



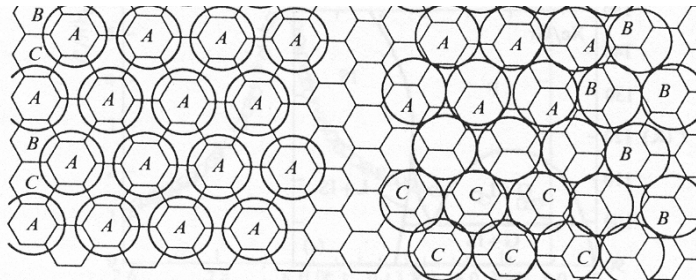
Hétérojonctions, épitaxie, et interfaces

- Jusqu'à présent, nous nous en sommes tenu qu'aux recouvrements inférieurs ou avoisinant une monocouche. Les interfaces entre deux phases condensées revêtissent une grande importance pratique et technologique. Nous allons explorer les propriétés les plus saillantes de ces objets. Les interfaces solide-solide sont formées par déposition et/ou réactions de composés issus de la phase gazeuse ou par croissance dans une phase fluide. La construction d'hétérojonctions (jonctions entre matériaux dissimilaires) requière qu'une attention particulière soit portée aux structures géométriques et électroniques des matériaux les constituants.



Hétérojonctions, épitaxie, et interfaces

- Structure aux interfaces.
 - Rappel: Couches proportionnées et disproportionnées.
 - La disparité des constantes de réseau de la couche adsorbée (A) et du substrat (S) est exprimée par $\epsilon = (a_A - a_S)/a_S$ (ang.: *lattice mismatch*).

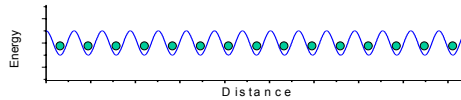




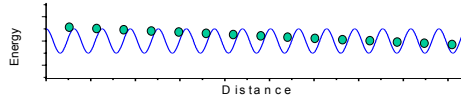
Hétérojonctions, épitaxie, et interfaces

- Structure aux interfaces.
 - Rappel: Couches proportionnées et disproportionnées.

Interaction avec le substrat est dominante:



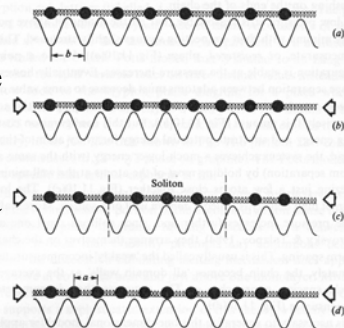
Interaction entre les adsorbats est dominante:



Hétérojonctions, épitaxie, et interfaces

- Structure aux interfaces.
 - Il y a une compétition entre les forces de cohésion à l'intérieur d'une couche adsorbée et les forces d'adhésion entre cette dernière et le substrat.
 - La disparité entre les structures des solides en contact créera un stress à l'interface.

Fig. 11.10. The Frenkel-Kontorova model of the C-I transition: (a) commensurate phase at low pressure; (b) a high energy configuration at intermediate pressure; (c) ground state configuration at intermediate pressure containing one domain wall; (d) incommensurate phase at high pressure.





Hétérojonctions, épitaxie, et interfaces

- Structure aux interfaces.

Fig. 11.11. A wall intersection where three commensurate domains meet (Bak, 1982).

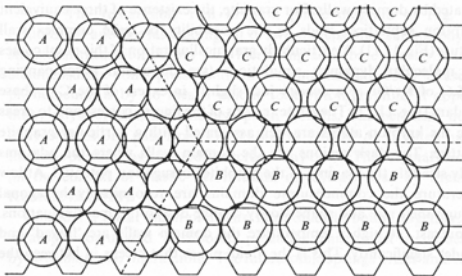
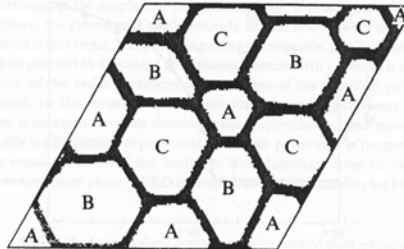


Fig. 11.12. Pictorial representations of the crystallographic structure of two-dimensional krypton on graphite obtained by molecular dynamics simulations just above one monolayer coverage. The depicted rhombus is 620 Å on a side. See text for discussion: (a) 17 K; (b) 95 K (Koch, Rudge & Abraham, 1984).

