

RÉPUBLIQUE ALGÉRIENNE DÉMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTÈRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPÉRIEUR ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE
Université d'Ain Témouchent BELHADJ BOUCHAIB

N° d'ordre : ... /2025

Faculté des Sciences et Technologie
Département d'électronique et Télécommunication



MÉMOIRE DE FIN D'ÉTUDES

Présentée pour l'obtention du diplôme de **MASTER**

Filière : **Electronique**

spécialité : **Instrumentation**

par : **MANKOURI Fatna**

Sujet :

**Simulation Monte Carlo d'un transistor MESFET à base
de ZnO**

Soutenue publiquement, le 30/06/2025, devant le jury composé de :

Mr. AMZIANE Djamel	MAA	à l'université de Ain Temouchent	Président
Dr. BERRABAH Baghdadi	MAB	à l'université de Ain Temouchent	Encadrant
Dr. ZEBENTOUT Abdel Djawad	MCA	à l'université de Ain Temouchent	Examineur

Remerciements

Ce travail a été réalisé au sein de l'université de Ain temouchent BELHADJ Bouchaib sous la direction du **Dr. BERRABAH Baghdadi**. Qu'il trouve ici le témoignage de mon grand respect et l'expression de ma profonde reconnaissance, l'expression de mes respectueux remerciements pour ses encouragements et sa patience pour que ce travail soit concrétisé.

Je tiens également de manifester ma profonde gratitude et mes remerciements les plus distingués à **Dr. ZEBENTOUT Abdel Djawad**, et **Mr. AMZIANE Djamal** les membres du jury, qui ont accepté de lire et d'évaluer ce travail.

Enfin n grand merci à ma famille et mes proches, pour leur soutien moral, leur patience et leurs conseils considérable.

Résumé

Ce travail a pour but de simuler numériquement l'influence des tension élevée et température élevées sur les caractéristiques courant-tension I-V d'un transistor MESFET à base de ZnO en utilisant le simulateur Monte Carlo. Les calculs sur le ZnO massif ont été effectués afin de fournir des informations sur la vitesse de dérive des électrons en fonction du champ électrique. Les résultats correspondant au GaAs et GaN ont été également présentés, mais principalement pour la comparaison.

Nos résultats de simulation montrent que, grâce à la forte densité de courant de drain, le MESFET-ZnO peut s'attendre à des performances supérieures en termes de puissance et des tensions élevés. De toute évidence, le ZnO à large bande interdite présente des concentrations intrinsèques en porteurs bien inférieures à celles du GaAs à haute température. Cela implique que les dispositifs destinés aux températures plus élevées doivent être fabriqués avec. En revanche, les résultats ont montré que pour des températures supérieures à 300 K, une réduction du courant de drain a été observée et, par conséquent, une puissance de sortie réduite. Ces résultats présentent une concordance bien plus étroite avec les données de la littérature disponibles.

Mots Clé : ZnO, MESFET, Monte Carlo, Caractéristique I-V.

Abstract

This work aims to numerically simulate the influence of high voltage and high temperature on the I-V current-voltage characteristics of a ZnO-based MESFET transistor using a Monte Carlo simulator.

Calculations on bulk ZnO were performed to provide information on the electron drift velocity as a function of the electric field. Results for GaAs and GaN were also presented, but mainly for comparison.

Our simulation results show that, thanks to the high drain current density, the ZnO MESFET can expect superior performance in terms of power and high voltages. Clearly, wide-bandgap ZnO exhibits much lower intrinsic carrier concentrations than GaAs at high temperatures. This implies that devices intended for higher temperatures should be fabricated with it. However, the results showed that for temperatures above 300 K, a reduction in drain current was observed and, consequently, a reduced output power. These results show much closer agreement with available literature data.

Keywords : ZnO, MESFET, Monte Carlo, I-V characteristics.

Table des matières

Résumé	iii
Abstract	iv
Introduction générale	1
1 Transistor à effet de champ MESFET à base de ZnO	3
1.1 Introduction	3
1.2 Propriétés du ZnO	4
1.2.1 Avantages du ZnO	4
1.2.2 Propriétés structurales et cristallographiques	5
1.2.3 Structures de bandes	6
1.2.4 Modes de vibration du ZnO	7
1.2.5 Propriété optique du ZnO	9
1.2.6 Conductivité thermique	10
1.2.7 Mobilité électronique	10
1.2.8 Vitesse électronique	11
1.3 L'état de l'art du transistor MESFET	13
1.3.1 Généralité sur le transistor	13
1.3.2 Principes de fonctionnement du MESFET	15
1.3.3 Région d'avalanche	17
1.3.4 Barrière de potentiel et zone de charge d'espace	17
1.3.5 Les phénomènes de pièges	18
1.3.6 L'effet thermique	18

2	Simulation de Monte Carlo	19
2.1	Approximation semi-classique	20
2.1.1	Mécanismes de diffusion	21
2.1.2	La structure de bande	22
2.1.3	L'approximation du modèle à trois vallées :	22
2.1.4	Notion de la masse effective	23
2.1.5	Approximation parabolique	23
2.1.6	Approximation non-parabolique	24
2.2	Algorithme de Monte-Carlo	24
2.2.1	Génération du vol libre	25
2.2.2	Calcul de processus de diffusion	27
2.2.3	État final après diffusion	28
2.2.4	Calcul de la vitesse	29
2.3	Ensemble Monte Carlo auto-cohérente	31
2.3.1	Répartition des charges dans le dispositif	31
2.3.2	Limites de taille de maillage et de pas de temps	32
2.3.3	Solution de l'équation de Poisson	32
2.3.4	Calcul de courant	33
3	Résultats et Discussions	35
3.1	Etude comparative entre ZnO et GaN	35
3.2	Effet de température	37
3.3	Simulation Monte Carlo du MESFET-ZnO	38
3.4	Caractéristique Courant-Tension I-V	40
3.5	L'effet thermique sur la caractéristique I-V	42
3.6	Conclusion	43
	Conclusion et perspectives	44
	Bibliographie	46

Table des figures

1.1	Oxyde de Zinc (ZnO) massif sous forme naturelle (a,b) et provenant de synthèse hydrothermal (c)	3
1.2	Energie de gap pour différents semiconducteurs	5
1.3	Strucutre cristallographique du ZnO	5
1.4	Strucutre de bande du ZnO Wurtzite	6
1.5	Courbe de dispersion des phonons de ZnO	7
1.6	Dispersion des indices de réfraction n_o (a), n_e (b).	9
1.7	Conductivité thermique en fonction du ZnO	10
1.8	Mobilité électronique en fonction de température du ZnO	11
1.9	Vitesse électronique en fonction du champ électrique	12
1.10	Strucutre du MESFET	14
1.11	Caractéristique Courant-Tension I-V d'un MESFET-ZnO	15
1.12	Principe de fonctionnement du MESFET	16
2.1	Modèle de simulation	20
2.2	Modèle de trois vallées	23
2.3	Processus du vol libre	25
2.4	Organigramme de Monte Carlo	30
2.5	Méthode Cloud in cell	32
2.6	Organigramme de Monte Carlo auto-cohérente	34
3.1	Vitesse des électrons en fonction du champ électrique kV/cm	36
3.2	Effet de température sur la caractéristique Vitesse-Champ	38
3.3	Structure du transistor MESFET sans plarisation	39

3.4	Structure du transistor MESFET avec ($V_g=-1$ $V_{ds}=80$)	40
3.5	Caractéristique Courant-Tension I-V ZnO	41
3.6	Caractéristique Courant-Tension I-V GaAs	41
3.7	Caractéristique Courant-Tension I-V du MSFET ZnO sous l'influence de température	42

Introduction générale

Les semi-conducteurs à large bande interdite, tels que le 6H-SiC (3,0 eV) et le GaN (3,5 eV), ont beaucoup attiré l'attention ces dix dernières années en raison du besoin croissant de dispositifs électroniques haute puissance et haute fréquence.

En revanche, un autre semi-conducteur à large bande interdite, le ZnO (3,4 eV), n'a pas reçu la même attention. En effet, le ZnO a trouvé de nombreuses applications dans des domaines aussi variés qu'il est désormais proposé pour les mêmes applications que celles mentionnées pour le GaN et le SiC. En fait, le ZnO présente plusieurs avantages fondamentaux par rapport à son principal concurrent, le GaN.

Le transistor à effet de champ métal-semiconducteur (MESFET) est l'un des composants les plus prisés dans la construction de circuits intégrés à grande échelle, en raison de sa simplicité de construction, de l'absence relative de problèmes de diffusion de dopants et des densités de remplissage élevées qui en résultent. Si le semi-conducteur privilégié reste le silicium, l'industrie se prépare désormais à la production de semi-conducteurs à large bande interdite, comme le ZnO, qui offre une mobilité électronique élevée et, par conséquent, des fréquences de fonctionnement plus élevées. Leur bande interdite directe facilite en outre l'intégration aux dispositifs optiques. C'est pourquoi les MESFET en ZnO ont fait l'objet d'une attention particulière pour comprendre leurs principes de fonctionnement.

Des méthodes théoriques comme la simulation de Monte-Carlo ont été largement utilisées dans ce domaine, car elles permettent une solution quasi exacte de l'équation de transport de Boltzmann et ne sont sujettes qu'à des erreurs statistiques, contrairement aux modèles de diffusion par dérivate, qui ne peuvent pas traiter avec précision les effets des électrons chauds, présents en grande quantité dans les dispositifs en GaN. Le ZnO offre des mobilités comparables à celles du GaN et est de plus en plus développé pour la construction de

commutateurs optiques. D'autres auteurs ont également souligné l'importance potentielle du ZnO et quelques dispositifs simples ont été simulés.

Ce memoire est organisé comme suit :

Un chapitre de fond, axé sur description des propriétés structurels, électronique correspondante au ZnO. En outre, une description du dispositifs MESFET à base ZnO y compris leurs principe de fonctionnement.

Le deuxième chapitre, est consacré à la technique de Monte Carlo, et la façon avec laquelle cette approche peut être utilisée pour résoudre l'équation de transport de Boltzmann afin d'analyser le transport électronique dans le transistor MESFET.

Le troisième chapitre des simulations ont été réalisées pour modéliser le transistor à effet de champ MESFET à base de ZnO. Les calculs Monte Carlo sur le ZnO massif ont été effectués afin de fournir des informations sur la vitesse de dérive des électrons. Les résultats sur l'effet de la température et pour des tensions élevés appliqués sur la caractéristiques de sortie (I-V) du dispositif MESFET-ZnO ont été également discutées. Les résultats du GaN et GaAs présentés sont utilisés principalement comme base de comparaison.

Chapitre 1

Transistor à effet de champ MESFET à base de ZnO

1.1 Introduction

Le ZnO a attiré l'attention des chercheurs en raison de ses d'excellentes propriétés. Son efficacité dans divers domaines d'applications a été prouvée comme dans les capteurs de gaz, les cellules solaires à hétérojonction, les systèmes utilisant le processus photo catalytique, les diodes électroluminescentes (LED). L'oxyde de zinc (ZnO) est un matériau qui existe sous forme naturelle sous le nom de "Zincite", l'oxyde de zinc, se présente à l'état solide sous l'aspect d'une poudre inodore de couleur blanc cassé à jaune pâle. Il peut aussi être synthétisé artificiellement sous forme massive (Figure 1.1).

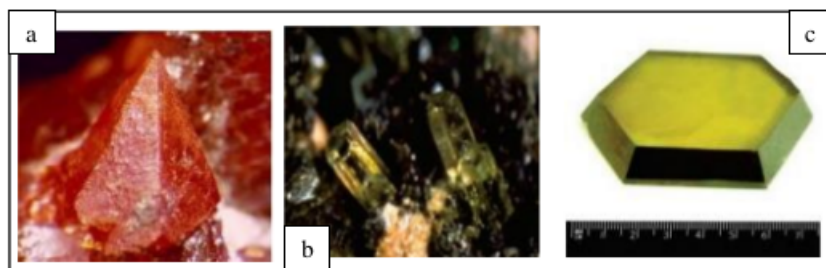


FIGURE 1.1 – Oxyde de Zinc (ZnO) massif sous forme naturelle (a,b) et provenant de synthèse hydrothermal (c)

L'oxyde de zinc (ZnO) est un semi-conducteur à large bande interdite directe réalisé à partir de 80.36 % de zinc et 9.66 % d'oxygène. Il est transparent dans le visible et dans le proche infrarouge avec une énergie de liaison d'exciton de 60 meV [1,2,3].

1.2 Propriétés du ZnO

1.2.1 Avantages du ZnO

Récemment, le semi-conducteur à base d'oxyde de zinc (ZnO) a suscité une grande attention pour les applications électroniques et optoélectroniques, en raison de ses avantages notables par rapport au GaN et aux autres nitrures III. L'oxyde de zinc (ZnO) est devenu particulièrement attractif pour différentes applications en microélectronique, et spintronique comme étant le matériau de futur. À partir de 1935, l'intérêt porté à l'oxyde de zinc (ZnO) n'a cessé pas de croître depuis qu'ont été montrées ses remarquables propriétés d'émissivité dans l'ultraviolet et le bleu, combinées à une stabilité chimique supérieure à celles de GaN [4,5], une large énergie de gap (3.4 eV), ainsi que la capacité d'élaboration sur des substrats monocristaux. Le ZnO possède des propriétés uniques qui pourraient être utilisées dans les émetteurs de lumière ultraviolette, les capteurs de gaz, les dispositifs à ondes acoustiques de surface et l'électronique transparente [6,7].

De plus, les semi-conducteurs à large bande interdite présentent un intérêt potentiel en tant que matériau adapté à l'électronique de forte puissance et, grâce à leur bande interdite directe, ils sont également bénéfiques pour les dispositifs optoélectroniques (figure 1.2). Le ZnO a récemment suscité beaucoup d'intérêt en raison de ses avantages potentiels par rapport au GaN, notamment la disponibilité commerciale de monocristaux massifs, sa facilité de gravure chimique humide et sa grande capacité de charge [8,9].

