôle et du courant $I(t)$ le parcourant permet de définir le modèle fréquentiel de l'oscillateur. Celui-ci exprime clairement la condition d'oscillations à la fréquence $f_{osc}$ en terme de relation d'impédance et permet le calcul des grandeurs fonctionnelles associées (puissance $P_{RF}$ et rendement $\eta$). Le problème posé au concepteur d'un oscillateur est en général l'obtention d'une puissance alternative à la fréquence fondamentale $f_{osc}$ désirée à la fois monochromatique et maximale, associée à un rendement de conversion $\eta = P_{RF}/P_{DC}$ le plus élevé possible [5]. La puissance émise et la résistance dynamique peuvent être calculées par les relations suivantes [6] :

$$P_{RF} = V_{RF} I_{RF} \cos\varphi \tag{5.2}$$

où $I_{RF}$ est l'amplitude du courant alternatif à la fréquence fondamentale.

$\varphi$ est le déphasage entre $V_{RF}$ et $I_{RF}$.

$$R_{RF} = \frac{V_{RF}}{I_{RF}} \cos\varphi \tag{5.3}$$

Lors de l'analyse du fonctionnement en microondes, deux cas ont été envisagés :

- Le premier cas consiste à utiliser notre modèle physico-thermique. Comme on l'a déjà souligné auparavant, la température de réseau est obtenue en tout point du dispositif par le calcul de l'équation de la chaleur.
- L'autre cas correspond à une température dans la zone active fixe, mais différente de la température ambiante [7]. Dans notre cas, cette température a été fixée à 492 K. Cette température de réseau est la valeur moyenne de la température de réseau obtenue dans la zone active par la résolution du modèle physico-thermique pour une tension appliquée de 50 V.

Les évolutions de la résistance dynamique et de la densité de puissance émise en fonction de la tension microonde $V_{RF}$ sont représentées sur les figures 5.10 et 5.11. La résistance dynamique est négative,

mais la figure 5.10 représente l'évolution de sa valeur absolue.

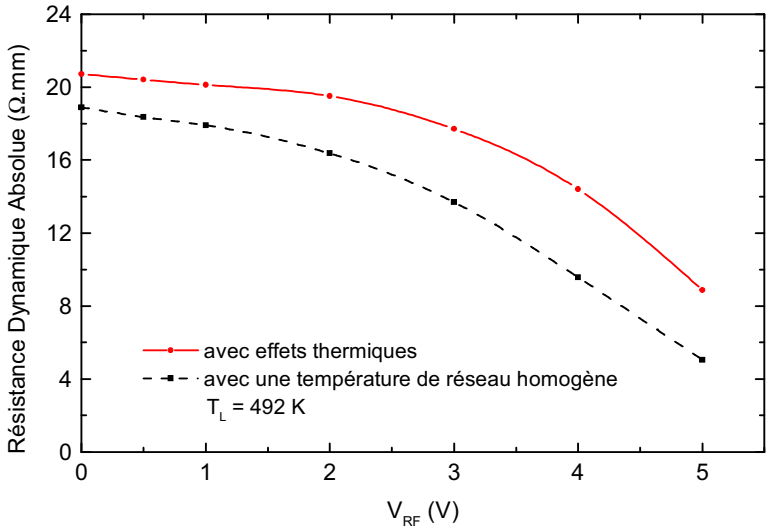



Figure 5.10. Évolution de la valeur absolue de la résistance dynamique en fonction de la tension microonde avec effets thermiques (trait plein) et avec une température de réseau homogène $T_L$ = 492 K (pointillé).

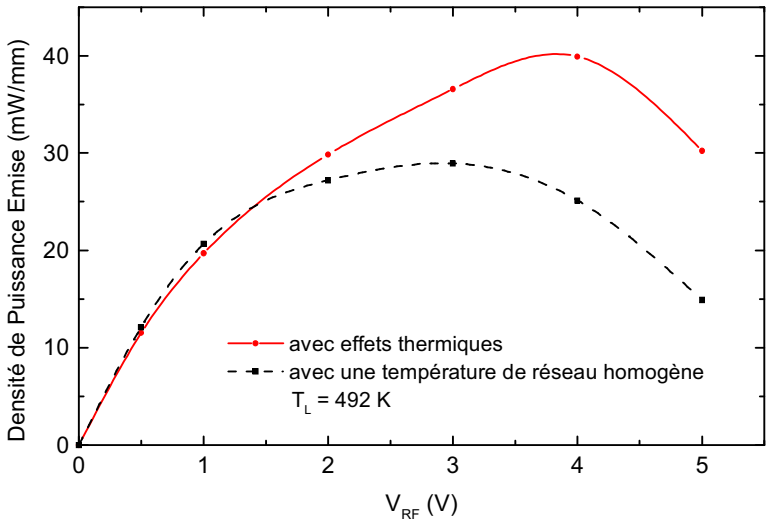



Figure 5.11. Évolution de la densité de puissance émise en fonction de la tension microonde avec effets thermiques (trait plein) et avec une température de réseau homogène $T_L$ = 492 K (pointillé).

Sur la figure 5.10, on peut noter que les profils de la résistance dynamique obtenus dans les deux cas sont similaires. Cependant celui obtenu en utilisant une température de réseau homogène et égale à 492 K est plus faible que celui obtenu avec une température de réseau calculée à l'aide du modèle physico-thermique. Ceci est dû à une surestimation des résistances d'accès avec une température de réseau

homogène et égale à 492 K. Les deux résistances dynamiques saturent lorsque la tension microonde tend vers zéro. Quant à la densité de puissance émise, celle avec la température de réseau homogène et égale à 492 K est toujours plus faible et sa valeur maximale apparaît pour une tension microonde de 3 V. La densité de puissance émise maximale est alors de 29 mW/mm. En utilisant le modèle physico-thermique, on trouve que le maximum de densité de puissance apparaît pour une tension microonde de 4 V, et le maximum de la puissance émise vaut 40 mW/mm. On peut aussi obtenir le rendement de conversion. Pour la tension microonde de 4 V, le rendement de conversion égal à 1,9 ‰.

#### 5.2.2.3. Performances thermiques

Pour étudier les performances thermiques de la diode Gunn GaN, nous avons tracé les évolutions de la température de réseau maximale et de la résistance thermique en fonction de la densité de puissance dissipée (Fig. 5.12). On peut constater que la température de réseau maximale augmente proportionnellement à l'augmentation de la densité de puissance dissipée au dessus de 10 W/mm. À 50 V, correspondant à une densité de puissance dissipée de 21 W/mm, la température de réseau maximale vaut 506 K. Quant à la résistance thermique, elle augmente vite à basse densité de puissance dissipée, mais lorsque la densité de puissance dissipée est supérieure à 12 W/mm, correspondant à une tension appliquée de 30 V, la résistance thermique augmente plus lentement.

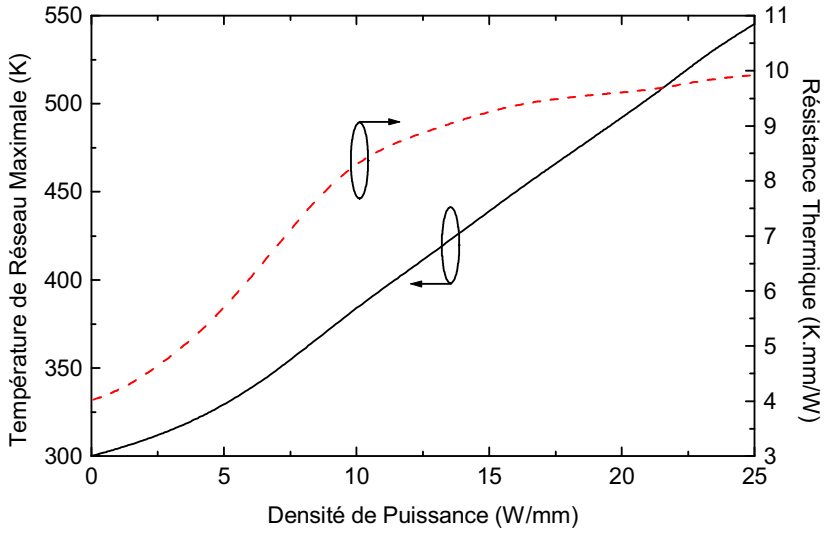



Figure 5.12. Évolutions de la température de réseau maximale et de la résistance thermique en fonction de la densité de puissance dissipée.