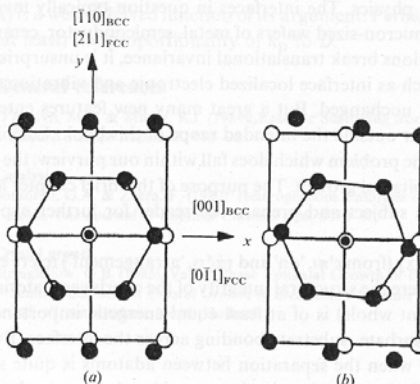


Hétérojonctions, épitaxie, et interfaces

- Structure aux interfaces.

Le stress à l'interface peut être dissipé par rotation de la couche adsorbée pour former une situation d'épitaxie partielle selon un des axes cristallographiques par exemple (*ang.*: *row matching*).

Fig. 16.1. Overlay of an FCC(111) monolayer (filled circles) onto a BCC(110) substrate surface (open circles); (a) FCC $[0\bar{1}1]$ parallel to BCC $[001]$; (b) 5.26° rotation relative to (a). The lattice constants of the two crystals are chosen to produce row-matching in the rotated case (Dahmen, 1982).



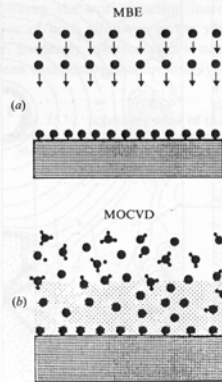


Hétérojonctions, épitaxie, et interfaces

- Croissance.

- Par condensation (*ang.*: *Physical Vapor Deposition, PVD*), faisceau moléculaire (*ang.*: *Molecular Beam Epitaxy, MBE*), ou réaction (*ang.*: *Chemical Vapor Deposition, CVD*) des composés issus de la phase gazeuse.
- Nucléation et croissance dans une phase fluide.

Fig. 15.14. Schematic view of the transport of reactant species to the surface for eventual incorporation into the substrate: (a) molecular beam epitaxy; (b) metalorganic chemical vapor deposition (Tsang & Miller, 1986).



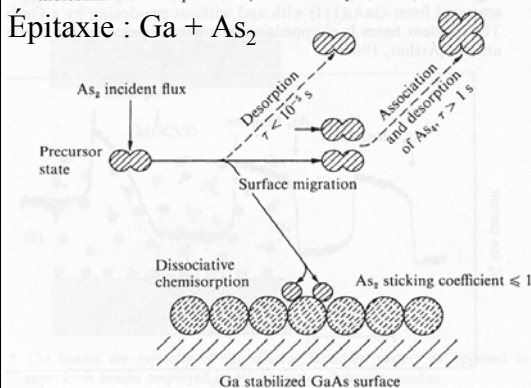
* The beams are typically of the effusive Knudsen variety as opposed to the supersonic beams employed in most reaction dynamics studies.



Hétérojonctions, épitaxie, et interfaces

- Croissance.

Fig. 15.16. Schematic model of GaAs crystal growth via Ga and As₂ molecular beam deposition (Foxon & Joyce, 1981).



Épitaxie : Ga + As₂

Metalorganic chemical vapor deposition (MOCVD) : AsH₃ + Ga(CH₃)₃. Pour la CVD, on doit sélectionner les réactants en fonction de la volatilité des produits indésirables (ici, on pourrait envisager H₂ et CH₄ comme produits volatiles potentiels).



Hétérojonctions, épitaxie, et interfaces

- Croissance.
 - Les cinétiques (diffusion, nucléation,...) peuvent dicter la structure du dépôt.

