

INTRODUCTION

On est plus dans un monde primitif, tout a évolué autour de nous. Surtout, après l'invention de la machine magique qui est l'ordinateur. Tout ce qui a été impossible avant son invention devient non seulement possible, mais en plus facile, désormais. D'autre part La modélisation et la simulation sont devenues aujourd'hui un outil de base pour le calcul des propriétés structurales et dynamiques des systèmes les plus complexes. Ils sont aussi un outil de choix pour la prédiction des propriétés de nouveaux matériaux. A cet effet, plusieurs *techniques numériques* de résolution des équations données ont été mises au point. La méthode de Monte Carlo est une des techniques de simulation, offrant la possibilité de reproduire fidèlement les divers phénomènes microscopiques résidant dans les matériaux semi-conducteurs. Dans cette partie nous présentons le principe de la simulation de Monte Carlo, ainsi que les différents paramètres mis en œuvre dans son application.

Le nom de Monte Carlo fait référence à la ville de la principauté de Monaco célèbre par ses casinos. En effet l'élément essentiel des jeux de la chance dans ce genre d'établissement est la roulette qui n'est rien d'autre qu'un générateur de nombres aléatoires. La première utilisation de la méthode Monte Carlo dans la recherche scientifique remonte au projet Manhattan pour simuler la diffusion des neutrons dans le matériau fissile. Il semble impossible pour un ordinateur régi par des lois déterministes et conçu par l'esprit humain de générer des nombres vraiment aléatoires. Malgré cela, des algorithmes pratiques d'ordinateurs "générateurs de nombres aléatoires" sont largement utilisés [9].

On outre le nom de la méthode de Monte Carlo est habituellement donné aux techniques stochastiques qui emploient la génération de nombre aléatoire. Dans le cas du transport des particules, la méthode de Monte Carlo est employée pour résoudre directement l'équation de Boltzmann. Les distributions appropriées de probabilité pour les paramètres impliqués sont obtenues à partir des suites de nombres aléatoires uniformes. Ceci est réalisé par les expériences numériques qui simulent le mouvement réel des particules à l'intérieur d'un semi-conducteur. En général, une approche semi classique est adoptée, selon les approximations suivantes:

- Des particules sont simulées comme des points classiques, caractérisés par la position et la quantité de mouvement.
- Le mouvement des particules est décrit comme série de vols libres interrompus en collisions. La trajectoire et les variations sont calculées en utilisant la mécanique classique [7].

La particularité de la méthode de Monte Carlo est de pouvoir obtenir les états des porteurs après les chocs en utilisant un procédé à base de tirage d'un nombre aléatoire ; d'autre part la connaissance des densités de probabilités correspondante aux interactions aux quelles sont soumis les porteurs.

III.1- Principe de la méthode

L'idée de base de la méthode consiste en la simulation du mouvement dans le temps d'un ou plusieurs porteurs par la génération dans l'espace des vecteurs d'onde des points représentatifs de ces porteurs, tenant compte de :

- a) l'accélération due aux forces appliquées aux porteurs

$$\frac{\partial \vec{K}}{\partial t} = \frac{q\vec{E}}{\hbar} \quad (3.1)$$

La connaissance de la bande d'énergie $\varepsilon(\vec{K}) = \frac{\hbar^2 K^2}{2m^*}$ permettant de calculer à chaque instant l'énergie du porteur.

- b) des collisions subies par ces porteurs induisant des transitions brutales entre les états.

Connaissant l'histoire dans l'espace des vecteurs d'onde \vec{K} , il est possible de se replacer dans l'espace géométrique réel quand on connaît la structure de bande d'énergie $\varepsilon(\vec{K})$ permettant de calculer la vitesse des porteurs à chaque instant, par la relation suivante :

$$\vec{v} = \frac{\partial \varepsilon}{\hbar \partial \vec{K}} \quad (3.2)$$

Par intégration, cette dernière équation donne la position du porteur au cours du temps.

Il est possible d'accéder à toutes les grandeurs moyennes ; énergie moyenne, vitesse de dérive...