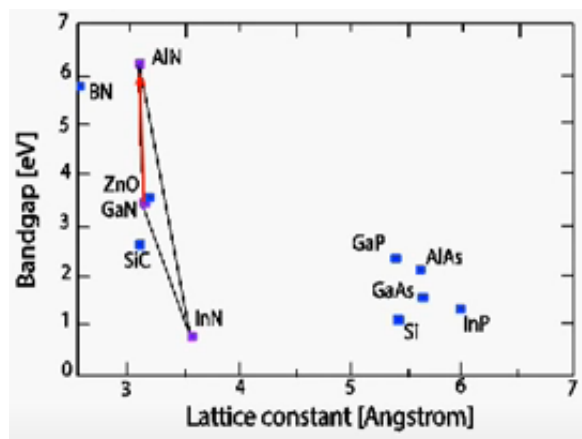


FIGURE 1.2 – Energie de gap pour différents semiconducteurs

1.2.2 Propriétés structurales et cristallographiques

L'oxyde de zinc, possède trois phases cristallographiques différentes : la phase Blende et la phase Wurtzite, la phase Rocksalt illustrées dans la figure (1.3).

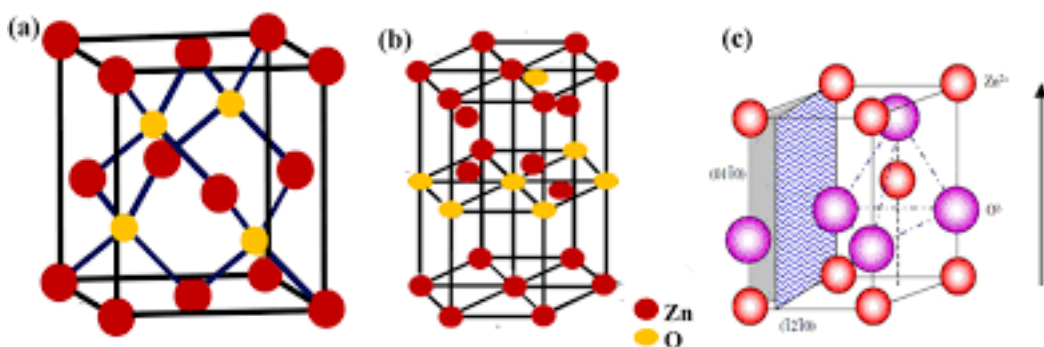


FIGURE 1.3 – Structure cristallographique du ZnO

La structure la plus stable thermodynamiquement stable à la température ambiante est la structure Wurtzite (hexagonale) pour le cas de a structure Blende (cubique) est observée lorsque ZnO est déposé sur certains substrats de symétrie cubique, alors que la structure Rocksalt est obtenue lorsqu'une pression hydrostatique (10-15 GPa) est appliquée sur la structure [10].

Nous nous sommes intéressés à la structure hexagonale compacte du type wurtzite, les paramètres de maille a (étant le côté d'un losange constituant la base) et c (le côté parallèle à l'axe oz). Les atomes de zinc sont tétracoordonnés et la structure de l'oxyde de zinc peut être

représentée par deux réseaux hexagonaux compacts, l'un est constitué d'ions $+2$, et l'autre -2 . Chaque cellule d'unité inclut quatre atomes et chaque atome d'une catégorie (atome de groupe II) est entouré de quatre atomes d'une autre catégorie (groupe VI) ou vice versa, qui sont positionnés aux bords d'un tétraèdre. Dans un vrai cristal de ZnO, la structure de wurtzite ne suit pas la même disposition que celle d'une structure idéale, puisque le rapport (c/a) ou la valeur de u est différente. Cette différence est probablement due à la stabilité et à l'ionité de la maille.

1.2.3 Structures de bandes

La connaissance de la structure de bande d'un semi-conducteur à évidemment un rôle crucial pour la réalisation de dispositifs. Un des points importants viennent d'être explicités est la valeur de l'énergie séparant le maximum de la bande valence du minimum de la bande de conduction "gap". Dans le cas du ZnO, la structure de bande montre que c'est un semi-conducteur à gap direct (Figure 1.4), à savoir que son maximum de la bande de valence et son minimum de la bande de conduction se trouvent alignés dans l'espace des K au centre de la zone de Brillouin (point Γ). Le gap direct de ZnO est de 3.437 eV à 1.6 K [11]. L'énergie de ce gap (E_g) a tendance à diminuer en augmentant la température.

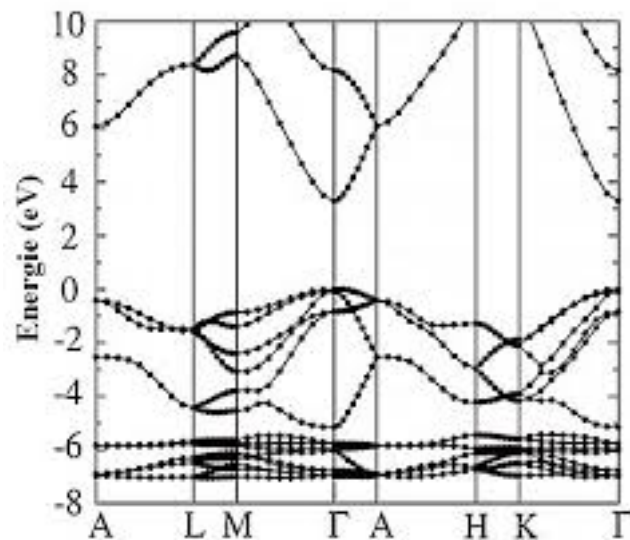


FIGURE 1.4 – Structure de bande du ZnO Wurtzite

Une caractéristique distinctive du ZnO, comparé à de nombreux autres semi-conducteurs à gap direct, est la grande séparation des vallées, cela pourrait conduire à l'utilisation d'une approximation analytique non parabolique simple pour la bande de conduction autour du centre de la zone de Brillouin, même à un champ électrique modérément élevé, jusqu'à plusieurs centaines de kV/cm.

Bien que les bandes de conduction et de valence sont multiples, les propriétés de transport électrique dépendent principalement des structures de la bande conduction la plus basse et de la bande de valence la plus haute.

1.2.4 Modes de vibration du ZnO

La figure I.5 représente le diagramme de dispersion des phonons de ZnO. Les modes de vibration sont importants pour la compréhension des propriétés électriques et optiques du matériau. Pour la structure Wurtzite du ZnO, la maille élémentaire contient 4 atomes non équivalents. Ce qui fait que pour un vecteur d'onde donné, il existe 12 branches de vibrations pour ZnO dont 3 branches acoustiques et 9 branches optiques.

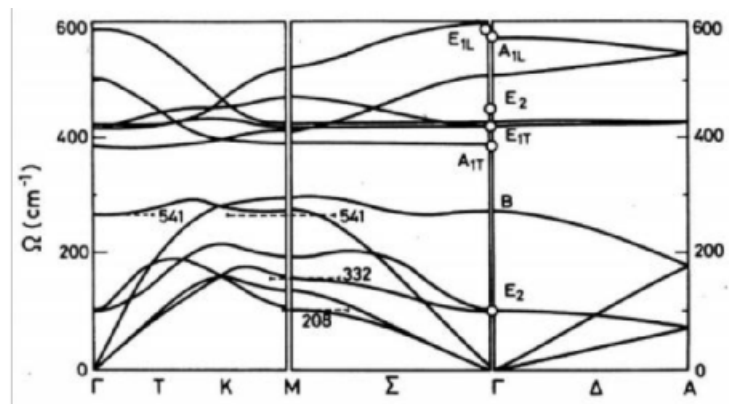


FIGURE 1.5 – Courbe de dispersion des phonons de ZnO

Le tableau I présente les paramètres et les informations supplémentaires sur la structure électronique et les dispersions des phonons calculée qui peuvent être trouvées dans la réf. 12.

Tableau.I Paramètres relatifs du matériau *ZnO*

Propriétés	<i>ZnO</i>
Densité(Kg/m^3) $\times 10^5$	5600
Constante diélectrique statique	8.2
Constante diélectrique en haute fréquence	3.7
Vitesse du son(cm/s) $\times 10^5$	6.4
Potentiel de déformation acoustique (eV)	14
potentiel de déformation optique (eV/cm) $\times 10^9$	72
Énergie de Gap (eV)	3.43
Énergie de séparation des vallées (eV)	
Γ -K	2.10
Γ -U	2.90
Coéfficient de non parabolicité (eV-1)	
Γ	0.219
K	0.109
U	0.111
Masse effective m_e/m_0	
Γ	0.25
U	0.4
K	0.3

S. H Arabshahi et al [12]

Il est instructif de comparer les paramètres matériels employés dans , avec celles correspondant à GaN et GaAs. Les sélections de paramètres des matériaux utilisé ensuite pour la simulation simulations du transport des électrons dans le ZnO puis dans le dispositif MESFET.

1.2.5 Propriété optique du ZnO

L'oxyde de zinc est un matériau transparent dans le domaine du visible grâce à son large gap, ce qui lui permet d'être classé parmi les oxydes transparents conducteurs TCO (transparent conductivity oxide) lorsqu'il est dopé. Du fait de l'anisotropie de sa structure cristalline hexagonale, la lumière se propageant dans un cristal de ZnO sera soumise au phénomène de la biréfringence optique. Le ZnO possède une transparence optique dans le domaine visible et le proche infrarouge qui dépasse parfois le seuil des 900 nm. Le spectre de la photoluminescence de ZnO se compose habituellement d'une bande d'émission dans le proche UV (375 nm) et d'une bande d'émission dans le vert (510 nm) à température ambiante. Son seuil fondamental d'absorption se situe dans l'ultraviolet. La propagation de la lumière aura lieu dans ce cas selon deux directions : elle se propagera ainsi suivant la première direction avec une polarisation parallèle à l'axe optique du cristal (l'axe c) et sera soumise à un indice de réfraction dit ordinaire noté n_o ; et elle se propagera suivant la seconde direction avec une polarisation perpendiculairement à l'axe optique avec un indice de réfraction dit extraordinaire noté n_e .

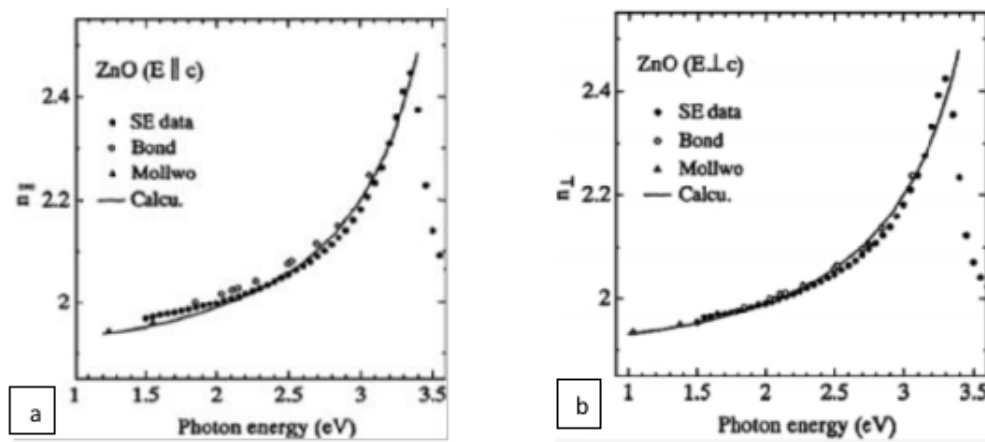


FIGURE 1.6 – Dispersion des indices de réfraction n_o (a), n_e (b).

Le spectre de photoluminescence (PL) du ZnO présente plusieurs branches d'émission allant du proche UV (350 nm) au domaine du visible (400-700 nm). Il se caractérise par une forte énergie du premier et du deuxième excitons qui sont respectivement de 60 meV et de 15 meV comparables à l'énergie de l'agitation thermique ambiante de 20 meV. L'énergie

du premier exciton du ZnO est largement supérieure à celle des autres matériaux semi-conducteur ZnS (20 meV), GaN (21 meV), Si (14,7 meV), AsGa (4,2 meV) , ce qui le rend très prometteur pour les applications dans le domaine des lasers (figure I.6).

1.2.6 Conductivité thermique

Les propriétés thermiques sont affectées principalement par la température, la conductivité thermique est considérée comme étant une propriété incontournable, notamment pour les dispositifs optoélectroniques à haute puissance, qui travaillent à des températures très élevées. Elle est influencée par le degré de liberté vibratoire, rotationnel et électronique. La figure (1.7) montre la variation de la conductivité thermique d'un cristal de ZnO. Il est clair que la conductivité thermique diminue au fur et à mesure que la température augmente [46]. Les défauts ponctuels tels que les lacunes, les impuretés et les fluctuations isotropiques affectent également la conductivité thermique de ZnO.

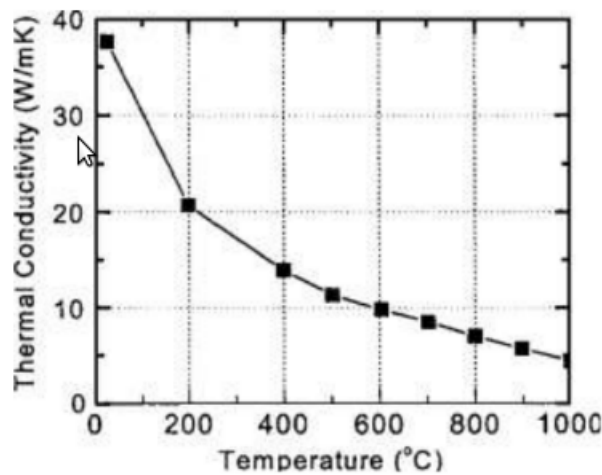


FIGURE 1.7 – Conductivité thermique en fonction du ZnO

1.2.7 Mobilité électronique

La mobilité est une caractéristique primordiale du matériau traduite par la capacité des porteurs à se déplacer dans le matériau. Elle dépend fondamentalement de deux paramètres : la masse effective des électrons et la fréquence des interactions avec le réseau cristallin.

La mobilité est principalement affectée par la diffusion des phonons et de Coulomb. La mobilité devient un paramètre dépendant du champ. La mobilité à faible champ dépend de la température et de la concentration des porteurs libres (électrons et trous), et de leur mobilité. Il est à noter qu'il existe un autre type de dopage non intentionnel lié à la présence d'impuretés et de défauts structurels, appelé dopage résiduel. La mobilité diminue régulièrement lorsque la concentration en électrons augmente. La figure 1.8 donne la mobilité en fonction de la température, par divers auteurs.