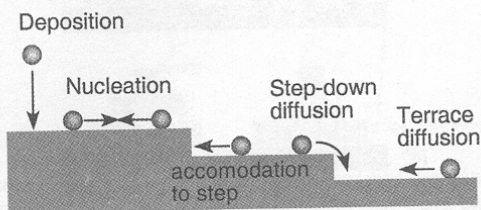
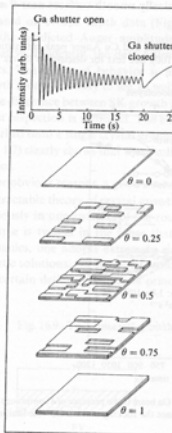


Figure 6.5 Surface processes involved in film growth

Fig. 16.7. Growth of GaAs(100) by MBE. Intensity of the RHEED specular beam as a function of time (top panel). The slow decay of peak intensity reflects a gradual increase in surface roughness. The lower panel illustrates a model of monolayer growth in the Frank-Van der Merwe scenario (Neave, Joyce, Dobson & Norton, 1983).



Hétérojonctions, épitaxie, et interfaces

- Structure aux interfaces.
 - Évidemment, quand l'épaisseur de la couche superficielle tends vers l'infini, sa structure tends vers celle du solide pur.
 - Le stress à l'interface se dissipe plus ou moins rapidement, dépendamment des propriétés mécaniques (i.e., la rigidité) du matériel qui compose la couche superficielle.



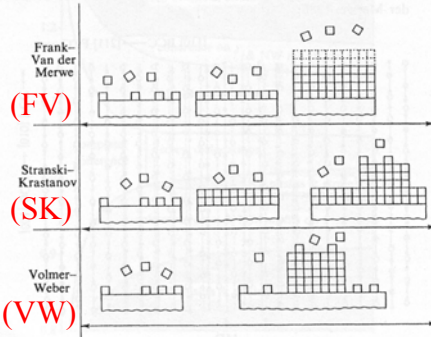
Hétérojonctions, épitaxie, et interfaces

- Croissance.

– Le stress à l'interface résulte en différents modes morphologiques pour la croissance. Une bonne correspondance des structures du film et du substrat ($\epsilon \sim 0$), et $\gamma_{sg} > \gamma_{sf} + \gamma_{fg}$ résulte en FV.

Une grande disparité structurelle ($\epsilon > 0.05$) et $\gamma_{sg} < \gamma_{sf} + \gamma_{fg}$ donne VW. Stranski-Krastanov (SK) est le plus commun et résulte d'une situation intermédiaire.

Fig. 16.6. Schematic view of the three topologically distinct epitaxial growth modes (Kern, Le Lay & Metois, 1979).

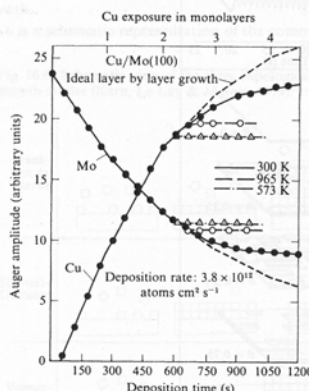


Hétérojonctions, épitaxie, et interfaces

- Structure aux interfaces.

On exploite la dépendance du libre parcours inélastique moyen des électrons sur l'épaisseur d'une couche superficielle pour déterminer son épaisseur. Les différents modes de croissance démontrent des comportements assez différents sur l'atténuation des électrons Auger.

Fig. 16.8. Time dependence of Mo and Cu Auger peak intensities as Cu grows epitaxially on Mo(100). See text for discussion (Soria & Poppa, 1980).





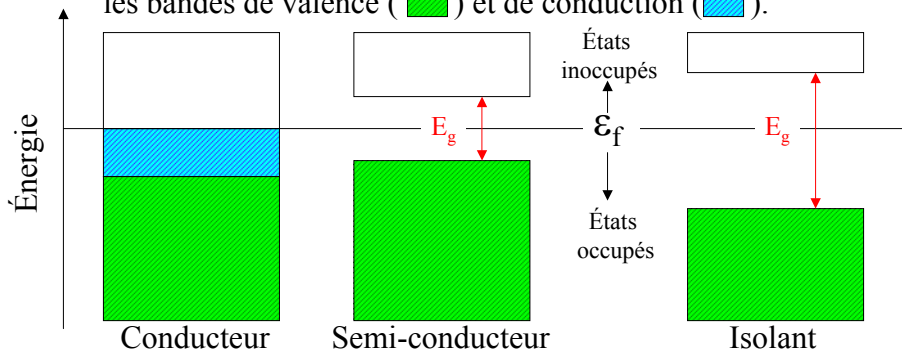
Hétérojonctions, épitaxie, et interfaces

- Structure électronique aux interfaces.
 - Les hétérojonctions sont parmi les éléments constitutifs les plus importants dans les composantes électroniques. Elle sont principalement composées de jonctions métal-semiconducteur ou semiconducteur-semiconducteur. Leur structure géométrique à l'interface (i.e., jonction) suit les règles générales que nous avons décrites. Nous allons maintenant d'investiguer leur structure électronique.



