

الجمهورية الجزائرية الديمقراطية الشعبية

République algérienne démocratique et populaire  
وزارة التعليم العالي و البحث العلمي  
Ministère de l'enseignement supérieur et de la recherche scientifique  
المركز الجامعي لعين تموشنت  
Centre Universitaire Belhadj Bouchaib d'Ain-Temouchent  
Institut des Sciences et de la Technologie  
Département de Génie Electrique



Projet de fin d'études  
Pour l'obtention du diplôme de Master en :  
Domaine : SCIENCE ET TECHNOLOGIE  
Filière : Génie Electrique  
Spécialité : Génie de Télécommunication

Thème

**Etude des phénomènes de transport électronique dans  
l'alliage ternaire semi-conducteur l'InGaP**

Présenté Par :

- 1) TALEB Nihad Wafaa
- 2) KEBDANI Kenza

Devant les jurys composés de :

Dr. FEROUANI Souheila	MCB	C.U.B.B (Ain Temouchent)	Président
Dr. AYACHE (née SAYAH) Choukria	MCA	C.U.B.B (Ain Temouchent)	Encadreur
Mr.Meradi Abdelhafid	MAA	C.U.BB (Ain Temouchent)	Examineur

# Introduction Générale

Le monde des semi-conducteurs est dominé, en termes de marché, par le Silicium. Ce dernier a été l'un des premiers matériaux utilisés (avec le Germanium) pour fabriquer des composants électroniques.

Dans les années 1960, une nouvelle famille est apparue, celle des matériaux III-V comme les alliages binaires comme l'InP, ternaires comme le  $\text{Ga}_x\text{In}_{(1-x)}\text{P}$ . Les composants fabriqués à partir de ces semi-conducteurs, surtout les composés binaires comme l'InP qui ont des propriétés physiques remarquables, jouent un rôle majeur dans les applications dans le domaine de l'optoélectronique et microélectronique.

Actuellement l'étude théorique des propriétés du transport électronique dans les matériaux semi-conducteurs et plus précisément dans les matériaux III-V ternaires fait l'objet de plusieurs recherches. Le transport électronique dans un cristal est très différent du transport dans le vide car dans ce dernier, la trajectoire des électrons n'est pas perturbée et les électrons n'effectuent pas d'interaction, alors que dans un cristal, le transport dépend fortement de la structure de bande dans laquelle les électrons évoluent. Ils subissent plusieurs types de collisions que nous allons présenter dans les chapitres suivants. Pour étudier les phénomènes de transport électronique dans un semi-conducteur, on a recours à résoudre l'équation de Boltzmann. Cette résolution s'avère très difficile à reproduire analytiquement. On a souvent recours, à l'utilisation des méthodes numériques.

Ces logiciels de simulation sont utilisés pour résoudre numériquement les systèmes d'équations obtenues par les lois de la physique qui sont difficiles à résoudre analytiquement. Aujourd'hui, les logiciels de simulations jouent un rôle très important dans tous les domaines de l'électronique générale. En effet, avant la fabrication d'un composant électronique, on procède à une simulation. Cette simulation est définie dans le cas général comme une technique permettant de reproduire de façon virtuelle le comportement d'un phénomène réel, et dans ce cas, les résultats obtenus sont très satisfaisants, car la simulation gagne en terme de coût et de temps par rapport à la fabrication.

L'intérêt pratique des semi-conducteurs III-V est encore amplement renforcé par l'aptitude de réaliser des alliages par substitution partielle de l'un des éléments par un autre élément de la même colonne. On sait par exemple obtenir des alliages ternaires du type  $Ga_xIn_{1-x}P$ . Ces semi-conducteurs qui possèdent des bandes interdites directes offrent un énorme potentiel pour les dispositifs optoélectroniques.

Dans le domaine de l'électronique ; leur éminentes propriétés de transport électrique ainsi leur possibilité de former des hétérojonctions dans les transistors à effet de champ, les rendent très attrayants pour les applications en haute fréquence, haute température et haute puissance. C'est dans ce même contexte que se situe notre étude, « Etude des phénomènes de transport électronique dans l'alliage ternaires : Application au matériau  $Ga_xIn_{1-x}P$  ». Notre but est de simuler le transport électronique par la méthode Monte-Carlo dans le matériau  $Ga_xIn_{1-x}P$  et par suite, fixer les performances de ce matériau en température et en champ électrique.

Notre travail a ainsi fait l'objet de quatre chapitres :

Dans le premier chapitre, nous présentons les propriétés physiques des matériaux semi-conducteurs III-V, ensuite on définit leur structure de bande d'énergie. Enfin on donne les expressions permettant de calculer les masses effectives des électrons et les coefficients de non parabolicité dans les vallées  $\Gamma$ , L et X.

Ensuite, dans le deuxième chapitre, nous présentons Le transport de charges dans les semi-conducteurs III-V. Le calcul des probabilités de collision est fondamental, puisque c'est grâce à ces dernières qu'il nous est possible de décrire la physique des phénomènes microscopiques qui entrent en jeu dans le transport électronique. Nous avons donc calculé les taux d'interaction des différents mécanismes de collision pris en considération dans notre modèle et qui décrivent le comportement électronique dans les composés III-V en particulier de l'InP. Ces mécanismes sont les collisions dues aux phonons acoustiques, les collisions par phonon acoustique polaire ou piézoélectrique, les collisions dues à l'absorption et à l'émission de phonons optiques polaires et non polaires, les collisions intervallées, les collisions des impuretés ionisées et d'alliage. Les types de diffusion dominante pour les trous

sont les interactions avec les phonons optiques polaires et non polaires ainsi avec des phonons acoustiques.

Le troisième chapitre est dédié à la présentation des techniques de Monte-Carlo, ainsi que les différents paramètres mis en œuvre dans son application.

Enfin, Le quatrième chapitre s'appuyera de manière fondamentale sur les résultats obtenus. Nous mènerons notre étude approfondie des matériaux, en commençant par une étude statique qui nous permettra d'analyser les principaux effets physiques mis en jeu. La méthode de Monte Carlo sera employée afin de préciser les propriétés de transport dans divers matériaux III-V massifs (InP, GaP et  $Ga_xIn_{1-x}P$ ) et de calculer les paramètres cinétiques tels que la vitesse de dérive des électrons, leur énergie moyenne, leur mobilité ainsi que le taux de population des différentes vallées. Au cours de cette étude, nous serons amenés à mettre en évidence l'influence de la température et de la présence d'impuretés au sein du réseau cristallin et de voir aussi l'influence du coefficient stœchiométrique et du potentiel d'alliage sur la caractéristique du transport électronique du matériau ternaire  $Ga_xIn_{1-x}P$ .

## 1.1. Introduction:

Le développement qu'a subi le domaine de l'électronique et de l'optoélectronique en particulier est dû en une grande partie à l'utilisation de nouveaux matériaux dans la fabrication des semi-conducteurs. La physique des solides permet de prédire le comportement de ces nouveaux matériaux pour enfin aboutir à des dispositifs plus performants [SAYA 02].

Dans ce but, plusieurs recherches sont entreprises et ont conduit à de bons résultats. Parmi les fruits de ces recherches l'apparition, vers la fin des années 50, d'une nouvelle classe de matériaux semi-conducteurs telle que la famille de composés III-V, qui représente une association d'éléments de la III<sup>ème</sup> et de la V<sup>ème</sup> colonne de la classification périodique du tableau de Mendeleïev.

Ces composés ont prouvé, par leurs qualités très spéciales, leur importance dans tous les domaines de l'optoélectronique où ils trouvent un champ d'application très vaste. L'intérêt pratique des matériaux III-V est renforcé par la possibilité de fabriquer des alliages ternaires et quaternaires par substitution partielle de l'un des éléments par un élément de la même colonne. Ainsi, ces matériaux composés offrent une grande variété de compositions permettant de varier leurs propriétés électroniques.

## 1.2. Matériaux semi-conducteurs III-V :

Les matériaux semi-conducteurs III-V sont des composés formés à partir d'un élément de la colonne III (Bore, Aluminium, Gallium..) et d'un élément de la colonne V (Azote, Phosphore, Arsenic...) de la classification périodique. Le **Tableau 1.1** regroupe un extrait de cette classification (le chiffres en haut et en bas représente respectivement le nombre atomique et la masse atomique). Ainsi de nombreux composés binaires peuvent être réalisés.

	III	IV	V	VI
	B 5	C 6	N 7	O 8
II	Al 13	Si 14	P 15	S 16
Zn 30	Ga 31	Ge 32	As 33	Se 34
Cd 48	In 49	Sn 50	Sb 51	Te 52
Hg 80	Tl 81	Pb 82	Bi 83	Po 84

**Tableau 1.2:** Extrait du tableau périodique [FONS 03].

### 1.2.1. Les composés binaires:

Parmi tous les composés binaires possibles, tous n'ont pas le même intérêt potentiel. L'étude de leurs propriétés, et en particulier de la structure de bandes montre que les éléments les plus légers donnent des composés dont laquelle la bande interdite est large et indirecte, et dans laquelle la masse effective des électrons est élevée.

Les composés contenant du Bore, de l'Aluminium ou de l'Azote entrent dans cette Catégorie; ils ont en général peu d'intérêt pour l'électronique rapide [CAST 89], qui demande des semi-conducteurs à forte mobilité de porteurs ou pour l'optoélectronique où une structure de bande directe est nécessaire pour que les transitions optiques soient efficaces. A l'autre extrémité, les éléments lourds comme le Thalium ou le Bismuth donnent des composés à base de Galium (GaAs, GaSb) ou d'indium ( InP, InAs, InSb) dont les propriétés sont les plus intéressantes [MASS 14].

Le **Tableau 1.2** présente quelques semi-conducteurs binaires en donnant leur énergie de la bande interdite  $E_g$ , la masse effective des électrons du bas de la bande de conduction en fonction de la masse de l'électron  $m^*/m_0$ , la mobilité électronique à champ faible  $\mu$  et les paramètres cristallins  $a$  et  $c$  dans le cas du GaP.

Composé III-V	Eg (ev)	$m^*/m_0$	$\mu$ (cm <sup>2</sup> /VS)	a (Å°)
BN	7.5			3.6150
AIP	2.45			5.4510
AIAs	2.16			5.6605
AlSb	1.58	0.12	200	6.1355
BP	2.0			4.5380
GaN	3.36	0.19	380	a=3.189, b=5.185
GaP	2.26	0.82	110	5.4512
GaAs	1.42	0.067	8500	5.6533
GaSp	0.72	0.042	5000	6.0959
InP	1.35	0.077	4600	5.8686
InAs	0.36	0.023	33000	6.0584
InSp	0.17	0.0145	80000	6.4794

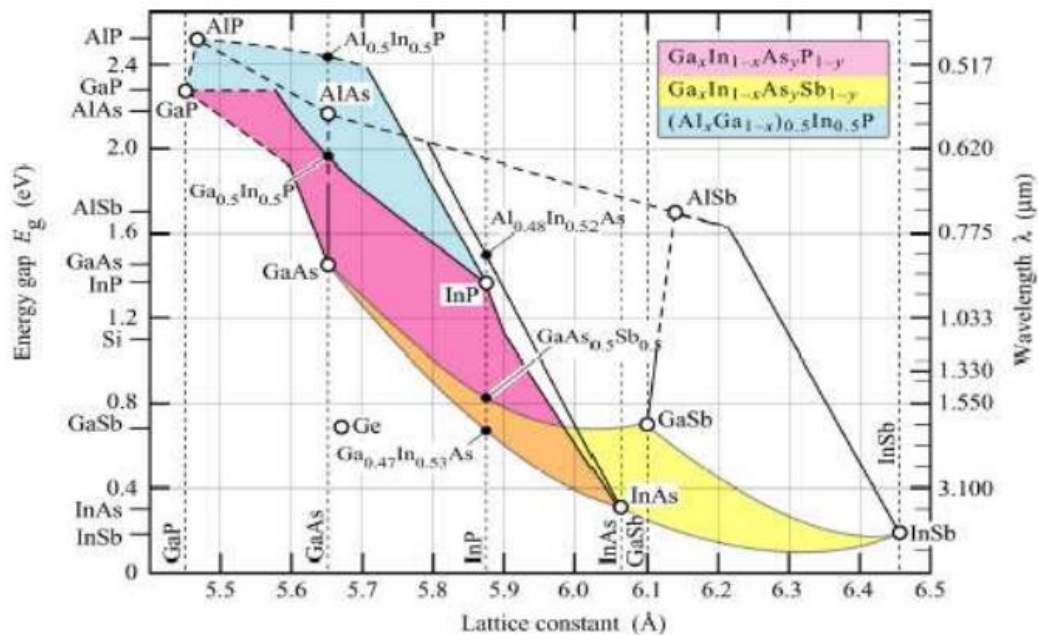
**Tableau 1.2:** Résumé des propriétés électriques de différents semi-conducteurs III-V [MASS 14].

### 1.2.2. Les composés ternaires:

L'intérêt majeur de ces semi-conducteurs, c'est qu'on peut les utiliser pour fabriquer des alliages ternaires et quaternaires par substitution de l'un des éléments par un autre élément de la même colonne. Les alliages ternaires apparaissent donc sous la forme  $A_xB_{(1-x)}C$  où ( $x$ ) est un coefficient stœchiométrique qui varie entre 0 et 1 et qui représente la concentration du composé AC alors que (1-x) représente la concentration du composé BC, comme c'est le cas du  $Ga_xIn_{(1-x)}P$ .

Le diagramme de **Figure 1.1** représente les variations de l'énergie de bande interdite en fonction du paramètre cristallin à qui varie lui-même avec la composition. Les points du graphe montrent la position des composés binaires stœchiométriques, et les lignes représentent l'évolution du gap et du paramètre cristallin a, en fonction de la composition des alliages ternaires. Certaines lignes présentent un point anguleux qui dénote une transition entre un gap direct et un gap indirect. C'est ainsi que le GaInAs se trouve sur la

courbe reliant le GaAs à l'InAs. Lorsque la fraction molaire de ce composé ternaire est égale à 0.47, nous constatons que le paramètre cristallin est identique à l'InP. Il est alors possible d'épitaxier le GaInAs sur du substrat InP. Il est également possible de déposer le composé ternaire AlGaAs sur le GaAs avec un bon accord de maille [SAYA 10].



**Figure 1.1:** Evolutions du gap et du paramètre cristallin [DESP 09] [SAYA 10].

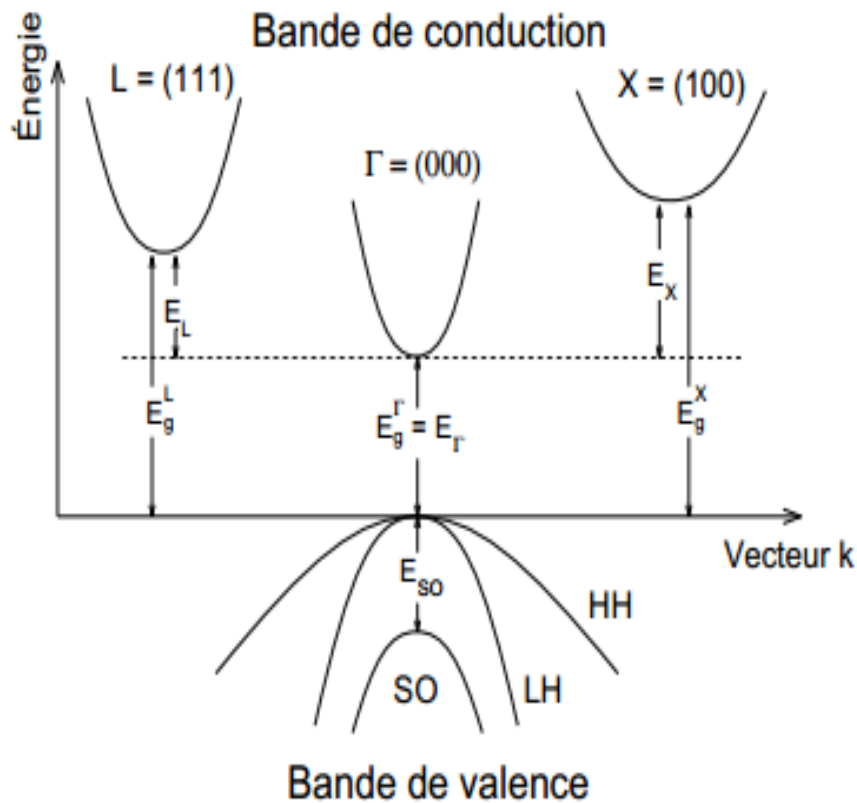
Ce diagramme est donc très important parce qu'il permet de connaître la composition de tout alliage ternaire susceptible d'être déposé en couche mince, par épitaxie, sur un substrat binaire comme le GaAs ou l'InP. Les matériaux III-V offrent donc une grande variété de compositions permettant de modifier leurs propriétés électroniques.

### 1.3. Structure de bande d'énergie des semi-conducteurs III-V :

#### 1.3.1. Allure générale des bandes d'énergie :

La structure des bandes dans les composés III-V présente l'allure typique de la **Figure 1.2**.



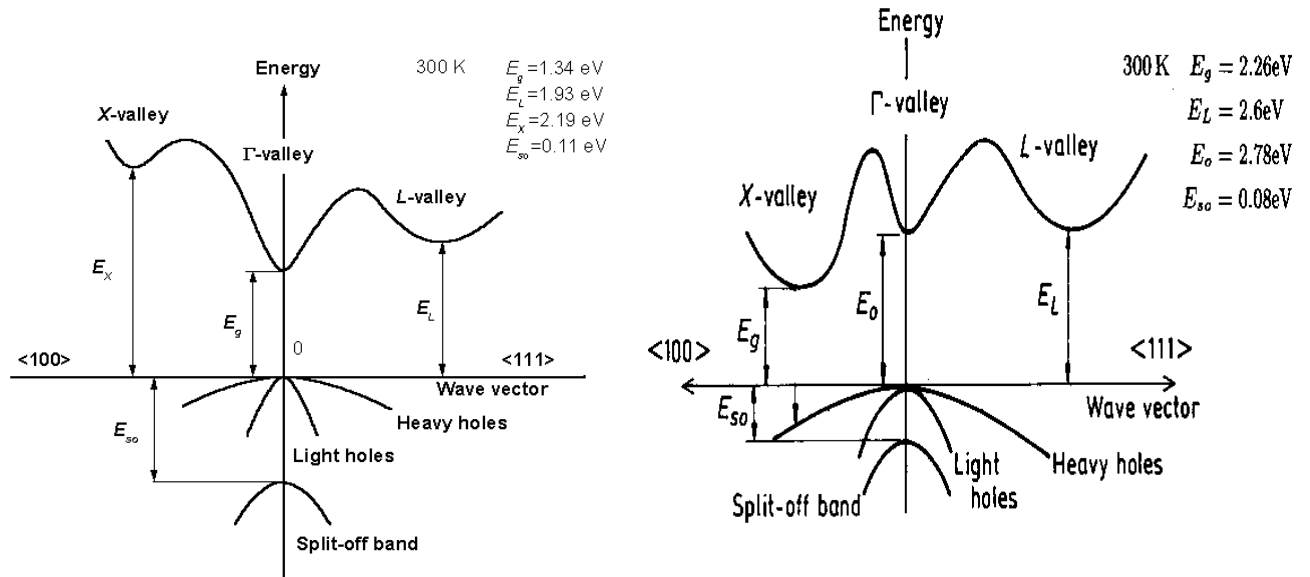


**Figure 1. 2.** Structure de bande des composés III-V [ABOU 96].

La bande de conduction présente généralement une courbure très accentuée ( $\partial^2\varepsilon/\partial k^2$  élevée) au voisinage de son minimum. La masse effective des électrons étant inversement proportionnelle à cette courbure,  $m^* = \hbar^2/(\partial^2\varepsilon/\partial k^2)$ , ceci explique pourquoi, dans les semi-conducteurs III-V à bande interdite directe comme GaAs, InP, etc..., la masse effective des électrons en  $\Gamma$  est très faible et, par conséquent, la mobilité électronique est élevée [SAYA 02].

On note également la présence de deux vallées latérales sur la bande de conduction, en bordure de la zone de Brillouin : vallée **L** dans la direction  $\langle 111 \rangle$  et vallée **X** dans la direction  $\langle 100 \rangle$ . Réparties dans l'espace, il existe quatre vallées de type **L** équivalentes et trois de type **X**. Ces vallées sont caractérisées par une courbure faible et, par conséquent, par des électrons ayant une masse effective élevée et une faible mobilité (**Figure 1. 2**).

La **Figure 1.3** représente les structures de bandes de l'InP et le GaP [LEVI 99] qui indique pour commencer les valeurs des largeurs de bande interdite  $\epsilon$  de différents composés.



**Figure 1.3:** Structure de bandes de l'InP et le GaP.

Les vallées  $\Gamma$ , L ou X de la bande conduction ne sont pas parfaitement paraboliques. La relation de dispersion, qui lie leur vecteur d'onde et leur énergie est donnée par la relation suivante:

$$\epsilon(1 + \alpha\epsilon) = \gamma(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m^*} \quad [1.1]$$

Avec  $\epsilon$  l'énergie,  $m^*$  la masse effective de l'électron et  $\alpha$  le coefficient de non parabolicité qui dépend de certains paramètres. Les vallées L et X ne sont pas à symétrie sphérique : la masse longitudinale  $m_l^*$  est différente de la masse transverse  $m_t^*$  et la masse effective de densité d'état peut être calculée par l'expression :

$$m^* = (m_l^{*1/2} \cdot m_t^*)^{2/3} \quad [1.2]$$

On peut calculer les variations de masse effective des composés ternaires  $A_x B_{1-x}$ , en fonction de la composition à partir d'une interpolation quadratique [QUAY 71] [PALA 69]:

$$m_v^{AB} = x.m_v^A + (1-x)m_v^B + x.(1-x).C_{m,v} \quad [1.3]$$

Les valeurs du paramètre  $C_{m,v}$  sont données dans le **Tableau 1.3**:

Matériaux	$C_{m,n}$	$C_{m,p}$
$Al_x Ga_{1-x} As$	0.0	0.0
$In_x Ga_{1-x} As$	-0.012	-0.03
$In_x Al_{1-x} As$	0.0	0.0
$Al_x Ga_{1-x} N$	0.0	0.0

**Tableau 1.3:** Valeurs du paramètre  $C_{m,v}$  des matériaux III-V [QUAY 71] [PALA 69].

## Références Bibliographiques :

**[SAYA 02]** SAYAH, C., "Application de la Méthode de Monte Carlo aux Composés III-V", Thèse de Magister en Electronique, Université Abou-Bekr Belkaid, Faculté des Sciences de l'Ingénieur, Janvier 2002.