Celles-ci peuvent être déduites de deux façons différentes : soit par l'observation d'un grand nombre de particules permettant de calcul de moyennes d'ensemble (cette définition est utile quand les conditions d'étude changent dans le temps), soit par observation d'un seul électron pendant une durée suffisamment grande. Le principe d'ergodisme stipule que pour un système en état stationnaire les deux manières de calculer les moyennes doivent aboutir aux mêmes résultats. L'histoire de chaque électron sera constituée par une suite de vols libres effectués sous l'influence de la force externe, puis des chocs sur les différents obstacles présentés par le milieu où évolue le porteur.

L'intérêt des méthodes de Monte Carlo est de pouvoir obtenir à la fois la durée de vol libre et les états du porteur après les chocs en utilisant un procédé basé d'une part sur le tirage de nombres aléatoires et d'autre part sur la connaissance des densités de probabilité correspondant aux interactions auxquelles est soumis le porteur.

Un des principaux avantages des méthodes de Monte Carlo est leur souplesse d'utilisation. Une fois le processus élémentaire de simulation mis au point les conditions d'utilisation de celui-ci peuvent être pratiquement variées à l'infini.

L'application la plus simple que l'on puisse imaginer est l'étude de la dynamique électronique dans un matériau supposé infini et homogène soumis à des conditions stationnaires en fonction du temps. La mise en œuvre de la méthode ne peut guère être limitée que par l'incertitude où l'on est concernant les caractéristiques du matériau étudié, mais ceci est commun à tout mode d'étude quel qu'il soit, Monte Carlo ou autre[9]. La situation peut se compliquer singulièrement quand le matériau étudié est inhomogène ou lorsque le champ appliqué n'est plus constant dans le temps ni uniforme dans l'espace. Dans le cas où les concepts habituels de bande d'énergie, de collisions instantanées restent valides, la méthode de Monte Carlo montre sa supériorité lorsque les phénomènes se compliquent quelque peu,

parce qu'elle permet de tenir compte facilement des non stationnarités spatiales ou temporelles que l'on veut étudier. Nous pensons que l'on peut insister sur le fait que cette méthode est actuellement la seule susceptible d'étudier les manifestations des porteurs chauds quelque soient les régimes de champ appliqué en effet de volume ou dans des composants. Elle tient compte de façon complète des formes de bandes d'énergie même complexes c'est le cas particulier de notre étude des alliages binaires et de tous les détails de la dynamique microscopique avec des hypothèses simplificatrices réduite au minimum.

En contre partie, la méthode de Monte Carlo est entachée d'erreur statistique voir figure (III.1). Comme pour tout phénomène stochastique on peut améliorer la précision en augmentant la durée d'observation t . Malheureusement l'amélioration de l'erreur n'évolue qu'en $(1/\sqrt{t})$, et ceci peut être une gêne importante quand on étudie des comportements fins : estimation d'une mobilité différentielle négative ou vitesse de pic en fonction de certaine paramètre (température ou dopage du matériau, par exemple) nécessite un soin particulier en absence d'une relation analytique. Il découle que cette méthode nécessite parfois des moyens de calcul importants.

La mise en œuvre des principes rappelés plus haut a été effectuée de deux façons différentes. La plus ancienne est due à Kurosawa [10] et a été reprise et considérablement améliorée par Rees, Fawcett et Price [11.12.13.14]. Elle a, par la suite connu un grand succès et a été appliquée à de nombreux matériaux.

III.2-Mouvement des électrons :

L'application du champ de force change le mouvement de l'électron par

$$K(t) = K(0) - e(V \times B + E)t/\hbar \quad (3.3)$$

Où E , vecteur de champ électrique, le signe moins est dus au faite que l'électron se déplace au sens opposé du champ appliqué et le mécanisme d'interaction agis aussi sur le mouvement des électrons.