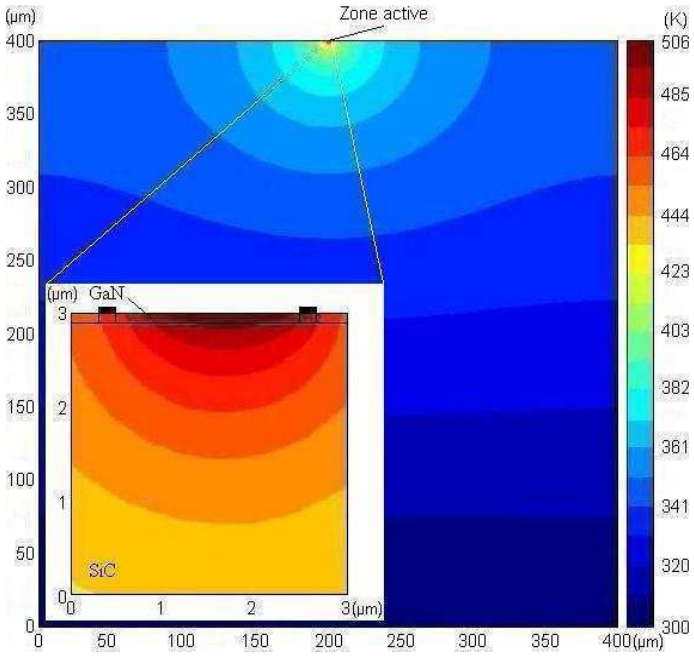



Figure 5.13. Carte 2D de la température de réseau pour une tension appliquée de 50 V. L'insert est un zoom proche de la zone active.

La figure 5.13 montre la distribution de la température de réseau et l'insert est un zoom proche de la zone active. On constate que la température de réseau maximale est plus proche de l'anode (l'électrode de droite) dans la zone active, là où la densité d'électrons et où la température électronique sont les plus élevées.

## 5.2.3 Résultats pour une couche de GaN de 0,05 µm d'épaisseur

Dans cette section, nous étudions la diode Gunn avec une épaisseur de la couche de GaN de 0,05 µm. Comme la couche de GaN est plus fine, la densité de courant est plus faible, en conséquence, le composant s'échauffe moins. Théoriquement les effets thermiques doivent donc être moins marqués et nos résultats vérifient cette prévision.

### 5.2.3.1. Caractéristiques statiques

Les résultats sont obtenus sous les mêmes conditions que ceux présentés auparavant pour une épaisseur de la couche de GaN de 0,1 µm.

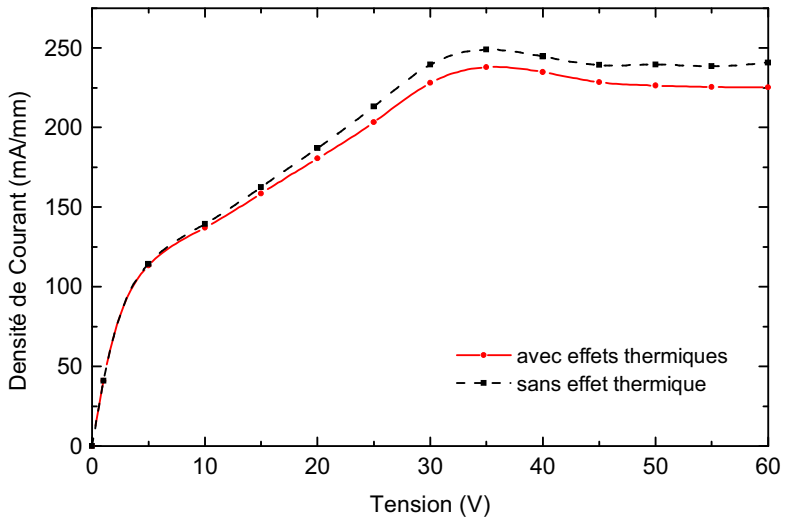



Figure 5.14. Caractéristiques *I*(*V*) avec (trait plein) et sans (pointillé) effets thermiques.

La figure 5.14 montre les caractéristiques *I*(*V*) avec et sans effet thermique. Par rapport aux résultats obtenus pour l'épaisseur de la couche de GaN de 0,1 µm, les densités de courant sont plus basses, aussi les caractéristiques sont plus proches, parce que le composant s'échauffe moins. Les champs critiques pour les deux cas sont presque identiques et égaux à 175 kV/cm.

Les figures 5.15 (a) et (b) montrent les oscillations du courant en fonction du temps pour deux tensions de polarisation différentes de 40 V et 50 V. Si l'on compare avec la figure 5.4 (a), on peut noter qu'à 40 V, les oscillations du courant avec effets thermiques sont déjà très marquées par rapport à celles obtenues pour une épaisseur de la couche de GaN de 0,1 µm. Comme le composant s'échauffe moins, la tension de saturation avec effets thermiques est proche de 35 V, et la polarisation de 40 V est suffisante pour que les oscillations existent. À 50 V, l'amplitude des oscillations avec effets thermiques est toujours plus petite que celle sans effet thermique en raison de la dégradation des propriétés de transport. De plus, la période des oscillations prenant en compte les effets thermiques, est un peu plus longue car le temps de transit est plus long. À 50 V, la période des oscillations avec effets thermiques est de 5,64 ps, correspondant à une fréquence d'oscillation de 177 GHz, alors que la période des oscillations sans effet thermique est de 5,49 ps, correspondant à une fréquence d'oscillation de 182 GHz. Par rapport aux résultats obtenus pour une épaisseur de la couche de GaN de 0,1 µm, on trouve que la période des oscillations sans effet thermique ne dépend pas de l'épaisseur de la couche de GaN, par contre, plus la couche est épaisse plus la période des oscillations avec effets thermiques est longue. En effet, la diode Gunn s'échauffe davantage

quand on augmente l'épaisseur de la couche de GaN. Les propriétés de transport se dégradent plus fortement. Les effets thermiques sont donc extrêmement marqués pour les diodes Gunn de cette filière.

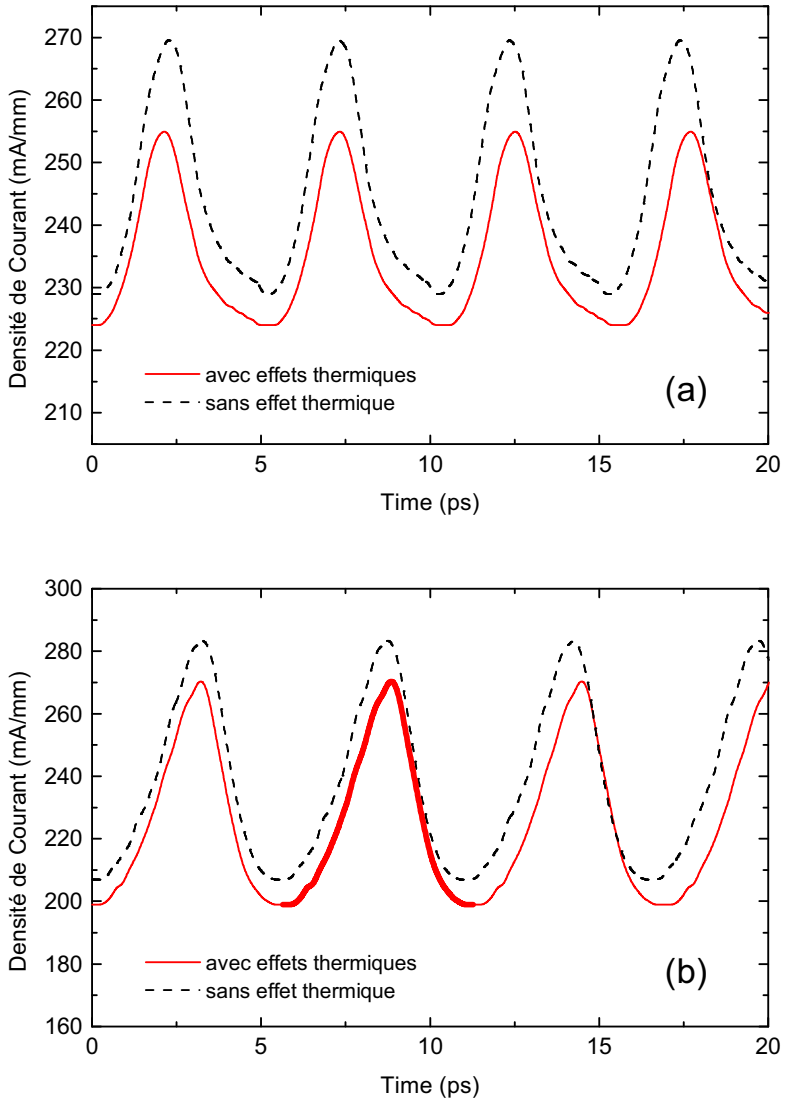



Figure 5.15. Évolution de la densité de courant en fonction du temps avec (trait plein) et sans (pointillé) effets thermiques pour différentes tensions appliquées : (a) 40 V et (b) 50 V. La partie grasse est une période des oscillations pour l'analyse des évolutions de trois grandeurs physiques.

On a aussi étudié les évolutions des trois grandeurs physiques telles que la densité d'électrons, la température électronique et la vitesse de dérive dans la zone active pendant une période des oscillations pour une tension appliquée de 50 V (Fig. 5.16-5.18). La période des oscillations de référence est indiquée sur la figure 5.15 (b) (partie grasse) de 177 GHz.