**[FONS 03]** FONSTAD, C., G., 2 / 03, 6.772/SMA5111-Compound Semiconductors, Lecture 1 – **The Compound Semiconductor Palette**-Summary, <http://ocw.mit.edu/NR/ronlyres/...and.../Lecture1v2.pdf>, 2003.

**[CAST 89]** R. CASTAGNE, J. P.DUCHEMIN, M. GLOANEC, CH. RUMELHARD, " Circuits Intégrés en Arséniure de gallium ", Paris 1989.

**[MASO 14]** Mousoum, N., " Modélisation du transport des porteurs de charge dans les dispositifs actifs MESFET ,MOSFET à base de GaInP par la méthode de monte carlo", Thèse de Doctorat en Electronique. Université Abou-BekrBelkaid, Faculté des Sciences de l'Ingénieur, 2014.

**[SAYA 10]** SAYAH, C., " Etudes des Effets du Champ Electromagnétique sur les Propriétés des Composés III-V par la Méthode de Monte Carlo et l'Equation de Poisson Couplée ", Thèse de Doctorat en Electronique. Université Abou-Bekr Belkaid, Faculté des Sciences de l'Ingénieur, 2010.

**[DESP 09]** DESPIAU-PUJO, E., "Gravure des semi-conducteurs III-V par plasmas inductifs chlorés inductifs chlorés", Docteur en Physique des Plasmas, Ecole Polytechnique, Paris, 28 Septembre 2009.

**[ABOU 96]** ABOU-KHALIL, M., "Modélisation du Transport des Porteurs de Charges dans les Dispositifs Actifs à Hétérostructures et à puits Quantiques par la Méthode Monte Carlo", Ph. D, Université de Montréal, 15 juillet 1996.

**[QUAY 71]** QUAY, R., "Analysis and Simulation of High Electron Mobility Transistors", Doktors der technischen Wissenschaften unter der Leitung von, eingereicht an der Technischen Universität Wien. Fakultät für Elektrotechnik und Informationstechnik, 9. Februar 1969 in Sofia, Bulgarien, 22. August 1971.

**[PALA 69]** PALANKOSVSKI, V., "Simulation of Heterojunction Bipolar Transistors", Doktors der technischen Wissenschaften, eingereicht ander Technischen Universität Wien, Fakultät für Elektrotechnik und Informationstechnik, 9 February 1969.

## 2.1. Introduction:

On entend par effets de transport ou effets cinétiques les différents phénomènes déterminés par une circulation de porteurs de charges électriques dans un milieu cristallin.

L'intérêt que présente l'étude des effets de transport tient à ce qu'elle permet de préciser les mécanismes des différentes interactions se manifestant dans le système lorsque le cristal est soumis à l'action de forces extérieures appliqués tels que le champ électrique ou le champ magnétique.

Pour une description qualitative des effets de transport il suffit de faire appel aux considérations générales concernant le mouvement d'une particule dans un champ de forces. Cependant ce modèle simple ne saurait suffire pour arriver à établir des relations précises entre les grandeurs en question qu'en faisant intervenir des méthodes d'étude plus générales permettant de tenir compte de l'importance relative des porteurs de charges se trouvant dans des états différents.

La méthode théorique la plus convenable pour procéder à une telle étude est la méthode fondée sur l'équation cinétique de Boltzmann, qui caractérise la modification de l'état des particules provoquée par différentes actions.

## 2.2. Equation de Boltzmann:

La dynamique des porteurs libres dans les composants semi-conducteurs repose sur la résolution de l'équation de Boltzmann (BTE) [SAYA 02][KIRE 75][MOGL 93][ALQU 85][SHIF 98][MAGN 98] :

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{v} \cdot \vec{\nabla}_r f + \frac{1}{\hbar} \vec{F} \cdot \vec{\nabla}_k f = \left( \frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{COLL}} \quad [2.1]$$

Cette équation régit l'évolution de la fonction de distribution, qui est la probabilité de présence d'une particule au point  $(\vec{r}, \vec{k})$  de l'espace des phases à l'instant  $t$ . Le second terme représente la variation de la fonction de distribution due aux mécanismes de diffusion résultant des gradients de concentration.

Le troisième terme représente les effets des forces extérieures appliquées qui se traduit par la dérivée de l'impulsion :

$$\vec{F} = \hbar \frac{\partial \vec{k}}{\partial t} = -e \cdot (\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B}) \quad [2.2]$$

Où  $\vec{k}$  est le vecteur d'onde de l'électron,  $r$  son vecteur de position,  $e$  sa charge en valeur absolue, sa vitesse définie par  $\vec{v} = \frac{1}{\hbar} \cdot \frac{\partial \epsilon}{\partial \vec{k}}$  et enfin  $\vec{E}$  est le champ électrique et  $\vec{B}$  champ magnétique.

Le second membre  $\left( \frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{COLL}}$  rend compte des collisions ou interactions avec le réseau cristallin. Les collisions provoquent la transition des électrons d'un état  $\vec{k}$  à un autre état  $\vec{k}'$  avec une probabilité de transition  $S(\vec{k}, \vec{k}')$  :

$$\left( \frac{\partial f}{\partial t} \right)_{\text{COLL}} = \sum_{\vec{k}'} \left[ f(\vec{r}, \vec{k}', t) S(\vec{k}', \vec{k}) - f(\vec{r}, \vec{k}, t) S(\vec{k}, \vec{k}') \right] \quad [2.3]$$

En l'absence de champ magnétique externe et en tenant compte de l'équation [2.3], l'équation de Boltzmann devient :

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{v} \cdot \vec{\nabla}_r f + \frac{e}{\hbar} \cdot \vec{E} \cdot \vec{\nabla}_k f = \sum_{\vec{k}'} \left[ f(\vec{r}, \vec{k}', t) S(\vec{k}', \vec{k}) - f(\vec{r}, \vec{k}, t) S(\vec{k}, \vec{k}') \right] \quad [2.4]$$

A cause de sa complexité, cette équation aux dérivées partielles n'admet pas de solution analytique sauf dans un nombre limité de cas moyennant des hypothèses

simplificatrices. Elle permet d'avoir accès directement à des grandeurs importantes en dynamique électronique telles que la vitesse et l'énergie des électrons.

### 2.3. Mécanismes d'interaction:

Lorsqu'un électron se déplace dans un cristal, il peut entrer en interaction avec les charges électriques présentes, atomes d'impureté ou autres porteurs ou par l'intermédiaire du champ électrique qu'il crée, échanger des quanta d'énergie ou phonons avec le réseau cristallin.

Au cours de ces interactions, son vecteur d'onde passe de  $\vec{k}$  à  $\vec{k}'$  et la probabilité d'interaction par unité de temps  $\lambda$  s'obtient en intégrant la densité de probabilité de transition  $S(\vec{k}, \vec{k}')$  entre les états  $\vec{k}$  et  $\vec{k}'$  sur toutes les valeurs de  $\vec{k}'$  :

$$\lambda(\vec{k}) = \int_{k'} S(\vec{k}, \vec{k}') \mathcal{D}^3 k' \quad [2.5]$$

L'expression de  $S(\vec{k}, \vec{k}')$  ne fait en général intervenir que le module des vecteurs  $\vec{k}$  à  $\vec{k}'$  et l'angle  $\beta$  qui les sépare. Dans les semi-conducteurs III-V comme GaP ou InP, les vallées  $\Gamma$  sont isotropes et le module de  $\vec{k}$  est relié de façon biunivoque à l'énergie  $\varepsilon$  (mesurée par rapport au bas de la vallée dans laquelle se trouve l'électron) [CAST 89] [SAYA 02] :

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} = \varepsilon(1 + \alpha\varepsilon) \quad [2.6]$$

On peut donc exprimer les densités de probabilités  $S$  en fonction des énergies  $\varepsilon$  et  $\varepsilon'$  et de l'angle  $\beta$ .

### 2.4. Interactions électrons phonons:

Dans ce paragraphe, nous allons donner les expressions des probabilités d'interaction pour différents processus envisageables:

### 2.4.1. Interaction acoustique:

Les interactions acoustiques intravallées sont élastiques, elles se manifestent donc à énergie constante. Lorsqu'un porteur subit une interaction acoustique le module du vecteur d'onde dans cette vallée reste constant.

L'angle de déviation  $\beta$  après interaction est tiré avec une distribution uniforme entre  $\{0, \pi\}$ . Cette interaction est très faible en vallée  $\Gamma$ .

La densité de probabilité par unité de temps permet le passage d'un porteur de l'état  $\vec{k}$  à  $\vec{k}'$  est donnée par [CAST 89]:

$$\lambda_{ac}(\varepsilon) = \frac{K_B \cdot T \cdot E_{ac}^2 \cdot m^{*3/2}}{\rho \cdot s^2 \cdot \hbar^4 \cdot 3\pi \cdot \sqrt{2}} \cdot \delta^{1/2}(\varepsilon) \cdot \frac{3(1 + \alpha \cdot \varepsilon)^2 + (\alpha \cdot \varepsilon)^2}{(1 + 2\alpha \cdot \varepsilon)} \quad [2.7]$$

avec  $\delta(\varepsilon) = \varepsilon(1 + \alpha\varepsilon)$

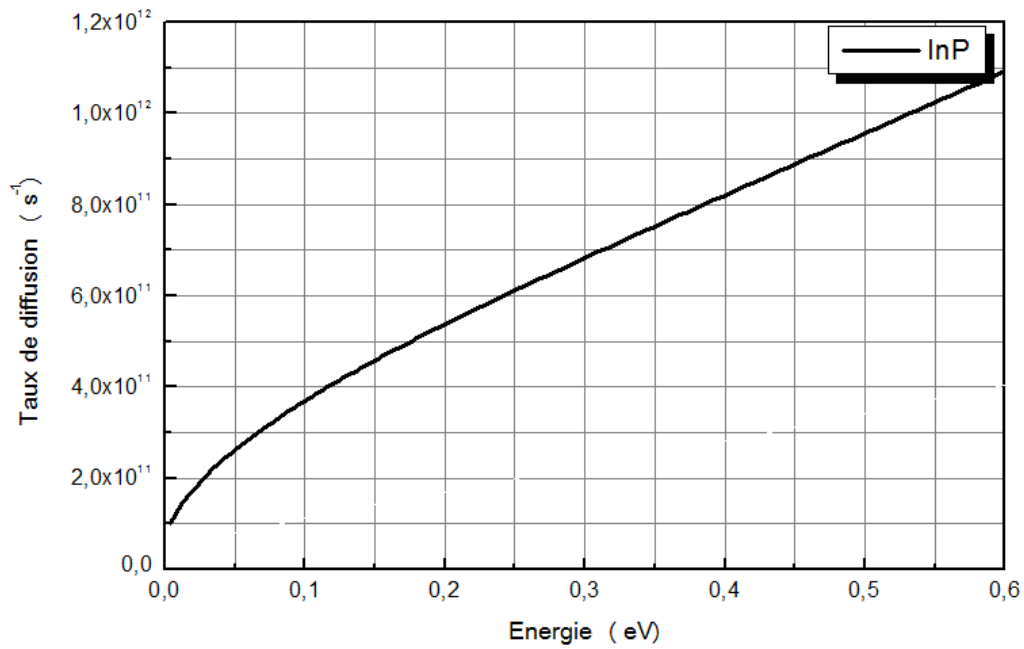
$$\delta(\varepsilon') = \varepsilon'(1 + \alpha\varepsilon')$$

Où  $K_B$  est la constante de Boltzmann,  $T$  la température du réseau,  $E_{ac}$  constante acoustique,  $m^*$  la masse effective des porteurs dans le bas de la vallée  $i$ ,  $\rho$  la masse volumique du matériau,  $s$  la vitesse du son,  $\hbar$  constante de Planck. La vitesse de son  $s$  qui est définit par :

$$s = 1/3(2c_t + c_l) \quad [2.8]$$

Où  $c_t$  et  $c_l$  sont les vitesses longitudinales et transversales du son. Nous représentons dans la **Figure 2.1** donne le taux de diffusion par les phonons acoustiques calculé par l'équation [2.8] obtenu avec notre simulateur Monte Carlo. Les courbes montrent le taux en fonction de l'énergie pour les électrons de la vallée  $\Gamma$  dans l'InP calculé à 300 K.





**Figure 2.1:** Taux de diffusion par les phonons acoustiques pour les électrons de la vallée  $\Gamma$  dans l'InP à 300 K.

#### 2.4.2. Les interactions piézoélectriques :

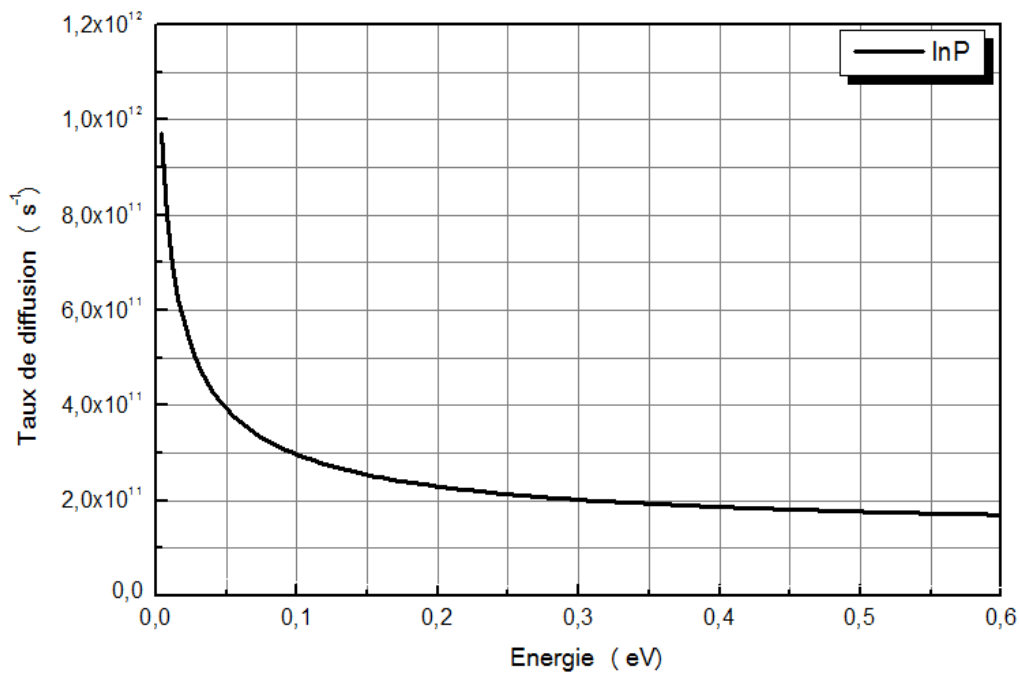
Elles sont élastique, leurs influences sont très faibles à forte énergie du fait que la probabilité d'interaction est inversement proportionnelle à la racine carrée de l'énergie. La probabilité d'interaction piézoélectrique par unité de temps est donnée par [FAVE 96] :

$$\lambda_{pi} = \frac{e^2 \cdot K_B \cdot T \cdot P_{Pi}^2 \cdot m^{*1/2}}{4\sqrt{2} \cdot \pi \cdot \hbar^2 \cdot \epsilon_0 \cdot \epsilon_s \cdot \delta^{1/2}} \cdot \frac{I}{(1 + 2\alpha \cdot \epsilon)} \quad [2.9]$$

Avec :

$$I = (1 + 2\alpha \cdot \epsilon)^2 \cdot \text{Ln} \left| \frac{2}{1 - \cos a} \right| - 2\alpha \cdot \epsilon \cdot (1 + 2\alpha \cdot \epsilon) \cdot (1 + \cos a) + \frac{(\alpha \cdot \epsilon)^2}{2} \cdot [4 - (1 - \cos a)^2] P_{pi}$$

$P_{pi}$  Potentiel piézo-électrique et  $a$  est un angle très faible  $< 0.01$  radian. La **Figure 2.2** présente le taux de diffusion piézoélectrique dans l'InP en fonction de l'énergie à 300 K de la vallée  $\Gamma$  obtenu avec notre simulateur Monte Carlo.



**Figure 2.2:** Taux de diffusion piézoélectrique pour les électrons de la vallée  $\Gamma$  dans l'InP à 300 K.

### 2.4.3. Les interactions optiques polaires:

Dans les semi-conducteurs composés, le mouvement des atomes chargés positivement et négativement dans une cellule unitaire du réseau va créer un dipôle oscillateur, les atomes forment des dipôles entre eux pour créer un seul mode de vibration longitudinal connu comme le phonon optique polaire

L'interaction optique polaire est très importante dans toutes les vallées et l'énergie du phonon est comparable à celle des électrons à la température ambiante. Par sa prédominance cette interaction joue un rôle important dans l'évolution de la mobilité des porteurs à faible champ L'énergie des électrons après interaction dans le cas l'émission ou d'absorption est donnée par :

$$\varepsilon' = \varepsilon \pm \hbar\omega_p \quad [2.10]$$

La probabilité d'interaction des électrons avec les phonons optiques polaire est donnée par [GOUR 94] :

$$\lambda_{OP} = \frac{e^2 \cdot w_{OP} \cdot m^{*1/2}}{4\sqrt{2} \cdot \epsilon_0 \cdot \pi \cdot \hbar} \left( \frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_s} \right) \cdot \frac{1 + 2\alpha \cdot \epsilon'}{\delta^{1/2}(\epsilon)} \cdot F(\epsilon, \epsilon') \left( N_{OP} + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) \quad [2.11]$$

Où

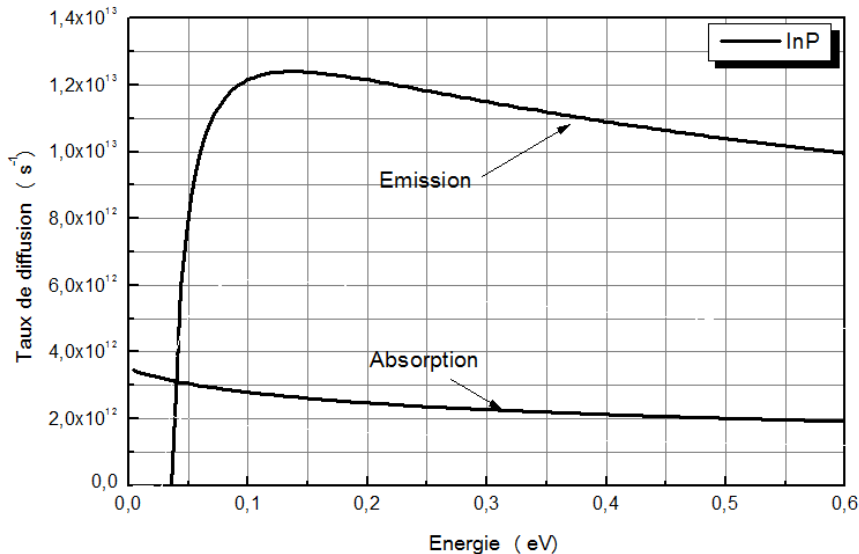
$$F(\epsilon, \epsilon') = \frac{1}{C} \left( A \cdot \text{Ln} \left| \frac{\delta^{1/2}(\epsilon) + \delta^{1/2}(\epsilon')}{\delta^{1/2}(\epsilon) - \delta^{1/2}(\epsilon')} \right| + B \right) \quad [2.12]$$

avec  $A = [2 \cdot (1 + \alpha \cdot \epsilon) \cdot (1 + \alpha \cdot \epsilon') + \alpha(\delta(\epsilon) + \delta(\epsilon'))]^2$

$$B = -2\alpha(\delta(\epsilon) \cdot \delta(\epsilon'))^{1/2} \cdot [4 \cdot (1 + \alpha \cdot \epsilon) \cdot (1 + \alpha \cdot \epsilon') + \alpha(\delta(\epsilon) + \delta(\epsilon'))]$$

et  $C = 4(1 + \alpha \cdot \epsilon) \cdot (1 + \alpha \cdot \epsilon') \cdot (1 + 2\alpha \cdot \epsilon) \cdot (1 + 2\alpha \cdot \epsilon')$

Où  $\epsilon_s$  et  $\epsilon_\infty$  sont les permittivités diélectriques relatives,  $e$  la charge de l'électron. La **Figure 2.3** présente le taux de diffusion par absorption et par émission de phonon optique polaire obtenu avec notre simulateur Monte Carlo en fonction de l'énergie à  $T = 300$  K pour les électrons dans la vallée  $\Gamma$  dans l'InP.



**Figure 2.3:** Taux de diffusion par phonon optique polaire pour les électrons dans la vallée  $\Gamma$  dans l'InP à 300 K pour le cas d'émission et d'absorption d'un phonon.

#### 2.4.4. Interaction optique non polaire:

L'interaction avec le phonon optique polaire est due aux variations du déplacement atomique qui déplace les atomes voisins dans un sens opposé. La diffusion est causée directement par ce déplacement qui est considéré comme le potentiel de la diffusion. Le vecteur d'onde de ce phonon correspond à des fréquences de courte longueur d'onde, ou onde optiques.

Cette interaction est importante pour des énergies relativement élevées ou le taux de transfert intervallée est dominant. Cette interaction est négligée dans la vallée  $\Gamma$  et appliquée surtout dans la vallée L, l'électron ne change pas de vallée au cours de l'interaction. Dans ce cas, les effets sur l'état de l'électron sont comparables à ceux d'une interaction intervallée équivalente avec  $Z_{ij}=1$  mais sa probabilité est très faible. L'énergie du phonon optique non polaire est égale à 43 eV soit environ 550 K pour l'InP.