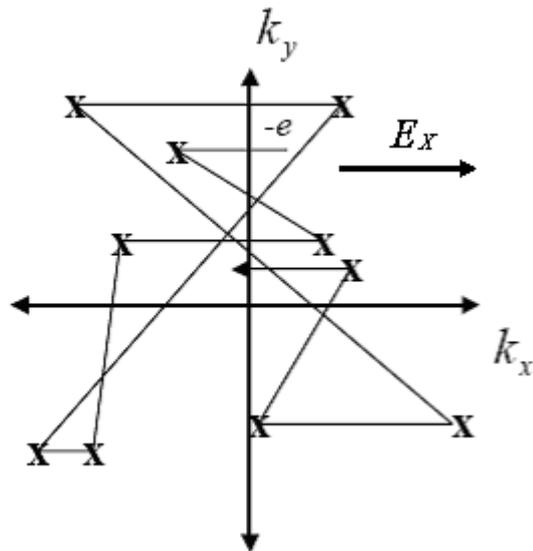


Figure (III.1) Mouvement d'électron dans l'espace K

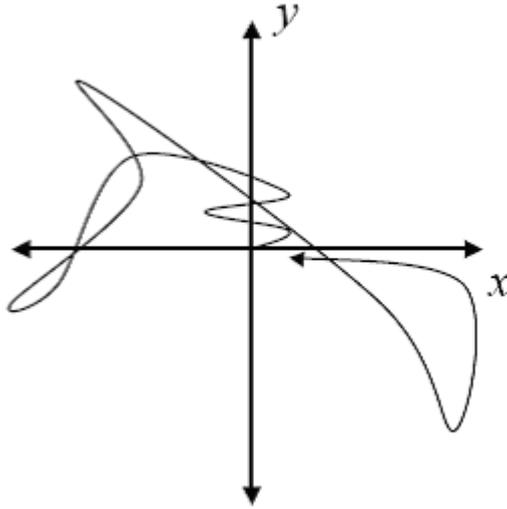


Figure (III.2) Mouvement d'électron dans l'espace réel

III.3- Les différents éléments de la simulation :

Nous voulons déterminer la probabilité qu'un porteur effectue un vol libre de durée quelconque Δt sachant qu'il est soumis à un champ électrique \vec{E} et à N processus de collision de types quelconques. La relation entre champ et vecteur d'onde est donnée par le principe de la dynamique $\frac{\partial \vec{K}}{\partial t} = \frac{q\vec{E}}{\hbar}$ et nous noterons par $\Gamma(\vec{K})$ la probabilité par unité de temps que le porteur ayant le vecteur d'onde \vec{K} subisse une collision de type quelconque l'amenant dans un autre état \vec{K}' différent de \vec{K} . On a évidemment par définition

$$\Gamma(\vec{K}) = \int d^3 K' \sum_{q=1, \dots, N} S_q(\vec{K}, \vec{K}') \quad (3.4)$$

Supposons qu'à l'instant $t = 0$, le porteur est dans l'état décrit par \vec{K} .

La probabilité $P(t)$ que le porteur effectue un vol libre de durée supérieure à t est le produit de deux probabilités statistiquement indépendantes. L'une est la probabilité que le porteur effectue un vol libre de durée supérieure à $(t - dt)$ et l'autre de durée dt . Ces derniers valent :

$$1 - \Gamma(\vec{K}(t-dt))dt \quad (3.5)$$

Ainsi

$$P(t) = P(t-dt) [1 - \Gamma(\vec{K}(t-dt))dt] \quad (3.6)$$

Faisant tendre dt vers 0 on trouve

$$\frac{dP}{dt} = -\Gamma[\vec{K}(t)]P(t) \quad (3.7)$$

Ce qui une fois intégré donne

$$P_n(t) = \exp \left\{ -\int_0^t \Gamma(\vec{K}(t')) dt' \right\} \quad (3.8)$$

La probabilité que le même électron aura une interaction pendant la même période de temps dt , après le temps initial peut s'écrire :

$$P(t)dt = \Gamma(K(t)) \exp \left\{ -\int_0^t \Gamma(K(t')) dt' \right\} dt \quad (3.9)$$

Il est nécessaire de résoudre cette équation afin de générer la distribution du temps libre pour ces particules.

Pour cela nous allons utiliser La méthode de **Rees [11]** c'est-à-dire a technique de self scattering.