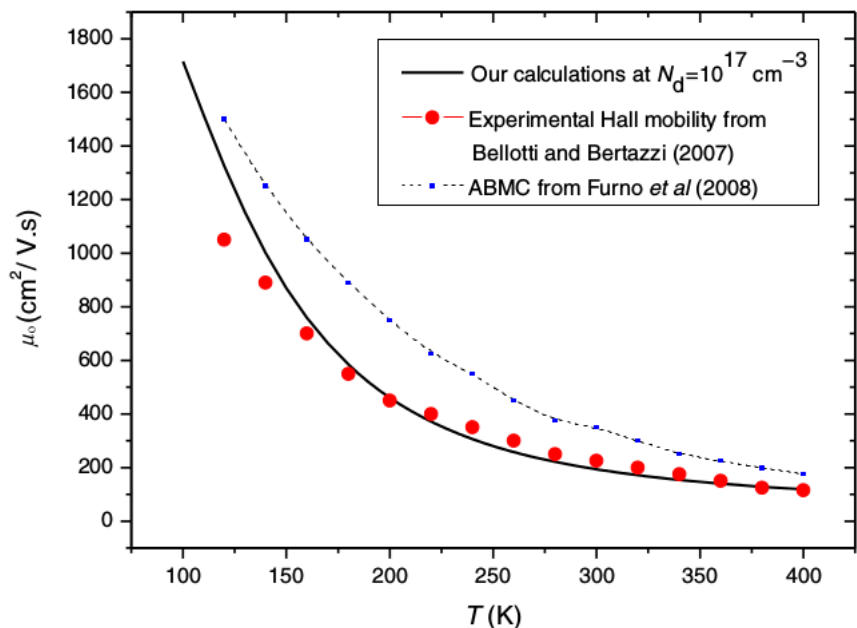


FIGURE 1.8 – Mobilité électronique en fonction de température du ZnO

1.2.8 Vitesse électronique

La caractéristique de vitesse des porteurs en fonction du champ électrique est fondamentale pour déterminer l'amplitude du courant qui peut circuler dans un composant. Ceci étant dit, qu'il faut donc y appliquer un grand champ électrique pour que les électrons puissent mouvoir dans la bande de conduction. Les électrons possédant une faible énergie au voisinage du minimum de la bande de conduction Γ , leur masse effective est faible s'ils gagnent de l'énergie, avec un champ électrique intense, ils vont monter dans la vallée supérieures et peuvent être portés à un niveau énergétique égal ou supérieur au minimum de

vallées U ou K pour le cas du ZnO. Leur masse effective augmentera et l'énergie cinétique de ces électrons va alors diminuer par conséquent ils sont alors brusquement ralentis. Ce phénomène est à l'origine de la saturation de vitesse de transport des électrons, lorsque le champ électrique est intense [12]. ce phénomène est observés dans plusieurs semiconducteurs à savoir GaN ,SiC (Figure 1.9).

Une relation simplifiée de la vitesse à faible champ électrique est donnée par suivante :

$$\vec{v} = \pm\mu(E) \cdot \vec{E} \tag{1.1}$$

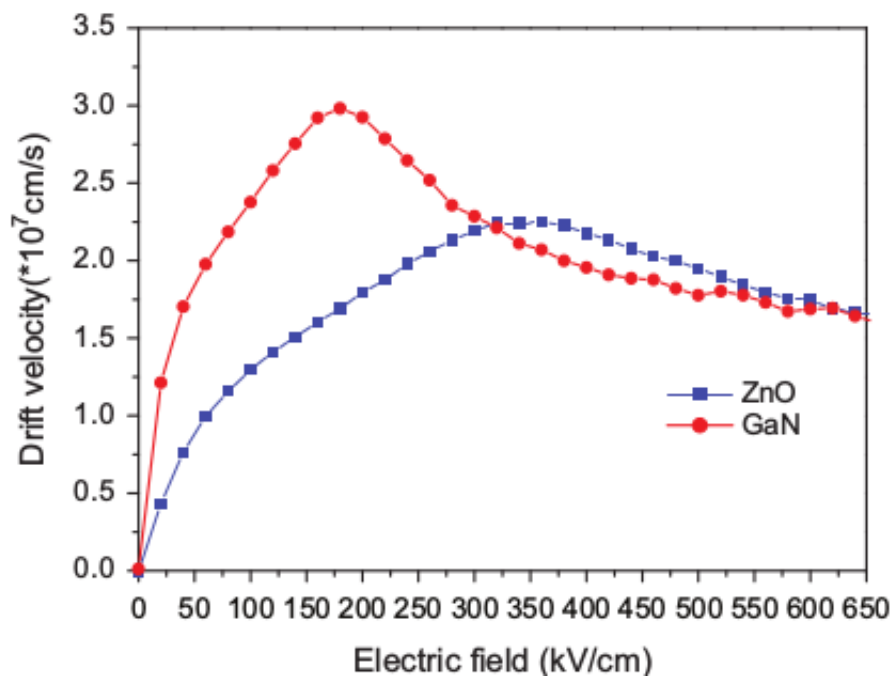


FIGURE 1.9 – Vitesse électronique en fonction du champ électrique

1.3 L'état de l'art du transistor MESFET

1.3.1 Généralité sur le transistor

Les transistors sont des éléments actifs essentiels de l'électronique qu'il est possible de distinguer selon deux principales catégories, les transistors bipolaires, ainsi que les transistors à effets de champ (TEC). Tous deux permettent une régulation du courant de sortie, par une modulation de courant pour le transistor bipolaire, ou une modulation de tension pour le TEC. La notion de transistor bipolaire à homojonction a été introduite par Shockley et son équipe en 1948. Faute de moyens techniques, il s'est contenté de mettre en évidence les potentialités de ce composant. Ce n'est que trois ans plus tard que le premier transistor fut créé. Le principe du transistor bipolaire à homojonction repose sur l'association de deux jonctions PN donnant naissance à un composant comportant trois électrodes nommées émetteur (E), base (B) et collecteur (C).

Le principe de fonctionnement du transistor bipolaire dans le mode de fonctionnement amplificateur repose sur l'injection de porteurs de charge majoritaires depuis l'émetteur dans la base grâce à une jonction EB maintenue en direct. Les porteurs injectés devenant minoritaires dans la base diffusent à travers celle-ci pour être finalement accumulés dans le collecteur grâce à la jonction BC polarisées en inverse.

L'évolution rapide des technologies de l'électronique de puissance et des communications nécessite le développement de dispositifs électroniques performants, capables de fonctionner à haute fréquence, sous haute tension et dans des conditions environnementales sévères. En l'occurrence, les transistors à effet de champ à grille Schottky (MESFET) metal Semiconductor Field Effect Transistors), représentent une architecture intéressante simple à fabriquer que le MOSFET, car ils ne nécessitent pas de couche isolante de haute qualité.

Le transistor à effet de champ a été inventé à la fin des années 1920 par J.E.Lilienfeld, mais n'a pu être réalisé avant la fin des années 1950. La structure MESFET met en évidence différentes couches utilisées pour sa réalisation elle repose sur une couche active (canal) directement implantée dans le substrat semi-isolant. La couche active est généralement une couche du type N qui repose sur un substrat semi-isolant. De plus, la grille en métal réfractaire est déposée pour matérialiser le contact Schottky. Les Zones N⁺ sont implantées en se

servant du métal comme d'un masque pour obtenir deux zones d'accès auto alignées sur la grille. Les contacts de source et de drain sont des contacts ohmiques contrairement au contact Schottky

Pour fournir une puissance élevée, le MESFET doit être capable de fournir le courant drain-source le plus élevé possible tout en prenant en charge des tensions V_{ds} de grande amplitude. Cependant, l'obtention d'un courant I_{ds} élevé nécessite l'utilisation de dopages élevés qui conduisent à une dégradation de la tension de claquage. En revanche, si l'on souhaite privilégier un fonctionnement à très hautes fréquences, il est nécessaire de réduire la longueur de grille. La nécessité de maintenir un facteur de forme raisonnable (rapport entre la longueur de grille et l'épaisseur de la couche active) oblige alors à réduire l'épaisseur de cette couche active, ce qui entraîne une réduction du courant drain-source (Figure 1.10).

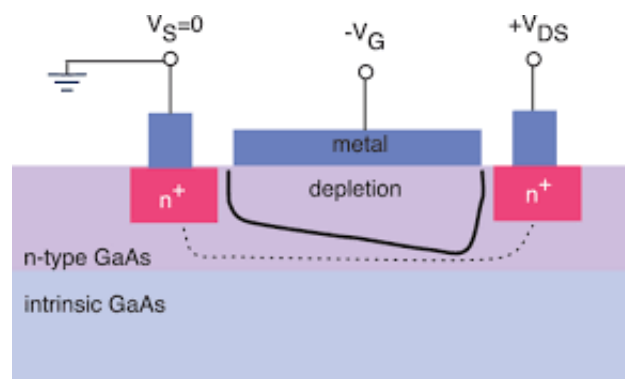


FIGURE 1.10 – Structure du MESFET

L'utilisation du ZnO permet d'obtenir des performances élevées grâce à un champ de claquage huit fois supérieur et une conductivité thermique trois fois supérieure à celle du silicium. Ces propriétés permettent d'utiliser ces composants à des tensions très élevées (Figure 1.11), de plusieurs dizaines de volts et à des températures élevées.

Compte tenu de ces performances, le domaine d'utilisation privilégié de ces composants est l'amplification de très haute puissance (objectif > 100 W). Cependant, la technologie des MESFET à base de ZnO reste encore peu développée comparativement à d'autres matériaux GaN, SiC. Il subsiste plusieurs défis technologiques, notamment la maîtrise des contacts ohmiques, la réduction des défauts cristallins, et la stabilité des caractéristiques électriques

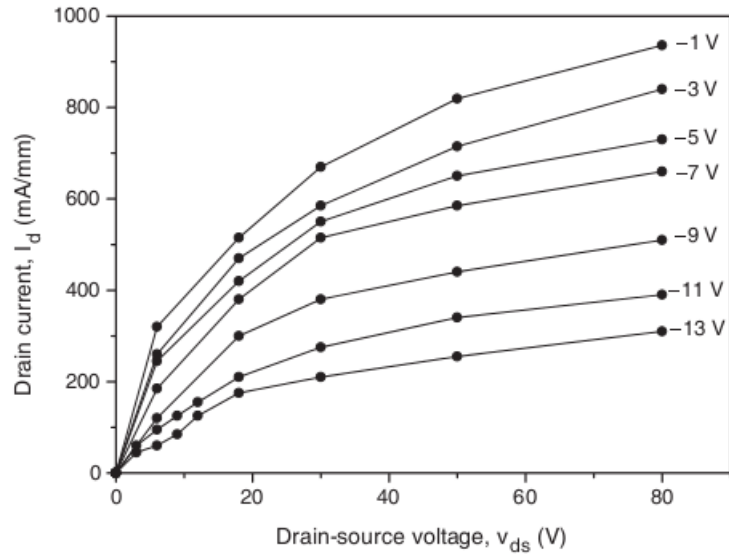


FIGURE 1.11 – Caractéristique Courant-Tension I-V d'un MESFET-ZnO

[13].

1.3.2 Principes de fonctionnement du MESFET

Un transistor FET est constitué de trois pôles : la source, le drain et la grille. Le fonctionnement d'un MESFET repose sur la possibilité de moduler l'épaisseur du canal sous la grille. Autrement dit, le contrôle de la zone de déplétion située sous le contact métallique qui module l'épaisseur du canal de conduction et donc le courant.

Ce courant augmente en fonction de la tension V_{ds} jusqu'à ce que le champ électrique atteigne la valeur pour laquelle $v = v_{sat}$, valeur pour laquelle on observe une saturation du courant. La modulation de la densité d'électrons et donc du courant dans le canal est réalisée par le pilotage de la tension de grille via le contact Schottky entre la grille [14].

En fonctionnement normal, le drain est polarisé positivement par rapport à la source, tandis que la grille est polarisée négativement, toujours par rapport à la source. La présence du contact Schottky crée une zone dépeuplée de porteurs libres sous la grille.

La différence de potentiel entre la grille et le canal est plus faible à l'extrémité située près de la source (entrée du canal). Le canal est donc plus resserré près du drain qu'à son entrée.

L'augmentation de la tension de drain positive crée un champ électrique dans le canal.

Ce champ propulse les électrons de la source vers la grille, établissant ainsi un courant I_{ds} (drain-source). Avec l'augmentation de la tension de drain, la section de la zone dépeuplée (zone de charge d'espace) commence à se déformer, devenant beaucoup plus importante côté drain que côté source. Ce resserrement du canal entraîne un ralentissement de la croissance du courant de drain. À un certain stade, l'augmentation de la tension V_{ds} n'a quasiment aucune influence sur le courant. Le courant de saturation I_{dsat} est appelé lorsque le courant de drain I_{ds} du transistor entre dans la zone de saturation pour une tension de polarisation de grille V_{gs} nulle.

Lorsque la tension de grille est suffisamment négative, le ZCE bloque complètement le canal, empêchant ainsi le passage du courant. Le transistor est alors dit « pincé » et la tension appliquée à la grille est alors appelée tension de pincement V_p .

La figure I.11 donnant l'évolution du courant I_{ds} circulant entre drain et source lorsque l'on fait croître la tension V_{ds} maintenant la tension de grille V_{gs} une valeur constante.

