

UNIVERSITE DE PARIS-SUD
CENTRE D'ORSAY

THESE

Présentée par

Marcel FILOCHE

pour obtenir

LE TITRE DE DOCTEUR EN SCIENCES

Discipline : PHYSIQUE

Sujet : **Simulation numérique des dispositifs
microoptoélectroniques à hétérojonction**

soutenue le 6 Mars 1991 devant le jury composé de :

MM. P. HESTO	<i>Président</i>
E. CAQUOT	
G. DESTEFANIS	
A. MARROCCO	<i>Rapporteur</i>
H. MARTINOT	<i>Rapporteur</i>

Thèse préparée au

*Laboratoire de Bagneux du CNET (Centre Paris-B)
Groupement "Microélectronique III-V, Conception et Technologie"
Département "Conception et Modélisation en Microélectronique"*

A Marcel

RESUME

Ce travail porte sur l'étude et la réalisation d'un ensemble logiciel intégré destiné à la Conception Assistée par Ordinateur de dispositifs microoptoélectroniques à hétérojonction.

Le modèle physique approprié à la description du transport électronique dans les dispositifs à hétérojonction est tout d'abord étudié. On en tire un système d'équations aux dérivées partielles accompagné de lois phénoménologiques.

L'étude de la bibliographie nous permet ensuite de retenir les solutions les plus efficaces tant en ce qui concerne le schéma de discrétisation que les algorithmes de résolution numérique. Ceci se concrétise par la réalisation de deux logiciels de simulation du comportement électrique, partageant le même environnement informatique convivial, validés par plusieurs études de dispositifs réalistes.

La nécessité de simuler les dispositifs optoélectroniques nous conduit ensuite à l'étude d'un logiciel de simulation de la propagation optique dans les structures à hétérojonction. Ce logiciel est réalisé dans le même environnement informatique que les logiciels précédents, préparant donc l'intégration dans une structure globale unique.

L'ensemble de C.A.O. microoptoélectronique ainsi réalisé par connexion des structures de données est ensuite utilisé pour la simulation de dispositifs optoélectroniques et notamment pour l'étude des courants de fuite dans une structure laser BRS.

- Mots-Clefs :
- Simulation
 - Hétérojonction
 - Modélisation
 - Discrétisation
 - Microoptoélectronique
 - Eléments finis

ABSTRACT

The subject of this work is the study and the realization of a complete software set for Computer-Aided Design of microoptoelectronic devices.

First the physical model for describing electronic transport through heterojunction devices is studied. A set of differential equations is then deduced and completed with experimental rules for recombinations and mobilities.

Discretization and resolution algorithms are made after a careful study of bibliography. Then two softwares simulating the electric transport are realized, sharing the same computer environment and validated by studies of realistic devices.

Since we have to simulate optoelectronic devices, a software simulating light propagation in heterostructures is realized. This software gets the same computer environment in order to integrate it in a global software structure.

This microoptoelectronic C.A.D set is then used to simulate optoelectronic devices and especially to study leakage currents in a B.R.S. laser structure.

- Key words :**
- Simulation
 - Heterojunction
 - Modelling
 - Discretization
 - Microoptoelectronic
 - Finite Elements

REMERCIEMENTS

Ce travail a été réalisé au Laboratoire de Bagneux du Centre National d'Etudes des Télécommunications. Je remercie Monsieur J.P. Noblanc, Directeur du Laboratoire, de m'avoir permis de mener cette thèse dans de bonnes conditions. Je tiens également à remercier Monsieur Bon, Chef du Groupement MCT, et Monsieur Caquot, Chef du Département CMM, de m'avoir accueilli au CNET et de s'être constamment intéressés à mon travail.

Je remercie vivement monsieur P. Hesto, Professeur à l'Université Paris XI, de s'être intéressé à ce travail et d'avoir accepté de présider le jury de cette thèse.

Je suis honoré de compter Monsieur G. Destefanis, Directeur de Recherche au C.S.E.L.T. de Turin, Monsieur A. Marrocco, Directeur de Recherche à l'I.N.R.I.A., et Monsieur H. Martinot, Directeur de Recherche au C.N.R.S., parmi les membres de ce jury.

Cette étude n'aurait pu aboutir sans le concours sympathique et efficace de :

J. Dangla, D. Havond et C. Chevallier pour de nombreuses et fructueuses discussions et leur assistance dans plusieurs études d'optimisation.

C. Corbex, S. Martin, A. Poncet et A. Gérodolle pour l'environnement logiciel et leur aide dans la mise en place des structures de données, ainsi que de nombreuses et sympathiques discussions.

J.F. Palmier pour sa collaboration amicale et pour l'apport de la base de données physiques des matériaux III-V.

Y. Le Bellego pour la réalisation et la mesure des photodiodes, ainsi que pour des talents de marin indéniables.

S. Mottet, J.E. Viallet et C. Simon pour de nombreux et très intéressants échanges.

L. Rivière et G. Post pour l'élaboration du langage de description géométrique bidimensionnelle.

J. Godin et A. Konczykowska pour la partie informatique, qui ont toujours été présents dès qu'un problème se présentait.

A. Carengo, J. Saulnier et P. Garçon pour l'étude et l'optimisation des composants optiques.

C. Kazmierski pour l'étude du laser B.R.S..

F. Bonnouvrier et L. Royère pour l'assistance informatique

P. Hisoppe et A.Piquet pour le tirage et la reliure du rapport

J'exprime toute ma profonde sympathie à C. Algani et H. Wang pour la très bonne ambiance de bureau dont j'ai bénéficié, à L. Giraudet, J.L. Courant et A. Chisholm pour les moments de détente indispensables même à quai, à J.M. Laherrère pour son cognac ainsi qu'à L. Nguyen, P. Carer et S. Faye.

J'aimerais également remercier tous ceux qui ont contribué à l'ambiance très amicale du laboratoire : V. Hornung, A. Bruno, M. Laporte, R. Mezui, B. Bimuala, A. Boudiaf, E. Zolana et je suis sûr d'en oublier.

Je voudrais enfin remercier, "last but not least", F. Tartare pour son soutien logistique permanent et chaleureux.

PRINCIPALES NOTATIONS

Constantes physiques

q	Charge élémentaire : $1,60218 \times 10^{-19} \text{ C}$
m_0	Masse électronique : $0,91095 \times 10^{-30} \text{ Kg}$
ϵ_0	Permittivité diélectrique du vide : $8,85418 \times 10^{-14} \text{ F.cm}^{-1}$
k	Constante de Boltzmann : $1,38066 \times 10^{-23} \text{ J.K}^{-1}$
h	Constante de Planck : $6,62617 \times 10^{-34} \text{ J.s}$, ($\hbar = 2\pi \hbar$)

Notations électriques

ϕ	Potentiel électrostatique (V)
ϕ_n, ϕ_p	Niveaux de Fermi des électrons et des trous (V)
\vec{E}	Champ électrique (V.cm^{-1})
T	Température (K)
U_T	Tension thermique : $U_T = \frac{kT}{q}$ (V)
ϵ_r	Permittivité diélectrique relative (sans dim.)
E_g	Hauteur de bande interdite (eV)
E_c	Energie de bas de bande de conduction (eV)
E_v	Energie de haut de bande de valence (eV)
χ	Affinité électronique (eV)
n, p	Concentrations d'électrons et de trous (cm^{-3})
N_c, N_v	Densités des bandes de conduction et de valence (cm^{-3})
N_a, N_d	Concentrations d'impuretés de type accepteur et donneur (cm^{-3})
dop	Concentration totale d'impuretés (cm^{-3})
\vec{J}_n, \vec{J}_p	Densités de courants d'électrons et de trous (A.cm^{-2})
μ_n, μ_p	Mobilités des électrons et des trous ($\text{cm}^2.\text{V}^{-1}.\text{s}^{-1}$)
U_n, U_p	Taux de générations-recombinaisons des électrons et des trous ($\text{cm}^{-3}.\text{s}^{-1}$)
τ_n, τ_p	Durées de vie non-radiatives des électrons et des trous (s)
E_T	Niveau de piège d'une impureté (eV)

Notations optiques

ϕ	<i>Composante du champ électrique ou magnétique</i>
\vec{E}, \vec{B}	<i>Champ électrique ($V.cm^{-1}$), champ magnétique ($V.s.cm^{-2}$)</i>
n	<i>Indice réfractif (sans dim.)</i>
λ	<i>Longueur d'onde (μm)</i>
\vec{k}	<i>Vecteur d'onde : $k = \vec{k} = \frac{2\pi}{\lambda}$</i>

Introduction

- INTRODUCTION -

Les progrès informatiques des dix dernières années et le développement de la micro-optoélectronique ont imposé la simulation numérique comme un outil indispensable au concepteur de circuits ou de composants, ainsi qu'au technologue. Celle-ci peut se présenter essentiellement sous deux aspects différents : *la simulation de circuits* qui évalue les interactions entre composants en modélisant ceux-ci de façon phénoménologique (caractéristiques statiques, courbes de transfert, etc...) et *la simulation de composants* qui consiste à résoudre les équations aux dérivées partielles décrivant le comportement dans le volume des dispositifs considérés.

Les problèmes de microoptoélectronique que l'on peut traiter par la simulation de composants sont multiples. On peut néanmoins distinguer trois grandes classes de problèmes :

- La simulation des procédés technologiques de fabrication des composants à partir des étapes élémentaires (dépôt, épitaxie, diffusion, etc...).
- La simulation du comportement électronique à partir des équations décrivant le transport des porteurs de charge dans le dispositif.
- La simulation du comportement optique à partir des équations décrivant la propagation des ondes électromagnétiques.

La complexité de ces comportements et l'apparition de composants permettant de coupler ces divers phénomènes afin d'obtenir de véritables fonctions optoélectroniques exigent maintenant de pouvoir intégrer les différentes simulations correspondantes au sein d'*univers logiciels* souples et conviviaux. On assiste donc depuis quelques années à l'émergence d'une véritable C.A.O. de composants microoptoélectroniques.

Le premier chapitre expose les divers niveaux de modèles, par ordre décroissant de complexité, disponibles pour représenter le fonctionnement des dispositifs microélectroniques. Une attention toute particulière est portée sur les problèmes posés par les hétérojonctions abruptes ou graduelles et les diverses hypothèses couramment admises en modé-

lisation des composants sont rediscutées dans ce cadre plus général. Les équations de continuité des populations, les expressions des courants ainsi que la conservation de l'énergie sont tirées de l'équation de transport de Boltzmann dans le cas des hétérostructures et pour une statistique quelconque, ce qui permet d'aboutir à un modèle de dérive-diffusion le plus général possible. Enfin les diverses lois phénoménologiques liées à ce modèle, telles que les lois de mobilité, d'ionisation, de recombinaisons sont détaillées et discutées.

La résolution mathématique et numérique du modèle de dérive-diffusion pose de nombreux problèmes, notamment à cause du caractère fortement non-linéaire des équations traitées et de leur couplage étroit. Des solutions nombreuses et variées ont été apportées pour résoudre ces problèmes, chacune comportant des avantages et des inconvénients.

Le deuxième chapitre expose la place de la simulation numérique dans la compréhension, l'étude et la conception des composants microélectroniques, puis passe en revue plus particulièrement les principaux problèmes de la simulation du transport électronique dans le modèle de dérive-diffusion. Dans chaque cas les solutions apportées par de nombreux laboratoires de par le monde sont examinées et comparées. Enfin un tableau récapitulatif des principaux logiciels de C.A.O. microélectronique est dressé, aussi bien pour la simulation de la fabrication que celle du comportement électronique. Le logiciel *TITAN III-V*, utilisé comme préprocesseur d'entrée pour nos logiciels de simulation du transport électronique, est enfin brièvement présenté.

Le troisième chapitre présente les logiciels de simulation électronique 1D, *ETHER*, et 2D, *DENEK*, réalisés au cours de cette thèse. Les schémas de discrétisation, puis de résolution et enfin les algorithmes de résolution sont détaillés dans les deux cas. Des dispositifs standards sont utilisés pour la validation de ces logiciels et enfin plusieurs études menées sur des dispositifs réels permettent de démontrer l'intérêt de ce type d'approche pour l'optimisation de composants complexes.

L'intégration des fonctions optiques et électroniques, notamment pour les applications de télécommunications, impose de pouvoir également modéliser et simuler la propagation de la lumière dans les composants microoptoélectroniques, voire également son interaction avec les porteurs de la structure.

Le quatrième chapitre présente donc le logiciel *ALCOR* de simulation de la propagation optique qui a été réalisé pendant cette thèse. On étudie tout d'abord les équations d'Helmholtz en milieu hétérogène en examinant en détail les conséquences des hétérojonctions sur la propagation lumineuse. Un modèle adapté à la simulation de la propagation lumineuse en mode TE et TM en est déduit puis résolu numériquement grâce à un algorithme de *Beam Propagation Method (B.P.M.)*. Le logiciel est ensuite utilisé pour étudier la réduction des dimensions de guide en titane diffusé sur niobate de lithium, grâce à une diffusion latérale d'oxyde de magnésium. Les résultats de simulation sont comparés avec les résultats expérimentaux de la littérature.

Un véritable outil de C.A.O. de dispositifs microoptoélectroniques nécessite donc la réunion de tous les logiciels précédents dans un ensemble cohérent et convivial.

Le cinquième et dernier chapitre présente donc les applications possibles des logiciels précédents à la simulation des composants microoptoélectroniques. Dans un premier temps les contraintes numériques et informatiques liées à ce type de simulation sont exposées. Des études et optimisations de dispositifs tels que la photodiode PIN ou le laser BRS sont ensuite effectuées et comparées aux résultats expérimentaux.

Nous concluons enfin en exposant les perspectives de développement et d'applications de ces logiciels afin d'aboutir à une C.A.O. complète et généraliste de dispositifs microoptoélectroniques.

Chapitre 1

Modélisation du transport électronique

I. GENERALITES

Le développement récent des technologies de fabrication des matériaux III-V a provoqué l'apparition de nouveaux domaines dans la conception de composants électroniques, tel que le "band gap engineering" consistant à obtenir des comportements électriques voulus en modifiant la géométrie, les matériaux et les dopages à l'intérieur du dispositif [1]. Ce type d'approche exige une analyse extrêmement fine des phénomènes physiques de transport des charges. Or cette connaissance précise du fonctionnement des structures conçues ne peut plus être obtenue, vu les dimensions de plus en plus réduites des composants et la complexité des phénomènes mis en jeu, par des méthodes globales de schémas électriques équivalents ou des calculs analytiques. La modélisation du dispositif doit alors passer par la résolution locale d'équations aux dérivées partielles décrivant les phénomènes électromagnétiques et le transport des charges, en faisant appel aux méthodes modernes de l'analyse numérique de type différences finies ou éléments finis.

Nous allons examiner dans ce chapitre les différents modèles physiques généralement utilisés pour la simulation des phénomènes de transport de charge dans les semiconducteurs et discuter la validité des approximations dans le cas général des dispositifs à hétérojonction ou à composition non-uniforme. L'analyse des différentes hypothèses sera effectuée en s'appuyant sur les modes de fonctionnement des dispositifs couramment rencontrés en microélectronique.

Un modèle de dérive-diffusion adapté à la simulation numérique des dispositifs à hétérojonction en sera ensuite déduit et nous examinerons dans le détail les diverses lois phénoménologiques incluses dans ce modèle.

2. LES DIVERS MODELES PHYSIQUES

On peut distinguer plusieurs niveaux de modèles pour la description des phénomènes de transport électrique dans les dispositifs semiconducteurs. Chacun de ces modèles peut être grossièrement subdivisé en deux parties : une première partie modélisant les phénomènes électromagnétiques à l'intérieur du dispositif et une seconde modélisant les transports des diverses quantités conservées (nombre de particules, moments, énergies).

2.1. Les phénomènes électromagnétiques

Le modèle fondamental de l'électromagnétisme est constitué des équations de Maxwell dans la matière :

$div \vec{D} = \rho \quad (1.1)$	$rot \vec{H} - \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} = \vec{J} \quad (1.3)$	$\vec{D} = \epsilon \vec{E} \quad (1.5)$
$div \vec{B} = 0 \quad (1.2)$	$rot \vec{E} + \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} = \vec{0} \quad (1.4)$	$\vec{B} = \mu \vec{H} \quad (1.6)$

\vec{E} et \vec{H} sont les champs électrique et magnétique et sont reliés au déplacement électrique \vec{D} et à l'induction magnétique \vec{B} par les relations constitutives (1.5) et (1.6) grâce à ϵ et μ qui sont respectivement la permittivité diélectrique et la perméabilité du matériau. Enfin ρ et \vec{J} représentent la densité de charge électrique et la densité de courant dans la structure.

Les notations utilisées pour ϵ et μ dans les équations constitutives sont des notations générales d'opérateur. Cependant tous les matériaux rencontrés habituellement dans les conditions de fonctionnement des dispositifs microélectroniques réunissent les propriétés suivantes : ils sont linéaires, permanents et isotropes. La relation générale liant le déplacement électrique au champ électrique dans un matériau uniforme s'écrit alors :

$$\vec{D} = \int \epsilon(\vec{x} - \vec{x}', t - t') \vec{E}(\vec{x}', t') d\vec{x}' dt'$$

où la fonction ϵ est localisée autour du point $(\vec{x} = \vec{0}, t = 0)$. Dans les cas statiques ou basses fréquences (pour des phénomènes dont les temps typiques sont supérieurs à 10^{-14} s), cette relation devient locale dans le temps et dans l'espace. De façon courante, on peut supposer le champ magnétique nul dans la structure : les phénomènes électromagnétiques sont alors bien modélisés à l'aide de la seule équation de Poisson (1.1). Les équations de Maxwell se ramènent dans ce cas à :

$$\boxed{\operatorname{div} \epsilon_r \vec{E} = \frac{\rho}{\epsilon_0}} \quad \text{avec} \quad \epsilon = \epsilon_0 \epsilon_r \quad (1.7)$$

ϵ_0 étant la permittivité diélectrique du vide et ϵ_r la permittivité relative du matériau. On peut cependant trouver des dispositifs tels que le magnéto transistor où le champ magnétique est non seulement non-nul mais joue également un rôle important [2].

Dans le cas où le champ magnétique est nul et du fait de l'équation (1.4), le rotationnel du champ électrique est nul : on peut donc trouver un potentiel ϕ vérifiant : $\vec{E} = -\vec{\nabla}\phi$. De plus la densité de charge dans les semiconducteurs peut être décomposée en deux parties : une partie due aux porteurs libres dans le matériau que sont les électrons et les trous et une partie due aux atomes ionisés qui sont donc des charges fixes. Si on prend comme inconnue le potentiel électrostatique ϕ , l'équation de Poisson devient

alors :

$$\operatorname{div}(-\epsilon_r \vec{\nabla}\phi) = \frac{\rho}{\epsilon_0} = \frac{q}{\epsilon_0}(p - n + dop)$$

soit encore

$$\boxed{\operatorname{div}(\epsilon_r \vec{\nabla}\phi) = \frac{q}{\epsilon_0}(n - p - dop)} \quad (1.8)$$

n et p représentant respectivement les densités d'électrons et de trous, et dop la somme des concentrations d'impuretés ionisées, c'est-à-dire les charges fixes de type donneur ou accepteur :

$$\boxed{dop = \sum_i N_{D_i}^+ - \sum_j N_{A_j}^-}$$

L'équation de Poisson décrit donc les phénomènes électromagnétiques présents dans la structure et fournit le potentiel électrostatique créé par les charges fixes ou mobiles. Il nous reste à modéliser maintenant le transport des porteurs libres, c'est-à-dire leurs interactions avec le champ électrique, le cristal (phonons, pièges, etc...) et les autres particules (recombinaisons, photons).

2.2. L'équation de transport de Boltzmann

L'évolution d'une population de N particules indiscernables classiques, dont l'état exact est mal ou imparfaitement connu, peut être décrite par l'intermédiaire d'une fonction de densité $f(\vec{r}_1, \vec{p}_1, \dots, \vec{r}_N, \vec{p}_N, t)$, \vec{r}_i et \vec{p}_i étant la position et l'impulsion de la $i^{\text{ème}}$ particule : cette fonction représente la densité de probabilité de présence du système des N particules à l'instant t autour du point $(\vec{r}_1, \vec{p}_1, \dots, \vec{r}_N, \vec{p}_N)$ dans l'espace à $6N$ dimensions appelé espace des phases. Chaque particule obéit aux équations classiques du mouvement dites de Hamilton :

$$\frac{\partial \vec{r}_i}{\partial t} = \frac{\partial H}{\partial \vec{p}_i} \quad \text{et} \quad \frac{\partial \vec{p}_i}{\partial t} = -\frac{\partial H}{\partial \vec{r}_i} \quad H \text{ étant le hamiltonien du système total}$$

Le théorème de Liouville permet alors de décrire l'évolution temporelle de cette densité : *le volume d'une région de l'espace des phases reste constant lorsque l'on suit cette région dans son évolution temporelle*. L'évolution de la population est donc donnée par l'équation de Liouville :

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \sum_{i=1}^N \left(\frac{\partial f}{\partial \vec{r}_i} \cdot \frac{\partial \vec{r}_i}{\partial t} + \frac{\partial f}{\partial \vec{p}_i} \cdot \frac{\partial \vec{p}_i}{\partial t} \right) = \frac{\partial f}{\partial t} + \sum_{i=1}^N \left(\frac{\partial f}{\partial \vec{r}_i} \cdot \frac{\partial H}{\partial \vec{p}_i} - \frac{\partial f}{\partial \vec{p}_i} \cdot \frac{\partial H}{\partial \vec{r}_i} \right) = 0$$

On appelle crochet de Poisson et on note $\{H, f\}$ l'opposé de la somme présente dans l'équation précédente. Celle-ci peut donc se réécrire sous la forme :

$$\boxed{\frac{\partial f}{\partial t} = \{H, f\}} \quad \text{avec} \quad \{H, f\} = \sum_{i=1}^N \left(\frac{\partial H}{\partial \vec{r}_i} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{p}_i} - \frac{\partial H}{\partial \vec{p}_i} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{r}_i} \right)$$

Dans le cas où les N particules sont sans interactions et plongées dans un champ de forces extérieures dérivant d'un potentiel V , le hamiltonien du système se réduit à une

$$\text{somme de hamiltoniens à un corps : } H = \sum_{i=1}^N H_i = \sum_{i=1}^N \left(\frac{\vec{p}_i^2}{2m} + V(\vec{r}_i) \right)$$

On peut donc caractériser le système par une fonction de densité réduite à un corps $f(\vec{r}, \vec{p}, t)$ qui peut s'interpréter comme la densité de particules dans l'espace des phases

$$\text{à un corps } (\vec{r}, \vec{p}) : f(\vec{r}, \vec{p}, t) = \hbar^{-3} \int d^3r_2 d^3p_2 \dots d^3r_N d^3p_N f(\vec{r}_1, \vec{p}_1, \dots, \vec{r}_N, \vec{p}_N, t)$$

$$\text{On en déduit donc : } \boxed{\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \vec{v} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{r}} f + \vec{F} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{p}} f = 0} \quad \text{avec } \vec{v} \equiv \frac{\vec{p}}{m} \quad (1.9)$$

\vec{v} représente la vitesse moyenne des particules et \vec{F} les forces agissant sur elles.

Cette équation est appelée équation de transport de Boltzmann. Dans le cas où il existe un potentiel d'interaction entre particules, celui-ci modifie leurs impulsions à chaque collision et la densité de probabilité $f d^3r d^3p$ dans le volume $d^3r d^3p$ n'est plus conservée lors de son évolution. On doit donc modifier l'équation de Boltzmann en introduisant au second membre un terme dû à ces collisions :

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \vec{v} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{r}} f + \vec{F} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{p}} f = \left(\frac{df}{dt} \right)_{coll} \quad (1.10)$$

Par analogie avec la mécanique quantique, on utilise souvent le moment \vec{k} de la particule à la place de son impulsion. Les deux quantités sont directement reliées : $\vec{p} = \hbar \vec{k}$. L'équation de transport de Boltzmann s'écrit alors :

$$\boxed{\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial t} + \vec{v} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{r}} f + \frac{\vec{F}}{\hbar} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{k}} f = \left(\frac{df}{dt} \right)_{coll}} \quad (1.11)$$

2.2.1. Application aux dispositifs à semiconducteurs

A l'intérieur d'un semiconducteur tous les phénomènes sont profondément quantiques. Cependant l'interaction des électrons avec un potentiel périodique cristallin entraîne la création de bandes d'énergies interdites et peut se modéliser à l'aide de quasi-particules de charge $+e$, les trous. On peut alors considérer les électrons et les trous comme des particules classiques dont les masses effectives m_n^* et m_p^* ont été modifiées par le potentiel cristallin, et dont les vitesses suivent des lois en fonction du vecteur d'onde légèrement différentes de celles données par (1.9) : ce sont les relations de dispersions du milieu considéré.

Le système thermodynamique global constitué de ces deux populations de particules classiques peut dans les situations proches de l'équilibre être considéré comme deux sous-systèmes indépendants faiblement couplés et donc être décrit par deux fonctions densité f_n et f_p dans l'espace des phases (\vec{x}, \vec{k}) :

$$\begin{aligned} \frac{df_n}{dt} &= \frac{\partial f_n}{\partial t} + \vec{v}_n \cdot \vec{\nabla}_{\vec{x}} f_n + \frac{\vec{F}_n}{\hbar} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{k}} f_n = Q_n(f_n, f_p) \\ \frac{df_p}{dt} &= \frac{\partial f_p}{\partial t} + \vec{v}_p \cdot \vec{\nabla}_{\vec{x}} f_p + \frac{\vec{F}_p}{\hbar} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{k}} f_p = Q_p(f_n, f_p) \end{aligned}$$

Les forces agissant sur les porteurs sont dues au champ électrique et à la variation du potentiel cristallin dans les changements de matériaux, les autres interactions (électron-électron, électron-trou, trou-trou mais aussi avec les impuretés et les phonons) étant modélisées à l'aide des termes de collisions $Q_n(f_n, f_p)$ et $Q_p(f_n, f_p)$. Si on ne considère que les interactions internes à chaque population, ce terme peut s'approcher assez bien grâce à la règle d'or de Fermi.

Il faut cependant bien garder à l'esprit que les particules sont toujours traitées classiquement dans ce cas. Ce modèle est donc mal adapté à la description de dispositifs à très courtes dimensions (puits quantiques, superréseaux, etc...). Il faut alors revenir à la résolu-

tion de l'équation de Schrödinger pour obtenir les probabilités de présence, les niveaux d'énergie et les densités d'états.

Le cas des hétérostructures abruptes est également délicat : en effet à l'interface des deux matériaux il y a discontinuité des valeurs physiques telles que les masses effectives ou les énergies de bas de bandes. Il existe alors une zone de quelques longueurs atomiques de chaque côté de la jonction où le traitement précis des phénomènes physiques ne peut être effectué que de façon quantique. Nous avons néanmoins axé notre étude sur la réalisation d'outils de CAO microélectronique à partir des équations classiques car la frontière de deux matériaux n'est pas dans la plupart des cas rencontrés une interface spatiale précise mais plus souvent un mélange intime de ceux-ci sur une zone de transition de quelques longueurs atomiques : l'hétérojonction idéalement abrupte n'est alors qu'un cas théorique limite qui peut être traité par le modèle classique moyennant des corrections (de type effet thermoionique) que nous détaillerons dans la suite de ce chapitre.

Les modèles fondés sur l'équation de transport de Boltzmann constituent la base dont on déduit la plus grande partie des modèles actuellement utilisés. Ceux-ci sont obtenus pour la plupart par projection de l'équation de Boltzmann sur une des composantes de l'espace des phases.

2.3. Les équations de conservation

Nous allons calculer la réponse d'un dispositif microélectronique à semiconducteur à des perturbations extérieures (tensions appliquées, éclairage, etc...) le déplaçant de son équilibre thermodynamique. Les temps caractéristiques de retour à l'équilibre local dû aux échanges d'impulsions à l'intérieur de chaque population de porteurs (temps de relaxation) sont typiquement de l'ordre de 10^{-14} ou 10^{-13} seconde. Dans des situations proches de l'équilibre, les phénomènes de transport spatial des porteurs et de l'énergie ainsi que les recombinaisons locales électron-trou sont en comparaison bien moins efficaces : leurs temps de réponses, qui caractérisent le retour à l'équilibre global du dispositif, peuvent être considérés comme macroscopiques devant les précédents.

On peut donc subdiviser le système global en une somme infinie de doubles sous-systèmes locaux d'électrons et de trous qui sont chacun en équilibre thermodynamique. Ces sous-systèmes sont faiblement couplés entre eux et les variations spatiales plus lentes des variables intensives (potentiel thermodynamique, température) entraînent des flux des quantités conservées associées qui évoluent à l'intérieur du dispositif avec des temps de réponse macroscopiques.

Cet état du dispositif est appelé "régime hydrodynamique" (ou de transport à l'équilibre local) par analogie avec la mécanique des fluides. On s'intéresse alors aux variations spatiales et temporelles macroscopiques des quantités conservées telles que les densités de porteurs ou d'énergie. Lorsque les flux engendrés ne varient plus dans le temps à cause de conditions extérieures imposées de façon constante (tensions, courants, etc...), le dispositif se stabilise dans une situation dite de transport en régime stationnaire.

Cet état général (dynamique ou stationnaire) suppose également que les longueurs caractéristiques d'établissement de l'équilibre local soient petites devant les distances de variation du dispositif et des grandeurs étudiées. Cette hypothèse est évidemment mise en défaut dans une hétérojonction abrupte puisque celle-ci contient une discontinuité spatiale du matériau, mais de même que dans le paragraphe précédent, nous ne considérerons l'hétérojonction abrupte que comme un cas limite de la jonction graduelle moyennant quelques corrections.

Nous pouvons donc déduire grâce à l'ensemble des hypothèses précédentes l'expression générale des termes de collisions $Q_n(f_n, f_p)$ et $Q_p(f_n, f_p)$: ceux-ci sont la somme d'un terme dû à la relaxation interne de chaque population vers son équilibre thermodynamique local et d'un second terme isotrope traduisant les générations-recombinaisons électron-trou. La relaxation vers l'équilibre thermodynamique local qui est représenté par une fonction densité f_0 , peut être décrit phénoménologiquement en première approximation par un terme linéaire du type :

$$Q_{coll}^n(f) = W_n (f_0 - f)$$

W_n (resp. W_p) représente l'inverse du temps typique de relaxation locale τ_{Wn}^n (resp. τ_{Wp}^p). Durant nos calculs nous allons nous placer dans des régimes suffisamment proches de l'équilibre thermodynamique local pour que la fonction densité puisse être considérée comme un développement, le plus souvent au premier ordre, en W autour de la densité d'équilibre f_0 .

En résumé, il existe dans les phénomènes de transport dans les semiconducteurs trois échelles de temps : la première caractérisée par τ_{Wn}^n et τ_{Wp}^p pour la relaxation interne de chaque population vers une distribution d'équilibre local, la seconde caractérisée par les durées de vie non-radiatives τ_n et τ_p pour les phénomènes d'échanges locaux entre les deux populations d'électrons et de trous (générations-recombinaisons) et la troisième caractérisée par les performances fréquentielles du dispositif (quelques GHz) pour les échanges macroscopiques spatiaux. Les ordres de grandeur typiques sont donc :

$$\tau_{Wn}^n, \tau_{Wp}^p = 10^{-13}, 10^{-14} \text{s} \quad \tau_{np} \in [10^{-10} \text{s}, 10^{-6} \text{s}] \quad f^{-1} \in [10^{-12} \text{s}, 10^{-6} \text{s}]$$

Les deux dernières échelles de temps étant du même ordre de grandeur et relativement plus lentes que la première, nous verrons que l'on pourra ensuite faire intervenir les phénomènes correspondants simultanément à l'intérieur du même modèle, c'est-à-dire concrètement introduire les termes de générations-recombinaisons dans les équations de continuité des populations.

Nous allons maintenant déterminer, grâce aux hypothèses précédentes, les équations de bilans macroscopiques associées aux transport des quantités conservées dans des régimes de quasi-équilibre. Une approche thermodynamique nous permettra enfin de déduire l'expression des flux en fonction des grandeurs macroscopiques usuelles telles que les divers potentiels ou les densités de porteurs.

2.3.1. La conservation du nombre de particules

Les premières équations que l'on peut tirer de l'équation de Boltzmann s'obtiennent en intégrant sur l'espace des moments. On aboutit donc à :

$$\int \frac{\partial f_n}{\partial t} d^3k + \text{div} \left(\int f_n \vec{v} d^3k \right) + \frac{\vec{F}}{\hbar} \cdot \int \vec{\nabla}_k f_n d^3k = \int Q_n(f_n, f_p) d^3k$$

Soit encore :

$$-q \frac{\partial n}{\partial t} + \text{div} \vec{J}_n = -q GR_n$$

$$n = \hbar^3 \int f_n d^3k \quad \vec{J}_n = -q \hbar^3 \int f_n \vec{v}_n d^3k \quad GR = \hbar^3 \int Q_n(f_n, f_p) d^3k$$

q étant la valeur absolue de la charge de l'électron et \hbar la constante de Planck. Cette équation est une équation classique de conservation d'espèce du type :

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div} \vec{J} = GR$$

où ρ représente la densité de particules de la population considérée, \vec{J} la densité de courant associée et GR est un taux de générations-recombinaisons qui exprime la non-conservation locale du courant de porteurs par création ou annihilation de paires électron-trou. En revanche les termes d'interactions à l'intérieur d'une même espèce (électron ou trou) ne contribuent pas à ce taux car ils ne modifient que les impulsions et gardent constant le nombre de particules. Il existe une équation de conservation pour les électrons et une autre pour les trous ce qui donne :

$$\left\{ \begin{array}{l} -q \frac{\partial n}{\partial t} + \text{div} \vec{J}_n = -q GR_n \end{array} \right. \quad (1.12)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} q \frac{\partial p}{\partial t} + \text{div} \vec{J}_p = q GR_p \end{array} \right. \quad (1.13)$$

2.3.2. La conservation des moments

On peut exprimer de la même manière les conservations des moments pour les électrons et les trous en multipliant chaque équation de Boltzmann par \vec{k} et en intégrant sur l'espace des moments. Par exemple pour les électrons :

$$\int \frac{\partial f}{\partial t} \vec{k} d^3k + \int (\vec{v} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{r}} f) \vec{k} d^3k + \int \left(\frac{\vec{F}}{\hbar} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{k}} f \right) \vec{k} d^3k = \int Q_n(f_n, f_p) \vec{k} d^3k$$

On retrouve dans le premier terme de cette équation l'expression du courant déduite des équations de continuité pour la densité de porteurs :

$$\int \frac{\partial f}{\partial t} \vec{k} d^3k = \frac{\partial}{\partial t} \int f \vec{k} d^3k = -\frac{m_n^*}{q\hbar^4} \cdot \frac{\partial \vec{J}_n}{\partial t}$$

Si on suppose que l'on se trouve près de l'équilibre thermodynamique local pour la population d'électrons, on peut développer la fonction densité suivant la méthode de Chapman-Enskog (1916-17) [3] : $f = f_0 + f_1$. f_0 représente la densité à l'équilibre thermodynamique local qui annule le terme de relaxation : elle est constante et isotrope. f_1 représente la réponse à la perturbation extérieure au premier ordre en W qui est l'inverse du temps de relaxation : cette densité est responsable des courants.

La méthode de Chapman-Enskog impose alors l'égalité des deux membres de l'équation de Boltzmann à chaque ordre du développement en W . Si on se place dans un régime proche de l'équilibre thermodynamique, on peut exprimer la dépendance de la densité électronique f_0 en fonction du potentiel thermodynamique E_n , de la température T_n de la population d'électrons et de la constante de Boltzmann k :

$$f_0(\vec{x}, \vec{k}, t) = f_0\left(\frac{E_n - \epsilon_n}{kT_n}\right) \quad \text{avec} \quad \epsilon_n = \frac{\vec{p}^2}{2m_n^*} + V(\vec{r})$$

On peut donc exprimer les divers termes du premier membre de l'équation de conservation du moment au premier ordre en W , f_0 étant la dérivée de la fonction f_0 :

$$\vec{\nabla}_{\vec{r}} f = f_0 \left(\frac{E_n - \epsilon_n}{kT_n} \right) \vec{\nabla} \left(\frac{E_n - \epsilon_n}{kT_n} \right) \quad \vec{\nabla}_{\vec{k}} f = -f_0 \left(\frac{E_n - \epsilon_n}{kT_n} \right) \frac{\hbar^2}{m_n^* kT_n} \vec{k}$$

$$\text{Et donc :} \quad \vec{v} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{r}} f + \frac{\vec{F}}{\hbar} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{k}} f = f_0 \left(\frac{E_n - \epsilon_n}{kT_n} \right) \left(\vec{\nabla} \left(\frac{E_n - \epsilon_n}{kT_n} \right) - \frac{1}{kT_n} \vec{F} \right) \cdot \vec{v}$$

Lisotropie de la densité à l'équilibre thermodynamique local nous permet d'effectuer l'intégration de cette expression sur les moments, en séparant le gradient spatial de l'énergie en gradient d'énergie potentielle et d'énergie cinétique :

$$\int \left(\vec{v} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{r}} f + \frac{\vec{F}}{\hbar} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{k}} f \right) \vec{k} d^3k = \frac{m_n^*}{3\hbar} \int f_0 \left(\frac{E_n - \epsilon_n}{kT_n} \right) v^2 d^3k \cdot \left(\vec{\nabla} \left(\frac{E_n - V}{kT_n} \right) - \frac{1}{kT_n} \vec{F} \right) + \frac{m_n^{*3}}{3\hbar} \int f_0 \left(\frac{E_n - \epsilon_n}{kT_n} \right) v^4 d^3k \cdot \vec{\nabla} \left(\frac{1}{2m_n^* kT_n} \right)$$

Car : $\int f_0 k_\alpha k_\beta d^3k = \frac{\delta_{\alpha\beta}}{3} \int f_0 k^2 d^3k$, $\delta_{\alpha\beta}$ étant le symbole de Kronecker. Sachant qu'à température constante, le courant d'électrons n'est dû qu'au gradient du potentiel thermodynamique, on en déduit que la force subie par un porteur s'exprime comme la somme d'une force provenant du gradient de potentiel V et d'une force provenant de la variation de la masse effective dans le matériau. Cette seconde force traduit la modification de l'énergie cinétique du porteur lorsqu'il se propage dans des matériaux de composition variable :

$$\vec{F} = -\vec{\nabla}V + \vec{F}_1 = -\vec{\nabla}V + \frac{1}{2} \left(\frac{\int f_0 v^4 d^3k}{\int f_0 v^2 d^3k} \right) \cdot \vec{\nabla} m_n^* \quad (1.14)$$

De plus en intégrant par partie on obtient :

$$\int f_0 \left(\frac{\mu_n - \epsilon_n}{kT_n} \right) v^2 d^3k = -\frac{kT_n}{m_n^*} \int \vec{\nabla}_{\vec{k}} f_0 \vec{k} d^3k = \frac{3kT_n}{m_n^*} \int f_0 d^3k = \frac{3kT_n}{m_n^* \hbar^3} n$$

$$\text{Et de même : } \int f_0 \left(\frac{\mu_n - \epsilon_n}{kT_n} \right) v^4 d^3k = \frac{3kT_n}{m_n^*} \int v^2 f_0 d^3k = \frac{3kT_n}{m_n^* \hbar^3} n \langle v^2 \rangle$$

La force supplémentaire due à la variation de masse effective s'écrit donc :

$$\boxed{\vec{F}_1 = \frac{1}{2} m_n^* \langle v^2 \rangle \cdot \frac{\vec{\nabla} m_n^*}{m_n^*}} \quad (1.15)$$

Remarque : dans le cas de la statistique de Boltzmann, on peut évaluer complètement cette expression. En effet la vitesse quadratique moyenne des porteurs est la somme de la vitesse de dérive macroscopique des porteurs et de l'agitation interne que l'on peut évaluer en se plaçant à l'équilibre thermodynamique :

$$\int f_0 \vec{k}^2 d^3k = \frac{3mkT_n}{\hbar^5} n \quad \text{et donc} \quad \boxed{\langle v^2 \rangle = v_n^2 + \frac{3kT_n}{m_n^*}}$$

Dans le cas général, l'expression de la force apparaissant dans l'équation de Boltzmann aboutit donc à compenser les termes proportionnels au gradient de la masse effective et à ne laisser qu'une somme de deux termes, l'un lié au gradient d'énergie de Fermi et l'autre au gradient de température.

Le second membre de l'équation de Boltzmann, dû aux collisions, se compose de deux termes. Le premier terme est le terme de relaxation interne qui ramène la population considérée à un état de quasi-équilibre. Le second provient des recombinaisons électrons-trous que nous supposons isotropes : sa contribution est donc nulle. On obtient donc :

$$\int Q_n(f_n, f_p) \vec{k} d^3k = -W \int f_n \vec{k} d^3k = \frac{m_n^*}{q \hbar^4 \tau_W^n} \vec{J}_n$$

Rassemblant tous ces termes, on peut reconstituer l'équation de conservation du moment :

$$-\frac{m_n^*}{q} \hbar^4 \cdot \frac{\partial \vec{J}_n}{\partial t} + n \frac{kT_n}{\hbar^4} \left(\vec{\nabla} \left(\frac{E_n - V}{kT_n} \right) - \frac{1}{kT_n} \vec{\nabla} V + \frac{1}{2} m_n^* \langle v^2 \rangle \vec{\nabla} \left(\frac{1}{kT_n} \right) \right) = \frac{m_n^*}{q \hbar^4 \tau_W^n} \vec{J}_n$$

L'équation de conservation du moment électronique se traduit donc finalement par :

$$\boxed{\frac{\partial \bar{\mathbf{J}}_n}{\partial t} + \frac{\bar{\mathbf{J}}_n - \bar{\mathbf{J}}_n^0}{\tau_{Wn}^n} = 0} \quad (1.16)$$

avec $\bar{\mathbf{J}}_n^0 = n\mu_n kT_n \left[\bar{\nabla} \left(\frac{E_n}{kT_n} \right) - (V + w_n) \bar{\nabla} \left(\frac{1}{kT_n} \right) \right]$
 en posant $\mu_n = \frac{q\tau_{Wn}^n}{m_n^*}$ $w_n = \frac{1}{2} m_n^* \langle \bar{v}^2 \rangle$

On reconnaît dans l'équation (1.16) une équation de relaxation : sous l'effet d'une perturbation extérieure les électrons retrouvent un équilibre thermodynamique local en un temps τ_{Wn}^n puis commencent à évoluer plus lentement pour restaurer un équilibre global à la fois localement avec les trous et spatialement avec les sous-systèmes voisins. Le courant de porteurs atteint donc sur le même intervalle de temps une valeur correspondant à la réponse linéaire du système devant un gradient macroscopique des variables intensives associées à des quantités conservées :

$$\text{densités de porteurs} \longrightarrow \frac{E_n}{kT_n} \quad \text{énergie} \longrightarrow \frac{1}{kT_n}$$

Le coefficient de réponse est proportionnel à la densité n et à un facteur μ_n appelé mobilité qui s'exprime en fonction du temps de relaxation et de la masse effective. Cette équation permet donc d'obtenir l'expression du courant d'électrons en régime de quasi-équilibre, en fonction des densités de porteurs, du niveau de Fermi et de la température de la population de porteurs. Le raisonnement est strictement identique pour les trous.

On obtient donc :

$$\left\{ \bar{\mathbf{J}}_n^0 = n\mu_n kT_n \left[\bar{\nabla} \left(\frac{E_n}{kT_n} \right) - (V + w_n) \bar{\nabla} \left(\frac{1}{kT_n} \right) \right] = n\mu_n \left[\bar{\nabla} E_n + (V + w_n - E_n) \frac{\bar{\nabla} T_n}{T_n} \right] \right. \quad (1.17)$$

$$\left. \bar{\mathbf{J}}_p^0 = p\mu_p kT_p \left[\bar{\nabla} \left(\frac{E_p}{kT_p} \right) - (V + w_p) \bar{\nabla} \left(\frac{1}{kT_p} \right) \right] = p\mu_p \left[\bar{\nabla} E_p + (V + w_p - E_p) \frac{\bar{\nabla} T_p}{T_p} \right] \right. \quad (1.18)$$

Ces expressions seront utilisées par la suite dans le modèle hydrodynamique ainsi que dans le modèle de dérive-diffusion pour explorer l'évolution du système sur des durées macroscopiques. On peut donc noter qu'une mesure de mobilité permet de remonter aux temps de relaxation des populations de porteurs et ainsi vérifier les hypothèses sur les échelles de temps relatives des divers retours à l'équilibre. Pour l'arséniure de gallium (GaAs) par exemple, on obtient :

$$\mu_n = 4000 \text{ cm}^2 \cdot \text{V}^{-1} \cdot \text{s}^{-1} \quad m_n^* = 0,067 m_e \quad \Rightarrow \quad \tau_W^n = \frac{m_n^* \mu_n}{q} = 1,5 \cdot 10^{-13} \text{ s}$$

:

On retrouve effectivement des valeurs de temps de relaxation bien plus faibles que pour les recombinaisons électron-trou ou pour le transport macroscopique dans le composant.

On peut noter que l'obtention de ces courants n'a demandé que quelques hypothèses restreintes sur la forme de la densité de Boltzmann à l'équilibre thermodynamique local. Les expressions de courants fournies sont donc valables quelque soit la statistique employée, Boltzmann ou Fermi-Dirac.

Remarque : dans le cas où l'on se place dès le début en statistique de Boltzmann, chaque terme de l'équation initiale peut être évalué séparément. En effet :

$$\int \frac{\partial f}{\partial t} \vec{k} d^3k = - \frac{m_n^*}{q \hbar^4} \frac{\partial \vec{J}_n}{\partial t} \quad \int \left(\frac{\vec{F}}{\hbar} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{k}} f \right) \vec{k} d^3k = - \frac{1}{\hbar^4} n \vec{F}$$

$$\int (\vec{v} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{r}} f) \vec{k} d^3k = \frac{\hbar}{m_n^*} \vec{\nabla} \int f \vec{k}^2 d^3k = \frac{m_n^* k T_n}{\hbar^4} \vec{\nabla} \left(\frac{n}{m_n^*} \right)$$

On peut donc réécrire cette équation également sous la forme :

$$\frac{\partial \vec{J}_n}{\partial t} - q k T_n \vec{\nabla} \left(\frac{n}{m_n^*} \right) + \frac{q}{m_n^*} n \vec{F} = - W \vec{J}_n$$

et donc
$$\vec{J}_n^0 = q k T_n \tau_W^n \vec{\nabla} \left(\frac{n}{m_n^*} \right) + \frac{q \tau_W^n}{m_n^*} n \vec{F} = \mu_n k T_n m_n^* \vec{\nabla} \left(\frac{n}{m_n^*} \right) + n \mu_n \vec{F}$$

On obtient finalement :
$$\boxed{\vec{J}_n^0 = \mu_n k T_n \vec{\nabla} n + n \mu_n \left(\vec{F} - q k T_n \frac{\vec{\nabla} m_n^*}{m_n^*} \right)} \quad (1.19)$$

Cette formulation, appelée également dérive-diffusion, que nous détaillerons par la suite, permet d'obtenir par comparaison avec la statistique de Fermi-Dirac les divers termes qui doivent intervenir dans le potentiel.

2.3.3. La conservation de l'énergie

Chaque électron dans le cristal possède une énergie dépendant de sa position et de

son moment :

$$\epsilon_n = \frac{\vec{p}^2}{2m_n^*} + V(\vec{x}) = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m_n^*} + V(\vec{x})$$

m_n^* étant la masse effective de l'électron. La conservation du flux d'énergie pour les électrons à travers le dispositif s'obtient en multipliant l'équation de Boltzmann par ϵ_n puis en intégrant sur l'espace des moments ce qui donne :

$$\int \frac{\partial f}{\partial t} \epsilon_n d^3k + \int (\vec{v} \cdot \vec{\nabla}_r f) \epsilon_n d^3k + \int \left(\frac{\vec{F}}{\hbar} \cdot \vec{\nabla}_k f \right) \epsilon_n d^3k = \int Q_n(f_n, f_p) \epsilon_n d^3k$$

Les termes faisant intervenir le potentiel V vont donner dans chaque membre des termes proportionnels à l'équation de continuité des électrons. On peut donc ne retenir que les termes dus à l'énergie cinétique. Le premier terme peut s'écrire sous la forme sui-

vante :

$$\frac{m_n^*}{2} \int \vec{v} \cdot \vec{\nabla}_r f d^3k = \boxed{\frac{n}{h^3} \cdot \frac{1}{2} m_n^* \langle v^2 \rangle}$$

On retrouve ainsi une densité d'énergie due à la vitesse moyenne des porteurs. Ce terme peut se décomposer en deux parties, la première représentant l'énergie due à la vitesse de dérive macroscopique globale des porteurs et la deuxième leur agitation interne qui donne une énergie cinétique moyenne par porteur de $\frac{3}{2} k T_n$ dans le cas de la statistique de Boltzmann. On en déduit donc la contribution du premier terme ainsi que la densi-

té d'énergie en chaque point :

$$\int f \epsilon_n d^3k = \frac{1}{\hbar^3} \varrho_n^E \quad \boxed{\varrho_n^E = n \left(V + \frac{1}{2} m_n^* v_n^2 + \frac{3}{2} k T_n \right) = n (V + w_n)}$$

La contribution du deuxième terme de l'équation peut s'évaluer également :

$$\frac{m_n^*}{2} \int \vec{v}^2 (\vec{v} \cdot \vec{\nabla}_r f) d^3k = \frac{m_n^*}{2} \operatorname{div} \int \vec{v}^2 (f \vec{v}) d^3k$$

Enfin le troisième terme de l'équation donne :

$$\int \frac{1}{2} m_n^* \vec{v}^2 \cdot \left(\frac{\vec{F}}{\hbar} \vec{\nabla}_k f \right) d^3k = \frac{\hbar}{2 m_n^*} \vec{F} \cdot \int \vec{k}^2 \vec{\nabla}_k f d^3k = \boxed{\frac{1}{q \hbar^3} \vec{F} \cdot \vec{J}_n}$$

L'équation totale peut ainsi se réécrire sous la forme :

$$\frac{\partial(nw_n)}{\partial t} + \frac{1}{q} \vec{F} \cdot \vec{J}_n + \hbar^3 \frac{m_n^*}{2} \operatorname{div} \left(\int \vec{v}^2 (f \vec{v}) d^3k \right) = n \left(\frac{\partial w_n}{\partial t} \right)_{coll} - U_n w_n$$

Cette équation peut se reformuler sous la forme d'une équation de conservation d'un courant d'énergie :

$$\boxed{\frac{\partial(nw_n)}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{S}_n = \vec{E} \cdot \vec{J}_n - U_n w_n + n \left(\frac{\partial w_n}{\partial t} \right)_{coll}} \quad (1.20)$$

avec $\vec{S}_n = \hbar^3 \frac{m_n^*}{2} \int \vec{v}^2 (f \vec{v}) d^3k$

On reconnaît en nw_n une densité d'énergie et en \vec{S}_n le courant correspondant. Le second membre représente la dissipation due respectivement à l'effet Joule, aux recombinaisons et aux collisions. Le terme de collision dans l'hypothèse des temps de relaxation s'écrit de manière similaire à l'équation de Boltzmann ce qui donne finalement :

$$\frac{\partial(nw_n)}{\partial t} + \operatorname{div} \vec{S}_n = \vec{E} \cdot \vec{J}_n - U_n w_n + n \frac{w_n^0 - w_n}{\tau_{WY}^n}$$

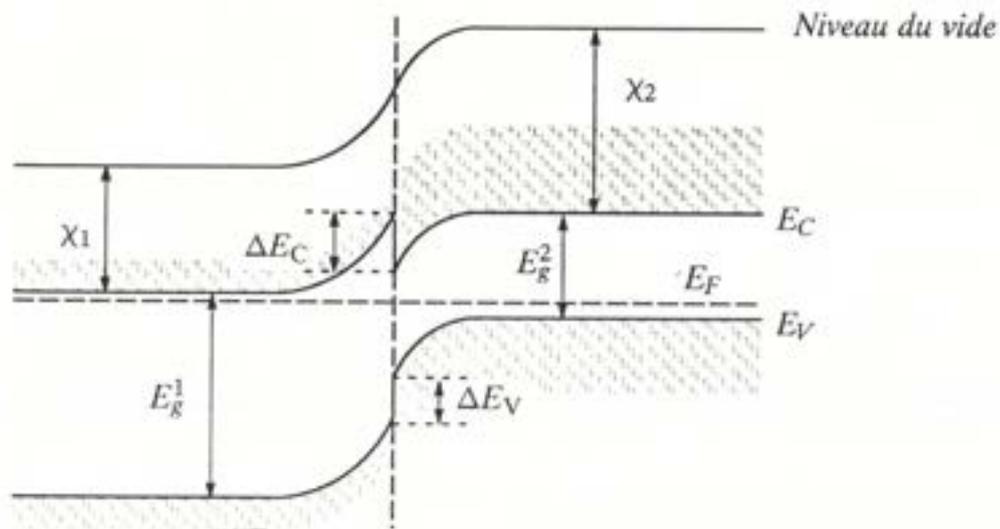
Le courant d'énergie peut s'évaluer en fonction des grandeurs thermodynamiques comme somme d'un courant de chaleur et d'un courant convectif [4] :

$$\vec{S}_n = -\kappa_n \vec{\nabla} T_n - (w_n + kT_n) \frac{\vec{J}_n}{q} \quad (1.21)$$

On peut procéder de manière strictement identique pour la densité d'énergie des trous.

2.4. Le traitement des hétérojonctions : le modèle d'Anderson

Le modèle permettant d'obtenir le schéma de bandes d'une hétérojonction abrupte a été proposé par Anderson [5], et suppose l'alignement des énergies de Fermi des porteurs de part et d'autre de l'hétérojonction, ce qui est vrai dans le cas où il n'y a pas de densité surfacique de pièges à l'interface :



En effet, ceci revient à considérer que, pour chaque population de porteurs, l'on a affaire à deux populations thermalisées de masse différente de chaque côté de l'hétérojonction. Le modèle suppose donc qu'à chaque instant l'équilibre énergétique entre les deux quasi-populations est établi localement au niveau de l'hétéro-interface. Cette hypothèse permet de rendre compte de nombreux phénomènes macroscopiques mais peut devenir caduque dans le cas de très hautes fréquences ou de porteurs chauds qui sont "lançés" de manière balistique par l'hétérojonction.

Les quantités χ_1 et χ_2 représentent les affinités électroniques de chaque matériau, c'est-à-dire la différence entre l'énergie de bas de bande de conduction et celle d'un électron libre à l'extérieur du dispositif. On voit donc dans ce modèle que la différence entre les bandes de conduction à l'interface est donnée par la différence des affinités. Cette relation n'est pas toujours respectée mais on peut éventuellement changer ΔE_C tout en conservant la validité du modèle.

Nous avons donc vu que l'équation de transport de Boltzmann classique ainsi que l'approximation du régime hydrodynamique étaient mal adaptées à la simulation réaliste d'une hétérojonction abrupte idéale. Il existe cependant des méthodes permettant de mieux prendre en compte les effets particuliers de cette structure tout en restant dans le cadre général précédemment décrit.

Par exemple le phénomène le plus courant, et premier par ordre d'importance, est l'apparition d'un courant de porteurs par effet tunnel à travers la barrière de potentiel due à la discontinuité des bandes. La méthode la plus couramment employée pour prendre en compte ce phénomène consiste à modéliser ce courant comme provenant d'un effet thermoionique [6].

Nous pouvons donc résumer les conditions d'interface à une hétérojonction dans notre modèle :

- Continuité du potentiel électrostatique.
- Continuité des composantes normales des courants d'électrons et de trous.
- Continuité des niveaux de Fermi (mais pas forcément de leur gradient).
- Discontinuité des constantes physiques.
- Discontinuité des densités de porteurs.

2.5. L'expression des courants

Dans le cas de la statistique de Boltzmann et d'un milieu uniforme on peut écrire :

$$n = N_c e^{\frac{\phi + E_n - \chi}{kT}} \quad \text{donc} \quad E_n = -q\phi + q\chi + kT \ln \frac{n}{N_c}$$

$$\text{d'où} \quad \vec{J}_n = n\mu_n \vec{\nabla} E_n = n\mu_n \vec{\nabla} (-q\phi + q\chi + kT \ln \frac{n}{N_c}) = -qn\mu_n \vec{\nabla} \phi + \mu_n kT \vec{\nabla} n$$

$$\text{et donc} \quad \boxed{\vec{J}_n = -qn\mu_n \vec{\nabla} \phi + qD_n \vec{\nabla} n} \quad (1.22) \quad \text{en posant} \quad D_n = \mu_n \frac{kT}{q}$$

Le courant d'électrons peut donc être séparé en deux composantes : une composante proportionnelle au gradient du potentiel électrostatique qui peut être interprétée comme la *dérive* des électrons sous l'effet du champ électrique, et une composante proportionnelle au gradient de densité des électrons qui représente la *diffusion* des électrons sous l'effet des inhomogénéités de densité. Le calcul est évidemment similaire pour les trous. Cette expression du courant est donc couramment appelé courant de *dérive-diffusion*.

La relation d'Einstein, qui relie le coefficient de diffusion D_n à la mobilité, n'est donc valable qu'en statistique de Boltzmann et dans un milieu de composition uniforme. Elle se révèle plus complexe dans le cas général : le coefficient de diffusion dépend alors de la densité de population et des gradients de matériaux. Il faut donc considérer l'expression du courant proportionnelle au gradient d'énergie de Fermi comme une expression générale, obtenue grâce à des considérations thermodynamiques, et la relation d'Einstein comme une relation de "fermeture" dans le cas particulier de la statistique de Boltzmann et des matériaux uniformes.

3. LA HIERARCHIE DES MODELES

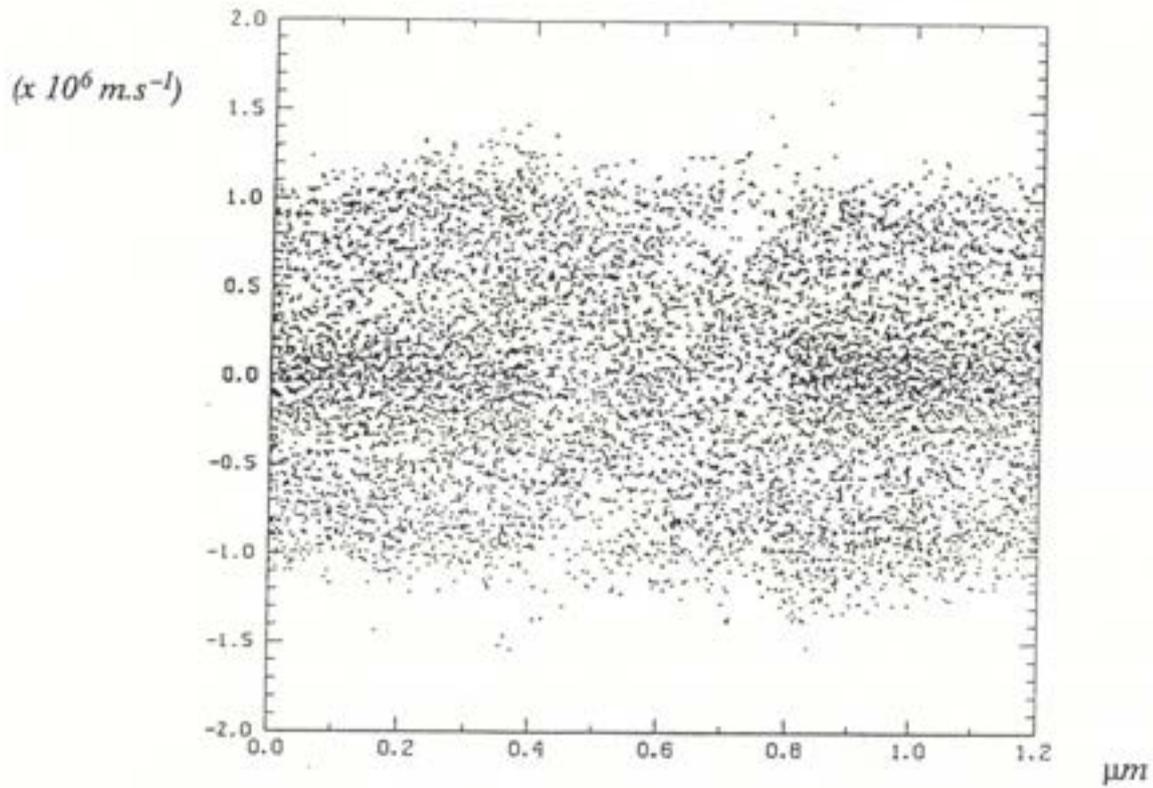
Grâce aux diverses équations décrites précédemment il est possible de constituer une hiérarchie de modèles utilisables pour la simulation plus ou moins fine des dispositifs microélectroniques. Nous allons examiner dans la suite du chapitre les principaux modèles de cette hiérarchie et décrire pour chacun d'eux leur champ d'applications actuel.

3.1. Le modèle de transport de Boltzmann

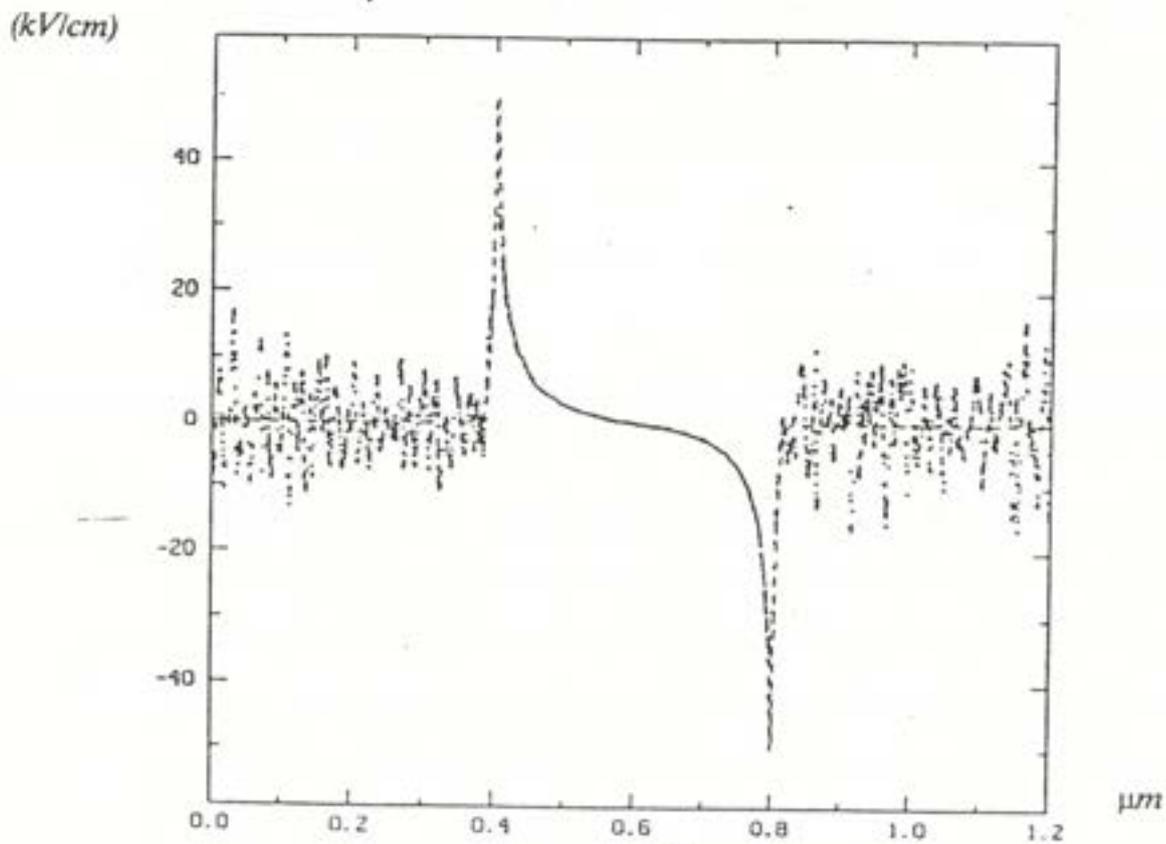
Le premier modèle de cette hiérarchie est le modèle de transport de Boltzmann constitué d'une part de l'équation de Poisson pour les phénomènes électromagnétiques et d'autre part des deux équations de Boltzmann pour les phénomènes de transport. Vu le grand nombre de degrés de libertés d'un tel système, ce type de modèle assez lourd est généralement réservé aux simulations de matériaux massifs pour l'examen et la caractérisation des matériaux ou encore la compréhension fine de phénomènes d'interfaces (hétérojonction, barrière Schottky, etc...) [7]. Il a été utilisé avec succès dans le logiciel *SPADES* [8] (figure 1) qui simule l'équation de transport de Boltzmann grâce à une méthode particulière déterministe. Dans une optique d'outils de CAO de dispositifs électroniques, et compte tenu des capacités actuelles et futures des calculateurs, ces modèles sont mal adaptés à une utilisation interactive rapide.

3.2. Le modèle hydrodynamique

Dans les régimes proches de l'équilibre thermodynamique et dans le cas où les collisions entre particules à l'intérieur de chaque population sont fréquentes devant les temps typiques d'évolution du dispositif, les populations de porteurs se thermalisent sous l'effet de ces collisions, c'est-à-dire atteignent une distribution d'énergie caractérisée chacune par une température locale. L'occupation d'un état d'énergie par un électron ou un trou



Position des particules dans l'espace des phases



Champ électrique dans la structure

figure 1 : Résultats de simulations Monte-Carlo avec le logiciel SPADES

est alors décrite par un facteur de Fermi :

$$\begin{cases} f_n(E) = \frac{1}{1 + e^{\frac{E-E_n}{kT}}} \\ f_p(E) = \frac{1}{1 + e^{\frac{E_p-E}{kT}}} \end{cases} \quad \begin{array}{l} E_n \text{ et } E_p \text{ sont les énergies de Fermi} \\ \text{des électrons et des trous} \end{array} \quad (1.23)$$

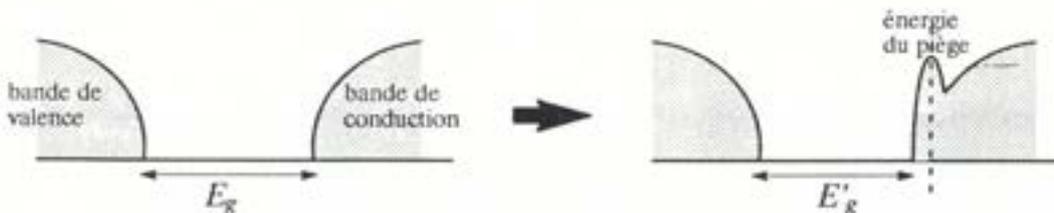
Les densités d'électrons et de trous dans les bandes de conduction et de valence sont alors déduites en intégrant les densités d'états ϱ_n et ϱ_p sur tous les états d'énergie possibles :

$$n = \int_{E_c}^{\infty} \varrho_n(E) f_n(E) dE \quad p = \int_{-\infty}^{E_v} \varrho_p(E) f_p(E) dE \quad (1.24)$$

Si on fait l'hypothèse classique de bandes paraboliques, on a donc :

$$\varrho_n(E) = \frac{4\pi}{h^3} (2m_n^*)^{\frac{3}{2}} \sqrt{E - E_c} \quad \varrho_p(E) = \frac{4\pi}{h^3} (2m_p^*)^{\frac{3}{2}} \sqrt{E_v - E} \quad (1.25)$$

En fait les fluctuations statistiques du potentiel électrostatique entraînent des variations spatiales des densités d'impuretés et altèrent les densités d'états dans les bandes de conduction et de valence en créant des niveaux d'énergie supplémentaires et des queues de bandes dans la bande interdite [9] (figure ci-dessous). Cet effet, appelé "band gap nar-



rowing" car il diminue la hauteur de bande interdite effective du matériau, devient non-négligeable pour de très fortes concentrations d'impuretés ($> 10^{18} \text{ cm}^{-3}$) ainsi que dans les matériaux semi-isolants. Cependant sa mise en oeuvre informatique dans des logiciels de CAO de dispositifs est extrêmement coûteuse et les méthodes prenant en compte cet effet passent par une correction de la concentration intrinsèque du semiconducteur, uni-

quement dans le cas de la statistique de Boltzmann. Etant donnés les dopages couramment rencontrés, nous avons donc préféré utiliser directement la statistique de Fermi-Dirac dont l'influence sur les densités d'état est plus grande, sans tenir compte pour l'instant de ces effets. Dans ce cas les expressions des densités de porteurs sont :

$$\left\{ \begin{array}{l} n = N_c f_{\frac{1}{2}}\left(\frac{E_n - E_c}{kT_n}\right) \\ p = N_v f_{\frac{1}{2}}\left(\frac{E_v - E_p}{kT_p}\right) \\ E_c = -q\phi + q\chi = E_v + E_g \end{array} \right. \quad (1.26) \quad (1.27)$$

$$N_c = 2 \left(\frac{2\pi kT_n m_n^*}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} \quad E_n = q\phi_n$$

$$N_v = 2 \left(\frac{2\pi kT_p m_p^*}{h^2} \right)^{\frac{3}{2}} \quad E_p = q\phi_p$$

E_n et E_p sont les énergies de Fermi (directement reliées aux niveaux de Fermi ϕ_n et ϕ_p), E_v et E_c les énergies des bandes de valence et de conduction, N_c et N_v les densités de ces bandes, χ l'affinité électronique exprimée en Volts et E_g la hauteur de bande interdite. Enfin $f_{\frac{1}{2}}$ est la fonction de Fermi, au facteur $\frac{2}{\sqrt{\pi}}$ près, que l'on peut approcher avec une bonne précision par la fonction exponentielle quand les dopages ne sont pas trop élevés : on retrouve alors la statistique de Boltzmann. Dans le cas contraire on doit rester en statistique de Fermi-Dirac afin de préserver une bonne précision au modèle. L'expression de $f_{\frac{1}{2}}$ est la suivante :

$$f_{\frac{1}{2}}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{+\infty} \frac{\sqrt{u}}{1 + e^{u-x}} du \quad (1.28)$$

Cette expression intégrale ne peut être utilisée dans des logiciels pour des raisons évidentes de temps de calcul et on a alors recours à des expressions analytiques qui approchent la fonction de Fermi tout en permettant des temps de calculs beaucoup plus courts [10]. Celles-ci seront explicitées par la suite.

En projetant l'équation de Boltzmann, on peut ainsi réaliser un sous-modèle constitué de l'équation de Poisson, des deux équations de conservation de la charge, des équations de conservation des moments et enfin de l'équation de l'énergie. Ce modèle est ap-

pelé modèle hydrodynamique par analogie avec les équations de Navier–Stokes qui décrivent les écoulements fluides. Il présente l'avantage de réduire l'espace d'étude à l'espace spatio-temporel (\vec{x}, t) et donc de faciliter la mise en oeuvre numérique en vue d'applications de CAO électronique mais permet également de prendre en compte les effets dus aux porteurs chauds dont la distribution d'énergie n'est pas en équilibre avec le cristal. Nous allons nous intéresser maintenant à un sous-modèle du modèle hydrodynamique, plus simple de mise en oeuvre mais adapté à la simulation de la plupart des dispositifs microélectroniques courants.

3.3. Le modèle de dérive–diffusion

Lorsque les échanges locaux d'énergie entre les populations (électrons, trous, phonons) sont rapides devant les temps caractéristiques de transport des porteurs dans le dispositif, les températures locales de ces diverses populations s'égalisent, les transports d'énergie se réduisent et on peut alors se limiter pour la modélisation du composant aux seules équations de conservation de la charge. Les mobilités ne dépendent alors plus que des concentrations d'impuretés et du champ électrique.

On utilise souvent comme inconnues à la place des énergies de Fermi les niveaux de Fermi ϕ_n et ϕ_p qui sont homogènes à une tension comme le potentiel électrostatique :

$$E_n = q\phi_n \quad E_p = q\phi_p$$

On introduit donc de façon naturelle la tension $U_T = kT/q$ qui est l'ordre de grandeur typique de variation de ces niveaux de Fermi dans les dispositifs en fonctionnement courant (sa valeur est de 0,025 V à température ambiante).

Nous allons maintenant détailler plus amplement les diverses expressions des phénomènes physiques rentrant en jeu dans ce modèle qui a été implanté dans nos logiciels de simulation.