III.4- La méthode de Monte Carlo utilisant les collisions fictives (self scattering) :

En effet les événements de vol libre et de choc sont supposés statiquement indépendants. C'est la probabilité (3.9) qui donnera les durées de vol libre qui seront effectivement suivies d'un choc. La procédure adoptée initialement par **Kurosawa [10]** pour déterminer les temps de libre parcours étant de tirer des nombres r à distribution uniforme 0 et 1 et de résoudre l'équation intégrale suivante

$$r = \int_0^t P(t) dt \quad (3.10)$$

Malheureusement dans le cas général l'expression de (3.9) est assez complexe et l'équation (3.10) n'est pas intégrable analytiquement. Pour simplifier l'expression de (3.9), Rees [11] a suggéré d'ajouter à l'ensemble des mécanismes de collisions entrant en jeu un processus d'interaction qui ne modifie pas l'état du système lorsqu'on le fait intervenir, c'est ce qu'on appelle le processus de collision fictive (self scattering)

dont par unité de temps la probabilité vaut

$$P(t) = \Gamma \exp\left(-\frac{t}{\tau_0}\right)$$

si r est un nombre aléatoire à distribution uniforme entre 0 et 1 on aura

$$t_r = -\frac{1}{\Gamma} \ln(1-r) = -\frac{1}{\Gamma} \ln(r)$$

L'avantage de cette procédure est de choisir la valeur Γ de manière à minimiser le nombre de collisions fictives puisque ces collisions ne jouent aucun rôle sur la trajectoire de l'électron dans l'espace des phases.

La suite des valeurs instantanées enregistrée durant la simulation par cette méthode constitue une histoire irrégulièrement échantillonnée dans le temps. De celle-ci, il est

toujours possible de tirer un échantillonnage régulier lorsque le champ de force appliqué est indépendant du temps. Lorsque ceci n'est pas le cas, le champ pouvant dépendre du temps ou de la position dans l'espace réel, la mise en œuvre est un peu plus délicate.

Il faut signaler que cette première méthode a été utilisée par de nombreux auteurs pour étudier plusieurs matériaux. En particulier, elle a été détaillée par Fawcett, Boardman et Swain[12.15] dans l'étude du GaAs ; elle est décrite aussi sur un plan un peu général par Albengi Quaranta, Jacoboni et Ottaviani en ce qui concerne l'étude des composés III-V et II-VI [16].

III.5- Procédure et choix d'interaction

Plus récemment cette méthode a été utilisée en champ statique et variable, en particulier pour tenir compte de la nouvelle bande entre deux collisions successives. A chaque instant $t_n = n\delta t$, la probabilité $\lambda[\vec{k}(t_n)]$ pour que le porteur subisse une collision sera connue et pourra être utilisée pour déterminer par tirage au sort si une collision a effectivement eu lieu ou non à la fin du δt considéré. Dans ce but on compare la quantité $\lambda[\vec{k}(t_n)]\delta t$ à un nombre r tiré au hasard dans une distribution uniforme entre 0 et 1. Ce nombre r sert aussi au choix de l'interaction qui aura effectivement lieu dans le cas où le test est positif (figure III. 3).

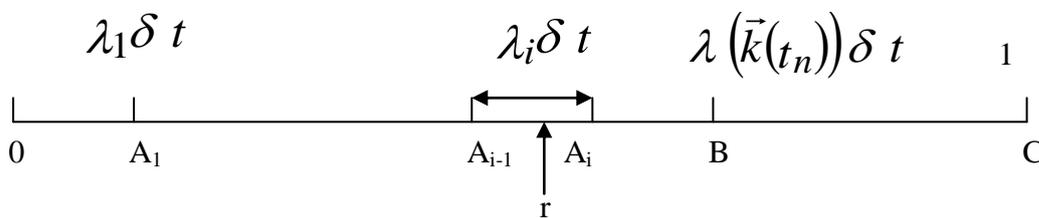


Fig (III. 3). Le schéma indique la procédure de choix de l'interaction. Quand r se situe entre les points A_{i-1} et A_i le $i^{\text{ème}}$ type d'interaction a lieu [17].

Le segment BC représente la probabilité qu'il ne se passe rien après le pas δt

Dans le cas où une collision aurait effectivement lieu, la procédure de choix du vecteur d'onde après choc est en tout point identique à celle décrite précédemment. Le porteur continue ensuite pour le δt suivant.