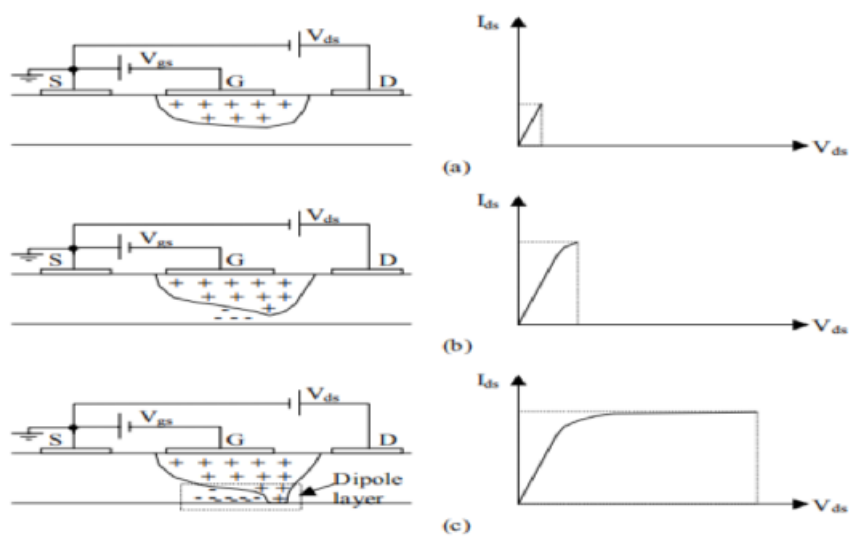


FIGURE 1.12 – Principe de fonctionnement du MESFET

On peut distinguer que les caractéristiques de ce réseau peuvent être séparé en deux régions : une région linéaire dans laquelle le courant I_{ds} croît avec la tension V_{ds} et une région dite de saturation où le courant de drain est sensiblement indépendant de V_{ds} . Ce comportement met en jeu un ensemble de phénomènes que nous allons décrire dans ce qui

suit.

Fonctionnement linéaire (région ohmique :Vds faible Dans cette région dite ohmique la vitesse des porteurs dans le canal est proportionnel au champ électrique, c.à.d une évolution quasi linéaire du courant de sortie I_{ds} pour des faibles valeurs V_{ds} . En effet, la section du canal conducteur est presque uniforme car elle dépend fondamentalement de la commande V_{gs} . Le transistor se comporte comme une conductance contrôlée par la tension de grille.

Régime de saturation du courant (région saturée) : Vds augmente Lorsque la tension de drain augmente, la pénétration de la zone de charge d'espace s'accroît à la sortie du canal. L'apparition de ce resserrement provoque le ralentissement de la croissance du courant du drain. Trois mécanismes sont alors susceptibles de provoquer la saturation du courant du drain : le pincement du canal, la saturation de vitesse en régime de transport stationnaire, le transfert après régime de survitesse.

Le pincement du canal Pour une certaine valeur V_{ds} de la tension drain-source, la zone de charge d'espace a rejoint le substrat à la sortie du canal. Celui-ci est donc pincé.

1.3.3 Région d'avalanche

: V_{ds} augmente d'avantage La jonction grille drain devient fortement polarisée en inverse. Le champ électrique devient localement très important entraînant une ionisation par choc provoquant ainsi une avalanche pouvant induire un claquage, donc la limitation de la tension V_{ds} à une valeur admissible sera nécessaire

1.3.4 Barrière de potentiel et zone de charge d'espace

Les électrons libres du semi-conducteur au voisinage de la jonction métal-semi-conducteur du contact Schottky migrent vers le métal laissant les atomes donneurs ionisés. Ces atomes forment à l'interface du cote semi-conducteur une zone de charge d'espace ZCE positive et un champ électrique E s'établit. A l'équilibre thermodynamique, le courant de diffusion

des électrons s'équilibre avec le courant de conduction engendré par le champ électrique. La hauteur de la barrière vue par les électrons dans le semi-conducteur est donnée par la différence des travaux de sortie du métal et du semi-conducteur [15].

Phénomène d'auto-backgating

La principale cause de l'auto-backgating est le comportement non idéal du substrat semi-insolant, qui contient des impuretés. Ces impuretés génèrent des états énergétiques pouvant être occupés par des porteurs dans la bande interdite du matériau. Ces derniers sont alors capables de capturer et de réémettre les électrons participant au courant dans le canal. L'effet principal de l'auto-backgating se reflète dans la réponse transitoire du courant de sortie « I_{ds} ».

1.3.5 Les phénomènes de pièges

Les principaux effets limitatifs dans les FETs sont les effets de pièges, Les phénomènes de pièges dans les composants semiconducteurs correspondent à l'existence d'états énergétiques pouvant être occupés par des porteurs dans la bande interdite du matériau. Ces niveaux d'énergie sont majoritairement dus à la présence d'impuretés et de défauts cristallins dans les interfaces. Ils sont capturés ou libérés des électrons qui participent au courant dans le canal. Ces effets de pièges peuvent être regroupés en deux catégories :le « Gate-lag », le « Self-backgating »

1.3.6 L'effet thermique

Il est important d'insister sur le phénomène d'auto échauffement due à la dissipation de puissance par effet Joule lors de son fonctionnement. Cette prise en compte est importante car une élévation de la température du composant entraîne une diminution de la vitesse et de la mobilité des porteurs dans le canal et par conséquent une diminution du courant de drain ainsi qu'une limitation de la fréquence d'utilisation. Il est donc important d'évaluer précisément la température du composant [15,16,17].

Chapitre 2

Simulation de Monte Carlo

Dans la simulation de dispositifs semi-conducteurs, le transport de Boltzmann semi-classique a été le pilier de la technologie des semi-conducteurs dès ses débuts. Jusqu'à présent, la plupart des simulations de dispositifs, y compris la méthode Monte-Carlo, reposaient sur la résolution de l'équation de transport de Boltzmann (BTE) et de ses simplifications, des équations de transport hydrodynamiques (HD) et du modèle de dérive-diffusion (DD) la figure illustre quelque modèle utilisé.

Les simulations de Monte Carlo sont des algorithmes de calcul qui s'appuient sur de nombreux événements stochastiques pour produire des résultats. Le nom Monte-Carlo attribué à cette méthode provient du fait que les variables aléatoires déterminés par tirage au sort sur la base de probabilités préalablement définies en faisant allusion aux jeux de hasards pratiqués à Monte-Carlo en France [18,19].

La technique de base consiste à simuler le mouvement libre des particules (vol libre) en sélectionnant la durée du vol libre du porteur et les événements de diffusion de manière stochastique (Figure 2.1).

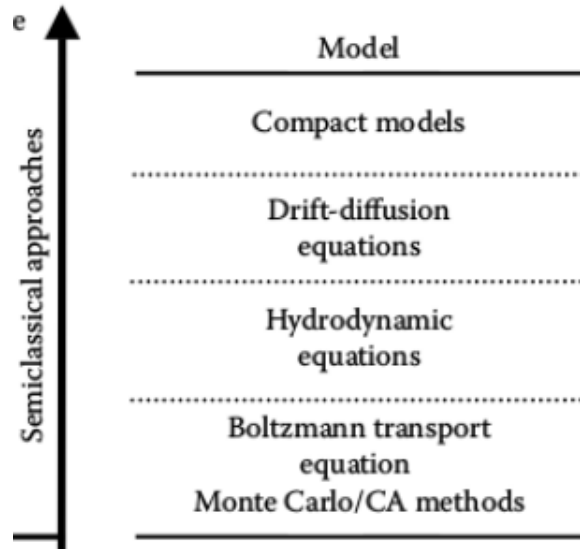


FIGURE 2.1 – Modèle de simulation

2.1 Approximation semi-classique

Notons qu’afin de rendre l’analyse plus traitable, le mouvement des électrons doit être traité sous les hypothèses de transport semi-classique. Dans le cadre de cette hypothèse, chaque électron est traité comme étant une particule ponctuelle ce qui est équivalent à dire qu’un électron se comporte comme un objet classique. Les électrons donc peuvent être traités de manière classique, ce qui signifie que l’équation de transport de Boltzmann (BTE) peut décrire comment les forces externes et les collisions (événements de diffusion) affectent le transport des électrons. Analytiquement la BTE peut être exprimée par,

$$\frac{\partial f(\bar{x}, \bar{k}, t)}{\partial t} + \frac{1}{\hbar} \nabla_{\bar{k}} \mathcal{E}(\bar{k}) \nabla_{\bar{x}} f(\bar{x}, \bar{k}, t) + \frac{qE(\bar{x}, t)}{\hbar} \nabla_{\bar{k}} f(\bar{x}, \bar{k}, t) = \left[\frac{\partial f}{\partial t} \right]_{\text{collision}} \quad (2.1)$$

Mathématiquement, $f(\bar{x}, \bar{k}, t)$ est la fonction de distribution du particule qui exprime la probabilité pour un électron d’avoir une position \bar{x} , pour un vecteur d’onde \bar{k} , dans un instant t .

D’un point de vue classique, un électron avec un vecteur d’onde électronique \bar{k} , a une vitesse,

$$\vec{v} = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\vec{k}} \mathcal{E}(\vec{k}) \quad (2.2)$$

Où $\mathcal{E}(\vec{k})$ désigne la structure de bande d'électrons correspondante, c'est-à-dire l'énergie de l'électron en fonction de vecteur d'onde, \vec{k} . Sous l'application d'un champ électrique, le taux de changement de l'impulsion d'un électron par rapport au temps peut être exprimé comme,

$$\hbar \frac{d\vec{k}}{dt} = -q\vec{E} \quad (2.3)$$

Les équations de vitesse (2.2) et (2.3) sont similaires aux lois de Newton, les électrons sont considérés comme des particules ponctuelles se déplaçant avec la vitesse de leur centre. Le membre de droite est le taux de changement de la fonction de distribution dû aux collisions aléatoires où $f(r, k, t)$ est la fonction de distribution à une particule et est une intégrale sur les termes de diffusion dans l'espace des vecteurs d'onde. Une fois que $f(r, k, t)$ est connu, des observables physiques, tels que la vitesse moyenne ou le courant, sont trouvés à partir des moyennes de f . Une discussion plus approfondie sur l'équation de transport de Boltzmann est fournie dans la littérature [20,21,22].

2.1.1 Mécanismes de diffusion

Le dernier terme dans la BTE décrit les collisions aléatoires qui est égal à la différence entre les processus de diffusion interne et externe. Étant donné que la nature ondulatoire des vibrations du réseau peut être quantifiée sous forme de phonons, l'influence des vibrations du réseau sur les mouvements des électrons peut être exprimée par un processus quantique appelé interaction électron-phonon.

L'interaction électron-phonon est l'un des processus de diffusion dominants dans les dispositifs à semi-conducteurs. Lorsque des atomes voisins dans un réseau oscillent dans la même direction, cela donne naissance à la diffusion acoustique dans le spectre de vibrations des phonons, tandis que, lorsque les atomes voisins oscillent dans la direction opposée, cela conduit à la diffusion optique dans les spectres de vibrations des phonons.

La diffusion des porteurs due aux phonons optiques non-polaires peut également être traitée comme la diffusion du potentiel de déformation acoustique, même si les atomes voisins oscillent dans des directions opposées, contrairement au cas des phonons acoustiques. Si le matériau est dopé, les porteurs peuvent subir une diffusion des impuretés ionisées, ce

type de diffusion augmente linéairement avec la densité de dopage et augmente jusqu'à une puissance carrée avec une augmentation de l'énergie de l'électron. Il est dominant à basse température et à faible énergie électronique.

Une interaction inter-vallée ne peut s'effectuer que si l'énergie après l'absorption ou l'émission du phonon est supérieure à l'énergie de séparation entre deux différentes vallées. La diffusion inter-vallée provoque un transfert des porteurs de la vallée centrale aux vallées satellites [23]. Il existe deux types de transferts vers les vallées équivalentes et vers les vallées non équivalentes.

2.1.2 La structure de bande

Afin de modéliser un mouvement d'électrons et d'en déduire les taux de diffusion, il est nécessaire de définir la structure de bande du matériau dans lequel les électrons se propagent. Il est donc essentiel de disposer d'un modèle de structure de bande approprié et de comprendre comment les mécanismes importants de diffusion des électrons varient avec l'énergie, le vecteur d'onde et la température.

2.1.3 L'approximation du modèle à trois vallées :

Une grande simplification de l'analyse peut être obtenue simplement en se concentrant sur les trois vallées les plus basses d'énergie de la bande de conduction plutôt que sur la structure de bande entière. La structure de bande est simplifiée comme le montre la figure 2.2. Ces matériaux sont des semi-conducteurs à bande interdite directe avec le minimum principal de la bande de conduction au point Γ .

Deux autres vallées satellites L et X sont respectivement dans les directions [111] et [100]. Aux faibles champs électriques, les électrons de la bande de conduction occupent le fond de la vallée centrale. Au fur et à mesure que le champ électrique augmente, l'énergie moyenne des électrons augmente et des états d'énergie plus élevés peuvent être occupés dans la bande de conduction.

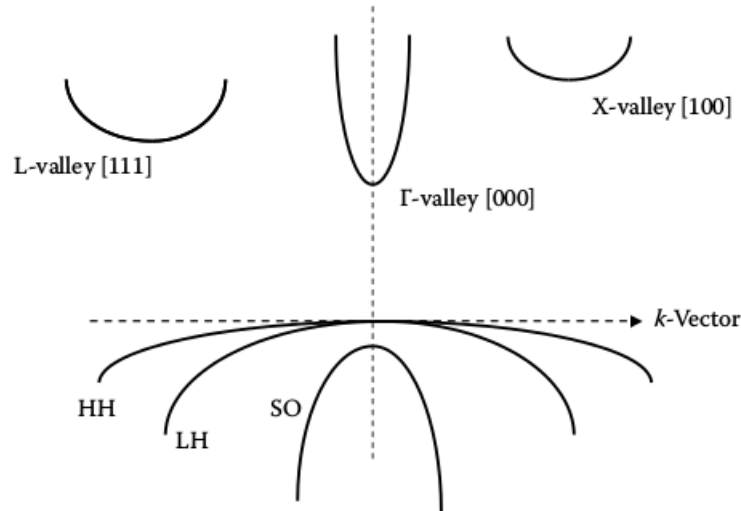


FIGURE 2.2 – Modèle de trois vallées

2.1.4 Notion de la masse effective

La masse effective d'une particule est un concept lié au modèle de transport semi-classique, elle représente la masse avec laquelle les électrons répondent à des forces externes comme un champ électrique. Cette masse est généralement exprimée en unités de [24,25] la masse ordinaire d'un électron m_e ($9.11 \times 10^{-31} kg$). La masse effective, m^* , d'un électron donc est définie comme,

$$m^* = \hbar^2 \left[\frac{d^2 E(k)}{dk^2} \right]^{-1} \quad (2.4)$$

\hbar : La constante de Planck réduite.

k : Le vecteur d'onde.