3.3.1. Le système d'équations

Ces équations sont d'une part l'équation de Poisson (1.29), d'autre part les équations de continuités (1.30) et (1.31) :

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{div}(\epsilon_r \vec{\nabla} \phi) = \frac{q}{\epsilon_0} (n - p - dop) \end{array} \right. \quad (1.29)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{div}(\vec{J}_n) = \text{div}(qn\mu_n \vec{\nabla} \phi_n) = qU_n + q \frac{\partial n}{\partial t} \end{array} \right. \quad (1.30)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{div}(\vec{J}_p) = \text{div}(qp\mu_p \vec{\nabla} \phi_p) = -qU_p - q \frac{\partial p}{\partial t} \end{array} \right. \quad (1.31)$$

n et p sont les densités d'électrons et de trous, dop la concentration d'impuretés ionisées, ϕ le potentiel électrostatique, ϕ_n et ϕ_p les niveaux de Fermi, μ_n et μ_p les mobilités respectives des électrons et des trous et enfin U_n et U_p les taux de générations-recombinaisons de chaque espèce. La statistique utilisée permet de relier les densités de population des porteurs libres au potentiel électrostatique et aux niveaux de Fermi :

$$\left\{ \begin{array}{l} n = N_c f_{\frac{1}{2}}\left(\frac{E_n - E_c}{kT}\right) \quad E_n = q\phi_n \\ p = N_v f_{\frac{1}{2}}\left(\frac{E_v - E_p}{kT}\right) \quad E_p = q\phi_p \\ E_c = -q\phi + q\chi = E_v + E_g \end{array} \right.$$

3.3.2. Les expressions des impuretés ionisées

Dans l'équation de Poisson dop représente les densités d'impuretés ionisées dans le volume c'est-à-dire les atomes des dopants ayant capturé ou donné un électron. Lorsque les densités de porteurs libres deviennent importantes, toutes les impuretés présentes dans le matériau ne sont pas ionisées : on peut exprimer ces ionisations partielles en fonction des concentrations d'impuretés initiales N_D (donneurs) et N_A (accepteurs), des densités de porteurs n et p , des énergies de piège E_i des impuretés et des constantes physiques

du matériau :

$$dop = \sum_i N_{D_i}^+ - \sum_j N_{A_j}^-$$

$$\begin{aligned} \text{pour une impureté de type donneur : } N_D^+ &= \frac{N_D}{1 + g \frac{n}{N_c} e^{\frac{E_c - E_f}{kT}}} \\ \text{pour une impureté de type accepteur : } N_A^- &= \frac{N_A}{1 + g \frac{p}{N_v} e^{\frac{E_f - E_v}{kT}}} \end{aligned} \quad (1.32)$$

Le facteur g provient de la dégénérescence des niveaux de pièges [11]. Une expression plus complète de l'ionisation des pièges a été exhibée par S. Mottet [12]; elle permet de modéliser plus finement les substrats semi-isolants. Nous nous contenterons cependant des expressions précédentes pour notre modèle car elles sont très générales et d'une grande simplicité de mise en oeuvre.

3.3.3. Les lois de mobilités

Les mobilités μ_n et μ_p apparaissent dans les expressions des courants à l'intérieur des coefficients de réponse liés aux gradients de niveaux de Fermi (cf. § 2.3.2.). Elles expriment l'interaction des porteurs libres avec le cristal durant leur temps de vol. En effet, ceux-ci sont accélérés sous l'effet du champ électrique et des autres porteurs puis interagissent avec les impuretés et les phonons du cristal. Leurs vitesses atteignent une valeur stationnaire après une durée de quelques picosecondes que l'on peut exprimer grâce aux mobilités qui dépendent du matériau intrinsèque et des concentrations de dopage.

Dans la stricte théorie thermodynamique de la réponse linéaire les mobilités sont donc associées à des coefficients de réponse qui doivent être constants. Cependant lorsque le champ électrique augmente dans un matériau semiconducteur massif, les chocs avec le cristal et les transferts des porteurs énergétiques vers d'autres vallées entraînent une saturation de la vitesse. Afin de tenir compte de cet effet, on introduit les lois phénoménologiques suivantes qui permettent reproduire fidèlement la variation de la vitesse stationnaire des porteurs en fonction du champ électrique \vec{E} . Celles-ci sont indexées par

les paramètres m_1 et m_2 :

$$\vec{v}_n = \mu_n(\mathbf{E}) \cdot \vec{\nabla}\phi_n \quad \vec{v}_p = \mu_p(\mathbf{E}) \cdot \vec{\nabla}\phi_p \quad \vec{E} = -\vec{\nabla}\phi$$

$$\mu_n(\mathbf{E}) = \mu_n^0 \cdot \frac{1 + \alpha \left| \frac{E}{E_n^{sat}} \right|^{m_1-1}}{1 + \left| \frac{E}{E_n^{sat}} \right|^{m_1}} \quad \alpha = \frac{v_n^{sat}}{\mu_n^0 \cdot E_n^{sat}}$$

$$\mu_p(\mathbf{E}) = \mu_p^0 \cdot \frac{1 + \beta \left| \frac{E}{E_p^{sat}} \right|^{m_2-1}}{1 + \left| \frac{E}{E_p^{sat}} \right|^{m_2}} \quad \beta = \frac{v_p^{sat}}{\mu_p^0 \cdot E_p^{sat}}$$

Les quantités μ_n^0 et μ_p^0 sont les mobilités à champ nul qui dépendent néanmoins des dopages. v_n^{sat} (resp. v_p^{sat}) représente la vitesse de saturation des électrons (resp. trous) dans le cristal. Enfin E_n^{sat} et E_p^{sat} sont les champs électriques pour lesquels ces vitesses de saturation sont atteintes.

m_1 et m_2 sont les paramètres qui permettent de tenir compte des phénomènes tels que les changements de vallée ou les saturations de vitesse (figure 2). Lorsque m_1 (resp. m_2) vaut 1, la loi de mobilité est homographe en fonction du champ. le numérateur se réduit à 1 et il existe alors une relation entre les trois paramètres μ^0 , E^{sat} , v^{sat} :

$$\mu^0 \cdot E^{sat} = v^{sat}$$

Cependant ce modèle ignore de par sa nature les phénomènes de vitesse non-stationnaire, tels que la survitesse [13] dans les structures à petites dimensions.

3.3.4. Les termes de générations–recombinaisons

Les termes de générations–recombinaisons U_n et U_p expriment les créations et annihilations de paires électron–trou. Ils sont la somme de plusieurs contributions. Nous allons examiner chaque type en situant leur importance relative dans les composants étudiés.

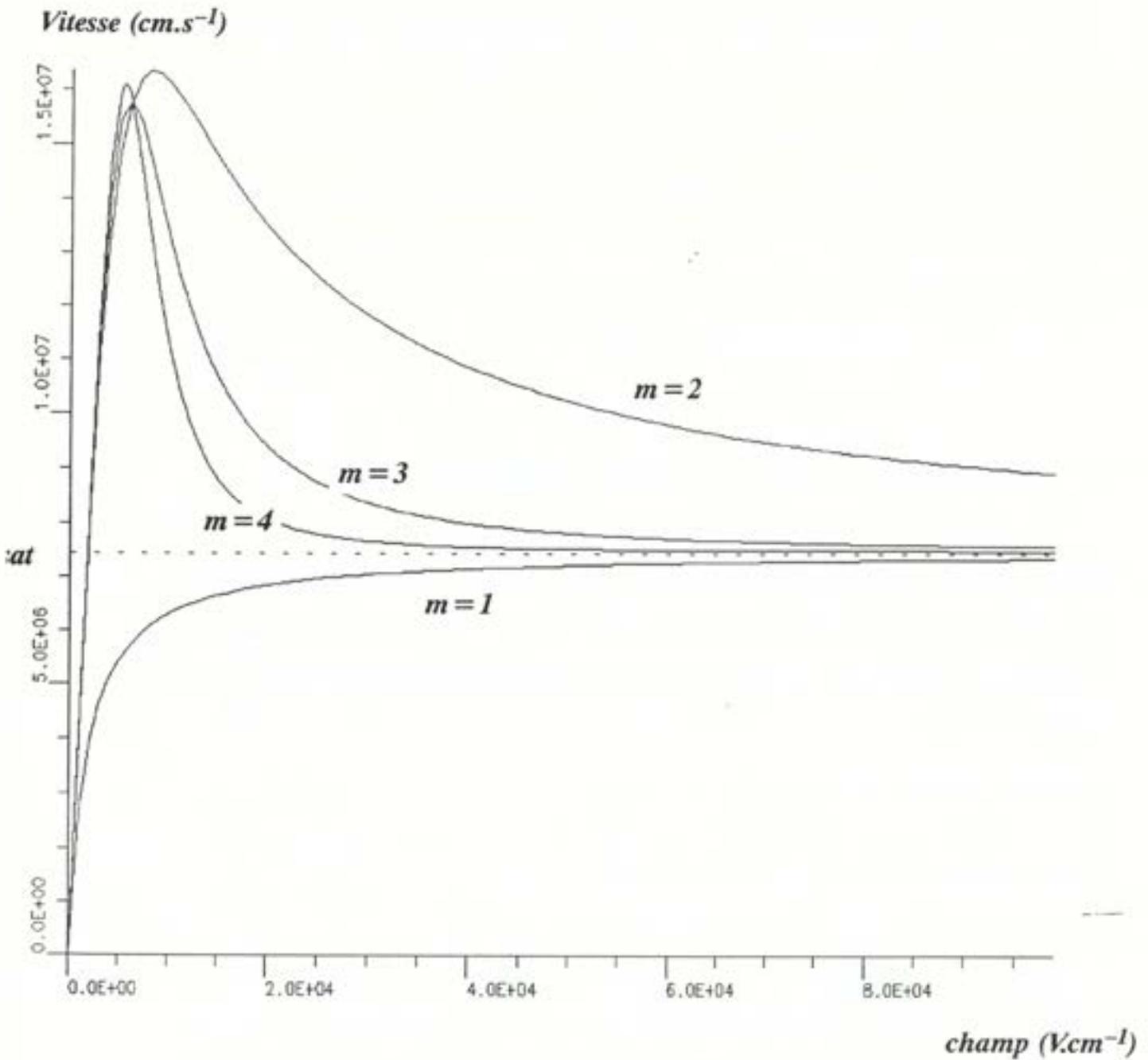


figure 2 : Lois de vitesses en fonction du champ électrique pour diverses valeurs de l'exposant m

3.3.4.1. Les recombinaisons bande à bande

Les recombinaisons bande à bande sont l'inverse du phénomène de génération optique par effet photoélectrique. Elles entraînent le passage d'un électron de la bande de conduction dans la bande de valence où il s'annihile avec un trou et s'accompagnent de l'émission d'un photon : ce sont des recombinaisons radiatives (figure 3).

Elles ne sont vraiment importantes que dans les matériaux à gap direct et à faible hauteur de bande interdite tels que InAs, ainsi que dans les dispositifs fonctionnant loin de l'équilibre thermodynamique entre les électrons et les trous, tels que la couche active d'un laser par exemple. Leur expression est de la forme [14]:

$$U = a.np .(1 - e^{\frac{\phi_p - \phi_n}{U_T}}) \quad (1.33)$$

3.3.4.2. Les recombinaisons sur centre : le modèle Read-Shockley-Hall

Les impuretés présentes dans le cristal permettent aux particules de disposer d'un niveau d'énergie dans la bande interdite et facilitent ainsi les recombinaisons non-radiatives. Les porteurs peuvent alors être piégés sur un centre où il se recombinent (figure 4). L'expression du taux de recombinaisons en statistique de Boltzmann est due à Read-Shockley-Hall [15] :

$$U_n = U_p = \frac{np - n_i^2}{\tau_p(n + n_1) + \tau_n(p + p_1)} \quad (1.34) \quad \text{avec} \quad \begin{aligned} n_1^2 &= N_c N_v e^{-\frac{E_T}{kT}} \\ n_1 &= n e^{\frac{E_T - E_n}{kT}} \\ p_1 &= p e^{\frac{E_p - E_T}{kT}} \end{aligned}$$

E_T représente l'énergie du piège dans la bande interdite. L'expression totale du taux de recombinaisons est obtenue en sommant sur toutes les impuretés présentes dans la structure. Cette expression des recombinaisons RSH n'est cependant plus valable en statistique de Fermi-Dirac car on n'obtient pas l'annulation du numérateur à l'équilibre thermodynamique ($\phi_n = \phi_p = 0$) ce qui aboutit à la présence d'un courant fictif de l'ordre de $10^{-9} \text{ A.cm}^{-2}$ entraînant de grosses imprécisions comme l'a montré J.E. Viallet dans l'étude des courants de fuite dans les diodes en inverse [16]. L'expression précédente doit

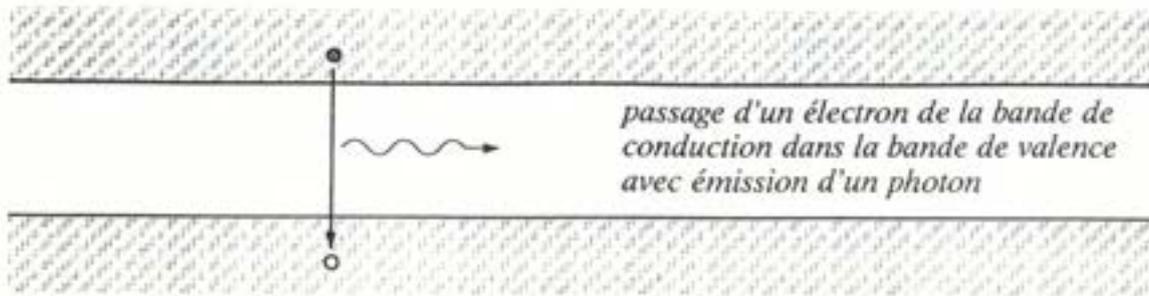


figure 3 : Recombinaisons bande à bande

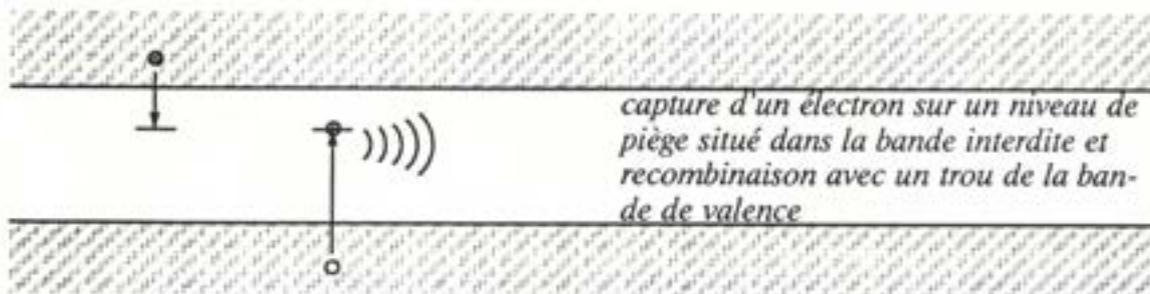


figure 4 : Recombinaisons assistée sur centres

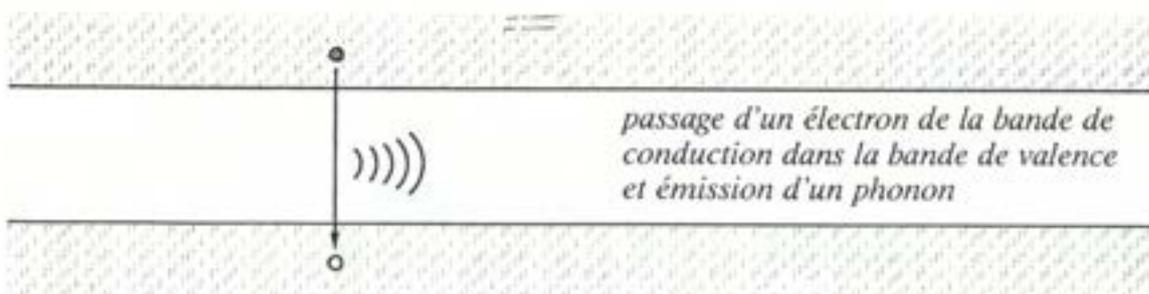


figure 5 : Recombinaisons Auger

alors être remplacée par :

$$U_n = U_p = \frac{np \cdot (1 - e^{\frac{\phi_p - \phi_n}{U_T}})}{\tau_p(n + n_1) + \tau_n(p + p_1)} \quad (1.35) \quad \begin{aligned} n_1 &= n e^{\frac{E_T - E_n}{kT}} \\ p_1 &= p e^{\frac{E_p - E_T}{kT}} \end{aligned}$$

Il est important de prendre une expression des recombinaisons qui s'annule exactement à l'équilibre thermodynamique quelque soit la statistique utilisée. Dans le cas d'une telle expression des recombinaisons, le courant fictif est alors de l'ordre de 10^{-23} A.cm⁻².

On peut également simplifier cette expression en supposant qu'il existe un unique niveau de piège situé au milieu de la bande interdite et dont les constantes de temps sont τ_n^0 et τ_p^0 . La somme sur toutes les impuretés se réduit alors à la simple expression suivante :

$$U_n = U_p = \frac{np \cdot (1 - e^{\frac{\phi_p - \phi_n}{U_T}})}{\tau_p^0(n + n_1) + \tau_n^0(p + p_1)} \quad (1.36)$$

3.3.4.3. Les recombinaisons Auger

Ce sont des recombinaisons non-radiatives : un électron passe de la bande de conduction à la bande de valence où il se recombine avec un trou en cédant son énergie à un électron ou à un trou (figure 5). L'expression de ces recombinaisons en statistique quelconque est [17] :

$$U = np \cdot (c_n n + c_p p) \cdot (1 - e^{\frac{\phi_p - \phi_n}{U_T}}) \quad (1.37)$$

3.3.4.4. L'ionisation par impact

C'est le phénomène inverse du précédent. Un électron est libéré de la bande de valence par un choc avec une particule très énergétique. Cette génération de porteurs ne devient prépondérante que dans le cas de forts courants ou de forts champs électriques qui permettent aux particules d'acquérir de l'énergie. Leur expression est [18] :

$$G_n = a_n e^{\left(\frac{-\phi_n}{|k|}\right)^{m_n}} \quad G_p = a_p e^{\left(\frac{-\phi_p}{|k|}\right)^{m_p}} \quad (1.38)$$

3.3.4.5. La génération radiative

Ce phénomène est l'inverse des recombinaisons bande à bande. Sous l'effet d'un éclairage lumineux, le matériau absorbe des photons et génère des paires électron-trou proportionnellement à l'intensité lumineuse absorbée localement :

$$U = -\alpha \cdot \phi_{abs}(\vec{x})$$

3.3.5. Les divers types de contacts

Après avoir passé en revue les divers modèles rendant compte du transport des charges dans le volume du dispositif, il nous reste à définir les différents types de conditions aux limites et établir pour chacune d'elles leur traduction en termes des inconnues choisies c'est-à-dire le potentiel électrostatique et les quasi-niveaux de Fermi.

3.3.5.1. Le contact ohmique

Le contact ohmique est une zone formée par un semiconducteur très dopé présentant donc une très faible résistivité et permettant le passage des porteurs libres avec une chute de potentiel négligeable. On peut donc supposer que les populations d'électrons et de trous y sont localement à l'équilibre thermodynamique et que la densité de charge est nulle. Ces conditions se traduisent par :

$$\rho = -q(n - p - dop) = 0 \quad \text{et} \quad \phi_n = \phi_p$$

$$\text{avec} \quad \begin{cases} n = N_c f_{\frac{1}{2}}\left(\frac{\phi_n + \phi - \chi}{U_T}\right) \\ p = N_v f_{\frac{1}{2}}\left(\frac{-\phi_p - \phi + \chi - \phi_g}{U_T}\right) \\ dop = \sum_i N_{D_i}^+ - \sum_j N_{A_j}^- \end{cases} \quad \text{avec} \quad E_g = q\phi_g$$

Les quantités $\phi + \phi_n$ et $\phi + \phi_p$ sont donc constantes sur ces contacts. Etant donné que l'application d'une tension V_{app} entraîne une variation opposée du potentiel électrostatique, les conditions aux limites s'écrivent finalement :

$$\phi_n = \phi_p = V_{app}$$

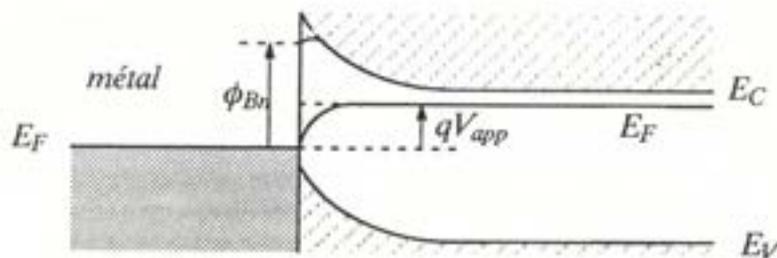
et

$$\phi = \phi_0 - V_{app}$$

ϕ_0 étant la valeur du potentiel électrostatique sur le contact lorsque le dispositif est entièrement à l'équilibre thermodynamique.

3.3.5.2. Le contact Schottky

Une interface métal–semiconducteur s'apparente assez bien en ce qui concerne les effets électroniques à une hétérojonction abrupte. Son schéma de bandes peut se représenter sous la forme suivante :



La présence du métal courbe les bandes de conduction et de valence afin de pouvoir égaliser les niveaux de Fermi de part et d'autre de l'interface. Lorsque l'on applique une tension V_{app} , le contact métal–semiconducteur se comporte comme une diode : le courant traversant l'interface peut s'exprimer à l'aide de V_{app} sous la forme suivante :

$$\vec{\mathbf{j}} = J_S \left[e^{\frac{eV_{app}}{kT}} - 1 \right] \vec{\mathbf{n}} \quad (1.39)$$

$\vec{\mathbf{n}}$ étant le vecteur normal à l'interface et sortant du semiconducteur. L'expression de la densité J_S peut être obtenue grâce à la théorie de l'émission thermoionique–diffusion [19] :

$$J_S = A^{**} T^2 \exp\left(\frac{-q\phi_{Bn}}{kT}\right) \quad (1.40)$$

$$\text{avec } A^{**} = \frac{f_{\mu} f_Q}{1 + f_{\mu} f_Q \frac{v_F}{v_D}} A^* = \frac{f_{\mu} f_Q}{1 + f_{\mu} f_Q \frac{v_F}{v_D}} \frac{4\pi q m^* k^2}{h^3} \quad (1.41)$$

v_R est la vitesse thermique, v_D la vitesse effective de diffusion, f_p la probabilité d'émission d'un électron au-dessus de la barrière et f_Q le rapport entre le courant total et le courant sans effet tunnel.

La condition aux limites due à un contact Schottky est donc une condition aux limites en courant qui relie celui-ci à la tension appliquée par une relation du type :

$$J_n = a (e^{\frac{V}{kT}} - 1)$$

3.3.5.3. Le bord isolant

Les conditions de bord isolant correspondent à une composante normale du flux de porteurs nulle. Dans le cas unidimensionnel ceci s'exprime très facilement car il n'existe que deux bords, le droit et le gauche :

$$\begin{aligned} \phi_n^1 &= \phi_n^2 & \text{et} & & \phi_p^1 &= \phi_p^2 & \text{pour le bord gauche} \\ \phi_n^{N-1} &= \phi_n^N & \text{et} & & \phi_p^{N-1} &= \phi_p^N & \text{pour le bord droit} \end{aligned}$$

Dans le cas bidimensionnel le schéma de discrétisation que nous avons adopté et qui sera détaillé par la suite nous assure la conservation du flux dans tout le domaine et donc évite de façon automatique les fuites de courants par les bords autres que les contacts ohmiques ou Schottky.

3.4. Les types de comportement

3.4.1. L'équilibre thermodynamique

Lorsqu'on ne polarise pas une structure, les échanges d'énergie et les diffusions spatiales de porteurs aboutissent à une situation où plus aucun courant ne circule. Les niveaux de Fermi sont alors identiques en tout point : c'est l'équilibre thermodynamique. Celui peut être obtenu en résolvant l'équation de Poisson et en prenant la valeur nulle comme

référence pour les niveaux de Fermi :

$$\operatorname{div}(\epsilon_r \vec{\nabla} \phi) = \frac{q}{\epsilon_0} \left(N_c f_{\frac{1}{2}}\left(\frac{\phi - \chi}{U_T}\right) - N_v f_{\frac{1}{2}}\left(\frac{-\phi + \chi - \phi_g}{U_T}\right) - \operatorname{dop} \right)$$

$$\phi_n = \phi_p = 0$$

On obtient ainsi un potentiel $\phi_0(\vec{x})$ dans toute la structure permettant de déterminer les largeurs de zone de charge d'espace ainsi que l'intensité du champ électrique interne à polarisation nulle.

3.4.2. La situation statique

Lorsque l'on soumet la structure à diverses polarisations sur ses contacts, des courants apparaissent et la structure se stabilise dans le temps vers une situation stationnaire. Cette situation peut être simulée en résolvant l'équation de Poisson ainsi que les équations de continuités sans leurs termes de dépendance temporelle. Ceci permet d'observer les comportements statiques des composantes (courbes $I(V)$, gain, capacités, importance des courants de recombinaisons, etc...) et d'en déduire des valeurs de comportement fréquentiel. Ce type de simulation répond à un grand nombre de problèmes en CAO micro-électronique.

3.4.3. Le comportement dynamique

Ce comportement correspond à l'évolution du dispositif sous l'effet de gradients macroscopiques des températures des populations ou des niveaux de Fermi. Celui-ci est régi par les équations générales décrites précédemment et permet d'étudier les temps de réponse de dispositifs et leurs comportements fréquentiels non-linéaire (ou grand signal). La solution initiale utilisée pour une telle simulation est bien évidemment obtenue par la résolution du problème statique dans les conditions initiales.

REFERENCES

- [1] S.G. Anderson, C.M. Aldao, G.D. Waddill, I.M. Vitomirov, C. Capasso and J.H. Weaver, "Fermi Level Movement for n- and p- GaAs Interfaces : Effects of Temperature and Dopant Concentration," *Appl. Physics Lett.*, 55 (24), pp. 2547-2549, 1989.
- [2] W. Allegretto, A. Nathan and H.P. Baltes, "Two-Dimensional Numerical Analysis of Silicon Bipolar Magnetotransistors," *Proceedings of the NASECODE V*, p. 87, ed. by B.T. Browne and J.J.H. Miller, Boole Press, Dublin 1987.
- [3] V.I. Roldughin, "The Chapman-Enskog Theory and Non-Equilibrium Thermodynamics," *Journal of Non-Equilibrium Thermodynamics*, vol. 9, pp. 71-80, 1984.
- [4] A. Forghieri, R. Guerrieri, P. Ciampolini, A. Gnudi, M. Rudan and G. Baccarani, "A New Discretisation Strategy of the Semiconductor Equations Comprising Momentum and Energy Balance," *IEEE Trans. on Computer-Aided Design*, vol. CAD-7, pp. 231-242, February 1988.
- [5] R.L. Anderson, "Experiments on Ge-GaAs Heterojunction," *Solid State Electron.*, 5, p. 341, (1962).
- [6] F.A. Padovani and R. Stratton, "Field and Thermoionic-Field Emission in Schottky Barriers," *Solid State Electron.*, 9, p. 695, (1966).
- [7] P. Hesto, "Simulation Monte-Carlo du transport non-stationnaire dans les dispositifs submicroniques : importance du phénomène balistique dans GaAs à 77 K", *Thèse de Doctorat de l'Université de Paris Sud*, Orsay 1984.
- [8] P. Degond, F. Delaurens, F.J. Mustieles and F. Nier, "Particle Simulation of Bidimensionnal Electron Transport Parallel to a Heterojunction Interface," *COMPEL* 9(2) (1990), pp. 109-116.
- [9] S. Selberherr, Analysis and Simulation of Semiconductor Devices, ed. by Springer-Verlag, 1984, p. 30.
- [10] J.S. Blakemore, "Approximations for Fermi-Dirac Integrals, especially the Function $F_{1/2}(\eta)$ used to Describe Electron Density in a Semiconductor," *Solid State Electron.*, 25, pp. 1067-1076, (1982).
- [11] S.M. Sze, Physics of Semiconductor Devices, Second Edition, ed. by John Wiley & Sons, 1981, p. 23.

- [12] S. Mottet and J.E. Viallet, "Specific Simulation Problem Related to III-V Compounds : Semi-Insulating Materials," *Proceedings of the NASECODE IV*, p. 436, ed. by B.T. Browne and J.J.H. Miller, Boole Press, Dublin 1985.
- [13] D. Ankri, "Transport Electronique en Régime de Survitesse dans les Composants à Semiconducteurs III-V," *L'Echo des Recherches*, n° 118, 4^e trimestre 1984.
- [14] S.M. Sze, Physics of Semiconductor Devices, Second Edition, ed. by John Wiley & Sons, 1981, p. 702.
- [15] W. Shockley and W.T. Read, "Statistics of the Recombination of Holes and Electrons," *Phys. Rev.*, vol. 87, N° 5, pp. 835-842, Sept. 1952.
- [16] J.E. Viallet, "Simulation Temporelle de Dispositifs à Semiconducteurs à Hétérojonctions : Mise en Equation et Méthodes Numériques," *Thèse de Doctorat de l'Université Paris VI*, 12 juin 1985.
- [17] S.M. Sze, Physics of Semiconductor Devices, Second Edition, ed. by John Wiley & Sons, 1981, p. 207.
- [18] A.G. Chynoweth, "Ionization Rates for Electron and Holes in Silicon," *Phys. Rev.*, vol. 109, pp. 1537-1540, 1958.
- [19] S.M. Sze, Physics of Semiconductor Devices, Second Edition, ed. by John Wiley & Sons, 1981, p. 262.

ANNEXE

1. Contact Schottky

L'expression du courant thermoionique à travers une interface métal-semiconducteur est :

$$J_{S \rightarrow m} = \int_{E_F + q\phi_B}^{\infty} qv_x dn = \int qv_x \frac{4\pi}{(2\pi)^3} f_0 \left(\frac{E_F - \epsilon_n}{kT_n} \right) d^3k$$

$$\text{Or : } \int_{E_F + q\phi_B}^{\infty} v_x e^{-\frac{\hbar^2 k^2}{2m_n^* kT_n}} d^3k = \int_{v_x^0}^{\infty} v_x e^{-\frac{m_n^* v_x^2}{2kT_n}} dv_x \cdot \left[\int_{\mathcal{R}} e^{-\frac{m_n^* v_y^2}{2kT_n}} dv_y \right]^2$$

v_x^0 étant la vitesse minimale suivant x que doivent posséder les électrons pour pouvoir passer la barrière métal-semiconducteur. On en déduit l'expression suivante du courant électronique à travers le contact :

$$J_{S \rightarrow m} = qm_n^* \cdot 2\pi kT_n^2 e^{\frac{E_F - \phi_B}{kT_n}} = A T_n^2 e^{-\frac{q\phi_B + eV}{kT_n}}$$

Chapitre 2
Etat de l'art

1. GENERALITES

Depuis plus de dix ans la simulation numérique s'est imposée comme une aide majeure à la conception dans des domaines aussi variés et étendus que la mécanique des solides, la mécanique des fluides ou l'électromagnétisme. Ce développement a été accompagné par l'essor de l'analyse numérique et la mise dans un cadre théorique rigoureux de techniques comme les différences finies ou les éléments finis. L'apparition de la simulation numérique est cependant beaucoup plus récente dans les domaines de la microélectronique. Les raisons de cette introduction tardive sont multiples : modèles physiques pas ou mal connus, manque de données expérimentales sur les caractéristiques physiques des matériaux (spécialement en microélectronique III-V), difficultés théoriques et pratiques importantes dans la résolution numérique des équations. Ces difficultés ont été peu à peu surmontées et l'on peut légitimement parler maintenant de l'émergence d'une véritable CAO des dispositifs analogue à la CAO de circuits déjà opérationnelle depuis plusieurs années.

Nous allons dans ce chapitre, tout d'abord passer en revue les étapes importantes et les principaux problèmes que la simulation numérique a dû ou doit encore surmonter, puis exposer l'état de l'art actuel en matière de logiciels de CAO de dispositifs.

1.1. Les applications de la simulation numérique en microélectronique

La simulation numérique s'est tout d'abord imposée en microélectronique pour la conception de circuits grâce à des logiciels basés sur des méthodes de type "*schéma électrique équivalent*". Ces méthodes consistent à représenter les dispositifs intervenant dans un circuit sous forme de réseaux de composants passifs linéaires (résistances, capacités, inductances), non-linéaires (diodes) et également de composants actifs (générateurs de tension, de courant, etc...). Les valeurs de ces composants élémentaires sont obtenues par des méthodes de "*fit*" avec les mesures statiques et dynamiques de chaque dispositif.

Ce type de simulation permet donc de prédire les comportements globaux des circuits, d'optimiser ceux-ci mais également de valider la technologie de fabrication ou de

mettre en évidence des problèmes particuliers (résistances d'accès, capacités parasites, etc...). Cependant, étant donné la complexité grandissante des structures de dispositifs et le nombre croissant des étapes technologiques de fabrication, ces méthodes de simulation ne permettent que très rarement de remonter aux paramètres directement contrôlables par les technologues (épaisseurs, temps de diffusion, masques...) ou par les concepteurs de circuits (tensions appliquées, fréquence d'horloge...) et d'estimer leur influence [1].

Il a donc été ressenti le besoin de développer, parallèlement à ce type de simulation, des logiciels décrivant de façon plus fine et avec des paramètres d'entrées plus proches de ceux contrôlés par les concepteurs de dispositifs. Ces logiciels utilisent les cadres théoriques de l'analyse numérique pour résoudre les équations aux dérivées partielles modélisant la fabrication des dispositifs ainsi que leurs comportements électronique ou optoélectronique.

Ces logiciels, plus complexes et plus délicats de manipulation, doivent réunir un certain nombre de propriétés afin d'aboutir à des résultats fiables et exploitables par les utilisateurs (figure 1) :

- Des modèles physiques adaptés et validés dans le cas des dispositifs étudiés.
- Une base de données physiques, concernant principalement les matériaux utilisés, accessible et remise à jour régulièrement grâce à des mesures expérimentales.
- Une méthode de résolution numérique permettant évidemment la convergence dans la majorité des cas, mais aussi assurant la cohérence des résultats obtenus (conservation du courant par exemple dans le cas de la simulation du transport).
- Une interface utilisateur ergonomique ainsi qu'un environnement général permettant la modification aisée des paramètres de la simulation et une

exploitation complète des résultats.

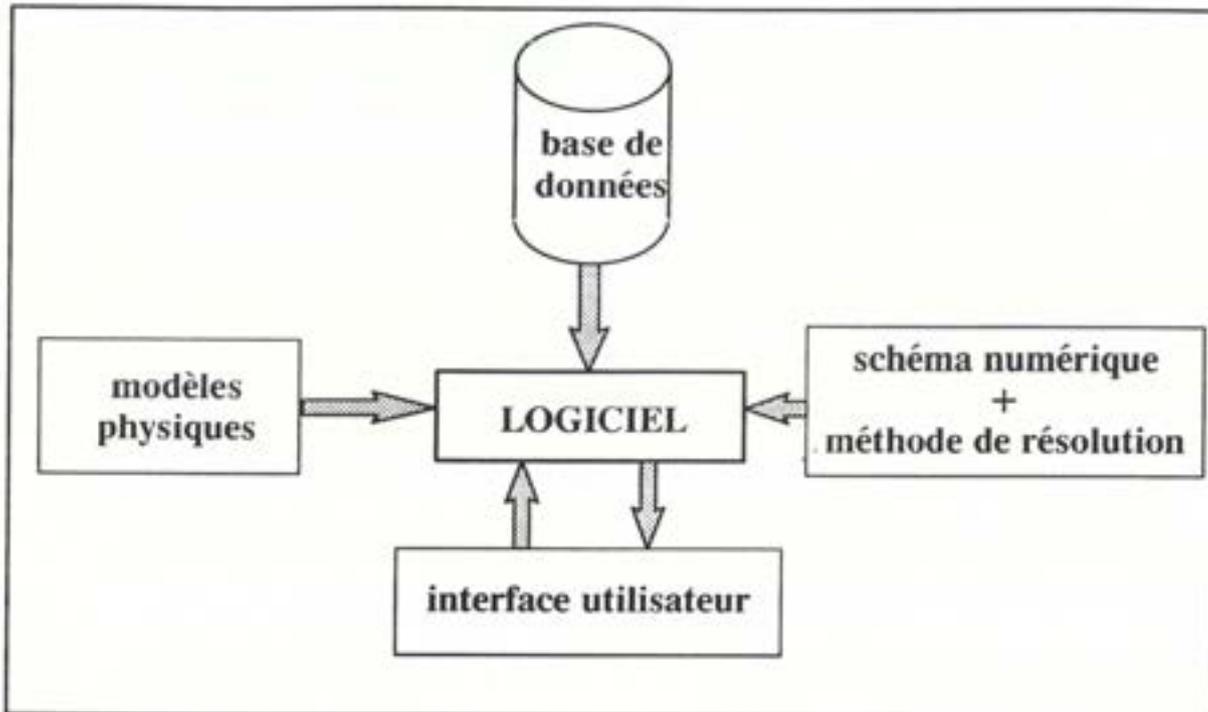


figure 1 : Environnement d'un logiciel de simulation numérique

C'est donc dans cette optique que nous avons réalisé l'ensemble des logiciels présentés tout au long de ce mémoire. Leur organisation générale ainsi que les méthodes de résolutions seront détaillées dans les chapitres ultérieurs.

Les problèmes rencontrés en microoptoélectronique peuvent être classés en trois grandes catégories : la simulation de la fabrication [2,3,4,5], la simulation du transport électronique et la simulation du comportement optique ou électromagnétique. Celles-ci ont subi un développement parallèle au cours des vingt dernières années avec l'essor de la microélectronique sur silicium et plus tard celui de la microélectronique sur matériaux III-V, destinée à des applications rapides ou à des intégrations dans des circuits de commande, d'émission et de réception optique.

Nous allons maintenant détailler les problèmes rencontrés en simulation du transport électronique ainsi que les diverses solutions proposées dans la littérature pour y remédier.

2. L'HISTORIQUE DE LA SIMULATION ELECTRONIQUE

La simulation numérique du transport électronique consiste à résoudre, après discrétisation, les équations aux dérivées partielles dans le volume décrivant le déplacement des porteurs libres dans un dispositif soumis à des différences de potentiel ou plus généralement à des sources d'énergie (éclairage, injection de porteurs dans la base d'un transistor bipolaire,...) l'écartant de son équilibre thermodynamique global.

De nombreux progrès ont été effectués en quelques années aussi bien dans la précision du modèle physique utilisé que dans la qualité de la résolution numérique. Nous nous attacherons dans cette partie à décrire l'évolution et l'état de l'art actuel de la simulation de dispositifs dans une optique de CAO microélectronique et nous intéresserons donc plus particulièrement soit aux modèles analytiques, soit aux modèles basés sur les équations de dérive-diffusion voire de conservation de l'énergie. Les principaux problèmes rencontrés dans la simulation des phénomènes physiques sont de deux types :

- Les problèmes de modèle physique proprement dit.
- Les problèmes liés à la résolution numérique.

Nous allons donc détailler ces deux types de problèmes en expliquant pour chacun d'eux les méthodes qui ont été utilisées pour les résoudre.

2.1. Les problèmes du modèle physique

Les principaux problèmes rencontrés dans la modélisation du transport dans les semiconducteurs par des équations de type dérive-diffusion sont :

- Le choix des inconnues du problème.
- La formulation générale des courants.
- L'expression des lois de mobilités des porteurs.
- L'expression des lois de générations-recombinaisons.
- La prise en compte des phénomènes liés aux hétérojonctions abruptes.

Nous verrons également que le choix des inconnues du problème recouvre aussi bien les aspects du problème physique que ceux de la méthode de résolution.

2.1.1. Le choix des inconnues du problème

En ce qui concerne les phénomènes électromagnétiques, la presque totalité des logiciels de simulation numérique suppose le champ magnétique nul dans la structure. Il existe néanmoins quelques exemples de simulations de magnétotransistors [6]. L'inconnue naturelle devient donc dans ce cas le potentiel électrostatique dont dépend directement le schéma des bandes d'énergie.

Pour ce qui est du transport électronique, plusieurs classes d'inconnues s'affrontent. La première classe d'inconnues est constituée par les densités de porteurs libres n et p qui présentent l'avantage d'être des grandeurs physiques connues dont les valeurs régissent directement de nombreux phénomènes physiques : taux d'ionisation des impuretés, recombinaisons, etc... Les premiers logiciels de simulation numérique du transport ont donc naturellement fait appel au triplet d'inconnues (ϕ, n, p) tant en différences finies [7] qu'en éléments finis [8].

Cependant les courants de porteurs dans la structure ne sont pas directement générés non pas par les variations des densités de porteurs, mais sont proportionnels aux gradients des niveaux de Fermi des populations. Des expressions de ces courants indépendantes de la statistique utilisée peuvent être ainsi obtenues en fonction des niveaux de Fermi [9] et sans faire intervenir de quasi-champ électrique [10] dans le cas de dispositifs à composition non-uniforme.

De plus les densités de porteurs peuvent atteindre une dynamique supérieure à 10^{20} , spécialement dans le cas des dispositifs bipolaires. Il s'en suit de gros problèmes de précision numérique et même des possibilités "d'explosion numérique" de l'algorithme de résolution dans le cas des variables (ϕ, n, p) . Ces raisons ont donc conduit progressivement à utiliser de façon majoritaire le potentiel électrostatique et les niveaux de Fermi comme

inconnues du problème [9,11] sauf dans les cas où une formulation des courants en fonction des densités de porteurs apporte un avantage substantiel.

2.1.2. La formulation des courants de porteurs

Nous venons de voir que le choix des inconnues et les expressions des courants sont des problèmes extrêmement liés. En effet si l'on prend par exemple le courant d'électrons, celui-ci peut s'écrire, dans le cas d'un matériau uniforme et d'une statistique de Boltzmann, en fonction de la densité d'électrons n et du potentiel électrostatique ϕ [12] :

$$\vec{J}_n = -qn\mu_n\vec{\nabla}\phi + qD_n\vec{\nabla}n$$

Cette expression s'accompagne de la relation d'Einstein reliant le coefficient de diffusion D_n à la mobilité électronique μ_n dans le cas uniquement d'une statistique de Boltzmann. Cette expression du courant ne peut donc être utilisée en statistique de Fermi-Dirac ou pour des matériaux de composition non-uniforme. Cependant elle est encore couramment employée dans le cadre de la microélectronique Silicium pour la simulation bidimensionnelle en statistique de Boltzmann car elle permet de garantir, grâce à une formulation en éléments finis de type "Box Method", la conservation et le calcul exact du flux même dans le problème discret [13,14].

Parallèlement une expression plus générale, obtenue par projection de l'équation de transport de Boltzmann est utilisée depuis longtemps dans la simulation unidimensionnelle [9]. Cette expression est également valable en statistique de Fermi-Dirac, dont la prise en compte est nécessaire dans le cas des forts dopages, mais ne permet plus une intégration exacte du flux le long d'une arête dans le cas de la Box-Method bidimensionnelle et peut présenter des instabilités plus importantes dans le cadre d'une résolution 2D en éléments finis P1 avec (ϕ, ϕ_n, ϕ_p) comme choix d'inconnues.

On voit donc deux approches possibles dans la formulation des courants, l'une réservée à la simulation des dispositifs silicium mais possédant des propriétés extrêmement intéressantes justifiant son utilisation, l'autre moins aisée d'emploi mais beaucoup plus gé-

nérale et tendant donc à s'imposer maintenant dans la plupart des logiciels de CAO de dispositifs.

2.1.3. Les expressions des lois de mobilités

Les vitesses des porteurs dans un semiconducteur ne croissent pas linéairement avec le champ électrique comme pour une loi d'Ohm classique. Elles atteignent une valeur de saturation pour un certain champ électrique dit champ de saturation. Les premières lois de vitesses (ou de mobilités) en fonction du champ électrique ont tenu compte de ce phénomène en prenant tout d'abord comme modèles les courbes obtenues dans le silicium ce qui a conduit à des choix de lois de type homographique [9].

Cependant le développement de la microélectronique III-V a imposé l'extension de ce modèle à de nouveaux matériaux semiconducteurs qui présentent des phénomènes plus complexes comme "l'overshoot", consistant en la présence d'un maximum dans la courbe de la vitesse des porteurs en fonction du champ électrique, maximum dû au transfert des porteurs d'une vallée dans l'autre. Ceci est un phénomène statique à bien distinguer des phénomènes de survitesse liés au transport balistique de porteurs sous l'effet d'une impulsion initiale. On a donc fait appel à des familles de lois phénoménologiques dépendant d'un ou plusieurs paramètres, comme par exemple les lois de Chaughey-Thomas [15] ou de Yamaguchi [16]. L'essentiel du travail dans ce domaine a donc consisté à rassembler dans une base de données les mobilités à champ nul, les vitesses de saturation et les champs de saturation de chaque matériau. Il est à noter que les mobilités à champ électrique nul ne sont pas non plus des constantes mais dépendent également des concentrations de dopage suivant des lois connues [17].

2.1.4. Les expressions des générations-recombinaisons

La plupart des dispositifs simulés ont un comportement électronique intrinsèque que l'on peut étudier sans faire intervenir de phénomènes de générations-recombinaisons. En effet les courants induits par ces derniers peuvent souvent être considérés comme des effets parasites par exemple dans le cas d'une diode P-N ou plus généra-

lement dans celui d'un transistor bipolaire. Les premières simulations ont donc été effectuées en supposant des taux de générations–recombinaisons nuls [8]. Cependant la plus grande partie des logiciels utilisent l'expression des recombinaisons non–radiatives RSH (Read–Schockley–Hall [18]) :

$$R = \frac{np - n_i^2}{\tau_p(n + n_i) + \tau_n(p + n_i)}$$

Cette expression, qui correspond à supposer l'existence d'un piège virtuel unique en milieu de bande interdite, est utilisée très largement car elle représente les recombinaisons les plus fréquentes et les plus importantes dans les dispositifs rencontrés.

De plus ces recombinaisons ne posent pas de graves problèmes numériques car elles constituent un terme linéaire de retour à l'équilibre dans les zones à porteur majoritaire. Néanmoins les études de composants comportant des zones à fort champ électrique exigent la prise en compte de phénomènes beaucoup plus difficiles à traiter tels que les recombinaisons Auger pour les lasers [19] et l'ionisation par impact pour les courants de grille dans les FET [20].

Ces phénomènes présentent des non–linéarités extrêmement importantes en fonction des potentiels électrochimiques ce qui aboutit à une instabilité fréquente et une convergence délicate des algorithmes de résolution. C'est pourquoi ces phénomènes ne sont pris en compte que dans des études précises où leur présence est indispensable à la précision de la simulation et ne sont pas utilisés de façon systématique pour tous les dispositifs.

2.1.5. La prise en compte des hétérostructures

Nous avons déjà vu l'influence directe du choix des inconnues et de la formulation des courants sur le traitement des hétérostructures. De fait, le développement de la microélectronique III–V a entraîné une profonde modification des logiciels et des choix numériques issus de la simulation des dispositifs silicium.

La très grande majorité des logiciels à vocation de CAO microélectronique basent leurs modèles physiques sur le modèle d'Anderson de l'hétérojonction supposant l'absen-

ce de densités de charges surfaciques à l'interface et, par voie de conséquence, la continuité des niveaux de Fermi à travers l'hétérojonction. Les inconnues naturelles adaptées au traitement des hétérojonctions sont donc le potentiel électrostatique et les niveaux de Fermi ou encore des variables issues d'une transformation continue du triplet précédent (ex : variables de Slotboom [21]).

Les discontinuités des énergies de bas de bande sont alors directement données par les différences entre affinités des matériaux ce qui implique une "transitivité" des discontinuités pas toujours effective dans la réalité :

$$\Delta E_c^{1 \rightarrow 3} = \Delta E_c^{1 \rightarrow 2} + \Delta E_c^{2 \rightarrow 3}$$

La première étape a donc consisté à mesurer expérimentalement ces discontinuités ainsi que tous les paramètres physiques associés au schéma de bandes (hauteur de bande interdite, densités d'états, etc...). Ce travail a été effectué durant les années 80 et reste encore dans certains cas à compléter et à valider.

Le modèle de dérive-diffusion a été généralement adopté pour la simulation des dispositifs à hétérojonction mais ses limitations aussi bien théoriques que pratiques ont rapidement conduit à lui adjoindre des corrections pour tenir compte des phénomènes physiques complexes existant à l'hétéro-interface. La première de ces corrections consiste à considérer le courant à travers une hétérojonction comme analogue à celui induit par l'effet thermoionique à travers une interface métal-semiconducteur [22]. Grinberg a amélioré ce modèle en 1984 [23] en traitant le transport à travers la jonction par un champ d'émission thermoionique et en utilisant l'approximation WKB [24]. Cette étude a prouvé que la simple analogie avec un effet thermoionique surestime largement la valeur du courant à l'interface.

Dans le cas d'une hétérojonction abrupte, la variation du potentiel électrostatique conjuguée à la discontinuité d'énergie de bande (par exemple de bas de bande de conduction) peut conduire à la création d'un puits de potentiel très fin pour les électrons (figure 2). Cette propriété est utilisée notamment dans les dispositifs comme les HEMT (High

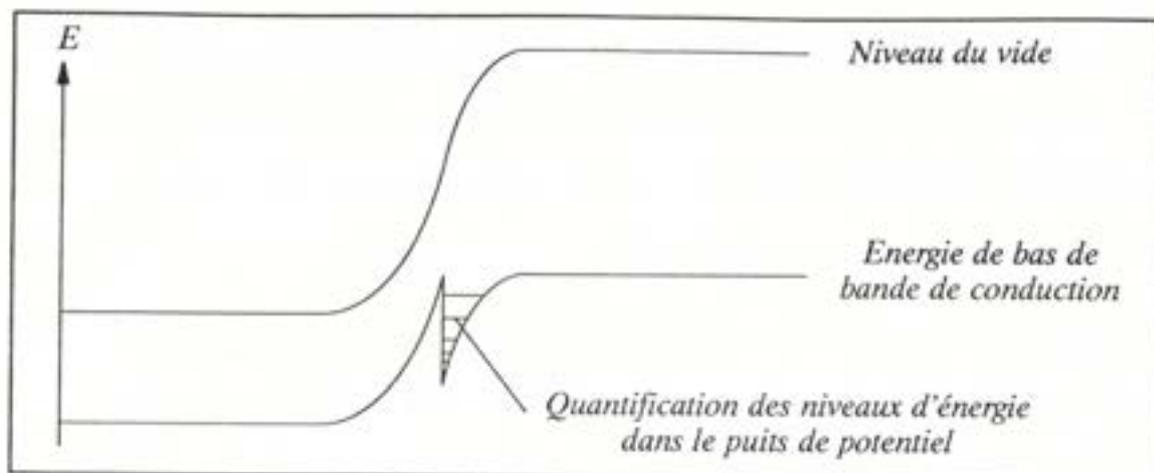


figure 2 : Puits de potentiel électronique dans une hétérojonction

Electron Mobility Transistor) pour confiner un gaz bidimensionnel d'électrons et profiter ainsi d'importantes mobilités dans les deux directions restantes. Ce type de dispositif ne peut évidemment être étudié dans un strict modèle de dérive-diffusion, même en tenant compte de l'effet thermoionique.

La solution, qui a été adoptée par de nombreux auteurs comme par exemple A. Das [25], consiste alors à résoudre de manière couplée l'équation de Poisson pour le calcul du potentiel électrostatique, l'équation de Schrödinger afin d'obtenir les niveaux d'énergie et les densités d'états dans le puits, et enfin les équations de dérive-diffusion classiques dans le reste du dispositif. Les fonctions d'onde sont obtenues pour un moment \vec{p} donné et le courant à travers l'hétérojonction est ensuite calculé en intégrant sur l'espace des moments. Ceci correspond, en fait, essentiellement à un traitement quantique de l'effet thermoionique.

Ce type de simulation présente de nombreux avantages, notamment la possibilité d'étudier des dispositifs complexes, en tenant compte non seulement des recombinaisons dans les domaines où le modèle de dérive-diffusion suffit, mais aussi des phénomènes quantiques (effet tunnel, réflexion de l'onde) aux endroits où ceux-ci sont prépondérants (abords de l'hétérojonction), sans exiger des temps de calcul prohibitifs. Néanmoins il est difficile d'envisager immédiatement l'implantation de ce type de modèle dans des vérita-

bles logiciels de CAO pour des raisons d'ergonomie, de description de structure et de découpage en domaines des dispositifs (par exemple dans le cas des hétérojonctions graduelles).

2.1.6. La simulation du dispositif couplé avec le reste du circuit

La destination finale d'un composant étant le plus souvent d'être intégré dans un circuit où il remplira une fonction en interaction avec les autres composants, il est impératif de pouvoir effectuer des simulations mêlant à la fois le composant à étudier et le reste du circuit. Pour des raisons informatiques évidentes (temps de calcul, place mémoire), il est impossible de résoudre les équations aux dérivées partielles à travers tout le circuit et il faut faire appel à des solutions numériques mixtes.

La première consiste à stocker la caractéristique intrinsèque du composant en simulant un assez grand nombre de points de polarisation, puis d'utiliser celle-ci dans un simulateur de circuits. Cette méthode, relativement économique puisque la simulation "lourde" du composant n'est effectuée qu'une seule fois par polarisation, ne permet cependant pas d'étudier le fonctionnement dynamique du circuit et peut présenter des difficultés pour des composants multipôles (transistor, quadripôle, etc...) dont les caractéristiques ne sont pas des tableaux linéaires mais des tableaux à plusieurs entrées.

La deuxième solution, très couramment employée, consiste à traduire le composant par un modèle analytique, typiquement un schéma électrique équivalent (ex. : modèle de Ebers-Moll pour le TBH, figure 3) qui se présente sous la forme d'un réseau de résistances, capacités, diodes, etc... Les valeurs de ces composants élémentaires sont extraites de la simulation numérique par "fit" des caractéristiques statiques et des réponses dynamiques mesurées. Ce schéma électrique peut ensuite être intégré dans un simulateur de type *SPICE* pour étudier le circuit globalement. La qualité de ce type de simulations est néanmoins très liée à la validité du schéma électrique équivalent retenu, ainsi qu'au mode de fonctionnement (statique, dynamique petit signal, dynamique grand signal) et nécessitent

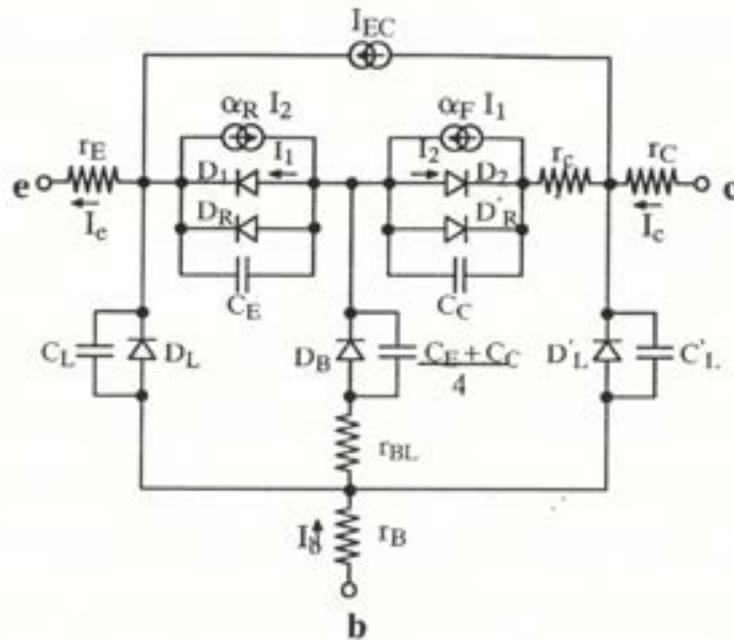


figure 3 : Schéma de Ebers-Moll d'un transistor bipolaire

une bonne connaissance a priori du composant. Ces méthodes ont prouvé dans ce cas être économes en temps calcul et d'une grande efficacité en conception de circuits [26,27].

La troisième solution consiste à effectuer simultanément la simulation du composant en différences finies ou éléments finis et celle du circuit, représenté par un schéma électrique. Cette méthode, plus lourde que la précédente, permet de simuler le composant dans n'importe quel type de fonctionnement et son principe a été généralisé par Engl et al. [28] dans le cas de plusieurs composants interagissant à l'intérieur d'un même circuit, chaque composant étant supposé indépendant et couplé au reste du circuit par un nombre limité de paramètres. Enfin Dirks et al. a proposé une solution mixte entre celle-ci et la première, présentée plus haut [29], consistant à simuler les composants en résolvant les équations aux dérivées partielles dans le cas de petits circuits, puis de stocker les courants et les charges présents aux accès de la structure dans des tableaux dans différentes conditions de fonctionnement. Ces tableaux sont ensuite utilisés pour des simulations de circuits plus importants en interpolant entre les valeurs stockées.

Enfin une méthode a été récemment proposée par l'Université de Bologne [30], basée sur l'extraction des paramètres du fonctionnement petit signal d'un transistor autour d'un point de fonctionnement grâce au logiciel *HFIELDS*, paramètres intégrés ensuite dans un simulateur fréquentiel appliqué à une paire différentielle. Cette méthode permet d'économiser de façon considérable le temps CPU une fois que le point de fonctionnement du composant a été déterminé, tout en explorant une large gamme de fréquences. Elle n'est cependant pas utilisable pour les fonctionnements transitoires ou bien grand signal.

2.1.7. Le couplage avec les effets thermiques

Dans de nombreux dispositifs la présence de champs électriques intenses ou de courants importants entraîne des phénomènes parasites qui peuvent affecter profondément le fonctionnement initial du composant. Ainsi l'augmentation de la température du réseau par effet Joule dans de forts champs électriques induit une réduction de la mobilité et donc une diminution des performances aussi bien statiques que dynamiques. De plus la durée de vie du dispositif est également altérée dans le cas de températures de fonctionnement importantes. C'est pourquoi l'on voit apparaître de plus en plus la prise en compte de ces effets, soit sous forme de post-traitements derrière la simulation, soit directement de manière couplée.

La méthode la plus simple consiste à résoudre l'équation de diffusion de la chaleur en supposant uniquement la présence d'un terme de source thermique correspondant à l'effet Joule [31] :

$$\operatorname{div} (D(T)\vec{\nabla}T) = S(\vec{x}) \quad \text{avec} \quad S(\vec{x}) = \vec{E} \cdot \vec{J}_n$$

Ce type de modèle permet d'obtenir une très bonne idée du comportement thermique au premier ordre du composant. Il ne prend cependant pas en compte les couplages thermo-électriques comme l'effet Seebeck ou l'effet Peltier. Si l'on désire étudier plus finement le transport de l'énergie et de la chaleur dans le dispositif, il faut alors résoudre

simultanément l'équation de conservation de l'énergie obtenue à partir de l'équation de Boltzmann (cf. Ch.1, § 2.3.3.).

2.2. Les problèmes de la résolution numérique

2.2.1. Le schéma de discrétisation

Le schéma de discrétisation détermine la façon dont le problème continu va être approché par un problème discret ainsi que les relations entre les variables continues et les variables discrètes retenues. Il existe deux grands types de discrétisation pour les logiciels de simulation : les différences finies et les éléments finis, possédant chacun leurs avantages et leurs inconvénients.

Les différences finies consistent à découper le dispositif sur une grille rectangulaire et considérer comme inconnues du problème discret les valeurs aux noeuds de la grille des fonctions inconnues du problème continu. Cette approche possède de multiples avantages :

- Dans le cadre d'une résolution par méthode de Newton-Raphson, les matrices sont régulières et bien conditionnées [32], ce qui facilite les inversions. La matrice provenant de l'équation de Poisson est symétrique et définie positive, celles des équations de continuités sont asymétriques.
- L'écriture du schéma de discrétisation est relativement simple et on peut composer le manque de précision et de rigueur du schéma en augmentant le degré des polynômes d'interpolation.

La méthode des différences finies a donc été utilisée en premier lieu, comme par exemple dans les logiciels *IMPACT* de l'ISEN [33] ou *MINIMOS* du T.U. Vienna [34]. Cependant la nature fortement non-linéaire du modèle et le traitement complet des hétérojonctions entraînent des chocs et des instabilités dans la résolution des équations. Le cadre des éléments finis offre alors, au prix d'une certaine complexité de formulation, une approche plus rigoureuse et plus générale [7]. En voici les principales caractéristiques :

- Le maillage n'est plus un maillage rectangulaire mais peut être réalisée à partir de polygones quelconques, voire de figures plus générales encore (à base d'arcs de cercle pour des éléments cylindriques), autorisant ainsi une très grande souplesse dans la discrétisation du dispositif.
- Les fonctions de base de l'espace discrétisé peuvent être choisies dans des espaces vectoriels plus généraux comme des espaces de Sobolev qui permettent de représenter des fonctions dont la divergence ou bien le rotationnel sont réguliers.
- Cependant les processus d'assemblage des matrices jacobiennes et des seconds membres sont assez coûteux et la structure des matrices impose un stockage adapté, les méthodes d'inversion directes devenant vite prohibitives en temps de calcul et place mémoire.

Les premières applications des éléments finis à la simulation du transport électronique ont été effectuées en "éléments finis P1" pour toutes les inconnues, ce qui consiste à les considérer linéaires par élément. On peut déjà remarquer que cette approximation est relativement grossière si l'on choisit comme inconnues les densités de porteurs et aboutit à des imprécisions numériques assez importantes dans le cas de maillages peu serrés.

2.2.2. La conservation des courants

La résolution des équations de Poisson et de continuités est effectuée en prenant (ϕ, n, p) ou (ϕ, ϕ_n, ϕ_p) comme inconnues. Néanmoins les quantités intéressantes pour le concepteur de dispositifs sont essentiellement les valeurs des courants de porteurs \bar{J}_n et \bar{J}_p qui caractérisent le fonctionnement du dispositif. Il est donc très important pour la cohérence et la compréhension des résultats d'obtenir la conservation de ces courants dans toute la structure même dans le problème discret et donc de choisir le type de discrétisation qui va entraîner cette conservation. Il existe plusieurs niveaux pour la conservation des courants en simulation numérique :

- La conservation dans le problème continu
- La conservation dans le problème discret
- La conservation dans le problème discret numérique
- La conservation dans le problème discret numérique résolu à ϵ près

Le modèle physique assure la première conservation quelque soit le dispositif étudié grâce à l'égalité des taux de générations–recombinaisons pour les électrons et les trous : ceux-ci sont créés par paire, il n'y a pas apparition ou disparition de charges électriques. La conservation dans le problème discret pose plus de problèmes : elle n'est pas assurée pour tous les schémas de discrétisation, par exemple si l'on choisit des éléments finis de type P1 avec (ϕ, n, p) comme inconnues. Franz et al. ont proposé en 1982 [35] un schéma de discrétisation en différences finies basé sur le concept de *volumes finis*, assurant la conservation du courant même dans le cas du problème discret résolu exactement. Cette méthode, provenant de la mécanique des fluides et appelée également "*Control Area Approximation*" (ou "*Box Method*", "*Finite Boxes*" ou encore "*Méthode de Volumes Finis*"), a été appliquée également dans le cadre des éléments finis [36]. Elle consiste à découper le maillage initial par des "boîtes" ou volumes finis sur lesquels on intègre la divergence du courant : cette technique a été reprise dans *DENEB*, notre logiciel de simulation électrique, et sera détaillée dans la description de *DENEB*.

Cette méthode a été largement employée pour la simulation des dispositifs silicium dans des logiciels comme *HFIELDS*, *TITAN-JUPIN*, ou *FIELDAY*. De plus on peut, en statistique de Boltzmann, obtenir une expression exacte de la composante longitudinale du courant sur une arête ce qui augmente encore la précision de la simulation.

Cependant, même dans ce cas, la dynamique des densités de porteurs dans une structure aussi simple qu'une jonction implique une dynamique quasi-identique sur les gradients des niveaux de Fermi et par voie de conséquence des problèmes de précision numérique dans le problème discret. On ne peut plus obtenir dans ce cas la conservation du courant dans le problème discret numérique à cause de l'insuffisance de la précision ma-

chine. Pour remédier à ces problèmes en gardant le même schéma de discrétisation, il faut, soit représenter les niveaux de Fermi sur des nombres possédant une trentaine de chiffres significatifs, soit mettre au point une méthode permettant de "retrouver" les valeurs des courants même dans les zones où ceux-ci sont numériquement nuls ou extrêmement bruités.

De plus, même avec une précision numérique très grande, les mauvais conditionnements des matrices de Newton, dans de très nombreux cas, entraînent une forte décorrélation entre les valeurs des incréments des niveaux de Fermi et la conservation des courants qui correspond à la résolution effective du système. On peut très bien alors aboutir à des potentiel électrostatique et des niveaux de Fermi dont les variations sont inférieures à 10^{-6} Volt et des courants pourtant toujours mal conservés.

Néanmoins de nouvelles voies d'exploration pour palier à ces difficultés sont apparues récemment. Elles consistent à ne plus résoudre directement un système de trois équations à trois inconnues (le potentiel électrostatique et les niveaux de Fermi) mais à considérer les flux de porteurs également comme des inconnues reliées aux précédentes par les équations de transport. Ces méthodes, connues sous le nom d'"*Eléments Finis Mixtes*" ou "*Eléments Finis Hybrides*" [37, 38,39], permettent de mieux tenir compte de la conservation du courant et d'améliorer la qualité de convergence du système.

2.2.3. Le schéma de résolution

Le modèle de dérive-diffusion est constitué d'un système de trois équations aux dérivées partielles couplées, dépendant chacune de trois fonctions inconnues. Le problème numérique revient à résoudre, après discrétisation, une équation non-linéaire $F(X) = 0$, X étant le vecteur rassemblant les trois fonctions inconnues discrètes. Le schéma de résolution détermine la manière dont le système non-linéaire discret va être résolu autant sur le plan de la méthode (Newton, gradient conjugué, relaxation, etc...) que sur le choix des couplages entre les divers types d'inconnues (potentiel, niveaux de Fermi, voire température ou énergie dans les modèles plus élaborés).

On peut tout d'abord remarquer que chaque équation du modèle de dérive-diffusion peut être associée de façon naturelle à une des inconnues : le potentiel électrostatique pour l'équation de Poisson, et le niveau de Fermi (ou la densité de porteurs) pour l'équation de transport de la population correspondante. C'est pourquoi Scharfetter et Gummel ont proposé en 1969 [40] un schéma de résolution découplé consistant à résoudre chaque équation sur son inconnue "naturelle", puis à boucler sur les trois équations jusqu'à convergence. Ce schéma a été très largement repris dans les logiciels de simulation électronique : S. Selberherr avec le logiciel *SCDSS* [41], Stanford avec le logiciel *SEDAN* etc... Il présente l'avantage de permettre une écriture très simple des matrices jacobiniennes dans la méthode de Newton. Néanmoins le découplage entraîne une instabilité plus grande du système, tout particulièrement dans les problèmes multidimensionnels.

La méthode de résolution retenue actuellement est le plus souvent la méthode de Newton-Raphson. Des comparaisons ont été effectuées avec des méthodes de relaxation [42] qui consistent à résoudre des problèmes partiels sur chaque inconnue du système en considérant les autres fixées. Elles ont montré la supériorité de la méthode de Newton notamment en ce qui concerne la stabilité.

2.2.4. Les procédés d'inversion et les tailles de maillage

Les équations de dérive-diffusion étant des équations différentielles du deuxième ordre, les matrices jacobiniennes obtenues dans la méthode de Newton après discrétisation sont des matrices "creuses", c'est-à-dire comportant essentiellement des éléments nuls. En particulier dans la simulation unidimensionnelle on a affaire à une matrice bande autour de la diagonale, le nombre de diagonales non-nulles étant variable selon le schéma de discrétisation retenu.

Les méthodes de stockage dans ce cas sont simples et les procédés d'inversion sont le plus souvent des méthodes de type descente-remontée de Gauss, aboutissant à une complexité linéaire en fonction de la taille du maillage.

En revanche, dans la simulation multidimensionnelle, les matrices jacobienne n'ont plus une structure aussi simple et il devient très rapidement impossible de les stocker et de les inverser par des méthodes directes pour des raisons de taille mémoire et de temps de calcul (notamment dans le cas des hétérostructures qui demandent des tailles de maillage élevées). On a alors recours à des algorithmes non plus directs (*SPARSPAK* [43], etc...) mais itératifs de type gradient conjugué simple ou double [44], avec ou sans préconditionnement selon la qualité du conditionnement des matrices. Ces algorithmes permettent de traiter des problèmes bien plus complexes et sont maintenant employés majoritairement dans les logiciels de simulation de la fabrication et du comportement électrique.

2.3. Les principaux logiciels actuels de simulation numérique

En conclusion à cette description des problèmes liés à la simulation et des solutions adoptées, nous avons regroupé dans un tableau récapitulatif les principaux logiciels connus, voire disponibles de façon externe au laboratoire.

Nom	Origine	date	dim.	Discrétisation	Caractéristiques
<i>BICEPS</i> [46]	AT&T	82	2	D.F.	Implantation ionique, prédéposition, diffusion en ambiance inerte et oxydante, épitaxie, attaque, dépôt
<i>COMPOSITE</i>	Fraunhofer	80	2	D.F.	Implantation ionique, prédéposition, diffusion, oxydation, épitaxie, attaque, dépôt, lithographie (<i>SAMPLE</i>)
<i>ICECREM</i> [45]		80	1	D.F.	Implantation ionique, diffusion, oxydation, épitaxie, attaque, dépôt, analyse de la sensibilité aux paramètres d'entrées
<i>IMPACT 1/2</i> <i>IMPACT 3</i> [33]	ISEN	80	2 2	E.F. D.F. + Box Method	MOS : 2 couches, implantation, diffusion, oxydation, Modèle : dérive-diffusion Dispositif : MOS (active planar ou parasitic non-planar) Résolution : Newton-Raphson, Scharffetter-Gummel Inversion : gradient conjugué Mobilités : Yamaguchi Recombinaisons : Auger, RSH, génération de Chynoweth Simulation : statique
<i>PROSIM</i> <i>ZANAL</i>	Elschner (Dresde)				Simulation de process
<i>TITAN 5</i> [5] <i>JUPIN</i>	CNET	87	2 2	E.F. E.F. + Box Method	Implantation ionique, diffusion, épitaxie, dépôt, attaque, glass reflow Modèle : dérive-diffusion Dispositif : fourni par <i>TITAN 5</i> Résolution : Newton couplé Inversion : gradient conjugué carré Mobilités : Masetti, Yamaguchi Recombinaisons : RSH, Auger, génération de Chynoweth Divers : électrons chauds, band gap narrowing Simulation : statique

Nom	Origine	date	dim.	Discrétisation	Caractéristiques
<i>OLIMP</i>	CNET		1		Diffusion avec prise en compte des mouvements de lacunes
<i>ETHER</i> [47]	CNET Bagneux		1	D.F	Modèle : dérive-diffusion Dispositif : généraliste 1D Résolution : Newton-Raphson, Scharffetter-Gummel Mobilités : Caughey-Thomas Recombinaisons : Auger, RSH, centres profonds, ionisation Simulation : statique,dynamique
<i>TITAN III-V</i>			2	E.F	Idem TITAN avec extension III-V
<i>DENEBO</i>			2	E.F + Box Method	Idem ETHER
<i>SUPREM</i>	Stanford	78	1	D.F.	Fortement exploité (process)
<i>GEMINI</i>			2	D.F.	Modèle : équation de Poisson
<i>SEDAN</i>		79	1	D.F.	Modèle : dérive-diffusion Dispositif : Bipolaire Résolution : Newton-Raphson, Scharffetter-Gummel Simulation : statique
<i>PISCES</i> [48]		82	2	E.F.	Modèle : dérive-diffusion Dispositif : Généraliste Résolution : Newton-Raphson, Scharffetter-Gummel Inversion : gradient conjugué Mobilités : Yamaguchi Recombinaisons : Auger, RSH, ionisation par impact Simulation : statique,dynamique
<i>CANDE</i>					
<i>ZOMBIE</i> <i>BAMBI</i> <i>MINIMOS</i> [34]	T.U. Vienna		2	D.F.	Modèle : dérive-diffusion Dispositif : MOS uniquement Résolution : Newton-Raphson, Scharffetter-Gummel Inversion : gradient conjugué Mobilités : Yamaguchi Recombinaisons : Auger, RSH, génération de Chynoweth Simulation : statique

Nom	Origine	date	dim.	Discrétisation	Caractéristiques
<i>HFIELDS</i> [49]	Université de Bologne		2/3	E.F + Box Method	Base importante de développe- ment <u>Modèle</u> : dérive-diffusion + hydrodynamique <u>Dispositif</u> : général <u>Résolution</u> : Newton-Raphson, Scharffetter-Gummel <u>Inversion</u> : gradient conjugué <u>Mobilités</u> : Yamaguchi <u>Recombinaisons</u> : Auger, RSH, génération de Chynoweth <u>Simulation</u> : statique,dynamique
<i>CURRY</i>	Philips				
<i>GALENA</i>	Université Aix-La- Chappelle				
<i>CADDETH</i> [50]	Hitachi		2/3	D.F.	<u>Modèle</u> : dérive-diffusion
<i>FEDSS</i> [51]	IBM		2		Simulation de process
<i>FIELDAY</i> [52]			2	E.F. + Box Method	<u>Modèle</u> : dérive-diffusion
<i>MOS2C</i> [53]	Toshiba		2	D.F. + Box Method	<u>Modèle</u> : dérive-diffusion <u>Dispositif</u> : MOS <u>Résolution</u> : Newton-Raphson, Scharffetter-Gummel <u>Inversion</u> : gradient conjugué <u>Mobilités</u> : Yamaguchi <u>Recombinaisons</u> : Auger, RSH, ionisation par impact <u>Simulation</u> : statique,dynamique
<i>SAMPLE</i> <i>SUPRA</i>	Berkeley		2		
<i>SUPER</i> <i>PRISM</i>	IMEC (Leuven)		2		

3. DESCRIPTION DU LOGICIEL *TITAN III-V*

Le besoin de véritables outils de "CAO de dispositifs microélectroniques" a conduit le CNET à développer un logiciel de simulation de la fabrication, tout d'abord adapté au silicium avec *TITAN 5* [54] réalisé par le CNS de Grenoble, puis permettant la simulation d'hétérostructures très diverses avec *TITAN III-V* conçu au CNET Bagneux [55].