La première constatation est que les libres parcours vécus par le porteur sont nécessairement constitués d'un nombre aléatoire de pas δt . Plus le δt est petit plus la valeur approchée de la durée de parcours sera bonne (figure 3.4).

Il en résulte que δt doit être beaucoup plus petit que le plus court des libres parcours. Cette condition garantit également que la quantité $p[\vec{k}(t_n)] \delta t$ ne peut jamais être plus grande que 1. De plus, le tirage de r se fait selon une distribution uniforme, le fait de tirer l' i ème interaction ne dépend pas de l'ordre dans lequel on a effectué ces interactions ; le résultat de test ne dépend que de la largeur $p_i(\vec{k}) \delta t$ du segment correspondant, soit en pratique de l'énergie du porteur au moment considéré.

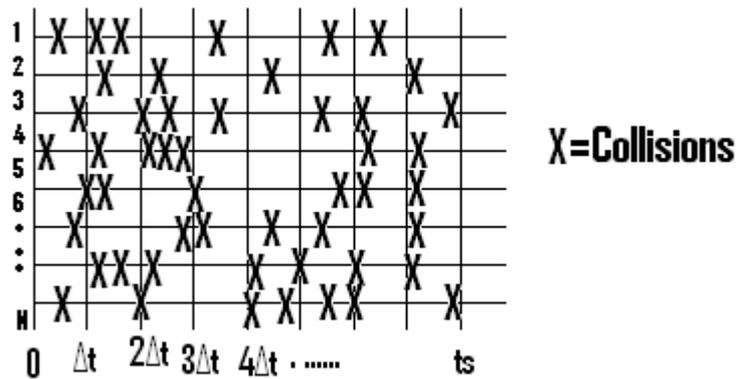


Figure III.4 : Echelle d'intervalle de temps de la simulation de Monte Carlo

III-6 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 [9].

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 λ 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}' :

$$\lambda(\vec{K}) = \int_{\vec{K}'} S(\vec{K}, \vec{K}') d^3 K' \quad (3-11)$$

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 β qui les sépare. Dans les semi-conducteurs III-V comme InSb, les vallées Γ sont isotropes et le module de \vec{K} est relié de façon biunivoque à l'énergie ε (mesurée par rapport au bas de la vallée dans laquelle se trouve l'électron) :

$$\frac{\hbar^2 \cdot K^2}{2m^*} = \varepsilon(1 + \alpha \varepsilon) \quad (3-12)$$

On peut donc exprimer les densités de probabilité S en fonction des énergies ε et ε' de l'angle β .

III-6-1- interactions électrons – phonons :

Dans ce paragraphe, nous donnerons les expressions des probabilités d'interaction pour différents processus envisageables.

III-6-1-1 interaction acoustique :

Les interactions acoustiques 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 [10]. Elle est presque inexistante en vallée centrale, possède une probabilité assez forte en vallée latérale ; de plus, la distribution de l'angle β de déviation est quasi-uniforme.

L'angle de déviation β après interaction est tiré avec une distribution uniforme entre $[0, \pi]$, Cette interaction est très faible en vallée Γ et ses effets sont souvent masqués par ceux de la multitude d'interactions inter vallées qui prédominent en vallées latérales [4]. La probabilité d'interaction acoustique par unité de temps est donnée par [10]:

$$\lambda_{ac}(\varepsilon) = \frac{K_B \cdot T \cdot E_{ac}^2 \cdot m^{*3/2}}{\rho \cdot S^2 \cdot \hbar^4 \cdot 3\pi \cdot \sqrt{2}} \cdot \delta^{1/2}(\varepsilon) \cdot \frac{3(1+\alpha \cdot \varepsilon)^2 + (\alpha \cdot \varepsilon)^2}{(1+2 \cdot \alpha \cdot \varepsilon)} \quad (3-13)$$

Avec : $\delta(\varepsilon) = \varepsilon(1+\alpha \cdot \varepsilon)$ (3-14)

$$\delta(\varepsilon') = \varepsilon'(1+\alpha \cdot \varepsilon') \quad (3-15)$$

où K_B est la constante de Boltzmann , T est la température du réseau , E_{ac} est une constante acoustique , m^* est la masse effective des porteurs dans le bas de la vallée , ρ est la masse volumique du matériau , s est la vitesse du son , \hbar est la constante de Planck .