$E(k)$: L'énergie en fonction de k ou la relation de dispersion.

2.1.5 Approximation parabolique

La courbure des bandes est parabolique et la relation énergie-vecteur d'onde est de la forme

$$E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \quad (2.5)$$

L'approximation parabolique conserve sa précision si les électrons sont proches des minima de la vallée. Si des champs appliqués élevés sont pris en compte, les électrons sont susceptibles de se trouver près du bord de la bande [26]. Dans ces circonstances, l'approximation parabolique peut devenir assez imprécise.

2.1.6 Approximation non-parabolique

Lorsque les champs électriques appliqués sont importants, les porteurs peuvent avoir une énergie cinétique très élevée, c'est-à-dire occuper des états d'énergie élevée par rapport aux minima de la bande de conduction. Dans cette région, la relation $E - k$ peut différer d'une structure de bande parabolique et de la structure de bande d'énergie non-parabolique. la relation de dispersion en termes de non-parabolicité de Kane au troisième est décrite par

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

Dans le cadre du modèle de Kane, ce coefficient non-parabolique est :

$$\alpha = \frac{1}{E_g} \left(1 - \frac{m^*}{m} \right)^2 \quad (2.7)$$

où E_g est l'écart d'énergie entre les maxima de la bande de valence et les minima de la vallée de la première bande de conduction, m^* est la masse effective des électrons aux minima de la vallée et m est la masse au repos des électrons [27].

2.2 Algorithme de Monte-Carlo

L'organigramme principal de l'algorithme de Monte Carlo, est initié par l'exécution du programme qui initialise premièrement divers paramètres utilisés dans le code. Une fois les paramètres de matériau sont lus analysés, l'étape suivante consiste à construire le tableau de diffusion pour les trois vallées en appelant un sous-programme qui initialise une série d'événements résumés précédemment. une fois que le processus d'initialisation est terminé, la procédure principale vol libre diffusion est exécutée dans le sous-programme (free flight scatter). Au début, les porteurs accélèrent librement en raison du champ électrique, accompli

en appelant le sous-programme drift, puis leurs vols libres sont interrompus par des événements de diffusion aléatoires qui sont gérés par le sous-programme (scatter carrier). En fin, le sous-programme écrit est appelé pour enregistrer l'évolution temporelle des variables, telles que la vitesse, l'énergie, et d'autres paramètres pertinents.

2.2.1 Génération du vol libre

Le mouvement des particules dans l'ensemble est divisé en certain nombre de petits pas de temps t généré d'un manière aléatoire. Durant chaque pas de temps, un électron est supposé accélérer sous l'action d'un champ électrique appliqué à la fin du vol libre l'électron subit un événement de diffusion choisi parmi un certain nombre d'événements de diffusion. La dynamique du mouvement des particules est supposée en vol libre interrompu par des événements de diffusion instantanés. La durée du vol libre dépend du taux de diffusion total qui est la somme des différents taux de diffusion (figure 2.3).

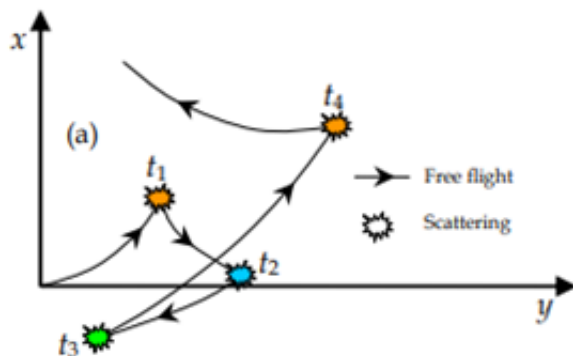


FIGURE 2.3 – Processus du vol libre

Étant donné que le taux de diffusion pour chaque mécanisme de diffusion est une fonction de l'énergie des électrons, le taux de diffusion total est également fonction de l'énergie des électrons. La densité de probabilité par unité de temps $P(\tau)$ pour qu'un électron voyage pendant un temps puis qu'il soit diffusé après ce vol peut s'écrire,

$$P(\tau) = W_T(E_k) \exp \left[- \int_0^\tau W_T(E_k) dt \right] \quad (2.8)$$

Où $W_T(E_k)$ est le taux de diffusion total donné par,

$$W_T(E_k) = \sum_{j=1}^N W_j(E_k) \quad (2.9)$$

l'équation (2.8) est l'équation fondamentale utilisée pour générer le temps de vol libre aléatoire après chaque événement de diffusion, résultant en un processus de marche aléatoire lié à la fonction de distribution de particules sous-jacentes.

Ici l'indice j désigne un mécanisme de diffusion et prend les valeurs $j = 1, 2, 3, \dots, N$ mécanismes de diffusion possibles.

Afin de déterminer le temps de vol en utilisant (2.8), nous devons évaluer τ pour un $P(\tau)/W_T$ donné étant spécifié par un nombre aléatoire r_1 réparti uniformément entre 0 et 1. Cependant, l'intégrale ne peut pas être évaluée analytiquement en raison de la forme compliquée de chaque $W_j(E_k)$. Dans le cas général, où cette simplification n'est pas possible, il convient d'introduire la méthode dite d'auto-diffusion [26], qui aboutit à la simplification de l'équation de sorte qu'elle ne modifie pas le vecteur k de la particule et dans laquelle on introduit un mécanisme de diffusion fictif dont le taux de diffusion s'ajuste toujours de façon que le total est une constante dans le temps. Dans le cas le plus simple, une valeur unique est choisie au début de toute la simulation, en vérifiant que le taux réel ne dépasse jamais cette valeur lors de la simulation. La constante Γ est considérée comme supérieure à la plus grande valeur de $W_T(E_k)$ pour éviter une valeur négative W_0 dans la plage d'énergie d'intérêt, W_0 devient,

$$W_0(E_k) = \Gamma - \sum_{j=1}^N W_j(E_k) \quad \text{or} \quad \Gamma = \sum_{j=0}^N W_j(E_k) \quad (2.10)$$

Le temps de vol peut être déterminé en conséquence en substituant un nombre aléatoire uniforme r_1 sous la forme analytique suivante :

$$\tau = -\frac{\ln(r_1)}{\Gamma} \quad (2.11)$$

Après avoir déterminé le temps de vol libre, il est possible de calculer le processus de vol libre sur la base de l'équation du mouvement. Dès-lors que le vol libre est terminé, l'électron sera à nouveau diffusé par l'un des mécanismes de diffusion, y compris l'auto-diffusion. Le

temps de vol total (la somme de chaque temps de vol) doit être suffisamment long pour que la condition initiale ait peu d'influence sur les résultats finaux.

2.2.2 Calcul de processus de diffusion

Dans le calcul de diffusion, nous sélectionnons d'abord un mécanisme de diffusion par lequel un électron doit être diffusé, puis identifions l'état de l'électron après la diffusion. La sélection d'un mécanisme de diffusion (n) peut être effectuée en utilisant des fonctions définies comme,

$$\Lambda_n(E_{\mathbf{k}}) = \frac{\sum_{i=1}^n W_i(E_{\mathbf{k}})}{\Gamma} \quad \text{pour } n = 1, 2, \dots, N \quad (2.12)$$

qui sont les sommations successives des processus de diffusion normalisées par le biais du paramètre Γ . Γ est identique au paramètre défini par (2.3), et N est le nombre total de mécanismes de diffusion. Un mécanisme de diffusion pour un électron d'énergie E_k est sélectionné en générant un nombre aléatoire r_2 compris entre 0 et 1, et en le comparant à $\Lambda_n(E_{\mathbf{k}})$; ainsi, le n -*ime* mécanisme de diffusion est choisi si la condition donnée par,

$$\Lambda_{n-1}(E_{\mathbf{k}}) < r_2 \leq \Lambda_n(E_{\mathbf{k}}) \quad n = 1, 2, \dots, N \quad (2.13)$$

Étant donné que le calcul de la forme tabulaire $\Lambda_n(E_{\mathbf{k}})$ pour les valeurs discrètes de E_k prend du temps, il est souhaitable de préparer une forme tabulaire $\Lambda_n(E_{\mathbf{k}})$ pour les valeurs discrètes de E_k . Après avoir déterminé le mécanisme de diffusion, on détermine ensuite le vecteur d'onde k' après diffusion. La direction de k' doit être déterminée en fonction de ses composantes dans une coordonnée cartésienne, si la diffusion est isotrope est si l'électron diffusé a la même probabilité d'être dans n'importe quelle direction après diffusion, les composantes (k'_x, k'_y, k'_z) peuvent être trouvées en considérant que la densité de probabilité $p(\phi', \theta') d\phi' d\theta'$ est proportionnelle au nombre d'états disponibles sur une sphère de rayon k' , où ϕ' et θ' sont les angles azimutaux et polaires de k' en fonction de k_z ,

$$\begin{aligned} k'_x &= k' \sin \theta' \cos \phi' \\ k'_y &= k' \sin \theta' \sin \phi' \\ k'_z &= k' \cos \theta' \end{aligned} \quad (2.14)$$

Pour les angles, ϕ et θ ils peuvent être déterminé par un couple de nombres aléatoires uniformes r_3 et r_4 , compris entre 0 et 1.

$$\begin{aligned}\phi' &= 2\pi r_3 \\ \cos \theta' &= 1 - 2r_4\end{aligned}\tag{2.15}$$

On peut calculer que l'angle polaire final pour la diffusion avec les phonons polaires pour les bandes paraboliques dans le système de coordonnées tourné est Pour les processus de diffusion anisotrope, tels que la diffusion des impuretés et la diffusion optique des phonons polaires, l'état final k' est désigné par θ et ϕ , qui sont les angles polaire et azimutal de k' par rapport au vecteur d'onde initial k . L'angle azimutal ϕ peut également être déterminé de manière aléatoire car le taux de transition est indépendant de ϕ ; ainsi ϕ peut être trouvé à partir de où r_3 est un nombre aléatoire uniform compris entre 0 et 1.

$$\phi = 2\pi r_3\tag{2.16}$$

Pour la diffusion des impuretés et la diffusion optique des phonons polaires, l'angle polaire θ est donné par,

$$\cos \theta = 1 - \frac{2r_4}{1 + (1 - r_4) \left(\frac{2k}{qD}\right)^2}\tag{2.17}$$

Lors de la mise à jour de l'orientation du vecteur d'onde électronique k dans (k_x, k_y, k_z) , il est pratique de travailler avec un nouveau référentiel (k'_x, k'_y, k'_z) , dans lequel l'axe k'_z est parallèle à l'axe initial vecteur d'onde k . Le nouveau repère est obtenu par rotation (k_x, k_y, k_z) d'un angle α autour de l'axe k_x puis β autour de l'axe k'_z , par conséquent, on obtient,

$$\begin{pmatrix} k'_x \\ k'_y \\ k'_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{k_y}{\sqrt{k_x^2 + k_y^2}} & \frac{k_x k_z}{k \sqrt{k_x^2 + k_y^2}} & \frac{k_x}{k} \\ \frac{-k_x}{\sqrt{k_x^2 + k_y^2}} & \frac{k_y k_z}{k \sqrt{k_x^2 + k_y^2}} & \frac{k_y}{k} \\ 0 & \frac{-\sqrt{k_x^2 + k_y^2}}{k} & \frac{k_z}{k} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} k' \sin \theta \cos \phi \\ k' \sin \theta \sin \phi \\ k' \cos \theta \end{pmatrix}\tag{2.18}$$

2.2.3 État final après diffusion

Le processus de diffusion lui-même qui termine le vol libre en modifiant l'énergie et la quantité de mouvement finales des particules après la diffusion doit être déterminé. En

conséquence, le type de diffusion qui met fin au vol libre est choisi en utilisant un nombre aléatoire uniforme entre 0 et Γ , en sélectionnant parmi les taux de diffusion totaux relatifs de tous les processus, y compris l'auto-diffusion à l'énergie et à la quantité de mouvement finales de la particule.

2.2.4 Calcul de la vitesse

Si nous accumulons le temps de vol d'un électron dans chaque élément de volume de l'espace k , la vitesse de dérive en présence du champ est donnée par la moyenne d'ensemble de la composante de la vitesse au nième pas de temps comme,

$$v_z(n\Delta t) \cong \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N v_z^j(n\Delta t) \quad (2.19)$$