Ces logiciels développés sur une base informatique identique permettent la simulation bidimensionnelle des procédés technologiques de fabrication des dispositifs microélectroniques, soit par des modèles analytiques, soit à l'aide de techniques plus complexes de l'analyse numérique. Pour chaque type d'étape technologique simulée, les modèles utilisés font appel à l'état de l'art de la connaissance dans ce domaine. Ces étapes sont : les recuits, oxydations, épitaxies, dépôts, gravures et implantation ionique. Chacune de ces étapes peut être simulée même en présence d'hétérostructure ou de matériau non-uniforme.

Nous allons décrire dans la suite tout d'abord la structure des données utilisée dans le logiciel, puis le détail des diverses étapes technologiques et enfin l'organisation générale du logiciel, organisation qui sera reprise dans tous les autres logiciels présentés dans cette thèse.

3.1. La structure de données

La structure de données du logiciel *TITAN* est gérée par le gestionnaire de données *DAMSEL* [56,57] qui permet une organisation cohérente et exportable des nombreuses informations concernant les matériaux, les modèles employés pour chaque étape technologique, la géométrie et le maillage de la structure, et enfin les profils d'impuretés présentes dans la structure.

3.1.1. La représentation des matériaux

Chaque matériau est représenté par un nom et un paramètre numérique permettant de différencier plusieurs matériaux portant néanmoins le même nom par commodité pour

l'utilisateur. Une représentation généraliste des dispositifs implique que le matériau soit une donnée locale sur le maillage, ce qui entraîne que toutes les caractéristiques physiques vont être des fonctions sur le maillage. En effet les structures actuelles peuvent présenter des gradualités dans une ou plusieurs directions et une description de la structure où le matériau serait obligatoirement constant par "zone" est inadaptée au traitement de tels dispositifs.

Cette représentation locale du matériau implique évidemment un surcoût important pour les tailles des structures de données mais se révèle néanmoins indispensable dans le cadre d'un outil de simulation généraliste.

3.1.2. La représentation des modèles

A chaque étape technologique est associée une série de modèles correspondant chacun à un ensemble de paramètres numériques, logiques ou alphabétiques. On crée ensuite des couples matériau-modèle où l'on stocke les paramètres du matériau dans le modèle considéré. Cette structure permet ainsi de rajouter ou de supprimer facilement des modèles et donc de changer les paramètres caractéristiques du matériau sans remettre en cause la structure complète des données.

3.1.3. Les étapes technologiques

En ce qui concerne la simulation il faut distinguer plusieurs classes d'étapes technologiques :

- Les étapes qui ne correspondent qu'à une modification globale de la géométrie et donc quasiment instantanées en temps de calcul, par exemple : la définition de substrat, l'épitaxie.
- Les étapes qui nécessitent uniquement un maillage de frontière évoluant dans le temps et donc peu gourmandes en temps CPU, par exemple : le dépôt, la gravure, l'oxydation.

- Les étapes qui nécessitent un maillage bidimensionnel des zones traitées ou une résolution d'équations aux dérivées partielles dans le domaine, par exemple : l'implantation ionique, la gravure.

3.1.3.1. L'implantation ionique

Cette étape consiste à implanter dans la structure des impuretés en les bombardant sur le matériau. L'énergie des impuretés permet de déduire le profil d'implantation à l'intérieur du dispositif dont la caractéristique essentielle est la profondeur moyenne. Chaque matériau possédant un pouvoir d'arrêt différent sur les impuretés considérées, le profil d'implantation dans une structure multicouches est caractérisé par une profondeur moyenne déduite grâce à la loi suivante :

$$R'_i = R_i + \sum_{j=1}^{i-1} Z_j \left(1 - \frac{R_i}{R_j} \right)$$

R_j étant la profondeur moyenne lorsque le matériau de la couche j est seul et Z_j l'épaisseur de la couche j .

Au profil obtenu est ajouté une déviation latérale pour tenir compte des chocs avec les atomes présents dans le matériau qui dévient les impuretés implantées :

$$C(x_0, y_0) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} f(x, y_0) e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2}} dx$$

$f(x, y)$ étant la distribution suivant y obtenue initialement au point $x = a$.

Les résultats sont ensuite interpolés sur le maillage en tenant compte de l'inclinaison éventuelle du faisceau par rapport à la surface.

3.1.3.2. La diffusion

La diffusion d'une impureté dans un matériau pendant une étape de recuit peut se modéliser à l'aide de l'équation de conservation suivante :

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \text{div } \vec{J} = 0 \quad \text{avec} \quad \vec{J} = -D \vec{\nabla} C + Z \mu C \vec{E}$$

La résolution de cette équation aux dérivées partielles est effectuée en éléments finis de type P1. Elle peut être accompagnée d'une prise en compte des interactions avec les défauts cristallins ainsi que de l'oxydation.

3.1.3.3. L'oxydation

Cette étape décrit la croissance d'oxyde sous atmosphère, ou pyrogénique.

3.1.3.4. Le dépôt

Cette étape, correspondant au dépôt d'une nouvelle couche de matériau sur la structure, est simulée par déplacement d'une frontière.

3.1.3.5. La gravure

La simulation de cette étape est obtenue en déplaçant une frontière libre, avec des critères d'attaque et d'isotropie différents suivant les matériaux.

3.1.4. La structure générale du logiciel

La conception d'outils logiciels de CAO de dispositifs réclame non seulement des algorithmes réalistes et efficaces ainsi qu'une structuration des données adaptée aux cas les plus généraux comme les hétérostructures ou les matériaux non-uniformes, mais également une intégration complète à l'intérieur d'un ensemble permettant une interface agréable avec l'utilisateur, des entrées-sorties multiples (fichier, clavier, imprimante) et un éditeur graphique souple pour la visualisation de tous les résultats disponibles.

C'est pourquoi le logiciel *TITAN III-V*, ainsi que tous les autres logiciels présentés dans cette thèse, a été conçu à l'aide de trois utilitaires fondamentaux :

- Le gestionnaire de données *DAMSEL*
- Le gestionnaire d'entrées-sorties *HERMES*
- L'éditeur graphique *DAMIGO*

L'organisation générale du logiciel *TITAN* peut être résumée graphiquement de la manière suivante :

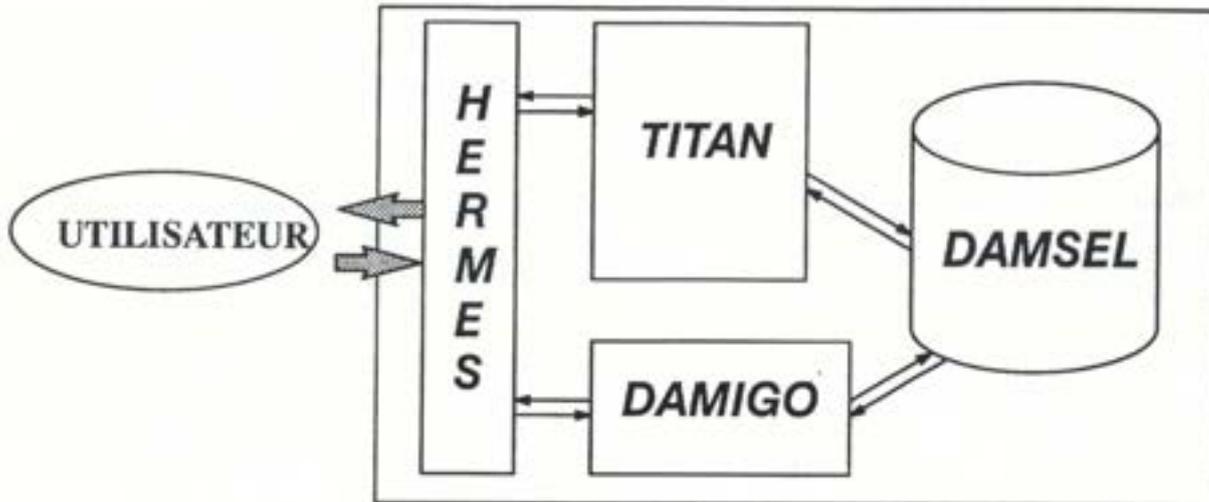


figure 4 : Organisation générale du logiciel *TITAN*

Il faut insister sur le fait qu'une organisation de ce type permet par la suite une grande économie de moyens et de temps lors de l'interfaçage des divers logiciels de simulation : simulation de la fabrication, du comportement électrique 1D, du comportement électrique 2D et enfin du comportement optique 2D. Cet interfaçage est en effet obligatoire si l'on veut simuler de façon réaliste et complète les dispositifs optoélectroniques complexes tels que le laser ou le coupleur électrooptique.

Nous avons donc choisi pour l'organisation de nos logiciels de simulation une approche généraliste plus coûteuse en taille et en rigueur de programmation qui n'est pas forcément justifiée si on s'intéresse à l'étude d'un dispositif particulier, mais qui devient indispensable dans le cadre qui est le nôtre, c'est-à-dire la création d'un ensemble cohérent d'outils de simulation en microoptoélectronique destiné aussi bien à la simulation des transistors bipolaires et des transistors à effet de champ que celle des lasers.

REFERENCES

- [1] P. Lloyd, "Application of Numerical Simulation in the Modeling of I.C. Device Structure", *Proceedings of the NASECODE III*, p. 16, ed. by B.T. Browne and J.J.H. Miller, Boole Press, Galway 1983.
- [2] S. Ichikawa, "Adaptation of Stiffs Methods to Simulation of Impurity Diffusion in Semiconductors", *Proceedings of the NASECODE III*, p. 140, ed. by B.T. Browne and J.J.H. Miller, Boole Press, Galway 1983.
- [3] G. Amaratunga, R. Bhatia and S. Nageswaran, "The Fast Simulation of MOS Source/Drain Diffusion Using an A-Priori and a Frontal Solution Scheme," *Proceedings of the NASECODE IV*, p. 134, ed. by B.T. Browne and J.J.H. Miller, Boole Press, Dublin 1985.
- [4] I. Desoutter, "Two-Dimensional Simulation of Diffusion under Oxidizing Ambients using the Finite Element Method," *Proceedings of the NASECODE IV*, p. 267, ed. by B.T. Browne and J.J.H. Miller, Boole Press, Dublin 1985.
- [5] A. Gerodolle, S. Martin and A. Marrocco, "Finite Element Method applied to 2D MOS Process Simulation and Defect Diffusion : Program TITAN," *Proceedings of the NASECODE IV*, p. 287, ed. by B.T. Browne and J.J.H. Miller, Boole Press, Dublin 1985.
- [6] W. Allegretto, A. Nathan and H.P. Baltes, "Two-Dimensional Numerical Analysis of Silicon Bipolar Magnetotransistors," *Proceedings of the NASECODE V*, p. 87, ed. by B.T. Browne and J.J.H. Miller, Boole Press, Dublin 1987.
- [7] R.E. Bank, D.J. Rose and W. Fichtner, "Numerical Methods for Semiconductor Device Simulation," *IEEE Trans. Electron Devices*, vol ED-30, pp. 1031-1041, 1983.
- [8] J.J. Barnes and R.J. Lomax, "Finite Elements Methods in Semiconductor Device Simulation," *IEEE Trans. Electron Devices*, vol ED-24, pp. 1082-1089, 1977.
- [9] B.V. Gokhale, "Numerical Simulation for a One-Dimensional Silicon n-p-n Transistor," *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. ED-17, p. 594, 1970.
- [10] Y.S Hiraoka, J.Yoshida and M. Azuma, "Two-Dimensional Analysis of Emitter Size Effect on Current Gain for GaAlAs/GaAs HBT's", *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. ED-34, pp. 721-725, 1987.
- [11] D. Ankri, R. Azoulay, E. Caquot, J. Dangla, C. Dubon and J.F. Palmier, "Analysis of D.C. Characteristics of GaAs/GaAlAs Double Heterojunction Bipolar Transistors," *Solid-State Electron.*, 29 (2), pp. 141-149, 1986.

- [13] Y.S. Hiraoka and J. Yoshida, "Two-Dimensional Analysis of the Surface Recombination Effect on Current Gain for GaAlAs/GaAs HBT's," *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. ED-35, p. 401, 1988.
- [14] K. Horio, Y. Iwatsu and H. Yanai, "Numerical Simulation of Graded AlGaAs/GaAs Heterojunction Bipolar Transistors with various Collector Parameters," *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. ED-36, p. 617, 1989.
- [15] W.L. Engl, H.K. Dirks et al., Device Modeling, *PROC. IEEE 71* (1), 1983
- [16] K. Yamaguchi, "A Mobility Model for Carriers in the MOS Inversion Layer," *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. ED-30, pp. 658-663, 1983.
- [17] D.M. Caughey and R.E. Thomas, "Carrier Mobilities in Silicon Empirically Related to Doping and Field," *Proc. IEEE (Lett.)*, vol. 55, pp. 2192-2193, Dec. 1967
- [18] W. Shockley and W.T. Read, "Statistics of the Recombination of Holes and Electrons," *Phys. Rev.*, vol. 87, pp. 835-842, Sept. 1952
- [19] S. Seki, M. Tomizawa, K. Yokoyama and A. Yoshii, "Two-Dimensional, Static and Dynamic Device Simulation of Laser Diodes," *IEDM-88*, p. 323.
- [20] P. Carer, "Modélisation et Caractérisation de transistors à effet de champ, sur matériaux III-V, pour applications microoptoélectroniques," *Thèse de Doctorat de l'Université PARIS-SUD*, 1990
- [21] J.W. Slotboom, "Computer-Aided Two-Dimensional Analysis of Bipolar Transistors," *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. ED-20, pp.669-679, 1973.
- [22] H.K. Henish, Rectifying Semi-conductor Contacts, Clarendon Press, Oxford (1957).
- [23] A.A. Grinberg, M.S. Shur, R.J. Fischer and H. Morkoç, "An Investigation of the Effect of Graded Layers and Tunneling on the Performance of AlGaAs/GaAs Heterojunction Bipolar Transistors," *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. ED-31, pp. 1758-1765, 1984.
- [24] F.A. Padovani and R. Stratton, "Field and Thermoionic-Field Emission in Schottky Barriers," *Solid State Electron.*, 9 (5), p. 695, 1966.
- [25] A. Das and M.S. Lundstrom, "Numerical Study of Emitter-Base Junction Design for AlGaAs/GaAs Heterojunction Bipolar Transistors," *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. ED-35, pp. 863-870, 1988.
- [26] C. Algani, "Conception de Circuits Hyperfréquences à base de Transistor Bipolaire à Hétérojonction GaAs/GaAlAs," *Thèse de Doctorat de l'Université Paris VI*, 5 juil. 1990.

- [27] E.J. Prendergast, "An Integrated Approach to Modeling," *Proceedings of the NASECODE IV*, p. 83, ed. by B.T. Browne and J.J.H. Miller, Boole Press, Dublin 1985.
- [28] W.L. Engl, R. Laur and H.K. Dirks, *IEEE Trans. on Computer Aided Design*, vol. CAD-1, pp. 85-93, 1982.
- [29] H.K. Dirks and K.M. Eickhoff, "Numerical Models and Table Models for MOS Circuit Analysis," *Proceedings of the NASECODE IV*, p. 13, ed. by B.T. Browne and J.J.H. Miller, Boole Press, Dublin 1985.
- [30] A. Gnudi, P. Ciampolini, R. Guerrieri, M. Rudan and G. Baccarani, "Circuit Analysis by using a Device Simulator," *Proceedings of the NASECODE V*, p. 201, ed. by B.T. Browne and J.J.H. Miller, Boole Press, Dublin 1987.
- [31] A. Napieralski, J.M. Dorkel and P. Leturcq, "Electro-thermal Coupling Simulation of High Power Bipolar Transistors," *Proceedings of the NASECODE V*, p. 301, ed. by B.T. Browne and J.J.H. Miller, Boole Press, Dublin 1987.
- [32] K. Hane, "Supercomputing for Process/Device Simulations," *Proceedings of the NASECODE VI*, p. 11, ed. by B.T. Browne and J.J.H. Miller, Boole Press, Dublin 1989.
- [33] D. Collard, B. Baccus, E. Dubois and D. Morel, "IMPACT 1-2-3 An Integrated 2D Process/Device Simulator for M.O.S. Technology," *Lecture notes and digest of the NASECODE VI short course and software Forum*, p. 16, ed. by W. Crans, Boole Press, Dublin 1989.
- [34] S. Selberherr et al., "MINIMOS - A Two-Dimensional Transistor Analyser," *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. ED-27, pp. 1540-1550, 1980.
- [35] A.F. Franz, G.A. Franz, S. Selberherr, C.A. Ringhofer and P.A. Markowich, "Finite Boxes : A Generalisation of the Finite Difference Method Suitable for Semiconductor Device Simulation," *Conference on Numerical Simulation of VLSI Devices*, Boston 1982.
- [36] B.J. McCartin, J.R. Caspar, R.E. La Barre, G.A. Peterson and R.H. Hobbs, "Steady State Numerical Analysis of Single Carrier Two-Dimensional Semiconductor Devices using the Control Area Approximation," *Proceedings of the NASECODE III*, p. 185, ed. by B.T. Browne and J.J.H. Miller, Boole Press, Galway 1983.
- [37] A. Marrocco, F. Hecht, E. Caquot and M. Filoche, "Semiconductor Device Modelling for Heterojunction Structures with Mixed Finite Elements," *Proceedings of the NASECODE VII*, ed. by B.T. Browne and J.J.H. Miller, Boole Press, Copper Mountain 1991 (à paraître).

- [38] E. Anderheggen, P. Bartelt, P. Durisch, J. Korvink, H. Schwarzenbach and H. Ungricht, "Numerical Comparison of Pian's 2D Hybrid FE-Model with some Classical Device Simulation Discretization Methods Using Sever's Test Diode," *Proceedings of the NASECODE VI*, p. 441, ed. by B.T. Browne and J.J.H. Miller, Boole Press, Dublin 1989.
- [40] D.L. Scharfetter and H.K. Gummel, "Large-Signal Analysis of a Silicon Read Diode Oscillator," *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. ED-16, p. 64, 1969.
- [41] A.F. Franz, G.A. Franz, S. Selberherr and P. Markowich, "The Influence of Various Mobility Models on the Iteration Process and Solution of the Basic Semiconductor Equations", *Proceedings of the NASECODE III*, p. 117, ed. by B.T. Browne and J.J.H. Miller, Boole Press, Galway 1983.
- [42] P. Wild and H.J. Wiesmann, "A 1D Case Study of Solving the Semiconductor Device Equations : Multigrid versus Newton," *Proceedings of the NASECODE VI*, p. 378, ed. by B.T. Browne and J.J.H. Miller, Boole Press, Dublin 1989.
- [43] A. George and J.W.H. Liu, "The Design of a User Interface for a Sparse Matrix Package," *ACM Trans. on Mathematical Software*, vol. 5, n° 2, 1979, pp. 139-162.
- [44] H. Elschner, D. Bothmann, W. Klix, R.G. Spallek, R. Stenzel, R. Vanselow and R. Voigt, "Methods and Results in 2D Process and Device Simulation as well as in 3D Device Simulation," *Proceedings of the NASECODE VI*, p. 148, ed. by B.T. Browne and J.J.H. Miller, Boole Press, Dublin 1989.
- [45] P. Pichler, A. Barthel, R. Dürr, N. Holzer, J. Lorenz, H. Ryssel and K. Schott, "One- and Two-Dimensional Process Simulation with ICECREM and COMPLAN," *Lecture notes and digest of the NASECODE VI short course and software Forum*, p. 173, ed. by W. Crans, Boole Press, Dublin 1989 .
- [46] B. R. Penumalli, "A Comprehensive Two-Dimensional VLSI Process Simulation Program, BICEPS," *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. ED-30, pp. 986-992, 1983.
- [47] E. Caquot, J. Dangla, M. Campana, D. Ankri and J.F. Palmier, "ETHER : a Software Simulating the Electrical Behaviour of Heterostructure Devices," *Proc. of the ESSDERC 84*, ed. by Physica 129B (1985), North-Holland, Amsterdam.
- [48] C.S. Rafferty, M.R. Pinto and R.W. Dutton, "Iterative Methods in Semiconductor Device Simulation," *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. ED-32, pp. 2018-2027, 1985.
- [49] G. Baccarani, R. Guerrieri, P. Ciampolini and M. Rudan, "HFIELDS : A Highly-Flexible 2-D Semiconductor-Device Analysis Program," *Proceedings of the NASECODE IV*, pp. 3-12, ed. by B.T. Browne and J.J.H. Miller, Boole Press, Dublin 1985.

- [50] T. Toyabe, H. Masuda, Y. Aoki, H. Shukuri and T. Hagiwara, "Three-Dimensional Device Simulator CADDETH with Highly Convergent Matrix Solution Algorithms," *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. ED-32, pp. 2038-2044, 1985.
- [51] L. Borucki, H.H. Hansen and K. Varahramyan, "FEDSS - A 2D Semiconductor Fabrication Process Simulator," *IBM Journal of Research and Development*, vol. 29, n° 3, pp. 263-276, 1985.
- [52] E.M. Buturia, P.E. Cottrell, B.M. Grossmann and K.A. Salsburg, "Finite-Element Analysis of Semiconductor Devices : the FIELDAY Program," *IBM J. Res. Develop.*, vol. 25, n° 4, pp. 218-231, 1981.
- [53] T. Wada and R. Dang, "Development and Application of a High-Speed 2-Dimensional Time Dependent Device Simulator (MOS2C)," *Proceedings of the NASECODE IV*, p. 108, ed. by B.T. Browne and J.J.H. Miller, Boole Press, Dublin 1985.
- [54] A. Gérodolle, C. Corbex, A. Poncet, T. Pédrón and S. Martin, "TITAN 5, A Two-Dimensional Process and Device Simulator," *Lecture notes and digest of the NASECODE VI short course and software Forum*, p. 56, ed. by W. Crans, Boole Press, Dublin 1989.
- [55] K. Souissi, "Simulation Numérique des Dispositifs Electroniques à Hétérojonctions," *Thèse de Doctorat de l'Université Paris VI*, 1989
- [56] K. Belhaddad, C. Corbex and A. Poncet, "Finite Element and Coupled Continuation Method for Device Simulation," *Proceedings of the NASECODE IV*, p. 193, ed. by B.T. Browne and J.J.H. Miller, Boole Press, Dublin 1985.
- [57] C. Lombardi, M. Vanzi and E. Torri, "IDAS : An Interactive Device Analysis Environnement," *Proceedings of the NASECODE IV*, p. 384, ed. by B.T. Browne and J.J.H. Miller, Boole Press, Dublin 1985.

Chapitre 3

Simulation du transport électronique

1. LA SIMULATION UNIDIMENSIONNELLE : *ETHER*

La simulation unidimensionnelle correspond à une très bonne approximation de la réalité dans beaucoup de dispositifs dont le comportement intrinsèque est quasi-unidimensionnel, tels que le transistor bipolaire, les diodes laser, etc... De plus le développement de ce logiciel nous a permis de mettre au point un schéma informatique et une structure de données suffisamment versatiles pour autoriser le traitement de très nombreux problèmes de microoptoélectroniques. Cette structure a été amplement réutilisée dans le développement du logiciel bidimensionnel ainsi que dans la définition d'une interface générale pour les logiciels de simulation de dispositifs microoptoélectroniques.

1.1. Le modèle choisi

Nous avons choisi d'utiliser le cadre des différences finies qui permet une très grande simplicité de mise en oeuvre, autant en ce qui concerne la souplesse du maillage que le schéma de discrétisation. Le caractère unidimensionnel autorise de plus une très bonne description, à taille totale de maillage identique, des interfaces et une bonne rapidité de convergence. Ceci nous a permis de prendre en compte et d'étudier l'influence de nombreux paramètres ou phénomènes physiques tels que les divers types de recombinaisons, les lois de mobilité en fonction des impuretés et du champ, ou encore le choix de la statistique (Boltzmann ou Fermi-Dirac).

Les inconnues principales du problème sont ϕ , ϕ_n et ϕ_p : elles sont homogènes toutes les trois à des tensions et sont donc exprimées en Volt.

1.1.1. La statistique de Fermi-Dirac

Le logiciel *ETHER* (*Etude du Transport dans les HETeRonjonctions*) utilise indifféremment la statistique de Boltzmann ou de Fermi-Dirac et permet donc de simuler les dispositifs à fort dopage. Cependant la fonction de Fermi $f_{\frac{1}{2}}$ intervenant en statistique de Fermi-Dirac est donnée par une formule intégrale inadaptée au calcul numérique in-

tensif :

$$f_{\frac{1}{2}}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{+\infty} \frac{\sqrt{u}}{1 + e^{u-x}} du$$

Cette expression ne peut être utilisée dans un logiciel pour des raisons évidentes de temps de calcul. Nous avons donc eu recours à des expressions analytiques pour la fonction de Fermi et sa dérivée $f_{-\frac{1}{2}}$, qui correspondent à de très bonnes approximations dans tous les cas rencontrés [1] :

$$\begin{cases} x < -7 \Rightarrow f_{\frac{1}{2}}(x) = e^x \\ x \geq -7 \Rightarrow f_{\frac{1}{2}}(x) = \left(e^{-x} + 3 \sqrt{\frac{\pi}{2}} \left(x + [(x-2,13)^{2,4} + 9,6]^{\frac{5}{12}} + 2,13 \right)^{\frac{3}{7}} \right)^{-1} \end{cases}$$

$$\begin{cases} x < -7 \Rightarrow f_{-\frac{1}{2}}(x) = e^x \\ x \geq -7 \Rightarrow f_{-\frac{1}{2}}(x) = \left(\frac{1}{U} + V - \frac{0,05524}{4} V^5 U (64 + 1,5 \sqrt{U}) \right)^{-1} \end{cases}$$

avec $U = f_{\frac{1}{2}}(x)$ et $V = \left(64 + 0,05224 U(64 + \sqrt{U}) \right)^{\frac{1}{4}}$

1.1.2. La traduction des conditions aux limites sur ϕ , ϕ_n , ϕ_p

1.1.2.1. Le contact ohmique

On prend comme référence des énergies dans la structure les niveaux de Fermi ϕ_n et ϕ_p à l'équilibre thermodynamique. Lorsque l'on applique une polarisation sur la structure en régime statique ou dynamique, nos conventions sont telles que le côté droit reste à la masse. Ceci se traduit donc par :

$$\begin{aligned} \phi_n = \phi_p = -V_{app} \quad \text{et} \quad \phi = \phi_g^0 + V_{app} \quad & \text{sur le bord gauche} \\ \phi_n = \phi_p = 0 \quad \quad \quad \text{et} \quad \phi = \phi_d^0 \quad & \text{sur le bord droit} \end{aligned}$$

ϕ_g et ϕ_d étant les potentiels calculés correspondant aux densités à l'équilibre thermodynamique sur les bords gauche et droit.

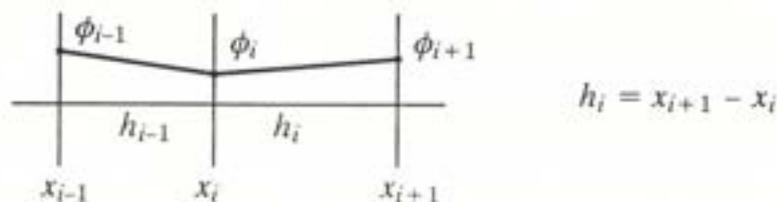
1.1.2.2. Les conditions aux limites en courant

La simulation unidimensionnelle du transistor bipolaire, qui est un composant à trois contacts électriques, implique de pouvoir imposer une condition aux limites en tension ou en courant à l'intérieur du dispositif (dans la base). Nous avons choisi d'imposer une condition aux limites en courant par l'adjonction d'un terme de création de porteurs à l'intérieur du terme de générations-recombinaisons.

P.A. Gough et al. [2] ont montré dans ces conditions que l'introduction d'un courant en un point du maillage ne pose pas de problème numérique. Cependant, afin de se préserver d'éventuelles instabilités numériques, le courant est réparti sur quelques points entourant le centre de la base. Les diverses comparaisons que nous avons pu mener n'ont montré aucune influence du nombre de points ou de leur position sur la simulation électronique.

1.2. Le schéma de discrétisation

On se donne un maillage unidimensionnel de la structure, défini par les abscisses des noeuds et les valeurs des pas de maillage entre deux noeuds voisins. On appelle x_i l'abscisse du noeud i et h_i la distance au noeud $i+1$:



1.2.1. Discrétisation de l'équation de Poisson

Considérons tout d'abord le premier membre de cette équation :

$$\text{div}(\epsilon_r \vec{\nabla} \phi) = \frac{d}{dx} \left(\epsilon_r \frac{d\phi}{dx} \right)$$

On discrétise de manière symétrique autour d'un noeud de maillage :

$$\begin{aligned} \operatorname{div}(\epsilon_r \bar{\nabla} \phi)(i) &\equiv \frac{(\epsilon_r \phi')_{i+\frac{1}{2}} - (\epsilon_r \phi')_{i-\frac{1}{2}}}{x_{i+\frac{1}{2}} - x_{i-\frac{1}{2}}} = \frac{\epsilon_r^{i+\frac{1}{2}} \cdot \frac{\phi_{i+1} - \phi_i}{h_i} - \epsilon_r^{i-\frac{1}{2}} \cdot \frac{\phi_i - \phi_{i-1}}{h_{i-1}}}{\frac{h_i + h_{i-1}}{2}} \\ &= \frac{2\epsilon_r^{i+\frac{1}{2}}}{h_i(h_i + h_{i-1})} \phi_{i+1} + \frac{2\epsilon_r^{i-\frac{1}{2}}}{h_{i-1}(h_i + h_{i-1})} \phi_{i-1} - \frac{\frac{2\epsilon_r^{i+\frac{1}{2}}}{h_i} + \frac{2\epsilon_r^{i-\frac{1}{2}}}{h_{i-1}}}{h_i + h_{i-1}} \phi_i \\ &= SUR(i) \phi_{i+1} + SOU(i) \phi_{i-1} + DIA(i) \phi_i \end{aligned}$$

On obtient donc :

$$\begin{aligned} SUR(i) &= \frac{2\epsilon_r^{i+\frac{1}{2}}}{h_i(h_i + h_{i-1})} & SOU(i) &= \frac{2\epsilon_r^{i-\frac{1}{2}}}{h_{i-1}(h_i + h_{i-1})} \\ DIA(i) &= -SUR(i) - SOU(i) \end{aligned}$$

Le deuxième membre de l'équation de Poisson ne contenant pas de terme différentiel, il s'exprime entièrement en fonction des valeurs des inconnues au point i et vaut :

$$\frac{q}{\epsilon_0} (n_i - p_i - dop_i) = c (n_i - p_i - dop_i)$$

Il reste donc à déterminer les expressions $\epsilon_r^{i+\frac{1}{2}}$ et $\epsilon_r^{i-\frac{1}{2}}$ qui correspondent aux valeurs que l'on donnera à la constante diélectrique ϵ_r entre deux noeuds du maillage unidimensionnel. Une interpolation classique consiste à utiliser la moyenne arithmétique :

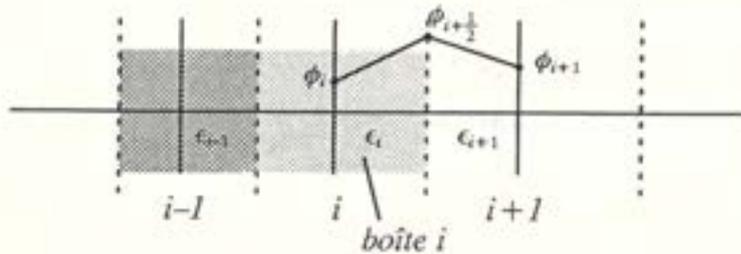
$$\epsilon_r^{i+\frac{1}{2}} = \frac{\epsilon_r^i + \epsilon_r^{i+1}}{2} \quad \text{---}$$

Cette interpolation est utilisée dans le logiciel *ETHER* et donne des résultats très satisfaisants car les amplitudes de variation de la constante diélectrique sont faibles. Cependant, dans le cas des équations de continuité, la constante diélectrique est remplacée par le terme $n\mu_n$ dont la dynamique est bien plus importante. Il a alors été démontré par C. Simon [3] qu'il existe une interpolation permettant de tenir compte de la continuité du flux à l'interface entre deux noeuds voisins même dans le cas des hétérojonctions. Cet-

te méthode est basée sur le principe suivant : supposons que l'on résolve l'équation :

$$\text{div}(\epsilon \vec{\nabla} \phi) = 0$$

On résout cette équation sur un maillage unidimensionnel :



On définit alors des "boîtes" délimitées par les milieux des intervalles $[i, i+1]$ sur lesquelles les quantités ϵ_i seront constantes. Chacun des intervalles $[i, i+1]$, de longueur h_i , contient donc deux demi-boîtes à la frontière desquelles on va exprimer la divergence du courant conservé en introduisant une valeur virtuelle de ϕ au point $i + \frac{1}{2}$. Ceci donne :

$$J_{[i, i+1]} = \epsilon_i \frac{\phi_{i+1/2} - \phi_i}{\frac{h_i}{2}} = \epsilon_{i+1} \frac{\phi_{i+1} - \phi_{i+1/2}}{\frac{h_i}{2}} \quad \text{et donc} \quad \boxed{\phi_{i+1/2} = \frac{\epsilon_i \phi_i + \epsilon_{i+1} \phi_{i+1}}{\epsilon_i + \epsilon_{i+1}}}$$

En réutilisant ce résultat, on exprime donc le flux qui est constant à l'interface des deux boîtes entre i et $i+1$:

$$J_{[i, i+1]} = \frac{\epsilon_i \epsilon_{i+1} (\phi_{i+1} - \phi_i)}{\frac{h_i}{2} (\epsilon_i + \epsilon_{i+1})} = \boxed{\frac{2 \epsilon_i \epsilon_{i+1} (\phi_{i+1} - \phi_i)}{\epsilon_i + \epsilon_{i+1} h_i} = \epsilon_{i+1/2} \vec{\nabla} \phi_{i+1/2}}$$

On voit donc que, dans cette méthode, l'interpolation classiquement linéaire ou géométrique de ϵ est remplacée par une interpolation harmonique. Ce résultat peut être appliqué aussi bien dans le cas de l'équation de Poisson où ϵ est constant au cours de la résolution que dans le cas des équations de continuité où il dépend de ϕ .

1.3. Discrétisation des équations de continuité statiques

On a vu précédemment que, dans le cas de l'équation de Poisson, la non-linéarité provenait exclusivement du second membre qui ne comporte pas de termes différentiels.

Dans les équations de continuité au contraire, il existe une non-linéarité dans l'expression de la divergence des courants due aux densités de porteurs, ce qui amène à des termes supplémentaires dans les équations linéarisées.

$$J_n = qn\mu_n \frac{d\phi_n}{dx} = q(n\mu_n)^{i+\frac{1}{2}} \frac{\phi_n^{i+1} - \phi_n^i}{h_i}$$

$$\text{d'où : } \frac{1}{q} \text{div}(J_n) = \frac{(n\mu_n)^{i+\frac{1}{2}} \frac{\phi_n^{i+1}}{h_i} + (n\mu_n)^{i-\frac{1}{2}} \frac{\phi_n^i}{h_{i-1}} - \left(\frac{(n\mu_n)^{i+\frac{1}{2}}}{h_i} + \frac{(n\mu_n)^{i-\frac{1}{2}}}{h_{i-1}} \right) \phi_n^i}{\frac{h_i + h_{i-1}}{2}}$$

et donc :

$$\frac{1}{q} \text{div}(J_n) \equiv \frac{2(n\mu_n)^{i+\frac{1}{2}}}{h_i(h_i + h_{i-1})} \phi_n^{i+1} + \frac{2(n\mu_n)^{i-\frac{1}{2}}}{h_i(h_i + h_{i-1})} \phi_n^i - 2 \frac{(n\mu_n)^{i+\frac{1}{2}} h_{i-1} + (n\mu_n)^{i-\frac{1}{2}} h_i}{h_i h_{i-1} (h_i + h_{i-1})} \phi_n^i$$

1.3.1. Discrétisation des équations de continuité dynamiques

Les équations de continuité dynamiques sont discrétisées de manière identique en ce qui concerne la partie spatiale. Le schéma de discrétisation temporelle adopté est un schéma complètement implicite afin d'assurer la stabilité inconditionnelle de l'algorithme même sous fortes polarisations. L'équation discrétisée de continuité, par exemple des

électrons, est donc :

$$-q \frac{n_i^{t+1} - n_i^t}{\Delta t} + \text{div } J_n^{t+1}(i) = q U_n^{t+1}(i)$$

soit encore :

$$-q \frac{n_i^{t+1}}{\Delta t} + \text{div } J_n^{t+1}(i) - q U_n^{t+1}(i) = -q \frac{n_i^t}{\Delta t}$$

Le problème dynamique se caractérise donc par l'adjonction dans la matrice jacobienne d'un terme diagonal qui devient prépondérant pour les faibles pas de temps. Dans le cas de grands pas de temps au contraire, on retrouve le problème statique : ceci nous a conduit à utiliser un schéma de résolution très proche et notamment à résoudre l'équation de Poisson de manière non-linéaire afin de retrouver les qualités de stabilité du schéma global de résolution statique pour les grands pas de temps. Le schéma avec résolution linéaire de l'équation de Poisson s'est montré en effet très instable et présentant de gran-

des difficultés de convergence pour des pas de temps supérieurs à la picoseconde alors que le schéma non-linéaire est resté inconditionnellement stable quelque soit le pas de temps utilisé. Après avoir explicité les schémas de discrétisation statique et dynamique nous allons maintenant détailler le schéma de résolution statique.

1.4. La résolution du problème discret

1.4.1. Le schéma général

La méthode de résolution que nous avons retenue pour ce système de trois équations non-linéaires couplées est une méthode découplée de type Gummel [4]. A chaque équation est associée une variable principale : le potentiel électrostatique ϕ pour l'équation de Poisson et le niveau de Fermi correspondant pour chaque équation de continuité d'une espèce. Chaque équation est alors résolue uniquement sur sa variable principale. Ce schéma de résolution est illustré par la figure 1.

Nous avons également testé un schéma de résolution complètement couplé. Celui-ci s'est avéré plus stable dans son mode de convergence, principalement du fait de la non-recherche d'un point fixe entre les trois équations, mais il s'est avéré également beaucoup plus lent et donc plus pénalisant globalement que la méthode découplée qui, après quelques améliorations, a donné de très bons résultats simultanément en temps de calcul et en précision des résultats pour toutes sortes de dispositifs.

Chaque équation est résolue sur sa variable principale par une méthode de Newton-Raphson. Il est important de noter que, la méthode de Newton étant une méthode facilement instable, le choix de la solution initiale est d'autant plus primordial que la non-linéarité est forte. Or, dans le cas qui nous intéresse, les termes non-linéaires dépendent grossièrement de façon exponentielle des inconnues ϕ , ϕ_n et ϕ_p : le choix d'une solution initiale va donc être déterminant pour la rapidité et même la convergence de l'algorithme. Nous avons choisi dans le logiciel *ETHER* d'utiliser l'équilibre thermodynamique local comme solution initiale ce qui consiste à obtenir un potentiel discontinu en résolvant en

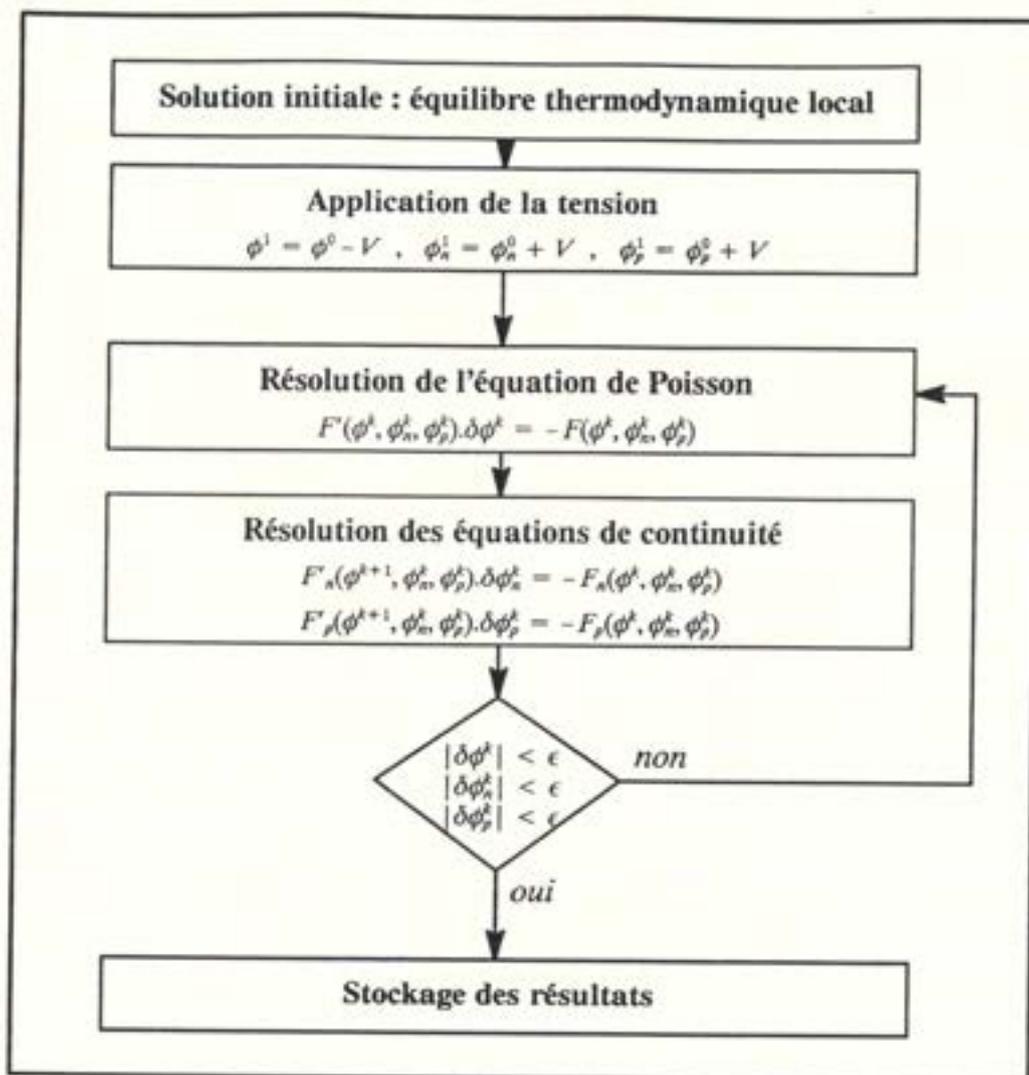


figure 1 : Schéma de résolution découplé

chaque point le système suivant :

$$\varrho = -q(n - p - dop) = 0 \quad \text{et} \quad \phi_n = \phi_p = 0$$

Dans le cas de dispositifs à hétérostructures abruptes et à dopages constants par région on aboutit aussi à un potentiel constant par région. L'application d'une tension est ensuite effectuée par addition d'un potentiel linéaire dans la structure ce qui correspond, du point de vue physique, au fait que les charges n'ont pas eu le temps de se déplacer depuis l'application de la tension.

1.4.2. La méthode de Newton-Raphson et ses extensions

La méthode utilisée pour résoudre chaque équation discrète est une méthode de Newton basée sur l'algorithme suivant :

$$X_{k+1} = X_k + dX_k \quad dX_k = -F'(X_k)^{-1} \cdot F(X_k)$$

On appelle équation linéarisée correspondant à $F(X) = 0$ l'équation :

$$F'(X)dX = -F(X)$$

Variantes de la méthode de Newton

Pour les problèmes particulièrement difficiles à résoudre et fortement instables il est souvent avantageux de modifier la méthode de Newton afin d'éviter les incréments trop grands. Cette modification peut s'effectuer sur plusieurs points.

On peut tout d'abord agir sur la mise à jour des variables après inversion du système linéaire : celle-ci s'effectue en appliquant à l'incrément une fonction T de "damping". L'algorithme devient alors :

$$X_{k+1} = X_k + T(dX_k) \quad dX_k = -F'(X_k)^{-1} \cdot F(X_k)$$

La fonction T que nous avons adoptée est :

$$T(x) = \operatorname{sgn}(x) \frac{1}{\beta U_T} \ln(1 + \beta|x|)$$

Dans la limite où β tend vers 0, on retrouve la méthode de Newton classique. Dans le cas général cette formule consiste à amortir les amplitudes des incréments avec un facteur d'amortissement β . Enfin dans le cas où β est égal à l'inverse de U_T , la fonction T correspond à effectuer un développement au premier ordre pour les densités de porteurs dans le cas de la statistique de Boltzmann. En effet dans ce cas les expressions des densités de porteurs sont :

$$n = N_c e^{\frac{\phi_n + \phi - \chi}{U_T}} \quad \text{et} \quad p = N_v e^{\frac{-\phi_p - \phi + \chi - \phi_0}{U_T}}$$

La mise à jour des potentiels se traduit alors par :

$$n^{k+1} = n^k e^{\frac{T(\Delta\phi^k)}{U_T}} = n^k (1 + \beta U_T |d\phi^k|)^{\frac{T(\Delta\phi^k)}{\beta U_T}} = n^k (1 + \frac{d\phi^k}{U_T})$$

Il n'est également pas nécessaire de calculer exactement la matrice obtenue par dérivation de F car celle-ci peut comporter des termes dont les temps de calcul rendraient inutilement coûteuse la simulation. On utilise alors une approximation de F' : ce sont des méthodes dites de "quasi-Newton". Cette technique a été employée notamment dans le calcul des dérivées des divers termes de recombinaisons. Celles-ci sont calculées en se plaçant constamment en statistique de Boltzmann ce qui simplifie les expressions et n'entraîne aucune altération dans la qualité de convergence.

1.4.3. Equation de Poisson linéarisée

La linéarisation de l'équation de Poisson est immédiate car les termes non-linéaires sont tous regroupés au second membre. Si on reprend les notations déjà utilisées pour la discrétisation de l'équation de Poisson on obtient :

$$DLA(i) d\phi_i + SUR(i) d\phi_{i+1} + SOU(i) d\phi_{i-1} = Y(i) \quad d\phi_1 = d\phi_N = 0$$

$$\text{avec } Y(i) = c(n_i - p_i - dop_i) - SUR(i) (\phi_{i+1} - \phi_i) - SOU(i) (\phi_i - \phi_{i-1})$$

On peut donc réécrire cette équation sous forme matricielle : $A.d\phi = Y$

A est une matrice tridiagonale (N,N), $d\phi$ et Y sont des vecteurs de dimension N . A chaque itération de l'algorithme de Newton-Raphson, on obtient $d\phi$ en inversant la ma-

trice A :

$$d\phi = A^{-1}. Y$$

1.4.4. Equations de continuité statiques linéarisées

Calculons tout d'abord la variation de la divergence du courant électronique due à une variation du niveau de Fermi des électrons :

$$\delta \left[\frac{1}{q} \operatorname{div}(J_n) \right] (i) = (SUR_1(i) + SUR_2(i)) d\phi_n^{j+1} + (SOU_1(i) + SOU_2(i)) d\phi_n^{j-1} + (DIA_1(i) + DIA_2(i)) d\phi_n^j$$

Les termes SUR_1 , SOU_1 et DIA_1 correspondent aux termes déjà rencontrés dans l'équation de Poisson. Mais on voit aussi apparaître des termes dûs à la non-linéarité du courant en fonction du niveau de Fermi (SUR_2 , SOU_2 , DIA_2) :

$$\begin{cases} SUR_1(i) = \frac{2(n\mu_n)^{j+\frac{1}{2}}}{h_i(h_i + h_{i-1})} \\ SOU_1(i) = \frac{2(n\mu_n)^{j-\frac{1}{2}}}{h_{i-1}(h_i + h_{i-1})} \end{cases} \quad DIA_1(i) = -SUR_1(i) - SOU_1(i)$$

$$\begin{cases} SUR_2(i) = \frac{2}{h_i + h_{i-1}} \frac{\phi_n^{j+1} - \phi_n^j}{h_i} d \frac{(n\mu_n)^{j+\frac{1}{2}}}{d\phi_n^{j+1}} \\ SOU_2(i) = \frac{2}{h_i + h_{i-1}} \frac{\phi_n^j - \phi_n^{j-1}}{h_{i-1}} d \frac{(n\mu_n)^{j-\frac{1}{2}}}{d\phi_n^{j-1}} \\ DIA_2(i) = \frac{-2}{h_i + h_{i-1}} \left[\frac{(\phi_n^{j+1} - \phi_n^j)}{h_i} d \frac{(n\mu_n)^{j+\frac{1}{2}}}{d\phi_n^j} + \frac{(\phi_n^j - \phi_n^{j-1})}{h_{i-1}} d \frac{(n\mu_n)^{j-\frac{1}{2}}}{d\phi_n^j} \right] \end{cases}$$

Si on suppose une interpolation linéaire des variables (mobilités, densités de porteurs, etc...) entre les noeuds du maillage, on peut réécrire ces derniers termes sous la forme suivante :

$$SUR_2(i) = \frac{\phi_n^{j+1} - \phi_n^j}{h_i(h_i + h_{i-1})} \mu_n^{i+1} \frac{dn_{i+1}}{d\phi_n^{j+1}}$$

$$SOU_2(i) = \frac{\phi_n^j - \phi_n^{j-1}}{h_{i-1}(h_i + h_{i-1})} \mu_n^{i-1} \frac{dn_{i-1}}{d\phi_n^{j-1}}$$

$$DIA_2(i) = -\frac{\mu_n^i}{h_i + h_{i-1}} \left[\frac{\phi_n^{j+1} - \phi_n^j}{h_i} + \frac{\phi_n^j - \phi_n^{j-1}}{h_{i-1}} \right] \frac{dn_i}{d\phi_n^j}$$

Dans le cas d'une interpolation harmonique ceci donne :

$$SUR_2(i) = \frac{\phi_n^{i+1} - \phi_n^i}{h_i(h_i + h_{i-1})} \left(\frac{n\mu_n^{i+\frac{1}{2}}}{n\mu_n^{i+1}} \right)^2 \frac{dn_{i+1}}{d\phi_n^{i+1}}$$

$$SOU_2(i) = \frac{\phi_n^i - \phi_n^{i-1}}{h_{i-1}(h_i + h_{i-1})} \left(\frac{n\mu_n^{i-\frac{1}{2}}}{n\mu_n^{i-1}} \right)^2 \frac{dn_{i-1}}{d\phi_n^{i-1}}$$

$$DIA_2(i) = \frac{-1}{(h_i + h_{i-1})(n\mu_n^i)^2} \left[\frac{(\phi_n^{i+1} - \phi_n^i)}{h_i} \left(n\mu_n^{i+\frac{1}{2}} \right)^2 + \frac{(\phi_n^i - \phi_n^{i-1})}{h_{i-1}} \left(n\mu_n^{i-\frac{1}{2}} \right)^2 \right] \frac{d(n\mu_n)^i}{d\phi_n^i}$$

Les seconds membres des équations de continuité sont constitués des termes de recombinaisons U_n et ne modifient que la diagonale de la matrice. Finalement, l'équation de continuité statique des électrons linéarisée et discrétisée s'écrit :

$$DIA(i) d\phi_n^i + SUR(i) d\phi_n^{i+1} + SOU(i) d\phi_n^{i-1} = Y_n(i) \quad d\phi_n^1 = d\phi_n^N = 0$$

$$SUR(i) = SUR_1(i) + SUR_2(i)$$

$$SOU(i) = SOU_1(i) + SOU_2(i)$$

avec

$$DIA(i) = DIA_1(i) + DIA_2(i) - \frac{dU_n^i}{d\phi_n^i}$$

$$Y_n(i) = U_n(i) - SUR_1(i) \cdot (\phi_n^{i+1} - \phi_n^i) - SOU_1(i) \cdot (\phi_n^i - \phi_n^{i-1})$$

Pour l'équation de continuité des trous, les calculs et les raisonnements sont strictement identiques. Il faut donc, comme dans le cas de l'équation de Poisson, résoudre un système tridiagonal, de dimension N pour chaque équation de continuité :

$$A_n \cdot d\phi_n = Y_n$$

$$A_p \cdot d\phi_p = Y_p$$

soit

$$d\phi_n = A_n^{-1} \cdot Y_n$$

$$d\phi_p = A_p^{-1} \cdot Y_p$$

1.4.5. La méthode d'inversion

Les matrices obtenues après linéarisation des équation de Poisson et de continuité sont toutes tridiagonales. Il est donc inutile de faire appel à des algorithmes d'inversion généraux. La méthode adoptée est une résolution de type Gauss par descente-remontée.

Sa complexité est linéaire par rapport au nombre d'inconnues ce qui permet de très bonnes performances en temps de calcul.

1.4.6. Le critère de convergence et le calcul des courants

Le test d'arrêt de l'algorithme de résolution consiste à imposer des incréments consécutifs pour le potentiel électrostatique et les niveaux de Fermi inférieurs à une certaine valeur ϵ qui est généralement prise égale à 10^{-5} Volt. Néanmoins les données intéressantes du point de vue du concepteur de dispositifs ne sont pas essentiellement les inconnues du problème mais plutôt les valeurs des densités de porteurs, du champ électrique ainsi que des densités de courants. Or le critère de convergence retenu n'assure pas de façon forte la conservation du courant total ce qui est pourtant une nécessité si l'on veut prétendre avoir résolu le problème physique.

En effet, si l'on considère une jonction P-N faiblement polarisée (quelques centaines de millivolts) où l'on suppose les recombinaisons nulles, les courants d'électrons et de trous sont faibles et constants. Or le courant de chaque espèce est le produit des densités de porteurs par les mobilités et par les gradients des niveaux de Fermi correspondants (cf. Ch. 1, § 3.3.1.) ce qui implique une correspondance presque exacte entre la dynamique des densités de porteurs à travers la jonction et la dynamique des gradients de niveaux de Fermi. Comme la première est typiquement de l'ordre de 10^{20} à 10^{30} , les incréments des niveaux de Fermi, d'un pas de maillage sur l'autre dans la zone de porteurs majoritaires, sont de l'ordre de 10^{-20} ou 10^{-30} Volt. Ceux-ci sont donc numériquement nuls si le problème est résolu avec moins de vingt chiffres significatifs pour les niveaux de Fermi et les courants déduits de ces gradients ne sont dus qu'au "bruit numérique" de la résolution (figure 2).

Afin de pouvoir calculer les courants même dans des cas où la dynamique l'interdit de façon directe, nous intégrons le taux de recombinaisons le long du dispositif ce qui nous donne la variation du courant, puis choisissons deux points de calcul particuliers pour les électrons et les trous correspondant aux endroits où les gradients de niveaux de Fermi sont

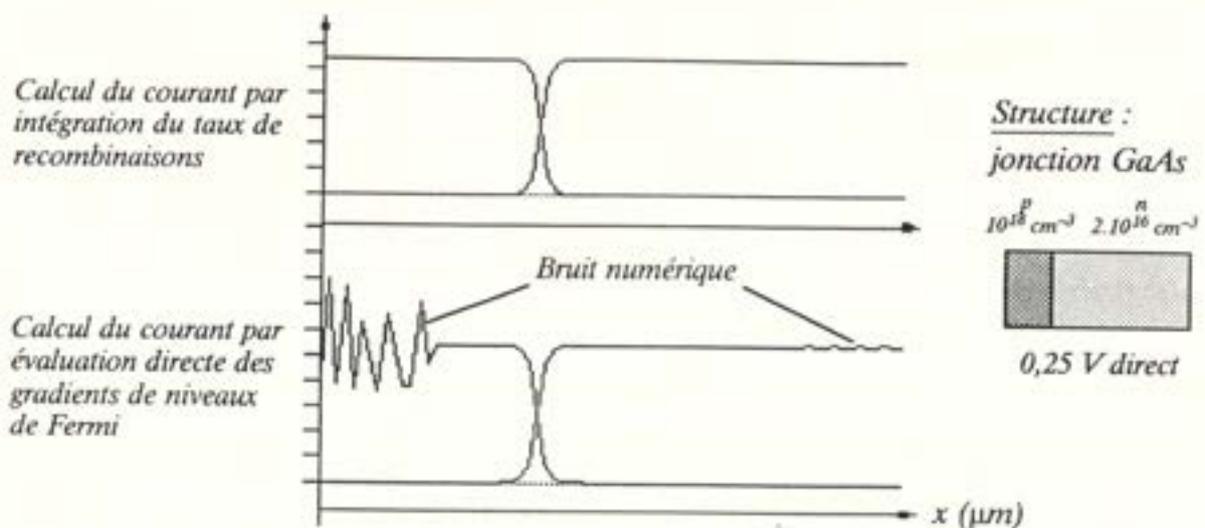


figure 2 : Bruit numérique dans le calcul direct du courant

maximaux. Cette méthode nous a permis de calculer les courants de façon très précise même pour les cas de forts dopages ou de faible tension appliquée, et de s'affranchir ainsi des problèmes de "bruit numérique".

1.4.7. L'influence du maillage sur la précision des résultats

La bonne connaissance de l'influence du maillage sur la précision des résultats est indispensable si l'on désire disposer d'un pouvoir de prédiction fiable. Le maillage utilisé dans le logiciel *ETHER* est un maillage géométrique à l'intérieur de chaque couche : le pas minimal est atteint aux interfaces avec les couches voisines et le pas maximal au milieu de la couche. Afin d'estimer la qualité des résultats, nous avons étudié le gain d'un transistor bipolaire à hétérojonction GaAs/GaAlAs typique de longueur totale égale à 1 micron (figure 3). Les simulations ont montré une grande dépendance initiale du gain pour des pas de discrétisation jusqu'à 20 Angströms puis une stabilisation assez lente au delà. Cette dépendance relativement importante est très certainement due à la discontinuité qui demande un maillage très fin aux abords de l'hétérojonction.

Afin de confirmer ce résultat nous avons mis au point un algorithme de maillage adapté. Celui-ci utilise les résultats d'une simulation avec maillage géométrique classique afin de redéfinir un maillage dont la densité de points est grossièrement inversement pro-

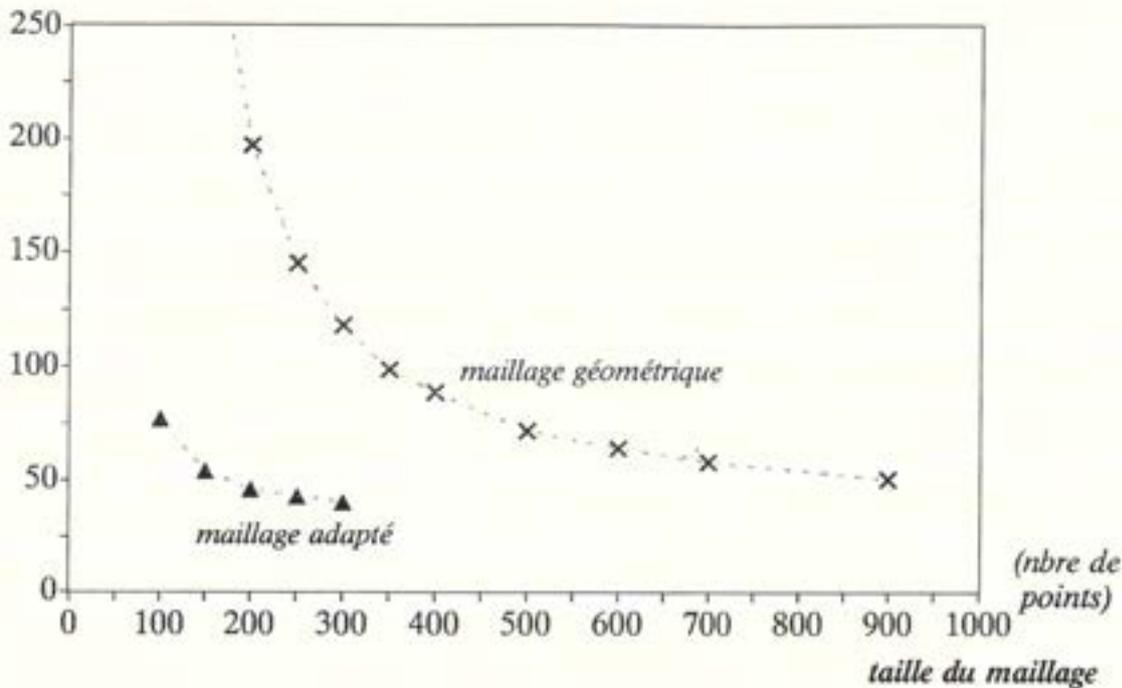
Gain du transistor

figure 3 : Influence du maillage sur la précision des résultats

proportionnelle à la variation des inconnues. Ce type d'algorithme est assez facilement réalisable dans le cadre d'un logiciel unidimensionnel. Les simulations ont confirmé les résultats précédents car nous avons trouvé des valeurs asymptotiques du gain très proches et mis en évidence une dépendance beaucoup moins importante de celui-ci en fonction de la taille de maillage.

Le nombre de paramètres intervenant dans la simulation d'un TBH étant considérable (données géométriques, constantes physiques des matériaux, impuretés, etc...), il est peu vraisemblable de pouvoir obtenir un réel pouvoir de prédiction sur les valeurs exactes de paramètres comme le gain. L'utilisation d'un logiciel de simulation numérique de ce type consiste plus souvent à comparer les performances relatives de deux dispositifs. Dans cette optique, on peut souvent se contenter en fait d'un maillage plus lâche mais qui conserve néanmoins les hiérarchies de comportement en fonction des paramètres d'entrée.

1.5. Organisation générale du logiciel *ETHER*

Le logiciel *ETHER* comprend un sous-ensemble de description géométrique de la structure à simuler, une base de données complète sur les matériaux III-V, une unité de résolution des problèmes d'équilibre thermodynamique, de comportements statique et dynamique et enfin l'unité de traitement graphique *DAMIGO* pour la visualisation des résultats. L'interface avec l'utilisateur utilise le préprocesseur *HERMES* doté d'un langage de commande convivial fonctionnant par mots-clés et permettant une utilisation souple orientée vers la CAO de dispositifs. Enfin l'organisation interne des données est assurée par *DAMSEL*, un gestionnaire de base de données généraliste qui permet un partage aisé des résultats entre les divers logiciels de simulation optoélectronique développé au laboratoire (figure 4).

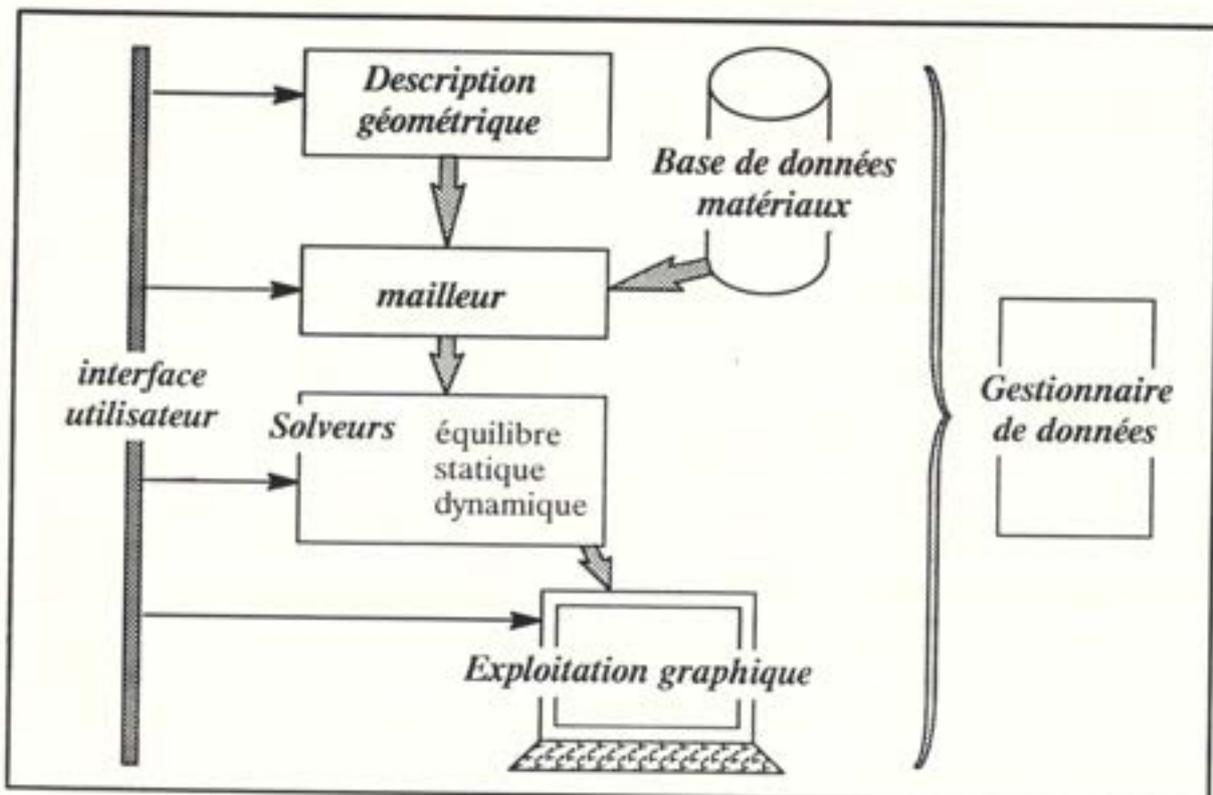


figure 4 : Organisation générale du logiciel *ETHER*

1.5.1. La représentation des données physiques

Afin de pouvoir décrire le plus grand nombre de dispositifs possible, nous avons choisi d'utiliser une base de données matériaux importante, développée au Laboratoire de Bagnex par J.F. Palmier, et incluant les lois de comportement de la plupart des données physiques usuelles pour les matériaux III-V binaires ainsi que pour les matériaux ternaires ou quaternaires dérivés, en fonction des dopages et des proportions d'alliages.

La majeure partie des logiciels de simulation de dispositifs est issue de la microélectronique silicium. C'est pourquoi ceux-ci considèrent le plus souvent les données physiques telles que l'affinité ou la hauteur de bande interdite comme des constantes dans le domaine simulé ou au mieux comme des constantes sur de grands sous-domaines dont les dimensions sont bien supérieures aux dimensions typiques du maillage. Cette représentation des données ne permet pas de décrire de façon souple et générale les possibilités offertes par la microélectronique III-V, telles que les hétérojonctions abruptes ou graduelles, les super-réseaux ou encore les multipuits quantiques.

Nous avons donc choisi de représenter toutes les données physiques comme des données locales, constantes sur chaque boîte associée à un noeud du maillage (cf. § 1.2.1.), même dans le cas d'un dispositif à homojonctions. Chaque donnée physique est donc représentée dans la base de données par un tableau de dimension N , N étant la taille du maillage utilisé dans la simulation. Ceci peut être considéré comme une consommation excessive et inutile de place mémoire mais les capacités grandissantes des ordinateurs réduisent aujourd'hui cette contrainte à néant, au profit d'une souplesse complète dans la description de la structure. Ceci nous a permis notamment d'effectuer de nombreuses simulations sur des dispositifs comportant des gradualités d'alliage très diverses, notamment dans le cas de l'optimisation des base graduelles pour les TBH GaAs/GaAlAs.

1.6. Validation du logiciel *ETHER*

La validation du logiciel *ETHER* a été effectuée, non seulement grâce aux nombreuses simulations qui seront exposées dans la suite de ce chapitre, mais également par la

simulation d'une homojonction et d'une hétérojonction P-N en GaAs et AlGaAs. Les géométries de ces jonctions sont identiques : une zone dopée p de longueur $0,1 \mu\text{m}$ et de dopage 10^{18} cm^{-3} , et une zone dopée n de longueur $0,4 \mu\text{m}$ et de dopage 10^{16} cm^{-3} (figure 5). Les recombinaisons introduites sont des recombinaisons non-radiatives de type RSH avec des durées de vie de 10^{-9} s . Nous avons reproduit ici les schémas de bande ainsi que les caractéristiques simulées de ces jonctions en direct (figures 6 et 7).

On retrouve bien les caractéristiques classiques de jonction P-N en direct avec une partie à faible polarisation où le courant de recombinaisons domine ($J \propto \exp(\frac{qV}{2kT})$) et une partie à plus forte polarisation où apparaît le courant de diffusion ($J \propto \exp(\frac{qV}{kT})$) puis la saturation lorsque la tension appliquée dépasse la hauteur de bande interdite.

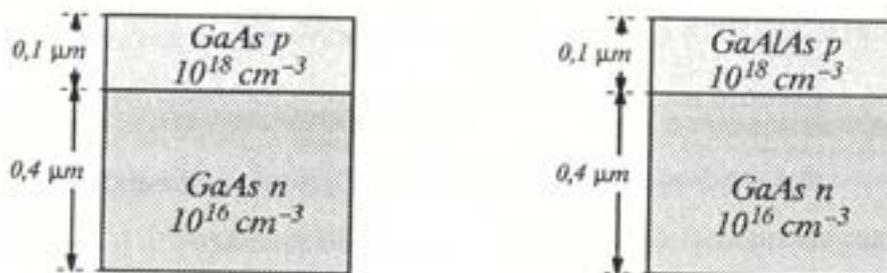


figure 5 : Géométries des jonctions tests pour la validation de ETHER

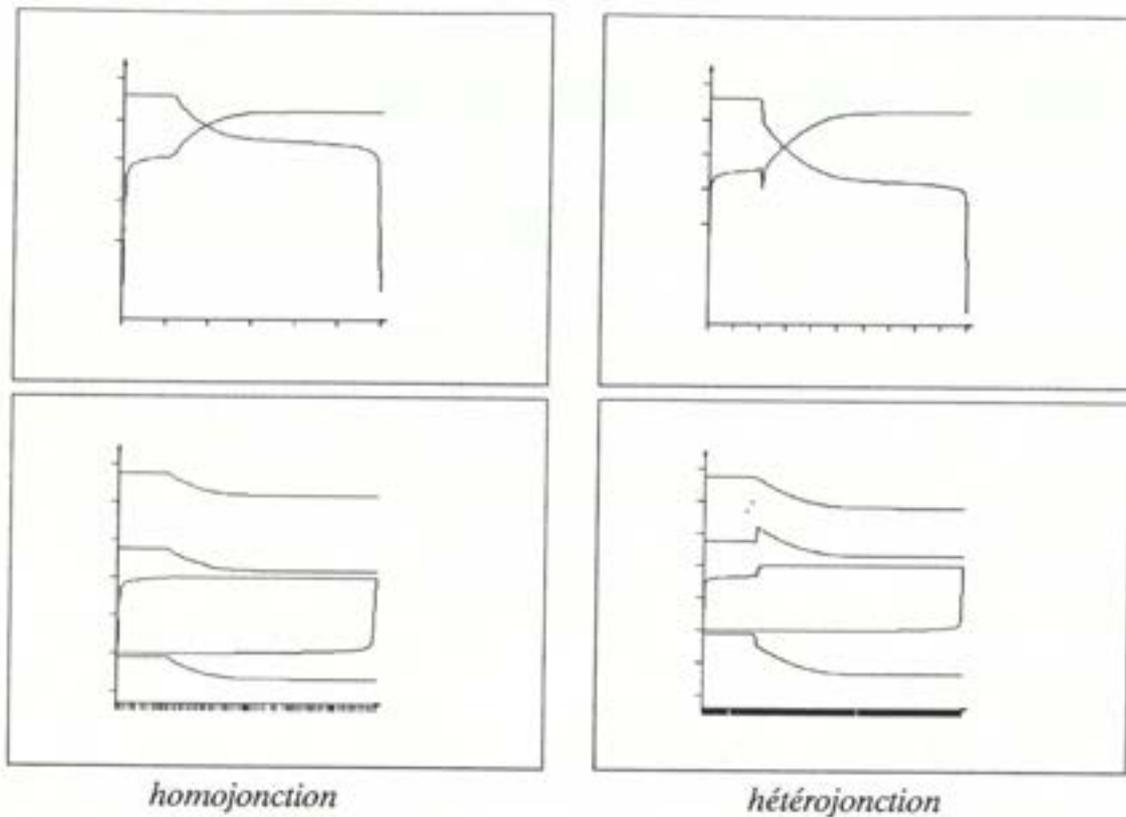


figure 6 : Schémas de bandes et densités de porteurs dans les jonctions

Densité de courant ($\log(A.cm^{-2})$)

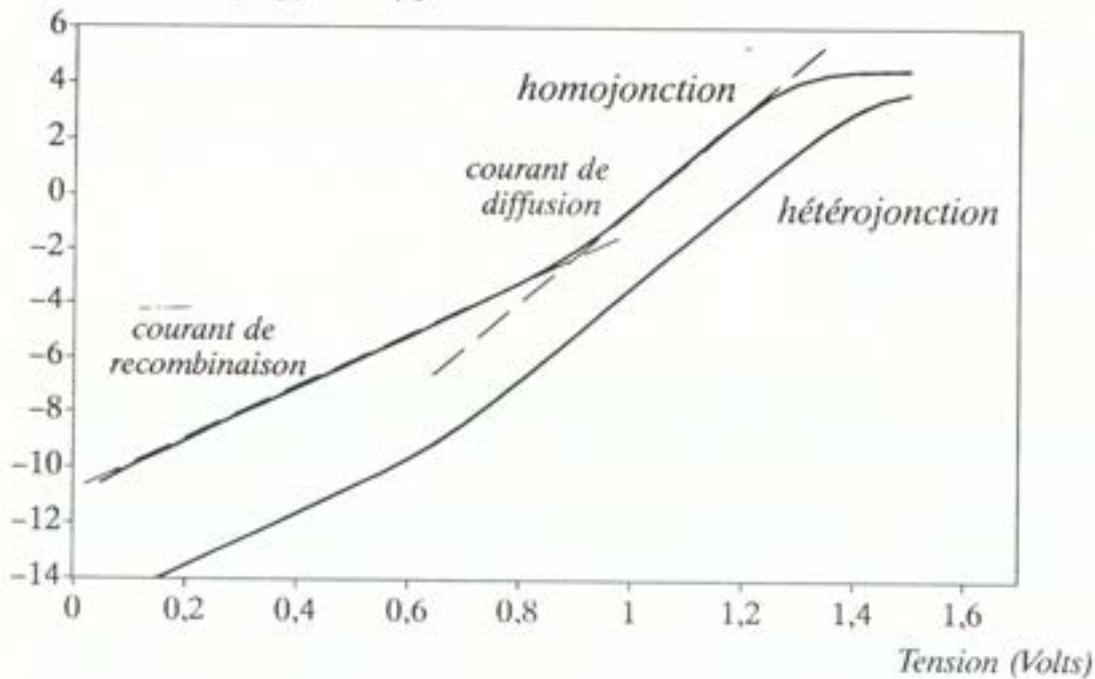


figure 7 : Caractéristiques des jonctions tests simulées sur ETHER

2. LA SIMULATION BIDIMENSIONNELLE : *DENEB*

Bien que la simulation unidimensionnelle permette de traiter de nombreux problèmes comme nous le verrons par la suite, il nous est apparu indispensable de disposer d'un outil de simulation bidimensionnelle, non seulement pour l'étude des dispositifs strictement 2D tels que les transistors à effet de champ, mais également pour pouvoir examiner en détail les effets induits par la géométrie dans des composants tels que le transistor bipolaire. Afin d'assurer la compatibilité entre *TITAN III-V*, *ETHER* et ce nouveau logiciel, nous avons décidé de conserver, dans la mesure du possible, l'architecture générale déjà utilisée permettant ainsi l'intégration future dans un ensemble unique.