Hétérojonctions, épitaxie, et interfaces

- Structure électronique aux interfaces.
 - La structure électronique d'un semiconducteur est caractérisée par la présence d'un « gap » d'énergie, E_g entre les bandes de valence (■) et de conduction (■).





Hétérojonctions, épitaxie, et interfaces

- Structure électronique aux interfaces.
 - E_g pour les semiconducteurs communs.

Table 1 Energy gap between the valence and conduction bands
(*i* = indirect gap; *d* = direct gap)

Crystal	Gap	E_g , eV		Crystal	Gap	E_g , eV	
		0 K	300 K			0 K	300 K
Diamond	<i>i</i>	5.4	—	HgTe ^a	<i>d</i>	-0.30	—
Si	<i>i</i>	1.17	1.11	PbS	<i>d</i>	0.286	0.34-0.37
Ge	<i>i</i>	0.744	0.66	PbSe	<i>i</i>	0.165	0.27
α Sn	<i>d</i>	0.00	0.00	PbTe	<i>i</i>	0.190	0.29
InSb	<i>d</i>	0.23	0.17	CdS	<i>d</i>	2.582	2.42
InAs	<i>d</i>	0.43	0.36	CdSe	<i>d</i>	1.840	1.74
InP	<i>d</i>	1.42	1.27	CdTe	<i>d</i>	1.607	1.44
GaP	<i>i</i>	2.32	2.25	ZnO	—	3.436	3.2
GaAs	<i>d</i>	1.52	1.43	ZnS	—	3.91	3.6
GaSb	<i>d</i>	0.81	0.68	SnTe	<i>d</i>	0.3	0.18
AlSb	<i>i</i>	1.65	1.6	AgCl	—	—	3.2
SiC(hex)	<i>i</i>	3.0	—	AgI	—	—	2.8
Te	<i>d</i>	0.33	—	Cu ₂ O	<i>d</i>	2.172	—
ZnSb	—	0.56	0.56	TiO ₂	—	3.03	—

^aHgTe is a semimetal; the bands overlap.



Hétérojonctions, épitaxie, et interfaces

- Structure électronique aux interfaces.
 - La concentration des électrons de conduction est aussi un indice de la conductivité (10 ordres de grandeur).

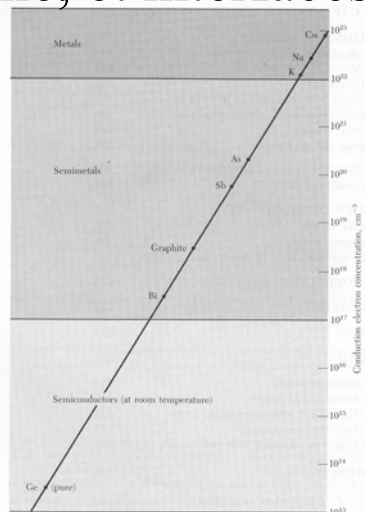


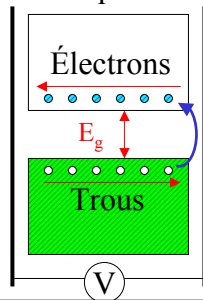
Figure 1 Carrier concentrations for metals, semimetals, and semiconductors. The semiconductor range may be extended upward by increasing the impurity concentration, and the range can be extended downward to merge eventually with the insulator range.