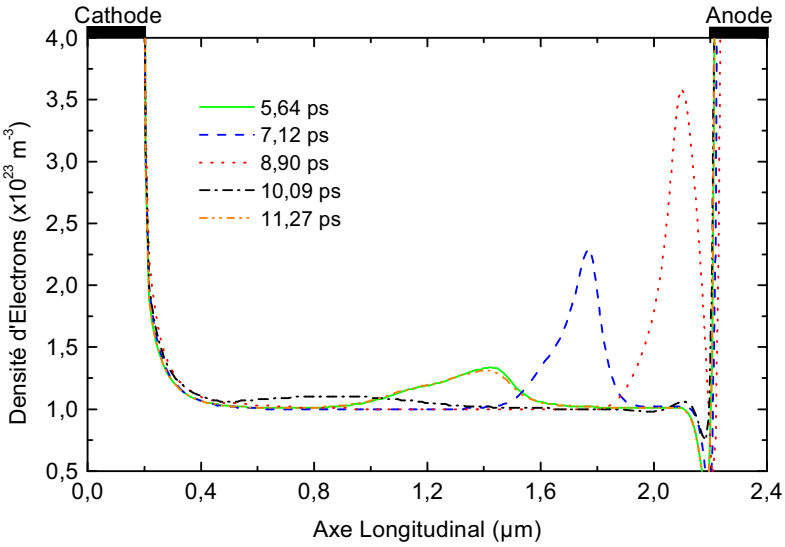



Figure 5.16. Profils de la densité d'électrons dans la zone active pour différents instants d'une période des oscillations avec effets thermiques. (La polarisation entre les deux électrodes est de 50 V.)

La figure 5.16 montre les profils de la densité d'électrons dans la zone active pour différents instants d'une période des oscillations. Par rapport aux résultats déduits (Fig. 5.5), on trouve que les évolutions de la densité d'électrons pour les deux épaisseurs de la couche de GaN différentes sont presque les mêmes. Le domaine Gunn apparaît aussi près du milieu de la zone active et son pic devient de plus en plus important quand il se déplace vers l'anode (l'électrode de droite).

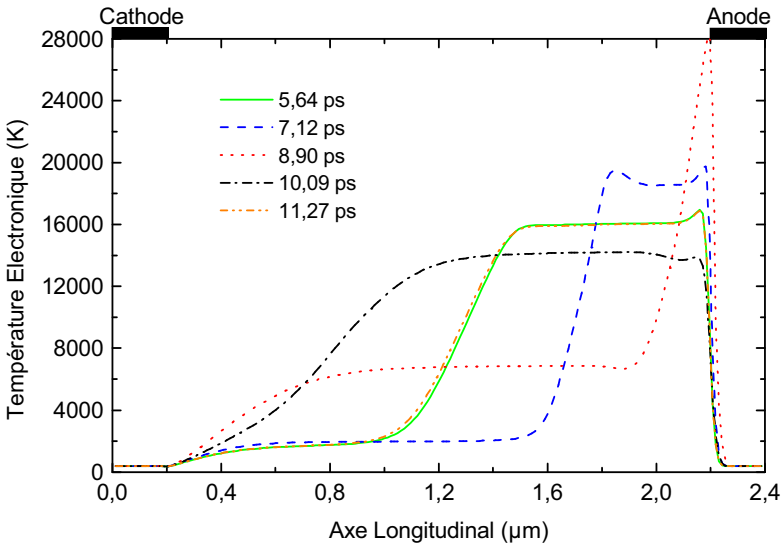



Figure 5.17. Profils de la température électronique dans la zone active pour différents instants d'une période des oscillations avec effets thermiques. (La polarisation entre les deux électrodes est de 50 V.)

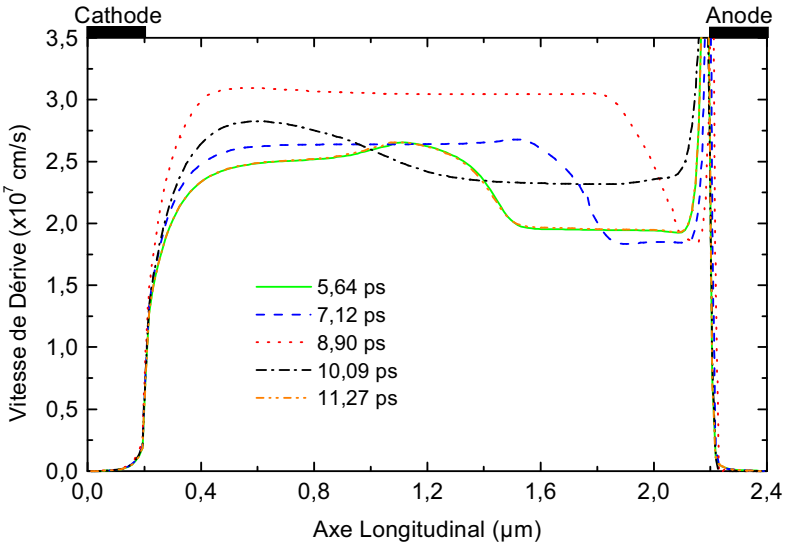



Figure 5.18. Profils de la vitesse de dérive dans la zone active pour différents instants d'une période des oscillations avec effets thermiques. (La polarisation entre les deux électrodes est de 50 V.)

Les figures 5.17 et 5.18 montrent les profils de la température électronique et de la vitesse de dérive dans la zone active pour différents instants pendant une période des oscillations avec effets thermiques. Comme l'évolution de la densité d'électrons, les évolutions de la température électronique et de la vitesse de dérive ne dépendent pas beaucoup de l'épaisseur de la couche de GaN.

### 5.2.3.2. Caractéristiques microondes

Pour la diode Gunn avec une épaisseur de la couche active de GaN de 0,05 µm, nous avons étudié ses performances microondes pour une tension microonde de 4 V. La tension de polarisation continue est fixée à 50 V. De plus, la fréquence du signal sinusoïdal appliquée définie par la figure 5.15 (b) est de 177 GHz.

En utilisant la même méthode que celle présentée dans la section 5.2.2.2, on obtient une densité de puissance émise de 25 mW/mm associée à un rendement de conversion de 2,2 ‰, correspondant à une densité de puissance dissipée de 11,3 W/mm. On obtient aussi une résistance dynamique de -12,6 Ω pour un développement de 1 mm.

### 5.2.2.3. Performances thermiques

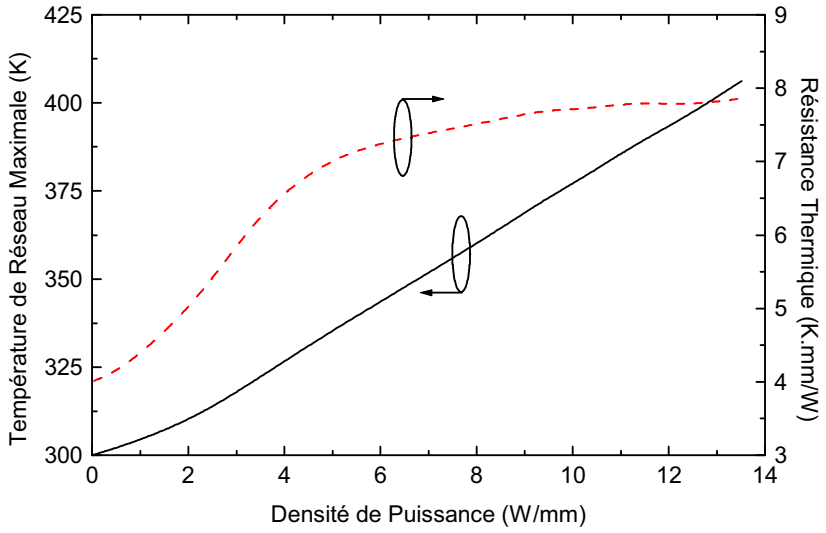



Figure 5.19. Évolutions de la température de réseau maximale et de la résistance thermique en fonction de la densité de puissance dissipée.

Les évolutions de la température de réseau maximale et de la résistance thermique en fonction de la densité de puissance dissipée sont représentées sur la figure 5.19. Par rapport à la figure 5.12, on peut constater que la température de réseau maximale augmente proportionnellement à l'augmentation de la densité de puissance dissipée au dessus de 6 W/mm mais elle est plus petite que celle obtenue avec une épaisseur de la couche de GaN de 0,1 µm pour la même polarisation, parce que son courant est plus faible que celui que l'on avait avec une couche de GaN plus épaisse.

À 50 V, correspondant à une densité de puissance dissipée de 11,3 W/mm, la température de réseau maximale vaut 386 K. La résistance thermique augmente rapidement à basse densité de puissance dissipée, puis elle augmente lentement au delà de 6 W/mm.

La figure 5.20 montre la distribution de la température de réseau et l'insert est un zoom proche de la zone active. Malgré le fait que la température de réseau maximale soit moins élevée que précédemment, le maximum est plus proche de l'anode (l'électrode de droite) dans la zone active. Ceci est dû à un terme de source plus élevé du côté de l'anode, du fait du profil de la température électronique.