2.1. Le modèle physique

Le modèle physique adopté dans le logiciel de simulation électrique bidimensionnelle est exactement le même que pour le cas unidimensionnel. Néanmoins la discrétisation choisie joue un rôle important dans un problème de ce type comportant de très fortes non-linéarités. le logiciel *DENEB* partage la même base de données matériaux que le logiciel *ETHER* ce qui permet une facilité et une souplesse de communication accrues pour les comparaisons entre les comportements unidimensionnel et bidimensionnel d'un même dispositif (par exemple la mise en évidence et la caractérisation des effets parasites bidimensionnels dans le transistor bipolaire).

2.2. La méthode numérique

Tout schéma de discrétisation aboutit à des non-conservations de certaines quantités et à des pertes d'informations par rapport à la solution de l'équation continue, pertes qui dépendent du schéma et qui tendent vers zéro lorsque le pas de discrétisation diminue. Cependant il existe des techniques de discrétisation qui permettent de bénéficier de la conservation des quantités intéressantes même dans le problème discret. C'est pourquoi aux éléments finis de type P1 [5] qui ont prouvé être efficaces pour la résolution de l'équation de Poisson, nous avons préféré pour les équations de continuité un schéma en élé-

ments finis de type Volumes Finis (ou Box-Method) afin d'assurer la conservation du courant même dans le cas discret, conservation qui est capitale pour la bonne fiabilité physique de la solution.

Nous allons donc présenter maintenant ce double schéma de discrétisation et détailler ses conséquences sur la résolution du problème discret.

2.2.1. La discrétisation de l'équation de Poisson

La résolution de l'équation de Poisson a été effectuée en considérant une discrétisation de type P1 pour le potentiel électrostatique. Rappelons l'équation de Poisson :

$$\operatorname{div}(\epsilon_r \vec{\nabla} \phi) = \frac{q}{\epsilon_0} (n - p - dop) = -\frac{\rho}{\epsilon_0}$$

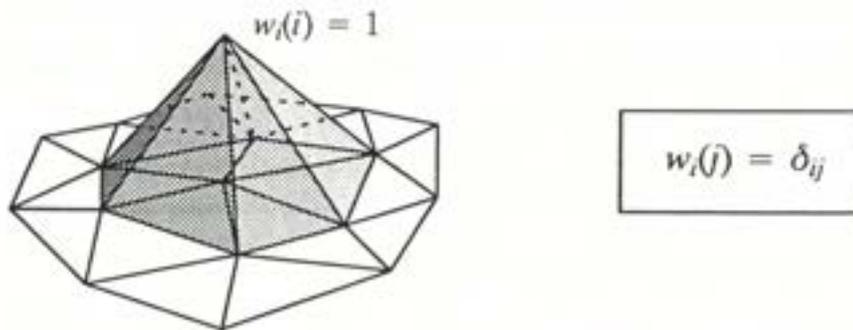
La formulation faible de ce problème s'obtient en multipliant chaque membre par un fonction test w puis en intégrant sur un domaine Ω quelconque tel que w s'annule sur sa frontière :

$$\oint_{\Omega} w(\vec{x}) \operatorname{div}(\epsilon_r \vec{\nabla} \phi) \, d\tau = \oint_{\Omega} -w(\vec{x}) \frac{\rho}{\epsilon_0} \, d\tau$$

On obtient alors après intégration par parties :

$$\oint_{\Omega} \epsilon_r \vec{\nabla} w \cdot \vec{\nabla} \phi \, d\tau = \oint_{\Omega} w \frac{\rho}{\epsilon_0} \, d\tau$$

Lorsque l'on passe dans le domaine discret, le problème revient donc à trouver une fonction ϕ_h vérifiant cette relation pour toute fonction w_h de base sur le maillage. Ces dernières sont indexées par les noeuds du maillage et sont linéaires par élément. Elles vérifient les relations suivantes :



La fonction ϕ s'écrit alors dans le domaine discret : $\phi(\vec{x}) = \sum_i \phi_i w_i(\vec{x})$

Si on suppose que ϵ_r est constant par élément, la contribution de l'élément K , contenant le noeud i , au premier membre de l'équation au noeud i se formule désormais :

$$\oint_K \epsilon_r \vec{\nabla} w_i \cdot \vec{\nabla} \phi \, d\tau = \epsilon_r(K) \sum_{\substack{j \text{ noeuds} \\ \text{de } K}} \left(\oint_K \vec{\nabla} w_i \cdot \vec{\nabla} w_j \, d\tau \right) \cdot \phi_j = \epsilon_r(K) \sum_j a_{ij} \phi_j$$

Les intégrales a_{ij} peuvent être facilement calculées de façon exacte dans le cas d'éléments triangulaires. On pose $K = (i, j, k)$:

$$a_{ii} = \frac{1}{2} \frac{(\vec{j}\vec{k})^2}{|\vec{i}\vec{j} \times \vec{i}\vec{k}|} \quad a_{ij} = \frac{1}{2} \frac{\vec{k}\vec{i} \cdot \vec{k}\vec{j}}{|\vec{i}\vec{j} \times \vec{i}\vec{k}|} \quad \text{pour } i \neq j$$

Il nous reste à évaluer la contribution au second membre qui fait appel à des fonctions plus complexes telles que la fonction de Fermi. Comme le maillage ne fait appel qu'à des éléments triangulaires, nous avons eu recours à une approximation appelée formule à trois points qui s'est avérée suffisante pour la précision des résultats :

$$\oint_K f(\vec{x}) \, d\tau = \text{aire}(K) \cdot \frac{f(i) + f(j) + f(k)}{3} \quad \text{avec} \quad \text{aire}(K) = \frac{1}{2} |\vec{i}\vec{j} \times \vec{i}\vec{k}|$$

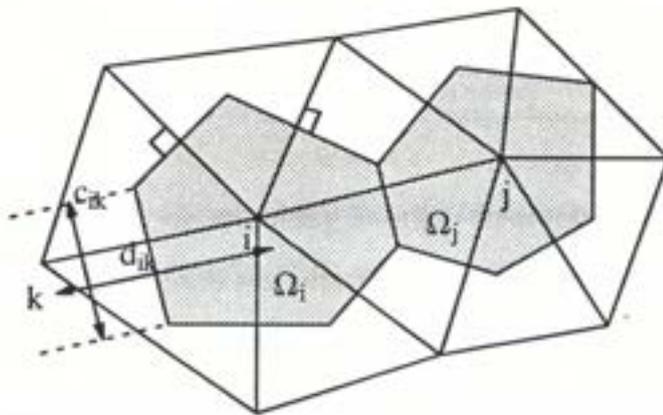
La contribution de l'élément K au second membre de l'équation au noeud i se traduit donc par :

$$\frac{-q \cdot \text{aire}(K)}{3\epsilon_0} \cdot (n_i - p_i - dop_i)$$

Il ne reste plus qu'à ajouter les contributions de tous les éléments entourant le noeud i pour obtenir l'équation de Poisson discrétisée en ce noeud.

2.2.2. La discrétisation des équations de continuité : la Box Method bidimensionnelle

Cette méthode consiste à exprimer la divergence du courant autour de chaque noeud du maillage grâce à un contour formé par les médiatrices des éléments qui entourent ce point :



En effet, si on reste dans le domaine continu, on peut intégrer l'équation de continuité statique sur un domaine Ω grâce au théorème de la divergence :

$$\text{div } \vec{J} = U(\vec{r}) \quad \text{d'où :} \quad \int_{\Omega} \text{div } \vec{J} \, d\tau = \int_{\Omega} U(\vec{r}) \, d\tau$$

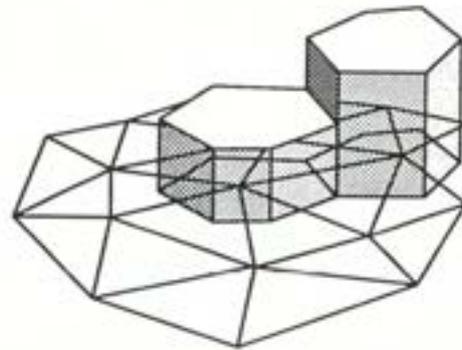
donc :

$$\int_{\Omega} \text{div } \vec{J} \, d\tau = \int_{\partial\Omega} \vec{J} \cdot \vec{\nu} \, ds = \int_{\Omega} U(\vec{r}) \, d\tau$$

$\partial\Omega$ étant la frontière de Ω ,

$\vec{J} \cdot \vec{\nu}$ étant la composante normale sortante du courant

Ceci correspond donc à prendre comme fonction de base pour exprimer les divergences des courants et les taux de recombinaisons des fonctions constantes par boîtes :



Si on suppose que la composante normale sortante est constante sur chaque morceau de médiatrice entourant le point choisi, cette expression devient dans le domaine discret :

$$\int_{\partial\Omega} \vec{J} \cdot \vec{\nu} \, ds = \sum_{\substack{\text{médiatrices} \\ \text{autour de } i}} c_{ik} \vec{J}_k \cdot \vec{\nu}_k$$

Le domaine Ω choisi est donc le domaine délimité par les médiatrices des éléments entourant le point i considéré. On voit immédiatement que ces domaines sont disjoints et qu'ils recouvrent l'ensemble du maillage. Chacun de ces domaines est appelé "boîte" du noeud correspondant. Dans ce schéma, le taux de générations-recombinaisons U est supposé constant sur chaque boîte du maillage. L'équation continue devient alors :

$$\sum_{\substack{\text{médiatrices} \\ \text{autour de } i}} c_{ik} \vec{J}_k \cdot \vec{\nu}_k = V(\Omega_i) U_i$$

$V(\Omega_i)$ étant le volume de la boîte du noeud i

On est donc ramené, grâce à cette astuce d'intégration, à exprimer les composantes normales du courant électrique sur chaque arête du maillage. Or le courant de porteurs

est donné par les équations de continuité :

$$\boxed{\vec{J}_n = qn\mu_n\vec{\nabla}\phi_n} \quad \text{et} \quad \boxed{\vec{J}_p = qp\mu_p\vec{\nabla}\phi_p}$$

Le problème est alors ramené à l'expression du courant discrétisé sur une arête, c'est-à-dire de manière unidimensionnelle. On peut de plus, dans le cas de la statistique de Boltzmann dans un milieu uniforme, calculer de façon exacte ce courant en utilisant les propriétés de la fonction exponentielle. Ceci est en revanche impossible avec la statistique de Fermi-Dirac ou encore dans une hétérostructure. Nous allons donc maintenant examiner séparément le cas d'un milieu uniforme et le cas général.

2.2.2.1. Statistique de Boltzmann dans un milieu uniforme

Si on suppose le courant électronique constant sur une arête A_{ij} , on a :

$$\begin{aligned} \oint_{A_{ij}} e^{\frac{\phi}{U_T}} (\vec{J}_n \cdot \vec{\nu}) ds &= \oint_{A_{ij}} qN_c\mu_n e^{\frac{\phi_n}{U_T}} (\vec{\nabla}\phi_n \cdot \vec{\nu}) ds = qN_c\mu_n e^{\frac{\phi_n}{U_T}} \left[e^{\frac{\phi_n}{U_T}} \right]_{A_{ij}} \\ &= qN_c\mu_n e^{\frac{\phi_n}{U_T}} (e^{\frac{\phi_j}{U_T}} - e^{\frac{\phi_i}{U_T}}) \end{aligned}$$

$$\text{et donc : } \vec{J}_n \cdot \vec{\nu} = \frac{qN_c\mu_n e^{\frac{\phi_n}{U_T}} (e^{\frac{\phi_j}{U_T}} - e^{\frac{\phi_i}{U_T}})}{\oint_{A_{ij}} e^{\frac{\phi}{U_T}} ds}$$

L'intégrale du dénominateur peut être calculée exactement dans le cas où l'on suppose que le potentiel ϕ varie linéairement sur l'arête A_{ij} grâce à la fonction de Bernoulli $B(x)$:

$$\int_a^b e^{u(x)} dx = \frac{(b-a) e^{u(b)}}{B(u(b)-u(a))} \quad B(x) = \frac{x}{e^x - 1}$$

$$\text{d'où : } \oint_{A_{ij}} e^{\frac{\phi}{U_T}} dx = \frac{d_{ij} e^{\frac{\phi_j}{U_T}}}{B(\frac{\phi_j - \phi_i}{U_T})} = -\frac{d_{ij} e^{\frac{\phi_i}{U_T}}}{B(\frac{\phi_i - \phi_j}{U_T})}$$

On en tire finalement l'expression du courant le long de l'arête [i,j] en fonction des densités de porteurs :

$$\boxed{\vec{J}_n \cdot \vec{v} = \frac{q}{d_{ij}} (n_j B_{ij} - n_i B_{ji})}$$

$$B_{ij} = B \left(\frac{\phi_j - \phi_i}{U_T} \right)$$

$$B_{ji} = -B \left(\frac{\phi_i - \phi_j}{U_T} \right)$$

Le calcul est strictement identique dans le cas des trous.

2.2.2.2. Statistique de Fermi-Dirac et milieux discontinus

On ne peut plus obtenir une expression analytique exacte du courant et on utilise alors la discrétisation déjà employée dans le logiciel *ETHER* pour la simulation unidimensionnelle. Néanmoins les propriétés de la "Box-Method", c'est-à-dire la conservation du flux de courant à travers la structure même dans le schéma discret, restent présentes.

Les équations discrètes de continuité des porteurs sont alors :

$$\boxed{\sum_{\substack{\text{médiatrices} \\ \text{autour de } i}} c_{ik} q \cdot (n\mu_n)_{[i,k]} \frac{\phi_n^k - \phi_n^i}{d_{ik}} = V(\Omega_i) U_i}$$

$$\text{avec : } (n\mu_n)_{[i,k]} = \frac{2 n_i \mu_n^i n_k \mu_n^k}{n_i \mu_n^i + n_k \mu_n^k}$$

Nous avons effectué des comparaisons dans ce cas entre une expression des courants utilisant une moyenne arithmétique pour les densités de porteurs et l'expression choisie qui utilise une moyenne harmonique. Les vitesses de convergence se sont révélées être relativement semblables ainsi que les profils obtenus pour le potentiel électrostatique et les niveaux de Fermi. Cependant l'utilisation de la moyenne harmonique s'est avérée nettement supérieure pour la précision des flux notamment dans le cas de maillages "lâches" ce qui est extrêmement appréciable car cela permet d'obtenir un outil de simulation précis et très économique en temps de calcul.

2.2.2.3. Le traitement des angles obtus

La méthode des volumes finis, ou "Box-Method", permet d'obtenir la conservation du courant même dans le problème discret grâce à un redécoupage du domaine de simula-

tion. Cependant ce redécoupage perd sa validité lorsque l'on se trouve en présence d'angles obtus dans le maillage originel. En effet le domaine délimité par les médiatrices entourant un noeud déborde, dans ce cas, des éléments auxquels appartient ce noeud (figure 8).

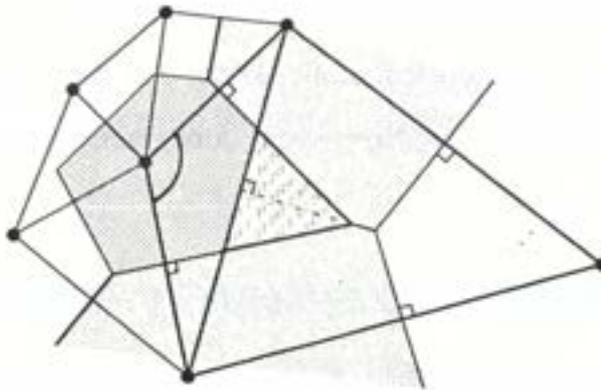


figure 8 : Problème posé par un angle obtus

Il n'est théoriquement plus possible d'exprimer le flux du courant sur le périmètre du domaine en considérant la composante normale du courant constante sur les médiatrices concernées. Cependant on peut remédier à cet inconvénient par deux méthodes :

- La première consiste à supposer nulles les parties des médiatrices situées hors des éléments immédiatement voisins et donc revient à négliger la contribution du flux à travers celles-ci. Cette hypothèse est souvent vérifiée car si l'angle est faiblement obtus, les longueurs considérées sont petites, et si l'angle est fortement obtus, les deux médiatrices sont proches et presque parallèles hors de l'élément, et donc les flux les traversant se compensent en grande partie.
- La seconde consiste à tenir compte dans le calcul du flux des contributions des médiatrices externes mais par ailleurs à introduire la médiatrice de longueur négative dans le calcul du flux autour des deux noeuds voisins. Cette méthode est plus lourde et plus coûteuse

en temps de calcul mais permet de mieux approcher théoriquement la conservation du flux dans le problème discret.

Les deux méthodes ont été successivement testées dans le logiciel *DENEB* et n'ont pas montré de différences notables en ce qui concerne les résultats, la conservation du courant ou le temps de calcul. Il faut cependant noter que les maillages obtenus à partir du mailleur de type Voronoï possèdent en général moins de 2% d'angles obtus ce qui explique leur peu d'influence sur les simulations. Nous avons donc retenu la première méthode pour sa simplicité de mise en oeuvre.

2.2.3. La cohérence entre l'équation de Poisson et les équations de continuité

Nous avons vu dans la discrétisation de l'équation de Poisson que la constante diélectrique était en fait considérée comme constante par élément et non par boîte associée à un noeud, à cause de la résolution en éléments finis P1 de l'équation de Poisson. Il y a donc en fait une incohérence dans la description et la discrétisation du matériau qui est constant par élément pour l'équation de Poisson et constant par boîte pour les équations de continuité, et il faudrait en toute rigueur, pour lever cette incohérence, résoudre l'équation de Poisson par la méthode des volumes finis. Cependant les solutions obtenues pour l'équation de Poisson dépendent très peu du schéma de discrétisation retenu et le problème ne peut apparaître qu'à une hétérojonction abrupte. Or même là la constante diélectrique ne varie que dans de faibles proportions et de plus le maillage y est beaucoup plus raffiné pour la résolution des équations de continuité ce qui permet de considérer finalement notre approximation comme justifiée.

2.2.4. La résolution du problème discret

Le schéma général adopté est identique à celui du logiciel *ETHER*, c'est-à-dire une résolution découplée des équations de Poisson et de continuité, en faisant appel à des méthodes de Newton pour chacune ce qui nécessite à chaque pas de calcul l'inversion d'une matrice. Cependant les dispositifs étudiés, et notamment ceux comportant des hétérostructures, réclament des tailles de maillage importantes pour obtenir une modélisation

précise ainsi qu'une convergence correcte. Il devient alors prohibitif, autant pour des raisons de taille mémoire que de temps de calcul, d'inverser les matrices de Newton par des méthodes classiques. Il a donc été nécessaire de faire appel à des techniques d'inversion plus complexes et mettant à profit les types de matrices rencontrés.

2.2.4.1. Les méthodes d'inversion

Les équations utilisées dans le modèle sont des équations aux dérivées partielles locales sans terme intégral. Les matrices déduites de la linéarisation des équations de Poisson et des équations de continuité ont donc des structures "creuses" ce qui signifie que la majorité de leurs coefficients sont nuls. Il est donc inutilement coûteux de stocker celles-ci sous forme de matrice carrée $N \times N$. Nous avons donc opté pour un stockage de type "Morse" dans le cas de ces matrices, stockage dont la particularité est de ne conserver que les coefficients non-nuls ainsi que deux tableaux entiers référençant leurs positions dans la matrice [6].

Les méthodes d'inversion retenues sont des méthodes de gradient conjugué qui opèrent de manière itérative et sont plus performantes en matière de précision, de taille mémoire et de temps CPU. Elles sont donc tout à fait adaptées à la résolution des grands systèmes qui sont fréquemment rencontrés dans la simulation électrique des dispositifs, étant données les tailles de maillage nécessaires pour décrire correctement des interfaces telles que des hétérojonctions abruptes. Ces méthodes d'inversion peuvent être utilisées avec des préconditionneurs dont le principe consiste à construire, à partir de la matrice A à inverser, une seconde matrice M puis à résoudre le système $M^{-1}Ax = M^{-1}b$ par gradient conjugué. La vitesse de résolution ainsi que la précision du résultat sont grandement accrues.

L'équation de Poisson fournit une matrice symétrique et est résolue par une méthode de gradient conjugué (routine *SIMGCD* de *MODULEF*) [7]. Les équations de continuité aboutissent à des matrices asymétriques qui sont préconditionnées par une méthode de décomposition *LU* incomplète (routines *CDLU1D* et *CDLU2D*) puis inversées par un algorithme de bigradient conjugué (routine *DGRAID*). Des comparaisons de ces diverses

méthodes avec des algorithmes d'inversion directe ont été effectuées par K. Hane [8] et ont montré la très nette supériorité des premières aussi bien en temps CPU qu'en précision de la solution.

2.3. Organisation générale du logiciel *DENEB*

Le logiciel *DENEB*, contrairement au logiciel *ETHER*, ne possède pas de module interne de description des structures géométriques et physiques à simuler. Il utilise pour cela comme préprocesseur le logiciel *TITAN III-V* qui est une évolution du logiciel *TITAN* spécialement destinée à la simulation de la fabrication des dispositifs III-V. L'interface entre les deux logiciels est assurée par un fichier grâce au gestionnaire de données commun qu'ils utilisent. *DENEB* possède cependant une base de données matériaux identique à celle utilisée dans *ETHER* et affecte lui-même dans la structure les valeurs des constantes physiques nécessaires à la simulation électrique, ce qui autorise une grande souplesse dans la stratégie de simulation.

Il est également possible de simuler la fabrication d'un dispositif grâce au logiciel *TITAN III-V*, de réaliser une coupe unidimensionnelle à l'endroit voulu dans ce dispositif, puis de simuler son comportement électrique avec le logiciel *ETHER*. Cette organisation croisée (figure 9) maintient une très grande cohérence interne et nous permet de compa-

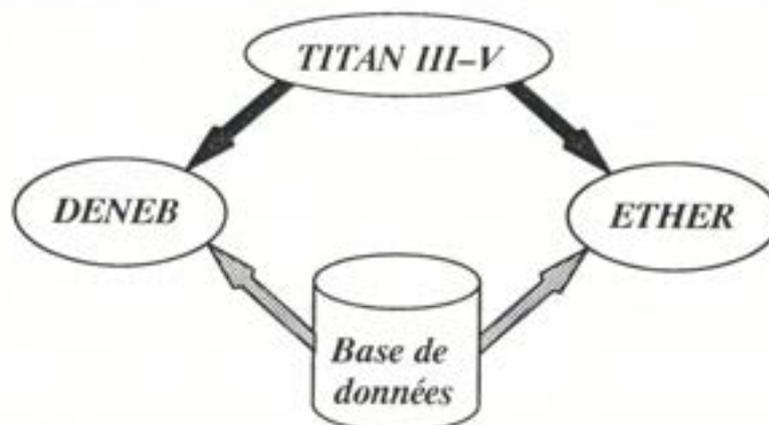


figure 9 : Ensemble logiciel de simulation

rer les comportements intrinsèques et les phénomènes parasites de nombreux composants.

2.4. Validation de *DENEB* par *ETHER*

La première étape dans l'utilisation du logiciel *DENEB* a été sa validation sur les dispositifs quasi-unidimensionnels grâce au logiciel *ETHER*. Nous avons utilisé comme dispositifs tests deux jonctions P-N, une homojonction en GaAs et une hétérojonction GaAs/GaAlAs. Les géométries des deux diodes sont représentées sur la figure 10. Le

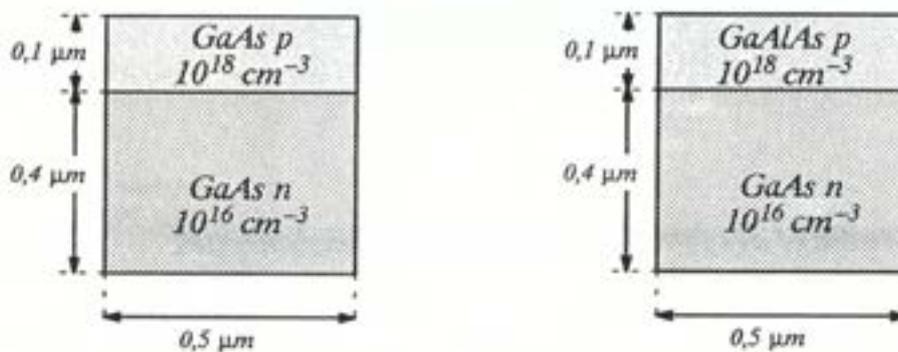


figure 10 : Géométries des jonctions tests pour la validation de *DENEB*

même maillage a été utilisé aussi bien dans *ETHER* que dans *DENEB* pour simuler l'homojonction ou l'hétérojonction. Il comprend 850 noeuds et 1600 éléments triangulaires (figure 11).

Les résultats de simulation (figures 12 et 13) ont montré un très bon accord entre les simulations unidimensionnelles et bidimensionnelles, dans toutes les parties de la caractéristique (courant de recombinaison, courant de diffusion, saturation) hormis dans le bas de la caractéristique où l'on retrouve les problèmes de précision numérique déjà rencontrés dans *ETHER*. Ceux-ci ne peuvent plus être contournés aussi simplement que dans le cas unidimensionnel où ils ont été résolus en intégrant les taux de recombinaison. Néanmoins la conservation du courant dans le cas bidimensionnel a été assurée à moins de 0,1% dans tout le reste de la caractéristique. Les temps de simulation pour un point de

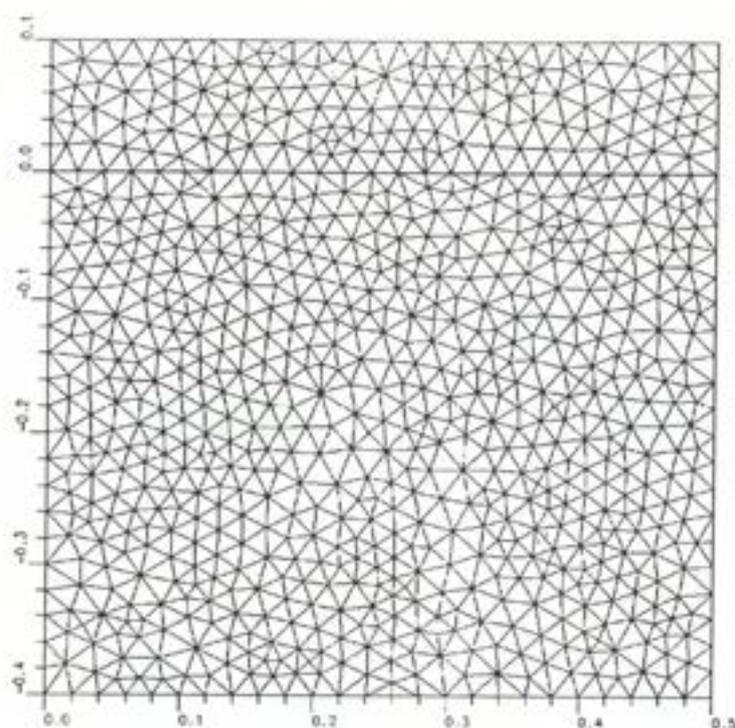


figure 11 : Maillage des jonctions quasi-unidimensionnelles

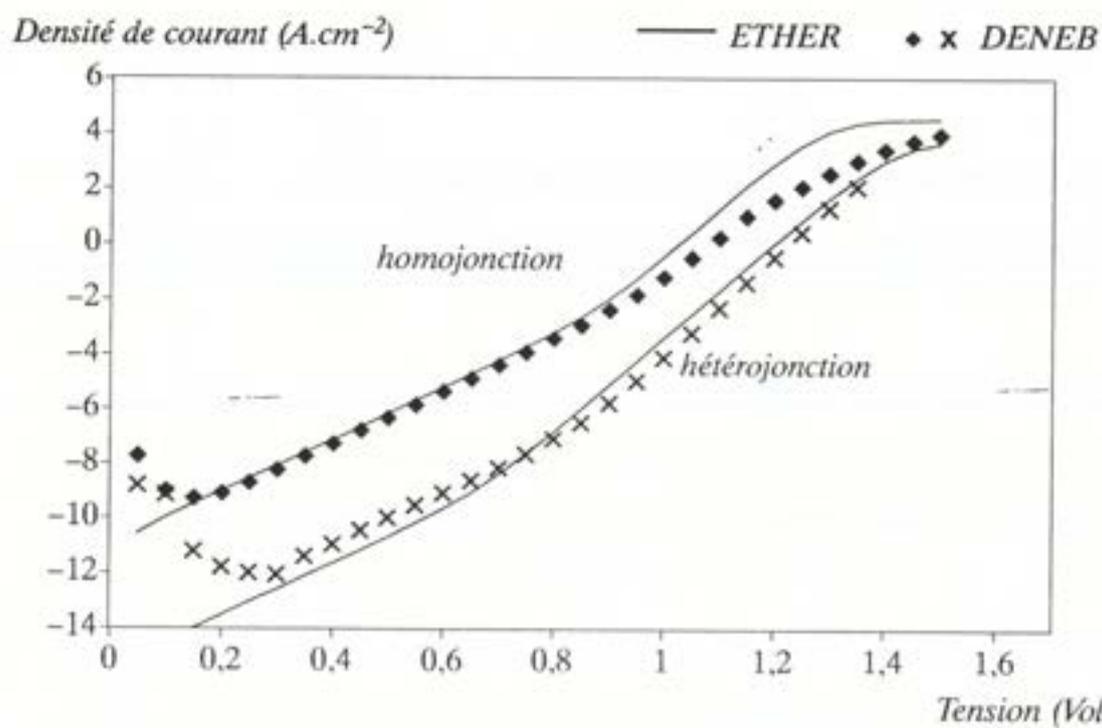


figure 12 : Caractéristiques des jonctions tests simulées sur DENEBA et ETHER

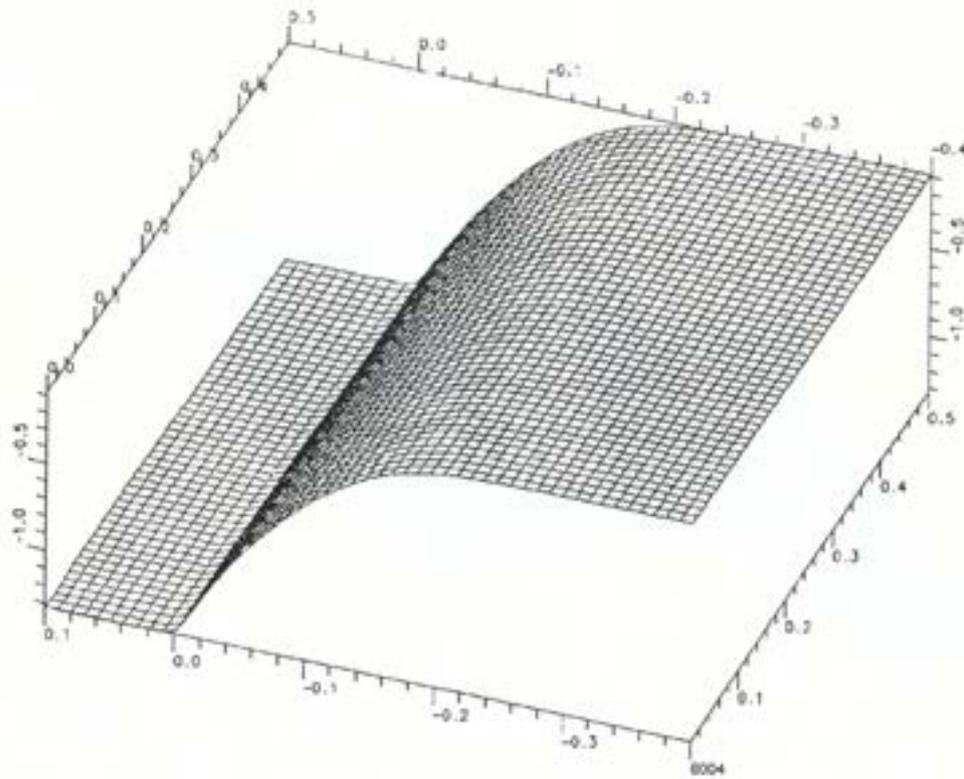


figure 13 : Potentiel électrostatique dans l'homojonction polarisée en direct

polarisation sont de quelques minutes de temps CPU sur un ordinateur vectoriel de type CONVEX.

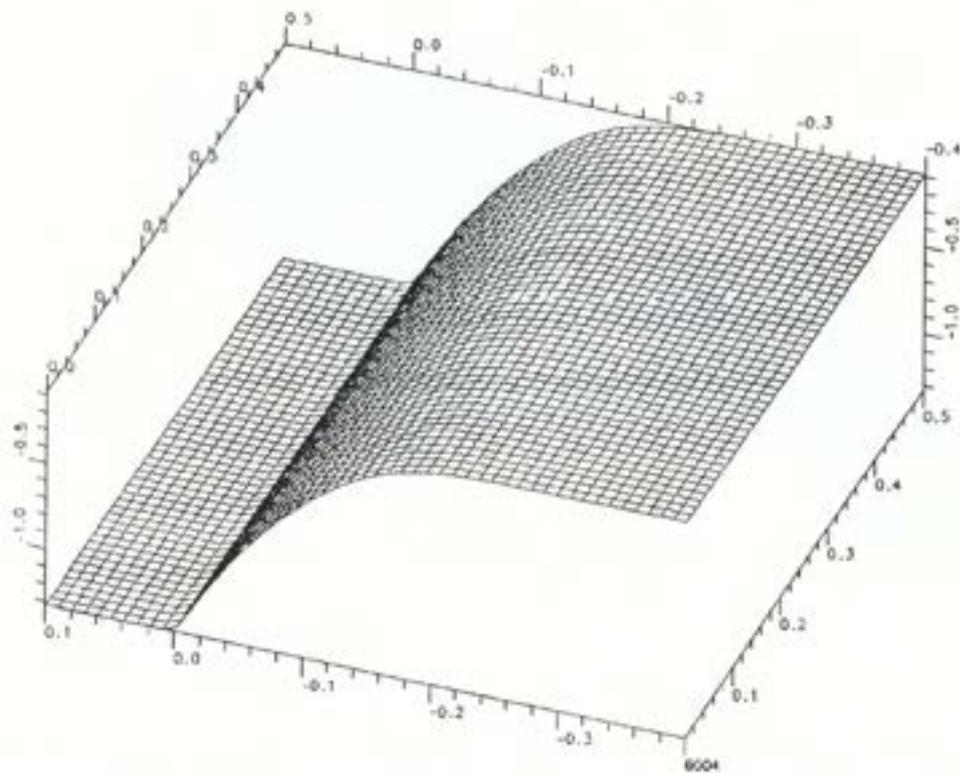


figure 14 : Potentiel électrostatique dans l'hétérojonction polarisée en direct

3. PROBLEMES RESOLUS

Les logiciels de simulation numérique présentés dans cette thèse ont été conçus afin de pouvoir étudier le plus finement possible la grande variété de composants et de dispositifs réalisés au Laboratoire de Bagneux.

Deux types de transistor sont développés sur matériaux III-V : des transistors bipolaires (et plus particulièrement le Transistor Bipolaire à Hétérojonction GaAs/GaAlAs) et des transistors à effet de champ (par exemple sur substrat InP afin de réaliser l'intégration du laser et de son transistor de commande). Les comportements électriques de ces deux dispositifs sont profondément différents : en effet, alors que le transport est essentiellement unidimensionnel dans un transistor bipolaire, et que les effets bidimensionnels peuvent y être considérés comme des perturbations, le comportement électrique d'un transistor à effet de champ nécessite un traitement immédiatement bidimensionnel.

Nous nous sommes attachés plus spécialement à l'étude et l'optimisation du TBH qui présente de nombreuses difficultés en simulation numérique, aussi bien sur le plan théorique – le transport est essentiellement perpendiculaire à l'hétérojonction – que sur le plan pratique – il nécessite un maillage très dense autour de l'hétérojonction –. Nous allons donc brièvement décrire les propriétés et les avantages d'un tel dispositif puis nous présenterons des études unidimensionnelles et bidimensionnelles portant sur des points critiques de son fonctionnement électrique.

3.1. Théorie du TBH GaAs / GaAlAs

3.1.1. Les matériaux GaAs et GaAlAs

L'arséniure de gallium (GaAs) est un matériau III-V à transition directe, c'est-à-dire permettant les phénomènes de générations et de recombinaisons de porteurs sans intervention de phonons (le minimum de la bande de conduction et le maximum de la bande de valence sont tous les deux au centre de la zone de Brillouin), ce qui lui confère des propriétés électroniques et optiques intéressantes. De plus sa mobilité électronique éle-

vée et sa grande largeur de bande interdite lui autorisent des performances électroniques supérieures à celle du silicium.

De plus il présente un accord de maille presque parfait avec le composé ternaire GaAlAs ce qui permet de réaliser des hétérojonctions sans contrainte mécanique afin d'aboutir à des propriétés de confinement optique ou électrique.

3.1.2. Les avantages de l'hétérojonction

Le gain statique en courant d'un transistor bipolaire est essentiellement déterminé par le rapport du produit dopage-mobilité dans l'émetteur sur le même produit dans la base. La nécessité d'obtenir un gain substantiel, notamment dans les applications de puissance, interdit des dopages de base trop importants dans des transistors bipolaires classiques, ce qui entraîne un temps de transit dans la base plus élevé et ainsi une limitation des performances fréquentielles du composant.

L'introduction d'un émetteur en GaAlAs crée une barrière de potentiel pour les trous bien plus importante que celle des électrons et augmente dans des proportions considérables l'efficacité d'injection de la diode émetteur-base, autorisant par conséquent des performances en fréquence bien supérieures.

3.2. Etude unidimensionnelle du transistor bipolaire à hétérojonction

Le premier logiciel développé, *ETHER*, qui simule le transport unidimensionnel des électrons et des trous, a donc été conçu pour la modélisation et l'optimisation des transistors bipolaires [9], ainsi que plus généralement pour l'étude des dispositifs à comportement électrique principalement unidimensionnel. Maziar et al. ont montré en 1987 que le modèle de dérive-diffusion était adapté à la simulation de transistors bipolaires pour des épaisseurs totales de base supérieures à 1000 Å [10]. Nous avons donc choisi d'illustrer la souplesse d'utilisation et les performances de ce logiciel par l'étude de deux problèmes sensibles dans les transistors bipolaires :

- Etude de l'influence sur le gain statique d'un TBH d'une gradualité d'aluminium dans l'émetteur et dans la base.

- Etude de l'influence sur la tension de seuil émetteur-base de la diffusion de dopants de base vers l'émetteur.

Enfin, bien que ce logiciel ne soit pas destiné à la simulation des transistors à effet de champ, il est néanmoins possible de l'utiliser pour étudier les structures transverses de canaux de transistor à effet de champ sous diverses polarisations de grille.

3.2.1. Etude de l'influence de la diffusion de dopants de base vers l'émetteur

Comme nous l'avons déjà vu, la nécessité d'améliorer les performances fréquentielles des transistors bipolaires à hétérojonction entraîne l'augmentation des dopages de base afin de réduire la résistance de base et donc le temps de transit des porteurs dans celle-ci. Ces niveaux de dopage peuvent actuellement atteindre des valeurs largement supérieures à 10^{19} atomes.cm⁻³ [11].

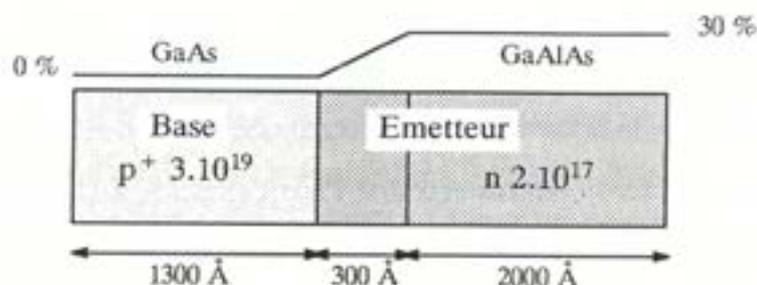
Lors de la réalisation d'un TBH à fort dopage de base, une partie de ces dopants de base diffusent vers l'émetteur, déplaçant ainsi la jonction électrique et diminuant dans des proportions considérables les performances théoriques de ces dispositifs. Un des problèmes principaux en vue d'améliorer les performances de ces transistors consiste donc à maîtriser la diffusion de ces dopants de la base vers l'émetteur.

L'objet de cette étude est d'identifier et de caractériser grâce à un ou plusieurs paramètres électriques, facilement accessibles par la mesure, la diffusion de ces dopants de la base vers l'émetteur pour diverses configurations du transistor.

Le niveau de diffusion ne peut pas facilement être déduit du gain statique du transistor car celui-ci dépend de nombreux autres paramètres (recombinaisons de surface et de volume, durée de vie des porteurs, etc...). De plus le maximum du gain statique intrinsèque ne peut pas toujours être atteint : pour les grandes géométries de transistor les densités de courant correspondantes ne peuvent être obtenues (effets thermiques) et sur les petites géométries les recombinaison de surface entraînent une réduction du gain.

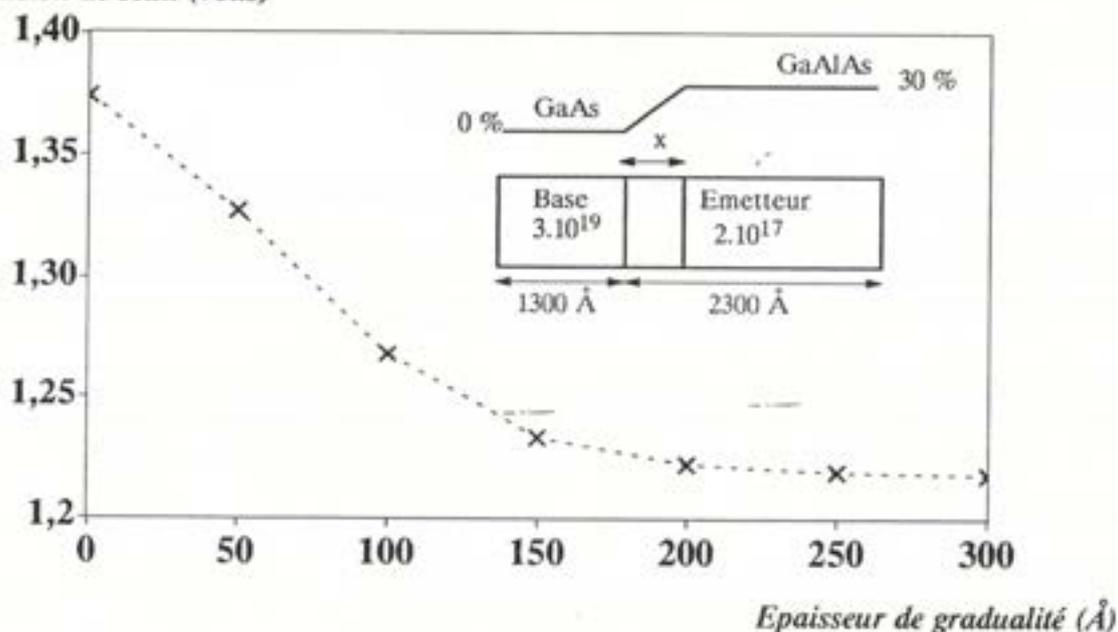
Nous avons finalement trouvé que la tension de seuil émetteur-base V_{BE} est un très bon indicateur de la diffusion des dopants p^+ vers l'émetteur. Pour le mettre en évidence

nous avons commencé par étudier l'influence sur cette tension de seuil successivement de l'épaisseur de la gradualité en aluminium, des dopages de base et d'émetteur. Les simulations ont été effectuées sur le logiciel *ETHER* pour un courant d'émetteur de 110 A.cm^{-2} , pour lequel les résistances série sont négligeables. La structure de base simulée est la suivante :



La première série de simulations a porté sur l'influence de l'épaisseur de la gradualité en aluminium sur la tension de seuil V_{BE} . On peut constater que celle-ci atteint très vite un niveau stable correspondant à la tension de seuil de l'homojonction en GaAs.

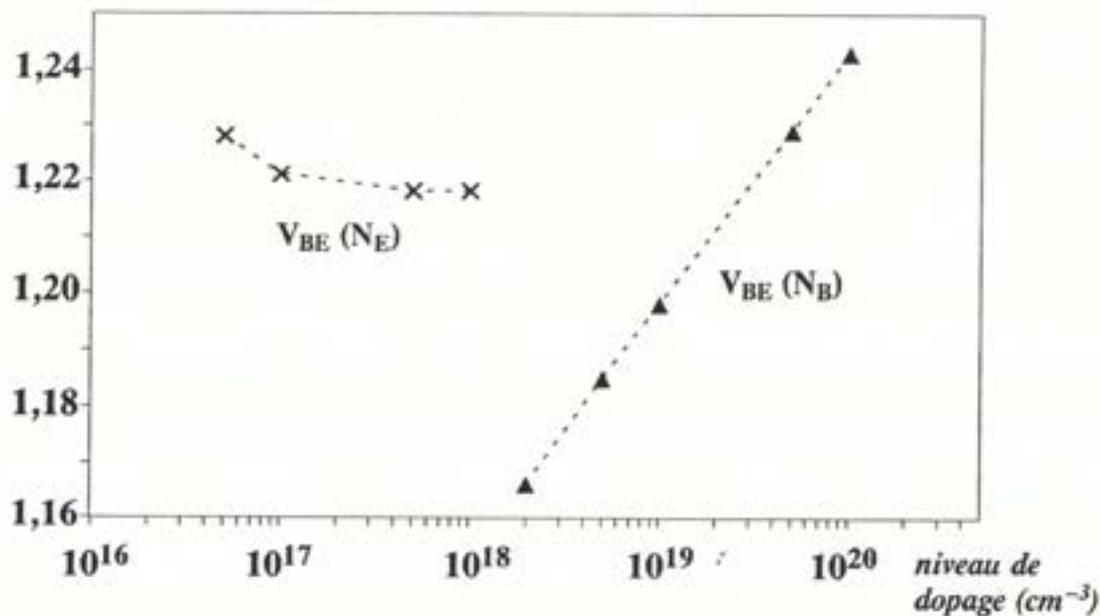
Tension de seuil (Volts)



Comme le contrôle sur l'épaisseur de gradualité est à peu près de 2% et que celle-ci a été choisie égale à 300 Å , elle n'est d'aucune influence sur la variation de tension de seuil.

Nous avons ensuite étudié le comportement de la tension de seuil en fonction des niveaux de dopage dans l'émetteur et dans la base, pour une structure sans diffusion et avec une épaisseur de gradualité de 300 Å. Celui-ci s'est révélé pratiquement indépendant du niveau de dopage de l'émetteur. En revanche une variation du dopage de base de $2 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ à $3 \cdot 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ entraîne une variation de de la tension de seuil de 55 mV. Comme le dopage de base est contrôlé à mieux de 10%, cette cause de variation est connue et quantifiée.

Tension de seuil (Volts)



Nous avons enfin exploré, pour différentes valeurs de dopage de base, l'influence sur la tension de seuil de la diffusion des dopants de base vers l'émetteur. La diffusion a été modélisée à l'aide d'un simple modèle exponentiel. Les résultats montrent clairement une importante variation de la tension de seuil puisque celle-ci passe de 1,22 V à 1,50 V (figure 15) lorsque les dopants diffusent dans toute l'épaisseur de la zone graduelle. Lorsque la diffusion est encore supérieure, il n'y a plus de variation de la tension de seuil mais le gain statique du transistor chute considérablement.

Afin de valider ces résultats de simulation, cinq plaques ont été réalisées au Laboratoire, en technologie double-mesa et en ne faisant varier à chaque fois que le dopage de

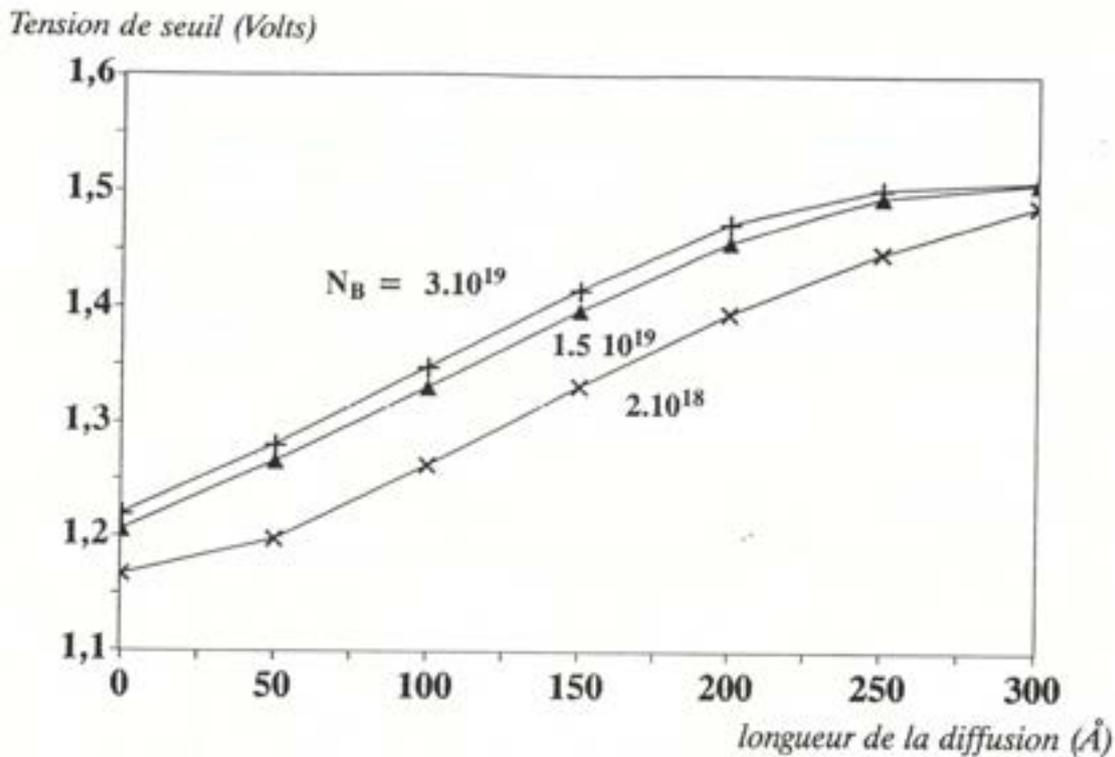


figure 15 : Evolution de la tension de seuil en fonction de la diffusion

base N_B et les conditions de croissance. Pour chacun de ces transistors nous avons mesuré le gain statique en courant et la tension de seuil émetteur-base V_{BE} . A partir de ces résultats et des simulations précédentes, nous avons pu remonter aux longueurs de diffusion dans l'émetteur. Le tableau ci-dessous résume les divers résultats :

n^0	N_B (cm^{-3})	β	V_{BE} (V)	diffusion (μm)	SIMS (μm)
1	$2 \cdot 10^{18}$	400	1,17	0	ud
2	$3 \cdot 10^{19}$	15	1,41	145	360
3	$1,5 \cdot 10^{19}$	60	1,27	55	280
4	$1,5 \cdot 10^{19}$	30	1,25	45	400
5	$3 \cdot 10^{19}$	35	1,22	0	ud

On peut donc constater que le transistor n^01 , faiblement dopé et servant de référence, a, d'après la simulation, une diffusion nulle dans l'émetteur. Ce résultat est d'ailleurs confirmé par les mesures SIMS. La tension de seuil du transistor n^02 , à croissance non-optimisée, correspond à une diffusion importante de 145 Å. Enfin les transistors 3, 4 et

5, à croissance optimisée et fort dopage de base, ont des diffusions beaucoup moins importantes voire nulle d'après la simulation.

Les valeurs de diffusion obtenues par mesure de la tension de seuil V_{BE} et comparaison avec la simulation peuvent être considérées comme beaucoup plus fiables que les mesures directes SIMS qui ne donnent qu'un ordre de grandeur. Ces résultats recourent bien les mesures de gain statique si l'on compare à dopage de base égal.

Ces simulations ont donc permis d'exhiber la diffusion des dopants de base vers l'émetteur comme cause principale de la variation de la tension de seuil émetteur-base. On peut ainsi disposer d'une mesure facilement réalisable et très fine de cette diffusion. Les mesures effectuées sur les dispositifs réalisés ont permis de confirmer ces résultats avec un très bon accord et ont validé la technique MOCVD pour la fabrication de TBH à fort dopage de base sans diffusion dans l'émetteur [12].

3.2.2. Etude et optimisation de gradualités en aluminium dans la diode émetteur-base

Le but de cette étude est d'essayer de quantifier, à l'aide de simulations numériques, l'influence de gradualités d'aluminium dans la base et dans l'émetteur sur les performances statiques des transistors bipolaires.

Les transistors étudiés sont des transistors bipolaires GaAs/GaAlAs réalisés au Laboratoire de Bagneux. L'existence d'une hétérojonction abrupte à l'interface émetteur-base introduit une barrière de potentiel très fine dans le bas de la bande de conduction, appelée aussi "spike", qui gêne le passage des électrons, diminue le courant électronique et par voie de conséquence le gain du transistor. Une solution envisagée pour remédier à cet effet consiste à introduire dans la base ainsi que dans l'émetteur une gradualité d'alliage en aluminium qui "lisse" l'énergie de bas de bande de conduction et favorise ainsi le passage des électrons de l'émetteur vers la base (figures 16 et 17), augmentant par là-même le gain du transistor.

Nous avons mené cette étude en plusieurs étapes. Tout d'abord nous avons examiné l'influence d'une gradualité dans l'émetteur seulement, en fonction de son épaisseur et

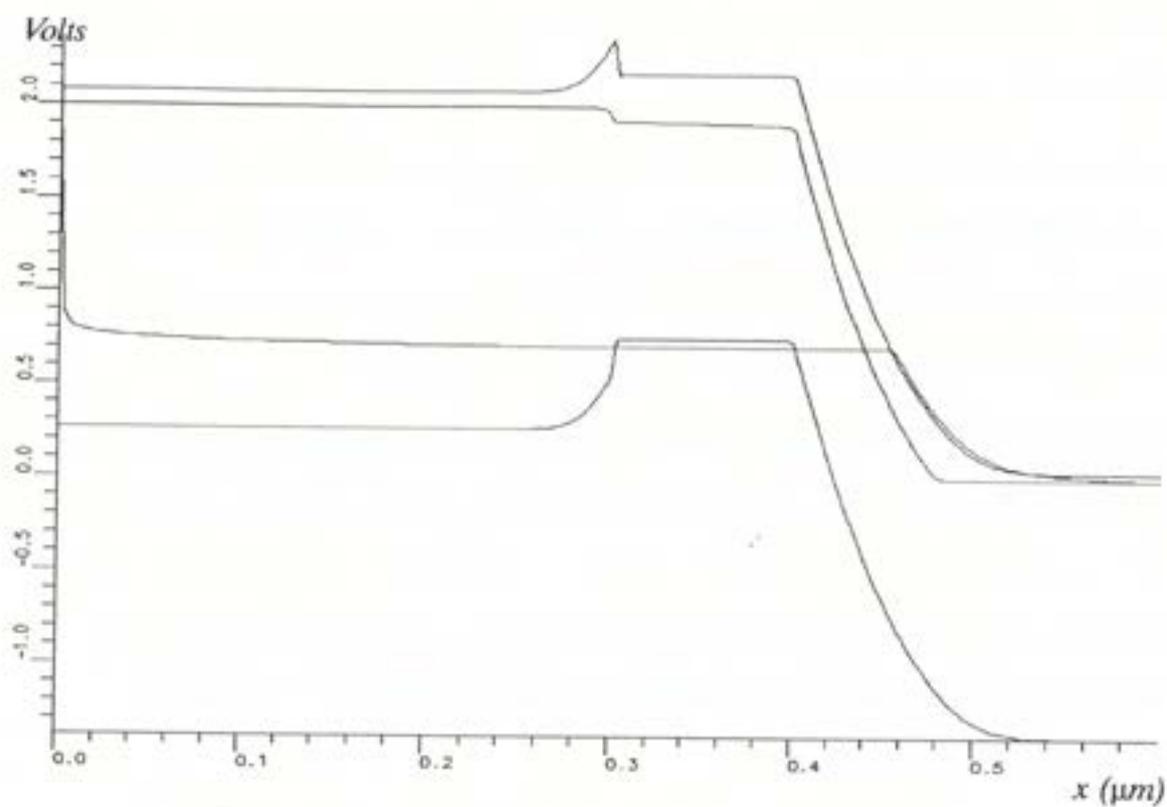


figure 16 : schémas de bandes d'un TBH abrupt

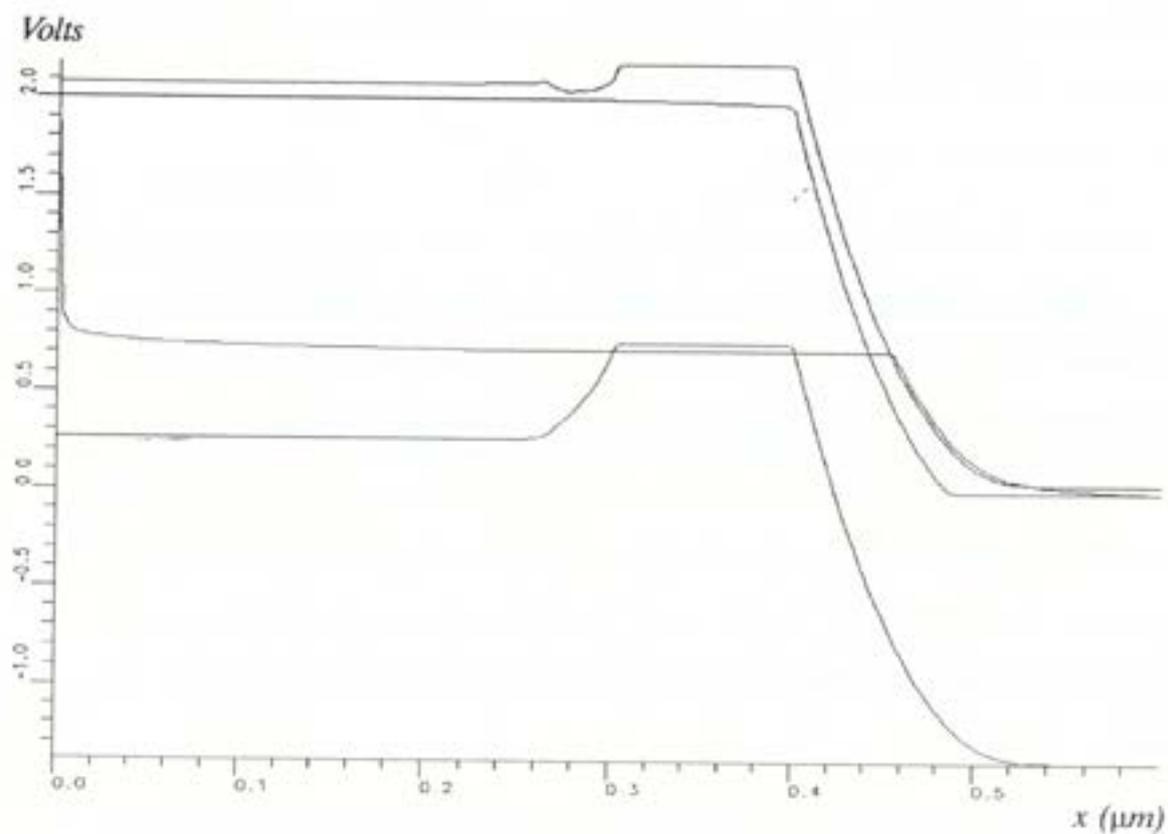
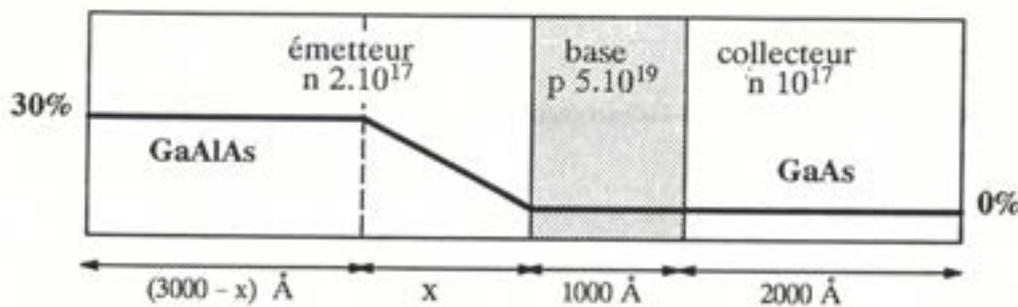


figure 17 : schémas de bandes pour TBH graduel de 400 Å

la hauteur de gradualité, puis l'influence de celle-ci couplée à une gradualité dans la base également. Ce schéma a été renouvelé pour deux valeurs de durée de vie non-radiatives afin de mieux comprendre l'influence des recombinaisons sur cette structure.

Nous avons commencé par prendre, pour les durées de vie non-radiatives des porteurs, une valeur de 5.10^{-8} s ce qui correspond à des recombinaisons peu importantes.

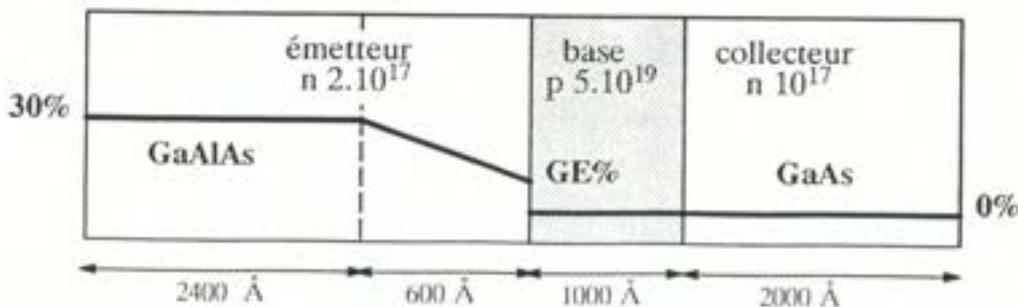
3.2.2.1. Première étape : gradualité d'émetteur continue



Dans cette première étape nous faisons donc varier l'épaisseur de la gradualité dans l'émetteur. On peut constater qu'on obtient une amélioration très importante du gain en passant d'une hétérojonction abrupte à une hétérojonction graduelle (figure 18). De plus, celui-ci sature lorsque l'épaisseur de la gradualité dépasse les 600 \AA , auquel cas on retrouve pratiquement l'homojonction en GaAs pour la diode émetteur-base.

3.2.2.2. Deuxième étape : gradualité d'émetteur discontinue

Nous avons ensuite conservé la base entièrement en GaAs et étudié l'influence du pourcentage d'aluminium GE à l'interface émetteur-base, pour une épaisseur de gradualité de 600 \AA , ce qui donne la structure suivante :



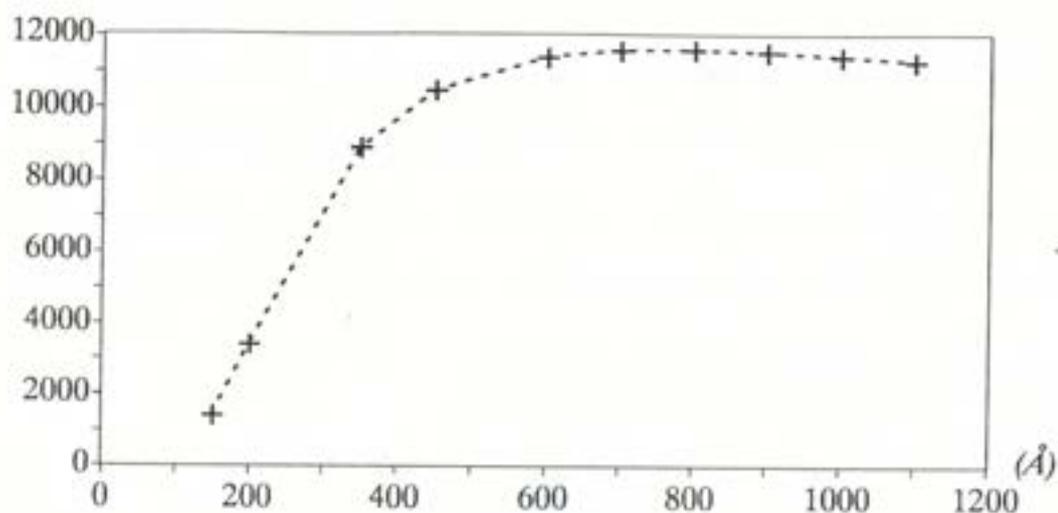


figure 18 : Gain statique en fonction de l'épaisseur de la gradualité d'émetteur

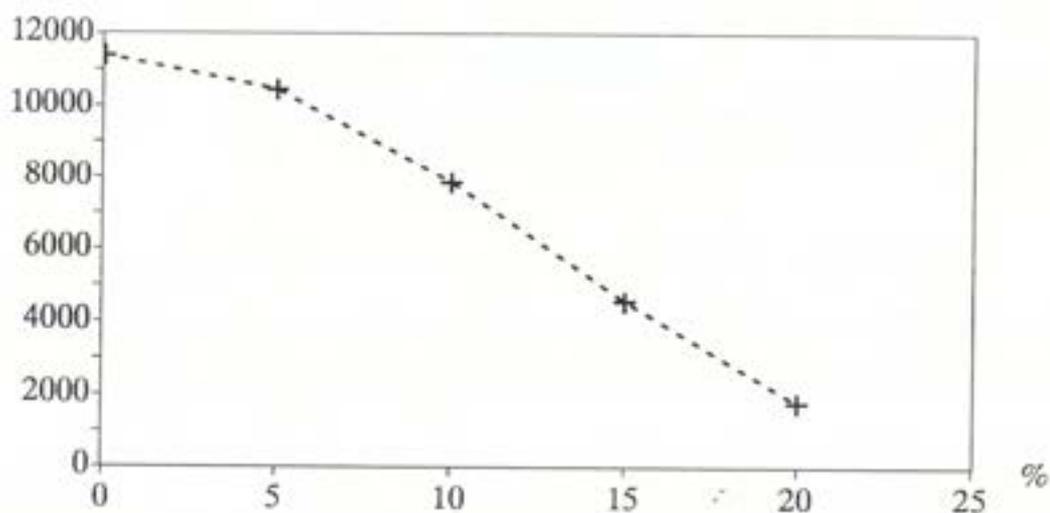


figure 19 : Gain statique en fonction du pourcentage d'aluminium GE

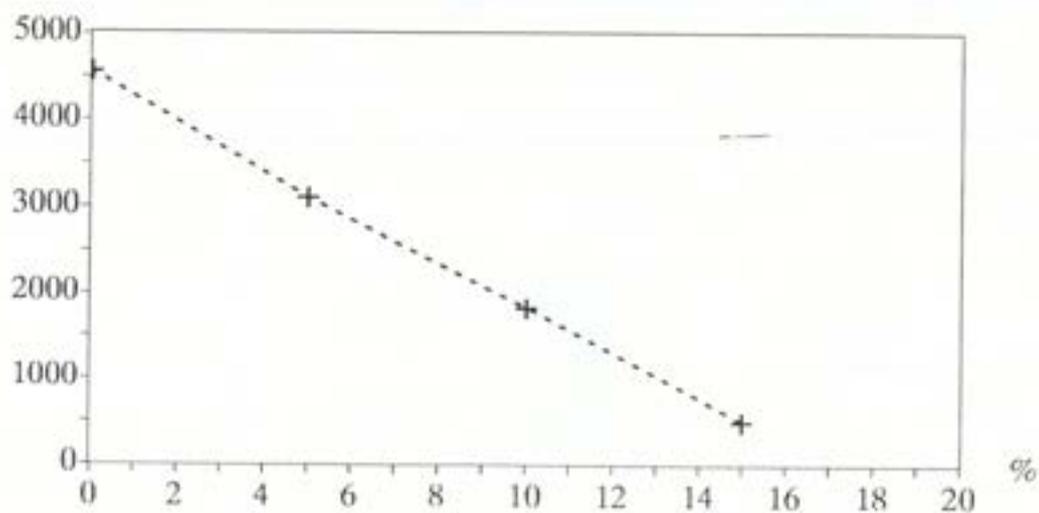
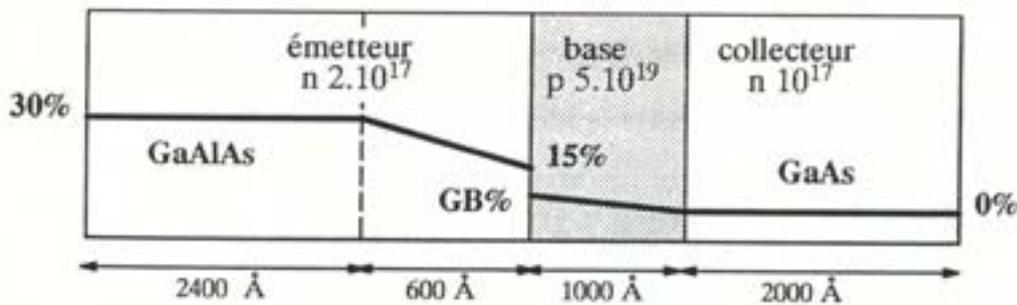


figure 20 : Gain statique en fonction du pourcentage d'aluminium GB

Le résultat obtenu par simulation a montré une décroissance régulière du gain à partir de $GE = 0\%$ (figure 19), ce qui confirme la supériorité de la gradualité devant une jonction même faiblement abrupte. Cependant, l'éventualité d'une gradualité dans la base nous a conduit à envisager des pourcentages d'aluminium non-nuls à l'interface émetteur-base.

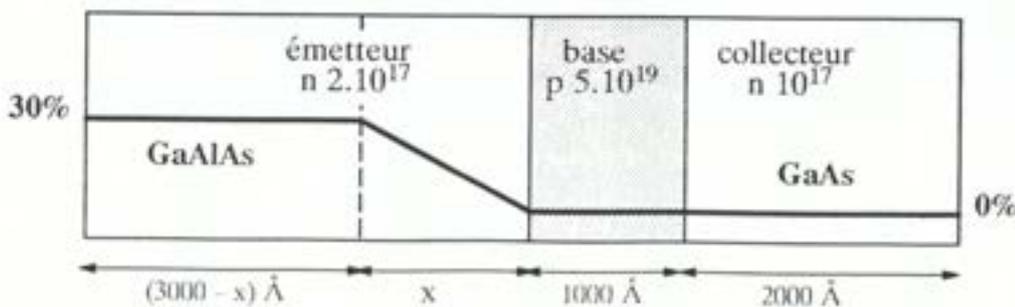
3.2.2.3. Troisième étape : gradualités dans l'émetteur et dans la base

Nous avons donc introduit dans la base une gradualité dont nous avons fait varier la valeur à l'interface émetteur-base. La gradualité d'émetteur a, quant-à-elle, été maintenue constante, de 30% à 15%, toujours pour une épaisseur de 600 Å :



Les résultats ont montré de manière systématique une diminution du gain suite à l'introduction d'une gradualité d'aluminium dans la base (figure 20). Ceci peut paraître surprenant et nous a conduit à mener à nouveau la même étude en changeant les durées de vie non-radiatives dans les matériaux. Celles-ci ont donc été portées à 10^{-9} seconde dans les simulations suivantes.