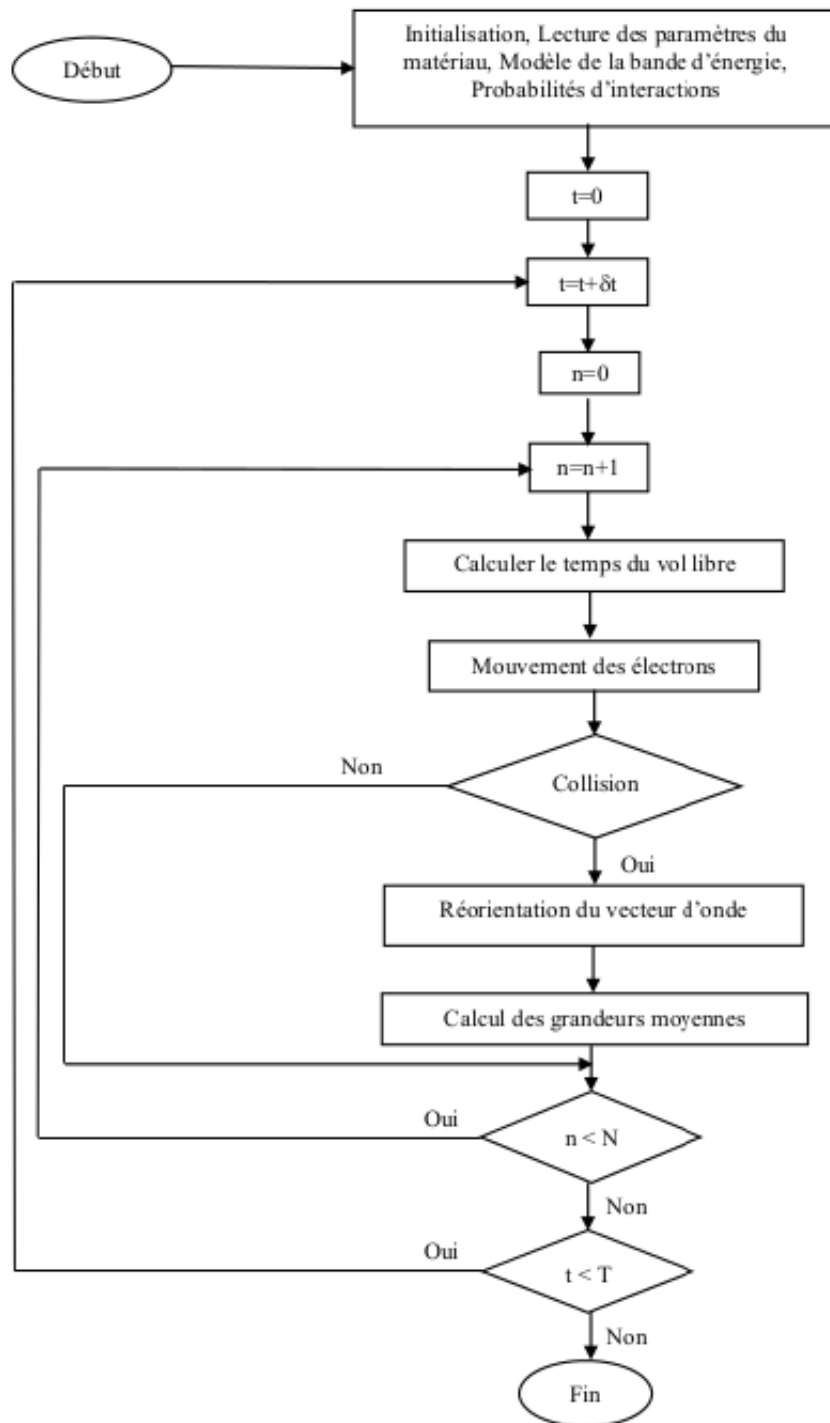


FIGURE 2.4 – Organigramme de Monte Carlo

2.3 Ensemble Monte Carlo auto-cohérente

En ce qui concerne la méthode de Monte Carlo pour la simulation des dispositifs, nous devons définir des conditions aux limites appropriées pour les particules qui atteignent la surface du modèle de dispositif. La géométrie du dispositif à simuler est spécifiée au début de la simulation en le définissant dans un plan $x - y$ comme un ensemble de régions rectangulaires jointes, chacune avec un dopage uniforme et un ensemble de régions de contact. La définition du maillage dépend des détails du dispositif et de la simulation, puisque la résolution du champ électrique est limitée par la taille des mailles.

Pendant la simulation, des particules peuvent être réfléchies à la surface du modèle de dispositif ou peuvent sortir ou entrer dans la zone du modèle de dispositif. L'autre chose à prendre en compte est que le calcul du potentiel doit être effectué de manière auto-cohérente avec la distribution des particules à travers la solution de l'équation de Poisson avec des conditions aux limites appropriées. Le champ associé au potentiel provenant de l'équation de Poisson est la force motrice qui accélère les particules.

2.3.1 Répartition des charges dans le dispositif

La géométrie du dispositif à simuler est spécifiée au début de la simulation en le définissant dans un plan $x - y$ comme un ensemble de régions rectangulaires jointes, chacune avec un dopage uniforme et un ensemble de régions de contact. La solution de l'équation de Poisson est basée sur une méthode aux différences finies qui nécessite que toutes les régions rectangulaires du dispositif soient divisées en réseaux uniformes de mailles bidimensionnelles. Le profil de densité électronique est trouvé en répartissant la charge de chaque superparticule à un point de grille particulier ou à plusieurs points de grille, selon le schéma de répartition. La méthode la plus simple de répartition des charges est la méthode du point de nuage dans la cellule Cloud-In-Cell (CIC) [29]. Lors de l'utilisation de la méthode CIC, la charge de chaque superparticule est attribuée à son point de grille le plus proche. Le schéma CIC traite chaque superparticule comme si elle était un nuage de charge. La charge de chaque porteur est ensuite affectée linéairement à chaque point de grille environnant en fonction de sa position dans la cellule (Figure 2.5).

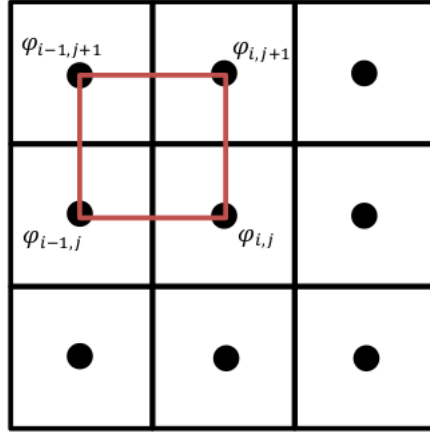


FIGURE 2.5 – Méthode Cloud in cell

2.3.2 Limites de taille de maillage et de pas de temps

Pour que la simulation du dispositif soit stable, nous devons nous assurer qu'un pas de temps et une taille de maillage appropriés sont choisis. C'est une exigence physique que le pas de temps soit plus petit que l'inverse de la fréquence plasma, de sorte que

$$\frac{1}{\Delta t} > \omega_p = \sqrt{\frac{e^2 n}{\epsilon_s m^*}} \quad (2.20)$$

2.3.3 Solution de l'équation de Poisson

En utilisant l'équation de Poisson discrétisée et en entrant le profil de densité de charge et le potentiel appliqué aux frontières, le champ électrique entre chaque point de grille est calculé. L'équation de Poisson à une dimension prend la forme,

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} = -\frac{\rho}{\epsilon_S} \quad (2.21)$$

la formulation exprime le potentiel électrique associé à une distribution connue de charges et la permittivité du vide.

Cela peut être discrétisé pour une utilisation sur un maillage également espacé pour donner,

$$\frac{\varphi_{i-1} - 2\varphi_i + \varphi_{i+1}}{\Delta x^2} = -\frac{\rho_i}{\epsilon_S} \quad (2.22)$$

2.3.4 Calcule de courant

Le courant de sortie de l'appareil peut être déterminé en gardant une trace des charges entrant et sortant de chaque borne de contact, le nombre net de charges sur une période de simulation peut être utilisé pour calculer le courant final. La charge nette traversant une frontière terminale est déterminée par,

$$Q(t) = e (n_{abs}(t) - n_{injec}(t)) + \varepsilon \int E_y(x, t) dy \quad (2.23)$$

n_{abs} est le nombre de particules qui sont absorbées par le contact (sortie)

n_{injec} est le nombre de particules qui ont été injectées au contact

E_y est le champ vertical au contact

Le deuxième terme de l'équation 2.23 du côté droit est utilisé pour tenir compte du courant de déplacement dû au champ changeant au contact. La pente de $Q(t)$ en fonction du temps donne une mesure du courant aux bornes des contacts. En régime permanent, le courant peut être trouvé par

$$I = \frac{dQ(t)}{dt} = \frac{e (n_{net})}{\Delta t} \quad (2.24)$$

où n_{net} est le nombre net de particules sortant du contact sur une période de temps fixe Δt

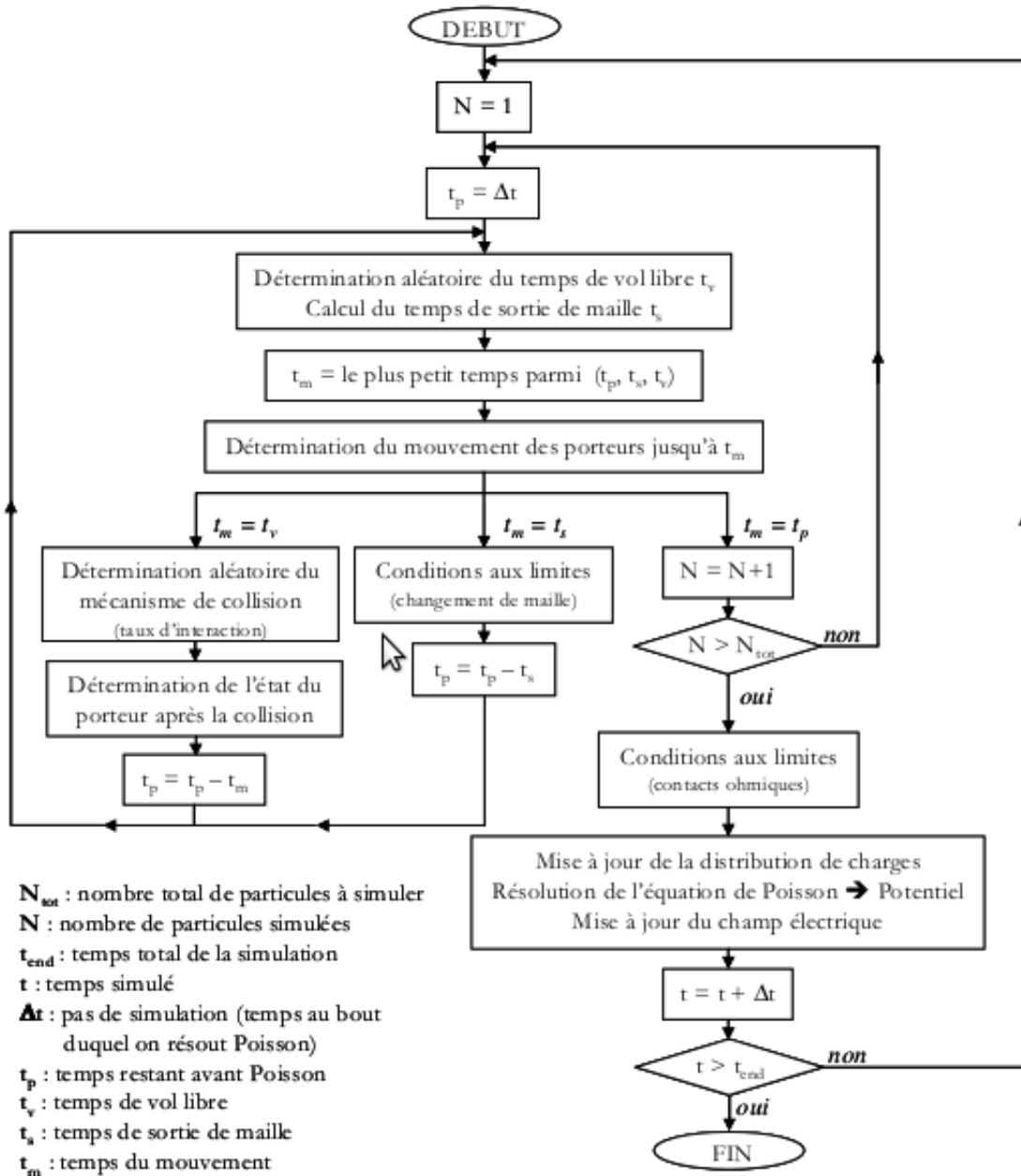


FIGURE 2.6 – Organigramme de Monte Carlo auto-cohérente

Chapitre 3

Résultats et Discussions

3.1 Etude comparative entre ZnO et GaN

Bien que notre travail consiste en une étude sur le MESFET-ZnO, une étude préliminaire sur la nature du transport des électrons dans le ZnO a été examinée. On a identifié les aspects du transport des électrons, en mettant particulièrement l'accent sur la caractéristique vitesse-champ. Les résultats acquis étant analysés et contrastés de manière critique avec ceux du GaN. nous examinons le mouvement de 20.000 électrons dans trois vallées de G, U et K. Les paramètres du matériau et les paramètres de vallée utilisés dans cette simulation sont mentionnés dans le tableau 1 chapitre 1. La température étant fixée à 300 K et la concentration de dopage étant fixée à $10^{17}cm^{-3}$.

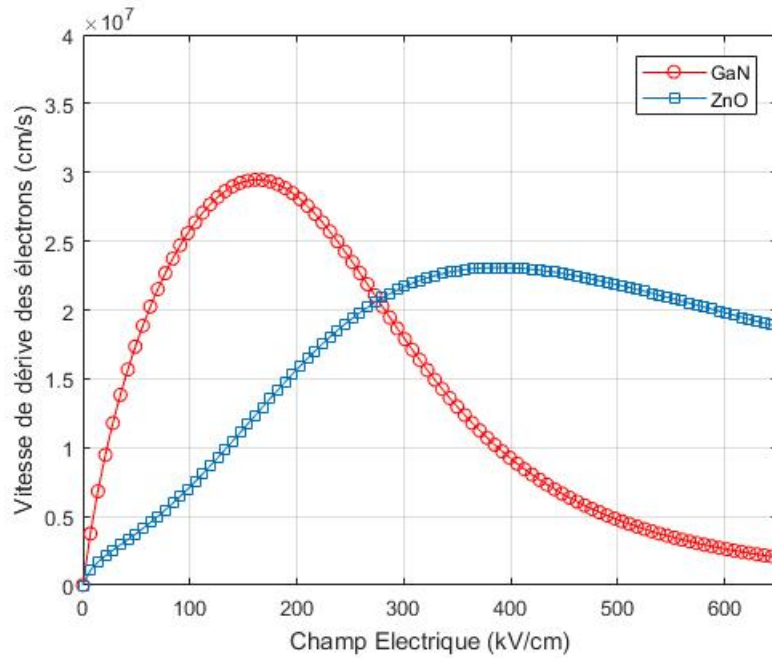


FIGURE 3.1 – Vitesse des électrons en fonction du champ électrique kV/cm

La figure 3.1 présente les vitesses électroniques en fonction de champ électrique obtenues pour le ZnO et GaN à 300 K.

Nos résultats montrent que le champ électrique de seuil du ZnO plus élevé que celui du GaN. De plus, un dépassement important de vitesse dans le ZnO se produit également à des champs électriques plus élevés (supérieure à 270 kV/cm). Il est clair que la vitesse de dérive augmente de façon monotone à mesure que le champ électrique appliqué augmente. De toute évidence, d'après la figure, la vitesse de dérive n'est pas vraiment plate à des champs électriques élevés. Cette caractéristiques présentent un pic et une mobilité différentielle négative (NDM). Le pic de vitesse de dérive pour GaN est d'environ $3 \times 10^7 \text{ cm/s}$ et pour ZnO d'environ $2.3 \times 10^7 \text{ cm/s}$ à des champs seuils de 170 kV/cm et 340 kV/cm, respectivement. Ces vitesses sont similaires à celles de H Arabshahi et al [25] présenté dans le chapitre 1. Pour le GaN, la vitesse est plus élevée pour des champ électrique faible inférieure à la valeur de seuil c.à.d la valeur pour laquelle les électrons ont tendance a mouvoir vers les vallées supérieures, cela peut etre traduit par sa masse effective (0.2) inférieure à celle du ZnO (0.25) dans la vallée centrale.