III-6-1-2- Interaction piézo-électrique :

C'est une interaction qui existe dans les cristaux piézo-électriques est qui met en jeu un phonon acoustique de faible longueur d'onde. Elle n'occasionne que de faibles échanges d'énergie [9] . Son effet sur le comportement de l'électron est très faible car c'est une interaction élastique qui ne provoque quasiment aucune déviation. La probabilité est inversement proportionnelle à la racine carrée de l'énergie [4]. La probabilité d'interaction piézo-électrique par unité de temps est donnée par :

$$\lambda_{pi} = \frac{e^2 \cdot K_B \cdot T \cdot P_{pi}^2 \cdot m^{*1/2}}{4\sqrt{2} \cdot \pi \cdot \hbar^2 \cdot \varepsilon_0 \cdot \varepsilon_s \cdot \delta^{1/2}} \cdot \frac{I}{(1+2 \cdot \alpha \cdot \varepsilon)} \quad (3-16)$$

Où

$$I = (1+2\alpha \cdot \varepsilon)^2 \cdot \ln \left| \frac{2}{1-\cos a} \right| - 2\alpha \varepsilon (1+2\alpha \varepsilon) \cdot (1+\cos a) + \frac{(\alpha \varepsilon)^2}{2} \cdot (4-1-\cos a)^2 \quad (3-17)$$

P_{pi} est le potentiel piézo-électrique et a un angle très faible < 0.01 radians.

III-6-1-3- Interaction optique-polaire :

Cette interaction est très importante dans toutes les vallées. L'énergie du phonon $\hbar\omega_0$ est comparable à celle des électrons à la température ambiante. L'équivalent en température pour la plupart des matériaux est de 200 à 600 K. Nous ne pouvons donc pas négliger la température du phonon devant celle des électrons et les collisions deviennent inélastiques.

Par sa prédominance, cette interaction joue un rôle important dans l'évolution de la mobilité des porteurs à faible champ [10]. La probabilité d'interaction par unité de temps est donnée par :

$$\lambda_{op} = \frac{e^2 \cdot W_{op} \cdot m^{*1/2}}{4\sqrt{2} \cdot \epsilon_0 \cdot \pi \cdot \hbar} \left(\frac{1}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_s} \right) \frac{1+2\alpha\epsilon}{\delta^{1/2}(\epsilon)} \cdot F(\epsilon, \epsilon') \left(N_{op} + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) \quad (3-18)$$

Où
$$F(\epsilon, \epsilon') = \frac{1}{C} \left(A \cdot \text{Ln} \left| \frac{\delta^{1/2}(\epsilon) + \delta^{1/2}(\epsilon')}{\delta^{1/2}(\epsilon) - \delta^{1/2}(\epsilon')} \right| + B \right) \quad (3-19)$$

Avec
$$A = (2(1+\alpha\epsilon) \cdot (1+\alpha\epsilon') + \alpha(\delta(\epsilon) + \delta(\epsilon')))^2 \quad (3-20)$$

$$B = -2\alpha(\delta(\epsilon) \cdot \delta(\epsilon'))^{1/2} \cdot (4(1+\alpha\epsilon) \cdot (1+\alpha\epsilon') + \alpha(\delta(\epsilon) + \delta(\epsilon'))) \quad (3-21)$$

$$C = 4((1+\alpha\epsilon)(1+\alpha\epsilon'))(1+2\alpha\epsilon)(1+2\alpha\epsilon') \quad (3-22)$$

Où ϵ_s et ϵ_∞ sont les permittivités diélectriques relatives et e la charge de l'électron

III-6-1-4- Interaction intervallée équivalente et non équivalente :

C'est au cours de ces interactions inélastiques qu'ont lieu les transferts entre les vallées équivalentes ou non équivalentes. 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 intervallées

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. Un transfert ne peut avoir lieu que si l'énergie après interaction est supérieure à l'énergie au fond de la vallée d'accueil. Ces énergies sont repérées par rapport au minimum de la bande de conduction [4].