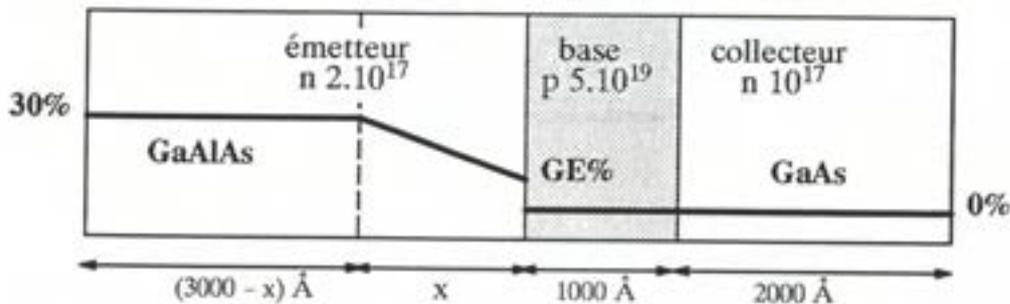
3.2.2.4. Première étape : gradualité d'émetteur continue



On reprend donc la même structure mais en modifiant simplement les taux de recombinaisons. Les résultats font maintenant apparaître un optimum du gain en fonction de l'épaisseur de la gradualité, pour une valeur d'environ 200 Å (figure 21). Ceci est tout à fait nouveau et peut être interprété grâce aux recombinaisons. En effet celles-ci sont plus importantes, à durées de vie comparables, dans un matériau à petite hauteur de bande interdite. Or l'introduction d'une gradualité dans l'émetteur diminue la hauteur de bande interdite et donc augmente ces recombinaisons non-radiatives qui altèrent le gain. Un optimum est donc obtenu qui correspond à un compromis entre les avantages de la gradualité et les inconvénients des plus fortes recombinaisons.

3.2.2.5. Deuxième étape : gradualité d'émetteur discontinue

On fait donc varier maintenant la valeur du pourcentage d'aluminium à l'interface émetteur-base, ceci pour diverses épaisseurs de gradualité d'émetteur.



Les résultats obtenus par simulation sur *ETHER* confirment les résultats précédents et on observe un optimum dépendant de l'épaisseur de la gradualité, mais qui se situe cependant entre $GE = 10\%$ et $GE = 15\%$ de façon générale (figure 22).

3.2.2.6. Troisième étape : gradualité dans l'émetteur et dans la base

Comme dans le cas des faibles recombinaisons, on introduit maintenant une gradualité dans la base pour diverses valeurs d'épaisseurs de base. L'épaisseur de la gradualité

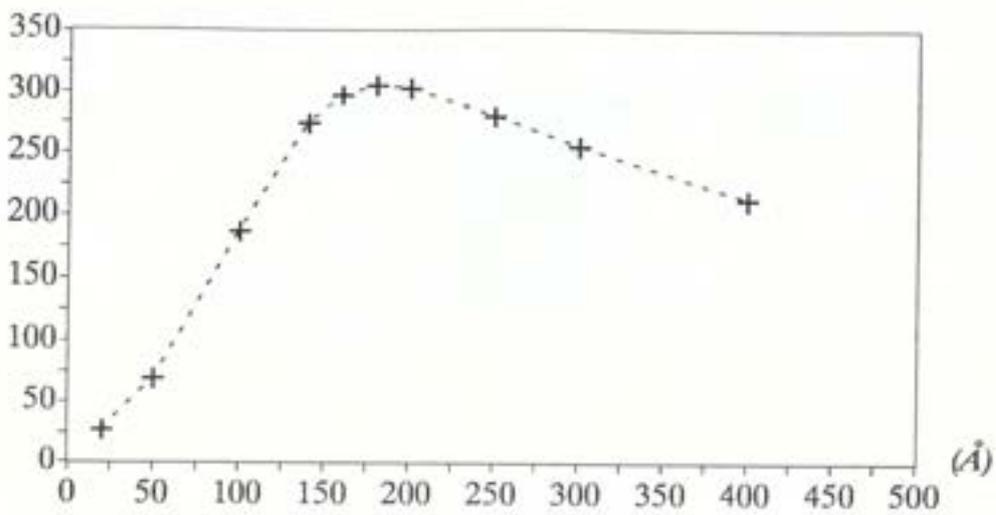


figure 21 : Gain statique en fonction de l'épaisseur de la gradualité d'émetteur

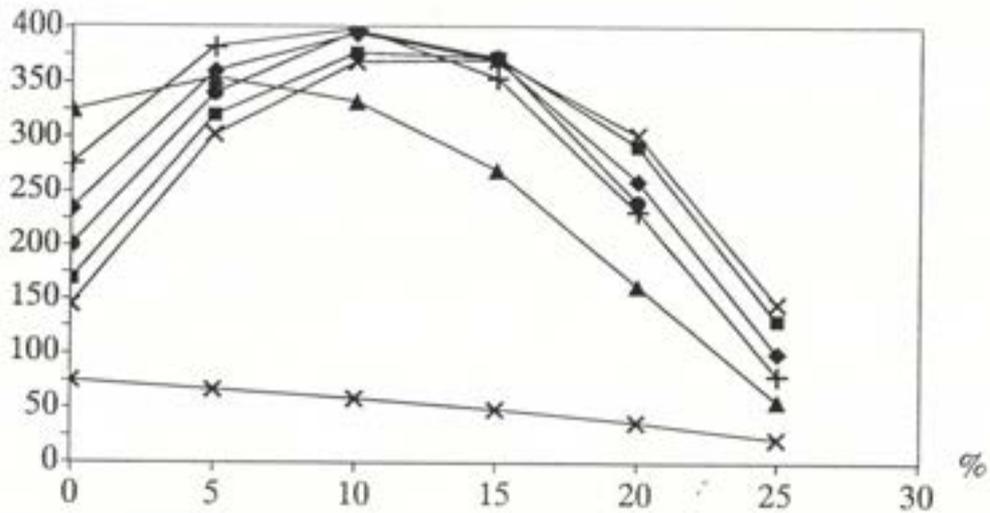


figure 22 : Gain statique en fonction du pourcentage d'aluminium GE

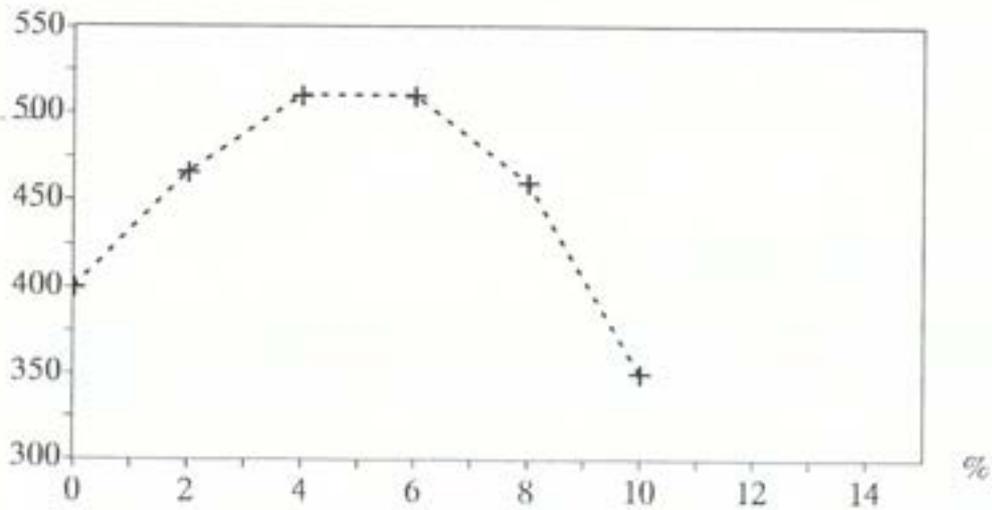
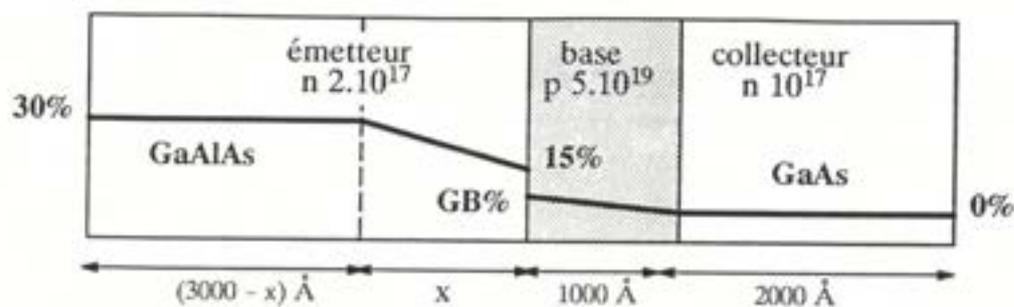


figure 23 : Gain statique en fonction du pourcentage d'aluminium GB

d'émetteur a été fixée à 600 Å.



Les simulations ont été menées pour trois épaisseurs de base différentes. On peut constater que les trois courbes présentent maintenant un maximum pour des valeurs de GB de l'ordre de quelques % (figure 23). Bien que ces résultats ne mettent pas en évidence de façon nette l'avantage d'une gradualité dans la base, ils prouvent que les recombinaisons peuvent fortement influencer sur les performances et le comportement du transistor. L'intérêt de la base graduelle apparaît alors dans le cas de matériaux dégradés ou d'interface comportant de nombreux défauts cristallins, générateurs de forts taux de recombinaisons.

En conclusion, nous avons donc constaté, par des simulations sur le logiciel *ETHER*, que dans le cas de recombinaisons non-radiatives relativement importantes, l'introduction d'une gradualité d'aluminium dans l'émetteur permettait de faire multiplier le gain statique du TBH par un facteur supérieur à 10 ($20 \rightarrow 300$), que l'optimum n'était pas atteint pour une gradualité totale et continue, et enfin que l'introduction conjointe d'une légère gradualité dans la base permettait d'améliorer encore de façon substantielle le gain ($300 \rightarrow 500$).

3.2.2.7. Comparaison simulations-expériences

Plusieurs plaques TBH ont été réalisées au Laboratoire de Bagneux afin de valider ces nombreuses simulations. Malheureusement les optimisations précédentes sont assez fines et supposent des structures les plus proches possibles des structures théoriques simulées ce qui n'a pas été le cas. En effet des phénomènes parasites liés aux recombinaisons de surface et à la diffusion de dopants de base dans l'émetteur (simulée plus haut) ont lissé

les gains des TBH et n'ont donc pas permis d'observer ces améliorations dues aux gradua-
lités d'aluminium. Néanmoins l'examen de la littérature correspondante permet de confir-
mer relativement les effets observés dans nos simulations.

3.3. Etude bidimensionnelle du transistor bipolaire à hétérojonction

Bien que le fonctionnement d'un transistor bipolaire soit fondamentalement unidimensionnel, la réduction constante des dimensions des dispositifs entraîne des effets induits par la géométrie du dispositif que les concepteurs ne peuvent pas se permettre de négliger dans le cadre d'une optimisation toujours plus poussée des performances. Il est donc dorénavant nécessaire de pouvoir disposer d'un outil de simulation bidimensionnel afin d'explorer des effets tels que la focalisation-défocalisation du courant ou bien des phénomènes parasites tels que les recombinaisons de surface qui peuvent perturber considérablement les performances intrinsèques théoriques du transistor.

Ce logiciel ayant été mis au point au cours des derniers mois, une étude exhaustive de l'influence des phénomènes parasites n'a pu être menée. Nous avons donc choisi, pour illustrer cette partie, de démontrer la validité de l'approche numérique et plus particulièrement les capacités du logiciel *DENEB* dans l'étude du transistor bipolaire à hétérojonction GaAs/GaAlAs.

3.3.1. La géométrie de la structure

Nous avons donc délibérément opté pour une structure géométrique relativement simple mais où l'on pourra observer les problèmes et les effets caractéristiques du TBH. La structure retenue est illustrée par la figure 24.

La structure du transistor a été réalisée par le logiciel *TITAN III-V* grâce à un fichier de commande puis transférée dans un fichier binaire afin de servir d'entrée au logiciel *DENEB*. Pour réaliser le maillage nous avons tenu compte des problèmes créés par la simulation de la jonction en inverse qui entraîne une variation très rapide des niveaux de Fermi et du potentiel à l'interface base-collecteur (figure 25). Le collecteur a donc été réalisé en deux parties, une première partant du contact ohmique de collecteur, d'épaisseur $0,46 \mu\text{m}$ et maillée assez grossièrement, et une seconde, d'épaisseur $0,04 \mu\text{m}$, à l'interface collecteur-base. Le maillage obtenu contient 987 noeuds et 1929 éléments. On

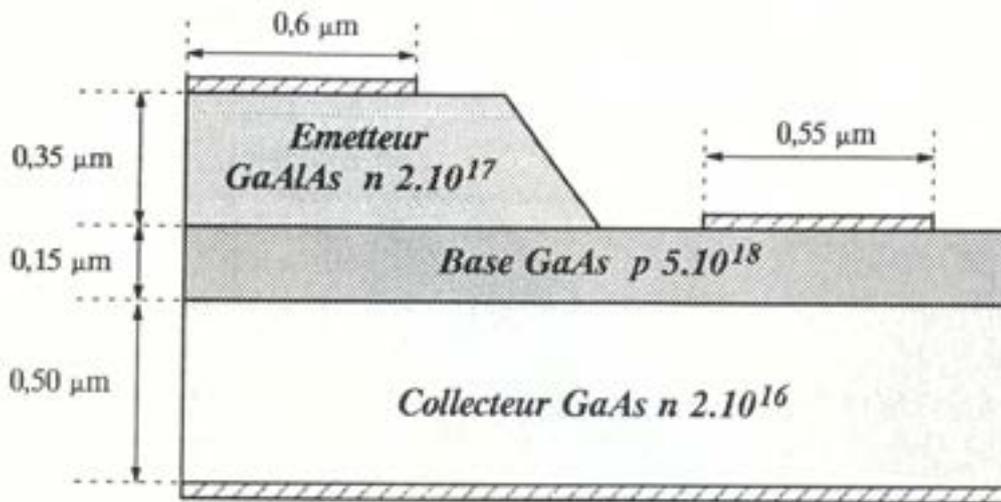


figure 24 : Structure du transistor bipolaire à hétérojonction

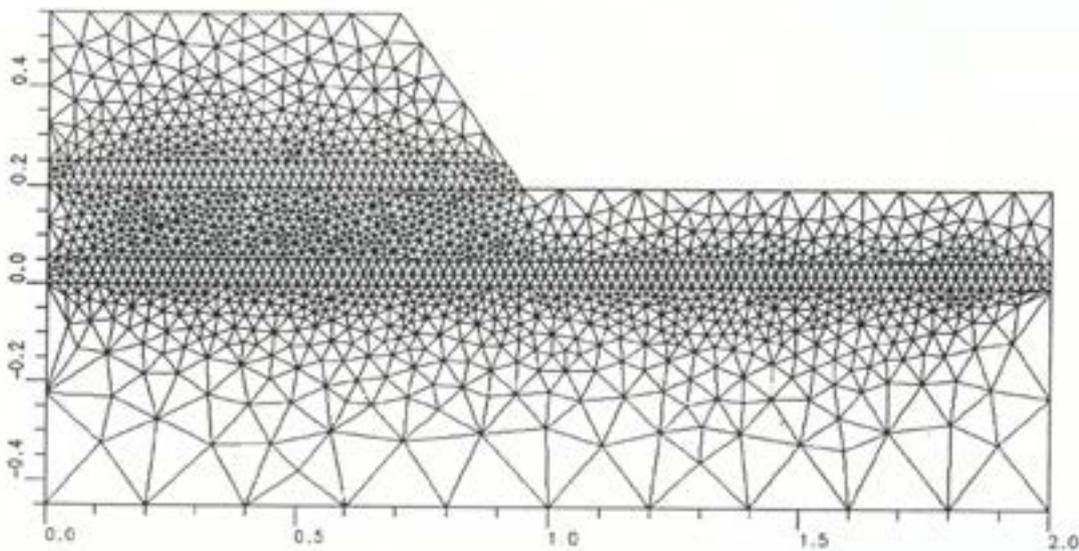


figure 25 : Maillage du transistor

voit ici tout l'intérêt du maillage de Voronoï qui permet d'obtenir des tailles de maillage très réduites tout en simulant finement les zones sensibles.

3.3.2. La simulation du dispositif

La simulation du transistor a été effectuée en statistique de Fermi-Dirac, en incluant les lois de mobilités du GaAs et du GaAlAs et les recombinaisons RSH avec des durées de vie non-radiatives de 10^{-9} seconde pour les électrons et les trous (figures 26 et 27).

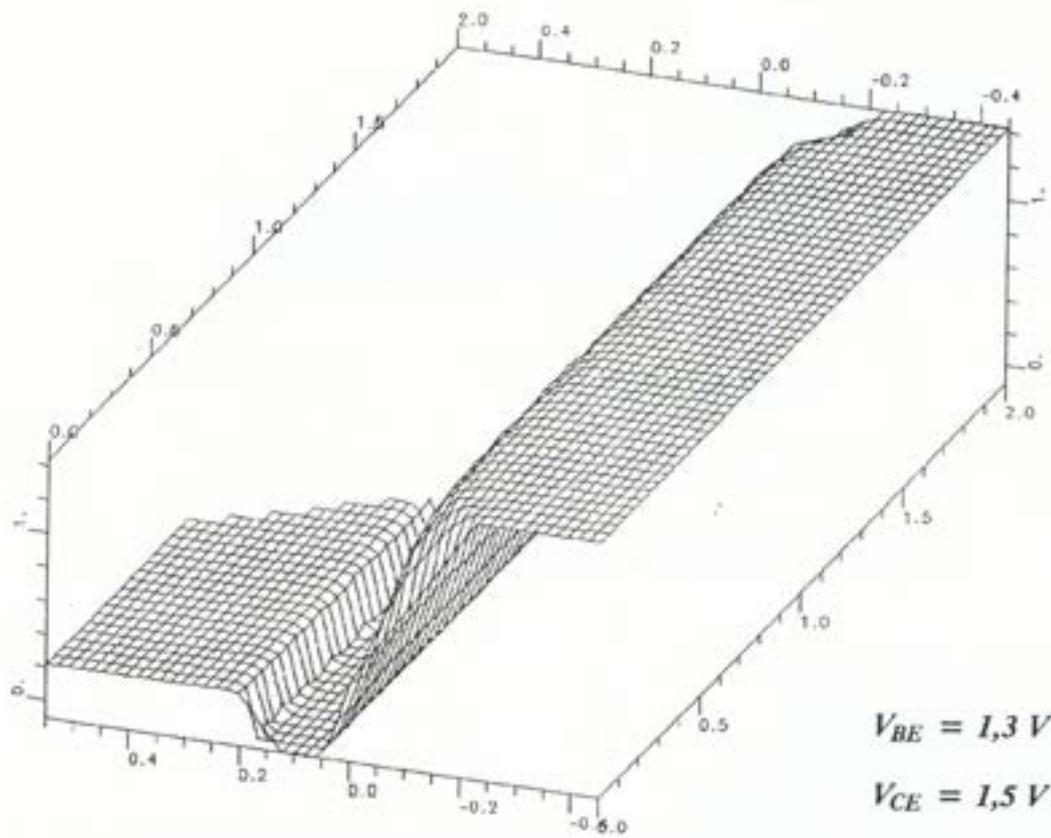


figure 26 : Potentiel électrostatique dans le TBH GaAs/GaAlAs polarisé

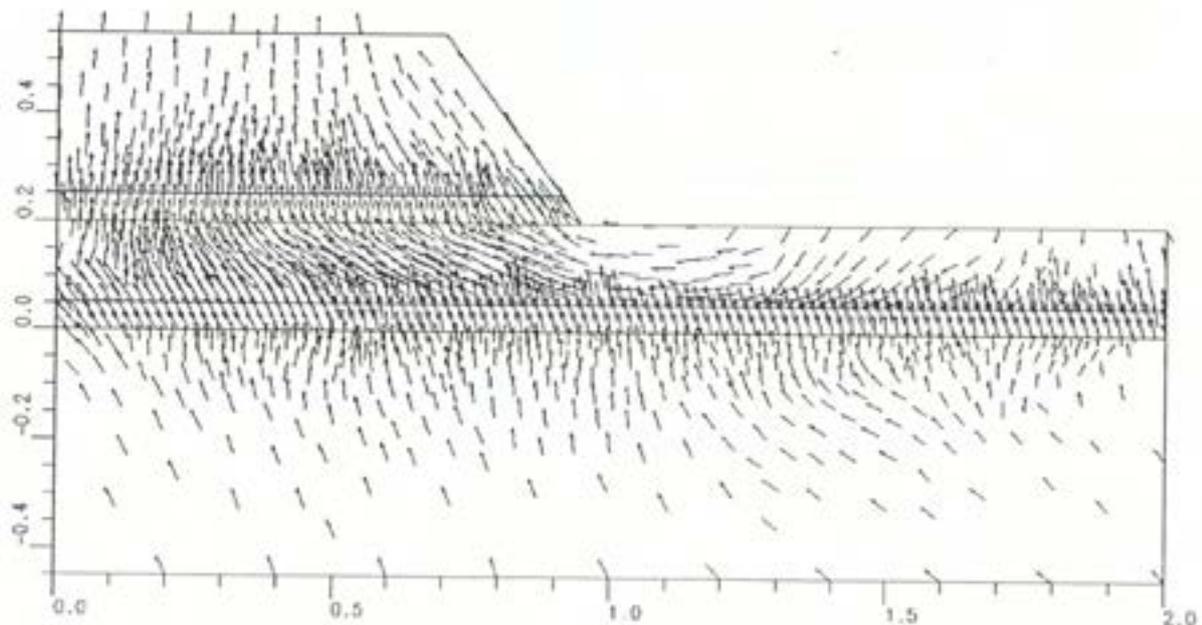


figure 27 : Lignes de courant dans le TBH

On peut donc grâce à ce type de simulation étudier les effets de focalisation ou de défocalisation des lignes de courant dans le transistor (figure 27) et identifier les effets strictement bidimensionnels en comparant des simulations 1D effectuées sur le logiciel *ETHER* et les coupes des résultats 2D obtenus par *DENEB* (figures 28 et 29).

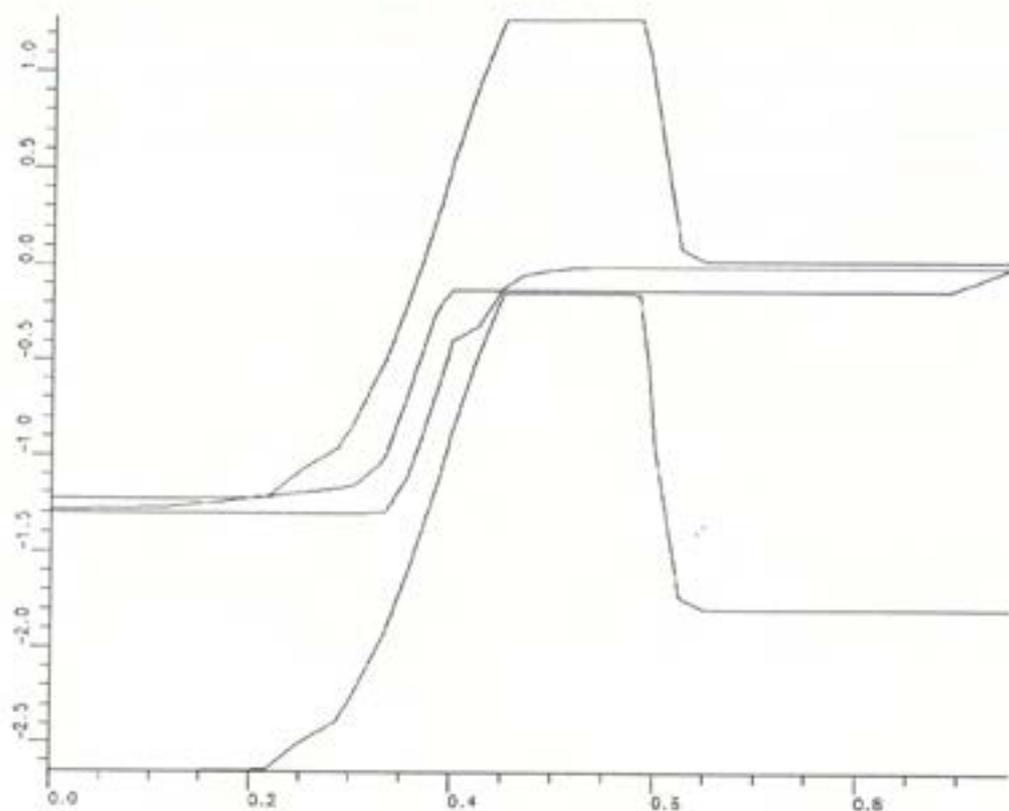


figure 28 : Vue en coupe du schéma de bandes à $V_{BE} = 0,2\text{ V}$, $V_{CE} = 1,5\text{ V}$

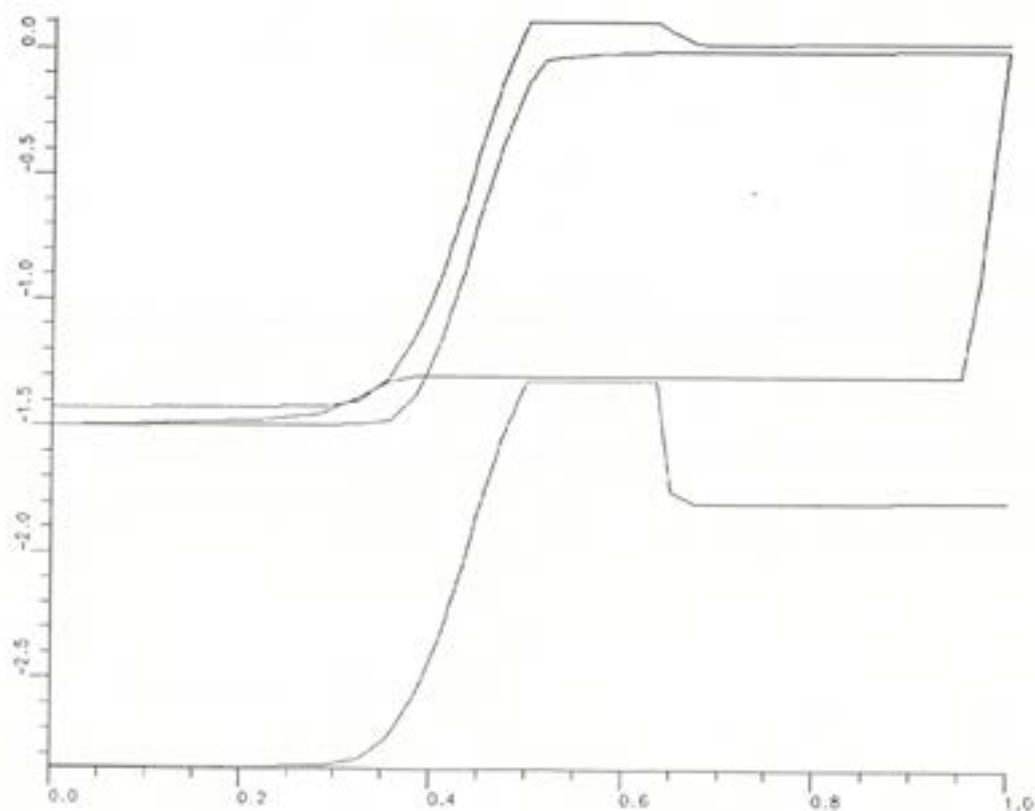


figure 29 : Vue en coupe du schéma de bandes à $V_{BE} = 1,3\text{ V}$, $V_{CE} = 1,5\text{ V}$

REFERENCES

- [1] J.S. Blakemore, "Approximations for Fermi-Dirac Integrals, especially the Function $F_{1/2}(\eta)$ used to Describe Electron Density in a Semiconductor," *Solid State Electron.*, **25**, pp. 1067-1076, (1982).
- [2] P.A. Gough, M.K. Johnson, S.A. Higgins, J.A.G. Slatter and K.R. Wright, "Two-Dimensional Simulation of Power Devices with Circuit Boundary Conditions," *Proceedings of the NASECODE V*, p. 213, ed. by B.T. Browne and J.J.H. Miller, Boole Press, Dublin 1987
- [3] C. Simon, "Simulation numérique de la conduction électronique dans les dispositifs à semiconducteurs : discrétisation et mailleur auto-adaptatif", *Thèse de Doctorat de l'Université Rennes 1*, 1990
- [4] H.K. Gummel, "A Self-Consistent Iterative Scheme for One-Dimensional Steady-State Transistor Calculation," *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. ED-11, pp. 455-465, 1964
- [5] P. Ciarlet, The Finite Element Method for Elliptic Problems, (North-Holland, Amsterdam-New York-Oxford, 1978)
- [6] P.L. George, MODULEF : Génération automatique de maillages, 2^{ème} édition, INRIA éditeur (1988).
- [7] K. Souissi, "Simulation numérique des dispositifs électroniques à hétérojonctions," *Thèse de Doctorat de l'Université Paris VI*, 1989
- [8] K. Hane, "Supercomputing for Process/Device Simulations," *Proceedings of the NASECODE VI*, p. 11, ed. by B.T. Browne and J.J.H. Miller, Boole Press, Dublin 1989
- [9] J. Dangla, M. Filoche, A. Konczykowska and E. Caquot, "Modelling the Parasitic Effects in GaAs/GaAlAs Heterojunction Bipolar Transistor," *Proc. of ESSDERC 90*, (North-Holland).
- [10] C.M. Maziar and M.S. Lundstrom, "On the Estimation of Base Transit Time in AlGaAs/GaAs Bipolar Transistors," *IEEE Electron Device Lett.*, vol. EDL-8, n° 3, pp. 90-92, 1987
- [11] J.L. Lievin and F. Alexandre, "Ultra-High Doping Levels of GaAs with Beryllium by Molecular Beam Epitaxy," *Electron. Lett.*, 1985, 21, pp. 413-414.
- [12] J. Dangla, C. Dubon-Chevallier, M. Filoche and R. Azoulay, "Electrical Characterization of the p-type Dopant Diffusion of Highly Doped AlGaAs/GaAs

Heterojunction Bipolar Transistors grown by MOCVD," *Electron. Lett.*, 1990, 26, pp. 1061-1063

Chapitre 4

Simulation de la propagation optique

1. GENERALITES

Les dispositifs utilisant des guides optiques intégrés prennent une part de plus en plus importante dans l'ensemble des chaînes de liaisons par fibres optiques. Que ce soit le *modulateur électrooptique*, qui par effet Pockel, permet de moduler de manière externe la lumière émise d'une source lumineuse afin de transporter l'information numérique, ou les divers types de *jonctions* (en Y, à plusieurs branches, etc.), l'optique guidée intégrée sert à définir les interconnexions lumineuses et les diverses fonctions de base des circuits intégrés "photoniques" (PIC) ou mixtes électriques-optiques (OEIC) [1].

Plusieurs solutions technologiques sont possibles pour réaliser de tels circuits : le matériau classique de l'optique intégrée, le niobate de lithium, peut être utilisé pour réaliser des circuits passifs avec des diffusions localisée de titane afin de définir les guides [2], d'autres préfèrent le silicium, etc. Si l'on souhaite intégrer sur le même circuit des fonctions d'émission ou de réception de lumière, les matériaux III-V se prêtent très bien à la réalisation à la fois de composants comme les lasers, les photodiodes, les dispositifs électroniques et les guides optiques, même si parfois leur perte est plus importante que dans le niobate de lithium. En utilisant les possibilités de l'épitaxie de matériaux d'indice lumineux différents et des structures ruban, les guides peuvent être aisément réalisés de manière compatible avec les composants actifs.

Bien qu'il soit possible dans certaines conditions d'obtenir des solutions analytiques exactes des champs électriques ou magnétiques propagés [3], les possibilités offertes par la technologie sont telles que des outils de conception deviennent indispensables pour pouvoir calculer a priori, la propagation de la lumière dans de tels guides, qui peuvent avoir des formes de plus en plus compliquées.

Un calcul rigoureux de ces phénomènes de propagation lumineuse dans des guides passe par la résolution à *trois dimensions*, dans des géométries réalistes des équations de Maxwell, qui peuvent, sous certaines hypothèses de modes de propagation se ramener à

l'équation d'Helmholtz. De tels calculs sont excessivement lourds et se prêtent mal à une utilisation dans un environnement de conception.

Il a donc été nécessaire de concevoir et de réaliser un logiciel permettant de répondre en partie aux besoins exprimés par les personnes chargées de la conception de tels circuits utilisant des guides optiques intégrés, grâce à une description aisée des problèmes à traiter, à un algorithme performant de résolution des équations de propagation et enfin à une exploitation facile, orientée utilisateur, autorisant des possibilités graphiques de visualisation des résultats étendues.

Dans ce chapitre nous allons tout d'abord étudier le modèle physique adapté à la simulation rapide des dispositifs d'optique guidée et plus particulièrement les conditions de validité de l'équation d'Helmholtz scalaire pour la modélisation de la propagation. Nous décrirons ensuite les solutions adoptées dans le logiciel *ALCOR* qui permet la simulation de la propagation d'une onde optique dans une structure tridimensionnelle par la méthode du faisceau propagé (*Beam Propagation Method*) couplée avec un calcul d'indice effectif. Ce logiciel sera pour finir appliqué à l'étude et l'optimisation des guides courbes sur substrat niobate de lithium.

2. LE MODELE PHYSIQUE

2.1. Les équations d'Helmholtz vectorielles

Le modèle physique fondamental est bien évidemment le système constitué par les équations de Maxwell dans la matière :

$div \vec{D} = \rho \quad (4.1)$	$rot \vec{H} - \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} = \vec{J} \quad (4.3)$	$\vec{D} = \epsilon \vec{E} \quad (4.5)$
$div \vec{B} = 0 \quad (4.2)$	$rot \vec{E} + \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} = \vec{0} \quad (4.4)$	$\vec{B} = \mu \vec{H} \quad (4.6)$

Les champs \vec{D} et \vec{H} , appelés respectivement déplacement électrique et champ magnétique, sont reliés au champ électrique \vec{E} et à l'induction magnétique \vec{B} par les relations constitutives (4.5) et (4.6), ϵ et μ étant respectivement les tenseurs de permittivité diélectrique et de perméabilité du matériau. Pour la plupart des dispositifs étudiés en optique guidée on peut retenir les hypothèses suivantes :

- il n'y a pas de courants de porteurs dans la structure : $\vec{J} = \vec{0}$
- il n'y a pas de charges accumulées : $\rho = 0$

De plus, si les matériaux traversés par l'onde lumineuse sont permanents, linéaires et isotropes et pour des fréquences inférieures à 10^{14} Hz, les tenseurs ϵ et μ deviennent de simples fonctions scalaires dépendant uniquement de la position, donc de la géométrie de la structure :

$\vec{D} = \epsilon \vec{E}$	(4.7)	et	$\vec{H} = \frac{1}{\mu} \vec{B}$	(4.8)
------------------------------	-------	----	-----------------------------------	-------

Afin d'obtenir des équations découplées pour les champs électrique et magnétique, on dérive par rapport au temps les équations (4.3) et (4.4), ce qui donne :

$$\begin{aligned} \operatorname{rot} \frac{\partial \vec{H}}{\partial t} - \frac{\partial^2 \vec{D}}{\partial t^2} &= \vec{0} \\ \operatorname{rot} \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} + \frac{\partial^2 \vec{B}}{\partial t^2} &= \vec{0} \end{aligned} \quad \text{avec} \quad \begin{aligned} \frac{\partial \vec{H}}{\partial t} &= -\frac{1}{\mu} \operatorname{rot} \vec{E} \\ \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} &= \frac{1}{\epsilon} \operatorname{rot} \vec{H} \end{aligned}$$

On suppose enfin que les champs oscillent sinusoïdalement dans le temps avec une pulsation ω (c'est-à-dire en suivant une loi en $\exp(-i\omega t)$). Si on s'intéresse désormais aux parties spatiales des champs complexes, on aboutit aux équations vectorielles de propagation d'Helmholtz (ou équations des ondes) :

$$\operatorname{rot} \left(\frac{1}{\mu} \operatorname{rot} \vec{E} \right) - \omega^2 \epsilon \vec{E} = \vec{0} \quad (4.9)$$

$$\operatorname{rot} \left(\frac{1}{\epsilon} \operatorname{rot} \vec{H} \right) - \omega^2 \mu \vec{H} = \vec{0} \quad (4.10)$$

2.2. Les équations d'Helmholtz scalaires

Nous allons examiner maintenant dans quelles conditions ces équations peuvent être ramenées à des équations scalaires découplées pour chaque composante des champs électrique et magnétique. La première étape de cette étude va consister à projeter ces équations vectorielles suivant l'axe Oz et le plan orthogonal à cette direction afin d'obtenir les équations générales de propagation dans un milieu hétérogène.

Formulaire : $\operatorname{rot} (\lambda \vec{U}) = \lambda \operatorname{rot} \vec{U} + \vec{\nabla} \lambda \times \vec{U}$
 $\operatorname{rot} (\operatorname{rot} \vec{U}) = \vec{\nabla} (\operatorname{div} \vec{U}) - \Delta \vec{U}$

L'application du formulaire donne pour les deux équations :

$$\begin{aligned} \frac{1}{\mu} \operatorname{rot} (\operatorname{rot} \vec{E}) + \vec{\nabla} \frac{1}{\mu} \times \operatorname{rot} \vec{E} - \omega^2 \epsilon \vec{E} &= \vec{0} \\ \frac{1}{\epsilon} \operatorname{rot} (\operatorname{rot} \vec{H}) + \vec{\nabla} \frac{1}{\epsilon} \times \operatorname{rot} \vec{H} - \omega^2 \mu \vec{H} &= \vec{0} \end{aligned}$$

On en déduit donc :

$$\begin{aligned} \text{rot}(\text{rot } \vec{E}) - k^2 n^2 \vec{E} - \frac{\vec{\nabla} \mu}{\mu} \times \text{rot } \vec{E} &= \vec{0} \\ \text{rot}(\text{rot } \vec{H}) - k^2 n^2 \vec{H} - \frac{\vec{\nabla} \epsilon}{\epsilon} \times \text{rot } \vec{H} &= \vec{0} \end{aligned} \quad \text{avec} \quad \begin{aligned} k &= \frac{\omega}{c} \\ n^2 &= \epsilon \mu c^2 \end{aligned}$$

Ou encore :

$$\begin{aligned} \left[\vec{\nabla}(\text{div} \vec{E}) - \Delta \vec{E} \right] - \frac{\vec{\nabla} \mu}{\mu} \times \text{rot } \vec{E} - k^2 n^2 \vec{E} &= \vec{0} \\ \left[\vec{\nabla}(\text{div} \vec{H}) - \Delta \vec{H} \right] - \frac{\vec{\nabla} \epsilon}{\epsilon} \times \text{rot } \vec{H} - k^2 n^2 \vec{H} &= \vec{0} \end{aligned}$$

et donc :

$$\begin{aligned} \Delta \vec{E} + k^2 n^2 \vec{E} - \vec{\nabla}(\text{div } \vec{E}) + \frac{\vec{\nabla} \mu}{\mu} \times \text{rot } \vec{E} &= \vec{0} \\ \Delta \vec{H} + k^2 n^2 \vec{H} - \vec{\nabla}(\text{div } \vec{H}) + \frac{\vec{\nabla} \epsilon}{\epsilon} \times \text{rot } \vec{H} &= \vec{0} \end{aligned}$$

Comme par ailleurs :

$$\begin{aligned} \text{div } \vec{E} &= \text{div} \left(\frac{1}{\epsilon} \vec{D} \right) = \vec{\nabla} \frac{1}{\epsilon} \cdot \vec{D} + \frac{1}{\epsilon} \text{div } \vec{D} = -\frac{\vec{\nabla} \epsilon}{\epsilon} \cdot \vec{E} \\ \text{div } \vec{H} &= \text{div} \left(\frac{1}{\mu} \vec{B} \right) = \vec{\nabla} \frac{1}{\mu} \cdot \vec{B} + \frac{1}{\mu} \text{div } \vec{B} = -\frac{\vec{\nabla} \mu}{\mu} \cdot \vec{H} \end{aligned}$$

On en déduit :

$$\Delta \vec{E} + k^2 n^2 \vec{E} + \vec{\nabla} \left(\frac{\vec{\nabla} \epsilon}{\epsilon} \cdot \vec{E} \right) + \frac{\vec{\nabla} \mu}{\mu} \times \text{rot } \vec{E} = \vec{0} \quad (4.11)$$

$$\Delta \vec{H} + k^2 n^2 \vec{H} + \vec{\nabla} \left(\frac{\vec{\nabla} \mu}{\mu} \cdot \vec{H} \right) + \frac{\vec{\nabla} \epsilon}{\epsilon} \times \text{rot } \vec{H} = \vec{0} \quad (4.12)$$

On va maintenant supposer que la perméabilité μ est constante ce qui est très souvent le cas pour les matériaux utilisés dans les composants optoélectroniques :

On aboutit à :

$$\Delta \vec{E} + k^2 n^2 \vec{E} + \vec{\nabla} \left(\frac{\vec{\nabla} \epsilon}{\epsilon} \cdot \vec{E} \right) = \vec{0} \quad (4.13)$$

$$\Delta \vec{B} + k^2 n^2 \vec{B} + \frac{\vec{\nabla} \epsilon}{\epsilon} \times \text{rot } \vec{B} = \vec{0} \quad (4.14)$$

Ces équations ont été obtenues sans aucune approximation sur la direction et le type de la propagation, ni sur la forme de la fonction $\epsilon(x,y,z)$. On va maintenant les projeter suivant l'axe Oz et le plan transverse afin de pouvoir étudier divers modes de propagation.

Formulaire : si on pose $\vec{U} = \vec{U}_T + U_z \vec{k}$ et $rot_T \vec{U}_T = \frac{\partial U_y}{\partial x} - \frac{\partial U_x}{\partial y}$

$$\text{alors } \boxed{rot \vec{U} = \vec{k} \times \left(\frac{\partial \vec{U}_T}{\partial z} - \vec{\nabla}_T U_z \right) + (rot_T \vec{U}_T) \vec{k}}$$

\vec{k} est le vecteur directeur orienté suivant l'axe Oz

On définit de plus les opérateurs différentiels transverses suivants :

$$\vec{\nabla}_T = \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial y} \end{pmatrix} \quad \Delta_T = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}$$

En projetant (grâce au formulaire) les équations obtenues précédemment, on aboutit au système suivant :

$$\boxed{\begin{aligned} \Delta \vec{E}_T + k^2 n^2 \vec{E}_T + \vec{\nabla}_T \left(\frac{\vec{\nabla}_T \epsilon}{\epsilon} \cdot \vec{E}_T \right) &= -\vec{\nabla}_T \left(\frac{1}{\epsilon} \frac{\partial \epsilon}{\partial z} E_z \right) \\ \Delta E_z + k^2 n^2 E_z + \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{1}{\epsilon} \frac{\partial \epsilon}{\partial z} E_z \right) &= -\frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\vec{\nabla}_T \epsilon}{\epsilon} \cdot \vec{E}_T \right) \end{aligned}}$$

$$\boxed{\begin{aligned} \Delta \vec{B}_T + k^2 n^2 \vec{B}_T + \frac{1}{\epsilon} \frac{\partial \epsilon}{\partial z} \frac{\partial \vec{B}_T}{\partial z} + (rot \vec{B}_T) \left(\frac{\vec{\nabla}_T \epsilon}{\epsilon} \times \vec{k} \right) &= -\frac{1}{\epsilon} \frac{\partial \epsilon}{\partial z} \vec{\nabla}_T B_z \\ \Delta B_z + k^2 n^2 B_z - \frac{\vec{\nabla}_T \epsilon}{\epsilon} \cdot \vec{\nabla}_T B_z &= -\frac{\vec{\nabla}_T \epsilon}{\epsilon} \cdot \frac{\partial \vec{B}_T}{\partial z} \end{aligned}}$$

Ce sont donc les équations vérifiées par une onde électromagnétique quelconque se propageant dans un milieu de permittivité diélectrique quelconque et de perméabilité constante. Si on ne suppose aucune hypothèse sur la direction de propagation de l'onde ni sur la forme de la fonction $\epsilon(x,y,z)$, on doit alors résoudre un problème vectoriel formé de deux fois trois équations scalaires où les champs électrique et magnétique sont découplés. Ce cadre de résolution est bien souvent trop général pour les mode de fonctionnement courants des dispositifs optoélectroniques. Nous allons maintenant nous intéresser

aux cas les plus souvent rencontrés dans le cadre de l'optique guidée c'est-à-dire une propagation paraxiale en mode TE ou TM.

2.3. Equations des modes TE et TM dans le cas d'une propagation paraxiale

Les modes TE (transverse électrique) et TM (transverse magnétique) sont des modes de propagation particuliers dans lesquels la composante longitudinale d'un des champs est nulle (respectivement $E_z = 0$ et $B_z = 0$). Les équations obtenues précédemment sont découplées suivant \vec{E} et \vec{B} ce qui ne permet pas de traduire complètement les propriétés de tels modes. Afin d'utiliser complètement les hypothèses, on repart des équations de Maxwell (4.3) et (4.4) qui peuvent s'écrire en mode fréquentiel sous la forme :

$$\text{rot } \vec{B} = -i\omega\epsilon\mu \vec{E} \quad (4.15)$$

$$\text{rot } \vec{E} = i\omega \vec{B} \quad (4.16)$$

On s'intéresse au cas où l'onde électromagnétique se propage dans une direction privilégiée : on suppose que la structure dans laquelle se propage l'onde est paraxiale, c'est-à-dire qu'elle se modifie très lentement dans la direction Oz . Donc si on projette les équations (4.15) et (4.16) suivant l'axe Oz et le plan transverse, on obtient :

$$\begin{aligned} \text{rot}_T \vec{B}_T &= -i\omega\epsilon\mu E_z & \text{---} & & \text{rot}_T \vec{E}_T &= -i\omega B_z \\ \vec{k} \times \left(\frac{\partial \vec{B}_T}{\partial z} - \vec{\nabla}_T B_z \right) &= -i\omega\epsilon\mu \vec{E}_T & & & \vec{k} \times \left(\frac{\partial \vec{E}_T}{\partial z} - \vec{\nabla}_T E_z \right) &= i\omega \vec{B}_T \end{aligned}$$

Etant donné que la propagation est paraxiale, on va supposer que les champs \vec{E} et \vec{B} ont une dépendance suivant Oz proportionnelle à $\exp(i\gamma z)$ et on ne s'intéressera dorénavant qu'à la dépendance transverse. Les dérivées par rapport à z deviennent des multiplications par $i\gamma$. En fait les profils des champs peuvent varier suivant Oz mais ces variations

sont lentes devant γ^{-1} et donc cette hypothèse reste valable :

$$\begin{aligned} \text{rot}_T \vec{\mathbf{B}}_T &= -i\omega\epsilon\mu E_z & \text{rot}_T \vec{\mathbf{E}}_T &= -i\omega B_z \\ \vec{\mathbf{k}} \times (i\gamma\vec{\mathbf{B}}_T - \vec{\nabla}_T B_z) &= -i\omega\epsilon\mu \vec{\mathbf{E}}_T & \vec{\mathbf{k}} \times (i\gamma\vec{\mathbf{E}}_T - \vec{\nabla}_T E_z) &= i\omega \vec{\mathbf{B}}_T \end{aligned}$$

On va maintenant en déduire une expression des champs transverses $\vec{\mathbf{E}}_T$ et $\vec{\mathbf{B}}_T$ uniquement en fonction des valeurs des champs longitudinaux E_z et B_z . Pour cela on multiplie vectoriellement à gauche par $\vec{\mathbf{k}}$ les deux équations du bas :

$$\begin{aligned} \text{rot}_T \vec{\mathbf{B}}_T &= -i\omega\epsilon\mu E_z & \text{rot}_T \vec{\mathbf{E}}_T &= -i\omega B_z \\ i\gamma\vec{\mathbf{B}}_T - \vec{\nabla}_T B_z &= \vec{\mathbf{k}} \times i\omega\epsilon\mu \vec{\mathbf{E}}_T & i\gamma\vec{\mathbf{E}}_T - \vec{\nabla}_T E_z &= -\vec{\mathbf{k}} \times i\omega \vec{\mathbf{B}}_T \end{aligned}$$

On en déduit : $i\gamma\vec{\mathbf{B}}_T - \vec{\nabla}_T B_z = i\omega\epsilon\mu \frac{1}{i\gamma} [i\omega \vec{\mathbf{B}}_T + \vec{\mathbf{k}} \times \vec{\nabla}_T E_z]$

Soit encore :

$$i\left(\gamma - \frac{\omega^2\epsilon\mu}{\gamma}\right) \vec{\mathbf{B}}_T = \vec{\nabla}_T B_z + \frac{\omega\epsilon\mu}{\gamma} \vec{\mathbf{k}} \times \vec{\nabla}_T E_z$$

De même pour $\vec{\mathbf{E}}_T$

$$i\left(\gamma - \frac{\omega^2\epsilon\mu}{\gamma}\right) \vec{\mathbf{E}}_T = \vec{\nabla}_T E_z - \frac{\omega}{\gamma} \vec{\mathbf{k}} \times \vec{\nabla}_T B_z$$

On s'intéresse à deux modes particuliers de propagation : les modes TE et TM (transverse électrique et transverse magnétique) qui aboutissent aux systèmes suivants :

mode TE :

$$\begin{aligned} i\left(\gamma - \frac{\omega^2\epsilon\mu}{\gamma}\right) \vec{\mathbf{B}}_T &= \vec{\nabla}_T B_z \\ i\left(\gamma - \frac{\omega^2\epsilon\mu}{\gamma}\right) \vec{\mathbf{E}}_T &= \frac{\omega}{\gamma} \vec{\mathbf{k}} \times \vec{\nabla}_T B_z \end{aligned}$$

mode TM :

$$\begin{aligned} i\left(\gamma - \frac{\omega^2\epsilon\mu}{\gamma}\right) \vec{\mathbf{B}}_T &= \frac{\omega\epsilon\mu}{\gamma} \vec{\mathbf{k}} \times \vec{\nabla}_T E_z \\ i\left(\gamma - \frac{\omega^2\epsilon\mu}{\gamma}\right) \vec{\mathbf{E}}_T &= \vec{\nabla}_T E_z \end{aligned}$$

On remarque donc qu'en mode TE (resp. TM) toutes les composantes des champs électriques et magnétiques peuvent être déterminées uniquement par la connaissance de B_z (resp. E_z). On déduit donc de ces systèmes les équations régissant le comportement de B_z ou E_z :

$$\text{mode TE :} \quad \text{rot}_T \left[i\left(\gamma - \frac{\omega^2 \epsilon \mu}{\gamma}\right) \vec{E}_T \right] = -\frac{\omega}{\gamma} \text{rot}_T (\vec{k} \times \vec{\nabla}_T B_z)$$

$$\text{donc} \quad \Delta_T B_z + (\omega^2 \epsilon \mu - \gamma^2) B_z - i\omega \mu \vec{\nabla}_T \epsilon \cdot \vec{E}_T = 0$$

$$\text{Or :} \quad i\left(\gamma - \frac{\omega^2 \epsilon \mu}{\gamma}\right) \vec{E}_T = -\frac{\omega}{\gamma} \vec{k} \times \vec{\nabla}_T B_z$$

$$\text{donc :} \quad \Delta_T B_z + (\omega^2 \epsilon \mu - \gamma^2) B_z - \frac{\omega^2 \epsilon \mu}{(\gamma^2 - \omega^2 \epsilon \mu)} \frac{\vec{\nabla}_T \epsilon}{\epsilon} \cdot \vec{\nabla}_T B_z = 0$$

$$\text{mode TM :} \quad \text{rot}_T \left[\frac{i\gamma}{\omega \epsilon \mu} \left(\gamma - \frac{\omega^2 \epsilon \mu}{\gamma}\right) \vec{B}_T \right] = \text{rot}_T (\vec{k} \times \vec{\nabla}_T E_z)$$

$$\text{donc} \quad \Delta_T E_z + (\omega^2 \epsilon \mu - \gamma^2) E_z + \frac{i\gamma^2}{\omega \mu \epsilon^2} \vec{\nabla}_T \epsilon \cdot \vec{B}_T = 0$$

$$\text{Or :} \quad i\left(\gamma - \frac{\omega^2 \epsilon \mu}{\gamma}\right) \vec{B}_T = \frac{\omega \epsilon \mu}{\gamma} \vec{k} \times \vec{\nabla}_T E_z$$

$$\text{donc :} \quad \Delta_T E_z + (\omega^2 \epsilon \mu - \gamma^2) E_z - \frac{\gamma^2}{(\gamma^2 - \omega^2 \epsilon \mu)} \frac{\vec{\nabla}_T \epsilon}{\epsilon} \cdot \vec{\nabla}_T E_z = 0$$

Soit encore en tenant à nouveau compte de la dépendance suivant Oz :

$$\text{mode TE :} \quad \Delta B_z + k^2 n^2 B_z - \frac{k^2 n^2}{(\gamma^2 - k^2 n^2)} \frac{\vec{\nabla}_T \epsilon}{\epsilon} \cdot \vec{\nabla}_T B_z = 0 \quad (4.17)$$

$$\text{mode TM :} \quad \Delta E_z + k^2 n^2 E_z - \frac{\gamma^2}{(\gamma^2 - k^2 n^2)} \frac{\vec{\nabla}_T \epsilon}{\epsilon} \cdot \vec{\nabla}_T E_z = 0 \quad (4.18)$$

En combinant ces résultats aux équations trouvées précédemment dans le cas général, on obtient les équations régissant le comportement des champs transverses :

$$\text{mode TE : } \Delta \vec{E}_T + k^2 n^2 \vec{E}_T = \vec{0} \quad (4.19)$$

$$\Delta \vec{B}_T + k^2 n^2 \vec{B}_T = \vec{0} \quad (4.20)$$

$$\text{mode TM : } \Delta \vec{E}_T + k^2 n^2 \vec{E}_T + \vec{\nabla}_T \left(\frac{\vec{\nabla}_T \epsilon}{\epsilon} \cdot \vec{E}_T \right) = \vec{0} \quad (4.21)$$

$$\Delta \vec{B}_T + k^2 n^2 \vec{B}_T + (\text{rot}_T \vec{B}_T) \cdot \left(\frac{\vec{\nabla}_T \epsilon}{\epsilon} \times \vec{k} \right) = \vec{0} \quad (4.22)$$

On remarque donc que les équations des champs longitudinaux obtenues pour les modes TE et TM sont très proches l'une de l'autre. De plus elles ne font pas intervenir la composante longitudinale du gradient de permittivité ce qui est normal car l'hypothèse de paraxialité (champs proportionnels à $\exp(i\gamma z)$) supposait implicitement l'invariance de ϵ suivant Oz . Enfin on retrouve bien les équations classiques dans le cas des milieux homogènes.

En revanche les équations des champs transverses sont notablement différentes ; en effet, en mode TE, les champs \vec{E}_T et \vec{B}_T obéissent à l'équation de Helmholtz scalaire alors que le mode TM fait apparaître des termes supplémentaires comportant des dérivées du premier ordre suivant les champs.

2.4. Conclusion

La propagation des composantes transverses du champ électrique ou magnétique en mode TE obéit donc exactement à l'équation d'Helmholtz scalaire, même dans des structures à indice variable. Les seules approximations seront donc apportées par les méthodes de résolution mathématique et numérique.

La résolution des équations de propagation pour les composantes longitudinales (mode TE ou TM), ainsi que celle des équations pour les composantes transverses en mode TM supposent un terme supplémentaire. Néanmoins on peut utiliser l'équation

d'Helmholtz scalaire pour résoudre ces problèmes en première approximation dans les composants où les variations d'indice sont faibles, tant que les erreurs induites sont du même ordre de grandeur que celles provenant de la méthode de résolution.

3. RESOLUTION DE L'EQUATION D'HELMHOLTZ SCALAIRE

Nous allons désormais nous intéresser à l'équation d'Helmholtz scalaire et aux méthodes permettant sa résolution numérique rapide ainsi que la description des structures tridimensionnelles simulées.

3.1. Introduction

On ne considère qu'une seule composante ϕ du champ électrique ou magnétique. Celle-ci obéit, par hypothèse, à l'équation d'Helmholtz scalaire :

$$\Delta\phi + k_0^2 n^2\phi = 0 \quad (4.23) \quad k_0 = \frac{\omega}{c}$$

$n(x,y,z)$ est l'indice réfractif dépendant de la géométrie de la structure considérée.

Cette équation est linéaire en ϕ et sa résolution ne présente pas de problèmes théoriques majeurs. Cependant les structures guidantes classiques ont des dimensions latérales de quelques dizaines de microns et des dimensions longitudinales de l'ordre du millimètre. La nécessité de résoudre cette équation avec des pas de maillage de l'ordre des longueurs d'onde propagée, c'est-à-dire du micron, imposerait alors des tailles de maillage prohibitives dans le cadre d'une résolution en éléments finis directe et incompatible avec une utilisation interactive orientée CAO.

De plus on ne connaît généralement que la valeur du champ à l'entrée du dispositif; ceci constitue une condition aux limites insuffisante pour résoudre de façon univoque l'équation des ondes qui est une équation différentielle du deuxième ordre. Pour palier à ces difficultés, nous avons utilisé la "Beam Propagation Method"[4], qui est une méthode de résolution explicite de l'équation d'Helmholtz sous certaines hypothèses. Une de ces hypothèses suppose la faible variation de l'indice $n(x,y,z)$ dans le milieu traversé par l'onde, ce qui est très rarement le cas pour des dispositifs d'optique intégrée qui sont au contact de l'air.

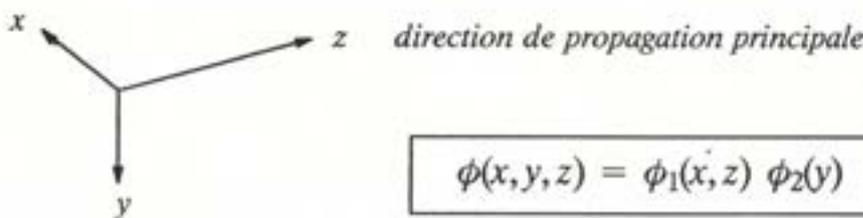
L'utilisation de la B.P.M. impose donc une manipulation de l'équation d'Helmholtz initiale afin de se ramener à un profil d'indice "variant peu" autour de sa valeur moyenne.

3.2. La méthode de l'indice effectif

3.2.1. Le principe

Cette méthode consiste, de façon générale, à découpler une ou plusieurs dimensions dans l'équation d'Helmholtz afin d'aboutir à des équations de plus faible dimensionnalité spatiale.

Dans le cas qui nous intéresse, nous allons découpler la dimension transverse verticale des deux autres directions. Si on pose que l'axe Oz est notre axe de propagation privilégiée, ce découplage peut s'exprimer simplement sous la forme suivante : le profil de l'onde propagée est le produit du mode vertical $\phi_2(y)$ par une fonction bidimensionnelle $\phi_1(x,z)$.



La méthode de l'indice effectif impose alors de trouver un profil d'indice effectif bidimensionnel $n_{eff}(x,z)$ de telle façon que :

$$\begin{cases} \Delta_{x,z} \phi_1 + k_0^2 n_{eff}^2(x,z) \phi_1 = 0 & (4.24) \\ \phi_2'' + k_0^2 n_{eff}^2(x,y,z) \phi_2 = k_0^2 n_{eff}^2(x,z) \phi_2 & (4.25) \end{cases}$$

On reconnaît dans ce système une équation d'Helmholtz à deux dimensions (4.24) où l'indice réfractif est remplacé par l'indice effectif calculé. La deuxième équation est une équation différentielle suivant y où $k_0^2 n_{eff}^2$ joue le rôle de la valeur propre recherchée, indiquée par x et z.

On peut supposer très raisonnablement que le mode suivant est essentiellement le mode fondamental ce qui revient à chercher la plus forte valeur pour n_{eff} dans l'équation (4.25). On peut facilement constater enfin que la solution ϕ élaborée à partir de ϕ_1 et ϕ_2 vérifie l'équation d'Helmholtz tridimensionnelle.

Si ces deux équations sont résolues, on a alors :

$$\begin{aligned} \Delta\phi + k_0^2 n^2\phi &= \Delta(\phi_1\phi_2) + k_0^2 n^2 \phi_1\phi_2 - k_0^2 n_{eff}^2 \phi_1\phi_2 + k_0^2 n_{eff}^2 \phi_1\phi_2 \\ &= \Delta_{x,z}\phi_1\phi_2 + \phi_1\phi_2'' + k_0^2 n^2 \phi_1\phi_2 - k_0^2 n_{eff}^2 \phi_1\phi_2 + k_0^2 n_{eff}^2 \phi_1\phi_2 \\ &= \phi_2[\Delta_{x,z}\phi_1 + k_0^2 n_{eff}^2 \phi_1] + \phi_1[\phi_2'' + k_0^2 n^2(x,y,z) \phi_2 - k_0^2 n_{eff}^2 \phi_2] = 0 \end{aligned}$$

La résolution de l'équation d'Helmholtz tridimensionnelle va se dérouler en deux étapes :

- *résolution en chaque point du plan (x,z) de l'équation à la valeur propre n_{eff} d'où obtention d'un profil d'indice effectif $n_{eff}(x,z)$.*
- *résolution de l'équation d'Helmholtz bidimensionnelle en utilisant le profil $n_{eff}(x,z)$.*

Remarque : Le mode suivant y , ϕ_2 , dépend évidemment de la position (x,z) dans le plan mais l'hypothèse de séparabilité de la fonction ϕ implique en fait que les variations de la structure suivant y en fonction de (x,z) ne se répercutent donc principalement que sur l'indice effectif $n_{eff}(x,z)$.

3.2.2. La description suivant Oy de la structure

Nous avons donc vu que pour une structure guidante quelconque, la transformation de l'équation d'Helmholtz tridimensionnelle en une équation bidimensionnelle nécessite la résolution pour tout point du plan (x,z) d'une équation différentielle aux valeurs propres. Numériquement et pour un maillage classique, cela revient à la résolution de plusieurs milliers voire dizaine de milliers d'équations différentielles aboutissant à des temps de calcul énormes.

Il faut donc décrire la structure de façon à se limiter à quelques équations différentielles pour le calcul des modes de propagation suivant Oy . La description géométrique retenue considère chaque structure tridimensionnelle comme un assemblage de "zones" bidimensionnelles suivant (x,z) ayant chacune un profil constant suivant la direction y (figure 1).

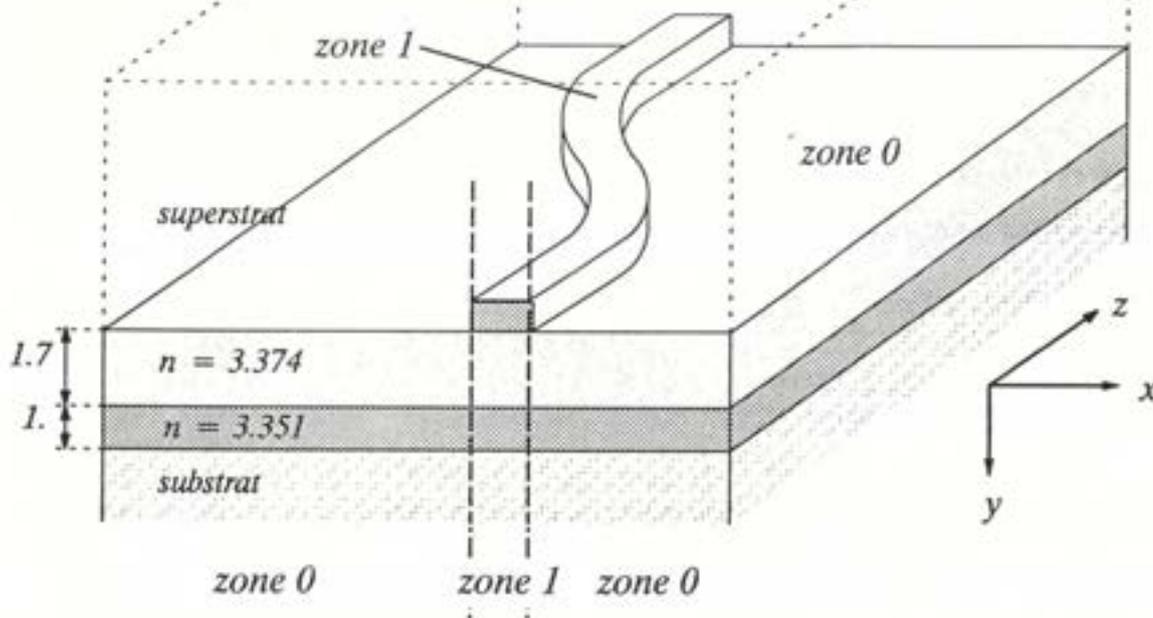


figure 1 : Découpage d'une structure tridimensionnelle en zones 2D

Le calcul de l'indice effectif s'effectue alors une seule fois pour chaque zone et le profil d'indice effectif dans toute la structure s'obtient donc très simplement en affectant à chaque point (x,z) la valeur de l'indice effectif de la zone à laquelle il appartient.

Chaque zone est décrite suivant y comme une succession de couches uniformes dont les paramètres principaux sont l'épaisseur et l'indice réfractif complexe. La structure est supposée comprise entre deux couches de longueur infinie : le substrat au-dessous et le superstrat au-dessus (généralement de l'air).

La méthode générale employée dans le logiciel *ALCOR* consiste à décrire pour chaque zone bidimensionnelle l'empilement des couches la constituant (figure 2), puis à calculer l'indice effectif de chaque zone par une méthode multicouches, en fonction de la

```

titre  structure en S
couche zonenum=0 reeli=3.374 epaisg=1.7
couche reeli=3.351 epaisg=1.

couche zonenum=1 reeli=3.351 epaisg=1.
couche reeli=3.374 epaisg=1.7
couche reeli=3.351 epaisg=1.

```

figure 2 : Fichier de description des zones suivant l'axe y

longueur d'onde et du type de mode propagé. Ces indices effectifs sont ensuite stockés dans la base de données et serviront à remplir le tableau d'indice effectif pendant la simulation de la propagation.

3.2.2.1. La prise en compte des mésas

Il est également possible de prendre en compte dans le logiciel *ALCOR* des guides non-abrupts présentant donc des "mésas" (figure 3). Un tel guide est donné par deux zo-

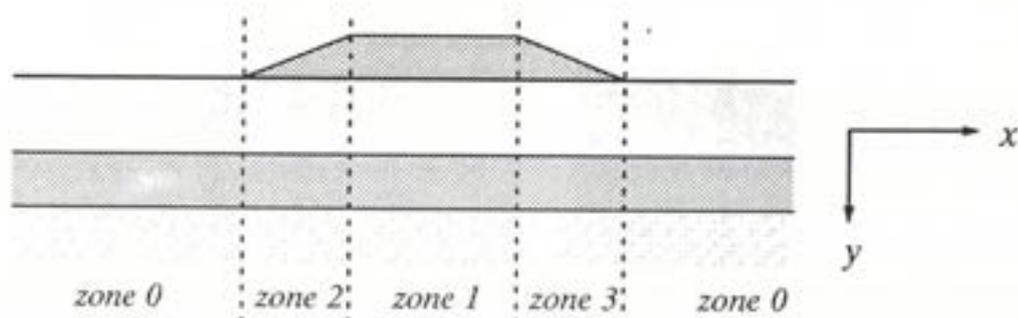


figure 3 : Guide d'ondes graduel

nes constantes (comme précédemment) et deux zones de transition définies par leur structure à gauche et leur structure à droite. L'indice effectif est calculé de chaque côté de la zone de transition puis interpolé suivant une fonction choisie par l'utilisateur (linéaire, parabolique, etc...). Le fichier de description de ces zones est donné dans la figure 4.

```

titre structure en S

couche zonenum=0 reeli=3.374 epaisg=1.7
couche reeli=3.351 epaisg=1.

couche zonenum=1 reeli=3.351 epaisg=1.
couche reeli=3.374 epaisg=1.7
couche reeli=3.351 epaisg=1.

couche zonenum=2 reeli=3.351 epaisg=0. epaisd=1.
couche reeli=3.374 epaisg=1.7
couche reeli=3.351 epaisg=1.

couche zonenum=3 reeli=3.351 epaisg=1. epaisd=0.
couche reeli=3.374 epaisg=1.7
couche reeli=3.351 epaisg=1.

```

figure 4 : Fichier de description de zones graduelles suivant l'axe y

3.2.3. Résolution multicouches de l'indice effectif

L'obtention d'un profil d'indice effectif $n_{eff}(x,z)$ passe donc par la résolution de l'équation aux valeurs propres :

$$\phi''(y) + k_0^2 n^2(x,y,z) \phi(y) = k_0^2 n_{eff}^2(x,z) \phi(y)$$

Ceci est une équation différentielle en y , indiquée par les variables continues x et z . Pour chaque point du plan (x,z) , cette équation possède plusieurs solutions, correspondant chacune à une valeur propre $k_0^2 n_{eff}^2(x,y,z)$ et qui représentent chacune un mode qui peut être propagé dans la structure. L'hypothèse raisonnable, considérant que seul le mode fondamental est propagé de façon notable, nous conduit à sélectionner la valeur la plus forte pour n_{eff} .

Une fois ce profil $n_{eff}(x,z)$ obtenu dans tout le plan, la résolution de l'équation d'Helmholtz se réduit à la résolution d'une équation identique mais bidimensionnelle.

Comme nous l'avons vu précédemment, ce profil s'obtient par résolution d'une équation différentielle aux valeurs propres pour chaque point (x,z) . La description de la structure tridimensionnelle devra donc fournir une discrétisation du plan (x,z) permettant un nombre très restreint de résolutions. En effet, vues les tailles et les complexités des dispositifs, une résolution point par point serait extrêmement coûteuse en temps de calcul et rendrait le logiciel difficilement utilisable pour des applications de CAO.

Une fois la structure unidimensionnelle le long de Oy décrite, nous pouvons calculer l'indice effectif en écrivant les conditions que celui-ci doit satisfaire. Pour cela, commençons par examiner les solutions de continuité du champ $\phi(y)$ à l'interface de deux couches uniformes. Dans chacune des deux couches, le champ doit vérifier :

$$\begin{aligned}\phi'' + k_0^2 (n_1^2 - n_{eff}^2) \phi &= 0 && \text{dans la couche 1} \\ \phi'' + k_0^2 (n_2^2 - n_{eff}^2) \phi &= 0 && \text{dans la couche 2}\end{aligned}$$

Les solutions de ces deux équations sont bien connues et peuvent s'écrire :

$$\begin{aligned}\phi(y) &= \alpha_1 e^{k_0 \sqrt{n_{eff}^2 - n_1^2} y} + \beta_1 e^{-k_0 \sqrt{n_{eff}^2 - n_1^2} y} && \text{dans la couche 1} \\ \phi(y) &= \alpha_2 e^{k_0 \sqrt{n_{eff}^2 - n_2^2} y} + \beta_2 e^{-k_0 \sqrt{n_{eff}^2 - n_2^2} y} && \text{dans la couche 2}\end{aligned}$$

Les facteurs en exponentiel peuvent être réels ou complexes suivant les valeurs relatives des indices réfractifs par rapport à l'indice effectif. On exprime alors la continuité du champ et de sa dérivée première au point d'interface que l'on supposera correspondre à $y=0$ pour simplifier les calculs :

$$\begin{aligned}\alpha_1 + \beta_1 &= \alpha_2 + \beta_2 \\ \alpha_1 k_0 \sqrt{n_{eff}^2 - n_1^2} - \beta_1 k_0 \sqrt{n_{eff}^2 - n_1^2} &= \alpha_2 k_0 \sqrt{n_{eff}^2 - n_2^2} - \beta_2 k_0 \sqrt{n_{eff}^2 - n_2^2}\end{aligned}$$

On peut réécrire ceci sous la forme :

$$\begin{aligned} a_2 + \beta_2 &= a_1 + \beta_1 \\ a_2 - \beta_2 &= a_{12} (a_1 - \beta_1) \end{aligned} \quad \text{en posant} \quad a_{12} = \sqrt{\frac{n_{eff}^2 - n_1^2}{n_{eff}^2 - n_2^2}}$$

et donc

$$\begin{pmatrix} a_2 \\ \beta_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1 + a_{12}}{2} & \frac{1 - a_{12}}{2} \\ \frac{1 - a_{12}}{2} & \frac{1 + a_{12}}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ \beta_1 \end{pmatrix}$$

Les coefficients dans la couche suivante s'obtiennent donc à partir des coefficients précédents grâce à un opérateur matriciel. On peut ainsi propager ces conditions de continuité à travers plusieurs couches uniformes par simple multiplication matricielle. Enfin les conditions d'annulation du champ à l'infini dans le substrat et dans le superstrat imposent les relations suivantes :

$$\beta_{superstrat} = 0 \quad \text{et} \quad a_{substrat} = 0$$

Donc si à partir du vecteur correspondant aux coefficients du champ dans le superstrat, on itère en multipliant à chaque interface par la matrice de continuité, on doit obtenir comme résultat total un vecteur correspondant aux coefficients dans le substrat. La condition sur l'indice effectif s'écrit alors :

$$X_2 = 0 \quad \text{en posant} \quad \vec{X} = \begin{pmatrix} X_1 \\ X_2 \end{pmatrix} = \prod_{i=0}^{i=n} \begin{pmatrix} \frac{1 + a_{12}^i}{2} & \frac{1 - a_{12}^i}{2} \\ \frac{1 - a_{12}^i}{2} & \frac{1 + a_{12}^i}{2} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

Nous avons ainsi obtenu une condition simple à exprimer que doit vérifier l'indice effectif. Cette équation est résolue dans le logiciel *ALCOR* par une méthode de dichotomie car on peut facilement encadrer l'indice effectif entre les valeurs extrémales des indices réfractifs des couches, substrat et superstrat compris. Cette méthode est ensuite itérée jusqu'à stabilisation de la solution de façon à obtenir la valeur maximale de n_{eff} correspondant au mode fondamental de la structure.