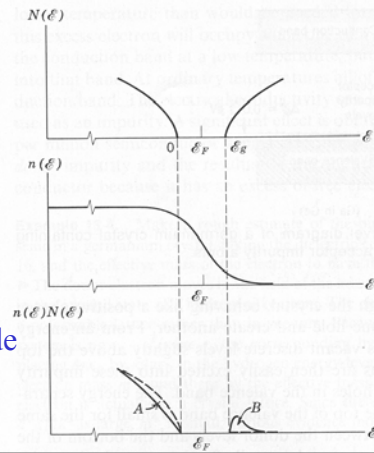
Hétérojonctions, épitaxie, et interfaces

- Structure électronique aux interfaces.

– Un semiconducteur est dit intrinsèque lorsque la conduction peut être stimulée thermiquement.



Excitation thermique d'électrons vers la bande conduction



Hétérojonctions, épitaxie, et interfaces

- Structure électronique aux interfaces.

– Un semiconducteur est dit intrinsèque lorsque la conduction peut être stimulée thermiquement (pour les métaux, on a $n \sim 10^{22-23}$ électrons/cm³).

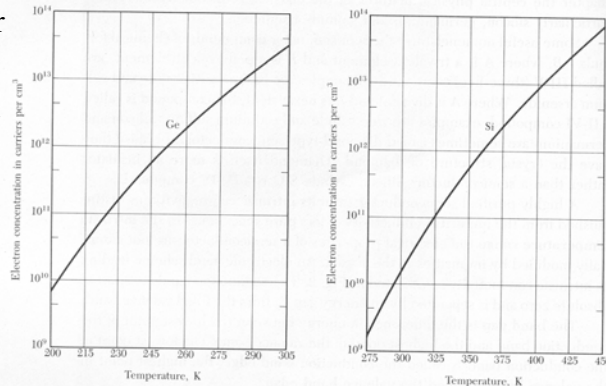


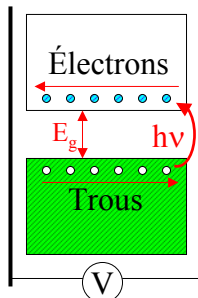
Figure 3 Intrinsic electron concentration as a function of temperature for (a) germanium and (b) silicon. Under intrinsic conditions the hole concentration is equal to the electron concentration. The intrinsic concentration at a given temperature is higher in Ge than in Si because the energy gap is narrower in Ge (0.66 eV) than in Si (1.11 eV). (After W. C. Dunlap.)



Hétérojonctions, épitaxie, et interfaces

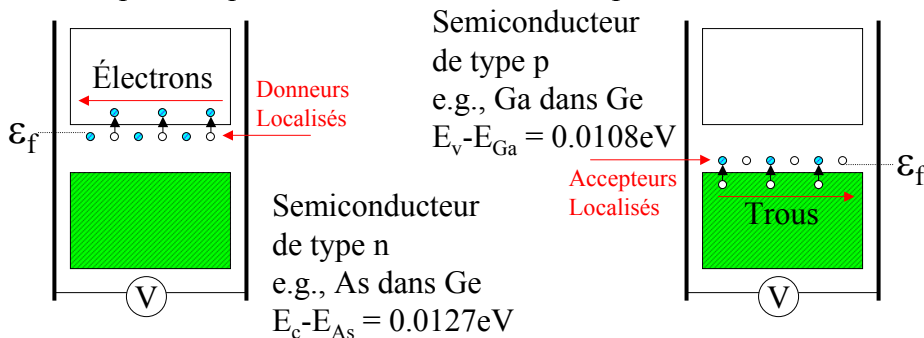
- Structure électronique aux interfaces.
 - La conduction dans les semiconducteurs peut aussi être stimulée à l'aide de photons. On crée un photocourant lorsque $h\nu > E_g$. Par exemple, $E_g = 0.67$ et 1.14eV pour Si et Ge ce qui correspond à de la radiation dans l'infrarouge.

Excitation
d'électrons
« chauds »
vers la bande
conduction



Hétérojonctions, épitaxie, et interfaces

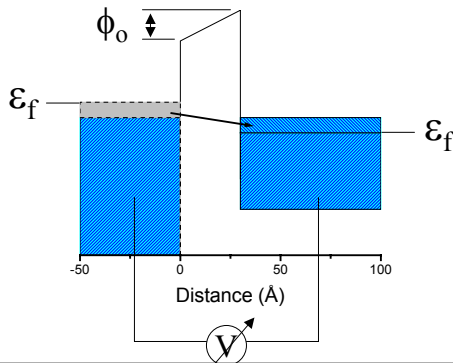
- Structure électronique aux interfaces.
 - On a aussi souvent recours au dopage pour stimuler la conduction dans les semiconducteurs (extrinsèque). On dope avec des impuretés qualifiées de donneurs ou accepteurs d'électrons.