La vitesse de dérive est décroissante après une valeur de champ de seuil est plus marquée

dans le GaN que pour le ZnO. Ceci peut être traduit par le nombre d'électrons transférés vers les vallées supérieures inférieur à celui du GaN avec un champ de seuil deux fois plus fort que celui du GaN. De plus, Comme la masse effective des électrons dans la vallée latérales est supérieure à celle dans la vallée la plus basse, les électrons dans les vallées supérieures seront plus lents, en conséquence, un comportement de saturation est observés. Un autre point très important observé, c'est le comportement à double pente avant le pic de vitesse pour le cas du ZnO, potentiellement dû à l'apparition de la diffusion optique polaire.

3.2 Effet de température

Il est à noter que les variations de température jouent en effet un rôle important dans la caractéristique de vitesse-champ. La figure 3.2 montre que la vitesse de dérive sous l'influence de différentes valeurs de température. Il est clair que l'élévation de la température de 300K à 600 K réduit la vitesse de dérive. La vitesse diminue avec la même allure, pour tendre vers sa valeur de saturation. En se concentrant sur la vitesse maximale de dérive des électrons elle-même, cette vitesse diminue d'environ $2,2 \times 10^7 \text{ cm/s}$ à 400 K à environ $2,1 \times 10^7 \text{ cm/s}$ à 600 K. L'augmentation de la température induisant une augmentation des vibrations du réseau cristallin engendre une diminution de la vitesse des porteurs en raison de l'augmentation des collisions entre le réseau cristallin et les porteurs.

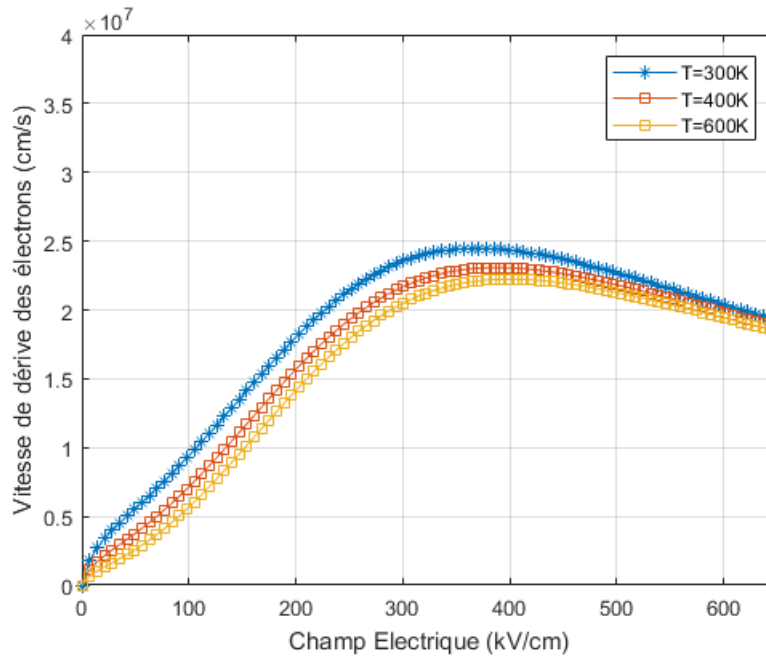


FIGURE 3.2 – Effet de température sur la caractéristique Vitesse-Champ

3.3 Simulation Monte Carlo du MESFET-ZnO

Via la simulation Monte Carlo, on a pu observer divers aspects du transport des porteurs en particulier la vitesse des électrons. Cependant, l'objectif principal de la simulation est censé être de calculer la caractéristique courant-tension I-V du MESFET-ZnO.

Le MESFET peut être décrit simplement par trois régions. La Figure 3.3 présente un schéma du MESFET ZnO modélisé. La géométrie du dispositif à simuler est spécifiée au début de la simulation en le définissant dans un plan de $x-y$ avec $x = 0, 6\mu m$, et $y = 0, 2\mu m$ et des longueurs de source et de drain de $0, 1\mu m$ alors qu'une longueur de grille de $0, 2\mu m$. La source et le drain ont des contacts ohmiques et la grille est en contact Schottky. Les régions de source et de drain sont dopées par des électrons à une concentration électronique de $3 \times 10^{23} m^{-3}$ le canal est dopé à une concentration électronique de $1 \times 10^{23} m^{-3}$. La géométrie du dispositif à simuler est spécifiée comme un ensemble de régions rectangulaires jointes, chacune présentant un dopage uniforme et d'autres paramètres de matériau, ainsi qu'un ensemble de régions de contact.

La structure est illustrée dans la figure 3.3.

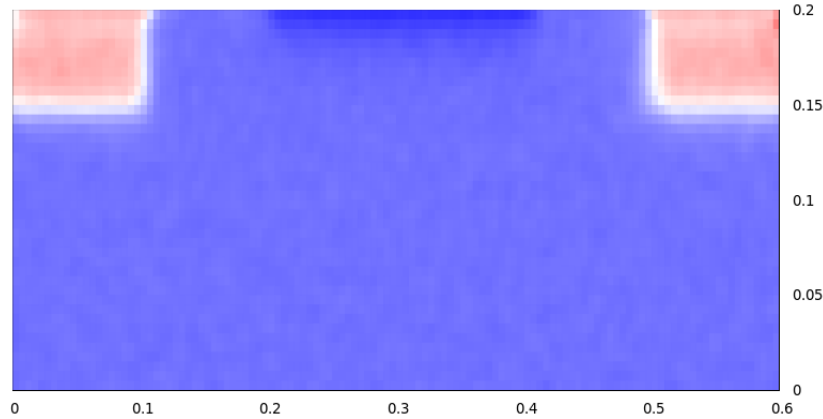


FIGURE 3.3 – Structure du transistor MESFET sans polarisation

Après avoir réglé tous les paramètres du matériau, la simulation est lancée dans un état de neutralité de charge. Les particules simulées sont réparties de manière appropriée entre toutes les mailles pour atteindre la neutralité requise. Nous considérons l'impureté ionisée, le phonon optique polaire, le potentiel de déformation acoustique et la diffusion intervallaire comme mécanismes de diffusion qui peuvent impacter le mouvement des électrons.

A polarisation de grille et de drain nulle, la couche de déplétion sous la grille présente une légère forme symétrique. Une faible région d'appauvrissement observée correspond à celle associée au potentiel intégré de la barrière de Schottky.

La figure 3.4 représente la distribution des électrons dans tout le dispositif pour un potentiel positif $V_{ds} = 80$ est appliqué au drain et un portentiel négative $V_g = -1$. La zone d'appauvrissement est clairement visible, là où la densité électronique est inférieure de à celle près de la source et du drain. Lorsque V_{ds} augmente la zone de charge d'espace devient de forme asymétrique. Le canal est plus resserré à l'extrémité drain ce qui restreint le chemin du courant vers la partie inférieure du canal. Ceci donne à un courant I_{ds} de la source vers le drain.

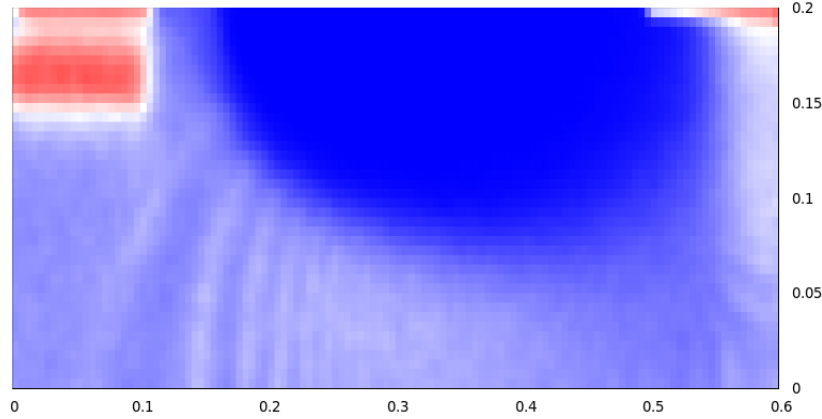


FIGURE 3.4 – Structure du transistor MESFET avec ($V_g=-1$ $V_{ds}=80$)

3.4 Caractéristique Courant-Tension I-V

La figure 3.5 montre la caractéristique Courant-Tension I-V pour différentes polarisation, la tension de grille passant de 1V à 5V par intervalles de 2. e courant de drain est obtenu en comptant le flux de charge net à travers le contact de drain. Un courant de drain de maximum est observé d'environ 450 mA/mm pour $V_{gs} = -1V$.

En comparaison, le MESFET-GaAs les valeurs de tension élevée de drain appliquées au MESFET-ZnO simulé montre que le ZnO est très bon candidat dans les applications haute puissance. Nos résultats montrent que la tension pour laquelle on observe un comportement de saturation du ZnO (20V) est plus élevé que celui du GaAs (1V) (figure 3.6). Les caractéristiques simulées à 300 K montrent approximativement un comportement de saturation avec une tension de drain supérieure à 20 V en raison au transfert d'électrons vers les vallées supérieures ou la masse effective devient plus faible. Autrement dit, a mesure que la tension drain-source augmente, le champ à l'extrémité drain augmente et se rapproche de la valeur à laquelle la vitesse des électrons se sature. Au-delà de cette valeur, qui correspond à la tension de seuil dans les caractéristiques courant-tension de drain, une augmentation supplémentaire de la tension drain-source n'augmente pas sensiblement le courant drain-source. La forte densité de courant de drain est encourageante pour l'utilisation du ZnO pour les applications de forte puissance. Il est également clair que le composant n'est pas complètement pincé, même avec une forte polarisation de grille négative ($V_{gs} = 5V$), ce qui est dû à une forte injection d'électrons dans la couche canal sous des champs électriques élevés.

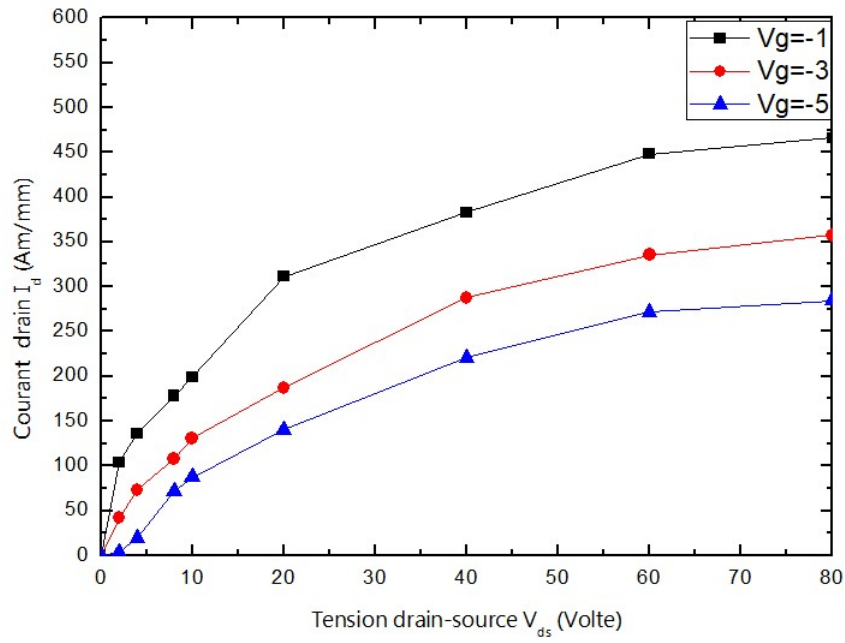


FIGURE 3.5 – Caractéristique Courant-Tension I-V ZnO

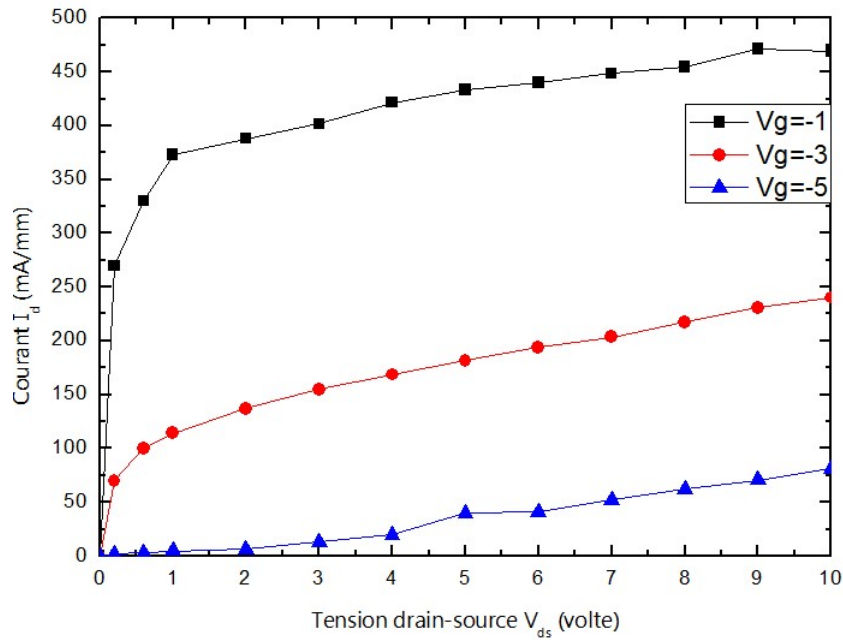


FIGURE 3.6 – Caractéristique Courant-Tension I-V GaAs

3.5 L'effet thermique sur la caractéristique I-V

La figure 3.7 montre la caractéristique tension-courant (I-V) de MESFET-ZnO en considérant l'effet thermique. Il est clair que l'allure générale de la caractéristique I-V simulées est similaire mais réduite. En comparant les courbes, on constate que le courant de drain est légèrement plus faible à température plus élevée. Ceci est dû à une diminution de la caractéristique vitesse-champ où le transport des électrons est dominé par la diffusion avec des phonons. L'augmentation de la température apporte un gain plus important en énergie cinétique aux électrons, qui vont se mouvoir plus et entrer en collisions avec les atomes avoisinants en leur transférant les énergies acquises ce qui a pour conséquence de diminuer de manière notable les performances hyperfréquences des composants.