3.2.4. Le cas particulier des guides diffusés

La description des structures tridimensionnelles comme un *pavage* de zones d'indice effectif constant ou à variation simple convient assez bien à la représentation des structures guidantes en semiconducteurs. Cependant il est également très intéressant de pouvoir étudier la propagation dans des guides optiques réalisés par diffusion d'un ruban de titane sur un substrat en niobate de lithium (figure 5). Le profil d'indice de ce type de guide n'est

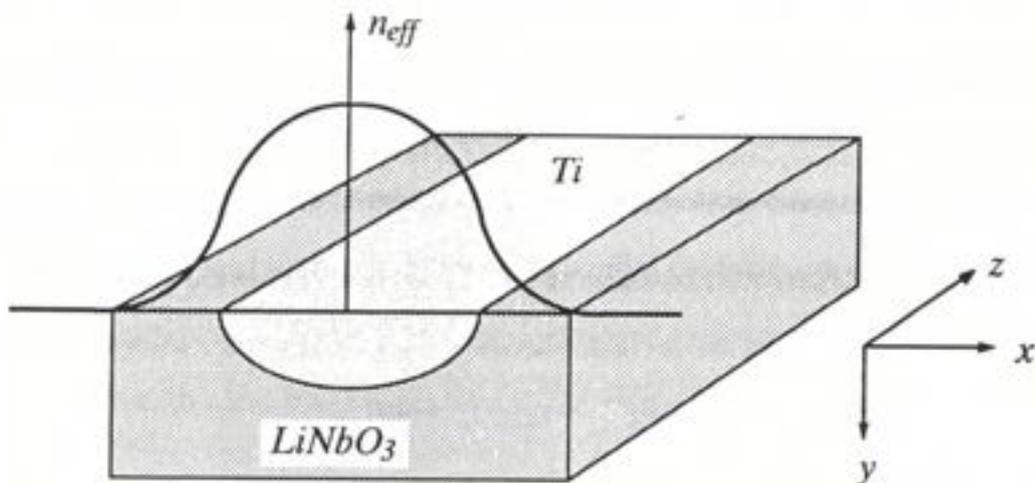


figure 5 : Profil typique de l'indice effectif dans un guide sur niobate de lithium

plus abrupt mais obéit à des lois analytiques complexes provenant des lois de diffusion du titane dans le niobate de lithium. La procédure adoptée pour simuler la propagation optique dans ces structures consiste à décrire la position des guides dans le plan (x,z) à l'aide des coordonnées des rubans de titane avant la diffusion, puis à calculer le profil d'indice effectif à chaque pas de propagation. Il n'y a donc pas dans ce cas de résolution d'une équation différentielle dans la direction y .

3.3. La "Beam Propagation Method"

L'intérêt de la méthode du faisceau propagé par rapport à une résolution directe en éléments finis de l'équation d'*Helmholtz* réside dans le gain considérable en temps de calcul et en taille du problème à traiter. Ce gain est permis grâce à un certain nombre d'hypothèses simplificatrices essentielles que nous rappelons ici :

- La lumière se propage dans des directions très proches de l'axe Ox (le problème est paraxial).
- Le champ réfléchi suivant x est considéré comme négligeable à toutes les abscisses de la structure.
- Il n'y a pas de brusques sauts d'indice et toutes les variations d'indices peuvent être considérées comme des perturbations.
- Les milieux traversés sont linéaires.
- L'onde propagée s'annule sur les bords latéraux de la fenêtre de propagation : il n'y a pas de rayonnement.

Il est important que ces hypothèses soient vérifiées pour assurer une bonne validité des résultats. Cependant cette méthode a prouvé être suffisamment robuste même dans des cas un peu éloignés des conditions citées plus haut.

3.3.1. Principe de résolution

Commençons par résoudre l'équation (4.23) dans un milieu à indice effectif constant n_0 :

$$\Delta\phi + k_0^2 n_0^2 \phi = 0$$

Si on effectue une transformée de Fourier uniquement suivant l'axe Ox et que l'on appelle $\psi(k,z)$ la transformée de ϕ , on obtient :

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} - k^2 \psi + k_0^2 n_0^2 \psi = 0$$

soit encore :

$$\boxed{\frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} = -(k_0^2 n_0^2 - k^2) \psi}$$

Cette équation a donc pour ensemble solution un espace vectoriel à deux dimensions engendré par les fonctions ψ^+_0 et ψ^-_0 :

$$\psi^+_0(k, z) = e^{i(k_0^2 n_0^2 - k^2)^{\frac{1}{2}} z} \quad \psi^-_0(k, z) = e^{-i(k_0^2 n_0^2 - k^2)^{\frac{1}{2}} z}$$

L'hypothèse de la propagation dans un seul sens sans réflexion de l'onde nous permet de ne choisir que la solution ψ^-_0 . On peut constater qu'il est très facile d'exprimer la propagation unidirectionnelle d'une onde dans un milieu d'indice effectif constant, en passant dans le domaine fréquentiel spatial. En effet celle-ci revient à multiplier la transformée de Fourier par un déphasage dépendant de k :

$$\begin{array}{ll} \text{si } |k| < k_0 n_0 & \psi_0(k, z + \Delta z) = e^{-i\sqrt{k_0^2 n_0^2 - k^2} \Delta z} \psi(k, z) \\ & \text{ce qui correspond à une onde se propageant vers } z > 0 \\ \text{si } |k| > k_0 n_0 & \psi_0(k, z + \Delta z) = e^{\sqrt{k^2 - k_0^2 n_0^2} \Delta z} \psi(k, z) \\ & \text{ce qui correspond à une onde s'amplifiant vers } z > 0 \end{array}$$

La B.P.M. consiste alors à exprimer l'évolution de ϕ suivant z sur une longueur Δz comme la propagation dans un milieu d'indice effectif constant n_0 corrigée par un facteur dû à la différence entre l'indice effectif réel et n_0 .

3.3.2. Calcul du facteur correctif

On vient donc de voir qu'il est très simple d'exprimer la propagation d'une onde à travers un milieu d'indice effectif uniforme n_0 . La présence d'un milieu hétérogène et dont l'indice effectif varie peu autour de n_0 entraîne une modification de l'onde se traduisant par l'introduction d'un facteur correctif multiplicatif que l'on se propose de calculer. On appellera ϕ_0 l'onde propagée dans un milieu uniforme et ϕ l'onde issue des mêmes conditions initiales mais propagée dans le milieu hétérogène. Donc :

$$\begin{aligned} \Delta \phi_0 + k_0^2 n_0^2 \phi_0 &= 0 \\ \Delta \phi + k_0^2 n^2 \phi &= 0 \end{aligned}$$

On suppose que pendant une longueur de propagation suffisamment faible, l'onde ϕ peut être décrite comme une petite variation de l'onde ϕ_0 : $\phi = \lambda(z) \phi_0$. Un calcul rapide permet de relier ce facteur correctif à la différence d'indice $\Delta n^2 = n^2 - n_0^2$. En effet, si les deux ondes se propagent suivant z avec la pulsation spatiale $k_0 n_0$, alors on peut écrire

les champs sous la forme :

$$\phi_0 = A(x, y, z) e^{-ik_0 n_0 z}$$

$$\phi = \lambda(z) A(x, y, z) e^{-ik_0 n_0 z}$$

A est une fonction enveloppe qui ne "varie pas rapidement" c'est-à-dire dont les longueurs typiques d'évolution suivant z sont grandes devant la longueur d'onde propagée. Les équations de propagation deviennent alors :

$$\Delta A - 2ik_0 n_0 \frac{\partial A}{\partial z} = 0 \quad \text{et} \quad \Delta(\lambda A) - 2ik_0 n_0 \frac{\partial(\lambda A)}{\partial z} + k_0^2 \Delta n^2 (\lambda A) = 0$$

et donc :

$$2 \frac{\partial \lambda}{\partial z} \cdot \frac{\partial A}{\partial z} + A \frac{\partial^2 \lambda}{\partial z^2} + A \left(-2ik_0 n_0 \frac{\partial \lambda}{\partial z} + k_0^2 \Delta n^2 \lambda \right) = 0$$

A et λ sont des fonctions variant peu suivant z par rapport à la longueur d'onde propagée. On peut alors négliger à ce stade les termes différentiels d'ordre supérieur, ce qui aboutit à :

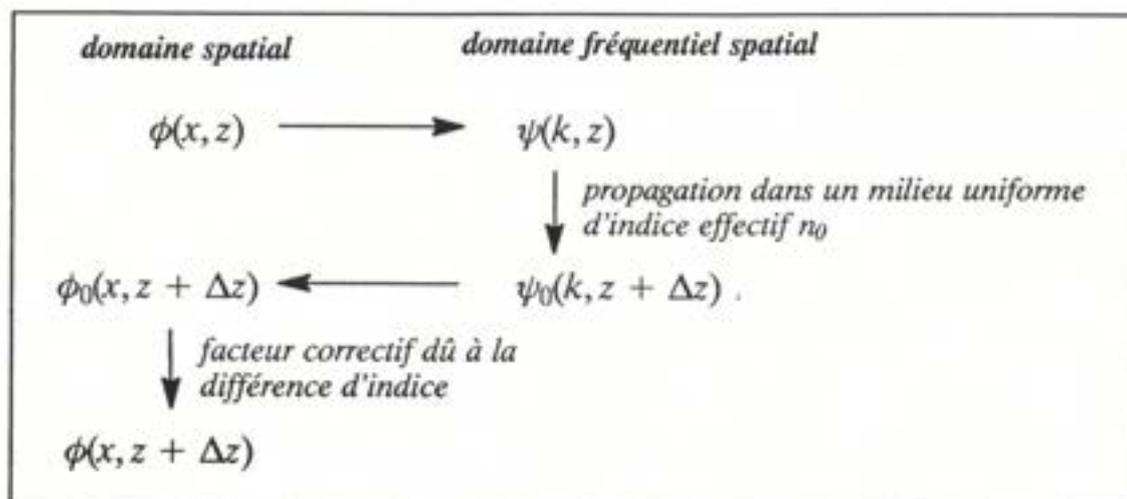
$$-2ik_0 n_0 \frac{\partial \lambda}{\partial z} + k_0^2 \Delta n^2 \lambda = 0 \quad \text{donc} \quad \lambda(z) = \lambda_0 e^{-i \frac{k_0 \Delta n^2}{2n_0} z}$$

Comme λ vaut 1 au début de la propagation, on en déduit que le facteur correctif dû à une propagation sur une petite longueur Δz dans un milieu d'indice n légèrement différent de n_0 vaut :

$$\lambda = e^{-i \frac{k_0 \Delta n^2}{2n_0} \Delta z}$$

3.3.3. Schéma de principe

On peut donc déduire des paragraphes précédents un schéma de principe d'application de la "Beam Propagation Method" :



3.3.4. La description bidimensionnelle : le langage 2D

Le logiciel *ALCOR* contient un analyseur syntaxique pour la description de la structure dans le plan horizontal contenant la direction de propagation. Cet analyseur a été écrit en langage C et interfacé avec le reste du logiciel écrit en *FORTRAN 77*. Le langage permet de paramétrer des petites structures afin de les utiliser dans des structures de taille supérieure avec des paramètres différents et en en leur faisant subir éventuellement des symétries par rapport aux deux axes Ox et Oz .

Ce langage décrit la structure en "vue de dessus" comme un assemblage de trapèzes dont les deux bords parallèles sont orthogonaux à la direction de propagation Oz . Il fonctionne par mots-clés et est tout à fait compatible avec la technique de description des dispositifs dans les procédés de fabrication (masqueur, etc...).

La structure dans le plan (x,z) est donc divisé en "zones", chaque trapèze appartenant à une seule de ces zones. Elles possèdent chacune un indice effectif ce qui permet d'obtenir un profil d'indice effectif constant par zone qui sera utilisé par la suite dans la résolution de la propagation.

L'utilisation de ce langage pour le cas de la structure décrite plus haut donne comme fichier source le résultat suivant :

```
def Sshape : linit=1000, long=1000, w=10, ecart=100, val=1
  ind val: l=long/10; x=ecart/100;
  ., linit, w
  ., l, w, , 3*x; ., ., ., 7*x; ., ., ., 10*x; ., ., ., 13*x; ., ., ., 17*x;
  ., ., ., 17*x; ., ., ., 13*x; ., ., ., 10*x; ., ., ., 7*x; ., ., ., 3*x;
  ., linit, w
end ! Sshape
```

La structure est appelée *Sshape* et cinq paramètres lui sont affectés : *linit* représente la longueur des guides rectilignes, *long* est la longueur de la zone de transition, *w* est la largeur du guide, *ecart* est l'écartement latéral obtenu grâce à la structure et enfin *val* relie les diverses zones aux structures multicouches décrites par ailleurs dans le logiciel.

Chaque zone correspond à une structure multicouche suivant *y*. Ces structures sont numérotées et l'ordre "*ind val*" permet d'indiquer que tous les trapèzes décrits après cet ordre appartiendront à la zone numéro *val*, ceci tant qu'un nouveau numéro de zone n'est pas précisé.

Chaque trapèze est décrit par le milieu de son premier côté, sa longueur suivant *z*, ses largeurs transversales avant et arrière et enfin l'écart transversal entre les deux milieux des côtés parallèles. Un "." signifie que l'on se place au point courant qui avance à chaque nouvelle définition de trapèze. De plus un paramètre non fourni est pris égal à la dernière valeur utilisée. Enfin chaque définition de trapèze est séparée par un ";" ou un retour à la ligne.

On peut voir dans ce fichier, sur la première ligne, la donnée du nom et des paramètres avec leurs valeurs par défaut. Sur la deuxième ligne sont calculés quelques paramètres intermédiaires. Les lignes suivantes sont consacrées à la description de tous les trapèzes constituant la structure. On peut également constater que les trapèzes partent tous du point courant ce qui signifie que la structure s'enchaîne de façon linéaire.

3.3.5. La prise en compte des conditions absorbantes

La résolution de l'équation d'Helmholtz dans le plan (x,z) s'effectue à l'intérieur d'une fenêtre de dimensions finies. La *Beam Propagation Method* opérant deux transformées de Fourier suivant l'axe Ox à chaque pas de propagation, la méthode de résolution va faire appel à un algorithme de transformée de Fourier rapide (FFT). L'espace réciproque étant également discrétisé, l'effet de cette transformée de Fourier va être de considérer la structure comme périodique suivant la direction transverse Ox .

Ainsi une onde rayonnée sur le côté par le dispositif réapparaîtrait sur l'autre bord de la fenêtre de simulation, réalisant un couplage parasite de la structure sur elle-même. Pour palier à cet inconvénient il va falloir non seulement imposer la nullité du profil d'onde sur les bords latéraux de la fenêtre de simulation mais aussi mettre en place des conditions d'absorption de telle manière qu'aucune onde sortant sur un bord ne réapparaisse sur l'autre.

Cette méthode d'absorption des ondes sortantes doit être choisie avec beaucoup de soins pour éviter d'une part les interférences entre les deux bords de la structure, d'autre part les réflexions de l'onde sortante vers l'intérieur de la fenêtre de simulation qui seraient tout aussi préjudiciable pour la précision de la résolution.

La méthode adoptée dans le logiciel *ALCOR* consiste à multiplier le profil d'onde à chaque pas de propagation par une fonction enveloppe dont la valeur est égale à un à l'intérieur de la fenêtre de propagation et qui s'annule progressivement à l'intérieur des bords absorbants. Nous avons également essayé une seconde méthode consistant à placer de chaque côté de la fenêtre de simulation un matériau absorbant c'est-à-dire possédant un indice réfractif à partie imaginaire négative. Cette méthode n'a pas donné de résultats satisfaisants, notamment en raison du caractère important des réflexions observées vers le centre de la structure.

4. VECTORISATION

Le schéma de principe de la BPM montre de façon claire la grande prédisposition de cette méthode à la vectorisation. Quelques préparations sont toutefois nécessaires pour assurer un taux de vectorisation optimal.

Dans le cas de la propagation dans un milieu uniforme, on remarque que la transformée de Fourier du profil d'onde est multipliée par un terme en exponentielle, proportionnel à la distance parcourue. Le facteur de proportionnalité ne dépend que des données k_0 et n_0 , ainsi que de la variable k . Il n'est donc pas utile de recalculer ce facteur à chaque pas de propagation et on peut le stocker dans un tableau, dépendant de k , qui n'aura plus qu'à être utilisé à chaque pas.

De plus l'essentiel des calculs de la BPM est effectué pendant les transformées de Fourier : nous avons donc eu recours à la transformée de Fourier rapide (Fast Fourier Transform) de la bibliothèque vectorielle du calculateur, dont les performances sont en moyenne trois fois meilleures que celle d'une FFT scalaire.

Enfin la description de la structure bidimensionnelle permet un stockage rapide du profil d'indice effectif sous forme de tableau et ainsi une utilisation tout à fait adaptée à la vectorisation car celui-ci n'intervient que de façon locale en chaque point du profil d'onde.

Grâce à cet ensemble de mesures, nous sommes parvenus à obtenir pour la routine résolvant l'équation d'Helmholtz par la BPM un taux de vectorisation de 90% ce qui est un des plus forts taux de vectorisation observés pour les logiciels scientifiques tournant sur ce calculateur.

5. PROBLEMES RESOLUS

Les guides d'onde optiques en niobate de lithium (LiNbO_3) sont utilisés dans de nombreux dispositifs aussi bien actifs comme les modulateurs ou les séparateurs de polarisation [5], que passifs comme les coupleurs et les croisements. Ces guides sont obtenus par diffusion localisée d'un ruban de Titane dans un substrat en niobate de lithium à cause de la grande simplicité de réalisation de cette opération. Cependant les guides ainsi obtenus laissent apparaître de fortes pertes de propagation dès qu'on augmente leurs courbures.

Afin de réduire les dimensions de ces dispositifs dans un but d'intégration toujours plus poussée, il est nécessaire de diminuer les rayons de courbures tout en minimisant les pertes en puissance associées, ce qui ne peut être rendu possible qu'en modifiant la structure et les valeurs d'indice du guide dans les parties courbées.

La solution étudiée dans ce chapitre, proposée en 1978 par NTT [6], consiste à diffuser de chaque côté du guide en titane des zones de MgO qui viennent renforcer les différences d'indices entre le guide et le substrat et assurent ainsi un meilleur confinement de la lumière. Le but de cette étude est d'examiner, en fonction des divers paramètres technologiques de fabrication, les pertes dans un virage en S destiné à être intégré dans des dispositifs optiques.

Remarque : ce problème d'optimisation est relativement simple dans sa formulation mais néanmoins suffisamment complexe pour qu'un calcul analytique soit la plupart du temps inenvisageable. On voit donc tout l'intérêt d'un logiciel de CAO qui permet à l'utilisateur de disposer d'un outil de prédiction de comportement, même s'il repose sur des hypothèses restrictives, et d'orienter la conception des dispositifs.

5.1. Description du problème

Le dispositif étudié est un guide obtenu par diffusion de titane sur un substrat de niobate de lithium, et dont la forme est un "S", constitué de deux parties rectilignes et de deux arcs de cercle de rayon de courbure R . On obtient grâce à ce dispositif un décalage

géométrique du faisceau lumineux sur une longueur de transition que l'on appellera l_{trans} . Ce type de structure est constamment utilisée en optoélectronique intégrée afin d'amener dans la zone active du dispositif les faisceaux lumineux provenant généralement de fibres optiques (figure 6).

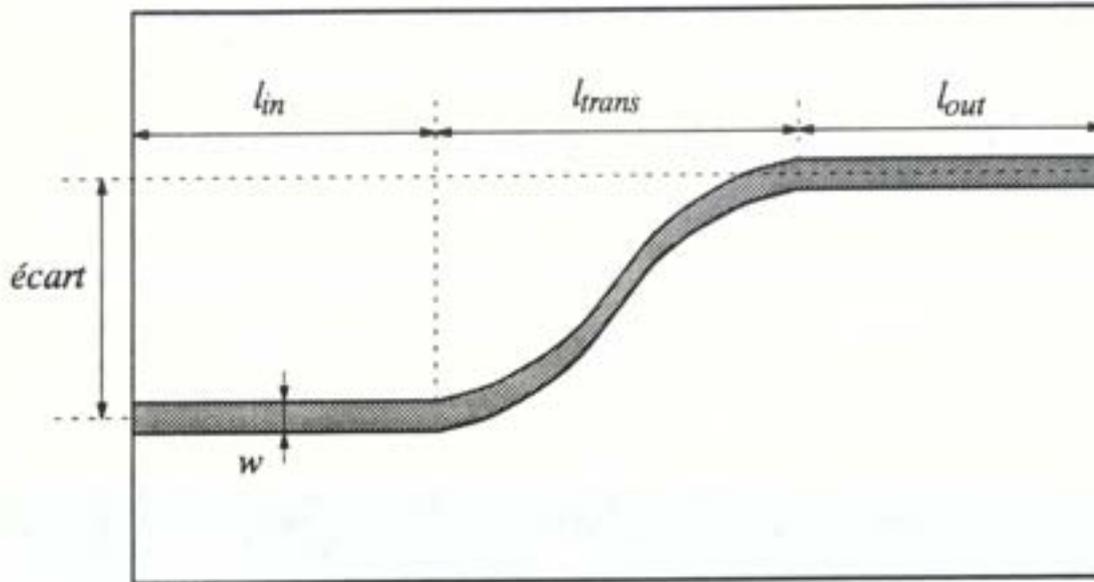


figure 6 : Géométrie du dispositif étudié

Nous allons tout d'abord étudier, grâce à des simulations effectuées sur le logiciel *ALCOR*, l'influence du rayon de courbure sur la perte de puissance en sortie de la structure, pour des conditions technologiques de fabrication identiques.

La première étape consiste à décrire cette structure dans le langage du logiciel, c'est-à-dire sous forme de trapèzes. Voici un exemple de fichier contenant la description d'un guide en S :

```
def Sshape :lin=3000,ltrans=5000,lout=3000,w=9,ecart=50,val=1
  ind val:
  l=ltrans/10;x=ecart/30;
  .,lin,w ; .,l,w,,x; .,.,.,2*x; .,.,.,3*x; .,.,.,4*x; .,.,.,5*x;
  .,.,.,5*x; .,.,.,4*x; .,.,.,3*x; .,.,.,2*x; .,.,.,x; .,lout
end ! Sshape
```

Les simulations ont été menées en introduisant dans le guide un profil de champ gaussien suivant Ox, de largeur égale à 12 microns. Ce profil est très proche du mode réel

du guide et l'on obtient donc après quelques centaines de microns de propagation rectiligne un mode stabilisé avec des pertes par rayonnement très faibles (figures 7 et 8). La taille du maillage est de l'ordre de 100 000 points. Cette taille importante est nécessaire pour simuler sur plusieurs millimètres des phénomènes dont les grandeurs typiques sont de l'ordre du micron. Elle est autorisée par le caractère explicite de la résolution.

Les résultats de la simulation ont montré, comme on pouvait s'y attendre, une décroissance des pertes en puissance avec la longueur de transition (figure 9). Ces pertes restent néanmoins importantes et nous allons nous intéresser dans la suite à des structures permettant de les réduire tout en minimisant les dimensions du dispositif.

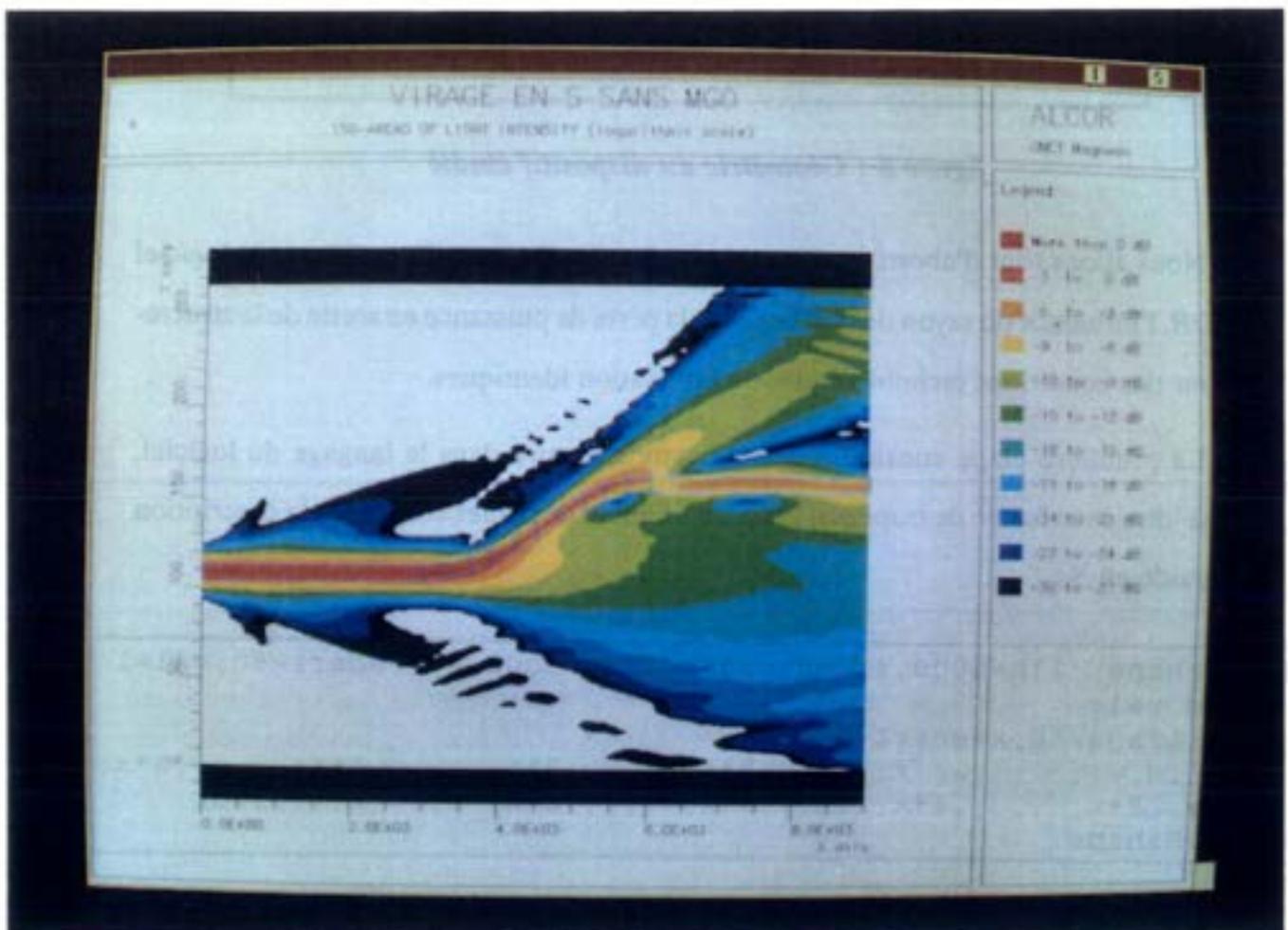


figure 7 : Propagation d'une onde lumineuse dans un virage en S

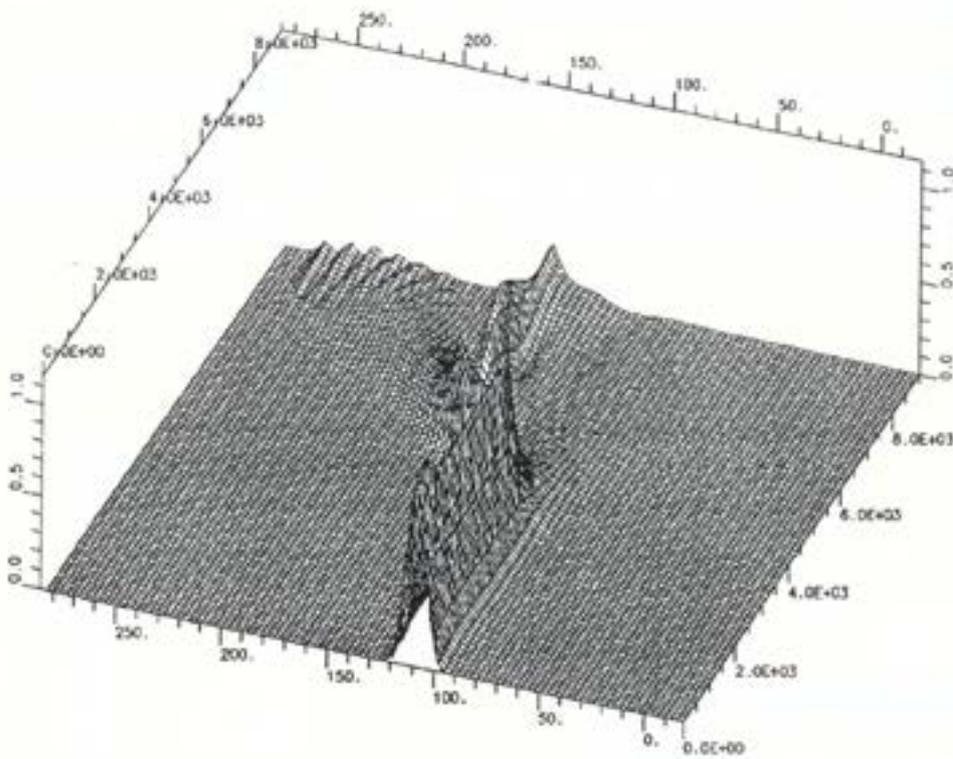


figure 8 : Vue tridimensionnelle de la puissance lumineuse propagée

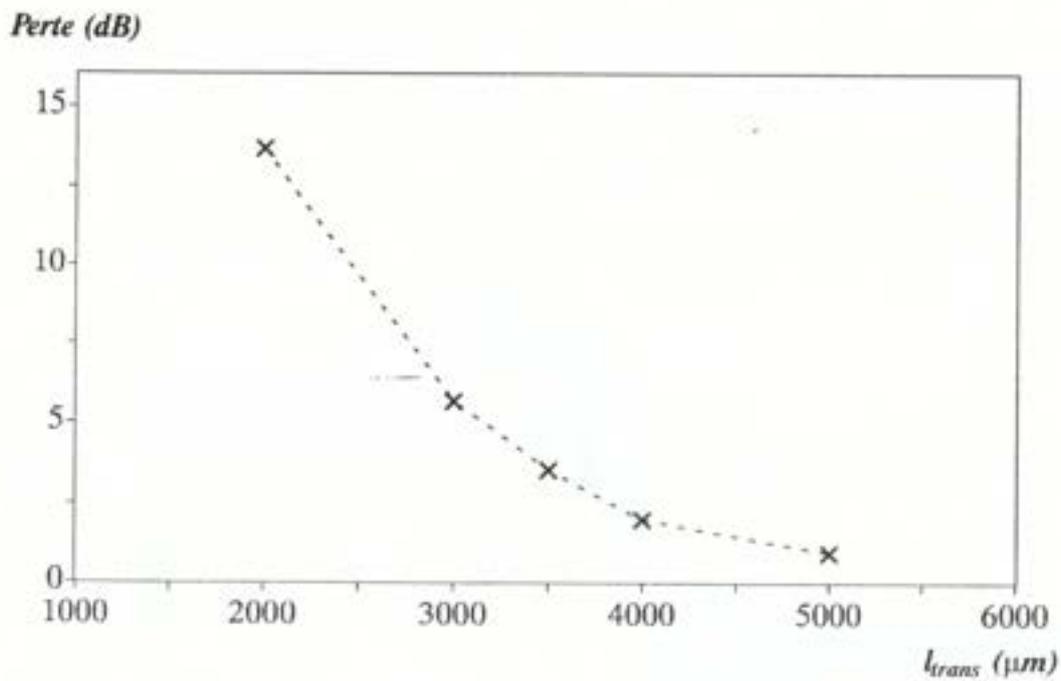
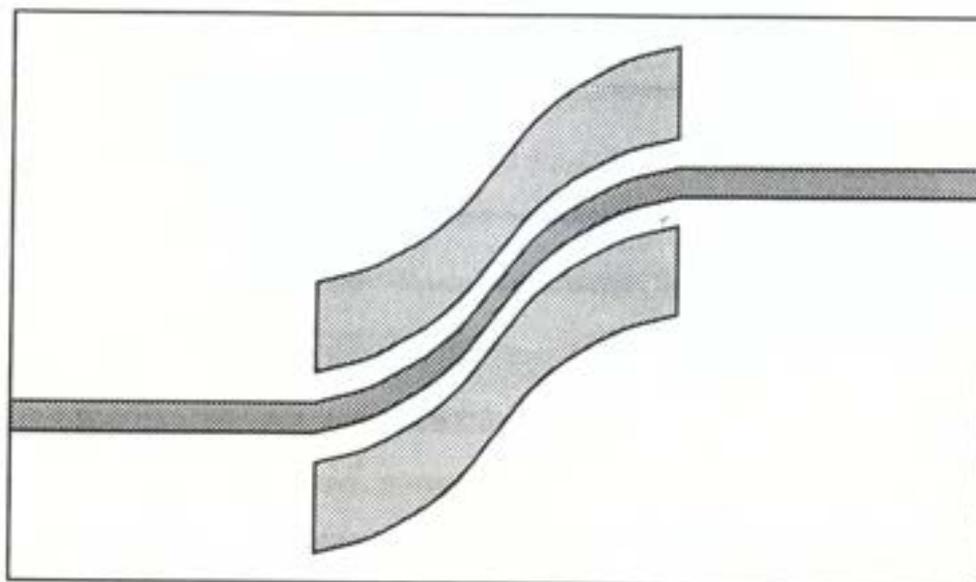


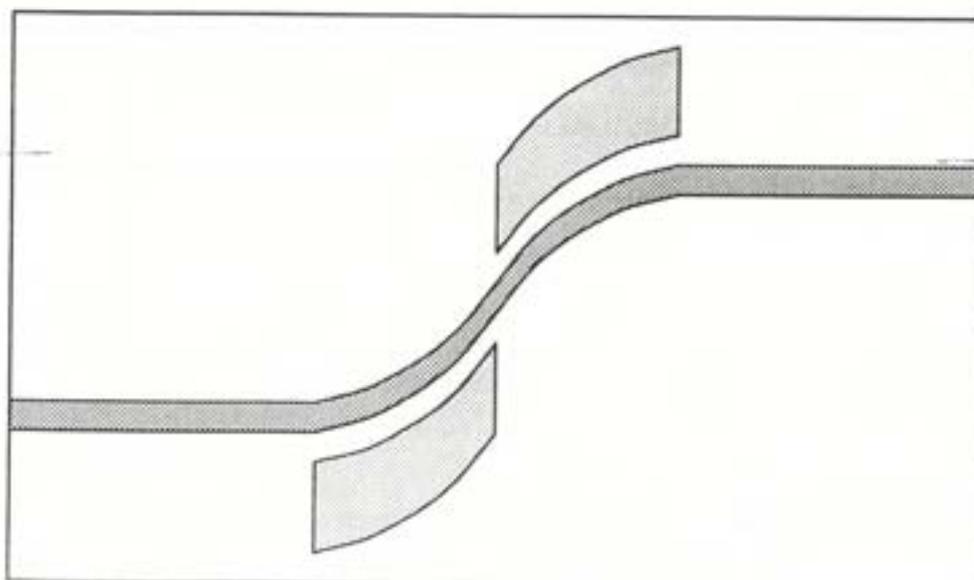
figure 9 : Perte en puissance en fonction de la longueur de transition

5.2. Description de la structure diffusée en MgO

Afin de diminuer les pertes de courbure dans le guide, on diffuse de chaque côté du ruban de Titane un ruban de MgO qui diminue localement l'indice du substrat et assure ainsi un meilleur guidage de la lumière. Ceci donne la structure suivante :



La figure ci-dessus représente un guide diffusé bilatéral caractérisé par deux rubans de MgO sont diffusés de part et d'autre du guide. Il est également possible de concevoir un guide diffusé unilatéral de la manière suivante :



Nous avons effectué des simulations comparatives sur ces deux types de structures, pour des conditions de fabrication données et en ne faisant varier que la longueur de transition qui est directement reliée au rayon de courbure. Les résultats de simulation pour le cas particulier d'une longueur de transition de $3000 \mu\text{m}$ (figures 10, 11, 12, 13 et 14) ont fait apparaître à la fois pour la diffusion unilatérale et bilatérale des pertes bien inférieures à celles constatées pour un guide simple sans diffusion de MgO, essentiellement grâce au meilleur confinement de la lumière dans les parties courbes. Nous avons ensuite fait varier la longueur de transition pour étudier les possibilités de la diffusion de MgO dans le cas des fortes courbures (figure 15). Les résultats ont montré que cette technique permet d'atteindre de très faibles longueurs de transition et donc de très fortes courbures, et ceci dans des proportions qui justifient amplement son adoption.

De plus les profils des courbes ne sont plus strictement décroissants comme précédemment mais présentent un minimum local pour une longueur de transition comprise entre 2000 et 3000 microns ce qui correspond également à des valeurs du rayon de courbure comprises entre 20 et 50 millimètres. Ce type de comportement a été confirmé expérimentalement [7], mais n'a pas encore reçu d'explications satisfaisantes. On peut d'ailleurs remarquer une similitude de comportement remarquable entre les courbes obtenues par la simulation sur *ALCOR* et les résultats expérimentaux (figure 16).

Enfin la technique de diffusion unilatérale s'est révélée plus performante que la diffusion bilatérale, à cause semble-t-il d'une moindre diffraction du faisceau lumineux en sortie de virage (figures 10 et 12). Nous avons donc retenu comme structure, pour la suite de l'étude, le guide obtenu par diffusion unilatérale, avec une longueur de transition de 2400 \AA ce qui correspond à la minimisation simultanée des pertes de propagation et des dimensions du dispositif. Nous nous sommes intéressés par la suite à l'optimisation de ce guide unilatéral en fonction des conditions de fabrication.

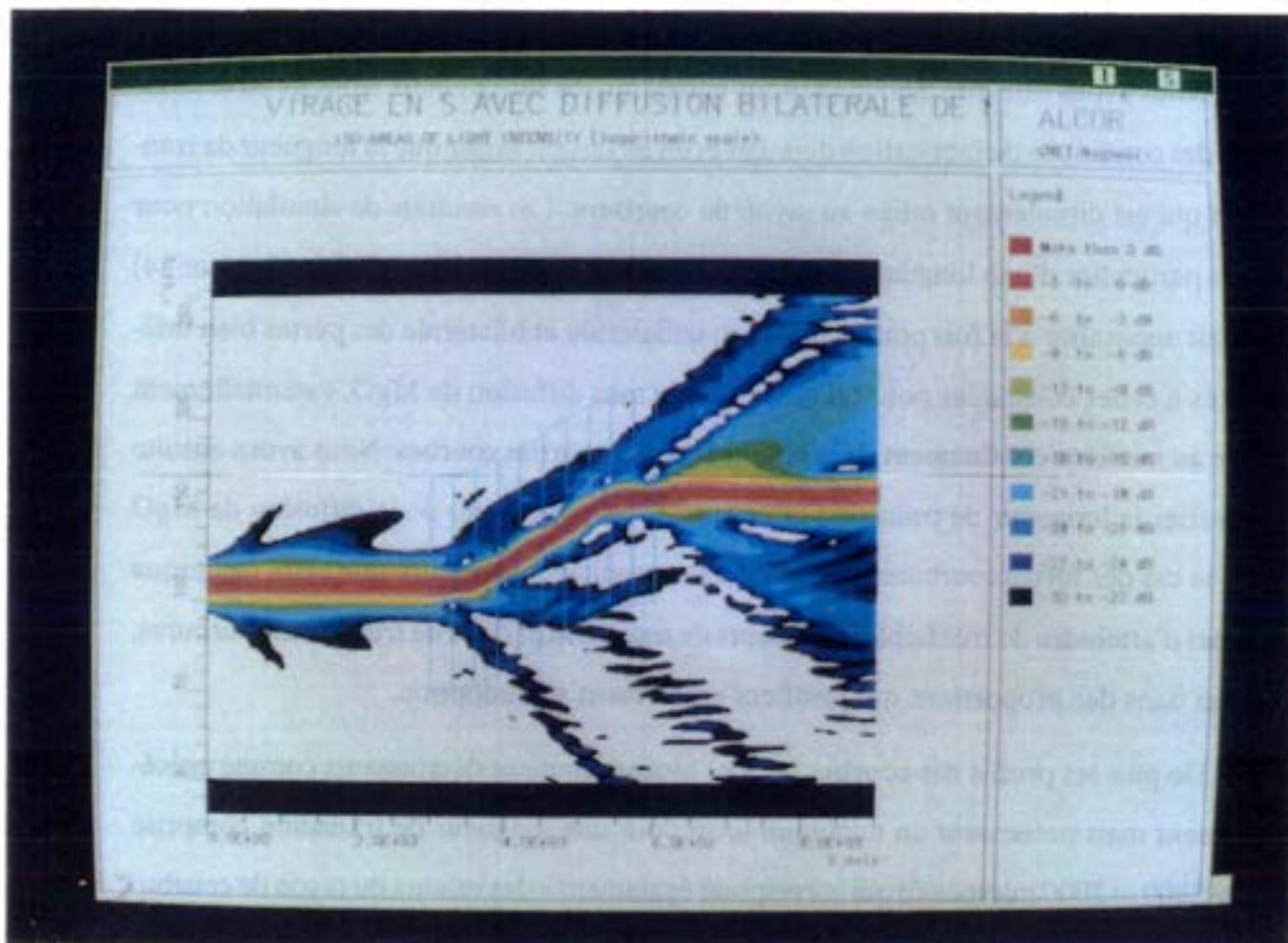


figure 10 : Propagation dans un virage avec diffusion bilatérale

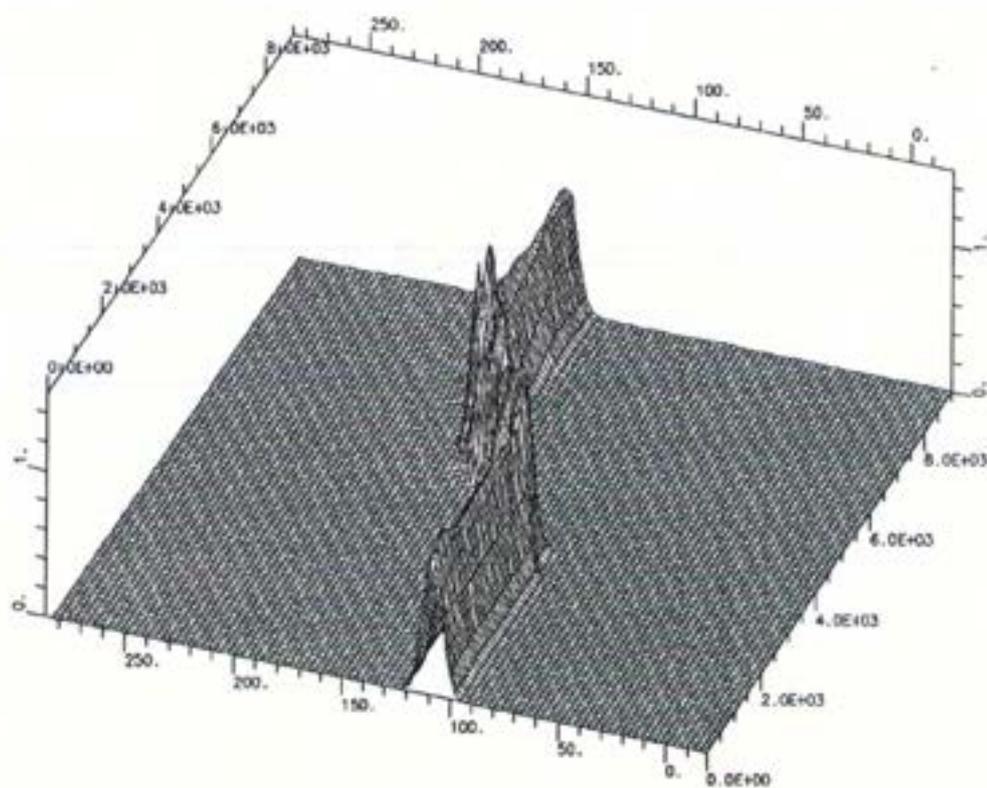


figure 11 : Vue tridimensionnelle de la puissance lumineuse propagée

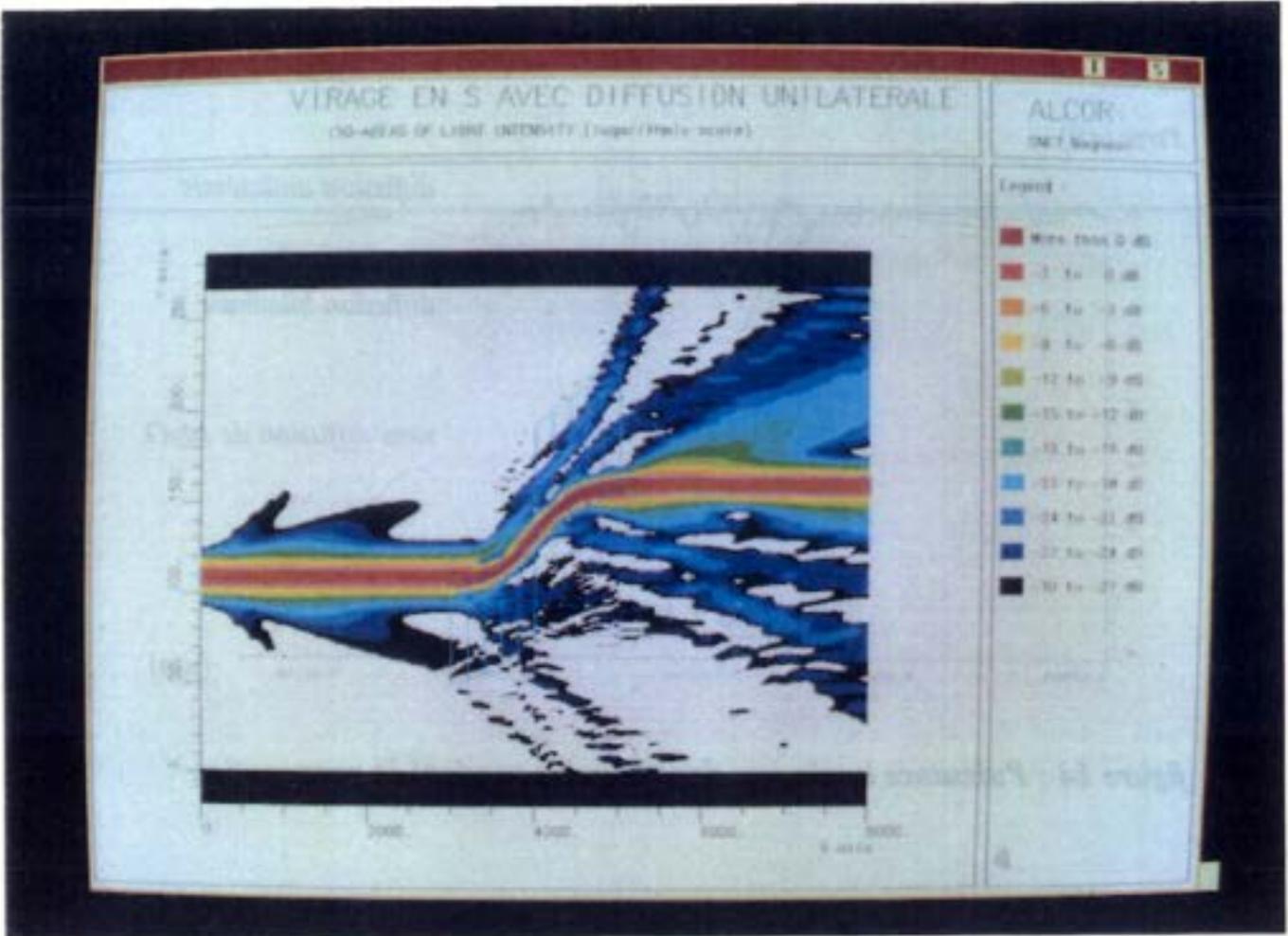


figure 12 : Propagation dans un virage avec diffusion unilatérale

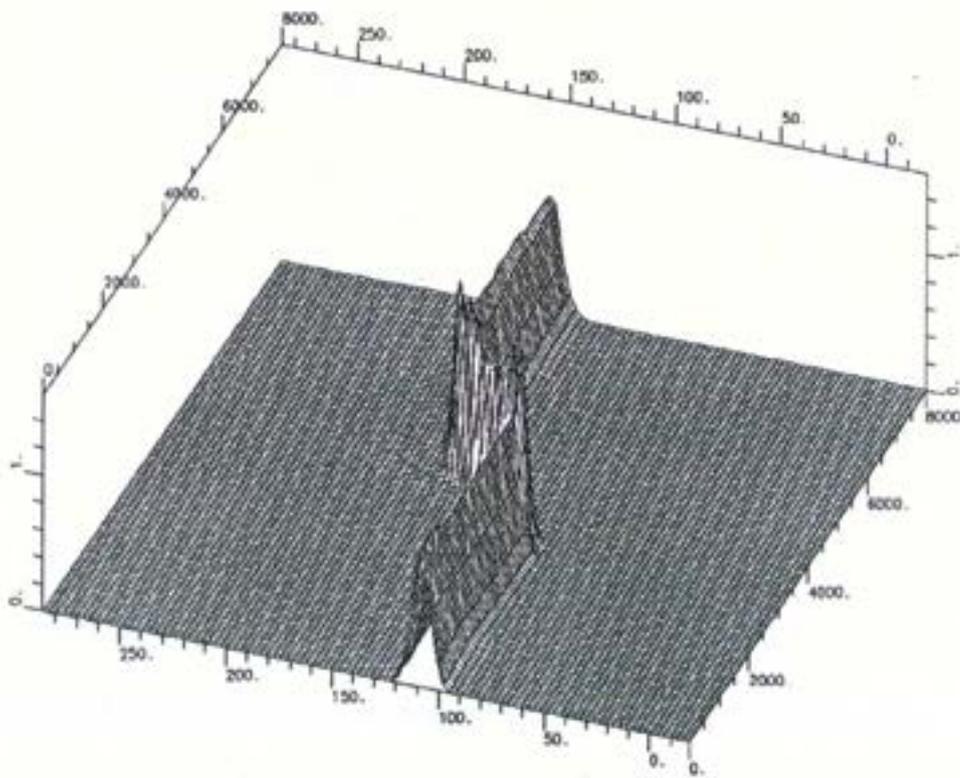


figure 13 : Vue tridimensionnelle de la puissance lumineuse propagée

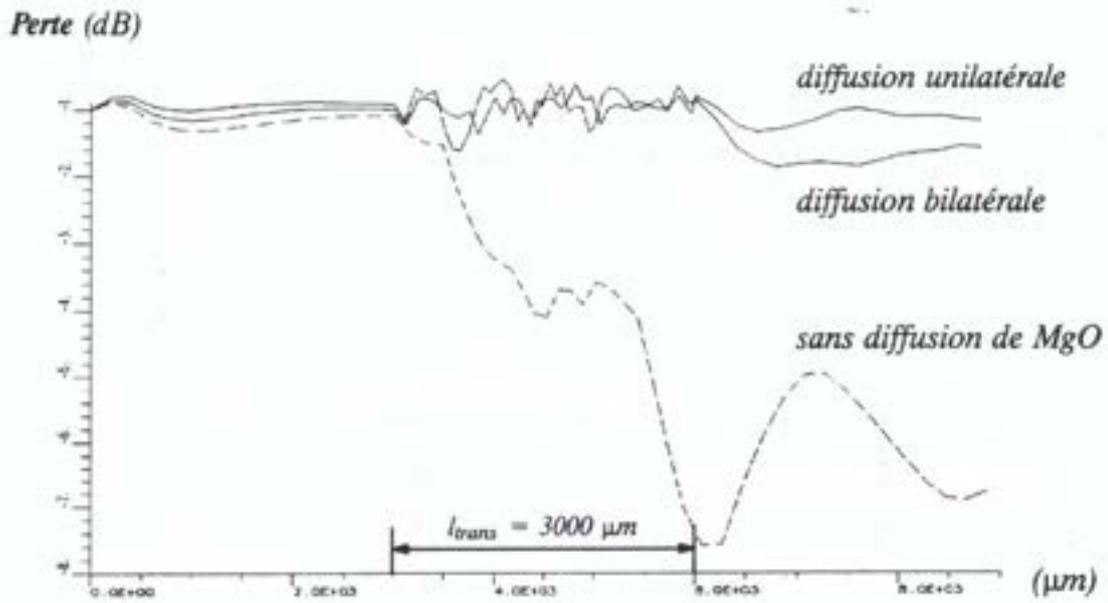


figure 14 : Puissance lumineuse dans le guide pendant la propagation

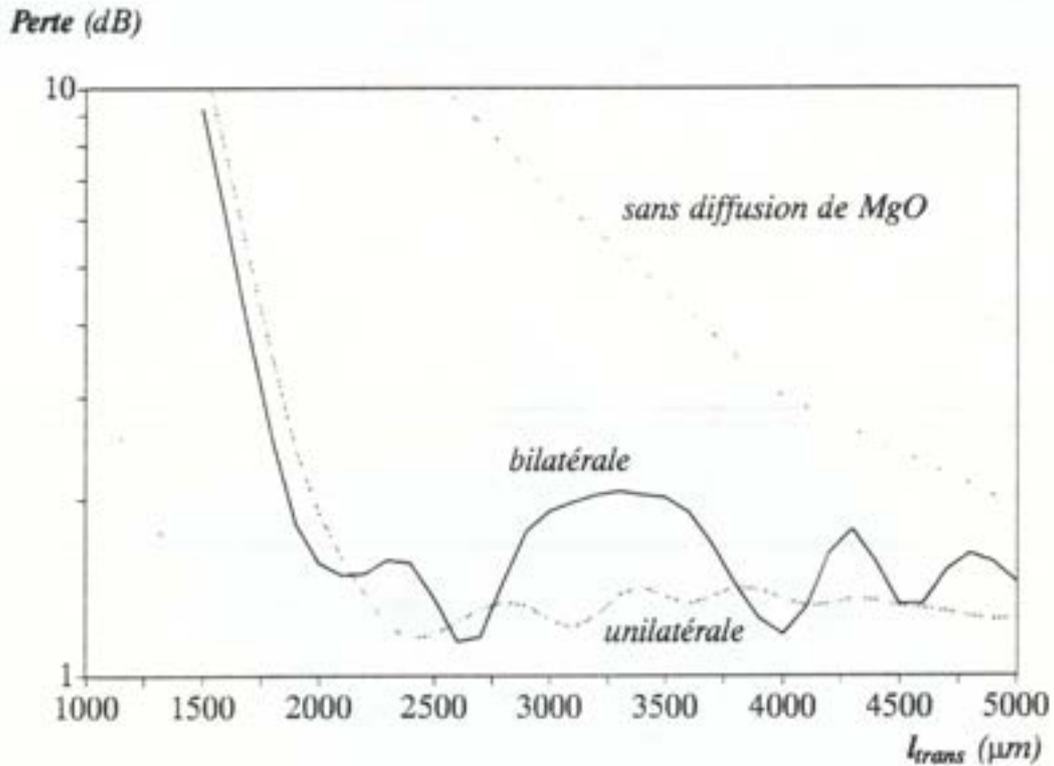


figure 15 : Pertes dans les structures en fonction de la longueur de transition

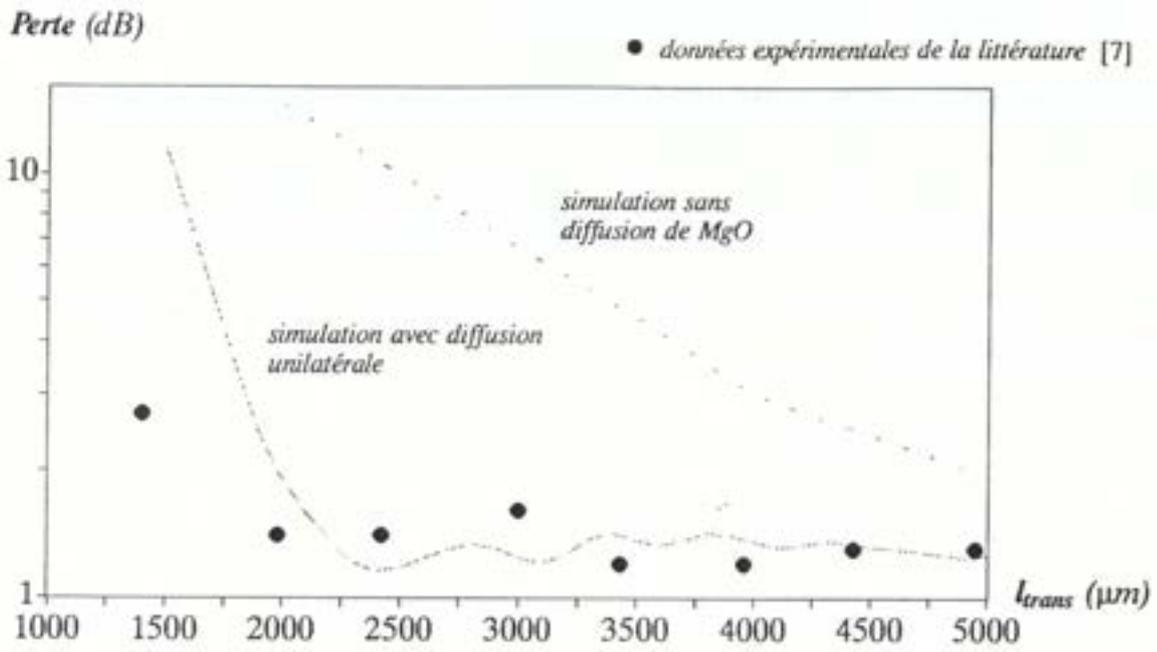


figure 16 : Comparaison simulations – expériences

5.3. Optimisation des conditions de fabrication

Le guide optique en niobate de lithium est réalisé par diffusion thermique d'un ruban de Titane d'une certaine épaisseur dans un substrat en LiNbO_3 . Puis, dans le cas d'une diffusion latérale de MgO , celui-ci est diffusé toujours thermiquement à une température différente. Les divers paramètres de la fabrication de ces guides sont donc, en dehors des données géométriques dans le plan (x,z) :

- L'épaisseur du ruban de Titane
- la température de diffusion du Titane
- La durée de diffusion du Titane
- L'épaisseur de la couche de MgO
- la température de diffusion du MgO
- La durée de diffusion du MgO

Les paramètres technologiques qui se rapportent au titane ont fait depuis longtemps l'objet d'une étude approfondie et nous nous sommes donc intéressés aux paramètres propres au MgO suivants :

- L'épaisseur de diffusion
- La température de diffusion

Nous avons commencé par étudier l'influence de l'épaisseur de la diffusion sur les pertes dans le guide (figure 17). Les résultats ont montré l'existence d'un minimum de perte pour une épaisseur de 200 Å. Ceci peut s'expliquer par le fait qu'une diffusion trop importante de MgO vient altérer la zone diffusée en titane et réduit ainsi les qualités de confinement du guide. Cette valeur optimale a été conservée pour les simulations suivantes.

Nous nous sommes ensuite intéressés à l'influence de la température de diffusion sur les pertes en puissance. Ce paramètre s'est révélé également avoir une importance non-négligeable et les simulations ont permis d'exhiber un minimum très net des pertes

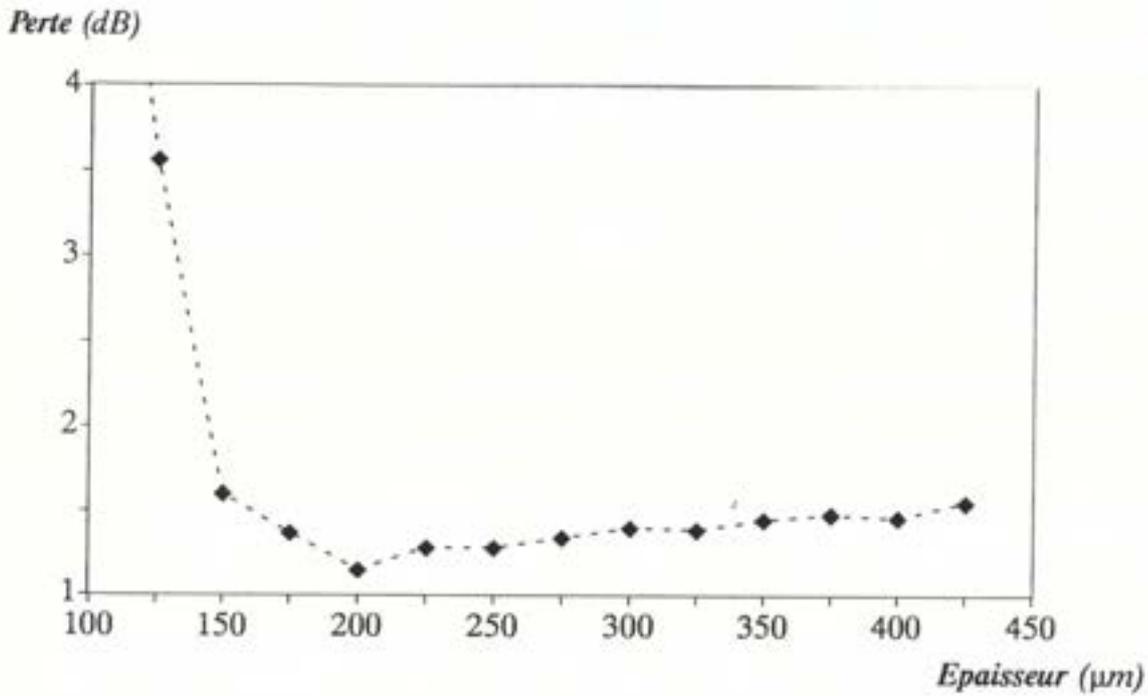


figure 17 : Influence de l'épaisseur de diffusion du MgO sur les pertes

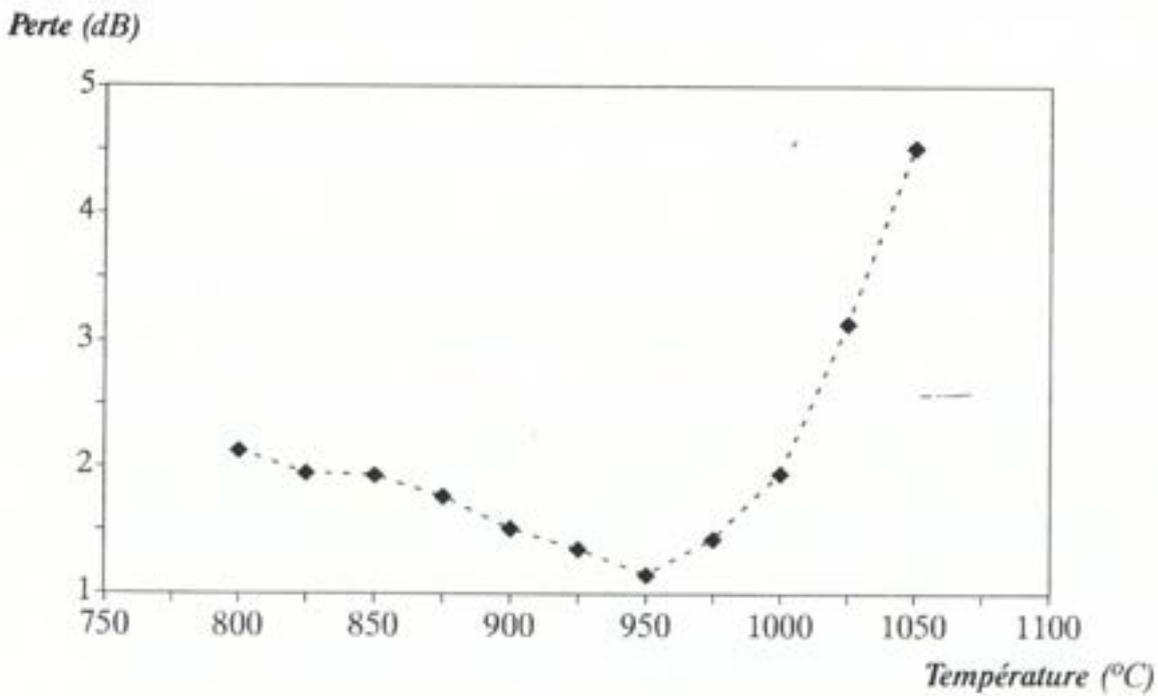


figure 18 : Influence de la température de diffusion du MgO sur les pertes

de propagation pour une température de diffusion de 950° (figure 18), la différence de pertes avec d'autres températures pouvant dépasser plusieurs dB.

Les valeurs des paramètres obtenues sont tout à fait en accord avec les résultats récents de la littérature [7] et confirment donc la validité du modèle utilisé dans *ALCOR*.

5.4. Conclusion

Les simulations réalisées à l'aide du logiciel *ALCOR* ont donc permis d'étudier les limitations des guides diffusés en titane sur niobate de lithium en ce qui concerne les rayons de courbure et de mettre en évidence, qualitativement et quantitativement, les avantages de la diffusion latérale de MgO dans les parties courbes. A l'intérieur de cette technique des comparaisons nous ont conduit à retenir la solution de la diffusion unilatérale qui a ensuite débouché sur l'optimisation des paramètres de réalisation technologique permettant la validation à rebours des modèles employés

5.5. Application à un dispositif complet

Afin de démontrer les capacités du logiciel *ALCOR* à étendre ce type d'étude, nous avons choisi de simuler un séparateur à diversité de polarisation constitué d'un coupleur optoélectronique 3 dB en entrée et de deux séparateurs de polarisation à la sortie du coupleur [5] (figure 19).

Son rôle est de sommer les deux signaux optiques arrivant dans les deux branches d'entrée (à gauche sur la figure), puis de séparer les composantes TE et TM de cette somme grâce à des électrodes placées dans les deux séparateurs de polarisation. Le langage modulaire de description bidimensionnelle du logiciel *ALCOR* nous a permis de définir cette structure complexe en réutilisant des sous-structures telles que les séparateurs utilisant elles-même des sous-structures comme les branches en Y.

La simulation effectuée sur ce dispositif (figure 20) est une simulation passive qui a pour rôle de vérifier le bon couplage à 3 dB dans le coupleur d'entrée et surtout de constater la faiblesse des pertes de propagation et de courbure malgré la longueur et la complexité du composant.

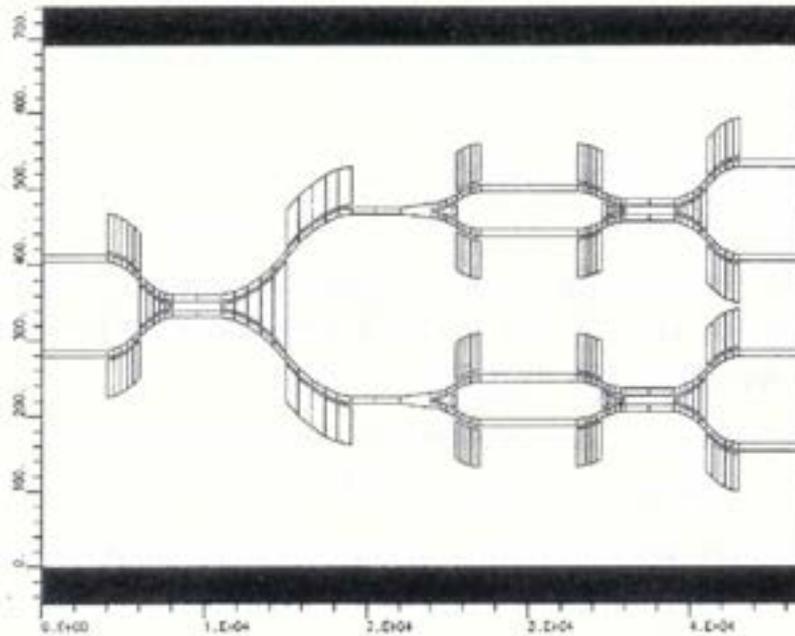


figure 19 : Géométrie du séparateur à diversité de polarisation

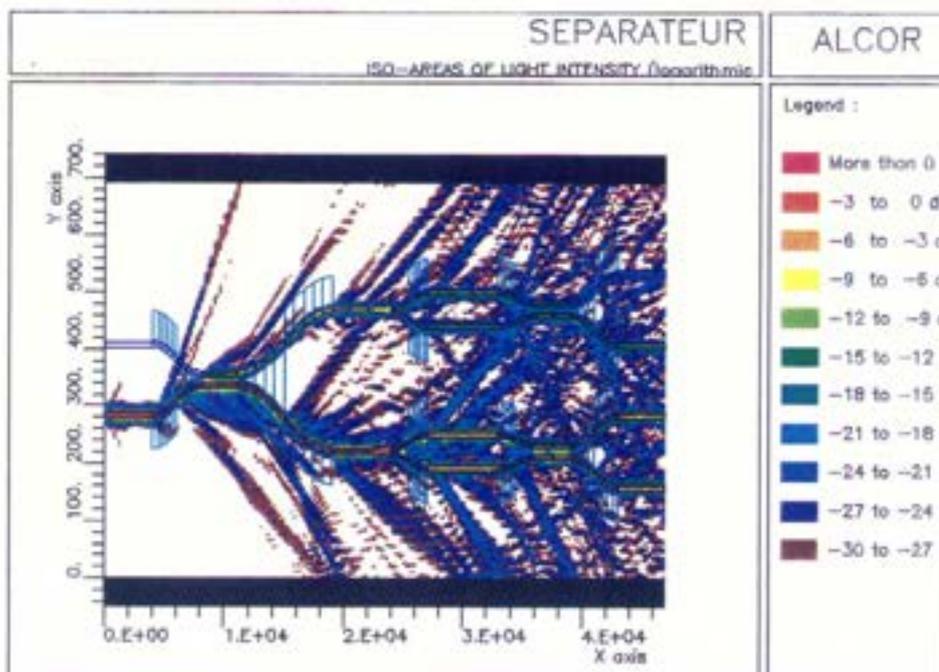


figure 20 : Propagation lumineuse dans la structure totale

REFERENCES

- [1] **Lars Thylen**, "Integrated Optics in LiNbO₃ : Recent Developments in Devices for Telecommunications," *J. Lightwave Tech.*, vol. LT-6, n° 6, 1988.
- [2] **G.L. Destefanis, J.P. Gailliard, E.L. Ligeon, S. Valette, B.W. Farmery, P.D. Townsend and A. Perez**, "The Formation of Waveguides and Modulators in LiNbO₃ by Ion Implantation," *J. Appl. Phys.*, vol. 50, p. 7898, 1978.
- [3] **J.D. Love and A.K. Ghatak**, "Exact Solutions for TM Modes in Graded Index Slab Waveguides," *IEEE J. Quantum Electron.*, vol. QE-15, pp. 14-16, Jan. 1979.
- [4] **P. Sansonetti, E. Caquot and A. Carengo**, "Design of Semiconductor Electrooptic Directional Coupler with the Beam Propagation Method," *J. Lightwave Tech.*, vol. 7, n° 2, pp. 385-389, 1989.
- [5] **J. Saulnier, F. Huet, L. Rivière, M. Carre and G. Caumont**, "Séparateur actif de polarisations sur LiNbO₃ : Ti," *Proc. of the ECOC 90*, 1990.
- [6] **J. Noda, M. Fukuma and S. Saito**, "Effect of Mg Diffusion on Ti-diffused LiNbO₃ Waveguides," *J. Appl. Phys.*, **49** (6), pp. 3150-3154, June 1978.
- [7] **B. Schüppert**, "Reduction of Bend Losses in Ti : LiNbO₃ Waveguides through MgO Double Diffusion," *Electron. Lett.*, Vol. 23, pp. 797-798, 1987.

Chapitre 5

Les dispositifs optoélectroniques

the 1990s, the number of people who have been employed in the public sector has increased in all countries.

There are a number of reasons for the increase in public sector employment. First, the public sector has become an important source of employment for many people, especially in developing countries. Second, the public sector has become an important source of income for many people, especially in developing countries. Third, the public sector has become an important source of social services for many people, especially in developing countries. Fourth, the public sector has become an important source of political power for many people, especially in developing countries.

The increase in public sector employment has led to a number of problems. First, the public sector has become a major source of corruption. Second, the public sector has become a major source of inefficiency. Third, the public sector has become a major source of waste. Fourth, the public sector has become a major source of unemployment.

There are a number of reasons for the increase in public sector employment. First, the public sector has become an important source of employment for many people, especially in developing countries. Second, the public sector has become an important source of income for many people, especially in developing countries.

Third, the public sector has become an important source of social services for many people, especially in developing countries. Fourth, the public sector has become an important source of political power for many people, especially in developing countries.

The increase in public sector employment has led to a number of problems. First, the public sector has become a major source of corruption. Second, the public sector has become a major source of inefficiency. Third, the public sector has become a major source of waste. Fourth, the public sector has become a major source of unemployment.

There are a number of reasons for the increase in public sector employment. First, the public sector has become an important source of employment for many people, especially in developing countries. Second, the public sector has become an important source of income for many people, especially in developing countries.

Third, the public sector has become an important source of social services for many people, especially in developing countries. Fourth, the public sector has become an important source of political power for many people, especially in developing countries.

The increase in public sector employment has led to a number of problems. First, the public sector has become a major source of corruption. Second, the public sector has become a major source of inefficiency. Third, the public sector has become a major source of waste. Fourth, the public sector has become a major source of unemployment.

There are a number of reasons for the increase in public sector employment. First, the public sector has become an important source of employment for many people, especially in developing countries. Second, the public sector has become an important source of income for many people, especially in developing countries.

Third, the public sector has become an important source of social services for many people, especially in developing countries. Fourth, the public sector has become an important source of political power for many people, especially in developing countries.