Hétérojonctions, épitaxie, et interfaces

- Structure électronique aux interfaces.
 - Rappel: Potentiel de contact issus des conditions d'équilibre aux interfaces métalliques.



Les électrons de conduction étant libres, ils écrantent efficacement le champ électrique à l'interface qui s'atténue rapidement sur une distance de quelques couches atomiques.



Hétérojonctions, épitaxie, et interfaces

- Structure électronique aux interfaces.
 - Barrière de Schottky.

Il y a transfert d'électrons du semiconducteur de type n vers la bande de conduction du métal. L'écrantage est moins efficace dans les semiconducteurs (charges localisées) ce qui crée une courbure des bandes (sur une distance de l'ordre du μm) et une barrière de potentiel.

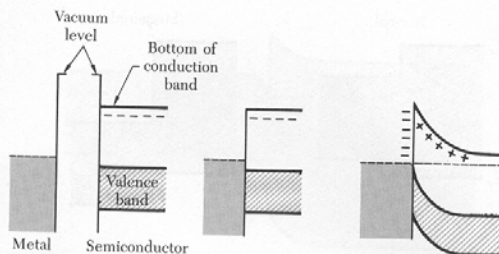


Figure 16 Rectifying barrier between a metal and an n-type semiconductor. The Fermi level is shown as a broken line.



Hétérojonctions, épitaxie, et interfaces

- Structure électronique aux interfaces.

- Jonction p-n.

On forme une jonction avec deux semiconducteurs de types p et n.

Le semiconducteur **p** possède des trous (**positifs**) mobiles (i.e., Ge^+ dans un cristal de Ge) qui sont responsables de la conduction alors que des charges **négatives** (électrons) excédentaires sont mobiles (i.e., Ge^- dans un cristal de Ge) dans le semiconducteur de type **n**.

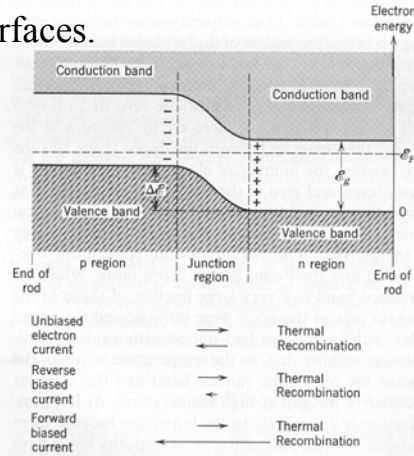


Figure 13-18 Electron energy-level diagram for an unbiased p-n junction.

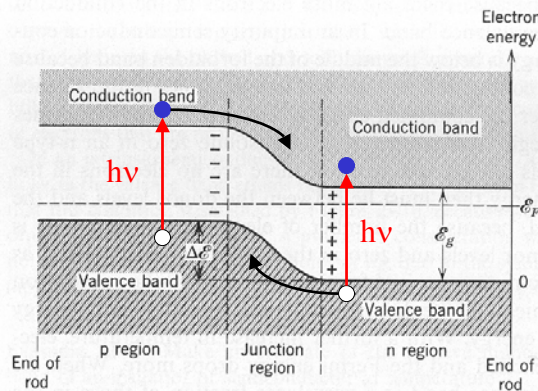


Hétérojonctions, épitaxie, et interfaces

- Structure électronique aux interfaces.

- Jonction p-n.

Énergie solaire et détecteurs photovoltaïques.





Hétérojonctions, épitaxie, et interfaces

- Structure électronique aux interfaces.

- On peut construire des hétérojonctions ayant des fonctions très spécifiques. Par exemple, les jonctions p-n sont des redresseurs de courant (haut) alors que les jonctions n-p-n ou p-n-p sont des transistors amplificateurs de puissance (bas).