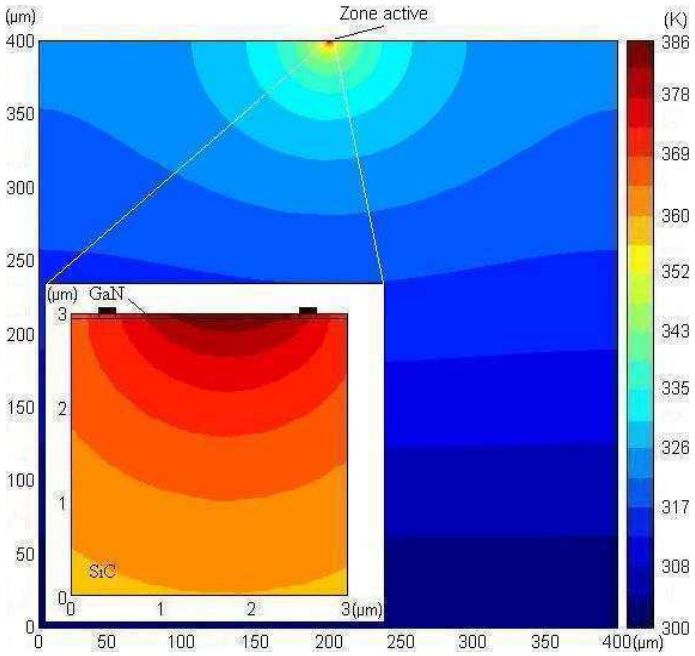



Figure 5.20. Carte 2D de la température de réseau pour une tension appliquée de 50 V. L'insert est un zoom proche de la zone active.

## 5.2.4 Résultats pour une couche de GaN de 0,15 µm d'épaisseur

### 5.2.4.1. Caractéristiques statiques

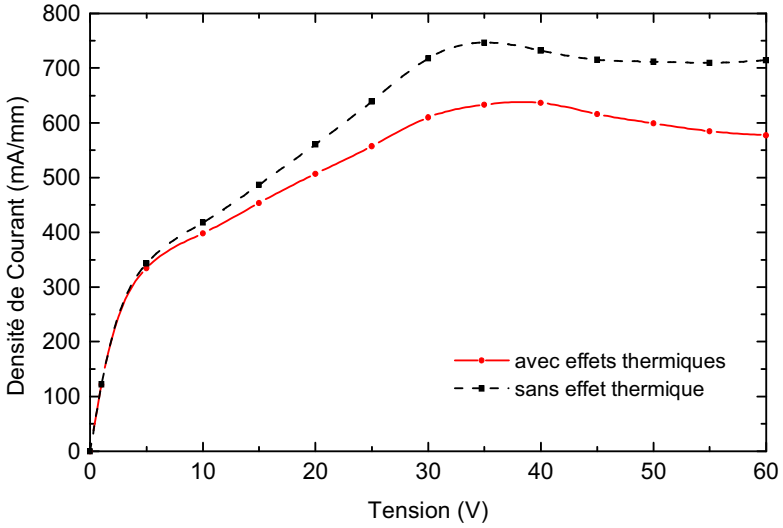



Figure 5.21. Caractéristiques $I(V)$ avec (trait plein) et sans (pointillé) effets thermiques.

Les caractéristiques $I(V)$ avec et sans effet thermique sont représentées sur la figure 5.21. La tension

de saturation sans effet thermique est de 35 V, correspondant à un champ critique de 175 kV/cm, alors que la tension de saturation avec effets thermiques est supérieure à 40 V. C'est pourquoi à 40 V, la diode Gunn n'a pas encore commencé à osciller quand les effets thermiques sont pris en compte (Fig. 5.22 (a)).

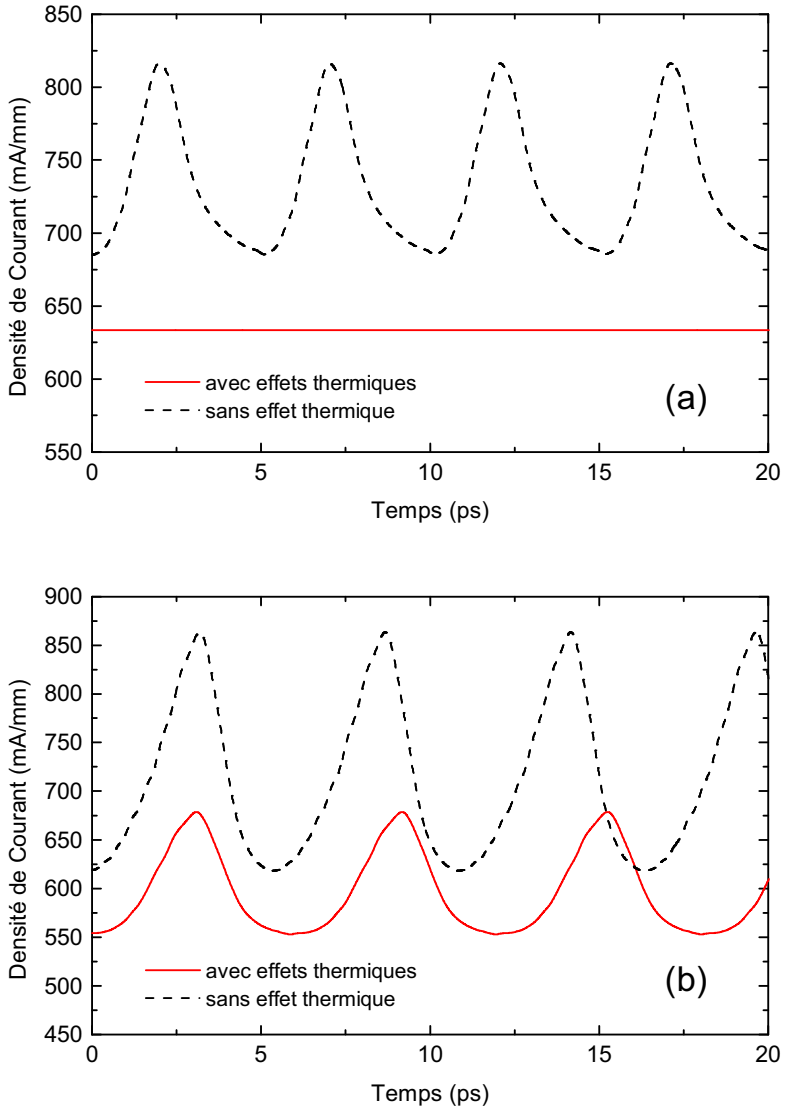



Figure 5.22. Évolution de la densité de courant en fonction du temps avec (trait plein) et sans (pointillé) effets thermiques pour différentes tensions appliquées : (a) 40 V et (b) 50 V.

Les figures 5.22 (a) et (b) montrent les oscillations du courant en fonction du temps pour deux polarisations différentes de 40 V et 50 V. À 40 V, la densité de courant avec effets thermiques est constante et la diode n'oscille pas. À 50 V, la période des oscillations avec effets thermiques est de 6,08 ps, correspondant à une fréquence d'oscillation de 164 GHz, alors que la période des oscillations sans effet

thermique est de 5,49 ps, correspondant à une fréquence d'oscillation de 182 GHz.

Comme la couche de GaN est épaisse, l'impact de la température de réseau est plus marqué et les propriétés de transport se dégradent fortement. En conséquence, le temps de transit est plus long, correspondant à une fréquence d'oscillation plus faible.

### 5.2.4.2. Caractéristiques Microondes

L'étude des performances microondes est faite dans les mêmes conditions qu'auparavant, sauf que la fréquence du signal sinusoïdal appliqué est égale à 164 GHz (Fig. 5.22 (b)).

Après les calculs, on obtient une densité de puissance émise de 44 mW/mm associée à un rendement de conversion de 1,5 ‰, correspondant à une densité de puissance dissipée de 30 W/mm. La résistance dynamique obtenue est -17 Ω pour un développement de 1 mm.

### 5.2.4.3. Performances thermiques

Les évolutions de la température de réseau maximale et de la résistance thermique en fonction de la densité de puissance dissipée sont montrées sur la figure 5.22.