1. GENERALITES

Les récents progrès en télécommunications optiques ont entraîné un développement important dans le domaine des dispositifs microoptoélectroniques couplant les phénomènes électriques et optiques afin de réaliser des fonctions d'émission, de réception et de commandes optiques et de les intégrer dans des circuits. Le couplage fort, existant dans ces dispositifs, entre les effets électriques et optiques nécessite la résolution simultanée des équations correspondantes afin d'obtenir une capacité réelle de prédiction du comportement complet.

C'est pourquoi on a vu se développer dans les dernières années des logiciels intégrant la résolution des équations de Maxwell ou d'Helmholtz pour les champs optiques, des équations de transport de charge et du transport de la chaleur pour les phénomènes électriques [1,2,3,4,5]

Les principales applications de ce type de logiciels concernent la simulation des trois grands domaines de l'optoélectronique : l'émission, le traitement optique et la réception. Dans chacun de ces domaines les dispositifs typiques sont :

- Pour l'émission : les cavités laser à semiconducteur, afin d'évaluer les pertes de puissance dues aux fuites, et en intégrant éventuellement les couplages thermoélectriques.
- Pour la commande : les coupleurs électrooptiques, où la propagation lumineuse est commandée par les tensions appliquées sur les électrodes, via l'intégrale de recouvrement électrooptique entre le champ électromagnétique lumineux et le champ électrostatique [6].
- Pour la réception : les photodiodes, où le couplage électrooptique est assuré par le terme de génération de paires électron-trou qui rend compte de la création de porteurs sous l'effet du faisceau lumineux incident.

1.1. Les structures de données

La simulation des dispositifs optoélectroniques nécessite la résolution simultanée ou séquentielle de plusieurs problèmes dont les natures sont assez différentes :

- *Equations de Maxwell* pour le champ électromagnétique qui peuvent se réduire selon les cas à l'*équation de Poisson* pour l'étude du potentiel électrostatique, ou aux *équations d'Helmholtz* pour la propagation des ondes électromagnétiques.
- *Equations de continuités* pour le transport des porteurs.
- *Equation de diffusion de la chaleur*.
- *Equation de conservation de l'énergie*.

La multiplicité des problèmes et des dispositifs impose alors de nombreuses exigences quant à la structure de données :

- Unité de la description géométrique du dispositif ce qui implique l'emploi d'une structure de données généraliste multidimensionnelle. Cette unité a pour rôle d'assurer par exemple la compatibilité entre la description d'un guide optique – simulation de la propagation lumineuse – et celle d'un photorécepteur de type P-I-N – simulation du comportement électrique – et permettre ainsi la simulation de l'intégration PIN-guide.
- Base de données des matériaux intrinsèques comportant les constantes physiques nécessaires à la modélisation de chaque phénomène (électrique, optique, chaleur, etc...) ainsi que les lois d'interpolation pour les alliages.
- Possibilité de résoudre les équations sur des maillages différents voire dans des cadres numériques différents (différences finies, éléments finis, etc...) et donc possibilité d'interpoler une solution d'un maillage sur un autre.

Afin de répondre à ces exigences, nous avons donc développé nos logiciels dans un environnement informatique et numérique commun, nous permettant ainsi de les réunir dans une structure cohérente adaptée à la résolution couplée de problèmes optoélectronique .

1.2. Les schémas de résolution

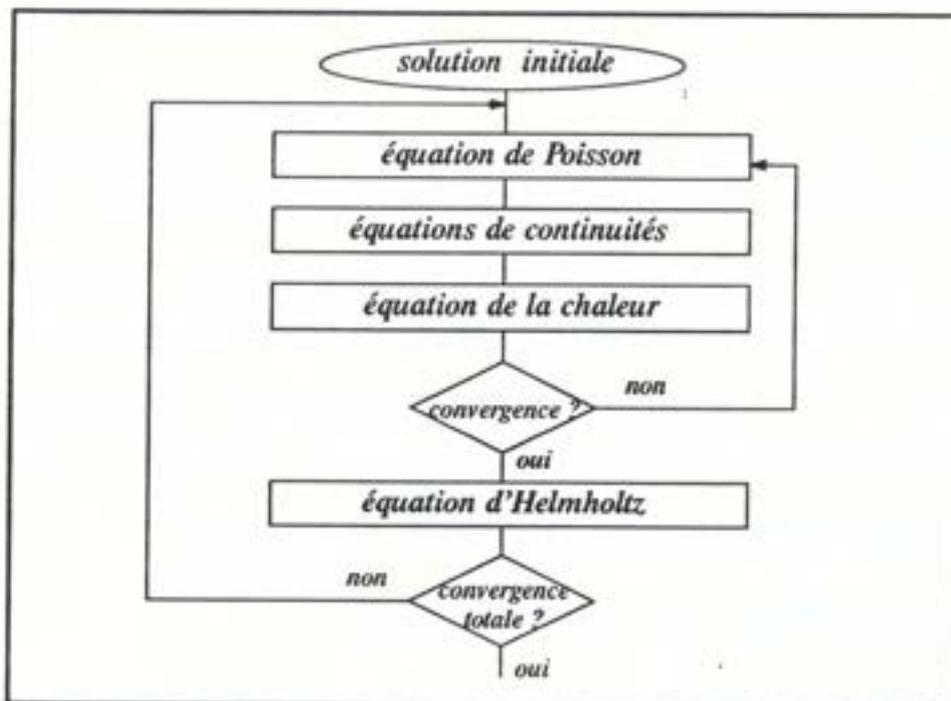


figure 1 : Exemple de schéma découplé pour la simulation du laser

Les schémas algorithmiques retenus sont le plus souvent des schémas découplés correspondant à une généralisation du schéma de Scharfetter-Gummel [7] (figure 1) car ils facilitent l'introduction de nouvelles équations dans le cas où l'on souhaite modifier ou améliorer le modèle. Les méthodes de résolution des problèmes optoélectroniques couplés font de plus couramment appel à des simplifications de modèle (par exemple en simulant séparément la région active et les autres couches dans un laser), ainsi qu'à des algorithmes numériques plus aisés à manipuler (méthode des directions alternées), permettant des interventions constantes de l'utilisateur dans le logiciel [3].

2. LA FONCTION DE RECEPTION : LA PHOTODIODE P-I-N

Le photodétecteur est chargé dans une liaison optique de transformer le signal lumineux en impulsions électriques en des temps de réponse compatibles avec les fréquences de transmission, tout en conservant un bruit propre le plus faible possible et en réduisant les dimensions afin de permettre l'intégration de ce composant dans des circuits microoptoélectroniques de réception [12]. Les récentes avancées dans le domaine des communications optiques et de l'optoélectronique imposent à ces photodétecteurs des temps de réponse de l'ordre d'une centaine de picosecondes.

Parmi les structures photodétectrices rapides, la photodiode P-I-N en GaInAs présente des performances et une simplicité de réalisation qui en font un dispositif très compétitif pour l'intégration dans les circuits de télécommunications optiques [8]. Cette étude a donc pour but d'optimiser les performances fréquentielles, la sensibilité et les dimensions d'une photodiode P-I-N en GaInAs, au moyen de simulations numériques réalisées avec le logiciel *ETHER*, et d'examiner les avantages obtenus par remplacement de la couche GaInAs dopée p par une couche fenêtre "transparente" en AlInAs [9].

2.1. Principe de fonctionnement de la photodiode PIN

La photodiode PIN est constituée de deux zones p et n fortement dopées et d'une zone intrinsèque non intentionnellement dopée. Sous l'action d'une forte polarisation inverse, cette dernière est soumise à un champ électrique. Si l'on éclaire alors la diode, des paires électron-trou sont générées par effet photoélectrique dans cette zone et sont séparées par le champ électrique (figures 2 et 3). Il y a donc création d'un courant dans le circuit extérieur. Les caractéristiques importantes d'une photodiode sont :

- La sensibilité : c'est le rapport du courant électrique généré sur la puissance optique émise. Il est important de pouvoir obtenir une sensibilité élevée.
- Le temps de réponse : il caractérise les performances fréquentielles de la photodiode et doit donc être le plus petit possible.

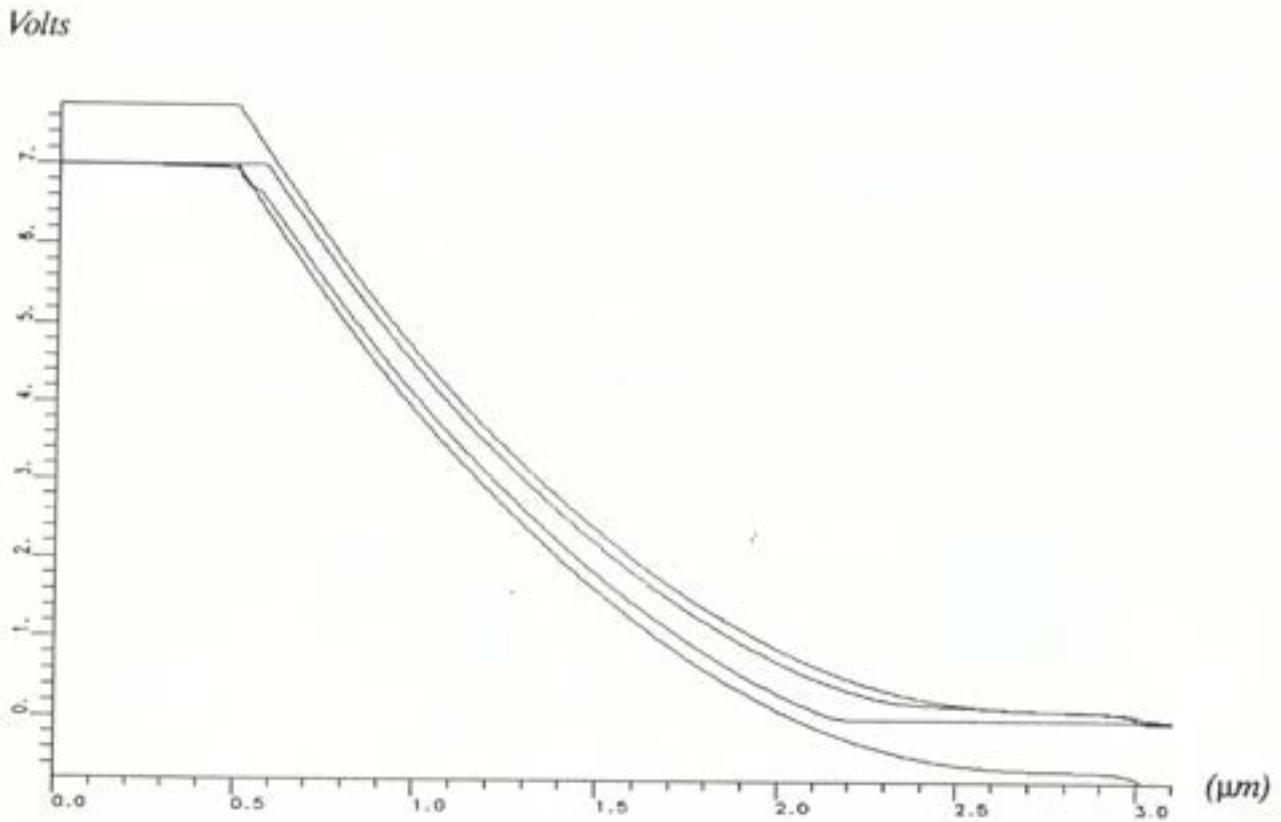


figure 2 : Schéma de bandes d'une photodiode en GaInAs

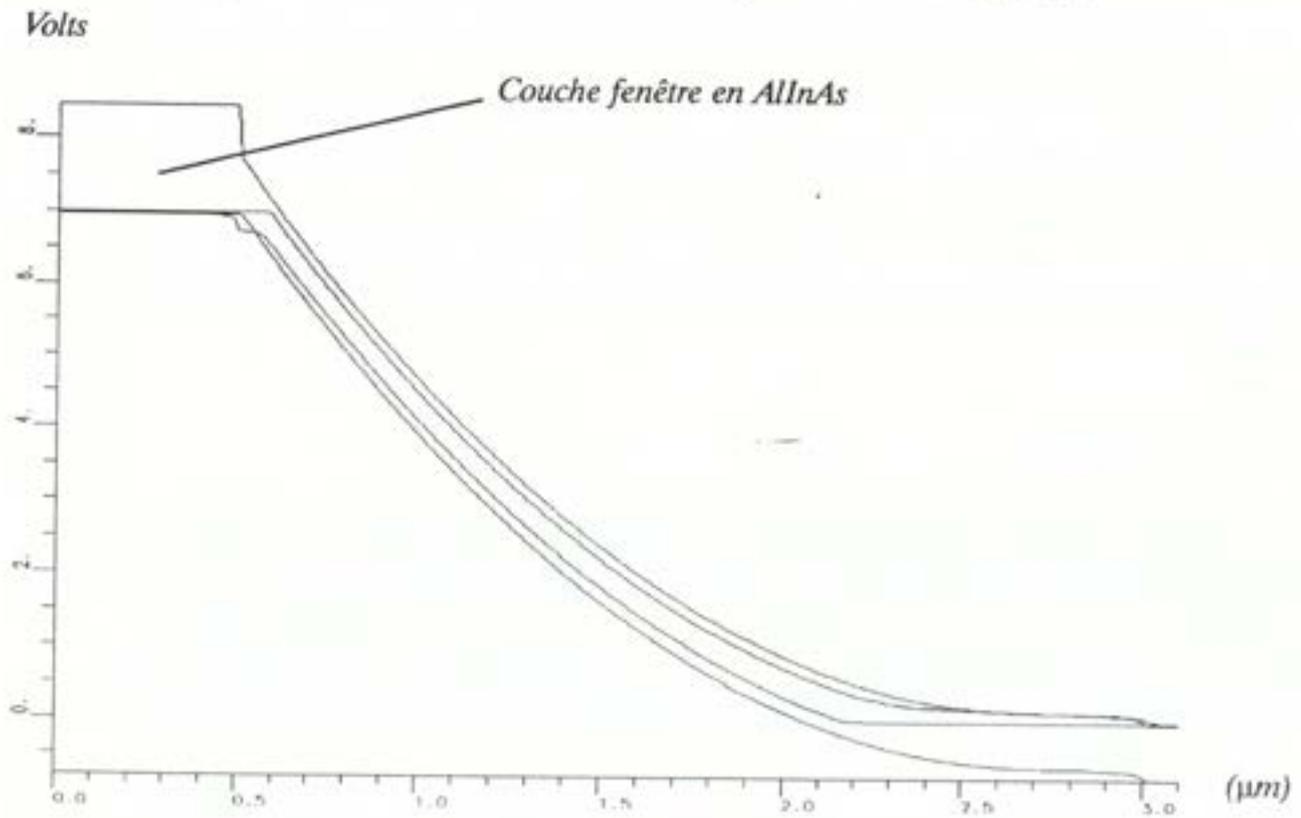


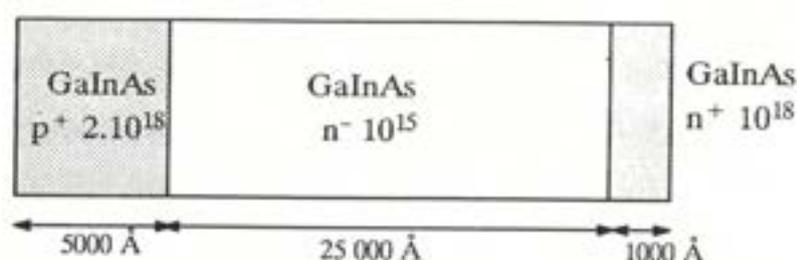
figure 3 : Schéma de bandes d'une photodiode en GaInAs avec fenêtre en AlInAs

- Les dimensions : des dimensions réduites facilitent l'intégration de ces diodes dans des circuits microélectroniques de photoréception.

2.2. Description du problème

2.2.1. La structure

La structure considérée est une diode PIN en $\text{Ga}_{0.47}\text{In}_{0.53}\text{As}$ (en accord de maille avec InP) :



La zone p^+ étant la plus fortement éclairée, elle génère de nombreux porteurs qui mettent beaucoup de temps à être collectés dans la zone n^+ et contribuent de façon importante à accroître le temps de réponse de la photodiode. Afin de résoudre ce problème, nous comparerons dans toute la suite de cette étude la structure décrite précédemment et une structure identique où la couche de $\text{GaInAs } p^+$ a été remplacée par une couche de AlInAs transparente pour les longueurs d'onde utilisées. Cette modification doit contribuer de façon significative à l'amélioration du temps de réponse et de la sensibilité de la diode.

2.2.2. La simulation

Nous avons étudié dans chaque cas la réponse de la photodiode à un éclairage d'une durée d'une picoseconde. Pour ce faire, nous avons simulé, grâce au logiciel *ETHER*, le comportement statique de la diode en l'absence d'éclairage (donc le courant d'obscurité). Nous avons ensuite utilisé le résultat de cette simulation comme condition initiale de la simulation dynamique. Le modèle électrique est donc celui de dérive-diffusion et le couplage avec le faisceau incident est assuré par le terme de génération radiative (cf. Ch. 1, § 3.3.4.5.). En ce qui concerne la structure de données matériaux et

afin de simuler l'absorption du faisceau lumineux dans la structure, l'indice réfractif complexe (dont la partie imaginaire représente le coefficient d'absorption) a été rajouté à la liste des constantes physiques du matériau intrinsèque. Ceci permettra également de simuler les couplages entre composants optiques et électriques (PIN-guide, laser-guide) dans des études bidimensionnelles.

L'impulsion lumineuse est envoyée dix picosecondes après le début de la simulation dynamique afin de vérifier la bonne stabilité de l'algorithme et de s'affranchir de toute oscillation initiale. La réponse en courant créée par cette impulsion lumineuse prend la forme d'un "pic" puis d'une relaxation vers l'équilibre (figure 5). Le temps de réponse de la diode est défini comme la durée écoulée entre le début de l'impulsion et l'instant de la relaxation où le courant atteint 1% de sa valeur pic.

2.3. Etude et optimisation

2.3.1. Influence de la polarisation

Nous allons tout d'abord étudier l'influence de la polarisation sur les performances des photodiodes. En effet la vitesse des porteurs générés dépend très fortement du champ électrique. Il faut donc d'une part assurer une polarisation suffisante pour dépléter complètement la zone isolante et créer ainsi un champ électrique capable d'accélérer les porteurs pendant toute la traversée de la zone isolante, d'autre part essayer de profiter du profil de la courbe de vitesse électronique en fonction du champ qui présente un maximum avant de décroître vers la saturation (figure 4).

Les simulations ont montré qu'il existe une valeur optimale de la polarisation qui permet de maximiser le courant "pic" obtenu tout en conservant un temps de réponse très bon (figures 6 et 7). Il faudra donc dorénavant comparer deux diodes différentes à leur polarisation optimale.

2.3.2. Influence de l'épaisseur

L'épaisseur de la photodiode est une grandeur primordiale. Une faible épaisseur permet un temps de réponse très rapide mais diminue fortement la sensibilité car le nom-

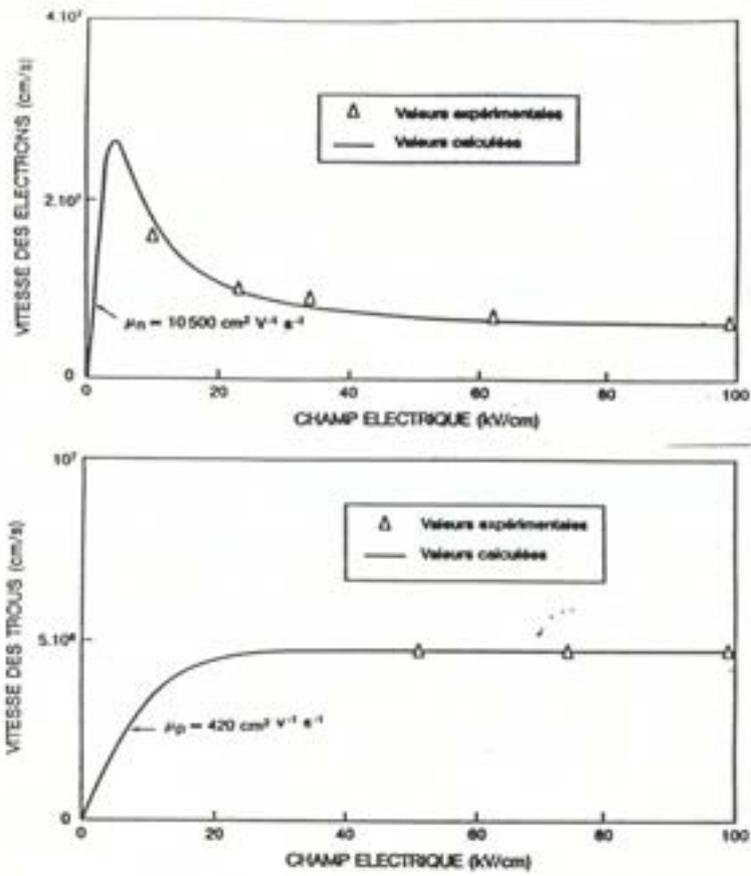


figure 4 : Courbes de vitesse dans GaInAs

$J \text{ (A/cm}^2\text{)}$

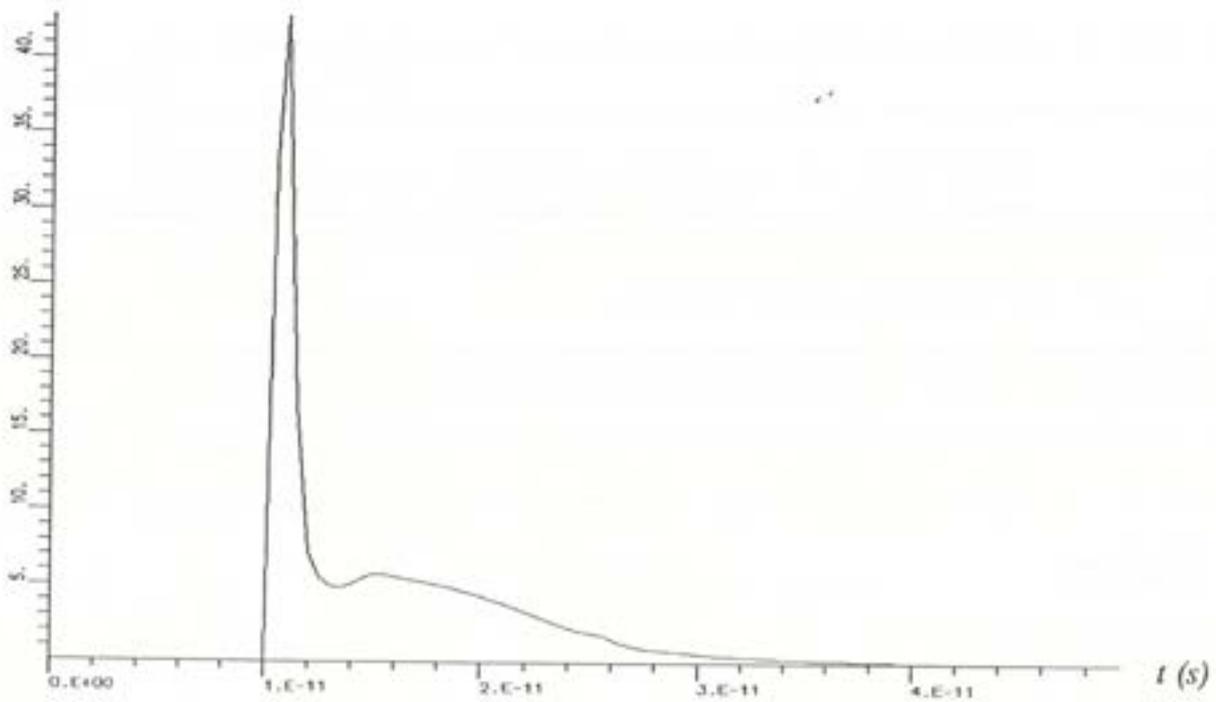


figure 5 : Réponse en courant à un éclairnement de 10^{-12} seconde

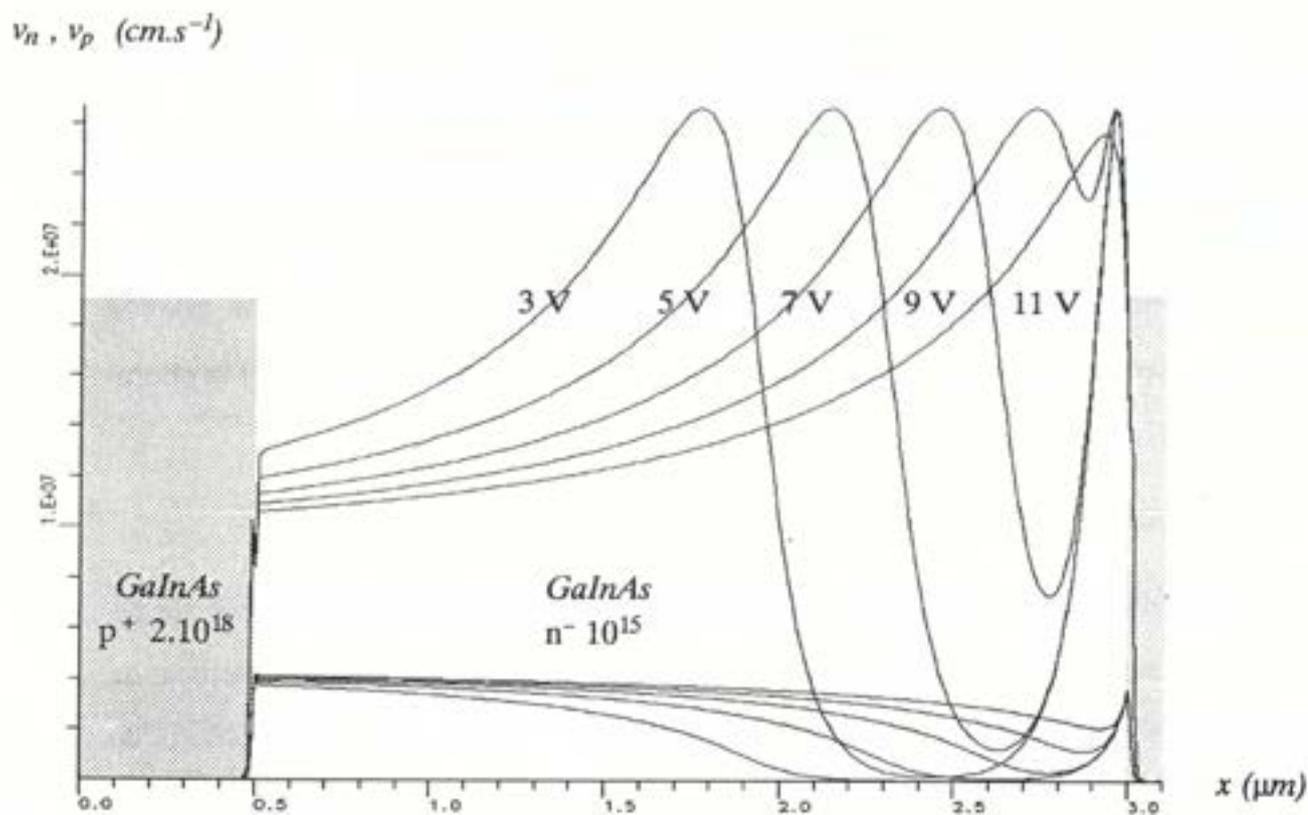


figure 6 : Vitesses dans la structure pour diverses polarisations

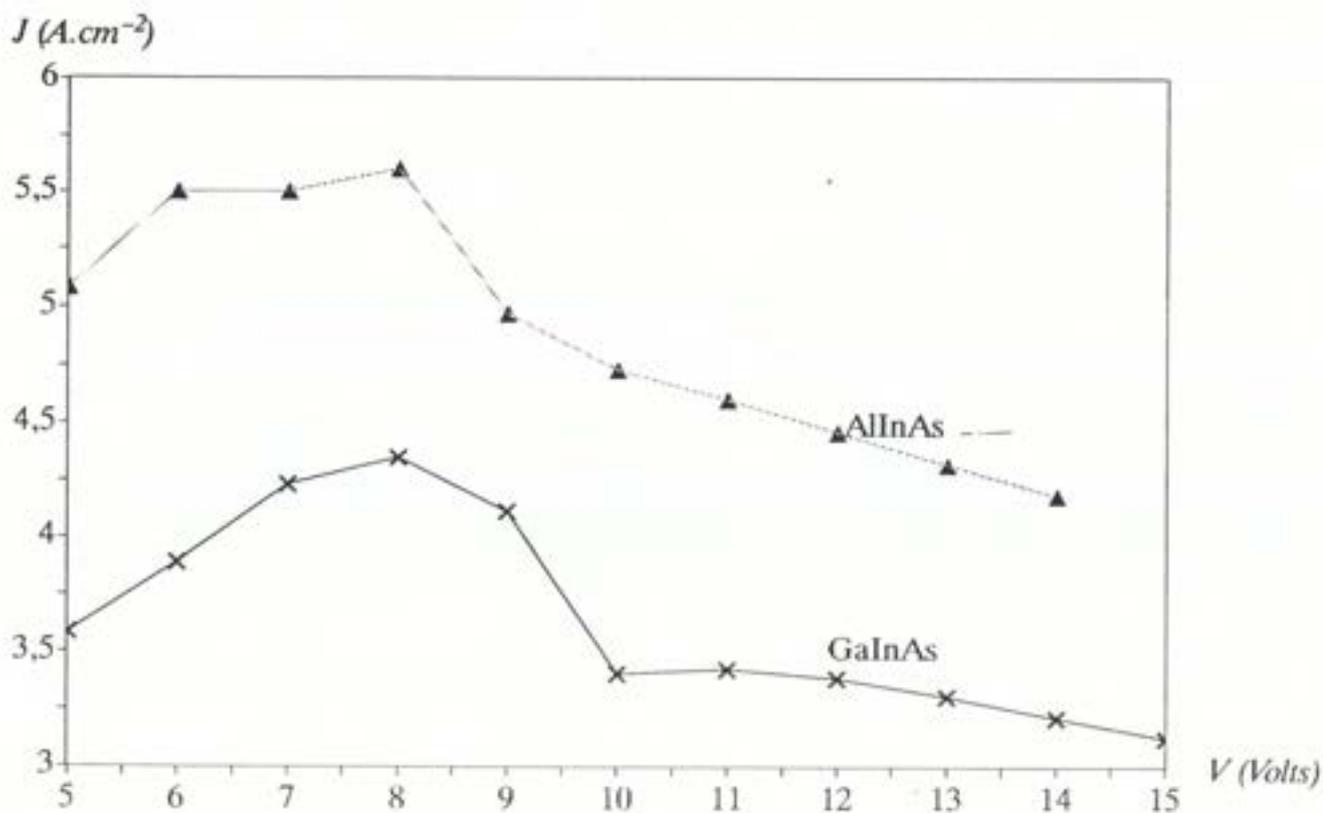


figure 7 : Courant "pic" en fonction de la polarisation

bre de porteurs générés dépend directement de ce paramètre. Il faut donc trouver un compromis entre la sensibilité de la photodiode et son temps de réponse.

Les simulations ont été effectuées pour chaque épaisseur à la tension optimale de fonctionnement car la distribution du champ électrique change évidemment de façon considérable d'une épaisseur à l'autre. Elles correspondent à ce que l'on attendait, tout en laissant apparaître une nette supériorité de la diode avec fenêtre en AlInAs sur la photodiode tout en GaInAs (figures 8 et 9).

2.3.3. Influence de la longueur d'onde

Nous allons maintenant étudier l'influence de la longueur d'onde absorbée sur les performances de la photodiode. En effet le coefficient d'absorption dépend fortement de la longueur d'onde (figure 10) ce qui entraîne une variation du temps de réponse et de la sensibilité. Pour étudier cette influence, nous avons sélectionné une photodiode d'épaisseur 2,5 microns qui représente un bon compromis de performances. Les simulations ont montré pour les deux types de structure une amélioration générale des performances lorsque l'on augmente la longueur d'onde (figure 11) et même un optimum autour de $\lambda = 1,55 \mu\text{m}$ pour la photodiode avec fenêtre en AlInAs.

2.3.4. Comportement en puissance

Nous avons enfin étudié le comportement en puissance de cette photodiode à la longueur d'onde présentant les meilleures performances, c'est-à-dire $\lambda = 1,55 \mu\text{m}$. Les résultats de simulation ont montré un comportement du courant pic très linéaire sur toute la gamme de puissance explorée (figure 12) ainsi qu'une sensibilité et un temps de réponse constants, ce qui est tout à fait conforme aux mesures expérimentales.

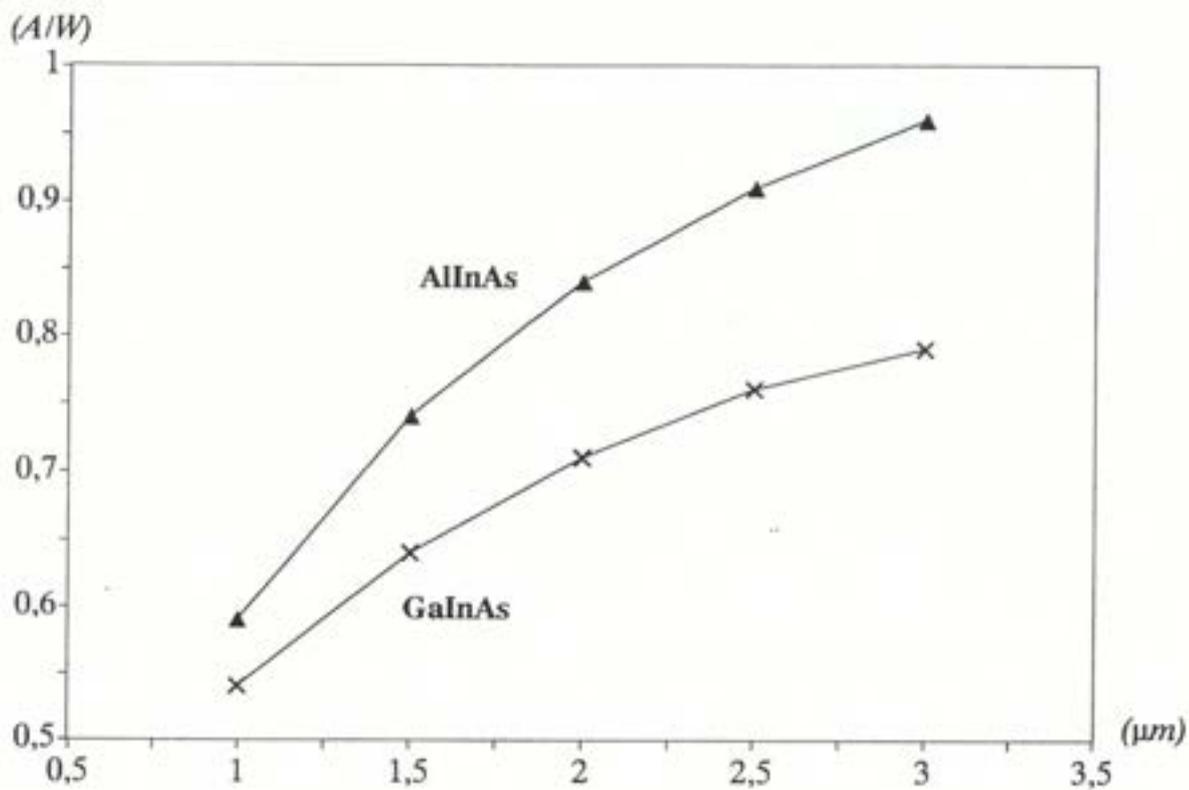


figure 8 : Sensibilité en fonction de l'épaisseur de la diode

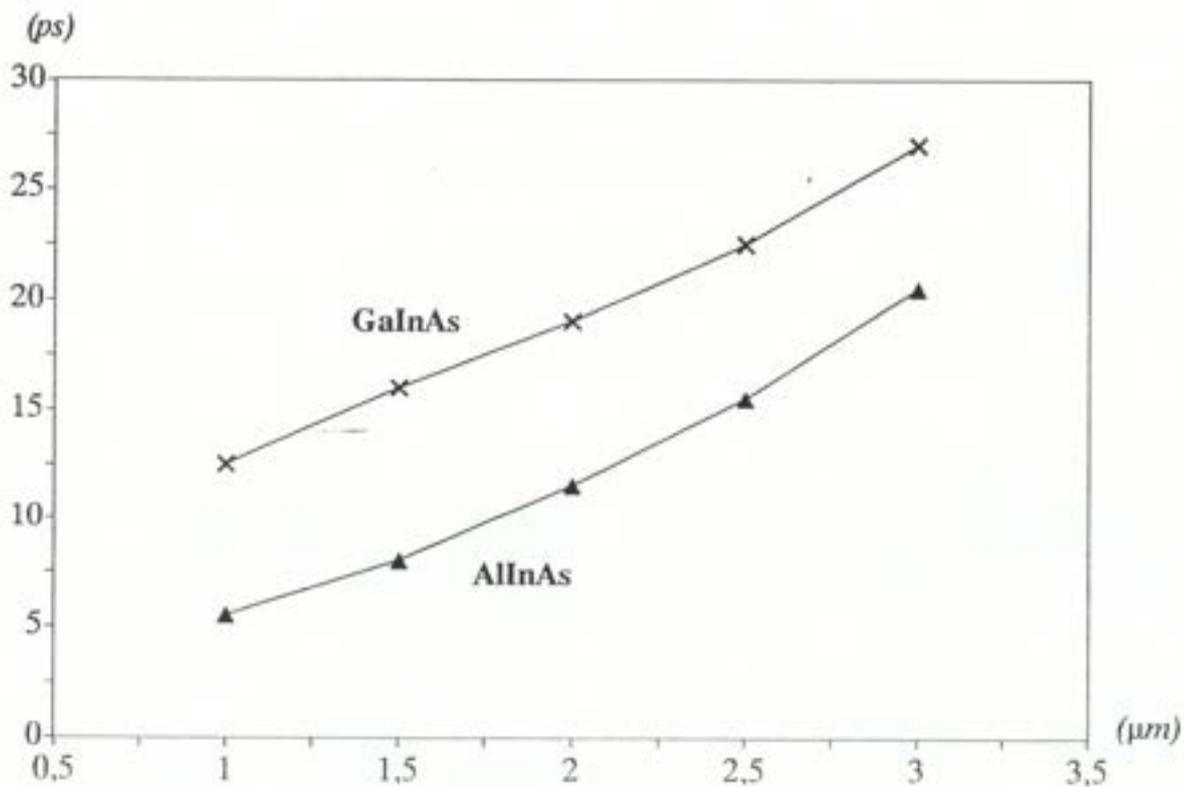


figure 9 : Temps de réponse en fonction de l'épaisseur de la diode

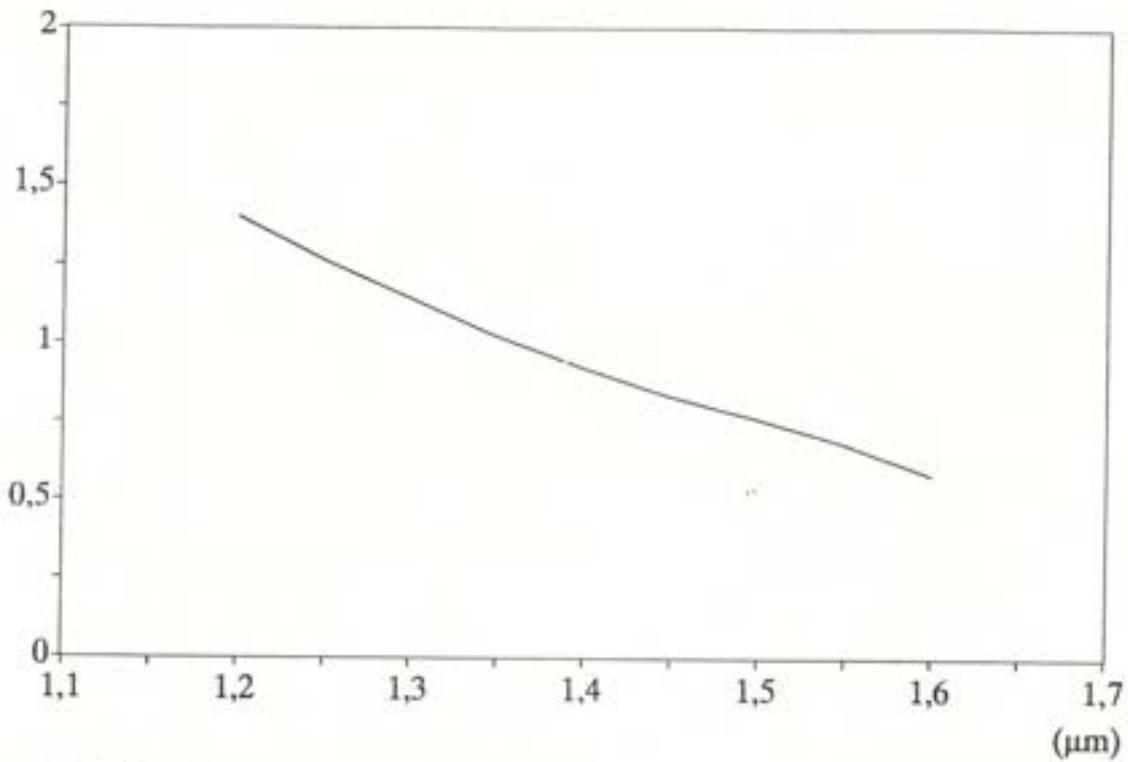


figure 10 : Coefficient d'absorption de GaInAs en fonction de la longueur d'onde

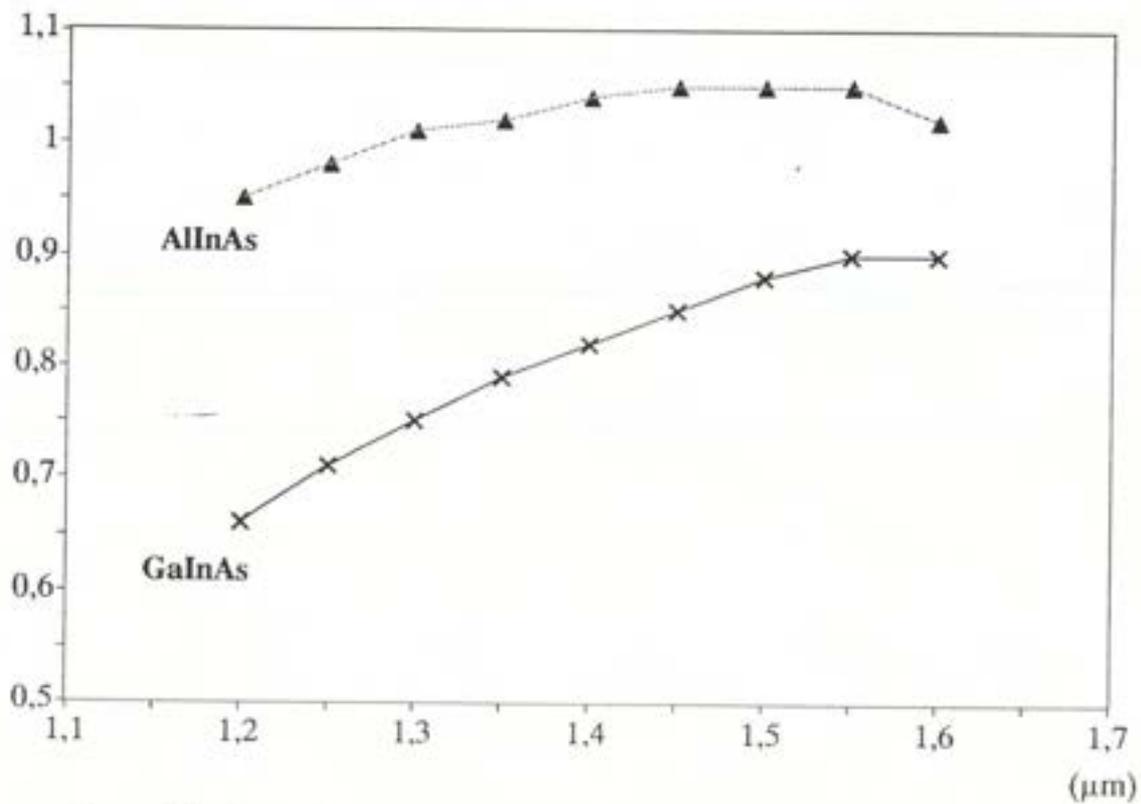


figure 11 : Sensibilité de la diode en fonction de la longueur d'onde

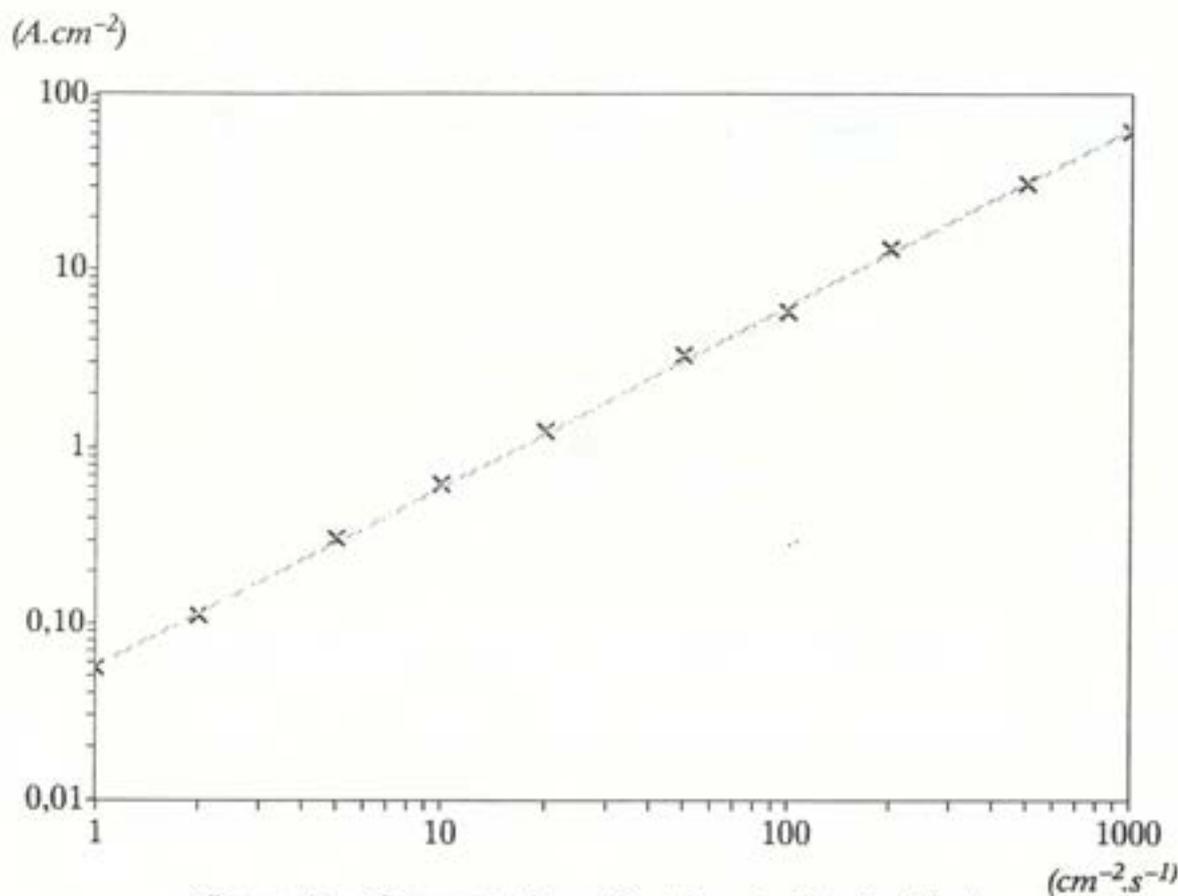


figure 12 : Courant pic en fonction du flux incident

2.4. Comparaisons simulations–expériences

Afin de valider ces simulations, plusieurs types de photodiode ont été réalisés au Laboratoire de Bagneux, en introduisant ou non la couche fenêtre en AlInAs. Les premières expériences ont porté sur l'existence d'un optimum du temps de réponse en fonction de la tension appliquée. Pour mesurer celui-ci, chaque photodiode testée a été insérée dans un circuit électronique (figure 13).

Les simulations effectuées précédemment grâce au logiciel *ETHER* ne prennent en compte que le comportement intrinsèque de la diode PIN. Cependant lorsque celle-ci est intégrée dans un circuit, le temps de réponse global du dispositif prend également en compte les réactions des autres composants que sont respectivement le laser émettant les impulsions lumineuses, les contacts ohmiques pris sur la photodiode (capacités parasites) et les caractéristiques du circuit test (résistance et capacité). Le temps de réponse global

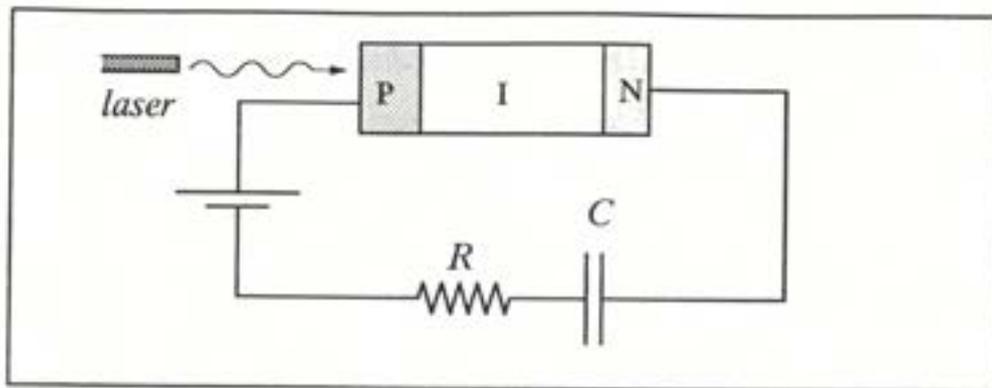


figure 13 : Schéma de montage de la photodiode PIN

est alors obtenu par :

$$\langle \tau_{FWHM} \rangle^2 = \langle \tau_{laser} \rangle^2 + \langle \tau_{transit} \rangle^2 + \langle \tau_{contact} \rangle^2 + \langle \tau_{RC} \rangle^2$$

Néanmoins, si l'on peut mesurer et maîtriser ces facteurs extrinsèques ou parasites avec suffisamment de précision, on peut alors remonter au temps de réponse intrinsèque et utiliser ce montage afin de valider les simulations.

Les résultats expérimentaux ont porté sur la variation du temps de réponse global en fonction de la tension de polarisation et ont permis d'exhiber effectivement un minimum correspondant, comme nous l'avons vu dans les simulations, à une répartition optimale de la courbe de vitesse des porteurs dans la zone isolante (figure 14).

Enfin les mesures de sensibilités ont donné une sensibilité de 0,6 A/W pour une photodiode d'épaisseur 1 micron avec couche fenêtre en GaInAs et 0,9 A/W pour une photodiode d'épaisseur 2 microns avec couche fenêtre en AlInAs ce qui est tout à fait en accord avec les simulations.

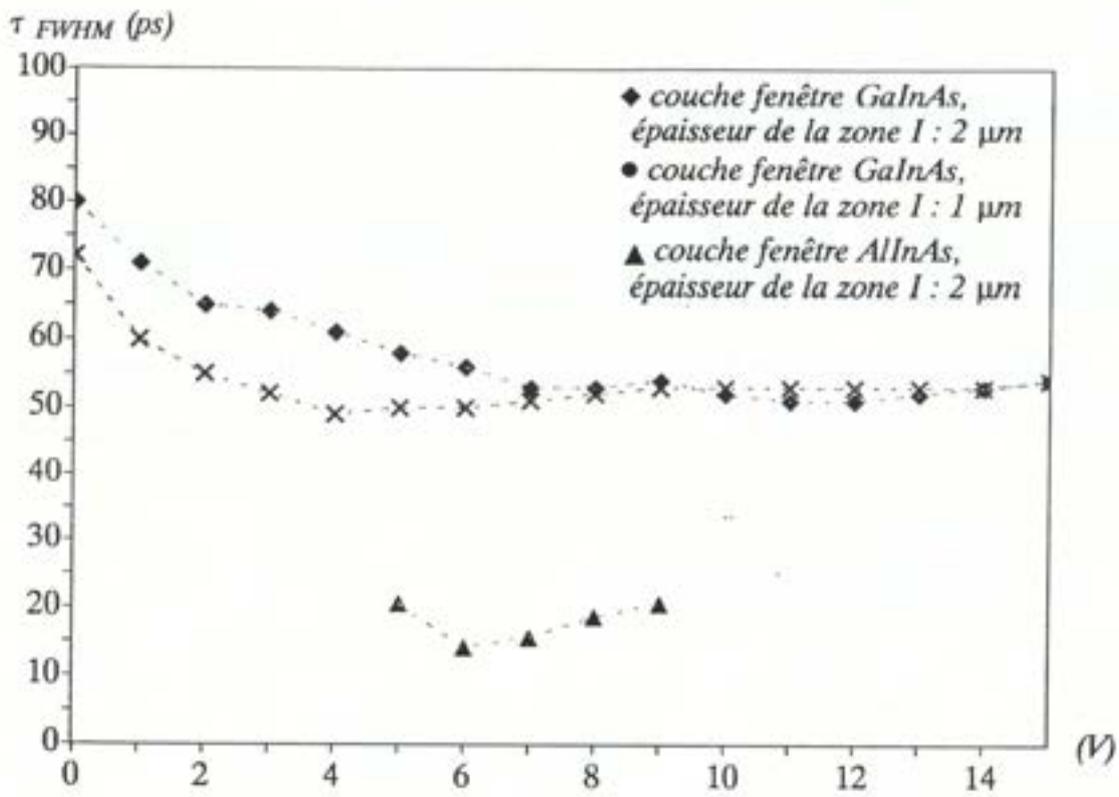


figure 14 : Courbes expérimentales du temps de réponse en fonction de la tension

3. LA FONCTION D'EMISSION : LE LASER BRS

3.1. Le principe de la diode laser

Le développement des télécommunications sur fibres optiques a nécessité la réalisation de composants d'extrémité, et plus particulièrement de lasers, de dimensions réduites pouvant être intégrés dans des circuits optoélectroniques d'émission, et dont les longueurs d'onde de fonctionnement correspondent aux minima d'absorption des matériaux utilisés

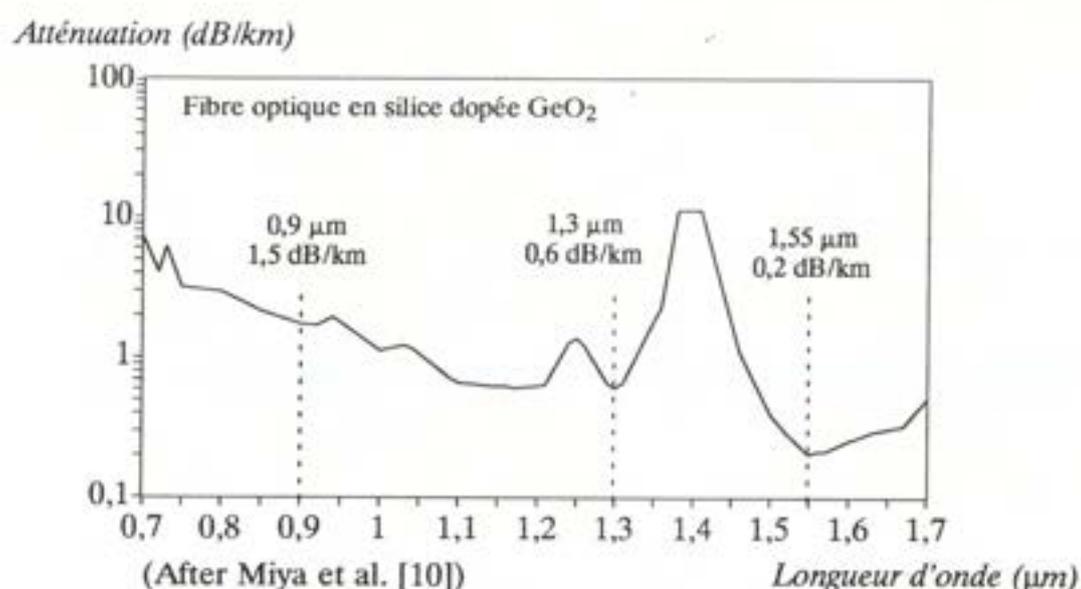


figure 15 : Courbe d'atténuation typique d'une fibre optique en silice

dans les fibres optiques (figure 15). Enfin les télécommunications à très haut débit leur imposent d'être modulables à des fréquences très élevées (plusieurs dizaines de GHz).

Les diodes lasers à semiconducteurs apportent une réponse à ces problèmes multiples. Le principe général de la diode laser consiste à obtenir, grâce à la combinaison de couches de matériaux semiconducteurs, un confinement électrique du courant à travers une zone active. Des densités très importantes d'électrons et de trous y sont alors atteintes, entraînant l'émission de lumière et l'effet laser. La structure de la diode doit ensuite permettre de confiner latéralement la lumière qui sort sous la forme d'un faisceau lumineux cohérent (figure 16).

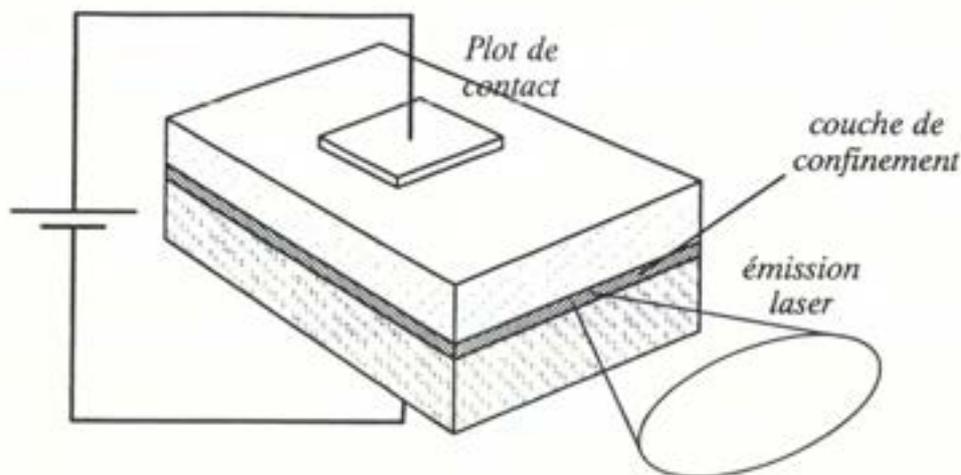


figure 16 : Géométrie standard d'une diode laser

Dans ce type de dispositif l'émission photonique cohérente est donc assurée par les transitions entre les bandes de valence et de conduction dans la couche active. La simplicité du processus physique permet de le commander très efficacement par un transistor qui peut être intégré sur le même substrat que la diode laser, autorisant ainsi des fréquences de modulation élevées (plusieurs GHz). Les diodes laser sont utilisées aujourd'hui couramment dans les communications par fibre optique, la lecture et l'écriture optique, les disques optiques ainsi que dans la modulation numérique ou analogique à haute fréquence.

3.2. Le laser à ruban enterré (Buried Ridge Stripe)

La géométrie classique d'une diode laser à double hétérostructure consiste en un matériau à faible hauteur de bande interdite directe correspondant à la longueur d'onde désirée mis en "sandwich" entre deux couches de type p et n constituées par un matériau à plus grande hauteur de bande interdite (figure 16). L'hétérostructure a pour avantage de réduire le courant de seuil nécessaire pour atteindre l'inversion de population et donc l'effet laser. Ceci permet un fonctionnement continu en évitant des températures trop élevées qui risqueraient d'endommager le dispositif.

La figure 17 présente une coupe schématique d'un laser à ruban enterré ou BRS (Buried Ridge Strip). Celui-ci est composé d'une couche non-intentionnellement dopée

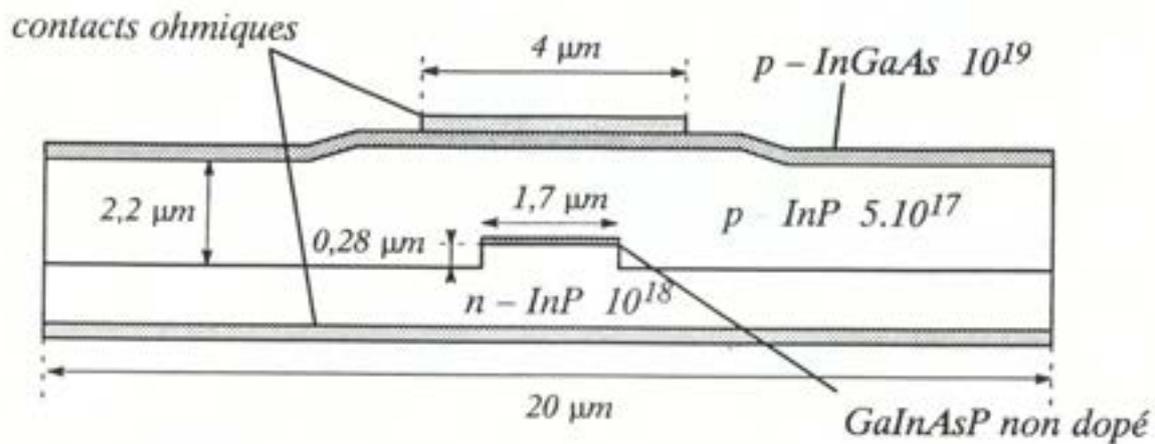


figure 17 : Géométrie du laser BRS

de GaInAsP accordé sur InP, d'épaisseur 0,12 microns et qui constitue la couche active, déposée sur un substrat InP dopé n (10^{18} cm^{-3}) puis attaquée par des procédés de lithographie afin d'obtenir un ruban. Celui-ci est ensuite recouvert d'une couche InP dopée p ($5.10^{17} \text{ cm}^{-3}$). Le contact sur la face supérieure est réalisé par dépôt d'une couche en InGaAs fortement dopée (10^{19} cm^{-3}) recouverte ensuite d'une couche d'or.

Le matériau GaInAsP employé dans la couche active représente en fait une famille d'alliages $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}$ indiquée par les pourcentages d'alliage en gallium et arsenic x et y . L'accord de maille entre ce matériau et InP impose une condition entre ces deux pourcentages ($x = 0,47y$) et on obtient donc une famille indiquée par un seul paramètre. A chaque valeur de ce paramètre correspond une hauteur de bande interdite différente et donc une longueur d'onde d'émission différente. Les valeurs de x et y correspondant à $\lambda = 1,55 \mu\text{m}$ sont respectivement $y = 0,6$ et $x = 0,28$.

La structure considérée permet donc d'obtenir un confinement du courant électrique grâce aux différences de tension de seuil entre l'homojonction InP et l'hétérojonction GaInAsP/InP. Ce confinement permet d'atteindre l'inversion de population et l'effet la-

ser. Le confinement optique est alors assuré par les différences d'indice réfractif entre les couches InP et le ruban GaInAsP.

Il est extrêmement important de maintenir la plus grande partie du courant dans la zone active. En effet les éventuelles fuites de courant à travers l'homojonction InP ont pour conséquences d'augmenter de façon considérable le courant de seuil nécessaire à l'effet laser et donc la consommation et la température de fonctionnement du dispositif. Le but de cette étude est de déterminer ces courants de fuite en mode statique et d'identifier les points de fuites éventuels afin d'améliorer la conception et la fabrication.

3.3. La simulation de la fabrication

Nous avons tout d'abord utilisé le logiciel *TITAN III-V* afin de simuler la fabrication du laser BRS. Celle-ci a été subdivisée en six étapes décrites dans la figure 18. Le dépôt de la couche InP dopée p a été simulé en deux temps afin de permettre un maillage plus fin à la jonction *InP p/InP n* tout en gardant une taille totale de maillage raisonnable. Les étapes simulées ne font appel qu'à des algorithmes géométriques et sont donc très rapides, autorisant une grande souplesse dans la modification et l'optimisation du dispositif (figure 19).

Une fois la simulation de la fabrication effectuée, la géométrie du dispositif, les valeurs des concentrations de dopants ainsi que les données du maillage sont stockées dans un fichier binaire généré par le gestionnaire de base de données *DAMSEL*. Ce fichier peut être alors utilisé comme entrée par le logiciel *DENEB* qui crée, à partir également des données physiques électriques des matériaux fournies indépendamment, la structure complète de données nécessaire à la simulation électrique bidimensionnel du dispositif.

Le maillage obtenu après la simulation de la fabrication est réalisé grâce à un algorithme de type Voronoï provenant de la bibliothèque de routines *MODULEF* [11] destinée à la simulation en éléments finis (figure 20).

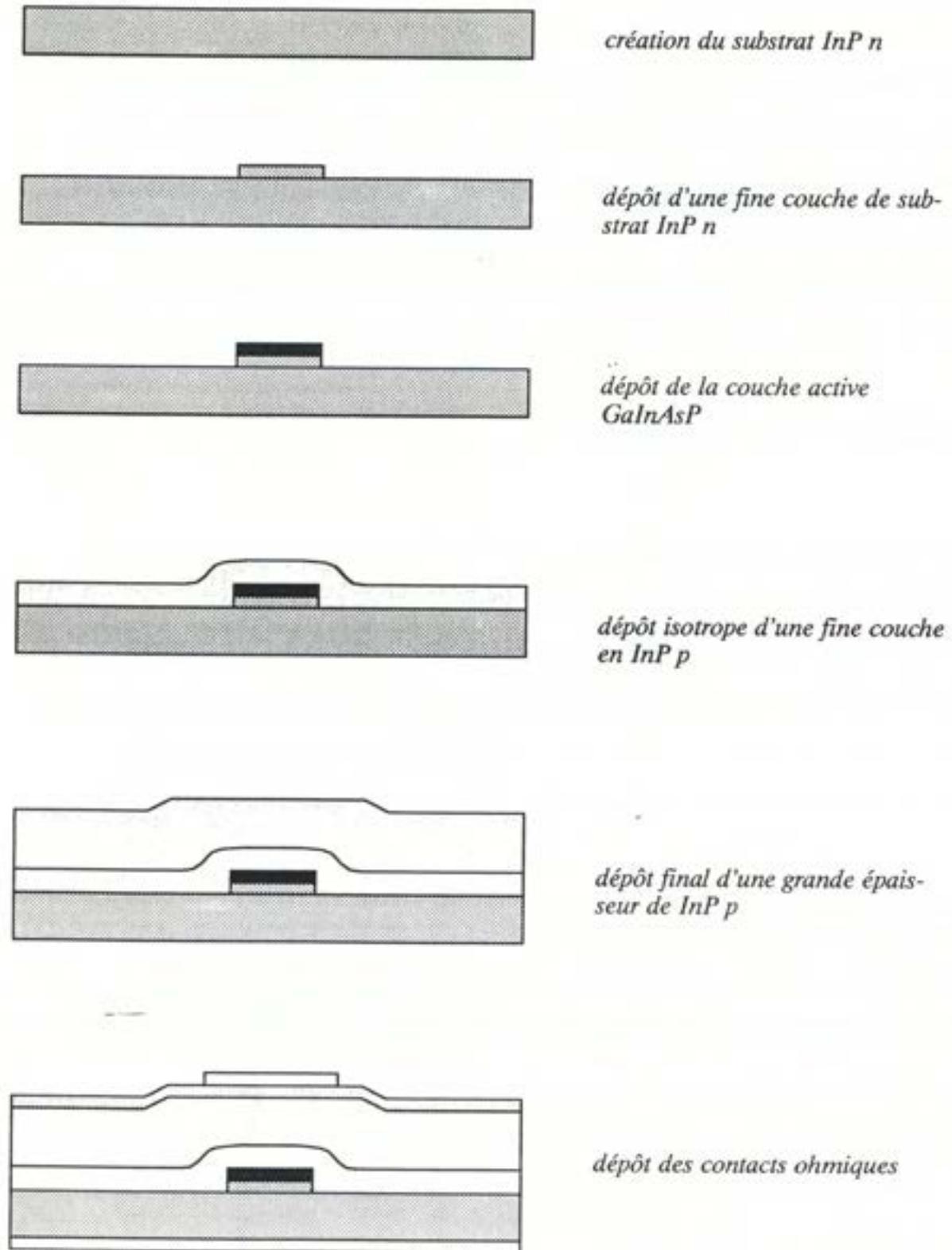


figure 18 : Etapes de simulation de la fabrication du laser BRS

```

titre COURANT DE FUITE DANS UNE MOITIE DE STRUCTURE BRS

modl> materiau nom = nInP1
modl> materiau nom = nInP2
modl> materiau nom = pInP1
modl> materiau nom = pInP2
modl> materiau nom = InGaAsP
modl> materiau nom = InGaAs
modl> materiau nom = au

modl> elemen nom = be charge = -1
modl> elemen nom = si charge = 1

modl> materlem mat = nInP1 element = si
modl> materlem mat = nInP2 element = si
modl> materlem mat = pInP1 element = be
modl> materlem mat = pInP2 element = be
modl> materlem mat = InGaAsP element = si
modl> materlem mat = InGaAs element = be
modl> materlem mat = au element = be

comm definition du substrat nInP1 de largeur 20 microns et d'epaisseur 6.5 microns
substrat mater = nInP1 width = 20 height = 6.5 elem1 = si dop1 = 1e18

comm epitaxie de la couche de confinement nInP2 d'epaisseur 0.28 microns et de largeur 1.7 microns
depmask mater = nInP2 thickness = 0.28 start = 9.15 end = 10.85 elem1 = si dop1 = 1e18

comm epitaxie de la couche active InGaAsP d'epaisseur 0.12 microns de largeur 1.7 microns
depmask mater = InGaAsP thick = 0.12 start = 9.15 end = 10.85

comm epitaxie isotrope d'une couche pInP1
depmask mater = pInP1 thick = 0.2 elem1 = be dop1 = 5e17

comm epitaxie suivie d'attaque de la couche active pInP2 pour avoir un depot planar
depmask mater = pInP2 thick = 2.2 elem1 = be dop1 = 5e17

comm le fichier RECES decrit le profil final de gravure (nombre des points et les coordonnees)
reces file = reces nam1 = pInP2

comm definition du masque pour la gravure MESA
defmask name = mesa start = 6.2801 end = 13.7199

comm gravure mesa de pInP2 avec un angle = 55 degres et de profondeur 0.4 microns
reces using = mesa depth = 0.4 nam1 = pInP2 angle = 55

comm epitaxie de InGaAs fortement dope d'epaisseur 0.2 microns
depmask mater = InGaAs thick = 0.2 elem1 = be dop1 = 1e19

comm depot du contact Au de largeur 4 microns et d'epaisseur 0.1 microns
depmask mater = Au thick = 0.1 START = 7.998 END = 12.002 elem1 = be dop1 = 1e19

comm maillage de la structure
auto mater = au dx = 0.4
auto mater = InGaAs dx = 0.6
auto mater = InGaAsP dx = 0.08
auto mater = nInP1 dx = 0.2
auto mater = nInP2 dx = 0.2
auto mater = pInP1 dx = 0.15
auto mater = pInP2 dx = 0.6

comm definition des contacts ohmiques
contact nam = AU mater = AU model = OHC1 pot = 0.
contact nam = MASSE bulk model = OHC2 pot = 0.

save file = LASER

```

figure 19 : Fichier de commande TITAN pour la fabrication du laser BRS

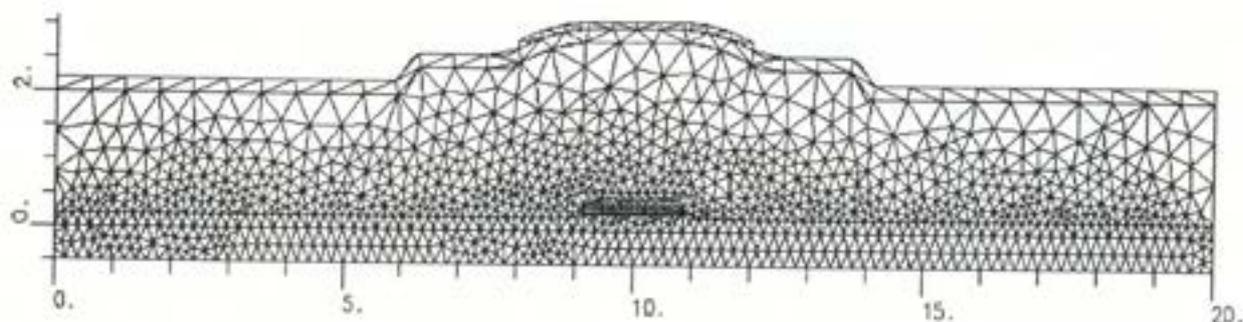


figure 20 : Maillage de la structure laser

3.4. La simulation unidimensionnelle du comportement électronique

Le confinement électrique du courant dans la zone active est assuré simultanément de deux manières. Tout d'abord la géométrie de la structure proposée, qui surélève la couche en GaInAsP, favorise le passage du courant à travers celle-ci. De plus les deux jonctions P-N ($InP\ p/InP\ n$) et P-I-N ($InP\ p/GaInAsP\ non\ dopé/InP\ n$) n'ont pas les mêmes tensions de seuil. Lorsque l'on polarise progressivement la structure, on atteint en premier la tension de seuil de l'hétérojonction : celle-ci devient alors passante. Si l'on dépasse la tension de seuil de l'homojonction, cette dernière se met également à conduire et une partie non-négligeable du courant peut fuir sans passer par la zone active. Il existe donc une plage de tension optimale.