Les interactions optiques non polaires sont inélastiques. L'expression du taux d'interaction est donnée par la relation suivante [KIRE 75] :

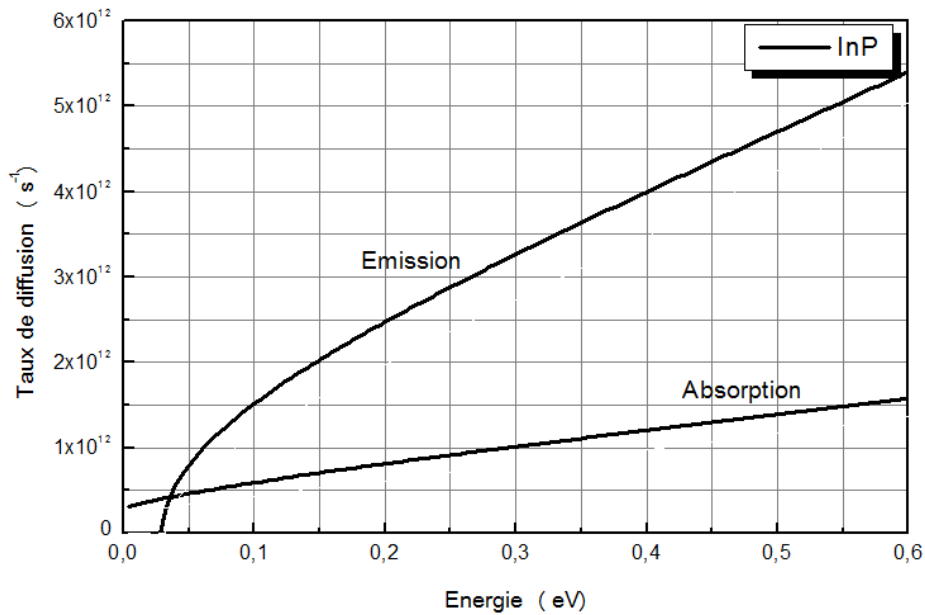
$$\lambda(\varepsilon) = (Z_L - 1) \cdot \frac{\pi \cdot h \cdot D_{no}^2}{\rho \cdot w_{no}} \cdot \left[ N_{no} + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right] \cdot g_L(\varepsilon') \quad [2.13]$$

Où  $\varepsilon' = \varepsilon \pm \hbar\omega_i$

$N_{no}$  est la fonction d'occupation des phonons :

$$N_{no} = \frac{1}{\exp(\hbar\omega_{no}/K_B T) - 1}$$

$D_{no}$  est le potentiel de déformation non polaire et  $\hbar w_{no}$  représente l'énergie du phonon échangé. La **Figure 2.4** représente le taux d'absorption et d'émission d'un phonon optique non polaire obtenu avec notre simulateur Monte Carlo en fonction de l'énergie à 300 K pour les électrons dans la vallée L dans l'InP.



**Figure 2.4:** Taux de diffusion par phonon optique non polaire pour les électrons de la vallée L dans l'InP à  $T = 300$  K pour le cas d'émission et d'absorption d'un phonon.

## 2.5. Interaction intervalles équivalentes et non-équivalentes:

Au cours des interactions intervalles, les transferts de charge entre vallées équivalentes et non-équivalentes ont lieu. Et selon le type d'interaction on a soit émission ou absorption de phonon.

Comme le montre la structure de bande, ces interactions sont tout à fait inexistantes dans la vallée centrale à faible champ car l'électron n'a pas suffisamment d'énergie pour être transféré dans les vallées supérieures. Mais dès que les conditions sur l'énergie sont satisfaites, les interactions intervalles jouent de loin le rôle le plus important parmi toutes les interactions, autant par leur forte probabilité que par leurs conséquences sur le comportement de l'électron. Le transfert ne peut avoir lieu que si l'énergie après interaction est supérieure à l'énergie minimum de la vallée d'accueil, ces énergies sont repérées par rapport au minimum de la bande de conduction.

La condition nécessaire pour qu'une interaction intervallée ait une chance d'intervenir est [FADE 83]:

$$\varepsilon_i \pm \hbar\omega_{ij} + \Delta_i - \Delta_j \geq 0$$

$\Delta_i$  est l'écart d'énergie entre le bas de la vallée de départ  $i$  et celui de la vallée  $\Gamma$  (000).

$\Delta_j$  est l'écart d'énergie entre le bas de la vallée de d'arrivée  $j$  et celui de la vallée  $\Gamma$  (000).

$\varepsilon_i$  est l'énergie mesurée par rapport au bas de la vallée  $i$ .

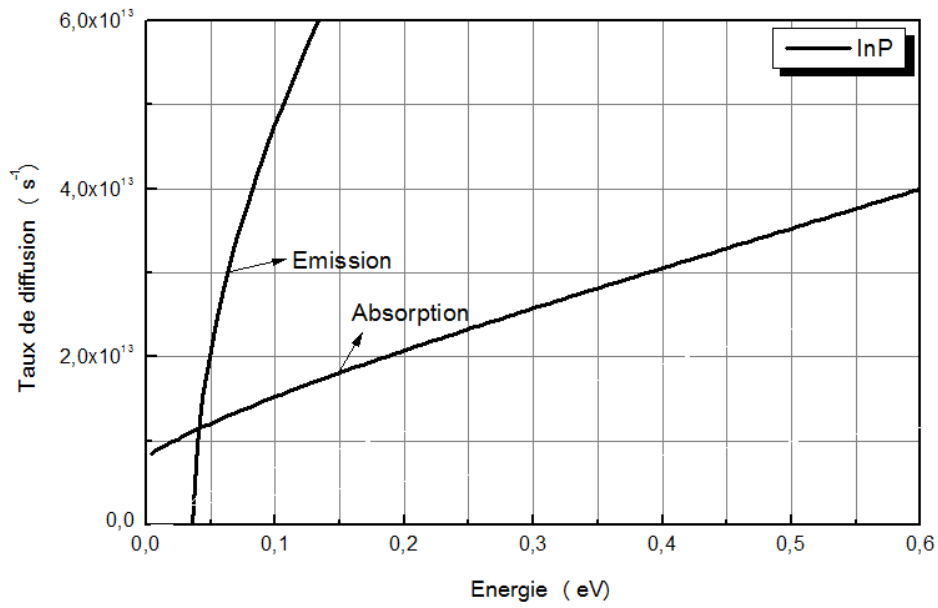
Quand un électron est transféré dans une autre vallée, aux effets directs de collision elle-même (variations de l'énergie et du vecteur d'onde) s'ajoutent les variations dues aux non-équivalences éventuelles entre vallées d'arrivée et de départ (masses et facteurs de non parabolicité dépendant de chaque vallée).

Après un transfert éventuel de la vallée  $\Gamma$ (000) vers les vallées de symétrie  $L$ (111) et  $X$ (100) la vitesse moyenne des porteurs chute car, d'une part, dans ces vallées les masses sont plus grandes que dans la vallée centrale et, d'autre part, les directions des vitesses sont aléatoires après une telle interaction [FADE 83][SAYA 02].

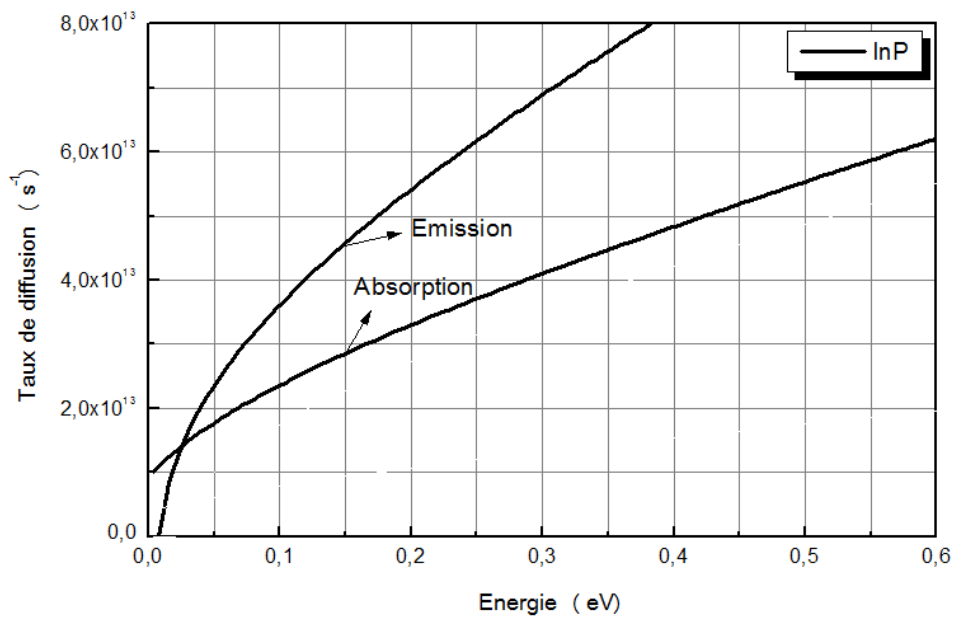
La probabilité d'interaction intervallée par unité de temps est donnée par la relation suivante:

$$\lambda_{ij}(\varepsilon_i) = \frac{Z_{ij} \cdot m_j^{*3/2} \cdot E_{ij}^2}{\pi \cdot \sqrt{2} \cdot \rho \cdot \omega_{ij} \cdot \hbar^3} \cdot \left( N_{ij} + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) \cdot \delta_j(\varepsilon) \cdot \frac{(1 + \alpha_i \cdot \varepsilon_i)(1 + \alpha_j \cdot \varepsilon_j)}{(1 + 2\alpha_i \cdot \varepsilon_i)} \quad [2.14]$$

Où  $E_{ij}$  est le potentiel de déformation intervallée entre la vallée  $i$  et la vallée  $j$ ,  $\hbar\omega_{ij}$  l'énergie du phonon échangé,  $Z_{ij}$  le nombre de vallée d'arrivée de type  $j$  quand on part de la vallée  $i$ . Les **Figures 2.5** et **2.6** présentent des courbes du taux de transfert entre les vallées équivalentes. Le taux de transfert  $L-L$  et  $X-X$  est calculé pour l'InP en fonction de l'énergie à 300 K obtenu avec notre simulateur Monte Carlo.

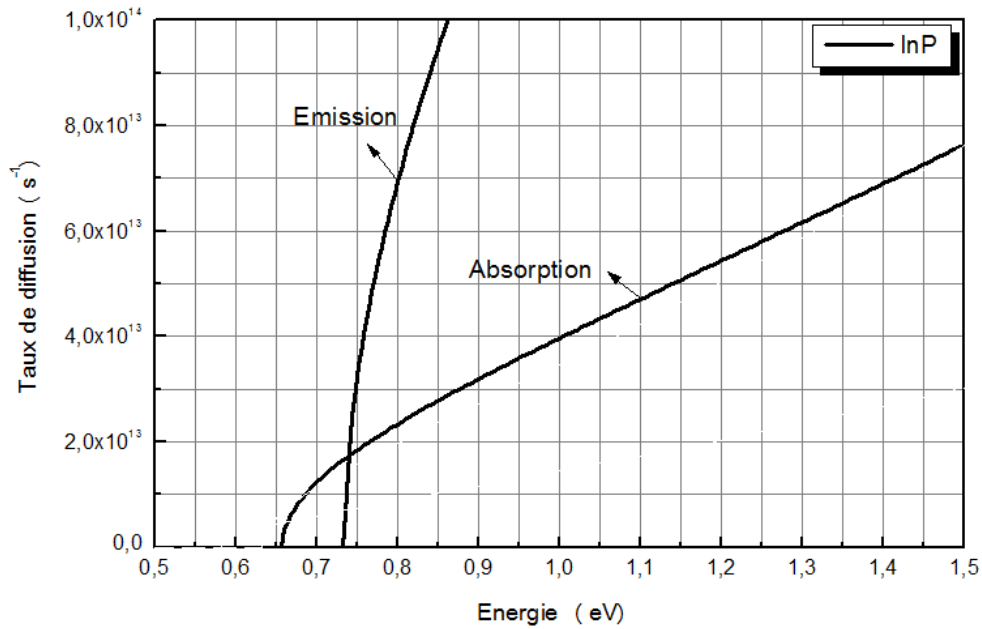


**Figure 2.5:** Taux de transfert des électrons dans les bandes équivalentes des vallées L dans l'InP à T = 300 K.

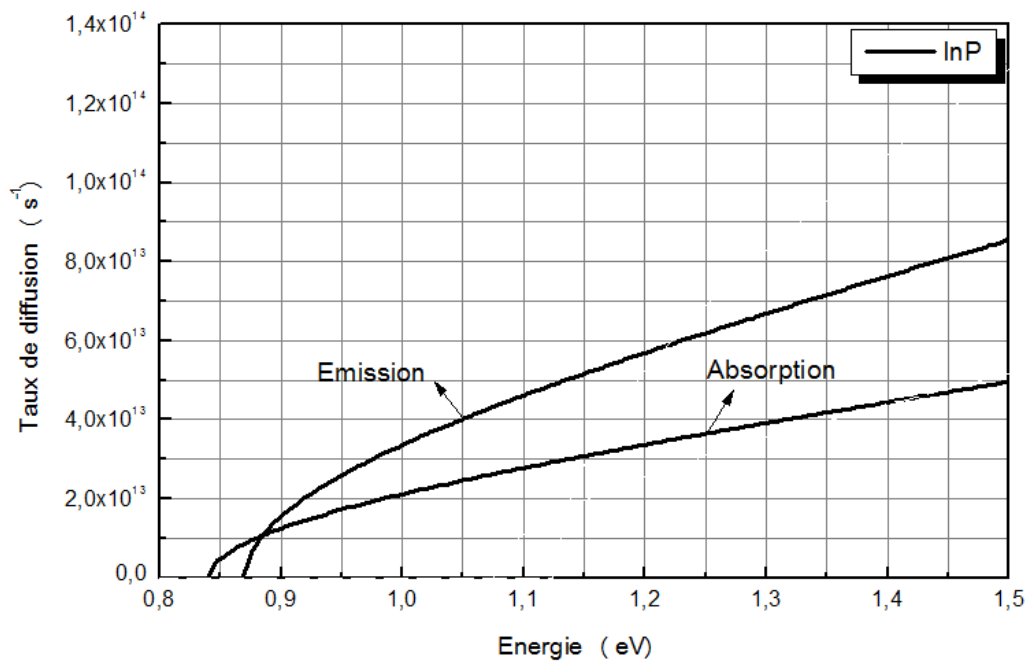


**Figure 2.6:** Taux de transfert des électrons dans les bandes équivalentes des vallées X dans l'InP à T = 300 K.

Les **Figures 2.7** et **2.8** donnent les courbes du taux de transfert obtenu avec notre simulateur Monte Carlo. Le taux de transfert de la vallée  $\Gamma$  aux vallées L et X est donné pour l'InP à  $T = 300$  K.



**Figure 2.7:** Taux de transfert des électrons dans la vallée  $\Gamma$  aux vallées L dans l'InP à  $T = 300$  K.



**Figure 2.8:** Taux de transfert des électrons dans la vallée  $\Gamma$  aux vallées X dans l'InP à  $T = 300$  K.



## 2.6. Interaction avec les impuretés :

Plusieurs théories ont été développées pour rendre compte des interactions entre les électrons de conduction et les impuretés dans les solides. Le modèle de H. Brooks et C. Herring tient compte des effets de charge d'espace au niveau de l'expression du potentiel  $V(r)$  créée par chaque impureté supposée ionisée. Il a supposé que pour des concentrations en impuretés inférieures à  $3.10^{17} \text{cm}^{-3}$ , les impuretés sont encore effectivement toutes ionisées et que les interactions électron-électron sont encore très peu probables.

L'interaction avec les impuretés est une interaction élastique dont la probabilité est indépendante de la concentration en impuretés ; celle-ci n'intervient que dans l'expression de la distribution de l'angle  $\beta$  de déviation qui se réduit à une fonction de dirac  $\delta(\beta)$ . Pour une concentration en impuretés  $N_D=0$  ; l'effet de l'interaction est alors nul. Cette distribution tend à être uniforme quand le dopage est élevé, contribuant dans ce cas à diminuer d'autant plus la vitesse moyenne de l'électron. Cette interaction, est fortement prépondérante en champ faible ou après les premiers transferts en vallée haute. Son effet principal sera donc de diminuer la valeur de la mobilité en champ faible. La probabilité d'interaction par unité de temps est donnée par :

$$\lambda(\varepsilon) = \frac{\sqrt{2} \cdot \pi \cdot N_D \cdot e^4 \cdot \varepsilon^{-4/2}}{(4 \cdot \pi \cdot \varepsilon_0 \cdot \varepsilon_S)^2 \cdot m^{*1/2}} \cdot \frac{(1 + 2\alpha \cdot \varepsilon)}{(1 + \alpha \cdot \varepsilon)^{3/2}} \cdot I \quad [2.17]$$

avec

$$I = \frac{\left[1 + 2e_k^2 \cdot (\theta/2k)^2\right]^2}{4 \cdot (\theta/2k)^2 \cdot \left[1 + (\theta/2k)^2\right]} + e_k^2 \cdot \left[1 + 2e_k^2 \cdot (\theta/2k)^2\right] \cdot \text{Ln} \left[ \frac{(\theta/2k)^2}{1 + (\theta/2k)^2} \right] + e_k^4 \quad [2.18]$$

Où 
$$e_k = \left( \frac{\alpha \cdot \varepsilon}{1 + 2\alpha \cdot \varepsilon} \right)^{1/2}$$

Où le paramètre d'écran  $\theta$  est lié à la concentration en impuretés  $N_D$  des électrons par:

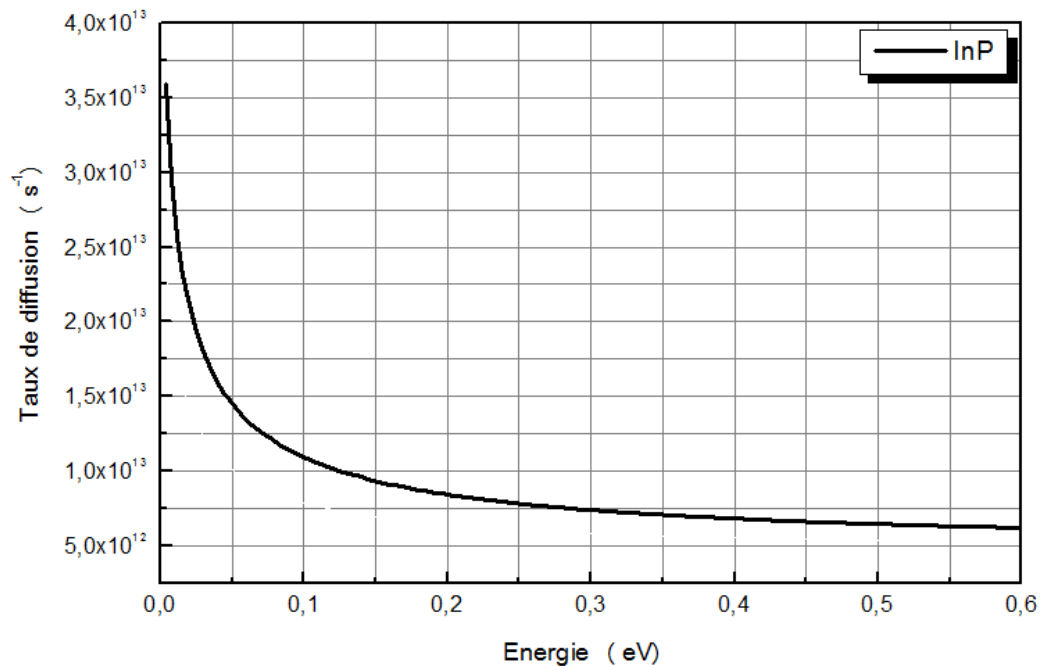
$$\theta^2 = \frac{N_D \cdot e^2}{\epsilon_0 \cdot \epsilon_s \cdot K_B T}$$

La probabilité d'interaction sous forme simplifiée s'écrit :

$$\lambda(\epsilon) = \frac{e^2 \cdot m^{*1/2} \cdot k_B \cdot T}{4 \cdot \pi \cdot \epsilon_0 \cdot \epsilon_s \cdot \hbar^2 \cdot \sqrt{2}} \cdot \frac{1 + 2\alpha \cdot \epsilon}{\delta(\epsilon)^{1/2}} \quad [2.19]$$

La **Figure 2.9** montre le taux de diffusion par impuretés ionisée calculé pour l'InP obtenu avec notre simulateur Monte Carlo en fonction de l'énergie à  $T = 300$  K pour

$$N_D = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$$



**Figure 2.9:** Taux de diffusion par impuretés ionisée pour les électrons de la vallée  $\Gamma$  dans l'InP à  $T = 300$  K .

## 2.7. Interaction alliage :

Dans les matériaux ternaires, à l'échelle microscopique, la stœchiométrie du réseau n'est pas respectée: le potentiel cristallin est perturbé. Cette perturbation est prise en compte par le potentiel d'alliage.

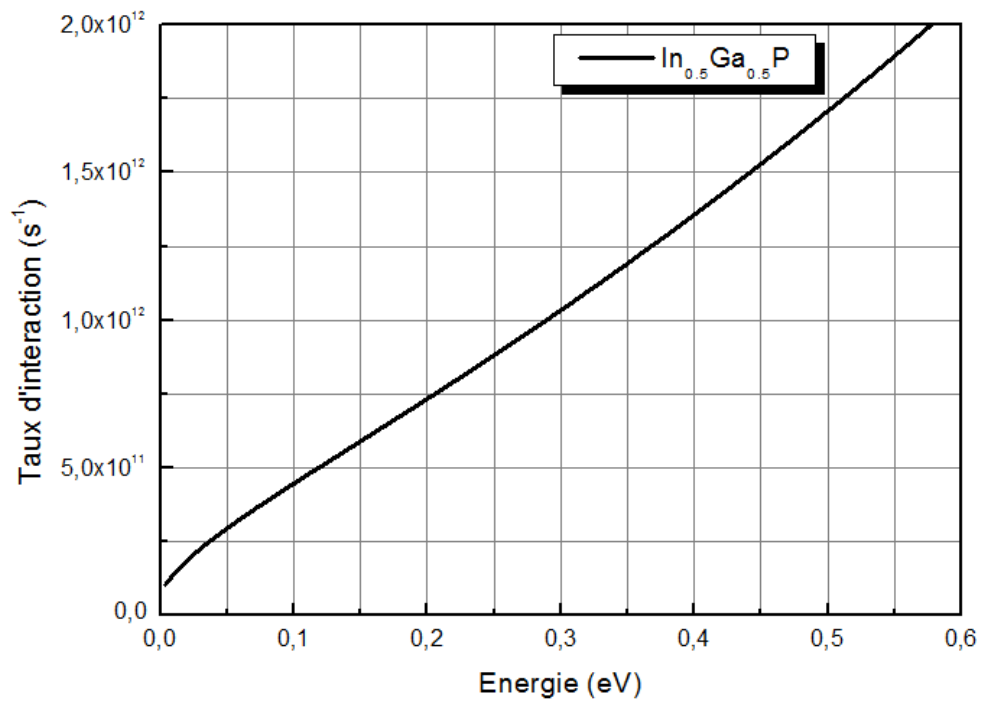
Le modèle le plus utilisé est celui qui repose sur le raisonnement suivant : Un électron qui passe au voisinage d'un atome de type 2 sur un site normalement occupé par un atome de type 1 subit un potentiel  $E_{\text{all}}$  dont l'extension spatiale est  $r_0$  telle que:

$$E_{\text{all}} = \begin{cases} e.U_{\text{all}} & \text{si } r \leq r_0 \\ 0 & \text{si } r > r_0 \end{cases} \quad [2.20]$$

Où  $U_{\text{all}}$  est le potentiel d'alliage et  $e$  la charge de l'électron. L'extension spatiale  $r_0$  est définie comme la distance entre deux plus proches voisins:  $r_0 = \sqrt{3}/4 \cdot a$  où  $a$  est la maille du semi-conducteur. Cette interaction a été discutée par Harrison-Hausser et Little John [DRIS 94], ou Le taux de diffusion est donné par l'expression suivante qui prend les interactions intravallée en considération [BENK 95]:

$$\lambda_{\text{all}}(\varepsilon) = \frac{3 \cdot \pi^3}{8 \cdot \hbar} \cdot \Omega \cdot U_{\text{all}}^2 \cdot x \cdot (1-x) \cdot g(\varepsilon) \quad [2.21]$$

La **Figure 2.10** présente la courbe du taux de diffusion par alliage ternaire obtenu avec notre simulateur Monte Carlo. Le calcul est fait pour l' $\text{In}_{0.5}\text{Ga}_{0.5}\text{P}$  à 300 K .