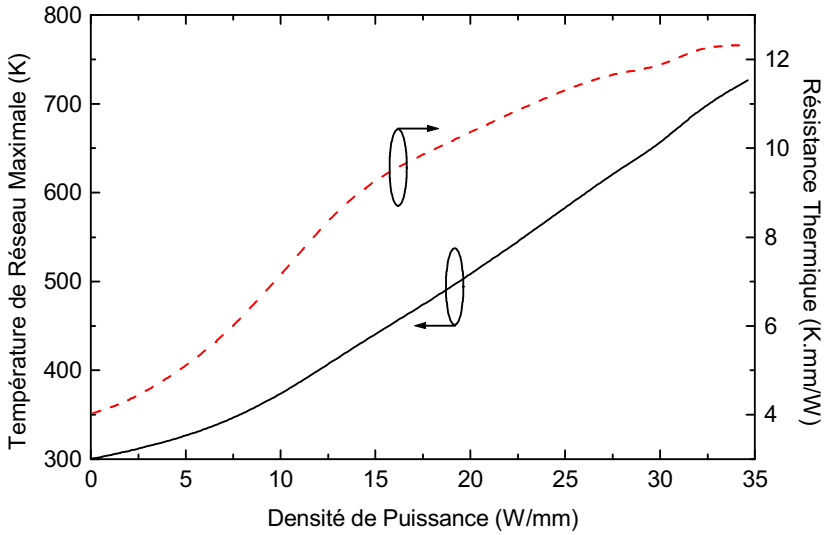



Figure 5.23. Évolutions de la température de réseau maximale et de la résistance thermique en fonction de la densité de puissance dissipée.

À 50 V, correspondant à une densité de puissance dissipée de 30 W/mm, la température de réseau

maximale vaut 654 K. Quant à la résistance thermique, elle évolue comme précédemment. Tout d'abord, une croissance rapide suivie d'une augmentation plus lente mais toutefois plus importante que dans les deux cas précédents (Fig. 5.23).

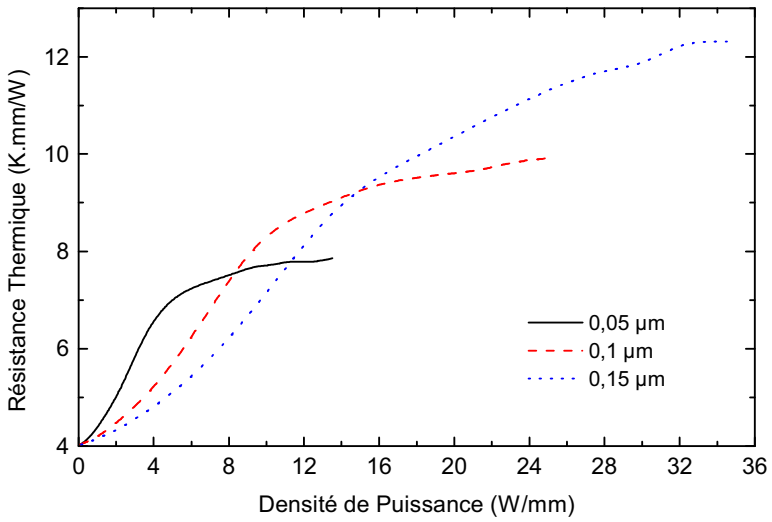



Figure 5.24. Évolution de la résistance thermique en fonction de la densité de puissance dissipée pour les différentes épaisseurs de la couche active de GaN.

Les deux régimes de l'augmentation de la résistance thermique sont liés à l'évolution du temps de relaxation de l'énergie $\tau_w$ en fonction de la température électronique. Sachant que la densité de puissance dissipée est l'intégration du terme de source de chaleur dans la zone active, dans le premier régime, le temps de relaxation augmente avec la température électronique, ce qui diminue le gradient de puissance dissipée associé à une augmentation du gradient de résistance thermique. L'expression du terme de source de chaleur est décrite comme :

$$H = \frac{3}{2} k_B n \frac{T_e - T_L}{\tau_w} \tag{5.4}$$

Aussi, si on continue à monter la tension de polarisation continue, le temps de relaxation commence à diminuer. En conséquence, lorsque la puissance dissipée augmente, elle entraine une croissance de la résistance thermique plus faible.

La figure 5.25 montre la distribution de la température de réseau et l'insert est un zoom proche de la zone active. Comme précédemment, le maximum est toujours plus proche de l'anode (l'électrode à droite) dans la zone active.

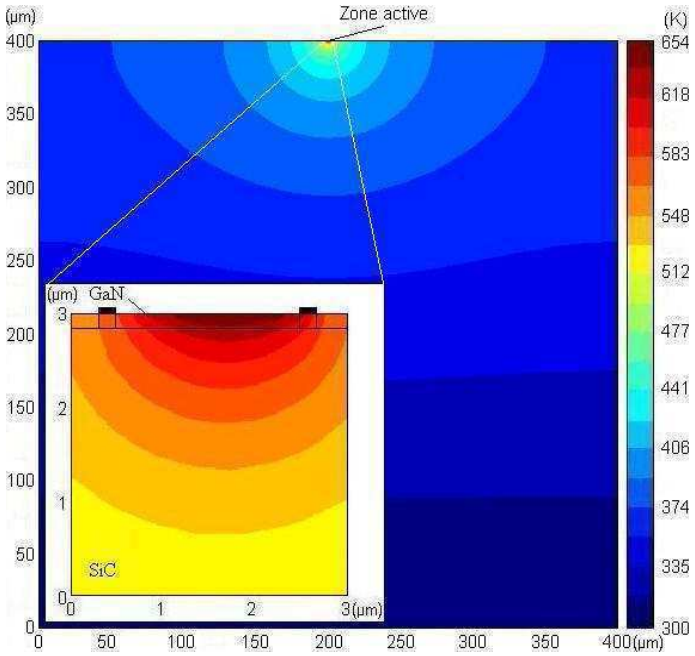



Figure 5.25. Carte 2D de la température de réseau pour une tension appliquée de 50 V. L'insert est un zoom proche de la zone active.

## 5.2.5. Étude de l'impact des effets thermiques sur les performances électriques

Pour étudier les performances électriques et thermiques, les grandeurs physiques telles que la fréquence d'oscillation, la densité de puissance dissipée, la densité de puissance émise, le rendement de conversion, la résistance dynamique et la température de réseau maximale pour trois épaisseurs de la couche de GaN différentes, sont récapitulés dans le tableau 5.1.

Tableau 5.1. Performances électriques et thermiques pour trois épaisseurs de la couche de GaN différentes. La tension de polarisation continue est égale à 50 V et la tension microonde est égale à 4 V.

| | Épaisseur de la couche de GaN (µm) | | |
|---|---|---|---|
| | 0,05 | 0,1 | 0,15 |
| Fréquence d'oscillation (GHz) | 177 | 169 | 164 |
| Densité de puissance dissipée (W/mm) | 11,3 | 21,3 | 30 |
| Densité de puissance émise (mW/mm) | 25 | 40 | 44 |
| Rendement de conversion (‰) | 2,2 | 1,9 | 1,5 |
| Résistance dynamique (Ω·mm) | -12,6 | -14,4 | -17 |
| Température de réseau maximale (K) | 386 | 506 | 654 |

On peut constater que lorsque l'épaisseur de la couche de GaN augmente, la densité de puissance dissipée et la densité de puissance émise augmentent. La valeur absolue de la résistance dynamique augmente aussi. En revanche, le rendement de conversion diminue. Évidemment, la température de réseau maximale augmente avec l'augmentation de l'épaisseur de la couche de GaN, ce qui crée une augmentation de la valeur absolue de la résistance dynamique. Donc, afin d'optimiser le design des diodes Gunn, il est nécessaire de trouver un compromis entre le rendement de conversion et la résistance dynamique dépendant des applications. Concernant la fiabilité, la température de fonctionnement maximale pour le composant sur le substrat SiC monocristallin, doit être autour de 500 K. De ce fait, la diode Gunn avec une épaisseur de la couche de GaN de 0,1 µm, constitue un bon compromis. Les résultats obtenus pour les diodes Gunn GaN avec une distance entre les deux contacts ohmiques de 2 µm ont été publiés [8].

## 5.3. Diode Gunn avec une distance entre les deux contacts ohmiques de 0,3 µm

Dans les sections précédentes, nous avons étudié une diode Gunn GaN avec une distance entre les deux contacts ohmiques de 2 µm. Afin d'augmenter la fréquence d'oscillation, nous avons diminué cette distance, laquelle est prise égale à 0,3 µm. Pour satisfaire au critère d'oscillation de type Gunn, le dopage de la couche de GaN est fixé à $8\times10^{17}$ $cm^{-3}$, beaucoup plus élevé que pour une distance entre les deux contacts ohmiques de 2 µm, et le dopage des zones fortement dopées est de $2\times10^{19}$ $cm^{-3}$. Par contre, l'épaisseur de la couche de GaN est choisie égale à 0,05 µm afin d'éviter que le composant s'échauffe trop fortement. Le substrat fait $400\times400$ $\mu m^2$.

### 5.3.1. Caractéristiques statiques

La figure 5.26 montre les caractéristiques $I(V)$ avec et sans effet thermique. L'insert montre la densité de courant en fonction du temps avec effets thermiques pour une tension appliquée de 12 V. Sur l'insert, on peut noter que la période des oscillations est proche de 1,33 ps, correspondant à une fréquence d'oscillation de 750 GHz.