L'intérêt de la simulation unidimensionnelle est dans ce cas de pouvoir estimer a priori ces deux tensions de seuil et donc l'intervalle de fonctionnement optimal de la diode laser. Les simulations ont été effectuées avec le logiciel *ETHER* qui utilise la même base de données matériaux que *DENEB*. Elles ont permis de mettre en évidence une plage de fonctionnement comprise entre 0,8 Volt et 1,2 Volt (figures 21 et 22).

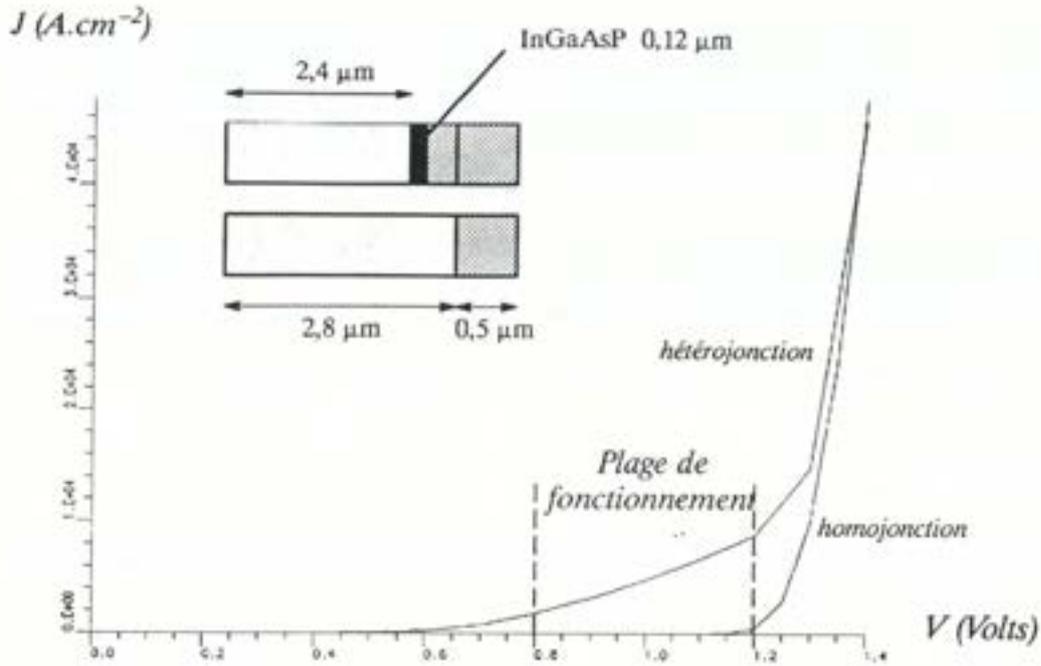


figure 21 : Caractéristiques de l'homojonction et de l'hétérojonction

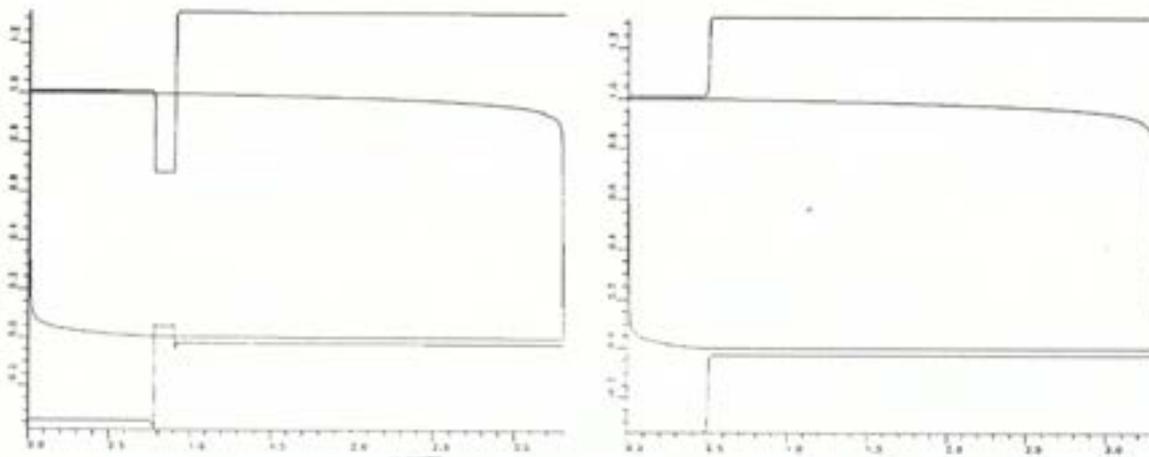


figure 22 : Schémas de bandes des jonctions à 1,0 Volt

3.5. La simulation bidimensionnelle du comportement électronique

L'enterrement de la zone active du laser est réalisée par une attaque de la zone InP dopée n suivie d'une reprise d'épitaxie en InP dopé p. L'état de surface du substrat InP n est souvent très dégradé ce qui entraîne des durées de vie non-radiatives pour les porteurs

extrêmement courtes et donc de très fortes recombinaisons à l'interface. Les caractéristiques de l'homojonction et de l'hétérojonction sont alors fortement modifiées et des fuites importantes apparaissent, entraînant la chute du rendement.

L'objet de cette étude est donc de simuler le comportement de la structure en fonction des durées de vies non-radiatives à l'interface et d'en déduire une caractérisation des états de surface dans les structures réalisées au Laboratoire de Bagnex.

3.5.1. Le modèle résistif

Une première approche de ce problème a été réalisée par K. Souissi et al. [12] pour une structure très semblable. Elle consiste à résoudre l'équation de Poisson non-linéaire uniquement dans la zone supérieure du laser dopée p, en imposant une conditions aux limites de Dirichlet sur le contact ohmique supérieure (tension imposée), des conditions de Neumann sur les bords isolants (nullité de la composante normale du gradient de potentiel) et des conditions aux limites non-linéaires sur les jonctions avec le substrat dopé n et la zone active, correspondant en fait à des conditions aux limites en courant. Les lois de comportement pour chaque jonction sont régies par deux paramètres : le courant \bar{J}_s et le facteur de non-idéalité n (cf. éq. 5.1). Elles sont obtenues par "fit" des caractéristiques

$$\bar{J} = \bar{J}_s \left(\exp\left(\frac{qV}{nkT}\right) - 1 \right) \quad (5.1)$$

mesurées sur le dispositif réel et permettent donc de rendre compte des phénomènes de dégradation des interfaces dus à la reprise d'épitaxie et qui influent sur le facteur de non-idéalité. Ce modèle revient finalement à considérer la zone dopée n comme un réseau infini de résistances en parallèles et suppose que les porteurs suivent les lignes de champ du potentiel électrostatique (figure 23).

La simulation de ce dispositif à plusieurs polarisations a permis de mettre en évidence la présence de courants de fuites dans le laser à l'interface InP p / InP n à partir de 1.3 Volt comme le laissait prévoir la comparaison des caractéristiques dans l'étude unidimensionnelle. Grâce à cette simulation, il a été possible d'identifier précisément les zones

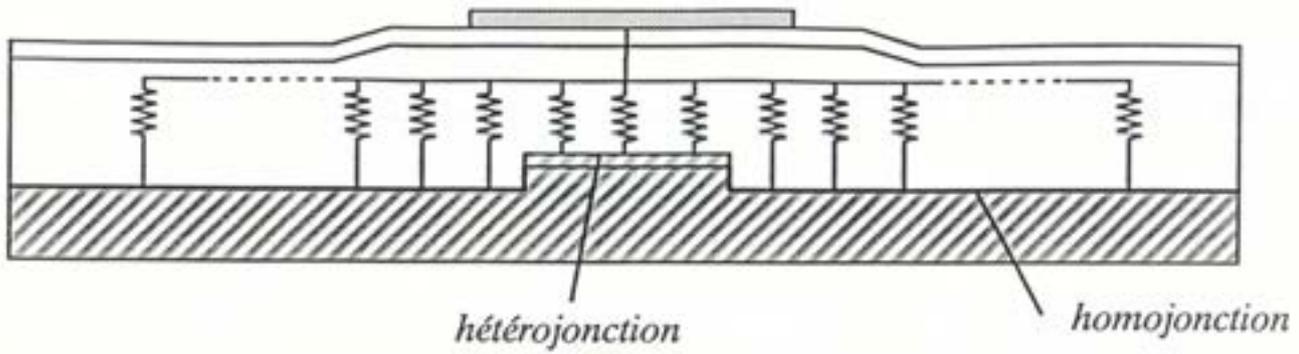


figure 23 : Schéma de principe de la modélisation par l'équation de Poisson

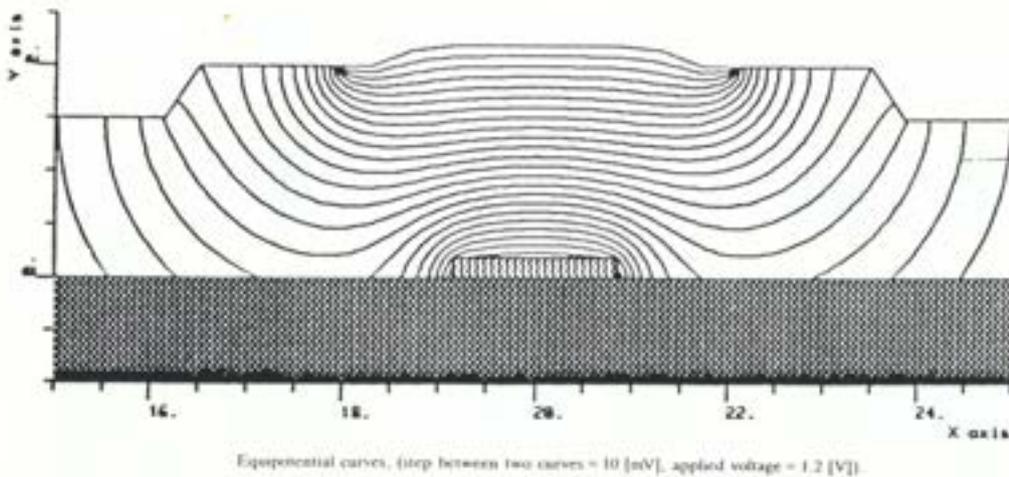
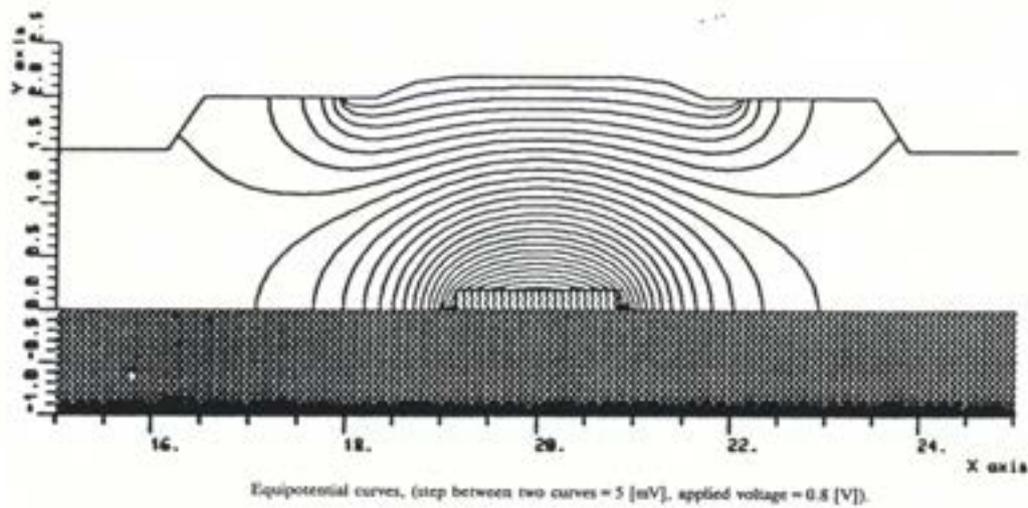


figure 24 : Courbes de niveaux du potentiel électrostatique dans le modèle résistif

de fuite et d'accroître les performances du laser de plus de 50% après traitement localisé des interfaces, autorisant ainsi un très bon comportement en puissance du dispositif.

3.5.2. La simulation complète en dérive-diffusion

Afin de mieux représenter les phénomènes physiques aux interfaces des jonctions InP p/InP n, InP p/InGaAsP et InGaAsP/InP n (notamment les phénomènes de recombinaisons dûs à la dégradation des interfaces lors de la reprise d'épitaxie), nous avons introduit dans les étapes de fabrication le dépôt d'une mince couche en InP dopé p à la reprise d'épitaxie sur le substrat n-Inp. Ceci nous a permis ensuite d'attribuer, de façon spécifique, des valeurs très faibles aux durées de vie non-radiatives dans cette couche, ce qui représente la dégradation de l'interface p-InP/n-InP.

Bien qu'il ait été démontré l'importance des recombinaisons Auger dans le fonctionnement des diodes laser [13,14], nous n'avons pris en compte que les recombinaisons RSH, afin, d'une part de pouvoir effectuer des comparaisons avec le modèle résistif utilisé précédemment, et d'autre part de pouvoir étudier plus en détail l'influence des durées de vie non-radiatives sur les fuites éventuelles et le lieu de ces fuites.

Les simulations effectuées avec le logiciel *DENE*B ont permis de mettre en évidence l'influence importante des recombinaisons sur les valeurs des courants de fuite dans le laser BRS [15]. Pour des durées de vie importantes (10^{-6} s, recombinaisons faibles), les courbes de niveaux du potentiel électrostatique et du niveau de Fermi font apparaître une conduction principalement à travers la zone active (figures 25 à 30 : les densités de courants étant proportionnels aux gradients des niveaux de Fermi, les lignes de courant sont orthogonales aux courbes de niveaux).

Lorsque l'on augmente les recombinaisons ($\tau_n = \tau_p = 10^{-9}$ s, figures 31 à 34) les lignes de courant à forte polarisation (1,3 Volt) sont affectées et l'on observe une fuite à l'interface p-InP/n-InP à environ 6 microns du centre de la zone active. Si les recombinaisons deviennent plus importantes encore ($\tau_n = \tau_p = 10^{-10}$ s, figures 35 à 38), les fuites s'intensifient et le lieu des fuites se rapproche de la zone active (3,5 microns du centre).

Ces résultats obtenus sont donc très proches des simulations effectuées à l'aide du modèle résistif et correspondent tout à fait aux observations expérimentales.

3.5.3. Conclusion

L'étude couplée sur les logiciels *ETHER* et *DENEB* des courants de fuite dans le laser BRS ont permis de confirmer la validité du modèle résistif utilisé auparavant et de caractériser la qualité de l'interface obtenue par reprise d'épitaxie grâce aux durées de vie non-radiatives, par l'intermédiaire des courants de fuites (figures 39 et 40).

L'étape suivante d'une telle simulation pourrait consister à résoudre de manière couplée l'équation d'Helmholtz bidimensionnelle dans cette structure afin de déterminer le mode lumineux généré dans la cavité. Celui-ci serait ensuite utilisé comme condition initiale de la propagation dans le logiciel *ALCOR*, permettant ainsi d'étudier et d'optimiser le couplage laser-guide.

$$\tau_n = \tau_p = 10^{-6} \text{ s}$$

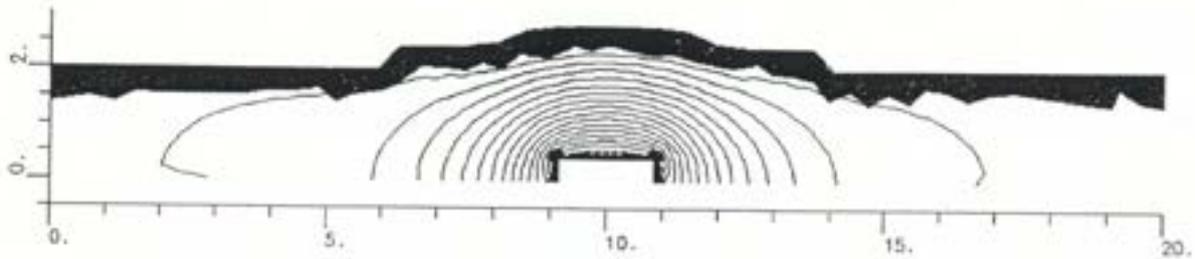


figure 25 : Courbes de niveaux du potentiel électrostatique à 1,0 Volt

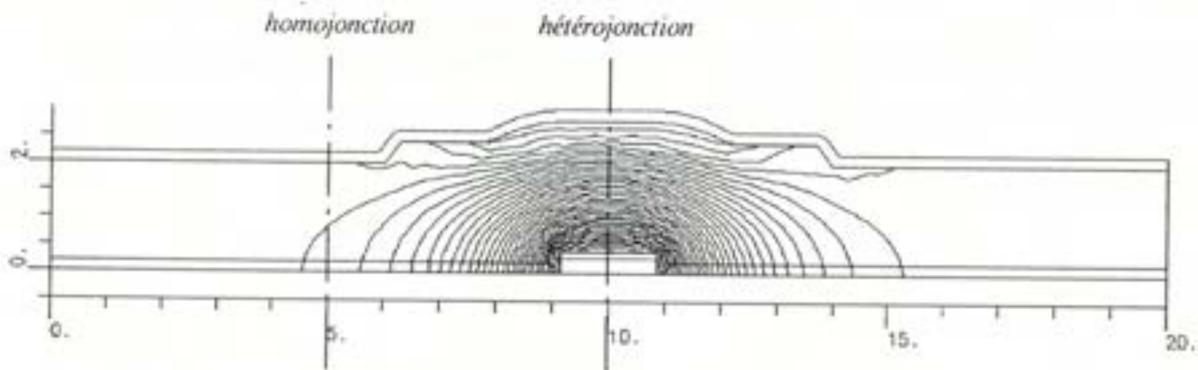


figure 26 : Courbes de niveaux du potentiel de Fermi des trous à 1,0 Volt

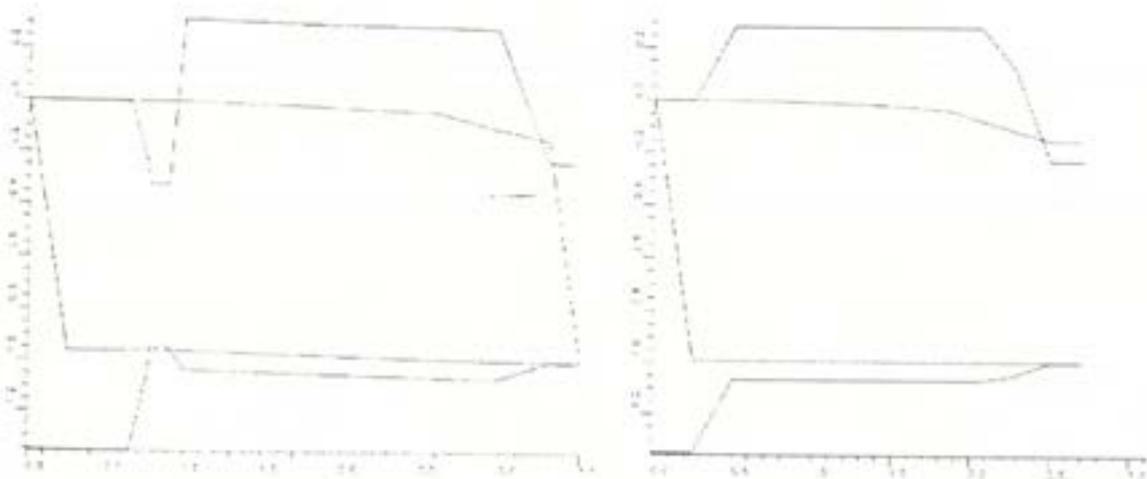


figure 27 : Vues en coupe X des schémas de bande des jonctions

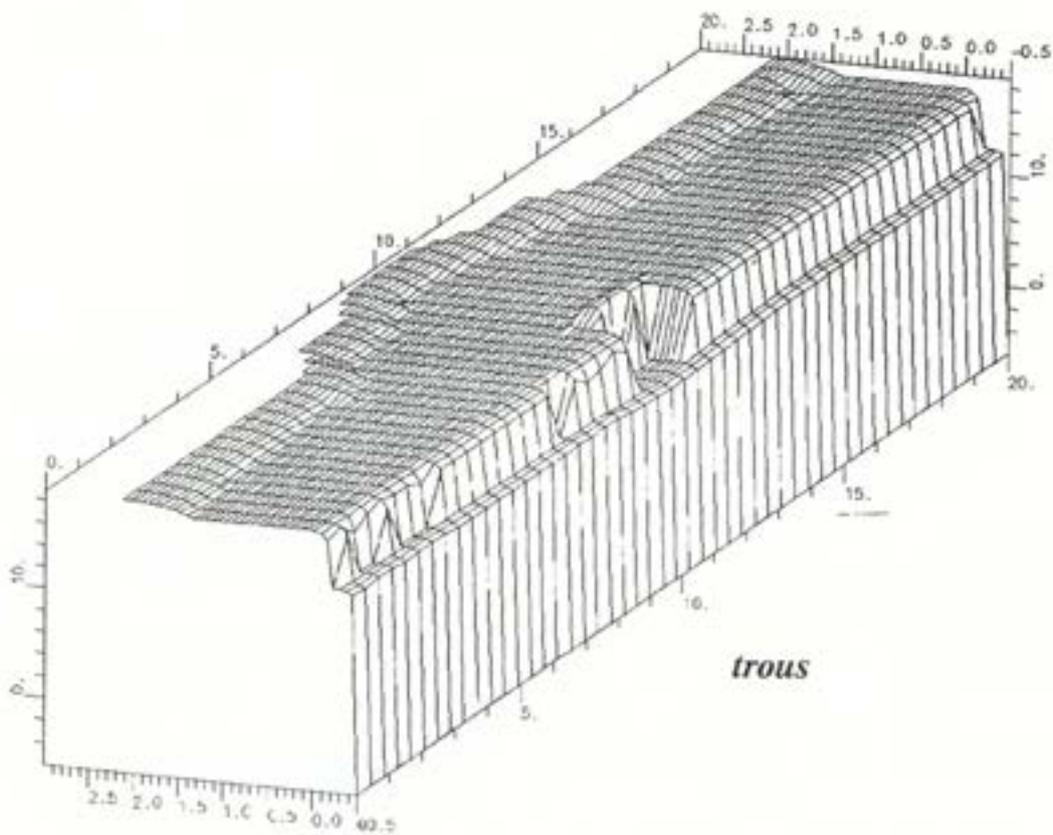
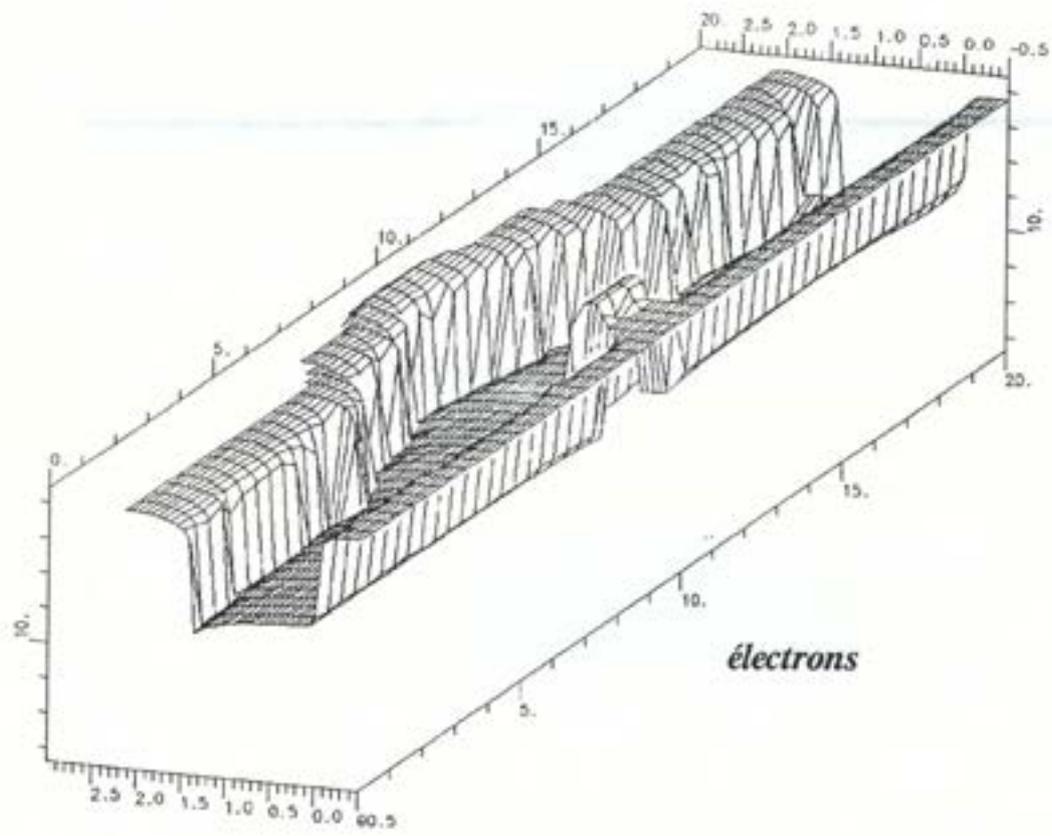


figure 28 : densités de porteurs dans le laser polarisé à 1,0 Volt

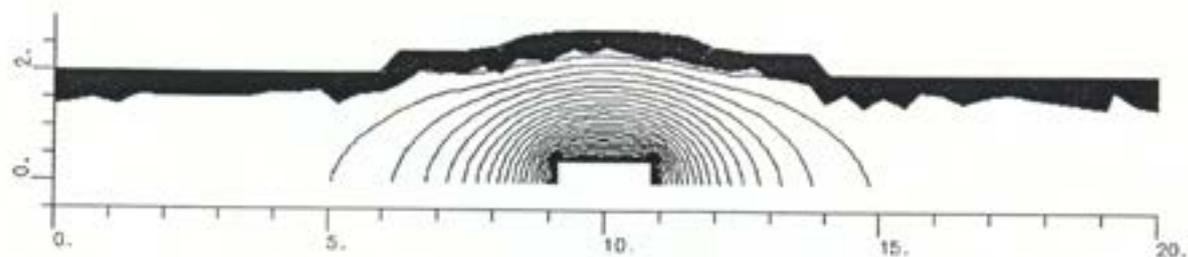


figure 29 : Courbes de niveaux du potentiel électrostatique à 1,3 Volt

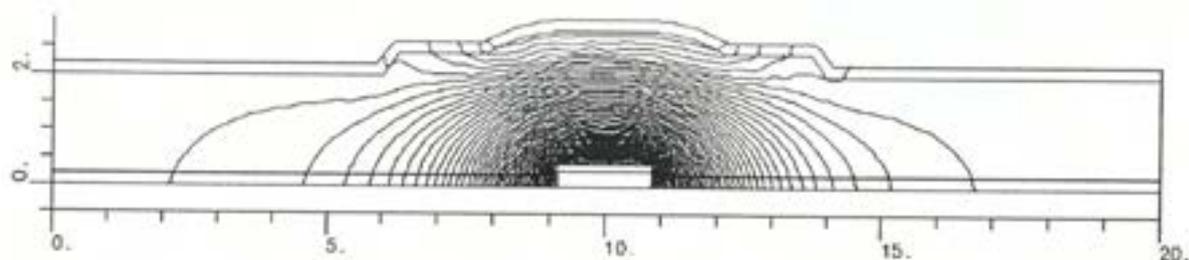


figure 30 : Courbes de niveaux du potentiel de Fermi des trous à 1,3 Volt

$$\tau_n = \tau_p = 10^{-9} \text{ s}$$

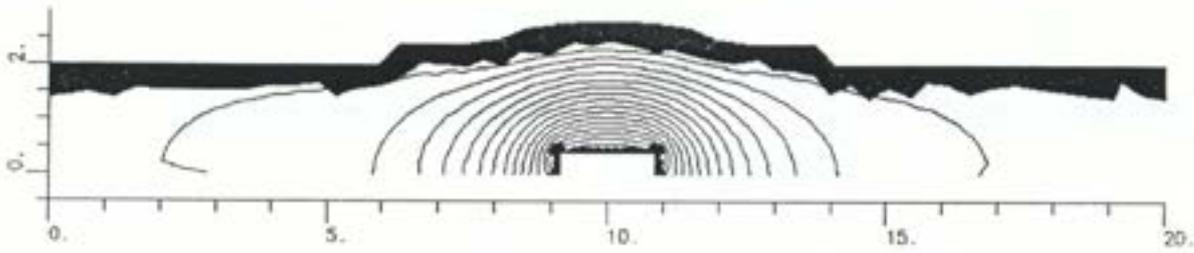


figure 31 : Courbes de niveaux du potentiel électrostatique à 1,0 Volt

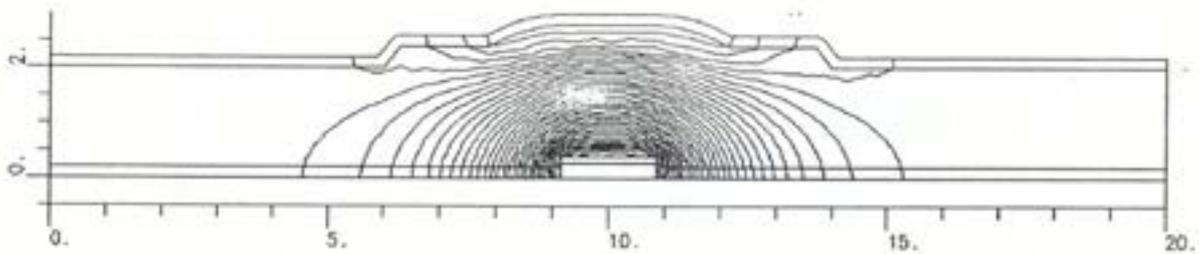


figure 32 : Courbes de niveaux du potentiel de Fermi des trous à 1,0 Volt

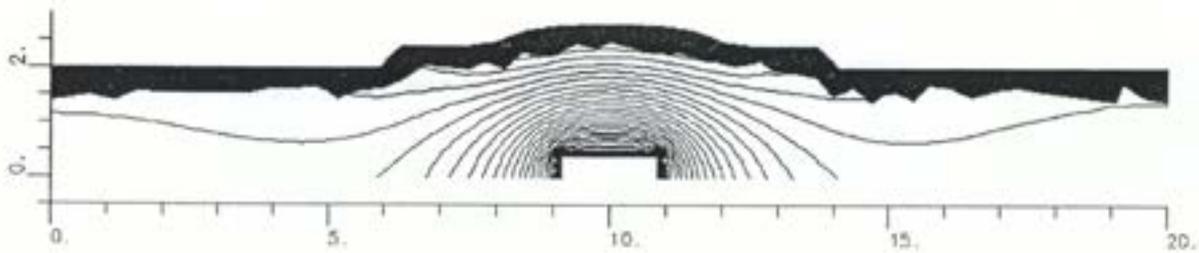


figure 33 : Courbes de niveaux du potentiel électrostatique à 1,3 Volt

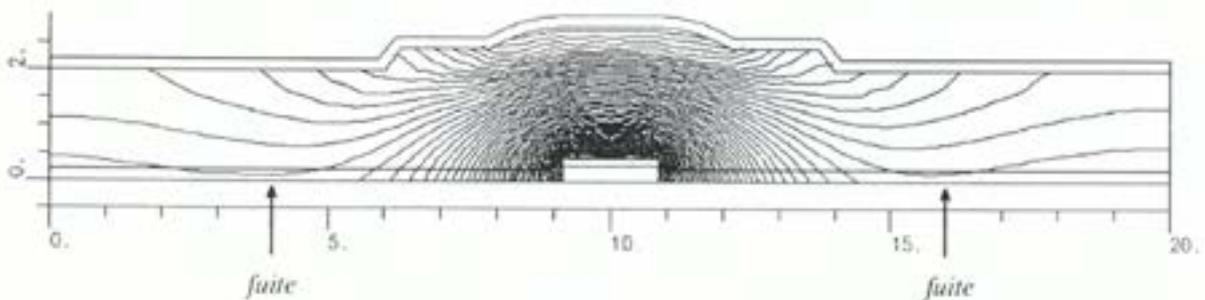


figure 34 : Courbes de niveaux du potentiel de Fermi des trous à 1,3 Volt

$$\tau_n = \tau_p = 10^{-10} \text{ s}$$

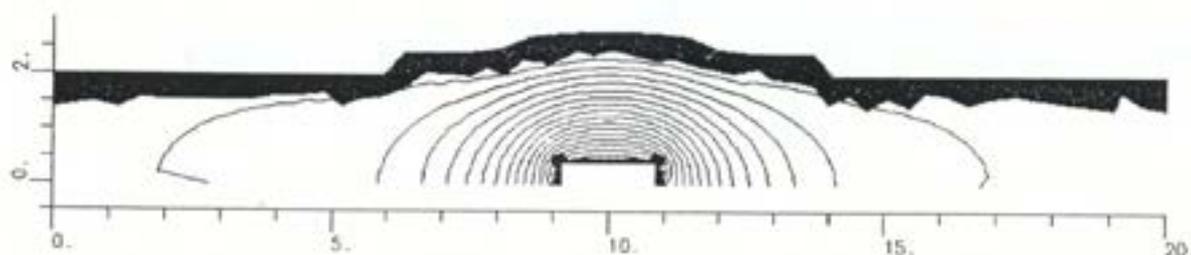


figure 35 : Courbes de niveaux du potentiel électrostatique à 1,0 Volt

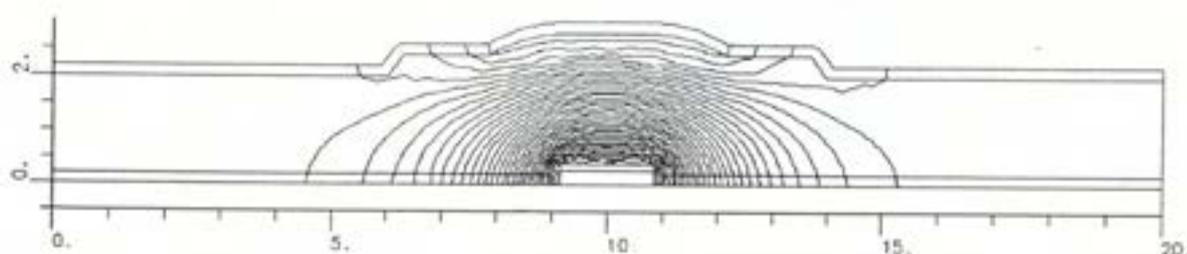


figure 36 : Courbes de niveaux du potentiel de Fermi des trous à 1,0 Volt

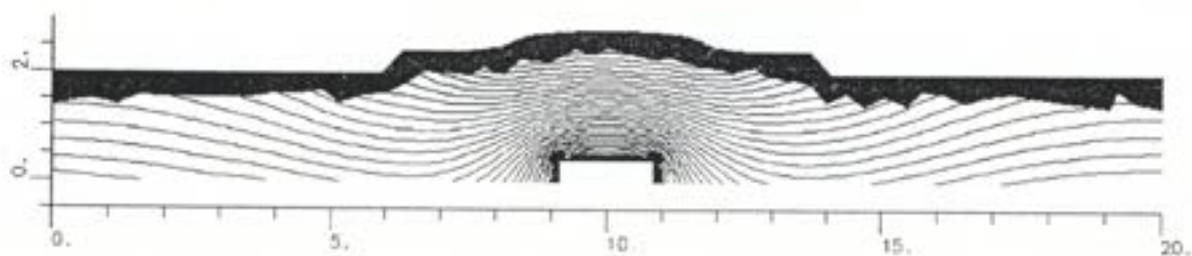


figure 37 : Courbes de niveaux du potentiel électrostatique à 1,3 Volt

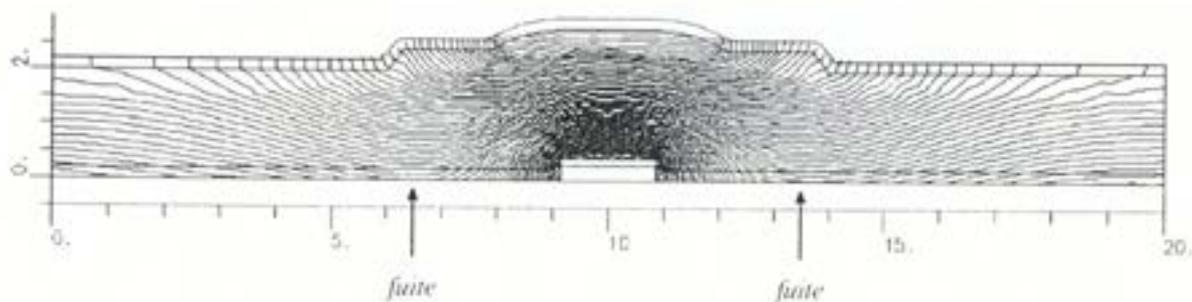


figure 38 : Courbes de niveaux du potentiel de Fermi des trous à 1,3 Volt

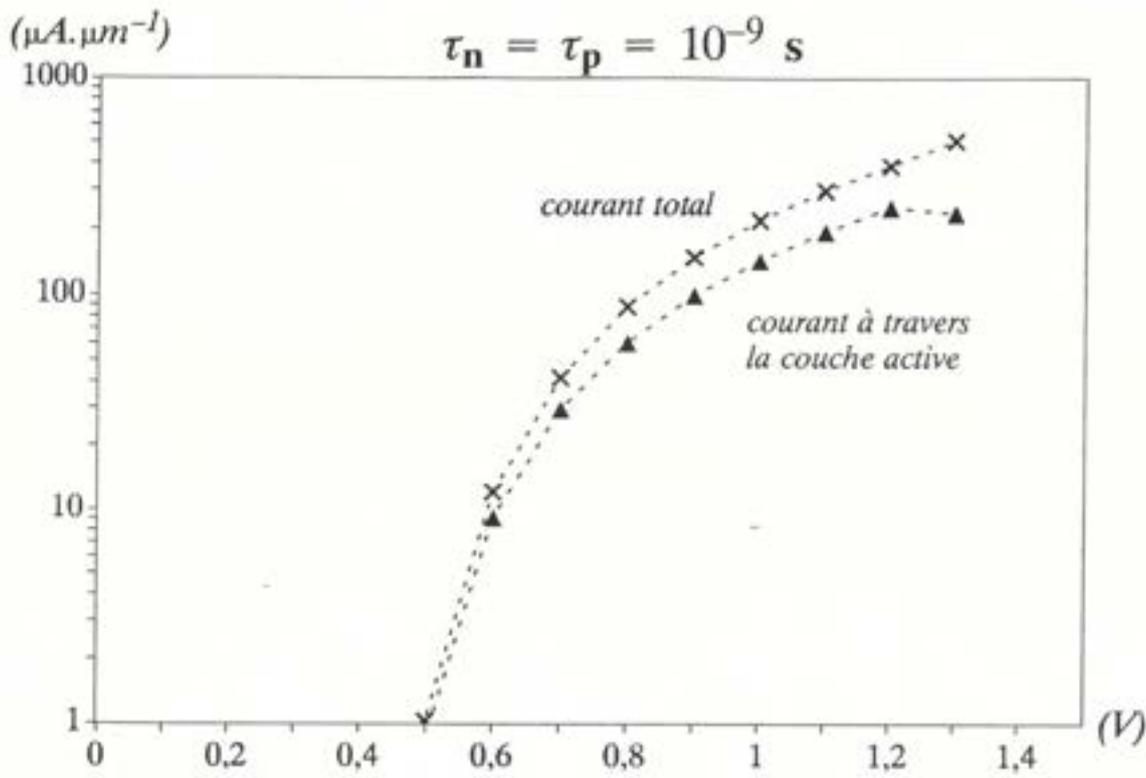


figure 39 : Comparaison entre courant total et courant à travers la couche active

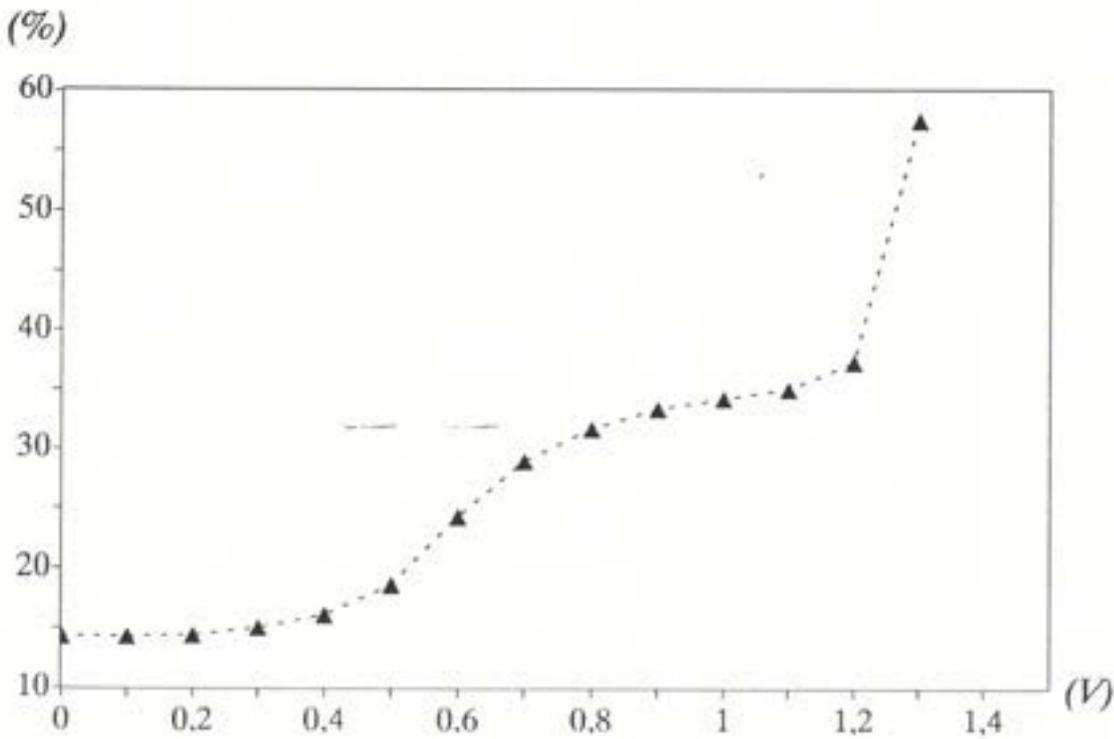


figure 40 : Pourcentage de courant de fuite en fonction de la tension

REFERENCES

- [1] F. Lozes-Dupuy, B. Saint-Cricq, G. Vassilieff, L. Vassilieff et A. Bensoussan, "Modélisation du Courant de Seuil de Diodes Laser GaAlAs à Guidage par l'Indice," *Revue Phys. Appl.*, **22**, pp. 1561-1569, 1987.
- [2] G. Song, "Two Dimensional Simulator for Semiconductor Lasers", Université de l'Illinois.
- [3] D. Wilt, *IEEE J. Quantum Electron.*, QE-17, 1941 (1981).
- [4] T. Ohtoshi, K. Yamaguchi, C. Kanai-Nagaoka, T. Uda, Y. Murayama and N. Chinone, "A Two-Dimensional Device Simulator of Semiconductor Lasers," *Solid State Electron.*, Vol. 30, pp. 627-638, 1987.
- [5] S. Seki, *Proc. CLEO* (1988).
- [6] C. Sabatier and E. Caquot, "Influence of a Dielectric Buffer Layer on the Field Distribution in an Electrooptic Guided-Wave Device," *IEEE Journal of Quantum Electronics*, **22** (1), pp. 32-37, 1986.
- [7] H.K. Gummel, "A Self-Consistent Iterative Scheme for One-Dimensional Steady State Transistor Calculations," *IEEE Trans. Electron Devices*, vol. ED-11, p. 455, 1964.
- [8] Y. Le Bellégo, "Photodiodes AlInAs/GaInAs pour transmissions optiques : composant passivé à grande sensibilité et large bande passante," *Thèse de Doctorat de l'Université de Caen*, 1991 (à paraître).
- [9] Y. Le Bellégo, J.P. Praseuth, L. Giraudet, F. Lugiez and A. Scavenec, "GaInAs PIN Photodiode with an AlGaInAs Window," *Proc. of GaAs and Related Compounds Conference*, Jersey, 1990.
- [10] T. Miya, Y. Teranuma, T. Hosaka and T. Miyashita, "Ultimate Low-Loss Single Mode Fiber at 1,55 μm ," *Electron. Lett.*, **15**, 108 (1979).
- [11] P.L. George, MODULEF : Génération automatique de maillages, 2^{ème} édition, *INRIA éditeur* (1988).
- [12] K. Souissi, A. Paraskevopoulos, P. Devoldère. and E. Caquot, "Mathematical and Numerical Analysis of the Spreading Resistance of Semiconductor Buried Ridge Stripe Lasers," *COMPEL*, 1988.
- [13] A. Haug, "Evidence of the Importance of Auger Recombination for InGaAsP Lasers," *Electron. Lett.*, vol. 20, pp. 85-86, 1984.

- [14] S. Mottet and J.E. Viallet, "Electrical 2D Simulation of 1,3 μm Semiconductor Laser," *Proceedings of SISDEP III Conference*, p.637, 1988.
- [15] M. Filoche, C. Kazmierski and E. Caquot, "Numerical Analysis of the Interface Recombination Effects on Leakage Current for InP/InGaAsP Buried Stripe Lasers," *Proceedings of InP and Related Materials Conference*, 1991 (à paraître).

Conclusion

Vers une CAO optoélectronique

the 1990s, the number of people who have been employed in the public sector has increased in all countries, but the increase has been particularly large in the United States and the United Kingdom.

There are a number of reasons for the increase in public sector employment. One reason is that the public sector has become a more important part of the economy in many countries.

Another reason is that the public sector has become a more attractive place to work. This is because of the higher wages and benefits that are offered in the public sector.

A third reason is that the public sector has become a more important part of the economy in many countries. This is because of the higher wages and benefits that are offered in the public sector.

A fourth reason is that the public sector has become a more attractive place to work. This is because of the higher wages and benefits that are offered in the public sector.

A fifth reason is that the public sector has become a more important part of the economy in many countries. This is because of the higher wages and benefits that are offered in the public sector.

A sixth reason is that the public sector has become a more attractive place to work. This is because of the higher wages and benefits that are offered in the public sector.

A seventh reason is that the public sector has become a more important part of the economy in many countries. This is because of the higher wages and benefits that are offered in the public sector.

An eighth reason is that the public sector has become a more attractive place to work. This is because of the higher wages and benefits that are offered in the public sector.

A ninth reason is that the public sector has become a more important part of the economy in many countries. This is because of the higher wages and benefits that are offered in the public sector.

A tenth reason is that the public sector has become a more attractive place to work. This is because of the higher wages and benefits that are offered in the public sector.

A eleventh reason is that the public sector has become a more important part of the economy in many countries. This is because of the higher wages and benefits that are offered in the public sector.

A twelfth reason is that the public sector has become a more attractive place to work. This is because of the higher wages and benefits that are offered in the public sector.

A thirteenth reason is that the public sector has become a more important part of the economy in many countries. This is because of the higher wages and benefits that are offered in the public sector.

A fourteenth reason is that the public sector has become a more attractive place to work. This is because of the higher wages and benefits that are offered in the public sector.

A fifteenth reason is that the public sector has become a more important part of the economy in many countries. This is because of the higher wages and benefits that are offered in the public sector.

A sixteenth reason is that the public sector has become a more attractive place to work. This is because of the higher wages and benefits that are offered in the public sector.

CONCLUSIONS ET PERSPECTIVES

L'objet de cette étude a été la réalisation d'un ensemble logiciel adapté à la simulation numérique, aussi bien électrique qu'optique, des dispositifs à hétérojonction afin d'aboutir à un outil intégré et généraliste de C.A.O. microoptoélectronique.

La simulation numérique en microélectronique a été utilisée tout d'abord sur silicium, ce qui a abouti à la réalisation de logiciels adaptés aux dispositifs silicium. Les développements de la microélectronique et de l'optoélectronique sur matériaux III-V ont entraîné la multiplication des étapes technologiques et des types de dispositifs ainsi qu'une augmentation de la complexité des géométries réalisées. L'apparition d'hétéro-interfaces provoquent notamment des chocs dans les phénomènes de transport et des instabilités dans la résolution numérique qui nécessitent une reformulation des modèles et des algorithmes.

La première partie de ce mémoire a présenté une étude complète du modèle de transport électronique dit *de dérive-diffusion* en tenant compte des hétérojonctions abruptes ou graduelles. Ce modèle a été détaillé pour aboutir à des formulations les plus générales possibles, notamment en statistique de Fermi-Dirac (cas des forts dopages), pour les densités de courants, les lois de recombinaisons ou les lois de mobilité.

Une étude bibliographique nous a permis de faire le point sur l'avancement des logiciels de simulation à travers le monde, sur les problèmes rencontrés ainsi que les principales solutions retenues : *méthode des volumes finis, éléments finis mixtes, inversion des matrices de Newton par gradient conjugué carré ou bigradient*, etc... Une comparaison de ces solutions nous a permis ensuite d'en implanter un grand nombre dans les logiciels réalisés au cours de cette thèse.

La base de notre ensemble logiciel de C.A.O. microoptoélectronique est le simulateur de fabrication *TITAN III-V*. A partir de la structure de données créée par ce logiciel, nous avons réalisé deux logiciels de simulation du transport électronique, *ETHER* (1D) et *DENEB* (2D) qui ont été validés par de nombreuses études et notamment par l'optimi-

sation des gradualités en aluminium dans l'émetteur et dans la base pour les TBH GaAs/GaAlAs.

Dans le cadre du développement d'un ensemble de C.A.O. complet en microoptoélectronique, la nécessité de pouvoir simuler les dispositifs couplant les phénomènes électrique et optique nous a conduit à réaliser un logiciel de simulation de la propagation optique, *ALCOR*. De même que pour la simulation électrique, nous avons tout d'abord étudié l'influence des discontinuités et des hétérojonctions sur le modèle de propagation représenté par l'équation d'Helmholtz scalaire. Un modèle de résolution en a été déduit puis un langage général de définition des structures a été mis au point, compatible avec la description des dispositifs fournie par *TITAN III-V*.

Nous disposons donc maintenant d'un ensemble logiciel de simulation microoptoélectronique basé sur un langage, des structures de données et un environnement communs, adaptés au cas général des hétérostructures. La dernière étape pour aboutir à un outil de C.A.O. complètement intégré est l'implantation d'un solveur de l'équation d'Helmholtz bidimensionnelle qui pourrait permettre par exemple le calcul du mode optique d'une cavité laser puis le couplage de ce mode avec l'entrée d'un guide optique, grâce au logiciel de propagation optique *ALCOR*.

Une intégration complète entre la simulation de la fabrication et celle du comportement optoélectronique passera ensuite par une validation expérimentale des étapes technologiques à travers la constitution d'une base de données matériaux. Les phénomènes de transport de l'énergie pourront être considérés dans un premier temps comme un post-traitement (équation de diffusion de la chaleur pour la température du dispositif), puis dans un deuxième temps inclus au modèle de dérive-diffusion par le biais des équations de conservation de l'énergie (modèle hydrodynamique).

Les modèles physiques et numériques représentant les étapes technologiques de fabrication, le transport de charge et d'énergie et la propagation lumineuse dans les dispositifs à semiconducteur III-V à hétérojonctions, sont donc parvenus à un niveau de maturité suffisant pour pouvoir envisager la réalisation d'outils intégrés de C.A.O., identiques à ceux réalisés pour la microélectronique silicium.

Table des matières

TABLE DES MATIERES

Introduction	11
Chapitre 1 : Modélisation du transport électronique	17
1. GENERALITES	19
2. LES DIVERS MODELES PHYSIQUES	20
2.1. Les phénomènes électromagnétiques	20
2.2. L'équation de transport de Boltzmann	22
2.3. Les équations de conservation	25
2.4. Le traitement des hétérojonctions : le modèle d'Anderson	36
2.5. L'expression des courants	38
3. LA HIERARCHIE DES MODELES	39
3.1. Le modèle de transport de Boltzmann	39
3.2. Le modèle hydrodynamique	39
3.3. Le modèle de dérive-diffusion	43
3.4. Les types de comportement	53
ANNEXE	57
1. Contact Schottky	57
Chapitre 2 : Etat de l'art	59
1. GENERALITES	61
1.1. Les applications de la simulation numérique en microélectronique	61
2. L'HISTORIQUE DE LA SIMULATION ELECTRONIQUE	64
2.1. Les problèmes du modèle physique	64
2.1.1. Le choix des inconnues du problème	65
2.1.2. La formulation des courants de porteurs	66
2.1.3. Les expressions des lois de mobilités	67
2.1.4. Les expressions des générations-recombinaisons	67
2.1.5. La prise en compte des hétérostructures	68
2.1.6. La simulation du dispositif couplé avec le reste du circuit	71
2.1.7. Le couplage avec les effets thermiques	73
2.2. Les problèmes de la résolution numérique	74
2.2.1. Le schéma de discrétisation	74
2.2.2. La conservation des courants	75
2.2.3. Le schéma de résolution	77
2.2.4. Les procédés d'inversion et les tailles de maillage	78
2.3. Les principaux logiciels actuels de simulation numérique	79
3. DESCRIPTION DU LOGICIEL TTAN III-V	83
3.1. La structure de données	83
3.1.1. La représentation des matériaux	83
3.1.2. La représentation des modèles	84
3.1.3. Les étapes technologiques	84
3.1.3.1. L'implantation ionique	85
3.1.3.2. La diffusion	85
3.1.3.3. L'oxydation	86
3.1.3.4. Le dépôt	86
3.1.3.5. La gravure	86
3.1.4. La structure générale du logiciel	86

Chapitre 3 : Simulation du transport électronique	93
1. LA SIMULATION UNIDIMENSIONNELLE : ETHER	95
1.1. Le modèle choisi	95
1.2. Le schéma de discrétisation	97
1.3. Discrétisation des équations de continuité statiques	99
1.4. La résolution du problème discret	101
1.5. Organisation générale du logiciel ETHER	110
1.6. Validation du logiciel ETHER	111
2. LA SIMULATION BIDIMENSIONNELLE : DENEb	114
2.1. Le modèle physique	114
2.2. La méthode numérique	114
2.3. Organisation générale du logiciel DENEb	124
2.4. Validation de DENEb par ETHER	125
3. PROBLEMES RESOLUS	129
3.1. Théorie du TBH GaAs / GaAlAs	129
3.2. Etude unidimensionnelle du transistor bipolaire à hétérojonction ..	130
3.3. Etude bidimensionnelle du transistor bipolaire à hétérojonction ..	144
 Chapitre 4 : Simulation de la propagation optique	 151
1. GENERALITES	153
2. LE MODELE PHYSIQUE	155
2.1. Les équations d'Helmholtz vectorielles	155
2.2. Les équations d'Helmholtz scalaires	156
2.3. Equations des modes TE et TM dans le cas d'une propagation paraxiale	159
2.4. Conclusion	162
3. RESOLUTION DE L'EQUATION D'HELMHOLTZ SCALAIRE ...	164
3.1. Introduction	164
3.2. La méthode de l'indice effectif	165
3.2.1. Le principe	165
3.2.2. La description suivant Oy de la structure	166
3.2.2.1. La prise en compte des mésas	168
3.2.3. Résolution multicouches de l'indice effectif	169
3.2.4. Le cas particulier des guides diffusés	172
3.3. La "Beam Propagation Method"	172
3.3.1. Principe de résolution	173
3.3.2. Calcul du facteur correctif	174
3.3.3. Schéma de principe	176
3.3.4. La description bidimensionnelle : le langage 2D	176
3.3.5. La prise en compte des conditions absorbantes	178
4. VECTORISATION	179
5. PROBLEMES RESOLUS	180
5.1. Description du problème	180
5.2. Description de la structure diffusée en MgO	184
5.3. Optimisation des conditions de fabrication	190
5.4. Conclusion	192
5.5. Application à un dispositif complet	192
 Chapitre 5 : Les dispositifs optoélectroniques	 195
1. GENERALITES	197
1.1. Les structures de données	198

1.2. Les schémas de résolution	199
2. LA FONCTION DE RECEPTION : LA PHOTODIODE P-I-N	200
2.1. Principe de fonctionnement de la photodiode PIN	200
2.2. Description du problème	202
2.2.1. La structure	202
2.2.2. La simulation	202
2.3. Etude et optimisation	203
2.3.1. Influence de la polarisation	203
2.3.2. Influence de l'épaisseur	203
2.3.3. Influence de la longueur d'onde	206
2.3.4. Comportement en puissance	206
2.4. Comparaisons simulations-expériences	209
3. LA FONCTION D'EMISSION : LE LASER BRS	212
3.1. Le principe de la diode laser	212
3.2. Le laser à ruban enterré (Buried Ridge Stripe)	213
3.3. La simulation de la fabrication	215
3.4. La simulation unidimensionnelle du comportement électronique ..	218
3.5. La simulation bidimensionnelle du comportement électronique ..	219
3.5.1. Le modèle résistif	220
3.5.2. La simulation complète en dérive-diffusion	222
3.5.3. Conclusion	223
Conclusion : Vers une CAO optoélectronique	233
Table des matières	237
Index	243

Index

the 1990s, the number of people in the world who are living in poverty has increased from 1.2 billion to 1.6 billion (World Bank, 2000).

There are a number of reasons for this increase in poverty. One of the main reasons is the rapid population growth in the developing world. The number of people in the world is increasing at a rate of about 1.2% per year, and this is putting a strain on the world's resources. Another reason is the increasing inequality in the distribution of income. The rich are getting richer and the poor are getting poorer.

There are a number of ways in which we can reduce poverty. One way is to increase the number of jobs in the developing world. This can be done by investing in infrastructure and education. Another way is to reduce the inequality in the distribution of income. This can be done by increasing the minimum wage and by providing social safety nets for the poor.

There are a number of challenges to reducing poverty. One of the main challenges is the rapid population growth in the developing world. This is putting a strain on the world's resources and making it difficult to provide enough jobs for everyone. Another challenge is the increasing inequality in the distribution of income. This is making it difficult to provide social safety nets for the poor.

There are a number of ways in which we can overcome these challenges. One way is to invest in infrastructure and education. This will help to create more jobs and to reduce the inequality in the distribution of income. Another way is to provide social safety nets for the poor. This will help to reduce the impact of poverty on the most vulnerable people in society.

There are a number of ways in which we can measure poverty. One way is to look at the number of people who are living on less than \$1 a day. This is a common measure of poverty, but it is not perfect. It does not take into account the cost of living in different parts of the world, and it does not take into account the quality of life of the poor.

There are a number of ways in which we can improve the quality of life of the poor. One way is to provide access to basic services such as clean water, electricity, and healthcare. Another way is to provide education and training. This will help the poor to find better jobs and to improve their standard of living.

There are a number of ways in which we can reduce poverty in the long term. One way is to invest in infrastructure and education. This will help to create more jobs and to reduce the inequality in the distribution of income. Another way is to provide social safety nets for the poor. This will help to reduce the impact of poverty on the most vulnerable people in society.

There are a number of ways in which we can measure poverty. One way is to look at the number of people who are living on less than \$1 a day. This is a common measure of poverty, but it is not perfect. It does not take into account the cost of living in different parts of the world, and it does not take into account the quality of life of the poor.

There are a number of ways in which we can improve the quality of life of the poor. One way is to provide access to basic services such as clean water, electricity, and healthcare. Another way is to provide education and training. This will help the poor to find better jobs and to improve their standard of living.

A

- Accord de maille, 130
 - GaInAs sur InP, 202
 - GaInAsP sur InP, 214
- Affinité électronique, 37, 42
 - transitivité, 69
- Agitation interne, 34
- ALCOR, 154
 - calcul de l'indice effectif, 169
 - description des couches, 166
 - le langage de description 2D, 176
 - méthode de résolution. *Voir* Beam Propagation Method
- Anderson, 68
 - Voir aussi* Hétérojonction
- Approximations
 - de la B.P.M., 165, 172
 - du modèle Helmholtz scalaire, 162
- Auger
 - recombinaisons. *Voir* Recombinaisons
 - recombinaisons dans le laser B.R.S., 222

B

- Balistique. *Voir* transport
- Bandes
 - Band Gap Narrowing, 41
 - hauteur de bande interdite, 42
 - paraboliques, 41
 - spike, 135
- Barrière de potentiel, 130
- Beam Propagation Method, 164
 - définition, 172
 - facteur correctif, 174
- Bernoulli, fonction, 119
- Boltzmann
 - équation, 23
 - méthode particulière, 39
 - modèle de transport, 39
 - statistique, 38
- Box Method, 66, 76, 115
 - angles obtus, 120
 - description, 117
- Bruit, numérique, 107
- Buried Ridge Stripe. *Voir* Laser

C

- Chaughey-Thomas, lois de mobilité, 67

- Circuit
 - intégration, 200
 - simulation couplée avec le dispositif, 71

Collisions, 23

Conditionnement de matrices, 74, 79

- Conditions aux limites
 - condition initiale de la B.P.M., 181
 - conditions absorbantes, 178
 - de la propagation optique, 164
 - en courant, 220
 - Voir aussi* Contact

- Confinement
 - électrique, 214
 - électrique dans un laser, 212
 - optique, 215

- Conservation
 - de l'énergie, 34
 - des flux, 66, 75
 - des moments, 29
 - équation générale de conservation, 28
 - numérique 1D des flux, 98
 - numérique 2D des flux, 114
 - quantités conservées, 32

- Contact
 - conditions aux limites en courant, 97, 220
 - isolant, 53
 - ohmique, 51, 96
 - Schottky, 52

- Continuité
 - conditions électriques à une hétérojonction, 37
 - conditions optiques à une hétérojonction, 170

- Convergence
 - comparaison de schémas de discrétisation, 120
 - critère, 107
 - rapidité, 104
 - stabilité, 101

Couche active, de confinement du laser, 214

Couche fenêtre, 202

Coupleur électrooptique, 197

- Courant
 - convectif, 36
 - d'énergie, 35
 - de chaleur, 36
 - de fuite du laser, 222
 - de porteurs, 32
 - de réponse d'une photodiode, 203

D

- Dégénérescence, niveaux de piège, 45
- DENEB, 114
 - inversion des matrices, 123
 - organisation générale, 124

Densité
d'énergie, 34, 35
d'états, 41
de probabilité, 22
développement de Chapman-Enskog, 29
fonction densité, 27

Dépôt, 86

Dérive-diffusion, 38
formulation, 34
modèle, 43

Différences finies, propriétés, 74

Diffusion, 85
coefficient, 38
de dopants, 131
de MgO dans LiNbO₃, 180
de titane dans LiNbO₃, 172

Dirichlet, condition de, 220

Dispositifs optiques
modulateur électrooptique, 153
OEIC, 153
séparateur à diversité de polarisation, 192

Dissipation, 35

Données, représentations des données physiques, 111

Dopages
de base et d'émetteur dans le TBH, 130
forts, 66

Durées de vie non-radiatives, laser B.R.S., 219

Dynamique
schéma temporel, 100
simulation de la photodiode, 202

E

Ebers-Moll, modèle analytique du TBH, 71

Eclairement, 202
Voir aussi Génération radiative

Efficacité d'injection, 130

Einstein, relation, 38, 66

Eléments finis
intérêt comparé de la B.P.M., 172
mixtes, 77
P1, 115
propriétés, 74

Energie
cinétique, 30, 34
échanges, 43
potentielle, 30

Enveloppe
approximation de la fonction enveloppe, 175

fonction pour condition absorbante, 178

ETHER, 95
organisation générale, 110
Schéma de discrétisation, 97

F

Facteur de non-idéalité, 220

Fermi
énergie, 42
facteur de, 41
fonction, 42

Fermi-Dirac
approximation numérique, 95
statistique, 42

Focalisation, 144

Formulation
des courants, 66
du problème, 65

Fourier
transformée, 173, 178
transformée vectorisée, 179

G

Gain, gain statique d'un transistor, 130

Génération
ionisation par impact, 50
radiative, 51

Génération-recombinaisons
Voir aussi Recombinaisons
définition, 28

Géométrie
d'une diode laser, 213
du TBH, 144

Gradualité, 135
d'aluminium dans la diode émetteur-base,
130

Gravure, 86

H

Hamilton, équations, 22

Hamiltonien, 23

Helmholtz, équations de propagation vectorielles, 156

HEMT, 69

Hétérojonction
avantages théoriques, 130
modèle d'Anderson, 36

Hétérostructure
discrétisation des courants, 120
influence dans la propagation optique, 162, 174
transport à travers, 25

Hydrodynamique
modèle, 39, 43
régime, 26, 37

I

Implantation ionique, 85

Impuretés, 21, 44

Indice
méthode de l'indice effectif : définition, 165
réfractif, 157

Interactions, 24

Interfaçage, 124
ALCOR / analyseur syntaxique, 176
DENEb / ALCOR, 223
global des logiciels, 198
TTAN III-V / DENEb, 215

Interpolation, unidimensionnelle, 98

Inversion
gradient conjugué, 79, 123
méthode de Gauss, 106
méthodes, 78
préconditionneur, 123

Ionisation par impact, 50

Ionisation partielle, 44

J

Joule, effet, 35, 73

L

Laser, 197, 212
structure B.R.S. (Buried Ridge Stripe), 214

Liouville
équation, 22
théorème, 22

Logiciel
CAO de circuits, 61
CAO de dispositifs, 62
électrique 1D : ETHER, 95
électrique 2D : DENEb, 114
environnement, 62, 110
environnement intégré de simulation, 199
interfaçage, 87, 114
Voir aussi Interfaçage

MODULEF, 123, 215
optique 2D : ALCOR, 154
process 2D : TTAN III-V, 83
structure générale, 86
tableau récapitulatif, 79

M

Maillage, 75, 198
contraintes du maillage du TBH, 129
contraintes du maillage optique, 164
du laser, 215
influence sur les résultats, 108
maillage 2D du TBH, 144
maillage 2D optique, 182
méthode de l'indice effectif, 166
Voronoi, 122

Masse effective, 24

Matériau
base de données, 111, 198
GaAs et GaAlAs, 129
GaInAsP, 214

Matrices, jacobiennes, 75, 78

Maxwell, équations, 20, 155

Mobilité, 32, 38, 43
du GaAs, 129
lois phénoménologiques, 45, 67
overshoot, 67

Modes
de propagation, 158
définition des modes TE et TM, 159
fondamental, 166
fondamental du guide diffusé, 181

Modulation, d'un laser, 213

N

Neumann, condition de, 220

Newton-Raphson
choix de la solution initiale, 101
variantes, 103

Niobate de lithium, 153

O

OEIC. *Voir* Dispositifs optiques

Optoélectronique
fonctions de base, 197
simulations. *Voir* Simulation

Oxydation, 86

P

Paraxialité, 159

Peltier, effet, 73
Perméabilité, 155, 157
Permittivité diélectrique, 21, 155
Phonons, 22, 43, 129
Photodiode, 197, 200
Photoélectrique, 200
 effet, 48
Piège, énergie, 44, 48
Pockel, effet, 153
Poisson
 crochet, 22
 discrétisation unidimensionnelle. *Voir* Schéma de discrétisation
 équation, 21
Porteurs chauds, 43
Potentiel électrostatique, 21
Précision numérique, 76
 calcul des courants, 107
Préconditionneur. *Voir* Inversion

R

Recombinaisons
 Auger, 50
 bande à bande, 48
 Read-Schockley-Hall, 48
Réflexion
 de l'onde pendant la propagation, 174
 optique sur les bords latéraux, 178
Relaxation
 du courant, 32
 méthode numérique. *Voir* Schéma de résolution
 temps. *Voir* Mobilité
 temps de relaxation, 27
 terme dans l'équation de Boltzmann, 26

S

Scharfetter et Gummel. *Voir* Schéma de résolution

Schéma de discrétisation, 74
 2D optique, 170
 équation de Poisson 1D, 97
 équation de Poisson 2D, 115
 équations de continuité 1D, 99
 équations de continuité 1D dynamique, 100
 équations de continuité 2D, 117
 fonction de base, 115
 hétérostructure, 120
 milieu uniforme, 119

Schéma de résolution, 77
 Beam Propagation Method. *Voir* Beam Propagation Method
 comparaison couplé-découplé 1D, 101
 directions alternées, 199
 relaxation, 78
 Scharfetter et Gummel, 78, 199
Schottky. *Voir* Contact
Schrödinger, équation de, 70
Seebeck, effet, 73
Semi-isolant, 41
Sensibilité
 d'une photodiode, 200
 mesures, 210
Séparabilité, 166
SIMS, mesures, 134
Simulation
 du transport électronique, généralités, 64
 électrique 1D du TBH, 130
 électrique 2D du TBH, 144
 optoélectronique : description, 198
 propagation optique 2D, 182
Slotboom, variables, 69
Sobolev, espaces de, 75
Spike. *Voir* Bandes
Statistique, 33, 44
 Fermi-Dirac. *Voir* Fermi-Dirac
Stockage
 méthodes, 78
 Morse, 123
Structure de données
 simulation couplée optoélectronique, 198
 TTAN III-V, 83
Substrat, de guide optique, 167
Superstrat, de guide optique, 167
Survitesse, 46, 67

T

TBH
 Voir aussi Transistor
 simulation. *Voir* Simulation
Technologie
 double-mesa, 133
 mésas pour guides optiques, 168
 MOCVD, 135
 optimisation des guides optiques diffusés, 190
 reprise d'épitaxie pour le laser B.R.S., 219
Temps, de réponse de photodiode, 200, 203
Temps CPU, 127
Temps de transit, 131

Tension de seuil, émetteur-base, 131

Thermalisation, 39

Thermique, effets, 73

Thermodynamique
équilibre, 51, 53
potentiel, 29

Thermoionique
effet, 37
modèle de Grinberg, 69
théorie, 52

TTAN III-V
description, 83
fabrication du laser B.R.S., 215
utilisation, 124, 144

Transfert, de vallées, 45

Transistor
transistor à effet de champ (TEC), 131
transistor bipolaire à hétérojonction (TBH).
Voir Hétérojonction

Transition, directe, 129

Transport
ballistique, 67

de l'énergie, 73
de la chaleur, 73
stationnaire, 26

Tunnel, effet, 37, 70

V

Vectorisation, 179

Vélocité
effective de diffusion, 53
thermique, 53

Vitesse
Voir aussi Mobilité
courbes de vitesse dans GaInAs, 203

Volumes finis. *Voir* Box Method

Voronoi. *Voir* Maillage

Y

Yamaguchi, lois de mobilité, 67

the 1990s, the number of publications on the topic has increased steadily (see Figure 1).

There are a number of reasons for the increase in research on the topic. First, the number of people who are affected by the disease has increased. Second, the disease has become a leading cause of death in many countries. Third, the disease has become a major public health problem in many countries.

The increase in research on the topic has led to a better understanding of the disease and its transmission. This has resulted in the development of more effective control measures. In addition, the disease has become a major focus of research in the field of infectious diseases.

The increase in research on the topic has also led to a better understanding of the social and economic impact of the disease. This has resulted in the development of more effective control measures. In addition, the disease has become a major focus of research in the field of infectious diseases.

The increase in research on the topic has also led to a better understanding of the social and economic impact of the disease. This has resulted in the development of more effective control measures. In addition, the disease has become a major focus of research in the field of infectious diseases.

The increase in research on the topic has also led to a better understanding of the social and economic impact of the disease. This has resulted in the development of more effective control measures. In addition, the disease has become a major focus of research in the field of infectious diseases.

The increase in research on the topic has also led to a better understanding of the social and economic impact of the disease. This has resulted in the development of more effective control measures. In addition, the disease has become a major focus of research in the field of infectious diseases.

The increase in research on the topic has also led to a better understanding of the social and economic impact of the disease. This has resulted in the development of more effective control measures. In addition, the disease has become a major focus of research in the field of infectious diseases.

The increase in research on the topic has also led to a better understanding of the social and economic impact of the disease. This has resulted in the development of more effective control measures. In addition, the disease has become a major focus of research in the field of infectious diseases.

The increase in research on the topic has also led to a better understanding of the social and economic impact of the disease. This has resulted in the development of more effective control measures. In addition, the disease has become a major focus of research in the field of infectious diseases.

RESUME

Ce travail porte sur l'étude et la réalisation d'un ensemble logiciel intégré destiné à la Conception Assistée par Ordinateur de dispositifs microoptoélectroniques à hétérojonction.

Le modèle physique approprié à la description du transport électronique dans les dispositifs à hétérojonction est tout d'abord étudié. On en tire un système d'équations aux dérivées partielles accompagné de lois phénoménologiques.

L'étude de la bibliographie nous permet ensuite de retenir les solutions les plus efficaces tant en ce qui concerne le schéma de discrétisation que les algorithmes de résolution numérique. Ceci se concrétise par la réalisation de deux logiciels de simulation du comportement électrique, partageant le même environnement informatique convivial, validés par plusieurs études de dispositifs réalistes.

La nécessité de simuler les dispositifs optoélectroniques nous conduit ensuite à l'étude d'un logiciel de simulation de la propagation optique dans les structures à hétérojonction. Ce logiciel est réalisé dans le même environnement informatique que les logiciels précédents, préparant donc l'intégration dans une structure globale unique.

L'ensemble de C.A.O. microoptoélectronique ainsi réalisé par connexion des structures de données est ensuite utilisé pour la simulation de dispositifs optoélectroniques et notamment pour l'étude des courants de fuite dans une structure laser BRS.

- Mots-Clefs :**
- Simulation
 - Hétérojonction
 - Modélisation
 - Discrétisation
 - Microoptoélectronique
 - Eléments finis