La condition nécessaire pour qu'une interaction intervallée ait une chance d'intervenir est [10] :

$$\varepsilon_i \pm \hbar\omega_{ij} + \Delta_i - \Delta_j \geq 0 \quad (3-23)$$

Δ_i est l'écart d'énergie entre le bas de la vallée de départ i et celui de la vallée Γ (000).

Δ_j est l'écart d'énergie entre le bas de la vallée d'arrivée j et celui de la vallée Γ (000).

ε_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 (variation de l'énergie et du vecteur d'onde) s'ajoutent les variations dues aux éventuels non équivalences entre vallées d'arrivée et de départ (masses et facteurs de non parabolicité dépendants de chaque vallée).

Après un éventuel transfert de la vallée Γ (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 [10] .

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

$$\lambda_{ij}(\varepsilon_i) = \frac{Z_{ij} \cdot m^{*3/2} \cdot E_{ij}^2}{\pi \sqrt{2} \cdot \rho \omega_{ij} \cdot \hbar^3} \left(N_{ij} + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) \delta(\varepsilon') \cdot \frac{(1 + \alpha_i \varepsilon_i)(1 + \alpha_j \varepsilon_j)}{(1 + 2\alpha_i \varepsilon_i)} \quad (3-24)$$

Où E_{ij} est le potentiel de déformation intervallée entre la vallée i et la vallée j, $\hbar\omega_{ij}$ est l'énergie du phonon échangé, Z_{ij} est le nombre de vallée d'arrivée de type j quand on part de la vallée i.

III-6-1-5- Interaction optique non polaire :

Les interactions optiques non polaires sont intervallées et inélastiques. Elles n'interviennent que dans les vallées de type L(111) [10] .

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 43eV soit environs 550k pour l'InP.

III-6-2- 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. BROUKS et C. HERRING tient compte des effets de charge d'espace au niveau de l'expression du potentiel $V(r)$ créé par chaque impureté supposée ionisée.

Il a supposé que pour des concentrations en impuretés inférieures à 3.10^{17}cm^{-3} , les impuretés sont encore effectivement toutes ionisées et que les interactions électron-électron sont encore très peu probables.

Ce modèle est préféré au modèle de E.M. CONWELL et V.F. WEISSKOPF dans lequel ce potentiel est simplement coulombien.

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 β de déviation qui se réduit à une fonction de DIRAC $\delta(\beta)$. Pour une concentration en impuretés $N=0$; 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 :

$$\lambda(\varepsilon) = \frac{\sqrt{2} \cdot \pi \cdot N_D \cdot e^4 \cdot \varepsilon^{-4/2} \cdot (1+2\alpha\varepsilon)}{(4 \cdot \pi \cdot \varepsilon_0 \cdot \varepsilon_s)^2 \cdot m^{*1/2} \cdot (1+\alpha\varepsilon)^{3/2}} \cdot I \quad (3-25)$$

Avec

$$I = \frac{[1+2 \cdot e_k^{\varepsilon}(\theta/2k)^2]^2}{4 \cdot (\theta/2k)^2 [1+(\theta/2k)^2]} + e_k^2 [1+2e_k^2(\theta/2k)^2] \ln \left[\frac{(\theta/2k)^2}{1+(\theta/2k)^2} \right] + e_k^2 \quad (3-26)$$

Où

$$e_k = \left(\frac{\alpha \varepsilon}{1+2\alpha\varepsilon} \right)^{1/2} \quad (3-27)$$

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

$$\theta = \frac{N_D \cdot e^2}{\varepsilon_0 \cdot \varepsilon_s \cdot K_B \cdot T} \quad (3-28)$$

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

$$\lambda(\varepsilon) = \frac{e^2 \cdot m^{*1/2} K_B \cdot T}{4\pi \varepsilon_0 \varepsilon_s \hbar^2 \sqrt{2}} \cdot \frac{1+2\alpha\varepsilon}{\delta(\varepsilon)^{1/2}} \quad (3-29)$$

III.7- Mise en œuvre de la simulation :

Les différentes étapes suivies pendant l'exécution de ce logiciel sont :

- Faire entrer les différents paramètres utilisés du matériau telle que l'énergie du gap, la masse effective, le coefficient de non parabolicité,...
- Entrer les conditions et les données nécessaires tel que la concentration des impuretés, la température du réseau, le champ électrique appliqué, etc....
- Exécution du logiciel.