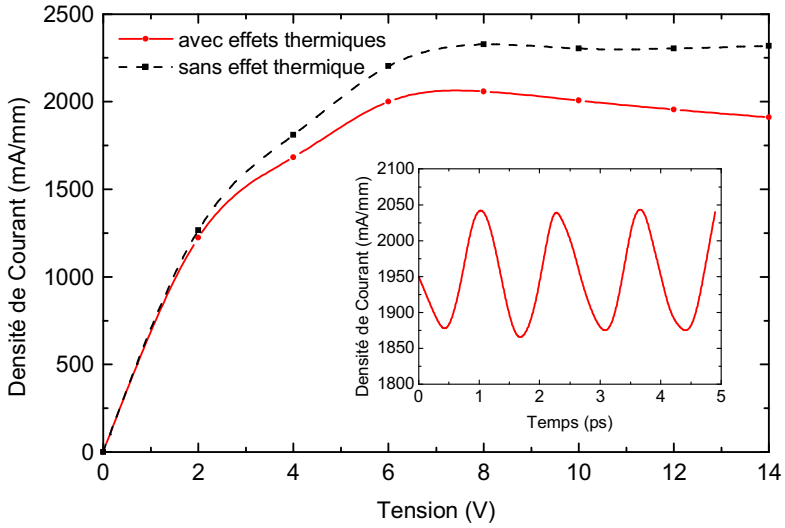



Figure 5.26. Caractéristiques *I*(*V*) avec (trait plein) et sans (pointillé) effets thermiques. L'insert montre la densité de courant en fonction du temps avec effets thermiques pour une tension appliquée de 12 V.

### 5.3.2. Caractéristiques microondes

Comme dans les études précédentes, on applique une tension de polarisation constituée d'une tension continue de 12 V à laquelle on superpose une tension microonde de fréquence égale à 750 GHz et d'amplitude de 1 V. On obtient une densité de puissance émise de 17 mW/mm et une résistance dynamique de -3 Ω pour un développement de 1 mm. De plus, on obtient un rendement de conversion égal à 0,7 ‰, associé à une densité de puissance dissipée de 23,5 W/mm.

### 5.3.3. Performances thermiques

La figure 5.26 montre la température de réseau maximale et la résistance thermique en fonction de la densité de puissance dissipée. La température de réseau maximale est égale à 588 K pour une tension continue de 12 V, correspondant à une densité de puissance dissipée de 23,5 W/mm. On peut aussi noter que la résistance thermique augmente rapidement à basse densité de puissance dissipée, mais son augmentation devient plus douce lorsque la densité de puissance dissipée est supérieure à 10 W/mm.

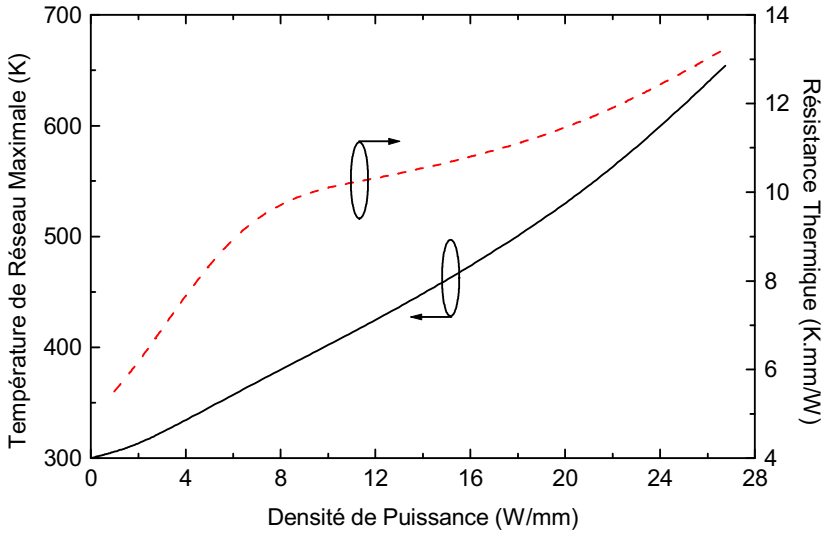



Figure 5.27. Température de réseau maximale et résistance thermique en fonction de la densité de puissance dissipée.

La figure 5.28 montre la distribution de la température de réseau et l'insert est un zoom proche de la zone active. La température de réseau maximale se situe dans la zone active proche de l'anode (l'électrode à droite).

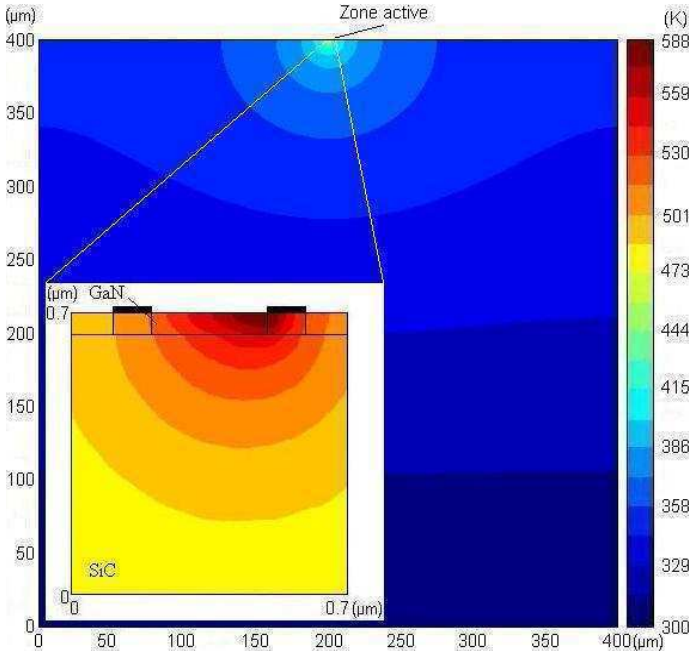



Figure 5.28. Carte 2D de la température de réseau pour une tension appliquée de 12 V. L'insert est un zoom proche de la zone active.

## 5.4. Conclusion

Dans ce chapitre, nous étudions les performances électriques et thermiques des diodes Gunn GaN en utilisant notre modèle physico-thermique.

D'abord, nous étudions les diodes Gunn avec une largeur entre les deux contacts ohmiques de 2 µm. Trois diodes Gunn ayant une épaisseur de la couche de GaN différente ont été étudiées, ce qui nous permet d'étudier l'impact des effets thermiques sur les performances électriques et thermiques. On a analysé les caractéristiques statiques et microondes de cette diode Gunn. Par comparaison des trois cas, on trouve que la diode Gunn avec l'épaisseur de la couche de GaN de 0,1 µm, constitue le meilleur compromis entre le rendement de conversion et la résistance dynamique. Dans ce cas, on a également regardé les différences obtenues en utilisant une température de réseau homogène, qui est une méthode approximative de traiter les effets thermiques. On trouve que les résultats microondes obtenus en utilisant les deux températures de réseau différentes sont très différents. Il est donc souhaitable de prendre en compte la vraie distribution de la température de réseau en tout point du composant afin d'optimiser correctement le composant.

Dans la seconde partie, pour augmenter la fréquence d'oscillation, nous étudions une diode plus courte (~ 0,3 µm). La fréquence d'oscillation est dans ce cas de 750 GHz pour une tension appliquée de 12 V, ce qui lui permet d'être utilisée dans les applications THz.

En résumé, la température de réseau crée de fortes modifications des performances électriques des diodes Gunn, telles que la fréquence et l'amplitude des oscillations, ainsi que sur les performances microondes. En conséquence, le modèle physico-thermique constitue un outil très utile pour le design précis des diodes Gunn de la filière nitrure de gallium.

# Bibliographie

[1] K. Y. Xu, X. F. Lu, A. M. Song, G. Wang, "Enhanced Terahertz Detection by Localized Surface Plasma Oscillations in a Nanoscale Unipolar Diode", *J. Appl. Phys.*, vol. 103, pp. 113708, 2008.

[2] J. T. Lu, J. C. Cao, "Terahertz Generation and Chaotic Dynamics in GaN NDR Diode", *Semicond. Sci. Technol.*, vol. 19, pp. 451-456, 2004.

[3] O. Yilmazoglu, K. Mutamba, D. Pavlidis, T. Karaduman, "First Observation of Bias Oscillations in GaN Gunn Diodes on GaN Substrate", *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. 55, No. 6, pp. 1563-1567, 2008.

[4] R. F. Macphersona, G. M. Dunn, "The Use of Doping Spikes in GaN Gunn Diodes", *Appl. Phys. Lett.*, vol. 93, pp. 062103, 2008.

[5] B. Culshaw, R. A. Giblin, P. A. Blackey, "Avalanche Diode Oscillators, I. Basic Concepts", *Int. J. Electronics*, vol. 37, No. 5, pp. 577-632, 1974.

[6] C. M. Lee, R. J. Lomax, G. I. Haddad, "Semiconductor Device Simulation", *IEEE Trans. Microwave Theory Techniques*, vol. 22, No. 3, pp. 160-177, 1974.