**Figure 2.10:** Taux de diffusion par alliages ternaires pour les électrons de la vallée  $\Gamma$  dans  $In_{0.5}Ga_{0.5}P$  à  $T = 300$  K.

## Références Bibliographiques:

- [KIRE 75] P. KIREEV, " physique des semi-conducteurs ", Edition Mir, Moscou 1975.
- [MOGL 93] MOGLESTUE, C., "Monte Carlo Simulation Semiconductor Devices", CHAPMAN & HALL, New York, 1993.
- [ALQU 85] G. ALQUIE, " physique des matériaux ", Maitrise de physique, Application de la physique, Université Pierre et Marie Curie, Paris VI, 1985.
- [SHIF 98] L. SHIFREN, " Ensemble Monte Carlo study ultrafast phenomena due to hot photo -excited carriers in bulk GaAs ", Thesis for the degree Master of Science, Arizona State University, 1998.
- [MAGN 98] V. MAGNIN, " contribution à l'étude et à l'optimisation de composants optoélectroniques ", Thèse de Docteur de l'Université en Electronique, l'Université des Sciences et Technologies de Lille, 1998.
- [CAST 89] R. CASTAGNE, J. P. DUCHEMIN, M. GLOANEC, CH. RUMELHARD, " Circuits Intégrés en Arséniure de gallium ", Paris 1989.
- [FAVE 96] P. N. FAVENNEC, " technologies pour les composants à semi-conducteurs ", Edition Masson, 1996.
- [GOUR 94] G. GOUREAUX, " physique des composants et dispositifs électroniques ", Edition Masson, Paris 1994.
- [FADE 83] M. FADEL, " contribution à l'étude du bruit et du transport en régime d'électrons chauds dans l'InP ", thèse de Docteur de 3<sup>ème</sup> Cycle Electronique, Université des Sciences et Techniques du Languedoc, 1983.
- [DRIS 94] F.Z. DRISS-KHODJA, " étude des propriétés électroniques  $Ga_xAl_{1-x}Sb$  ", thèse de magister en physique, Université de Sidi Bel Abbes, 1994.
- [BENK 95] K. BENKABOU, " étude des propriétés électroniques et optiques de l'alliage quaternaire  $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}$  ", thèse de magister, Université Djilali Liabes de Sidi Bel Abbes, 1995.

### 3.1. Historique:

Le nom et le développement des méthodes de Monte-Carlo datent de 1944 environ. Le nom de Monte-Carlo fait référence à la principauté de Monaco connue pour les jeux de hasard. On y trouve des roulettes qui constituent des générateurs de nombres aléatoires très simples. Bien que leur développement soit très récent, ces méthodes ont été utilisées (sans analyse probabiliste) à de nombreuses occasions dans le passé.

La première utilisation des méthodes de Monte-Carlo en tant qu'outil pour la recherche est liée aux travaux sur la bombe atomique pendant la seconde guerre mondiale. Ces travaux nécessitaient une simulation directe du problème probabiliste de la diffusion des neutrons dans la matière fissile. Mais déjà à un stade précoce de ces recherches, Von Neumann et Ulam ont travaillé sur la résolution de problèmes déterministes. Néanmoins, le développement de ces idées a dû attendre les travaux de Harris et Hermann Kahn en 1948. Cette année-là, Fermi, Metropolis et Ulam ont obtenu une estimation des valeurs propres de l'équation de Schrödinger [ALEV 99].

Aux environs de 1970, les développements de nouvelles théories ont rendu les méthodes probabilistes crédibles auprès des chercheurs et des problèmes de dimensions importantes pour lesquels les méthodes traditionnelles étaient inefficaces ont pu être résolus par les méthodes de Monte-Carlo. De nos jours, les méthodes probabilistes sont des outils performants et très utilisés dans le monde de la recherche pour estimer la solution de problèmes déterministes tels que le calcul d'intégrales multiples et la résolution d'équations aux dérivées partielles.

La première fois que la méthode a été utilisée pour la simulation du transport des électrons fut en 1960 par Luthi [ABOU 96] [LUTC 60] et quelques années plus tard, elle a été présentée par Kurozawa [KURO 66] dans le cadre d'une conférence sur les semi-conducteurs en 1966. Après plusieurs améliorations techniques, Fawcett a réalisé la première simulation des transistors à effet de champ au début des années 70 [FAWC 70]. Grâce au développement des microordinateurs, la méthode a connu un intérêt croissant dans le

domaine de la simulation des phénomènes de transport des porteurs de charges dans les semi-conducteurs [ABOU 96].

De nombreux travaux ont contribué au développement rapide de cette méthode, comme les ouvrages de Price [PRIC 72], de Jacoboni [JACO 89] [JACO 83] et du groupe de Malvern [ABOU 96] qui présente une méthode basée sur le modèle à plusieurs bandes. Littlejohn et Ferry ont analysé le transport et la diffusion dans les alliages ternaires et quaternaires [HAUS 76] [LITT 78], tandis que Hockney [HOCK 74] d'une part, et Moglestue [MOGL 86] d'une autre part, ont exposé les aspects techniques de la méthode et son application aux dispositifs électroniques. Ces travaux ont servi plus tard à la modélisation des dispositifs MODFET et des transistors à électrons de haute mobilité.

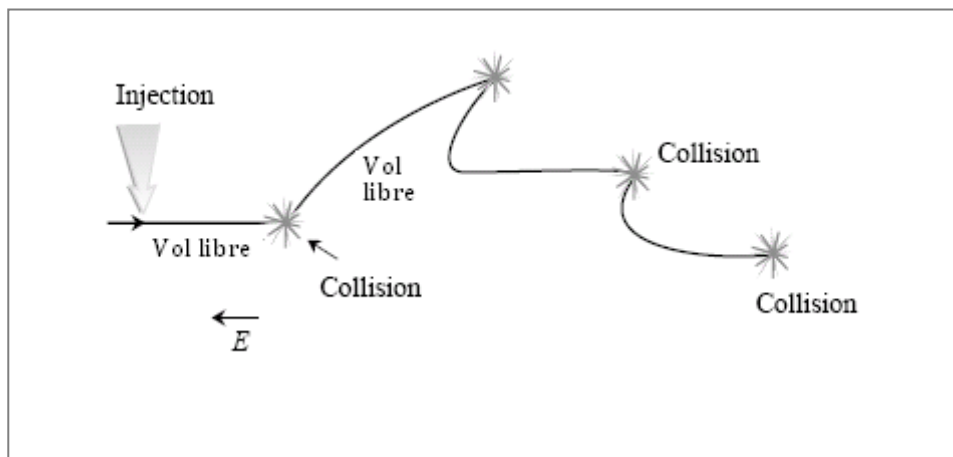
Ces travaux ont été suivis par un nombre de simulations de dispositifs à hétérojonction comme les articles de Stern [STER 80], Vinter [VINT 84], Yokoyama [YOKO 86] et d'autres qui ont aussi contribué au développement d'une large famille des nouveaux dispositifs à hétérojonction. De plus, les simulateurs Monte Carlo ont été dotés par les modèles bipolaires avec l'introduction des diffusions par les trous dans les travaux de Costato et Riggiani [COST 73] [COSTT 73]. Ceci a ouvert de nouvelles possibilités pour simuler des structures de différents matériaux, unipolaires ou bipolaires.

Les travaux cités ne constituent qu'un petit échantillon de la longue liste de contributions liées à la simulation Monte Carlo dans l'analyse du transport électronique. Et malgré les difficultés liées au besoin de ressources informatiques importantes, elle est devenue un outil très efficace pour la simulation et l'analyse des dispositifs [ABOU 96].

### **3.2. Aspect général:**

L'évolution des particules d'un système peut être décrite par deux processus distincts: les libres parcours et les diffusions [ALEV 99] [FARI 02].

La méthode de simulation employée permet donc de suivre les évolutions d'un ensemble de particules, au cours du temps. L'histoire de ces particules est constituée d'une séquence de vols libres résultant de l'action des champs électriques régnant dans la structure, entrecoupée par des processus de diffusion qui sont des phénomènes aléatoires liés à la nature des matériaux semi-conducteurs, et qui perturbent la trajectoire des particules (**Figure 3.1**) [BANS 99]. Ce qui a pour effet de faire varier leur énergie cinétique et la direction de leur vecteur d'onde. Il en résulte une variation de leur vecteur vitesse. Les grandeurs tel que la vitesse de dérive, l'énergie,... en présence du champ électrique sont calculées par la moyenne d'ensemble du composant. On peut considérer, dans une même simulation, l'effet de plusieurs types de diffusions avec des probabilités de réalisation qui leurs son propres. On peut, par exemple, simuler un système où les porteurs peuvent interagir avec des divers types de phonons en plus de collisionner entre eux. L'ensemble d'un programme Monte Carlo peut être schématisé sur la **Figure 2.2**.



**Figure 3.1:** L'évolution d'un ensemble de particules au cours du temps [SING 93].

Dans l'étape d'initialisation, on définit d'abord les paramètres de la simulation. On regroupe ici l'ensemble des définitions permettant de décrire entièrement l'environnement dans lequel évolueront les porteurs simulés. Dans le cas d'un semi-conducteur massif, il suffit de définir les propriétés du matériau comme, par exemple, la masse effective des porteurs, la température à laquelle le système est maintenu, les potentiels de déformation décrivant l'interaction des porteurs avec les phonons du cristal, etc.



Une fois l'ensemble de ces informations connues, on peut calculer les probabilités qu'un porteur dans un état donné subisse une diffusion d'un type quelconque. Ceci est expliqué et plus de détails sur le calcul de ces probabilités sont présentées dans le chapitre 2. La simulation de l'évolution temporelle des particules peut débuter une fois cette initialisation complétée. On discrétise le temps en une série d'intervalles très courts de durée  $\Delta t$ .

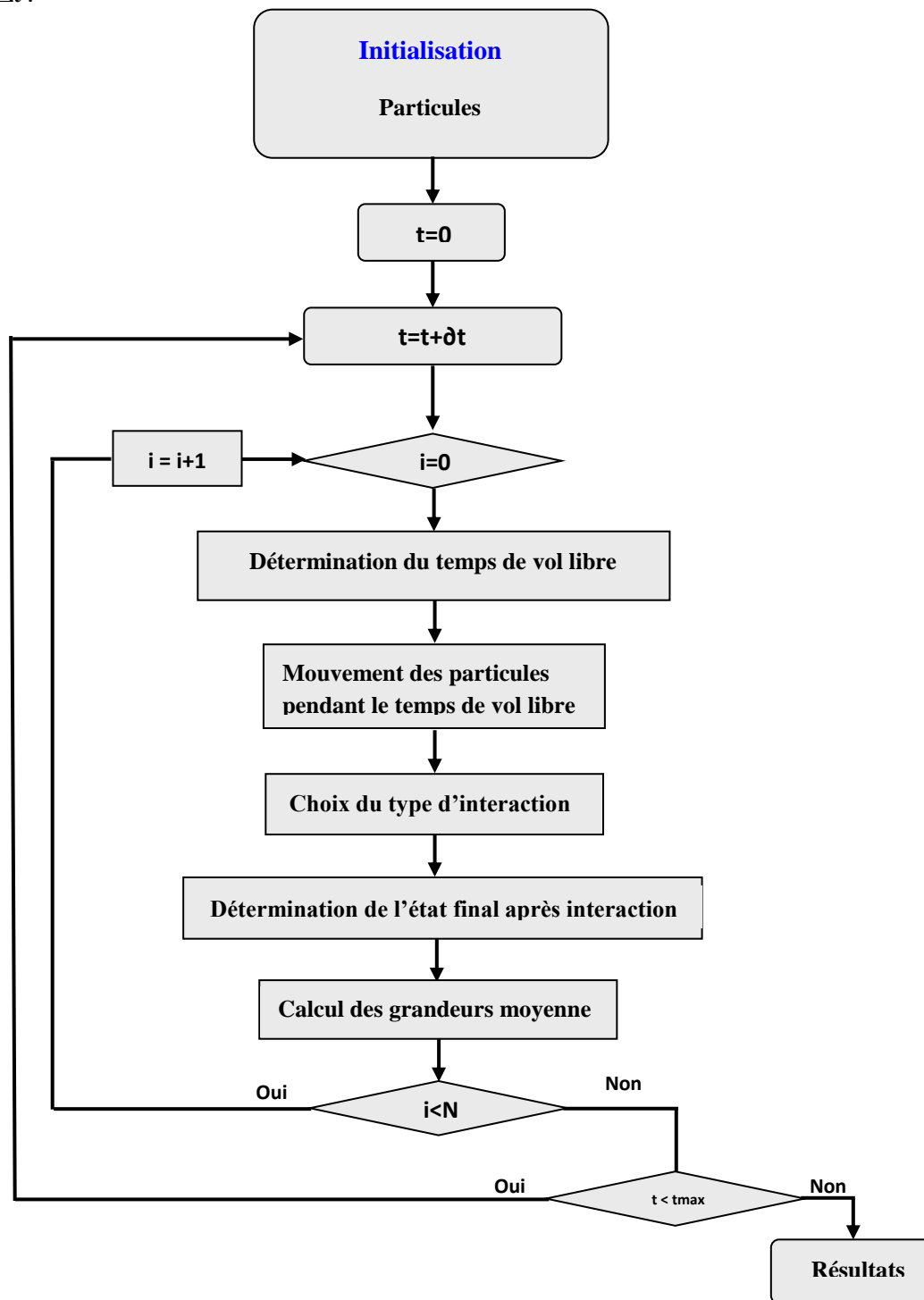


Figure 3.2: Organigramme général de l'algorithme de simulateur Monte Carlo.

Durant chacun de ces éléments de temps, on fait évoluer selon les équations du mouvement semi classique, l'état de chacune des N particules simulées. Si le libre parcours ne se termine pas dans l'intervalle  $\Delta t$  en cours, son évolution du temps  $t$  à  $t + \Delta t$  sera purement semi classique. Cependant si le libre parcours se termine, on doit alors considérer l'effet de la diffusion qui y a mis fin.

Le traitement des diffusions nécessite de sélectionner stochastiquement, parmi les processus considérés, celui qui est responsable de l'interruption du libre parcours, tout en respectant les probabilités propres à chacun des types de diffusion traités. On doit sélectionner ensuite l'état final dans lequel se trouve la particule à la suite de cette diffusion, puis générer pour cette particule, un nouveau temps de libre parcours pour la suite de la simulation.

### 3.3. Structure de bande:

Le mouvement des porteurs de charge dans les semi-conducteurs est décrit par la structure de bandes qui détermine leur état énergétique. Cet état est exprimé par la relation de dispersion  $\varepsilon(\vec{k})$  entre l'énergie  $\varepsilon$  et le vecteur d'onde du cristal  $\vec{k}$ . Un porteur qui se trouve dans une bande non parabolique avec un vecteur d'onde  $\vec{k}$ , a une quantité de mouvement  $p = \hbar k = m^* v$  et une énergie cinétique donnée par [ABOU 96] [SHIF 98]:

$$\varepsilon(1 + \alpha\varepsilon) = \gamma(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad [3.1]$$

Ou encore

$$\varepsilon(\vec{k}) = \frac{-1 + \sqrt{1 + 4\alpha\gamma}}{2\alpha} \quad [3.2]$$

Avec  $\hbar$  est la constante de Planck divisée sur  $2\pi$  et  $m^*$  est la masse effective du porteur dans la bande.  $\alpha$  est un facteur de non parabolicité exprimé en fonction de l'énergie du gap

$\varepsilon_g$  entre la bande de conduction et la bande de valence et la masse de l'électron libre  $m_0$  par [SHIF 98]:

$$\alpha = \frac{1}{\varepsilon_g} \left[ 1 - \frac{m^*}{m_0} \right]^2 \quad [3.3]$$

De plus, le porteur se déplace avec la vitesse de groupe  $v$  donnée par [SHIF 98] [HEST 84] [KASZ 79]:

$$v(\mathbf{k}) = \frac{1}{\hbar} \cdot \frac{\partial \varepsilon}{\partial \mathbf{k}} = \frac{\hbar \mathbf{k}}{m^* (1 + 2\alpha \varepsilon)} = \frac{\hbar \mathbf{k}}{m^* \sqrt{1 + 4\alpha \gamma(\mathbf{k})}} \quad [3.4]$$

A partir de l'équation [3.4], La masse effective est définie par la relation suivante :

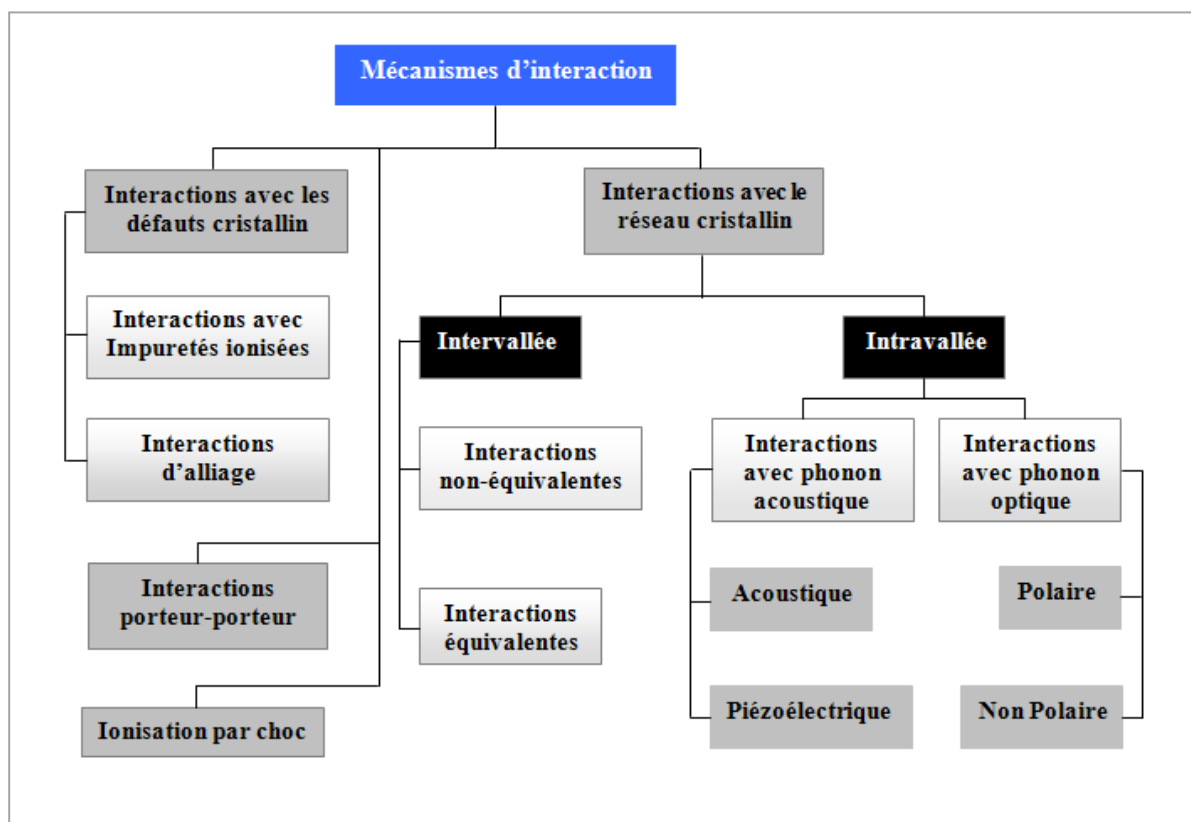
$$\frac{1}{m^*} = \frac{v}{\hbar k} = \frac{1}{\hbar k} \cdot \frac{1}{\hbar} \cdot \frac{\partial \varepsilon}{\partial k} = \frac{1}{\hbar^2 k} \cdot \frac{\partial \varepsilon}{\partial k} \quad [3.5]$$

### 3.4. Processus de diffusion des électrons:

Dans les semi-conducteurs, les porteurs subissent plusieurs types de diffusion pendant leurs parcours. Les diffusions sont des phénomènes aléatoires décrits par des lois de probabilité qui lient l'état initial à un état final accessible. Leur effet stochastique modifie l'orientation du vecteur d'onde et éventuellement l'énergie du porteur suivant que l'interaction est élastique ou inélastique. Les collisions des porteurs se font en générale avec les atomes d'impuretés dans le matériau, avec différents types de phonons, avec des défauts cristallins, ou avec d'autres porteurs (**Tableau 3.1**).

Ces diffusions dans les semi-conducteurs sont classifiées en deux catégories. La première catégorie affecte le porteur par un échange d'énergie, et la deuxième, par un changement de sa quantité de mouvement pour donner une nouvelle orientation à sa trajectoire sans changer son énergie.

L'énergie finale  $\varepsilon'$  après l'échange d'énergie devient  $\varepsilon' = \varepsilon + \Delta\varepsilon$  et  $\Delta\varepsilon$  peut avoir plusieurs formes selon le type de diffusion choisi. De plus, le calcul du vecteur  $\vec{k}$  est effectué à l'aide de l'équation [3.1], tandis que son orientation est obtenue à partir d'une probabilité définie aussi pour chaque type de diffusion et calculée en fonction de l'énergie  $\varepsilon'$ . Pour les types de diffusion qui modifient seulement la quantité de mouvement, l'orientation finale des porteurs est tirée d'une probabilité  $P(\theta)$  calculée en fonction de l'énergie  $\varepsilon$ .