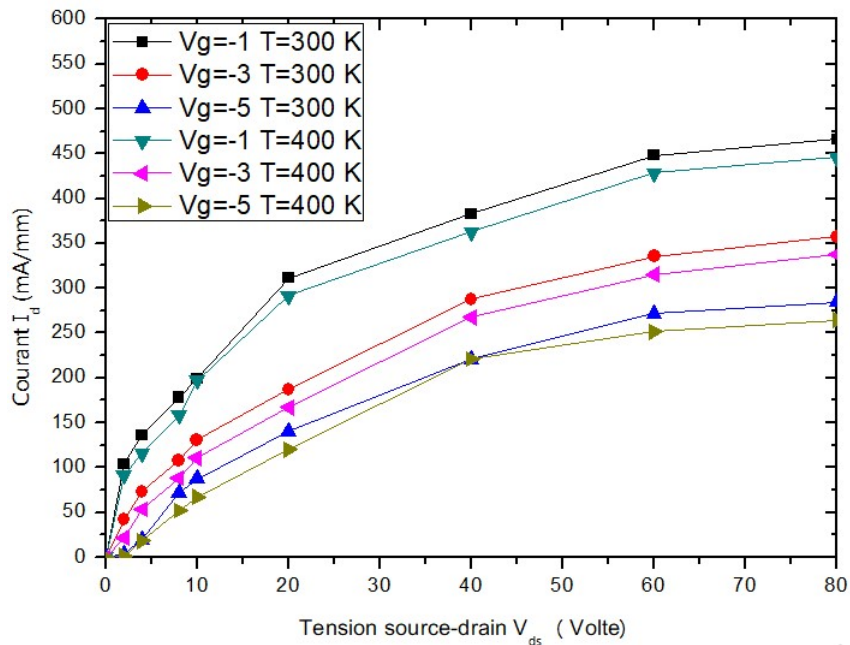


FIGURE 3.7 – Caractéristique Courant-Tension I-V du MSFET ZnO sous l'influence de température

3.6 Conclusion

La simulation Monte Carlo a été utilisée pour modéliser le transport d'électrons dans un transistor à effet de champ métal-semiconducteur ZnO. Nos résultats de simulation montrent que, grâce à la forte densité de courant de drain, les dispositifs ZnO peuvent s'attendre à des performances supérieures en termes de puissance et des tensions élevés. Ces résultats illustrent également les avantages du MESFET-ZnO pour les performances à haute fréquence. En revanche, ont résultat ont montré que pour des températures supérieures à 300 K, une réduction du courant de drain a été observée et, par conséquent, la puissance de sortie du MESFET ZnO est réduite ou le courant de drain de sortie à haute température est limité par une forte diffusion des phonons.

Conclusion et perspectives

L'objectif principal du travail était la modélisation semi-classique pour analyser le comportement dynamique des particules au sein d'un transistor MESFET à base de ZnO. Les résultats correspondant au GaAs et GaN ont été également présentés, mais principalement pour la comparaison.

Les calculs sur le ZnO massif ont été effectués afin de fournir des informations sur la vitesse de dérive des électrons en fonction du champ électrique, ce qui est une considération fondamentale pour bien cibler les premiers objectifs.

En effet, Dans un sens, les résultats de la littérature ont joué un rôle primordial dans le déroulement de ce travail. En l'occurrence, une comparaison critique, avec d'autres résultats a été également présentée. Les géométries et le dopage simulés du dispositif sont adaptés au plus près des structures expérimentales, et le courant de drain prédit du dispositif simulé, présentent une concordance bien plus étroite avec les données de la littérature disponibles.

Nos résultats de simulation montrent que, grâce à la forte densité de courant de drain, le MESFET-ZnO peut s'attendre à des performances supérieures en termes de puissance et des tensions élevés. Ces résultats illustrent également les avantages du MESFET-ZnO pour les performances à haute fréquence.

De toute évidence, les semi-conducteurs à large bande interdite comme le ZnO présente des concentrations intrinsèques en porteurs bien inférieures à celles du GaAs à haute température. Cela implique que les dispositifs destinés aux températures plus élevées doivent être fabriqués avec afin d'éviter les effets des porteurs générés thermiquement. En revanche, les résultats ont montré que pour des températures supérieures à 300 K, une réduction du courant de drain a été observée et, par conséquent, une puissance de sortie réduite ou le courant de drain de sortie à haute température est limité par une forte diffusion des phonons.

Enfin, la simulation Monte Carlo permet de tester la validité des approximations théoriques en comparaison quantitative avec des données expérimentales.

Bibliographie

- [1] H. Morkoc and U. Ozgur, Zinc Oxide : Fundamentals, Materials and Device Technology, Wiley-VCH, (2009)
- [2] G. H. Hamed, F. M. Nejad , and K. Oveisi , Materials and Structures 49 , 4483, (2016)
<https://doi.org/10.1617/s11527-016-0802-z>.
- [3] C. Zhou et al, ECS J. Solid State Sci. Technol. 6, Q149(2017).
<https://doi.org/10.1149/2.0101712jss>
- [4] PD. Gutiérrez et al, Materials 16, 1526 (2023). <https://doi.org/10.3390/ma16041526>
- [5] P.Mishra, R.Patel, B.Hussain, J.Stansell, B.Kucukgok, M. Y.Raja, N.Lu, and I. T.Ferguson, 2014 11th Annual High Capacity Optical Networks and Emerging/Enabling Technologies (Photonics for Energy), Charlotte, NC, USA (IEEE, 15–17 Dec., 2014), pp. 67–70.
- [6] J. E.Nause , E. A. Burgett, N. E. Hertel, and I. Ferguson, “Thin film doped ZnO neutron detector,” U.S. patent 2013/0,075,718 A1.
- [7] Y. Heo, D.Norton, L.Tien, Y.Kwon, B.Kang, F.Ren, and S.Pearton, Mater. Sci. Eng. R47, 1(2004). <https://doi.org/10.1016/j.mser.2004.09.001>
- [8] Zamfirescu, M., Kavokin, A., Gil, B., Malpuech, G. and Kaliteevski, M. ZnO as a material mostly adapted for the realization of room-temperature polariton lasers. Physical Review B : Condensed Matter, 65, 161205 (2002).
- [9] Scharrer, M., Yamilov, A., Wu, X., Cao, H. and Chang, R.P.H. Ultraviolet lasing in high-order bands of three dimensional ZnO photonic crystals. Applied Physics Letters, 88, 201103 (2006).

- [10] Hofstetter, D., Bonetti, Y., Giorgetta, F.R., El-Chaer, A.-H., Bakin, A., Waag, A., Schmidt-Grund, R., Schubert, M. and Grundmann, M. Demonstration of an ultraviolet ZnO-based optically pumped third order distributed feedback laser. *Applied Physics Letters*, 91, 111108 (2007).
- [11] Yano, M., Koike, K., Sasa, S. and Inoue, M. ZnO/ZnMgO heterojunction FETs, in *Zinc Oxide Bulk, Thin Films and Nanostructures : Processing, Properties and Applications* (eds C. Jagadish and S.J. Pearton), Elsevier, Oxford (2006).
- [12] Electron transport simulation in bulk wurtzite ZnO and its n b -n-n b diode, compared with GaN
- [13] . Masuda, S., Kitamura, K., Okumura, Y., Miyatake, S., Tabata, H. and Kawai, T. Transparent thin film transistors using ZnO as an active channel layer and their electrical properties. *Journal of Applied Physics*, 93, 1624 (2003).
- [14] . Masuda, S., Kitamura, K., Okumura, Y., Miyatake, S., Tabata, H. and Kawai, T. Transparent thin film transistors using ZnO as an active channel layer and their electrical properties. *Journal of Applied Physics*, 93, 1624 (2003).
- [15] . Hoffman, R.L., Norris, B.J. and Wager, J.F. ZnO-based transparent thin-film transistors. *Applied Physics Letters*, 82, 733 (2003).
- [16] . ao, C.J., Kwon, Yong Wook, Heo, Y.W., Norton, D.P., Pearton, S.J., Ren, F. and Chi, G.C. Comparison of ZnO metal- oxide-semiconductor field effect transistor and metal-semiconductor field effect transistor structures grown on sapphire by pulsed laser deposition. *Journal of Vacuum Science Technology B*, 23, 1024 (2005).
- [17] . M. H.Kane, K.Shalini, C. J.Summers, R.Varatharajan, J.Nause, C. R.Vestal, Z. J.Zhang, and I. T.Ferguson, *J. Appl. Phys.*97, 23906 (2005).
<https://doi.org/10.1063/1.1830084>
- [18] C. Jacoboni, L. Reggiani, *The Monte-Carlo method for the solution of charge transport in semiconductors with applications to covalent materials*, *Reviews of Modern Physics* , vol. 55, n 3, p. 645-705, (1983).

- [19] M. V. Fischetti, S. E. Laux, *Monte Carlo analysis of electron transport in small semiconductor devices including band-structure and space charge effects*, Physical Review B , vol. 38, n 14, p. 9721-9745, (1988).
- [20] H. Kosina, M. Nedjalkov, S. Selberherr, *the Monte Carlo method for semiconductor device simulation*, IEEE Transactions on Electron Devices , vol. 47, n 10, p. 1898-1908, (2000).
- [21] B.R. Nag, *Electron Transport in Compound Semiconductors* Springer-Verlag, Berlin, (1980).
- [22] M. Shur, *Physics of Semiconductor Devices* Prentice-Hall, Englewood Cliffs, (1990).
- [23] J. P. McKelvey, *Solid State and Semiconductor Physics* Krieger Publishing Company, Melbourne, FL, (1982).
- [24] M. Lundstrom, *Fundamentals of Carrier Transport* Cambridge University Press, Cambridge, U.K., (2000).
- [25] D. K. Ferry, *Semi-conducteur Transport* Taylor Francis, London, U.K., 2000.
- [26] J. M. Ziman, *Electrons and Phonons : The Theory of Transport Phenomena in Solids* Oxford University Press, New York, (2001).
- [27] N.W. Ashcroft, N.D. Mermin, *Solid State Physics* Saunders College, Philadelphia, (1976).
- [28] C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics*, 8th edn. Wiley, New York, (2005).
- [29] L. I. Schiff, *Quantum Mec*Toutes les grandeurs physiques sont Nous considérons l'impureté ionisée, le phonon optique polaire, le potentiel de déformation acoustique et la diffusion intervallaire comme mécanismes de diffusion.hanics McGraw-Hill Inc., New York, 1955.
- [30] Vasileska, D. Goodnick, Stephen Klimeck, Gerhard, *Computational Electronics : Semiclassical and Quantum Device Modeling and Simulation* CRC Press, (2010).
- [31] K. Tomizawa, *Numerical Simulation of Submicron Semiconductor Devices*,(1993).
- [32] M. H. Kalos and P. A. Whitlock, *Monte Carlo Methods* Wiley, New York, (1986).
- [33] C. Jacoboni and P. Lugli, *The Monte Carlo Method for Semiconductor Device Simulation* Springer-Verlag, Vienna, Austria, (1989).

- [34] K. Hess, *Monte Carlo Device Simulation* Kluwer Academic Publishing, Boston, MA, (1991).
- [35] P. Lugli, *The Monte Carlo method for semiconductor device and process modeling*, IEEE Trans. Comput. Des. Integr. Circuits Syst., vol. 9, no. 11, (1990).
- [36] R. M. Yorston, *Free-flight time generation in the Monte Carlo simulation of carrier transport in semiconductors*, J. Comput. Phys., 64, 177 (1986).
- [37] R. W. Hockney and J. W. Eastwood, *Computer Simulation Using Particles*, Institute of Physics Publishing, Bristol, U.K., (1988=.
- [38] S. Laux, *On particle-mesh coupling in Monte Carlo semiconductor device simulation*, IEEE Trans. Comput. Des., vol. 15, no. 10, (1996).
- [39] T. Gonzalez and D. Pardo, *Physical models of ohmic contact for Monte Carlo device simulation*, Solid State Electron., 39, 555 (1996).
- [40] Allen MW, Swartz CH, Myers TH, Veal TD, Durbin SM (2010). Bulk transport measurements in ZnO : The effect of surface electron layers. Phys. Rev., 81 : 075211.
- [41] Arabshahi H, Benam MR, Salahi B (2007). A Shock-Capturing Upwind Discretization Method For Characterization of SiC MESFETs. Mod.Phys. Lett. B., 21 : 1715.
- [42] Arabshahi H (2007). Monte Carlo Modeling of Hot Electron Transport in Bulk AlAs, AlGaAs and GaAs at Room Temperature. Mod. Phys. Lett. B., 21 : 199.
- [43] Cameron DC, Irving LD, Whitehouse CR (1983). Comparison of High and Low Field Electron Transport in AlGaN, AlN and GaN. Thin Solid Films, pp. 103-161.
- [44] Cameron DC, Irving LD, Whitehouse CR (1982). Comparison of Low Field Electron Transport in ZnO and GaN Structures for High-Power and high Temperature Device Modelling, Electron. Lett., pp. 18-534.
- [45] Foutz BE, Eastman LF, Bhapkar UV, Shur M (1997). Discretization Method of Hydrodynamic for simulation of ZnO MESFETs. Appl. Phys. Lett., 70 : 2849.
- [46] Grundmann M, Frenzel H, Lajn A, Lorenz M, Schein F, Wenckstern H (2010). Transparent semiconducting oxides : Materials and devices. Physica Status Solidi (a), 207 : 1269.

- [47] Nemeč H, Rochford, J, Taratula O, Sundstrom (2010). Influence of the Electron-Cation Interaction on Electron Mobility in DyeSensitized ZnO and TiO₂ Nanocrystals : A Study Using Ultrafast Terahertz Spectroscopy. *Phys. Rev. Lett.*, 104 : 197401.
- [48] G.C. Turner, Zinc Oxide MESFET Transistors, MSc. Thesis, University of Canterbury, Christchurch, New Zealand 2009.