[7] R. P. Joshi, S. Viswanadha, P. Shah, R. D. del Rosario, "Monte Carlo Analysis of GaN-Based Gunn Oscillators for Microwave Power Generation", *J. Appl. Phys.*, vol. 93, No. 8, pp. 4836-4842, 2003.

[8] X. Tang, M. Rousseau, C. Dalle, J. C. De Jaeger, "Physical Analysis of Thermal Effects on the Optimization of GaN Gunn Diodes", *Appl. Phys. Lett.*, vol. 95, pp. 142102, 2009.

# CONCLUSION GÉNÉRALE

Ce travail de thèse a été consacré à l'analyse électrique et thermique pour l'optimisation de composants de la filière nitrure de gallium. Dans ce but, nous avons étudié des contacts Schottky TiN sur hétérostructure AlGaN/GaN sur substrat Si (111) réalisés par pulvérisation magnétron et modélisé des composants de cette filière en utilisant une méthode de discrétisation basée sur la méthode des éléments finis. La caractérisation du contact Schottky permet d'avoir une bonne connaissance physique de la commande du canal. Par contre, les travaux de modélisation permettent d'optimiser des composants et permettent des analyses précises des phénomènes physiques mis en jeu.

Le premier chapitre débute par un bref rappel des propriétés physiques et thermiques des matériaux semiconducteurs III-N. Nous avons présenté une vue d'ensemble des transistors de la filière nitrure de gallium. Notamment, une étude du gaz d'électrons bidimensionnel à l'aide du modèle Schrödinger-Poisson a été faite en détail. Nous avons analysé les influences du taux d'aluminium, de l'épaisseur et du dopage de la couche barrière AlGaN sur la densité du gaz 2D. De plus, nous avons aussi présenté les principes fondamentaux de fonctionnement des diodes Gunn de la même filière nitrure de gallium, en profitant d'une grande vitesse pic et d'un temps de relaxation de l'énergie court favorables à la montée en fréquences d'oscillation. Comme l'augmentation de la température de réseau dégrade les propriétés de transport et les composants de la filière nitrure de gallium sont souvent utilisés à forte puissance, ils sont alors le siège d'effet d'auto-échauffement. Il est donc nécessaire d'étudier les effets thermiques, ce qui a motivé l'utilisation d'un modèle physico-thermique.

Le deuxième chapitre a été consacré à l'étude de la formation et les mécanismes de conduction des contacts Schottky de transistors HEMT AlGaN/GaN sur substrat Si (111). Les dépôts par pulvérisation magnétron ont permis d'obtenir des résultats remarquables notamment avec la métallisation TiN/Au. Le procédé optimisé comporte un prétraitement de surface par décapage physique à l'argon in-situ dans le bâti de métallisation, le dépôt d'une couche de TiN dont l'épaisseur est comprise entre 5 nm et 10 nm et recuit à 500 °C sous $N_2$ ou sous vide pour une technologie optique et 600 °C pour une technologie submicronique. Nous avons analysé et défini les mécanismes de conduction dominants du contact Schottky TiN/Au. Le mécanisme du courant limité par charge d'espace a permis de mettre en évidence une couche d'inversion de type *P* sous le contact Schottky.

Le troisième chapitre a consisté en une présentation de notre modèle physico-thermique. Ce modèle est une solution pour obtenir des résultats fiable avec un temps de calcul raisonnable par rapport à des modèles microscopiques. Ce chapitre a commencé par une introduction générale des équations de base utilisées dans notre modélisation et la méthodologie a ensuite été présentée. Nous avons présenté les propriétés de transport données par la simulation Monte Carlo et donné des fonctions analytiques par un algorithme génétique, afin de permettre leur introduction dans le modèle. Enfin, nous avons expliqué pourquoi le modèle a été implémenté par une méthode des éléments finis par une comparaison des avantages et des inconvénients parmi les trois méthodes de discrétisation : méthode des différences finies, méthode des éléments finis et méthode des volumes finis.

Dans le quatrième chapitre, nous avons étudié les performances thermiques des hétérostructures AlGaN/GaN et InAlN/GaN sur différents substrats à partir de structures TLM. Parmi les hétérostructures AlGaN/GaN sur les substrats : Si, GaN avec peu de dislocations, SiC monocristallin, diamant monocristallin et substrats composites (SopSiC, SiCopSiC, GaNopSiC et Sopdiamant), nous constatons que les substrats diamant monocristallin et SiC monocristallin apparaissent comme les meilleurs candidats en terme de dissipation thermique, mais les substrats composites et GaN avec peu de dislocations apportent une amélioration vis-à-vis du Si notamment pour de fortes densités de puissance. De plus, l'étude de l'impact de la température de socle du composant montre que l'augmentation de la température de socle dégrade les performances électriques et thermiques. Les résultats obtenus présentent un excellent accord avec les résultats expérimentaux. Enfin, nous avons aussi étudié les hétérostructures InAlN/GaN et comparé ses performances électriques et thermiques avec celles de la filière AlGaN/GaN.

Le dernier chapitre est consacré à l'analyse des performances électriques et thermiques des diodes Gunn GaN en utilisant notre modèle physico-thermique. Nous avons étudié des diodes Gunn avec des largeurs différentes entre les deux contacts ohmiques de 0,3 µm et 2 µm. Dans le premier cas, avec des contacts distants de 2 µm, trois épaisseurs de la couche de GaN différentes ont été étudiées, ce qui nous permet d'étudier l'impact des effets thermiques sur les performances électriques et thermiques. Après l'analyse des résultats obtenus, on trouve que la diode Gunn avec l'épaisseur de la couche active de GaN de 0,1 µm, constitue le meilleur compromis entre le rendement de conversion et la résistance dynamique. Dans ce cas, nous avons également regardé les différences obtenues en utilisant une température de réseau moyenne dans la zone active, qui est une méthode approximative pour traiter les effets thermiques. Les

résultats microondes obtenus en calculant une répartition de température en tout point et en utilisant une température moyenne sont très différents. Un compromis est nécessaire, mais ce compromis dépend de la température de fonctionnement. L'utilisation d'un modèle physico-thermique conduit donc à une analyse plus précise et plus fiable du comportement des composants qui sont le siège d'effet d'auto-échauffement important. Dans le second cas avec des contacts distants de 0,3 µm, nous obtenons une fréquence d'oscillation de 750 GHz pour une tension appliquée de 12 V, ce qui lui permet d'être utilisée dans les applications THz. En résumé, la température de réseau crée de fortes modifications des performances électriques des diodes Gunn GaN, telles que la fréquence et l'amplitude des oscillations, ainsi que sur les performances microondes.

En conclusion, notre travail a mené à une bonne compréhension des phénomènes électriques et thermiques dans les composants de la filière nitrure de gallium. Il montre que le modèle que nous avons développé est un outil très utile pour l'étude et la conception de circuits MMICs à base de GaN.

Ce travail peut mener à différentes perspectives :

La première perspective de ce travail consiste en une amélioration du notre modèle physico-thermique afin d'être capable de modéliser les transistors de type HEMT en utilisant la méthode des volumes finis. La discrétisation par la méthode des volumes finis des équations de conservation permet d'utiliser une méthode de type "upwind" donnant des schémas de discrétisation stables.

Le deuxième travail à réaliser consiste à étudier des structures plus complexes à partir de ce modèle. Dans ce cadre, deux types de structures peuvent être envisagées. Le premier type de structures correspond à des dispositifs multidoigts. Le second type de structures correspond à des structures utilisant un "heat spreader" (substrat d'accueil par le haut) pour améliorer la dissipation thermique vers le haut.

Une autre investigation consiste à utiliser notre modèle en régime impulsionnel afin d'être en mesure d'établir le régime transitoire et le régime établi pour ces conditions de fonctionnement utilisées en pratique.

Le dernier travail qui peut être réalisé consiste à optimiser la topologie de diodes Gunn dans le domaine THz, ce qui est très intéressant pour les applications de source de génération THz. Dans ce domaine des structures de type distribué peuvent être également envisagées.

# RÉSUMÉ

Le travail de thèse consiste à étudier des composants de la filière nitrure de gallium à partir d'études électriques et d'un modèle physico-thermique. Les dispositifs de cette filière sont très prometteurs pour des applications de puissance en hyperfréquence. Cependant, leurs performances électriques sont limitées par deux causes principales :

La première cause est liée à la réalisation des contacts. Dans ce travail, nous avons étudié des contacts Schottky TiN sur hétérostructures AlGaN/GaN sur substrats Si (111) réalisés par pulvérisation magnétron. Une analyse détaillée des paramètres obtenus, tels que la hauteur de barrière, le coefficient d'idéalité et le courant de fuite en polarisation inverse, permet d'optimiser la topologie et le procédé technologique, tels que la température et la durée de recuit, la passivation et le prétraitement de surface. La théorie relative aux mécanismes de conduction à travers le contact est aussi rappelée, montrant que l'effet tunnel assisté par champ électrique et le courant limité par charge d'espace sont les mécanismes dominants.