**Tableau 3.1:** Différents processus de diffusion des porteurs dans le semi-conducteur.

### 3.4.1. Changement d'énergie:

L'échange d'énergie est lié soit au changement de bande du porteur pendant son transport, appelé diffusion intervallée (ou interbande), ou à l'échange d'énergie avec les

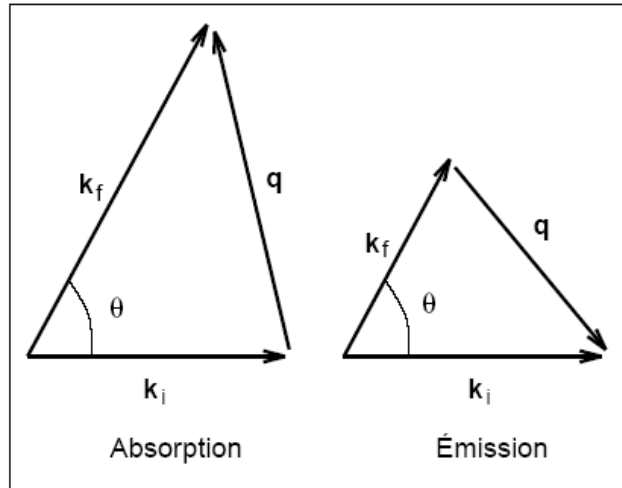
phonons du matériau sans changer la bande, connu comme diffusion intravallée (ou intrabande).

#### 3.4.1.1. Diffusions intervallées par des phonons:

Les diffusions intervallées sont causées d'une part, par des vibrations thermiques dans le cristal et d'autre part, par des potentiels de déformation du réseau cristallographique [ABOU 96]. La collision du porteur avec le phonon peut être considérée comme une collision élastique, où l'énergie et la quantité de mouvement sont conservées. La valeur de  $\Delta\varepsilon$  prend la valeur l'énergie du phonon acoustique, de l'énergie du phonon optique non polaire ou de l'énergie du phonon optique polaire. Le porteur peut absorber un phonon et gagner de l'énergie ou émettre un phonon en perdant de l'énergie. Le vecteur final est dans les deux cas la somme vectorielle du vecteur initial avec celui du phonon ( $\mathbf{k}' = \mathbf{k} + \mathbf{q}$ ).

Par ailleurs, les vibrations peuvent aussi déformer le réseau du cristal et causer des modifications dans la structure de bande. Alors le porteur subit une diffusion causée par le potentiel de cette déformation et interagit avec des phonons qui sont en phase avec son mouvement [SING 93]. **La Figure 3.3** montre la différence d'orientation du vecteur d'onde d'un porteur après l'émission ou l'absorption d'un phonon, basée sur la conservation de la quantité de mouvement et de l'énergie.

Dans les bandes supérieures, les porteurs possèdent des masses élevées et une mobilité inférieure à celle de la bande centrale. Le rôle des diffusions intervallée se manifeste clairement dans le transport en champ fort, lorsque les porteurs peuvent acquérir des énergies élevées. Ce changement de bandes est la cause de plusieurs phénomènes physiques tels que l'effet de Gunn et le dépassement de la vitesse employée dans certains dispositifs pour diverses fonctions.



**Figure 3.3:** Orientation du vecteur d'onde finale pour les cas de diffusion par émission et absorption de phonon [ABOU 96].

#### 3.4.1.2. Diffusions intervallée (interbandes):

La diffusion intervallée provoque un transfert du porteur de la bande centrale aux bandes supérieures et vis versa. Ce transfert est possible pour des énergies du porteur comparables à la différence d'énergie entre la bande centrale et les autres bandes.  $\Delta\varepsilon$  prend une des valeurs  $\Delta\varepsilon_{\Gamma L}$  ou  $\Delta\varepsilon_{\Gamma X}$  pour les électrons. On note, que ces énergies sont des caractéristiques de matériau qui dépendent de la température et peuvent jouer un rôle important sur le taux de diffusion intervallée.

#### 3.4.2. Changement de la quantité de mouvement :

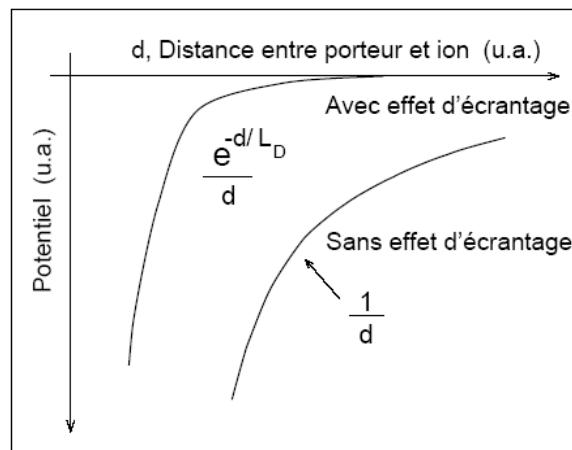
Le changement de vecteur d'onde sans changement d'énergie est expliqué, en général, par l'effet du potentiel coulombien à cause de la différence de charge entre les porteurs et les impuretés ionisées, et par la présence d'alliages. L'effet de ce potentiel se traduit par une déviation du trajet des porteurs en conservant le module du vecteur d'onde.

### 3.4.2.1. Impuretés ionisées:

L'interaction des porteurs avec des impuretés prend une importance croissante en fonction de la densité d'ion dans le milieu. On s'en sert pour contrôler le transport en champ faible. Pour des faibles densités de dopant, on peut considérer que la variation du potentiel est inversement proportionnelle à la distance entre le porteur et l'ion. Par contre, si la densité d'impuretés est élevée, le porteur est affecté par l'effet d'écrantage et influencé par un autre potentiel formé par un ensemble d'ions. Cependant, la perturbation causée par le potentiel du porteur seul ou de l'ion seul, décroît exponentiellement en fonction de la distance entre le porteur et l'ion [ANDE 85].

Pour calculer le potentiel, en compare cette distance à une longueur dépendante de la densité de porteurs libres, elle est appelée la longueur de Debye  $L_D$ . Cette longueur caractéristique est équivalente à la distance maximale pour laquelle l'effet de la charge d'un porteur reste dominant malgré la présence d'autres porteurs de charge dans l'espace [SZE 81] [CASE 81].

La **Figure 3.4** donne une idée qualitative de la variation du potentiel en fonction de la distance  $d$  entre le porteur et l'ion, ou le changement de la forme du potentiel dû à l'effet d'écrantage est schématisé. Sans l'écrantage le potentiel décroît avec la relation  $1/d$ , tandis qu'avec l'effet d'écrantage le potentiel décroît selon  $\exp(-d/L_D)$ .



**Figure 3.4:** L'effet d'écrantage sur le potentiel coulombien entre les porteurs et les impuretés ionisées [ABOU 96].

### 3.4.2.2. Alliages:

La présence d'alliages et dislocations dans le cristal cause un désordre important dans le réseau. Ce dernier perd facilement sa périodicité pour crée un changement de potentiel à l'échelle atomique. Cette différence brusque de potentiel influe sur le mouvement du porteur et l'oblige à changer sa direction durant son parcours [ANDE 85].

Le potentiel effectif qui contribue à cette diffusion dépend de la nature d'alliage, notamment s'il est ternaire ou quaternaire. Son calcul est possible à l'aide d'expressions d'extrapolation dépendant des fractions des matériaux employés [HAUS 76] [LITT 78].

### 3.5. Initialisation:

L'état initial des particules à l'instant  $t=0$  est tiré au hasard par la distribution de Maxwell-Boltzmann [XIAO 00]:

$$p(\varepsilon)d\varepsilon = \frac{1}{\varepsilon_0} \exp\left(-\frac{\varepsilon}{\varepsilon_0}\right) \quad \text{avec} \quad \varepsilon_0 = \frac{3}{2} \cdot k_B \cdot T \quad [3.6]$$

Alors

$$\varepsilon = -\frac{3}{2} \cdot k_B \cdot T \cdot \ln(r_1)$$

[3.7]

Où  $r_1$  est un nombre aléatoire compris entre 0 et 1.

### 3.6. Génération des temps de libre parcours:

Un des points le plus important de l'algorithme Monte Carlo est la génération stochastique du temps de libre parcours respectant les probabilités de collision propre à chacun des processus. On doit générer initialement un premier temps de libre parcours pour



chacun des porteurs simulés, mais à chaque fois qu'un de ces porteurs subit une collision (à la fin du libre parcours), un nouveau temps doit être choisi pour ce porteur [FARI 02].

Connaissant  $\Gamma(\vec{k})\delta t$ , la probabilité totale pour qu'un électron de vecteur d'onde  $\vec{k}$  subisse une collision durant un intervalle  $\delta t$ , on en déduit que la probabilité  $p$  au temps  $t$  pour que la collision ne se produise pas est donnée par la relation suivante:

$$p_s(\vec{k}(t)) = \exp\left(-\int_0^{t_v} \Gamma[\vec{k}(t')]\delta t'\right) \quad [3.8]$$

La probabilité que le libre parcours (qui suit immédiatement la collision au temps  $t=0$ ) soit de durée  $t$  est donc la probabilité qu'il subisse une collision au temps  $t$  et sans en avoir subi entre 0 et  $t$ , soit [JACO 89] [SHIF 98] [HEST 84] [MOGL 93] [MOGL 90]:

$$P_{\text{libre}}(t)\delta t = \Gamma[\vec{k}(t)] \exp\left[-\int_0^{t_v} \Gamma[\vec{k}(t')]\delta t'\right] \delta t \quad [3.9]$$

Bien évidemment, la nécessité de calculer l'intégrale présente dans l'argument de l'exponentielle (et ce chaque fois que l'on souhaite générer un temps de libre parcours), rendait très lourds les calculs nécessaires de la simulation. Pour simplifier cette équation on introduit dans la simulation, un processus de collision que l'on appelle Self Scattering. C'est l'approche la plus répandue qui a été introduite par Rees [REES 68] [FAXC 69]. Pour simplifier l'expression, Rees a suggéré d'ajouter à l'ensemble des mécanismes d'interactions entrant en jeu un processus d'interaction virtuel qui ne change pas l'état énergétique du porteur [ABOU 96].

On choisit la probabilité  $\Gamma_{\text{self}}$  (**Figure 3.5**) de manière à ce que la probabilité totale d'interaction soit une constante:

$$\Gamma_0 = \Gamma(\vec{k}(t)) + \Gamma_{\text{self}}(\vec{k}(t)) \quad [3.10]$$

L'équation [3.10] se réduit à:

$$P_{\text{libre}}(t)\partial t = \Gamma_0 \cdot \exp(-\Gamma_0 t) \cdot \partial t \quad [3.11]$$

Il faut trouver une valeur aléatoire du temps de libre parcours propre à cette probabilité. On utilise pour cela un générateur de nombres pseudo aléatoires répartis uniformément sur l'intervalle  $[0,1]$  pour lequel la probabilité  $P(r)\partial r$  de choisir un nombre compris entre  $r$  et  $r + \partial r$ , est simplement donnée la relation  $P(r)\partial r = \partial r$ , on a alors [JACO 83]:

$$P(r')\partial r' = \partial r' = P_{\text{libre}}(t')\partial t' \quad [3.12]$$

$$\int_0^r \partial r' = r = \int_0^{t_v} P_{\text{libre}}(t')\partial t' \quad [3.13]$$

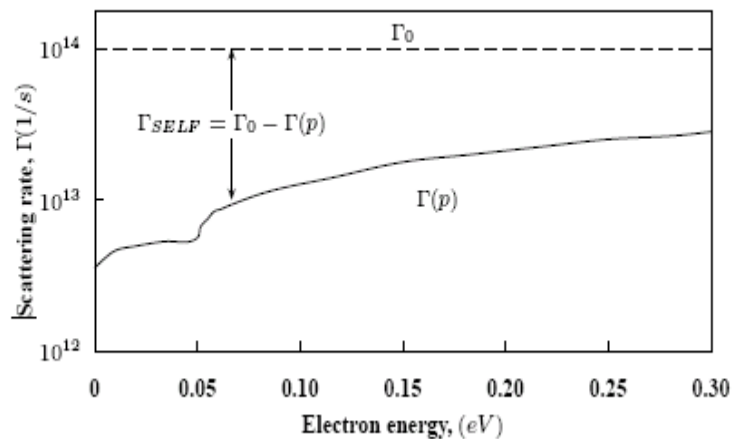
$$r = \int_0^{t_v} \Gamma_0 \cdot \exp(-\Gamma_0 t)\partial t = -\exp(-\Gamma_0 t)\Big|_0^{t_v} = 1 - \exp(-\Gamma_0 t_v) \quad [2.14]$$

$$t_v = -\frac{1}{\Gamma_0} \ln(1-r) \quad [3.15]$$

Compte tenu que  $r$  est distribué uniformément on utilise plutôt la forme:

$$t_v = -\frac{1}{\Gamma_0} \ln(r) \quad [3.16]$$

Au temps  $t=0$ , on génère pour chacun des  $N$  porteurs simulés un nombre aléatoire  $r$ , auquel on peut associer une durée  $t_v$  de chacun des premiers libres parcours. Puis, lorsqu'un des porteurs subit une collision, on doit choisir un nouveau temps pour ce dernier, toujours en utilisant l'équation [3.16].



Page 42  
**Figure 3.5:** Probabilité totale d'interaction et Self Scattering [CEM 03].

### 3.7. Trajectoire des particules:

L'évolution temporelle de la position et du vecteur d'onde d'un électron traité semi classiquement, sans champ magnétique externe, est décrite par les deux équations suivantes [FARI 02]:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \vec{k}}{\partial t} = -\frac{e}{\hbar} \mathbf{E} \end{array} \right. \quad [3.17]$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial t} = \frac{\hbar \cdot \vec{k}}{m^*} \end{array} \right. \quad [3.18]$$

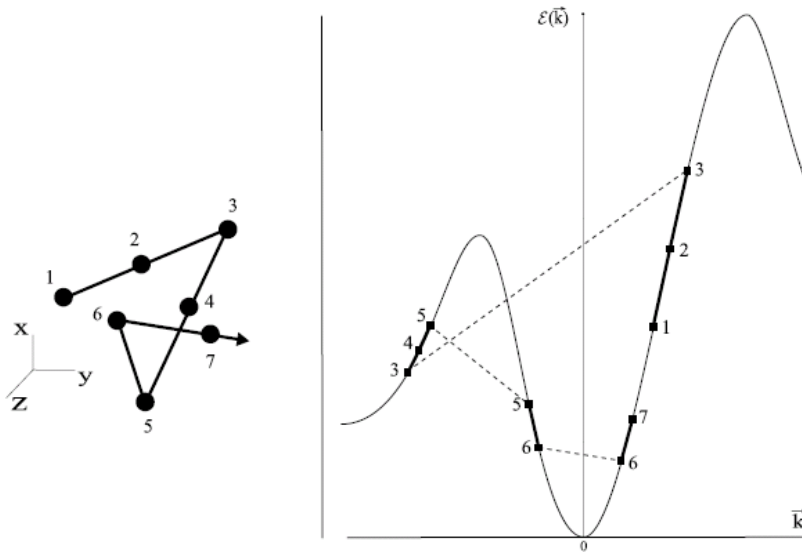
Pour un champ électrique externe constant, le porteur passe de l'état initial  $(\mathbf{k}, \mathbf{r})$  au temps  $t$  à l'état final  $(\mathbf{k}', \mathbf{r}')$  au temps  $t + \Delta t$ . Ceci permet d'écrire l'équation [3.17] sous la forme:

$$\mathbf{k}'(t + \Delta t) = \mathbf{k}(t) - \frac{e}{\hbar} \cdot \mathbf{E} \cdot \Delta t \quad [3.19]$$

et

$$\mathbf{r}'(t + \Delta t) = \mathbf{r}(t) + \frac{\hbar}{m^*} \cdot \frac{\mathbf{k}(t) + \mathbf{k}'(t + \Delta t)}{2} \cdot \Delta t \quad [3.20]$$

C'est deux équations ([3.19] et [3.24]) régissent le mouvement des porteurs sans effectuer de collisions. Connaissant l'état initial de chacun des porteurs, on peut donc, tout au long du libre parcours, déterminer son état, en répétant la procédure dictée par les équations, jusqu'à ce que soit atteint l'intervalle de temps au cours duquel se termine le libre parcours, c'est-à-dire au cours duquel survient une collision. Nous avons représenté sur la **Figure 3.6** un court fragment de la trajectoire d'un électron au cours du temps dans l'espace réel (à gauche) correspond de l'énergie dans l'espace réciproque (à droite). On remarque que le porteur a tendance à se déplacer vers la droite qui représente la direction du champ électrique. Les électrons effectuent un vol libre à chaque pas de temps et subissent parfois des interactions (étapes 3,5 et 6).



**Figure 3.6:** Trajectoire d'un électron au cours du temps dans l'espace réel (à gauche) correspond de l'énergie dans l'espace réciproque (à droite) [GALL 05].

### 3.8. Sélection du type de diffusion :

A la fin d'un vol libre, la nature de l'interaction subie par la particule est déterminée par tirage au sort.

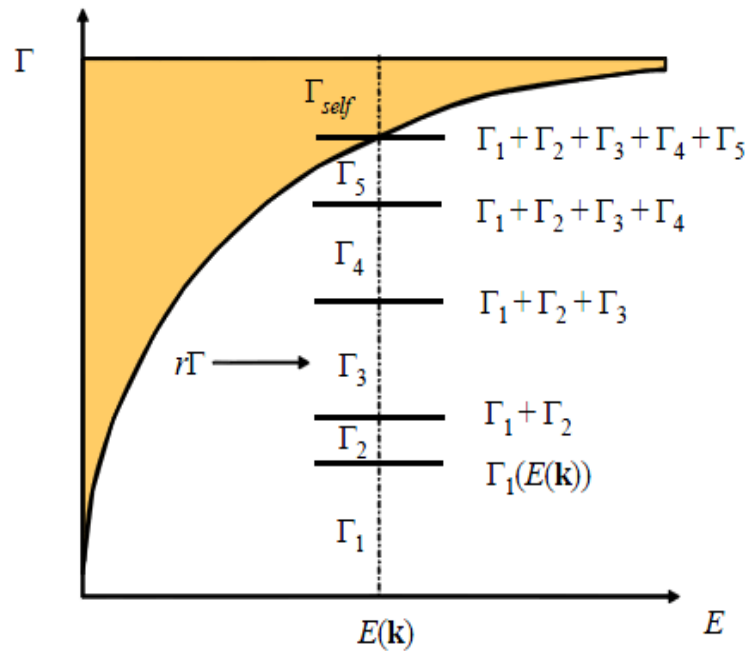
L'interaction  $k$  subie par la particule est déterminée, à partir d'un nombre aléatoire  $r$  compris entre 0 et 1 suivant l'expression suivante:

$$\frac{\sum_{i=1}^{k-1} P_i}{\Gamma_0} < r \leq \frac{\sum_{i=1}^k P_i}{\Gamma_0} \quad [3.21]$$

On calcule  $r$  avec  $\Gamma_0$  est le taux de diffusion totale. En commence, par la suite, à le comparer aux différentes sommes de taux:

- ✚ Si  $r\Gamma_0 = \Gamma_1(k)$ , alors le processus de diffusion  $\Gamma_1$  est choisi.
- ✚ Si  $\Gamma_1(k) < r\Gamma_0 = \Gamma_1(k) + \Gamma_2(k)$ , alors le processus de diffusion  $\Gamma_2$  est choisi.

✚ Et ainsi si  $\Gamma_1(\mathbf{k}) + \Gamma_2(\mathbf{k}) + \dots + \Gamma_{n-1}(\mathbf{k}) < r\Gamma_0 = \Gamma_1(\mathbf{k}) + \dots + \Gamma_n(\mathbf{k})$  alors le processus de diffusion  $\Gamma_n$  est choisi [JACO 83] [SINK 06] comme cela est représenté sur la **Figure 3.7**.



**Figure 3.7:** Choix du processus de diffusion [SINK 06].

## Références Bibliographiques:

**[ALEV 99]** ALEV, D., G., "Simulation des Dispositifs Optoélectroniques par la Méthode de Monte Carlo", Maîtrise ES Sciences Appliquées, Université de Montréal, Mai 1999

**[ABOU 96]** ABOU-KHALIL, M., "Modélisation du Transport des Porteurs de Charges dans les Dispositifs Actifs à Hétérostructures et à puits Quantiques par la Méthode Monte Carlo", Ph. D, Université de Montréal, 15 juillet 1996.

**[LUTC 60]** LUTCHI, B. and WYDER, P., *Helv. Phys. Acta.*, vol. 33, pp. 667, 1960.

**[KURO 66]** KUROZAWA, T., "Monte Carlo Calculation of Hot Electron Problems", *Proc. 8<sup>th</sup> Int. Conf. Phys. Semic.*, Kyoto, *J. Phys. Soc. Japan, Suppl. 24*, pp. 424, 1966.

**[FAWC 70]** FAWCETT, W., BOARDMAN, A., D. and SWAIN, S., "Monte Carlo Determination of Electron Transport Properties of Gallium Arsenide", *J. Phys. Chem. Solides*, vol. 31, pp. 1963, 1970.

**[PRIC 72]** PRICE, P., S., *Semiconductors and Semimetals*, vol. 14, pp. 249, 1972.

**[JACO 89]** JACOBONI, C. and LUGLI, P., "the Monte Carlo Method for Semiconductor Device Simulation", *Computational Microelectronics*, Selberherr, Springer-Verlag Wien, New York, 1989.

**[JACO 83]** JACOBONI, C. and REGGIANI, L., "The Monte Carlo Method for the Solution of Charge Transport in Semiconductors with Applications to Covalent Materials", *Review of Modern physics*, Vol. 55, No. 3, pp. 645, July 1983 .

**[HAUS 76]** HAUSER, J., R., LITTLEJOHN, M., A. and GLISSON, T., H., "Velocity Field Relationship of InAs-InP Alloys Including the Effects of Alloy Scattering", *Apply. Phys. Lett.*, vol 28, no. 8, pp. 458-461, 15 April 1976.

**[LITT 78]** LITTLEJOHN, M., A., HAUSER, J., R., GLISSON, T., H., FERRY, D., K. and HARRISON, J., W., "alloy Scattering and High Field Transport in Ternary and Quaternary III-V Semiconductors", *Solid State Electr.*, vol 21, pp. 107-114, 1978.

**[HOCK 74]** HOCKNEY, R., W., WARRINER, R., A. and REISER, M., "Two Dimensional Particle Models in Semiconductor Device Analysis", *Electr. Lett.*, vol 10, no. 23, pp. 484-486, Nov14, 1974.