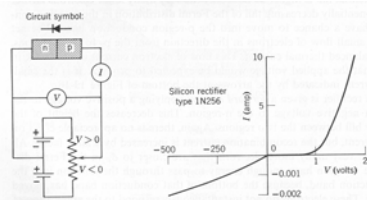


Figure 13-19 Left: A circuit in which the voltage across a p-n junction can be varied. The voltage is taken as positive when the p-side is at higher potential. Right: Current through the junction as a function of the applied voltage. Note that very different scales are used for the forward- and reverse-biased portions of the curve.

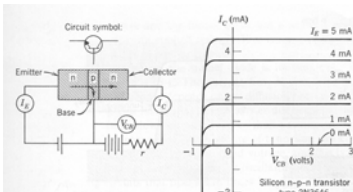
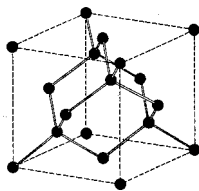


Figure 13-20 Left: A circuit in which an n-p-n transistor acts as a power amplifier. Electrons flow in the direction shown by the arrow, from emitter to collector. Right: Characteristic curves for a transistor acting as a power amplifier.



Hétérojonctions, épitaxie, et interfaces

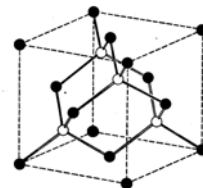
- Structure électronique aux interfaces.
 - On forme des hétérojonctions par croissance de substances ayant des compositions chimiques (et donc, des propriétés électroniques) différentes. Par exemple, le GaAs et le Ge adoptent tous deux des structures de type diamantaire (ZnS pour GaAs) ayant des constantes de réseau de 5.65Å. Cependant, leur E_g sont 0.67eV pour Ge et 1.43eV pour GaAs.



Diamant:

C, Si, Ge, Sn

Semiconducteurs III-V
(i.e., AlP, GaAs, InSb),
ZnSe, AgI, CdS, CuCl





Hétérojonctions, épitaxie, et interfaces

- Structure électronique aux interfaces.
 - Pour les hétérojonctions, la variété des valeurs de E_g et la possibilité de contrôler E_F par dopage a ouvert une nouvelle discipline de la microélectronique: *band gap engineering*.
 - On doit aussi assurer de bonnes propriétés mécaniques et d'adhésion ($\epsilon \sim 0.1-1.0$). Les paires utilisées couramment sont Ge/GaAs, AlAs/GaAs, InAs/GaSb, GaP/Si et ZnSe/GaAs.

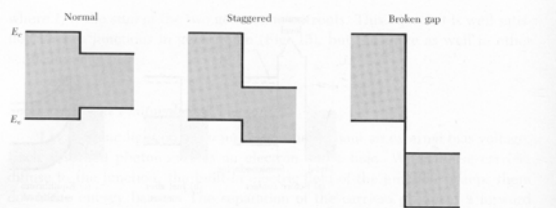


Figure 17 Three types of band edge offsets at hetero-interfaces. The forbidden gaps are shown shaded. The offset called normal occurs, for example, in GaAs(Al,Ga)As. The "broken-gap" offset occurs in the GaSb/InAs heterojunction.



Hétérojonctions, épitaxie, et interfaces

- Structure électronique aux interfaces.
 - Cet exemple est la structure électronique d'une jonction laser semiconducteur.

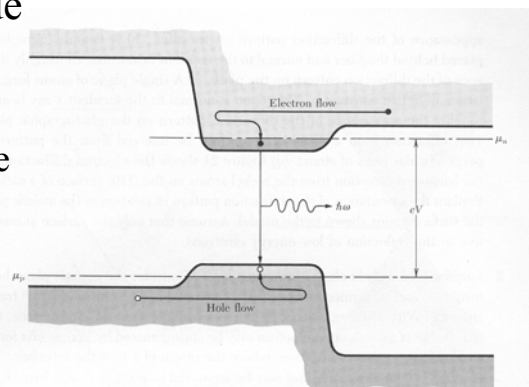


Figure 19 Double heterostructure injection laser. Electrons flow from the right into the optically-active layer, where they form a degenerate electron gas. The potential barrier provided by the wide energy gap on the p side prevents the electrons from escaping to the left. Holes flow from the left into the active layer, but cannot escape to the right.