➤ Aboutir aux résultats

La figure (III. 4) représente l'organigramme général de la procédure de Monte Carlo que nous venons de décrire.

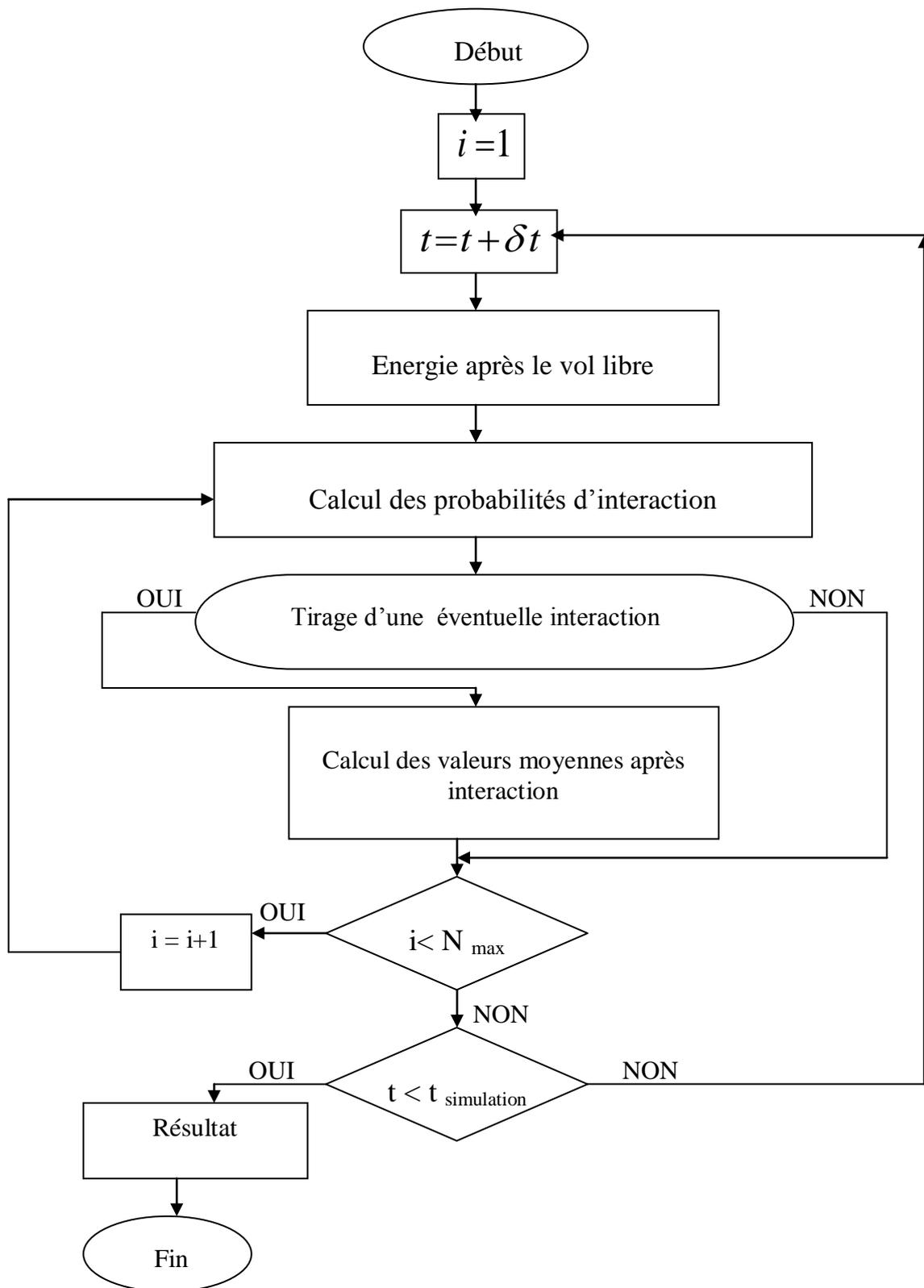


Fig. III. 5 : ORGANIGRAMME