- [MOGL 86]** MOGLESTUE, C., " A Self-Consistent Monte Carlo Particle Model to Analyse Semiconductor Microcomponents of any Geometry", IEEE Trans. Computer-Aided Design, vol. CA-5, no 2, pp. 326, April. 1986.
- [STER 80]** STERN, F., DAS SARMA, S., "Monte Carlo Simulation of Real Space Electron Transfert in GaAs-AlGaAs Heterostructures", J. Appl. Phys., vol51, no. 10, pp. 5445-5449, Oct. 1980.
- [VINT 84]** VINTER, B., "Subbands and Charge Control in a Two Dimensional Electron Gas Field Effect Transistor", Appl. Phys. Lett., Vol 44, no. 3, pp. 307-309, Feb., 1984.
- [YOKO 86]** YOKOYAMA, K. and HESS, K., "Intersubband PhononOverlap Integral for AlGaAs/GaAs Single-Well Heterostructures", Phys. Rev. B, vol. 33, no. 8, pp. 5595, 15 April 1986.
- [COST 73]** COSTATO, M. and REGGIANI, L., "Scattering Probabilities for Holes. I. Deformation Potential and ionized Impurity Scattering Mechanisms ", Phys. Stat. Sol. B, vol. 58, pp. 471, 1973.
- [COSTT 73]** COSTATO, M. and REGGIANI, L., "Scattering Probabilities for Holes.II. Polar Optical Scattering Mechanisms", Phys. Stat. Sol. B, vol. 59, pp. 47, 1973.
- [FARI 02]** FARIBAULT, A ., "Simulation Monte Carlo du Transport et de la Relaxation des Porteurs dans les Structures à Boites Quantiques Auto-Assemblées", Mémoire de Maître és Sciences, Université de Sherbrooke, Québec, Canada, Mai 2002.
- [BANS 99]** BANSE, F., DEKEYSER, J., L. and FAUQUEMBERGUEB, R., " Parallélisation d'une méthode de Monte Carlo pour la simulation de composants semi-conducteurs, Publication interne Laboratoire d'Informatique Fondamentale de Lille (LIFL), février 1999.
- [SING 93]** SINGH, J., "Physics of Semiconductors and their Heterostructures", Electrical and computer engineering series, McGraw-Hill, New York, 1993.
- [SHIF 98]** SHIFREN, L., "Ensemble Monte Carlo study ultrafast phenomena due to hot photo-excited carriers in bulk GaAs", Thesis for the degree Master of Science, Arizona State University, 1998.
- [HEST 84]** HESTO, P., "Simulation Monte Carlo du Transport Non Stationnaire dans les Dispositifs Submicroniques: Importance du Phénomène Balistique dans GaAs à 77 k", Thèse de Docteur en Sciences, Université de Paris-Sud, Centre d'Orsay, 1984.
- [KASZ 79]** KASZYNSKI, A., "Étude des Phénomènes de Transport dans les Matériaux Semiconducteurs par les Méthodes de Monte Carlo: Application a l'Arséniure de Gallium de

type N", Thèse de Docteur Ingénieur. Université des Sciences et Techniques de Lille, juillet 1979.

**[ANDE 85]** ANDERSON, D., A., APSLEY, N., DAVIS, P., GILES, P., L., "Compensation in Heavily Doped n-Type InP and GaAs", J. Appl. Phys., vol 58, no. 10, pp. 3059-3067, Oct. 1985.

**[SZE 81]** SZE, S., M., "Physics of Semiconductor Devices", John Willey&Sons, New York, 1981.

**[CASE 81]** CASEY, H., C., and PANISH, M., B., "Heterostructures Lasers, Part A: Fundamental Principles", Academic Press, New York, PP. 133, 1981.

**[XIAO 00]** XIAO JIANG He, "Two-Dimensional Monte Carlo Simulations of Ultra-Small MOSFETs", Master's Thesis, Arizona State University, Tempe, Arizona, May 2000.

**[MOGL 93]** MOGLESTUE, C., "Monte Carlo Simulation Semiconductor Devices", CHAPMAN & HALL, New York, 1993.

**[MOGL 90]** MOGLESTUE, C., "A Self-Consistent Monte Carlo Particle Modeling of Small Semiconductor Elements", Rep. Proc. Phys., Vol. 53, pp.1333, 1990.

**[REES 68]** REES, H., D., Phys. Lett., vol. a26, pp. 416, 1968.

**[FAXC 69]** FAXCETT, W., REES, H.D., Phys. Lett., vol. 11, pp. 731, 1969.

**[CEM 03]** CEM, S., "High field transport phenomena in wide band gap semiconductors", thesis for the degree of Master of Science, institute of engineering and science of bilkent university, September, 2003.

**[GALL 05]** GALLOO, J., S., "Composants nanométriques balistiques de type GaInAs/AlInAs/InP pour application Terahertz", Thèse de Docteur de l'université en électronique, Université des Sciences et Technologies de Lille, 14 décembre 2005.

**[SINK 06]** SIN KIM, D., "Monte Carlo Modeling of carrier dynamics in photoconductivity terahertz sources", Doctor of Philosophy in the School of Electrical and Computer Engineering, Georgia Institute of Technology, August 2006.

**[ZIMM 80]** ZIMMERMANN, J., "Etude par la méthode de Monte Carlo des phénomènes de transport électronique dans le Silicium de type N en régimes stationnaires et non stationnaires. Application a la simulation de composants submicroniques", Thèse de Doctorat d'état, Université de Lille 1, 1980.

**[LUND 90]** LUNDSTROM, J., "Fundamentals of carrier transport", Modular series on solid state devices, vol X, Neudeck-Pierret, Addison-Wesley Publishing, 1990.



## 4.1. Introduction:

La simulation qui vient d'être décrite nécessite une bonne connaissance des caractéristiques du matériau étudié. En particulier les caractéristiques de la bande de conduction jouent un rôle prépondérant dans l'étude des phénomènes de transport. Les niveaux des minima des vallées indiquent l'énergie à partir de laquelle un électron peut être transféré, modifiant ainsi éventuellement ses conditions de transport. De plus, dans une vallée donnée, l'évolution de l'énergie en fonction de son vecteur d'onde détermine la masse effective de l'électron qui suivant qu'il est "lourd" ou "léger", pourra se déplacer plus ou moins rapidement dans le champ électronique.

## 4.2. Etude du transport électronique:

Ce chapitre a pour but d'étudier les potentialités des matériaux l'InP, le GaP et le ternaire  $Ga_xIn_{(1-x)}P$  en fonction du coefficient stœchiométrique. Pour cela, nous utiliserons la modélisation décrite dans ce mémoire, en nous limitant au régime stationnaire. Dans un premier temps, nous présenterons toutes les données nécessaires à la mise en œuvre de la méthode de Monte-Carlo, afin de simuler les matériaux l'InP, le GaP et GaInP. Au cours de cette étude, nous serons amenés à mettre en évidence l'influence de la température et de la présence d'impuretés au sein du réseau cristallin.

### 4.2.1. Structure de la bande de conduction:

Le modèle utilisé pour la bande de conduction est analogue au modèle employé par Littlejohn. Ce modèle fait intervenir trois types de vallées ( $\Gamma$ , L, X) isotropes et non paraboliques, que nous avons représentées sur la **Figure 4.1** :

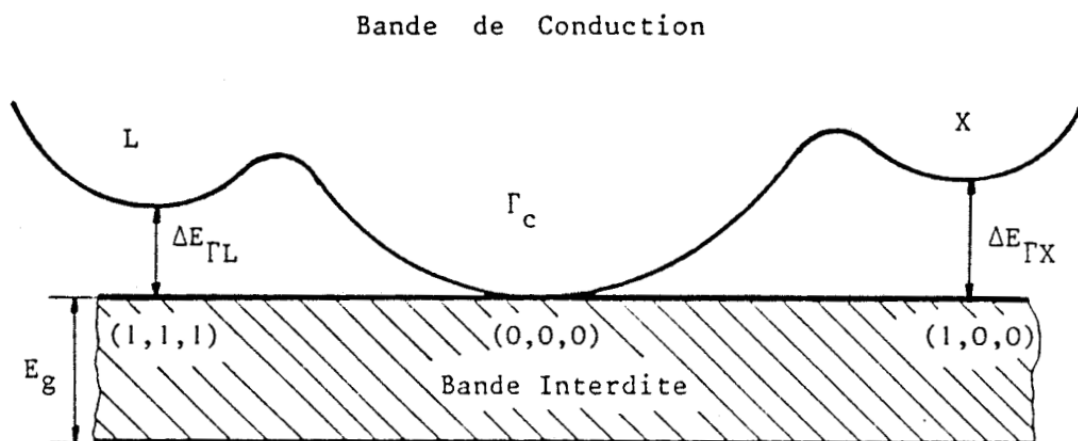
- ✚ Une vallée centrale  $\Gamma$  en (0000) au minimum absolu de la bande de conduction.

- ✚ 3 vallées latérales à symétries X correspondant à des minima relatifs dans les directions (100).
- ✚ 4 vallées latérales à symétries L correspondant à des minima relatifs dans les directions (111).

La relation reliant le module du vecteur d'onde à l'énergie cinétique relative au fond de la vallée qu'il occupe, est la suivante :

$$\varepsilon(1 + \alpha\varepsilon) = \gamma(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m^*}$$

où  $m^*$  est la masse effective au fond de la vallée et  $\alpha$  le coefficient de non parabolicité.



**Figure 4.1:** Structure de la bande de Conduction.

#### 4.2.2. Interactions intervenant dans ce modèle:

Les interactions prises en compte dans le modèle sont les suivantes :

- ✚ Optique polaire
- ✚ Acoustique
- ✚ Piézoélectrique

- ✚ Intervallées
- ✚ Optique non polaire
- ✚ Impuretés ionisées
- ✚ Interaction d'alliage (pour les matériaux composés).

La méthodologie suivie pour tenir compte de toutes ces interactions est décrite en détail dans le chapitre 2.

### 4.2.3. Principaux paramètres utilisés dans la simulation Monte Carlo:

L'ensemble des données utilisées dans notre simulation de la structure de bande de l'InP sont rassemblées dans le **Tableau 4.1**.

Paramètres	InP
Constante de maille ( $A^0$ )	5.8687
Densité ( $Kg/m^3$ )	4790
Vitesse du son (m/s)	5130
Constante diélectriques relatives :	12.40
$\epsilon_s$	9.55
$\epsilon_\infty$	
Constante piézoélectrique ( $Cb/m^2$ )	0.0131
Potentiel d'alliage (eV)	0.0
Energie de fond de vallée (eV) :	
$\epsilon_\Gamma$	1.35
$\epsilon_L$	1.96
$\epsilon_x$	2.21
Masses effectives relatives de fond de vallée :	
$m_\Gamma^*$	0.082
$m_L^*$	0.3529
$m_x^*$	0.4618
Coefficients de Non parabolicité (eV) :	
$\alpha_\Gamma$	0.624
$\alpha_L$	0.462
$\alpha_x$	0.205
Energie du phonon Polaire-optique (eV)	0.0432
Energie du phonon Non polaire-optique (eV)	0.043
Energie de phonons intervalles (eV) :	
$\Gamma, L$	0.0337
$\Gamma, X$	0.0337
$L, L$	0.0337

L, X	0.0337
X, X	0.0239
Potentils de déformation acoustique (eV) :	
$\Gamma$	7
L	12
X	11
Potentiel de déformation optique-polaire (eV/m)	$6.7 \cdot 10^{10}$
Potentiel de déformation non optique-polaire (eV/m)	$6.7 \cdot 10^{10}$
Potentils de déformation intervalles (eV/m) :	
$\Gamma$ , L	$13.7 \cdot 10^{10}$
$\Gamma$ , X	$12.5 \cdot 10^{10}$
L, L	$5.6 \cdot 10^{10}$
L, X	$8.4 \cdot 10^{10}$
X, X	$9.9 \cdot 10^{10}$
Energie de gap (eV)	1.35

**Tableau 4.1:** Paramètre de l'InP [DESS 89].

### 4.3. Transport en régime stationnaire:

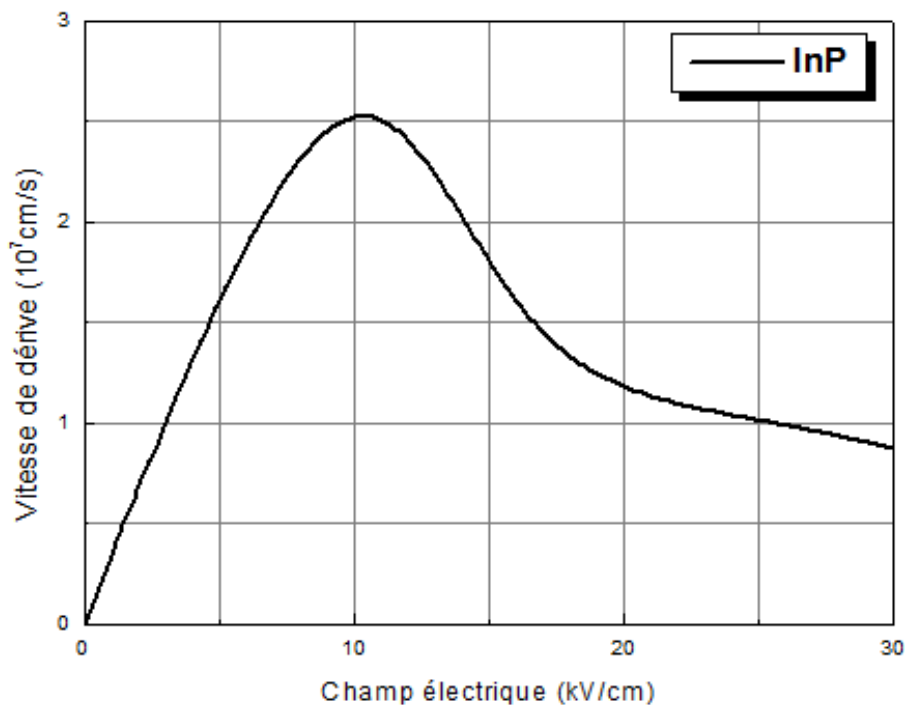
Le transport de porteurs de charge dans les semi-conducteurs se caractérise, entre autres, par leur mobilité dans le matériau et par leur occupation des bandes d'énergie à l'état stationnaire. La mobilité est spécifiée par la vitesse de dérive. Elle est obtenue par le calcul de la moyenne statistique des vitesses enregistrées après chaque libre parcours et lorsque la simulation atteint l'état stationnaire.

Menons à présent une étude approfondie des propriétés de transport de ces matériaux: l'InP, GaP,  $\text{Ga}_x\text{In}_{(1-x)}\text{P}$ . Ce travail constituera une base pour étudier des structure plus complexes, et ce jusqu'au transistor complet. Pour cela, nous utilisons une simulation Monte Carlo permettant de calculer les principales grandeurs physiques qui caractérisent le transport électronique tout en mettant en évidence les principaux effets physiques qui interviennent dans ces matériaux. Ceux-ci pourront, par la suite, constituer le canal non intentionnellement dopé d'un transistor.

### 4.3.1. Phosphure d'Indium " InP ":

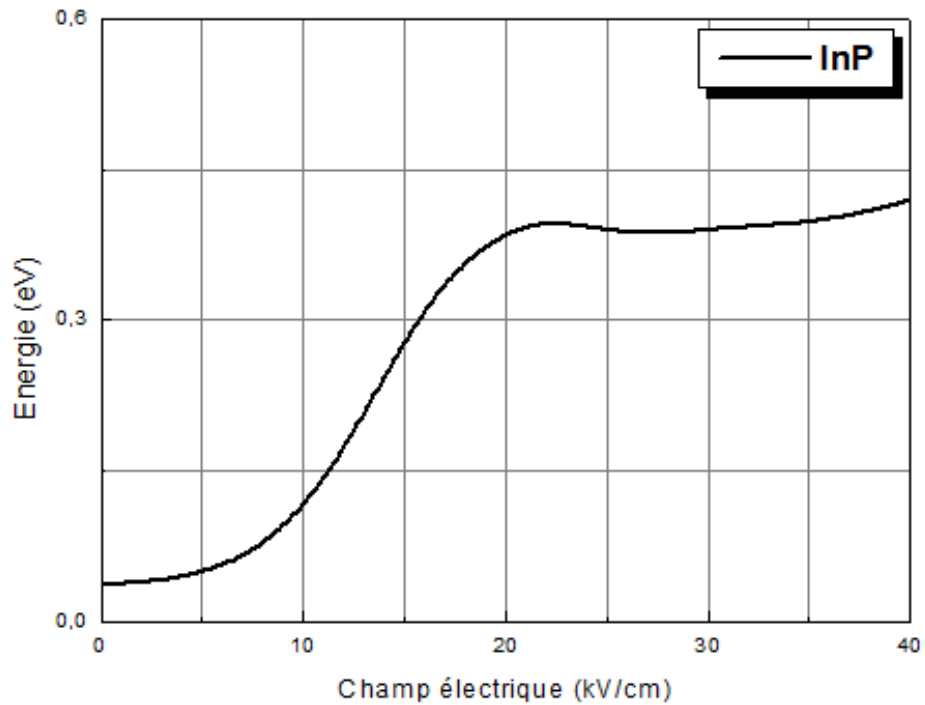
Les composants HEMT (High Electron Mobility Transistor) de la filière InP présente des potentialités très intéressantes pour le fonctionnement à très haute fréquences. En microélectronique, l'InP, déjà en usage dans les FET classiques devient un matériau assez prisé dans la fabrication des HEMT car il présente deux qualités intéressantes. Utilisé comme barrière avec un canal en GaInAs, il permet la réalisation de structure sans aluminium. Utilisé comme canal, il devient, vis à vis du GaInAs, une alternative intéressante pour les applications de puissance [GALL 05] [SAYA 10].

A l'aide de notre simulateur Monte Carlo, nous avons calculé la vitesse de dérive électronique dans l'InP faiblement dopé et nous l'avons reporté en fonction du champ électrique dans la **Figure 4.2** à température ambiante. On remarque qu'autour du champ critique 10 kV/cm, la vitesse pic est de l'ordre de  $2.5 \times 10^7 \text{ cm.s}^{-1}$  et une vitesse de saturation de  $1 \times 10^7 \text{ cm.s}^{-1}$ .

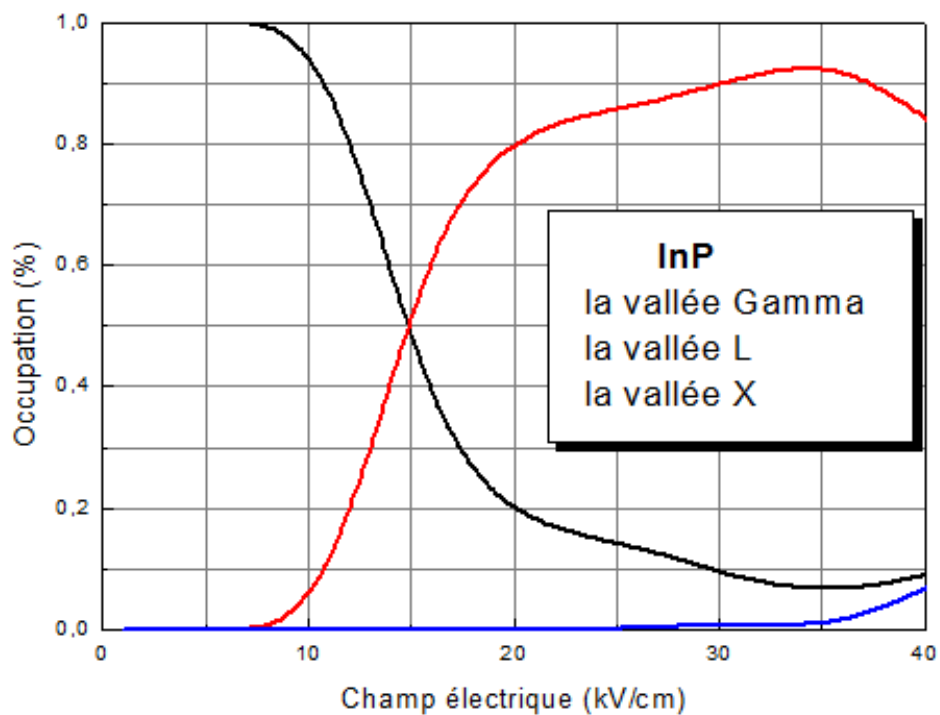


**Figure 4.2:** vitesses de dérive des électrons en fonction du champ électrique dans l'InP.

Les **Figures 4.3 et 4.4** donnent l'occupation relative des bandes et l'énergie moyenne des électrons en fonction du champ électrique dans l'InP. Nous pouvons donc remarquer trois zones d'intérêt.



**Figure 4.3:** Energie moyenne des électrons en fonction du champ électrique dans l'InP.



**Figure 4.4:** Population des vallées en fonction du champ électrique dans l'InP.

La première région, pour les faibles valeurs du champ électrique (<10 kV/cm) est celle où les électrons simulés sont encore tous dans la vallée  $\Gamma$  et ont une faible masse effective moyenne correspondant à la valeur de la masse effective de la vallée  $\Gamma$  et une mobilité élevée, ce qui implique une vitesse de dérive croissante (**Figure 4.2**).

La deuxième région (pour un champ  $\approx 10$  KV/cm) où les particules acquièrent de l'énergie, **Figure 4.3**, et favorisent le transfert aux bandes supérieures. Cela correspond aux valeurs où les électrons passent de la première à la deuxième vallée, L dans laquelle la masse effective moyenne augmente jusqu'à rejoindre la valeur de la masse effective de la vallée L (**Figure 4.4**).

La **Figure 4.4** montre, qu'à cette valeur du champ, la bande  $\Gamma$  commence à se vider tandis que la bande L commence à se remplir et les populations s'inversent vers 65 kV/cm. Les particules dans cette bande commencent à avoir une vitesse de dérive plus faible, ce qui explique le maximum de la vitesse de dérive dans la **Figure 4.2**.

Enfin, la troisième zone correspond aux champs électriques élevés pour lesquels presque tous les électrons sont désormais transférés dans la vallée X avec une valeur de masse effective moyenne correspondant à celle de la vallée X. Pour un champ très élevé, la majorité des particules reste dans la bande L et dans la bande X pour donner à la vitesse une valeur constante.