La seconde cause est liée à l'effet d'auto-échauffement important dans les composants de la filière GaN compte tenu des fortes puissances dissipées, ce qui dégrade leurs performances électriques ainsi que la fiabilité. Dans ce cadre, un modèle physico-thermique basé sur le couplage d'un modèle énergie-balance avec un modèle thermique a été développé. Ce modèle prend en compte la température de réseau en tout point du composant et décrit bien les performances électriques et thermiques des composants de cette filière. Grâce au modèle développé, nous avons d'abord analysé les hétérostructures AlGaN/GaN et InAlN/GaN sur différents substrats à partir de structures TLM, afin d'évaluer leurs performances électriques et thermiques, et ainsi d'optimiser le choix des substrats. Nous avons également étudié les diodes Gunn de la filière GaN avec différentes topologies, ce qui a permis d'optimiser une structure en termes de fréquence d'oscillations et de conversion de puissance, en prenant en compte les effets thermiques. Après une comparaison entre les résultats de simulation et ceux mesurés, il s'avère que le modèle physico-thermique est un outil de prédiction précis et fiable, extrêmement utile pour les technologues et qui permet en outre une meilleure compréhension des phénomènes physiques observés.

# *ABSTRACT*

The work of this thesis is dedicated to study gallium nitride based components by means of electric studies and a physical-thermal model. The GaN based devices are very promising for high-frequency microwave power applications. However, their electric performances are limited by two principal causes:

The first cause is related to the contacts realization. In this work, we studied TiN Schottky contacts on AlGaN/GaN heterostructures on Si (111) substrates realized by magnetron spray. A detailed analysis of the obtained parameters, such as the barrier height, the ideality factor and the reverse leakage current, permits optimizing the topology and the technological processes, such as the annealing temperature and time, the passivation and the surface pre-etching. The theory related to the conduction mechanisms through the contact is also recalled, showing that the electric field assisted tunnel effect and the space charge limited current are the dominant mechanisms.

The second cause is related to the important self-heating effect in the GaN based components in consideration of the high dissipated power, which degrades the electric performances and the reliability as well. In this framework, a physical-thermal model based on the coupling of an energy-balance model with a thermal model was developed. Such a model takes into account the lattice temperature everywhere in the device and describes the electric and thermal performances of GaN based components. Thanks to the developed model, firstly the AlGaN/GaN and InAlN/GaN heterostructures were analyzed on different substrates by means of TLM patterns, in order to evaluate their electric and thermal performances so as to optimize the substrate choice. The GaN based Gunn diodes with different topologies were also studied with the goal to optimize a structure in terms of frequency oscillation and power conversion, taking into account the thermal effects. After a comparison between the simulation results and the measured ones, it is proved that the physical-thermal model is an accurate and reliable predictive tool, which is extremely useful for the technologists and furthermore, permits a better understanding of the observed physical phenomena.

# *PUBLICATIONS ET COMMUNICATIONS*

**Physical Analysis of Thermal Effects on the Optimization of GaN Gunn Diodes**
X. Tang, M. Rousseau, C. Dalle, J. C. De Jaeger,
Appl. Phys. Lett., vol. 95, pp. 142102, 2009.

**AlGaN/GaN HEMT High Power Densities on SiC/SiO2/poly-SiC Substrates**
N. Defrance, V. Hoel, Y. Douvry, J. C. De Jaeger, C. Gaquiere, X. Tang, M. Rousseau, M. A. Di Forte-Poisson, J. Thorpe, H. Lahreche, R. Langer
IEEE Electron Device Lett., vol. 30, No. 6, pp. 596-598, 2009.

**Thermal Behavior Analysis of GaN Based Epi-Material on Different Substrates by Means of a Physical-Thermal Model**
X. Tang, M. Rousseau, N. Defrance, V. Hoel, A. Soltani, R. Langer, J. C. De Jaeger
Article soumis à publication, à Phys. Status Solidi A

**Physical-Thermal Modelling of GaN Gunn Oscillations**
X. Tang, M. Rousseau, J. C. De Jaeger
Proceedings of the 4th European Microwave Integrated Circuits Conference, EuMIC 2009, Rome, Italy, September 28-29, 2009, pp. 168-171, ISBN 978-1-4244-4749-7

**Étude du Comportement Thermique de Différents Substrats à Partir d'un Modèle Physico-Thermique**
X. Tang, M. Rousseau, N. Defrance, A. Soltani, V. Hoel, H. Gerard, R. Langer, J. C. De Jaeger
16èmes Journées Nationales Microondes, JNM 2009, Grenoble, France, 27-29 mai, 2009, 6F-15, 1-4

**Physical Thermal Investigation of GaN Gunn Diode for THz Wave Source**
X. Tang, M. Rousseau, C. Dalle, J. C. De Jaeger
5èmes Journées Térahertz, Villeneuve d'Ascq, France, 10-12 juin, 2009

**Microwave Power Capabilities of AlGaN/GaN HEMTs on Composite Substrates**
J. C. De Jaeger, V. Hoel, N. Defrance, C. Gaquiere, H. Gerard, X. Tang, M. Rousseau, H. Lahreche, R. Langer, J. Thorpe, M.A. Poisson
Proceedings of ESA/MOD Workshop on GaN Microwave Component Technologies, Ulm, Germany, March 30-31, 2009, pp. 76-86

# RÉSUMÉ

Le travail de thèse consiste à étudier des composants de la filière nitrure de gallium à partir d'études électriques et d'un modèle physico-thermique. Les dispositifs de cette filière sont très prometteurs pour des applications de puissance en hyperfréquence. Cependant, leurs performances électriques sont limitées par deux causes principales :

La première cause est liée à la réalisation des contacts. Dans ce travail, nous avons étudié des contacts Schottky TiN sur hétérostructures AlGaN/GaN sur substrats Si (111) réalisés par pulvérisation magnétron. Une analyse détaillée des paramètres obtenus, tels que la hauteur de barrière, le coefficient d'idéalité et le courant de fuite en polarisation inverse, permet d'optimiser la topologie et le procédé technologique, tels que la température et la durée de recuit, la passivation et le prétraitement de surface. La théorie relative aux mécanismes de conduction à travers le contact est aussi rappelée, montrant que l'effet tunnel assisté par champ électrique et le courant limité par charge d'espace sont les mécanismes dominants.

La seconde cause est liée à l'effet d'auto-échauffement important dans les composants de la filière GaN compte tenu des fortes puissances dissipées, ce qui dégrade leurs performances électriques ainsi que la fiabilité. Dans ce cadre, un modèle physico-thermique basé sur le couplage d'un modèle énergie-balance avec un modèle thermique a été développé. Ce modèle prend en compte la température de réseau en tout point du composant et décrit bien les performances électriques et thermiques des composants de cette filière. Grâce au modèle développé, nous avons d'abord analysé les hétérostructures AlGaN/GaN et InAlN/GaN sur différents substrats à partir de structures TLM, afin d'évaluer leurs performances électriques et thermiques, et ainsi d'optimiser le choix des substrats. Nous avons également étudié les diodes Gunn de la filière GaN avec différentes topologies, ce qui a permis d'optimiser une structure en termes de fréquence d'oscillations et de conversion de puissance, en prenant en compte les effets thermiques. Après une comparaison entre les résultats de simulation et ceux mesurés, il s'avère que le modèle physico-thermique est un outil de prédiction précis et fiable, extrêmement utile pour les technologues et qui permet en outre une meilleure compréhension des phénomènes physiques observés.



# ABSTRACT

The work of this thesis is dedicated to study gallium nitride based components by means of electric studies and a physical-thermal model. The GaN based devices are very promising for high-frequency microwave power applications. However, their electric performances are limited by two principal causes:

The first cause is related to the contacts realization. In this work, we studied TiN Schottky contacts on AlGaN/GaN heterostructures on Si (111) substrates realized by magnetron spray. A detailed analysis of the obtained parameters, such as the barrier height, the ideality factor and the reverse leakage current, permits optimizing the topology and the technological processes, such as the annealing temperature and time, the passivation and the surface pre-etching. The theory related to the conduction mechanisms through the contact is also recalled, showing that the electric field assisted tunnel effect and the space charge limited current are the dominant mechanisms.

The second cause is related to the important self-heating effect in the GaN based components in consideration of the high dissipated power, which degrades the electric performances and the reliability as well. In this framework, a physical-thermal model based on the coupling of an energy-balance model with a thermal model was developed. Such a model takes into account the lattice temperature everywhere in the device and describes the electric and thermal performances of GaN based components. Thanks to the developed model, firstly the AlGaN/GaN and InAlN/GaN heterostructures were analyzed on different substrates by means of TLM patterns, in order to evaluate their electric and thermal performances so as to optimize the substrate choice. The GaN based Gunn diodes with different topologies were also studied with the goal to optimize a structure in terms of frequency oscillation and power conversion, taking into account the thermal effects. After a comparison between the simulation results and the measured ones, it is proved that the physical-thermal model is an accurate and reliable predictive tool, which is extremely useful for the technologists and furthermore, permits a better understanding of the observed physical phenomena.