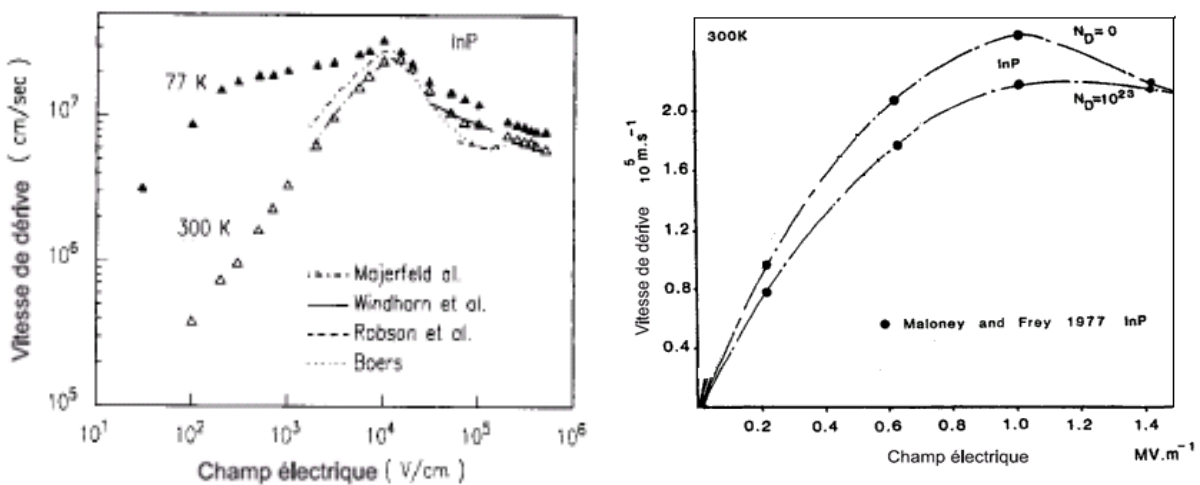
En peut remarquer dans la **Figure 4.3** que l'énergie moyenne des électrons en fonction du champ électrique peut être décomposée en deux parties.

- ✚ La première d'entre elles correspond à des valeurs très basses du champ électrique, pour lesquelles l'énergie moyenne reste quasiment constante. L'échange énergétique entre le gaz électronique et le réseau est alors équilibré et la valeur de l'énergie moyenne est celle de l'équilibre thermodynamique  $\varepsilon_0$  qui vérifie la relation  $\varepsilon_0 = \frac{3}{2} K_B \cdot T$ . À la température ambiante 300 K,  $\varepsilon_0$  vaut 40 meV.

- ✚ Dans la deuxième partie de la courbe, elle correspond aux champs électriques plus élevés, nous pouvons observer une augmentation de l'énergie moyenne avec le champ électrique.

En effet, lorsque celui-ci devient suffisamment important, les collisions ne suffisent plus à dissiper l'énergie qu'il apporte aux électrons. Leur énergie augmente alors, en même temps que le nombre de collisions inélastiques, jusqu'à ce qu'un nouvel équilibre soit obtenu. La relation précédente n'est plus valable et doit être remplacée par la relation  $\bar{\varepsilon} = \frac{3}{2} K_B \cdot T_e$ . Du fait de l'augmentation de l'énergie moyenne, cette température devient supérieure à la température T du réseau cristallin. Tout se passe alors comme si les électrons s'échauffaient de plus en plus au fur à mesure que le champ électrique augmente. Nous parlons alors de régime de porteurs chauds.

Nous avons porté sur la **Figure 4.5** l'ensemble des vitesses de dérive des électrons dans l'InP en fonction du champ électrique à 300 K. Les résultats sont comparés avec des travaux expérimentaux (Majerfeld [MAJE 74], Windhorn [WIND 83], Robson [ROBS 75], Boers [BOER 71]) et théoriques (Maloney et Frey 1977 [MALO 77]) obtenues par Monte Carlo. Nous constatons que les résultats donnés par la **Figure 4.5** sont en bon accord avec nos résultats obtenus par notre simulateur Monte Carlo.

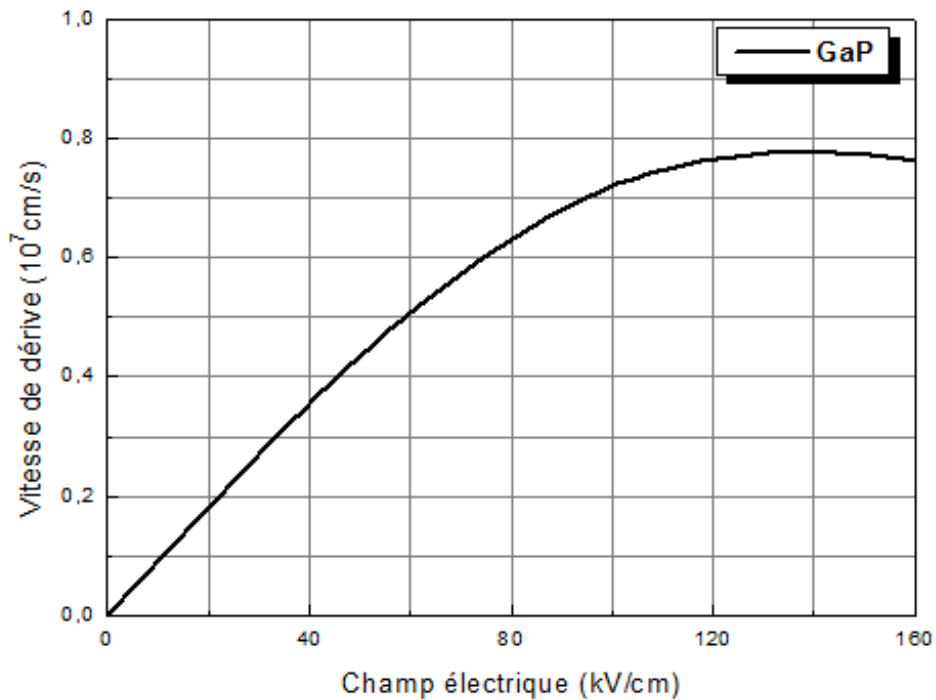


**Figure 4.5:** Vitesse de dérive des électrons dans l'InP en fonction du champ électrique à 300K des travaux expérimentaux [FISC 91] et théoriques [MALO 77].



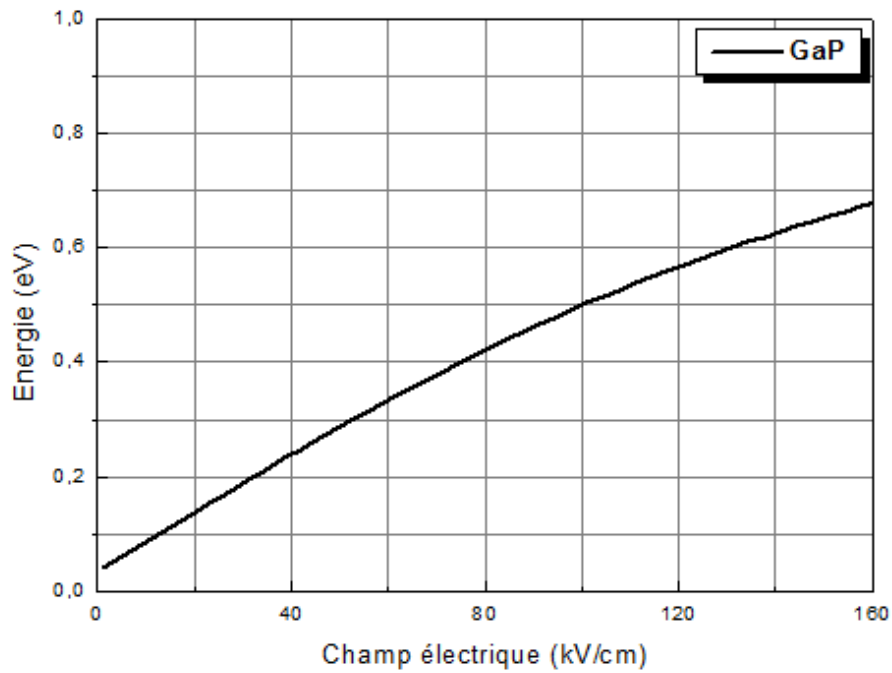
### 4.3.2. Phosphure de Gallium "GaP":

Les **Figures 4.6, 4.7 et 4.8** montrent la vitesse de dérive, énergie et la population des vallées en fonction du champ électrique dans le GaP faiblement dopé, obtenue avec notre simulateur Monte Carlo à 300 K.

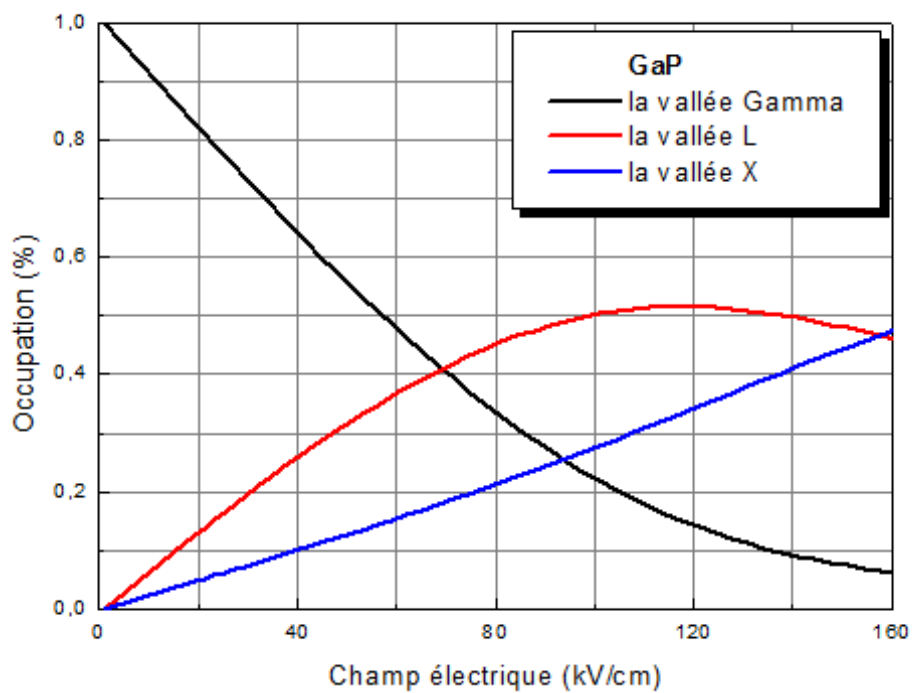


**Figure 4.6:** vitesses de dérive des électrons en fonction du champ électrique dans le GaP.

Le GaP possède une bande à gap indirect qui présente le minimum de bande de conduction suivant la direction X ou L. Le comportement du GaP est tout à fait différent de l'InP, puisqu'on n'observe pas de vitesse pic, le transport ayant lieu uniquement en vallées X quel que soit le champ électrique (**Figure 4.6**). Au champ électrique élevé, l'émission des phonons optique intervallée domine provoquant la saturation de la vitesse de dérive à environ  $0,8 \times 10^7 \text{ cm.s}^{-1}$ .

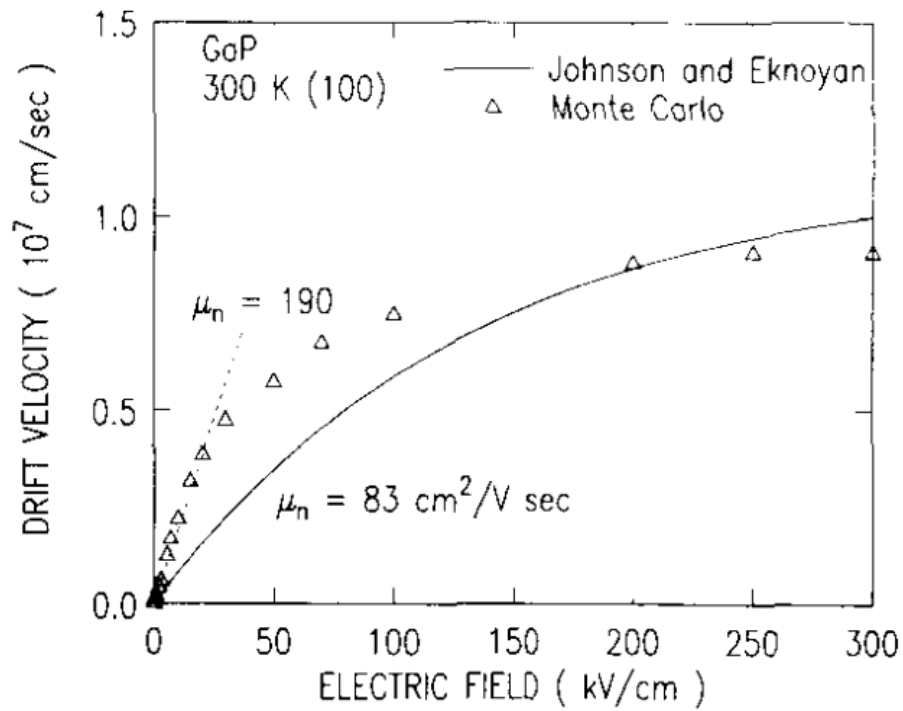


**Figure 4.7:** Energie moyenne des électrons en fonction du champ électrique dans le GaP.



**Figure 4.8:** Population des vallées en fonction du champ électrique dans le GaP.

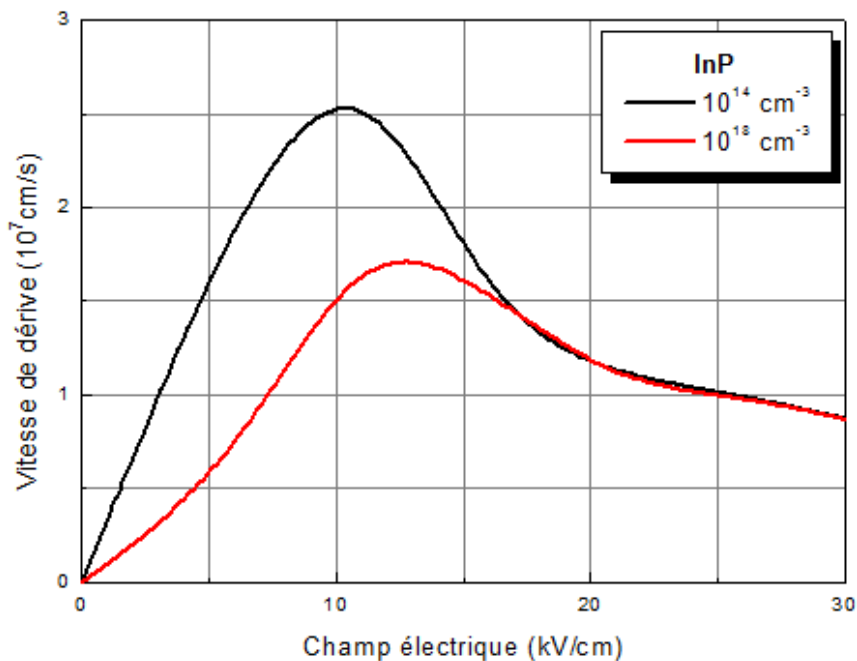
Nous constatons que nos résultats obtenus par notre simulateur Monte Carlo sont en bon accord avec les simulations de Monte Carlo et les résultats expérimentaux [FISC 91].



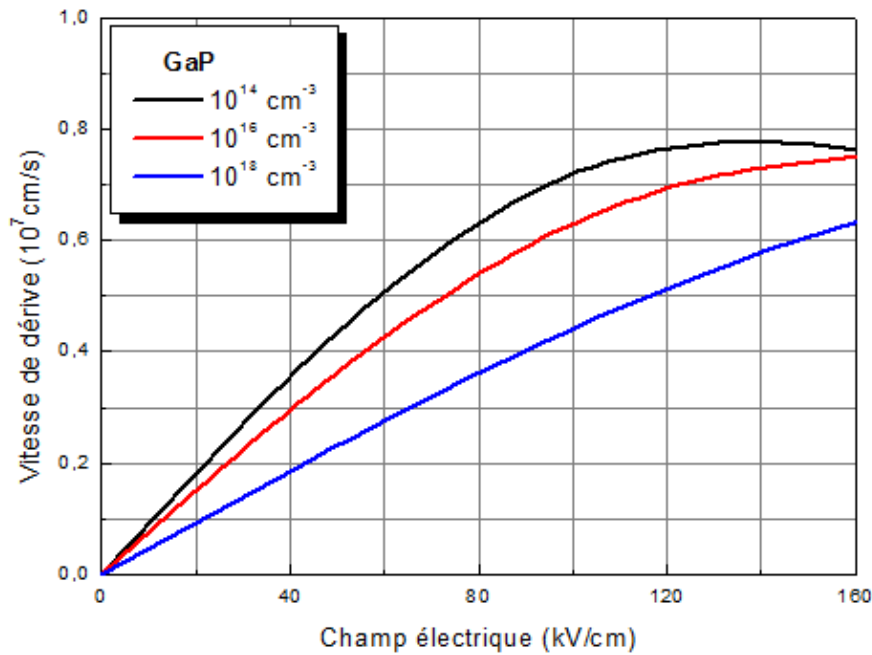
**Figure 4.9:** Vitesse de dérive des électrons dans le GaP en fonction du champ électrique à 300K des travaux expérimentaux et des d simulations de Monte Carlo [FISC 91].

#### 4.4. Influence du dopage:

L'influence du dopage sur les caractéristiques de transport des matériaux est présentée sur la **Figure 4.10** pour l'InP et la **Figure 4.11** pour le GaP. Elle se manifeste essentiellement pour les champs électriques faibles et autour du champ de seuil.



**Figure 4.10:** Vitesses de dérive des électrons dans l'InP pour divers dopage.



**Figure 4.11:** Vitesses de dérive des électrons dans le GaP pour divers dopage.

L'élévation du dopage jusqu'à  $10^{18} \text{ cm}^{-3}$  diminue le pic de vitesse de  $3.5 \times 10^7 \text{ cm.s}^{-1}$  à  $1.72 \times 10^7 \text{ cm.s}^{-1}$  dans le cas de l'InP et de  $0.76 \times 10^7 \text{ cm.s}^{-1}$  à  $0.63 \times 10^7 \text{ cm.s}^{-1}$  dans le cas le GaP pour un champs électrique égal 160 kV/cm.

L'affaiblissement des caractéristiques de vitesse en régime faible champ (**Figures 4.10** et **4.11**) se traduit par une réduction de la mobilité des porteurs lorsque le dopage augmente. Nous constatons également une diminution importante de la vitesse pic qui s'accompagne d'un accroissement du champ de seuil, que nous retrouvons sur les caractéristiques vitesse-champ électrique de la **Figure 4.10**. Cet effet s'explique par le passage plus tardif des électrons en vallées latérales, du fait du nombre grandissant d'interactions sur impuretés ionisées lorsque le dopage augmente. Pour les champs électriques élevés, l'influence du dopage sur la vitesse de dérive des porteurs est négligeable. La combinaison de ces deux effets entraîne une réduction importante de l'effet de mobilité différentielle négative.

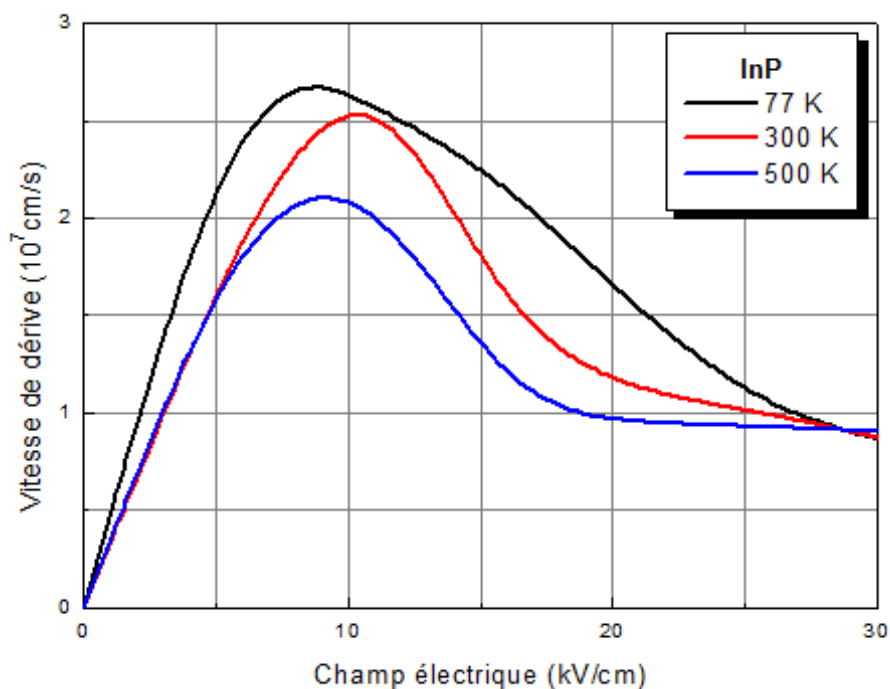
En champ fort, l'énergie moyenne des porteurs tend à se saturer vers une valeur correspondant approximativement à l'espacement énergétique entre vallée centrale et

vallées satellites, et ce quel que soit le dopage. Nous constatons aussi qu'en régime de forts champs, une grande majorité de porteurs se trouve en vallée haute, donc à forte énergie.

#### 4.5. Influence de la température:

Il est bien connu que la température joue un rôle décisif en influençant sur les caractéristiques de la vitesse de dérive en fonction du champ électrique. Nous présentons sur les **Figures 4.12 et 4.13** les caractéristiques vitesse-champ électrique pour les matériaux l'InP et le GaP à dopage nul et pour des températures de 77K, 300K et 500K.

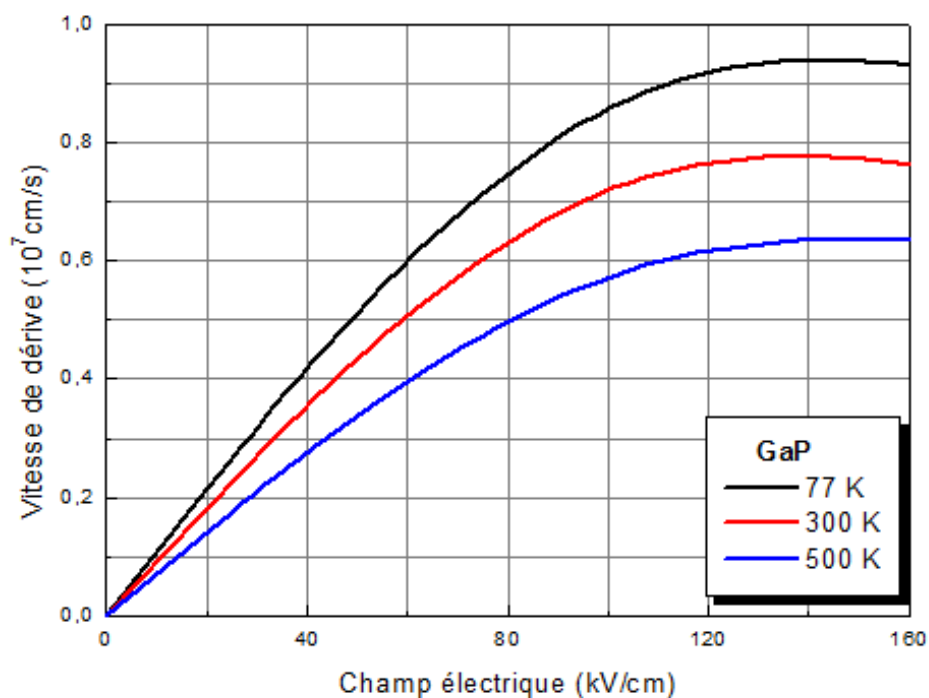
Nous y observons des vitesses plus élevées à la température de l'azote liquide qu'à température ambiante. Cet effet, particulièrement marqué à faible champ, contribue à augmenter la mobilité de façon très sensible dans les matériaux. Notons également l'accroissement de la vitesse pic et le décalage du champ de seuil vers une valeur plus faible.



**Figure 4.12:** Vitesses de dérive des électrons dans l'InP pour divers température.

La forme des caractéristiques de vitesse en fonction du champ change sensiblement à mesure que la température augmente. En particulier, la vitesse de dérive maximale et la vitesse de saturation diminuent sensiblement avec la température. Il est intéressant de noter que la mobilité à faible champ augmente pendant que la température diminue, tandis que, la vitesse de saturation montre une dépendance moins prononcée de la température. Ceci peut être expliqué que pour les faibles champs, la dispersion est dominée par les phonons acoustiques, des impuretés ionisées, et l'absorption des phonons optiques polaires qui sont faibles pour des basses températures améliorant ainsi la mobilité. Pour des températures allant jusqu'à 300 K, la bosse dans les caractéristiques de la vitesse de dérive est liée à la présence de la dispersion des impuretés.

Aux températures élevées, la bosse disparaît, due à la dominance de la dispersion des phonons optiques polaires avec une réduction dans la dispersion des impuretés. Le transport à champ élevé, est dominé par les dispersions des phonons optiques polaires et intervallées qui ont une faible dépendance de la température du réseau.

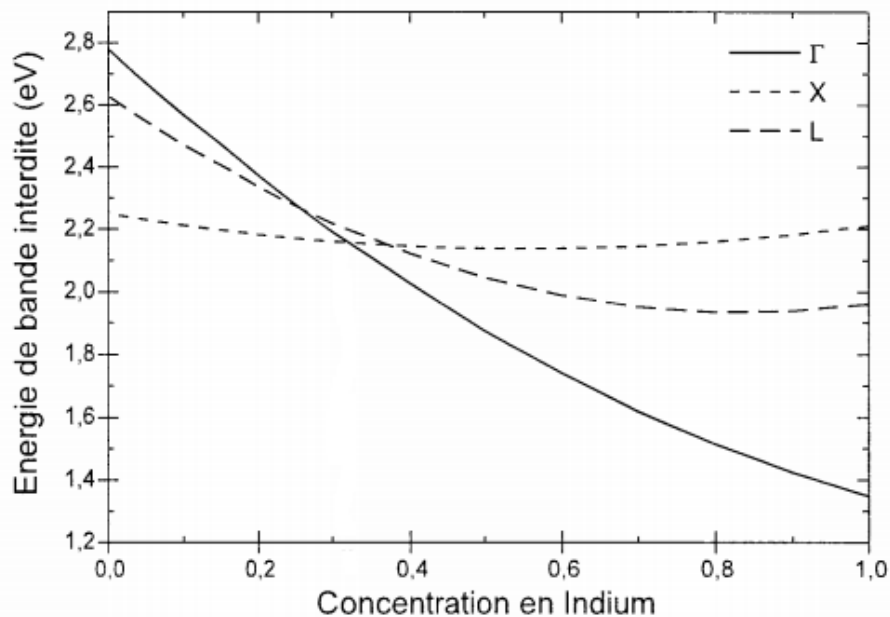


**Figure 4.13:** Vitesses de dérive des électrons dans le GaP pour divers température.

L'élévation de température diminue le pic de vitesse de  $2.76 \times 10^7 \text{ cm.s}^{-1}$  pour 77 K jusqu'à  $2.10 \times 10^7 \text{ cm.s}^{-1}$  pour 500 K dans le cas de l'InP et de  $0.9 \times 10^7 \text{ cm.s}^{-1}$  pour 77 K jusqu'à  $0.6 \times 10^7 \text{ cm.s}^{-1}$ , pour 500 K dans le cas du GaP.

#### 4.6. Le ternaire Gallium Indium Phosphide " $\text{Ga}_x\text{In}_{(1-x)}\text{P}$ " :

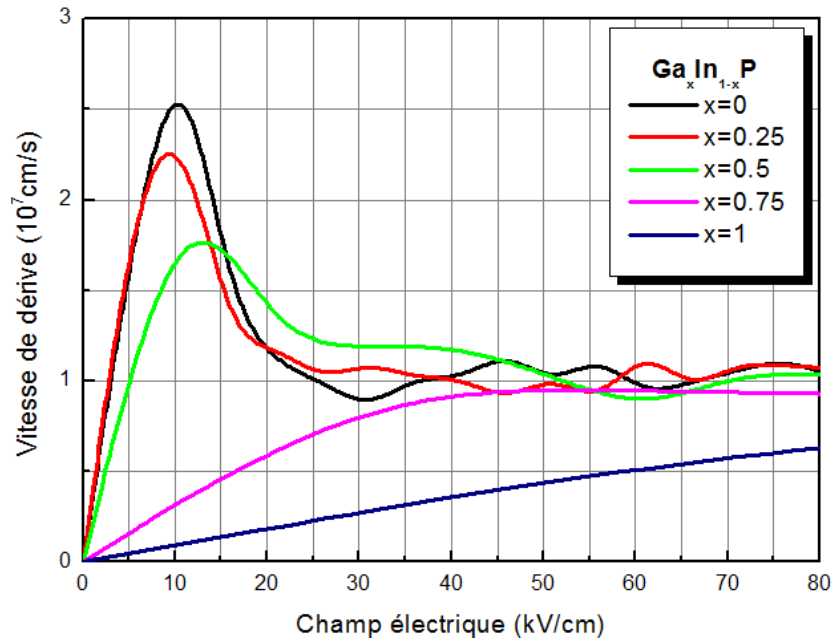
Dès les années 1970, les alliages ternaires GaInP ont fait l'objet d'une attention toute particulière car des transitions directes de photons d'énergie aussi importante que 2,14 eV y étaient possibles. Les potentialités de ces alliages pour la réalisation de sources électroluminescentes dans le domaine du visible ont donc motivé les travaux sur cette famille [SCHU 98]. La **Figure 4.14** représente l'évolution des gaps  $\Gamma$ , X et L avec la composition.



**Figure 4.14:** Evolution des gaps  $\Gamma$ , X et L de  $\text{Ga}_{1-x}\text{In}_x\text{P}$  à température ambiante [SCHU 98].

##### 4.6.1. L'évolution de la vitesse électronique :

La **Figure 4.15** représente l'évolution de la vitesse électronique en fonction du champ électrique du matériau massifs  $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{P}$  et non intentionnellement dopés.



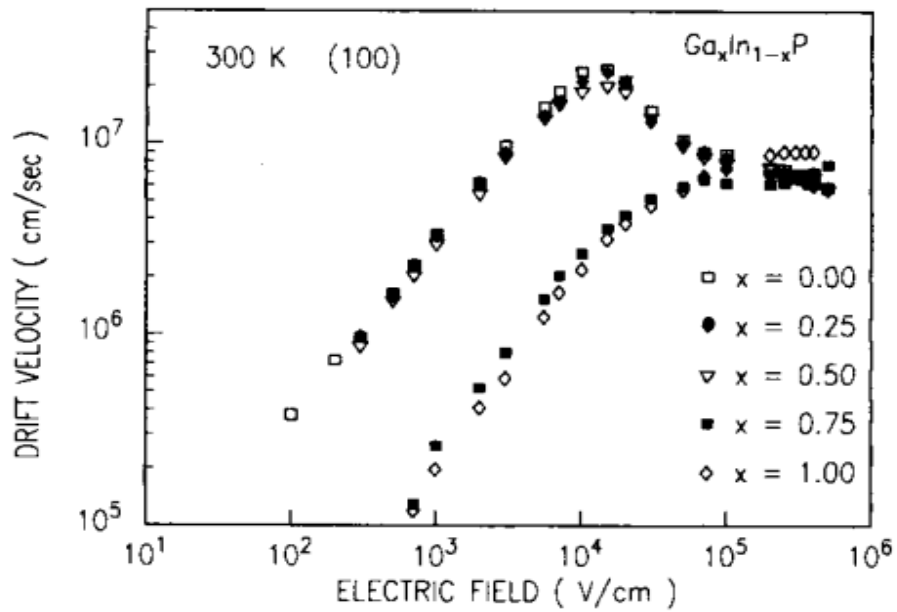
**Figure 4.15** : Evolution de la vitesse électronique en fonction du champ électrique du  $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{P}$ .

Sur la **Figure 4.15**, nous comparons les vitesses de dérive à température ambiante en fonction du champ électrique du  $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{P}$ . Avec une vitesse pic à  $2.2 \times 10^7 \text{ cm.s}^{-1}$  vers un champ de 10 kV/cm, le  $\text{Ga}_{0.25}\text{In}_{0.75}\text{P}$  se montre supérieur à  $\text{Ga}_{0.5}\text{In}_{0.5}\text{P}$  à température ambiante. Le troisième  $\text{Ga}_{0.5}\text{In}_{0.5}\text{P}$  ne dispose que d'une vitesse pic de  $1.7 \times 10^7 \text{ cm.s}^{-1}$  à 13 kV/cm et quant au quatrième  $\text{Ga}_{0.75}\text{In}_{0.25}\text{P}$  est tout à fait différent, puisqu'on n'observe pas de vitesse pic. Dans  $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{P}$ , avec l'augmentation de la composition du Gallium, la mobilité et la vitesse électroniques à bas champ diminuent puisqu'elles atteignent  $0.9 \times 10^7 \text{ cm.s}^{-1}$  pour une composition de 75% d'indium et  $0.8 \times 10^7 \text{ cm.s}^{-1}$  pour le GaP. La différence observée sur la valeur de la vitesse pic provient principalement du fait que dans le  $\text{Ga}_{0.75}\text{In}_{0.25}\text{P}$ , le transfert en vallée haute d'un électron de la vallée centrale nécessite un peu moins d'énergie que dans le  $\text{Ga}_{0.5}\text{In}_{0.5}\text{P}$  et la même chose pour le  $\text{Ga}_{0.25}\text{In}_{0.75}\text{P}$  et l'InP.

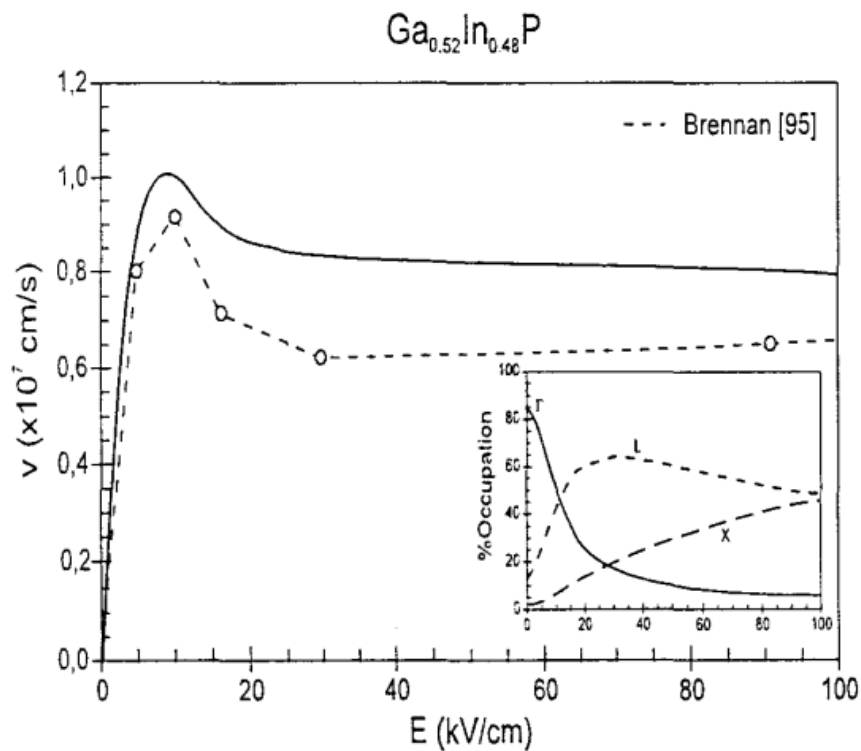
Peu de données expérimentales sont disponibles sur les propriétés de transport des matériaux phosphorés, nous nous baserons donc sur des simulations par la méthode de Monte Carlo réalisées Massimo V. Fischetti [FISC 91] (**Figure 4.16**), ainsi que sur les travaux de Brennan et al. [BREN 95] (**Figure 4.17**). Les **Figures 4.16** et **4.17** représentent l'évolution



de la vitesse électronique en fonction du champ électrique des matériaux massifs GaInP non intentionnellement dopés.



**Figure 4.16:** Vitesse de dérive des électrons dans le GaInP en fonction du champ électrique à 300K des simulations par la méthode de Monte Carlo réalisées Massimo V. Fischetti [FISC 91].



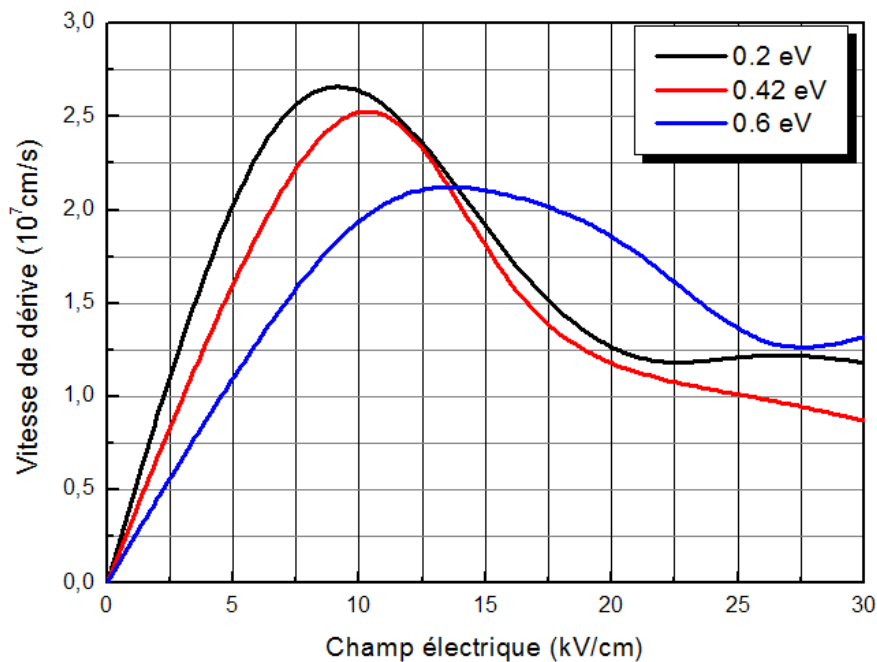
**Figure 4.17:** Vitesse de dérive des électrons dans le GaInP en fonction du champ électrique à 300K des simulations par la méthode de Monte Carlo réalisées Brennan et al. [BREN 95].

Comme nous pouvons le constater sur la **Figure 4.16** d'après Brennan et al. [BREN 95], la vitesse pour le  $\text{Ga}_{0.52}\text{In}_{0.48}\text{P}$  atteint une vitesse pic de  $1 \times 10^7$  cm/s pour un champ de seuil de 10 kV/cm.

Nous constatons que nos résultats obtenus par notre simulateur Monte Carlo sont en bon accord avec les résultats de Brennan et al. [BREN 95] et Massimo V. Fischetti [FISC 91].

#### 4.6.2. Influence du potentiel d'alliage :

Les vitesses de dérive en fonction du champ électrique pour différents potentiels d'alliages ont été tracées sur la **Figure 4.18**.



**Figure 4.18:** Vitesses de dérive des électrons dans  $\text{Ga}_{0.5}\text{In}_{0.5}\text{P}$  pour différents potentiels d'alliages.

On remarque une réduction de la vitesse de dérive qui s'accompagne d'un accroissement du champ de seuil quand le potentiel d'alliage augmente. L'élévation du potentiel jusqu'à 0.6 eV abaisse le pic de vitesse de  $2.6 \times 10^7$  cm.s<sup>-1</sup> avec un champ de seuil de 9.1 kV/cm à  $2.1 \times 10^7$  cm.s<sup>-1</sup> avec un champ de seuil de 13.6 kV/cm.

Une augmentation du potentiel de l'alliage augmente le taux de diffusion totale, diminue le temps de vol libre de l'électron et nécessite un champ plus large pour atteindre un niveau donné de la vallée L et X. Comme le temps de vol libre et l'énergie acquise dans ce temps diminue, alors il faut un champ plus élevé pour que la diffusion aux vallées L et X deviennent possible.

## Références Bibliographiques:

**[DESS 98]** DESSENNE, F., "Etude théorique et optimisation de transistors à effet de champ de la filière InP et de la filière GaN", Thèse de Doctorat, USTL Lille, 13 Février 1998.

**[GALL 05]** GALLOO, J., S., "Composants nanométriques balistiques de type GaInAs/AlInAs/InP pour applications Tétrahertz", thèse de Docteur de l'université, Université des Sciences et Techniques de Lille, 2005.

**[SAYA 10]** SAYAH, C., " Etudes des Effets du Champ Electromagnétique sur les Propriétés des Composés III-V par la Méthode de Monte Carlo et l'Equation de Poisson Couplée ", Thèse de de Doctorat en Electronique. Université Abou-Bekr Belkaid, Faculté des Sciences de l'Ingénieur, 2010.

**[MAJE 74]** MAJERFELD, A., POTTER, K., E. and ROBSON, P., N., "Subthreshold velocity field characteristics for bulk and epitaxial InP", J. Appl. Phys., vol. 45, n° 9, September 1974, pp. 3861-3682.

**[WIND 83]** WINDHORN, T., H., COOK, L., W., HAASE, M., Q. and STILLMAN, G., E., "Electron transport in InP at high electric fields", Appl. Phys. Lett., vol. 42, n° 8, 15th April 1983, pp. 725-727.

**[ROBS 75]** ROBSON, P., N., POTTER, K., E., and MAJERFELD, A., "Capacitive probe measurements of dipole domains in InP", IEEE Trans. Electron Devices, vol. ED-22, pp. 569-575, 1975.

**[BOER 71]** BOERS, P., M., "Measurements on dipole domains in indium phosphide", Phys. Lett., vol. 34A, pp. 329-330, 1971.

**[MALO 77]** MALONEY, T., J. and FREY, J., "Transient and steady-state electron transport properties of GaAs and InP", J. Appl. Phys., vol. 48, pp. 781-787, 1977.

**[FISC 91]** FISCHETTI, M., V., "Monte Carlo Simulation of Transport in Technologically Significant Semiconductors of the Diamond and Zinc-Blende Structures-Part I: Homogeneous Transport", IEEE Trans. Electron Devices, vol. 38, no. 3, March 1991.

**[SCHU 98]** Olivier SCHULER, "EPITAXIE PAR JETS MOLECULAIRES A SOURCES GAZEUSES DES MATERIAUX AlGaInP SUR SUBSTRAT GaAs POUR APPLICATIONS HYPERFREQUENCES", Thèse de Doctorat, USTL Lille, le 17 novembre 1998.

## Conclusion Générale

Au cours de ce travail, Nous avons donc étudié de manière quantitative les bonnes propriétés de transport des matériaux III-V en particulier l'InP, GaP et  $Ga_xIn_{1-x}P$ . Nous avons essentiellement utilisé la méthode de Monte Carlo, qui permet de décrire le fonctionnement de systèmes complexes à partir des lois élémentaires régissant le mouvement des électrons. En effet, elle nous permet de tenir compte de tous les effets se produisant dans un matériau, de calculer les propriétés statiques et de les interpréter à la lumière des phénomènes physiques fondamentaux.

Dans la première partie de ce chapitre, la simulation numérique a été présentée comme un outil désormais incontournable pour étudier le transport électronique dans les matériaux semi-conducteurs. La simulation numérique est un puissant outil d'analyse qui permet l'étude détaillée d'objets et/ou de phénomènes physiques. Elle permet également d'accroître la capacité d'innovation en ne se limitant pas à la simulation du réel. Ceci implique que les modèles, indispensables à toute simulation, doivent être en phase voire même en avance de phase par rapport à la technologie afin d'aider à la compréhension de phénomènes dans les dispositifs existants ou à l'optimisation des générations technologiques, voire même afin d'évaluer de futures architectures.

Un certain nombre d'informations sur ces matériaux ne sont pas encore présentés dans la littérature. Dans le but d'approfondir la connaissance de ces matériaux, l'un des points importants de cette étude a consisté en l'extraction des paramètres de transport en régime stationnaire à l'aide de notre simulateur particulière de Monte Carlo. Les valeurs stationnaires de la vitesse de dérive, de l'énergie, de la population ont été calculées en fonction du champ électrique. Donc ces résultats ne sont pas toujours exacts et restent purement théorique car ils reposent sur des lois de probabilités, alors il faut toujours les avec des résultats existant dans la littérature.

Les travaux de recherche sur ce matériau n'est pas encore terminées, le domaine d'application reste très vaste par exemple le domaine de l'optoélectronique. En attendant

des travaux expérimentaux sur cet alliage, nous espérons dans un futur proche faire des applications par cette méthode pour l'étude caractéristiques et les propriétés électronique dans les dispositifs microélectroniques et nanostructures à base du  $Ga_xIn_{1-x}P$ .

Néanmoins, il est évident que les méthodologies mises au point dans ce travail peuvent ouvrir d'autres perspectives d'application avec la généralisation de cette méthode à d'autres matériaux de structure de bande comparable. Elle permet de traiter des composés binaires de type III-V et plus généralement des composés quaternaires.

Toute l'étude qui peut être faite sur  $Ga_xIn_{1-x}P$  est alors transposable à n'importe lequel de ces composés. Il sera alors intéressant de faire des études comparatives des propriétés présentées par ces matériaux afin de choisir celui qui sera le plus approprié à l'application envisagée au niveau du composant, avant toute réalisation technologique.